Valószínűségi áramsűrűség

A valószínűségi áramsűrűségat a kontinuitási egyenlet segítségével fogjuk bevezetni:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathrm{div}\mathbf{j} = 0 \ . \tag{1}$$

A megtalálási valószínűséget, valószínűség sűrűséget, a hullámfüggvény abszolútérték négyzeteként értelmezzük: $\rho(\mathbf{r}) = \psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$. Ennek idő szerinti parciális deriváltját az időfüggő Schrődinger egyenlet segítségével csempészhetjük be:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V(\mathbf{r})\psi \ . \tag{2}$$

Vegyük a fenti egyenlet komplex konjugáltját: (A komplex konjugáció során a képzetes rész előjelet vált, a valós rész változatlan marad.)

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi^* + V(\mathbf{r})\psi^* \ , \tag{3}$$

majd szorozzuk meg az 2. számú egyenletet ψ^*-val és a 3. számú egyenletet ψ-vel:

$$i\hbar\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*\Delta\psi + V(\mathbf{r})\psi^*\psi \tag{4}$$

$$-i\hbar\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi\Delta\psi^* + V(\mathbf{r})\psi\psi^* \ . \tag{5}$$

A fenti két egyenlet különbségében megjelenik a valószínűségi sűrűség idő szerinti parciális deriváltja:

$$i\hbar\left(\psi^*\frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial \psi^*}{\partial t}\right) = i\hbar\frac{\partial \psi^*\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^*\right) \ . \tag{6}$$

A bal oldalon tehát megjelent a sűrűség idő szerinti parciális deriváltja. Vizsgáljuk meg azt, hogy a jobb oldalt fel tudjuk-e írni úgy, mint egy áram divergenciáját. Fejtsük ki részletesen a következő kifejezést:

$$\mathrm{div}(\psi^*\nabla\psi) - \mathrm{div}(\psi\nabla\psi^*) = \sum_{i=1}^{3}\left(\partial_i(\psi^*\partial_i\psi) - \partial_i(\psi\partial_i\psi^*)\right) \ , \tag{7}$$

ahol a ∂_i jelőlés a helyvektor i-dik komponense szerinti parciális deriváltat jelöli: $\partial_i f = \frac{\partial f}{\partial r_i}$. Használjuk ki a deriválás szabályait és alakítsuk át az 7. számú egyenletet:

$$\sum_{i=1}^{3}\left(\partial_i(\psi^*\partial_i\psi) - \partial_i(\psi\partial_i\psi^*)\right) = \sum_{i=1}^{3}\left(\partial_i\psi^*\partial_i\psi + \psi^*\partial_i^2\psi - \partial_i\psi\partial_i\psi^* - \psi\partial_i^2\psi^*\right)$$

$$= \psi^*\sum_{i=1}^{3}\partial_i^2\psi + \psi\sum_{i=1}^{3}\partial_i^2\psi^* = \psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^* \ . \tag{8}$$

Az előző egyenletben kihasználtuk, hogy

$$\sum_{i=1}^{3} \partial_i^2 \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \Delta \psi \ . \tag{9}$$

Az imént kapot 8. számú egyenletet beheyettesítve a 6. számú egyenletbe a köetkező eredményt kapjuk:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\hbar}{2im} \mathrm{div} \left(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* \right) = 0 \ . \tag{10}$$

Összevetve az előző egyenletet az 1. számú kontinuitási egyenlettel, a valószínűségi áramsűrűségre a következő kifejezés adódik:

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2im} \left(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* \right) \ . \tag{11}$$

A valószínűségi áramsűrűség kifejezését megvizsgálva megállapíthatjuk, hogy ha a hullámfüggvény valós, vagy a komplex részének nincs helyfüggése, akkor az áramsűrűség nulla lesz. Nézzük meg, hogy egy A amplitudójű, $\mathbf{k}$ hullámszámú síkhullámnak mekkora az áramsűrűsége:

$$\psi = A e^{-i(\omega t - \mathbf{kr})} \tag{12}$$

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar |A|^2}{2im} \left(e^{i(\omega t - \mathbf{kr})} i\mathbf{k} e^{-i(\omega t - \mathbf{kr})} - e^{-i(\omega t - \mathbf{kr})} (-i) \mathbf{k} e^{i(\omega t - \mathbf{kr})} \right) \tag{13}$$

$$= |A|^2 \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} \tag{14}$$