Το Ελεύθερο Σωμάτιο – Ρεύμα Πιθανότητας

Δομή Διάλεξης

Χρονική εξέλιξη Gaussian κυματοσυνάρτησης σε μηδενικό δυναμικό (ελεύθερο σωμάτιο): Μετατόπιση και Διασπορά

Πείραμα διπλής οπής: Κροσσοί συμβολής για μικροσκοπικά και μακροσκοπικά σωμάτια

Πείραμα διπλής οπής: Κροσσοί συμβολής για μικροσκοπικά και μακροσκοπικά σωμάτια

Τελεστές και κυματοσυναρτήσεις σε 3 διαστάσεις

Ρεύμα Πιθανότητας

Θεώρημα Virial

Σύνοψη

Gaussian Κυματοπακέτο

Το Gaussian κυματοπακέτο ορίζεται ως:

$$\psi(x;0) = \frac{A}{\sqrt{\sigma}} e^{-x^2/2\sigma^2} e^{i(p_0/\hbar)x}$$

Κανονικοποίηση:

$$|\psi(x;0)|^2 = \frac{A^2}{\sigma} e^{-x^2/\sigma^2} \Longrightarrow 1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x;0)|^2 \, dx = A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2/\sigma^2} \frac{dx}{\sigma}$$

$$= A^2 \sqrt{\pi}$$

$$\Downarrow$$

$$A = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}$$

Στη βιβλιογραφία εμφανίζονται παραλαγές του ορισμού:

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \mathrm{e}^{-x^2/4\sigma^2}$$

Αν θέλουμε $\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \sigma$ θα πρέπει να το ορίσουμε με $4\sigma^2$ στον παρονομαστή του εκθετικού

5a+

Δυναμική Ελεύθερου Σωματίου

Στο ελεύθερο σωμάτιο το δυναμικό είναι 0 άρα η Hamiltonian είναι:

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

Αναπτύσουμε την αρχική κυματοσυνάρτηση σε ιδιοκαταστάσεις της Hamiltonian και εξελίσσουμε την κάθε μια στο ανάπτυγμα με την φάση που εξαρτάται απο την αντίστοιχη ιδιοτιμή της ενέργειας:

Στην περίπτωση αυτή οι ιδιοκαταστάσεις της Hamiltonian συμπίπτουν με τις ιδιοκαταστάσεις της ορμής που τις έχουμε βρεί.

Έστω αρχική κατάσταση με πλάτη πιθανότητας στην βάση ιδιοκαταστασεων ορμής (και ενέργειας) που δίνονται απο Gaussian:

$$\langle p|\psi,0\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar^2/4\sigma^2)^{1/4}}\,\mathrm{e}^{-\sigma^2(p-p_0)^2/\hbar^2}$$

5b+: Βρείτε το $\Delta p^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$

Ανάπτυγμα κυματοσυνάρτησης

Έστω αρχική κατάσταση με πλάτη πιθανότητας στην βάση ιδιοκαταστασεων ορμής (και ενέργειας) που δίνονται απο Gaussian:

$$\langle p|\psi,0\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar^2/4\sigma^2)^{1/4}}\,\mathrm{e}^{-\sigma^2(p-p_0)^2/\hbar^2}$$

σταθερά κανονικοποίησης

E_n

$|E_n, 0>$

$$|\psi,t\rangle = \sum_n a_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}|E_n,0\rangle \Rightarrow \langle x|\psi,t\rangle = \int \mathrm{d}p\,\langle x|p\rangle\langle p|\psi,0\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}p^2t/2m\hbar}$$

Κβαντική συμβολή
(υπέρθεση)

a_n

$$= \frac{1}{\sqrt{h}(2\pi\hbar^2/4\sigma^2)^{1/4}}\int \mathrm{d}p\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{e}^{-\sigma^2(p-p_0)^2/\hbar^2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p^2t/2m\hbar}$$

Εξέλιξη στο Χρόνο

$$|\psi,t\rangle = \sum_n a_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}|E_n,0\rangle \Rightarrow \langle x|\psi,t\rangle = \int \mathrm{d}p\,\langle x|p\rangle\langle p|\psi,0\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}p^2 t/2m\hbar}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{h}(2\pi\hbar^2/4\sigma^2)^{1/4}} \int \mathrm{d}p\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{e}^{-\sigma^2(p-p_0)^2/\hbar^2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p^2 t/2m\hbar}$$

Το ολοκλήρωμα είναι γκαουσιανό και ο υπολογισμός του θα δοθεί σαν λυμένη άσκηση:

5c++

$$|\langle x|\psi,t\rangle|^2 = \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}\hbar^2|b|^2}\exp\left\{\frac{-(x-p_0 t/m)^2\sigma^2}{2\hbar^4|b|^4}\right\}$$

όπου:

$$b^2 = \left(\frac{\sigma^2}{\hbar^2} + \frac{\mathrm{i}t}{2m\hbar}\right)$$

Το κυματοπακέτο μεταοπίζεται και απλώνεται!!

$$|\langle x|\psi,t\rangle|^2 = \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}\hbar^2|b|^2}\exp\left\{\frac{-(x-p_0t/m)^2\sigma^2}{2\hbar^4|b|^4}\right\}$$

