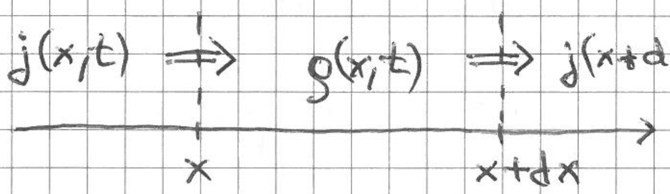
Sannsynlighetsstrøm og -bevarelse

[PCH 2.6; DJG 1.4; IØ 2.8]

Anta $\Psi(x,t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$ med ortonormert $\{\psi_n\}$, slik at $\int \rho(x,t)\,dx = \int |\Psi(x,t)|^2 dx = \sum_n |c_n|^2 = 1$, uavh. av t; $\rho(x,t)$ = sanns. tetthet; $[\rho] = 1/\mathrm{m}$

Endring i $\rho(x,t)$ må skyldes netto strøm av sannsynlighet inn eller ut ved x:



$j(x,t)$ = sanns. strøm ved pos. x ved tid t; $[j] = 1/\mathrm{s}$

$\Rightarrow$ $j(x,t) - j(x+dx,t)$ = (netto) sanns. økning pr tidsenhet på $(x, x+dx)$ ved tid t

Har også:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\rho(x,t)\,dx\right] = \frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t}\cdot dx = \text{—— " ——}$$

Dermed: $$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = -\frac{j(x+dx,t) - j(x,t)}{dx} = -\frac{\partial j(x,t)}{\partial x}$$

Dvs: $$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0}$$

som er en kontinuitetsligning (i 1D) for sannsynlighet; uttrykker sanns. bevarelse. (Tilsvarende for masse, ladning etc)

Hvis 3D: $\rho(x,t) \to \rho(\vec{r},t)$ med $[\rho] = 1/m^3$

$j(x,t) \to \vec{j}(\vec{r},t)$ med $[j] = 1/s \cdot m^2$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0 \quad ; \quad \nabla \cdot \vec{j} = \partial j_x/\partial x + \partial j_y/\partial y + \partial j_z/\partial z$$

Vi viser at SL gir sanns. bevarelse og bestemmer j:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}\{\Psi^* \Psi\} = \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\Psi$$

$$\overset{SL}{=} \Psi^* \frac{\hat{H}}{i\hbar}\Psi + \left(\frac{\hat{H}}{i\hbar}\Psi\right)^* \Psi$$

$$= \frac{i\hbar}{2m}\{\Psi^* \Psi'' - (\Psi^*)''\Psi\}$$ (leddene med $V(x)$ kansellerer)

Generelt:

$$[fg' - f'g]' = f'g' + fg'' - f''g - f'g' = fg'' - f''g$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\Big\{\underbrace{\frac{\hbar}{2mi}\left[\Psi^* \Psi' - (\Psi^*)'\Psi\right]}_{=j}\Big\}$$

Skriver om j:

$$j = \frac{\hbar}{2m}\left[\left(\frac{1}{i}\Psi^* \Psi'\right) + \left(\frac{1}{i}\Psi' \Psi^*\right)^*\right]$$

$$= \mathrm{Re}\left[\Psi^* \left(\frac{1}{m}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi\right]$$

Fra klassisk fysikk: $j = \rho \cdot v$ (evt $\vec{j} = \rho \vec{v}$)

Her: $\frac{1}{m}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{m}\hat{p}$ = hastighetsoperator

$\Rightarrow$ ikke urimelig med $j = \mathrm{Re}\left[\Psi^* \frac{\hat{p}}{m} \Psi\right]$

når $\Psi^*\Psi$ representerer tettheten ρ

3D: $\boxed{\vec{j} = \mathrm{Re}\left[\Psi^* \left(\frac{1}{m}\frac{\hbar}{i}\nabla\right)\Psi\right]}$

Eks: Stasjonær tilstand i 1D boks, $\Psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\frac{n\pi x}{L} e^{-iE_n t/\hbar}$

Tidsavh. kansellerer i $\Psi^*\Psi$ $\Rightarrow$ $[\cdots \frac{1}{i} \cdots]$ blir imaginær

$\Rightarrow j = \mathrm{Re}[\cdots 1/i \cdots] = \underline{\underline{0}}$; som ventet for "stående bølger".

