

Chapter Three

The Schrödinger Wave Equation

در فصل قبل برای تابع موج زیر:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \Phi(p) e^{i(px - \frac{p^2}{2m}t)/\hbar}$$

معادله زیر احداث زدیم:

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

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

حال به طور معکوس می گوئیم معادله شرودینگر توصیف کننده یک ذره آزاد است

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \Phi(p) e^{i(px - \frac{p^2}{2m}t)/\hbar}$$

که جواب کلی آن را می توان به صورت زیر نوشت

معادله شرودینگر نسبت به مشتق زمانی مرتبه اول است

اگر تابع موج را در یک لحظه اولیه داشته باشیم آنگاه تابع موج را در تمام زمانهای دیگر خواهیم داشت

$$\Psi(x, 0)$$

$$\Psi(x, t)$$

$$\Psi(x, t)$$

$$\Psi(x, t + \Delta t)$$

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

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

$$\Psi(x, t + \Delta t) = \Psi(x, t) + \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} \Delta t$$

$\Psi(x, t)$



$\Psi(x, t + \Delta t)$



یا به طریق مشابه

$$\Psi(x, t + \Delta t) = \Psi(x, t) + \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \Delta t$$

$$= \Psi(x, t) + \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} \Delta t$$



تمرین: ثابت کنید که:

$$\Phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi(x, 0) e^{-ipx/\hbar}$$

$$\Phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi(x, 0) e^{-ipx/\hbar}$$

از رابطه فوق چنین استنباط می شود که با داشتن تابع موج در لحظه $t = 0$ می توان با تبدیل معکوس فوريه ضريب بسط فوريه در فضاي اندازه حرکت را به دست آورد و از روی آن خود تابع موج را در لحظه کلی t به صورت زیر محاسبه کرد:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \Phi(p) e^{i(px - \frac{p^2}{2m}t)/\hbar}$$

نکته: ضريب بسط فوريه در فضاي اندازه حرکت فقط تابعی از p است و به t بستگی ندارد. لذا وقتی که این ضريب را با استفاده از تابع موج در لحظه $t = 0$ بدست می آوریم همان ضريب را برای محاسبه تابع موج در لحظات بعدی می توانیم مورد استفاده قرار دهیم.

دانستن تابع موج در هر لحظه از روی تابع موج در لحظه $t = 0$ به معنای عدم وجود عدم قطعیت در معادله دیفرانسیل شرودینگر است

حال به دنبال تعبیری مناسب برای $\Psi(x, t)$ هستیم.

برای این منظور به نکات زیر توجه می کنیم:

(1) تابع موج در حالت کلی یک تابع مختلط است.

(2) قدر مطلق تابع موج در جایی که فرض می شود ذره وجود دارد بزرگ و در سایر جاها کوچک است.

(3) خاصیت پهن شدگی دامنه بسته موج کما کان وجود دارد.

با توجه به نکات فوق ماکس بورن پیشنهاد کرد که:

$$P(x, t)dx = |\Psi(x, t)|^2 dx$$

به صورت احتمال وجود ذره بین x و $x + dx$ در زمان t تعبیر شود.

$P(x, t)$ حقیقی است.

$P(x, t)$ در جایی که انتظار وجود ذره می رود بزرگ است. پهن شدگی $P(x, t)$ به معنای پهن شدگی ذره نیست، بلکه به معنای آن است که با احتمال کمتری توقع داریم که ذره را در زمان t در جایی بیابیم که آن را قبلاً در $t = 0$ قرار داده بودیم.

برای آنکه تعبیر اخیر از پهن شدگی برآورده شود باید بنویسیم:

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x, t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$$

$\Psi(x, t)$ جواب معادله شرودینگر است.

$\Psi(x, t) \propto \alpha$ نیز یک جواب خواهد بود.

نکته: معادله شرودینگر خطی است

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\alpha|^2 |\Psi(x, t)|^2 dx = |\alpha|^2$$

بنابراین برای آنکه تعبیر ما فیزیکی باقی بماند باید خود را به دسته‌ای از جوابهای $\Psi(x, t)$ محدود کنیم که در شرط زیر صدق کنند.

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx < \infty$$

به چنین توابعی مجذورا انتگرال پذیر (Square Integrable) گویند.

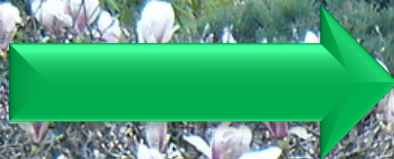
می توان نشان داد (اثبات آن را به بعد موکول می کنیم) که برای حفظ شرط مجذورا انتگرال پذیری کافی است که:

توابع موج حالت اولیه مجذورا انتگرال پذیر باشند یعنی:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, 0)|^2 dx < \infty$$

و این بدان معنی است که تابع موج در $t = 0$ باید در بینهایت به سمت صفر با سرعتی بیشتر از $x^{-1/2-\epsilon}$ میل کند. اگر چه ϵ می تواند به اندازه دلخواه کوچک باشد ولی حتما باید مثبت باشد

$$\varepsilon = 0$$



$$\int_{-\infty}^{\infty} |x^{-1/2}|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} x^{-1} dx = [\ln x]_{-\infty}^{\infty}$$

که مشکل دارد. پس باید $\varepsilon \neq 0$ باشد.

یک دسته از توابعی که مجذورا انتگرال پذیراند آنهایی هستند که در بینهایت مقدارشان صفر می شود مانند توابع گوسی.

دسته دیگر که در بینهایت هم به سمت صفر نمی روند توابع متناوبند مانند توابع سینوسی و کسینوسی.

خلاصه این که یکی از ویژگیهای توابع موج مجذورا انتگرال پذیری آنهاست.

ویژگی دیگر پیوسته بودن توابع موج نسبت به x می باشد

نکته: چون مربع قدر مطلق تابع موج کمیت فیزیکی است، پس به نظر می رسد که عامل فاز کمیت بی اهمیت باشد. اما باید دقت نمود که این جمله همیشه صحیح نیست، مثلا:

$$\Psi(x, t) = \alpha_1 \Psi_1(x, t) + \alpha_2 \Psi_2(x, t)$$

$$|\Psi(x, t)|^2 = |\alpha_1|^2 |\Psi_1|^2 + |\alpha_2|^2 |\Psi_2|^2 + \alpha_1^* \alpha_2 \Psi_1^* \Psi_2 + \alpha_2^* \alpha_1 \Psi_2^* \Psi_1$$

که بنابراین در دو جمله آخر اختلاف فاز اهمیت پیدا می کند. مثلا، در ترکیب دو تابع موج اختلاف فاز می تواند سبب تضعیف یا تقویت شود.

