Πανεπιστήμιο Αθηνών

Τμήμα Φυσικής

Κβαντομηχανική Ι *Α. Καρανίκας και Π. Σφήκας*

Σημειώσεις ΙΙ: Εισαγωγή στις Κβαντικές Αρχές

Η Κβαντική μηχανική στηρίζεται σε ορισμένες βασικές αρχές και έννοιες οι οποίες ερμηνεύουν και υποστηρίζονται από αναρίθμητα πειράματα τα οποία γίνονται για περισσότερο από έναν αιώνα. Αυτά που ακολουθούν αποτελούν το απόσταγμα θεωρητικών και πειραματικών αναζητήσεων πολλών ετών αλλά δεν παρακολουθούν την ιστορική διαδρομή που τα παρήγαγε. Πολλά (πιο σωστά: τα περισσότερα) από αυτά δεν μπορούν να "αποδειχθούν" (με την έννοια ότι δεν υπάρχει κάποια "βαθύτερη" θεωρία από την οποία να προκύπτουν) και έτσι πρέπει να τεθούν ως αξιώματα. Κάποια άλλα παράγονται μέσω κάποιων εύλογων υποθέσεων.

1. <u>Κυματοσυνάρτηση και πλάτος πιθανότητας</u>

Σε κάθε καλά προετοιμασμένο συμβάν (όπως, για παράδειγμα, στο πείραμα των δύο οπών: ένα σωμάτιο ξεκινάει από τη θέση 0 τη χρονική στιγμή 0 και ανιχνεύεται στη θέση x τη χρονική t) αντιστοιχεί μια μιγαδική συνάρτηση ψ (στο συγκεκριμένο παράδειγμα $\psi(x,t)$) η οποία περικλείει ***όλη*** τη γνώση που μπορούμε να έχουμε για το συμβάν.

Το απόλυτο τετράγωνο αυτής της συνάρτησης, η οποία ονομάζεται πλάτος πιθανότητας ή κυματοσυνάρτηση, μας δίνει την πιθανότητα πραγματοποίησης του εν λόγω συμβάντος.

Με άλλη διατύπωση: ***Η θέση στην οποία μπορεί να βρεθεί ένα σωμάτιο, τη χρονική στιγμή t, είναι μια (συνεχής) τυχαία μεταβλητή X.*** Η κατανομή των τιμών x της μεταβλητής αυτής καθορίζεται από την κυματοσυνάρτηση $\psi(x,t)$ και η πιθανότητα πραγματοποίησής τους δίδεται ως:

$$\left|\psi(x,t)\right|^2 dx = dP(x,t) = \Pr\left(x \le \mathrm{X} \le x+dx, t\right) \tag{2.1}$$

Η ποσότητα

$$\rho(x,t) = \left|\psi(x,t)\right|^2$$

ορίζει την «πυκνότητα πιθανότητας» να βρεθεί το σωμάτιο στη θέση x τη χρονική στιγμή t.

Δεδομένης της (2.1), η πιθανότητα το σωμάτιο να βρίσκεται στο εύρος (a,b) δίδεται ως

$$\Pr\left(a \le \mathrm{X} \le \beta, t\right) = \int_a^b \rho(x,t)\,dx$$

Για να ισχύει η ερμηνεία της $\psi(x,t)$ ως πλάτος της πυκνότητας πιθανότητας, θα πρέπει η πιθανότητα το σωμάτιο να βρεθεί κάπου στο χώρο, δηλαδή οπουδήποτε στο $(-\infty,+\infty)$, να είναι ανεξάρτητη του χρόνου και ίση με μονάδα (πιθανότητα 100%):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left|\psi\left(x,t\right)\right|^2 dx = 1 \tag{2.2}$$

Η (2.2) ονομάζεται σχέση κανονικοποίησης της $\psi\left(x,t\right)$. Η δε $\psi\left(x,t\right)$ που πληροί την (2.2) ονομάζεται κανονικοποιημένη.

1.1 Συμβολή κυματοσυναρτήσεων

Εάν ένα συμβάν μπορεί να πραγματοποιηθεί με περισσότερους από έναν τρόπους, μη διακρίσιμους μεταξύ τους, το συνολικό πλάτος πιθανότητας είναι το ***άθροισμα των επιμέρους πλατών πιθανότητας*** που αντιστοιχούν σε καθέναν από τους εναλλακτικούς τρόπους πραγματοποίησης του εν λόγω συμβάντος:

$$\psi_{\text{ολ.}} = \psi_1 + \psi_2 + \ldots \tag{2.3}$$

Η συνολική πυκνότητα πιθανότητας είναι επομένως:

$$\left|\psi_{ολ.}\right|^2 = \left|\psi_1 + \psi_2 + \ldots\right|^2 \tag{2.4}$$

Η τελευταία σχέση είναι από αυτές που χαρακτηρίζουν την κβαντική μηχανική και την διαφοροποιούν πλήρως από οποιαδήποτε κλασική θεωρία. Ο λόγος θα γίνει αμέσως αντιληπτός αν γράψουμε (για λόγους απλότητας, περιοριζόμαστε σε δύο μόνον όρους στο άθροισμα (2.3)):

$$\psi_1 = \left|\psi_1\right| e^{i\theta_1} \;,\; \psi_2 = \left|\psi_2\right| e^{i\theta_2}, \quad \left(\tan\theta = \mathrm{Im}\psi / \mathrm{Re}\psi\right) \tag{2.5}$$

Αντικαθιστώντας στην εξ. (2.4) θα πάρουμε:

$$\begin{aligned} \left|\psi_{ολ.}\right|^2 &= \left|\psi_1\right|^2 + \left|\psi_2\right|^2 + \left|\psi_1\right|\left|\psi_2\right|\left(e^{i(\theta_2-\theta_1)} + e^{-i(\theta_2-\theta_1)}\right) = \\ &= \left|\psi_1\right|^2 + \left|\psi_2\right|^2 + 2\left|\psi_1\right|\left|\psi_2\right|\cos\left(\theta_2 - \theta_1\right) \end{aligned} \tag{2.6}$$

Ο τελευταίος όρος στο παραπάνω άθροισμα είναι υπεύθυνος για την εικόνα "κροσσών συμβολής" η οποία παρατηρείται στο πείραμα των δύο οπών και είναι ακριβώς αυτός που αναδεικνύει την διαφορά της κβαντικής από την κλασική περιγραφή: Αν το πείραμα μπορούσε να περιγραφεί ως ένα κλασικό πείραμα τύχης, μόνο οι πρώτοι δύο όροι θα ήταν παρόντες στην εξ. (2.6).