Eks: Fri partikkel, impuls $\vec{p} = p\hat{x}$.

$\Rightarrow \Psi = e^{ikx} e^{-iEt/\hbar}$; $k = p/\hbar$

$\Rightarrow j = \mathrm{Re}\left[\frac{1}{m}\frac{\hbar}{i} \cdot ik\right] = \hbar k/m = p/m = \underline{\underline{v}}$

(OK; her er $\rho = 1$)

Usikkerhet og uskarphetsrelasjoner

[PCH 4.5 ; DJG 1.6, 3.4 ; IØ Øv1]

Vanlig mål for usikkerhet i fysisk størrelse x:

$$\Delta x = \sqrt{\langle (x-\langle x\rangle)^2 \rangle} = \text{Root Mean Square Deviation}$$

$$= \text{standardavvik}$$

D: $x - \langle x \rangle$

SD: $(x - \langle x \rangle)^2$

MSD: $\langle (x-\langle x\rangle)^2 \rangle$

RMSD: $\sqrt{\langle (x-\langle x\rangle)^2 \rangle}$

Omskriving:

$$\langle (x-\langle x\rangle)^2 \rangle = \langle x^2 - 2x\langle x\rangle + \langle x\rangle^2 \rangle$$

$$= \langle x^2\rangle - 2\langle x\rangle\langle x\rangle + \langle x\rangle^2$$

$$= \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2$$

$$\Rightarrow \boxed{\Delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}} \quad \text{RMSD}$$

Postulat C $\Rightarrow$

$$\langle x^n \rangle = \int \Psi^* \, x^n \, \Psi \, dx$$

$$\langle p^n \rangle = \int \Psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \Psi \, dx$$

Dette resulterer i at

$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2}$ Heisenbergs uskarphetsrelasjon

Foreløpig tatt ut av løse lufta!

Vi må ta for oss <u>hermiteske operatorer</u> og <u>kommutatorer</u>.

Hermiteske operatorer. Kommutatorer

[PCH 2.2; DJG 3; IØ 2.3]

Krever <u>reelle</u> fysiske størrelser F og forventningsverdier $\langle F \rangle$

$\rightarrow \langle F \rangle = \langle F \rangle^*$

$$\Rightarrow \boxed{\begin{aligned} \int \Psi^* \hat{F} \Psi \, dx &= \left\{ \int \Psi^* \hat{F} \Psi \, dx \right\}^* \\ &= \int \Psi (\hat{F} \Psi)^* \, dx \end{aligned}}$$

Må gjelde for alle normerbare bølgef. Ψ.

Hvis $\hat{F}$ oppfyller $\boxed{\cdots}$, er $\hat{F}$ en <u>hermitesk operator</u>

[<u>Merk</u>: Vi kompleks-konjugerer funksjoner og tall, ikke operatorer, derfor $(\hat{F}\Psi)^*$]

En ekvivalent, men noe mer <u>anvendelig</u> definisjon av <u>hermitesk</u> operator $\hat{F}$:

$$\boxed{\int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_2 \, dx = \int \Psi_2 (\hat{F} \Psi_1)^* \, dx}$$ PCH 2.8

<u>Bevis</u>: Velg $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 e^{i\alpha}$ med vilkårlig reell α

$$\langle F \rangle = \int (\Psi_1^* + \Psi_2^* e^{-i\alpha}) \hat{F} (\Psi_1 + \Psi_2 e^{i\alpha}) \, dx$$

$$= \underbrace{\int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_1 \, dx}_{\text{reell !}} + \underbrace{\int \Psi_2^* \hat{F} \Psi_2 \, dx}_{\text{reell}}$$

$$+ \underbrace{e^{-i\alpha} \int \Psi_2^* \hat{F} \Psi_1 \, dx + e^{i\alpha} \int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_2 \, dx}$$

<u>reelt</u>, dersom integralene er kompleks konjugerte av hverandre: $a + a^* = 2 \,\mathrm{Re}\, a$ = reelt tall

$$\Rightarrow \int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_2 \, dx = \left\{ \int \Psi_2^* \hat{F} \Psi_1 \, dx \right\}^*$$

$$= \int \Psi_2 (\hat{F} \Psi_1)^* \, dx$$

<u>QED</u>

Lærdom: Hermitesk operator $\hat{F}$ for målbar fysisk størrelse F kan "flyttes etter behov" ved beregning av integraler som

$$\int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_2 \, dx = \int (\hat{F} \Psi_1)^* \Psi_2 \, dx$$