گفتیم که می توان نشان داد که برای حفظ شرط مجذورا انتگرال پذیری کافی است که:

توابع موج حالت اولیه مجذورا انتگرال پذیر باشند، یعنی:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, 0)|^2 dx < \infty$$

برای اثبات ابتدا به عنوان تمرین ثابت کنید که:

$$\frac{\partial P(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} j(\mathbf{x}, t) = 0$$

که در آن

$$P(\mathbf{x}, t) = \Psi^*(\mathbf{x}, t)\Psi(\mathbf{x}, t)$$

$$j(\mathbf{x}, t) = \frac{\hbar}{2im} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{x}} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial \mathbf{x}} \Psi \right) \equiv \text{FLUX}$$

به عنوان تمرین همچنین ثابت کنید که می توان فلو را به صورت زیر هم نوشت:

$$j(\mathbf{x}, t) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{x}} \right)$$

از طرفین قانون بقا انتگرال می گیریم:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} dx P(x, t) = - \frac{\partial}{\partial x} \int_{-\infty}^{\infty} dx j(x, t)$$

$$= -[j(x, t)]_{-\infty}^{\infty}$$

$$= -[0 - 0] = 0$$

و برای توابع مجذورا انتگرال پذیر توابع موج و مزدوج آنها در بینهایت باید صفر باشند، پس فلو هم باید در بینهایت صفر باشد.

$$j(x, t) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)$$

چون:

اگر تابع موج ناپیوسته باشد آنگاه در مشتق آن و در نتیجه در فلو تکینگی به وجود می آید. و چون $j(x)$ به $P(x)$ از طریق معادله پیوستگی مربوط است پس در تابع احتمال $P(x)$ نیز تکینگی به وجود می آید. تکینگی در کمیت های فیزیکی غیر قابل قبول است پس تابع موج باید پیوسته هم باشد.

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} dx P(x, t) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(x, t)|^2 = 0$$

پس مجذورا انتگرال پذیر بودن مستقل از زمان است.



معادله زیر یک قانون
بقاست:

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial j(x, t)}{\partial x} = 0$$

و بیان می کند که:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_a^b dx P(x, t) = - \int_a^b dx \frac{\partial}{\partial x} j(x, t) = j(a, t) - j(b, t)$$

یعنی اگر تغییری در چگالی در ناحیه x روی دهد آن تغییر با یک تغییر خالص در شار در آن ناحیه جبران خواهد شد.

یعنی اگر چگالی یک نقطه x با گذشت زمان تغییر کرد این به معنای آن است که جریان از آن نقطه می گذرد، یعنی به عبارت دیگر j با x تغییر می کند.

تمرین: تعریف تابع احتمال، شار و قانون بقا با تبدیل معادله شرودینگر ذره آزاد به صورت زیر

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

یعنی با وارد کردن پتانسیل $V(x)$ بدون تغییر باقی می ماند، مشروط بر آنکه $V(x)$ حقیقی باشد.

تمرین: نشان دهید که اگر $V(x) = V_R(x) + iV_I(x)$ آنگاه:

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial j(x, t)}{\partial x} = \frac{2}{\hbar} V_I(x) P \neq 0$$

طرف راست می تواند معرف چشمه یا چاه باشد.

به معادله فوق معادله شرودینگر یک ذره تحت پتانسیل $V(x)$ گویند.

تعمیم معادله شرودینگر به سه بعد

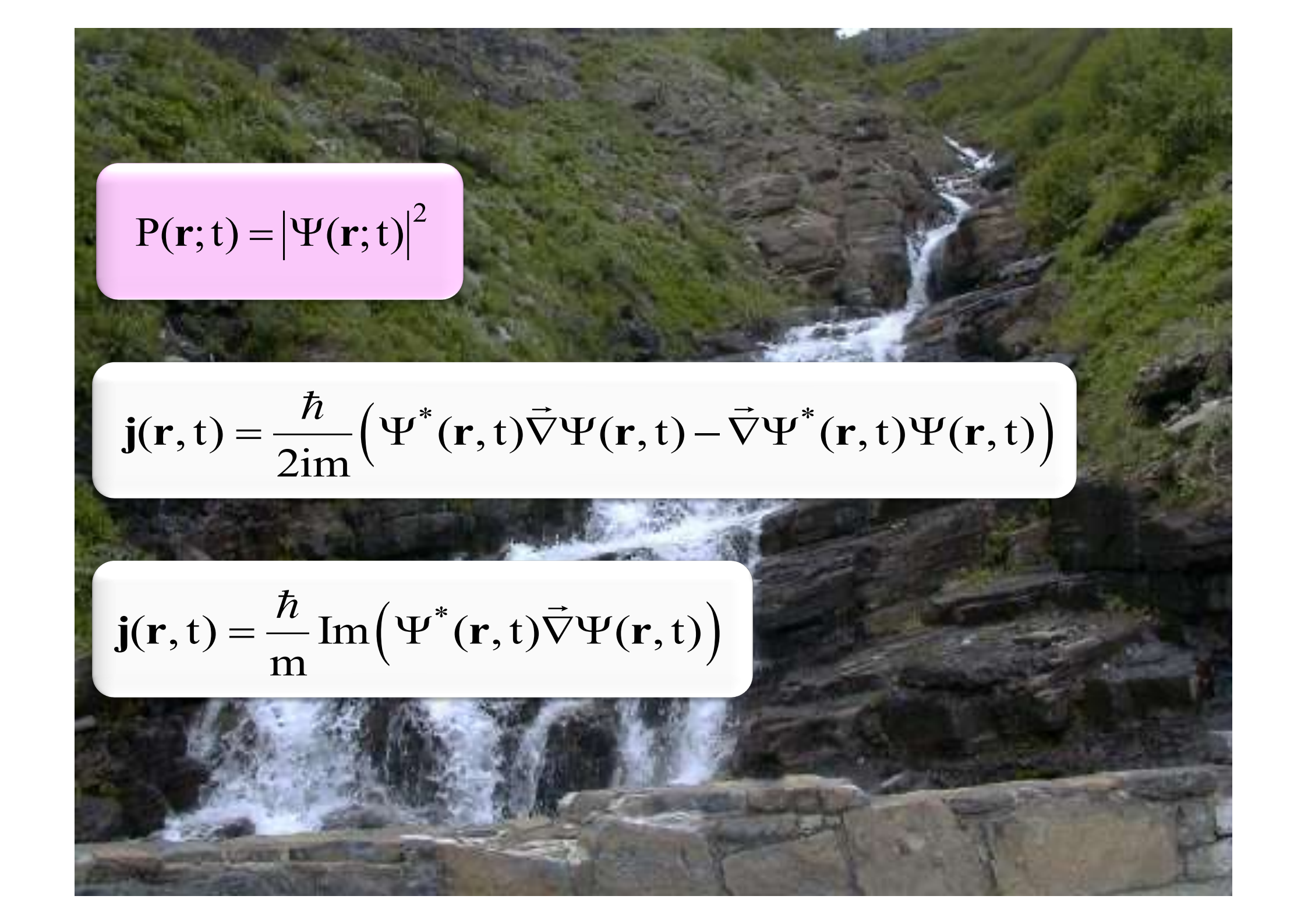
$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, y, z; t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \Psi(x, y, z; t) + V(x, y, z) \Psi(x, y, z; t)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}; t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}; t) + V(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}; t)$$

نظم قانون بقا

$$\frac{\partial P(x, y, z; t)}{\partial t} + \nabla \cdot J(x, y, z; t) = 0$$

$$\frac{\partial P(r; t)}{\partial t} + \nabla \cdot J(r; t) = 0$$


$$P(\mathbf{r}; t) = |\Psi(\mathbf{r}; t)|^2$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2im} \left(\Psi^*(\mathbf{r}, t) \vec{\nabla} \Psi(\mathbf{r}, t) - \vec{\nabla} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) \right)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\Psi^*(\mathbf{r}, t) \vec{\nabla} \Psi(\mathbf{r}, t) \right)$$

مقادیر چشم داشتی در مکانیک کوانتومی

1

$$\langle f(x) \rangle = \frac{\int dx f(x) P(x, t)}{\int dx P(x, t)} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) f(x) \Psi(x, t)$$

تابع موج متغیر اساسی در مکانیک کوانتومی است و با رابطه بالا می‌توان مقدار چشم‌داشتی توابع مختلف را محاسبه کرد.

