



مدرسان شریف

فصل اول

«مبانی تجربی پیدایش نظریه کوانتومی»

در این فصل به مطالعه پدیده‌هایی می‌پردازیم که در سال‌های آغازین قرن بیستم، لزوم کنار نهادن مفاهیم کلاسیک را در توضیح دقیق پدیده‌های فیزیکی بر ما آشکار ساخت و منجر به تولد نظریه‌ای شد که آن را به نام نظریه کوانتومی می‌شناسیم.

درسنامه (۱): آزمایش‌های تجربی

در این درسنامه به آزمایش‌هایی که منجر به تولد مکانیک کوانتوم می‌شود می‌پردازیم.

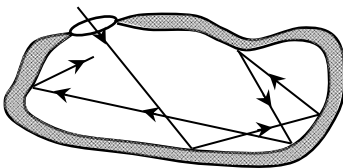
تابش جسم سیاه

اجسام به واسطه دمایی که دارند، تابش می‌کنند. در حالت تعادل نور گسیل شده شامل طیفی از تمام بسامدها (یا به عبارتی طول موج‌ها) می‌شود که تابع دمایی (T) جسم است. توان گسیل $E(\lambda, T)$ انرژی گسیل شده در واحد سطح در واحد زمان و در طول موج λ در دمایی T است. ضریب جذب $A(\lambda, T)$ اجسام کسری از انرژی فرودی است که جسم در طول موج λ جذب می‌کند. به ازای یک طول موج معین نسبت $\frac{E}{A}$ برای همه اجسام ثابت است.

جسم سیاه: به جسمی اطلاق می‌شود که تمامی تابش فرودی را جذب می‌کند و بنابراین برای آن $A = 1$ و در نتیجه $E(\lambda, T)$ برای جسم سیاه تابعی جهانی است.

برای دست یافتن به طیف جسم سیاه می‌توان محفظه‌ای تو خالی را مجسم کرد که دیواره‌های آن تا دمایی T گرم شده‌اند و یک روزنه بسیار کوچک رو به بیرون دارد. چنین محفظه‌ای را کواک می‌نامند. در این صورت هر تابشی به این روزنه فرود آید دیگر امکان خارج شدن از آن را ندارد و از این رو روزنه تقریباً یک جذب کننده کامل بوده و بنابراین تابش ناشی از آن «تابش جسم سیاه» است.

شکل روبرو کواکی را نمایش می‌دهد که می‌تواند بهترین نمونه عملی از جسم سیاه باشد؛ دیواره‌ها تا دمایی T گرم شده‌اند. تابش از روزنه وارد کواک شده و امکان خارج شدن ندارد.



کواک با دیواره‌هایی در دمایی T

نکته ۱: می‌توان نشان داد چگالی انرژی الکترومغناطیسی درون کواک با توان گسیل آن رابطه $u(\lambda, T) = \frac{4}{c} E(\lambda, T)$ دارد که در آن c سرعت نور است.

تا پیش از سال ۱۹۰۰، برای توصیف طیف انرژی گسیل شده از جسم سیاه دو فرمول پیشنهاد شده بود:

۱- **فرمول وین** که برای تابش با طول موج‌های کوتاه (و به عبارتی بسامدهای بزرگ) صادق است (در این رابطه β یک ثابت است): $u(v, T) \propto v^3 e^{-\beta \frac{v}{T}}$

۲- **فرمول ریلی - جینز** که در مورد تابش با طول موج‌های بلند (و به عبارتی بسامدهای کوچک) صدق می‌کند (در اینجا k ثابت بولتزمن است):

$$u(v, T) = \frac{8\pi v^2}{c^3} kT$$

هیچ‌یک از دو رابطه بالا نمی‌توانست به طور کامل توزیع طیفی تابش ناشی از جسم سیاه را توضیح دهد و رابطه ریلی - جینز (انتگرال چگالی انرژی روی تمامی بسامدها) را بی‌نهایت پیش‌بینی می‌کرد که به فاجعه فرابنفش معروف است.



در سال ۱۹۰۰ ماکس پلانک فرض کرد که دیواره‌های کاواک انرژی الکترومغناطیسی را تنها به صورت مضارب درستی (صحیحی) از یک کوانتوم انرژی پایه ϵ ، جذب و یا گسیل کنند.

فرمول پلانک به صورت $u(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{\epsilon}{e^{kT} - 1}$ است که در آن $\epsilon = h\nu$ و h ثابت پلانک بوده و در دستگاه SI مقدار آن 6.63×10^{-34} J.s است.

در این رابطه c سرعت نور در خلأ، ν بسامد تابش و T دمای کاواک است. بنابر رابطه کوانتاش پلانک، نوسانگرهای دیواره درون کاواک به صورت $E = n\epsilon$ رد و بدل می‌شود که در آن n عددی درست و نامنفی است. به این ترتیب فرمول پلانک در موارد حدی به فرمول‌های وین و ریلی - جینز تحویل می‌یابد:

فرمول وین \rightarrow فرمول پلانک در حد فرکانس‌های بزرگ

فرمول ریلی - جینز \rightarrow فرمول پلانک در حد فرکانس‌های کوچک

رابطه استفان - بولتزمن: مطابق رابطه استفان - بولتزمن که از محاسبه انتگرال چگالی انرژی کل با استفاده از فرمول پلانک حاصل می‌شود، انرژی تابشی کل در واحد حجم متناسب با توان چهارم دمای جسم است: $U \propto T^4$.

قانون جابه‌جایی وین: طیف انرژی گسیل شده از یک جسم سیاه در دمای T برحسب طول موج λ ، بیشینه‌ای دارد که با دمای جسم سیاه مرتبط است؛ اگر بیشینه گسیل انرژی در طول موج λ_{\max} رخ دهد، مطابق این رابطه، $\lambda_{\max} \propto \frac{1}{T}$ بنابراین با افزایش دمای جسم، بیشینه تابش در طول موج‌های کوتاه‌تر رخ می‌دهد، به عبارت دیگر $\lambda_{\max} T = b$ که در آن b مقداری ثابت است؛ این همان قانون جابه‌جایی وین است.

کلمه مثال ۱: شعاع ستاره‌ای دو برابر شعاع خورشید است؛ اگر شدت تابش گسیلی در سطح دو ستاره یکسان باشد، دمای سطح ستاره (T_s) با دمای سطح خورشید (T_\odot) چه رابطه‌ای دارد؟

$$T_s = \sqrt{2}T_\odot \quad (1) \quad T_s = 2T_\odot \quad (2) \quad T_s = T_\odot \quad (3) \quad T_\odot = \sqrt{2}T_s \quad (4)$$

پاسخ: گزینه «۱» اگر فرض کنیم ستاره‌ها (از جمله خورشید) مانند اجسام سیاه رفتار می‌کنند، آنگاه بنابر رابطه استفان - بولتزمن انرژی تابشی کل ستاره (U) با توان چهارم دمای سطح آن (T) متناسب است؛ به عبارت دیگر $U = \sigma T^4$ ، که در آن σ ثابت استفان - بولتزمن است. به این ترتیب داریم:

$$\left. \begin{aligned} U_s &= \sigma T_s^4 \\ U_\odot &= \sigma T_\odot^4 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \frac{U_s}{U_\odot} = \left(\frac{T_s}{T_\odot}\right)^4 \quad (I)$$

اما انرژی الکترومغناطیسی U با شدت تابش I (انرژی تابشی در واحد سطح) رابطه $I = \frac{U}{A}$ دارد که در آن A مساحت سطح جسم است. در این صورت داریم:

$$\frac{U_s}{U_\odot} = \frac{I_s A_s}{I_\odot A_\odot}$$

اما بنابر فرض مسأله $I_s = I_\odot$ و $R_s = 2R_\odot$ و از آنجا که مساحت سطح کره‌ای به شعاع R برابر با $4\pi R^2$ است داریم:

$$\frac{U_s}{U_\odot} = \frac{A_s}{A_\odot} = \frac{4\pi R_s^2}{4\pi R_\odot^2} = \left(\frac{R_s}{R_\odot}\right)^2 = \left(\frac{2R_\odot}{R_\odot}\right)^2 \Rightarrow \frac{U_s}{U_\odot} = 4 \quad (II)$$

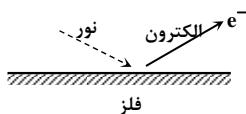
$$\left(\frac{T_s}{T_\odot}\right)^4 = 4 \Rightarrow \frac{T_s}{T_\odot} = \sqrt[4]{4} = \sqrt{2} \Rightarrow T_s = \sqrt{2}T_\odot$$

از روابط (I) و (II) ملاحظه می‌شود که:

اثر فوتوالکتریک

خروج الکترون‌ها از سطح فلز به وسیله تابش نور، اثر فوتوالکتریک نام دارد. مشاهدات تجربی، واقعیت‌های زیر را مشهود ساخت:

- ۱- وقتی یک صفحه فلزی صیقلی شده در معرض تابش نور قرار می‌گیرد ممکن است الکترون گسیل کند، اما هیچ یون مثبتی گسیل نمی‌کند.
- ۲- گسیل الکترون از این صفحه، به بسامد (ν) نور بستگی دارد. بسامد آستانه‌ای وجود دارد (ν_0) که به طور کلی از یک فلز به فلز دیگر فرق می‌کند؛ نور به شرطی می‌تواند جریان فوتوالکتریک تولید کند که بسامدش بیش از بسامد آستانه فلز باشد ($\nu > \nu_0$).
- ۳- بزرگی این جریان اگر تولید شود متناسب با شدت تابش چشمه نور است ($i \propto I$).
- ۴- انرژی فوتوالکترون‌ها مستقل از شدت چشمه نور است اما با بسامد نور فرودی به صورت خطی تغییر می‌کند ($E \propto \nu$).





الف) در نظریه الکترومغناطیس کلاسیک، انرژی موج الکترومغناطیسی با شدت آن متناسب است و به بسامد آن ارتباطی ندارد.
 ب) انرژی امواج الکترومغناطیس بر سطوح جبهه‌های موج پخش است، هر جبهه موج، انرژی اندکی به الکترون منتقل می‌کند به طوری که پس از سپری شدن مدت زمانی که قابل اندازه‌گیری است، الکترون از فلز جدا می‌شود.

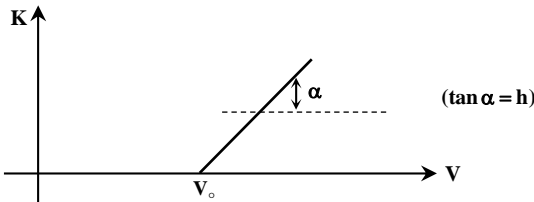
بنا به دلایل فوق (الف و ب) اثر فوتوالکتریک را نمی‌توان در چارچوب نظریه الکترومغناطیس کلاسیک توصیف کرد.
 آلبرت اینشتین تابش را متشکل از کوانتوم‌هایی با انرژی $h\nu$ در نظر گرفت که در آن ν بسامد نور است.

هر کوانتوم نور (که بعدها فوتون نامیده شده) در برخورد با الکترون درون فلز، انرژی الکترون را به اندازه $h\nu$ افزایش می‌دهد، اگر الکترون با جذب این انرژی، بتواند از سطح فلز بگریزد، جریان فوتوالکتریک پدیدار می‌شود. اما در برخی موارد انرژی الکترون برای جدا شدن از سطح فلز کافی نیست. همین امر وجود فرکانس آستانه را در اثر فوتوالکتریک توجیه می‌کند. در واقع هر فلزی با یک تابع کار W مشخص می‌شود، که اگر انرژی الکترون بزرگ‌تر یا مساوی تابع کار فلز باشد در آن صورت الکترون می‌تواند از سطح فلز جدا شود.

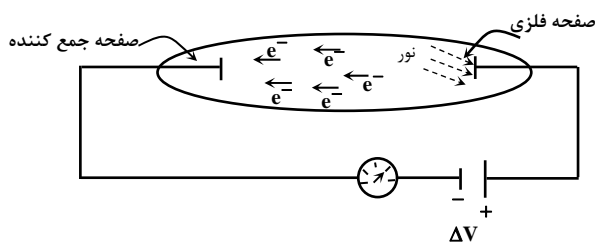
فرکانس آستانه ν_0 با رابطه $\nu_0 = \frac{W}{h}$ به تابع کار فلز مربوط می‌شود.

اگر انرژی فوتون تابشی بیش از تابع کار فلز باشد ($h\nu > W$) در این صورت الکترونی که فوتون را جذب کرده با انرژی مازاد K (انرژی جنبشی)، سطح فلز را ترک می‌گوید: $h\nu = W + K$ از این رو انرژی جنبشی فوتوالکتریک رابطه‌ای خطی با فرکانس نور دارد:

$$K = h\nu - W = h(\nu - \nu_0)$$



شیب منحنی K برحسب ν همان ثابت پلانک (h) است: $(\tan \alpha = h)$
 با این وصف، افزایش جریان فوتوالکتریک (i) با افزایش شدت نور فرودی (I) توجیه می‌شود. به این ترتیب که با افزایش شدت چشمه، در واقع تعداد فوتوالکتریک‌ها زیاد می‌شود و بنابراین تعداد الکترون‌های خروجی و در نتیجه شدت جریان افزایش می‌یابد.



اگر مطابق شکل روبه‌رو صفحات فلزی را به پیلای (با اختلاف پتانسیل ΔV) متصل کنیم می‌توانیم پتانسیل توقف V_0 جریان فوتوالکتریک‌ها را به دست آورده و از آنجا انرژی فوتوالکتریک‌ها را محاسبه کنیم:
 اگر الکترون‌ها بتوانند خود را به صفحه جمع‌کننده برسانند در این صورت $K = eV_0$ می‌توان با تنظیم ΔV همواره V_0 (پتانسیل توقف) را محاسبه کرد.

مثال ۲: آستانه فوتوالکتریک برای تنگستن 2300 \AA است. انرژی الکترون‌های کنده شده از سطح تنگستن توسط نور فرابنفش با طول موج

1900 \AA کدام است؟ (فرض کنید: $hc = 1200 \text{ eV.nm}$)

- ۱) 1 eV ۲) $1/6 \text{ eV}$ ۳) $2/3 \text{ eV}$ ۴) 3 eV

پاسخ: گزینه «۲» رابطه میان انرژی فوتوالکتریک‌ها (K)، انرژی فوتون‌ها (E) و تابع کار فلز (W) به صورت $E = W + K$ است. در اینجا به دنبال

K هستیم؛ $K = E - W$. اما مطابق رابطه پلانک - اینشتین $E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$ (طول موج نور فرودی است). از طرفی رابطه تابع کار فلز با بسامد آستانه

$$K = \frac{hc}{\lambda} - \frac{hc}{\lambda_0} = hc \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_0} \right)$$

به صورت $W = h\nu_0$ است. از این رو $W = \frac{hc}{\lambda_0}$ و به این ترتیب داریم:

$$hc = 1200 \text{ eV.nm}, \lambda = 1900 \text{ \AA}, \lambda_0 = 2300 \text{ \AA}$$

اما مطابق فرض مسأله

$$\Rightarrow K = 1200 \text{ (eV.nm)} \left(\frac{1}{190 \text{ nm}} - \frac{1}{230 \text{ nm}} \right) = 1200 \text{ (eV.nm)} \left(\frac{5}{3} - \frac{4}{3} \right) \times 10^{-3} \frac{1}{\text{nm}} \Rightarrow K = 1/3 \text{ eV}$$

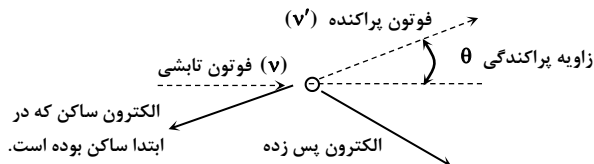


درسنامه (۲): خاصیت موجی و پراکندگی



اثر کامپتون

هنگامی که پرتوهای X از الکترون‌ها پراکنده می‌شوند، جابه‌جایی در بسامد (یا به طور معادل طول موج) آن‌ها را می‌توان مشاهده کرد که مقدار آن به زاویه پراکندگی بستگی دارد. این اثر را کامپتون در سال ۱۹۲۳ کشف کرد و به طور همزمان او و دبای آن را براساس نظریه دوپروی توضیح دادند. شماتیک مسأله به صورت شکل روبه‌رو است:



از اصول پایستگی تکانه خطی و انرژی، رابطه میان طول موج فوتون پراکنده شده (λ') و طول موج فوتون فرودی (λ) و زاویه پراکندگی θ به دست می‌آید:

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta)$$

در این رابطه h ثابت پلانک، m_e جرم الکترون و c سرعت نور است. به طور کلی $\frac{h}{m_e c}$ طول موج کامپتون الکترون خوانده می‌شود و مقدار آن

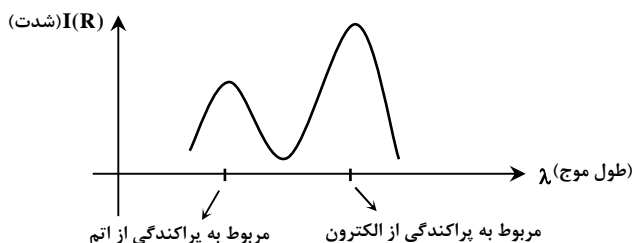
تقریباً 2.43×10^{-12} متر است. در اینجا به وضوح دیده می‌شود که الکترون مقداری از انرژی فوتون فرودی را جذب کرده و در نتیجه انرژی فوتون پراکنده شده

کاهش می‌یابد؛ در نتیجه بنابر رابطه $E = \frac{hc}{\lambda}$ طول موج فوتون پراکنده همواره بزرگ‌تر از طول موج فوتون تابشی است.

اگر پراکندگی از اتم را در نظر بگیریم به جای m_e ، M (جرم اتم) را که بسیار بزرگ‌تر است باید در رابطه $\Delta\lambda$ جایگزین کنیم، در این صورت به علت

کوچکی فوق‌العاده $\frac{h}{Mc}$ ، اختلاف میان λ و λ' ناچیز می‌شود.

بنابراین آنچه به طور تجربی از اثر کامپتون مشاهده می‌شود این است که تابش پراکنده شده در یک زاویه معین عملاً از دو مؤلفه تشکیل می‌شود، مؤلفه‌ای که طول موج آن همان طول موج تابش فرودی است (مربوط به پراکندگی از اتم) و مؤلفه دیگری که طول موج آن نسبت به طول موج فوتون فرودی به مقداری که بستگی به زاویه دارد انتقال یافته است (مربوط به پراکندگی از الکترون) شکل را ملاحظه کنید:



برخلاف نظریه فوتونی نور، در نظریه کلاسیک در برخورد موج الکترومغناطیسی به الکترون‌ها، آن‌ها به نوسان وا داشته شده و همان بسامد موج فرودی را تابش می‌کنند به طوری که شدت مشاهده شده در زاویه θ بستگی به طول موج نور فرودی ندارد. اما مشاهدات تجربی کاملاً مخالف پیش‌بینی‌های نظریه کلاسیک است.

توجه: در اینجا نکاتی را که در حل تست‌های مربوط به اثر کامپتون باید در نظر گرفت، بر می‌شماریم:

۱- رابطه انرژی و تکانه فوتون به صورت $E = pc$ است که در آن c سرعت نور می‌باشد.

۲- رابطه میان تکانه فوتون و فرکانس (و یا طول موج) آن به صورت $P = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$ است.

۳- انرژی‌های ذرات مادی (مانند الکترون‌ها) باید به صورت نسبیتی در نظر گرفته شود؛ به عبارت دیگر ذره‌ای به جرم m_0 دارای انرژی سکون

$$E = m_0 c^2 = m_0 c^2 + K = \sqrt{(m_0 c^2)^2 + P^2 c^2}$$

که K انرژی جنبشی و E کل انرژی است، به طوری که:

در اینجا P تکانه خطی ذره مادی است که آن نیز باید به طور نسبیتی تعریف شود: $P = mv = \frac{m_0 v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$ (در اینجا v سرعت ذره است).

۴- انرژی الکترون پراکنده شده مستقیماً با انرژی فوتون متناسب است. پس اثر کامپتون تنها در حوزه امواج با طول موج‌های کوتاه (اشعه X و اشعه γ) قابل مشاهده است.



مدرس‌ان شریف

فصل دوم

«بسته‌های موج، روابط عدم قطعیت و معادله شرودینگر»

درسنامه (I): ذره‌ها با تعبیر موجی



بسته‌های موج

همان‌گونه که دوبروی پیشنهاد کرده بود، می‌توان به ذرات مادی با تکانه خطی p ، خصلتی موج گونه با طول موج λ که از رابطه $\lambda = \frac{h}{p}$ بدست می‌آید، نسبت داد. این خصلت موج‌گونه را می‌توان با «بسته‌های موج» جایگزیده تعریف کرد که از برهم نهی امواج با بسامدهای مختلف حاصل می‌شوند. این امواج فقط در ناحیه‌ای که ذرات حضور دارند غیرصفر هستند و در بقیه فضا یکدیگر را خنثی کرده و از بین می‌برند. این مطلب را می‌توان از لحاظ ریاضی به شکل زیر تفسیر کرد:

می‌توان تابع $f(x)$ را حاصل برهم نهی امواجی به شکل e^{ikx} با طول موج $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ دانست: $f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dk g(k) e^{ikx}$ که در آن $g(k)$ (تابع وزن) ضریب بسط مربوط به موج e^{ikx} با عدد موج k است.

اگر $g(k)$ ، را تابعی گاوسی در نظر بگیریم، به عبارت دیگر $g(k) = e^{-\alpha(k-k_0)^2}$ ، حاصل انتگرال فوق به صورت $f(x) = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{ik_0 x} e^{-\frac{x^2}{4\alpha}}$ درمی‌آید و

مربع قدر مطلق تابع $f(x)$ عبارت است از: $|f(x)|^2 = \frac{\pi}{\alpha} e^{-\frac{x^2}{2\alpha}}$

این تابع در $x=0$ به اوج می‌رسد و برحسب اندازه α بسته موجی را نمایش می‌دهد که پهن (α بزرگ) یا بسیار باریک (α کوچک) است. بنابراین می‌توانیم $|f(x)|^2$ را نمایانگر حضور ذره در α در نظر بگیریم.

پهنای بسته موج در فضای x یعنی Δx با قرار دادن توان \exp در $|f(x)|^2$ برابر با -1 به صورت $\Delta x = 2\sqrt{2\alpha}$ به دست می‌آید. همچنین پهنای بسته موج در فضای k یعنی Δk با قرار دادن توان \exp در $|g(k)|^2$ برابر با -1 به صورت $\Delta k = \frac{2}{\sqrt{2\alpha}}$ به دست می‌آید.

حاصل ضرب این دو پهنای برابر با $\Delta x \Delta k \sim 4$ ، از مرتبه یک و مستقل از α است. این ویژگی توابعی است که تبدیل فوریه یکدیگرند، یعنی تابعی که در فضای x بسیار پهن (باریک) است در فضای k بسیار باریک (پهن) خواهد بود.

مثال ۱: کدام یک از توابع زیر می‌تواند معرف بسته موج جایگزیده‌ای با تابع وزن $g(k) = \begin{cases} C; & -\frac{a}{2} < k < \frac{a}{2} \\ 0; & \text{جاهای دیگر} \end{cases}$ باشد؟ (فرض کنید C عددی ثابت است)

$$\frac{\sin^2\left(\frac{ax}{2}\right)}{x^2} \quad (۴)$$

$$\frac{\sin\left(\frac{ax}{2}\right)}{x} \quad (۳)$$

$$\frac{\cos^2\left(\frac{ax}{2}\right)}{x^2} \quad (۲)$$

$$\frac{\cos\left(\frac{ax}{2}\right)}{x} \quad (۱)$$

پاسخ: گزینه «۴» باید انتگرال $f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{ikx} dk$ را محاسبه کنیم؛ از آنجا که در خارج از ناحیه $-\frac{a}{2} < k < \frac{a}{2}$ ، تابع $g(k)$ صفر است و

$$f(x) = \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} C e^{ikx} dk = C \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} e^{ikx} dk = C \left(\frac{e^{ikx}}{ix} \right) \Big|_{k=-\frac{a}{2}}^{k=\frac{a}{2}} = \frac{C}{ix} \left(e^{i\left(\frac{a}{2}\right)x} - e^{-i\left(\frac{a}{2}\right)x} \right)$$

در داخل این بازه $g(k)=C$ داریم:

اما از رابطه اویلر ($e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$) داریم: $e^{i\theta} - e^{-i\theta} = 2i\sin\theta$

بنابراین رابطه بالا به صورت روبه رو درمی آید:

$$f(x) = \frac{C}{ix} (2i\sin(\frac{ax}{2})) \Rightarrow f(x) = 2C \frac{\sin(\frac{ax}{2})}{x}$$

بنابراین $f(x) \propto \frac{\sin(\frac{ax}{2})}{x}$ ؛ اما آنچه می تواند معرف ذره باشد مجذور قدرمطلق $f(x)$ است بنابراین $|f(x)|^2 \propto \frac{\sin^2(\frac{ax}{2})}{x^2}$.

