シュレディンガー方程式

シャンチー

2005.2.21

1　Ehrenfestの定理と古典的極限

前節で以下の式

$$\frac{d}{dt} < \boldsymbol{r} >= \frac{1}{m} < \boldsymbol{p} >$$

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

$\boldsymbol{p}$ に関しては定義のような気がするが、そう導入したのではなく、$\boldsymbol{p}$ の p 空間におけるフーリエ変換として導入した。
これらの式は Ehrenfest の定理と呼ばれ知られている。
注意しておきたいことは、Newton's　運動方程式と似ているが、これは期待値におけるものなので古典とは異なる。

1.1　古典との一致

それではどのようなときにこれらの式が一致するのか考察してみよう。粒子の状態を波束であると考え、波束（有限領域での (?)) 確率波が十分小さければ最大値と平均値の差はほとんどないので波束の中心を $< \boldsymbol{r} >$ とする。$< \boldsymbol{p} >$ に加わる力と、平均の力は一般には

$$< \nabla V(\boldsymbol{r}) >\neq \nabla V(\boldsymbol{r} =< \boldsymbol{r} >) \tag{1}$$

であるが、これが成立するときに、波束の中心が古典力学に従う。
1 次元の波束を扱う。

今ポテンシャルが $V(x) = \lambda x^n (\lambda;$ 実数$, n$ は正の整数$)$

$$< V'(x) >= V'(x =< x >)$$

となるときは,

$$< V'(x) >= \lambda n < x^{n-1} > \tag{2}$$

$$\{V'(x)\}_{x=<x>} = \lambda n < x >^{n-1} \tag{3}$$

両式より　$n = 1, 2$　のときは左辺と右辺は等しい　(4)

(5)

$n = 0$ のときは $V'(x) = 0$ なので、これら 3 通りの時成立する。
$n = 0$ のときは　自由粒子
$n = 1$ のときは　一様な力の場の中の粒子
$n = 2$ のときは　調和振動子
をそれぞれ表し、これらは波束の中心と古典粒子の運動と厳密に等しいより一般的には力が巨視的、つまり $\boldsymbol{V}(\boldsymbol{r})$ の変化が十分に緩やかならば、波束の中心は、ほぼ古典粒子として求めた軌道と一致する

$$\begin{aligned} < \nabla V(\boldsymbol{r}) > &= \int d^3 r \psi^* [\nabla V(\boldsymbol{r})] \psi \\ &= \int d^3 r |\psi|^2 [\nabla V(\boldsymbol{r})] \end{aligned}$$

波は十分に $\boldsymbol{r} =< \boldsymbol{r} >$ に局在していると仮定する。粒子なのでそう考えても矛盾はしない。よって、

$$= \nabla V(< \boldsymbol{r} >) \int d^3 r |\psi|^2 = \nabla V(< \boldsymbol{r} >)$$

よって、広い空間での電子や、その他の荷電粒子に古典論を適用してもよいのは、このためだったのである。