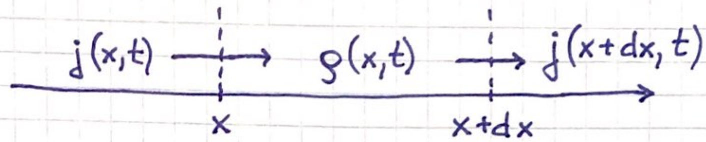
Sannsynlighetsstrøm. Bevaring av sannsynlighet.

[PCH 2.6 ; DJG 1.4 ; IØ 2.8]

Fra før: $\rho(x,t) = dP/dx = |\Psi(x,t)|^2$

$=$ sanns. pr lengdeenhet (ved tid t, pos. x)

En endring i ρ skyldes netto strøm av sannsynlighet, j (inn eller ut):



$$\underbrace{j(x,t) - j(x+dx,t)}_{\substack{\text{netto sanns.strøm} \\ \text{inn på } (x,\, x+dx)}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial t}\left\{\rho(x,t)\,dx\right\}}_{\substack{\text{sanns. endring} \\ \text{pr tidsenhet}}}$$

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

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

Kontinuitetsligning for sannsynlighet (som for masse i TFY4163 og ladning i FY1003)

3D: $\partial\rho/\partial t + \nabla\cdot\vec{j} = 0$; $\nabla\cdot\vec{j} = \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} + \frac{\partial j_z}{\partial z}$

Vi bruker SL og regner ut $\partial\rho/\partial t = \frac{\partial}{\partial t}\{\Psi^*\Psi\} =$

$= \ldots = -\frac{\partial}{\partial x}\{\text{uttrykk}\}$; her må "uttrykk" være det generelle uttrykket for $j(x,t)$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}\left\{\Psi^* \Psi\right\} = \frac{\Psi^*}{i\hbar}\cdot \underbrace{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}}_{=\hat{H}\Psi} + \underbrace{\left(i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t}\right)^*}_{(\hat{H}\Psi)^*}\cdot \frac{\Psi}{(i\hbar)^*}$$

Her er $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$, slik at leddene med $V(x)$ kansellerer. Vi står igjen med:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\left\{\Psi^* \cdot \Psi'' - (\Psi^*)''\cdot \Psi\right\} \quad ; \quad \Psi'' = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$$

Generelt gjelder:

$$\left[f\cdot g' - f'\cdot g\right]' = f'g' + fg'' - f''g - f'g' = fg'' - f''g$$

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

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

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

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

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

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

3D: $\vec{j} = \mathrm{Re}\left\{\Psi^* \frac{\hat{\vec{p}}}{m}\Psi\right\} \quad ; \quad \hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla$

Et rimelig uttrykk:

I klassisk fysikk er $\vec{j} = \rho\cdot\vec{v}$.

I QM erstattes ρ av $\Psi^*\Psi$ og $\vec{v}$ erstattes av $\hat{\vec{v}} = \hat{\vec{p}}/m$.

Eks 1: Fri partikkel med impuls p

$$\Psi(x,t) = \exp\left(i(px - Et)/\hbar\right)$$

$$\Rightarrow\ j = \mathrm{Re}\left\{\Psi^* \frac{\hbar}{mi} \cdot \frac{ip}{\hbar} \cdot \Psi\right\} = \frac{p}{m} = v$$

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

Eks 2: Partikkel i stasjonær bundet tilstand

$$\Psi(x,t) = \psi(x) \cdot e^{-iEt/\hbar}$$

Vi kan alltid velge <u>reell</u> $\psi(x)$ for bundet tilstand i en dimensjon. Da innser vi at

$$j = 0 \qquad (\mathrm{Re}\{i * \text{reelt tall}\} = 0)$$

Ikke uventet for en stasjonær tilstand!

Vi fortsetter med sentralt stoff fra kap. 2 og 4 i PCH, hhv "Fundamentale prinsipper" og "Viktige teoremer".

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

Definisjon av kommutatoren mellom to operatorer:

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

$\hat{A}$ og $\hat{B}$ kommuterer dersom $[\hat{A}, \hat{B}]f = 0$

Eks 1: $[x, \hat{p}_x] f(x) = x \frac{\hbar}{i}\frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}(xf) = i\hbar f(x)$

Dvs, virkningen av $[x, \hat{p}_x]$ på en funksjon $f(x)$ er den samme som å multiplisere $f(x)$ med $i\hbar$.

