Sie erfüllen das Ehrenfestsche Theorem:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle(t) = \langle \psi(t) | [\hat{A}, \hat{H}] | \psi(t) \rangle$$

- Im Heisenberg-Bild (H) betrachten wir nur zeitunabhängige Zustände $|\psi(0)\rangle = |\psi_H\rangle \; (= \hat{U}^+(t,0)|\psi(t)\rangle) \Rightarrow$ Die Zeitentwicklung gegeben durch $\hat{U}(t,t_0)$ wird auf die Operatoren übertragen:

in $\langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | \underbrace{\hat{U}^+(t,0) \hat{A} \hat{U}(t,0)} | \psi(t_0) \rangle$

$$\equiv \langle \psi_H | \hat{A}_H(t) | \psi_H \rangle$$

- mit $\boxed{\hat{A}_H(t) = \hat{U}^+(t,0) \hat{A} \hat{U}(t,0) \underset{\hat{H}=\hat{H}^+}{=} e^{+\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \hat{A} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}}$ zeitabh. Operator

oder $\frac{d}{dt} e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = \frac{i}{\hbar}\hat{H} e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ vertauschbar

$\Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \langle \psi_H | i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) | \psi_H \rangle$

$\overset{\text{Ehrenfest}}{=} \langle \psi_H | \hat{U}^+(t,0) [\hat{A}, \hat{H}] \hat{U}(t,0) | \psi_H \rangle = \langle \psi_H | \hat{U}^+ (\hat{A} \; \hat{H} - \hat{H} \hat{A}) \hat{U} | \psi_H \rangle$

einfügen $\mathbb{1} = \hat{U}\hat{U}^+$ $\quad \hat{\mathbb{1}} = \hat{U}\hat{U}^+$ (oder $[\hat{U}^+, \hat{H}] = \hat{0}$)

$= \langle \psi_H | [\hat{A}_H(t), \hat{H}_H(t)] | \psi_H \rangle \quad \forall |\psi_H\rangle$, mit $\hat{H}_H(t) = \hat{U}^+(t,0) \hat{H} \hat{U}(t,0)$

$$= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \hat{H} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = \hat{H}$$

denn $[\hat{H}, \hat{H}] = 0$

d.h. $\boxed{i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = [\hat{A}_H(t), \hat{H}]}$

zeitabhängige Gleichung für die Operatoren im Heisenberg-Bild

- In der Feldtheorie wird oft ein drittes, sogenanntes Dirac- oder Wechselwirkungsbild verwendet. Hier sind sowohl Zustände als auch Operatoren zeitabhängig, und nur die "triviale" Zeitabhängigkeit durch den freien Anteil des Hamilton operators $\hat{H}_0$, In $\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{p}^2}{2m}}_{\hat{H}_0} + \hat{V}(\hat{r})$ wird abgespalten als $e^{\pm i/\hbar \hat{H}_0 t}$.

- Zusammenfassend fügen wir zu den Postulaten I–III der QM (s. S. 58)

folgendes Postulat hinzu (im Schrödingerbild):

IV. Die Zeitentwicklung von Zuständen im Schrödingerbild wird

durch die zeitabhängige Schrödi gegeben:

$$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle}$$ wobei $\hat{H}$ der Hamilton op. ist.

- Zurück zur Quantisierung (s. S. 8–9.)

* Im Heisenberg-Bild ist die Analogie zwischen dem Hamiltonschen Bl. und der QM besonders deutlich (in der klass. Mechanik gibt es auch mehrere äquivalente Beschreibungen (Bilder): Newton, Lagrange u. Hamilton)!