Το ζεύγος των σχέσεων (2.3) και (2.4) ορίζει κάτι εξαιρετικά σημαντικό, τον τρόπο με τον οποίο συντίθεται ανεξάρτητα ενδεχόμενα στην κβαντική μηχανική: ***Αθροίζονται τα ανεξάρτητα πλάτη πιθανότητας και όχι οι ανεξάρτητες (πυκνότητες) πιθανότητας.***

Αν δεν περιοριστούμε σε δύο μόνο ενδεχόμενα όπως στην (2.6) αν, δηλαδή, φανταστούμε ένα πείραμα στο οποίο το ενδιάμεσο φράγμα έχει περισσότερες οπές, θα πρέπει στην επαλληλία (2.4) να λάβουμε υπόψη και άλλους όρους οι οποίοι να αντιστοιχούν στα νέα ενδεχόμενα. Μπορούμε, μάλιστα, να σκεφτούμε ότι υπάρχουν πολλά ενδιάμεσα φράγματα τα οποία έχουν πάρα πολλές οπές. Είναι προφανές ότι όσο περισσότερα είναι τα ενδιάμεσα φράγματα και όσες περισσότερες οι οπές, τόσο θα αυξάνουν οι όροι στην (2.4). Στο όριο όπου ο αριθμός των φραγμάτων τείνει στο άπειρο και το ίδιο συμβαίνει με τον αριθμό των οπών, το πλήθος των όρων της επαλληλίας γίνεται άπειρο. Αν σκεφθούμε ότι αυτό το σκηνικό είναι ισοδύναμο με το να μην υπάρχει κανένα εμπόδιο ανάμεσα στο αρχικό και το τελικό σημείο, είναι προφανές ότι για να βρεθεί το πλάτος πιθανότητας, ένα σωμάτιο να ξεκινήσει από ένα σημείο και να καταλήξει σε ένα άλλο, θα πρέπει να αθροισθούν τα πλάτη πιθανότητας που αντιστοιχούν σε όλες τις (μαθηματικές) τροχιές που ενώνουν τα δύο σημεία:

$$\psi_{\text{ολ.}} = \sum_{\text{τροχ.}} \psi_{\text{τροχ.}} \tag{2.7}$$

Όσο και αν είναι, για το επίπεδο της συζήτησης, ασαφής η τελευταία σχέση, είναι σαφές αυτό που δηλώνει: ***Στο πλαίσιο της κβαντικής μηχανικής η έννοια της μίας και συγκεκριμένης τροχιάς που ακολουθεί ένα κινούμενο σωμάτιο, δεν υφίσταται.***

1.2 Ενδεχόμενα και παρατήρηση

Εάν, μέσω κάποιας μέτρησης, προσδιορίσουμε ποιό από τα διαφορετικά ενδεχόμενα πραγματοποιείται (για παράδειγμα: στο πείραμα των δύο οπών μπορούμε να προσδιορίσουμε, με τη βοήθεια μιας πηγής φωτονίων, την οπή από την οποία περνάει το σωμάτιο) τότε η συνολική πιθανότητα είναι το άθροισμα των επιμέρους πιθανοτήτων:

$$|\psi_{ολ.}|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + \ldots \tag{2.8}$$

Αν δούμε τη σχέση αυτή στο πλαίσιο του πειράματος των δύο οπών, η ερμηνεία της είναι απλή: Το ποσοστό των σωματιδίων που καταμετρούνται σε μια συγκεκριμένη θέση του πετάσματος είναι το άθροισμα του ποσοστού των σωματιδίων που έφθασαν στη συγκεκριμένη θέση αφού πέρασαν από την πρώτη οπή του φράγματος, του ποσοστού των σωματιδίων τα οποία πέρασαν από τη δεύτερη οπή κλπ. Οι όροι συμβολής που υπάρχουν στη σχέση (2.6) έχουν εξαφανισθεί!

Τόσο η σχέση (2.6) όσο και η (2.8) έχουν πολλαπλώς ελεγχθεί σε απειρία πειραμάτων. Η διαφορά τους βρίσκεται στη μέτρηση η οποία, στη δεύτερη περίπτωση, προσδιόρισε ποιο από τα ανεξάρτητα τυχαία γεγονότα έχει πραγματοποιηθεί και έχει "σβήσει" τους όρους "συμβολής" οι οποίοι ήταν παρόντες πριν αυτή πραγματοποιηθεί.

Το γεγονός αυτό έχει πολλές και σημαντικές συνέπειες. Μία είναι άμεση: Αν θέλουμε να περιγράψουμε σωστά την κβαντική συμπεριφορά της ύλης, θα πρέπει να δεχθούμε ότι η προφανής, στο πλαίσιο της κλασικής φυσικής, δήλωση "το σωμάτιο πέρασε από την πρώτη (ή τη δεύτερη) οπή" δεν έχει θέση στην κβαντική μηχανική. Για να κάνουμε μια τέτοια δήλωση θα πρέπει να προηγηθεί μέτρηση (δηλ. προσδιορισμός με κάποιο τρόπο). Αμέσως μετά από αυτή γνωρίζουμε ακριβώς την κατάσταση κάθε σωματίου, (στη συγκεκριμένη περίπτωση, την οπή από την οποία πέρασε) και σε μια τέτοια περίπτωση η κβαντική "συμβολή" των διαφόρων δυνατοτήτων εξαφανίζεται.

Η μέτρηση είναι μια μη αντιστρέψιμη διαδικασία: Μετά από αυτήν ξεκινά μια νέα φυσική διαδικασία η οποία περιγράφεται από το πλάτος πιθανότητας ένα σωμάτιο το οποίο εκκινεί από νέα θέση (τη θέση της οπής από την οποία πέρασε) να καταγραφεί σε ένα συγκεκριμένο σημείο του πετάσματος.

Η υπόθεση της κυματοσυνάρτησης και της πρόσθεσης των επιμέρους πλατών θα πρέπει να θεωρηθούν ως θεμελιακά αξιώματα της κβαντικής μηχανικής. Για την υπόθεση της επίδρασης της παρατήρησης στην κατάσταση ενός συστήματος, καταβάλλεται μεγάλη προσπάθεια τα τελευταία χρόνια να γίνει κατανοητή μέσω της αλληλεπίδρασης των κβαντικών συστημάτων με το περιβάλλον τους. Επειδή το ζήτημα δεν έχει, ως τώρα τουλάχιστον, κοινά αποδεκτή λύση θα θεωρήσουμε και αυτή την υπόθεση ως αξίωμα.

1.3 Εξίσωση Schrödinger

Προκειμένου να μιλήσουμε για κβαντική μηχανική χρειαζόμαστε μια διαφορική εξίσωση από την οποία να προκύπτει η χρονική εξέλιξη της κυματοσυνάρτησης.