όπου: $b^2 = \left(\frac{\sigma^2}{\hbar^2} + \frac{\mathrm{i}t}{2m\hbar}\right)$

$$\sigma(t)^2 = \hbar^4|b|^4/\sigma^2$$

Η διασπορά σ(t) προκύπτει με σύγκριση με το κανονικοποιημένο Gaussian κυματοπακέτο (αφού υψώσουμε στο τετράγωνο):

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}}\,\mathrm{e}^{-x^2/4\sigma^2}$$

Η διασπορά του |<x|ψ,t>|^2 είναι:

$$\sigma^2(t) = \sigma^2 + \left(\frac{\hbar t}{2m\sigma}\right)^2$$

5d+

Η Δυναμική της Διασποράς

$$|\langle x|\psi,t\rangle|^2 = \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}\hbar^2|b|^2}\exp\left\{\frac{-(x-p_0t/m)^2\sigma^2}{2\hbar^4|b|^4}\right\}$$

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}}\,\mathrm{e}^{-x^2/4\sigma^2}$$

$$\Rightarrow \sigma(t)^2 = \hbar^4|b|^4/\sigma^2$$

$$b^2 = \left(\frac{\sigma^2}{\hbar^2} + \frac{\mathrm{i}t}{2m\hbar}\right)$$

$$\sigma^2(t) = \sigma^2 + \left(\frac{\hbar t}{2m\sigma}\right)^2$$

Το κυματοπακέτο μετατοπίζεται και απλώνεται!

Ε: Γιατί απλώνει το κυματοπακέτο; Γιατί αυξάνεται η αβεβαιότητα στην θέση;

Η αβεβαιότα θέσης αυξάνεται με τον χρόνο.

$$\sigma^2(t) = \sigma^2 + \left(\frac{\hbar t}{2m\sigma}\right)^2$$

Το κυματοπακέτο μετατοπίζεται και απλώνει!

Ε: Γιατί απλώνεται το κυματοπακέτο. Γιατί αυξάνεται η αβεβαιότητα στην θέση;

Η αβεβαιότα θέσης αυξάνεται με τον χρόνο.

Η διασπορά του κυματοπακέτου στο χώρο των ορμών είναι χρονικά αμετάβλητη και προκύπτει ως:

$$\langle p|\psi,0\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar^2/4\sigma^2)^{1/4}}\,\mathrm{e}^{-\sigma^2(p-p_0)^2/\hbar^2}$$

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}}\,\mathrm{e}^{-x^2/4\sigma^2}$$

$$\Rightarrow \quad \sigma_p = \hbar/2\sigma \quad \Longrightarrow \quad \Delta_v \sim \hbar/2m\sigma$$

Διασπορά στην ταχύτητα

Αυτή η αβεβαιότητα στην ταχύτητα προκαλεί επιπλέον αβεβαιότητα στην θέση!!

$$\Delta_x = \Delta_v t \sim \hbar t/2m\sigma$$

Που συμφωνεί με την διασπορά που βρήκαμε: $\sigma^2(t) = \sigma^2 + \left(\frac{\hbar t}{2m\sigma}\right)^2$

Η αβεβαιότα θέσης αυξάνεται με τον χρόνο.

$$|\langle x|\psi,t\rangle|^2 = \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}\hbar^2|b|^2}\exp\left\{\frac{-(x-p_0t/m)^2\sigma^2}{2\hbar^4|b|^4}\right\}$$

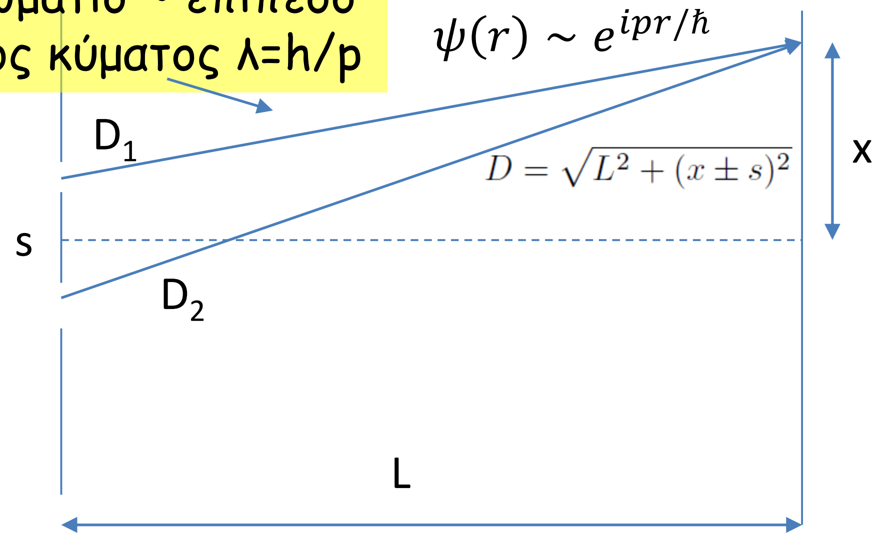
Ε: Γιατί μετατοπίζεται το κυματοπακέτο;

