II.4.2 c Formale Lösung der Schrödinger-Gleichung

Im Fall eines zeitunabhängigen Hamilton-Operators $\hat{H}$ ist die Schrödinger-Gleichung (II.39) eine lineare Differentialgleichung erster Ordnung mit konstanten Koeffizienten. Die Lösung zu dieser Gleichung, die die Anfangsbedingung (II.32) erfüllt, ist

$$\boxed{\hat{\mathcal{U}}(t,t_0) = \exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}\right].} \tag{II.41}$$

Beweis: Taylor-Reihenentwicklung des Exponentials.

Falls $\hat{H}(t)$ explizit von der Zeit abhängt... später!

Ab jetzt ist, wenn nicht anders gesagt wird, der Hamilton-Operator automatisch zeitunabhängig.

II.4.2 d Schrödinger-Gleichung in der Energiebasis

Die Zeitentwicklung eines Zustandsvektors $|\psi(t)\rangle$ nimmt eine relativ einfache Form an, wenn $|\psi(t)\rangle$ auf der Basis der Eigenvektoren $\{|\phi_n\rangle\}$ zum Hamilton-Operator $\hat{H}$ zerlegt.

Diese sog. *Energiebasis* und die zugehörigen (möglicherweise entarteten) Eigenwerte $\{E_n\}$ ergeben sich, indem man die Eigenwertgleichung

$$\boxed{\hat{H}|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle} \tag{II.42}$$

löst, die oft als *stationäre Schrödinger-Gleichung* bezeichnet wird.

Sei angenommen, dass die Eigenvektoren $\{|\phi_n\rangle\}$ und Eigenwerte $\{E_n\}$ bekannt sind. Dank der Zeitunabhängigkeit von $\hat{H}$ sind diese Eigenelemente auch zeitunabhängig. Dann kann man einen Zustandsvektor $|\psi(t)\rangle$ als

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|\phi_n\rangle \quad \text{mit} \quad c_n(t) \equiv \langle\phi_n|\psi(t)\rangle \tag{II.43a}$$

schreiben. Insbesondere gilt zur Zeit t_0

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_n c_n(t_0)|\phi_n\rangle \quad \text{mit} \quad c_n(t_0) \equiv \langle\phi_n|\psi(t_0)\rangle. \tag{II.43b}$$

Das Einsetzen des Ansatzes (II.43a) in die Schrödinger-Gleichung (II.40) gibt

$$\mathrm{i}\hbar\sum_n \dot{c}_n(t)|\phi_n\rangle = \sum_n c_n(t)\hat{H}|\phi_n\rangle = \sum_n c_n(t)E_n|\phi_n\rangle,$$

wobei die übliche Notation $\dot{c}_n(t) \equiv \mathrm{d}c_n(t)/\mathrm{d}t$ eingeführt wurde. Das Skalarprodukt aus dem Bra $\langle\phi_m|$ und dieser Gleichung lautet

$$\mathrm{i}\hbar\sum_n \dot{c}_n(t)\langle\phi_m|\phi_n\rangle = \sum_n c_n(t)E_n\langle\phi_m|\phi_n\rangle,$$

was dank der Orthonormalitätsbedingung $\langle\phi_m|\phi_n\rangle = \delta_{mn}$ für die Eigenvektoren zum hermiteschen Operator $\hat{H}$ zu

$$\mathrm{i}\hbar\dot{c}_m(t) = E_m c_m(t) \tag{II.44}$$

für jeden Koeffizienten c_m führt. Die Lösung dieser linearen Differentialgleichung mit der Anfangsbedingung $c_n(t_0)$ ist einfach

$$c_m(t) = c_m(t_0)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(t-t_0)E_m/\hbar}, \tag{II.45}$$

woraus die Zeitabhängigkeit des Zustandsvektors $|\psi(t)\rangle$ folgt

$$\boxed{|\psi(t)\rangle = \sum_m c_m(t_0)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(t-t_0)E_m/\hbar}|\phi_m\rangle.} \tag{II.46}$$

Dabei merkt man, dass der Betrag $|c_n(t)|$ zeitunabhängig ist:

$$|c_n(t)| = |c_n(t_0)| \quad \forall t.$$

Laut dem Postulat (II.9) bedeutet dieses Resultat, dass die Wahrscheinlichkeit, in einer Messung der Observablen $\hat{H}$ am Zustand $|\psi\rangle$ den Eigenwert E_n zu messen, nicht von der Zeit abhängt.

