Το κυματοπακέτο

(Η αρίθμηση των εξισώσεων είναι συνέχεια της αρίθμησης που εμφανίζεται στο εδάφιο «Ελεύθερο Σωμάτιο».

Ένα ελεύθερο σωμάτιο δεν έχει κατ΄ανάγκη απολύτως καθορισμένη ορμή. Αν, για παράδειγμα, έχουμε ένα σωμάτιο εγκλωβισμένο στο «πηγάδι» του εδαφίου για το ελεύθερο σωμάτιο και ξαφνικά αφαιρέσουμε τα «τοιχώματα» αυτό, αμέσως μετά, θα μείνει μεν ελεύθερο αλλά η κατάστασή του θα είναι επαλληλία καταστάσεων με γειτονικές ορμές αφού, όντας αρχικά περιορισμένο, δεν είναι δυνατό να έχει καθορισμένη ορμή.

Επομένως η κατάστασή του θα περιγράφεται από κάποια συνάρτηση της μορφής

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} b_\nu e^{\frac{2\nu i\pi}{L}x}$$

Όπως είδαμε η ορμή σε μια τέτοια περίπτωση βρίσκεται στη γειτονιά της μέσης ορμής του σωματίου (μάλιστα τόσο πιο μικρή είναι η γειτονιά αυτή όσο μεγαλύτερο ήταν το «κουτί» πριν αφαιρέσουμε τα «τοιχώματα»). Βέβαια, αυτός δεν είναι ο μόνος τρόπος να «προετοιμάσουμε» ένα ελεύθερο σωμάτιο. Είναι, όμως, ένα καλό παράδειγμα για να καταλάβουμε γιατί είναι πολύ πιο ρεαλιστικό να θεωρήσουμε ότι ένα ελεύθερο σωμάτιο περιγράφεται από μια επαλληλία καταστάσεων με γειτονικές ορμές.
Για να εξετάσουμε μια τέτοια κατάσταση θα ξεκινήσουμε από τις σχέσεις (7) και θα δούμε, καταρχήν, πώς διαμορφώνονται στο όριο $L \to \infty$.
Όπως είδαμε στη σχέση (12) η μεταβλητή $p = \frac{2\pi\hbar}{L}\nu$ είναι σχεδόν συνεχής αφού όταν $\nu \to \nu + 1,\ p \to p + \frac{2\pi\hbar}{L}$ και επομένως η μεταβολή της είναι απειροστά μικρή :

$$\delta p = \frac{2\pi\hbar}{L} \to 0 .$$

Ας πάμε τώρα στις σχέσεις (7). Η πρώτη απ' αυτές γράφεται:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} (\sqrt{\delta p} b_\nu) e^{\frac{i}{\hbar}(\nu\delta p)x} \tag{18}$$

Για τη δεύτερη έχουμε

$$b_\nu = \frac{\sqrt{\delta p}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-L/2}^{L/2} dx e^{-\frac{i}{\hbar}(\nu\delta p)x} \psi(x) \equiv \sqrt{\delta p}\, g(\nu\delta p) \tag{19}$$

Αντικατάσταση της (19) στην (18) θα μας δώσει:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \delta p g(\nu\delta p) e^{\frac{i}{\hbar}(\nu\delta p)x} \quad , \quad g(\nu\delta p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-L/2}^{L/2} dx e^{-\frac{i}{\hbar}(\nu\delta p)x} \psi(x) \qquad (20)$$

Το όριο $L \to \infty$ διαβάζεται τώρα αμέσως:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px} g(p) \ , \ g(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}px} \psi(x) \qquad (21)$$

Οι σχέσεις αυτές δεν είναι τίποτα άλλο παρά ο γνωστός μας μετασχηματισμός Fourier ή, διατυπωμένο αλλιώς , η ανάπτυξη της κυματοσυνάρτησης σε μια επαλληλία ιδιοκαταστάσεων του τελεστή της ορμής

$$f_p(x) = \frac{e^{\frac{i}{\hbar}px}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \qquad (22)$$

Στις (21) η συνάρτηση $g(p)$ παρουσιάζει, ως γνωστόν, το πλάτος πιθανότητας να βρεθεί το σωμάτιο με ορμή p. Προσέξτε ότι, παρόλο που οι συναρτήσεις (22) είναι ένα πλήρες και ορθοκανονικό σύνολο συναρτήσεων, δεν είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες και επομένως δεν μπορούν να ερμηνευθούν ως το πλάτος πιθανότητας να βρεθεί στη θέση x ένα σωμάτιο με ορμή p.