Α: Γιατί η πιθανότερη τιμή της ορμής του είναι p_0 και αρα της ταχύτητας p_0/m! Παίρνουμε δηλαδή το κλασσικά αναμενόμενο αποτέλεσμα που επιβεβαιώνει άλλη μια φορά ότι επιλέξαμε σωστά τον τελεστή της ορμής ως

$$\langle x|\hat{p}|\psi\rangle = (\hat{p}\psi)(x) = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

Το πείραμα της διπλής οπής ποσοτικά

Ελευθερο σωμάτιο ~ επίπεδο κύμα με μήκος κύματος λ=h/p



Φάση του επιπέδου κύματος στην θέση x του πετάσματος:

$$2\pi D/\lambda = pD/\hbar$$

Η διαφορά μήκους των δύο διαδρομών για μικρά x/L και s/L είναι

$$D_2 - D_1 \simeq L\frac{2sx}{L^2} = \frac{2sx}{L} \text{ αφού πχ } D_1 \simeq L\left(1 + \frac{\frac{1}{2}(x-s)^2}{L^2}\right)$$

5e+

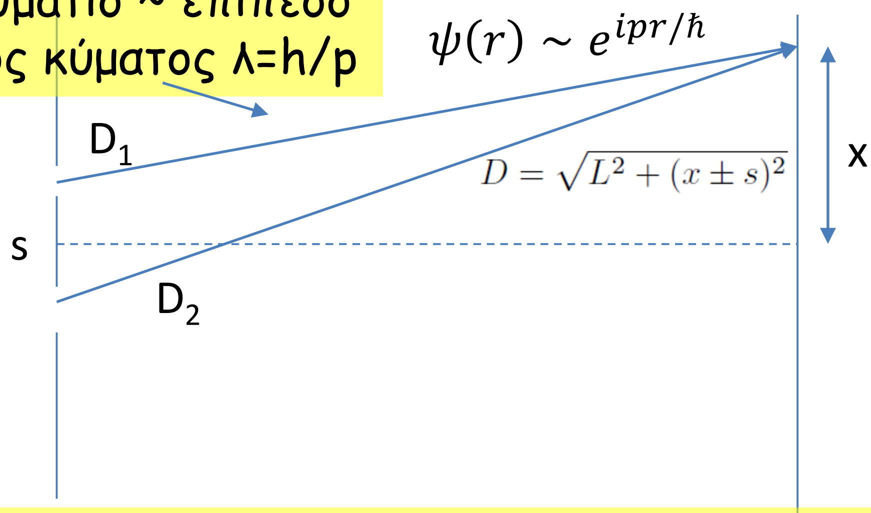
Άρα η διαφορά φάσης μεταξύ των δύο κυμάτων που συμβάλουν στη θέση x είναι:

$$\phi_1 - \phi_2 \simeq \frac{2psx}{\hbar L}$$

5f+

Το πείραμα της διπλής οπής ποσοτικά

Ελευθερο σωμάτιο ~ επίπεδο κύμα με μήκος κύματος λ=h/p



Φάση του επιπέδου κύματος στην θέση x του πετάσματος:

$$2\pi D/\lambda = pD/\hbar$$

Η διαφορά φάσης μεταξύ των δύο κυμάτων που συμβάλουν στη θέση x είναι:

$$\phi_1 - \phi_2 \simeq \frac{2psx}{\hbar L}$$

Το πλάτος πιθανότητας μεγιστοποιήται όταν η διαφορά φάσης των δύο συμβαλομένων κυμάτων είναι 2nπ

Άρα η απόσταση μεταξύ των μεγίστων πιθανότητας είναι:

$$X = \frac{hL}{2ps}$$

5g+

Το πείραμα της διπλής οπής ποσοτικά

Άρα η απόσταση μεταξύ των μεγίστων πιθανότητας είναι:

$$X = \frac{hL}{2ps}$$

Ε: Πόση είναι πρακτικά η απόσταση αυτή σε ένα πείραμα με ηλεκτρόνια;

Α: Θέτουμε:

$$h = 6.63 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s}$$

$$p = \sqrt{2mE} \qquad E = 100\,\mathrm{eV} = 1.6 \times 10^{-17}\,\mathrm{J}$$

$$p = 5.5 \times 10^{-24}\,\mathrm{N\,s}$$

s $= 1\mu m$ L $= 1m$

$$\xrightarrow{X = \frac{hL}{2ps}} X = 0.057\,\mathrm{mm}$$

5h+

μετρήσιμη απόσταση

Το πείραμα της διπλής οπής ποσοτικά

Άρα η απόσταση μεταξύ των μεγίστων πιθανότητας είναι: $X = \frac{hL}{2ps}$

Ε: Πόση είναι πρακτικά η απόσταση αυτή σε ένα πείραμα με μακροσκοπικές σφαίρες;

Α: Θέτουμε:

$$h = 6.63 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s}$$

s = $1cm$ L = $1000m$

p = $1gr\ x\ 300m/s$

$$\left.\right\} \xrightarrow{X = \frac{hL}{2ps}} X \sim 10^{-29}\,\mathrm{m}$$

5i+

μη μετρήσιμη απόσταση η πιθανότητα είναι πρακτικά ομογενης όπως στην κλασσική μηχανική

Γενίκευση σε 3 Διαστάσεις

Σε 3 διαστάσεις οι συνιστώσες κάθε διανυσματικού παρατηρήσιμου μεγέθους είναι ξεχωριστά παρατηρήσιμα μεγέθη.