اما اگر بخواهیم $\langle p \rangle$ را حساب کنیم چون p را به صورت تابعی از x نداریم رابطه فوق به ما کمک نمی‌کند.

برای محاسبه $\langle p \rangle$ چنین عمل می کنیم:

از مکانیک کلاسیک می دانیم که:

$$p = mv = m \frac{dx}{dt}$$

$$\langle p \rangle = m \frac{d\langle x \rangle}{dt}$$

$$\langle p \rangle = m \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t)$$

$$\langle p \rangle = m \int_{-\infty}^{\infty} dx \left\{ \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} x \Psi(x, t) + \Psi^* x \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \right\}$$

نکته: توجه شود که مشتق x نسبت به t در زیر انتگرال وجود ندارد، زیرا تنها متغیر اساسی در مکانیک کوانتومی تابع موج است، یعنی تغییرات در تابع موج است که سبب تغییر در x می شود.

از معادله شرودینگر و مزدوج آن خواهیم داشت:

$$\langle p \rangle = \frac{\hbar}{2i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left\{ \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} x \Psi(x, t) - \Psi^* x \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} \right\}$$

تمرین: نشان دهید که انتگرالده را می توان به صورت زیر نوشت:

$$\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} x \Psi(x, t) - \Psi^* x \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} =$$

$$= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} x \Psi - \Psi^* x \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi^* \Psi \right) + 2 \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x}$$

$$\langle p \rangle = \frac{\hbar}{2i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} x \Psi - \Psi^* x \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi^* \Psi \right) + \frac{\hbar}{2i} \int_{-\infty}^{\infty} 2 \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx$$

$$\langle p \rangle = \frac{\hbar}{2i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} x \Psi - \Psi^* x \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi^* \Psi \right) + \frac{\hbar}{2i} \int_{-\infty}^{\infty} 2 \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx$$

$$\langle p \rangle = \frac{\hbar}{2i} \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} x \Psi - \Psi^* x \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi^* \Psi \right) + \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi dx$$

0

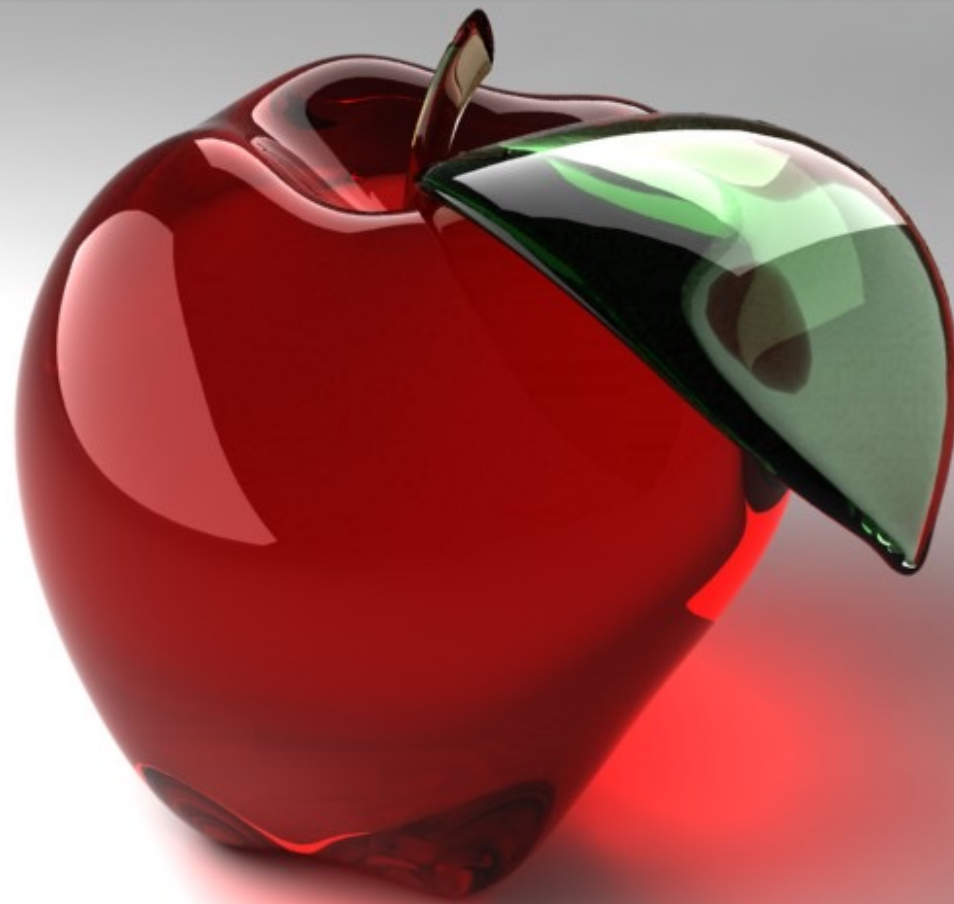
چون تابع موج و مزدوج آن باید مجذورا انتگرال پذیر باشند، پس باید در بینهایت صفر شوند.

$$\langle p \rangle = \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t)$$

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

در مکانیک کوانتومی p در فضای x یک عملگر بر حسب x می باشد.

تمرین: $\langle p \rangle$ را به $\langle f(p) \rangle$ تعمیم دهید:



$$\langle f(p) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) f\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi(x, t)$$

اهمیت فیزیکی $\Phi(p)$

1) قضیه پارسوال: اگر تابع موجی به یک نرمالیزه باشد، آنگاه تبدیل فوریه آن نیز به یک نرمالیزه است.