Όταν λέμε ότι η κατάσταση του σωματίου είναι μια επαλληλία καταστάσεων με γειτονικές ορμές εννοούμε ότι η συνάρτηση $g(p)$ είναι διάφορη του μηδενός μόνο στο γειτονιά κάποιας συγκεκριμένης ορμής:

$$g(p) = \frac{1}{(2\pi\Lambda^2)^{1/4}} \exp[-\frac{(p-p_0)^2}{4\Lambda^2}] \qquad (23)$$

Ο συντελεστής στην παραπάνω σχέση έχει επιλεγεί με τέτοιο τρόπο ώστε το απόλυτο τετράγωνο της $g(p)$ να μπορεί να ερμηνευθεί ως πιθανότητα:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp |g(p)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Lambda^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-\frac{(p-p_0)^2}{2\Lambda^2}} \underset{p-p_0=q}{=} \frac{2}{\sqrt{2\pi\Lambda^2}} \int_{0}^{\infty} dq e^{-\frac{q^2}{2\Lambda^2}} = 1 \qquad (24)$$

Πριν προχωρήσουμε να θυμίσουμε ότι η έκφραση (23) (σωστότερα το τετράγωνό της) ορίζει αυτό που ονομάζουμε «κατανομή Gauss» ή «κανονική κατανομή» μιας τυχαίας μεταβλητής –εδώ της ορμής. Η μέση τιμή αυτής της τυχαίας μεταβλητής μπορεί πολύ εύκολα να βρεθεί:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp p |g(p)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Lambda^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dp p e^{-\frac{(p-p_0)^2}{2\Lambda^2}} \underset{p-p_0=q}{=} \frac{2p_0}{\sqrt{2\pi\Lambda^2}} \int_{0}^{\infty} dq e^{-\frac{q^2}{2\Lambda^2}} = p_0 \qquad (25)$$

Η διασπορά της ορμής γύρω από τη μέση της τιμή βρίσκεται κι αυτή εύκολα αν πρώτα παρατηρήσουμε ότι:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp p^2 |g(p)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Lambda^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dp p^2 e^{-\frac{(p-p_0)^2}{2\Lambda^2}} \underset{p-p_0=q}{=} \frac{2}{\sqrt{2\pi\Lambda^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dq (q+p_0)^2 e^{-\frac{q^2}{2\Lambda^2}} =$$

$$= \frac{2p_0^2}{\sqrt{2\pi\Lambda^2}} \int_0^{\infty} dq e^{-\frac{q^2}{2\Lambda^2}} + \frac{2}{\sqrt{2\pi\Lambda^2}} \int_0^{\infty} dq q^2 e^{-\frac{q^2}{2\Lambda^2}} = p_0^2 + \Lambda^2 \qquad (26)$$

Έτσι:

$$(\Delta p)^2 = \Lambda^2 \qquad (27)$$

.

Σημειώστε εδώ δύο συχνά εμφανιζόμενους τύπους ολοκληρωμάτων:

$$\int_0^{\infty} dx x^n \exp(-a x^m) = \frac{1}{m} a^{-\frac{n+1}{m}} \Gamma\left(\frac{n+1}{m}\right)$$

όπου (για $k \neq -1, -2, \ldots$) : $\Gamma(k+1) = k\Gamma(k)$, $\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}$

και

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-ax^2 \pm ibx) = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left(-\frac{b^2}{4a}\right)$$

(η τελευταία σχέση ισχύει για $a > 0$ αλλά μπορεί να επεκταθεί και για $a = \pm ic$, $c > 0$)

Η επιλογή (23) είναι ένας τρόπος (δεν είναι ο μοναδικός αλλά είναι ο πιο βολικός) για να υλοποιήσουμε αυτό που είπαμε: Μια κατάσταση η οποία είναι επαλληλία καταστάσεων με ορμές στη γειτονιά μιας καθορισμένης ορμής. Αν με την έκφραση (23) τροφοδοτήσουμε την (21) θα παράξουμε την κατάσταση που είναι γνωστή ως ***«κυματοπακέτο»***:

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\Lambda^2)^{1/4}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} px - \frac{(p-p_0)^2}{4\Lambda^2}\right] \qquad (28)$$