Για τις συν/νες θέσης x,y, z έχουμε: $[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0.$

πλήρες σετ μετατιθέμενων μεγεθών βάση $\{|\mathbf{x}\rangle\}$

Όμοια, για τις συν/νες ορμής έχουμε: $[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$

Στην αναπαράσταση της θέσης έχουμε: $\hat{p}_i = -i\hbar \dfrac{\partial}{\partial x_i} \Rightarrow \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$

Άρα οι σχέσεις μετάθεσης σε 3 διαστάσεις γίνονται: $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$

Γενίκευση σε 3 Διαστάσεις

Οι ιδιοκαταστάσεις της ορμής στον χώρο των θέσεων ικανοποιούν την αντίστοιχη (διανυσματική) εξίσωση ιδιοτιμών και είναι:

$$\langle \mathbf{x}|\mathbf{p}\rangle = \frac{1}{h^{3/2}} e^{\mathrm{i}\mathbf{x}\cdot\mathbf{p}/\hbar}$$

Χρονοεξαρτώμενη εξίσωση Schrodinger σε 3 διαστάσεις (αναπαράσταση θέσης):

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial \langle \mathbf{x}|\psi\rangle}{\partial t} = \langle \mathbf{x}|\hat{H}|\psi\rangle = \langle \mathbf{x}|\frac{\hat{p}^2}{2m}|\psi\rangle + \langle \mathbf{x}|V(\hat{\mathbf{x}})|\psi\rangle$$

$$\langle \mathbf{x}|V(\hat{\mathbf{x}})|\psi\rangle = V(\mathbf{x})\langle \mathbf{x}|\psi\rangle$$

$$\langle \mathbf{x}|\hat{p}^2|\psi\rangle = -\hbar^2\nabla^2\langle \mathbf{x}|\psi\rangle$$

$$\psi(\mathbf{x}) \equiv \langle \mathbf{x}|\psi\rangle$$

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\mathbf{x})\psi$$

Το Ρεύμα Πιθανότητας

Πυκνότητα πιθανότητας ρ=dP/dV να βρεθεί σωμάτιο στην θέση **x** την χρονική στιγμή t:

$$\rho(x,t) \equiv |\psi(\mathbf{x},t)|^2$$

Το σωματιο βρίσκεται σίγουρα κάπου στο χώρο. Άρα:

$$\int \mathrm{d}^3\mathbf{x}\, |\psi(\mathbf{x},t)|^2 = 1$$

κανονικοποίηση

Ε: Διατηρεί την κανονικοποίηση η χρονική εξέλιξη σύμφωνα με την χρονοεξαρτώμενη εξίσωση Schrodinger;

$$\rho(x,t) \equiv |\psi(\mathbf{x},t)|^2$$

$$\mathrm{Prob}(R) = \int_R |\psi|^2 d^3x \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt}\mathrm{Prob}(R) = \int_R \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t}\psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t}\right) d^3x$$

Το Ρεύμα Πιθανότητας

Ε: Διατηρεί την κανονικοποίηση η χρονική εξέλιξη σύμφωνα με την χρονοεξαρτώμενη εξίσωση Schrodinger;

Έστω Prob(R) η πιθανότητα εύρεσης του σωματίου σε μιά περιοχή R του χώρου. Τότε έχουμε:

$$\text{Prob}(R) = \int_R |\psi|^2 d^3x \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt}\text{Prob}(R) = \int_R \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t}\psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) d^3x$$

Θεωρόύμε την χρονοξερτώμενη εξίσωση Schrodinger και την συζηγή της:

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

οι όροι με το δυναμικό απλοποιούνται

5j+

Το Ρεύμα Πιθανότητας

Ε: Διατηρεί την κανονικοποίηση η χρονική εξέλιξη σύμφωνα με την χρονοεξαρτώμενη εξίσωση Schrodinger;

Έστω Prob(R) η πιθανότητα εύρεσης του σωματίου σε μιά περιοχή R του χώρου. Τότε έχουμε:

$\rho(x,t) \equiv |\psi(\mathbf{x},t)|^2$

$$\text{Prob}(R) = \int_R |\psi|^2 d^3x \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt}\text{Prob}(R) = \int_R \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t}\psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t}\right) d^3x$$

Θεωρόύμε την χρονοξερτώμενη εξίσωση Schrodinger και την συζηγή της:

$$\left.\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi \\ -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* + V\psi^* \\ \frac{d}{dt}\text{Prob}(R) &= \int_R \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t}\psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t}\right) d^3x \end{aligned}\right\} \Rightarrow$$