[$dx \to d\tau = dq_1 \, dq_2 \cdots dq_n$ hvis flere dimensjoner og/eller partikler]

Operatorers rekkefølge er generelt <u>ikke</u> ~~lig~~ likegyldig:

$$x\hat{p}\, f(x) = x \frac{\hbar}{i}\frac{\partial f}{\partial x}$$

$$\hat{p}\, x\, f(x) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}(x \cdot f(x)) = \frac{\hbar}{i} f + \frac{\hbar x}{i}\frac{\partial f}{\partial x} \neq x\hat{p}f(x)$$

Vi ser at $x\hat{p}\, f(x) - \hat{p}\, x\, f(x) = -\frac{\hbar}{i} f(x) = i\hbar\, f(x)$

$$\Rightarrow \quad x\hat{p} - \hat{p}x \equiv [x, \hat{p}] = i\hbar$$

Dvs: Resultatet av å la <u>kommutatoren</u> $[x, \hat{p}]$ mellom operatorene x og $\hat{p}$ virke på en funksjon $f(x)$ er det samme som å multiplisere $f(x)$ med $i\hbar$

Nå har vi nok ballast til å vise følgende:

$$\boxed{\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2}\left|\langle i[\hat{A}, \hat{B}]\rangle\right|}$$

ΔA = standardavvik i fysisk størrelse A

ΔB = ——— " ——— B

(evt. "uskarphet" i A og B)

$\hat{A}$ = hermitesk operator for A

$\hat{B}$ = ——— " ——— B

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Bevis: $(\Delta A)^2 = \langle (\hat{A} - \langle A \rangle)^2 \rangle \equiv \langle \tilde{A}^2 \rangle$

$(\Delta B)^2 = \langle (\hat{B} - \langle B \rangle)^2 \rangle \equiv \langle \tilde{B}^2 \rangle$

Notasjon: $\langle \hat{A} \rangle = \langle A \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi \, dx$

$$\int | \tilde{A} \Psi + i\alpha \tilde{B} \Psi |^2 dx \geq 0$$ (med vilkårlig reell α i første omgang)

$$\Rightarrow \int (\tilde{A}\Psi + i\alpha \tilde{B}\Psi)^* (\tilde{A}\Psi + i\alpha\tilde{B}\Psi) dx \geq 0$$

$$\Rightarrow \int (\tilde{A}\Psi)^* \tilde{A}\Psi dx + \alpha^2 \int (\tilde{B}\Psi)^* \tilde{B}\Psi dx + i\alpha \int (\tilde{A}\Psi)^* \tilde{B}\Psi dx - i\alpha \int (\tilde{B}\Psi)^* \tilde{A}\Psi dx \geq 0$$

Her er $\hat{A}$ og $\hat{B}$ åpenbart hermitske (da A og B er observable); da er også $\tilde{A}$ og $\tilde{B}$ hermitske (da $\tilde{A} = \hat{A} - \langle A \rangle$; $\tilde{B} = \hat{B} - \langle B \rangle$).
Kan nå bruke PCH 2.8 til å samle alle operatorene mellom Ψ^* og Ψ:

$$\int (\tilde{A}\Psi)^* \tilde{A}\Psi dx = \int \Psi^* \tilde{A}\tilde{A} \Psi dx = \langle \tilde{A}^2 \rangle = (\Delta A)^2$$

$$\int (\tilde{B}\Psi)^* \tilde{B}\Psi dx = \text{\_\_\_\_\_\_\_\_} = \langle \tilde{B}^2 \rangle = (\Delta B)^2$$

$$\int (\tilde{A}\Psi)^* \tilde{B}\Psi dx - \int (\tilde{B}\Psi)^* \tilde{A}\Psi dx = \int \Psi^* (\tilde{A}\tilde{B} - \tilde{B}\tilde{A}) \Psi dx = \langle [\tilde{A}, \tilde{B}] \rangle$$

$$\Rightarrow (\Delta A)^2 + \alpha^2 (\Delta B)^2 + \alpha \underbrace{\langle i [\tilde{A}, \tilde{B}] \rangle}_{\text{(reell)}} \geq 0$$

$$[\tilde{A}, \tilde{B}] = (\hat{A} - \langle A \rangle)(\hat{B} - \langle B \rangle) - (\hat{B} - \langle B \rangle)(\hat{A} - \langle A \rangle) = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = [\hat{A}, \hat{B}]$$

Resten av leddene kansellerer, da $\langle A \rangle$ og $\langle B \rangle$ er reelle tall som kommuterer med $\hat{A}$ og $\hat{B}$.