Η εξίσωση αυτή δεν μπορεί παρά να αφορά στο θεμέλιο λίθο της κβαντικής μηχανικής που είναι το πλάτος πιθανότητας: αυτή είναι η μιγαδική συνάρτηση μέσω της οποίας υπολογίζουμε σύνθετα ενδεχόμενα (όπως φαίνεται στη σχέση (2.6)) και όχι η πιθανότητα (όπως συμβαίνει στη στατιστική φυσική).

Η σχέση* (2.3) *υποδεικνύει ότι η εξίσωση αυτή πρέπει να είναι γραμμική και ομογενής έτσι ώστε ένας γραμμικός συνδυασμός λύσεων να είναι επίσης λύση της.

Η πρώτη από τις αρχές μας βεβαιώνει ότι η κυματοσυνάρτηση περιγράφει πλήρως την κατάσταση ενός συστήματος. Επομένως, θα πρέπει να υπάρχει η δυνατότητα, ξεκινώντας από αυτήν, να βρούμε την κατάσταση του συστήματος σε κάποια άλλη χρονική στιγμή. ***Αυτό σημαίνει ότι η χρονική παράγωγος, η οποία κατ' ανάγκη υπάρχει στην εξίσωση που ψάχνουμε, δεν μπορεί παρά να είναι πρώτης τάξης***: Αν δεν ήταν έτσι τότε, για τη λύση της εξίσωσης, θα χρειαζόμασταν παραπάνω από μια πληροφορίες (ας πούμε την τιμή της κυματοσυνάρτησης και της παραγώγου της σε κάποια αρχική χρονική στιγμή, εάν η παράγωγος ήταν δεύτερης τάξης). Με αυτή τη λογική μια εύλογη επιλογή για την εξίσωση που ψάχνουμε είναι η ακόλουθη:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=\hat{\mathrm{H}}\,\psi(x,t) \tag{2.9}$$

Το σύμβολο $\hat{\mathrm{H}}$ λέγεται ***τελεστής*** και ο συμβολισμός $\hat{\mathrm{H}}\psi(x,t)$ συνοψίζει τις αλλαγές που μπορούν να γίνουν στη μιγαδική συνάρτηση $\psi(x,t)$ μετατρέποντάς την σε κάποια άλλη μιγαδική συνάρτηση $\tilde{\psi}(x,t)$. Ένας τελεστής είναι γνωστός εάν είναι γνωστή η δράση του σε μια τυχαία συνάρτηση.

Για να είναι γραμμική η εξ. (2.9) θα πρέπει ο τελεστής $\hat{\mathrm{H}}$ να είναι γραμμικός:

$$\hat{\mathrm{H}}(\psi_1+\psi_2)=\hat{\mathrm{H}}\psi_1+\hat{\mathrm{H}}\psi_2 \tag{2.10}$$

Στο βαθμό που δεν ορίζουμε με περισσότερη λεπτομέρεια τη δράση του τελεστή $\hat{\mathrm{H}}$, η ύπαρξη της σταθεράς $i\hbar$ στην εξίσωση (2.9) είναι θέμα σύμβασης. Σε κάθε περίπτωση όμως, ο τελεστής $\hat{\mathrm{H}}$ παράγει τη χρονική εξέλιξη στο πλαίσιο της κβαντικής μηχανικής και, με την έννοια αυτή, παίζει ρόλο ανάλογο με την συνάρτηση η οποία είναι γνωστή ως ***Χαμιλτονιανή*** στην κλασική μηχανική. Για το λόγο αυτό θα κρατήσουμε την ίδια ονομασία και στην κβαντική μηχανική. Η Χαμιλτονιανή έχει (στην κλασική μηχανική) διαστάσεις ενέργειας. Η ύπαρξη, στην εξ. (2.9), της σταθεράς του Plank της οποίας οι διαστάσεις είναι $[\hbar]=[\text{Ενέργεια}][\text{Χρόνος}]$, εξασφαλίζει ότι και η κβαντική εκδοχή της Χαμιλτονιανής έχει διαστάσεις ενέργειας.

Θα μπορούσε να αναρωτηθεί κανείς για το ποιοι τελεστές επιτρέπονται στην εξίσωση (2.9). Ένας βασικός περιορισμός (πέραν της γραμμικότητας) προκύπτει από την απαίτησή μας η λύση της εξ. (2.9) να μπορεί να ερμηνευθεί ως πλάτος πιθανότητας και επομένως να ικανοποιεί την εξ. (2.2).

Αυτό σημαίνει ότι ***η συνολική πιθανότητα διατηρείται*** (είναι ανεξάρτητη του χρόνου):

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\psi\left(x,t\right)\right|^{2}dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi\right)\psi^{*}+\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi^{*}\right)\psi\right)dx=0 \qquad (2.11)$$

Από την εξ. (2.9) μπορούμε να δούμε ότι $\frac{\partial}{\partial t}\psi=\frac{1}{i\hbar}\hat{\mathrm{H}}\psi,\ \frac{\partial}{\partial t}\psi^{*}=-\frac{1}{i\hbar}\left(\hat{\mathrm{H}}\psi\right)^{*}$ και επομένως η (2.11) μας οδηγεί στο συμπέρασμα ότι

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left(\hat{\mathrm{H}}\psi\right)^{*}\psi dx=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}\left(\hat{\mathrm{H}}\psi\right)dx \qquad (2.12)$$

Το τελευταίο αποτέλεσμα θα πρέπει να ισχύει και για την περίπτωση που η κυματοσυνάρτηση είναι γραμμικός συνδυασμός άλλων κυματοσυναρτήσεων (όπως στην εξ. (2.3)). Αυτό μας οδηγεί στο συμπέρασμα ότι θα πρέπει να ισχύει ότι:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left(\hat{\mathrm{H}}\psi_{1}\right)^{*}\psi_{2}dx=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{1}^{*}\left(\hat{\mathrm{H}}\psi_{2}\right)dx \qquad (2.13)$$

Ένας τελεστής ο οποίος ικανοποιεί την τελευταία δέσμευση λέγεται ***αυτοσυζυγής ή ερμιτιανός***. Στα προβλήματα και τις ασκήσεις που ακολουθούν θα δούμε παραδείγματα τέτοιων τελεστών. Πριν κλείσουμε την παράγραφο αυτή θα πρέπει να πούμε ότι εάν τα συστήματα τη χρονική εξέλιξη των οποίων θέλουμε να περιγράψουμε είναι μη σχετικιστικά, η εξίσωση (2.9) ***είναι η γνωστή εξίσωση Schrödinger.***