οι όροι με το δυναμικό απλοποιούνται

$$\frac{d}{dt}\text{Prob}(R) = -\int_R \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\nabla^2\psi^* - \psi^*\nabla^2\psi\right) d^3x$$

$$= -\int_R \nabla \cdot \mathbf{J} d^3x$$

5k+

Το Ρεύμα Πιθανότητας

$$\frac{d}{dt}\text{Prob}(R) = -\int_R \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\nabla^2\psi^* - \psi^*\nabla^2\psi\right) d^3x = -\int_R \nabla\cdot\mathbf{J}d^3x$$

Ορίζουμε το ρεύμα πιθανότητας ως

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}) \equiv \frac{i\hbar}{2m}\Big(\psi\boldsymbol{\nabla}\psi^* - \psi^*\boldsymbol{\nabla}\psi\Big)$$

Τότε έχουμε:

5I+

$$i\hbar\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*\right) \Rightarrow \frac{\partial\rho}{\partial t} = -\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{J}$$

Διατήρηση της πιθανότητας

Το Ρεύμα Πιθανότητας

$$i\hbar\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}+\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right)=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi^*\nabla^2\psi-\psi\nabla^2\psi^*\right) \Rightarrow \frac{\partial\rho}{\partial t}=-\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{J}$$

$$\rho(x,t)\equiv|\psi(\mathbf{x},t)|^2$$

Διατήρηση της πιθανότητας

Ολοκληρωτική μορφή:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\mathcal{V}}\mathrm{d}^3\mathbf{x}\,\rho=\int_{\mathcal{V}}\mathrm{d}^3\mathbf{x}\,\frac{\partial\rho}{\partial t}=-\int_{\mathcal{V}}\mathrm{d}^3\mathbf{x}\,\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{J}=-\oint_{\partial\mathcal{V}}\mathrm{d}^2\mathbf{S}\cdot\mathbf{J}$$

Νόμος Gauss

Ο ρυθμός μεταβολής της πιθανότητας να βρούμε το σωμάτιο σε μια περιοχή του χώρου ισούται με μειον το ολοκλήρωμα της ροής πιθανότητας στο όριο της περιοχής (δηλ. την πιθανότητα που 'βγαίνει' απο την περιοχή)

Όταν η περιοχή γίνεται άπειρη, η ροή απο το όριο μηδενίζεται (δεν υπάρχει όριο) και τότε η ολική πιθανότητα (1) μένει σταθερή.

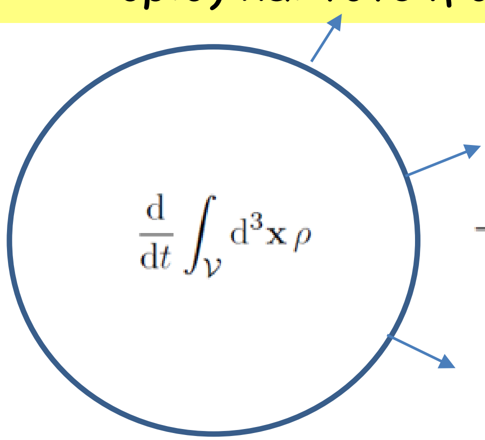
Το Ρεύμα Πιθανότητας

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\mathcal{V}} \mathrm{d}^3\mathbf{x}\,\rho = \int_{\mathcal{V}} \mathrm{d}^3\mathbf{x}\,\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\int_{\mathcal{V}} \mathrm{d}^3\mathbf{x}\,\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{J} = -\oint_{\partial\mathcal{V}} \mathrm{d}^2\mathbf{S}\cdot\mathbf{J}$$

Νόμος Gauss

Ο ρυθμός μεταβολής της πιθανότητας να βρούμε το σωμάτιο σε μια περιοχή του χώρου ισούται με μειον το ολοκλήρωμα της ροής πιθανότητας στο όριο της περιοχής (δηλ. την πιθανότητα που 'βγαίνει' απο την περιοχή)

Όταν η περιοχή γίνεται άπειρη, η ροή απο το όριο μηδενίζεται (δεν υπάρχει όριο) και τότε η ολική πιθανότητα (1) μένει σταθερή.



$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\mathcal{V}} \mathrm{d}^3\mathbf{x}\,\rho$$

$$-\oint_{\partial\mathcal{V}} \mathrm{d}^2\mathbf{S}\cdot\mathbf{J}$$

Φάση κυματοσυνάρτησης και ταχύτητα

Το ρεύμα (μάζα ανα μονάδα επιφανείας ανα μονάδα χρόνου) σε περίπτωση ρευστού με πυκνότητα ρ και ταχύτητα v δίνεται απο την σχέση

$$\mathbf{J} = \rho \mathbf{v}$$

5m+

$$\mathbf{J} = \rho \mathbf{v}$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}) \equiv \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\psi \boldsymbol{\nabla} \psi^* - \psi^* \boldsymbol{\nabla} \psi\right)$$

$$\psi(\mathbf{x}) = S(\mathbf{x}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi(\mathbf{x})}$$

$$\mathbf{J} = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}(S\boldsymbol{\nabla}S - \mathrm{i}S^2\boldsymbol{\nabla}\phi - S\boldsymbol{\nabla}S - \mathrm{i}S^2\boldsymbol{\nabla}\phi)$$

$$= \frac{\hbar}{m} S^2 \boldsymbol{\nabla}\phi. \xrightarrow{\mathbf{J} = \rho \mathbf{v}} \mathbf{v} = \frac{\hbar \boldsymbol{\nabla}\phi}{m}$$

$$\rho(x,t) \equiv |\psi(\mathbf{x},t)|^2$$

Η κλίση της φάσης της κυματοσυνάρτησης καθορίζει την ταχύτητα ροής της της πιθανότητας

