Συμπληρωμα θεωριας Κεφαλαιου 6

Τοπική διατήρηση της πιθανότητας: Το ρεύμα πιθανότητας

Στην εισαγωγή τούτου του κεφαλαίου επικαλεστήκαμε ένα υδροδυναμικό ανάλογο για να δικαιολογήσουμε τον ισχυρισμό μας ότι για ένα επίπεδο κύμα $\psi = Ae^{ikx}$ η ποσότητα $J = |\psi|^2 v = |A|^2 \hbar k/m$ μας δίνει τη *ροή* μιας δέσμης κβαντικών σωματιδίων που περιγράφονται από την κυματοσυνάρτηση ψ. Για την πλήρη κβαντομηχανική αιτιολόγηση αυτού του ισχυρισμού χρειάζεται να μελετήσουμε τη λεγόμενη *τοπική διατήρηση της πιθανότητας*. Να δούμε δηλαδή το πώς μεταφέρεται η πιθανότητα από μια περιοχή του χώρου σε μιαν άλλη, όταν η χρονική εξέλιξη της κυματοσυνάρτησης μειώνει την πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο μέσα σε έναν δεδομένο όγκο οπότε πρέπει να αυξηθεί ανάλογα η πιθανότητα να το βρούμε έξω από αυτόν. Η «εικόνα» θυμίζει πολύ τον τρόπο διατήρησης της μάζας ενός συμπιεστού ρευστού με πυκνότητα $\rho(\boldsymbol{r}, t)$, η οποία εκφράζεται σε μαθηματική μορφή από τη λεγόμενη *εξίσωση συνεχείας*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{J} = 0, \tag{1}$$

όπου $\boldsymbol{J} = \rho(\boldsymbol{r}, t)\, \boldsymbol{v}(\boldsymbol{r}, t)$ είναι το διάνυσμα *ροής* (ή *πυκνότητας ροής*) του ρευστού και $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r}, t)$ το πεδίο ταχυτήτων του.

α) Αποδείξτε ότι η (1) εκφράζει πράγματι τη διατήρηση της μάζας του ρευστού. Αποδείξτε συγκεκριμένα –βάσει της (1)– ότι η ολική μάζα $M(t) = \int_V \rho(\boldsymbol{r}, t)\, dV$ που περικλείεται μέσα σε έναν τυχόντα όγκο V ικανοποιεί τη σχέση

$$\frac{dM}{dt} = -\oint_S \boldsymbol{J} \cdot d\boldsymbol{s}, \tag{2}$$

το οποίο σημαίνει ότι μεταβάλλεται ανά μονάδα χρόνου ακριβώς κατά το ποσόν της μάζας του ρευστού και «διέρρευσε» προς το περιβάλλον μέσω της επιφάνειας που περικλείει τον εξεταζόμενο όγκο.

β) Αποδείξτε τώρα ότι μια ανάλογη με την (1) *εξίσωση συνεχείας* ισχύει και στην κβαντομηχανική όπου, βεβαίως, τον ρόλο της πυκνότητας μάζας ρ αναμένεται να τον παίζει η *πυκνότητα πιθανότητας*

$$P(\boldsymbol{r}, t) = \left|\psi(\boldsymbol{r}, t)\right|^2 = \psi^*(\boldsymbol{r}, t)\psi(\boldsymbol{r}, t). \tag{3}$$

Παραγωγίστε την (3) ως προς t και αφού χρησιμοποιήσετε την εξίσωση Schrödinger

$$i\hbar\,\frac{\partial\psi}{\partial t}=H\psi\;\Rightarrow\;-i\hbar\,\frac{\partial\psi^*}{\partial t}=H\psi^*$$

για να απαλείψετε τις χρονικές παραγώγους της ψ, δείξτε μετά ότι οι εκφράσεις που προκύπτουν μπορούν να γραφούν ως απόκλιση ενός κατάλληλου διανύσματος ροής $\boldsymbol{J}$, έτσι ώστε να ισχύει η

$$\frac{\partial P}{\partial t}+\nabla\boldsymbol{\cdot}\boldsymbol{J}=0. \tag{4}$$

