# 1-2 Ehrenfest の定理



[古典力学（Newton 方程式）の導出]

1. $\hbar \to 0$ により Schrödinger 方程式は
古典力学の方程式に帰着される

2. 期待値にたいする方程式

$\Downarrow$

Newton 方程式そのもの

（Ehrenfest の定理という）

$$\boxed{\begin{aligned} \langle \hat{E} \rangle &= \left\langle \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \right\rangle + \langle V \rangle \\ \frac{d}{dt}\langle \mathbf{r} \rangle &= \frac{1}{m}\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle \\ \frac{d}{dt}\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle &= -\langle \nabla V \rangle \end{aligned}}$$

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$$

$$\langle \hat{O} \rangle \equiv \int \Psi^*(\mathbf{r}, t)\, \hat{O}\, \Psi(\mathbf{r}, t)\, d^3r$$

# 【Ehrenfest の定理の証明】

1. Schrödinger 方程式

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi}$$

この式に左から $\Psi^*$ をかけて空間積分する

$$\int \Psi^* i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} d^3r = -\frac{\hbar^2}{2m}\int \Psi^* \nabla^2 \Psi d^3r + \int \Psi^* V \Psi d^3r$$

$\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ , $\hat{p}^2 = -\hbar^2\nabla^2$ としているので

$$\underline{\langle \hat{E} \rangle = \langle \frac{1}{2m}\hat{p}^2 \rangle + \langle V \rangle}$$

2. $\frac{d}{dt}\langle r \rangle = \frac{1}{m}\langle \hat{p} \rangle$ の証明

$$\frac{d}{dt}\langle r \rangle = \frac{d}{dt}\int \Psi^* r \Psi d^3r = \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} r \Psi d^3r + \int \Psi^* r \frac{\partial \Psi}{\partial t} d^3r$$

$$= \frac{1}{2mi}\left[ \int \Psi^* \nabla^2 (r\Psi) d^3r - \int \Psi^* r \nabla^2 \Psi d^3r \right]$$

$$= \frac{1}{2mi} 2 \int \Psi^* \nabla \Psi d^3r = \frac{1}{m}\langle \hat{p} \rangle$$

よって示された.

3. $\frac{d}{dt}\langle \hat{p} \rangle = -\langle \nabla V \rangle$ の証明

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{p} \rangle = \frac{d}{dt}\int \Psi^* \hat{p}\, \Psi\, d^3r = \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\hat{p}\, \Psi\, d^3r + \int \Psi^* \hat{p}\, \frac{\partial \Psi}{\partial t}\, d^3r$$

$$= -\frac{1}{i\hbar}\left[ -\frac{\hbar^2}{2m}\int (\nabla^2 \Psi^*)\, \hat{p}\, \Psi\, d^3r + \int (V\Psi)^* \hat{p}\, \Psi\, d^3r \right]$$

$$+ \frac{1}{i\hbar}\left[ -\frac{\hbar^2}{2m}\int \Psi^* \hat{p}\, (\nabla^2 \Psi)\, d^3r + \int \Psi^* \hat{p}\, V \Psi\, d^3r \right]$$

$$= -\frac{1}{i\hbar}\left[ \int (V\Psi^*)\, \hat{p}\, \Psi\, d^3r - \int \Psi^* \hat{p}\, V \Psi\, d^3r \right]$$

$$= -\langle \nabla V \rangle$$

よって示された.

・Schrödinger 方程式で

期待値をとると（平均すると）

↓

古典力学となる