Φάση κυματοσυνάρτησης και ταχύτητα

Η κλίση της φάσης της κυματοσυνάρτησης καθορίζει την ταχύτητα ροής της της πιθανότητας

$$\mathbf{v} = \frac{\hbar \boldsymbol{\nabla} \phi}{m}$$

Για το ελέυθερο σωμάτιο:

$$\phi(\mathbf{x}) = \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}/\hbar$$

$$\left.\begin{array}{l} \phi(\mathbf{x}) = \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}/\hbar \\ \\ \mathbf{v} = \dfrac{\hbar \boldsymbol{\nabla} \phi}{m} \end{array}\right\} \Rightarrow \mathbf{v} = \mathbf{p}/m$$

Όπως αναμένεται απο την κλασική φυσική.

5η+

Το Θεώρημα Virial

Το θεώρημα Virial έχει τις ρίζες του στην κλασική μηχανική και είναι μι σχέση που συνδέει την κινητική με την δυναμική ενέργεια σωματίου σε δέσμια κατάση σε δυναμική.

Στην κβαντική μηχανική είναι μια σχέση μεταξύ μέσης κινητικής και μέσης δυναμικής ενέργειας σωματίου που είναι σε ιδιοκατάσταση της Hamiltonian (στάσιμη κατάσταση).

Έχουμε δείξει ότι σε ιδιοκατάσταση της Hamiltonian οι αναμενόμενες (μέσες) τιμές φυσικών μεγεθών είναι χρονικά ανεξάρτητες.

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle E|Q|E\rangle = \langle E|(QH - HQ)|E\rangle = (E - E)\langle E|Q|E\rangle = 0$$

Άρα για Q=x p έχουμε:

$$0 = \mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \hat{\mathbf{x}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\rangle = \langle E|\left[\hat{\mathbf{x}}\cdot\hat{\mathbf{p}}, \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{x}})\right]|E\rangle$$

$$= \frac{1}{2m}\langle E|[\hat{\mathbf{x}}\cdot\hat{\mathbf{p}}, \hat{p}^2]|E\rangle + \langle E|[\hat{\mathbf{x}}\cdot\hat{\mathbf{p}}, V(\hat{\mathbf{x}})]|E\rangle$$

Το Θεώρημα Virial

$$0 = i\hbar \frac{d}{dt}\langle \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{p}} \rangle = \frac{1}{2m}\langle E|[\hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{p}}, \hat{p}^2]|E\rangle + \langle E|[\hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{p}}, V(\hat{\mathbf{x}})]|E\rangle$$

Υπολογίζουμε κάθε όρο χωριστά:

$$[\hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{p}}, \hat{p}^2] = \sum_{jk}[\hat{x}_j \hat{p}_j, \hat{p}_k^2] = \sum_{jk}[\hat{x}_j, \hat{p}_k^2]\hat{p}_j = \sum_{jk} 2i\hbar \hat{p}_k \delta_{jk} \hat{p}_j = 2i\hbar \hat{p}^2$$ 5ο+

$$[\hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{p}}, V(\hat{\mathbf{x}})] = -i\hbar \mathbf{x} \cdot \nabla V(\mathbf{x})$$ 5ρ+ στην αναπαράσταση της θέσης

Άρα με αντικατάσταση στην πάνω σχέση παίρνουμε:

$$2\langle E|\frac{\hat{p}^2}{2m}|E\rangle = \langle E|(\mathbf{x} \cdot \nabla V)|E\rangle$$

Θεώρημα virial

Ειδική Πέρίπτωση

$$2\langle E|\frac{\hat{p}^2}{2m}|E\rangle = \langle E|(\mathbf{x}\cdot\nabla V)|E\rangle$$

Θεώρημα virial

Έστω δυναμικό της μορφής:

$$V(\mathbf{x}) = C|\mathbf{x}|^\alpha \xrightarrow{\nabla|\mathbf{x}| = \mathbf{x}/|\mathbf{x}|} \mathbf{x}\cdot\nabla V = \alpha C|\mathbf{x}|^\alpha = \alpha V$$

$$\left.\begin{aligned} &2\langle E|\frac{\hat{p}^2}{2m}|E\rangle = \langle E|(\mathbf{x}\cdot\nabla V)|E\rangle \\ &\mathbf{x}\cdot\nabla V = \alpha C|\mathbf{x}|^\alpha = \alpha V \end{aligned}\right\} \Rightarrow 2\langle E|\frac{\hat{p}^2}{2m}|E\rangle = \alpha\langle E|V|E\rangle$$

Αρμονικός ταλαντωτής: α=2
Άτομο υρογόνου: α=-1

5q+

Σύνοψη

Η χρονική εξέλιξης της κατάστασης ελεύθερου σωματίου μπορεί να βρεθεί αφου η κατάσταση αναπυχθεί σε ιδιοσυναρτήσεις της ορμής που είναι και ιδιοκαταστάσεις της Hamiltonian του ελεύθερου σωματίου

Η χρονική εξέλιξη μια αρχικής κατάστασης που είναι Gaussian είναι επίσης Gaussian που μετατοπίζεται ενώ αυξάνεται και η διασπορα με το χρόνο. Η αύξηση της διασποράς οφείλεται στην αβεβαιότητα στην ταχύτητα.

