Συμπληρωμα θεωριας Κεφαλαιου 4

3. Ο νόμος της χρονικής εξέλιξης των μέσων τιμών και το κλασικό όριο

Ο νόμος της χρονικής εξέλιξης των μέσων τιμών που δείξατε προηγουμένως μπορεί να χρησιμοποιηθεί και για την απόδειξη ενός θεωρήματος που αναδεικνύει τη σχέση των κλασικών και των κβαντικών εξισώσεων κίνησης με έναν ιδιαίτερα διαυγή τρόπο. Η σχέση αυτή είναι γνωστή ως *θεώρημα του Ehrenfest* και διατυπώνεται ως εξής:

Θεώρημα του Ehrenfest: *Η χρονική εξέλιξη των μέσων τιμών στην κβαντομηχανική υπακούει στις κλασικές εξισώσεις κίνησης.*

α) Αποδείξτε το παραπάνω θεώρημα στην ειδική περίπτωση μιας μονοδιάστατης κίνησης υπό την επίδραση μιας δύναμης $F = F(x)$. Δείξτε συγκεκριμένα ότι θα ισχύει ο *κβαντικός νόμος του Νεύτωνα*

$$m \frac{d^2\langle x\rangle}{dt^2} = \big\langle F(x)\big\rangle. \tag{1}$$

β) Εφαρμόστε την εξίσωση (1) για τις ειδικές περιπτώσεις: i) $F = F_0 =$ σταθερή δύναμη, ii) $F = -kx =$ δύναμη αρμονικού ταλαντωτή, και δείξτε ότι η μέση θέση του σωματιδίου στην κβαντομηχανική μεταβάλλεται με τον χρόνο ακριβώς όπως και στο αντίστοιχο κλασικό πρόβλημα. Είναι δηλαδή $\langle x\rangle_t = x_{\mathrm{cl}}(t)$.

γ) Ισχύει το ίδιο για έναν τυχόντα νόμο δύναμης $F = F(x)$; Αν όχι, διατυπώστε τις συνθήκες υπό τις οποίες θα αναπαράγεται η κλασική μηχανική ως οριακή περίπτωση της κβαντομηχανικής.

Λύση

α) Εφαρμόζοντας τον νόμο της χρονικής εξέλιξης των μέσων τιμών

$$i\hbar \frac{d\langle A\rangle}{dt} = \big\langle [A,H]\big\rangle \tag{2}$$

για $A = x$ ή p και $H = (p^2/2m) + V(x)$, παίρνουμε

$$i\hbar \frac{d\langle x\rangle}{dt} = \big\langle [x,H]\big\rangle = \left\langle i\hbar \frac{\partial H}{\partial p}\right\rangle = i\hbar\left\langle \frac{p}{m}\right\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \frac{d\langle x\rangle}{dt} = \left\langle \frac{p}{m}\right\rangle = \langle v\rangle, \tag{3}$$

όπου $v = p/m$ ο κβαντικός τελεστής της ταχύτητας. Η (3) είναι, βεβαίως, η αναμενόμενη από την κλασική μηχανική σχέση μέσης θέσης και μέσης ταχύτητας στην κβαντομηχανική. Για την ορμή p η (2) θα δώσει

$$i\hbar \frac{d\langle p\rangle}{dt} = \big\langle [p, H]\big\rangle = \left\langle -i\hbar \frac{\partial H}{\partial x}\right\rangle = \left\langle -i\hbar \frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle = \big\langle i\hbar F(x)\big\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \frac{d\langle p\rangle}{dt} = \big\langle F(x)\big\rangle, \tag{4}$$

όπου η (4) είναι η προφανής κβαντική εκδοχή του νόμου του Νεύτωνα για τις μέσες τιμές. Αν τώρα συνδυάσουμε την (3), που γράφεται επίσης ως

$$\langle p\rangle = m \frac{\langle dx\rangle}{dt}, \tag{5}$$

με την (4), φτάνουμε αμέσως στην

$$m \frac{d^2\langle x\rangle}{dt^2} = \big\langle F(x)\big\rangle, \tag{6}$$

που είναι επίσης η κβαντική εκδοχή του νόμου του Νεύτωνα στην πιο παραδοσιακή του μορφή.

β) i) Για $F(x) = F_0 =$ σταθερά, η (6) γράφεται ως

$$m \frac{d^2\langle x\rangle}{dt^2} = \langle F_0\rangle = F_0 \tag{7}$$

και είναι ταυτόσημη με την κλασική εξίσωση κίνησης

$$m \frac{d^2 x_{\mathrm{cl}}(t)}{dt^2} = F_0, \tag{8}$$

με την προφανή αντιστοίχιση

$$\langle x\rangle_t \;\leftrightarrow\; x_{\mathrm{cl}}(t),$$

όπου τώρα βάλαμε και τον δείκτη t στην κβαντική μέση θέση, ώστε να είναι απόλυτα σαφές ότι μιλάμε για την χρονικά εξελισσόμενη τιμή της. Η (7) θα λύνεται λοιπόν αμέσως –όπως και η (8)– και η λύση της θα γράφεται ως

$$\langle x\rangle_t = \frac{1}{2} at^2 + \langle v\rangle_0 t + \langle x\rangle_0, \tag{9}$$