انتشار بسته های موج در زمان، سرعت فاز و سرعت گروه

اگر به موج تخت e^{ikx} تابعیت زمانی به صورت $e^{-i\omega t}$ نسبت دهیم می توان وابستگی زمانی تابع $f(x, t)$ را برحسب امواج رونده به دست آورد.

$$f(x, t) = \int dk g(k) e^{i(kx - \omega t)}$$

به طور کلی ω تابعی از k است و رابطه $\omega = \omega(k)$ به رابطه پاشندگی موسوم است. در مورد نور (و به طور کلی امواج الکترومغناطیسی) که در خلأ منتشر می شوند $\omega = kc$ که در آن c سرعت نور در خلأ است، بنابراین:

$$f(x, t) = \int dk g(k) e^{ik(x-ct)} = f(x-ct)$$

بنابراین تابعی که در $t=0$ در $x=0$ جایگزیده بود، اکنون در $x=ct$ جایگزیده است. این موج نوری بدون واپیچش در فضا انتشار می یابد.

$$f(x, t) = \int dk g(k) e^{i(kx - \omega(k)t)}$$

در مورد ذرات مادی، رابطه پاشندگی $\omega(k)$ به سادگی این رابطه در مورد نور نیست؛ در این مورد داریم:

از آنجا که می خواهیم بسته موج در هر دو فضا (k و فضای x) پهنای مناسبی داشته باشد، می توانیم $\omega(k)$ را حول $k = k_0$ بسط تیلور دهیم که به

تقریب عبارت است از:

$$\omega(k) \approx \omega(k_0) + (k - k_0) \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0} + \frac{1}{2} (k - k_0)^2 \left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_{k_0} \Rightarrow \omega(k) \approx \omega(k_0) + v_g (k - k_0) + \beta (k - k_0)^2$$

در رابطه بالا $v_g = \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k=k_0}$ و سرعت گروه نام دارد؛ در اصل سرعت وابسته به ذره مادی، سرعت گروه (سرعت پوش) بر هم نهی امواج در فضای k است. این سرعت همان سرعت انتقال انرژی است و لازم به ذکر است که همواره مقدار آن از سرعت نور (c) کمتر است.

در مقابل سرعت گروه، سرعت فاز $v_{ph} = \frac{\omega}{k}$ را داریم؛ β هم برابر با $\frac{1}{2} \left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_{k=k_0}$ است.

نکته ۱: برخلاف امواج نوری، امواج مادی حتی در خلأ هم پاشندگی دارند. به عبارت دیگر امواج با عدد موج (طول موج) متفاوت، سرعت های فاز

$$v_{ph} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{E}{p} = \frac{mc^2}{mv} = \frac{c^2}{v}$$

مختلفی دارند، برای سرعت فاز v_{ph} روابط روبرو را داریم:

نکته ۲: از آنجا که همواره $c > v$ ، مطابق رابطه بالا، سرعت فاز ماده از نظر موجی در خلأ همواره بزرگ تر از سرعت نور است. پس این سرعت

نمی تواند با سرعت خود ذرات یکی باشد و از آنجا که ذرات دارای جرم هستند، خیلی کندتر از نور حرکت می کنند. در واقع سرعت گروه موج ماده

همان سرعت ذره است یعنی $v = v_g$ بنابراین $v_{ph} v_g = c^2$.

نکته ۳: برای بسته موج گوسی ($g(k) = e^{-\alpha(k-k_0)^2}$)، $f(x, t)$ و $|f(x, t)|^2$ به صورت زیر بدست می آیند:

$$f(x, t) = e^{i(k_0 x - \omega(k_0) t)} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha + i\beta t}} e^{-\frac{(x - v_g t)^2}{2(\alpha + i\beta t)}} \quad \text{و} \quad |f(x, t)|^2 = \sqrt{\frac{\pi^2}{\alpha^2 + \beta^2 t^2}} e^{-\frac{\alpha(x - v_g t)^2}{2(\alpha^2 + \beta^2 t^2)}}$$

رابطه بالا برای $|f(x, t)|^2$ نمایانگر بسته موجی است که قله آن با سرعت v_g انتشار می یابد، اما پهنای ثابتی ندارد. به عبارت دیگر بسته موج در طول

زمان پهن می شود.

نکته ۴: اگر α بزرگ (کوچک) باشد، یعنی اگر بسته موج در زمان اولیه از لحاظ فضایی بزرگ (کوچک) باشد، آهنگ پهن شدن کوچک (بزرگ) خواهد بود.



درسنامه (۲): روابط عدم قطعیت

حالت خاص روابط عدم قطعیت

در دنیای میکروسکوپیک (دنیای اتم‌ها و ذرات زیر اتمی) محدودیتی بنیادین در اندازه‌گیری همزمان سرعت ذره (v) و موقعیت آن (x) وجود دارد که به هیچ وجه با مفاهیم مکانیک نیوتنی (فیزیک کلاسیک) سازگار نیست. در واقع در فیزیک کلاسیک می‌توان از روی منحنی مکان - زمان ذره، سرعت ذره (برداری مماس بر منحنی) را بدست آورد و به این ترتیب مسیر ذره را مشخص کرد. مفهوم مسیر ذره در مکانیک کوانتومی به معنای کلاسیکی آن کاملاً بی‌معنی است. در واقع برحسب تکانه خطی ذره ($p = mv$) رابطه بنیادین زیر، میان میزان خطا در اندازه‌گیری مکان ذره (Δx) و میزان خطا در اندازه‌گیری تکانه آن

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (\Delta p) \text{ وجود دارد که به رابطه عدم قطعیت هایزنبرگ معروف است:}$$

بنابر رابطه بالا اگر سعی کنیم بسته موج بسیار جایگزیده‌ای در فضای x بسازیم، آنگاه بر خلاف آن چه در فیزیک کلاسیک مسلم فرض می‌شود، نسبت دادن یک تکانه کاملاً معین به آن غیر ممکن می‌شود. به همین ترتیب، بسته موجی که با تکانه‌ای مشخص می‌شود که در یک محدوده باریک تعریف شده است باید از لحاظ فضایی بسیار پهن باشد. این محدودیتی است که مکانیک کوانتومی بر استفاده از مفاهیم کلاسیک برای توصیف یک سیستم فیزیکی تحمیل می‌کند. مفاهیم کلاسیک مکان و تکانه مستقل از یکدیگرند؛ آن‌ها به درجات آزادی متفاوتی مربوط می‌شوند. در مکانیک کوانتومی مکان و تکانه یک سامانه، ویژگی‌های مکمل یکدیگر هستند و تئوری هیچ آزمایشی را ممکن نمی‌داند که در آن واحد بتوان هر دو را همزمان تعیین کرد. همچنین رابطه عدم قطعیتی برای اندازه‌گیری زمان و انرژی در مکانیک کوانتومی وجود دارد که طبق آن $\Delta E \Delta t \sim \hbar$ است.

مثال ۲: کمینه انرژی ذره‌ای به جرم m در چاه پتانسیل یک بُعدی $V(x) = \begin{cases} mgx & x > 0 \\ \infty & x \leq 0 \end{cases}$ که از رابطه عدم قطعیت $\Delta x \Delta p \geq \hbar$ به دست می‌آید کدام

(فیزیک - سراسری ۹۳)

است؟

$$\frac{1}{2} (mg^2 \hbar^2)^{\frac{1}{3}} \quad (1) \quad \frac{3}{2} (mg^2 \hbar^2)^{\frac{1}{3}} \quad (2) \quad \frac{5}{2} (mg^2 \hbar^2)^{\frac{1}{3}} \quad (3) \quad \frac{7}{2} (mg^2 \hbar^2)^{\frac{1}{3}} \quad (4)$$

پاسخ: گزینه «۲» با توجه به تعریف انرژی مکانیکی (هامیلتونی سیستم)، داریم:

از طرفی طبق رابطه عدم قطعیت $\Delta x \Delta p \geq \hbar$ کمترین مقدار انرژی به ازای کمترین عدم قطعیت یعنی $\Delta x \Delta p = \hbar$ به دست می‌آید. پس می‌توانیم به این ترتیب انرژی را فقط برحسب متغیر x تعریف کنیم.

$$\left. \begin{aligned} E = E_k + V(x) &= \frac{p^2}{2m} + mgx \\ \Delta p \Delta x = \hbar &\Rightarrow px = \hbar \Rightarrow p = \frac{\hbar}{x} \end{aligned} \right\} \Rightarrow E = \frac{\hbar^2}{2mx^2} + mgx$$

کمینه انرژی به ازای مقداری از x به دست می‌آید که در آن مشتق E نسبت به x صفر می‌شود. یعنی داریم:

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{mx^3} + mg = 0 \Rightarrow \frac{\hbar^2}{mx^3} = mg \Rightarrow m^2 g x^3 = \hbar^2 \Rightarrow x^3 = \frac{\hbar^2}{m^2 g} \Rightarrow x_0 = \left(\frac{\hbar^2}{m^2 g} \right)^{\frac{1}{3}}$$

حال که مقدار x مشخص شده است، می‌توانیم مقدار کمینه انرژی که همان انرژی حالت پایه است را به دست آوریم:

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2mx_0^2} + mgx_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{m^2 g}{\hbar^2} \right)^{\frac{2}{3}} + mg \left(\frac{\hbar^2}{m^2 g} \right)^{\frac{1}{3}} = \frac{\hbar^2 m^{\frac{2}{3}} g^{\frac{2}{3}}}{2m \hbar^{\frac{2}{3}}} + \frac{mg \hbar^{\frac{2}{3}}}{m^{\frac{2}{3}} g^{\frac{1}{3}}} =$$

$$\frac{\frac{2}{3} \frac{1}{2} \frac{2}{3}}{2} + \frac{\frac{1}{3} \frac{2}{3} \frac{2}{3}}{1} = \frac{3}{2} \frac{\hbar^2 m^{\frac{2}{3}} g^{\frac{2}{3}}}{\hbar^{\frac{2}{3}}} = \frac{3}{2} (mg^2 \hbar^2)^{\frac{1}{3}}$$

نکته ۵: رابطه‌ی عدم قطعیت زمان و انرژی بدین معنی است که برای یک عدم قطعیت در انرژی حتماً در زمان‌های بالاتر از $\frac{\hbar}{\Delta E}$ می‌توان

دسترسی پیدا کرد نه کمتر از آن زمان.

نکته ۶: می‌توان از رابطه عدم قطعیت هایزنبرگ در به دست آوردن تقریبی انرژی حالت پایه سامانه‌های کوانتومی در برخی موارد ساده استفاده کرد.



کجه مثال ۳: ذره‌ای با جرم m_0 تحت تأثیر پتانسیل مرکزی جاذبه‌ای $U(r) = -U_0 \left(\frac{a_0}{r}\right)$ به دور مرکز نیرو و روی دایره‌ای به شعاع r حرکت مقید دارد (U_0 و a_0 مقادیر

فیزیکی مثبت هستند). بر مبنای رابطه عدم قطعیت $\Delta p_r \cdot \Delta r \geq \frac{\hbar}{2}$ انرژی حالت پایه ذره بر حسب U_0 و a_0 کدماست؟ ($V_0 = \frac{\hbar^2}{4m_0 a_0^2}$) (فوتونیک - سراسری ۹۶)

$$-\frac{1}{2} \left(\frac{U_0}{V_0}\right) U_0 \quad (۱) \quad -\frac{3}{2} \left(\frac{U_0}{V_0}\right) U_0 \quad (۲) \quad -\left(\frac{U_0}{V_0}\right) U_0 \quad (۳) \quad -\frac{3}{2} \left(\frac{U_0}{V_0}\right) U_0 \quad (۴)$$

پاسخ: گزینه «۱» با استفاده از رابطه‌های عدم قطعیت می‌توان مقادیر بعضی از کمیت‌ها را در فیزیک میکروسکوپییک برآورد کرد.

می‌دانیم که طبق رابطه عدم قطعیت تکانه و مکان داریم: $\Delta P_r \cdot \Delta r \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow P \cdot r \sim \frac{\hbar}{2} \Rightarrow P = \frac{\hbar}{2r}$

عبارت فوق به این معنی است که حاصل ضرب تکانه و مکان از مرتبه $\frac{\hbar}{2}$ است، بنابراین می‌توانیم تکانه را بر حسب مکان تخمین بزنیم.

به این ترتیب می‌توانیم انرژی را بر حسب r بیان کنیم: $E = \frac{P^2}{2m} + V(r) = \frac{P^2}{2m} - \frac{U_0 a_0}{r} = \frac{\hbar^2}{4mr^2} - \frac{U_0 a_0}{r}$

مقدار کمینه انرژی که همان انرژی حالت پایه سیستم است از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$\frac{\partial E}{\partial r} = 0 \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2mr^3} + \frac{U_0 a_0}{r^2} = 0 \Rightarrow \frac{1}{r^2} \left\{ U_0 a_0 - \frac{\hbar^2}{2mr} \right\} = 0 \Rightarrow \frac{\hbar^2}{2mr} = U_0 a_0 \Rightarrow r_0 = \frac{\hbar^2}{2mU_0 a_0}$$

حال که مکان مربوط به انرژی حالت پایه را مشخص کرده‌ایم، می‌توانیم به راحتی انرژی در این مکان را به دست آوریم. (مکان مورد نظر در حقیقت شعاع

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{4mr_0^2} - U_0 \frac{a_0}{r_0} \Big|_{r=r_0} = \frac{\hbar^2 \times 16m^2 U_0^2 a_0^2}{4m\hbar^4} - \frac{U_0 a_0 \times 4mU_0 a_0}{\hbar^2} = -\frac{2mU_0^2 a_0^2}{\hbar^2} = -\frac{1}{2} \frac{U_0^2}{V_0}$$

مسیر دایره‌ای حالت پایه سیستم است.)

روابط کلی عدم قطعیت

پاشندگی (عدم قطعیت) کمیت مشاهده‌پذیر \hat{A} نسبت به حالت ψ به صورت روبه‌رو تعریف می‌شود: $\Delta A \equiv A - \langle A \rangle$

$$\Rightarrow \langle (\Delta A)^2 \rangle = \langle A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

بنابراین عدم قطعیت در کمیت (مشاهده‌پذیر) \hat{A} به صورت $\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$ تعریف می‌شود.

نکته ۷: میان هر دو مشاهده‌پذیر (عملگر) که جابه‌جا نشوند رابطه عدم قطعیت وجود دارد.

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} | \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle |^2$$

به طور کلی اگر $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ داریم:

این رابطه عدم قطعیت تعمیمی از رابطه عدم قطعیت هایزنبرگ برای مؤلفه‌های یکسان مکان (x) و تکانه خطی (p) است. در واقع با توجه به این که

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} | \langle i\hbar \rangle |^2 \Rightarrow \langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

داریم: $[x, p] = i\hbar$

در این قسمت به مرور برخی روابط بسیار مهم و اساسی (با تأکید بر مسائل ۱ بعدی) می‌پردازیم:

۱- در مکانیک کوانتومی به هر ذره مادی به جرم m یک تابع موج نسبت می‌دهند (ψ) که عموماً وابسته به مکان و زمان است ($\psi = \psi(x, t)$) و در

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

معادله شرودینگر صدق می‌کند:

در رابطه فوق $V(x, t)$ ، (انرژی) پتانسیل ذره است.

۲- تعبیر فیزیکی تابع موج $\psi(x, t)$ با تعبیر احتمالاتی برون داده می‌شود: {احتمال یافتن ذره جایی میان x و x + dx در لحظه t}

۳- مقدار میانگین یک توزیع گسسته با ضرب احتمال P به ازای هر متغیر از رابطه $\langle f(j) \rangle = \sum_j f(j)P(j)$ به دست می‌آید.

۴- بنابر اصل پایداری احتمال و این که در هر حال ذره باید در «جایی» واقع باشد، توابع موجی مورد قبول هستند که به واحد، بهنجار شده باشد. شرط

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

بهنجارش را می‌توان به صورت مقابل بیان کرد:

۵- مهمترین متغیرهای دینامیکی در مکانیک کوانتومی، موقعیت (x) و تکانه خطی (p) هستند. تمامی متغیرهای دینامیکی دیگر به صورت توابعی از این

دو متغیر ($Q(x, p)$) ظاهر می‌شوند. مقادیر چشمداشتی متغیرهای دینامیکی از روابط مقابل به دست می‌آیند:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi(x, t)|^2 dx$$

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

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



مدرس‌ان شریف

فصل سوم

«معادله شرودینگر مستقل از زمان»

درسنامه (۱): معادله ویژه مقدراری انرژی



معادله ویژه مقدراری شرودینگر

در معادله شرودینگر هرگاه تابع انرژی پتانسیل وابستگی صریح زمانی نداشته باشد، می‌توان معادله را با روش جداسازی متغیرها حل کرد؛ در این روش

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + V(x)\psi(x, t) \quad \text{فرض می‌کنیم } \psi(x, t) = \psi(x)T(t) \text{ در این صورت داریم:}$$

$$\Rightarrow i\hbar \psi(x)T'(t) = \frac{-\hbar^2}{2m} \psi''(x)T(t) + V(x)\psi(x)T(t) \Rightarrow \frac{i\hbar T'(t)}{T(t)} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\psi''(x)}{\psi(x)} + V(x)$$

$$\Rightarrow \frac{i\hbar T'(t)}{T(t)} = E \Rightarrow T(t) = e^{\frac{-iEt}{\hbar}} \Rightarrow \psi(x, t) = \psi(x) e^{\frac{-iEt}{\hbar}}$$

در اینجا E ثابت جداسازی است و $\psi(x)$ در معادله زیر صدق می‌کند:

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

رابطه بالا، معادله مستقل از زمان شرودینگر خوانده می‌شود.

برحسب عملگر هامیلتونی (\hat{H}) معادله شرودینگر مستقل از زمان را می‌توان به صورت $\hat{H}\psi = E\psi$ بیان کرد.

در این رابطه E ویژه مقدار عملگر هامیلتونی (\hat{H}) و ψ ویژه حالت متناظر آن است.

به طور کلی معادلات ویژه مقدراری در فیزیک کوانتومی به وفور یافت می‌شوند و منظور از حل آن‌ها یافتن ویژه مقادیر و ویژه حالات است.

در واقع در یک معادله ویژه مقدراری، عملگری (مانند \hat{L}) بر تابعی (مانند $f(x)$) عمل کرده و حاصل برابر با حاصلضرب یک ضریب ثابت به نام ویژه مقدار

(مانند λ) در خود تابع است: $\hat{L}f(x) = \lambda f(x)$

مثال ۱: در یک بعد تابع موج ذره‌ای به جرم m و انرژی معین به شکل $\psi(x) = A \left(\frac{x}{x_0}\right)^n e^{-\frac{x}{x_0}}$ است که در آن A ، n و x_0 کمیت‌های ثابت غیرصفر

هستند. انرژی پتانسیل این ذره که در حد $x \rightarrow \infty$ به صفر میل کند کدام است؟ (فوتونیک - سراسری ۹۳)

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n(n-1)}{x_0^2 x} + \frac{2n}{x_0 x} \right) \quad (۴) \quad \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{(n-1)}{x^2} + \frac{n}{x_0 x} \right) \quad (۳) \quad \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n(n-1)}{x^2} - \frac{n}{x_0 x} \right) \quad (۲) \quad \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n(n-1)}{x^2} - \frac{2n}{x_0 x} \right) \quad (۱)$$

پاسخ: گزینه «۱» با استفاده از معادله ویژه مقدراری شرودینگر داریم:

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



برای حل این مسئله لازم است ابتدا مشتق دوم تابع موج داده شده را به دست آوریم و سپس با استفاده از معادله بالا مقدار $V(x)$ را پیدا کنیم.

$$\begin{aligned} \psi(x) = A \left(\frac{x}{x_0}\right)^n e^{-\frac{x}{x_0}} &\Rightarrow \frac{d\psi(x)}{dx} = An \left(\frac{x}{x_0}\right)^{n-1} \cdot \frac{1}{x_0} e^{-\frac{x}{x_0}} + A \left(\frac{x}{x_0}\right)^n \times -\frac{1}{x_0} e^{-\frac{x}{x_0}} = \frac{An}{x_0} \left(\frac{x}{x_0}\right)^{n-1} e^{-\frac{x}{x_0}} - \frac{A}{x_0} \left(\frac{x}{x_0}\right)^n e^{-\frac{x}{x_0}} \\ \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} &= \frac{An(n-1)}{x_0^2} \left(\frac{x}{x_0}\right)^{n-2} e^{-\frac{x}{x_0}} - \frac{An}{x_0^2} \left(\frac{x}{x_0}\right)^{n-1} e^{-\frac{x}{x_0}} - \frac{An}{x_0^2} \left(\frac{x}{x_0}\right)^{n-1} e^{-\frac{x}{x_0}} + \frac{A}{x_0^2} \left(\frac{x}{x_0}\right)^n e^{-\frac{x}{x_0}} \\ &= \frac{An(n-1)}{x_0^2} \left(\frac{x}{x_0}\right)^{n-2} e^{-\frac{x}{x_0}} - \frac{2An}{x_0^2} \left(\frac{x}{x_0}\right)^{n-1} e^{-\frac{x}{x_0}} + \frac{A}{x_0^2} \left(\frac{x}{x_0}\right)^n e^{-\frac{x}{x_0}} \\ \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} &= A \left(\frac{x}{x_0}\right)^n e^{-\frac{x}{x_0}} \left[\frac{n(n-1)}{x_0^2} \times \frac{x_0^2}{x^2} - \frac{2n}{x_0^2} \left(\frac{x_0}{x}\right) + \frac{1}{x_0^2} \right] \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = \psi \left[\frac{n(n-1)}{x^2} - \frac{2n}{xx_0} + \frac{1}{x_0^2} \right] \end{aligned}$$

حال با استفاده از معادله شرودینگر داریم:

$$\begin{aligned} \frac{\psi m(V(x) - E)}{\hbar^2} &= \frac{d^2\psi}{dx^2} \Rightarrow \frac{\psi m}{\hbar^2} (V(x) - E) = \left[\frac{n(n-1)}{x^2} - \frac{2n}{xx_0} + \frac{1}{x_0^2} \right] \psi \Rightarrow \frac{\psi m}{\hbar^2} (V(x) - E) = \left[\frac{n(n-1)}{x^2} - \frac{2n}{xx_0} + \frac{1}{x_0^2} \right] \psi \\ \Rightarrow \begin{cases} V(x) = \frac{\hbar^2}{\psi m} \left[\frac{n(n-1)}{x^2} - \frac{2n}{xx_0} \right] \\ E = -\frac{\hbar^2}{\psi m x_0^2} \end{cases} \end{aligned}$$

عملگر خطی: رده خاصی از عملگرها وجود دارند که عملگرهای خطی نامیده می‌شوند. عملگرهای خطی (\hat{L}) این خاصیت را دارند که به ازای توابع f و g و اعداد ثابت a و b (مختلط) و

عملگر هرمیتی: عملگر خطی \hat{L} خودالحاقی یا هرمیتی است اگر $\int \psi_1^* \hat{L} \psi_2 dV = \int (\hat{L} \psi_1)^* \psi_2 dV$ که در آن ψ_1 و ψ_2 توابع انتگرال‌پذیر مجذوری دلخواه‌اند.

نکته ۱: در مکانیک کوانتومی لازم است که همه عملگرها خودالحاقی و خطی باشند. در این حالت اصل برهم نهی برقرار است و ویژه مقادیر حقیقی هستند. در نتیجه مقدار چشمداشتی حقیقی خواهد بود.

$$\langle \hat{L} \rangle = \int \psi^* \hat{L} \psi dV = \int (\hat{L} \psi)^* \psi dV = \left[\int \psi^* (\hat{L} \psi) dV \right]^* = \langle \hat{L} \rangle^*$$

مثال ۲: اگر تابع موج یک دستگاه فیزیکی در لحظه $t = 0$ و $t = T$ حقیقی باشد، ویژه مقادیر انرژی این دستگاه کدام است؟ (فوتونیک - سراسری ۹۵)

$$n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2) \quad \frac{nh}{2T}$$

$$n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (1) \quad \frac{nh}{T}$$

$$n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4) \quad \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{h}{2T}$$

$$n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3) \quad \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{h}{T}$$

پاسخ: گزینه «۲» اگر تابع موج را $\psi(x)$ در نظر بگیریم، در لحظه t تحول زمانی تابع موج عبارت خواهد بود از:

که در لحظه مشخص T نتیجه به صورت $\psi(x, T) = e^{-\frac{iET}{\hbar}} \psi(x)$ در خواهد آمد. با توجه به معادله شرودینگر (معادله ویژه مقادیری) داریم:

$$H\psi = E\psi \Rightarrow \text{He}^{-\frac{iET}{\hbar}} \psi(x) = E\psi(x)$$

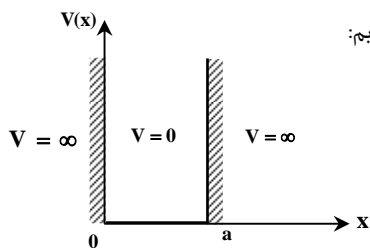
یعنی ویژه توابع انرژی متناسب با $e^{-\frac{iET}{\hbar}}$ هستند. بنابراین باید این کمیت یک مقدار حقیقی باشد.

$$e^{-\frac{iET}{\hbar}} = \cos \frac{ET}{\hbar} - i \sin \frac{ET}{\hbar} \quad \text{برای اینکه این کمیت حقیقی باشد باید } \sin \frac{ET}{\hbar} = 0 \text{ شود.}$$

$$\sin \frac{ET}{\hbar} = 0 \Rightarrow \frac{ET}{\hbar} = n\pi \Rightarrow E = \frac{n\pi\hbar}{T} = \frac{n\pi\hbar}{2\pi T} = \frac{nh}{2T}$$

که به ازای همه مقادیر صحیح n باید برقرار باشد؛ یعنی $n = 0; \pm 1; \pm 2, \dots$.

