3 Axiomatische Formulierung der Quantenmechanik

3.1 Die Postulate der Quantenmechanik

Postulat 1: Zustände eines physikalischen Systems werden durch Elemente eines komplexen Hilbertraums $\mathcal{H}$ beschrieben

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H}$$

- Hilberträume in der Quantenmechanik:
  - $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^n)$ zur Beschreibung von Bewegungsfreiheitsgraden in n-Dimensionen.
  - $\mathbb{C}^n$ zur Beschreibung von Spinfreiheitsgraden (siehe später)
- Hilbertraumvektoren, die sich nur durch eine globale Phase unterscheiden, repräsentieren den gleichen physikalischen Zustand.

Postulat 2: Die **zeitliche Evolution** eines Zustandes ist durch die Schrödingergleichung bestimmt,

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

Integration der Schrödingergleichung für eine Anfangsbedingung $|\psi(0)\rangle$ ergibt die Wellenfunktion zu beliebigen anderen Zeiten,

$$|\psi(0)\rangle \quad \xrightarrow{SG} \quad |\psi(t)\rangle$$

Postulat 3: Physikalische Messgrößen (Observable) werden durch selbstadjungierte Operatoren beschrieben.

- Selbsadjungierte Operatoren $A = A^\dagger$ besitzen reelle Eigenwerte $a \in \mathbb{R}$ und orthogonale, vollständige Eigenfunktionen $|\psi_{a,\alpha}\rangle$

$$A\,|\psi_{a,\alpha}\rangle = a\,|\psi_{a,\alpha}\rangle \qquad \langle\psi_{a,\alpha}|\psi_{b,\beta}\rangle = \delta_{ab}\delta_{\alpha\beta} \qquad \sum_a \sum_{\alpha=1}^{g_a} |\psi_{a,\alpha}\rangle\,\langle\psi_{a,\alpha}| = \mathbb{1}$$

  Die Eigenwerte a sind im Allgemeinen g_a-fach entartet, $\alpha = 1, \ldots, g_a$.

- Beispiele:
  - Ortsoperator: $\hat{x}\,|x\rangle = x\,|x\rangle$
  - Impulsoperator: $\hat{p}\,|p\rangle = p\,|p\rangle$
  - kinetische Energie: $\frac{\hat{p}^2}{2m}\,|\pm p\rangle = \frac{p^2}{2m}\,|\pm p\rangle$ (zweifache Entartung)
  - Hamiltonoperator: $\hat{H}\,|\psi_{E,\alpha}\rangle = E\,|\psi_{E,\alpha}\rangle$

Postulat 4: zur **Statistik von Messungen („Messpostulat“)**:

a) Die Messung einer Observablen A ergibt als Messwert einen der Eigenwerte a.

b) Die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung von A an einem System im Zustand $|\phi\rangle$, den Messwert a zu erhalten ist

$$P_a = \sum_{\alpha=1}^{g_a} |\langle\psi_{a,\alpha}|\phi\rangle|^2$$

c) Wird bei einer Messung von A an einem System im Zustand $|\phi\rangle$ ein Ergebnis a erzielt, befindet sich das System nach der Messung im Zustand

$$|\phi(a)\rangle = \frac{1}{\sqrt{P_a}}\mathbb{P}_a |\phi\rangle$$

wobei $\mathbb{P}_a$ der Projektionsoperator in den Unterraum zum Eigenwert a ist

$$\mathbb{P}_a = \sum_{\alpha=1}^{g_a} |\psi_{a,\alpha}\rangle \langle\psi_{a,\alpha}|$$

Das System wird durch die Messung mit Resultat a in den Zustand $|\phi(a)\rangle$ projiziert. Durch die Messung erhalten wir neue Information über das physikalische System. Die neue Wellenfunktion $|\phi(a)\rangle$ entspricht der auf das Messergebnis a konditionierten Beschreibung des Systems.

Erläuterungen zu Postulat 4:

- Die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung von A an einem System im Zustand $|\phi\rangle$, den Messwert a zu erhalten, kann mit dem Projektionsoperator $\mathbb{P}_a$ auch als

$$P_a = \langle\phi|\mathbb{P}_a|\phi\rangle$$

geschrieben werden:

$$\langle\phi|\mathbb{P}_a|\phi\rangle = \langle\phi| \left[\sum_{\alpha=1}^{g_a} |\psi_{a,\alpha}\rangle\langle\psi_{a,\alpha}|\right] |\phi\rangle = \sum_{\alpha=1}^{g_a} \langle\phi|\psi_{a,\alpha}\rangle\langle\psi_{a,\alpha}|\phi\rangle = \sum_{\alpha=1}^{g_a} |\langle\psi_{a,\alpha}|\phi\rangle|^2 = P_a$$

- Eigenschaften der Projektionsoperatoren $\mathbb{P}_a$
  - $\mathbb{P}_a\mathbb{P}_b = \mathbb{P}_a\delta_{ab}$ aufgrund der Orthogonalität der Basis $|\psi_{a,\alpha}\rangle$

$$\mathbb{P}_a\mathbb{P}_b = \left[\sum_{\alpha=1}^{g_a} |\psi_{a,\alpha}\rangle\langle\psi_{a,\alpha}|\right]\left[\sum_{\beta=1}^{g_b} |\psi_{b,\beta}\rangle\langle\psi_{b,\beta}|\right] = \sum_{\alpha=1}^{g_a}\sum_{\beta=1}^{g_b} |\psi_{a,\alpha}\rangle\langle\psi_{a,\alpha}|\psi_{b,\beta}\rangle\langle\psi_{b,\beta}|$$

$$= \sum_{\alpha=1}^{g_a}\sum_{\beta=1}^{g_b} \delta_{ab}\delta_{\alpha\beta} |\psi_{a,\alpha}\rangle\langle\psi_{b,\beta}| = \delta_{ab}\sum_{\alpha=1}^{g_a} |\psi_{a,\alpha}\rangle\langle\psi_{a,\alpha}| = \delta_{ab}\mathbb{P}_a$$

