

Ehrenfest Teoremi

Harmonik osilatör ders notlarında, standart yaklaşımlar - Hermit polinomları içeren integraller (Bölüm 12-15 Ders Özeti, sayfa 63-65) kullanılarak $\langle \hat{x} \rangle(t)$ ve $\langle \hat{p}_x \rangle(t)$ için ifadeler türetilmiştir. Hesaplamalar, cebir ağırlıklı olup, $\langle \hat{x} \rangle(t)$ ve $\langle \hat{p}_x \rangle(t)$ ' nin titreşim frekansında osilasyon yaptığı bulunmuştur. Sonuçlar aşağıdaki gibidir:

$$\langle x \rangle(t) = (2\alpha)^{-1/2} \cos(\omega_{\text{tit}} t) = \left(\frac{\hbar}{2\mu\omega} \right)^{1/2} \cos(\omega_{\text{tit}} t)$$

ve

$$\langle p \rangle(t) = \frac{1}{2} \left[i\hbar \left(\frac{\alpha}{2} \right)^{1/2} \left(e^{i\omega_{\text{tit}} t} - e^{-i\omega_{\text{tit}} t} \right) \right] = - \left(\frac{\hbar\mu\omega}{2} \right)^{1/2} \sin(\omega_{\text{tit}} t)$$

Burada dikkat edilmesi gereken husus, $\langle x \rangle(t)$ ve $\langle p \rangle(t)$ ' nin daha basit bir şekilde hesaplanması için kullanılacak yaklaşımlardır.

Klasik olarak

$$p = mv = m \frac{dx}{dt}$$

dir (serbest bir parçacık için μ yerine m kullanılır).

Kuantum mekaniksel olarak

$$\langle p \rangle(t) = m \frac{d\langle x \rangle(t)}{dt}.$$

tahmin edilebilir. Ancak, bu ifade geçerli midir? Bu ifadenin gerçekte, aşağıdaki ispatla verildiği gösterilebilir:

$\frac{d\langle x \rangle(t)}{dt}$ için orijinal ifade

$$\frac{d\langle x \rangle(t)}{dt} = \frac{d}{dt} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{x} \psi dx \right\} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\psi^*}{dt} \hat{x} \psi dx + \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{x} \frac{d\psi}{dt} dx$$

şeklindedir.

Zamana bağılı Schrödinger denklemi hatırlanırsa

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi \quad \text{veya} \quad \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} H\psi$$

Bu sonuçlar, yukarıdaki ifadede yerine konularak

$$\begin{aligned} \frac{d\langle x \rangle(t)}{dt} &= -\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{H}\psi)^* \hat{x} \psi dx + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{x} (\hat{H}\psi) dx \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (\hat{x}\hat{H} - \hat{H}\hat{x}) \psi dx = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (\hat{H}\hat{x} - \hat{x}\hat{H}) \psi dx \end{aligned}$$

sonucu elde edilir.

Komütatör (H'nin harmonik osilatör Hamiltonyen olduğu varsayılır) değerlendirildiğinde

...

$$\begin{aligned} (\hat{H}\hat{x} - \hat{x}\hat{H})f(x) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right) \hat{x} f(x) - \hat{x} \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right) f(x) \\ &= -2 \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{df}{dx} = -\frac{\hbar^2}{\mu} \left(\frac{i}{\hbar} \hat{p}_x \right) = -\frac{i\hbar}{\mu} \hat{p}_x \end{aligned}$$

bulunur. Böylece

$$\frac{d\langle x \rangle(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (\hat{H}\hat{x} - \hat{x}\hat{H}) \psi dx = \frac{1}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{p}_x \psi dx$$

sonucuna varılır. Bu sonuç, istenilen sonuçtur.

$$\boxed{\langle \hat{p}_x \rangle(t) = \mu \frac{d\langle x \rangle(t)}{dt}}$$

Bu şekilde, harmonik osilatör ders notlarında yer alan uzun hesaplamalar olmadan $\langle \hat{p}_x \rangle(t)$

elde edilebilir.

$$\langle \hat{p}_x \rangle(t) = \mu \frac{d\langle x \rangle(t)}{dt} = \mu \frac{d}{dt} \left\{ \left(\frac{\hbar}{2\mu\omega} \right)^{1/2} \cos(\omega t) \right\} = - \left(\frac{\mu\omega\hbar}{2} \right)^{1/2} \sin(\omega t)$$

$$\boxed{\langle \hat{p}_x \rangle(t) = - \left(\frac{\mu\omega\hbar}{2} \right)^{1/2} \sin(\omega t)}$$

Bu sonuç, başlangıçta kullanılan sonuçtur.

Yukarıdaki denklemler, Paul Ehrenfest (Hollanda, Leiden'de yerleşmiş Avusturyalı fizikçi)' den dolayı daha genel bir sonucun özel bir gösterimidir ve Ehrenfest Teoremi olarak bilinir. Özellikle, herhangi bir dinamik F değişkeni için

$$\frac{d\langle F \rangle(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (\hat{H}\hat{F} - \hat{F}\hat{H}) \psi dx$$

yazılır. Daha fazla bilgi için McQuarrie problemlerine bakılabilir.