Το τελευταίο ολοκλήρωμα μπορεί να υπολογιστεί εύκολα αν αλλάξουμε τη μεταβλητή της ολοκλήρωσης:

$$p - p_0 = q + \frac{2i}{\hbar}\Lambda^2 x \qquad (29)$$

Με τον τρόπο αυτό στο εκθετικό θα μείνει ένας τετραγωνικός όρος (τον οποίο ξέρουμε να ολοκληρώσουμε) και κάποιοι όροι οι οποίοι δεν εξαρτώνται από την μεταβλητή ολοκλήρωσης και έτσι βγαίνουν έξω από το ολοκλήρωμα:

$$\frac{i}{\hbar}px - \frac{(p-p_0)^2}{4\Lambda^2} = -\frac{q^2}{4\Lambda^2} - \frac{x^2\Lambda^2}{\hbar^2} + \frac{i}{\hbar}p_0 x \qquad (30)$$

(Αυτός είναι ένας γενικός κανόνας : Αν έχετε μια έκφραση της μορφής $Ax^2 + Bx$ μπορείτε να την κάνετε πάντα τέλειο τετράγωνο με την αλλαγή $x \to x - \frac{B}{2A}$).

Αντικαθιστώντας την (30) στην (28) θα πάρουμε:

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi a^2)^{1/4}}\exp\left(-\frac{x^2}{4a^2} + \frac{i}{\hbar}p_0 x\right)\ ,\ a^2 \equiv \frac{\hbar^2}{4\Lambda^2} \qquad (31)$$

Αν συγκρίνουμε την έκφραση (31) με την (23) θα διαπιστώσουμε ότι (το απόλυτο τετράγωνό της) είναι μια κατανομή Gauss της τυχαίας μεταβλητής «θέση». Η μέση τιμή, επομένως, της θέσης του σωματιδίου είναι μηδέν. Να σημειώσουμε ότι αυτό έχει να κάνει με τον τρόπο «παραγωγής» της (31): Αν το «πηγάδι» δεν ήταν επικεντρωμένο στο μηδέν αλλά σε κάποια άλλη θέση αυτή θα ήταν και η μέση θέση που θα προσδιόριζε η κατανομή (31):

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi a^2)^{1/4}}\exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{4a^2} + \frac{i}{\hbar}p_0 x\right] \qquad (32)$$

Η διασπορά της θέσης του σωματιδίου προσδιορίζεται ακριβώς με τον ίδιο τρόπο όπως και η διασπορά της ορμής :

$$(\Delta x)^2 = a^2 = \frac{\hbar^2}{4\Lambda^2} = \frac{\hbar^2}{4(\Delta p)^2} \quad \Rightarrow \quad (\Delta x)(\Delta p) = \frac{\hbar}{2} \qquad (33)$$

Η τελευταία σχέση είναι που δικαιολογεί την ονομασία της (31) ως ***« κατάσταση ελάχιστης αβεβαιότητας»***.
Όπως είδαμε στην πρώτη παράγραφο η αβεβαιότητά μας ως προς την ορμή είναι τόσο μικρότερη όσο μεγαλύτερο είναι το «κουτί» μέσα στο οποίο έχουμε εγκλωβίσει το σωμάτιο. Επομένως, και χωρίς να χρειάζεται κανένας ιδιαίτερος υπολογισμός μπορούμε να εκτιμήσουμε ότι $\Delta p \sim \frac{\hbar}{L}$. Από την σχέση (33) διαπιστώνουμε αυτό που θα περιμέναμε : Το σωμάτιο είναι, τη χρονική στιγμή που τα «τοιχώματα» αφαιρούνται, περιορισμένο σε μια έκταση $\Delta x \sim L$. Αυτός είναι και ο λόγος για τον οποίο η κατάσταση

(31) ή (32) είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες . Η σημασία της φάσης στις εν λόγω καταστάσεις μπορεί να γίνει προφανής αν υπολογίσουμε την μέση ορμή :

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x)(-i\hbar \frac{d}{dx})\psi(x) = p_0 \tag{34}$$

Αυτήν είναι η κατάσταση των πραγμάτων τη χρονική στιγμή της αφαίρεσης των «τοιχωμάτων». Τι θα γίνει όμως με την πάροδο του χρόνου;
Η κατάσταση (31) δεν είναι ιδιοκατάσταση της ελεύθερης Hamiltonian και επομένως θα εξελιχθεί με μη τετριμμένο τρόπο. Για να τον βρούμε θα γράψουμε

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px} g(p,t) \ , \ g(p,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}px} \psi(x,t) \tag{35}$$

