مکانیک کوانتومی
مفاهیم، مبانی و کاربردها

علیرضا علمائی
استادیار فیزیک دانشگاه جهرم

فهرست مطالب

فصل ۵

مکانیک موجی

در فصل قبل صورت بندی هایزنبرگ از مکانیک کوانتومی یا همان مکانیک ماتریسی را بررسی کردیم. در این فصل به صورت بندی مکانیک موجی میپردازیم که اولین بار توسط شرودینگر معرفی شد. در مکانیک موجی بجای ماتریسها و درایه های گسسته ی آنها به عنوان ضرایب بسط، با توابع موج که کمیتهایی پیوسته هستند سروکار داریم. اگرچه خواهیم دید که هردو بیان، معادل هستند. در بسیاری از مسائل رهیافت تابع موجی، از آنجا که با توابع، مشتقات و معادلات دیفرانسیل سروکار دارد، رهیافت مناسب تری است. در این فصل پس از معرفی مکانیک موجی در دو نمایش مهم موقعیت و تکانه، به حل برخی مسائل در این دو فضا خواهیم پرداخت.

۱.۵ نمایش موقعیت

تا به اینجا مشاهده پذیرهایی را در نظر گرفتیم که دارای طیفهای گسسته ای از ویژه مقادیر هستند و در نتیجه ویژه کتهای مرتبط با آنها هم گسسته و **شمارش پذیر** هستند یعنی برای مشاهده پذیر $\hat{A}$ داریم:

$$\hat{A}\,|a_n\rangle = a_n\,|a_n\rangle \ , \quad n = 1, 2, \cdots \tag{۱.۵}$$

که در اینجا هر ویژه کت را با ویژه مقدار متناظرش نشان گذاری کرده ایم. این بدین معناست که ویژه کتهای $|a_i\rangle$ شمارش پذیر هستند. البته تعداد این ویژه کتها (یا همان بعد فضای هیلبرتی که توسط آنها بسط داده میشود) میتواند متناهی یا بینهایت باشد.

اما در مکانیک کوانتومی با مشاهده پذیرهایی با طیف پیوسته هم سروکار داریم که ویژه مقادیر آنها دارای یک طیف پیوسته هستند مانند مکان x یا تکانه p_x. در نتیجه ویژه کتهای نظیر این ویژه مقادیر هم یک طیف پیوسته بوده و **شمارش ناپذیر** هستند. مثلا:

$$\hat{X}\,|x\rangle = x\,|x\rangle \ , \quad or \quad \hat{P}_x\,|p_x\rangle = p_x\,|p_x\rangle \ . \tag{۲.۵}$$

در اینجا هم مجددا هر ویژه کت را با ویژه مقدار متناظرش نشان گذاری کرده ایم. روابط مشابهی برای عملگرهای $\hat{Y}$ و $\hat{Z}$ هم وجود دارد:

$$\hat{Y}\,|y\rangle = y\,|y\rangle \ , \quad \hat{Z}\,|z\rangle = z\,|z\rangle \ . \tag{۳.۵}$$

هرکدام از ویژه کتهای $|x\rangle$، $|y\rangle$ و $|z\rangle$ متعلق به یک فضای هیلبرت بینهایت بعدی هستند. بنابراین فضای هیلبرت کت موقعیت $|\mathbf{r}\rangle$ در فضای سه بعدی، $\mathcal{H}_3$، حاصلضرب تانسوری سه فضای هیلبرت $\mathcal{H}_x$، $\mathcal{H}_y$ و $\mathcal{H}_z$ بوده

$$\mathcal{H}_3 = \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_y \otimes \mathcal{H}_z \ , \tag{۴.۵}$$

و ویژه کت $|\mathbf{r}\rangle$ حاصلضرب ویژه کتهای $|x\rangle$، $|y\rangle$ و $|z\rangle$ خواهد بود:

$$|\mathbf{r}\rangle = |x\rangle \otimes |y\rangle \otimes |z\rangle \equiv |x\rangle\,|y\rangle\,|z\rangle \equiv |x, y, z\rangle \ . \tag{۵.۵}$$

میبنیم که میتوان دو یا چند کت از فضاهای هیلبرت متفاوت را در هم ضرب تانسوری کرد و فضای هیلبرت بزرگتری ساخت. اما همانطور که در فصل (؟؟) هم گفته شد دو کت از یک فضای هیلبرت در یکدیگر قابل ضرب نیستند. در ادامه بحث را در یک بعد و روی ویژه کتهای $\hat{X}$ ادامه میدهیم. برای عملگرهای $\hat{Y}$ و $\hat{Z}$ هم مشابه است. بررسی دقیقتر مسیله در فضاهای بیش از یک بعد را در فصل (؟؟) انجام خواهیم داد.

اولین نتیجه ی حاصل از پیوسته بودن و شمارش ناپذیر بودن این ویژه کتها این است که تعداد آنها نامتناهی است و بنابراین فضای هیلبرتی که توسط این ویژه کتها بسط داده میشود (مانند فضای موقعیت x) یک فضای هیلبرت بینهایت بعدی است. در حالت گسسته هنگام شمارش از ویژه کت $|a_1\rangle$ به $|a_2\rangle$ میرفتیم و بین آنها ویژه کت دیگری نبود. (مانند شمارش اعدا طبیعی) اما در حالت پیوسته بین ویژه کت $|x\rangle$ و $|x'\rangle$ همچنان بینهایت ویژه کت دیگر مانند $|x''\rangle$ وجود دارد. (مانند اعداد حقیقی)

با توجه به معادله ویژه مقداری (۲.۵) برای مشاهده پذیرهای پیوسته، و همچنین قضیه (؟؟) نتیجه میگیریم که ویژه مقادیر آنها حقیقی و ویژه کتها دو به دو بر هم عمودند. همچنین این ویژه کتها تشکیل مجموعه کاملی از پایه های را میدهند. روابط مربوطه را میتوان به کمک روابط مشابهی که در حالت گسسته داشتیم بدست آورد:

$$\langle a_i|a_j\rangle \;=\; \delta_{ij} \;\longrightarrow\; \langle x|x'\rangle = \delta(x-x')\ , \tag{۶.۵}$$

$$\sum_{i=1}^{N} |a_i\rangle\langle a_i| \;=\; \mathbb{1} \;\longrightarrow\; \int_{-\infty}^{\infty} dx\, |x\rangle\langle x| = \mathbb{1}\ . \tag{۷.۵}$$

همچنین اصل بسط که در پایه های گسسته به شکل زیر است:

$$|\psi\rangle \;=\; \sum_{i=1}^{N} |a_i\rangle\, \langle a_i|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N} c_i\, |a_i\rangle\ \ , \tag{۸.۵}$$

در پایه های پیوسته بصورت زیر در می آید:

$$|\psi\rangle \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} dx\, |x\rangle\, \langle x|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ c(x)\, |x\rangle\ \ . \tag{۹.۵}$$

در اینجا ضریب بسط $c(x) = \langle x|\psi\rangle$ یک مجموعه ی پیوسته است و بنابراین یک تابع از متغیر پیوسته ی x است، بر خلاف ضریب بسط $c_i = \langle a_i|\psi\rangle$ که یک مجموعه ی گسسته و شمارا است.

تابع موج: عبارت $\langle x|\psi\rangle$ بیانگر دامنه ی احتمال این است که از اندازه گیری مکان $\hat{X}$ روی سامانه $|\psi\rangle$، مقدار x را برای آن بدست آوریم. مرسوم است که بجای $c(x)$ آن را به صورت زیر نشان دهیم:

$$\langle x|\psi\rangle = \psi(x)\ , \tag{۱۰.۵}$$

و به آن تابع موج گوییم. با در نظر گرفتن تحول زمانی سامانه $|\psi(t)\rangle$ خواهیم داشت:

$$\langle x|\psi(t)\rangle = \psi(x,t)\ . \tag{۱۱.۵}$$

با توجه به تعریف ارائه شده در می یابیم که این عبارت همان تابع موج معادله ی شرودینگر است. بنابراین تابع موج ضریب بسط حالت $|\psi\rangle$ ی سامانه در فضای موقعیت است یعنی

$$|\psi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \psi(x,t)\, |x\rangle\ \ . \tag{۱۲.۵}$$

با دقت در معادلات بالا تفاوت متغیرهای x و t را در می یابیم. x ویژه مقدار مشاهده پذیر $\hat{X}$ و بسط دهنده ی فضای هیلبرت سامانه است درحالیکه t تنها یک پارامتر است که تحول زمانی سامانه را توصیف میکند و ویژه مقدار مشاهده پذیر هرمیتی مانند $\hat{T}$ نیست. اما در نسبیت خاص با زمان و مکان به عنوان متغیرهایی همسان روبرو هستیم و که با موقعیت آنها در مکانیک کوانتومی متفاوت است!

دامنه ی احتمال مشاهده پذیر نیست. آنچه واقعا قابل اندازه گیری است احتمال است. در حالت گسسته مربع بزرگی دامنه ی احتمال برابر احتمال بود. با شروع از شرط بهنجارش تابع موج و تزریق رابطه تمامیت (۷.۵) داریم:

$$\begin{aligned}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle &= \langle\psi(t)|\,\mathbb{1}\,|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t)|\left(\int_{-\infty}^{\infty}dx\,|x\rangle\langle x|\right)|\psi(t)\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty}dx\,\langle\psi(t)|x\rangle\,\langle x|\psi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}dx|\psi(x,t)|^2 = 1\ .\end{aligned} \quad (۱۳.۵)$$

با توجه به اینکه تابع موج بهنجار به یک است یعنی مجموع همه احتمال ها یک خواهد بود:

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \int d\mathrm{Pr}(\psi\to x) = 1\ . \quad (۱۴.۵)$$

و با مقایسه این رابطه با رابطه ی (۱۳.۵) به این نتیجه میرسیم که

$$d\mathrm{Pr}(\psi\to x) = |\psi(x,t)|^2dx\ . \quad (۱۵.۵)$$

این رابطه بدین معناست که مربع بزرگی دامنه ی احتمال $|\psi(x,t)|^2$ کمیتی از جنس چگالی احتمال است و ضرب آن در بازه ی دیفرانسیلی dx به ما مقدار دیفرانسیلی احتمال $d\mathrm{Pr}(\psi\to x)$ را میدهد. به عبارتی در حالت پیوسته مربع بزرگی دامنه ی احتمال برابر چگالی احتمال است یعنی

$$\rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2 = \psi^*(x,t)\psi(x,t)\ . \quad (۱۶.۵)$$

همچنین در سه بعد چگالی احتمال برابر است با

$$\rho(\mathbf{r},t) = |\psi(\mathbf{r},t)|^2 = \psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)\ . \quad (۱۷.۵)$$

بنابراین احتمال یافتن ذره در بازه ی x تا $x+dx$ برابر است با

$$d\mathrm{Pr}(\psi\to(x,x+dx)) = |\rho(x,t)|^2dx\ . \quad (۱۸.۵)$$

توضیح این رابطه و تفاوت آن با حالت گسسته که در آن مربع بزرگی دامنه ی احتمال برابر خود احتمال میشود از این قرار است که در حالت پیوسته مثل $\hat{X}$، احتمال یافتن ذره در محل x برابر صفر است چراکه تعداد نقاط، حتی در یک بازه ی محدود، بینهایت و ناشمارا است و بنابراین احتمال اینکه محل ذره دقیقا در نقطه ی x باشد برابر تقسیم یک پیشامد بر بینهایت پیشامد است که صفر خواهد شد. بنابراین آنچه به عنوان احتمال دارای معنا است احتمال یافتن ذره در محل x و بازه ی dx در اطراف آن است و بنابراین چگالی احتمال معنا پیدا میکند.