  - $\sum_a \mathbb{P}_a = \mathbb{1}$ aufgrund der Vollständigkeit der Basis $|\psi_{a,\alpha}\rangle$

$$\sum_a \mathbb{P}_a = \sum_a \sum_{\alpha=1}^{g_a} |\psi_{a,\alpha}\rangle\langle\psi_{a,\alpha}| = \mathbb{1}$$

- Der Zustand $|\phi(a)\rangle$ nach der Messung ist ein Eigenzustand von A zum gemessenen Eigenwert a,

$$A|\phi(a)\rangle = \frac{1}{\sqrt{P_a}} A\mathbb{P}_a |\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{P_a}} a\mathbb{P}_a |\phi\rangle = a|\phi(a)\rangle$$

- **Falls der Eigenwert a von A nicht entartet ist**, also $g_a = 1$ und $A|\psi_a\rangle = a|\psi_a\rangle$, gilt:

  - Die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung von A an einem System im Zustand $|\phi\rangle$, den Messwert a zu erhalten, ist

$$P_a = |\langle\psi_a|\phi\rangle|^2$$

Die Wahrscheinlichkeit ist das Betragsquadrat des Skalarproduktes zwischen Zustand $|\phi\rangle$ des Systems und dem Eigenzustand $|\psi_a\rangle$ zum Messwert a.

  - Der Zustand nach der Messung ist

$$|\phi(a)\rangle = e^{i\Psi} |\psi_a\rangle$$

mit einer Phase $e^{i\Psi} = \frac{\langle\psi_a|\phi\rangle}{|\langle\psi_a|\phi\rangle|}$, wegen

$$|\phi(a)\rangle = \frac{1}{\sqrt{P_a}} \mathbb{P}_a |\phi\rangle = \frac{1}{|\langle\psi_a|\phi\rangle|} |\psi_a\rangle \langle\psi_a|\phi\rangle = e^{i\Psi} |\psi_a\rangle .$$

Der Zustand des Systems nach der Messung ist der Eigenzustand $|\psi_a\rangle$ zum Messwert a (bis auf eine globalen Phase).

- **Beispiel: Messung der Energie eines harmonischen Oszillators**
  - Ein harmonischer Oszillator liege in einem Zustand $|\phi\rangle$ vor mit

$$|\phi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle \,.$$

  - Der Operator der Energie ist der Hamiltonoperator mit Eigenzuständen und -werten

$$H|n\rangle = E_n |n\rangle \qquad E_n = \hbar\omega(n + \tfrac{1}{2}) \qquad (n = 0, 1, 2, \cdots)$$

  - Messung der Energie liefert einen der Energieeigenwerte E_n als Messergebnis mit Wahrscheinlichkeit

$$P_n = \langle\phi|\mathbb{P}_n|\phi\rangle = \langle\phi|n\rangle\langle n|\phi\rangle = |\langle n|\phi\rangle|^2 = |c_n|^2$$

  - Das Messergebnis sei E_{n_0}. Der Oszillator befindet sich nach der Messung im Zustand

$$|\phi(n_0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{P_{n_0}}}\mathbb{P}_{n_0}|\phi\rangle = e^{i\Psi}|n_0\rangle$$

    mit $e^{i\Psi} = \frac{c_n}{|c_n|}$, d.h. er wird in den Energieeigenzustand $|n_0\rangle$ projiziert.

- Wellenfunktionen, die sich nur durch eine globale Phase unterscheiden, ergeben dieselbe Statistik für alle Messung:

  Ein Zustand $|\phi\rangle$ ergibt bei einer Messung von A die Wahrscheinlichkeiten

  $$P_a = \langle\phi|\mathbb{P}_a|\phi\rangle\,.$$

  Ein Zustand $|\phi'\rangle = e^{i\Psi}\,|\phi\rangle$ ergibt die Wahrscheinlichkeiten

  $$P_a' = \langle\phi'|\mathbb{P}_a|\phi'\rangle = \langle\phi|e^{-i\Psi}\mathbb{P}_a e^{i\Psi}|\phi\rangle = \langle\phi|\mathbb{P}_a|\phi\rangle = P_a.$$

  Wellenfunktionen (Hilbertraumvektoren), die sich nur durch eine globale Phase unterscheiden, repräsentieren daher den gleichen physikalischen Zustand.

- **Energieeigenzustände sind „stationäre“ Zustände**: Die Statistik von Messungen hängt nicht vom Zeitpunkt der Messung ab.

  Ein System befinde sich zum Zeitpunkt $t = 0$ in einem Energieeigenzustand $|\psi_E\rangle$ des Hamiltonoperators H mit $H\,|\psi_E\rangle = E\,|\psi_E\rangle$. Zum Zeitpunkt $t > 0$ befindet sich das System im Zustand

  $$|\psi_E(t)\rangle = e^{-iEt/\hbar}\,|\psi_E\rangle$$

  der sich nur durch eine globale Phase von $|\psi_E\rangle$ unterscheidet.

  Aber: Superpositionen von Energieeigenzuständen sind nicht stationär, d.h. die Statistik von Messungen hängt im Allgemeinen vom Zeitpunkt der Messung ab.