Δείξτε συγκεκριμένα ότι το ζητούμενο $\boldsymbol{J}$ γράφεται ως

$$\boldsymbol{J}=\mathrm{Re}\big(\psi^*(\boldsymbol{v}\psi)\big), \tag{5}$$

όπου $\boldsymbol{v}=\boldsymbol{p}/m=-i(\hbar/m)\nabla$ είναι ο *τελεστής της ταχύτητας*, οπότε η (5) μπορεί εύλογα να ιδωθεί ως η σωστή κβαντομηχανική εκδοχή του υδροδυναμικού τύπου $\boldsymbol{J}=P\cdot\boldsymbol{v}=|\psi|^2\cdot\boldsymbol{v}=\psi^*\psi\boldsymbol{v}$, αφού η φύση του $\boldsymbol{v}$ ως *τελεστή* επιβάλλει την «τοποθέτησή» του ανάμεσα στο ψ^* και το ψ ενώ απαιτείται επίσης να πάρουμε και το πραγματικό μέρος της όλης έκφρασης ώστε το διάνυσμα ροής $\boldsymbol{J}$ να είναι σίγουρα πραγματικό.

γ) Δείξτε τώρα ότι για ένα τυχόν επίπεδο κύμα στις τρεις διαστάσεις $\psi=Ae^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ η εφαρμογή του κβαντομηχανικού τύπου (5) δίνει

$$\boldsymbol{J}=|A|^2\,\frac{\hbar\boldsymbol{k}}{m},$$

δηλαδή αυτό ακριβώς που θα παίρναμε και με την «αφελή» υδροδυναμική αναλογία που χρησιμοποιήσαμε στο κείμενο.

Λύση

α) Ολοκληρώνοντας τα δύο μέλη της (1) σε έναν τυχόντα όγκο V και χρησιμοποιώντας το θεώρημα του Gauss(*) παίρνουμε

$$\int\frac{\partial\rho}{\partial t}\,dV+\int\nabla\boldsymbol{\cdot}\boldsymbol{J}\,dV=0$$

$$\Rightarrow\quad\frac{\partial}{\partial t}\underbrace{\int\rho\,dV}_{M}+\oint_S\boldsymbol{J}\boldsymbol{\cdot}d\boldsymbol{s}=0$$

$$\Rightarrow\quad\frac{dM}{dt}=-\oint_S\boldsymbol{J}\boldsymbol{\cdot}d\boldsymbol{s}.$$

(*) Ότι δηλαδή, για ένα τυχόν διανυσματικό πεδίο $\boldsymbol{A}$ ισχύει η

$$\oint_S\boldsymbol{A}\boldsymbol{\cdot}d\boldsymbol{s}=\int_V\nabla\boldsymbol{\cdot}\boldsymbol{A}\,dV,$$

που λέει ότι: Το κλειστό επιφανειακό ολοκλήρωμα ενός διανυσματικού πεδίου ισούται με το ολοκλήρωμα όγκου της απόκλισής του πάνω στον περικλειόμενο όγκο.

β) Θα παραγωγίσουμε ως προς t την πυκνότητα πιθανότητας $P(\boldsymbol{r},t)=\psi^*(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)$ −που αναμένεται να παίζει το ρόλο της πυκνότητας μάζας ρ στην εξίσωση συνεχείας− και θα δούμε αν το αποτέλεσμα μπορεί να γραφεί ως απόκλιση κάποιου διανύσματος. Θα έχουμε κατ' αρχάς

$$\frac{\partial P}{\partial t}=\frac{\partial \psi^*}{\partial t}\,\psi+\psi^*\,\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