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \Phi(p) e^{ipx/\hbar}$$

$$\Phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi(x) e^{-ipx/\hbar}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp \Phi^*(p) \Phi(p) = \int_{-\infty}^{\infty} dp \Phi^*(p) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi(x) e^{-ipx/\hbar} =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi(x) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \Phi^*(p) e^{-ipx/\hbar}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi(x) \Psi^*(x) = 1$$



(2) نکته دیگر اینکه: تبدیل فوریه تابع موج خود یک تابع موج در فضای تکانه محسوب می شود:

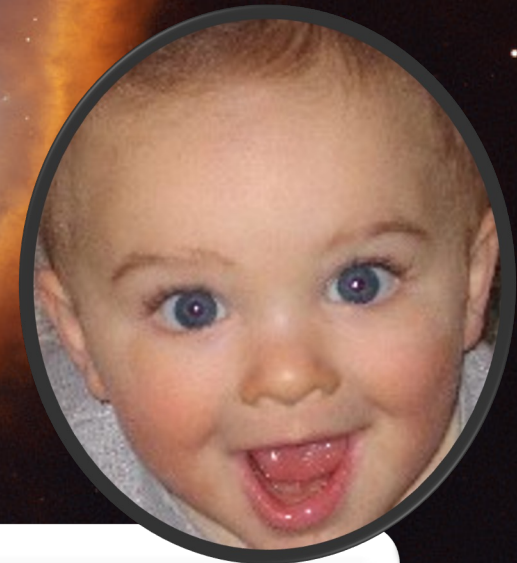
$$\langle p \rangle = \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t)$$

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \Phi(p) e^{ipx/\hbar}$$

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{ip}{\hbar} dp \Phi(p) e^{ipx/\hbar}$$

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp \Phi(p) p \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x) e^{ipx/\hbar}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dp \Phi(p) p \Phi^*(p)$$



نتایج:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp \Phi(p) p \Phi^*(p)$$



$$\int_{-\infty}^{\infty} dp \Phi^*(p) \Phi(p) = 1$$

قویا بیان می کنند که می توان $\Phi(p)$ را به عنوان تابع موج در فضای p در نظر گرفت.

$$|\Phi(p)|^2$$

احتمال یافتن ذره با تکانه p

بدین ترتیب حتی می توان t را به صورت زیر وارد $\Phi(p)$ نیز کرد، یعنی $\Phi(p, t)$:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \Phi(p) e^{i(px - \frac{p^2}{2m}t)/\hbar}$$

$$\Phi(p, t) = \Phi(p) e^{-i\frac{p^2}{2m}t/\hbar}$$

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \Phi(p, t) e^{ipx/\hbar}$$

اما باید مراقب تعبیرمان باشیم.

هنوز می توانیم به جای آنکه به $\Phi(p, t)$ مانند تابع موج نگاه کنیم باز هم فقط $\Psi(x, t)$ را تابع موج در نظر بگیریم که در این صورت باید p را به صورت عملگر در نظر بگیریم.

نکته: فضای تکانه p عملگر نیست.

نکته فوق بدین معنی است که اگر $\Phi(p, t)$ را تابع موج در فضای تکانه تصور کنیم، آنگاه p اسکالر است.

اما اگر $\Psi(x, t)$ را تابع موج در نظر بگیریم، آنگاه p یک عملگر به صورت زیر در فضای مکان است:

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$$

تمرین: ثابت کنید که به عکس مکان نیز در فضای تکانه یک عملگر است:

تمرین: $\langle x \rangle$ را به $\langle f(x) \rangle$ تعمیم دهید:

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Phi^*(p, t) f \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Phi(p, t)$$

بتدریج در خواهیم یافت که عملگرها نقش اساسی در مکانیک کوانتومی ایفا می کنند و با آنها بیشتر آشنا خواهیم شد. در اینجا به ذکر **نکات زیر** اکتفا می کنیم:

پیش از ارائه نکات به دو تعریف زیر توجه نمایید:

$$[A, B] = AB - BA$$

جاببه جاگر A و B

$$\{A, B\} = AB + BA$$

پاد جاببه جاگر A و B

(1) بر خلاف اعداد معمولی، عملگرها همواره با هم جاببه جا نمی شوند:

$$[p, x] \Psi(x, t)$$

$$= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} x \Psi - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi$$

$$= \frac{\hbar}{i} \Psi + \cancel{\frac{\hbar}{i} x \frac{\partial \Psi}{\partial x}} - x \cancel{\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x}}$$

$$= \frac{\hbar}{i} \Psi$$

$$[p, x] = \frac{\hbar}{i} \neq 0$$

یعنی **x** و **p** با هم جاببه جا نمی شوند.

حال این سوال مطرح است که اگر ما یک تابع از x و p مانند $f(x, p)$ داشته باشیم و بخواهیم به مکانیک کوانتومی بیایم باید به جای xp چه قرار دهیم؟

پاسخ: یک کمیت متقارن از x و p

xp یا px ؟

xp



$$\frac{1}{2}(xp + px)$$

x^2p



$$\frac{1}{4}(x^2p + 2xpx + px^2)$$

رابطه فوق چگونه بدست آمده است؟

$$x^2p = x(xp) = x\left(\frac{1}{2}(xp + px)\right) = \frac{1}{2}\left(x\left(\frac{1}{2}(xp + px)\right) + \left(\frac{1}{2}(xp + px)\right)x\right)$$

$$x^2p = \frac{1}{4}(x^2p + xpx + xpx + px^2) = \frac{1}{4}(x^2p + 2xpx + px^2)$$

خلاصه اینکه: در مکانیک کلاسیک x^2p ، xpx و px^2 با هم یکسان اند ولی در مکانیک کوانتومی این گونه نیست.

بعدا خواهیم دید که این جا به جا نشدن x و p است که سبب می شود عدم قطعیت بین x و p وجود داشته باشد.