- Hamiltonfunktion (1D)

$H(p,x) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$, x, p sind unabhängige Variablen,

d.h. mit Poisson-klammer $\{F,G\} = \frac{\partial F}{\partial x}\frac{\partial G}{\partial p} - \frac{\partial F}{\partial p}\frac{\partial G}{\partial x}$ gilt

- kanonische Poisson-klammern $\{x,x\} = 0$, $\{p,p\} = 0$, $\{x,p\} = 1$
- Dynamik $\dot{x} = \{x,H\}$ $(= \frac{p}{m})$, $\dot{p} = \{p,H\}$ $(= -\frac{\partial V}{\partial x})$

- Quantisierung:

$x \to \hat{x}$, $p \to \hat{p}$ $(\to -i\hbar\frac{d}{dx}$ im Ortsraum$)$, $\{\cdot,\cdot\} \to [\cdot,\cdot]$ $\frac{1}{i\hbar}$ beim $\hat{x}(t), \hat{p}(t)$ zur selben Zeit

- gleichzeitige Vertauschungsrelationen $[\hat{x},\hat{x}] = 0$, $[\hat{p},\hat{p}] = 0$, $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$

- Dynamik $i\hbar \frac{d}{dt}\hat{x}(t) = [\hat{x}(t), \hat{H}]$, $i\hbar \frac{d}{dt}\hat{p}(t) = [\hat{p}(t), \hat{H}]$

Bemerkung: in der klass. Mechanik gibt es im Hamiltonformalismus

kanonische Transformationen $x \to X(x,p)$, $p \to P(x,p)$

z.B. um auf Wirkungswinkelvariablen zu kommen, wobei

gilt daß $\{F,G\}_{x,p} = \{F,G\}_{X,P}$.

Dem entspricht in der QM eine unitäre Transformation:

$$\begin{array}{llcl}
\text{klass. Mech.} & x,p & \xrightarrow[\text{Trafo}]{\text{kanon.}} & X,P \\
 & \text{kanon. Quant.} \downarrow & & \downarrow \text{Quant} \\
\text{QM} & \hat{x},\hat{p} & \xrightarrow[\text{Trafo}]{\text{unitäre}} & \hat{X},\hat{P}
\end{array}$$

3.4. Der statistische Operator ρ [Münster 21, (Fließbach Ende VI, 37)]

Betrachten wir zunächst einen sog. "reinen" physikalischen Zustand $|\psi\rangle \in V$ und einen Operator $\hat{A}$, der auf $V \to V$ wirkt.
(↗ dieser ist durch alle seine Quantenzahlen = Eigenwerte eindeutig festgelegt)

Dann können wir folgende Größen bestimmen:

- Erwartungswert $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$
- Varianz² $(\Delta A)^2 = \langle \psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 | \psi \rangle$
- die Wahrscheinlichkeit $P_\psi(a)$, daß eine Messung der Observablen, die durch $\hat{A}$ gegeben ist, den Meßwert a ergibt:

  Eigenzustand zu a: $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$, dann ist

$$P_\psi(a) = |\langle a|\psi\rangle|^2 = \psi(a)^* \psi(a) = \langle \psi | a \rangle \langle a | \psi \rangle$$

* Wir drücken diese Größen nun durch den zu $|\psi\rangle$ gehörenden statistischen Operator $\boxed{\hat{\rho}_\psi \equiv |\psi\rangle\langle\psi|}$ wie folgt aus

⇒ Erwartungswert: $\langle \hat A\rangle = \langle\psi|\hat A|\psi\rangle = \sum_a \langle\psi|\hat A|a\rangle\langle a|\psi\rangle$

Einschub von $\hat{\mathbb{1}}$

$$= \sum_a \underbrace{\langle a|\psi\rangle\langle\psi|\hat A|a\rangle}_{\hat\varrho_\psi \hat A} \equiv Sp[\hat\varrho_\psi \hat A]$$

wobei wir für beliebige Operatoren die Spur Sp definieren als (*)

$$\boxed{Sp[\hat O] \equiv \sum_a \langle a|\hat O|a\rangle}$$ hier in der Basis $\{|a\rangle\}$.

→ entsprechend lässt sich die Varianz ausdrücken als

$$(\Delta A)^2 = \langle\psi|(\hat A - \langle\hat A\rangle)^2|\psi\rangle \overset{SS\,12}{=} \langle\psi|\hat A^2|\psi\rangle - \langle\hat A\rangle^2$$
$$= Sp[\hat\varrho_\psi \hat A^2] - \left(Sp[\hat\varrho_\psi\hat A]\right)^2$$

- genau wie für $|\psi\rangle \in V$ lässt sich für jedes Basiselement $|a\rangle$, dem Eigenzustand zu $\hat A$ mit Eigenwert a, ein entsprechender statistischer Operator $\hat\varrho_a = |a\rangle\langle a|$ definieren.