با توجه به (۱۸.۵) احتمال یافتن ذره در بازه ی محدود (a,b) برابر است با

$$\mathrm{Pr}(\psi\to(a,b)) = \int_a^b dx\,|\psi(x,t)|^2\ . \quad (۱۹.۵)$$

بنابراین چون به هر حال ذره در یک جایی از فضا قرار دارد، احتمال یافتن آن در کل فضا برابر یک است و شرط بهنجارش به صورت زیر خواهد بود:

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 1 \quad\longrightarrow\quad \int_{-\infty}^{\infty}dx|\psi(x,t)|^2 = 1\ . \quad (۲۰.۵)$$

۱.۱.۵ بسط تابع موج

همانگونه که میتوان کت دلخواه $|\psi\rangle$ را بر حسب ویژه کتهای $|\phi_i\rangle$ یک مشاهده پذیر مانند $\hat{A}$ بسط داد:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N}c_i\,|\phi_i\rangle\ , \quad (۲۱.۵)$$

میتوان هر تابع موج دلخواه $\psi(x)$ را هم بر حسب ویژه توابع $\phi_i(x)$ یک مشاهده پذیر $\hat{A}$ بسط داد. کافی است بسط (۲۱.۵) را از چپ در $\langle x|$ ضرب کنیم و داریم:

$$\psi(x) = \sum_{i=1}^{N} c_i \phi_i(x) \ . \tag{۲۲.۵}$$

به طریق مشابه ضرایب بسط c_i هم بر حسب توابع موج از قرار زیر خواهند بود:

$$c_i = \langle \phi_i | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \ \phi_i^*(x)\psi(x) \ . \tag{۲۳.۵}$$

همانگونه که $\{|\phi_i\rangle\}$ها تشکیل مجموعه ی کاملی از بردارهای پایه را میدهند که فضای هیلبرت را بسط میدهند، مجموعه ی ویژه توابع $\{\phi_i(x)\}$ هم تشکیل مجموعه ی راست هنجاری از توابع را میدهند که پایه های فضای هیلبرت هستند. چراکه

$$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \delta_{ij} \implies \langle \phi_i | \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx \ \ |x\rangle\langle x| \right) |\phi_j\rangle = \delta_{ij} \ , \tag{۲۴.۵}$$

و بنابراین

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \ \phi_i^*(x)\phi_j(x) = \delta_{ij} \ , \tag{۲۵.۵}$$

که همان شرط راست هنجاری است.

۲.۱.۵ بهنجارش

اگر انتگرال (۲۰.۵) برابر یک نشود اما برابر عددی محدود مانند $\mathcal{N}$ شود یعنی:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x,t)|^2 = \mathcal{N} \ , \tag{۲۶.۵}$$

باز میتوان تابع موج را بهنجار کرد. اگر دو طرف رابطه بالا را به $\mathcal{N}$ تقسیم کنیم خواهیم داشت

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{|\psi(x,t)|^2}{\mathcal{N}} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\psi^*(x,t)}{\sqrt{\mathcal{N}}} . \frac{\psi^(x,t)}{\sqrt{\mathcal{N}}} = 1 \ . \tag{۲۷.۵}$$

بنابراین با تعریف

$$\tilde{\psi}(x,t) = \frac{\psi(x,t)}{\sqrt{\mathcal{N}}} \ , \tag{۲۸.۵}$$

میبینیم که تابع موج جدید $\tilde{\psi}(x,t)$ بهنجار است:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \left| \tilde{\psi}(x,t) \right|^2 = 1 \ . \tag{۲۹.۵}$$

اما اگر در معادله (۲۶.۵) مقدار $\mathcal{N}$ بینهایت شود یعنی

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x,t)|^2 = \infty \ , \tag{۳۰.۵}$$

تابع موج بهنجارپذیر نیست.

حال سوالی که مطرح میشود این است که در چه حالتی تابع موج بهنجارپذیر نیست. برای بررسی این موضوع مشاهده پذیر نوعی $\hat{\xi}$ با طیف ویژه مقادیر پیوسته $|\xi\rangle$ را در نظر میگیریم:

$$\hat{\xi}\,|\xi\rangle = \xi\,|\xi\rangle \ . \qquad (۳۱.۵)$$

این مشاهده پذیر میتواند هر کمیتی با طیف ویژه مقداری پیوسته باشد: مانند مکان، تکانه خطی یا حتی انرژی سامانه زمانی که دارای طیف پیوسته است مانند انرژی ذره آزاد. بسط حالت سامانه $|\psi\rangle$ در پایه های $\{|\xi\rangle\}$ از قرار زیر است:

$$|\psi\rangle = \int d\xi\,\langle\xi|\psi\rangle\,|\xi\rangle = \int d\xi\; c(\xi)\,|\xi\rangle \ . \qquad (۳۲.۵)$$

با فرض اینکه حالت سامانه بهنجار باشد داریم

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \implies \int d\xi\; c^*(\xi)c(\xi) = 1 \qquad (۳۳.۵)$$

از طرفی بسط $|\psi\rangle$ را در پایه ی پیوسته ی دیگری مانند $\{|\eta\rangle\}$ در نظر بگیرید که مجددا ویژه کتهای مشاهده پذیر $\hat{\eta}$ هستند که $\hat{\eta}$ یک مشاهده پذیر با طیف پیوسته مانند مکان، تکانه یا انرژی با طیف پیوسته باشد:

$$|\psi\rangle = \int d\eta\;\langle\eta|\psi\rangle\,|\eta\rangle = \int d\eta\; d(\eta)\,|\eta\rangle \ . \qquad (۳۴.۵)$$

حال در بسط (۳۳.۵) بجای $c(\xi) = \langle\xi|\psi\rangle$ در $|\psi\rangle$ بسط آن را در پایه های $\{|\eta\rangle\}$ از معادله (۳۴.۵) جایگذاری میکنیم:

$$\begin{aligned}\int d\xi\; c^*(\xi)c(\xi) &= \int d\xi\; c^*(\xi)\,\langle\xi|\psi\rangle = \int d\xi\; c^*(\xi)\,\langle\xi|\int d\eta\; d(\eta)\,|\eta\rangle \\ &= \int d\xi\;\int d\eta\; c^*(\xi)d(\eta)\,\langle\xi|\eta\rangle \ . \end{aligned} \qquad (۳۵.۵)$$

عبارت $\langle\xi|\eta\rangle$ بیانگر دامنه ی احتمال این است که از اندازه گیری کمیت $\hat{\xi}$ روی حالتی با مقدار مشخص η (یعنی روی ویژه حالت مشاهده پذیر $\hat{\eta}$ با ویژه مقدار η)، مقدار ξ را بدست آوریم (یعنی به ویژه حالت $|\xi\rangle$ از مشاهده پذیر $\hat{\xi}$ برویم). مزدوج مختلط آن، یعنی $\langle\eta|\xi\rangle$ هم تعریفی مشابه دارد با این تفاوت که جای η و ξ عوض میشود. بنابراین با توجه به پیوسته بودن طیف $\hat{\eta}$، عبارت $\langle\xi|\eta\rangle = \langle\eta|\xi\rangle^*$ یک تابع موج است که آن را با $\varphi_\eta(\xi)$ نشان میدهیم. بنابراین با جایگذاری آن در رابطه (۳۵.۵) داریم:

$$\int d\xi\; c^*(\xi)c(\xi) = \int d\xi\;\int d\eta\; c^*(\xi)d(\eta)\varphi_\xi^*(\eta) \ . \qquad (۳۶.۵)$$

با مقایسه سمت راست و چپ رابطه بالا خواهیم داشت:

$$c(\xi) = \langle\xi|\psi\rangle = \int d\eta\; d(\eta)\varphi_\xi^*(\eta) = \int d\eta\;\langle\eta|\psi\rangle\,\varphi_\xi^*(\eta) \ . \qquad (۳۷.۵)$$

حال با جایگذاری $|\psi\rangle$ از بسط (۳۲.۵) در رابطه بالا داریم:

$$c(\xi) = \int d\eta\;\langle\eta|\int d\xi'\; c(\xi')\,|\xi'\rangle\,\varphi_\xi^*(\eta) = \int d\xi' c(\xi')\int d\eta\,\langle\eta|\xi'\rangle\,\varphi_\xi^*(\eta) \ . \qquad (۳۸.۵)$$

با جایگذاری $\varphi_{\xi'}(\eta) = \langle\eta|\xi'\rangle$ خواهیم داشت:

$$c(\xi) = \int d\xi'\; c(\xi')\left[\int d\eta\;\varphi_\xi^*(\eta)\varphi_{\xi'}(\eta)\right] . \qquad (۳۹.۵)$$

واضح است که عبارت داخل کروشه باید برابر $\delta(\xi-\xi')$ باشد یعنی:

$$\int d\eta\;\varphi_\xi^*(\eta)\varphi_{\xi'}(\eta) = \delta(\xi-\xi') \ . \qquad (۴۰.۵)$$

معنای این عبارت این است که به ازای $\xi \neq \xi'$ مقدار انتگرال صفر شده یعنی توابع موج $\varphi_\xi(\eta)$ بر هم عمودند ولی برای $\xi = \xi'$ مقدار انتگرال بینهایت شده و قابل بهنجارشدن نیست. به عبارتی:

توابع موج مشاهده پذیرهای با طیف پیوسته بهنجار پذیر نیستند.

یا به عبارت دقیق تر:

ضرایب بسط هر مشاهده پذیری با طیف پیوسته (مثلا $\hat{\xi}$) در پایه های مشاهده پذیر دیگری با طیف پیوسته (مثلا $\hat{\eta}$)، بهنجارپذیر نیستند.

نتیجه ۱.۵. انتظار داریم تابع موج $\hat{P}_x$ در پایه های $\hat{X}$ بهنجار پذیر نباشد؛ و برعکس.

نتیجه ۲.۵. تابع موج $\psi(x)$ که ویژه حالت هامیلتونی و جواب معادله شرودینگر است برای حالتی که طیف انرژی پیوسته است بهنجار پذیر نیست.

در چنین حالتهایی ما به جای احتمال از نسبت احتمالها صحبت میکنیم. یعنی اگر $\psi(x)$ بهنجار پذیر نباشد، $|\psi(x)|^2dx$ بیانگر احتمال یافتن ذره در بازه ی x تا $x+dx$ نیست. اما نسبت

$$\frac{\Pr(\psi\to x')}{\Pr(\psi\to x'')}=\frac{|\psi(x')|^2}{|\psi(x'')|^2}\,, \tag{۴۱.۵}$$

همچنان نسبت احتمال یافتن ذره در x' به احتمال یافتن ذره در x'' را میدهد.

۳.۱.۵ نمایش عملگر مکان در پایه های مکان

در فصل قبل دیدیم که نمایش عملگر در پایه های گسسته بصورت ماتریس مربعی است و اگر پایه های فضا، ویژه کتهای خود عملگر باشند، یعنی عملگر در پایه های خودش بسط داده شده باشد، نمایش ماتریسی آن ساده و قطری بوده و عناصر روی قطر اصلی ویژه مقادیر خواهند بود. در غیر این صورت نمایش ماتریسی قطری نیست. نمایش عملگر در پایه های پیوسته هم تا حدی به همین صورت است. یعنی اگر عملگر در پایه های خودش بسط داده شود شکل ساده ای خواهد داشت.

