4.3. Ehrenfests'sches Theorem

Einschub: Klarstellung:

$$\boxed{\begin{array}{ll} \text{Impulsdarstellung von Ortsoperator:} & \hat{\underline{r}} = i\hbar \nabla_{\underline{p}} \\ \text{" \qquad " Impuls " :} & \hat{\underline{p}} = \underline{p} \end{array}}$$ siehe (4.40)

- Theorem: $\boxed{\text{Mittelwerte } \langle \hat{A} \rangle \text{ gehorchen (fast) Bewgln. der klass. Mechanik}}$ (4.42)

- linearer Operator $\hat{A}$:

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle = \frac{d}{dt}\left[\int d^3r\, \psi^*(\underline{r},t)\hat{A}(\hat{\underline{r}},\hat{\underline{p}},t)\psi(\underline{r},t)\right]$$

$$= \int d^3r \left[\underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\right)}_{SG^*:\ \frac{i}{\hbar}\hat{H}\psi^*}\hat{A}\psi + \psi^*\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\psi + \psi^*\hat{A}\underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi\right)}_{SG:\ -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\psi}\right]$$

hermitesch

$$= \frac{i}{\hbar}\psi^*[\hat{H},\hat{A}]\psi$$

$$\longrightarrow \boxed{\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H},\hat{A}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle} \quad (4.43)$$

vgl. klass. Mechanik: $\frac{dA}{dt} = \{H,A\} + \frac{\partial A}{\partial t}$!!

"fast": $\{H,A\} \not\longrightarrow \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \langle \hat{A} \rangle]$

$\longrightarrow \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H},\hat{A}] \rangle$ } Unterschied!

• Anwendung auf $\hat{r}, \hat{p}$:

(i) $\frac{\partial \hat{r}}{\partial t} = 0$, $[\hat{H}, \hat{r}] = [\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{r}] \underset{(4.17)}{\overset{(4.13)}{=}} \frac{\hbar}{i} \frac{\hat{p}}{m}$ (4.44)

(ii) $\frac{\partial \hat{p}}{\partial t} = 0$, $[\hat{H}, \hat{p}] = [U(\underline{r}), \hat{p}] \underset{(4.14)}{=} i\hbar \underline{\nabla} U(\underline{r})$ (4.45)

(4.46)

$$\xrightarrow{\text{in (4.43)}} \boxed{\left.\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{r} \rangle &= \frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle &= - \langle \underbrace{\underline{\nabla} U(\hat{r})}_{\text{„Kraft"}} \rangle \end{aligned}\right\} m \frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{r} \rangle = - \langle \underline{\nabla} U(\hat{r}) \rangle}$$

... Ehrenfestsches Theorem für $\langle \hat{r} \rangle$

.. $\langle \hat{r} \rangle$ genügt fast Newt. Bewgl.

NB.: $-\underline{\nabla} U(\hat{r}) = -k \hat{r}$ ... harm. Kraft

$$\longrightarrow \quad m \frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{r} \rangle = -k \langle \hat{r} \rangle \checkmark$$

• Korrespondenzprinzip: (Bohr)

$\boxed{\text{Im makroskop. Grenzfall gilt die klass. Mechanik}}$ (4.47)

wichtig: prüfe Konsistenz von QT

(i) große Quantenzahlen

(ii) makroskop. Längenskala

• hier: makroskop. Körper: $|\Delta \underline{r}| \ll$ makroskop. Dimension

$\hat{=}$ Wellenfkt. konzentriert um $\langle \underline{r} \rangle$

[vgl. Gaußsches Wellenpaket]

$$\longrightarrow \langle \underline{\nabla} U(\hat{r}) \rangle \approx \underline{\nabla} U(\langle \hat{r} \rangle)$$

$$\xrightarrow{(4.46)} \boxed{m \frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{r} \rangle = -\nabla U(\langle \hat{r} \rangle)} \quad (4.48)$$

QT $\longrightarrow$ klass. Mechanik ✓

4.4. Heisenbergsche Unschärferelation

- Zentrales Prinzip der QT!
- <u>Def:</u> $\boxed{\text{Unschärfe } \Delta A \text{ einer Observablen } \hat{A}: \quad (\Delta A)^2 = \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2}$ (4.49)

  Bsp: Δx, Δp ... Orts- und Impulsunschärfe vgl. (3.14)/(3.15)

- $\boxed{\text{Geg: 2 hermitesche Operatoren } \hat{A}, \hat{B} \longrightarrow \Delta A \, \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|}$ (4.50)

  ... allg. Heisenbergsche Unschärferelation

  Beweis: mit Hilfe Schwarzsche Ungleichung (4.4)
  $\longrightarrow$ Übung

- Diskussion:

  (i) $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ ... „$\hat{A}$, $\hat{B}$ kommutieren/vertauschen nicht"

  $\longrightarrow$ beide Observablen können im Exp. <u>nicht</u> gleichzeitig scharf gemessen werden!

  Bsp: $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \longrightarrow \boxed{\Delta x \, \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}}$ (4.51)

  ... Heisenbergsche Unschärferelation

  $\longrightarrow$ „klassisches Teilchen" mit scharfem Ort <u>und</u> Impuls existiert nicht in der QT!