1.4 Μέτρηση θέσης και αναλογία με Κλασσική Μηχανική

Για να προχωρήσουμε, θα πρέπει να σταθούμε περισσότερο σ' αυτό το οποίο ήδη από την αρχή έχουμε πει: Το να βρεθεί ένα σωμάτιο σε μια συγκεκριμένη θέση σε μια συγκεκριμένη στιγμή είναι ένα τυχαίο γεγονός και αυτό που μπορούμε να ξέρουμε είναι το πλάτος πιθανότητας που συνδέεται με το εν λόγω γεγονός. Πώς "γνωρίζουμε" όμως το πλάτος αυτό; Κάνοντας μετρήσεις! Μπορούμε, για παράδειγμα, έχοντας στη διάθεσή μας έναν μεγάλο αριθμό πανομοιότυπα προετοιμασμένων συστημάτων (παράδειγμα: στο πείραμα των δύο οπών, μπορούμε να επαναλάβουμε πολλές φορές το πείραμα κάτω από ακριβώς τις ίδιες συνθήκες προετοιμασίας) να βρούμε τη μέση τιμή της θέσης του σωματίου:

$$\left\langle \mathrm{X}\right\rangle_{t}=\int_{-\infty}^{+\infty}xp\left(x,t\right)dx=\int_{-\infty}^{+\infty}x\left|\psi\left(x,t\right)\right|^{2}dx \qquad (2.14)$$

Είναι σύνηθες, στο πλαίσιο της κβαντικής μηχανικής, να προτιμάται ο όρος ***"αναμενόμενη τιμή"*** για την μέση τιμή (2.14). Ο δείκτης στο σύμβολο της μέσης τιμής δηλώνει την εξάρτηση της αναμενόμενης τιμής από το χρόνο.

Είναι προφανές ότι η θέση δεν είναι το μόνο φυσικό μέγεθος το οποίο μπορούμε ή πρέπει να μετρήσουμε. Για να μπορέσουμε να ανοίξουμε τη συζήτηση προς την κατεύθυνση αυτή είναι χρήσιμο να ορίσουμε τον λεγόμενο ***τελεστή της θέσης:***

$$\hat{\mathrm{X}}f\left(x\right)=xf\left(x\right) \qquad (2.15)$$

Όπως έχουμε πει, έναν τελεστή τον ορίζουμε μέσω της δράσης του επάνω σε μια τυχαία (μιγαδική εν γένει) συνάρτηση. Στη σχέση (2.15) η συνάρτηση f είναι μια τυχαία συνάρτηση της θέσης και ο τελεστής της θέσης ορίζεται ως η εντολή: $\hat{X}f \to \tilde{f}$, $\tilde{f} = xf(x)$. Μετά απ' αυτόν τον ορισμό μπορούμε να γράψουμε την (2.14) με τη μορφή:

$$\langle X \rangle_t = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t)\hat{X}\psi(x,t)dx \tag{2.16}$$

Μπορούμε εύκολα να διαπιστώσουμε ότι ο τελεστής της θέσης πρέπει να είναι αυτοσυζυγής. Ο λόγος είναι ότι η μέση τιμή της θέσης πρέπει να είναι πραγματικός αριθμός: $\langle x \rangle^* = \langle x \rangle$. Επομένως

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*\hat{X}\psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\psi^*\hat{X}\psi\right)^* dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\hat{X}\psi\right)^* \psi dx \tag{2.17}$$

Συγκρίνοντας με την σχέση (2.12) βλέπουμε αμέσως ότι ***τελεστής της θέσης είναι ερμιτιανός τελεστής.***

Μαζί με τη θέση, η άλλη θεμελιακή έννοια στο πλαίσιο της κλασικής μηχανικής είναι η ορμή. Για να την ορίσει κανείς θα πρέπει πρώτα να έχει στη διάθεσή του την έννοια της ταχύτητας η οποία, με τη σειρά της, ορίζεται μέσω της τροχιάς $x(t)$ που ακολουθεί το σωμάτιο. Όπως όμως έχουμε ήδη πει η έννοια της τροχιάς, στις μικροσκοπικές κλίμακες όπου η κβαντική περιγραφή είναι απαραίτητη, δεν υφίσταται! Η έννοια της τροχιάς μπορεί να χρησιμοποιείται μόνο στις κλίμακες όπου η κλασική περιγραφή είναι επαρκής. Ακόμα και εάν ήθελε κάποιος να χρησιμοποιήσει τις τροχιές που συνδέονται με το πλάτος πιθανότητας, όπως φαίνεται στην εξ. (2.7), αυτές είναι μαθηματικές καμπύλες, στην τεράστια πλειοψηφία τους μη παραγωγίσιμες, και όχι διαδρομές οι οποίες ακολουθούνται από κάποιο οιονεί σωματίδιο.

1.5 Θεώρημα/Αξίωμα Μέσης Τιμής

Παρά την αδυναμία παρατήρησης της τροχιάς ενός σωματιδίου, η ορμή, όπως και άλλες φυσικές ποσότητες όπως η ενέργεια, για παράδειγμα, μπορούν να μετρηθούν και μετρώνται. Είναι λογικό να σκεφθούμε ότι και αυτές οι ποσότητες, όπως και η θέση, είναι τυχαίες μεταβλητές η κατανομή των οποίων καθορίζεται από την κυματοσυνάρτηση του συστήματος στο οποίο διεξάγεται η μέτρηση.

Οδηγούμαστε, έτσι, στο εξής αξίωμα:

Κάθε φυσικό (δηλαδή, μετρήσιμο) μέγεθος A ***αντιπροσωπεύεται από ένα τελεστή*** $\hat{A}$ ***τέτοιον ώστε η μέση τιμή επανειλημμένων μετρήσεων του εν λόγω μεγέθους να δίνεται από την έκφραση:***

$$\langle A \rangle_t = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t)\hat{A}\psi(x,t)dx \tag{2.18}$$

Είναι φανερό ότι η τελευταία έκφραση είναι η γενίκευση της αντίστοιχης σχέσης (2.16) που αφορά στη μέση τιμή της θέσης.

Όπως θέσαμε ως αρχή ή αξίωμα, ότι το φυσικό μέγεθος "θέση" είναι μια τυχαία μεταβλητή της οποίας η μέση τιμή δίνεται από την (2.16), έτσι θέτουμε και ως αξίωμα ότι το φυσικό μέγεθος A είναι μια τυχαία μεταβλητή, η επίτευξη της μιας ή της άλλης τιμής του τυχαίο γεγονός, και ότι η μέση τιμή των δυνατών αποτελεσμάτων σε μετρήσεις του μεγέθους αυτού, δίνεται από την (2.18) μέσω του τελεστή $\hat{\mathrm{A}}$. Η σχέση (2.18) ***δεν μπορεί να αποδειχθεί γι' αυτό και τίθεται ως αξίωμα.***

Τελικός κριτής, βέβαια, μπορεί να είναι μόνο το πείραμα και η δυνατότητα μας να περιγράψουμε και να προβλέψουμε. Όπως και στην περίπτωση της θέσης, η μέση τιμή (2.18), ως μετρούμενη ποσότητα, πρέπει να είναι πραγματικός αριθμός και επομένως ο ***τελεστής*** $\hat{\mathrm{A}}$ ***πρέπει να είναι αυτοσυζυγής, ή "ερμιτιανός"***:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{\mathrm{A}} \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\hat{\mathrm{A}} \psi\right)^* \psi dx \tag{2.19}$$

Στηριγμένοι στην σχέση* (2.18) *θα λέμε ότι ο ερμιτιανός τελεστής $\hat{\mathrm{A}}$ ***αντιπροσωπεύει το φυσικό μέγεθος*** A.

