C5.5 Consecința Ecuației Schrödinger. Densitate de Probabilitate

Dacă se consideră o regiune de volum din spaţiu, notată cu Γ_Σ, aceasta este caracterizată de densitatea de probabilitate de localizare

$$\boxed{\wp_t(\Gamma_\Sigma) = \int_{\Gamma_\Sigma} |\psi_t(\boldsymbol{r})|^2 d\boldsymbol{r}}$$

pentru un sistem electronic cu funcţia de undă normalizată

$$\boxed{1 = \int_{(\infty)} |\psi_t(\boldsymbol{r})|^2 d\boldsymbol{r}}$$

notând că atunci când tot spaţiul este implicat condiţia de normalizare nu depinde de timp. De aceea, variaţia în timp a probabilităţii $\wp(\Gamma_\Sigma)$ produce apariţia unui curent al densităţii de probabilitate

$$\boxed{\frac{d}{dt}\wp_t(\Gamma_\Sigma) = -\oint_{\Sigma} \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)d\boldsymbol{\sigma}_\Sigma}$$

unde semnul minus marchează diminuarea localizării sarcinii în regiunea Γ_Σ, și respectiv creşterea densităţii de probabilitate a sarcinii în afara acestei regiuni, asociată cu creşterea curentului densităţii de probabilitate (electronice) în regiunea complementară $(\infty \setminus \Gamma_\Sigma)$. Ecuaţia de mai sus poate fi rescrisă în forma echivalentă

$$\boxed{\frac{d}{dt}\int_{\Gamma_\Sigma} |\psi_t(\boldsymbol{r})|^2 d\boldsymbol{r} = -\oint_{\Sigma} \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)d\boldsymbol{\sigma}_\Sigma}$$

și, mai mult, prin introducerea divergenței curentului densității de probabilitate devine

$$\boxed{\int_{\Gamma_\Sigma} \frac{d}{dt}|\psi_t(\boldsymbol{r})|^2 d\boldsymbol{r} = -\int_{\Gamma_\Sigma} div\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)d\boldsymbol{r}}$$

Atunci, ecuaţia curentului densității de probabilitate este

$$\frac{d}{dt}\rho_t(\mathbf{r}) + div\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = 0$$

recunoscând că

$$\rho_t(\mathbf{r}) = |\psi_t(\mathbf{r})|^2$$

în orice regiune din spaţiu.