ذره در جعبه نامتناهی یگ بعدی



در این بخش به حل معادله ویژه مقداری شرودینگر (معادله مستقل از زمان) برای پتانسیلی به شکل زیر می پردازیم:

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

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

در ناحیه $x < 0$ و $x > a$ ، جوابهای معادله شرودینگر مستقل از زمان صفر است: $(\psi(x) = 0)$ در نواحی که پتانسیل نامتناهی باشد امکان حضور ذره وجود ندارد.

در ناحیه داخل چاه که برای آن $V(x) = 0$ ، معادله شرودینگر به صورت $\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0$ در می آید. به ازای انرژیهای منفی ($E < 0$) جوابهای معادله بالا به لحاظ فیزیکی غیرقابل قبولند چرا که جوابهایی از جنس توابع هیپربولیک هستند و در مرزها ($x = a$) مقداری غیرصفر خواهند داشت که پیوستگی تابع موج در مرز را نقض می کند.

به ازای انرژیهای مثبت ($E > 0$) جوابها نوسانی اند و اگر قرار دهیم $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ در این صورت $\psi(x) \sim \sin kx$ و $\cos kx$. جوابی که شرایط مرزی $(\psi(x=0) = \psi(x=a) = 0)$ را برآورده سازد سینوسی است و از این رو: $\psi(x) = A \sin kx$. در اینجا می بینیم که اعمال شرایط مرزی نتیجه ای را در مکانیک کوانتومی رقم می زند که مشابه کلاسیکی برای آن وجود ندارد و آن کوانتس انرژی است. در واقع در مرز $x = a$ ، $\psi(x)$ باید صفر شود از این رو $\sin ka = 0$ و بنابراین $ka = n\pi$ و به عبارتی $k = \frac{n\pi}{a}$ که در آن $n = 1, 2, 3, \dots$.

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}; n = 1, 2, 3, \dots$$

با توجه به رابطه میان k و E بدست می آید:

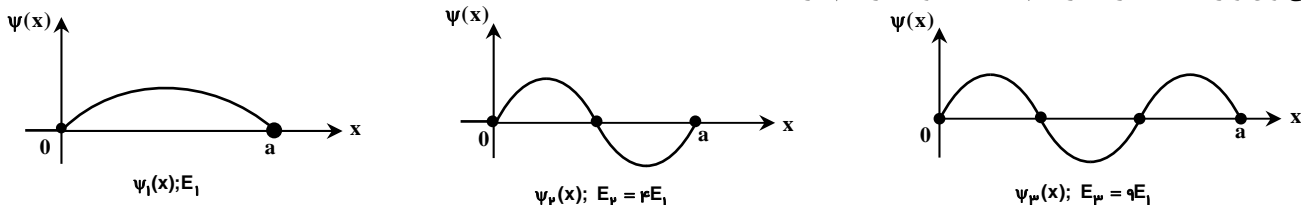
از رابطه بالا دیده می شود که انرژی ذره در جعبه نامتناهی به صورت گسسته تغییر می کند (برخلاف انرژیهای ذره در چاه کلاسیک که می تواند مقادیر پیوسته به خود بگیرد).

نکته ۲: یکی دیگر از ویژگیهای خاص مکانیک کوانتومی و تفاوتهای اساسی آن با مکانیک کلاسیک در این است که در مکانیک کلاسیک کمینه انرژی ذره (در جعبه) مربوط به ذره ساکن ($v = 0$) با انرژی $E = 0$ است در حالی که در مکانیک کوانتومی کمینه انرژی برای ذره در جعبه نامتناهی مقداری غیرصفر دارد و به انرژی حالت پایه موسوم است:

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

با استفاده از شرط بهنجارش در نهایت، ویژه حالتهای بهنجار ذره در جعبه از رابطه $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$ با $n = 1, 2, 3, \dots$ به دست می آیند.

حالت با انرژی کمینه (E_1) حالت پایه خوانده می شود: $\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a}$. می توان ویژه حالتها را به ازای چند حالت اولیه ترسیم کرد:



نکته ۳: همان طور که از شکلهای بالا دیده می شود هرچه خمیدگی جوابها بیشتر می شود، انرژی افزایش می یابد. در واقع مقدار چشم داشتی

انرژی جنبشی از رابطه $\langle T \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \int dx \left| \frac{d\psi(x)}{dx} \right|^2$ بدست می آید. همان طور که مشخص است هرچه تغییرات ψ نسبت به x بیشتر باشد (یعنی $\frac{d\psi}{dx}$ بزرگتر باشد)، متوسط انرژی ذره بزرگتر است.

نکته ۴: ویژه توابع ذره در جعبه در رابطه راست - هنجاری صدق می کنند. به عبارت دیگر $\int dx \psi_n^*(x) \psi_m(x) = \delta_{nm}$ (ویژه توابع مربوط به

ویژه مقادیر متفاوت، متعامدند). در این جا δ_{nm} تابع دلتای کرونکر است که به صورت $\delta_{nm} = \begin{cases} 1 & n = m \\ 0 & n \neq m \end{cases}$ تعریف می شود.



مثال ۳: در یک فضای هیلبرت با بُعد N ، هامیلتونی دستگاهی $H = \hat{1} - \lambda |\psi_n\rangle\langle\psi_n|$ است، که $\langle\psi_m|\psi_m'\rangle = \delta_{mm'}$ (فوتونیک - سراسری ۹۵)

و $m, m' = 1, 2, 3, \dots, N$ است. ویژه مقادیر انرژی این دستگاه و مرتبه‌ی تبهگنی آن‌ها کدام گزینه است؟

$$(1) -\lambda \text{ با درجه تبهگنی } N$$

$$(2) 1 \text{ غیر تبهگن و } 0 \text{ با درجه تبهگنی } N-1$$

$$(3) -\lambda \text{ و } 1 \text{ تبهگن به ترتیب با درجه تبهگنی } 2 \text{ و } N-2$$

$$(4) 1-\lambda \text{ با درجه تبهگنی یک (غیر تبهگن)، و } 1 \text{ با درجه تبهگنی } N-1$$

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

پاسخ: گزینه «۴» با استفاده از معادله ویژه مقادری داریم:

برای هامیلتونی مشخص شده در صورت مسئله می‌توانیم بنویسیم:

$$H|\psi_m\rangle = E_m|\psi_m\rangle \Rightarrow \{\hat{1} - \lambda|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\}|\psi_m\rangle = E_m|\psi_m\rangle \Rightarrow \hat{1}|\psi_m\rangle - \lambda|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\psi_m\rangle = \hat{1}|\psi_m\rangle - \lambda|\psi_n\rangle\delta_{nm}$$

دو حالت می‌تواند رخ دهد یا $n = m$ است و یا $n \neq m$ که دو حالت را جداگانه بررسی می‌کنیم.

$$H|\psi_n\rangle = E_{n=m}|\psi_n\rangle \Rightarrow 1|\psi_n\rangle - \lambda|\psi_n\rangle\delta_{nn} = (1-\lambda)|\psi_n\rangle = E_{n=m}|\psi_n\rangle$$

برای $m = n$ داریم:

$$\Rightarrow E_{n=m} = 1 - \lambda$$

که فقط یک امکان دارد یعنی تبهگنی یگانه دارد.

$$H|\psi_m\rangle = E_{n \neq m}|\psi_m\rangle$$

برای $m \neq n$ داریم:

$$\Rightarrow 1|\psi_m\rangle - \lambda|\psi_m\rangle\delta_{mn} \stackrel{\delta_{nm}=0}{=} 1|\psi_m\rangle = E_{n \neq m}|\psi_m\rangle$$

$$\Rightarrow E_{n \neq m} = 1$$

که تبهگنی آن به اندازه بعد سیستم به جز حالت $n = m$ است. یعنی $N-1$ گانه.

نکته ۵: برای ذره در جعبه نامتناهی $\langle p \rangle = 0$ است.

با توجه به این که وابستگی زمانی هر ویژه حالت $\psi_n(x)$ با $e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}$ داده می‌شود، می‌توان حالت‌های ذره در جعبه (نامتناهی) را به صورت زیر نمایش داد:

$$\left. \begin{aligned} \psi_n(x, t) &= \psi_n(x) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \\ E_n &= \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}; \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} e^{-i\frac{n^2 \pi^2 \hbar}{2ma^2} t}$$

حالت‌های $\psi_n(x, t)$ به حالت‌های مانا (پایا) موسومند. علت این نامگذاری آن است که چگالی احتمال چنین حالت‌هایی وابسته به زمان نیست و همواره

$$P_n(x, t) = |\psi_n(x, t)|^2 = \psi_n^*(x, t)\psi_n(x, t) = \psi_n^*(x) e^{i\frac{E_n t}{\hbar}} \psi_n(x) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} = \psi_n^*(x)\psi_n(x) = |\psi_n(x)|^2$$

ثابت است:

نکته ۶: هر حالت مانا انرژی کاملاً معین مخصوص به خود را دارد؛ به عبارتی برای حالت‌های مانا عدم قطعیتی در انرژی وجود ندارد ($\Delta E = 0$)

در اینجا مناسب است رابطه عدم قطعیت را برای ویژه حالت‌های انرژی ذره در چاه پتانسیل نامتناهی بدست آوریم:

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} \quad \text{و} \quad \Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$$

ابتدا $\langle x \rangle$ را بدست می‌آوریم:

$$\langle x \rangle = \int_0^a dx \psi_n^*(x) x \psi_n(x) = \int_0^a dx \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} x \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} = \frac{2}{a} \int_0^a x \sin^2 \left(\frac{n\pi x}{a} \right) dx = \frac{2}{a} \int_0^a x \left(\frac{1}{2} \right) (1 - \cos \frac{2n\pi x}{a}) dx$$

$$= \frac{1}{a} \left\{ \int_0^a x dx - \int_0^a x \cos \frac{2n\pi x}{a} dx \right\} = \frac{1}{a} \left\{ \frac{x^2}{2} \Big|_0^a - \left[x \frac{a}{2n\pi} \sin \frac{2n\pi x}{a} \right] \Big|_0^a + \frac{a}{2n\pi} \int_0^a \sin \frac{2n\pi x}{a} dx \right\}$$

$$= \frac{1}{a} \left\{ \frac{a^2}{2} - \frac{a^2}{2n\pi} \sin 2n\pi + \frac{a}{2n\pi} \left(-\frac{a}{2n\pi} \right) \cos \frac{2n\pi}{a} \Big|_0^a \right\} = \frac{a}{2} \Rightarrow \langle x \rangle = \frac{a}{2}$$

$$\langle x^2 \rangle = \int_0^a dx \psi_n^*(x) x^2 \psi_n(x) = \int_0^a dx \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} (x^2) \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$$

مقدار چشم‌داشتی x^2 نیز به همین ترتیب محاسبه می‌شود:

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

$$= \frac{1}{a} \left\{ \frac{x^3}{3} \Big|_0^a - \left[x^2 \frac{a}{2n\pi} \sin \frac{2n\pi x}{a} \right] \Big|_0^a + \frac{a}{2n\pi} \int_0^a \sin \frac{2n\pi x}{a} (2x dx) \right\}$$

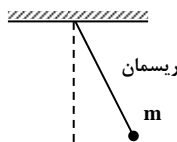
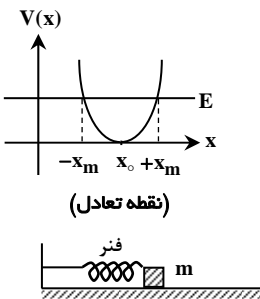


مدرسایان شریف

فصل چهارم

«نوسانگر کوانتومی»

درسنامه (I): نوسانگر با توصیف عملگری



ذره‌ای به جرم m واقع در پتانسیل سهمی شکل مانند روبه‌رو حول نقطه تعادل خود (کمینه انرژی پتانسیل) حرکت رفت و برگشتی انجام می‌دهد. نقاط $-x_m$ و $+x_m$ نقاط برگشت کلاسیک هستند. مثال‌هایی از نوسانگر هماهنگ ساده کلاسیکی می‌تواند شامل جرمی (نقطه‌ای) آویزان از ریشمانی (بدون جرم) باشد (در محدوده‌ی نوسانات کوچک) و یا جرم متصل به فنری که روی سطح بدون اصطکاک از حالت تعادل خارج شده است:

در اینجا مسأله نوسانگر هماهنگ کوانتومی را در یک بعد بررسی می‌کنیم: هدف یافتن ویژه مقادیر انرژی و ویژه حالت‌ها است. دو روش مرسوم برای حل مسأله نوسانگر وجود دارد: روش تحلیلی و روش عملگری، در این فصل، تنها به روش دوم یعنی روش عملگری می‌پردازیم.

همایلتونی نوسانگر هماهنگی به جرم m که به اندازه x از نقطه تعادل خود جابجا شده است با رابطه $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2$ داده می‌شود، k (ثابت فنر) را

می‌توان برحسب جرم ذره (m) و بسامد زاویه‌ای آن (ω) به صورت $k = m\omega^2$ نوشت. در این صورت:

پتانسیل $V(\hat{x}) = \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$ مستقل از زمان است؛ بنابراین جواب‌ها به صورت $\psi_n(x, t) = \psi_n(x)e^{-iE_n t/\hbar}$ خواهند بود. به دنبال ویژه توابع

$\psi_n(x)$ و ویژه مقادیر انرژی E_n هستیم، از نمادگذاری دیراک به صورت $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$ استفاده می‌کنیم و $|n\rangle$ ویژه حالت‌ها هستند، است.

عملگرهای نردبانی

برای حل مسأله نوسانگر هماهنگ دو عملگر \hat{a} و \hat{a}^\dagger را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$\hat{a} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + i \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\omega\hbar}}, \quad \hat{a}^\dagger \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - i \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\omega\hbar}}$$

عملگر \hat{a} را عملگر نابودی (پایین آورنده) ویژه حالت $|n\rangle$ و عملگر \hat{a}^\dagger را عملگر آفرینش (بالا برنده) ویژه حالت $|n\rangle$ می‌نامند.

نکته ۱: عملگرهای \hat{a} و \hat{a}^\dagger (عملگرهای نردبانی نوسانگر هماهنگ) هرمیتی نیستند از این رو نمی‌توانند نمایانگر مشاهده‌پذیرهای فیزیکی باشند.

نکته ۲: عملگرهای \hat{a} و \hat{a}^\dagger با هم جابجا نمی‌شوند، در واقع رابطه جابجایی آن‌ها به صورت روبرو است:

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1$$

مثال ۱: در مسئله نوسانگر هماهنگ یک بعدی به جرم m و بسامد زاویه‌ای ω اگر عملگر مکان، $\mathbf{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\mathbf{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\mathbf{p}$ و \mathbf{k} ضریب ثابتی

باشند، حاصل جابه‌جاگر $[a, e^{ikx}]$ کدام است؟ (فوتونیک - سراسری ۹۳)

$$ik\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}e^{ikx} \quad (۴) \qquad ik\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (۳) \qquad ik\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}e^{ikx} \quad (۲) \qquad ik\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \quad (۱)$$

پاسخ: گزینه «۴» برای محاسبه جابه‌جاگر $[a, e^{ikx}]$ به راحتی می‌توانیم با استفاده از جابه‌جایی X و p مقدار را محاسبه کنیم.

$$[a, e^{ikx}] = \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\mathbf{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\mathbf{p}, e^{ikx} \right] = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} [x, e^{ikx}] + \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}} [p, e^{ikx}]$$

با استفاده از دو رابطه $[x, f(x)] = 0$ و $[p, f(x)] = \frac{\hbar}{i} \frac{df}{dx}$ خواهیم داشت:

$$[a, e^{ikx}] = 0 + \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \times \frac{\hbar}{i} \times ike^{ikx} = ik\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} e^{ikx}$$

نکته ۳: می‌توان عملگرهای مکان (\hat{x}) و تکانه خطی (\hat{p}) را برحسب عملگرهای آفرینش \hat{a} و نابودی \hat{a}^\dagger به صورت زیر به دست آورد:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \qquad , \qquad \hat{p} = -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)$$

و هامیلتونی نوسانگر هماهنگ ساده برحسب \hat{a} و \hat{a}^\dagger به صورت $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2})$ در خواهد آمد.

نقش عملگر تعداد

عملگر $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ را عملگر تعداد \hat{N} می‌نامند. $(\hat{a}^\dagger\hat{a} = \hat{N})$ عملگر تعداد، عملگری هرمیتی است. $(\hat{N}^\dagger = \hat{N})$ و توصیف‌کننده یک کمیت مشاهده‌پذیر فیزیکی است.

نکته ۴: با توجه به تعریف عملگر تعداد (\hat{N}) و رابطه جابجایی $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ می‌توان نوشت:

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger = 1 + \hat{N}$$

$$[\hat{H}, \hat{a}] = -\hbar\omega\hat{a} \qquad , \qquad [\hat{H}, \hat{a}^\dagger] = \hbar\omega\hat{a}^\dagger$$

اگر $|n\rangle$ ویژه حالت \hat{H} با ویژه مقدار E_n باشد، آنگاه $\hat{a}|n\rangle$ نیز ویژه حالت \hat{H} با ویژه مقدار $E_n - \hbar\omega$ است:

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \Rightarrow \hat{H}(\hat{a}|n\rangle) = (E_n - \hbar\omega)(\hat{a}|n\rangle)$$

بنابراین $\hat{a}|n\rangle$ متناظر با حالتی است که انرژی آن به اندازه $\hbar\omega$ کاهش یافته است. به همین دلیل \hat{a} را عملگر پایین آورنده (کاهنده) می‌نامند. اگر مجدداً عملگر \hat{a} را بر حالت $\hat{a}|n\rangle$ اعمال کنیم، ویژه مقدار انرژی به اندازه $2\hbar\omega$ کاهش می‌یابد. روند کاهش در جایی که حالت پایه است قطع می‌شود، حالت پایه را با $|0\rangle$ نمایش می‌دهیم:

$$\hat{H}|0\rangle = \hbar\omega(\frac{1}{2} + \hat{a}^\dagger\hat{a})|0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega|0\rangle \Rightarrow \boxed{E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega}$$

نکته ۵: برخلاف حالت کلاسیک که کمینه انرژی مربوط به ذره ساکن در نقطه تعادل صفر است در حالت کوانتومی همواره یک انرژی زمینه غیرصفر برابر با $(\frac{1}{2}\hbar\omega)$ وجود دارد.

اگر $|n\rangle$ ویژه حالت عملگر \hat{H} با ویژه مقدار انرژی E_n باشد، در آن صورت $\hat{a}^\dagger|n\rangle$ نیز ویژه حالت عملگر \hat{H} با ویژه مقدار انرژی $E_n + \hbar\omega$ است:

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \Rightarrow \hat{H}(\hat{a}^\dagger|n\rangle) = (E_n + \hbar\omega)(\hat{a}^\dagger|n\rangle)$$

بنابراین $\hat{a}^\dagger|n\rangle$ متناظر با حالتی است که انرژی آن به اندازه $\hbar\omega$ افزایش یافته است. به همین دلیل \hat{a}^\dagger را عملگر بالا برنده (افزاینده) می‌نامند.

با n بار اعمال عملگر \hat{a}^\dagger بر حالت پایه $(|0\rangle)$ ، n امین حالت برانگیخته، $(|n\rangle)$ با ویژه مقدار انرژی $n\hbar\omega + \frac{1}{2}\hbar\omega$ به دست می‌آید.

$$\boxed{E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \qquad , \qquad n = 0, 1, 2, 3, \dots}$$

به این ترتیب ویژه مقادیر انرژی نوسانگر هماهنگ به صورت روبه‌رو است:

نکته ۶: توجه کنید که فاصله ویژه مقادیر انرژی در نوسانگر هماهنگ مقدار ثابت $\hbar\omega$ است.



N امین حالت برانگیخته نوسانگر هماهنگ را می‌توان از حالت پایه $(|0\rangle)$ با استفاده از رابطه مقابل به دست آورد:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle$$

در اینجا $\frac{1}{\sqrt{n!}}$ ضریب بهنجارش حالت $|n\rangle$ است)

ویژه حالت‌های نوسانگر هماهنگ در رابطه راست هنجاری صدق می‌کنند:

$$\langle n | m \rangle = \delta_{nm}$$

δ_{nm} تابع دلتای کرونکر است:

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 0, & n \neq m \\ 1, & n = m \end{cases}$$

نکته ۷: ویژه کت‌های انرژی نوسانگر هماهنگ $(|n\rangle)$ همان ویژه کت‌های عملگر تعداد (\hat{N}) با ویژه مقدارهای n هستند:

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

از آنجا که ویژه کت‌های نوسانگر هماهنگ تشکیل یک مجموعه کامل می‌دهند، هر حالت دلخواه $|\alpha\rangle$ را می‌توان برحسب آن‌ها بسط داد:

$$|\alpha\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

ضرایب بسط $c_n = \langle n | \alpha \rangle$ از رابطه $c_n = \langle n | \alpha \rangle$ به دست می‌آیند.

نکته ۸: احتمال قرار گرفتن سامانه در ویژه حالت $|n\rangle$ برابر با مجذور قدر مطلق c_n است:

$$P_n = |c_n|^2$$

نکته ۹: مقدار چشمداشتی انرژی (هامیلتونی) نسبت به حالت $|\alpha\rangle$ برابر است با:

$$\langle \hat{H} \rangle_\alpha = \sum_n E_n P_n = \sum_n \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega |c_n|^2 = \sum_n \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2}\right) |\langle n | \alpha \rangle|^2$$

مثال ۲: اگر حالت سامانه‌ای به صورت $|\alpha\rangle = \frac{1}{3}|1\rangle + \frac{2}{3}|2\rangle - \frac{\sqrt{2}}{3}|3\rangle$ باشد، مقدار چشمداشتی انرژی این سامانه کدام است؟ ($|n\rangle$ ها ویژه حالات نوسانگر هماهنگ ساده‌اند)

$$\frac{17}{6} \hbar \omega \quad (۴)$$

$$\frac{5}{9} \hbar \omega \quad (۳)$$

$$\frac{1}{9} \hbar \omega \quad (۲)$$

$$\frac{5}{18} \hbar \omega \quad (۱)$$

پاسخ: گزینه «۴» احتمال یافتن ذره در حالت $|n\rangle$ برابر مجذور قدر مطلق ضریب $|n\rangle$ است اگر حالت $|\alpha\rangle$ درست بهنجار شده باشد باید مجموع

$$\sum_n P_n = P_1 + P_2 + P_3 = \left|\frac{1}{3}\right|^2 + \left|\frac{2}{3}\right|^2 + \left|-\frac{\sqrt{2}}{3}\right|^2 = \frac{1}{9} + \frac{4}{9} + \frac{2}{9} = 1$$

احتمالات برابر ۱ شود: در اینجا:

پس مطمئن شدیم که $|\alpha\rangle$ بهنجار است. اینک به سراغ تعیین مقدار چشمداشتی انرژی می‌رویم:

$$\langle \hat{H} \rangle = \sum_n \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2}\right) P_n = \hbar \omega \left(1 + \frac{1}{2}\right) P_1 + \hbar \omega \left(2 + \frac{1}{2}\right) P_2 + \hbar \omega \left(3 + \frac{1}{2}\right) P_3 = \hbar \omega \left\{ \frac{3}{2} \times \frac{1}{9} + \frac{5}{2} \times \frac{4}{9} + \frac{7}{2} \times \frac{2}{9} \right\} \Rightarrow \boxed{\langle \hat{H} \rangle = \frac{17}{6} \hbar \omega}$$

نکته ۱۰: هامیلتونی نوسانگر هماهنگ را می‌توان برحسب عملگر تعداد \hat{N} به صورت $\hat{H} = \left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$ نوشت.

نکته ۱۱: روابط عملگری زیر برای عملگرهای آفرینش \hat{a}^\dagger ، نابودی \hat{a} و تعداد \hat{N} برقرار است:

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$$

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (n = 1, 2, \dots)$$

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (n = 0, 1, 2, \dots, N-1)$$

درسنامه (۲): حالت‌های نوسانگر

فضای مکان (تابع موج)

نمایش حالت $|\alpha\rangle$ در فضای مکان (x) با تابع موج $\Psi_\alpha(x)$ داده می‌شود:
 پس می‌توان ویژه توابع نوسانگر هماهنگ ساده را به دست آورد:

حالت پایه $\Psi_0(x) = \langle x | 0 \rangle$ ، اولین حالت برانگیخته $\Psi_1(x) = \langle x | 1 \rangle$

با حل تحلیلی برای پتانسیل $\frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ ویژه توابع انرژی نوسانگر هماهنگ ساده متناسب با چند جمله‌ای‌های هرمیت به دست می‌آیند:

حالت اولیه $\Psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$

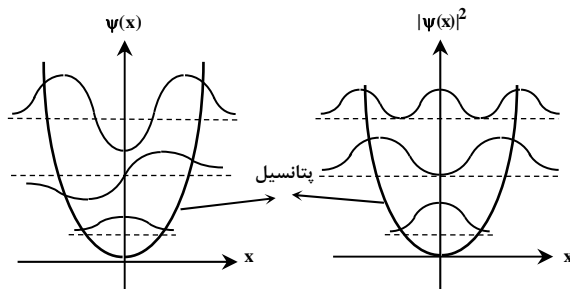
حالت برانگیخته $\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{d}{dx}\right)^n e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$

نکته ۱۲: از آنجا که پتانسیل نوسانگر هماهنگ تابعی زوج از x است، جواب‌ها به دو دسته فرد و زوج تقسیم می‌شوند. در واقع حالت پایه زوج است اولین حالت برانگیخته فرد است، دومین حالت برانگیخته زوج است و به همین ترتیب الی آخر.