Αφήνοντας για αργότερα τις μαθηματικές λεπτομέρειες που αφορούν στους ερμιτιανούς τελεστές, πρέπει να σημειώσουμε, στο σημείο αυτό, ότι ο λόγος για τον οποίο εισάγονται με τέτοιον αφηρημένο τρόπο τα φυσικά μεγέθη ***στην κβαντική μηχανική είναι, σε τελική ανάλυση, το γεγονός ότι δεν έχει νόημα να αποδώσουμε μια συγκεκριμένη τιμή σε ένα φυσικό μέγεθος (π.χ. μια συγκεκριμένη τιμή στο μέγεθος "θέση") αν δεν κάνουμε μέτρηση***.

Αυτή η (επιβεβλημένη από τη φύση) διαπίστωση έρχεται σε πλήρη αντίθεση με αυτό που συμβαίνει όταν μπορούμε να εξετάσουμε ένα σύστημα κλασικά: Εδώ τα μεγέθη (η θέση, για παράδειγμα) έχουν μια συγκεκριμένη τιμή είτε αυτή μετρηθεί είτε όχι (η τροχιάς θεωρούμε ότι υπάρχει ακόμα και αν δεν την έχουμε προσδιορίσει).

1.6 <u>Ορμή και αναλογία με Κλασσική Μηχανική</u>

Μετά τα γενικά της προηγούμενης παραγράφου εξακολουθούμε να είμαστε μπροστά στο πρόβλημα: Πώς μπορούμε να ορίσουμε την ορμή στο πλαίσιο της κβαντικής μηχανικής αν δεν έχουμε στη διάθεσή μας την έννοια της τροχιάς;

Σύμφωνα με αυτά που είπαμε πρέπει να ορίσουμε έναν ερμιτιανό τελεστή $\hat{\mathrm{P}}$ τέτοιον ώστε:

$$\left\langle \mathrm{P} \right\rangle_t = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*\left(x,t\right) \hat{\mathrm{P}} \psi\left(x,t\right) dx \tag{2.20}$$

Οι μέσες τιμές είναι αριθμοί που επιτυγχάνονται σε κάποιο εργαστήριο, είναι, επομένως, ποσότητες οι οποίες θα πρέπει να συμπεριφέρονται κλασικά:

Αν μετρήσουμε τη μέση θέση ενός (μη σχετικιστικού) σωματιδίου ως συνάρτηση του χρόνου, $\left\langle x \right\rangle_t$, είναι λογικό να ορίσουμε τη αναμενόμενη τιμή της ορμής ως:

$$\left\langle \mathrm{P} \right\rangle_t = m \frac{d}{dt} \left\langle \mathrm{X} \right\rangle_t \tag{2.21}$$

Αν χρησιμοποιήσουμε τη σχέση (2.16) και την εξίσωση Schrödinger τελευταία σχέση μας οδηγεί στο συμπέρασμα ότι:

$$\left\langle \mathrm{P} \right\rangle_t = \frac{m}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\left(\hat{\mathrm{H}} \psi\right)^* \hat{\mathrm{X}} \psi + \psi^* \hat{\mathrm{X}} \left(\hat{\mathrm{H}} \psi\right) \right) dx \tag{2.22}$$

Επειδή ο τελεστής $\hat{\mathrm{H}}$ είναι αυτοσυζυγής μπορούμε να γράψουμε:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left(\hat{\mathrm{H}}\psi\right)^{*}\hat{\mathrm{X}}\psi dx=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}\hat{\mathrm{H}}\left(\hat{\mathrm{X}}\psi\right) \tag{2.23}$$

Η παρένθεση στο δεύτερο σκέλος της εξίσωσης είναι για να υπογραμμίσει ότι ο τελεστής δρα σε ό,τι βρίσκεται δεξιά του. Έτσι:

$$\langle \mathrm{P}\rangle_{t}=\frac{m}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\left(-\psi^{*}\hat{\mathrm{H}}\left(\hat{\mathrm{X}}\psi\right)+\psi^{*}\hat{\mathrm{X}}\left(\hat{\mathrm{H}}\psi\right)\right)dx=\frac{m}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}\left(-\hat{\mathrm{H}}\hat{\mathrm{X}}+\hat{\mathrm{X}}\hat{\mathrm{H}}\right)\psi dx \tag{2.24}$$

Ο συνδυασμός που εμφανίσθηκε στο τελευταίο βήμα είναι πολύ συχνός στην κβαντική μηχανική γι' αυτό και θα χρησιμοποιούμε την ακόλουθη συντομογραφία που ονομάζεται ***μεταθέτης*** των δύο τελεστών:

$$\left[\hat{\mathrm{X}},\hat{\mathrm{H}}\right]\equiv\hat{\mathrm{X}}\hat{\mathrm{H}}-\hat{\mathrm{H}}\hat{\mathrm{X}} \tag{2.25}$$

Είναι προφανής η σημασία που έχει ο μη μηδενισμός του μεταθέτη: Αν δεν ήταν έτσι, η μέση ορμή σε κάθε σύστημα θα ήταν μηδέν και η μέση θέση ενός σωματίου δεν θα άλλαζε σε καμία περίπτωση! Γενικά, όταν ο μεταθέτης δύο τελεστών είναι διάφορος του μηδενός, $\left[\hat{\mathrm{A}},\hat{\mathrm{B}}\right]\neq 0$, αλλάζοντας τη σειρά με την οποία επιβάλλουμε τις αλλαγές που επιφέρουν οι τελεστές σε μια τυχαία συνάρτηση, παράγουμε διαφορετικό αποτέλεσμα:

$$\hat{\mathrm{A}}\left(\hat{\mathrm{B}}f\right)\neq\hat{\mathrm{B}}\left(\hat{\mathrm{A}}f\right) \tag{2.26}$$

Αν συγκρίνουμε τις σχέσεις (2.20) και (2.24), και επειδή η συνάρτηση ψ είναι τυχαία, μπορούμε να βγάλουμε το συμπέρασμα ότι ο τελεστής της ορμής πρέπει να είναι τέτοιος ώστε:

$$\hat{\mathrm{P}}=\frac{m}{i\hbar}\left[\hat{\mathrm{X}},\hat{\mathrm{H}}\right] \tag{2.27}$$