- Falls das Spektrum von A **kontinuierlich** (und nicht entartet) ist, dann ist

$$P_a = |\langle \psi_a|\phi\rangle|^2$$

eine **Wahrscheinlichkeitsdichte** auf dem Wertebereich von a.
Zum Beispiel:

  - Ortsmessung: $\hat{x}\,|x\rangle = x\,|x\rangle$ mit $x \in \mathbb{R}$

$$P_x = |\langle x|\phi\rangle|^2 = |\phi(x)|^2$$

  - Impulsmessung: $\hat{p}\,|p\rangle = p\,|p\rangle$ mit $x \in \mathbb{R}$

$$P_p = |\langle p|\phi\rangle|^2 = |\phi(p)|^2$$

- Die **Wahrscheinlichkeit**, einen Messwert in einem infinitesimalen Intervall $\mathrm{d}a$ um a zu finden ist

$$P_a \mathrm{d}a = |\langle \psi_a|\phi\rangle|^2 \mathrm{d}a$$

Die Wahrscheinlichkeit, einen Messwert a in einem endlichen Intervall I zu finden ist

$$P_{a\in I} = \langle \phi|\mathbb{P}_{a\in I}|\phi\rangle$$

mit dem Projektor auf den Unterraum aus Eigenzuständen $|\psi_a\rangle$ mit $a \in I$

$$\mathbb{P}_{a\in I} = \int_I \mathrm{d}a\ |\psi_a\rangle \langle \psi_a|\,.$$

Wegen

$$P_{a\in I} = \int_I \mathrm{d}a\,|\,\langle \psi_a|\phi\rangle\,|^2 = \int_I \mathrm{d}a\ \langle \phi|\psi_a\rangle \langle \psi_a|\phi\rangle = \langle \phi|\left[\int_I \mathrm{d}a\ |\psi_a\rangle \langle \psi_a|\right]|\phi\rangle = \langle \phi|\mathbb{P}_{a\in I}|\phi\rangle$$

- **Beispiel: Messung der Position eines harmonischen Oszillators**
  - Ein harmonischer Oszillator befinde sich im Grundzustand $|\phi\rangle = |0\rangle$ mit Ortsdarstellung

$$\phi(x) = \langle x|\phi\rangle = \left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

  - Der Ortsoperator besitzt die Eigenzustände und -werte

$$\hat{x}\,|x\rangle = x\,|x\rangle \qquad\qquad (x \in \mathbb{R})$$

  - Die Wahrscheinlichkeitsdichte einer Ortsmessung ist

$$P_x = \langle\phi|\mathbb{P}_x|\phi\rangle = \langle\phi|x\rangle\,\langle x|\phi\rangle = |\langle x|\phi\rangle|^2 = |\phi(x)|^2 = \left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}$$

  - Die Wahrscheinlichkeit, den Oszillator in $[0,\infty]$ vorzufinden, ist

$$P_{x\in[0,\infty)} = \int_0^\infty \mathrm{d}x\,|\phi(x)|^2 = \frac{1}{2}$$

3.2 Messgrößen und Messungen

- Für einen gegebenen Zustand $|\phi\rangle$ des Systems bilden die Wahrscheinlichkeiten P_a für die Messwerte a eine **normierte Wahrscheinlichkeitsverteilung** über dem Eigenwertspektrum von A,

$$\sum_a P_a = \sum_a \langle\phi|\mathbb{P}_a|\phi\rangle = \langle\phi| \left[\sum_a \mathbb{P}_a\right] |\phi\rangle = \langle\phi|\phi\rangle = 1$$

- **Mittelwert und höhere Momente der Messung** einer Observablen A and einem System im Zustand ϕ sind

$$\langle A\rangle = \langle\phi|A|\phi\rangle \qquad \langle A^n\rangle = \langle\phi|A^n|\phi\rangle$$

wegen $\langle A^n\rangle = \sum_a a^n P_a = \sum_a a^n \langle\phi|\mathbb{P}_a|\phi\rangle = \langle\phi| \left[\sum_a a^n \mathbb{P}_a\right] |\phi\rangle = \langle\phi|A^n|\phi\rangle$

- Die **Varianz der Messung** ist

$$\Delta A^2 = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2 = \left\langle \left(A - \langle A\rangle\right)^2 \right\rangle$$

wegen

$$\begin{aligned}\left\langle (A - \langle A\rangle)^2 \right\rangle &= \langle\phi|(A - \langle A\rangle)^2|\phi\rangle = \langle\phi|A^2 - 2A\langle A\rangle + \langle A\rangle^2|\phi\rangle \\ &= \langle\phi|A^2|\phi\rangle - 2\langle\phi|A|\phi\rangle\langle A\rangle + \langle A\rangle^2 = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2\end{aligned}$$

- Wird eine Observable A an einem System gemessen, das in einem Eigenzustand

$$|\phi\rangle = \sum_{\alpha=1}^{g_a} c_\alpha \, |\psi_{a,\alpha}\rangle$$

von A zum Eigenwert a vorliegt, $A\,|\phi\rangle = a\,|\phi\rangle$, dann wird mit Sicherheit der Messwert a erhalten,

$$P_b = \langle\phi|\mathbb{P}_b|\phi\rangle = \sum_{\alpha=1}^{g_a}\sum_{\beta=1}^{g_b} |c_\alpha|^2 |\langle\psi_{a,\alpha}|\psi_{b,\beta}\rangle|^2 = \sum_{\alpha=1}^{g_a}\sum_{\beta=1}^{g_b} |c_\alpha|^2 \delta_{ab}\delta_{\alpha\beta} = \delta_{ab}$$

Entsprechend verschwindet die Varianz der Messung

$$\Delta A^2 = \langle\phi|A^2|\phi\rangle - \langle\phi|A|\phi\rangle^2 = \langle\phi|a^2|\phi\rangle - \langle\phi|a|\phi\rangle^2 = a^2 - a^2 = 0$$

- **Wiederholte Messungen ergeben das gleiche Messresultat.**

  Da die Wellenfunktion durch die Messung mit Resultat a in einen Eigenzustand $|\phi(a)\rangle$ von A mit Eigenwert a projiziert wird, liefert eine wiederholte Messung von A mit Sicherheit wieder das Messergebnis a.

  Aber: Dies gilt im Allgemeinen nicht, wenn der Zustand des Systems sich zwischen den beiden Messungen verändert (z.B. zeitlich gemäß der Schrödingergleichung evolviert).