⇒ Wahrscheinlichkeit

$$P_\psi(a) = \langle a|\psi\rangle\langle\psi|a\rangle = \sum_{a'}\langle a|a'\rangle\langle a'|\psi\rangle\langle\psi|a\rangle$$

dies ist noch keine Spur, füge $\hat{\mathbb{1}}$ ein

$$= \sum_{a'} \langle a'|\underbrace{\psi\rangle\langle\psi}_{\hat\varrho_\psi}|\underbrace{a\rangle\langle a}_{\hat\varrho_a}|a'\rangle = Sp[\hat\varrho_\psi\hat\varrho_a]$$

D.h. alle physikalischen Infos, die wir bezüglich $\hat A$ benötigen, lassen sich durch $\hat\varrho$'s ausdrücken.

(*) $$Sp[\hat A\hat B] \overset{!}{=} Sp[\hat B\hat A] = \sum_a \langle a|\hat B \underset{\hat{\mathbb{1}}}{\hat A}|a\rangle = \sum_{a,b}\langle a|\hat B|b\rangle\langle b|\hat A|a\rangle$$
$$= \underbrace{\sum_{a,b}\langle b|\hat A|a\rangle\langle a|\hat B|b\rangle}_{\text{Vollst.}} = \sum_b \langle b|\hat A\hat B|b\rangle = Sp[\hat A,\hat B]$$, d.h. Sp ist zyklisch

- Eigenschaften eines solchen statistischen Operators:

1) $\hat{S}_\psi^+ = \hat{S}_\psi$ ist hermitesch, denn es gilt für bel. $|\chi\rangle, |\phi\rangle \in V$:

$$\langle\chi|\hat{S}_\psi^+|\phi\rangle = \langle\hat{S}_\psi\chi|\phi\rangle = \langle\phi|\hat{S}_\psi|\chi\rangle^*$$
$$= \left(\langle\phi|\psi\rangle\langle\psi|\chi\rangle\right)^* = \langle\chi|\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle = \langle\chi|\hat{S}_\psi|\phi\rangle$$

2) für normierte $|\psi\rangle \in V$ mit $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ gilt

$\underline{Sp[\hat{S}_\psi] = 1}$ denn $Sp[\hat{S}_\psi] = \sum_a \langle a|\psi\rangle\langle\psi|a\rangle = \sum_a \langle\psi|a\rangle\langle a|\psi\rangle$ gibt $\hat{\mathbb{1}}$

$$= \langle\psi|\psi\rangle = 1$$

3) $\hat{S}_\psi^2 = \hat{S}_\psi$ für normiertes $|\psi\rangle \in V$, wie für Projektionsoperatoren $\hat{P}, \hat{P}_\perp$;

dafür gilt $\hat{\mathbb{1}} = \hat{P} + \hat{P}_\perp$ zerlegt den Raum,
mit $\hat{P}^2 = \hat{P}$, $\hat{P}_\perp^2 = \hat{P}_\perp$ und $\hat{P}\hat{P}_\perp = \hat{0} = \hat{P}_\perp\hat{P}$

denn $\hat{S}_\psi^2 = |\psi\rangle\underbrace{\langle\psi|\psi\rangle}_{1}\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = \hat{S}_\psi$

* der statistische Operator läßt sich auch für Zustände definieren, die ein Gemisch aus mehreren reinen oder Basiszuständen darstellen. Dies ist besonders hilfreich, wenn wir ein Vielteilchensystem mit komplizierten oder gar unbekannten Wechselwirkungen vorliegen haben, oder ein System, das aus mehreren Untersystemen besteht, und wir über den Effekt eines Teilsystemes (z.B. eines Wärmebades) mitteln möchten.