ενώ για τη μέση ταχύτητα $\langle v\rangle_t$ θα έχουμε

$$\langle v\rangle_t = at + \langle v\rangle_0, \tag{10}$$

όπου $a = F_0/m$ η κλασική τιμή της επιτάχυνσης του σωματιδίου. Η (9) μας λέει, βεβαίως, ότι υπό την επίδραση μιας σταθερής δύναμης η κβαντομηχανική μέση θέση του σωματιδίου εκτελεί μια *ομαλά επιταχυνόμενη κίνηση*, όπως και στο αντίστοιχο κλασικό πρόβλημα. Όσο περίπλοκη και αν είναι η χρονική μεταβολή της κυματοσυνάρτησης του σωματιδίου –όποιες και αν είναι οι μεταβολές της μορφής της– η μέση θέση που υπολογίζεται βάσει αυτής θα ακολουθεί πιστά τον κλασικό νόμο (9). Ο Νεύτωνας είναι παρών πίσω από τον Schrödinger!

ii) Εντελώς ανάλογα για $F(x) = -kx$, η (6) θα δώσει

$$m\,\frac{d^2\langle x\rangle}{dt^2} = -k\langle x\rangle$$

$$\Rightarrow\quad \frac{d^2\langle x\rangle}{dt^2} + \omega^2\langle x\rangle = 0,$$

που είναι ξανά η κλασική εξίσωση του αρμονικού ταλαντωτή, άρα και με ταυτόσημη λύση. Θα είναι δηλαδή και εδώ

$$\langle x\rangle_t = \langle x\rangle_0 \cos\omega t + \frac{\langle v\rangle_0}{\omega}\sin\omega t, \tag{11}$$

όπου $\langle x\rangle_0$ και $\langle v\rangle_0 = (d\langle x\rangle/dt)_{t=0}$ ή αρχική μέση θέση και η αρχική μέση ταχύτητα του σωματιδίου. Σύμφωνα με την (11), *οποιαδήποτε και αν είναι η αρχική κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου που κινείται υπό την επίδραση μιας δύναμης ανάλογης προς την απομάκρυνση από ένα ελκτικό κέντρο, η μέση θέση του θα εκτελεί πάντα μια αρμονική ταλάντωση ταυτόσημη με εκείνη του αντίστοιχου κλασικού προβλήματος.*

γ) Όμως, με εξαίρεση την περίπτωση που ο νόμος δύναμης έχει τη γραμμική μορφή $F = \alpha x + \beta$ –οπότε θα είναι $\langle F(x)\rangle = \alpha\langle x\rangle + \beta = F(\langle x\rangle)$– για κάθε άλλη συναρτησιακή μορφή θα είναι εν γένει

$$\big\langle F(x)\big\rangle \neq F\big(\langle x\rangle\big),$$

οπότε η εξίσωση (6) *δεν* θα γράφεται πλέον ως

$$m\,\frac{d^2\langle x\rangle}{dt^2} = F\big(\langle x\rangle\big)$$

και έτσι η λύση της *δεν* θα είναι πλέον ταυτόσημη με εκείνη του αντίστοιχου κλασικού προβλήματος

$$m\,\frac{d^2 x_{\rm cl}}{dt^2} = F(x_{\rm cl}).$$

Παραδείγματος χάριν, για μια δύναμη επαναφοράς της μορφής $F = -gx^3$ –που προέρχεται από το δυναμικό $V = gx^4/4$ $(g > 0)$– η εξίσωση (6) γράφεται ως

$$m\,\frac{d^2\langle x\rangle}{dt^2} = -g\langle x^3\rangle$$

και σίγουρα δεν συμπίπτει με την αντίστοιχη κλασική διότι είναι $\langle x^3\rangle \neq \langle x\rangle^3$, όπως γίνεται φανερό και από την απλούστερη περίπτωση της συνάρτησης x^2 για την οποία γνωρίζουμε ότι είναι

$$\langle x^2\rangle \neq \langle x\rangle^2,$$

εκτός εάν η αβεβαιότητα θέσης $(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ μηδενίζεται. Το οποίο συμβαίνει μόνο όταν η κυματοσυνάρτηση του σωματιδίου έχει την «πολύ συγκεντρωμένη μορφή» μιας συνάρτησης δέλτα.

Στην πραγματικότητα, η αβεβαιότητα θέσης του σωματιδίου μπορεί να θεωρηθεί αμελητέα και στην γενικότερη περίπτωση που η κίνησή του λαμβάνει χώρα πάνω σε μια μακροσκοπική τροχιά και η σχετική κυματοσυνάρτηση θα είναι ένα πολύ συγκεντρωμένο κυματοπακέτο γύρω από την εκάστοτε μέση θέση του σωματιδίου. Σε αυτή την περίπτωση μπορούμε πράγματι να θέσουμε

$$\big\langle F(x) \big\rangle \simeq F\big(\langle x \rangle\big),$$

οπότε η κβαντική εξίσωση (6) θα συμπίπτει όντως με την εξίσωση του Νεύτωνα και η μέση θέση του σωματιδίου –δηλαδή *η θέση του*, αφού η αβεβαιότητα θεωρείται αμελητέα– θα ακολουθεί πλήρως την κλασική κίνηση. Στο μακροσκοπικό όριο ο Schrödinger μεταμορφώνεται σε... Νεύτωνα! Η κλασική μηχανική προκύπτει ως οριακή περίπτωση της κβαντομηχανικής.