- Kommutierende Observable $[A, B] = 0$ besitzen ein gemeinsames System von Eigenzuständen,

$$A\,|a, b; \alpha\rangle = a\,|a, b; \alpha\rangle \qquad\qquad B\,|a, b; \alpha\rangle = b\,|a, b; \alpha\rangle$$

  (α bezeichnet eine mögliche Entartung.) Ein System in einem Eigenzustand $|a, b, \alpha\rangle$ besitzt verschwindende Streuung

$$\Delta A = \Delta B = 0$$

  in beiden Groessen A und B. Beide Messgrössen nehmen im Zustand $|a, b; \alpha\rangle$ „scharfe" Werte a bzw. b an.

- Dasselbe gilt für einen grösseren Satz kommutierender Observabler $\{A,\ B,\ C, \cdots\}$. In einem gemeinsamen Eigenzustand $|a, b, c, \cdots; \alpha\rangle$

$$A\,|a, b, c\cdots; \alpha\rangle = a\,|a, b, c\cdots; \alpha\rangle \qquad\qquad B\,|a, b, c\cdots; \alpha\rangle = b\,|a, b, c\cdots; \alpha\rangle$$
$$C\,|a, b, c\cdots; \alpha\rangle = c\,|a, b, c\cdots; \alpha\rangle \qquad\qquad \text{etc.}$$

  besitzen alle Observable scharfe Werte $a, b, c, \cdots$ und die Streuungen verschwinden

$$\Delta A = \Delta B = \Delta C = \cdots = 0$$

- Falls der Unterraum zu den Eigenwerten $a, b, c, \cdots$ eines Satzes kommutierender Observabler $A,\ B,\ C, \cdots$ eindimensional ist, d.h. nur aus einem **einzigen** Zustand $|a, b, c, \cdots\rangle$ besteht, dann bilden die Observablen einen **vollständigen Satz kommutierender Observabler („VSKO")**.

  Der Zustand $|a, b, c, \cdots\rangle$ ist dann **eindeutig** festgelegt durch Angabe der (scharfen) Werte aller Observabler $A,\ B,\ C, \cdots$, d.h. aller Eigenwerte $a, b, c, \cdots$.

- **Beispiel: zweidimensionaler harmonischer Oszillator**
  - Der Hamiltonoperator eines zweidimensionalen Oszillators ist

$$H = H_1 + H_2 \qquad\qquad H_i = \hbar\omega\left(a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2}\right)$$

    H_i sind die Hamiltonoperatoren für die Bewegung in x_i-Richtung. Es gilt $[H_1, H_2] = 0$.
  - Die Eigenzustände und Eigenwerte sind

$$H\,|n_1, n_2\rangle = E_n\,|n_1, n_2\rangle \qquad E_n = \hbar\omega(n+1) \qquad \text{mit} \quad n = n_1 + n_2$$

    Die Energieeigenwerte sind $(n+1)-$fach entartet

$$\begin{array}{llll} E_0 = \hbar\omega & |0,0\rangle & & \\ E_1 = 2\hbar\omega & |1,0\rangle & |0,1\rangle & \\ E_2 = 3\hbar\omega & |2,0\rangle & |1,1\rangle & |0,2\rangle \end{array}$$

    etc.

    Angabe der Gesamtenergie legt den Zustand nicht eindeutig fest.
  - Ein VSKO bilden $\{H_1, H_2\}$: Angabe der Energien E_{n_i} in jeder Bewegungsrichtung legt den Zustand $|n_1, n_2\rangle$ eindeutig fest.
  - Ein alternatives VSKO ist $\{H, H_1\}$: Angabe der Gesamtenergie E_n und der Energie E_{n_1} in einer Bewegungsrichtung legt den Zustand $|n_1, n - n_1\rangle$ eindeutig fest.
  - Ein weiteres VSKO ist $\{H, L_3\}$, d.h. die Gesamtenergie und die Komponente des Drehimpulses in x_3-Richtung, $L_3 = x_1 p_2 - x_2 p_1$.

- **Für zwei nicht-kommutierende Observable A, B mit $[A, B] \neq 0$ können die Streuungen ΔA und ΔB im Allgemeinen nicht zugleich verschwinden.**

Es gilt die verallgemeinerte **Heisenbergsche Unschärferelation** für alle Zustände $|\phi\rangle$

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

Beweis:

- Wir definieren $\widetilde{A} = A - \langle\phi|A|\phi\rangle$ und $\widetilde{B} = B - \langle\phi|B|\phi\rangle$, sodass im Zustand $|\phi\rangle$

$$\langle\widetilde{A}\rangle = 0 \qquad \langle\widetilde{B}\rangle = 0 \qquad \langle\widetilde{A}^2\rangle = \Delta A^2 \qquad \langle\widetilde{B}^2\rangle = \Delta B^2$$

- Es sei $|\widetilde{\phi}\rangle = \left(\widetilde{A} + i\lambda\widetilde{B}\right)|\phi\rangle$ mit $\lambda \in \mathbb{R}$. Dann ist

$$0 \leq \| \, |\widetilde{\phi}\rangle \, \|^2 = \langle\phi| \left\{ \left(\widetilde{A} - i\lambda\widetilde{B}\right) \left(\widetilde{A} + i\lambda\widetilde{B}\right) \right\} |\phi\rangle = \langle\phi| \left(\widetilde{A}^2 + i\lambda\left[\widetilde{A}, \widetilde{B}\right] + \lambda^2\widetilde{B}^2\right) |\phi\rangle$$
$$= \Delta A^2 + \lambda i \langle[A, B]\rangle + \lambda^2 \Delta B^2 \qquad \forall\lambda \in \mathbb{R}$$

Bemerkung: $\langle[A, B]\rangle$ ist rein imaginär, wegen $\langle[A, B]\rangle^* = \left\langle [A, B]^\dagger \right\rangle = \langle[B, A]\rangle = -\langle[A, B]\rangle$.