Vi har en operator-identitet:

$$[x, \hat{p}_x] = i\hbar$$

Siden $\hat{p}_y x = 0$ etc, dvs $\hat{p}_i q_j = \frac{\hbar}{i}\delta_{ij}$, har vi

$$[q_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

Vi innser videre:

$$[q_i, q_j] = 0 \quad ; \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$$

Eks 2: Bestem $[\hat{H}, x]$ og $[\hat{H}, \hat{p}_x]$

$[\hat{H}, x] = [\hat{K} + V(x), x] = [\hat{K}, x]$ da $[V(x), x] = 0$

$$[\hat{K}, x] f(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{\partial^2}{\partial x^2}(xf) - x\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right\}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}(xf) = \frac{\partial}{\partial x}\left(f + x\frac{\partial f}{\partial x}\right) = 2\frac{\partial f}{\partial x} + x\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$$

$$\Rightarrow [\hat{K}, x] f(x) = -\frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial}{\partial x} f(x) = -\frac{i\hbar}{m}\cdot\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} f(x) = \frac{\hbar}{im}\hat{p}_x f(x)$$

$$\Rightarrow [\hat{H}, x] = \frac{\hbar}{im}\hat{p}_x$$

$$[\hat{H}, \hat{p}_x] = [V(x), \hat{p}_x] \quad \text{da} \quad [\hat{K}, \hat{p}_x] = 0$$

$$[V(x), \hat{p}_x] f(x) = V(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}(V \cdot f) = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x} \cdot f(x)$$

$$\Rightarrow \quad [\hat{H}, \hat{p}_x] = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x}$$

Hermiteske operatorer [PCH 2.2; DJG 3; IØ 2.3]

Først definerer vi den adjungerte $\hat{A}^\dagger$ av en operator $\hat{A}$:

$$\int (\hat{A}\Psi_1)^* \Psi_2 \, dx = \int \Psi_1^* (\hat{A}^\dagger \Psi_2) \, dx \qquad \text{(PCH 2.9)}$$

La nå F være en fysisk størrelse og $\hat{F}$ operatoren som representerer F. Da må forventningsverdien $\langle F \rangle$ være reell:

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

Dermed:

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

Mer generelt gjelder, når F er en fysisk størrelse (se PCH eller notater H20 for bevis):

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

Når $\hat{F}$ oppfyller (PCH 2.7) og (PCH 2.8) sier vi at $\hat{F}$ er hermitesk. Sammenligning med (PCH 2.9) viser at da er $\hat{F}^\dagger = \hat{F}$, og vi sier også at $\hat{F}$ er selvadjungert.

Eks 1: Hva er $\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^{\dagger}$? Er $\frac{\partial}{\partial x}$ hermitesk ?

Løsn 1:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial}{\partial x}\Psi_1\right)^* \Psi_2 \, dx = \underbrace{\Big|_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^* \Psi_2}_{=0} - \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^* \left(\frac{\partial}{\partial x}\Psi_2\right) dx$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^{\dagger} = -\frac{\partial}{\partial x} \quad \Rightarrow \text{ ikke hermitesk}$$

Eks 2: Hva er $(\hat{A}\hat{B})^{\dagger}$?

Løsn 2:

$$\int \Psi_1^* (\hat{A}\hat{B})^{\dagger} \Psi_2 \, dx \overset{2.9}{=} \int (\hat{A}\hat{B}\Psi_1)^* \Psi_2 \, dx \overset{2.9}{=}$$

$$= \int (\hat{B}\Psi_1)^* \hat{A}^{\dagger} \Psi_2 \, dx \overset{2.9}{=} \int \Psi_1^* (\hat{B}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger}) \Psi_2 \, dx$$

$$\Rightarrow (\hat{A}\hat{B})^{\dagger} = \hat{B}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger}$$

Eks 3: Er $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ hermitesk ?

Løsn 3:

$$\hat{p}^{\dagger} = \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)^{\dagger} = \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^{\dagger}\left(\frac{\hbar}{i}\right)^{\dagger} = \left(-\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(-\frac{\hbar}{i}\right) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} = \hat{p},$$

dvs selvadjungert, og dermed hermitesk.

Her brukte vi Eks 1 ovenfor, samt at $c^{\dagger} = c^*$ for en vilkårlig kompleks konstant, noe som følger direkte fra 2.9.