

1.2 Grundlagen der Quantisierung

Wir fangen wieder mit klassischen Teilchen an. Der wohl einfachste Weg zur Quantisierung basiert auf dem Hamilton-Formalismus.

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

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial x} \dot{x} + \frac{\partial H}{\partial p} \dot{p} = \frac{\partial H}{\partial x} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial x} = 0 \quad \text{(Energie-Erhaltung)}$$

Poisson-Klammer:

$$\{F, G\}_p \equiv \frac{\partial F}{\partial x} \frac{\partial G}{\partial p} - \frac{\partial F}{\partial p} \frac{\partial G}{\partial x}$$

Falls ohne Argument, seien x und p die Werte am gleichen Zeitpunkt, z.B. $t=0!$

Dann gilt:

$$\{x, x\}_p = 0$$

$$\{p, p\}_p = 0$$

$$\{x, p\}_p = 1$$

$$\dot{x}(t) = \{x, H\}_p$$

$$\dot{p}(t) = \{p, H\}_p$$

Notabene:

- * Die ersten drei enthalten keine dynamische Information. Sie bestimmen nur, daß die Koordinaten unseres Phasenraums "kanonisch" normalisiert sind.
- * Die letzten zwei bestimmen die Dynamik bzw. Zeitentwicklung. Erst hier müssen wir die Hamiltonfunktion H bzw. Potential $V(x)$ kennen!

Quantisierung

[Wir benutzen im Folgenden Einheiten wobei $\hbar = h/2\pi = 1.$]

$x \rightarrow \hat{x}$	}	Operatoren
$p \rightarrow \hat{p}$		
$[\hat{x}, \hat{x}] = 0$	}	Gleichzeitige Vertauschungsrelationen: "Normalisierung".
$[\hat{p}, \hat{p}] = 0$		
$[\hat{x}, \hat{p}] = i$		
$i \frac{d}{dt} \hat{x}(t) = [\hat{x}, \hat{H}]$	}	Dynamik im <u>Heisenberg-Bild</u> .
$i \frac{d}{dt} \hat{p}(t) = [\hat{p}, \hat{H}]$		

Zur Erinnerung:

Die gleichzeitigen Vertauschungsrelationen sind immer dieselben, aber für die Zeitabhängigkeit gibt es verschiedene "Bilder".

Im Schrödinger-Bild sind Operatoren zeitunabhängig; alle Zeitabhängigkeit ist in den Zuständen. Die Zustände erfüllen die Schrödinger-Gleichung:

$$i \frac{d}{dt} |t; s\rangle = \hat{H} |t; s\rangle$$
$$\Rightarrow |t; s\rangle = e^{-i\hat{H}t} |0; s\rangle$$

Erwartungswert eines Operators \hat{O}_s :

$$\langle t; s | \hat{O}_s | t; s \rangle = \langle 0; s | e^{i\hat{H}t} \hat{O}_s e^{-i\hat{H}t} | 0; s \rangle$$

Im Heisenberg-Bild sind Operatoren zeitabhängig, Zustände zeitunabhängig.

Erwartungswerte bleiben invariant:

$$|H\rangle \equiv |0; s\rangle$$
$$\hat{O}_H(t) \equiv e^{i\hat{H}t} \hat{O}_s e^{-i\hat{H}t}$$

$$\langle H | \hat{O}_H(t) | H \rangle = \langle t; s | \hat{O}_s | t; s \rangle$$

Die Heisenbergsche Bewegungsgleichung beschäftigt sich also mit Operatoren:

$$i \frac{d}{dt} \hat{O}_H(t) = [\hat{O}_H(t), \hat{H}]$$

Um die Signifikanz der Quantisierung zu verstehen, betrachten wir das klassische Beispiel, den harmonischen Oszillator.

$$\hat{H} \equiv \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2 \quad ; \quad m, \omega: \text{freie Parameter}$$

$\omega \rightarrow 0 \Leftrightarrow$ freies Teilchen

Standardnotation: [Aufgabe 2.1]

$$\hat{a} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2}} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\omega}} \hat{p}$$

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2}} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\omega}} \hat{p}$$

$$\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$$

$$\hat{p} = i \sqrt{\frac{m\omega}{2}} (-\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$$

Der klassische Fall

$$H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \Rightarrow p = m \dot{x}$$

$$\dot{p} = m \ddot{x} = - \frac{\partial H}{\partial x} = - m \omega^2 x$$

$$\ddot{x} = - \omega^2 x$$

$$x(t) = A \cdot \cos \omega t + B \sin \omega t$$

$$= x(0) \cdot \cos \omega t + \frac{p(0)}{m \omega} \cdot \sin \omega t$$

Die klassische Lösung enthält also zwei freie Parameter, $x \equiv x(0)$ und $p \equiv p(0)$. Damit ist

$$\begin{aligned} \langle [x(t)]^2 \rangle &\equiv \frac{1}{T} \int_0^T dt [x(t)]^2 \Big|_{T = \frac{2\pi}{\omega}} \\ &= \frac{1}{2} [x(0)]^2 + \frac{1}{2} \left[\frac{p(0)}{m \omega} \right]^2 \in [0, \infty) \end{aligned}$$