Η τελευταία εξίσωση είναι εξαιρετικά σημαντική γατί είναι απολύτως γενική. Ισχύει, επομένως, και στην περίπτωση ενός ελευθέρου σωματίου, η χρονική εξέλιξη της κατάστασης του οποίου δεν μπορεί να εξαρτάται από τη θέση του. Στην περίπτωση αυτή η Χαμιλτονιανή $\hat{\mathrm{H}}_0$ που υπεισέρχεται στην εξίσωση Schrödinger, δεν μπορεί να εξαρτάται από τη θέση αλλά μόνο από την ορμή όπως και αν ορίζεται αυτή: $\hat{\mathrm{H}}_0=H_0\left(\hat{\mathrm{P}}\right)$. Επομένως θα πρέπει:

$$\hat{\mathrm{P}}=\frac{m}{i\hbar}\left[\hat{\mathrm{X}},H_0\left(\hat{\mathrm{P}}\right)\right] \tag{2.28}$$

Μια πρώτη και σημαντική παρατήρηση στο σημείο αυτό, είναι ότι οι τελεστές της θέσης και της ορμής δεν πρέπει να μετατίθενται: Αν ο μεταθέτης τους ήταν μηδέν το ίδιο θα συνέβαινε και για τον μεταθέτη στο δεύτερο σκέλος της (2.28) και αυτό θα οδηγούσε στο παράλογο συμπέρασμα ότι ο τελεστής της ορμής είναι ταυτοτικά μηδέν. Για να προχωρήσουμε μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι η εξίσωση (2.21) δεν αλλάζει αν κάνουμε την αλλαγή $\hat{\mathrm{X}}\rightarrow\hat{\mathrm{X}}+\upsilon t$, $\hat{\mathrm{P}}\rightarrow\hat{\mathrm{P}}+m\upsilon$ όπου υ κάποια σταθερά. Επομένως το ίδιο πρέπει να συμβαίνει και με την εξίσωση (2.28):

$$\hat{\mathrm{P}} + m\upsilon = \frac{m}{i\hbar}\left[\hat{\mathrm{X}} + \upsilon t, H_0\left(\hat{\mathrm{P}} + m\upsilon\right)\right] = \frac{m}{i\hbar}\left[\hat{\mathrm{X}}, H_0\left(\hat{\mathrm{P}} + m\upsilon\right)\right] \tag{2.29}$$

Για το τελευταίο βήμα χρησιμοποιήσαμε την ιδιότητα

$$\left[\hat{\mathrm{A}} + \text{σταθερά}, \hat{\mathrm{B}}\right] = \left[\hat{\mathrm{A}}, \hat{\mathrm{B}}\right]$$

Μπορεί κανείς εύκολα να δείξει ότι ο μόνος τρόπος να ικανοποιείται η (2.29) είναι να ισχύει ότι

$$H_0\left(\hat{\mathrm{P}}\right) = \hat{\mathrm{P}}^2 / 2m \tag{2.30}$$

και επίσης

$$\left[\hat{\mathrm{X}}, \hat{\mathrm{P}}\right] = i\hbar \tag{2.31}$$

Μπορεί κανείς εύκολα να ελέγξει ότι

$$\begin{aligned} &\frac{m}{i\hbar}\left[\hat{\mathrm{X}}, \left(\hat{\mathrm{P}} + m\upsilon\right)^2 / 2m\right] = \frac{m}{i\hbar}\left[\hat{\mathrm{X}}, \hat{\mathrm{P}}^2 / 2m + \upsilon\hat{\mathrm{P}} + \frac{m\upsilon^2}{2}\right] = \frac{m}{i\hbar}\left[\hat{\mathrm{X}}, \hat{\mathrm{P}}^2 / 2m + \upsilon\hat{\mathrm{P}}\right] = \\ &= \frac{m}{i\hbar}\left[\hat{\mathrm{X}}, \hat{\mathrm{P}}^2 / 2m + \upsilon\hat{\mathrm{P}}\right] = \frac{m}{i\hbar}\left[\hat{\mathrm{X}}, \hat{\mathrm{P}}^2 / 2m\right] + \frac{m\upsilon}{i\hbar}\left[\hat{\mathrm{X}}, \hat{\mathrm{P}}\right] = \hat{\mathrm{P}} + \frac{m\upsilon}{i\hbar}\left[\hat{\mathrm{X}}, \hat{\mathrm{P}}\right] \end{aligned} \tag{2.32}$$

και να πιστοποιήσει αμέσως την (2.31). Για να καταλήξουμε στην τελευταία χρησιμοποιήσαμε τις ακόλουθες ιδιότητες των μεταθετών:

$$\left[\hat{\mathrm{A}}, \hat{\mathrm{B}} + \hat{\Gamma}\right] = \left[\hat{\mathrm{A}}, \hat{\mathrm{B}}\right] + \left[\hat{\mathrm{A}}, \hat{\Gamma}\right], \quad \left[\left(\text{σταθερά}\right)\hat{\mathrm{A}}, \hat{\mathrm{B}}\right] = \left(\text{σταθερά}\right)\left[\hat{\mathrm{A}}, \hat{\mathrm{B}}\right]$$

Δεν είναι καθόλου δύσκολο να πεισθεί κάποιος ότι εκτός από τις επιλογές (2.30) και (2.31) δεν υπάρχει κανένας άλλος τρόπος να ικανοποιηθεί η εξίσωση (2.28).

Ο φυσικός λόγος είναι απλός και σημαντικός: Η αλλαγή που παρατηρήσαμε ότι αφήνει αναλλοίωτη την (κλασική) εξίσωση (2.21) δεν παρά οι μετασχηματισμοί του Γαλιλαίου.

Το συμπέρασμα (2.31) αποτελεί μια από τις πλέον εμβληματικές σχέσεις της κβαντικής μηχανικής και έναν από τους θεμέλιους λίθους της: ***Ο τελεστής της θέσης και αυτός της ορμής δεν μετατίθενται.*** Από τη σχέση (2.31) μπορούμε να βρούμε τη δράση του τελεστή της ορμής σε μια τυχαία συνάρτηση της θέσης.