και με χρήση της εξισώσεως Schrödinger

$$i\hbar\,\frac{\partial\psi}{\partial t}=H\psi \quad\Rightarrow\quad -i\hbar\,\frac{\partial\psi^*}{\partial t}=H\psi^*$$

$$\begin{aligned}\Rightarrow\quad \frac{\partial P}{\partial t}&=-\frac{1}{i\hbar}\,(H\psi^*)\psi+\frac{1}{i\hbar}\,\psi^*(H\psi)=\frac{1}{i\hbar}\,\big(\psi^*(H\psi)-\psi(H\psi^*)\big)\\ &=\frac{1}{i\hbar}\left(\psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2+V\right)\psi-\psi\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2+V\right)\psi^*\right)\\ &=\frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\big(\psi^*\,\nabla^2\psi-\psi\,\nabla^2\,\psi^*\big).\end{aligned}\tag{6}$$

Αν τώρα χρησιμοποιήσουμε και τη γνωστή ταυτότητα

$$\phi(\nabla^2\psi)-\psi(\nabla^2\phi)=\nabla\big(\phi(\nabla\psi)-\psi(\nabla\phi)\big)$$

με $\phi=\psi^*$, η (6) θα γράφεται ως

$$\frac{\partial P}{\partial t}+\frac{-i\hbar}{2m}\,\nabla\big(\psi^*(\nabla\psi)-\psi(\nabla\psi^*)\big)=0$$

ή, ακόμα, ως

$$\frac{\partial P}{\partial t}+\nabla\,\frac{1}{2}\left(\psi^*\left(\frac{-i\hbar}{m}\,\nabla\psi\right)+\psi\left(\frac{-i\hbar}{m}\,\nabla\psi\right)^*\right)=0,$$

δηλαδή ως

$$\frac{\partial P}{\partial t}+\nabla\boldsymbol{\cdot}\boldsymbol{J}=0,\tag{7}$$

όπου $\boldsymbol{J}$ το διανυσματικό πεδίο

$$\boldsymbol{J}=\frac{1}{2}\big(\psi^*(\boldsymbol{v}\psi)+\psi(\boldsymbol{v}\psi)^*\big)=\mathrm{Re}\,\big(\psi^*(\boldsymbol{v}\psi)\big)$$

και $\boldsymbol{v}=\boldsymbol{p}/m=-i\hbar\nabla/m$ ο κβαντομηχανικός *τελεστής της ταχύτητας*.

Καταλήξαμε λοιπόν στο συμπέρασμα ότι η κβαντομηχανική πιθανότητα να βρούμε κάπου το σωματίδιο διατηρείται με τον τρόπο που περιμένουμε σε μια φυσική θεωρία. Αν η πιθανότητα να το βρούμε μέσα σε έναν δεδομένο όγκο τείνει να μειωθεί, αυτό γίνεται με «ισόποση» μεταφορά πιθανότητας στον περιβάλλοντα χώρο διά μέσου της συνοριακής επιφάνειας που περικλείει αυτόν τον όγκο. Και αυτές οι μεταφορές περιγράφονται από το διάνυσμα ροής $\boldsymbol{J}$ που βρήκαμε προηγουμένως. Οι μεταφορές γίνονται κατά την κατεύθυνση του $\boldsymbol{J}$ και με ένταση ανάλογη με το μέτρο του σε κάθε περιοχή του χώρου. Ας σημειώσουμε ακόμα ότι η έκφραση που βρήκαμε

$$\boldsymbol{J} = \mathrm{Re}\,(\psi^*(\boldsymbol{v}\psi) \tag{8}$$

μπορεί να ιδωθεί ως μια εύλογη τροποποίηση του κλασικού τύπου

$$\boldsymbol{J} = \rho\boldsymbol{v} \;\;\Rightarrow\;\; \boldsymbol{J} = P\boldsymbol{v} = |\psi|^2\,\boldsymbol{v} = \psi^*\psi\boldsymbol{v} = \psi^*(\boldsymbol{v}\psi) = \mathrm{Re}\big(\psi^*(\boldsymbol{v}\psi)\big)$$

με την αυτονόητη τοποθέτηση του $\boldsymbol{v}$ μεταξύ των ψ^* και ψ, ώστε να δρα στην κυματοσυνάρτηση ψ που βρίσκεται στα δεξιά του, και με την επιπλέον «πρόνοια» να πάρουμε το πραγματικό μέρος $-\boldsymbol{J} = \mathrm{Re}\,(\psi^*(\boldsymbol{v}\psi))-$ ώστε το αποτέλεσμα να είναι σίγουρα πραγματικό.

