

4.3. Ehrenfest'sches Theorem

Einschub: Klarstellung:

Impuls darstellbar von Ortsoperator: $\hat{r} = i\hbar \nabla_{\mathbf{r}}$ " " " Impuls " : $\hat{p} = \mathbf{p}$	siehe (4.40)
--	-----------------

• Theorem: Mittelwerte $\langle \hat{A} \rangle$ gehorchen (fast) Regeln der klass. Mechanik (4.42)

• linearer Operator \hat{A} :

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle &= \frac{d}{dt} \left[\int d^3r \psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{A}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}, t) \psi(\mathbf{r}, t) \right] \\
 &= \int d^3r \left[\underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial t} \psi^* \right) \hat{A} \psi}_{\text{SG: } \frac{i}{\hbar} \hat{H} \psi^*} + \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi + \underbrace{\psi^* \hat{A} \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi \right)}_{\text{SG: } -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \psi} \right] \\
 &= \frac{i}{\hbar} \psi^* [\hat{H}, \hat{A}] \psi
 \end{aligned}$$

hermitisch

$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle$

(4.43)

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

'fast': $\{H, A\} \rightarrow \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \langle \hat{A} \rangle]$
 $\rightarrow \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle$ } Unterschied!

• Anwendung auf \hat{r} , \hat{p} :

$$(i) \frac{\partial \hat{r}}{\partial t} = 0, [\hat{A}, \hat{r}] = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{r} \right] \stackrel{(4.13)}{\stackrel{(4.17)}}{=} \frac{\hbar}{i} \frac{\hat{p}}{m} \quad (4.44)$$

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

(4.46)

$\xrightarrow{\text{in (4.43)}}$

$$\left. \begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{r} \rangle &= \frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle &= - \langle \underline{\nabla} U(\hat{r}) \rangle \end{aligned} \right\} m \frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{r} \rangle = - \langle \underline{\nabla} U(\hat{r}) \rangle$$

„Kraft“

... Ehrenfest'sches Theorem für $\langle \hat{r} \rangle$

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

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

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

• Korrespondenzprinzip: (Bohr)

Im makroskop. Grenzfall gilt die klass. Mechanik (4.47)

wichtig: prüfe Konsistenz von QT

(i) große Quantenzahlen

(ii) makroskop. Längenskala

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

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

[vgl. Gaußsches Wellenpaket]

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

$\xrightarrow{(4.46)}$

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

QT \rightarrow klass. Mechanik \checkmark

4.4. Heisenbergsche Unschärferelation

• Zentrales Prinzip der QT!

• Def: Unschärfe ΔA einer Observablen \hat{A} :
 $(\Delta A)^2 = \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2$ (4.49)

Bsp: $\Delta x, \Delta p \dots$ Orts- und Impulsunschärfe vgl. (3.14)/(3.15)

• Geg: 2 hermitesche Operatoren \hat{A}, \hat{B} (4.50)

$$\longrightarrow \Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|$$

... allg. Heisenbergsche Unschärferelation

Beweis: mit Hilfe Schwarzsche Ungleichung (4.4)

→ Übung

• Diskussion:

(i) $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0 \dots \hat{A}, \hat{B}$ kommutieren / ortstauschen nicht"

→ Beide Observablen können im Exp. nicht gleichzeitig scharf gemessen werden!

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

... Heisenbergsche Unschärferelation

→ "Klassisches Teilchen" mit scharfem Ort und 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. $[\hat{x}, U(\hat{x})] = 0$, $[\hat{p}, \hat{x}^2] = 0$

• Zeit-Energie-Unschärferelation: oft verwendet!

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

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

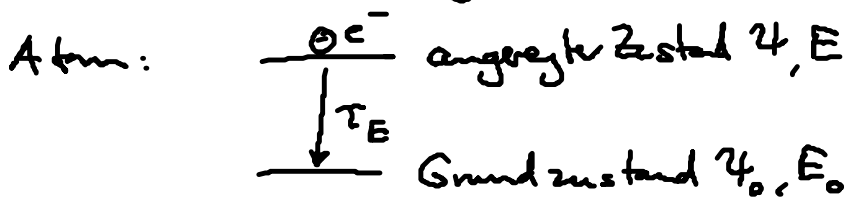
... Zeit auf der sich $\langle \hat{A} \rangle$ um ΔA , also merklich, ändert!

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

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

$\rightarrow \tau_A = \infty$... stationärer Zustand! s. Kap. 5

(ii) typische Anwendung: Lebensdauer!



\hat{A} ... „Zustand ψ ist besetzt“ $\rightarrow \tau_E$... mittlere Lebensdauer von ψ

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

Energieunschärfe des angeregten Zustands wegen endlicher Lebensdauer

5. Zeitunabhängige SG und Eigenwertprobleme

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

5.1. Zeitunabh. SG

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

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

in i.h. $\frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi$

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

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

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

... zeitunabh. SG

... Eigenwertgl. von \hat{H}

mit E .. Energieeigenwerte

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

[vgl. $\underline{A} \underline{v} = \lambda \underline{v}$ \underline{A} ... Matrix/Tensor
 λ, \underline{v} ... Eigenwerte/-vektoren!]

- spezielle Lsg. von SG:

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

... stationärer Zustand

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

- Bsp: freies Teilchen: $U(\underline{r}) = 0 \rightarrow \hat{H} \stackrel{(3.34)}{=} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$

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

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

$$\rightarrow \frac{p^2}{2m} \psi(\underline{r}) = E \psi(\underline{r})$$

$$\rightarrow \left[\begin{array}{l} \psi_p(\underline{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^3}} e^{\frac{i}{\hbar} \underline{p} \cdot \underline{r}}, \quad E = \frac{p^2}{2m} \\ \text{spezielle Lsg: } \psi(\underline{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^3}} e^{\frac{i}{\hbar} (\underline{p} \cdot \underline{r} - Et)} \end{array} \right] \quad (S.5)$$

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