عملگر $\hat{X}$ را در نظر بگیرید. اگر پایه های فضا ویژه کتهای این عملگر یعنی $\{|x\rangle\}$ باشند نمایش عملگر در این پایه ها بصورت زیر خواهد بود:

$$\hat{X}=\mathbb{1}\hat{X}\mathbb{1}=\int_{-\infty}^{\infty}dx\,|x\rangle\langle x|\,\hat{X}\int_{-\infty}^{\infty}dx'\,|x'\rangle\langle x'|=\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}dx'\,\langle x|\hat{X}|x'\rangle\,|x\rangle\langle x'|\ . \tag{۴۲.۵}$$

با توجه به رابطه ی ویژه مقداری (۲.۵) و رابطه ی راست هنجاری (۶.۵) خواهیم داشت:

$$\hat{X}=\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}dx'x'\delta(x-x')\,|x\rangle\langle x'|=\int_{-\infty}^{\infty}dx\;x\,|x\rangle\langle x|\ . \tag{۴۳.۵}$$

از تساوی آخر عبارت بالا واضح است که فقط قطر اصلی $|x\rangle\langle x|$ غیر صفر بوده و عنصر روی آن ویژه مقدار x است. البته در حالت پیوسته درایه ها شمارا نیستند و ما کمیتی پیوسته روبرو هستیم که با توجه به رابطه تمامیت (۷.۵) میتوانیم نتیجه بگیریم که عملگر $\hat{X}$ در پایه های خودش به شکل ساده ی پارامتر x خواهد بود یعنی

$$\hat{X}\doteq x\ ,\quad \text{پایه های فضا}\ :\ \{|x\rangle\} \tag{۴۴.۵}$$

۴.۱.۵ نمایش عملگر تکانه در پایه های مکان

اگر عملگری در پایه هایی به جز پایه های خودش بسط داده شود شکل آن بسادگی (۴۴.۵) نخواهد بود. به عنوان یک مثال بسیار مهم نمایش عملگر تکانه را در پایه های مکان بدست می آوریم. نکته بسیار مهم این است که ما در مکانیک کوانتومی هیچ تعریفی برای تکانه (و بسیار از کمیتهای دیگر) نداریم و مجبوریم تعریف تکانه را از مکانیک کلاسیک قرض بگیریم و سپس آن را کوانتیده کنیم. به همین دلیل است که همانگونه که در بخش (؟؟) درباره آن صحبت شد، مکانیک کوانتومی به عنوان یک نظریه ی جامع، به مکانیک کلاسیک به عنوان یک حالت حدی از خودش نیاز دارد. این بدان علت است که ما به عنوان موجوداتی بزرگ مقیاس هیچ تجربه ی مستقیمی در مقیاسهای اتمی و زیر اتمی نداشته و تمامی کمیتهایی مانند تکانه، انرژی، سرعت و ... که برای توصیف طبیعت ساخته ایم مناسب جهان بزرگ مقیاس است و لزوما کمیتهای مناسبی برای توصیف جهان ریزمقیاس اتمی

و زیراتمی نیستند. بنابراین چاره ای جز استفاده از تعریف تکانه خطی در مکانیک کلاسیک برای ساختن نسخه ی کوانتومی آن نداریم. به قول جولین شویینگر: برای ویژگیهای اساسی، ما تنها نام کمیتها را از فیزیک کلاسیک قرض میگیریم.

همانگونه که در فصل ۱ دیدیم، در مکانیک کلاسیک تکانه به عنوان کمیتی که تحت انتقال سامانه (که نتیجه ی همگنی فضا است) پایسته است، یا به صورت معادل، به عنوان کمیتی که مولد انتقال است تعریف میشود. بنابراین در اینجا هم از همین مفهوم استفاده کرده و **تعریف میکنیم** که تکانه خطی مولد انتقال باشد. بنابراین اگر عملگر $\hat{\mathcal{T}}(a)$ مولد انتقال سامانه به اندازه ی a باشد داریم:

$$\hat{\mathcal{T}}(a)\,|x\rangle = |x+a\rangle \ , \tag{۴۵.۵}$$

و بنابراین تابع موج انتقال یافته بصورت زیر خواهد بود:

$$\psi(x+a) = \langle x+a|\psi\rangle = \langle x|\hat{\mathcal{T}}^\dagger(a)|\psi(t)\rangle \tag{۴۶.۵}$$

برای اینکه حالت سامانه پس از انتقال همچنان بهنجار باشد لازم است که عملگر انتقال یکانی باشد یعنی:

$$\hat{\mathcal{T}}(a)^\dagger\hat{\mathcal{T}}(a) = \mathbb{1} \ . \tag{۴۷.۵}$$

تمرین ۱.۵. ثابت کنید برای اینکه حالت سامانه پس از انتقال همچنان بهنجار باشد لازم است که عملگر انتقال یکانی باشد. □

حال فرض کنیم مقدار a بینهایت کوچک و برابر δx باشد. میتوان عملگر انتقال برای مقدار بینهایت کوچک δx را بصورت زیر نوشت:

$$\hat{\mathcal{T}}(\delta x) = \mathbb{1} - i\hat{K}_x\delta x \ . \tag{۴۸.۵}$$

این بسط را بدین صورت میتوان توجیه نمود که با صفر بودن δx هیچ انتقالی اتفاق نمی افتد و عملگر انتقال به عملگر واحد تبدیل میشود. بنابراین عبارت دوم بیانگر مقدار انتقال است و باید شامل عملگری مثل $\hat{K}_x$ باشد که این کار را انجام بدهد. همچنین باید متناسب با δx یعنی مقدار انتقال باشد. ضریب i برای این معرفی شده که $\hat{K}$ هرمیتی باشد.

تمرین ۲.۵. ثابت کنید برای این که عملگر $\hat{\mathcal{T}}(dx)$ یکانی باشد لازم است که عملگر $\hat{K}$ هرمیتی باشد. □

با توجه به اینکه مولد انتقال، تکانه ی خطی است، لازم است عملگر هرمیتی $\hat{K}$ متناسب با عملگر تکانه خطی باشد و این ثابت تناسب لازم است ثابتی جهانی باشد. بعد $\hat{K}$ از جنس عکس طول است. بنابراین

$$\hat{K}_x = \frac{\hat{P}_x}{\text{ثابتی جهانی از جنس تکانه ی زاویه ای}} \ . \tag{۴۹.۵}$$

این ثابت جهانی با توجه به اصل تطابق بوهر چیزی جز ثابت پلانک، $\hbar$، نخواهد بود. بنابراین داریم:

$$\hat{P}_x = \hbar\hat{K}_x \ , \tag{۵۰.۵}$$

و عملگر انتقال بصورت زیر خواهد بود:

$$\hat{\mathcal{T}}(\delta x) = \mathbb{1} - i\frac{\hat{P}_x\delta x}{\hbar} \ . \tag{۵۱.۵}$$

حال جابجایی بین $\hat{\mathcal{T}}(dx)$ و $\hat{X}$ را بدست می آوریم که به یک رابطه بسیار مهم و بنیادی منجر میشود:

$$\begin{aligned}\left[\hat{X},\hat{\mathcal{T}}(\delta x)\right]|x\rangle &= \hat{X}\hat{\mathcal{T}}(\delta x)\,|x\rangle - \hat{\mathcal{T}}(\delta x)\hat{X}\,|x\rangle = \hat{X}\,|x+\delta x\rangle - x\hat{\mathcal{T}}(\delta x)\,|x\rangle \\ &= (x+\delta x)\,|x+\delta x\rangle - x\,|x+\delta x\rangle = \delta x\,|x+\delta x\rangle \simeq \delta x\,|x\rangle \ . \end{aligned} \tag{۵۲.۵}$$

بنابراین داریم

$$\Big[\hat{X},\hat{\mathcal{T}}(\delta x)\Big]=-i\hat{X}\frac{\hat{P}_x}{\hbar}\delta x+i\frac{\hat{P}_x}{\hbar}\hat{X}\delta x=\delta x\ , \qquad (۵۳.۵)$$

که میدهد

$$\Big[\hat{X},\hat{P}_x\Big]=i\hbar\ . \qquad (۵۴.۵)$$

این رابطه که **مستقل از نمایش و کاملا کلی** است یکی از مهمترین روابط جابجایی در مکانیک کوانتومی است به قسمی که کوانتیده کردن یک سامانه معادل است با برقراری رابطه جابجایی بین عملگرهای مکان و تکانه در آن سامانه. روابط مشابهی بین مولفه های مکان و تکانه در جهتهای y و z هم برقرار است. البته عملگر مکان $\hat{X}$ با تکانه $\hat{P}_y$ یا $\hat{P}_z$ جابجا میشود. بنابراین روابط جابجایی از قرار زیر خواهند بود:

$$\Big[\hat{X}_i,\hat{P}_j\Big]\ \ =\ \ i\hbar\delta_{ij}\ , \qquad (۵۵.۵)$$

که اندیسهای i و j بیانگر مولفه های x و y و z هستند. عملگرهای تکانه ی $\hat{P}_x$، $\hat{P}_y$ و $\hat{P}_z$ هم با یکدیگر جابجا میشوند. چراکه انتقال در راستاهای x و y و z جابجا پذیر هستند. بنابراین:

$$\Big[\hat{P}_i,\hat{P}_j\Big]\ \ =\ \ 0\ . \qquad (۵۶.۵)$$

تمرین ۳.۵. با شروع از رابطه جابجایی $\Big[\hat{\mathcal{T}}(\delta x),\hat{\mathcal{T}}(\delta y)\Big]$ و تاثیر آن روی حالت $|x,y\rangle$ ثابت کنید $\Big[\hat{P}_x,\hat{P}_y\Big]=0$. □

به طریق مشابه میتوان ثابت کرد که عملگرهای مکان هم با یکدیگر جابجا میشوند یعنی $\Big[\hat{X},\hat{Y}\Big]=0$ یا به عبارت کلی:

$$\Big[\hat{X}_i,\hat{X}_j\Big]\ \ =\ \ 0\ . \qquad (۵۷.۵)$$

حال برای اینکه نمایش تکانه در پایه های مکان را بدست آوریم، عملگر انتقال $\hat{\mathcal{T}}(\delta x)=\mathbb{1}-i\hat{P}_x\delta x/\hbar$ را بر بروی کت حالت سامانه، $|\psi\rangle$، تاثیر داده و برای اینکه به پایه های مکان برویم رابطه تمامیت در پایه مکان را در آن تزریق میکنیم:

$$\begin{aligned}\Big(\mathbb{1}-i\frac{\hat{P}_x\delta x}{\hbar}\Big)|\psi\rangle\ \ &=\ \ \hat{\mathcal{T}}(\delta x)\Big(\int_{-\infty}^{\infty}dx\,|x\rangle\langle x|\Big)|\psi\rangle\\ &=\ \ \int_{-\infty}^{\infty}dx\,|x+\delta x\rangle\,\langle x|\psi\rangle\\ &=\ \ \int_{-\infty}^{\infty}dx\,|x\rangle\,\langle x-\delta x|\psi\rangle\\ &=\ \ \int_{-\infty}^{\infty}dx\,|x\rangle\,\psi(x-\delta x)\ .\end{aligned} \qquad (۵۸.۵)$$

حال تابع موج $\psi(x-\delta x)$ را حول x بسط میدهیم:

$$\begin{aligned}\psi(x-\delta x)\ \ &=\ \ \psi(x)-\delta x\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)+O(\delta x^2)\\ &=\ \ \langle x|\psi\rangle-\delta x\frac{\partial}{\partial x}\langle x|\psi\rangle=\Big(1-\delta x\frac{\partial}{\partial x}\Big)\langle x|\psi\rangle\ .\end{aligned} \qquad (۵۹.۵)$$

با جایگذاری (۵۹.۵) در (۵۸.۵) داریم:

$$\hat{P}_x|\psi\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}dx\,|x\rangle\Big(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Big)\langle x|\psi\rangle\ , \qquad (۶۰.۵)$$

و با ضرب دو طرف تساوی در $\langle x'|$ خواهیم داشت:

$$\langle x'|\hat{P}_x|\psi\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\psi\rangle \ . \tag{۶۱.۵}$$

رابطه (۶۱.۵) بوضوح نمایش عملگر تکانه را در پایه های مکان نشان میدهد:

$$\hat{P}_x \doteq -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \ , \quad \text{پایه های فضا} \ : \ \{|x\rangle\} \ . \tag{۶۲.۵}$$