- Für eine quadratische Funktion $f(\lambda) = a\lambda^2 + b\lambda + c$ gilt $f(\lambda) \geq 0$ falls sie keine oder höchstens eine Nullstelle besitzt. Dies ist dann der Fall, wenn für die Diskriminante gilt $b^2 - 4ac \leq 0$. Also gilt

$$\left| \left\langle [A, B] \right\rangle \right|^2 - 4\Delta A^2 \Delta^2 \leq 0$$

- Insbesondere für **Orts- und Impulsoperator** gilt wegen $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ für alle Zustände

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

- Für **Zustände minimaler Unschärfe** gilt $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$. Die Wellenfunktion ist dann eine **Gaußsche Funktion** in Orts- und Impulsdarstellung.

  Beweis:

  - Für $\left|\left\langle [A, B] \right\rangle\right|^2 - 4\Delta A^2 \Delta^2 = 0$ verschwindet die Diskriminante, $b^2 - 4ac = 0$, und die quadratische Funktion $f(\lambda) = a\lambda^2 + b\lambda + c$ besitzt genau eine Nullstelle $f(\lambda_0) = 0$ bei $\lambda_0 = -\frac{b}{2a}$.
  - Damit gilt für $|\widetilde{\phi}\rangle = \left(\widetilde{A} + i\lambda_0 \widetilde{B}\right)|\phi\rangle$, dass $\| \, |\widetilde{\phi}\rangle \, \|^2 = 0$ bzw. $|\widetilde{\phi}\rangle = 0$ also

  $$\left((A - \langle A \rangle\,) - \frac{\langle [A, B] \rangle}{2\Delta B^2} (B - \langle B \rangle\,) \right) |\phi\rangle = 0$$

  - Für $A = \hat{x}$ und $B = \hat{p}$ erfüllt ein Zustand minimaler Unschärfe daher

  $$\left((\hat{x} - \langle x \rangle\,) - \frac{i\hbar}{2\Delta p^2} (\hat{p} - \langle p \rangle\,) \right) |\phi\rangle = 0$$

  - Für die Ortsdarstellung $\phi(x) = \langle x|\phi\rangle$ gilt daher die Differentialgleichung

  $$\left((x - \langle x \rangle\,) - \frac{i\hbar}{2\Delta p^2} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \langle p \rangle \right) \right) \phi(x) = 0$$

  Die Lösung ist eine Gaußsche Funktion in x. Analoges gilt für die Impulsdarstellung.

3.3 Zeitliche Evolution

- Die Dynamik eines Systems wird durch die Schrödingergleichung $i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\phi(t)\rangle = \hat{H}|\phi(t)\rangle$ beschrieben. Dabei ist $\hat{H}$ der **Hamiltonoperator des Systems**.
- Um von einer klassischen Beschreibung eines Systems mit einer Hamiltonfunktion $H(x_i, p_j)$ und kanonischen Phasenraumvariablen x_i und p_j zu einer quantenmechanischen Beschreibung zu kommen, kann (in der Regel) die **kanonische Quantisierungsvorschrift** befolgt werden:

$$\begin{aligned} x_i &\quad\to\quad \hat{x}_i \\ p_j &\quad\to\quad \hat{p}_j \\ H(x_i, p_j) &\quad\to\quad \hat{H} = H(\hat{x}_i, \hat{p}_j) \end{aligned}$$

Den Operatoren $\hat{x}_i$ und $\hat{p}_j$, die den kanonischen Phasenraumvariablen entsprechen, wird die **kanonische Kommutatorrelation** auferlegt:

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

Bemerkung: Die Quantisierungsvorschrift liefert keinen eindeutingen Hamiltonoperator. Die Rechtfertigung für die Verwendung eines Hamiltonoperators erfolgt letztlich empirisch.

- Die allgemeine Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} |\phi(t)\rangle = H |\phi(t)\rangle$$

mit einem Hamiltonoperator H, der nicht explizit von der Zeit abhängt, ist

$$|\phi(t)\rangle = \sum_{E,\alpha} c_{E,\alpha} e^{-iEt/\hbar} |\psi_{E,\alpha}\rangle \qquad\qquad c_{E,\alpha} \in \mathbb{C}$$

mit den Energieeigenzuständen und -eigenwerten des Hamiltonoperators

$$H |\psi_{E,\alpha}\rangle = E |\psi_{E,\alpha}\rangle .$$

α bezeichnet eine mögliche Entartung. Für kontinuierliche Spektren sind Summen durch Integrale zu ersetzen.

- Die Amplituden $c_{E,\alpha}$ sind für einen gegebenen Anfangszustand $|\phi(t_0)\rangle$ zum Zeitpunkt t_0 als

$$c_{E,\alpha} = e^{iEt_0/\hbar} \langle\psi_{E,\alpha}|\phi(t_0)\rangle$$

zu wählen, wegen

$$\langle\psi_{E,\alpha}|\phi(t_0)\rangle = \sum_{E',\beta} c_{E',\beta} e^{-iEt_0/\hbar} \langle\psi_{E,\alpha}|\psi_{E',\beta}\rangle = \sum_{E',\beta} c_{E',\beta} \delta_{EE'} e^{-iEt_0/\hbar} \delta\alpha\beta = c_{E,\alpha} e^{-iEt_0/\hbar}$$

Zeitentwicklungsoperator

- Damit ist der Zustand zum Zeitpunkt t

$$|\phi(t)\rangle = \sum_{E,\alpha} e^{-iE(t-t_0)/\hbar} |\psi_{E,\alpha}\rangle \langle\psi_{E,\alpha}|\phi(t_0)\rangle = \left[\sum_E e^{-iE(t-t_0)/\hbar} \sum_\alpha |\psi_{E,\alpha}\rangle \langle\psi_{E,\alpha}|\right] |\phi(t_0)\rangle$$