Σημειώστε, τέλος, ότι για $\psi =$ πραγματική συνάρτηση είναι $\boldsymbol{J} = 0$. Το οποίο σημαίνει ότι η «κίνηση της πιθανότητας» στον χώρο οφείλεται στο μιγαδικό της μέρος της ψ δηλαδή στη *φάση* της.

γ) Αν θέσουμε $\psi(\boldsymbol{r}) = R(\boldsymbol{r})e^{i\phi(\boldsymbol{r})}$ και κάνουμε χρήση της ταυτότητας

$$\nabla(f\phi) = (\nabla f)\phi + f(\nabla\phi)$$

σε συνδυασμό με την

$$\nabla F\big(\phi(\boldsymbol{r})\big) = F'(\phi)(\nabla\phi)$$

ο τύπος (8) θα δώσει

$$\begin{aligned}
\psi^*(\boldsymbol{v}\psi) &= Re^{-i\phi}\left(\frac{-i\hbar}{m}\,\nabla(Re^{i\phi})\right) = \frac{-i\hbar}{m}\,Re^{-i\phi}\big(\nabla(Re^{i\phi})\big)\\
&= \frac{-i\hbar}{m}\,Re^{-i\phi}\big((\nabla R)\,e^{i\phi} + i(\nabla\phi)\,Re^{i\phi}\big)\\
&= \frac{\hbar}{m}\,R^2(\nabla\phi) - \frac{i\hbar}{m}\,R(\nabla R)
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow\;\; \boldsymbol{J} = \mathrm{Re}\big(\psi^*(\boldsymbol{v}\psi)\big) = \frac{\hbar}{m}R^2(\nabla\phi) \tag{9}$$

οπότε, για την ειδική περίπτωση ενός επίπεδου κύματος $\psi = A\,e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \Rightarrow R = |A|$ $=$ σταθερά, $\phi(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}$, θα έχουμε $\nabla\phi = \boldsymbol{k}$ (δείξτε το) και επομένως

$$\boldsymbol{J} = \frac{\hbar}{m}\,|A|^2\,\boldsymbol{k} = |A|^2\,\frac{\hbar\boldsymbol{k}}{m} = |A|^2\,\frac{\boldsymbol{p}}{m} = |A|^2\,\boldsymbol{v},$$

που είναι το υδροδυναμικά αναμενόμενο αποτέλεσμα. Υδροδυναμικά εύλογος είναι και ο τύπος (9), αν παρατηρήσουμε ότι είναι $R^2 = |\psi|^2 = P(\boldsymbol{r})$ −που είναι το κβαντομηχανικό ανάλογο της πυκνότητας ρ ενός ρευστού− και θεωρήσουμε επίσης ως τοπική ταχύτητα $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r})$ την έκφραση

$$\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r}) = \frac{\hbar}{m}\,\nabla\phi(\boldsymbol{r})$$

η οποία μας λέει ότι το κβαντομηχανικό «ρευστό» μετακινείται στον χώρο προς τις κατευθύνσεις μέγιστης κλίσης της φάσης του.

Αν συνδυάσετε τα παραπάνω με παρατηρήσεις που έχουμε κάνει αλλού –π.χ., ότι οι μέσες τιμές ορμής και στροφορμής σε πραγματικές κυματοσυναρτήσεις είναι μηδέν– θα αντιληφθείτε αμέσως το εξής πολύ γενικό:

Παρ' ότι μια χωρικά εξαρτημένη φάση δεν παίζει κανέναν ρόλο στην κατανομή πιθανότητας του σωματιδίου, εντούτοις είναι ο καθοριστικός παράγοντας που προσδιορίζει εκείνα τα φυσικά του μεγέθη –όπως *ορμή*, *στροφορμή*, *ρεύμα πιθανότητας* κ.λπ.– που αντιπροσωπεύουν την κίνησή του στον χώρο.