Schreibt man jetzt $c_m(t_0)|\phi_m\rangle = \langle\phi_m|\psi(t_0)\rangle|\phi_m\rangle = |\phi_m\rangle\langle\phi_m|\psi(t_0)\rangle$ und interpretiert man dabei das Produkt aus Ket und Bra als der Projektor auf $|\phi_n\rangle$, so lautet Gl. (II.46) noch

$$|\psi(t)\rangle = \left(\sum_m \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(t-t_0)E_m/\hbar}|\phi_m\rangle\langle\phi_m|\right)|\psi(t_0)\rangle.$$

Aus dem Vergleich mit Gl. (II.31) folgt, dass der Term in Klammern genau der Zeitentwicklungsoperator sein muss:

$$\hat{\mathcal{U}}(t,t_0) = \sum_m \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(t-t_0)E_m/\hbar}|\phi_m\rangle\langle\phi_m|, \tag{II.47}$$

was in der Tat die Spektralzerlegung der Form (II.41) ist.

Sei $\hat{A}$ ein diagonalisierbarer Operator mit Spektralzerlegung $\hat{A} = \sum a_n|a_n\rangle\langle a_n|$ und $f(z)$ eine in $z=0$ analytische Funktion der komplexen Variablen z. Wenn alle Eigenwerte $\{a_n\}$ im Inneren des Konvergenzkreises der Taylor-Reihenentwicklung in $z=0$ von $f(z)$ sind, kann man einen Operator $f(\hat{A})$ definieren, dessen Spektralzerlegung $f(\hat{A}) = \sum f(a_n)|a_n\rangle\langle a_n|$ ist.
Gleichung (II.47) stellt nur ein Sonderfall dieses allgemeinen Resultats dar.

II.4.3 Zeitentwicklung von Erwartungswerten

Sei $\hat{A}$ eine Observable, die nicht explizit von der Zeit abhängt. Im Allgemeinen könnte deren Erwartungswert im Zustandsvektor $|\psi(t)\rangle$

$$\langle\hat{A}\rangle_{\psi(t)} \equiv \langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle \tag{II.48a}$$

von der Zeit abhängen. Traditionell wird diese Zeitabhängigkeit mithilfe der Notation

$$\langle\hat{A}\rangle_\psi(t) \equiv \langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle \tag{II.48b}$$

gekennzeichnet.

Ausgehend von der Schrödinger-Gleichung (II.40) für $|\psi(t)\rangle$ und der dazu hermitesch konjugierten Gleichung

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\langle\psi(t)|}{\partial t} = \langle\psi(t)|\hat{H}, \tag{II.49}$$

wobei die Hermitizität von $\hat{H}$ benutzt wurde, kann man eine Zeitentwicklungsgleichung für $\langle\hat{A}\rangle_\psi(t)$ herleiten. Die Produktregel gibt nämlich erstens

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{A}\rangle_\psi(t) = \frac{\mathrm{d}\langle\psi(t)|}{\mathrm{d}t}\hat{A}|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\hat{A}\,\frac{\mathrm{d}|\psi(t)\rangle}{\mathrm{d}t}.$$

Dabei können die zwei Zeitableitungen ersetzt werden:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{A}\rangle_\psi(t) = -\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi(t)|\hat{H}\hat{A}|\psi(t)\rangle + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi(t)|\hat{A}\hat{H}|\psi(t)\rangle.$$