- Für einen Hamiltonoperator H, der nicht explizit von der Zeit abhängt, ist der **unitäre Zeitentwicklungsoperator (Evolutionsoperator)** definiert als

$$U(t, t_0) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar}$$

  - Die Spektraldarstellung des Zeitentwicklungsoperators lautet

$$U(t, t_0) = \sum_E e^{-iE(t-t_0)/\hbar} \mathbb{P}_E \qquad \mathbb{P}_E = \sum_\alpha |\psi_{E,\alpha}\rangle \langle\psi_{E,\alpha}|$$

    mit dem Projektor $\mathbb{P}_E$ in den Unterraum zum Energieeigenwert E. Es gilt also

$$|\phi(t)\rangle = U(t, t_0) |\phi(t_0)\rangle$$

  - Dies ist konsistent mit der formalen Lösung der Schrödingergleichung

$$i\hbar \tfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} |\phi(t)\rangle = H |\phi(t)\rangle$$

    durch

$$|\phi(t)\rangle = e^{-iH(t-t_0)/\hbar} |\phi(t_0)\rangle = U(t, t_0) |\phi(t_0)\rangle$$

- **Eigenschaften des Zeitentwicklungsoperators**

$$U(t,t_0) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar}$$

  - unitär: $U(t,t_0)U^\dagger(t,t_0) = U^\dagger(t,t_0)U(t,t_0) = \mathbb{1}$
  - $U^\dagger(t,t_0) = U(t_0,t)$
  - $U(t,t) = \mathbb{1}$
  - $U(t,t_1)U(t_1,t_0) = U(t,t_0)$
  - $U(t,t)$ gehorcht der (operatorwertigen) Differentialgleichung

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U(t,t_0) = HU(t,t_0)$$

    Aufgrund der Schrödingergleichung $i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left|\phi(t)\right\rangle = H\left|\phi(t)\right\rangle$ und $\left|\phi(t)\right\rangle = U(t,t_0)\left|\phi(t_0)\right\rangle$ gilt

$$i\hbar\tfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U(t,t_0)\left|\phi(t_0)\right\rangle = U(t,t_0)\left|\phi(t_0)\right\rangle \qquad \forall\left|\phi(t_0)\right\rangle$$

  - Bemerkung: Der Zeitentwicklungsoperator $U(t,t_0)$ hängt nur von der Zeitdifferenz $t-t_0$ ab, $U(t,t_0) \equiv U(t-t_0)$. (Dies gilt nur für den Fall zeitunabhängiger Hamiltonoperatoren!) Die Operatoren $U(\tau)$ bilden eine **einparametrige Gruppe**:

$$U(\tau_1+\tau_2) = U(\tau_1)U(\tau_2) \qquad\qquad U(0) = \mathbb{1} \qquad\qquad U^\dagger(\tau) = U(-\tau)$$

- **Beispiel: Zeitliche Evolution des harmonischen Oszillator**

Mit $H\left|n\right\rangle = E_n\left|n\right\rangle$ und $E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$, $n = 0, 1, 2, \cdots$, ist der Evolutionsoperator

$$U(t,0) = e^{-iHt/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-iE_n t/\hbar}\mathbb{P}_n = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)t}\left|n\right\rangle\left\langle n\right|$$

Ein Zustand

$$\left|\phi(0)\right\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} c_m\left|m\right\rangle$$

entwickelt sich zu

$$\left|\phi(t)\right\rangle = U(t,0)\left|\phi(0)\right\rangle = e^{-i\omega t/2}\sum_{n,m=0}^{\infty} c_m e^{-in\omega t}\left|n\right\rangle\left\langle n|m\right\rangle = e^{-i\omega t/2}\sum_{m=0}^{\infty} c_m e^{-im\omega t}\left|m\right\rangle$$

- Auch für explizit **zeitabhängige Hamiltonoperatoren** $H(t)$ existiert ein Zeitevolutionsoperator $U(t, t_0)$, der einen Anfangszustand $|\phi(t_0)\rangle$ auf die Lösung $\phi(t)$ der zeitabhängigen Schrödingergleichung $i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\phi(t)\rangle = H(t)|\phi(t)\rangle$ abbildet,

$$|\phi(t)\rangle = U(t, t_0)|\phi(t_0)\rangle$$

  - Der Zeitevolutionsoperator erfüllt alle Eigenschaften, die auch im Fall zeitunabhängiger Hamiltonoperatoren gelten. Er besitzt allerdings keine einfache Spektraldarstellung.
  - Er erfüllt die Differentialgleichung

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U(t, t_0) = H(t)U(t, t_0)$$

  - Durch formale Lösung erhält man die Integralgleichung

$$U(t, t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t' H(t')U(t', t_0)$$

  - Iterieren der formalen Lösung ergibt eine Darstellung von $U(t, t_0)$ in Potentzen von $H(t)$

$$U(t, t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t' H(t') + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t' \int_{t_0}^{t'} \mathrm{d}t'' H(t')H(t'') + \cdots$$

  Bemerkung: Diese Reihenentwicklung des Evolutionsoperators $U(t, t_0)$ wird symbolisch abgekürzt durch den „Zeitordnungsoperator" $\mathcal{T}$

$$U(t, t_0) = \mathcal{T}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t' H(t')\right]$$

Schrödingerbild und Heisenbergbild

- Bisher haben wir die Dynamik eines Systmes im **Schrödingerbild** beschrieben:

  - Gegeben ein Anfangszustand $|\phi(t_0)\rangle$
  - Lösen der Schrödingergleichung

    $$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,|\phi(t)\rangle = H(t)\,|\psi(t)\rangle$$

    zur Anfangsbedingung $|\phi(t_0)\rangle$ ergibt den zeitlich entwickelten Zustand

    $$|\phi(t)\rangle = U(t,t_0)\,|\phi(t_0)\rangle$$

  - Mittelwerte etc. von Messungen von Observablen A ergeben sich aus

    $$\langle A(t)\rangle = \langle\phi(t)|A|\phi(t)\rangle = \langle\phi(t_0)|U^\dagger(t,t_0)AU(t,t_0)|\phi(t_0)\rangle$$

Im Schrödingerbild ist der **Zustand des Systems zeitabhängig** und die **Observablen sind zeitunabhängig**.