Πράγματι εάν f είναι μια τυχαία συνάρτηση θα έχουμε:

$$\left[\hat{\mathrm{X}}, \hat{\mathrm{P}}\right] f(x) = i\hbar f(x) \rightarrow \hat{\mathrm{X}}\left(\hat{\mathrm{P}} f(x)\right) - \hat{\mathrm{P}}\left(\hat{\mathrm{X}} f(x)\right) = i\hbar f(x) \tag{2.33}$$

Τη δράση του τελεστή της θέσης επάνω σε οποιαδήποτε συνάρτηση της θέσης την έχουμε ορίσει στην (2.15). Επομένως:

$$x\left(\hat{\mathrm{P}} f(x)\right) - \hat{\mathrm{P}}\left(x f(x)\right) = i\hbar f(x) \tag{2.34}$$

Η προφανής λύση της τελευταίας εξίσωσης είναι

$$\hat{\mathrm{P}} f(x) = -i\hbar \frac{d}{dx} f(x) \tag{2.35}$$

Μια μικρή διερεύνηση της εξίσωσης (2.34) μας πείθει ότι η δράση του τελεστή της ορμής πρέπει οπωσδήποτε να περιέχει παράγωγο πρώτης τάξης και ότι είναι αδύνατον να υπάρχουν παράγωγοι ανώτερης τάξης. Εν τούτοις ούτε η εξίσωση αυτή ούτε η σχέση μετάθεσης (2.31) απαγορεύουν την δυνατότητα $\hat{\mathrm{P}} f(x) = \left(-i\hbar \frac{d}{dx} + A(x)\right) f(x)$ όπου $A(x)$ κάποια πραγματική (λόγω της απαίτησης ο τελεστής να είναι ερμιτιανός) συνάρτηση της θέσης. Όταν αναφερόμαστε στην ορμή ενός ελεύθερου σωματίου για το οποίο όλα τα σημεία του χώρου είναι ισοδύναμα, μπορούμε να αποκλείσουμε οποιαδήποτε άλλη δυνατότητα πέραν της $A = 0$. Όπως θα διαπιστώσουμε αργότερα η ορμή ενός φορτισμένου σωματιδίου το οποίο κινείται μέσα σε ηλεκτρομαγνητικό πεδίο μπορεί να έχει μια τέτοια σύνθετη μορφή. Σε αυτά που ακολουθούν θα συνδέουμε τον τελεστή $\hat{\mathrm{P}}$ με την ορμή του ελευθέρου σωματίου. Αξίζει, όμως, να σημειώσουμε ότι ακόμα και εάν το σωμάτιο δεν είναι ελεύθερο η σχέση μετάθεσης (2.31) δεν αλλάζει.

1.7 Ενέργεια και Χαμιλτονιανή

Εάν κανείς προσέξει την έκφραση (2.30) για τη Χαμιλτονιανή ελευθέρου σωματιδίου θα διαπιστώσει ότι θα μπορούσε να την είχε κατασκευάσει χρησιμοποιώντας την κλασική Χαμιλτονιανή $H_0 = p^2/2m$ του ελευθέρου σωματίου (που είναι η κινητική του ενέργεια) και αναβαθμίζοντας την κλασική ορμή στον τελεστή της ορμής. Το γεγονός αυτό δεν είναι απλή "σύμπτωση". Η μορφή $H_0 \sim p^2$ υπαγορεύεται, όπως είπαμε, από την απαίτηση της αναλλοιώτητας των εξισώσεων κίνησης σε μετασχηματισμούς του Γαλιλαίου. Αν σκεφθεί κάποιος ότι η κβαντική περιγραφή θα πρέπει, σε κάποιο όριο, να αναπαράγει τα κλασικά αποτελέσματα είναι εμφανές ότι θα πρέπει να σέβεται, και αυτή, βασικές συμμετρίες του χώρου σεβαστές και από την κλασική μηχανική. Έτσι η δομή $\hat{\mathrm{H}}_0 \sim \hat{\mathrm{P}}^2$ είναι, στην πραγματικότητα, μονόδρομος.

Αναπτύσσοντας τη λογική αυτή μπορούμε να σκεφθούμε ότι η Χαμιλτονιανή που καθορίζει τη δυναμική ενός σωματιδίου το οποίο δεν είναι ελεύθερο, μπορεί να έχει τη δομή:

$$\hat{\mathrm{H}} = \frac{\hat{\mathrm{P}}^2}{2m} + V(\hat{\mathrm{X}}) \tag{2.36}$$

Προκειμένου να είναι ερμιτιανός ο τελεστής της Χαμιλτονιανής είναι απαραίτητο η συνάρτηση V να είναι πραγματική.

Όπως μπορεί εύκολα να διαπιστωθεί (βλ. άσκηση) αν ακολουθήσουμε τη διαδικασία που μας οδήγησε στην (2.24) ισχύει η ακόλουθη σχέση για τον ρυθμό μεταβολής της μέσης ορμής ενός σωματίου:

$$\frac{d}{dt}\langle \mathrm{P} \rangle_t = \left\langle -\frac{dV}{dx} \right\rangle_t \tag{2.37}$$

Το γεγονός αυτό, δικαιολογεί τον όρο "δυναμικό" για τον δεύτερο όρο στην έκφραση (2.36). ***Μπορούμε, επομένως, να πούμε ότι ο ερμιτιανός τελεστής*** $\hat{\mathrm{H}}$ ***αντιπροσωπεύει το φυσικό μέγεθος "ολική ενέργεια".***

Θα κλείσουμε τη συζήτηση για την ορμή στο πλαίσιο της κβαντικής μηχανικής με την ακόλουθη παρατήρηση. Η κυματοσυνάρτηση είναι μια μιγαδική συνάρτηση και επομένως μπορούμε να τη γράψουμε με τη μορφή:

$$\psi(x,t) = |\psi(x,t)| e^{i\theta(x,t)} \tag{2.38}$$

Επομένως:

$$\left\langle \hat{\mathrm{P}} \right\rangle_t = \hbar \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 \frac{\partial \theta(x,t)}{\partial x} dx \tag{2.39}$$

Από τη σχέση αυτή βλέπουμε ότι η μη μηδενική αναμενόμενη τιμή της ορμής οφείλεται αποκλειστικά στο γεγονός ότι η κυματοσυνάρτηση είναι μιγαδική συνάρτηση και μάλιστα με φάση η οποία αλλάζει από σημείο σε σημείο του χώρου. Αυτή ακριβώς η μεταβολή είναι που παράγει την εικόνα της "κίνησης" στο κβαντικό επίπεδο.