۵.۱.۵ تابع موج تکانه در پایه های مکان

حال که نمایش عملگر تکانه را در فضای مکان بدست آوردیم میتوانیم تابع موج تکانه، $\langle x|p_x\rangle = \varphi_p(x)$، در فضای مکان را بدست آوریم. با شروع از معادله ویژه مقداری عملگر $\hat{P}_x$

$$\hat{P}_x|p_x\rangle = p_x|p_x\rangle \ , \tag{۶۳.۵}$$

و ضرب طرفین در $\langle x|$ و قرار دادن $\langle x|p_x\rangle = \varphi_p(x)$ داریم

$$\langle x|\hat{P}_x|p_x\rangle = p_x\langle x|p_x\rangle \implies \hat{P}_x\varphi_p(x) = p_x\varphi_p(x). \tag{۶۴.۵}$$

با استفاده از نمایش عملگر $\hat{P}_x$ در فضای مکان (۶۲.۵) خواهیم داشت

$$-i\hbar\frac{d\varphi_p(x)}{dx} = p_x\varphi_p(x) \ . \tag{۶۵.۵}$$

با حل این معادله خواهیم داشت:

$$\varphi_p(x) = Ce^{ip_xx/\hbar} \ , \tag{۶۶.۵}$$

که ضریب C ثابتی است که باید از شرط بهنجارش بدست آید؛ دقیقا مشابه حل معادلات ویژه مقداری در مکانیک ماتریسی که همواره پس از حل معادله، یک ضریب ثابت در ویژه کت وجود خواهد داشت که باید از شرط بهنجارش بدست آید. بنابراین با توجه به (۲۰.۵) داریم

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} dx\varphi_p^*(x)\varphi_p(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} dxC^*e^{-ip_xx/\hbar}Ce^{ip_xx/\hbar} \\ &= |C|^2\int_{-\infty}^{\infty} dx = |C|^2[\infty-(-\infty)] = |C|^2(\infty) = \infty \ .\end{aligned} \tag{۶۷.۵}$$

بینهایت شدن جواب انتگرال بالا بوضوح به ما میگوید که تابع موج تکانه در فضای مکان بهنجارپذیر نیست. این نتیجه با رابطه (۴۰.۵) و نتیجه (۱.۵) همخوان است.

ضریب بهنجارش C را اگرچه نمیتوان از شرط بهنجارش بدست آورد، اما رابطه (۴۰.۵) و نمایش انتگرالی تابع دلتا به ما کمک میکند که بتوانیم ضریب C را بدست آوریم، اگرچه همچنان تابع موج بهنجارپذیر نخواهد بود.

نمایش انتگرالی تابع دلتای دیراک از قرار زیر است:

$$\delta(k-k') = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dx \ e^{(k-k')x} \ . \tag{۶۸.۵}$$

در سمت چپ رابطه (۶۷.۵) تکانه ها را متفاوت قرار میدهیم و با جایگذاری از رابطه (۶۸.۵) داریم

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} dx \ \varphi_{p'}^*(x)\varphi_p(x) &= |C|^2\int_{-\infty}^{\infty} dx \ e^{i(p-p')x/\hbar} = |C|^2(2\pi)\delta\Big(\frac{p-p'}{\hbar}\Big) \\ &= |C|^2 2\pi\hbar\delta(p-p') \ .\end{aligned} \tag{۶۹.۵}$$

در تساوی آخر از ویژگی

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x) \ , \tag{۷۰.۵}$$

تابع دلتای دیراک استفاده کرده ایم. بنابراین با انتخاب $C = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$ داریم

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \ \varphi^*_{p'}(x)\varphi_p(x) = \delta(p - p') \ , \tag{۷۱.۵}$$

که بدین معناست که

$$\varphi_p(x) = \langle x|p_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \, e^{ip_x x/\hbar} \ . \tag{۷۲.۵}$$

واضح است که تابع موج مکان در فضای تکانه یا $\langle p_x|x\rangle$ مزدوج مختلط رابطه ی بالاست یعنی:

$$\varphi_x(p_x) = \langle p_x|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \, e^{-ip_x x/\hbar} \ . \tag{۷۳.۵}$$

رابطه (۷۲.۵) در سه بعد از قرار زیر است:

$$\varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \ . \tag{۷۴.۵}$$

جدای از اثباتی که در رابطه (۶۷.۵) برای بهنجارناپذیر بودن تابع موج تکانه در فضای مکان ارائه شد، میتوان یک دلیل فیزیکی هم برای آن بیان کرد. تابع موج $\varphi_p(x) = \langle x|p_x\rangle$ بیانگر این است که حالت اولیه سامانه قبل از اندازه گیری، $|p_x\rangle$، دارای تکانه ی مشخص p_x است. پس از اندازه گیری حالت سامانه دارای مکان معین x یعنی $|x\rangle$ است. بنابراین ما درباره دامنه احتمال اینکه حالتی با تکانه معین دارای مکان معینی باشد صحبت میکنیم که بوضوح با اصل عدم قطعیت در تناقض است. چراکه نمیتوان همزمان مکان و تکانه سامانه را تعیین کرد. پس به عبارتی بهنجارناپذیر بودن $\varphi_p(x)$ هزینه ای است که اصل عدم قطعیت بر ما تحمیل میکند!

۶.۱.۵ پاریته

حال که پایه های مکان را شناختیم، مناسب است که عملگر پاریته[۱] یا وارونی فضا را که با $\hat{\pi}$ نشان میدهیم[۲] معرفی کنیم. این عملگر روی ویژه کتهای $|x\rangle$ اثر میکند که با توجه به تعریف وارونی فضا داریم:

$$\hat{\pi}\,|x\rangle = |-x\rangle \ , \tag{۷۵.۵}$$

و در سه بعد بصورت زیر خواهد بود:

$$\hat{\pi}\,|\mathbf{r}\rangle = |-\mathbf{r}\rangle \ . \tag{۷۶.۵}$$

دقت داشته باشید که $|-x\rangle$ برابر با $(-|x\rangle)$ نیست چراکه این دو ویژه کت به ترتیب مربوط به دو نقطه ی متفاوت x و $(-x)$ از فضا هستند. البته واضح است که $\hat{\pi}$ باید یکانی باشد. چراکه با وارونی فضا بقای احتمال همچنان برقرار است. حال اگر پاریته را دوبار روی $|x\rangle$ تاثیر دهیم باید به خودش نظیر شود یعنی

$$\hat{\pi}^2\,|x\rangle = \hat{\pi}\,|-x\rangle = |x\rangle \ , \tag{۷۷.۵}$$

و بنابراین داریم

$$\hat{\pi}^2 = \mathbb{1} \ , \tag{۷۸.۵}$$

[۱] Parity

[۲] برخی کتابها عملگر پاریته را با $\hat{P}$ یا $\hat{\mathcal{P}}$ نشان میدهند. ما برای اینکه با عملگر تکانه اشتباه نشود از نماد $\hat{\pi}$ استفاده کرده ایم.

که بدین معناست که $\hat{\pi}=\hat{\pi}^{-1}$ و چون پاریته یکانی است نتیجه میگیریم که باید هرمیتی هم باشد یعنی

$$\hat{\pi}=\hat{\pi}^{\dagger}\ . \qquad (۷۹.۵)$$

به عبارتی پاریته یک مشاهده پذیر است. از رابطه (۷۸.۵) مشخص است که ویژه مقادیر عملگر پاریته باید ± 1 باشد. به ویژه کتهای پاریته با ویژه مقدار $+1$ پاریته زوج و با ویژه مقدار -1 پاریته فرد گویند. به عبارتی اگر $|\alpha\rangle$ ویژه کت پاریته باشد داریم

$$\hat{\pi}\,|\alpha\rangle=\pm\,|\alpha\rangle\ , \qquad (۸۰.۵)$$

که علامت مثبت برای ویژه کتهای با پاریته زوج و علامت منفی برای ویژه کتهای با پاریته فرد است. به طریق مشابه $\langle x|\alpha\rangle=\alpha(x)$ هم ویژه تابع پاریته خواهد بود.

حال تابع موج دلخواه $\langle x|\psi\rangle=\psi(x)$ را در نظر بگیرید. تابع موج حالت وارونی فضای آن از قرار زیر است:

$$\langle x|\hat{\pi}|\psi\rangle=\langle -x|\psi\rangle=\psi(-x)\ . \qquad (۸۱.۵)$$

در حالت کلی $\psi(x)$ ویژه تابع پاریته نیست مگر اینکه $|\psi\rangle$ ویژه کت پاریته باشد که در این صورت اگر $\psi(x)$ تابعی زوج باشد ویژه حالت پاریته با ویژه مقدار $+1$ و اگر تابعی فرد باشد ویژه حالت پاریته با ویژه مقدار -1 خواهد بود:

$$\hat{\pi}\psi(x)=\psi(-x)=\begin{cases}+\psi(x)\ , & \text{پاریته زوج}\\ -\psi(x)\ . & \text{پاریته فرد}\end{cases} \qquad (۸۲.۵)$$

جهانشمولی پاریته:....

۲.۵ معادله شرودینگر در نمایش مکان

در فصل (؟؟) گفتیم که اصل موضوع پنجم مکانیک کوانتومی تحول زمانی کت حالت سامانه را بدست میدهد:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi(t)\rangle=\hat{H}\,|\psi(t)\rangle \qquad (۸۳.۵)$$

که به آن معادله شرودینگر گوییم. برای اینکه این معادله را در پایه های مکان بیان کنیم دو طرف معادله را در $\langle x|$ ضرب میکنیم. فعلا حالت یک بعدی را در نظر میگیریم. تعمیم به حالت سه بعدی سرراست است. بنابراین

$$i\hbar\,\langle x|\,\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi(t)\rangle=\ \langle x|\hat{H}|\psi(t)\rangle\ \ . \qquad (۸۴.۵)$$

برای رفتن به پایه های مکان رابطه تمامیت در پایه مکان یعنی معادله (۷.۵) را در سمت راست معادله بالا تزریق میکنیم:

$$\begin{aligned}\langle x|H|\psi(t)\rangle &= \langle x|\,\hat{H}\left(\int_{-\infty}^{\infty}dx'\ \ |x'\rangle\langle x'|\right)|\psi(t)\rangle\\ &= \int_{-\infty}^{\infty}dx'\,\langle x|\hat{H}|x'\rangle\,\psi(x',t)\ .\end{aligned} \qquad (۸۵.۵)$$

عبارت $\langle x|\hat{H}|x'\rangle$ چیزی جز نمایش عملگر هامیلتونی در پایه مکان نیست. با توجه به اینکه $\hat{H}=\hat{K}+\hat{V}$ داریم

$$\langle x|\hat{H}|x'\rangle=\ \langle x|\hat{K}|x'\rangle+\ \langle x|\hat{V}|x'\rangle=\frac{1}{2m}\,\langle x|\hat{P}_x^2|x'\rangle+\ \langle x|\hat{V}(\hat{X},t)|x'\rangle\ \ , \qquad (۸۶.۵)$$

که جملات اول و دوم در تساوی آخر به ترتیب عناصر ماتریسی عملگرهای انرژی جنبشی و انرژی پتانسیل در نمایش مکان هستند. نمایش تکانه در پایه های مکان را در رابطه (۶۲.۵) نشان دادیم و بنابراین نمایش انرژی جنبشی در پایه مکان برابر است با

$$\hat{K}=\frac{\hat{P}_x^2}{2m}\doteq-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\ ,\quad \text{پایه های فضا}\ :\ \ \{|x\rangle\}\ . \qquad (۸۷.۵)$$

همچنین از آنجا که نمایش عملگر مکان $\hat{X}$ در پایه های مکان برابر پارامتر x است بنابراین هر تابعی از عملگر مکان هم چنین خواهد بود از جمله برای انرژی پتانسیل:

$$\hat{V}(\hat{X},t) \doteq V(x,t)\ , \quad \text{پایه های فضا}:\ \{|x\rangle\}\ . \tag{۸۸.۵}$$

سمت چپ معادله (۸۴.۵) هم از قرار زیر خواهد بود:

$$i\hbar\,\langle x|\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,\langle x|\psi(t)\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)\ . \tag{۸۹.۵}$$