$$[p, x] = \frac{\hbar}{i} \neq 0$$

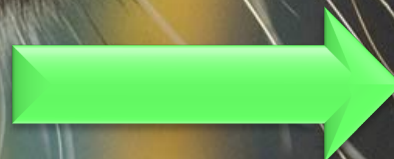


$$\Delta p \Delta x \geq \hbar$$

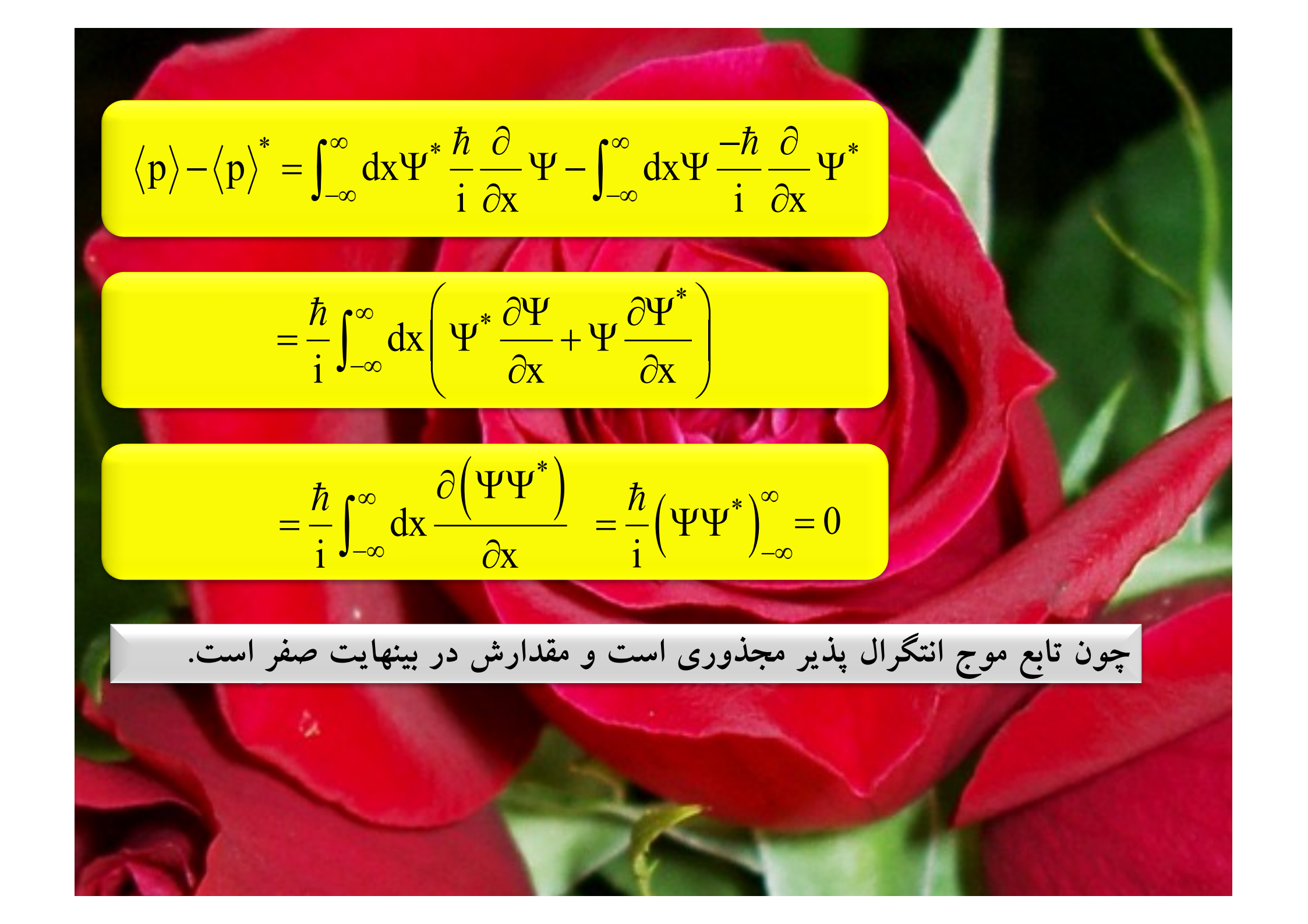
(2) نکته دوم: وجود i در p ممکن است این شبه را پدید آورد که $\langle p \rangle$ حقیقی نباشد. در زیر نشان می دهیم که این نگرانی بی مورد است.

برای این منظور کافی است نشان دهیم که:

$$\langle p \rangle - \langle p \rangle^* = 0$$



$$\langle p \rangle = \langle p \rangle^*$$


$$\langle p \rangle - \langle p \rangle^* = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi - \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi \frac{-\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi^*$$

$$= \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right)$$

$$= \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\partial (\Psi \Psi^*)}{\partial x} = \frac{\hbar}{i} (\Psi \Psi^*)_{-\infty}^{\infty} = 0$$

چون تابع موج انتگرال پذیر مجذوری است و مقدارش در بینهایت صفر است.

اگر تابع موج انتگرال پذیر مجذوری نباشد ولی یک تابع متناوب باشد باز هم $\langle p \rangle$ حقیقی خواهد شد:

$$\langle p \rangle - \langle p \rangle^* = \int_0^L dx \Psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi - \int_0^L dx \Psi \frac{-\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi^*$$

$$= \frac{\hbar}{i} \int_0^L dx \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right)$$

$$= \frac{\hbar}{i} \int_0^L dx \frac{\partial (\Psi \Psi^*)}{\partial x} = \frac{\hbar}{i} (\Psi \Psi^*) \Big|_0^L = 0$$

$$\Psi(0) = \Psi(L)$$

یا

$$\Psi(x + L) = \Psi(x)$$

چون :

تعریف عملگر هر میتی: مقدار
چمداشتی یک عملگر هر میتی
حقیقی است.

آنگاه می توان معادله زیر

$$p_{\text{op}} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

اگر:

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

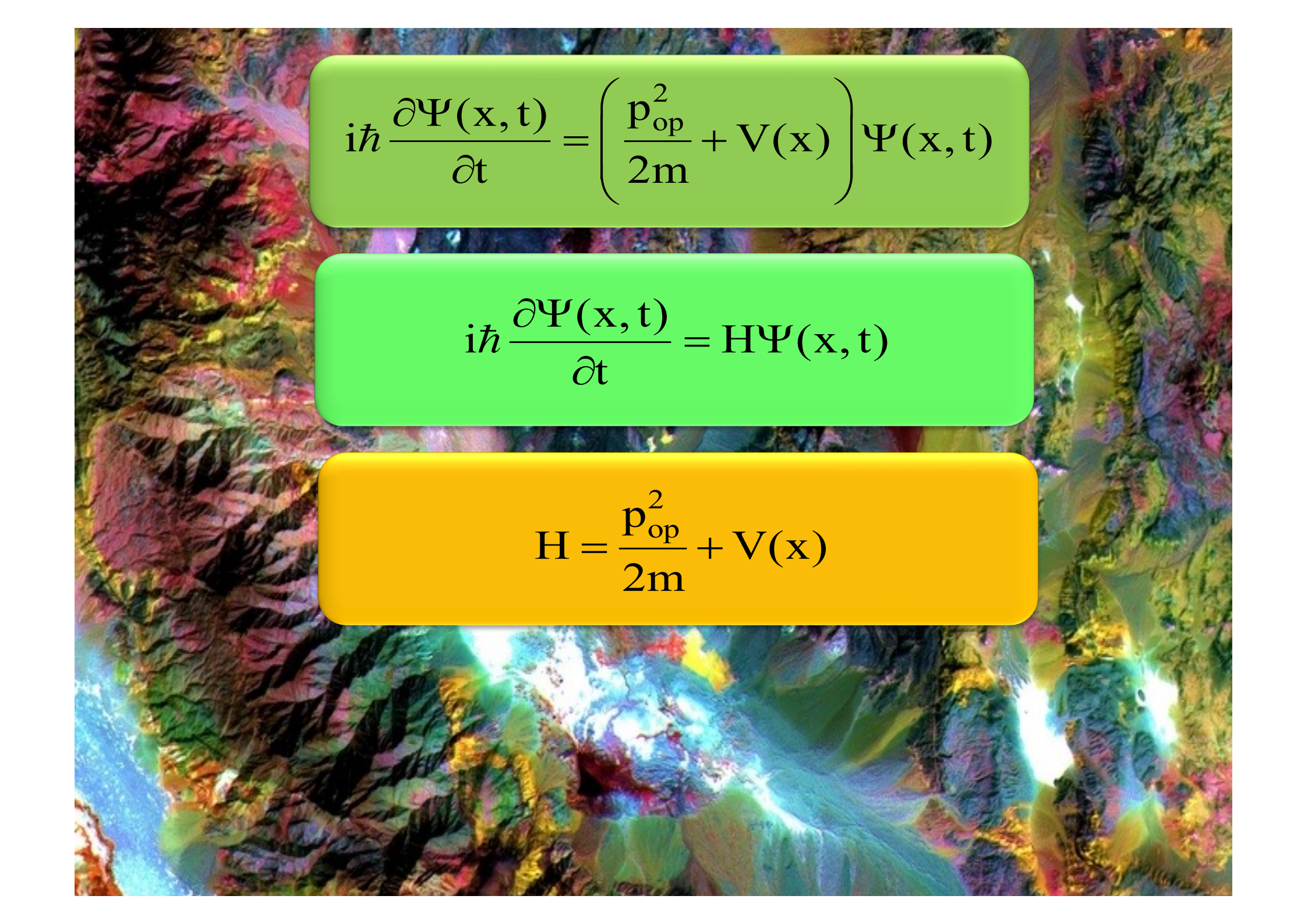
به صورت زیر هم نوشت:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \frac{p_{\text{op}}^2}{2m} \Psi(x, t)$$

و تعمیم آن:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \left(\frac{p_{\text{op}}^2}{2m} + V(x) \right) \Psi(x, t)$$

معادله غیر نسبیتی مکانیک
کوانتومی


$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \left(\frac{p_{\text{op}}^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \right) \Psi(\mathbf{x}, t)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = H \Psi(\mathbf{x}, t)$$

$$H = \frac{p_{\text{op}}^2}{2m} + V(\mathbf{x})$$

تمرین: ضمیمه ب را خلاصه کنید.