και θα πάμε στην εξίσωση Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)$$

για να προσδιορίσουμε ότι

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} g(p,t) = \frac{p^2}{2m} \ \Rightarrow \ g(p,t) = g(p) e^{-\frac{i}{\hbar}t\frac{p^2}{2m}} \tag{36}$$

Συνδυάζοντας τις (23), (35) και (36) θα πάρουμε:

$$\begin{aligned} \psi(x,t) &= \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(p_0 x - tE_{p_0})}}{(2\pi\Lambda^2)^{1/4}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp[-q^2(\frac{1}{4\Lambda^2} + \frac{it}{2m\hbar}) + \frac{i}{\hbar}q(x - v_0 t)] = \\ &= \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(p_0 x - tE_0)}}{\left(a^2 + \frac{i\hbar}{2m}t\right)^{1/2}} \exp[-\frac{(x - v_0 t)^2}{4(a^2 + \frac{i\hbar}{2m}t)}] \end{aligned} \tag{37}$$

$$E_0 = \frac{p_0^2}{2m}, \ v_0 = \frac{p_0}{m}$$

Για να φθάσουμε στο αποτέλεσμα αυτό γράψαμε στην (23) $p - p_0 = q$ και στο ολοκλήρωμα που προέκυψε κάναμε τον εκθέτη τέλειο τετράγωνο. Για να βρούμε την αντίστοιχη πιθανότητα θα χρειαστούμε το απόλυτο τετράγωνο της (37):

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\left(a^2 + \frac{\Lambda^2}{m^2} t^2\right)^{1/2}} \exp[-\frac{(x - v_0 t)^2}{2(a^2 + \frac{\Lambda^2}{m^2} t^2)}] =$$

$$\equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi a^2(t)}} \exp[-\frac{x(t)^2}{2a^2(t)}] \tag{38}$$

Για να καταλήξετε στο αποτέλεσμα αυτό σημειώστε ότι:

$$\left(a^2 + \frac{i\hbar}{2m} t\right)\left(a^2 - \frac{i\hbar}{2m} t\right) = a^2 \left(a^2 + \frac{\Lambda^2}{m^2} t^2\right) \equiv a^2 a^2(t)$$

Παρατηρώντας το αποτέλεσμα (38) βλέπουμε ότι η κατανομή της θέσης εξακολουθεί, με την πάροδο του χρόνου, να είναι μια κατανομή Gauss αλλά με δύο σημαντικές διαφορές. Η πρώτη είναι ότι το κέντρο της κατανομής, δηλαδή η μέση θέση, μετακινείται προς τα δεξιά με ταχύτητα v_0. Η δεύτερη είναι ότι η διασπορά της έχει αποκτήσει χρονική εξάρτηση:

$$a^2(t) = a^2 + \frac{\Lambda^2}{m^2} t^2 \;\Rightarrow\; (\Delta x)_t^2 = (\Delta x)_0^2 + \frac{\hbar^2}{4(\Delta x)_0^2} t^2 \tag{39}$$

Όπως βλέπουμε η αβεβαιότητα για τη θέση του σωματιδίου συνεχώς αυξάνει και μάλιστα τόσο γρηγορότερα όσο μικρότερη ήταν η αρχική μας αβεβαιότητα για τη θέση του. Για να αποκτήσουμε μια αίσθηση για τι μιλάμε ας υποθέσουμε ότι το αρχικό μας «κουτί» έχει μέγεθος της τάξης μεγέθους του ατόμου του Υδρογόνου ($(\Delta x)_0 \sim 1\, fm = 10^{-13} cm$) και ότι η μάζα του σωματίου είναι της τάξης μεγέθους της μάζας του ηλεκτρονίου ($m_e \sim 10^{-27} gr$). Μέσα σε τρείς ώρες ($t \sim 10^4 \sec$) η αβεβαιότητά μας ως προς τη θέση του θα είναι της τάξης μεγέθους της απόστασης Γης-Ηλίου ($(\Delta x)_t \sim 10^8 km$)!

Βλέπουμε έτσι ότι αν και μόλις αφαιρέσαμε τα «τοιχώματα» του «πηγαδιού» το σωμάτιο ήταν σχετικά εντοπισμένο πολύ σύντομα η πιθανότητα να βρεθεί σε μια οποιαδήποτε περιοχή γίνεται η ίδια. Είναι μάλιστα μια εύκολη άσκηση να δείξει κανείς ότι αν μιλάμε για αποστάσεις μικρές σε σχέση με τη διασπορά (39) το αποτέλεσμα (17) της προηγουμένης παραγράφου αναπαράγεται.