نکته ۱۳: پاریته ویژه حالت n ام نوسانگر هماهنگ از عبارت $(-1)^n$ به دست می‌آید.

نکته ۱۴: ویژه توابع نوسانگر هماهنگ، ویژه توابع عملگر پاریته هم هستند، (در واقع $[\hat{H}, \hat{\Pi}] = 0$) حالت‌های نوسانگر هماهنگ پاریته خود را حفظ می‌کنند به عبارت دیگر حالتی که از ابتدا فرد باشد، تا ابد فرد و حالتی که در آغاز زوج باشد برای همیشه زوج می‌ماند.

در شکل‌های زیر ویژه توابع $(\Psi(x))$ و چگالی احتمال $(|\Psi(x)|^2)$ برای سه حالت اول نوسانگر هماهنگ ترسیم شده‌اند.



نکته ۱۵: تابع موج نوسانگر کوانتومی در ناحیه‌ای که به لحاظ کلاسیکی «ممنوع» است نفوذ می‌کند.

در اینجا به بررسی چند نکته درخصوص ویژه حالات نوسانگر هماهنگ در یک بعد می‌پردازیم:

۱- حاصل $\langle n | \hat{x} | m \rangle$ جز برای $n = m \pm 1$ صفر است.

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \Rightarrow \langle n | \hat{x} | m \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle n | \hat{a} + \hat{a}^\dagger | m \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \{ \langle n | \hat{a} | m \rangle + \langle n | \hat{a}^\dagger | m \rangle \}$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \{ \sqrt{m} \langle n | m-1 \rangle + \sqrt{m+1} \langle n | m+1 \rangle \} \Rightarrow \langle n | \hat{x} | m \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \{ \sqrt{m} \delta_{n,m-1} + \sqrt{m+1} \delta_{n,m+1} \}$$

۲- می‌توان نشان داد $\langle n | \hat{p} | m \rangle$ جز برای $n = m \pm 1$ مقداری برابر صفر دارد:

$$\langle n | \hat{p} | m \rangle = \langle n | (-i) \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) | m \rangle = i \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} \langle n | \hat{a}^\dagger - \hat{a} | m \rangle = i \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} \{ \langle n | \hat{a}^\dagger | m \rangle - \langle n | \hat{a} | m \rangle \}$$

$$= i \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} \{ \sqrt{m+1} \langle n | m+1 \rangle - \sqrt{m} \langle n | m-1 \rangle \} \Rightarrow \langle n | \hat{p} | m \rangle = i \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} \{ \sqrt{m+1} \delta_{n,m+1} - \sqrt{m} \delta_{n,m-1} \}$$

۳- با استفاده از راست هنجاری ویژه حالات نوسانگر هماهنگ عبارت $\langle m | [\hat{x}, \hat{p}] | n \rangle$ برابر $i\hbar\delta_{mn}$ است که در آن δ_{mn} دلتای کرونکر است.

محاسبه رابطه عدم قطعیت میان مولفه‌های مکان و تکانه خطی برای نوسانگر هماهنگ:

از نکات ۱ و ۲ بلافاصله درمی‌یابیم که مقادیر چشمداشتی \hat{x} و \hat{p} برای ویژه حالت $|n\rangle$ نوسانگر هماهنگ صفر است:

(زیرا $\langle \hat{x} \rangle = \langle n | \hat{x} | n \rangle = 0$ ($n \neq n \pm 1$))

(زیرا $\langle \hat{p} \rangle = \langle n | \hat{p} | n \rangle = 0$ ($n \neq n \pm 1$))



مدرسان شریف

فصل پنجم

«سامانه‌های بس ذره‌ای و ذرات یکسان»

درسنامه (۱): تکانه و تابع موج کلی

در این فصل به مطالعه سامانه‌های کوانتومی بیش از یک ذره و در یک بعد می‌پردازیم.

مقدمه

به طور کلی سامانه‌ای شامل N ذره با تابع موج $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N; t)$ مشخص می‌شود که به شکل زیر بهنجار شده است:

$$\int \dots \int dx_1 dx_2 \dots dx_N |\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N; t)|^2 = 1$$

$|\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N; t)|^2$ چگالی احتمال یافتن ذره ۱ در مکان x_1 ، ذره ۲ در مکان x_2 و ... و ذره N در مکان x_N و در لحظه t است. تحول زمانی تابع موج سامانه‌ای N ذره‌ای با معادله شرودینگر داده می‌شود:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x_1, x_2, \dots, x_N; t) = \hat{H} \Psi(x_1, x_2, \dots, x_N; t)$$

در رابطه بالا عملگر \hat{H} ، هامیلتونی سامانه است که به صورت زیر داده می‌شود:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + \hat{V}(x_1, x_2, \dots, x_N; t)$$

در اینجا عملگر تکانه خطی ذره i ام یعنی \hat{p}_i به صورت $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}$ در فضای مکان تعریف می‌شود.

نکته ۱: عملگرهایی که مشاهده پذیرهای تک ذره‌ای را توصیف می‌کنند، وقتی به ذرات مختلف مربوط می‌شوند، با هم جابجا می‌شوند، به عبارت دیگر:

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}$$

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & , i = j \\ 0 & , i \neq j \end{cases}$$

در رابطه بالا δ_{ij} دلتای کرونکر بوده و چنین تعریف می‌شود:

مثال ۱: کدام گزینه نادرست است؟

$$[\hat{x}_2, \hat{p}_1] = 0 \quad (۴)$$

$$[\hat{x}_2, \hat{p}_2] = i\hbar \quad (۳)$$

$$[\hat{x}_1, \hat{p}_2] = 0 \quad (۲)$$

$$[\hat{x}_1, \hat{p}_1] = i\hbar \quad (۱)$$


پاسخ: گزینه «۳» با توجه به این که برای عملگرهای مکان (\hat{x}) و تکانه خطی (\hat{p}) دو ذره m و n رابطه $[\hat{x}_n, \hat{p}_m] = i\hbar \delta_{nm}$ برقرار است،

روشن است که $[\hat{x}_2, \hat{p}_2] = 0$ و بنابراین میان گزینه‌های موجود، گزینه ۳ نادرست است و بنابراین پاسخ صحیح به این مثال است.



(انرژی) پتانسیل یک سامانه N ذره‌ای به طور کلی با عبارت $V(x_1, x_2, \dots, x_N; t)$ داده می‌شود؛ چنانچه پتانسیل مستقل از زمان باشد و میدان‌های خارجی (مانند میدان‌های گرانشی زمین یا میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی خارجی) وجود نداشته باشند، انرژی پتانسیل تنها به فاصله نسبی ذرات بستگی دارد:

$$V = V(x_1 - x_2, x_2 - x_3, \dots, x_{N-1} - x_N)$$

نکته ۲: در مورد نیروهای دو جسمی (مانند نیروهای کولنی) پتانسیل (در غیاب میدان خارجی) به صورت $V = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} V(x_i - x_j)$ درمی‌آید. 

نکته ۳: به طور کلی در غیاب عوامل خارجی، تمام کمیت‌های مهم فیزیکی (از جمله پتانسیل V) تحت انتقال (جابجایی $x_j \rightarrow x_j + a$) ناوردا (یکسان) باقی می‌مانند و بستگی پتانسیل به فاصله نسبی میان ذرات پیامد این واقعیت است.

در مکانیک کلاسیک و در غیاب نیروهای خارجی تکانه خطی یک سامانه N ذره‌ای پایسته می‌ماند. همین نتیجه در مکانیک کوانتومی نیز صادق است و این مطلب ناشی از ناوردایی هامیلتونی تحت انتقال یکسان ذرات است.

تکانه خطی کل در مکانیک کوانتومی

تکانه خطی کل یک سامانه N ذره‌ای در مکانیک کوانتومی با عملگر \hat{P} داده می‌شود و چنین تعریف می‌شود:

$$\hat{P} = \sum_{i=1}^N \hat{p}_i = -i\hbar \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial x_i}$$

نکته ۴: به طور کلی در مکانیک کوانتومی عملگر تکانه خطی مولد انتقال فضایی است و چنانچه هامیلتونی یک سامانه بس ذره‌ای تحت انتقال ناوردا بماند به این معناست که این عملگر (یعنی هامیلتونی) با عملگر تکانه خطی کل، جابجا می‌شود: $[\hat{H}, \hat{P}] = 0$.

اما می‌دانیم هرگاه عملگری وابستگی صریح زمانی نداشته باشد (چنانچه در مورد \hat{P} چنین است) و با هامیلتونی جابجا شود (چنانچه \hat{P} واجد این شرایط است)، ثابت حرکت خواهد بود.

نکته ۵: رابطه عملگری $[\hat{H}, \hat{P}] = 0$ نشان می‌دهد که تکانه کل \hat{P} مربوط به یک سامانه بس ذره‌ای، ثابت حرکت است. این یک پیامد بسیار مهم و حکمی درباره ماهیت فضا است. این حکم که مبدایی وجود ندارد، یعنی قوانین فیزیکی تحت یک جابجایی ثابت، ناوردا هستند و به یک قانون پایستگی منجر می‌شود. (قانون پایستگی تکانه خطی کل)



درسنامه (۲): سامانه دو ذره‌ای

در این قسمت به ساده‌ترین سامانه بس ذره‌ای یعنی سیستمی شامل تنها دو ذره می‌پردازیم؛ این کار را برای دو حالت انجام می‌دهیم: ۱- سامانه دو ذره‌ای بدون برهم‌کنش ۲- سامانه دو ذره‌ای برهم‌کنشی با انرژی برهم‌کنش متناسب با فاصله دو ذره از هم

سامانه دو ذره‌ای بدون برهم‌کنش

یک سیستم دو ذره‌ای (غیر یکسان) منزوی که ذرات آن با هم اندرکنشی ندارند (به عبارتی $V(x_1, x_2) = 0$) در واقع دو ذره آزاد محسوب می‌شوند.

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} = -\frac{\hbar^2}{2} \left\{ \frac{1}{m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{1}{m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right\}$$

هامیلتونی این سامانه به صورت مقابل در خواهد آمد:

نکته ۶: از آنجا که دو ذره هیچ برهم‌کنشی با یکدیگر ندارند، چگالی احتمال یافتن ذره ۱ در مکان x_1 و ذره ۲ در مکان x_2 برابر با حاصل ضرب چگالی‌های احتمال تک ذره‌ای است، به بیان دیگر داریم:

$$P(x_1, x_2) = P(x_1)P(x_2)$$

رابطه بالا به این معناست که چگالی‌ها مستقل از یکدیگرند.

پیامد رابطه فوق این است که تابع موج سامانه دو ذره‌ای بدون برهم‌کنش برابر با حاصل ضرب دو تابع موج تک ذره‌ای وابسته به دو ذره است:

$$\Psi(x_1, x_2) = \Psi_1(x_1)\Psi_2(x_2)$$

به این ترتیب معادله حاکم بر یک سامانه دو ذره‌ای غیر برهم‌کنشی به شکل زیر در خواهد آمد:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) \Psi(x_1, x_2) = E \Psi(x_1, x_2) \quad ; \quad \Psi(x_1, x_2) = \Psi_1(x_1)\Psi_2(x_2)$$

رابطه بالا با روش جداسازی متغیرها قابل حل است، نتیجه دو معادله زیر است:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2 \Psi_1(x_1)}{dx_1^2} = E_1 \Psi_1(x_1), \quad -\frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{d^2 \Psi_2(x_2)}{dx_2^2} = E_2 \Psi_2(x_2) \quad ; \quad E = E_1 + E_2$$

معادلات بالا، معادلات حاکم بر دو ذره آزاد است که در فصول قبل جواب‌های آن را بدست آوردیم:

$$\Psi_1(x_1) \sim e^{ik_1 x_1} \quad ; \quad k_1^2 = \frac{2m_1 E_1}{\hbar^2}, \quad \Psi_2(x_2) \sim e^{ik_2 x_2} \quad ; \quad k_2^2 = \frac{2m_2 E_2}{\hbar^2}$$

$$\Psi(x_1, x_2) = C e^{ik_1 x_1 + ik_2 x_2}$$

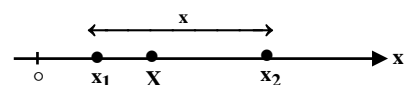
به این ترتیب تابع موج توصیف‌کننده یک سامانه دو ذره‌ای غیر برهم‌کنشی بدست می‌آید:

نکته ۷: به طور کلی سامانه‌های شامل N ذره (غیریکسان) غیر برهم‌کنشی، قابل تحویل به N سامانه ۱ ذره‌ای است، به طوری که تابع موج کل از حاصل ضرب توابع موج تک ذره‌ای و انرژی کل از حاصل جمع انرژی‌های تک ذره‌ای بدست می‌آید:

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \Psi_1(x_1)\Psi_2(x_2)\dots\Psi_N(x_N) \quad ; \quad E = E_1 + E_2 + \dots + E_N$$

مسئله دو ذره بدون برهم‌کنش و غیریکسان را در چارچوب مرکز جرم و مختصات نسبی بررسی می‌کنیم: اگر مکان و جرم ذره ۱ را به ترتیب با x_1 و m_1 و همچنین مکان و جرم ذره ۲ را به ترتیب با x_2 و m_2 نمایش دهیم، آنگاه مختصات مرکز جرم در ۱ بعد به صورت زیر بدست می‌آید:

$$X = x_1 - x_2 \quad (\text{فاصله میان دو ذره})$$



$$X = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2} \quad (\text{مختصه مرکز جرم})$$

به همین ترتیب می‌توان عدد موج (تکانه خطی) کل K و عدد موج نسبی k را به صورت مقابل تعریف کرد:

$$K \equiv k_1 + k_2 \quad ; \quad k \equiv \frac{m_2 k_1 - m_1 k_2}{m_1 + m_2}$$

به این ترتیب تابع موج این سامانه دو ذره‌ای بدست می‌آید: $\Psi(x_1, x_2) = C e^{iKX} e^{ikx}$ (در اینجا C یک ضریب ثابت است). در این رابطه عامل e^{iKX}

حرکت مرکز جرم را نمایش می‌دهد و e^{ikx} تابع موج داخلی است. انرژی کل سامانه، یعنی E چنین است:

$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2M} + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$$

در رابطه بالا M جرم کل سامانه ($M = m_1 + m_2$) و μ جرم کاهش یافته است که به صورت $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$ تعریف می‌شود. جمله اول، انرژی یک

سیستم دو ذره‌ای به جرم $m_1 + m_2$ است که آزادانه با تکانه کل $P = \hbar K = \hbar(k_1 + k_2)$ حرکت می‌کند و جمله دوم، انرژی تک ذره‌ای آزاد به جرم μ است که با تکانه $p = \hbar k$ در حرکت است.

نکته ۸: جرم کاهش یافته (μ) همواره از هر یک از جرم‌های m_1 و m_2 کوچکتر است. چنانچه در یک مسئله دو ذره‌ای یکی از اجرام (مانند m_1) از جرم دیگر (m_2) بسیار بزرگتر باشد، در این صورت جرم کاهش یافته تقریباً برابر با جرم کوچکتر (یعنی m_2) است و جرم کل تقریباً برابر با جرم بزرگتر است:

$$m_1 \gg m_2 \Rightarrow \begin{cases} M \approx m_1 \\ \mu \approx m_2 \end{cases}$$



سامانه دو ذره‌ای برهمکنشی با انرژی برهم‌کنش متناسب با فاصله دو ذره از هم

برهمکنش‌ها در بسیاری از موارد تنها تابع فاصله میان ذرات است؛ برهمکنش کولنی به این صورت است. در اینجا تمام برهمکنش‌های میان ذرات تابع فاصله میان آن‌ها است. اتم هیدروژن (شامل یک پروتون و یک الکترون) نمونه بارزی از یک سامانه دو ذره‌ای با برهمکنش متناسب با فاصله است. به این ترتیب هامیلتونی یک

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + V(x_1 - x_2) \quad \text{سیستم دو ذره‌ای با پتانسیلی که تنها به فاصله نسبی دو ذره بستگی دارد به صورت مقابل است:}$$

با توجه به هامیلتونی بالا، معادله حاکم بر تابع موج سامانه، $\Psi(x_1, x_2)$ عبارتست از:

$$\hat{H}\Psi(x_1, x_2) = E\Psi(x_1, x_2) \Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right)\Psi(x_1, x_2) + V(x_1 - x_2)\Psi(x_1, x_2) = E\Psi(x_1, x_2)$$

در اینجا مجدداً از مختصات مرکز جرم و فاصله نسبی استفاده می‌کنیم. به این ترتیب پتانسیل تنها تابع X خواهد بود:

$V(x_1 - x_2) = V(x)$ و مرکز جرم X همچنان به مانند یک ذره آزاد حرکت خواهد کرد. به این ترتیب تابع موج سامانه به صورت زیر درمی‌آید: در رابطه بالا $\Psi(x)$ تابع موج داخلی است که در معادله زیر صدق می‌کند:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = \varepsilon\psi(x) \quad \text{معادله شرودینگر تک ذره‌ای به جرم } \mu \text{ و انرژی داخلی } \varepsilon:$$

در اینجا ε عبارتست از:

در رابطه بالا E انرژی کل است.

مثال ۲: دو الکترون هریک به جرم m_e در نظر بگیرید که حالت اسپینی یکسانی دارند و تحت پتانسیل یک‌بعدی $V(|x_1 - x_2|) = \begin{cases} -V_0 & 0 \leq |x_1 - x_2| \leq a \\ \infty & \text{جاهای دیگر} \end{cases}$

قرار دارند. پایین‌ترین تراز انرژی حالت سیستم دو الکترونی کدام است؟ فرض کنید عدد موج دوپرویی مربوط به تکانه کل دو الکترون K است. (فیزیک - سراسری ۹۰)

$$\frac{\hbar^2}{4m_e a^2} + \frac{\hbar^2 K^2}{4m_e} - V_0 \quad (۴) \quad \frac{\Delta \hbar^2}{m_e a^2} + \frac{\hbar^2 K^2}{2m_e} + V_0 \quad (۳) \quad \frac{\Delta \hbar^2}{m_e a^2} + \frac{\hbar^2 K^2}{4m_e} - V_0 \quad (۲) \quad \frac{\hbar^2}{4m_e a^2} + \frac{\hbar^2 K^2}{2m_e} + V_0 \quad (۱)$$

پاسخ: گزینه «۴» از تبدیل مختصات که به صورت زیر تعریف می‌شود استفاده می‌کنیم:

$$\begin{cases} x = x_1 - x_2 \\ X = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2} \end{cases}; \quad \begin{cases} M = m_1 + m_2 = 2m_e \\ \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \rightarrow \mu = \frac{m_e}{2} \end{cases}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} - V_0\right] u_E(x_1, x_2) = E u_E(x_1, x_2) \Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - V_0\right] u_E(x, X) = E u_E(x, X)$$

$$|x| = |x_1 - x_2| \leq a \rightarrow |x| \leq a$$

$$u_E(x, X) = \phi(X)\psi(x)$$

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2 \phi(X)}{dX^2} = E_c \phi(X) & \text{(I)} \\ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} - V_0 \psi(x) = E_r \psi(x) & \text{(II)} \\ E = E_c + E_r \end{cases}$$

از جداسازی متغیر معادله شرودینگر فوق داریم:

$$K^2 = \frac{2ME_c}{\hbar^2} \Rightarrow \phi(X) = e^{iKX} \Rightarrow E_c = \frac{K^2 \hbar^2}{2m_e} \quad \text{از معادله I نتیجه می‌گیریم:}$$

$$q^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2} (V_0 - |E_r|) \quad \left. \begin{array}{l} y = qa \\ y = n\pi \end{array} \right\} \Rightarrow E_r \cong \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2\mu a^2} - V_0 \quad \text{و از معادله II داریم:}$$

$$E_{r_{\min}} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{m_e a^2} - V_0$$

$$\Rightarrow E = \frac{K^2 \hbar^2}{2m_e} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{m_e a^2} - V_0 \quad \Rightarrow E = \frac{K^2 \hbar^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2}{2m_e a^2} - V_0 \quad \text{با توجه به رابطه } \hbar = \frac{h}{2\pi} \text{ داریم:}$$



مدرسان شریف

فصل ششم

«مبانی ریاضی و اصول موضوعه مکانیک کوانتومی و نمادنگاری دیراک»

درسنامه (۱): توضیحات پایه‌ای



در این فصل و در بسیاری از جاهای دیگر کتاب از نمادنگاری پرا و کت استفاده خواهیم کرد.

فضای کت

در مکانیک کوانتومی، یک حالت فیزیکی، توسط یک بردار حالت واقع در یک فضای برداری مختلط، نمایش داده می‌شود. چنین برداری را کت می‌خوانند و با $|\alpha\rangle$ نمایش می‌دهند. فرض می‌شود چنین کت تمام اطلاعات در مورد حالت فیزیکی را در بر داشته باشد.

- دو کت را می‌توان با هم جمع کرد، حاصل یک کت جدید است:
 $|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle$
 - می‌توان $|\alpha\rangle$ را در یک عدد (به طور کلی مختلط) c ضرب کرد، حاصل کتی جدید است:
 $(c)|\alpha\rangle = c|\alpha\rangle$
 عدد c می‌تواند سمت چپ و یا راست کت قرار بگیرد، حاصل هیچ تفاوتی نمی‌کند:
 $c|\alpha\rangle = |\alpha\rangle c$
 در حالت خاصی که c صفر باشد ($c=0$) کت حاصل را کت پوچ می‌نامند.
 $0|\alpha\rangle = |0\rangle$
 - یکی از فرضیات فیزیکی، مبنی بر این است که $|\alpha\rangle$ و $c|\alpha\rangle$ ($c \neq 0$) حالت فیزیکی یکسانی را نمایش می‌دهند؛ به عبارت دیگر تنها «جهت» در فضای برداری حائز اهمیت است.

- یک مشاهده‌پذیر (مانند تکانه خطی) را می‌توان توسط یک عملگر، مانند \hat{A} ، در فضای برداری مفروض نمایش داد. به طور کلی یک عملگر از سمت چپ بر یک کت عمل می‌کند:

- به طور کلی حاصل $\hat{A}|\alpha\rangle$ یک ثابت ضرب در $|\alpha\rangle$ نیست. با این وجود کت‌های ویژه‌ای وجود دارند که به ویژه کت‌های عملگر \hat{A} موسومند، آن‌ها را با $|a'''\rangle, |a''\rangle, |a'\rangle$ نمایش می‌دهیم و ویژگی روبه‌رو را دارند:
 $\hat{A}|a'\rangle = a'|a'\rangle, \hat{A}|a''\rangle = a''|a''\rangle, \dots$
 در اینجا a', a'', a''' و ... عدد هستند و مجموعه اعداد a', a'', a''' و ... که به طور فشرده به صورت $\{a'\}$ نمایش داده می‌شوند، مجموعه ویژه مقادیر عملگر \hat{A} خوانده می‌شوند. حالت فیزیکی منتسب به یک ویژه‌کت، به ویژه حالت، موسوم است.
 - در یک فضای برداری N بعدی که توسط N ویژه‌کت مشاهده‌پذیر A «پوشانده» می‌شود، هر کت حالت دلخواه $|\alpha\rangle$ را می‌توان به صورت
 $|\alpha\rangle = \sum_a c_a |a'\rangle$ بسط داد. c_a یک ضریب مختلط است.

فضای برا و ضرب‌های داخلی

به ازای هر کت $|\alpha\rangle$ ، یک برا که با $|\alpha\rangle$ نمایش می‌دهیم، در فضایی تصویر دوگان فضای وجود دارد. فضای برا توسط ویژه براهای $\{|a'\rangle\}$ که متناظر با ویژه کت‌های $\{|a'\rangle\}$ هستند، ساخته می‌شود. برای متناظر با کت $|\alpha\rangle$ است $c^* \langle a|, c|\alpha\rangle$ و این نکته بسیار مهمی است. به طور کلی برای متناظر با $c|\alpha\rangle + c|\beta\rangle$ به صورت $c_\alpha^* \langle \alpha| + c_\beta^* \langle \beta|$ است.

ضرب داخلی یک برا و کت را به گونه‌ای تعریف می‌کنیم که برا در چپ و کت در راست قرار داشته باشد:
 $\langle \beta | \alpha \rangle = (\langle \beta |) \cdot (| \alpha \rangle)$
 به طور کلی حاصل ضرب داخلی، یک عدد مختلط است.