نهایتا با تجمیع روابط بالا معادله شرودینگر در پایه های مکان در یک بعد به صورت زیر خواهد بود:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\psi(x,t)\ , \tag{۹۰.۵}$$

که دقیقا همان معادله ایست که شرودینگر، ولی با دیدگاهی کمتر بنیادی، بدست آورد و در بخش (؟؟) بیان شد. تعمیم به سه بعد بسیار ساده است و به نتیجه زیر میرسد:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2\psi(\mathbf{r},t) + V(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)\ . \tag{۹۱.۵}$$

۱.۲.۵ بقای احتمال

چون ذره خودبخود از بین نمیرود، با گذشت زمان همچنان در یک جایی از فضا قرار دارد و بنابراین احتمال یافتن آن در یک جایی از فضا یک است. به عبارتی

$$\frac{d}{dt}\int d^3r|\psi(\mathbf{r},t)|^2 = \frac{d}{dt}(1) = 0\ . \tag{۹۲.۵}$$

بنابراین

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\int d^3r|\psi(\mathbf{r},t)|^2 &= \frac{d}{dt}\int d^3r\psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)\\ &= \int d^3r\Big(\frac{\partial\psi^*(\mathbf{r},t)}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) + \psi^*(\mathbf{r},t)\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t}\Big) = 0\ .\end{aligned} \tag{۹۳.۵}$$

معادله ی شرودینگر برای $\psi(\mathbf{r},t)$ و $\psi^*(\mathbf{r},t)$ از قرار زیر است:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2\psi(\mathbf{r},t) + V(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)\ , \tag{۹۴.۵}$$

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^*(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2\psi^*(\mathbf{r},t) + V(\mathbf{r},t)\psi^*(\mathbf{r},t)\ . \tag{۹۵.۵}$$

با ضرب دو معادله ی بالا به ترتیب در $\psi^*(\mathbf{r},t)$ و $\psi(\mathbf{r},t)$ داریم:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t}\psi^*(\mathbf{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*(\mathbf{r},t)\boldsymbol{\nabla}^2\psi(\mathbf{r},t) + V(\mathbf{r},t)\psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)\ , \tag{۹۶.۵}$$

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^*(\mathbf{r},t)}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi(\mathbf{r},t)\boldsymbol{\nabla}^2\psi^*(\mathbf{r},t) + V(\mathbf{r},t)\psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)\ . \tag{۹۷.۵}$$

حال با کم کردن دو معادله ی بالا از هم داریم:

$$\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t}\psi^*(\mathbf{r},t) + \frac{\partial\psi^*(\mathbf{r},t)}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) = \frac{i\hbar}{2m}\Big(\psi^*(\mathbf{r},t)\boldsymbol{\nabla}^2\psi(\mathbf{r},t) - \psi(\mathbf{r},t)\boldsymbol{\nabla}^2\psi^*(\mathbf{r},t)\Big)\ . \tag{۹۸.۵}$$

با توجه به تعریف چگالی احتمال (۱۷.۵)

$$\rho(\mathbf{r},t) = |\psi(\mathbf{r},t)|^2 = \psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)\ , \tag{۹۹.۵}$$

میتوانیم معادله ی (۹۸.۵) را به شکل زیر بنویسیم:

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\boldsymbol{\nabla}\cdot\Big(\psi^*(\mathbf{r},t)\boldsymbol{\nabla}\psi(\mathbf{r},t) - \psi(\mathbf{r},t)\boldsymbol{\nabla}\psi^*(\mathbf{r},t)\Big)\ . \tag{۱۰۰.۵}$$

با تعریف بردار چگالی جریان احتمال $\mathbf{j}(\mathbf{r},t)$ به صورت

$$\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = \frac{i\hbar}{2m}\Big(\psi(\mathbf{r},t)\boldsymbol{\nabla}\psi^*(\mathbf{r},t) - \psi^*(\mathbf{r},t)\boldsymbol{\nabla}\psi(\mathbf{r},t)\Big)\ , \tag{۱۰۱.۵}$$

معادله ی (۱۰۰.۵) به صورت زیر نوشته میشود:

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = 0\ , \tag{۱۰۲.۵}$$

که به آن **معادله ی پیوستگی**[۳] گویند که شبیه معادله ی پیوستگی در الکترومغناطیس که بیانگر قانون بقای بار است میباشد. معادله ی (۱۰۲.۵) بیان ریاضیاتی قانون بقای احتمال است و بدین معنی است که اگر در نقطه ای از فضا چگالی احتمال یافتن ذره کاهش (افزایش) یابد، این تغییر احتمال توسط چگالی جریان احتمال شارش یافته و در محل دیگری با افزایش (کاهش) چگالی احتمال روبرو خواهیم بود به قسمی که همچنان احتمال یافتم ذره در تمام فضا برابر یک باشد.

۲.۲.۵ معادله شرودینگر مستقل از زمان

در معادله (۹۰.۵) اگر انرژی پتانسیل مستقل از زمان باشد یعنی $V(x,t) = V(x)$، میتوان تابع موج $\psi(x,t)$ بصورت حاصلضرب تابعی از x در تابعی از t نوشت:

$$\psi(x,t) = \psi(x)f(t)\ . \tag{۱۰۳.۵}$$

در اینجا قسمت وابسته به مکان را مجددا با ψ نشان داده ایم. تفاوت با تابع موج وابسته به زمان از روی متغیرها قابل تشخیص است. با جایگذاری (۱۰۳.۵) در معادله (۹۰.۵) خواهیم داشت:

$$i\hbar\psi(x)\frac{df(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}f(t)\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x)f(t)\ . \tag{۱۰۴.۵}$$

با تقسیم معادله بالا بر $\psi(x)f(t)$ و کمی ضرب و تقسیم داریم:

$$i\hbar\frac{1}{f(t)}\frac{df(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\ . \tag{۱۰۵.۵}$$

سمت راست و چپ معادله بالا تابعی از دو متغیر متفاوت هستند اما همواره با هم برابرند. تنها حالتی که این برابری برای تمامی مقادیر x و t برقرار باشد این است که هردو طرف معادله برابر عددی ثابت باشند. از تحلیل ابعادی جملات این معادله واضح است که این عدد باید از جنس انرژی باشد. بنابراین آن را با E نشان میدهیم و داریم:

$$i\hbar\frac{1}{f(t)}\frac{df(t)}{dt} = E\ , \tag{۱۰۶.۵}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x) = E\ . \tag{۱۰۷.۵}$$

[۳] continuity equation

با حل معادله (۱۰۶.۵) خواهیم داشت

$$f(t) = Ce^{-iEt/\hbar} \,, \tag{۱۰۸.۵}$$

که C ثابت انتگرال گیری است و بعدا میتواند از بهنجارش تعیین شود. معادله (۱۰۶.۵) هم برابر خواهد بود با

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \,. \tag{۱۰۹.۵}$$

این معادله را معادله شرودینگر مستقل از زمان گوییم و در سه بعد به شکل زیر خواهد بود:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2\psi(\mathbf{r},t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \,. \tag{۱۱۰.۵}$$

اگر انرژی پتانسیل ذره فقط به یک مختصه (مثلا x) بستگی داشته باشد یا بتوان آن را بصورت جمع سه تابع جداگانه از مختصه ها به شکل زیر نوشت:

$$V(\mathbf{r}) = V(x,y,z) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z) \,, \tag{۱۱۱.۵}$$

میتوان معادله شرودینگر (۱۱۰.۵) در سه بعد را به سه معادله شرودینگر (۱۰۹.۵)، برای مختصه های جداگانه ی x و y و z تبدیل کرد. بنابراین برای بسیاری از مسائل سه بعدی، میتوان از حل معادله در یک بعد کمک گرفت. از طرفی، امروزه با پیشرفت فناوری، با سامانه های کوانتومی با ابعادی کمتر از سه بعد هم روبرو هستیم و بنابراین حل یک بعدی معادله شرودینگر کاربرد عملی هم دارد. پس در ادامه بیشتر به بررسی حل معادله شرودینگر برای سامانه های یک بعدی میپردازیم.

از معادله (۱۰۸.۵) مشخص است که شکل تابعی جواب قسمت زمانی معادله شرودینگر کاملا از ویژگی های سامانه مستقل است و فقط به انرژی آن بستگی دارد. بنابراین تمام ویژگی های سامانه اعم از تابع موج و انرژی از حل معادله شرودینگر مستقل از زمان بدست می آید. بعلاوه با توجه به نمایش انرژی جنبشی در پایه مکان، معادله (۸۷.۵)، میتوان معادله (۱۰۹.۵) را به شکل زیر نوشت:

$$\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\Big)\psi(x) = \big(\hat{K} + V(x)\big)\psi(x) = \hat{H}\psi(x) \,, \tag{۱۱۲.۵}$$

و معادله (۱۰۹.۵) به شکل زیر در می آید:

$$\hat{H}\psi_E(x) = E\psi_E(x) \,, \tag{۱۱۳.۵}$$

که بوضوح یک معادله ویژه مقداری است. بنابراین E ویژه مقدار عملگر هامیلتونی و انرژی سامانه است. همچنین $\psi_E(x)$ ویژه تابع انرژی سامانه خواهد بود و به همین دلیل تابع موج ψ را با اندیس E نمایش داده ایم. البته این نمایش بیشتر مناسب حالتی است که طیف انرژی پیوسته باشد. هنگامی که طیف انرژی گسسته باشد که ترازهای آن را با E_n نشان میدهیم، مناسبتر است که تابع موج را بصورت $\psi_n(x)$ نمایش دهیم.

همانطور که در بخش (؟؟) گفتیم ویژه توابع انرژی با گذشت زمان تحول نمی یابند و به آنها حالتهای مانا گوییم. طیف ویژه مقدار E میتواند بسته به نوع سامانه، گسسته یا پیوسته یا ترکیبی از هردو باشد. از آنجا که جمله انرژی جنبشی برای همه ی سامانه ها یکسان است، نوع سامانه را انرژی پتانسیل آن تعیین میکند. این معادله را میتوانستیم از نوشتن نمایش معادله (؟؟) که معادله شرودینگر مستقل از زمان در فضای برداری کت ها است هم بدست آوریم.

ویژه مقادیر انرژی میتوانند در هر دو حالت طیف گسسته و پیوسته تبهگن باشند. یعنی دو یا چند ویژه حالت دارای انرژی یکسانی باشند. در این حالت مشاهده پذیر دیگری (مانند تکانه زاویه ای یا اسپین) وجود دارد که با هامیلتونی سامانه جابجا میشود که ویژه مقدار آن برای حالتهای تبهگن متفاوت بوده و تبهگنی را از بین میبرد.

۳.۲.۵ ویژگی های جوابهای معادله شرودینگر

قبل از ورود به حل معادله شرودینگر برخی ویژگی های کلی آن را بررسی میکنیم.

پیوستگی و منظم بودن:

۱. $\psi(\mathbf{r})$ باید تک مقداره باشد. چراکه نمیتوان به یک نقطه دو احتمال نسبت داد.

۲. $\psi(\mathbf{r})$ باید پیوسته باشد. چون معادله شرودینگر الزام میکند که $\psi(\mathbf{r})$ مشتق پذیر باشد.

۳. به دلیل مشابه بالا مشتق اول $\psi(\mathbf{r})$ باید برای پتانسیل های محدود پیوسته باشد، حتی اگر آن پتانسیل ناپیوسته باشد. البته اگر در نقطه ای پتانسیل بینهایت باشد، مانند پتانسیل تابع دلتا، اگرچه $\psi(\mathbf{r})$ همچنان پیوسته است اما مشتق آن ناپیوسته خواهد بود.

