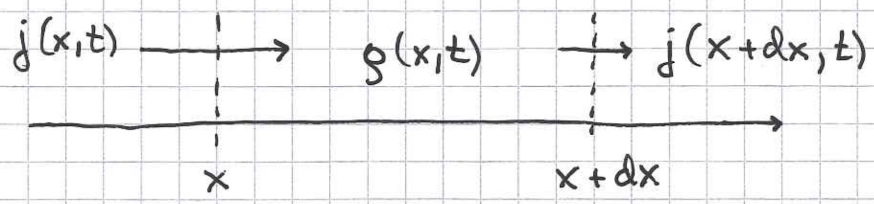
Sannsynlighetsstrøm og -bevarelse

[PCH 2.6 ; DJG 1.4 ; IØ 2.8]

En kontinuitetsligning uttrykker at sanns. er bevart.

Sanns. tetthet : $\rho(x,t) = \frac{dP}{dx} = |\Psi(x,t)|^2$ $\quad (m^{-1})$

Sanns. strøm : $j(x,t)$ $\quad (s^{-1})$



En netto strøm inn (ut) tilsvarer økningen (reduksjonen) i sannsynlighet pr tidsenhet på $(x, x+dx)$:

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

$$\Rightarrow \quad \boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0}$$

Hvis 3D : $\rho(\vec{r},t)$ $\quad (m^{-3})$ og $\vec{j}(\vec{r},t)$ $\quad (s^{-1}\,m^{-2})$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0$$

$$\nabla \cdot \vec{j} = \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} + \frac{\partial j_z}{\partial z}$$

(Tilsvarende kont. lign. har vi for masse og ladning.)

Regner ut $\partial\rho/\partial t$ med utgangspunkt i SL og identifiserer dermed et uttrykk for j :

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

$$= \Psi^* \hat{H}\Psi/i\hbar + (\hat{H}\Psi/i\hbar)^* \Psi$$

$$= \frac{\Psi^*}{i\hbar}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi'' + V\Psi\right\} + \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi^{*''} + V\Psi^*\right\}\frac{\Psi}{(-i\hbar)}$$

$$= \frac{i\hbar}{2m}\left\{\Psi^* \Psi'' - \Psi^{*''}\Psi\right\}$$

Har generelt :

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

slik at

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left\{\Psi^* \Psi' - \Psi^{*'}\Psi\right\} = -\frac{\partial j}{\partial x}$$

dvs

$$j = -\frac{i\hbar}{2m}\left\{\Psi^* \Psi' - \Psi^{*'}\Psi\right\}$$

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

$$= \frac{\hbar}{2m} \cdot 2\,\mathrm{Re}\left\{\frac{1}{i}\Psi^* \Psi'\right\}$$

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

$$= \mathrm{Re}\left\{\Psi^*\left(\frac{\hat{p}}{m}\right)\Psi\right\}$$

I 3D:

$$\vec{j} = \mathrm{Re}\left\{\Psi^*\left(\frac{1}{m}\hat{\vec{p}}\right)\Psi\right\} \quad ; \quad \hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla$$

Et <u>rimelig</u> resultat: I klassisk fysikk er $\vec{j} = \rho \vec{v}$. Nå erstattes ρ av $\Psi^* \dots \Psi$ mens $\vec{v}$ erstattes av $\hat{\vec{v}} = \frac{1}{m} \hat{\vec{p}}$.

Eks 1: Fri partikkel

$$\Psi(x,t) = e^{i(px - Et)/\hbar}$$

$$j = \mathrm{Re}\left\{ \frac{\hbar}{mi} \cdot \frac{ip}{\hbar} \right\} = p/m = v$$

Rimelig: Her er $\rho = \Psi^* \Psi = 1$ overalt $\Rightarrow j = \rho v = v$

Eks 2: Stasjonær tilstand i 1D boks

$$\Psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \exp(-iE_n t/\hbar)$$

$\Rightarrow \Psi_n^* \left(\frac{\hbar}{mi} \frac{\partial}{\partial x} \right)$ er rent imaginær

$\Rightarrow j_n = 0$; ikke uventet for en stående bølge

[Stasjonær tilstand med <u>reell</u> romlig del $\psi(x)$ gir alltid $j = 0$.]

Kommutator [PCH 2.2; DJG 2.3.1; IØ 2.3.c]

Operatorenes rekkefølge kan ha betydning:

$$x\hat{p}\, f(x) = (x\hbar/i)\,\partial f/\partial x, \quad \text{mens}$$

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

dvs

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

Kommutatoren mellom x og $\hat{p}$: $[x, \hat{p}] = x\hat{p} - \hat{p}x$

Virkningen av $[x,\hat{p}]$ på f tilsvarer å gange f med $i\hbar$

$\Rightarrow$ Har en operator-identitet: $[x, \hat{p}] = i\hbar$

Vi sier at $\hat{A}$ og $\hat{B}$ kommuterer hvis $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

$\Rightarrow$ x og $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ kommuterer <u>ikke</u> (med hverandre)

Hermitesk operator [PCH 2.2; DJG 3; IØ 2.3]

En fysisk størrelse F er <u>reell</u>.