دو ویژگی بنیادی ضرب‌های داخلی

- ۱- $\langle \beta | \alpha \rangle = \langle \alpha | \beta \rangle^*$ ، به عبارت دیگر $\langle \beta | \alpha \rangle$ و $\langle \alpha | \beta \rangle$ ، همیوگ مختلط یکدیگر هستند. ۲- همواره $\langle \alpha | \alpha \rangle \geq 0$
- دو کت $|\alpha\rangle$ و $|\beta\rangle$ متعامد خوانده می‌شوند هرگاه $\langle \alpha | \beta \rangle = 0$ (به شرط آن که $\langle \alpha | \alpha \rangle \neq 0$)
- با کت غیر پوچ $|\alpha\rangle$ می‌توان کت بهنجار $|\tilde{\alpha}\rangle$ را تشکیل داد: $|\tilde{\alpha}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle}} |\alpha\rangle$ به طوری که $\langle \tilde{\alpha} | \tilde{\alpha} \rangle = 1$

عملگرها

- در مکانیک کوانتومی مشاهده‌پذیرها را با عملگرهایی که بر روی کت‌های حالت اثر می‌کنند، نمایش می‌دهند.
- یک عملگر از سمت چپ بر یک کت اثر می‌کند و حاصل یک کت جدید است: $\hat{X}(|\alpha\rangle) = |\beta\rangle$ (البته خود $|\alpha\rangle$ باید کت حالت پوچ نباشد)
 - عملگر \hat{X} و \hat{Y} را مساوی گویند، هرگاه: $\hat{X}|\alpha\rangle = \hat{Y}|\alpha\rangle$ که در آن $|\alpha\rangle$ هر کت دلخواهی (به غیر از کت پوچ) می‌تواند باشد.
 - عملگر \hat{X} را عملگر پوچ می‌نامند، هرگاه برای هر کت دلخواه $|\alpha\rangle$ داشته باشیم: $\hat{X}|\alpha\rangle = 0$
 - عملگرها را می‌توان با یکدیگر جمع کرد. عملیات جمع، جابه‌جایی‌پذیر و شرکت‌پذیر هستند: $\hat{X} + \hat{Y} = \hat{Y} + \hat{X}$ ، $\hat{X}(\hat{Y} + \hat{Z}) = (\hat{X}\hat{Y} + \hat{X}\hat{Z})$
 - عملگر \hat{X} را خطی گویند، هرگاه: $\hat{X}(c_\alpha|\alpha\rangle + c_\beta|\beta\rangle) = c_\alpha\hat{X}|\alpha\rangle + c_\beta\hat{X}|\beta\rangle$
 - یک عملگر همواره از سمت راست بر یک کت اثر می‌کند: $(|\alpha\rangle)\hat{X} = |\beta\rangle$ ، حاصل یک کت جدید است.
 - متناظر برای عبارت $\langle \alpha | \hat{X}^\dagger$ ، $\langle \hat{X} | \alpha \rangle$ است. عملگر \hat{X}^\dagger را همیوگ هرمیتی \hat{X} می‌نامند.
 - عملگر \hat{X} را هرمیتی می‌خوانند، هرگاه $\hat{X} = \hat{X}^\dagger$.
 - عملگر \hat{X} را یکانی می‌خوانند هرگاه $\hat{X}\hat{X}^\dagger = \hat{X}^\dagger\hat{X} = \hat{X}$ (در اینجا \hat{X} عملگر یکه (واحد) است).

ضرب

- عملگرهای \hat{X} و \hat{Y} را می‌توان در یکدیگر ضرب کرد.
- در حالت کلی عملیات ضرب، جابه‌جا پذیر نیستند: $\hat{X}\hat{Y} \neq \hat{Y}\hat{X}$
 - عملیات ضرب مانند جمع، شرکت پذیر هستند: $\hat{X}(\hat{Y}\hat{Z}) = (\hat{X}\hat{Y})\hat{Z} = \hat{X}\hat{Y}\hat{Z}$
 - 📖 نکته ۱: همیوگ هرمیتی $\hat{X}\hat{Y}$ ، به صورت $\hat{Y}^\dagger\hat{X}^\dagger$ است: $(\hat{X}\hat{Y})^\dagger = \hat{Y}^\dagger\hat{X}^\dagger$

ضرب خارجی (ضرب بیرونی)

- اگر کت $|\beta\rangle$ را از سمت چپ در برای $\langle \alpha |$ ضرب کنیم، حاصل ضرب خارجی، تشکیل می‌شود:
- $$(|\beta\rangle)\langle \alpha | = |\beta\rangle\langle \alpha |$$
- 📖 نکته ۲: $|\beta\rangle\langle \alpha |$ یک عملگر است، بنابراین به طور اساسی با ضرب داخلی $\langle \alpha | \beta \rangle$ که یک عدد است، فرق می‌کند.

ضرب‌های ممنوع

- ضرب‌هایی چون $\hat{X}|\alpha\rangle$ و $|\alpha\rangle\hat{X}$ نه کت، نه برا و نه عملگر هستند. آن‌ها بی‌معنی هستند. ضرب‌هایی چون $|\alpha\rangle\langle \beta |$ و $\langle \alpha | \beta \rangle$ و ضرب $|\alpha\rangle$ و $|\beta\rangle$ وقتی بردارهای کت مربوط به فضای کت یکسان نباشند، ممنوع است.

- 📖 نکته ۳: عبارت $|\beta\rangle\langle \alpha | \gamma \rangle$ را می‌توان به دو گونه تعبیر کرد:

- می‌توان $|\beta\rangle\langle \alpha | \gamma \rangle$ را به صورت یک حاصل ضرب بیرونی $|\beta\rangle\langle \alpha |$ که بر یک کت $|\gamma\rangle$ عمل می‌کند، دانست:
- $$|\beta\rangle\langle \alpha | \gamma \rangle = (|\beta\rangle\langle \alpha |) \cdot |\gamma\rangle$$
- می‌توان $|\beta\rangle\langle \alpha | \gamma \rangle$ را به صورت حاصل ضرب عدد $\langle \alpha | \gamma \rangle$ در کت $|\beta\rangle$ تعبیر نمود:
- $$|\beta\rangle\langle \alpha | \gamma \rangle = (|\beta\rangle) \cdot (\langle \alpha | \gamma \rangle)$$

- 📖 نکته ۴: عملگر $|\beta\rangle\langle \alpha |$ ، کت $|\gamma\rangle$ را در جهت کت $|\beta\rangle$ می‌چرخاند.

- 📖 نکته ۵: اگر $\hat{X} = |\beta\rangle\langle \alpha |$ آنگاه $\hat{X}^\dagger = |\alpha\rangle\langle \beta |$

- 📖 نکته ۶: برای عملگر \hat{X} و کت‌های حالت $|\alpha\rangle$ و $|\beta\rangle$ ، رابطه روبه‌رو همواره برقرار است:
- $$\langle \beta | \hat{X} | \alpha \rangle = \langle \alpha | \hat{X}^\dagger | \beta \rangle^*$$

- 📖 نکته ۷: برای عملگر هرمیتی \hat{X} رابطه بالا به صورت $\langle \beta | \hat{X} | \alpha \rangle = \langle \alpha | \hat{X} | \beta \rangle^*$ در خواهد آمد.



کج مثال ۱: اگر A یک عملگر یکانی با ویژه بردار $|\psi\rangle$ و ویژه مقدار λ باشد، آنگاه ویژه مقدارهای عملگر $\langle\psi|A^\dagger|\psi\rangle$ کدامند؟

(فوتونیک - سراسری ۹۵)

- (۱) ۱ و ۰ (۲) ۱- و ۱ (۳) $|\lambda|^2$ (۴) λ و λ^*

پاسخ: گزینه «۲» طبق معادله ویژه مقداری چون A یک عملگر یکانی با ویژه بردار $|\psi\rangle$ و ویژه مقدار λ است می‌توانیم بنویسیم: $A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$

از طرفی اگر الحاقی رابطه بالا را در نظر بگیریم داریم:

از طرفی چون A یک عملگر یکانی است از رابطه $AA^\dagger = 1$ پیروی می‌کند. حال می‌توانیم معادله ویژه مقداری را برای عملگر $\langle\psi|A^\dagger|\psi\rangle$ معرفی شده در صورت مسئله بنویسیم:

$$\langle A|\psi\rangle\langle\psi|A^\dagger|\psi\rangle = \underbrace{\langle A|\psi\rangle}_{\lambda|\psi\rangle}\underbrace{\langle\psi|A^\dagger|\psi\rangle}_{\lambda^*\langle\psi|} = (\lambda|\psi\rangle)(\lambda^*\langle\psi|) = \lambda^*\lambda|\psi\rangle$$

به یک روش دیگر با استفاده از خاصیت یکانی بودن A نیز می‌توانیم معادله ویژه مقداری را حل کنیم:

$$A\underbrace{\langle\psi|A^\dagger|\psi\rangle}_{1} = A1|\psi\rangle = AA^\dagger|\psi\rangle = 1^2|\psi\rangle = 1|\psi\rangle$$

چون هر دو رابطه یکسان هستند پس می‌توانیم آن‌ها را برابر در نظر بگیریم. یعنی:

$$\lambda^*\lambda|\psi\rangle = 1|\psi\rangle \Rightarrow \lambda^*\lambda = 1 \Rightarrow \begin{cases} \lambda = \pm 1 & \text{اگر حقیقی باشد} \\ \lambda = \pm i & \text{اگر موهومی باشد} \end{cases}$$



کج مثال ۲: عملگر $\frac{1+i\hat{A}}{1-i\hat{A}}$ در صورتی یکانی است که عملگر \hat{A} عملگری باشد. (فوتونیک - سراسری ۹۶)

- (۱) پادهرمیتی (۲) یکانی (۳) هرمیتی (۴) متقارن

پاسخ: گزینه «۳» عملگری را یکانی می‌خوانند که الحاقی آن با وارون آن برابر باشد، به عبارتی عملگری یکانی است که برای آن $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$ باشد.

اگر طرفین این تساوی را در \hat{U} ضرب کنیم، داریم:

بنابراین به سادگی برای تشخیص یکانی بودن یک عملگر می‌توانیم از شرط $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{I}$ استفاده کنیم. که در آن \hat{I} عملگر واحد است.

در مثال حاضر داریم $\hat{U} = \frac{1+i\hat{A}}{1-i\hat{A}}$ بنابراین خواهیم داشت: $\hat{U}^\dagger = \frac{1-i\hat{A}^\dagger}{1+i\hat{A}^\dagger}$ در نتیجه می‌توانیم شرط یکانی بودن عملگر را بررسی کنیم.

$$\hat{U}\hat{U}^\dagger = \frac{1+i\hat{A}}{1-i\hat{A}} \times \frac{1-i\hat{A}^\dagger}{1+i\hat{A}^\dagger} = \frac{(1+i\hat{A})(1-i\hat{A}^\dagger)}{(1-i\hat{A})(1+i\hat{A}^\dagger)} = \frac{1-i\hat{A}^\dagger+i\hat{A}+\hat{A}\hat{A}^\dagger}{1-i\hat{A}+i\hat{A}^\dagger+\hat{A}\hat{A}^\dagger} = \hat{I}$$

برای اینکه کسر فوق با عملگر واحد برابر باشد، باید صورت و مخرج کسر با هم برابر باشند؛ یعنی:

$$1-i\hat{A}^\dagger+i\hat{A}+\hat{A}\hat{A}^\dagger = 1-i\hat{A}+i\hat{A}^\dagger+\hat{A}\hat{A}^\dagger \Rightarrow -i(\hat{A}^\dagger-A) = -i(\hat{A}-\hat{A}^\dagger) \Rightarrow (\hat{A}^\dagger-\hat{A}) = (\hat{A}-\hat{A}^\dagger)$$

$$\Rightarrow 2\hat{A}^\dagger = 2\hat{A} \Rightarrow \hat{A}^\dagger = \hat{A}$$

عبارت به دست آمده شرط هرمیتی بودن یک عملگر است؛ بنابراین برای اینکه عملگر $\frac{1+i\hat{A}}{1-i\hat{A}}$ یک عملگر یکانی باشد، باید عملگر \hat{A} یک عملگر هرمیتی باشد.



درسنامه (۲): کت‌های پایه و نمایش‌های ماتریسی



ویژه کت‌های یک مشاهده‌پذیر

نکته ۸: در مکانیک کوانتومی، مشاهده‌پذیرهای فیزیکی با عملگرهای هرمیتی نشان داده می‌شوند.

قضیه: ویژه مقادیر یک عملگر هرمیتی (مانند \hat{A})، حقیقی هستند و ویژه کت‌های متناظر با ویژه مقادیر متفاوت، بر هم عمودند، به زبان ریاضی:

$$\langle a' | a'' \rangle = 0 \quad (a' \neq a'') \quad \text{آنگاه: } \langle a' | a'' \rangle = \langle a'' | a' \rangle^* \quad \text{و} \quad \hat{A} | a' \rangle = a' | a' \rangle \quad \text{اگر} \quad \hat{A} = \hat{A}^\dagger \quad \text{و} \quad a' = a'^*$$

نکته ۹: عملگرهای مشاهده‌پذیرهای فیزیکی، ویژه مقادیر حقیقی دارند.

نکته ۱۰: ویژه مقادیر عملگرهای فیزیکی همان مقادیر چشم‌داشتی مشاهده‌پذیرهای فیزیکی متناظر با آن‌ها هستند.

ویژه کت‌ها به عنوان کت‌های پایه

ویژه کت‌های بهنجار عملگر \hat{A} تشکیل یک مجموعه کامل راست هنجار می‌دهند، به طوری که هر کت دلخواه در فضای کت‌ها را می‌توان بر حسب ویژه کت‌های عملگر \hat{A} بسط داد:

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle$$

عملگر $|a'\rangle\langle a'|$ را عملگر تصویر در امتداد کت پایه $|a'\rangle$ می‌نامند، زیرا هنگامی که بر حالت دلخواه $|\alpha\rangle$ عمل می‌کند، بخشی از $|\alpha\rangle$ را که در امتداد $|a'\rangle$ است، برمی‌گزیند:

$$(|a'\rangle\langle a'|)|\alpha\rangle = |a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle = c_{a'} |a'\rangle$$

از آنجا که $|\alpha\rangle$ به طور کلی یک کت دلخواه است داریم: $\sum_{a'} |a'\rangle\langle a'| = \hat{I}$ در اینجا \hat{I} عملگر یکه است و این رابطه به رابطه‌ی کاملیت یا تمامیت موسوم است.

عملگر تصویر را با $\hat{\Lambda}_{a'}$ نمایش می‌دهیم: $\hat{\Lambda}_{a'} \equiv |a'\rangle\langle a'|$ ؛ بنابراین رابطه تمامیت به صورت $\sum_{a'} \hat{\Lambda}_{a'} = \hat{I}$ درمی‌آید.

نمایش ماتریسی

با مشخص شدن کت‌های پایه، می‌توان عملگر دلخواه \hat{X} را در فضای کت‌ها با یک ماتریس مربعی نمایش داد. ابعاد این ماتریس، همان ابعاد فضای کت مورد بررسی است. به طور کلی اگر پایه‌های فضای کت، ویژه کت‌های عملگر \hat{A} یعنی $\{|a^{(i)}\rangle\}$ با $i = 1, 2, 3, \dots$ باشند، در این صورت نمایش ماتریسی عملگر \hat{X} در این فضا چنین است:

$$\hat{X} = \begin{pmatrix} \langle a^{(1)} | \hat{X} | a^{(1)} \rangle & \langle a^{(1)} | \hat{X} | a^{(2)} \rangle & \dots \\ \langle a^{(2)} | \hat{X} | a^{(1)} \rangle & \langle a^{(2)} | \hat{X} | a^{(2)} \rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

به طور کلی، عنصر X_{ij} ماتریس \hat{X} را می‌توان به صورت $X_{ij} = \langle a^{(i)} | \hat{X} | a^{(j)} \rangle$ نمایش داد.

نکته ۱۱: نمایش ماتریسی مشاهده‌پذیر A ، در صورتی که ویژه کت‌های آن به عنوان کت‌های پایه به کار روند، قطری است. به عبارت دیگر ماتریس متناظر با هر مشاهده‌پذیر فیزیکی، در پایه‌ی ویژه کت‌های خود آن مشاهده‌پذیر، قطری است. عناصر قطری همان ویژه مقادیر مشاهده‌پذیر هستند:

$$\hat{A} = \begin{bmatrix} a^{(1)} & 0 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & a^{(2)} & 0 & \dots & \dots \\ 0 & 0 & a^{(3)} & \ddots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \ddots & a^{(N)} \end{bmatrix}$$

در مکانیک ماتریسی، مشاهده‌پذیرهای فیزیکی را با ماتریس‌های مربعی، کت‌های حالت را با ماتریس‌های ستونی و براها را با ماتریس‌های سطری نمایش می‌دهند.

نکته ۱۲: برای یافتن ویژه مقادیر و ویژه توابع یک ماتریس لازم است معادله ویژه مقداری را برای آن ماتریس حل کنیم. برای اینکه ویژه مقادیر a

$$A |a'\rangle = a' |a'\rangle$$

$$\text{Det}(A - a'I) = 0$$

وجود داشته باشند باید درمینان ضرایب کت حالت صفر باشد یعنی:



مدرسان شریف

فصل هفتم

«مکانیک کوانتومی در سه بعد»

درسنامه (۱): معادله شرودینگر در دستگاه‌های مختصات چندبعدی



دنیای واقعی یک دنیای سه بعدی است و درک بسیاری از پدیده‌ها در سطح میکروسکوپیکی نیازمند بسط نظریه کوانتومی به فضای سه بعدی است. در این فصل به بررسی مکانیک کوانتومی در سه بعد می‌پردازیم.

معادله شرودینگر در سه بعد

معادله حاکم بر تحول زمانی تابع موج ذره‌ای به جرم m که تحت تأثیر (انرژی) پتانسیل V قرار دارد، با معادله شرودینگر داده می‌شود:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$$

در این رابطه $\psi(\vec{r}, t)$ تابع موج مشخصه ذره است که به طور کلی تابعی از مکان (\vec{r}) و زمان (t) است و حاوی تمامی اطلاعات سامانه فیزیکی است. \hat{H} عملگر هامیلتونی ذره در سه بعد است که به صورت مجموع عملگرهای انرژی جنبشی (\hat{K}) و انرژی پتانسیل (\hat{V}) تعریف می‌شود:

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V}$$

$$\hat{K} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{(-i\hbar \nabla)^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

عملگر انرژی جنبشی را می‌توان به صورت روبرو به عملگر تکانه خطی (\hat{p}) ارتباط داد:

در این جا عملگر ∇^2 ، عملگر لاپلاسی در سه بعد است.

به این ترتیب معادله شرودینگر در سه بعد به شکل مقابل در می‌آید:

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

در این قسمت تنها به بررسی پتانسیل‌هایی می‌پردازیم که وابستگی زمانی ندارند. بحث کلی‌تر پتانسیل‌های وابسته به زمان را به فصل ۹ مוקول می‌کنیم. بنابراین داریم: $V = V(\vec{r})$. در این صورت معادله شرودینگر قابل جداسازی است و تابع موج، متناسب با حاصل ضرب یک بخش زمانی در یک بخش فضایی است:

$$V = V(\vec{r}) \Rightarrow \psi(\vec{r}, t) \propto \psi(\vec{r}) e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

بخش فضایی تابع موج در معادله شرودینگر مستقل از زمان صادق است:

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

هدف بدست آوردن ویژه مقادیر انرژی (E) و ویژه توابع (یا بطور کلی ویژه حالات) $\psi(\vec{r})$ برای پتانسیل‌های معلوم است. باید لاپلاسی را در دستگاه مختصات مناسب با مسأله خاص مورد بررسی، بدانیم.

در این فصل به بررسی معادله شرودینگر در دو دستگاه مختصات دکارتی و کروی خواهیم پرداخت.

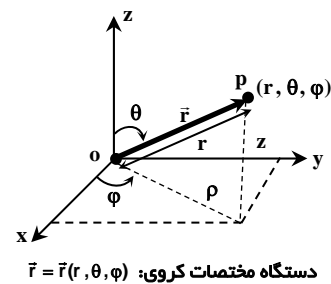
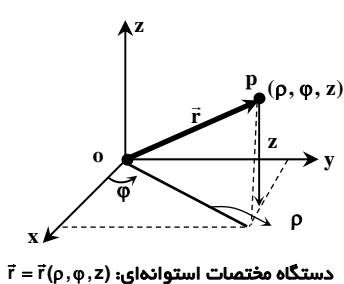
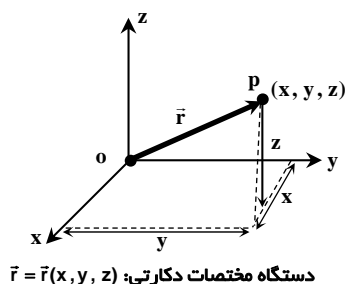
نکته ۱: انتخاب دستگاه مختصات مناسب برای حل معادله شرودینگر به شکل تابعی پتانسیل $V(\vec{r})$ بستگی دارد. به عنوان مثال مسأله ذره در

جعبه با حل معادله شرودینگر در مختصات دکارتی بررسی می‌شود و مسأله ذره در میدان نیروی مرکزی (مانند پتانسیل کولنی) را با حل معادله

شرودینگر در مختصات کروی به انجام می‌رسانیم.

در این قسمت عملگر لاپلاسی را در ۳ دستگاه مختصات دکارتی، استوانه‌ای و کروی معرفی می‌کنیم.

به طور کلی چنانچه موقعیت یک ذره نسبت به مبدأ یک چارچوب مرجع را با \vec{r} نمایش دهیم داریم:



$$\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$\nabla^2 \equiv \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$\nabla^2 \equiv \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

عملگر لاپلاسی در مختصات دکارتی:

عملگر لاپلاسی در مختصات استوانه‌ای:

عملگر لاپلاسی در مختصات کروی:

نکته ۲: گاهی عملگر لاپلاسی را در مختصات کروی به شکل‌های زیر می‌نویسند:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

مثال ۱: هامیلتونی ذره‌ای به جرم m در یک بعد به صورت $H = \frac{p^2}{2m} + mgx$ است. کدام گزینه ممکن است تابع موج این ذره در فضای تکانه، $\phi(p)$ باشد؟ (N ضریب ثابت و E ویژه مقدار انرژی ذره است.)

(فیزیک - سراسری ۹۷)

$$\phi(p) = Ne^{i\left(\frac{p^2}{2m} - \frac{E_p}{mg\hbar}\right)} \quad (2)$$

$$\phi(p) = Ne^{i\left(\frac{p^2}{2m} - \frac{E_p}{mg\hbar}\right)} \quad (1)$$

$$\phi(p) = Ne^{i\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{E_p}{mg\hbar}\right)} \quad (4)$$

$$\phi(p) = Ne^{i\left(\frac{p^2}{2m} - \frac{p^2}{2m}\right)} \quad (3)$$

پاسخ: گزینه «۲» برای حل این سؤال باید معادله شرودینگر را در فضای تکانه نوشته و حل کنیم.

$$H\psi = E\psi \Rightarrow \left(\frac{p^2}{2m} + V(p)\right)\phi(p) = E\phi(p) \Rightarrow \left(\frac{p^2}{2m} - mg \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp} - E\right)\phi(p) = 0$$

$$V(p) = mg\left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p}\right) = -mg \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp}$$

از آنجایی که $V(x) = mgx$ است، در فضای تکانه، پتانسیل عبارت است از:

حال می‌توانیم معادله شرودینگر به دست آمده در فضای تکانه را به راحتی حل کنیم:

$$\left(\frac{p^2}{2m} - E\right)\phi(p) = mg \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp} \phi(p) \Rightarrow \frac{i}{mg\hbar} \left(\frac{p^2}{2m} - E\right) dp = \frac{d\phi(p)}{\phi(p)}$$

با انتگرال‌گیری از طرفین رابطه فوق خواهیم داشت:

$$\frac{i}{mg\hbar} \int \left(\frac{p^2}{2m} - E\right) dp = \int \frac{d\phi(p)}{\phi(p)} \Rightarrow \frac{i}{mg\hbar} \left[\frac{p^3}{6m} - Ep\right] = \ln\left(\frac{\phi(p)}{N}\right) \Rightarrow \phi(p) = N \exp\left\{\frac{i}{mg\hbar} \left[\frac{p^3}{6m} - Ep\right]\right\}$$

$$\Rightarrow \phi(p) = Ne^{i\left[\frac{p^3}{6m^2 g \hbar} - \frac{E_p}{mg\hbar}\right]}$$



معادله شرودینگر در مختصات دکارتی

معادله مستقل از زمان شرودینگر حاکم بر ذره‌ای به جرم m که تحت تأثیر پتانسیل مستقل از زمان $V = V(x, y, z)$ است به صورت زیر است:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z) + V(x, y, z) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z) \quad (I)$$

در این جا پتانسیلی را در نظر می‌گیریم که بر حسب متغیرهای مستقل x, y, z به صورت زیر قابل جداسازی باشد:

$$V(x, y, z) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)$$

$$\psi(x, y, z) = \psi_1(x) \psi_2(y) \psi_3(z)$$

در این حالت جواب معادله شرودینگر را می‌توان جداسازی کرد:

به این ترتیب معادله دیفرانسیل جزئی سه بعدی (I) به سه معادله دیفرانسیل کامل یک بعدی تبدیل می‌شود:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_1(x)}{dx^2} + V_1(x) \psi_1(x) = E_1 \psi_1(x) \quad \text{ویژه مقدار انرژی ذره در راستای } x$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_2(y)}{dy^2} + V_2(y) \psi_2(y) = E_2 \psi_2(y) \quad \text{ویژه مقدار انرژی ذره در راستای } y$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_3(z)}{dz^2} + V_3(z) \psi_3(z) = E_3 \psi_3(z) \quad \text{ویژه مقدار انرژی ذره در راستای } z$$

در روابط بالا، ویژه مقادیر انرژی ذره، یعنی $E = E_1 + E_2 + E_3$ بدست می‌آیند.