۴. از معادله مستقل از زمان (۱۱۰.۵) واضح است اگر در جایی پتانسیل بینهایت شود، در آنجا $\psi(\mathbf{r}) = 0$؛ چراکه همه جملات مقداری محدود و متناهی دارند. بنابراین جمله ی $V\psi$ هم باید متناهی باشد و در نواحی که $V \to \infty$ الزاما $\psi \to 0$ تا حاصلضرب آنها بتواند متناهی شود. یعنی احتمال ورود ذره به سد بینهایت صفر است و بنابراین در مرز ناحیه، بنا بر پیوستگی تابع موج $\psi(\mathbf{r}) = 0$. اما در مرز چون تغییرات پتانسیل ناگهانی و ناپیوسته است، چراکه از یک مقدار محدود به بنیهایت میرود، بنابراین مشتق تابع موج ناپیوسته است. اما اگر $V < \infty$ دیگر تابع موج لزوما صفر نیست، حتی اگر انرژی کل ذره، E، کمتر از انرژی پتانسیل باشد که بدین معنی است که انرژی جنبشی منفی است. یعنی در نواحی که به لحاظ کلاسیکی ممنوع است (چون انرژی جنبشی منفی میشود) ممکن است ذره ی کوانتومی حاضر باشد.

۵. در هر بعدی، تابع موج حالت پایه (یعنی ویژه تابع کمترین مقدار انرژی) صفر نمیشود.

ویژه مقادیر انرژی:

۱. از آنجا که $\left\langle \hat{T} \right\rangle > 0$ و $\left\langle \hat{H} \right\rangle = \left\langle \hat{T} \right\rangle + \left\langle \hat{V} \right\rangle$، زمانی که پتانسیل دارای مقدار کمینه باشد واضح است $\langle V \rangle \geq V_{min}$ و بنابراین $\left\langle \hat{H} \right\rangle \geq V_{min}$. پس چون این رابطه برای تمامی حالت ها برقرار است بنابراین ویژه حالتهای انرژی باید از V_{min} بزرگتر باشند یعنی

$$E_n > V_{min} \ . \tag{۱۱۴.۵}$$

۲. اگر برای $r \to \infty$ داشته باشم $V \to 0$، (که برای حالتی که نیرو با سرعت کافی در بینهایت صفر میشود صادق است.) بنابراین داریم:

- ویژه مقادیر منفی انرژی گسسته هستند و مربوط به ویژه حالتهای مقید هستند.
- ویژه مقادیر مثبت انرژی پیوسته هستند و مربوط به ویژه حالتهای حرکت آزاد هستند.

دلیل: در فواصل دور $V \to 0$ و حرکت تقریبا مانند ذره آزاد است و بنابراین طیف پیوسته است و بعلاوه حرکت آزاد فقط میتواند با انرژی های مثبت مربوط باشد.

- اگر انرژی پتانسیل در همه جا مثبت باشد (که به معنای نیروی دافعه است) و در $r \to \infty$ انرژی پتانسیل به سمت صفر میل کند، طیف گسسته وجود ندارد و تنها حالت حرکت آزاد است.

۳. اگر $V(\infty) = \infty$، تمام طیف گسسته خواهد بود.

۴. نکته جالب توجه این است که ممکن است ذره با حرکت محدود در نواحی یافت شود که در آنها $E < V$ است؛ احتمال یافتن ذره، $|\psi|^2$، به سرعت با افزایش فاصله در این ناحیه به سمت صفر کاهش پیدا میکند، اما همچنان در تمامی نواحی محدود برابر صفر نیست. در اینجا تفاوت بنیادی با حالت کلاسیکی وجود دارد که در آن ذره نمیتواند در ناحیه ای نفوذ کند که در آن $E < V$، چراکه در این نواحی انرژی جنبشی منفی و سرعت موهومی خواهد شد. در مکانیک کوانتومی ویژه مقادیر انرژی جنبشی همچنان مثبت است؛ به هر حال ما در اینجا به تناقض برخورد نمیکنیم چراکه اگر حالت ذره بواسطه ی فرآیند اندازه گیری، در یک نقطه ی معین در فضا جایگزیده شده باشد، حالت ذره بخاطر این فرآیند تغییر کرده است به قسمی که در حالت کلی نمیتواند انرژی جنبشی معینی داشته باشد.

۵. مطابق رابطه ی (۱۱۰.۵) معادله شرودینگر برای توابع موج ψ حالتهای مانا حقیقی است؛ همچنین شرایط مرزی روی جوابهای آن هم حقیقی هستند. بنابراین جواب های آن هم میتوانند همیشه حقیقی انتخاب شوند. البته این برای حالتی که ذره در میدان مغناطیسی قرار داشته باشد صادق نیست. بنابراین ویژه توابع انرژی در عدم حضور میدان مغناطیسی حقیقی است.

۶. اگر تابع انرژی پتانسیل زوج باشد یعنی $V(-\mathbf{r}) = V(\mathbf{r})$، آنگاه چون همواره انرژی جنبشی با پاریته جابجا میشود، هامیلتونی سامانه با عملگر پاریته جابجا میشود یعنی $\left[\hat{\pi}, \hat{H}\right] = 0$، و بنابراین ویژه توابع انرژی، ویژه توابع پاریته هم هستند یا به عبارتی ویژه توابع انرژی به دو دسته ی زوج و فرد تقسیم میشوند.

ویژگی جوابها در حالت یک بعدی:

۱. در طیف گسسته تبهگنی نداریم.

اثبات: فرض کنید تبهگنی داریم. یعنی حداقل دو ویژه تابع متفاوت ψ_1 و ψ_2 وجود دارند که متناظر با ویژه مقدار انرژی E هستند. هردو باید معادله شرودینگر را ارضا کنند یعنی

$$\psi_i''(x) = \frac{2m(V-E)}{\hbar^2}\psi_i(x)\,, \quad i = 1,2 \tag{۱۱۵.۵}$$

که $\psi_i''(x)$ مشتق دوم $\psi_i(x)$ نسبت به x است. بنابراین داریم

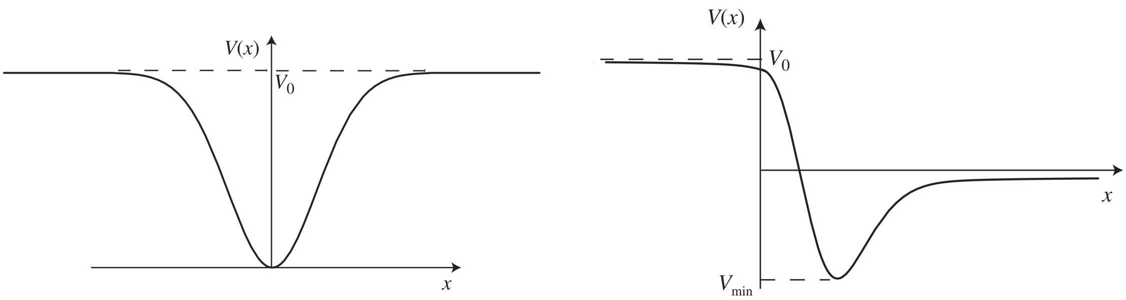
$$\frac{\psi_1''}{\psi_1} = \frac{\psi_2''}{\psi_2} = \frac{2m(V-E)}{\hbar^2}\,, \tag{۱۱۶.۵}$$

که میدهد $\psi_1''\psi_2 - \psi_2''\psi_1 = 0$. با انتگرال گیری از این عبارت خواهیم داشت $\psi_1'\psi_2 - \psi_2'\psi_1 = C$ که C ثابت انتگرال گیری است. از آنجا که برای $x \to \infty$، توابع موج ψ_1 و ψ_2 به سمت صفر میل میکنند، ثابت C باید برابر صفر باشد. بنابراین $\psi_1'/\psi_1 = \psi_2'/\psi_2$. با انتگرال گیری مجدد از این رابطه خواهیم داشت که $\psi_1 = B\psi_2$، که باز B ثابت انتگرال گیری است. این رابطه به ما میگوید که توابع موج ψ_1 و ψ_2 با هم متناسب و بنابراین از یکدیگر مستقل خطی نیستند که خلاف فرض اولیه ما است که آنها را متفاوت و مستقل خطی در نظر گرفته بودیم و بدین ترتیب ادعای ما اثبات شد. □

نکته: باید دقت داشت که این ویژگی در ابعاد بالاتر برقرار نیست.

۲. در طیف گسسته، ویژه تابع $\psi_n(x)$ مربوط به $(n+1)$-مین سطح انرژی یعنی E_n، دارای n ریشه است.

۳. طیف گسسته تنها برای مقادیری از انرژی وجود دارد که به ازاء آنها ذره اجازه ی فرار به بینهایت را نداشته باشد و به عبارتی از هر دو طرف مقید باشد. اما اگر برای مقادیری از انرژی ذره بتواند از حداقل یک طرف به بینهایت فرار کند، طیف انرژی پیوسته خواهد بود. مثلا برای پتانسیل شکل (۱.۵(آ)) طیف انرژی برای $E < 0$ گسسته و برای $0 < E < V_0$ پیوسته و حرکت ذره در سمت راست تا بینهایت ادامه دارد و برای $V_0 < E < \infty$ طیف انرژی پیوسته است اما این بار حرکت ذره از هر دو طرف تا بینهایت ادامه دارد. اما برای پتانسیل شکل (۱.۵(ب)) طیف انرژی به ازاء تمامی مقادیر $E < V_0$ گسسته و برای $E > V_0$ پیوسته است و حرکت ذره از دو طرف تا بینهایت ادامه دارد.



(ب) ... (آ) ...

شکل ۱.۵: ...

۳.۵ چند سامانه یک بعدی

در این بخش معادله شرودینگر را برای چند سامانه یک بعدی حل میکنیم. جدای از اینکه حل سامانه های یک بعدی مقدمه ای برای حل مسائل سه بعدی و واقعی است، امروزه با پیشرفت فناوری با سامانه های کوانتومی روبرو هستیم که با تقریب خوبی یک

یا دو بعدی هستند. بعلاوه مواردی که انتخاب شده اند همگی به لحاظ فیزیکی واجد اهمیت هستند و بر اساس آنها فناوریهای مهمی بوجود آمده اند. مثلا سد پتانسیل مبنای فیزیکی پدیده تونل زنی است، که جدای از جذابیت های نظری در توصیف بسیاری از پدیده های فیزیکی از مقیاس اتم تا کیهان، اساس ساخت فناوریهای جذابی مانند دیود تونلی یا میکروسکوپ تونلی روبشی است.

۱.۳.۵ ذره آزاد

ابتدا مسئله را در حالت یک بعدی بررسی میکنیم. ذره ی آزاد یعنی سامانه ای که تحت تاثیر هیچ پتانسیلی نبوده و بنابراین هامیلتونی آن فقط دارای جمله ی انرژی جنبشی است:

$$\hat{H} = \hat{T} = \frac{p_x^2}{2m} \; . \tag{۱۱۷.۵}$$

با فرض اینکه جرم ذره m باشد معادله شرودینگر مستقل از زمان از قرار زیر خواهد شد:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \tag{۱۱۸.۵}$$

با تعریف

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \; , \tag{۱۱۹.۵}$$

خواهیم داشت

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0 \; . \tag{۱۲۰.۵}$$

چون انرژی E برای ذره آزاد فقط شامل جمله ی انرژی جنبشی است پس مثبت و بنابراین k^2 هم مثبت خواهد بود و جواب معادله ی بالا تناوبی خواهد بود. از آنجا که این معادله دیفرانسیل مرتبه ۲ است پس دو جواب مستقل خواهیم داشت

$$\psi_r(x) = Ae^{ikx} \; , \quad \psi_l(x) = Be^{-ikx} \; , \tag{۱۲۱.۵}$$

که ψ_r بیانگر موجی است که به سمت راست (جهت قراردادی مثبت) و ψ_l بیانگر موجی است که در جهت چپ حرکت میکند، چراکه با قرار دادن $E = \hbar\omega$ و با ضرب فاکتور زمانی $e^{-iEt/\hbar} = e^{-i\omega t}$ در هرکدام از این عبارات خواهیم داشت

$$\psi_r(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)} = Ae^{ik(x-vt)} \; , \quad \psi_l(x,t) = Be^{-i(kx+\omega t)} = Be^{-ik(x+vt)} \; , \tag{۱۲۲.۵}$$