$\Rightarrow$ Forventningsverdien $\langle F\rangle$ må også være reell, dvs $\langle F\rangle = \langle F\rangle^*$.

$$\Rightarrow \int \Psi^* \hat{F}\, \Psi\, dx = \left\{ \int \Psi^* (\hat{F}\Psi)\, dx \right\}^* = \int \Psi\, (\hat{F}\Psi)^* dx \qquad \text{(PCH 2.7)}$$

En operator $\hat{F}$ som oppfyller (PCH 2.7), for vilkårlig normerbar Ψ, kalles <u>hermitesk</u>. Da gjelder også, noe mer generelt

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

Bevis: Velg vilkårlig normerbar $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 e^{i\alpha}$ med reell konstant α. Har da

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

$$= \underbrace{\langle F \rangle_1 + \langle F \rangle_2}_{\text{reelle}} + \underbrace{e^{i\alpha} \int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_2 dx + e^{-i\alpha} \int \Psi_2^* \hat{F} \Psi_1 dx}_{\text{må være c.c. av hverandre for å resultere i at } \langle F \rangle \text{ er reell}}$$

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

som er (PCH 2.8). Altså: Hermitesk operator $\hat{F}$ kan flyttes etter behov i slike integraler, dvs

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

Notasjonen her: $(\hat{F}\Psi_1)^* \Psi_2$ betyr at $\hat{F}$ bare virker på Ψ_1.

[Adjungert og selvadjungert operator: Ikke pensum; les evt. selv.]

Usikkerhet. Uskarphetsrelasjoner [PCH 4.5; DJG 1.6, 3.4; IØ Øving 1]

Standardavvik, evt. "root mean square deviation" (RMSD), i en målbar størrelse x:

$$\Delta x = \underset{R}{\sqrt{}} \underset{M}{\langle} \underbrace{(x - \langle x \rangle)}_{D} \underset{S}{{}^2} \underset{M}{\rangle} = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$$

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

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

Vi skal vise at for to målbare størrelser A og B er

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

Dvs: To størrelser med operatorer som ikke kommuterer, kan ikke ha skarpe verdier samtidig.

Et par konkrete eksempler først:

Eks 1: $[x, \hat{p}_x] = i\hbar \quad \Rightarrow \quad \Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$

En partikkel kan ikke ha skarp x og p_x samtidig.

Eks 2: $[x, \hat{p}_y] = 0$

En partikkel <u>kan</u> ha skarp x og p_y samtidig.

Vi utleder ulikheten for ~~[illegible]~~ <u>uskarphetsproduktet</u>:

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

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

Oper. for avviket fra forv.verdien: $\tilde{A} = \hat{A} - \langle A \rangle$, $\tilde{B} = \hat{B} - \langle B \rangle$

At $\langle A \rangle = \langle \hat{A} \rangle$ etc. følger fra def. av forv.verdien.

Siden A, B, $\langle A \rangle$ og $\langle B \rangle$ alle er <u>reelle</u>, er samtlige operatorer $\hat{A}$, $\hat{B}$, $\tilde{A}$ og $\tilde{B}$ <u>hermiteske</u>.

Da kan (PCH 2.8) brukes etter behov, dvs

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

Start med $\int |\tilde{A}\Psi + i\alpha\tilde{B}\Psi|^2\,dx \geq 0,$ (41)

innfil videre med vilkårlig reell α:

$$0 \leq \int \{\tilde{A}\Psi + i\alpha\tilde{B}\Psi\}^* \{\tilde{A}\Psi + i\alpha\tilde{B}\Psi\}\,dx$$

$$= \int (\tilde{A}\Psi)^* \tilde{A}\Psi\,dx + \alpha^2 \int (\tilde{B}\Psi)^* \tilde{B}\Psi\,dx$$

$$+ i\alpha \int (\tilde{A}\Psi)^* \tilde{B}\Psi\,dx - i\alpha \int (\tilde{B}\Psi)^* \tilde{A}\Psi\,dx$$

$$= \langle \tilde{A}^2 \rangle + \alpha^2 \langle \tilde{B}^2 \rangle + i\alpha \langle \tilde{A}\tilde{B} - \tilde{B}\tilde{A} \rangle$$

$$= (\Delta A)^2 + \alpha^2 (\Delta B)^2 + i\alpha \langle [\tilde{A}, \tilde{B}] \rangle$$

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

$$= \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \underbrace{- \hat{A}\langle B \rangle + \langle B \rangle \hat{A}}_{=0} \underbrace{- \langle A \rangle \hat{B} + \hat{B}\langle A \rangle}_{=0} \underbrace{+ \langle A \rangle\langle B \rangle - \langle B \rangle\langle A \rangle}_{=0}$$

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

$$\Rightarrow (\Delta A)^2 + \alpha^2 (\Delta B)^2 + i\alpha \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \geq 0$$

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

For et generelt utsagn om minste verdi for $\Delta A \cdot \Delta B$ må vi velge $\alpha = (-i/2 \cdot (\Delta B)^2) \cdot \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle$, som gir max. høyre side. Setter denne verdien av α inn i ulikheten og får

$$(\Delta A)^2 \cdot (\Delta B)^2 \geq -\frac{1}{4} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2$$ (positiv, siden $[\hat{A}, \hat{B}]$ er imaginær)

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