مثال ۲: الکترونی در یک چاه بی‌نهایت عمیق دوطبقی به طول a و عرض $3a$ زندانی است. اگر این الکترون از اولین حالت برانگیخته چاه به حالت پایه آن برگردد، طول موج فوتون گسیلی در این انتقال کدام است؟ c سرعت نور در خلأ و h ثابت پلانک است. (فوتونیک - سراسری ۹۴)

$$\begin{matrix} \frac{m_e a^3}{c^2 h} & (۴) & \frac{m_e a^2}{ch} & (۳) & \frac{m_e c a^2}{h} & (۲) & \frac{m_e c a^2}{h} & (۱) \end{matrix}$$

پاسخ: گزینه «۲» می‌دانیم که طول موج فوتون گسیلی با استفاده از رابطه $\Delta E = \frac{hc}{\lambda}$ با تفاوت انرژی دو تراز که الکترون بین آن‌ها منتقل شده است متناسب است. بنابراین لازم است ابتدا انرژی تراز پایه و انرژی اولین تراز برانگیخته برای چاه بی‌نهایت دوطبقی مذکور را محاسبه کنیم.

$$E_{n_x, n_y} = \frac{n_x^2 \hbar^2}{4m_e L_x^2} + \frac{n_y^2 \hbar^2}{4m_e L_y^2}$$

برای چاه پتانسیل دوطبقی بی‌نهایت انرژی ترازهای مختلف برابر است با:

$$E_{1,1} = \frac{\hbar^2}{4m_e L_x^2} + \frac{\hbar^2}{4m_e L_y^2} = \frac{\hbar^2}{4m_e a^2} + \frac{\hbar^2}{4m_e (9a^2)} = \frac{10 \hbar^2}{36 m_e a^2}$$

بنابراین برای تراز پایه انرژی برابر است با:

اولین تراز برانگیخته کمترین انرژی پس از تراز انرژی پایه را دارد. برای اینکه اولین تراز برانگیخته را مشخص کنیم n مربوط به بعدی از چاه که بزرگتر است را یک واحد افزایش می‌دهیم. در این مثال $L_y = 3a$ بعد بزرگتر است، بنابراین $n_y = 2$ را یک واحد افزایش داده و $n_y = 2$ در نظر می‌گیریم. از طرفی $n_x = 1$ باقی می‌ماند بنابراین داریم:

$$E_{1,2} = \frac{\hbar^2}{4m_e a^2} + \frac{4 \hbar^2}{4m_e (9a^2)} = \frac{13 \hbar^2}{36 m_e a^2}$$

بنابراین تغییر انرژی الکترون در گذار از اولین حالت برانگیخته به حالت پایه انرژی برابر است با:

$$\Delta E = E_{1,2} - E_{1,1} = \frac{13 \hbar^2}{36 m_e a^2} - \frac{10 \hbar^2}{36 m_e a^2} = \frac{3 \hbar^2}{36 m_e a^2} = \frac{\hbar^2}{12 m_e a^2}$$

$$\Delta E = \frac{hc}{\lambda} \Rightarrow \lambda = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{hc}{\frac{\hbar^2}{12 m_e a^2}} = 24 \frac{m_e a^2 c}{h}$$

بنابراین طول موج فوتون گسیلی برابر است با:

تبهگنی

توجه داشته باشید که تبهگنی در این مسأله بسیار زیاد به چشم می‌خورد: تعداد جواب‌ها به ازای یک مقدار معین E برابر با تعداد مجموعه‌های اعداد طبیعی (n_1, n_2, n_3) است که به مقدار یکسانی از $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2$ منجر می‌شوند.

یادآوری: هر گاه بیش از یک ویژه حالت به ویژه مقدار انرژی یکسانی منجر شود، در این صورت می‌گوئیم تبهگنی داریم؛ اینچنین ویژه حالت‌ها را ویژه حالت‌های تبهگن (یا واگن) می‌خوانند و تعداد چنین ویژه حالت‌هایی را درجه تبهگنی سیستم می‌نامند.

نکاتی در خصوص تبهگنی:

نکته ۳: تبهگنی، ناشی از تقارن در هامیلتونی مسأله است. در مسأله ذره در جعبه مکعبی از آنجا که در هر سه راستا طول جعبه برابر است، تبهگنی ایجاد می‌شود. (ولی لزوماً درجه‌ی تبهگنی ۳ نیست.)

نکته ۴: در مسائل یک بعدی، برای حالات مقید هیچ‌گاه تبهگنی نداریم ولی برای حالات آزاد ممکن است داشته باشیم.

نکته ۵: ویژه حالت پایه (ویژه حالتی با کمترین ویژه مقدار انرژی) ناتبهگن است. در مورد ذره در جعبه مکعبی ویژه حالت $(1,1,1)$ با ویژه مقدار

$$E_{\text{پایه}} = 3 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

انرژی تنها حالت غیر تبهگن است و ویژه حالت‌های برانگیخته همگی تبهگن هستند.

نکته ۶: تبهگنی معمولاً ناشی از وجود عملگرهای جابه‌جا شونده است، که ناشی از تقارن مسئله است. در این‌جا عملگرهای جابه‌جا شونده،

$$\hat{H}_x = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \hat{V}_1(x) ; \hat{H}_y = \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \hat{V}_1(y) ; \hat{H}_z = \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + \hat{V}_1(z)$$

هستند که به صورت مقابل تعریف می‌شوند:

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z ; [\hat{H}_i, \hat{H}_j] = 0 ; i, j = x, y, z$$

مثال ۳: درون یک چاه سه‌بعدی بی‌نهایت مکعب مستطیلی به طول $3a$ ، عرض a و ارتفاع $2a$ سه الکترون قرار دارند. از برهمکنش میان الکترون‌ها

چشم‌پوشی می‌شود. با در نظر گرفتن اسپین الکترون، انرژی حالت پایه این مجموعه چند برابر $\frac{\hbar^2}{m_e a^2}$ است؟ (فوتونیک - سراسری ۹۴)

$$\frac{191}{288} \quad (۴) \qquad \frac{53}{96} \quad (۳) \qquad \frac{31}{48} \quad (۲) \qquad \frac{49}{24} \quad (۱)$$

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{n_x^2 \hbar^2}{8mL_x^2} + \frac{n_y^2 \hbar^2}{8mL_y^2} + \frac{n_z^2 \hbar^2}{8mL_z^2}$$

پاسخ: گزینه «۳» برای چاه مکعبی انرژی ترازها عبارت است از:

برای چاه مکعبی ذکر شده در این مسئله داریم: $L_x = 3a, L_y = a, L_z = 2a$.

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{n_x^2 \hbar^2}{8m(3a)^2} + \frac{n_y^2 \hbar^2}{8ma^2} + \frac{n_z^2 \hbar^2}{8m(2a)^2} = \frac{n_x^2 \hbar^2}{72ma^2} + \frac{n_y^2 \hbar^2}{8ma^2} + \frac{n_z^2 \hbar^2}{32ma^2}$$

بنابراین خواهیم داشت:

از طرفی چون ۳ الکترون در این چاه قرار دارند، طبق اصل طرد پاولی دو الکترون در نخستین تراز انرژی و الکترون سوم در تراز بعدی انرژی قرار می‌گیرند. بنابراین لازم است که دو تراز اول انرژی که در اینجا $E_{1,1,1}$ و $E_{2,1,1}$ هستند را محاسبه کنیم.

$$E_{1,1,1} = \frac{\hbar^2}{72ma^2} + \frac{\hbar^2}{8ma^2} + \frac{\hbar^2}{32ma^2} = \frac{49\hbar^2}{288ma^2} \qquad E_{2,1,1} = \frac{4\hbar^2}{72ma^2} + \frac{\hbar^2}{8ma^2} + \frac{\hbar^2}{32ma^2} = \frac{61\hbar^2}{288ma^2}$$

$$E = 2E_{1,1,1} + E_{2,1,1} = \frac{98\hbar^2}{288ma^2} + \frac{61\hbar^2}{288ma^2} = \frac{53}{96} \frac{\hbar^2}{ma^2}$$

بنابراین انرژی حالت پایه در این شرایط برابر است با:

نکاتی در خصوص ذره آزاد در فضای سه بعدی:

نکته ۷: ویژه مقادیر انرژی ذره آزاد تشکیل یک طیف پیوسته می‌دهند، $0 < E < \infty$

نکته ۸: درست مانند مورد یک بعدی، ترکیب خطی از حالت‌های ذره آزاد با مؤلفه‌های k گوناگون نمایانگر یک ذره آزاد فیزیکی (بسته موج) است:

$$\psi(\vec{r}) = \int g(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} d^3k$$

(بسته موج سه بعدی نمایانگر ذره آزاد)

نکته ۹: ویژه توابع ذره آزاد، همان ویژه توابع تکانه خطی با $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$ است و تکانه خطی یک ذره آزاد ثابت حرکت است. $([\hat{H}, \hat{p}] = 0)$

محاسبه انرژی حالت پایه N فرمیون یکسان بدون برهم‌کنش در جعبه مکعبی

در اینجا انرژی پایه N الکترون را در جعبه‌ای به حجم L^3 بدست می‌آوریم. با توجه به اسپین الکترون و اصل طرد پائولی، برای هر سه تایی از اعداد درست مثبت (n_1, n_2, n_3) می‌توان دو الکترون در نظر گرفت. در این جا هدف یافتن تعداد ترکیب‌های (n_1, n_2, n_3) به گونه‌ای است که برای آن‌ها انرژی E کمتر از انرژی فرمی E_F باشد. هر سه تایی یک نقطه شبکه در یک فضای سه بعدی تشکیل می‌دهد و اگر تعداد این نقاط بسیار زیاد باشد با تقریب بسیار

$$\text{خوب می‌توان گفت که آن‌ها باید در کره‌ای به شعاع R قرار داشته باشند به طوری که: } R^3 = \frac{2mE_F L^3}{\pi^2 \hbar^2}$$

این تعداد برابر یک هشتم

حجم کره است. (که برای آن تمام n_i ها مثبت‌اند.)



مدرسان شریف

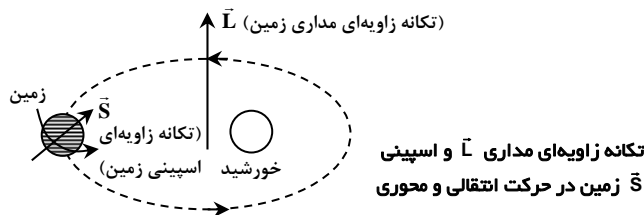
فصل هشتم

«اسپین و جمع اندازه حرکت‌های زاویه‌ای»

درسنامه (۱): تکانه زاویه‌ای ذاتی



مکانیک کلاسیک برای جسم صلب، دو نوع تکانه زاویه‌ای متصور است: تکانه زاویه‌ای مداری ($\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$) که مربوط به حرکت مرکز جرم است، و اسپینی ($\vec{S} = I\vec{\omega}$) که به حرکت حول مرکز جرم، منتسب است. برای مثال، کره زمین، تکانه زاویه‌ای مداری که منسوب به گردش سالانه آن حول خورشید است و تکانه زاویه‌ای اسپینی که از چرخش روزانه آن حول محور شمال - جنوب ناشی می‌شود را داراست.



تکانه زاویه‌ای مداری \vec{L} و اسپینی \vec{S} زمین در حرکت انتقالی و محوری

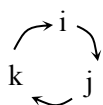
در مکانیک کلاسیک تمایز میان تکانه زاویه‌ای مداری و تکانه زاویه‌ای اسپینی عمدتاً ساده است، زیرا اگر دقت کنیم \vec{S} چیزی نیست جز جمع کل تکانه‌های زاویه‌ای «مداری» تمام سنگ‌ها و کلوخ‌هایی که زمین را می‌سازند که ناشی از چرخش آن‌ها حول محور است. اما مورد مشابهی در مکانیک کوانتومی رخ می‌دهد و در آن‌ها تمایز، اساساً بنیادی است. علاوه بر تکانه زاویه‌ای، (در مورد هیدروژن) مربوط به حرکت الکترون پیرامون هسته (که با هماهنگ‌های کروی توصیف می‌شود)، الکترون حامل شکل دیگری از تکانه زاویه‌ای است که ربطی به حرکت آن در فضا ندارد (و بنابراین با هیچ تابعی از متغیرهای مکان r ، θ و φ توصیف نمی‌شود)، اما کمابیش مشابه اسپین کلاسیک است (که به همین دلیل برای آن از همان واژه استفاده می‌شود). الکترون (تا جایی که می‌دانیم) یک ذره نقطه‌ای بدون ساختار است، و تکانه زاویه‌ای اسپینی آن را نمی‌توان به تکانه زاویه‌ای مداری اجزای تشکیل دهنده‌اش تفکیک کرد. تنها به گفتن این نکته بسنده می‌کنیم که ذرات بنیادی علاوه بر تکانه زاویه‌ای «غیر ذاتی» (\vec{L}) حامل تکانه زاویه‌ای ذاتی (\vec{S}) هستند.

روابط جابجایی بنیادین حاکم بر مولفه‌های اسپین:

روابط جابجایی بنیادی زیر برای اسپین وجود دارند.

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar \hat{S}_z, \quad [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar \hat{S}_x, \quad [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar \hat{S}_y$$

روابط بالا را به عنوان اصول موضوعه اسپین در نظر می‌گیریم، برحسب نماد لوی - چی ویتا و جایگشت چرخه‌ای شاخص‌های i ، j و k می‌توان این روابط



$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{S}_k$$

را به صورت فشرده نمایش داد:

جایگشت چرخه‌ای به این صورت است که اگر حرکت i ، j و k به ترتیب در جهت فلش‌های بالا باشند ε_{ijk} ، ۱ در غیر این صورت، -۱ خواهد بود.

$$\vec{\hat{S}} = \hat{x}\hat{S}_x + \hat{y}\hat{S}_y + \hat{z}\hat{S}_z$$

- «بردار» اسپین را می‌توان برحسب مولفه‌های آن در فضای دکارتی توصیف کرد:

روابط ویژه مقداری حاکم بر اسپین

درست مانند تکانه زاویه‌ای مداری، روابط مقابل بر عملگرهای \hat{S}_Z و \hat{S}^2 حاکمند: $\hat{S}_Z |s, m_s\rangle = m_s \hbar |s, m_s\rangle$; $\hat{S}^2 |s, m_s\rangle = \hbar^2 s(s+1) |s, m_s\rangle$; نکته ۱: از آنجا که حالت‌های اسپینی قابل توصیف برحسب توابع فضایی نیستند، مجبوریم از کت‌های حالت $|s, m_s\rangle$ برای توصیف ویژه حالت‌های اسپینی استفاده کنیم.

عملگرهای نردبانی اسپین

عملگر افزایشده (کاهنده) اسپین را با \hat{S}_+ (\hat{S}_-) نمایش می‌دهیم و برحسب مولفه‌های \hat{S}_X و \hat{S}_Y به صورت $\hat{S}_+ = \hat{S}_X + i\hat{S}_Y$ ، $\hat{S}_- = \hat{S}_X - i\hat{S}_Y$ تعریف می‌کنیم. عملگرهای نردبانی در روابط زیر صادقند:

$$\hat{S}_+ |s, m_s\rangle = \hbar \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s+1)} |s, m_s+1\rangle$$

$$\hat{S}_- |s, m_s\rangle = \hbar \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s-1)} |s, m_s-1\rangle$$

در حقیقت عملگر \hat{S}_+ (\hat{S}_-) ویژه کت $|s, m_s\rangle$ را صرفنظر از یک ضریب ثابت به ویژه کت $|s, m_s+1\rangle$ ($|s, m_s-1\rangle$) تبدیل می‌کند و به عبارتی عدد کوانتومی مغناطیسی اسپینی (m_s) را یک واحد افزایش (کاهش) می‌دهد.

نکته ۲: اعداد کوانتومی s و m_s برخلاف اعداد کوانتومی ℓ و m_ℓ (از این به بعد برای عدد کوانتومی مغناطیسی m ، شاخص ℓ را به کار می‌بریم تا از m_s متمایز شود) می‌توانند، مقادیر نیمه صحیح نیز به خود اختصاص دهند (البته در مورد عدد کوانتومی s ، تنها مقادیر نامنفی مدنظر است).

$$s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$$

$$m_s = -s, -s+1, -s+2, \dots, s-2, s-1, s \quad \rightarrow \quad -s \leq m_s \leq s$$

نکته ۳: درست مانند عدد کوانتومی m_ℓ ، به ازای یک s مفروض، m_s می‌تواند $2s+1$ حالت را بگیرد که هر یک از این مقادیر با اختلاف ۱ از هم متمایزند:

$$-s \leq m_s \leq s$$

نکته ۴: برخلاف عدد کوانتومی ℓ که یک ذره می‌تواند برحسب انرژی خود مقادیر مختلف آن را اختیار کند، عدد کوانتومی s یک ذره، مشخصه آن است و هرگز نمی‌تواند تغییر کند به همین دلیل از واژه تکانه زاویه‌ای ذاتی برای آن استفاده می‌کنیم.

هر ذره بنیادی دارای مقدار خاص و تغییرناپذیر s است که آن را اسپین آن موجود خاص می‌نامیم؛ الکترون‌ها اسپین $\frac{1}{2}$ دارند؛ فوتون‌ها اسپین ۱ دارند؛

اسپین دلتاها $\frac{3}{2}$ است؛ گراویتون‌ها دارای اسپین ۲ هستند و به همین ترتیب الی آخر. در مقابل، عدد کوانتومی تکانه زاویه‌ای مداری ℓ می‌تواند هر مقدار صحیحی را به خود اختصاص دهد و هرگاه سیستم مختل شود، می‌تواند از عددی به عدد دیگر تغییر کند. اما برای هر ذره، s ثابت است و این امر نظریه اسپین را نسبتاً ساده می‌سازد.



درسنامه (۲): رفتارهایی از اسپین



فرمیون‌های اسپین $\frac{1}{2}$

یادآوری می‌کنیم که در طبیعت دو نوع ذره وجود دارد:

- ۱- ذرات موسوم به فرمیون‌ها که دارای اسپین نیمه‌صحیح هستند و از آمار فرمی - دیراک پیروی می‌کنند و اصل طرد پاولی در مورد آن‌ها اعمال می‌شود.
- ۲- ذرات موسوم به بوزون‌ها که دارای اسپین صحیح بوده و از آمار بوز - اینشتین تبعیت می‌کنند. میان فرمیون‌های گوناگون، ساده‌ترین و مهم‌ترین آن‌ها فرمیون‌های اسپین $\frac{1}{2}$ هستند، چرا که این مورد اسپین ذراتی است که مواد معمولی را می‌سازند (الکترون‌ها، پروتون‌ها و نوترون‌ها). با درک اسپین $\frac{1}{2}$ ، فرمول‌بندی هر اسپین بالاتر دیگری ساده است. در اینجا بر روی ذرات اسپین $\frac{1}{2}$ تمرکز می‌کنیم.

ویژه‌کتهای معرف ذرات اسپین $\frac{1}{2}$:

برای $s = \frac{1}{2}$ ، تنها دو حالت ممکن با $m_s = +\frac{1}{2}$ و $m_s = -\frac{1}{2}$ وجود دارد که آن‌ها را به ترتیب اسپین بالا و اسپین پایین می‌نامند و چنین نمایش می‌دهند:

$$S = \frac{1}{2} : \begin{cases} m_s = +\frac{1}{2} & \text{اسپین بالا} \\ m_s = -\frac{1}{2} & \text{اسپین پایین} \end{cases} \begin{cases} \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle & \text{ویژه کت اسپین بالا } (\uparrow) \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle & \text{ویژه کت اسپین پایین } (\downarrow) \end{cases}$$

اگر از این کتهای به عنوان کتهای پایه استفاده کنیم، براساس اصل بسط، هر کت حالت دلخواه یک سیستم دو حالت را می‌توان بر حسب این ویژه کتهای (که آن‌ها را اسپینور می‌نامند) بسط داد:

$$\left. \begin{array}{l} \left| \uparrow \right\rangle \text{ یا } \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \text{ یا } \chi_+ \\ \left| \downarrow \right\rangle \text{ یا } \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \text{ یا } \chi_- \end{array} \right\} \text{ویژه کتهای: } \quad \left| \alpha \right\rangle = c_+ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + c_- \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$$

در نمایش ماتریسی، هر حالت را با یک ماتریس ستونی دو مولفه‌ای نمایش می‌دهیم. به این ترتیب، اصل بسط به صورت زیر بازنویسی می‌شود:

$$\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a\chi_+ + b\chi_- \quad , \quad \chi_K = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ اسپینور نمایانگر اسپین بالا} \quad \chi_K = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ اسپینور نمایانگر اسپین پایین}$$

در اینجا ویژه اسپینور نمایانگر اسپین بالا را با $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ و ویژه اسپینور نمایانگر اسپین پایین را با $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ نمایش می‌دهیم.

مشاهده‌پذیرهای اسپین برای فرمیون‌های اسپین $\frac{1}{2}$:

در مورد ذرات با اسپین $\frac{1}{2}$ ، بعد فضای هیلبرت، ۲ است و از این رو برای نمایش عملگرهای \hat{S}^2 و \hat{S}_z از ماتریس‌های 2×2 استفاده می‌کنیم:

$$\hat{S}^2 \doteq \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{یا} \quad \hat{S}^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \hat{1} \quad ; \quad \hat{S}_z \doteq \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

به این ترتیب معادلات ویژه مقدراری حاکم بر فرمیون‌های اسپین $\frac{1}{2}$ به صورت مقابل است:

$$\hat{S}^2 \chi_{\pm} = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi_{\pm} \quad , \quad \hat{S}_z \chi_{\pm} = \pm \frac{\hbar}{2} \chi_{\pm}$$

نمایش ماتریسی عملگرهای نردبانی (\hat{S}_-, \hat{S}_+) فرمیون‌های با اسپین $\frac{1}{2}$ به صورت زیر است:

$$\hat{S}_+ \doteq \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \hat{S}_- \doteq \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_+ \chi_+ = 0 \quad , \quad \hat{S}_+ \chi_- = \hbar \chi_+$$

$$\hat{S}_- \chi_+ = \hbar \chi_- \quad , \quad \hat{S}_- \chi_- = 0$$

به این ترتیب به سادگی مشاهده می‌شود که:

به این ترتیب نمایش عملگرهای \hat{S}_x ، \hat{S}_y به صورت زیر است:

$$\left. \begin{aligned} \hat{S}_+ &= \hat{S}_x + i\hat{S}_y \\ \hat{S}_- &= \hat{S}_x - i\hat{S}_y \end{aligned} \right\} \Rightarrow \begin{cases} \hat{S}_x = \frac{1}{2}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-) \\ \hat{S}_y = \frac{1}{2i}(\hat{S}_+ - \hat{S}_-) \end{cases} \Rightarrow \hat{S}_x = \frac{1}{2}[\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}] \Rightarrow \boxed{\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}}$$

$$\hat{S}_y = \frac{1}{2i}[\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}] = \frac{1}{2i}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \boxed{\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}}$$

ماتریس‌های پاولی برای ذرات فرمیونی اسپین ۱/۲:

به طور کلی می‌توان بردار اسپین ذرات دارای اسپین ۱/۲ را برحسب بردار اسپین پائولی به صورت $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$ نمایش داد. در اینجا $\vec{\sigma}$ را می‌توان در فضای دکارتی به مولفه‌های σ_x و σ_y و σ_z تجزیه کرد:

در رابطه بالا σ_i ها ($i=x, y, z$) ماتریس‌های مربعی 2×2 موسوم به ماتریس‌های اسپین پائولی هستند. در فضای اسپین که با اسپینورها χ_+ و χ_- توصیف می‌شود، نمایش ماتریسی آن‌ها چنین است:

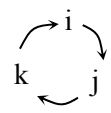
$$\hat{\sigma}_x \doteq \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_y \doteq \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_z \doteq \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

ویژگی‌های ماتریس‌های پاولی فرمیون‌های اسپین ۱/۲:

ماتریس‌های پاولی در روابط زیر صدق می‌کنند:

$$\hat{\sigma}_i^2 \equiv \hat{\sigma}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2 + \hat{\sigma}_z^2 = 3\hat{1}$$

$$\hat{\sigma}_i^2 = \hat{1} \quad ; \quad \{\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j\} = 0 \quad ; \quad [\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = 2i\epsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k$$



در روابط بالا i, j و k در جایگشت‌های چرخه‌ای صدق می‌کنند. روابط جابجایی $[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = \hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j - \hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i$ و پاد جابجایی، $\{\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j\} = \hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j + \hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i$ به صورت‌های بالا برقرارند.