- Im **Heisenbergbild** wird die Zeitabhängigkeit auf die Observablen verschoben:
  Der zeitlich entwickelte Operator $A_H(t)$ der Observablen A im Heisenbergbild ist definiert als

$$A_H(t) = U^\dagger(t,t_0) A\, U(t,t_0)$$

Damit sind Mittelwerte etc. von Messungen der Observablen A zum Zeitpunkt t an einem System im Zustand $|\phi(t_0)\rangle$ gegeben durch

$$\langle A(t)\rangle = \langle\phi(t_0)|U^\dagger(t,t_0)AU(t,t_0)|\phi(t_0)\rangle = \langle\phi(t_0)|A_H(t)|\phi(t_0)\rangle$$

- Operatoren im Heisenbergbild erfüllen die **„Heisenbergsche Bewegungsgleichung“**

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A_H(t) = [A_H(t), H_H(t)] \qquad \text{mit} \qquad H_H(t) = U^\dagger(t,t_0)H(t)\,U(t,t_0)$$

$H_H(t)$ ist der Hamiltonoperator im Heisenbergbild. Dies folgt aus der Definition von $A_H(t)$ und der Differentialgleichung für den Zeitenwicklungsoperator $U(t,t_0) =: U$

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A_H(t) &= i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U^\dagger AU = \left(i\hbar\dot{U}^\dagger\right)A\,U + U^\dagger A\left(i\hbar\dot{U}\right) = -U^\dagger H(t)A\,U + U^\dagger A\,H(t)U \\ &= -U^\dagger H(t)UU^\dagger A\,U + U^\dagger AUU^\dagger H(t)U = [A_H(t), H_H(t)] \end{aligned}$$

Bemerkung: Wir nehmen hier an, der Operator A im Schrödingerbild ist zeitunabhängig $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A = 0$. Andernfalls gilt $i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A_H(t) = [A_H(t), H_H(t)] + \frac{\partial}{\partial t}A_H(t)$.

- Für einen zeitunabhängigen Hamiltonoperator $H(t) \equiv H$ gilt

$$H_H(t) = U^\dagger(t,t_0) H\, U(t,t_0) = e^{iH(t-t_0)/\hbar} H e^{-iH(t-t_0)/\hbar} \equiv H$$

und die Heisenbergsche Bewegungsgleichung vereinfacht sich zu

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} A_H(t) = [A_H(t), H]$$

- Im **Heisenbergbild** wird die Dynamik eines Systems wie folgt beschrieben:

  - Gegeben ein Anfangszustand $|\phi(t_0)\rangle$

  - Lösen der Heisenberggleichung

  $$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} A_H(t) = [A_H(t), H_H(t)]$$

  zur Anfangsbedingung $A_H(0) = A$ ergibt den zeitlich entwickelten Operator

  $$A_H(t) = U^\dagger(t,t_0) A\, U(t,t_0)$$

  - Mittelwerte etc. von Messungen von Observablen A ergeben sich aus

  $$\langle A(t)\rangle = \langle \phi(t_0)|A_H(t)|\phi(t_0)\rangle$$

Im Heisenbergbild ist der **Zustand des Systems zeitunabhängig** und die **Observablen sind zeitabhängig**.

- **Beispiel: Heisenbergsche Bewegungsgleichungen des harmonischen Oszillators**
  Der Hamiltonoperator ist
  $$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2$$
  Die Heisenbergschen Bewegungsgleichungen für Orts- und Impulsoperator sind
  $$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{x}_H(t) = -\frac{i}{\hbar}[\hat{x}_H(t), H] = \frac{\hat{p}_H(t)}{m} \qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{p}_H(t) = -\frac{i}{\hbar}[\hat{p}_H(t), H] = -m\omega^2\hat{x}_H(t)$$
  Details der Rechnung:
  $$-\frac{i}{\hbar}[\hat{x}_H(t), H] = -\frac{i}{\hbar}[U(t)\hat{x}U^\dagger(t), H] = -\frac{i}{\hbar}U(t)[\hat{x}, H]U^\dagger(t) = U(t)\frac{\hat{p}}{m}U^\dagger(t) = \frac{\hat{p}_H(t)}{m}$$
  Die Bewegungsgleichungen sind in diesem Fall linear und identisch zu den klassischen Bewegungsgleichungen.

  Die Lösungen zu den Anfangsbedingungen $\hat{x}(0) = \hat{x}$ und $\hat{p}(0) = \hat{p}$ lauten
  $$\hat{x}_H(t) = \cos(\omega t)\hat{x} + \sin(\omega t)\frac{\hat{p}}{m\omega} \qquad \hat{p}_H(t) = \cos(\omega t)\hat{p} - \sin(\omega t)m\omega\hat{x}$$
  Die *Mittelwerte* von Ort und Impuls folgen für alle Zustände den klassischen Trajektorien
  $$\langle x(t)\rangle = \cos(\omega t)\langle x(0)\rangle + \sin(\omega t)\frac{\langle p(0)\rangle}{m\omega} \qquad \langle p(t)\rangle = \cos(\omega t)\langle p(0)\rangle - \sin(\omega t)m\omega\langle x(0)\rangle$$

- **Falls eine Messgröße A mit dem Hamiltonoperator H eines Systems kommutiert, $[A, H] = 0$, ist A eine Erhaltungsgröße.**

  Die Bewegungsgleichung von $A_H(t)$ im Heisenbergbild ist dann

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} A_H(t) = [A_H(t), H] = U(t)[A, H]U^\dagger(t) = 0$$

  also gilt

$$A_H(t) = A$$

- Für eine Erhaltungsgröße A ist die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung von A einen Messwert a zu finden, zeitunabhängig.