Η απόσταση των κροσσών συμβολής στο πείραμα της διπλής οπής είναι υπρεβολικά μικρή (μη μετρήσιμη αν αντί για ηλεκτρόνια χρησιμοποιηθούν μακροσκοπικά σώματα.

Στην κβαντομηχανική η πιθανότητα διατηρείται και ισχύει η εξίσωση της συνέχειας που περιλαμβάνει το ρεύμα πιθανότητας.

Το θεώρημα virial συσχετίζει τις μέσες τιμές δυναμικής και κινητικής ενέργειας όταν το σύστημα είναι σε ιδιοκατάσταση της ενέργειας (στάσιμη κατάσταση).

Άσκηση 1

Υπολογίστε το ολοκλήρωμα:

$$\langle x|\psi,t\rangle = \int \mathrm{d}p\,\langle x|p\rangle\langle p|\psi,0\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}p^2t/2m\hbar}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{h}(2\pi\hbar^2/4\sigma^2)^{1/4}}\int \mathrm{d}p\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{e}^{-\sigma^2(p-p_0)^2/\hbar^2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p^2t/2m\hbar}$$

5r+

Λύση

Αντικαθιστούμε το p^2 με $(p-p_0)^2+2p_0p-p_0^2$

τότε έχουμε:

$$\langle x|\psi,t\rangle = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_0^2t/2m\hbar}}{\sqrt{h}(2\pi\hbar^2/4\sigma^2)^{1/4}}$$

$$\times\int \mathrm{d}p\,\exp\left\{\frac{\mathrm{i}p}{\hbar}\left(x-\frac{p_0t}{m}\right)-(p-p_0)^2\left(\frac{\sigma^2}{\hbar^2}+\frac{\mathrm{i}t}{2m\hbar}\right)\right\}$$

Άσκηση 1

τότε έχουμε: $$\langle x|\psi,t\rangle = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_0^2 t/2m\hbar}}{\sqrt{\hbar}(2\pi\hbar^2/4\sigma^2)^{1/4}} \times \int \mathrm{d}p \exp\left\{\frac{\mathrm{i}p}{\hbar}\left(x - \frac{p_0 t}{m}\right) - (p-p_0)^2\left(\frac{\sigma^2}{\hbar^2} + \frac{\mathrm{i}t}{2m\hbar}\right)\right\}$$

θέτουμε: $$a = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(x - \frac{p_0 t}{m}\right) \qquad b^2 = \left(\frac{\sigma^2}{\hbar^2} + \frac{\mathrm{i}t}{2m\hbar}\right)$$

και παίρνουμε ολοκλήρωμα της μορφής: $$I \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \mathrm{e}^{-(b^2x^2+ax)}$$

θέτουμε: $$b^2x^2 + ax = (bx + a/2b)^2 - a^2/4b^2$$

$z \equiv bx + a/2b$

Οπότε με αλλαγή μεταβλητής παίρνουμε: $$I = \mathrm{e}^{a^2/4b^2} b^{-1} \int \mathrm{d}z\, \mathrm{e}^{-z^2}$$

$\sqrt{\pi}$

Άρα : $$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \mathrm{e}^{-(b^2x^2+ax)} = \frac{\sqrt{\pi}}{b}\, \mathrm{e}^{a^2/4b^2}$$

Άσκηση 1

$$\langle x|\psi,t\rangle = \frac{e^{ip_0^2 t/2m\hbar}}{\sqrt{\hbar}(2\pi\hbar^2/4\sigma^2)^{1/4}} \times \int dp \, \exp\left\{\frac{ip}{\hbar}\left(x - \frac{p_0 t}{m}\right) - (p-p_0)^2\left(\frac{\sigma^2}{\hbar^2} + \frac{it}{2m\hbar}\right)\right\}$$

$$a = \frac{i}{\hbar}\left(x - \frac{p_0 t}{m}\right) \qquad b^2 = \left(\frac{\sigma^2}{\hbar^2} + \frac{it}{2m\hbar}\right)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \, e^{-(b^2x^2+ax)} = \frac{\sqrt{\pi}}{b} e^{a^2/4b^2}$$

$$\langle x|\psi,t\rangle = \frac{e^{ip_0^2 t/2m\hbar}}{\sqrt{\hbar}(2\pi\hbar^2/4\sigma^2)^{1/4}} \exp\left\{\frac{ip_0}{\hbar}\left(x - \frac{p_0 t}{m}\right)\right\} \frac{\sqrt{\pi}}{b} e^{-(x-p_0t/m)^2/4\hbar^2 b^2}$$