- در اینجا $\hat{1}$ ماتریس واحد در فضای 2×2 است: $\hat{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

نکته ۵: مقدار چشم‌داشتی S^2 را می‌توان از رابطه زیر برحسب مقادیر چشم‌داشتی S_x ، S_y و S_z بدست آورد: $\langle S^2 \rangle = \langle S_x^2 \rangle + \langle S_y^2 \rangle + \langle S_z^2 \rangle$

مثال ۱: چنانچه $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ یکی از ماتریس‌های پائولی باشد حاصل $\exp[\frac{i\beta}{2}\sigma_x]$ کدام است؟ (فوتونیک - سراسری ۹۱)

$$\begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & i \sin \frac{\beta}{2} \\ i \sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \quad (۲)$$

$$\begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & \sin \frac{\beta}{2} \\ \sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \quad (۱)$$

$$\begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & i \sin \frac{\beta}{2} \\ \sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \quad (۴)$$

$$\begin{pmatrix} i \sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \\ \cos \frac{\beta}{2} & i \sin \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \quad (۳)$$

پاسخ: گزینه «۲» با توجه به بسط تیلور تابع نمایی داریم:

$$\exp[\frac{i\beta}{2}\sigma_x] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\frac{i\beta}{2}\sigma_x)^n}{n!} = 1 + \frac{i\beta}{2}\sigma_x + (\frac{i\beta}{2})^2 \frac{\sigma_x^2}{2!} + (\frac{i\beta}{2})^3 \frac{\sigma_x^3}{3!} + (\frac{i\beta}{2})^4 \frac{\sigma_x^4}{4!} + (\frac{i\beta}{2})^5 \frac{\sigma_x^5}{5!} + \dots$$

$$= 1 + \frac{i\beta}{2}\sigma_x - (\frac{\beta}{2})^2 \frac{\sigma_x^2}{2!} - i(\frac{\beta}{2})^3 \frac{\sigma_x^3}{3!} + (\frac{\beta}{2})^4 \frac{\sigma_x^4}{4!} - i(\frac{\beta}{2})^5 \frac{\sigma_x^5}{5!} + \dots$$

حال کافی است با استفاده از ماتریس $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ ماتریس‌های σ_x^2 ، σ_x^3 و ... را به دست آوریم.

$$I \sigma_x^2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = I$$

$$\sigma_x^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \sigma_x$$



مدرسان شریف

فصل نهم

«نظریه اختلال»

تعداد پتانسیل‌هایی که برای آن‌ها معادله شرودینگر حل دقیق دارد (مانند نوسانگر هماهنگ و اتم هیدروژن)، اندک است. بنابراین، باید از روش‌های تقریبی برای تعی این ویژه مقادیر و ویژه توابع استفاده کنیم. در این فصل به بررسی نظریه اختلال می‌پردازیم.

درسنامه (I): نظریه اختلال مستقل از زمان



در این قسمت به بررسی نظریه اختلال در مورد انرژی پتانسیل مستقل از زمان $V = V(\vec{r})$ می‌پردازیم و حالت عمومی‌تر پتانسیل اختلالی وابسته به زمان را به آینده موکول می‌کنیم.

مستقل از زمان ناتبهگن

فرض کنید معادله شرودینگر (مستقل از زمان) را برای پتانسیلی معلوم حل کرده‌ایم: $\hat{H}^{(0)}\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$ و مجموعه کاملی از ویژه حالات راست هنجار، $\psi_n^{(0)}$ و ویژه مقادیر متناظر آن‌ها، $E_n^{(0)}$ را بدست آورده‌ایم. اینک پتانسیل را اندکی مختل می‌کنیم. علاقه‌مندیم ویژه توابع و ویژه مقادیر جدید را بیابیم: $\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$. نظریه اختلال فرآیندی اصولی برای به دست آوردن جواب‌های تقریبی مسأله مختل شده، با استفاده از جواب‌های دقیق و معلوم مورد مختل نشده است.

اولین گام تفکیک هامیلتونی به صورت مجموع دو عبارت است:

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \lambda\hat{H}'$$

در اینجا \hat{H}' اختلال است (بالا نوشت \circ همواره کمیت مختل نشده را نمایش می‌دهد) و λ را عدد کوچکی در نظر می‌گیریم تا بتوانیم از بسط استفاده کنیم، بعداً آن را مساوی ۱ قرار می‌دهیم که در آن صورت \hat{H} هامیلتونی صحیح خواهد بود (در واقع λ پارامتر پیوسته‌ای است در محدوده $0 < \lambda < 1$).

اختلال مرتبه اول

تصحیح مرتبه اول انرژی

در نمایش دیراک رابطه (II) را می‌توان به صورت مقابل بیان کرد:

$$\hat{H}^{(0)}|n^{(1)}\rangle + \hat{H}'|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}|n^{(0)}\rangle$$

طرفین رابطه بالا را از چپ در $|n^{(0)}\rangle$ ضرب می‌کنیم:

$$\langle n^{(0)}|\hat{H}^{(0)}|n^{(1)}\rangle + \langle n^{(0)}|\hat{H}'|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}\langle n^{(0)}|n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}\langle n^{(0)}|n^{(0)}\rangle$$

به این ترتیب جمله اول طرف چپ تساوی برابر با جمله اول طرف راست تساوی است. با توجه به این که $\langle n^{(0)}|n^{(0)}\rangle = 1$ به این ترتیب به رابطه بسیار

$$E_n^{(1)} = \langle n^{(0)}|\hat{H}'|n^{(0)}\rangle$$

مهم روبرو می‌رسیم:

رابطه بالا، نتیجه بنیادی نظریه اختلال مرتبه اول است. بنابراین رابطه تصحیح مرتبه اول انرژی یک حالت برابر با مقدار چشمداشتی پتانسیل اختلالی نسبت به همان حالت مختل نشده است.

تصحیح مرتبه اول تابع موج:

در اینجا تصحیح مرتبه اول تابع موج را در نظریه اختلال مستقل از زمان می‌آوریم.

همانگونه که دیدیم، تصحیح مرتبه اول انرژی از رابطه $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)}|\hat{H}'|n^{(0)}\rangle$ بدست می‌آید.

در اینجا به بیان جزئیات نحوه بدست آمدن تصحیح مرتبه اول ویژه حالت نمی‌پردازیم؛ تنها به ذکر نتیجه بسنده می‌کنیم. تصحیح مرتبه اول ویژه حالت در نظریه اختلال مستقل از زمان ناتبهن، از رابطه مهم زیر بدست می‌آید:

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})} |\psi_m^{(0)}\rangle$$

توجه: مخرج تا زمانی که طیف انرژی قبل از اعمال اختلال، ناتبهن است، صفر نمی‌شود (زیرا هیچ جمله‌ای با $m = n$ نداریم). ولی اگر دو حالت مختل نشده مختلف، انرژی یکسانی داشته باشند، با مشکلی جدی مواجه می‌شویم؛ در این مورد به نظریه اختلال تبهن نیازمندیم که در آینده به آن خواهیم پرداخت.

به این ترتیب نظریه مرتبه اول اختلال، ویژه حالت‌ها و ویژه مقادیر انرژی را به صورت مقابل تقریب می‌زند:

$$E_n \approx E_n^{(0)} + \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle$$

$$|\psi_n\rangle \approx |\psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})} |\psi_m^{(0)}\rangle$$

مثال ۱: یک سامانه کوانتومی دو لایه‌ای دارای حالت پایه انرژی $|\circ\rangle$ با مقدار ویژه ϵ_0 و حالت برانگیخته $|\Delta\rangle$ با مقدار ویژه $\epsilon_0 + \Delta$ می‌باشد. برهمکنش $V = \lambda \Delta U$ در یک لحظه بر این سامانه اعمال می‌گردد که در آن λ عدد مثبت و نزدیک به صفر است و نیز داریم:

$$\begin{cases} \langle \circ | U | \circ \rangle = \langle \Delta | U | \Delta \rangle = 0 \\ \langle \circ | U | \Delta \rangle = \langle \Delta | U | \circ \rangle = 1 \end{cases}$$

اکنون در اولین تقریب غیر صفر λ در مقایسه با گاف انرژی اولیه Δ ، دو تراز انرژی جدید چه وضعیتی نسبت به یکدیگر پیدا می‌کنند؟ (فیزیک - سراسری ۹۱)

- ۱) گاف بین دو تراز انرژی جدید همان گاف قبلی است و تغییری نمی‌کند.
- ۲) به اندازه $4\lambda^2 \Delta$ به یکدیگر نزدیکتر می‌شوند.
- ۳) به اندازه $2\lambda^2 \Delta$ از یکدیگر دورتر می‌شوند.
- ۴) به اندازه $4\lambda^2 \Delta$ از یکدیگر دورتر می‌شوند.

پاسخ: گزینه «۳» مسأله حاضر، یک مثال از اختلال مستقل از زمان است. بنابراین به بررسی اختلال‌های مرتبه اول و دوم انرژی می‌پردازیم.

در تصحیح مرتبه اول اختلال ویژه مقادیر انرژی داریم:

بنابراین برای حالت پایه و اولین حالت برانگیخته معرفی شده در صورت سؤال داریم:

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle$$

$$E_0^{(1)} = \langle \circ | \lambda \Delta U | \circ \rangle = \lambda \Delta \langle \circ | U | \circ \rangle = 0$$

$$E_\Delta^{(1)} = \langle \Delta | \lambda \Delta U | \Delta \rangle = \lambda \Delta \langle \Delta | U | \Delta \rangle = 0$$

$$E_n^{(2)} = \sum_{n \neq m} \frac{|\langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

در اختلال مرتبه اول تغییری در گاف انرژی مشاهده نمی‌شود. بنابراین به اختلال مرتبه دوم خواهیم پرداخت:

دوباره به بررسی پایه انرژی و اولین حالت برانگیخته به صورت جداگانه می‌پردازیم:

$$E_0^{(2)} = \frac{|\langle \Delta | \hat{H}' | \circ \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_\Delta^{(0)}} = \frac{|\Delta \lambda \Delta U|^2}{\epsilon_0 - (\epsilon_0 + \Delta)} = \frac{\lambda^2 \Delta^2 |\langle \Delta | U | \circ \rangle|^2}{-\Delta} = \frac{\lambda^2 \Delta^2}{-\Delta} = -\lambda^2 \Delta$$

$$E_\Delta^{(2)} = \frac{|\langle \circ | \hat{H}' | \Delta \rangle|^2}{E_\Delta^{(0)} - E_0^{(0)}} = \frac{|\langle \circ | \lambda \Delta U | \Delta \rangle|^2}{\epsilon_0 + \Delta - \epsilon_0} = \frac{\lambda^2 \Delta^2 |\langle \circ | U | \Delta \rangle|^2}{\Delta} = \frac{\lambda^2 \Delta^2}{\Delta} = \lambda^2 \Delta$$

$$E_\Delta^{(0)} - E_0^{(0)} = \lambda^2 \Delta - (-\lambda^2 \Delta) = 2\lambda^2 \Delta$$

بنابراین فاصله ایجاد شده در تراز انرژی در این حالت برابر است با:

یعنی ترازهای انرژی در این حالت به اندازه $2\lambda^2 \Delta$ از هم دور می‌شوند.

مثال ۲: یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی کوانتومی به جرم m و بسامد زاویه‌ای ω تحت تأثیر نیروی ثابت اختلالی \vec{F}_0 در همان راستای نوسان قرار

گرفته است. اولین تصحیح اختلالی غیر صفر در تراز n م انرژی نوسانگر کدام است؟ $(\mathbf{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\mathbf{a} + \mathbf{a}^\dagger))$ (فوتونیک - سراسری ۹۷)

$$nF_0 \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \quad (۴) \qquad F_0 \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \quad (۳) \qquad -\frac{nF_0^2}{2m\omega^2} \quad (۲) \qquad -\frac{F_0^2}{2m\omega^2} \quad (۱)$$



پاسخ: گزینه «۱» چون نیروی \bar{F}_0 در راستای x به نوسانگر وارد شده است، بنابراین پتانسیل اختلالی $-F_0 x$ به نوسانگر وارد خواهد شد. پس

$$H = H_0 + H_1 = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 - F_0 x$$

همایلتونی کلی سیستم عبارت است از:

بنابراین پتانسیل اختلالی $H_1 = -F_0 x$ به سیستم وارد شده است. بنابر نظریه اختلال مرتبه اول، جابه‌جایی انرژی در مرتبه اول اختلال برابر با مقدار چشمداشتی پتانسیل اختلالی نسبت به حالت‌های مختل نشده است. ویژه حالت‌های نوسانگر هماهنگ را با $|n\rangle$ در نمایش دیراک نشان می‌دهیم. بنابراین آنچه باید محاسبه شود عبارت است از $\langle n | -F_0 x | n \rangle$. به این ترتیب داریم:

$$E_n^{(1)} = \langle n | -F_0 x | n \rangle = -F_0 \langle n | x | n \rangle = 0$$

علت صفر شدن عبارت $\langle n | x | n \rangle$ در این است که پاریته حالت $|n\rangle$ نوسانگر هماهنگ $(-1)^n$ است و پاریته x ، (-1) است. به این ترتیب عبارت $\langle n | x | n \rangle$ دارای پاریته $(-1)^n (-1)^n$ یا به عبارتی پاریته فرد است و چون پتانسیل نوسانگر هماهنگ، متقارن است، پس حاصل $\langle n | x | n \rangle$ صفر

است. بدون ملاحظات پاریته و برحسب عملگرهای نردبانی a ، a^\dagger و تعامد ویژه حالت‌های $|n\rangle$ ، همین نتیجه به دست می‌آید:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$$

$$\langle n | x | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle n | a + a^\dagger | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \{ \langle n | a | n \rangle + \langle n | a^\dagger | n \rangle \}$$

بنابراین داریم:

$$\hat{a} | n \rangle = \sqrt{n} | n-1 \rangle ; \quad a^\dagger | n \rangle = \sqrt{n+1} | n+1 \rangle$$

چون تأثیر عملگرهای نردبانی بر حالت‌های $|n\rangle$ بنابر روابط روبه رو است:

$$\langle n | x | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \{ \sqrt{n} \langle n | a | n \rangle + \sqrt{n+1} \langle n | a^\dagger | n \rangle \} = 0$$

به این ترتیب داریم:

بنابراین از نظریه مرتبه اول نمی‌توان به طیف انرژی‌ها دست یافت، باید مرتبه‌های بالاتر اختلال را در نظر بگیریم. به محاسبه تصحیح مرتبه دوم انرژی می‌پردازیم:

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle n^{(0)} | H_1 | m^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

در اینجا $H_1 = -F_0 x$ است. $E_m^{(0)}$ ، $E_n^{(0)}$ ویژه مقادیر انرژی نوسانگر مختل نشده‌اند که به ترتیب برابر با $(n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ ، $(m + \frac{1}{2})\hbar\omega$ هستند.

$|n^{(0)}\rangle$ ، $|m^{(0)}\rangle$ هم ویژه‌کتهای نوسانگر هماهنگ مختل نشده‌اند. بنابراین داریم:

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{\langle n^{(0)} | -F_0 x | m^{(0)} \rangle \langle m^{(0)} | -F_0 x | n^{(0)} \rangle}{(n + \frac{1}{2})\hbar\omega - (m + \frac{1}{2})\hbar\omega} \Rightarrow E_n^{(2)} = \frac{F_0^2}{\hbar\omega} \sum_{m \neq n} \frac{\langle n^{(0)} | x | m^{(0)} \rangle \langle m^{(0)} | x | n^{(0)} \rangle}{n - m}$$

اما چون عملگر \hat{x} برحسب عملگرهای نردبانی به صورت $\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$ بیان می‌شود، به این ترتیب داریم:

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \frac{F_0^2}{\hbar\omega} \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right) \sum_{m \neq n} \frac{\langle n^{(0)} | \hat{a} + \hat{a}^\dagger | m^{(0)} \rangle \langle m^{(0)} | \hat{a} + \hat{a}^\dagger | n^{(0)} \rangle}{n - m} \\ &= \frac{F_0^2}{2m\omega^2} \sum_{m \neq n} \frac{(\langle n^{(0)} | \hat{a} | m^{(0)} \rangle + \langle n^{(0)} | \hat{a}^\dagger | m^{(0)} \rangle)(\langle m^{(0)} | \hat{a} | n^{(0)} \rangle + \langle m^{(0)} | \hat{a}^\dagger | n^{(0)} \rangle)}{n - m} \\ &= \frac{F_0^2}{2m\omega^2} \sum_{m \neq n} \frac{[\sqrt{m} \langle n^{(0)} | m-1^{(0)} \rangle + \sqrt{m+1} \langle n^{(0)} | m+1^{(0)} \rangle][\sqrt{n} \langle m^{(0)} | n-1^{(0)} \rangle + \sqrt{n+1} \langle m^{(0)} | n+1^{(0)} \rangle]}{n - m} \\ &= \frac{F_0^2}{2m\omega^2} \sum_{m \neq n} \frac{(\sqrt{m} \delta_{n,m-1} + \sqrt{m+1} \delta_{n,m+1})(\sqrt{n} \delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{m,n+1})}{n - m} \end{aligned}$$

در محاسبات بالا از راست‌هنجاری ویژه حالت‌های نوسانگر استفاده کرده‌ایم:

با توجه به خاصیت تابع دلتای کرونگر $(\delta_{nm} = \begin{cases} 1 & ; n = m \\ 0 & ; n \neq m \end{cases})$ حاصل عبارت بالا را به دست می‌آوریم:

$$E_n^{(2)} = \frac{F_0^2}{2m\omega^2} \left\{ \frac{(\sqrt{n+1})(\sqrt{n+1})}{n - (n+1)} + \frac{\sqrt{n}\sqrt{n}}{n - (n-1)} \right\} = \frac{F_0^2}{2m\omega^2} \{ -(n+1) + n \} \Rightarrow E_n^{(2)} = -\frac{F_0^2}{2m\omega^2}$$

روش تستی: با استفاده از مربع کامل کردن معادله هامیلتونی می توان طیف انرژی سیستم را مشخص کرد.

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - F_0 x = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \left(x^2 - \frac{2F_0}{m\omega^2} x\right) = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \left(x^2 - \frac{F_0}{m\omega^2} x + \left[\frac{F_0}{m\omega^2}\right]^2 - \left[\frac{F_0}{m\omega^2}\right]^2\right)$$

$$= \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \left[\left(x - \frac{F_0}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{F_0^2}{m^2\omega^4}\right] = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \left(x - \frac{F_0}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{F_0^2}{2m\omega^2}$$

بنابراین طیف انرژی سیستم عبارت است از: $E = -\frac{F_0^2}{2m\omega^2} + \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$ طیف مجاز

یعنی تصحیح انرژی عبارت است از: $E = -\frac{F_0^2}{2m\omega^2}$

مثال ۳: نوسانگر هماهنگ یک بعدی با هامیلتونی $H = \frac{P_x^2}{2m_0} + \frac{1}{2}m_0\omega_0^2 x^2$ با بار الکتریکی q_0 در معرض میدان الکتریکی ثابت و

یکنواخت $\vec{E}_0 = E_0 \hat{x}$ در یک محیط چسبنده با انرژی چسبندگی استهلاکی $-\frac{v_0}{\lambda} p_x$ را در نظر بگیرید. ترازهای انرژی این نوسانگر کدام اند؟ (v_0 یک

ثابت فیزیکی می باشد) (فوتونیک - سراسری ۹۶)

$$\hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{2}m_0 \left(\left(\frac{v_0}{\lambda}\right)^2 + \left(\frac{q_0 E_0}{m_0 \omega_0}\right)^2\right) \quad (۲)$$

$$\hbar\omega_0 (n+1) - \frac{1}{2}m_0 \left(\left(\frac{v_0}{\lambda}\right)^2 + \left(\frac{q_0 E_0}{m_0 \omega_0}\right)^2\right) \quad (۳)$$

پاسخ: گزینه «۲» روش محاسبه اختلال مرتبه دوم معمولاً بسیار زمان گیر و طولانی است؛ بنابراین در حل این گونه مسائل از یک روش کوتاه تر استفاده می کنیم که با مربع کامل کردن هامیلتونی سیستم انجام می شود:

$$+ \frac{1}{2}m_0\omega_0^2 x^2 - q_0 E_0 x = \frac{P_x^2}{2m_0} - \frac{v_0}{\lambda} P_x - \frac{v_0}{\lambda} P_x \quad H = \frac{P_x^2}{2m_0} + \frac{1}{2}m_0\omega_0^2 x^2 - q_0 E_0 x$$

$$= \frac{1}{2m_0} \{P_x^2 - m_0 v_0 P_x\} + \frac{1}{2}m_0\omega_0^2 \left\{x^2 - \frac{2}{m_0\omega_0^2} q_0 E_0 x\right\} = \frac{1}{2m_0} \left\{P_x^2 - m_0 v_0 P_x + \frac{1}{4}m_0^2 v_0^2 - \frac{1}{4}m_0^2 v_0^2\right\} +$$

$$\frac{m_0\omega_0^2}{2} \left\{x^2 - \frac{2}{m_0\omega_0^2} q_0 E_0 x + \left(\frac{q_0 E_0}{m_0\omega_0^2}\right)^2 - \left(\frac{q_0 E_0}{m_0\omega_0^2}\right)^2\right\}$$

$$= \frac{1}{2m_0} \left\{P_x^2 - m_0 v_0 P_x + \frac{1}{4}m_0^2 v_0^2\right\} - \frac{1}{8}m_0 v_0^2 + \frac{1}{2}m_0\omega_0^2 \left\{x^2 - \frac{2q_0 E_0}{m_0\omega_0^2} x + \left(\frac{q_0 E_0}{m_0\omega_0^2}\right)^2\right\} - \frac{q_0^2 E_0^2}{2m_0\omega_0^2}$$

$$= \frac{1}{2m_0} (P_x - \frac{1}{2}m_0 v_0)^2 + \frac{1}{2}m_0\omega_0^2 \left(x - \frac{q_0 E_0}{m_0\omega_0^2}\right)^2 - \frac{1}{8}m_0 v_0^2 - \frac{q_0^2 E_0^2}{2m_0\omega_0^2}$$

به این ترتیب می توانیم انرژی سیستم را به دست آوریم:

$$E_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{8}m_0 v_0^2 - \frac{q_0^2 E_0^2}{2m_0\omega_0^2} = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{2}m_0 \left\{\left(\frac{v_0}{\lambda}\right)^2 + \left(\frac{q_0 E_0}{m_0 \omega_0}\right)^2\right\}$$

مثال ۴: هامیلتونی سیستم مختل شده ای به شکل زیر است. که در آن $0 < \epsilon \ll 1$. پایین ترین مقدار انرژی این سیستم تا مرتبه اول ϵ چیست؟

(فیزیک - سراسری ۹۱)

$$H = \begin{pmatrix} 2-2\epsilon & \epsilon & 2\epsilon \\ \epsilon & 1+\epsilon & \epsilon \\ 2\epsilon & \epsilon & 3+\epsilon \end{pmatrix}$$

(۱) $1-\epsilon$ (۲) $1+\epsilon$ (۳) $1+2\epsilon$ (۴) $1-2\epsilon$

پاسخ: گزینه «۲» هامیلتونی معرفی شده در صورت سؤال از دو بخش تشکیل شده است. یکی هامیلتونی اصلی پیش از اعمال اختلال و دیگری

هامیلتونی مختل شده.

$$H = H_0 + H_1 \Rightarrow \begin{pmatrix} 2-2\epsilon & \epsilon & 2\epsilon \\ \epsilon & 1+\epsilon & \epsilon \\ 2\epsilon & \epsilon & 3+\epsilon \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -2\epsilon & \epsilon & 2\epsilon \\ \epsilon & \epsilon & \epsilon \\ 2\epsilon & \epsilon & \epsilon \end{pmatrix}$$



مدرسان شریف

فصل دهم

«مباحث تکمیلی»

در این فصل نسبتاً کوتاه، به بررسی مسائل باقی مانده درس مکانیک کوانتومی می‌پردازیم که گرچه سؤالات کمی از آن‌ها مطرح می‌شود، اما نمی‌توان از اهمیتشان چشم پوشید.

درسنامه (I): روش‌های وردشی

تعریف

نظریه اختلالی فصل پیشین تا زمانی که جواب‌های دقیق مسأله‌ای که هامیلتونی آن به قدر کافی شبیه هامیلتونی اصلی است، معلوم باشد، جواب می‌دهد. روش وردشی در تخمین انرژی حالت پایه E_0 ، هنگامی که جواب‌های دقیق در دسترس نیستند، به کار می‌آید.