Η εικόνα του κυματοπακέτου είναι, στο πλαίσιο της Κβαντικής Μηχανικής, η πιο κοντινή σε ένα ελεύθερο σωμάτιο. Η επιλογή (23) για την κατανομή της ορμής είναι πολύ πρακτική γιατί οι υπολογισμοί γίνονται εύκολα, αντιπροσωπεύει τη φυσική που θέλουμε να περιγράψουμε αλλά δεν είναι μοναδική. Θα μπορούσαμε να σκεφτούμε και άλλες κατανομές της ορμής αρκεί να δίνουν την ίδια μέση τιμή (αφού αυτή είναι μετρήσιμη ποσότητα) και να είναι επαρκώς συγκεντρωμένες γύρω απ' αυτή. Μπορεί, βέβαια, να χρησιμοποιήσει κανείς το *Κεντρικό Οριακό Θεώρημα* της θεωρίας των πιθανοτήτων για να αποδείξει ότι πάντα θα αναπαράγονται τα μετρήσιμα αποτελέσματα

που παράγονται από την κατανομή Gauss αλλά αυτή είναι μια συζήτηση που ξεφεύγει από αυτήν που θέλουμε να κάνουμε εδώ.
Εφαρμογή της εικόνας του κυματοπακέτου βρίσκει κανείς σε προβλήματα σκέδασης στα οποία έχει μεγάλη σημασία το ρεύμα πιθανότητας και αυτό γιατί η σκέδαση είναι μια δυναμική διαδικασία στην οποία αυτό που έχει, κυρίως, σημασία είναι το ρεύμα σωματιδίων που παράγεται καθώς αυτά εγκαταλείπουν μια περιοχή στην οποία αισθάνθηκαν ένα πεδίο δυνάμεων. Ας υπολογίσουμε, λοιπόν, το ρεύμα που παράγει ένα κυματοπακέτο της μορφής

$$\psi(x,t) = e^{\frac{i}{\hbar}(p_0 x - tE_0)} A(x,t;p_0,\Delta p) \tag{40}$$

Η συγκεκριμένη μορφή της συνάρτησης A εξαρτάται από την επιλογή της κατανομής της ορμής. Για την επιλογή (23) όπως διαπιστώσαμε είναι:

$$A(x,t;p_0,\Delta p) = \left(\frac{2}{\pi}\frac{(\Delta p)^2}{\hbar^2}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{f(t)}} \exp\left[-\frac{(\Delta p)^2}{\hbar^2}\frac{(x-v_0 t)^2}{f(t)}\right] \tag{41}$$

$$f(t) = 1 + \frac{2i}{\hbar m} t (\Delta p)^2$$

Ο λόγος που γράψαμε τη συνάρτησή μας με τον τρόπο αυτό είναι για να γίνει προφανές ότι όσο μικρότερη είναι η αβεβαιότητα για την ορμή τόσο πιο κοντά σε μια σταθερά είναι η συνάρτηση (41) και τόσο πιο κοντά σε ένα «επίπεδο» κύμα η κυματοσυνάρτηση (40). Για τον υπολογισμό του ρεύματος δεν έχουμε παρά να υπολογίσουμε την

$$j(x,t) = \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^* \frac{\partial}{\partial x}\psi - \psi\frac{\partial}{\partial x}\psi^*\right) \tag{42}$$

Ένας απλός υπολογισμός θα μας δώσει

$$j(x,t) = v_0 |A|^2 + \frac{\hbar}{2im}\left(A^* \frac{\partial}{\partial x}A - A\frac{\partial}{\partial x}A^*\right) \tag{43}$$

Ο πρώτος όρος στο δεξί σκέλος της τελευταίας σχέσης είναι το ρεύμα που παράγεται από ένα «επίπεδο» κύμα ενώ ο δεύτερος έχει να κάνει με τις λεπτομέρειες του συντελεστή (41). Ένας απλός υπολογισμός θα μας δώσει

$$j(x,t) = v_0 |A|^2 + \frac{4(\Delta p)^4}{m^2\hbar^2}\frac{(x-v_0 t)t}{|f(t)|^2}|A|^2 \tag{44}$$

για να πεισθούμε ότι η συνεισφορά του είναι σχεδόν αμελητέα αν η ορμή του σωματίου είναι σχεδόν καθορισμένη.