Somit gilt

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi(t)\,|\,\hat{A}\,|\,\psi(t)\rangle = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi(t)\,|\,\big[\hat{A},\hat{H}\big]\,|\,\psi(t)\rangle.} \tag{II.50}$$

Wenn die Observable $\hat{A}$ mit dem Hamilton-Operator $\hat{H}$ kommutiert, ist die rechte Seite dieser Gleichung automatisch Null, und daher $\langle\hat{A}\rangle_\psi(t)$ zeitunabhängig. Anders gesagt sind die Erwartungswerte von Observablen, die mit dem Hamilton-Operator kommutieren, *Erhaltungsgrößen* des Systems.

Falls $\hat{A}$ explizit von der Zeit abhängt, d.h. der Form $\hat{A}(t)$ ist, kommt noch ein zusätzlicher Term beim Ableiten von $\langle\psi(t)\,|\,\hat{A}(t)\,|\,\psi(t)\rangle$ nach der Zeit, entsprechend der Ableitung von $\hat{A}(t)$ in der Anwendung der Produktregel. Insgesamt gilt dann das *Ehrenfest*[(s)]*-Theorem*

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi(t)\,|\,\hat{A}(t)\,|\,\psi(t)\rangle = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi(t)\,|\,\big[\hat{A}(t),\hat{H}\big]\,|\,\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)\,|\,\frac{\partial\hat{A}(t)}{\partial t}\,|\,\psi(t)\rangle.} \tag{II.51}$$

Bemerkung: Auch wenn die Bezeichnung $\hat{A}(t)$ suggeriert, dass der Operator $\hat{A}$ nur Funktion der Zeit ist, wird dessen Zeitableitung traditionell mit einer partiellen Ableitung bezeichnet, um den Unterschied mit der totalen Ableitung auf der linke Seite des Theorems zu betonen.

II.4.4 „Bilder“ in der Quantenmechanik

Aus historischen Gründen — und zwar der parallelen Entwicklung unterschiedlicher quantenmechanischen Formalismen, die sich im Nachhinein als äquivalent herausgestellt haben — kann die Zeitentwicklung eines Systems in verschiedenen sog. *Bildern* beschrieben werden.

II.4.4 a Schrödinger-Bild

Die im Abschn. II.4.2 eingeführte Beschreibung geht auf E. Schrödinger zurück und basiert auf

- zeitabhängigen Zustandsvektoren $|\psi(t)\rangle$, die der Schrödinger-Gleichung (II.40) genügen, und
- (oft) zeitunabhängigen Observablen $\hat{A}$ — obwohl einige zeitabhängig sein können.

Anhand dieser „nicht direkt physikalisch beobachtbaren“ Bestandteilen des *Schrödinger-Bildes* lassen sich die messbaren Erwartungswerte in einem Zustand gemäß

$$\langle\hat{A}\rangle(t) \equiv \langle\psi(t)\,|\,\hat{A}\,|\,\psi(t)\rangle \tag{II.52}$$

berechnen.

II.4.4 b Heisenberg-Bild

In der als *Heisenberg-Bild* bekannten äquivalenten Beschreibung werden Zustände und Operator neu definiert: nach Angabe eines beliebigen Bezugszeitpunkt t_0 — für den man oft $t_0 = 0$ annimmt — betrachtet man

- einen zeitunabhängigen Zustandsvektor
$$|\psi\rangle_{\mathrm{H}} \equiv |\psi(t_0)\rangle; \tag{II.53a}$$
- (meistens) zeitabhängige Observablen
$$\hat{A}_{\mathrm{H}}(t) \equiv \hat{\mathcal{U}}(t,t_0)^\dagger\hat{A}(t)\,\hat{\mathcal{U}}(t,t_0), \tag{II.53b}$$
wobei eine mögliche explizite Zeitabhängigkeit der Schrödinger-Bild-Observablen $\hat{A}$ erlaubt wurde.