Notabene: $\{x, x\}_p = 0$ aber

$$\begin{aligned} \{x(t), x\}_p &= \{x \cos \omega t, x\}_p + \frac{1}{m \omega} \{p \sin \omega t, x\}_p \\ &= - \frac{1}{m \omega} \sin \omega t \neq 0 ! \end{aligned}$$

Quantenmechanisch [Heisenberg-Bild]

$$[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$$

$$i \frac{d}{dt} \hat{x}_H = [\hat{x}_H, \hat{H}] = \frac{1}{2m} [\hat{x}_H, \hat{p}_H^2] = \frac{1}{2m} \{ \hat{p}_H [\hat{x}_H, \hat{p}_H] + [\hat{x}_H, \hat{p}_H] \hat{p}_H \}$$

$$\Leftrightarrow \frac{d}{dt} \hat{x}_H = \frac{\hat{p}_H}{m}$$

$$i \frac{d}{dt} \hat{p}_H = [\hat{p}_H, \hat{H}] = \frac{m \omega^2}{2} [\hat{p}_H, \hat{x}_H^2] = \frac{m \omega^2}{2} \{ \hat{x}_H [\hat{p}_H, \hat{x}_H] + [\hat{p}_H, \hat{x}_H] \hat{x}_H \}$$

$$\Leftrightarrow \frac{d}{dt} \hat{p}_H = - m \omega^2 \hat{x}_H$$

$$\Rightarrow \frac{d^2}{dt^2} \hat{x}_H = - \omega^2 \hat{x}_H$$

— dieselbe Gleichung wie im klassischen Fall!

Lösung: $\hat{x}_H(t) = \hat{x} \cos \omega t + \frac{\hat{p}}{m \omega} \sin \omega t$,

wo $\hat{x} \equiv \hat{x}_H(0) \equiv \hat{x}_S$, $\hat{p} \equiv \hat{p}_H(0) \equiv \hat{p}_S$.

Und: $\frac{1}{m \omega} \hat{p}_H(t) = - \hat{x} \sin \omega t + \frac{\hat{p}}{m \omega} \cos \omega t$.

Mit Hilfe von \hat{a}, \hat{a}^\dagger :

$$\hat{x}_H(t) = \frac{1}{\sqrt{2m\omega}} \left\{ (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \cos \omega t + i(-\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \sin \omega t \right\}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2m\omega}} \left\{ \hat{a} e^{-i\omega t} + \hat{a}^\dagger e^{i\omega t} \right\}$$

$$\hat{x}_H(0) = \hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2m\omega}} \left\{ \hat{a} + \hat{a}^\dagger \right\}$$

Dann zum Beispiel:

$$[\hat{x}_H(t), \hat{x}_H(0)] = \frac{1}{2m\omega} \left\{ [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] e^{-i\omega t} + [\hat{a}^\dagger, \hat{a}] e^{i\omega t} \right\}$$

$$= \frac{1}{2m\omega} \left\{ e^{-i\omega t} - e^{i\omega t} \right\} = \frac{1}{im\omega} \sin \omega t$$

\Rightarrow die Vertauschung ist nichttrivial für $t \neq 0$!

Letztendlich:

$$\langle n | [\hat{x}_H(t)]^2 | n \rangle = \frac{1}{2m\omega} \langle n | \left\{ \hat{a}^\dagger \hat{a} e^{-2i\omega t} + \hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger e^{2i\omega t} \right\} | n \rangle$$

Aufgabe 2.1 \nearrow

$$= \frac{1}{2m\omega} \langle n | \left\{ \dots + \hat{a} \sqrt{n+1} |n+1\rangle + \hat{a}^\dagger \sqrt{n} |n-1\rangle \right\}$$

$$= \frac{1}{2m\omega} (2n+1) > 0$$

\therefore Die QM Lösung ähnelt der KM Lösung sehr —
 die Zeitabhängigkeit sieht identisch aus —
 aber hat im gewissen Sinne weniger Freiheit :
 die Vertauschungsrelationen bestimmen den Wert
 von $\langle n | [\hat{x}_H(t)]^2 | n \rangle$, während $\langle x^2(t) \rangle$ im klassischen Fall
 einen beliebigen Wert hat. D.h., QM bestimmt
 die "Normierung" von Fluktuationen, falls
 der Zustand bekannt ist.