که بوضوح $\psi_r(x,t)$ بیانگر موج رونده به سمت راست با سرعت v و $\psi_l(x,t)$ بیانگر موج رونده به سمت چپ با سرعت v است که

$$v = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p_x} \; . \tag{۱۲۳.۵}$$

البته میتوان جواب را بر حسب $\cos(kx)$ و $\sin(kx)$ هم نوشت، اما نمایش نمایی برای این مسئله مناسب تر است. با توجه به معادلات (۱۱۷.۵) و (۱۱۹.۵) میتوان نتیجه گرفت که k همان عدد موج و برابر است با $k = p_x/\hbar$ و بنابراین معادله (۱۲۱.۵) را میتوان بصورت زیر نوشت

$$\psi_r(x) = Ae^{ip_x x/\hbar} \; , \quad \psi_l(x) = Be^{-ip_x x/\hbar} \; . \tag{۱۲۴.۵}$$

مشخص است که ψ_r و ψ_l دو ویژه تابع متفاوت انرژی هستند اما ویژه مقدار انرژی برای هردو برابر

$$E = \frac{\hbar^2k^2}{2m} = \frac{p_x^2}{2m} \; , \tag{۱۲۵.۵}$$

است. بنابراین در اینجا با تبهگنی از مرتبه ۲ روبرو هستیم. پس باید مشاهده پذیر دومی وجود داشته باشد که با هامیلتونی سامانه جابجا شود ولی ویژه مقدارش برای ψ_r و ψ_l متفاوت باشد که برای این مسئله عملگر تکانه خطی $\hat{p}_x$ خواهد بود چراکه

$$\left[\hat{H}, \hat{p}_x\right] = \left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m}, \hat{p}_x\right] = 0 \ . \tag{۱۲۶.۵}$$

بنابراین داریم

$$\begin{aligned} \hat{p}_x\psi_r(x) &= -i\hbar\frac{d}{dx}Ae^{+ip_xx/\hbar} = +p_xAe^{+ip_xx/\hbar} = +p_x\psi_r \ , \\ \hat{p}_x\psi_l(x) &= -i\hbar\frac{d}{dx}Ae^{-ip_xx/\hbar} = -p_xBe^{-ip_xx/\hbar} = -p_x\psi_l \ , \end{aligned} \tag{۱۲۷.۵}$$

که بوضوح دارای ویژه مقدار متفاوت برای دو جواب تبهگن است و تبهگنی را از بین میبرد. البته میتوان این را از روی ویژگی فیزیکی دو جواب هم حدس زد. چراکه همانطور که در بالا توضیح داده شد جوابهای ψ_r و ψ_l به ترتیب موجهای رونده به سمت راست و چپ هستند و بنابراین کمیت فیزیکی که باید تبهگنی را از بین ببرد ویژه مقدارش مرتبط با جهت حرکت ذره است که همان تکانه خطی خواهد بود و میبینیم که ویژه مقدارش برای موجی که به سمت راست حرکت میکند مثبت و برای موجی که به سمت چپ حرکت میکند منفی شده است.

ویژه توابع ψ_r و ψ_l بهنجارپذیر نیستند. چراکه $\psi_{r(l)}(x) = A\exp(\pm ip_xx/\hbar)$ بیانگر دامنه ی احتمال یافتن ذره ای با تکانه ی $\pm p_x$ در محل x است که آشکارا با اصل عدم قطعیت در تناقض است. البته چون این دو تابع موج، ویژه توابع تکانه هم هستند با توجه به رابطه (۷۲.۵) ضرایب A و B برابر $1/\sqrt{2\pi\hbar}$ خواهند بود.

اگر ذره در ابتدا در یکی از حالتهای ψ_r یا ψ_l باشد همواره در آن حالت باقی خواهد ماند. چراکه وقتی مثلا موج منتسب به ذره به سمت راست حرکت میکند، تا وقتی که هیچ تاثیری از خارج بر آن وارد نشود (که معادل این است که هامیلتونی همچنان هامیلتونی ذره آزاد و بدون جمله ی برهمکنش باشد) به حرکت خود به سمت راست ادامه میدهد که مطابق قانون اول نیوتون نیز هست. این نتیجه با این حقیقت هم سازگار است که ψ_r و ψ_l ویژه حالتهای انرژی و حالت مانا هستند و بنابراین اگر ذره در ابتدا در یکی از این ویژه حالتها باشد با گذشت زمان حالتش تغییر نمیکند.

معادله شرودینگر خطی است بنابراین ترکیب خطی دو جواب هم همچنان جواب معادله دیفرانسیل خواهد بود یعنی

$$\psi(x) = \alpha\psi_r + \beta\psi_l \ . \tag{۱۲۸.۵}$$

بنابراین با توجه به معادله (۱۰۸.۵) جواب معادله شرودینگر وابسته به زمان از قرار زیر خواهد شد

$$\psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar} = \alpha\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{i(p_xx-Et)/\hbar} + \beta\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-i(p_xx+Et)/\hbar} \ . \tag{۱۲۹.۵}$$

واضح است که جمله ی اول تابع موج ذره آزادی است که به سمت مثبت حرکت میکند و جمله ی دوم تابع موج حرکت در جهت منفی را بیان میدارد.

تمرین ۴.۵. تعبیر فیزیکی ضرایب بسط α و β چیست؟ □

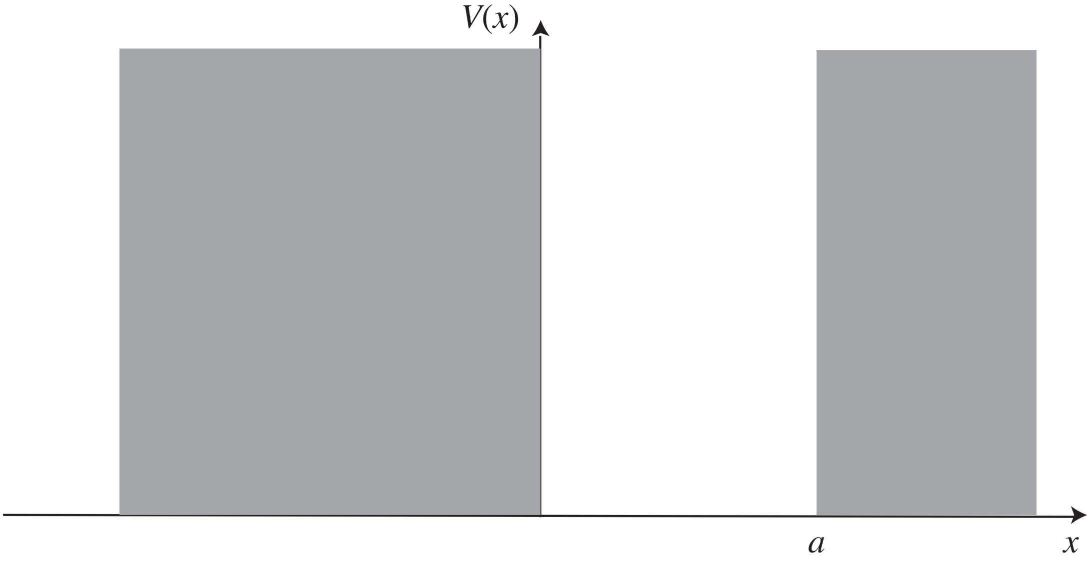
تمرین ۵.۵. چگالی جریان احتمال را برای $\psi_r(x,t)$، $\psi_l(x,t)$ و $\psi(x,t)$ بدست آورده و قانون بقای احتمال را بررسی کنید. □

۲.۳.۵ ذره در جعبه

ذره ای به جرم m را در یک بعد در نظر بگیرید که مطابق شکل (۲.۵) در بازه ای به طول a آزاد بوده ولی از دو طرف تحت تاثیر پتانسیل دافعه ی بسیار قوی قرار گرفته است به قسمی که میتوانیم در مقیاس انرژی های سامانه، آنها را بینهایت در نظر بگیریم.

بنابراین تابع انرژی پتانسیل ذره از قرار زیر خواهد بود:

$$V(x) = \begin{cases} 0 \ , & \text{اگر}\ 0 < x < a \ , \\ \infty \ . & \text{جاهای دیگر} \end{cases} \tag{۱۳۰.۵}$$



شکل ۲.۵: ...

در زیربخش (۳.۲.۵) گفته شد که اگر در ناحیه ای پتانسیل بینهایت باشد، تابع موج صفر خواهد شد. بنابراین در نواحی $x \geq a$ و $x \leq 0$ تابع موج صفر میشود. پس تنها لازم است تابع موج را در فاصله $0 \leq x \leq a$ بدست آوریم. در این بازه $V(x) = 0$ و معادله شرودینگر برابر است با

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \; . \tag{۱۳۱.۵}$$

این معادله شبیه معادله شرودینگر (۱۱۸.۵) برای ذره آزاد است با این تفاوت که در اینجا شرایط مرزی متفاوت است و همین باعث میشود با سامانه ی متفاوت و جوابهای متفاوتی روبرو باشیم. بنا به شرط پیوستگی تابع موج، مقدار تابع موج روی مرزها یعنی در $x = 0$ و $x = a$ برابر صفر خواهد شد که شرایط مرزی مسئله را تعیین میکند:

$$\mathrm{BC} : \begin{cases} \psi(0^-) = \psi(0^+) = 0 \; , \\ \psi(a^-) = \psi(a^+) = 0 \; . \end{cases} \tag{۱۳۲.۵}$$

با بازنویسی معادله (۱۳۱.۵) داریم

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0 \; , \tag{۱۳۳.۵}$$

که مجددا قرار داده ایم

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \; . \tag{۱۳۴.۵}$$

مجددا، مانند حالت ذره آزاد، چون در بازه ی $0 \leq x \leq a$، ذره فقط دارای انرژی جنبشی است پس E و k^2 مثبت هستند. بنابراین جواب تناوبی و ترکیب خطی از $\cos(kx)$ و $\sin(kx)$ خواهد بود:

$$\psi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx) \; . \tag{۱۳۵.۵}$$

سه پارامتر مجهول A، B و k از شرایط مرزی (۱۳۲.۵) و شرط بهنجارش بدست می آیند. معمولا بهتر است از شرایط مرزی صفر شروع کنیم. ابتدا شرط مرزی $\psi(0) = 0$ را اعمال میکنیم یعنی

$$\psi(0^-) = 0 = \psi(0^+) = A\cos(0) + B\sin(0) = A \implies A = 0 \tag{۱۳۶.۵}$$

پس تابع موج برابر است با

$$\psi(x) = B\sin(kx)\ . \tag{۱۳۷.۵}$$

با جایگذاری شرط مرزی $\psi(a) = 0$ داریم

$$B\sin(ka) = 0\ . \tag{۱۳۸.۵}$$

برای ارضای معادله بالا یا $B = 0$ یا $\sin(ka) = 0$. اگر ضریب B را صفر قرار دهیم کل تابع موج صفر شده و جوابی بدیهی بدست خواهیم آورد. بنابراین باید $\sin(ka)$ را صفر قرار دهیم که داریم

$$\sin(ka) = 0 \implies ka = n\pi\ , \quad n = 1, 2, \cdots\ . \tag{۱۳۹.۵}$$

عدد n نمیتواند صفر باشد چون مجددا تابع موج را صفر میکند. بنابراین k با توجه به n مقادیری گسسته را اتخاذ خواهد کرد که آنها را با k_n نشان میدهیم و نتیجتا طبق رابطه (۱۳۴.۵) انرژی سامانه هم کوانتیده خواهد بود و داریم

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \implies E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\ , \quad n = 1, 2, \cdots\ . \tag{۱۴۰.۵}$$

