Наверняка всем долбили, что все нерелятивистские формулы – частный случай релятивистских. Здесь подобное: наши любимые и привычные законы Ньютона являются частным случаем нестационарного ур-я Шрёдингера, а именно:

$$\frac{\partial}{\partial t} < x >= \frac{< p >}{m}$$

(аналог определения p=mv из классики)

$$\frac{\partial}{\partial t} < p >= -\frac{\partial U}{\partial x}\bigg|_{x=<x>}$$

(аналог второго закона Ньютона $\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial U}{\partial x}$)

Обратная операция – вывод квантмеха из классики – гораздо сложнее. А вот вывести классику из квантмеха гораздо проще. Что неудивительно, т.к. классика – частный случай квантмеха.

Доказываются формулы тупой подстановкой среднего значения координаты и импульса через интеграл, производная по времени берётся из нестационарного уравнения Шрёдингера, и далее алгебра.
Вот выкладки, которым, кстати, предшествует доказательство того, что если волновая функция меняется в каждой точке пространства по нестационарному уравнению Шрёдингеру, то её нормировка остаётся единичной (если бы это не было так, нестационарное уравнение Шрёдингера отправилось на помойку):

Вычислим производую (2.2) по времени и убедимся, что она обращается в нуль (здесь и дальше, для простоты записи, приведены формулы для одномерной системы)

$$\frac{\partial}{\partial t}\int \psi^*\psi dx = \int \psi^*\frac{\partial \psi}{\partial t}dx + \int \left(\frac{\partial \psi}{\partial t}\right)^* \psi dx \tag{2.5}$$

Производная волновой функции по времени определена уравнением Шредингера. Подставляем:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int \psi^*\psi dx = \frac{1}{i\hbar}\int \psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\psi + U(x)\psi\right)dx - \frac{1}{i\hbar}\int \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\psi + U(x)\psi\right)^* \psi dx. \tag{2.6}$$

Знак 'минус' перед вторым слагаемым появился при вычислении комплексного сопряжения от множителя $\frac{1}{i\hbar}$. Нетрудно видеть, что слагаемые, содержащие $U(x)$, сокращаются. Остается показать, что сокращаются также и члены, содержащие вторые производные:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int \psi^*\psi dx = \frac{1}{i\hbar}\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\int \psi^*\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}dx + \int \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2}\psi dx\right). \tag{2.7}$$

Для этого, достаточно выполнить в каждом из них интегрирование по частям, приняв во внимание, что, поскольку частица локализована в конечной области пространства, волновая функция и ее производные на бесконечности должны обращаться в нуль. Однократное интегрирование по частям дает

$$\int \psi^*\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}dx = -\int \frac{\partial \psi^*}{\partial x}d\psi = -\int \frac{\partial \psi^*}{\partial x}\frac{\partial \psi}{\partial x}dx$$

и точно такое же выражение для второго интеграла. Таким образом, норма сохраняется:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int \psi^*\psi dx = 0. \tag{2.8}$$

Выведем вначале формулу для изменения среднего значения координаты. Действуем аналогично проверке сохранения нормировки. Вместо формулы (2.6) получается

$$\frac{\partial}{\partial t} < x >= \frac{\partial}{\partial t} \int \psi^* x \psi dx =$$

$$= \frac{1}{i\hbar} \int \psi^* x \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + U(x)\psi \right) dx - \frac{1}{i\hbar} \int \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + U(x)\psi \right)^* x\psi dx. \tag{2.9}$$

Видно, что содержащие $U(x)$ слагаемые вновь сокращаются, а вместо (2.7) получается

$$\frac{\partial}{\partial t} < x >= \frac{1}{i\hbar} \frac{\hbar^2}{2m} \left(-\int \psi^* x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} dx + \int \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} x\psi dx \right). \tag{2.10}$$

Появление дополнительного множителя x меняет результат интегрирования по частям:

$$\int \psi^* x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} dx = -\int \frac{\partial \psi}{\partial x} d(x\psi^*) = -\int \frac{\partial \psi^*}{\partial x} x \frac{\partial \psi}{\partial x} dx - \int \frac{\partial \psi}{\partial x} x\psi^* dx$$

и

$$\int \psi x \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} dx = -\int \frac{\partial \psi^*}{\partial x} d(x\psi) = -\int \frac{\partial \psi}{\partial x} x \frac{\partial \psi^*}{\partial x} dx - \int \frac{\partial \psi^*}{\partial x} x\psi dx$$

При вычислении разности этих выражений, сокращаются только первые слагаемые. Вторые же слагаемые различаются знаком: $\int \frac{\partial \psi}{\partial x} x\psi^* dx = -\int \frac{\partial \psi^*}{\partial x} x\psi dx$ (это легко проверить интегрированием по частям). Таким образом, получаем

$$\frac{\partial}{\partial t} < x >= 2\frac{1}{i\hbar} \frac{\hbar^2}{2m} \int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} x dx, \tag{2.11}$$

то есть

$$\frac{\partial}{\partial t} < x >= \frac{< p >}{m}. \tag{2.12}$$

Теперь, аналогичным образом, получим формулу для производной среднего значения импульса. На этот раз, вместо формулы (2.6) имеем

$$\frac{\partial}{\partial t} < p >= -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \int \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi dx =$$

$$= \int \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + U(x)\psi \right) dx - \int \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + U(x)\psi \right)^* \frac{\partial}{\partial x} \psi dx. \tag{2.13}$$

В этом случае, в противоположность формуле (2.9), сокращаются слагаемые, содержащие массу: как нетрудно проверить однократным интегрированием по частям, каждое из этих слагаемых равно $\frac{\hbar^2}{2m} \int \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} dx$. Остаются только слагаемые, содержащие $U(x)$, которые мы запишем в следующем виде:

$$\frac{\partial}{\partial t} < p >= \int \psi^* \left(\frac{\partial}{\partial x} U(x) - U(x) \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi dx. \tag{2.14}$$

Для того, чтобы продвинуться дальше, необходимо конкретизировать вид потенциала $U(x)$. Как мы говорили, мы рассматриваем случай, когда неопределенность координаты мала по сравнению с характерным масштабом, на

котором меняется $U(x)$, так что можно ограничиться первыми членами ряда Тейлора: $U \approx U(< x >) + \frac{\partial U}{\partial x}|_{x=<x>}(x- < x >)$. Подставляя это выражение в формулу (2.14) и используя соотношение $\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) = \psi + x\frac{\partial \psi}{\partial x}$, получаем искомую формулу

$$\frac{\partial}{\partial t} < p >= -\frac{\partial U}{\partial x}\bigg|_{x=<x>}. \tag{2.15}$$

Полученные формулы (2.12) и (2.15) совпадают с уравнениями движения классической механики, что и означает выполнение принципа соответствия применительно к движению волнового пакета[6].

Скажу ещё про «волновой пакет». Рубцов, чей конспект я взял, всё пишет – волновой пакет, волновой пакет. На самом деле эти формулы верны всегда. Более того, как раз свободные частицы – волновые пакеты – квантмех описывает плохо, там у ВФ сбивается нормировка. Про это мы ещё поговорим.