در این روش انرژی حالت پایه E_0 را با در نظر گرفتن تابع موج آزمایشی $\tilde{\psi}_0$ که تقریبی از تابع موج واقعی حالت پایه ψ_0 است، حدس زده می‌شود در اینجا \bar{H} را به صورت روبه‌رو تعریف می‌کنیم:

$$\bar{H} \equiv \frac{\langle \tilde{\psi}_0 | H | \tilde{\psi}_0 \rangle}{\langle \tilde{\psi}_0 | \tilde{\psi}_0 \rangle}$$

کلمه مثال ۱: در روش وردشی اگر مقدار چشمداشتی تابع هامیلتونی را با هر تابع آزمایشی بهنجار با \bar{H} و انرژی حالت پایه دستگاه را با E_0 نشان دهیم، داریم:

$$\bar{H} < E_0 \quad (۴)$$

$$\bar{H} = E_0 \quad (۳)$$

$$\bar{H} \leq E_0 \quad (۲)$$

$$\bar{H} \geq E_0 \quad (۱)$$

پاسخ: گزینه «۱» با این که ویژه کت‌های انرژی هامیلتونی H را نمی‌دانیم، می‌توان چنین تصور کرد که تابع موج آزمایشی قابل بسط بر حسب ویژه حالت‌های دقیق انرژی H باشد:

$$|\tilde{\psi}_0\rangle = \sum_k |k\rangle \langle k | \tilde{\psi}_0 \rangle \quad ; \quad \hat{H} |k\rangle = E_k |k\rangle$$

$$\hat{H} |\tilde{\psi}_0\rangle = \sum_k \hat{H} |k\rangle \langle k | \tilde{\psi}_0 \rangle = \sum_k E_k |k\rangle \langle k | \tilde{\psi}_0 \rangle$$

به این ترتیب داریم:

$$\langle \tilde{\psi}_0 | \hat{H} | \tilde{\psi}_0 \rangle = \sum_k E_k \langle \tilde{\psi}_0 | k \rangle \langle k | \tilde{\psi}_0 \rangle = \sum_k E_k |\langle k | \tilde{\psi}_0 \rangle|^2$$

و بنابراین:

$$\bar{H} = \frac{\langle \tilde{\psi}_0 | H | \tilde{\psi}_0 \rangle}{\langle \tilde{\psi}_0 | \tilde{\psi}_0 \rangle} = \frac{\sum_k E_k |\langle k | \tilde{\psi}_0 \rangle|^2}{\sum_k |\langle k | \tilde{\psi}_0 \rangle|^2}$$

$$\langle \tilde{\psi}_0 | \tilde{\psi}_0 \rangle = \sum_k \langle \tilde{\psi}_0 | k \rangle \langle k | \tilde{\psi}_0 \rangle = \sum_k |\langle k | \tilde{\psi}_0 \rangle|^2$$

از طرفی $\bar{H} = E_0 + \frac{\sum_k (E_k - E_0) |\langle k | \tilde{\psi}_0 \rangle|^2}{\sum_k |\langle k | \tilde{\psi}_0 \rangle|^2}$ و بنابراین داریم:

$$\bar{H} = \frac{\sum_k (E_k - E_0) |\langle k | \tilde{\psi}_0 \rangle|^2}{\sum_k |\langle k | \tilde{\psi}_0 \rangle|^2} + E_0$$

اکنون به جای E_k عبارت $E_k - E_0 + E_0$ را قرار می‌دهیم:

از آنجا که E_0 حالت پایه (یعنی حالتی با کمترین انرژی) است، پس همواره $E_k \geq E_0$ و از این رو جمله اول رابطه بالا همواره مقداری نامنفی است. به عبارت دیگر $\bar{H} - E_0 \geq 0$ و از این رو $\bar{H} \geq E_0$.

نکته ۱: روش وردشی همواره حد بالایی را برای انرژی حالت پایه با در نظر گرفتن توابع موج آزمایشی گوناگون، بدست می‌دهد.

نوسانگر هماهنگ و مسائل دیگر

در اینجا به عنوان نمونه‌ای از کاربرد روش وردشی در تخمین تراز پایه انرژی یک سیستم، فرض کنید می‌خواهیم انرژی حالت پایه نوسانگر هماهنگ یک

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

بعدی را بیابیم:

$\psi(x) = A e^{-bx}$ می‌توان تابع موج «آزمایشی» را یک تابع گاوسی در نظر گرفت: در اینجا b مقداری ثابت و A ثابت بهنجارش است.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2bx} dx = 1$$

پیش از هر کاری باید A را بدست آوریم:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2bx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{2b}}$$

اما حاصل انتگرال را می‌توان از رابطه $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$ بدست آورد:

$$|A|^2 \sqrt{\frac{\pi}{2b}} = 1 \Rightarrow A = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}$$

بنابراین $|A|^2 = \sqrt{\frac{\pi}{2b}}$ و از این رو $A = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}$

به این ترتیب تابع آزمایشی به صورت $\psi(x) = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-bx}$ در می‌آید.

حال به محاسبه مقدار چشمداشتی هامیلتونی می‌پردازیم: ابتدا مقدار چشمداشتی انرژی جنبشی T را محاسبه کنیم:

$$\langle \hat{T} \rangle = \langle \frac{\hat{p}^2}{2m} \rangle = \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi(x) \hat{p}^2 \psi(x) = \frac{1}{2m} \sqrt{\frac{2b}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-bx} (-i\hbar \frac{d}{dx})^2 e^{-bx} dx \Rightarrow \langle \hat{T} \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{\frac{2b}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-bx} \frac{d^2}{dx^2} e^{-bx} dx$$

(در اینجا از نمایش عملگر \hat{p} در فضای مکان (x) ، استفاده کردیم: $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$)

$$\begin{aligned} \Rightarrow \langle \hat{T} \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{\frac{2b}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-bx} \frac{d}{dx} \{-2bx e^{-bx}\} dx \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{\frac{2b}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-bx} (-2b) \{e^{-bx} + x(-2bx) e^{-bx}\} dx = -\frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{\frac{2b}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} (-2b)(1-2bx^2) e^{-2bx} dx \\ &= \frac{\hbar^2 b}{m} \sqrt{\frac{2b}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} (1-2bx^2) e^{-2bx} dx = \frac{\hbar^2 b}{m} \sqrt{\frac{2b}{\pi}} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2bx} dx - 2b \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-2bx} dx \right\} \\ &= \frac{\hbar^2 b}{m} \sqrt{\frac{2b}{\pi}} \left\{ \sqrt{\frac{\pi}{2b}} + 2b \frac{d}{d(2b)} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2bx} dx \right\} = \frac{\hbar^2 b}{m} \sqrt{\frac{2b}{\pi}} \left\{ \sqrt{\frac{\pi}{2b}} + 2b \frac{d}{d(2b)} \sqrt{\frac{\pi}{2b}} \right\} = \frac{\hbar^2 b}{2m} \quad (I) \end{aligned}$$

به همین صورت مقدار چشمداشتی انرژی پتانسیل بدست می‌آید:

$$\begin{aligned} \langle \hat{V} \rangle &= \frac{1}{2} m \omega^2 \langle x^2 \rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-bx} x^2 \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-bx} dx \\ &= \frac{m \omega^2}{2} \sqrt{\frac{2b}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-2bx} dx = \frac{m \omega^2}{2} \sqrt{\frac{2b}{\pi}} \left(-\frac{d}{d(2b)}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2bx} dx \\ &= \frac{m \omega^2}{2} \sqrt{\frac{2b}{\pi}} \left(-\frac{d}{d(2b)}\right) \sqrt{\frac{\pi}{2b}} = \frac{m \omega^2}{2} \sqrt{\frac{2b}{\pi}} \sqrt{\pi} (-1) \left(-\frac{1}{2}\right) (2b)^{-\frac{3}{2}} = \frac{m \omega^2}{4} \sqrt{2b} \left(\frac{1}{2b\sqrt{2b}}\right) \Rightarrow \langle \hat{V} \rangle = \frac{m \omega^2}{4b} \quad (II) \end{aligned}$$

$$\langle \hat{H} \rangle = \langle \hat{T} \rangle + \langle \hat{V} \rangle = \frac{\hbar^2 b}{2m} + \frac{m \omega^2}{4b} \quad (III)$$

با استفاده از روابط (I) و (II) مقدار چشمداشتی هامیلتونی بدست می‌آید:

بنا بر رابطه $\langle H \rangle \geq E_0$ ، برای دستیابی به نزدیک‌ترین کران، $\langle H \rangle$ را کمینه می‌کنیم:

$$\frac{d \langle \hat{H} \rangle}{db} = 0 \Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{m \omega^2}{4} (-1) b^{-2} = 0 \Rightarrow \frac{\hbar^2 b^2 - m^2 \omega^2}{4mb^3} = 0 \Rightarrow \boxed{b = \frac{m \omega}{\hbar}}$$

$$\langle \hat{H} \rangle_{\min} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{m \omega}{\hbar}\right) + \frac{m \omega^2}{4} \left(\frac{\hbar}{m \omega}\right) \Rightarrow \langle \hat{H} \rangle_{\min} = \frac{\hbar \omega}{4} + \frac{\hbar \omega}{4} = \frac{1}{2} \hbar \omega$$

با جایگذاری b در رابطه (III)، کمینه $\langle \hat{H} \rangle$ بدست می‌آید:

مقدار بدست آمده همان انرژی حالت پایه نوسانگر هماهنگ یک بعدی است!

* توجه کنید که در روش وردشی انتخاب تابع موج آزمایشی از اهمیت خاصی برخوردار است، در واقع انتخاب تابع گاوسی در مسأله بالا بود که ما را به ویژه مقدار انرژی زمینه درست، رهنمون ساخت.



مثال ۲: برای یک نوسانگر هماهنگ مقدار چشم‌داشتی هامیلتونی با استفاده از روش وردشی به صورت $\langle H \rangle = \frac{\hbar^2}{2mb^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 b^2$ محاسبه شده است، که در آن b پارامتر وردشی می‌باشد. مقدار کمینه انرژی کدام است؟ (فوتونیک - سراسری ۹۶)

$$\hbar\omega \quad (۱) \quad \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar\omega \quad (۲) \quad \frac{1}{2}\hbar\omega \quad (۳) \quad \frac{3}{2}\hbar\omega \quad (۴)$$

پاسخ: گزینه «۲» در روش وردشی بنا بر رابطه $\langle H \rangle \geq E_0$ ، برای دست‌یابی به نزدیک‌ترین کران، $\langle H \rangle$ را کمینه می‌کنیم:

$$\frac{d\langle H \rangle}{db} = 0 \Rightarrow \frac{d}{db} \left\{ \frac{\hbar^2}{2mb^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 b^2 \right\} = 0 \Rightarrow \frac{-\hbar^2}{2mb^3} + m\omega^2 b = 0 \Rightarrow \frac{\hbar^2}{2mb^3} = m\omega^2 b$$

$$\Rightarrow \hbar^2 = 2m^2\omega^2 b^4 \Rightarrow b^4 = \frac{\hbar^2}{2m^2\omega^2} \Rightarrow b^2 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}m\omega}$$

حال که پارامتر وردشی b محاسبه شده است، مقدار کمینه انرژی به راحتی قابل محاسبه است:

$$\langle H \rangle \Big|_{b^2 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}m\omega}} = \frac{\hbar^2}{2m \times \frac{\hbar}{\sqrt{2}m\omega}} + \frac{1}{2}m\omega^2 \times \frac{\hbar}{\sqrt{2}m\omega} = \frac{\sqrt{2}\omega\hbar}{4} + \frac{\hbar\omega}{2\sqrt{2}} = \frac{\sqrt{2}\hbar\omega}{4} + \frac{\sqrt{2}\hbar\omega}{4} = \frac{\sqrt{2}\hbar\omega}{2}$$

مقدار به دست آمده همان انرژی حالت پایه نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی است.

مثال ۳: فرض کنید E_0 و E_1 ویژه مقادیر انرژی حالت زمینه و اولین حالت برانگیخته هامیلتونی مستقل از زمان H است. اگر \bar{E}_0 و \bar{E}_1 با استفاده از روش وردش و با استفاده از توابع موج آزمایشی $\bar{\Psi}_0$ و $\bar{\Psi}_1$ برای حالت زمینه و اولین حالت برانگیخته به دست آمده باشد، کدام گزینه امکان صحیح بودن ندارد؟ (فیزیک - سراسری ۹۷)

$$\bar{E}_0 \geq E_0 \text{ و } \bar{E}_1 < E_1 \quad (۱) \quad \bar{E}_0 \geq E_0 \text{ و } \bar{E}_1 > E_1 \quad (۲) \quad \bar{E}_1 \geq E_1 \text{ و } \bar{E}_0 < E_0 \quad (۳) \quad \bar{E}_1 \geq E_1 \text{ و } \bar{E}_0 > E_0 \quad (۴)$$

پاسخ: گزینه «۳» روش وردشی یک روش تقریبی برای به دست آوردن پاسخ‌های سیستم کوانتومی است که برخلاف روش اختلال، متکی بر پاسخ‌های یک هامیلتونی از قبل حل شده ساده نیست. این روش برای تعیین مقادیر حد بالای ویژه مقادیر انرژی سیستم با هامیلتونی شناخته شده در حالی که ویژه مقادیر و ویژه حالات آن معلوم نیست، به کار می‌رود. این روش به ویژه برای تعیین حالت پایه یک سیستم مناسب است. یک سیستم فیزیکی دلخواه در نظر بگیرید که هامیلتونی آن مستقل از زمان باشد و فرض کنید که طیف \hat{H} کاملاً گسسته و ناتبهنگن باشد:

$$\hat{H}|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle \quad ; \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

اگرچه هامیلتونی H معلوم است اما الزاماً ویژه مقادیر E_n و ویژه حالت‌های مربوطه معلوم نیستند. یک کت دلخواه $|\psi\rangle$ از فضای حالت این سیستم را در نظر بگیرید. مقدار متوسط هامیلتونی بر روی این کت عبارت است از:

$$\bar{E}_0 = \langle \hat{H} \rangle_{|\psi\rangle} = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0 \Rightarrow \bar{E}_0 \geq E_0$$

که در آن E_0 انرژی حالت پایه سیستم است. بنابراین امکان ندارد که $\bar{E}_0 < E_0$ شود. پس گزینه (۳) نمی‌تواند صحیح باشد.

مثال ۴: تابع موج آزمون ذره‌ای در یک بعد با هامیلتونی $H = \frac{p^2}{2m} + V_0$ به صورت $\psi(x) = e^{-|x|}$ است که V_0 پتانسیل ثابتی می‌باشد. شرط آن که انرژی حالت پایه این ذره که از روش وردش به دست می‌آید منفی باشد، کدام است؟ (فیزیک - سراسری ۹۲)

$$V_0 < \frac{2\hbar^2}{m} \quad (۴) \quad V_0 < \frac{\hbar^2}{2m} \quad (۳) \quad V_0 < \frac{3\hbar^2}{2m} \quad (۲) \quad V_0 < \frac{\hbar^2}{m} \quad (۱)$$

پاسخ: گزینه «۳» بنا بر اصل وردشی حد بالایی برای انرژی حالت پایه عبارت است از:

$$\bar{H} = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0$$

در رابطه فوق \hat{H} عملگر هامیلتونی (برابر مجموع عملگرهای انرژی پتانسیل \hat{V} و انرژی جنبشی $\frac{\hat{p}^2}{2m}$) ذره است. E_0 انرژی حالت پایه که طبق صورت

مسئله منفی است و $\psi(x)$ تابع موج آزمون بهنجار است.

به این ترتیب طبق صورت مسئله چون $E_0 < 0$ است داریم:

$$\bar{H} < 0$$

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + V_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0$$

برای مسئله حاضر داریم:

$$\psi(x) = e^{-|x|}$$

$$\langle \psi(x) | \psi(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-|x|} e^{-|x|} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-|x|} dx = \int_{-\infty}^0 e^{\gamma x} dx + \int_0^{+\infty} e^{-\gamma x} dx = \left\{ \frac{1}{\gamma} e^{\gamma x} \Big|_{-\infty}^0 - \frac{1}{\gamma} e^{-\gamma x} \Big|_0^{+\infty} \right\}$$

$$= \left\{ \frac{1}{\gamma} e^0 - \frac{1}{\gamma} e^{-\infty} - \frac{1}{\gamma} e^{-\infty} + \frac{1}{\gamma} e^0 \right\} = \left\{ \frac{1}{\gamma} + \frac{1}{\gamma} \right\} = 1$$

$$\langle \psi(x) | H | \psi(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-|x|} \left(\frac{p^{\gamma}}{2m} + V_0 \right) e^{-|x|} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-|x|} \left(-\frac{\hbar^{\gamma}}{2m} \frac{d^{\gamma}}{dx^{\gamma}} + V_0 \right) e^{-|x|} dx = \int_{-\infty}^0 e^x \left(-\frac{\hbar^{\gamma}}{2m} \frac{d^{\gamma}}{dx^{\gamma}} + V_0 \right) e^x dx +$$

$$\int_0^{+\infty} e^{-x} \left(-\frac{\hbar^{\gamma}}{2m} \frac{d^{\gamma}}{dx^{\gamma}} + V_0 \right) e^{-x} dx = \int_{-\infty}^0 e^x \left(-\frac{\hbar^{\gamma}}{2m} + V_0 \right) e^x dx +$$

$$\int_0^{+\infty} e^{-x} \left(-\frac{\hbar^{\gamma}}{2m} + V_0 \right) e^{-x} dx = \left(-\frac{\hbar^{\gamma}}{2m} + V_0 \right) \int_{-\infty}^0 e^{\gamma x} dx + \left(-\frac{\hbar^{\gamma}}{2m} + V_0 \right) \int_0^{+\infty} e^{-\gamma x} dx$$

$$= \left(-\frac{\hbar^{\gamma}}{2m} + V_0 \right) \left\{ \frac{1}{\gamma} e^{\gamma x} \Big|_{-\infty}^0 \right\} + \left(-\frac{\hbar^{\gamma}}{2m} + V_0 \right) \left\{ -\frac{1}{\gamma} e^{-\gamma x} \Big|_0^{+\infty} \right\} = \frac{1}{\gamma} \left(-\frac{\hbar^{\gamma}}{2m} + V_0 \right) + \frac{1}{\gamma} \left(-\frac{\hbar^{\gamma}}{2m} + V_0 \right) = -\frac{\hbar^{\gamma}}{\gamma m} + V_0$$

$$H < 0 \Rightarrow -\frac{\hbar^{\gamma}}{\gamma m} + V_0 < 0 \Rightarrow V_0 < \frac{\hbar^{\gamma}}{\gamma m} \quad \bar{H} = \frac{\langle \psi(x) | H | \psi(x) \rangle}{\langle \psi(x) | \psi(x) \rangle} = -\frac{\hbar^{\gamma}}{\gamma m} + V_0 \quad \text{با این ترتیب } \bar{H} \text{ برابر است با:}$$

مثال ۵: تابع هامیلتونی ذره‌ای به جرم m در یک بُعد به شکل $H = \frac{p^{\gamma}}{2m} + \alpha x^{\gamma}$ است که α مقدار ثابتی است. با انتخاب تابع

آزمون $\psi(x) = A e^{-bx^{\gamma}}$ بهترین تخمین برای انرژی حالت پایه ذره کدام است؟ (فوتونیک - سراسری ۹۴)

$$\frac{(\gamma \alpha)^{1/\gamma} \left(\frac{\hbar^{\gamma}}{2m} \right)^{\gamma/\gamma}}{\gamma} \quad (۴) \quad \frac{\gamma (\gamma \alpha)^{1/\gamma} \left(\frac{\hbar^{\gamma}}{m} \right)^{\gamma/\gamma}}{\gamma} \quad (۳) \quad \left(\frac{\gamma \alpha}{\gamma} \right)^{1/\gamma} \left(\frac{\hbar^{\gamma}}{2m} \right)^{\gamma/\gamma} \quad (۲) \quad \frac{\gamma (\alpha)^{1/\gamma} \left(\frac{\hbar^{\gamma}}{m} \right)^{\gamma/\gamma}}{\gamma} \quad (۱)$$

پاسخ: گزینه «۳» برای حل این مسئله از روش وردشی استفاده می‌کنیم. به این منظور ابتدا ضریب بهنجارش A را محاسبه می‌کنیم.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx = 1 \Rightarrow |A|^{\gamma} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\gamma bx^{\gamma}} dx = 1$$

$$|A|^{\gamma} \times \sqrt{\frac{\pi}{\gamma b}} = 1 \Rightarrow |A|^{\gamma} = \sqrt{\frac{\gamma b}{\pi}} \Rightarrow A = \left(\frac{\gamma b}{\pi} \right)^{1/2\gamma} \quad \text{با استفاده از } \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta x^{\gamma}} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\beta}}$$

بنابراین تابع آزمون به صورت $\psi(x) = \left(\frac{\gamma b}{\pi} \right)^{1/2\gamma} e^{-bx^{\gamma}}$ بهنجار می‌شود. حال به محاسبه مقدار چشم‌داشتی هامیلتونی می‌پردازیم.

$$H = T + V \Rightarrow \langle H \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle$$

ابتدا مقدار چشم‌داشتی انرژی جنبشی T را محاسبه می‌کنیم.

$$\begin{aligned} \langle T \rangle &= \left\langle \frac{p^{\gamma}}{2m} \right\rangle = \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) p^{\gamma} \psi(x) = \frac{1}{2m} \sqrt{\frac{\gamma b}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-bx^{\gamma}} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right)^{\gamma} e^{-bx^{\gamma}} dx \\ &= -\frac{\hbar^{\gamma}}{2m} \sqrt{\frac{\gamma b}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-bx^{\gamma}} \frac{d^{\gamma}}{dx^{\gamma}} e^{-bx^{\gamma}} dx = -\frac{\hbar^{\gamma}}{2m} \sqrt{\frac{\gamma b}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-bx^{\gamma}} \frac{d}{dx} (-\gamma bx^{\gamma-1} e^{-bx^{\gamma}}) dx \\ &= -\frac{\hbar^{\gamma}}{2m} \sqrt{\frac{\gamma b}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-bx^{\gamma}} (-\gamma b) [e^{-bx^{\gamma}} + x(-\gamma bx^{\gamma-1}) e^{-bx^{\gamma}}] dx = -\frac{\hbar^{\gamma}}{2m} \sqrt{\frac{\gamma b}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} (-\gamma b) (1 - \gamma bx^{\gamma-1}) e^{-bx^{\gamma}} dx \\ &= \frac{\hbar^{\gamma} b}{m} \sqrt{\frac{\gamma b}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} (1 - \gamma bx^{\gamma-1}) e^{-bx^{\gamma}} dx = \frac{\hbar^{\gamma} b}{m} \sqrt{\frac{\gamma b}{\pi}} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-bx^{\gamma}} dx - \gamma b \int_{-\infty}^{+\infty} x^{\gamma-1} e^{-bx^{\gamma}} dx \right] \\ &= \frac{\hbar^{\gamma} b}{m} \sqrt{\frac{\gamma b}{\pi}} \left[\sqrt{\frac{\pi}{\gamma b}} + \gamma b \frac{d}{d(\gamma b)} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\gamma bx^{\gamma}} dx \right] = \frac{\hbar^{\gamma} b}{m} \sqrt{\frac{\gamma b}{\pi}} \left[\sqrt{\frac{\pi}{\gamma b}} + \gamma b \frac{d}{d(\gamma b)} \sqrt{\frac{\pi}{\gamma b}} \right] = \frac{\hbar^{\gamma} b}{2m} \end{aligned}$$

به همین ترتیب برای مقدار چشم‌داشتی انرژی پتانسیل $\langle V \rangle$ داریم:

$$\begin{aligned} \langle V \rangle &= \langle \alpha x^{\gamma} \rangle = \alpha \langle x^{\gamma} \rangle = \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) x^{\gamma} \psi(x) dx = \alpha \sqrt{\frac{\gamma b}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^{\gamma} e^{-\gamma bx^{\gamma}} dx = \alpha \sqrt{\frac{\gamma b}{\pi}} \frac{d^{\gamma}}{d(\gamma b)^{\gamma}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\gamma bx^{\gamma}} dx = \alpha \sqrt{\frac{\gamma b}{\pi}} \frac{d^{\gamma}}{d(\gamma b)^{\gamma}} \sqrt{\frac{\pi}{\gamma b}} \\ &= \alpha \sqrt{\gamma b} \frac{d^{\gamma}}{d(\gamma b)^{\gamma}} (\gamma b)^{-\frac{1}{\gamma}} = \alpha \sqrt{\gamma b} \frac{d}{d(\gamma b)} \left(-\frac{1}{\gamma} (\gamma b)^{-\frac{\gamma}{\gamma}} \right) = -\frac{\alpha \sqrt{\gamma b}}{\gamma} \frac{d}{d(\gamma b)} (\gamma b)^{-\frac{\gamma}{\gamma}} = -\frac{\alpha \sqrt{\gamma b}}{\gamma} \times -\frac{\gamma}{\gamma} (\gamma b)^{-\frac{\gamma}{\gamma}} = \frac{\gamma \alpha}{\gamma} (\gamma b)^{-\frac{\gamma}{\gamma}} = \frac{\gamma \alpha}{\gamma b^{\gamma}} \end{aligned}$$

$$\langle H \rangle = \frac{\hbar^{\gamma} b}{2m} + \frac{\gamma \alpha}{\gamma b^{\gamma}}$$

بنابراین مقدار چشم‌داشتی عملگر هامیلتونی برابر است با: