

IV. Beziehung zwischen klassischer und Quantenmechanik: Ehrenfest Theorem

Klassische
Mechanik

Klassenpunkt

$\vec{r}, \vec{p}$

deterministisch

$\vec{r}(t)$

$\vec{p}(t)$

klassisch statistische
Verteilung

$$\overline{\vec{r}} = \int d^3r P(\vec{r}) \vec{r}$$

$$\overline{\vec{p}} = \int d^3k P(\vec{k}) \hbar \vec{k}$$

Quantenmechanik

Wellenfunktion

$\Psi(\vec{r}, t)$

$\hat{r}, \hat{p}$

Wahrscheinlichkeiten

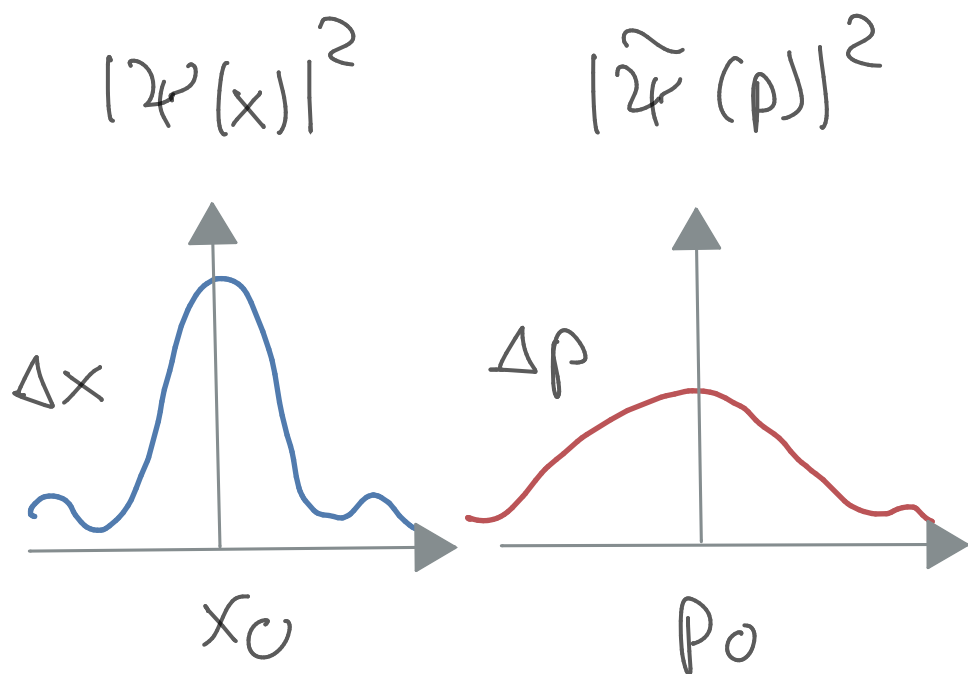
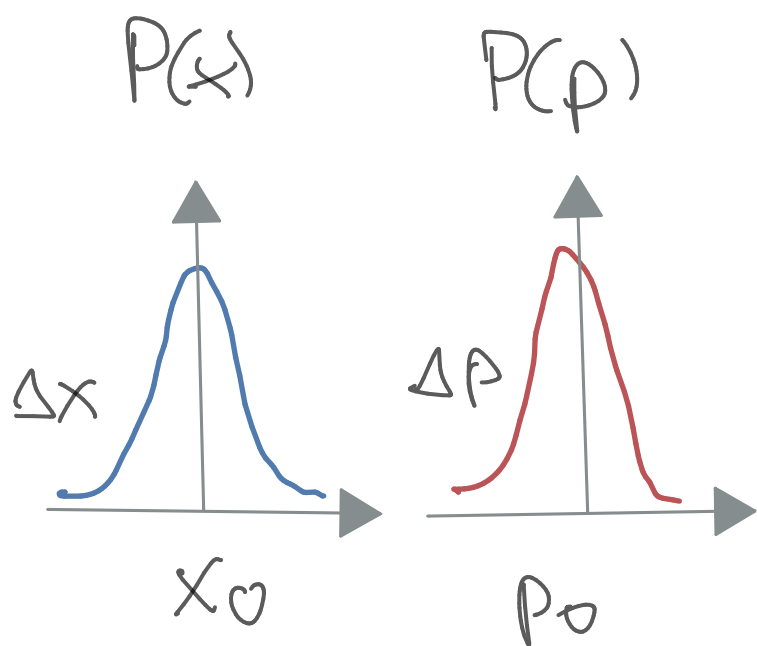
$|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ W.-Dichte
im Ortsraum

$|\tilde{\Psi}(\vec{k}, t)|^2$ W.-Dichte
im Impulsraum

$$\langle \hat{r} \rangle = \int d^3r |\Psi(\vec{r})|^2 \vec{r}$$

$$\langle \hat{p} \rangle = \int d^3k |\tilde{\Psi}(\vec{k})|^2 \hbar \vec{k}$$

Bspl:



$$\Delta x, \Delta p \text{ beliebig} \quad \langle \Delta x^2 \rangle \langle \Delta p^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

Dynamik in klassischer und Quantenmechanik

Hamiltonmechanik

q, p $H(q, p)$

$$(251) \quad \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \{q, H\}_p \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = \{p, H\}_p$$

$$(252) \quad \boxed{\frac{d f(q, p, t)}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{f, H\}_p}$$

Quantenmechanik

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{f} \rangle &= \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \hat{f} | \psi(t) \rangle = \\ &= \left(\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \right) \hat{f} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \left(\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \right) | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \hat{f} \left(\frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle \right) \end{aligned}$$

$$(253) \quad \frac{d}{dt} \langle \hat{f} \rangle = \left\langle \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \right\rangle - \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{f}, \hat{H}] \rangle$$

d.h. $\{, \}_{\text{P}} \rightarrow -\frac{i}{\hbar} [,]$

Ehrenfest Gleichungen

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{p}] \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{x}), \hat{p} \right] \rangle$$

$$(254) \quad = \frac{i}{\hbar} \langle [V(\vec{x}), \hat{p}] \rangle$$

Was ist $[V(\vec{x}), \hat{p}] = ? \Rightarrow$ Ortsdarstellung

$$\left[V(x), \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right] \psi(x) = V(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x)$$

$$- \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} V(x) \psi(x) = - \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial x} V(x) \right) \psi(x)$$



$$(255) \quad \Rightarrow [V(\vec{x}), \hat{p}] = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial V(\vec{x})}{\partial x} \quad \text{in Ortsdarstellung}$$

d.h.

$$(256) \quad \frac{d}{dt} \langle \vec{p} \rangle = - \langle \vec{\nabla} V(\vec{r}) \rangle$$

2. Ehrenfest'sche Gleichung

Gl. (256) ist analog zur klass. Gleichung

$$\frac{d}{dt} \vec{p} = -\vec{\nabla} V(\vec{r}) = \vec{F}$$

Nun betrachten wir analog

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{x}] \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}), \hat{x}] \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle [\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{x}] \rangle = \frac{\langle \hat{p} \rangle}{m} \end{aligned}$$

d.h. in 3D

(257)

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{r} \rangle = \frac{1}{m} \langle \vec{p} \rangle$$

1. Ehrenfest'sche Gleichung

analog zu

$$\frac{d}{dt} \vec{r} = \frac{1}{m} \vec{p}$$

Achtung: Ehrenfestgleichung bedeuten nicht daß q.mech. Erwartungswerte den klassischen (Newtonschen) Gleichungen genügen!

denn
(258)

$$\langle \vec{\nabla} V(\vec{r}) \rangle \neq \vec{\nabla} V(\langle \vec{r} \rangle)$$

i.A.

Klassische Näherung

Kraft $\vec{F}(\vec{r}) = -\vec{\nabla} V(\vec{r}) = \vec{F}(\vec{r})$

Taylorentwicklung in $\vec{r} - \langle \vec{r} \rangle$

$$F(x) = F(\langle x \rangle) + F'(x) \Big|_{x=\langle x \rangle} (x - \langle x \rangle) + \frac{1}{2!} F''(x) \Big|_{x=\langle x \rangle} (x - \langle x \rangle)^2 + \dots$$

liefert

$$\langle F(x) \rangle = F(\langle x \rangle) + \frac{1}{2!} F''(x) \Big|_{x=\langle x \rangle} \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle + \dots$$

$$(259) \quad \langle F(x) \rangle = F(\langle x \rangle) + \frac{1}{2!} F''(x) \Big|_{\langle x \rangle} \langle \Delta x^2 \rangle + \dots$$

klassischer
Beitrag

quantenmechanische
Korrekturen

Falls

$$(260) \quad |F''(x) \langle \Delta x^2 \rangle| \ll F(\langle x \rangle)$$

gelten klass. Gleichungen für die Erwartungswerte