  NB: Gaußsches Wellenpaket (3.26)/(3.27):
  minimalste Unschärfe: $\Delta x \, \Delta p = \frac{\hbar}{2}$ bei $t = 0$

  (ii) $[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \longrightarrow$ beide Observablen können im Exp. gleichzeitig scharf ($\Delta A = 0 = \Delta B$) gemessen werden

Bsp. $[\hat{x}, U(\hat{x})] = 0$, $[\hat{p}, \frac{\hat{p}^2}{2m}] = 0$

• <u>Zeit-Energie-Unschärferelation</u>: oft verwendet!

Sei $\hat{B} = \hat{H}$, $\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0$ $\xrightarrow[(4.50)]{}$ $\Delta A \underbrace{\Delta E}_{\text{Energie-unschärfe}} \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle| = \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d \langle \hat{A} \rangle}{dt} \right|$

mit $\tau_A = \dfrac{\Delta A}{\left|\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle\right|}$ (4.52)

... Zeit auf der sich $\langle \hat{A} \rangle$ um ΔA, also merklich, ändert!

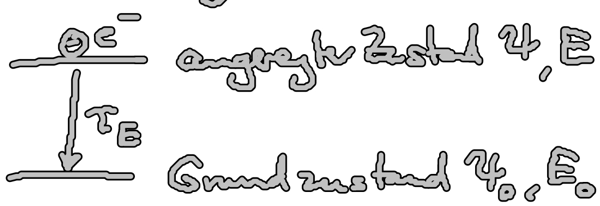
$\longrightarrow$ $\boxed{\tau_A \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}}$ (4.53)

Bsp: (i) $\Delta E = 0$ ... Energie-Eigenzustand

$\longrightarrow$ τ_A „$= \infty$" ... stationärer Zustand! s. Kap. 5

(ii) typische Anwendung: Lebensdauer!

Atom:



$\hat{A}$ ... „Zustand ψ ist besetzt" $\longrightarrow$ τ_E ... mittlere Lebensdauer von ψ

$\longrightarrow$ $\boxed{\tau_E \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}}$ (4.54)

Energieunschärfe des angeregten Zustands wegen endlicher Lebensdauer

5. Zeitunabhängige SG und Eigenwertprobleme

- formale Lsg. der SG ($i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$) & vertiefe mathem. Struktur der QT

5.1. Zeitunabh. SG.

- Löse SG durch Separationsansatz: [i.f. $\hat{H} \neq f(t)$]

$\psi(\underline{r}, t) = g(t)\,\varphi(\underline{r})$

in $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$ $\xrightarrow[\frac{SG}{\psi}]{}$ $\underbrace{\frac{i\hbar}{g(t)} \frac{\partial}{\partial t} g(t)}_{\text{hängt nur von } t \text{ ab}} = \underbrace{\frac{1}{\varphi(\underline{r})} \hat{H}\varphi(\underline{r})}_{\text{hängt nur von } \underline{r} \text{ ab}} \stackrel{!}{=} E = \text{konst.}$

$$\text{(i)}\quad g(t) = e^{-iEt/\hbar} \qquad (5.1)$$

$$\text{(ii)}\quad \boxed{\hat{H}\varphi(\underline{r}) = E\varphi(\underline{r})} \qquad (5.2)$$

... zeitunabh. SG

... Eigenwertgl. von $\hat{H}$

mit E .. Energieeigenwerte

$\varphi(\underline{r})$ ... " eigenfunktionen/vektoren

[vgl. $\underline{\underline{A}}\,\underline{v} = \lambda \underline{v}$ $\quad \underline{\underline{A}}$... Matrix/Tensor

$\lambda, \underline{v}$ ... Eigenwerte/-vektoren!]

- spezielle Lsg. von SG:

$$\boxed{\psi(\underline{r}, t) = e^{-iEt/\hbar}\,\varphi(\underline{r})} \qquad (5.3)$$

... stationärer Zustand

weil $|\psi(\underline{r}, t)|^2 = |\varphi(\underline{r})|^2$!

- Bsp: freies Teilchen: $U(\underline{r}) = 0 \longrightarrow \hat{H} \stackrel{(3.36)}{=} -\frac{\hbar^2}{2m}\underline{\nabla}^2$

EW-Problem: $-\frac{\hbar^2}{2m}\underline{\nabla}^2 \varphi(\underline{r}) = E\,\varphi(\underline{r})$ (5.4)

sehe an: $\varphi_{\underline{p}}(\underline{r}) \sim e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}$ in (5.4)

$$\rightarrow \quad \frac{p^2}{2m}\,\varphi\cancel{(r)} = E\,\varphi\cancel{(r)}$$

$$\rightarrow \quad \boxed{\begin{aligned} &\varphi_p(r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{\frac{i}{\hbar} p\cdot r}, \quad E = \frac{p^2}{2m} \\ &\text{spezielle Lsg:} \quad \psi(r,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{\frac{i}{\hbar}(p\cdot r - Et)} \end{aligned}} \tag{5.5}$$

vgl. (3.2) mit $E = \hbar\omega$, $p = \hbar k$