  Rechnung im Schrödingerbild:

  - Aufgrund von $[A, H] = 0$ existiert ein gemeinsamer Satz von Eigenzuständen $|\psi_{Ea\alpha}\rangle$ von H und A, also $H\,|\psi_{Ea\alpha}\rangle = E\,|\psi_{Ea\alpha}\rangle$ und $A\,|\psi_{Ea\alpha}\rangle = a\,|\psi_{Ea\alpha}\rangle$.
  - Sei $|\phi(0)\rangle = \sum_{Ea\alpha} c_{Ea\alpha}\,|\psi_{Ea\alpha}\rangle$. Der Zustand zum Zeitpunkt t ist

$$|\phi(t)\rangle = \sum_{Ea\alpha} c_{Ea\alpha} e^{-iEt/\hbar}\,|\psi_{Ea\alpha}\rangle$$

  - Die Wahrscheinlichkeit ein Resultat a zu erhalten ist zum Zeitpunkt t

$$P_a(t) = \langle\psi(t)|\mathbb{P}_a|\psi(t)\rangle = \sum_{E\alpha} \left| c_{Ea\alpha} e^{-iEt/\hbar} \right|^2 = \sum_{E\alpha} |c_{Ea\alpha}|^2 \equiv P_a(0).$$

- Enthält ein vollständiger Satz kommutierender Observabler $\{H, A, B, C, \cdots\}$ den Hamiltonoperator H eines Systems, so sind alle Messgrössen in diesem VSKO Erhaltungsgrößen, weil

$$[H, A] = [H, B] = [H, C] = \cdots = 0$$

  Wird ein System in einem der Eigenzustände

$$|E, a, b, c \cdots\rangle$$

  des VSKO $\{H, A, B, C, \cdots\}$ präpariert, so ändert sich der Zustand mit der Zeit nicht (bis auf eine globale Phase),

$$e^{-iEt/\hbar} |E, a, b, c \cdots\rangle$$

  (Dies ist im Allgemeinen nicht der Fall, wenn das VSKO den Hamiltonoperator nicht enthält.)

  Die Eigenwerte (“**Quantenzahlen**“)

$$E, a, b, c, \cdots$$

  legen den Zustand für alle Zeiten fest.

- Um die Zustände eines quantenmechanischen Systems mit Hamiltonoperator H zu klassifizieren, suchen wir daher Erhaltungsgrössen $\{A, B, C, \cdots\}$, die gemeinsam mit H ein VSKO bilden.

  Z.B. wird für die elektronischen Zustände des Wasserstoffatomes das VSKO $\{H, \vec{L}^{\,2}, L_z\}$ verwendet (siehe später).

Ehrenfestsches Theorem

- Für ein massives Teilchen in 3D in einem Potential $V(\vec{x})$ ist

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x})$$

und die Bewegungsgleichungen für Orts- und Impulsoperator im Heisenbergbild lauten

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\vec{x}_H(t) = -\frac{i}{\hbar}[\vec{x}_H(t), H] = \frac{\vec{p}_H(t)}{m}$$
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\vec{p}_H(t) = -\frac{i}{\hbar}[\vec{p}_H(t), H] = -\vec{\nabla}V(\vec{x}_H(t)) = \vec{F}\big(\vec{x}(t)\big)$$

mit dem Operator für die Kraft $\vec{F}(\vec{x}) = -\vec{\nabla}V(\vec{x})$

- **Ehrenfestsches Theorem**:
„Im statistischen Mittel gelten die klassischen Bewegungsgleichungen“

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\vec{x}(t)\rangle = \frac{1}{m}\langle\vec{p}(t)\rangle \qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\vec{p}(t)\rangle = \left\langle\vec{F}\big(\vec{x}(t)\big)\right\rangle$$

Dies impliziert **nicht**, dass die Mittelwerte $\langle\vec{x}(t)\rangle$ und $\langle\vec{p}(t)\rangle$ die klassischen Bewegungsgleichungen erfüllen, da im Allgemeinen

$$\left\langle\vec{F}\big(\vec{x}(t)\big)\right\rangle \neq \vec{F}\big(\langle\vec{x}\rangle\big)$$

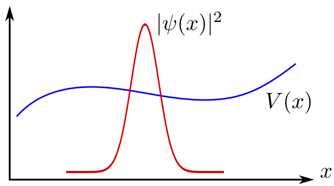
- Wann gilt näherungsweise $\langle\vec{F}(\vec{x}(t))\rangle \simeq \vec{F}(\langle\vec{x}\rangle)$?

$$\langle\vec{F}(\vec{x}(t))\rangle = -\langle\vec{\nabla}V(\vec{x})\rangle = -\int \mathrm{d}^3x\,\psi^*(\vec{x})\left(\vec{\nabla}V(\vec{x})\right)\psi(\vec{x}) = -\int \mathrm{d}^3x\,|\psi(\vec{x})|^2\left(\vec{\nabla}V(\vec{x})\right)$$

Falls $\vec{\nabla}V(\vec{x})$ über die Ausdehnung des Wellenpaketes $|\psi(\vec{x})|^2$ nur sehr langsam variiert, kann das Potential in einer Taylorreihe um $\langle\vec{x}\rangle$ entwickelt werden,

$$V(\vec{x}) = V(\langle\vec{x}\rangle) + \vec{\nabla}V(\langle\vec{x}\rangle)\cdot(\vec{x}-\langle\vec{x}\rangle) + \cdots$$

Damit ist $\vec{\nabla}V(\vec{x}) \simeq \vec{\nabla}V(\langle\vec{x}\rangle)$ bzw. $\langle\vec{\nabla}V(\vec{x})\rangle \simeq \vec{\nabla}V(\langle\vec{x}\rangle)$ und $\langle\vec{F}(\vec{x}(t))\rangle \simeq \vec{F}(\langle\vec{x}\rangle)$.



In diesem Fall folgen die Mittelwerte für Ort und Impuls effektiv den klassischen Bewegungsgleichungen:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\vec{x}(t)\rangle = \frac{1}{m}\langle\vec{p}(t)\rangle \qquad\qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\vec{p}(t)\rangle = \vec{F}(\langle\vec{x}\rangle)$$