5s+

Άσκηση 2

Βρείτε τις ενέργειες ένός νετρονίου, ηλεκτρονίου και ενός φωτονίου με μήκος κύματος 0.1nm:

Λύση

$$E_\mathrm{n} = \frac{p^2}{2m} = \frac{(h/\lambda)^2}{2m} = 1.32 \times 10^{-20}\,\mathrm{J} = 0.0821\,\mathrm{eV}$$

$$E_\mathrm{e} = \frac{m_\mathrm{n}}{m_\mathrm{e} E_\mathrm{n}} = 1837 E_\mathrm{n} = 150.8\,\mathrm{eV}$$

5t+

$$E_\gamma = h\nu = hc/\lambda = 1.988 \times 10^{-15}\,\mathrm{J} = 12.407\,\mathrm{keV}$$

Άσκηση 3

Δείξτε ότι ένας κλασικός αρμονικός ταλαντωτής ικανοποιεί το θεώρημα virial:

$$2\langle KE\rangle = \alpha\langle \Delta E\rangle$$

Λύση

$$m\ddot{x} = -m\omega^2 x, \Rightarrow x = A\cos\omega t \Rightarrow \tfrac{1}{2}m\langle \dot{x}^2\rangle = \tfrac{1}{4}m\omega^2A^2$$

$$\Downarrow \qquad\qquad\qquad \Downarrow$$

$$\tfrac{1}{2}m\omega^2\langle x^2\rangle = \tfrac{1}{4}m\omega^2A^2 \Rightarrow 2\langle KE\rangle = \alpha\langle \Delta E\rangle \qquad \alpha = 2$$

Άσκηση 3

Βρείτε το ρεύμα πιθανότητας που αντιστοιχεί στην κυματοσυνάρτηση

$$\psi = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kz-\omega t)} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kz+\omega t)}$$

Λύση

Έχουμε:

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}) \equiv \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\Big(\psi\boldsymbol{\nabla}\psi^* - \psi^*\boldsymbol{\nabla}\psi\Big)$$

Ακόμα :

$$\boldsymbol{\nabla}\psi = \mathrm{i}k\hat{\mathbf{z}}(A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} - B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kz})$$

5u+

Άρα :

$$\mathbf{J} = -\frac{\hbar k\hat{\mathbf{z}}}{2m}\left[(A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kz})(-A^*\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kz} + B^*\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}) - (A^*\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kz} + B^*\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz})(A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} - B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kz})\right]$$

$$\mathbf{J} = v\big(|A|^2 - |B|^2\big)\,\hat{\mathbf{z}},$$

όπου

$$v = \hbar k/m$$

Έχουμε δύο ρευστά πιθανότητας που κινούνται σε αντίθετες κατευθύνσεις

Άσκηση 4

Χωρίς να χρησιμοποιήσετε την εξίσωση συνέχειας δείξτε ότι <ψ(t)|ψ(t)>= σταθερό.

Λύση

Απο την εξίσωση Schrodinger έχουμε: $$\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}H(t)|\psi(t)\rangle$$

Με ερμητειανή συζηγία παίρνουμε: $$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)| = -\frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|H^{\dagger}(t) = -\frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|H(t)$$

Άρα $$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \frac{d\langle\psi(t)|}{dt}|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt}$$

$$= \left[-\frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|H(t)\right]|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\left[\frac{1}{i\hbar}H(t)|\psi(t)\rangle\right] = 0$$

5ν+

Άσκηση 5

Έστω σωμάτιο που περιγράφεται απο την Hamiltonian $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$

Δείξτε ότι $[H, x] = -i\hbar p/m$ και ότι σε στάσιμη κατάσταση <p>=0

Λύση

Έχουμε $[H, x] = \frac{1}{2m}[p^2, x] + [V(x), x] = \frac{1}{2m}2p[p, x] + 0 = -\frac{i\hbar}{m}p$

Σε στάσιμη κατάσταση $H|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$

Άρα

$$\langle p\rangle = \langle\psi|p|\psi\rangle = \frac{im}{\hbar}\langle\psi|Hx - xH|\psi\rangle = \frac{im}{\hbar}[\lambda\langle\psi|x|\psi\rangle - \lambda\langle\psi|x|\psi\rangle] = 0$$

Άλυτες Ασκήσεις

Δίνεται η κυματοσυνάρτηση $\psi(x) = A \sin kx$. Έχει το σωμάτιο αυτό καλά καθορισμένη ορμή ίση με $\hbar k$;

Εξηγήστε γιατι η κυματοσυνάρτηση $\psi = f(x) \cos \omega t$ δεν μπορεί να είναι λύση της χρονοεξαρτώμενης εξίσωσης του Schrodinger; (Υπόδειξη: εξετάστε την διατήρηση της ολικής πιθανότητας).

Δείξτε ότι σε στάσιμες καταστάσεις το ρεύμα πιθανότητας είναι χρονικά αμετάβλητο και οτι μηδενίζεται όταν η κυματοσυνάρτηση είναι φανταστική