2. <u>Ρεύμα πιθανότητας</u>

Χρησιμοποιώντας τις (2.35) και (2.36), ο τελεστής της Χαμιλτονιανής γράφεται ως

$$\hat{\mathrm{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \tag{2.40}$$

και επομένως, η εξίσωση Schrödinger, δηλ. η (2.9), για ένα σωμάτιο μάζας m σε δυναμικό $V(x)$ γράφεται ως

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \tag{2.41}$$

Αν τώρα, η πυκνότητα πιθανότητας δίδεται ως $\rho = |\psi(x)|^2$, θα πρέπει να ισχύει κάποια σχέση συνέχειας που να εκφράζει τη διατήρηση της πιθανότητας. Συγκεκριμένα, στην (2.11) απαιτήσαμε η συνολική πιθανότητα εύρεσης του σωματιδίου κάπου στο $(-\infty, +\infty)$ να διατηρείται - και έτσι φτάσαμε στην απαίτηση της ερμιτιανότητας της Χαμιλτονιανής. Τι γίνεται όμως αν θεωρήσουμε την πιθανότητα εύρεσης του σωματιδίου σε ένα πεπερασμένο εύρος του χώρου, έστω στο $[a,b]$; Προφανώς, αν υπάρχει κίνηση, μπορεί αυτή η πιθανότητα να μην είναι σταθερή στο χρόνο. Σε αυτή την περίπτωση, αν στο διάστημα $[a,b]$ δεν υπάρχουν πηγές νέων σωματιδίων ή καταστροφείς σωματιδίων, η όποια αλλαγή στη συνολική πιθανότητα εύρεσης του σωματιδίου στο $[a,b]$ θα πρέπει να ισούται με το όποιο "ρεύμα" πιθανότητας υπάρχει προς/από το $[a,b]$.

Γνωρίζουμε ότι αυτό εκφράζεται ως "εξίσωση συνέχειας". Ως παράδειγμα, στον ηλεκτρομαγνητισμό, η πυκνότητα φορτίου $\rho(\vec{r})$ και η πυκνότητα ρεύματος, $\vec{J}(\vec{r})$, πληρούν την εξίσωση

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0 \tag{2.42}$$

Γράφοντας την (2.42) σε μια διάσταση, θα πρέπει να υπάρχει κάποια ποσότητα, $j(x)$, για την οποία θα ισχύει

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\frac{\partial j}{\partial x}=0 \tag{2.43}$$

όπου τώρα ρ είναι η πυκνότητα πιθανότητας και j το ρεύμα. Το $j(x)$ βρίσκεται από τον υπολογισμό της (2.43):

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho=\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2=\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi\psi^*\right)=\frac{\partial\psi}{\partial t}\psi^*+\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t} \tag{2.44}$$

Χρησιμοποιώντας την (2.41), και αντικαθιστώντας τις χρονικές παραγώγους στην (2.44), παίρνουμε:

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho}{\partial t}&=\left(\frac{1}{i\hbar}\right)\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V(x)\psi\right\}\psi^*+\psi\left(-\frac{1}{i\hbar}\right)\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}+V^*(x)\psi^*\right\}\\&=-\frac{\hbar}{2mi}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\psi^*-\psi\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\right)+\frac{1}{i\hbar}\left(V(x)-V^*(x)\right)\psi\psi^*\end{aligned}$$

Αν το δυναμικό είναι πραγματικό, δηλ. $V(x)=V^*(x)$, έχουμε

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}-\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\psi\right)=-\frac{\hbar}{2mi}\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}-\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi\right) \tag{2.45}$$

Συγκρίνοντας με την (2.43), συμπεραίνουμε ότι

$$j(x)=\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}-\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi\right) \tag{2.46}$$

Η ποσότητα $j(x)$ είναι το ρεύμα.

<u>Παράδειγμα:</u> έστω $\psi(x,t)=Ae^{i(kx-\omega t)}$. Το ρεύμα δίδεται με απλή αντικατάσταση στην (2.46):

$$\begin{aligned}j(x)&=\frac{\hbar}{2mi}\left\{A^*e^{-i(kx-\omega t)}-ikAe^{i(kx-\omega t)}-A^*(-ik)e^{-i(kx-\omega t)}\cdot Ae^{i(kx-\omega t)}\right\}\\&=\frac{\hbar}{2mi}\cdot 2ik|A|^2=\frac{\hbar k}{m}|A|^2\end{aligned}$$

και δεδομένου ότι $\rho=\psi\psi^*=|A|^2$, ενώ $\rho=\hbar k$, βρίσκουμε

$$j=\rho\cdot\frac{p}{m}=\rho\cdot u$$

δηλ. ανακτούμε την κλασσική μορφή του ρεύματος ενός συνόλου οντοτήτων με πυκνότητα ρ και ταχύτητα u.

3. <u>Περίληψη</u>

Η ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης είναι ότι μου δίνει την πιθανότητα να βρεθεί το σωμάτιο στο εύρος (x_0,x_0+dx) ως:

$$\left|\psi(x_0)\right|^2dx=dp\left(x_0\le x\le x_0+dx\right) \tag{2.47}$$

Επομένως, η ποσότητα

$$\rho\left(x_0\right)=\left.\frac{dp}{dx}\right|_{x=x_0}=\left|\psi\left(x_0\right)\right|^2 \tag{2.48}$$

είναι η «πυκνότητα πιθανότητας» το σωμάτιο να βρεθεί στη "γειτονιά" του σημείου x_0.

Δεδομένης της (2.47), η πιθανότητα το σωμάτιο να βρίσκεται στο εύρος $\left(a,b\right)$ δίδεται ως

$$P_{o\lambda}\left(a\le x\le b\right)=\int_a^b \rho\left(x\right)dx$$

Για να ισχύει η ερμηνεία της $\psi\left(x\right)$ ως πλάτος της πυκνότητας πιθανότητας, θα πρέπει η πιθανότητα το σωμάτιο να βρεθεί κάπου στο χώρο, δηλαδή οπουδήποτε στο $\left(-\infty,+\infty\right)$, να είναι 100% :

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\psi\left(x\right)\right|^2 dx=1 \tag{2.49}$$

Η (2.49) ονομάζεται σχέση κανονικοποίησης της $\psi\left(x\right)$. Η δε $\psi\left(x\right)$ που πληροί την (2.49) ονομάζεται κανονικοποιημένη.

Ένα καίριο ερώτημα είναι γιατί παίρνουμε την $\rho\left(x\right)$ να δίδεται από την $\left|\psi\left(x\right)\right|^2$ και όχι από κάποια άλλη δύναμη της $\left|\psi\left(x\right)\right|$, έστω την $\left|\psi\left(x\right)\right|^n$. Ο λόγος είναι ότι η $\rho\left(x\right)$ πρέπει να πληροί την εξίσωση διατήρησης του «ρεύματος» ή εξίσωση συνέχειας, δηλ. να υπάρχει ποσότητα $j\left(x\right)$ τέτοια ώστε

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\frac{\partial j}{\partial x}=0 \tag{2.50}$$

και έχουμε δείξει ότι για την $\rho\left(x\right)$ οριζόμενη ως η (2.48), η $j\left(x\right)$ δίδεται από την (2.46).

Τέλος, είναι εύκολο να δούμε ότι δεν μπορούμε να βρούμε $j\left(x\right)$ που να πληροί την (2.50) για $\rho=\left|\psi\right|^n$ με $n\neq 2$.