[(s)] P. Ehrenfest, 1880–1933

Mit diesen Definitionen lautet der Erwartungswert von $\hat{A}_{\rm H}(t)$ im Zustand $|\psi\rangle_{\rm H}$

$$\langle\hat{A}(t)\rangle \equiv {}_{\rm H}\langle\psi\,|\,\hat{A}_{\rm H}(t)\,|\,\psi\rangle_{\rm H} = \langle\psi(t_0)\,|\,\hat{\mathcal{U}}(t,t_0)^\dagger\hat{A}(t)\hat{\mathcal{U}}(t,t_0)\,|\,\psi(t_0)\rangle,$$

d.h. unter Berücksichtigung der Gl. (II.31) $\langle\hat{A}(t)\rangle = \langle\psi(t)\,|\,\hat{A}(t)\,|\,\psi(t)\rangle$, entsprechend dem gleichen Erwartungswert wie im Schrödinger-Bild:

$$\langle\hat{A}(t)\rangle = \langle\hat{A}\rangle(t). \tag{II.54}$$

Aus der Definition (II.53b) der Heisenberg-Bild-Observablen $\hat{A}_{\rm H}(t)$ findet man für deren totale Ableitung nach der Zeit

$$\boxed{\frac{{\rm d}\hat{A}_{\rm H}(t)}{{\rm d}t} = \frac{1}{{\rm i}\hbar}\big[\hat{A}_{\rm H}(t),\hat{H}_{\rm H}(t)\big] + \left(\frac{\partial\hat{A}(t)}{\partial t}\right)_{\rm H},} \tag{II.55}$$

wobei $(\partial\hat{A}(t)/\partial t)_{\rm H}$ den Operator bezeichnet, der aus der Anwendung der Transformation (II.53b) auf $\partial\hat{A}(t)/\partial t$ folgt. Diese Differentialgleichung wird *Heisenberg-Gleichung* genannt.

Beweis: kommt!

Bemerkungen:

∗ Die Heisenberg-Gleichung (II.55) und die Unabhängigkeit der Erwartungswerte vom Bild, in dem sie berechnet sind [Gl. (II.54)], führen sofort zum Ehrenfest-Theorem (II.51).

∗ Falls der Hamilton-Operator $\hat{H}$ des Schrödinger-Bildes zeitunabhängig ist, so dass der zugehörige Zeitentwicklungsoperator durch Gl. (II.41) gegeben ist, wird die Definition (II.53b) zu

$$\hat{A}_{\rm H}(t) \equiv {\rm e}^{{\rm i}(t-t_0)\hat{H}/\hbar}\,\hat{A}(t)\,{\rm e}^{-{\rm i}(t-t_0)\hat{H}/\hbar}. \tag{II.56}$$

Dann gilt $\hat{H}_{\rm H}(t) = \hat{H}$, d.h. der Hamilton-Operator in Heisenberg-Bild ist eigentlich zeitunabhängig.

∗ In der Formulierung der klassischen Hamilton'schen Mechanik anhand von Poisson[(t)]-Klammern $\{\,\cdot\,,\,\cdot\,\}_{\mathbf{q},\mathbf{p}}$ lautet die totale Zeitableitung einer Phasenraumfunktion $f(t,\mathbf{q},\mathbf{p})$

$$\frac{{\rm d}f}{{\rm d}t} = \{f,\mathcal{H}\}_{\mathbf{q},\mathbf{p}} + \frac{\partial f}{\partial t},$$

wobei $\mathcal{H}$ die Hamilton-Funktion des klassischen Systems ist. Die Ähnlichkeit dieses Ergebnisses mit dem Heisenberg-Gleichung (II.55) sollte der Leserin offensichtlich sein.

∗ Neben den Schrödinger- und Heisenberg-Bilder benutzt man auch oft das *Wechselwirkungsbild* (oder *Dirac-Bild*) — dafür muss die Leserin aber auf eine fortgeschrittenere Vorlesung warten!

[(t)]S. Poisson, 1781–1840