Vi søker $\Delta A \cdot \Delta B$, evt $(\Delta A)^2 (\Delta B)^2$, så vi ganger ulikheten med $(\Delta B)^2$ og flytter α-ledd over på høyre side:

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq -\alpha^2 (\Delta B)^4 - \alpha \langle i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle (\Delta B)^2$$

Da α er reell, har høyre side en max-verdi, som vi kan finne ved å maksimere mhp verdi av α:

$$\frac{d}{d\alpha} \left\{ -\alpha^2 (\Delta B)^4 - \alpha \langle i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle (\Delta B)^2 \right\} = 0$$

$$\Rightarrow \alpha = - \frac{\langle i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle}{2 (\Delta B)^2}$$

$$\Rightarrow (\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4} \langle i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2$$

$$\Rightarrow \underline{\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} \left| \langle i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|} \qquad \text{qed!}$$

Eks: $[x, \hat{p}_x] = i\hbar \quad \Rightarrow \quad \Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar/2$

$[x, \hat{p}_y] = 0 \quad \Rightarrow \quad \Delta x \cdot \Delta p_y \geq 0$

$\Rightarrow$ x og p_y <u>kan</u> måles presist samtidig

Eks: Når er $\Delta x \cdot \Delta p = \hbar/2$? Da er $\tilde{A}\Psi + i\alpha \tilde{B}\Psi = 0$, med $\tilde{A} = x - \langle x \rangle$ og $\tilde{B} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} - \langle p \rangle$, og da med løsning

$$\Psi(x) \sim \exp\left\{ -\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2\alpha\hbar} + i \frac{\langle p \rangle}{\hbar} x \right\}$$

Og her er $2\alpha\hbar = \underbrace{\left[-\langle i[x, \hat{p}] \rangle / (\Delta p)^2 \right]}_{2\alpha} \cdot \underbrace{2\Delta x \Delta p}_{\hbar} = 4(\Delta x)^2$

$$\Rightarrow \Psi(x) \sim \exp\left\{ -\left(\frac{x - \langle x \rangle}{2\Delta x} \right)^2 + i \frac{\langle p \rangle}{\hbar} x \right\}$$

dvs: en <u>gaussisk</u> bølgepakke har <u>minimalt</u> uskarphetsprodukt

Tidsutvikling av forventningsverdier

[PCH 4.3 ; DJG 3.4.3

$$\frac{d}{dt}\langle F\rangle = \frac{d}{dt}\left\{\int \Psi^* \hat{F} \Psi \, dx\right\}$$

$$= \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \hat{F} \Psi \, dx + \int \Psi^* \hat{F} \frac{\partial \Psi}{\partial t} dx + \int \Psi^* \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \Psi \, dx$$

$$= \int \left(\frac{\hat{H}\Psi}{i\hbar}\right)^* \hat{F} \Psi \, dx + \int \Psi^* \hat{F} \frac{\hat{H}\Psi}{i\hbar} dx + \left\langle \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \right\rangle$$

$$= \frac{i}{\hbar} \int \Psi^* \hat{H} \hat{F} \Psi \, dx - \frac{i}{\hbar} \int \Psi^* \hat{F} \hat{H} \Psi \, dx + \left\langle \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \right\rangle$$

$$= \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{F}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \right\rangle$$

Som regel er $\hat{F}$ uavh. av t $\Rightarrow \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = 0$

$$\Rightarrow \quad \frac{d}{dt}\langle F\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{F}] \rangle$$

Dvs: Hvis $\hat{F}$ kommuterer med $\hat{H}$, er

$\langle F\rangle$ en bevegelseskonstant ; $\frac{d}{dt}\langle F\rangle = 0$.

Eks: Fri partikkel, $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$

$\Rightarrow [\hat{H}, \hat{p}] = 0$

$\Rightarrow \langle p\rangle = \text{konstant}$ (som ventet)