تست 1 (کنکور کارشناسی ارشد سال 1374): هرگاه تابع حالت يك ذره حقيقي باشد، مقدار انتظاري $\langle p \rangle$ ، برابر مي شود با:

(1) صفر

(2) بستگي به نوع تابع دارد

(3) موهومي خالص

(4) حقيقي اما مخالف صفر



$$\langle p \rangle = \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t)$$

$\langle p \rangle$ همواره حقيقي است. اگر تابع موج حقيقي باشد، آنگاه انتگرالده حقيقي و بنابر اين ضريب موهومي $\hbar/i$ آن را موهومي خالص مي کند. پس در اين حالت :

$$\langle p \rangle = 0$$

fedora

تست 2 (کنکور کارشناسی ارشد سال 13): کدامیک از توابع نمایی ذیل برای یک تابع حالت، حداقل عدم یقین را در بر دارد؟

(1) دلتای دیراک

(2) سینوسی

(3) گوسی

(4)

لورنتسی



در ضمیمه ب کتاب (که قبلاً به عنوان تمرین تعیین شده بود) ثابت شده است که حالت عدم قطعیت کمینه به ازای تابع موج گوسی روی می دهد.

تست 3 (کنکور کارشناسی ارشد سال 1383): تابع موج ذره ای در فضای اندازه حرکت خطی در یک بعد به

شکل $\Phi(p) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{\alpha p^2}{2}}$ است، که در آن α مقدار ثابتی است. مقدار عدم قطعیت در بخش اندازه حرکت

خطی کدام است؟

4) $\sqrt{2\alpha}$

3) $\frac{1}{2\alpha}$

2) $\frac{1}{\sqrt{2}}$

1) $\frac{1}{\sqrt{2\alpha}}$



$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$$

بنابر تست 1 داریم:

$$\langle p \rangle = 0$$

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle &= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\alpha p^2}{2}} p^2 e^{-\frac{\alpha p^2}{2}} dp \\ &= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} p^2 e^{-\alpha p^2} dp \end{aligned}$$

$$= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2} \left\{ -\frac{d}{d\alpha} \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{1/2} \right\} = \frac{1}{2\alpha}$$

$$\Delta p = \sqrt{\frac{1}{2\alpha} - 0^2} = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}}$$

تست 4 (کنکور کارشناسی ارشد سال 1391): برای ذره ای که تحت پتانسیل مختلط یک بعدی $V(x) = V_0(x + 2ix^2)$ نگر داشته شده است، حاصل عبارت $\frac{\partial j}{\partial x}$ چقدر است؟

$$2) - \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{4V_0x}{\hbar} \right) P$$

$$1) - \frac{\partial P}{\partial t}$$

$$4) \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{4V_0x^2}{\hbar} \right) P$$

$$3) - \left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{4V_0x^2}{\hbar} \right) P$$



$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = \frac{2}{\hbar} V_I(x) P$$

$$\frac{\partial j}{\partial x} = -\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{2}{\hbar} (V_0 2x^2) P$$

$$\frac{\partial j}{\partial x} = -\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{2}{\hbar} V_I(x) P$$

$$\frac{\partial j}{\partial x} = \left(-\frac{\partial}{\partial t} + \frac{4V_0x^2}{\hbar} \right) P$$

تست 5 (کنکور کارشناسی ارشد سال 1374): ذره ای که جرم آن m است، با تابع موج یک بعدی $\Psi = \sqrt{c}e^{ipx/\hbar}$ توصیف می شود. شار احتمال این ذره کدام است؟

4) $\sqrt{c} \frac{p}{m}$

3) $2\sqrt{c} \frac{p}{m}$

2) $c \frac{p}{m}$



1) $\frac{p}{m}$

$$\Psi = \sqrt{c}e^{ipx/\hbar}$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\Psi^*(\mathbf{r}, t) \vec{\nabla} \Psi(\mathbf{r}, t) \right)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\sqrt{c}e^{-ipx/\hbar} \sqrt{c} \frac{ip}{\hbar} e^{ipx/\hbar} \right)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{m} \frac{cp}{\hbar} = \frac{cp}{m}$$

NAPLES
ZOO
at CARIBBEAN GARDENS

تست 6 (کنکور کارشناسی ارشد سال 1376): هرگاه $P_{ab}(t)$ احتمال یافتن ذره در فاصله $a < x < b$ و $j(x, t)$ شار احتمال آن باشد داریم:

$$2) \frac{d}{dt} P_{ab}(t) = J(a, t) - J(b, t)$$



$$1) -\frac{d}{dt} P_{ab}(t) = 0$$

$$4) \frac{d}{dt} P_{ab}(t) = J(b, t) - J(a, t)$$

$$3) \frac{d}{dt} P_{ab}(t) = \text{cte.}$$

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial j(x, t)}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_a^b dx P(x, t) = - \int_a^b dx \frac{\partial}{\partial x} j(x, t) = j(a, t) - j(b, t)$$

تست 7 (کنکور کارشناسی ارشد سال 1376): اگر تابع موج ذره ای در فضای مکان حقیقی باشد چگالی شار آن برابر کدام است؟

(4) موهومی

(3) مختلط

(2) حقیقی

(1) صفر



$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\Psi^*(\mathbf{r}, t) \vec{\nabla} \Psi(\mathbf{r}, t) \right)$$

از طرفی تابع موج طبق فرض مساله حقیقی است، پس می توان از رابطه بالا نتیجه گرفت که:

$$\mathbf{j} = 0$$

تست 8 (کنکور کارشناسی ارشد سال 1374): در یک بعد، ذره ای در پتانسیل $V(x)$ قرار دارد و تابع حالت آن $\Psi(x)$ یکی از ویژه حالت‌های هامیلتونی دستگاه است. ناگهان پتانسیل فوق در همه جا صفر می شود (پتانسیل خاموش می شود). در این صورت دامنه احتمال آن که اندازه حرکت خطی سیستم در بازه معین p تا $p+dp$ ، $P(p,t)dp$ باشد، چقدر است؟