پس تا به اینجا ویژه مقدار انرژی را بدست آوردیم. همچنین ویژه تابع انرژی برای هر تراز n برابر است با

$$\psi_n(x) = B_n \sin\Big(\frac{n\pi}{a}x\Big)\ . \tag{۱۴۱.۵}$$

برای بدست آوردن B_n از شرط بهنجارش استفاده میکنیم و داریم

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\ |\psi_n(x)|^2 = \int_{-\infty}^{0} dx\ (0) + \int_0^a dx\ B_n^2 \sin^2(\frac{n\pi}{a}x) + \int_a^{\infty} dx\ (0) = 1\ , \tag{۱۴۲.۵}$$

که میدهد

$$1 = \int_0^a dx\ B_n^2 \sin^2(\frac{n\pi}{a}x) = B_n^2 \int_0^a dx\ \left(\frac{1-\cos(2n\pi x/a)}{2}\right) = \frac{a}{2}B_n^2\ . \tag{۱۴۳.۵}$$

بنابراین داریم

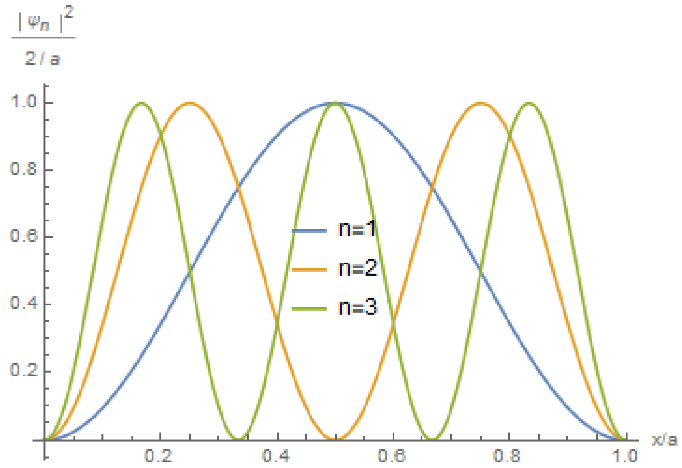
$$B_n = \sqrt{\frac{2}{a}}\ , \tag{۱۴۴.۵}$$

و ویژه تابع انرژی برابر خواهد بود با

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\Big(\frac{n\pi}{a}x\Big)\ . \tag{۱۴۵.۵}$$

از روابط (۱۴۰.۵) و (۱۴۵.۵) واضح است که تبهگنی نداریم.

شکل (۳.۵) مربع بزرگی ویژه توابع انرژی برای سه تراز اول انرژی را نشان میدهد. آشکار است که هرچه تراز انرژی بالاتر باشد تعداد صفرهای ویژه تابع مربوطه بیشتر است. همه ی ویژه توابع در ابتدا و انتهای بازه صفر هستند که توسط شرایط مرزی (۱۳۲.۵) القا شده است. اما نکته ی جالب این است که به جز حالت پایه، بقیه ویژه تابع مربوط به بقیه ترازها در نقاطی در طول بازه ی $(0, a)$ هم صفر هستند. مثلا ویژه تابع $\psi_2(x)$ در $x = a/2$ صفر میشود که یعنی ذره هرگز نمیتواند در $x = a/2$ وجود داشته باشد. اما همینطور که در شکل (۳.۵) هم میبینیم در دو طرف این نقطه احتمال یافتن ذره وجود دارد. این بدان معناست که اگر ذره در نقطه ای در سمت چپ $x = a/2$ باشد، برای رفتن به نقطه ای در سمت راست آن، نمیتواند از نقطه ی $x = a/2$ عبور کند! نتیجه ای که کاملا برخلاف دیدگاه کلاسیکی است. چراکه از دیدگاه کلاسیکی برای رفتن از نقطه ای در سمت چپ $x = a/2$ به نقطه ای در سمت راست آن، الزاما باید از خود نقطه ی $x = a/2$ عبور کرد، درحالیکه نتیجه ی کوانتومی احتمال حضور در این نقطه را صفر پیش بینی میکند.



شکل ۳.۵: ...

تمرین ۶.۵. تناقضی که بالا توضیح داده شد را چگونه میتوانید به کمک اصول مکانیک کوانتومی توضیح دهید؟ □

بنا به قضیه (؟؟) ویژه توابع $\psi_n(x)$ تشکیل یک مجموعه ی راست هنجار و کامل میدهند. یعنی اولا دو بدو بر هم عمودند:

$$\int_0^a dx\ \psi_n^*(x)\psi_m(x) = \frac{2}{a}\int_0^a dx\ \sin\Big(\frac{n\pi}{a}x\Big)\sin\Big(\frac{m\pi}{a}x\Big) = 0\ , \quad n\neq m \tag{۱۴۶.۵}$$

ثانیا بهنجار به یک هستند:

$$\int_0^a dx\ \psi_n^*(x)\psi_m(x) = \frac{2}{a}\int_0^a dx\ \sin\Big(\frac{n\pi}{a}x\Big)\sin\Big(\frac{m\pi}{a}x\Big) = 1\ , \quad n = m \tag{۱۴۷.۵}$$

و ثالثا هر تابع موج دلخواه $\psi(x)$ را در بازه ی $0\leq x\leq a$ را میتوان بر حسب ویژه توابع $\psi_n(x)$ بسط داد:

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\psi_n(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\Big(\frac{n\pi}{a}x\Big)\ , \tag{۱۴۸.۵}$$

که در واقع چیزی جز بسط سری فوریه یک تابع $\psi(x)$ در بازه ی $0\leq x\leq a$ نیست. ضرایب بسط c_n هم از رابطه زیر بدست می آیند:

$$c_n = \langle\psi_n|\psi\rangle = \int_0^a dx\ \psi_n^*(x)\psi(x)\ , \tag{۱۴۹.۵}$$

که بیانگر دامنه ی احتمال این هستند که از اندازه گیری انرژی روی حالت $\psi(x)$، مقدار E_n را برای آن بیابیم.

کمترین انرژی سامانه را انرژی حالت پایه گویند که برای ذره در جعبه به ازاء $n=1$ برابر است با

$$E_G = E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\ . \tag{۱۵۰.۵}$$

نکته ی مهم این است که انرژی حالت پایه صفر نشد درحالیکه بر اساس تفکر کلاسیکی، کمترین انرژی ذره برابر صفر خواهد بود. علت این است که انرژی صفر به معنای سکون و تکانه ی صفر است. ولی در مکانیک کوانتومی، تکانه ی صفر بدین معناست که ما مقدار تکانه را دقیقا برابر صفر یعنی با عدم قطعیت صفر $(\Delta p_x = 0)$ در نظر گرفته ایم. بر اساس اصل عدم قطعیت، اگر $\Delta p_x = 0$ باشد نتیجه میدهد که $\Delta x = \infty$، درحالیکه برای ذره در جعبه ای به طول a حداکثر عدم قطعیت در مکان برابر a است. بنابراین مقدار تکانه نمیتواند برابر صفر باشد و نتیجتا انرژی حالت پایه هم صفر نخواهد بود.

تمرین ۷.۵. به کمک اصل عدم قطعیت، و بدون حل معادله شرودینگر، انرژی حالت پایه ذره در جعبه را تخمین بزنید. □

تمرین ۸.۵. تعداد صد الکترون را در نظر بگیرید که در جعبه پتانسیل یک بعدی به طول $1\ \mathrm{nm}$ گیر افتاده اند. اگر در هر تراز انرژی تنها دو الکترون قرار بگیرند[۴]، انرژی سامانه چند الکترون ولت خواهد بود. (**یادآوری:** $1\ \mathrm{eV} = 1.6\times 10^{-19}\ \mathrm{J}$) □

تمرین ۹.۵. تابع موج ذره ای به جرم m در جعبه پتانسیل یک بعدی به طول a از قرار زیر است:

$$\psi(x) = \begin{cases} A(x/a)\ , & 0<x<a/2 \\ A(1-x/a)\ . & a/2<x<a \end{cases} \tag{۱۵۱.۵}$$

(الف) ضریب بهنجارش A را بدست آورید. (ب) دامنه ی احتمال اینکه از اندازه گیری انرژی روی حالت $\psi(x)$، انرژی سامانه را E_n بیابیم چقدر است؟ (پ) ضرایب بسط تابع موج $\psi(x)$ بر حسب ویژه توابع جعبه پتانسیل یک بعدی $\psi_n(x)$ را بدست آورید. □

مثال ۱.۵. جعبه پتانسیل متقارن: ذره ای را به جرم m در نظر بگیرید که در جعبه پتانسیل متقارنی قرار دارد که بدین معنی است که ذره در بازه ی $-a/2 \le x \le a/2$ آزاد و در جاهای دیگر تحت تاثیر پتانسیل مثبت بسیار زیادی است که عملا میتوان آن را بینهایت در نظر گرفت. (الف) ویژه مقادیر و ویژه توابع انرژی را بدست آورید.

حل: این جعبه پتانسیل متقارن، همان جعبه ی پتانسیلی شکل (۲.۵) است با این تفاوت که به اندازه ی $a/2$ به سمت چپ منتقل شده است. پس برای بدست آوردن ویژه توابع این سامانه، جواب (۱۴۵.۵) را به اندازه ی $a/2$ به سمت چپ منتقل کنیم یعنی $x \to x + a/2$. بنابراین تابع موج ذره در جعبه پتانسیل متقارن از قرار زیر خواهد بود:

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left[\frac{n\pi}{a}(x+\frac{a}{2})\right] \\ &= \sqrt{\frac{2}{a}}\Big[\sin\Big(\frac{n\pi}{a}x\Big)\cos\Big(\frac{n\pi}{2}\Big)+\cos\Big(\frac{n\pi}{a}x\Big)\sin\Big(\frac{n\pi}{2}\Big)\Big] \\ &= \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\big(\frac{n\pi}{a}x\big) = \psi_n^{(odd)}(x)\ , & n \text{ زوج} \\ \sqrt{\frac{2}{a}}\cos\big(\frac{n\pi}{a}x\big) = \psi_n^{(even)}(x)\ . & n \text{ فرد} \end{cases} \end{aligned} \tag{۱۵۲.۵}$$

واضح است که ویژه مقادیر انرژی تغییری نکرده و همچنان با رابطه (۱۴۰.۵) داده میشود. میبینیم که در اینجا ویژه توابع انرژی به دو دسته ی زوج و فرد تقسیم میشوند. به عبارتی ویژه توابع انرژی، ویژه توابع عملگر پاریته (۸۲.۵) نیز هستند یعنی

$$\begin{aligned} \hat{\pi}\psi_n^{(odd)}(x) &= -\psi_n^{(odd)}(x)\ , \\ \hat{\pi}\psi_n^{(even)}(x) &= +\psi_n^{(even)}(x)\ . \end{aligned} \tag{۱۵۳.۵}$$

به عبارتی عملگرهای هامیلتونی و پاریته دارای ویژه توابع همزمان هستند و بنابراین باهم جابجا میشوند یعنی برای این سامانه

$$\left[\hat{\pi}, \hat{H}\right] = 0\ . \tag{۱۵۴.۵}$$

البته این بدین معنا نیست که سامانه تبهگن است. در واقع برای این سامانه تبهگنی نداریم. یعنی:

> اگرچه تبهگنی در ویژه کتهای یک مشاهده پذیر، بیانگر وجود مشاهده پذیر دومی است که با اولی جابجا میشود، اما عکس آن صحیح نیست و ممکن است در سامانه ای، مشاهده پذیرها با هم جابجا شوند اما تبهگنی نداشته باشیم.

به عبارت دقیق تر عکس قضیه (؟؟) لزوما برقرار نیست.

۳.۳.۵ سد پتانسیل و تونل زنی

۴.۳.۵ چاه پتانسیل

۵.۳.۵ نوسانگر هماهنگ

۴.۵ نمایش تکانه

[۴] اینکه در هر تراز انرژی تنها دو الکترون قرار میگیرند به علت ویژگی اسپین الکترون است که مقدار آن ۱/۲ است و در فصل (؟؟) توضیح داده خواهد شد. برای حل این مثال همین که بدانید در هر تراز تنها دو الکترون میتوانند قرار داشته باشند کفایت میکند.