(2) متناسب با مربع اندازه تابع موج



(1) متناسب با تبدیل معکوس فوری $\Psi(x)$

(4) صفر

(3) متناسب با ارزش انتظاری اندازه حرکت خطی در حالت $\Psi(x)$

بنا بر قضیه پارسوال داریم که:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp \Phi^*(p) \Phi(p) = 1$$

$$P(p, t)dp = \Phi^*(p) \Phi(p) dp = |\Phi(p)|^2 dp$$

تست 9 (کنکور کارشناسی ارشد سال 1380):

تابع موج ذره ای به جرم m در یک بعد x ، $\Psi(x, t) = [Ae^{ipx/\hbar} + Be^{-ipx/\hbar}]e^{-ip^2t/2m\hbar}$ است. چگالی جریان متناظر این تابع موج کدام است؟ (A و B اعداد ثابت مختلطی هستند).

$$2) \frac{p}{m} (|A|^2 - |B|^2)$$



$$1) \frac{p}{m} (|A|^2 + |B|^2)$$



$$4) \frac{p}{m} \left(|A|^2 \cos \frac{px}{\hbar} - |B|^2 \sin \frac{px}{\hbar} \right)$$

$$3) \frac{p}{m} (|A|^2 + |B|^2) \cos \frac{p^2 t}{2m\hbar}$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\Psi^*(\mathbf{r}, t) \vec{\nabla} \Psi(\mathbf{r}, t) \right)$$

$$= \frac{p}{m} (|A|^2 - |B|^2)$$

تست 10 (کنکور کارشناسی ارشد سال 1381): تابع موج ذره آزاد در فضای یک بعدی به صورت بسته موجی است

که با رابطه $\Psi(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}$ توصیف می شود. مقدار انتظاری اندازه حرکت ذره کدام است؟

2) $\frac{\hbar\alpha}{2} \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}$

4) $\frac{\hbar}{\sqrt{\alpha}}$



1) 0

3) $\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$

تابع موج داده شده حقیقی است، بنابراین مقدار انتظاری اندازه حرکت صفر است.

تست 11 (کنکور کارشناسی ارشد سال 1381): تابع موج ذره ای در مختصات کروی $\Psi(\mathbf{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} / r$ است، که در

آن $\vec{k} = k\hat{r}$ بردار موج وابسته به ذره است. چگالی جریان وابسته به این تابع موج کدام است؟ ($\hat{r}$ بردار یکه شعاعی است)

$$2) \frac{p}{m} \frac{1}{r^3} \hat{r}$$

$$1) -\frac{p}{m} \frac{1}{r^3} \hat{r}$$

$$4) -\frac{p}{m} \frac{1}{r^2} \hat{r}$$

$$3) \frac{p}{m} \frac{1}{r^2} \hat{r}$$



$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\Psi^*(\mathbf{r}, t) \vec{\nabla} \Psi(\mathbf{r}, t) \right)$$

$$\vec{\nabla} = \hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\phi} \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \frac{e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{r} \left(\frac{e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{r^2} + \frac{i k e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{r^2} \right) \hat{r} = \frac{\hbar}{m} \frac{k}{r^2} \hat{r} = \frac{p}{m} \frac{1}{r^2} \hat{r}$$

پیش از ارایه تست های بعدی به نکات زیر در ارتباط با جابه جاگرها توجه نمایید:

$$[a\hat{A} + b\hat{B}, \hat{C}] = a[\hat{A}, \hat{C}] + b[\hat{B}, \hat{C}]$$

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}]$$

$$\langle A \rangle = \langle A \rangle^* \quad A = A^\dagger$$

ویژگی عملگرهای هرمیتی

عملگرهای زیر مستقل از اینکه A هرمیتی باشد یا نه همواره هرمیتی اند.

$$(A + A^\dagger)^\dagger = A^\dagger + (A^\dagger)^\dagger = A^\dagger + A = A + A^\dagger$$

$$(AA^\dagger)^\dagger = (A^\dagger)^\dagger A^\dagger = AA^\dagger = AA^\dagger$$

اثبات:

$$A + A^\dagger \text{ \& } AA^\dagger$$

اگر A و B هرمیتی باشند، حاصل ضرب این دو عملگر تنها زمانی هرمیتی است که جابه جاگر آنها صفر باشد:

$$A = A^\dagger \quad B = B^\dagger$$

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger = BA = AB$$

$$[A, B] = 0 \longrightarrow AB = BA$$

تست 12 (کنکور کارشناسی ارشد سال 1382): عملگر $\hat{B} = x + a \frac{d}{dx}$ که در آن a مقدار ثابت حقیقی است، را در نظر بگیرید. جابه جا گر $[\hat{B}, \hat{B}^\dagger]$ کدام است؟

2) 0

1) $-2a\hbar$

4) $a\hbar$

3) $2a$

$$[\hat{B}, \hat{B}^\dagger] = \left[x + a \frac{d}{dx}, x + a \frac{d}{dx} \right]$$

$$[\hat{B}, \hat{B}^\dagger] = -\frac{ai}{\hbar} [x, p] + \frac{ai}{\hbar} [p, x]$$

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

$$p = [p, x] = \frac{\hbar}{i} = -i\hbar$$

$$[\hat{B}, \hat{B}^\dagger] = \left[x + \frac{aip}{\hbar}, x - \frac{aip}{\hbar} \right]$$

$$[\hat{B}, \hat{B}^\dagger] = -\frac{ai}{\hbar} (i\hbar) + \frac{ai}{\hbar} (-i\hbar) = 2a$$

تست 13 (کنکور کارشناسی ارشد سال 1375): کدامیک از عملگرهای زیر هرمیتی نیستند؟

$$2) xp_x$$

$$1) xy$$

$$3) xzp_y$$

$$3) xp_y$$

$$[x, p_x] \neq 0$$

چون اگر A و B هرمیتی باشند، حاصل ضرب این دو عملگر تنها زمانی هرمیتی است که جابه جاگر آنها صفر باشد.

تست 14 (کنکور کارشناسی ارشد سال 1376): عملگرهای A و B هر دو هرمیتی هستند، جابه جاگر این دو عملگر $[A, B]$ عملگری است.

(1) پاد هرمیتی

(2) صفر

(3) نامشخص

(4) هرمیتی

$$[A, B]^{\dagger} = (AB - BA)^{\dagger} = (AB)^{\dagger} - (BA)^{\dagger} = B^{\dagger} A^{\dagger} - A^{\dagger} B^{\dagger}$$

$$A^{\dagger} = A \quad \& \quad B^{\dagger} = B$$

$$[A, B]^{\dagger} = BA - AB = -[A, B]$$

نکته: مقدار چشمداشتی یک عملگر پاد هرمیتی موهومی خالص است:

$$A = -A^{\dagger}$$

$$\langle A \rangle = -\langle A^{\dagger} \rangle$$

تست 15 (کنکور کارشناسی ارشد سال 1374): رابطه عدم قطعیت بین مختصات x و انرژی جنبشی $T = P_x^2/2m$ عبارت است از $\Delta x \Delta T > \dots$

$$4) \frac{\hbar}{2} |\langle p \rangle|$$

$$3) \frac{\hbar}{2} \left\langle \frac{p^2}{m} \right\rangle$$

$$2) \frac{\hbar}{2} \frac{1}{m}$$

$$1) \frac{\hbar}{2} \left| \left\langle \frac{p}{m} \right\rangle \right|$$

$$[T, x] = \left[\frac{p_x^2}{2m}, x \right] = \frac{1}{2m} [p_x^2, x] = \frac{1}{2m} (p_x [p_x, x] + [p_x, x] p_x)$$

$$= \frac{1}{2m} \left(p_x \frac{\hbar}{i} + \frac{\hbar}{i} p_x \right) = \frac{\hbar}{mi} p_x = -i \frac{\hbar}{m} p_x$$

$$[A, B] = iC \longrightarrow \Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle C \rangle|$$

نکته:

$$[T, x] = -i \frac{\hbar}{m} p_x \longrightarrow \Delta T \Delta x \geq \frac{1}{2} \left| \left\langle \frac{\hbar}{m} p_x \right\rangle \right| = \frac{\hbar}{2} \left| \left\langle \frac{p_x}{m} \right\rangle \right|$$

تست 16 (کنکور کارشناسی ارشد سال 1374): معادل اپراتوری x^2p کدام است؟

$$2) \frac{1}{2}(x^2p - px^2)$$

$$1) \frac{1}{2}(x^2p + px^2)$$

$$4) \frac{1}{4}(x^2p + 2xpx + px^2)$$

$$3) \frac{1}{2}(x^2p + 2xp + px^2)$$

$$x^2p = x(xp) = x(xp + px) = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2}(x(xp + px) + (xp + px)x) \right) = \frac{1}{4}(x^2p + 2xpx + px^2)$$

تست 17 (کنکور کارشناسی ارشد سال 1376): چنانچه A و B عملگر و a عددی غیر حقیقی باشد، کدام گزینه نادرست است؟

$$2) (A + B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger$$

$$1) (A^\dagger)^\dagger = A$$

$$4) (AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$$

$$3) (aA)^\dagger = aA^\dagger$$

$$(aA)^\dagger = a^* A^\dagger$$

تعریف می

تست 18 (کنکور کارشناسی ارشد سال 1380): عملگر A به صورت $Af(x) = \int_0^x f(x')dx'$ شود، حاصل جابه جاگر $[x, A]$ کدام است؟

4) A^2

3) x

2) A

1) 0

$$[x, A]f(x) = xAf(x) - Ax f(x) = x \int_0^x f(x')dx' - \int_0^x x' f(x')dx'$$

$$= x \int_0^x f(x')dx' - \left\{ x \int_0^x f(x')dx' - \int_0^x \left[\int_0^x f(x')dx' \right] dx' \right\}$$

$$= \int_0^x \left[\int_0^x f(x')dx' \right] dx' = A^2 f(x) \longrightarrow [x, A] = A^2$$

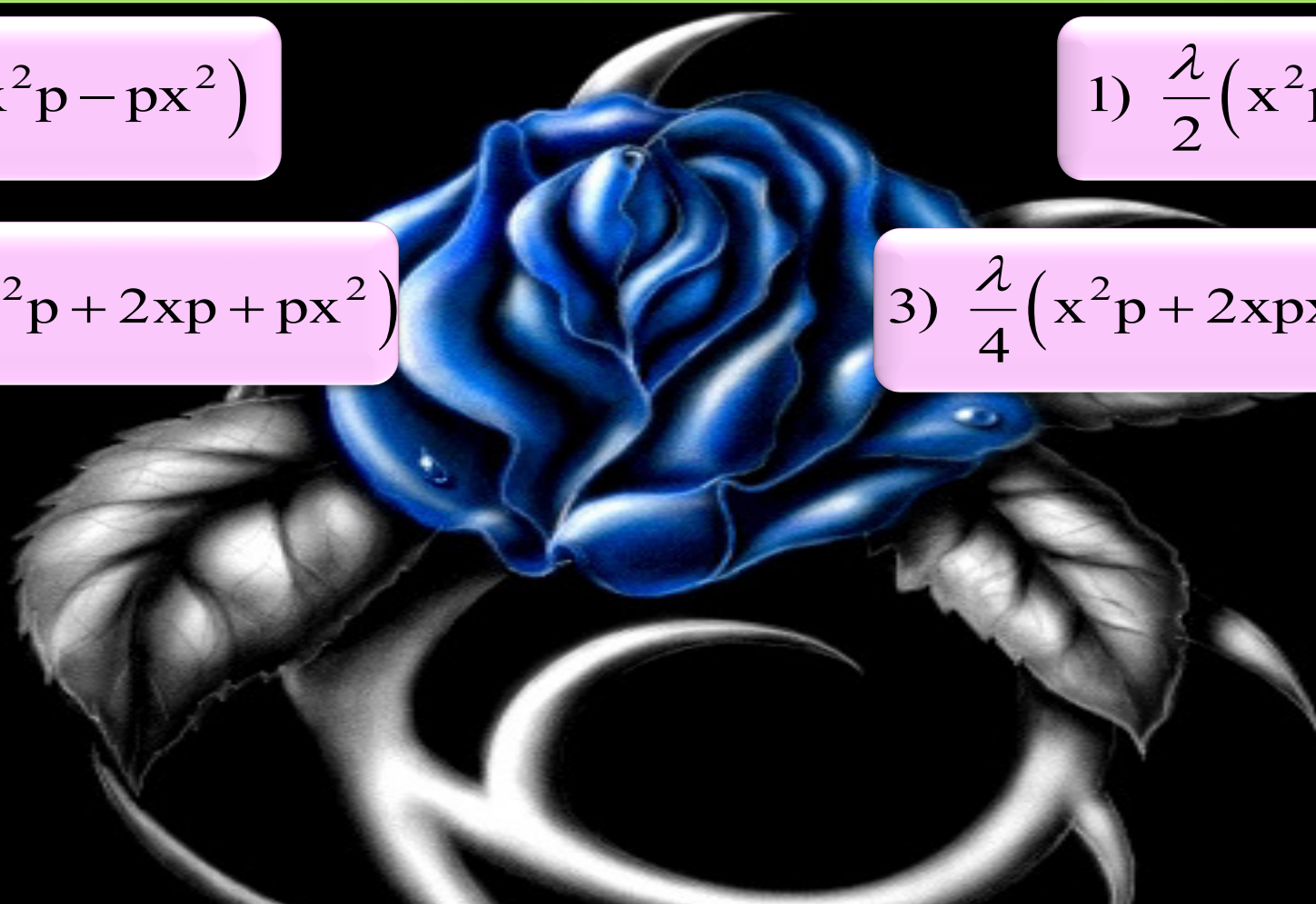
تست 19 (کنکور کارشناسی ارشد سال 1381): هامیلتونی یک ذره کلاسیک به صورت $H=\lambda x^2 p$ است. هامیلتونی کوانتومی این ذره به کدام شکل می تواند باشد؟

2) $\frac{\lambda}{2}(x^2 p - p x^2)$

1) $\frac{\lambda}{2}(x^2 p + p x^2)$

4) $\frac{\lambda}{2}(x^2 p + 2xp + p x^2)$

3) $\frac{\lambda}{4}(x^2 p + 2xp + p x^2)$



$$x^2 p = x(xp) = x(xp + px) = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} (x(xp + px) + (xp + px)x) \right) = \frac{1}{4} (x^2 p + 2xp + p x^2)$$