



# مکانیک کوانتومی

## مفاهیم و کاربردها

نورالدین زتیلی

ویرایش دوم

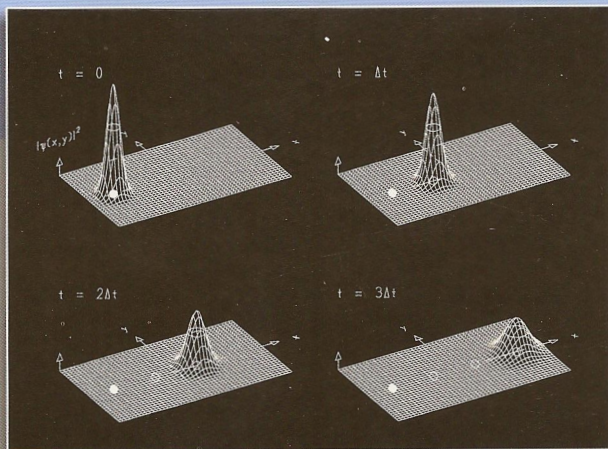
۲۰۱۰

جلد اول

مترجمان: نیما یوسفی، مسهر باقری

در تشابه بین بالا رفتن از یک کوه و فراگیری درس مکانیک کوانتومی ، آویزگاه ها در کوه نوردی نقش مفاهیم و واقعیت هایی را در مکانیک کوانتومی ایفا می کنند که در روند یادگیری باید به آنها دست آویخت تا عمیقاً در ذهن جای گرفته و در آن ثبت شوند...

کتاب های نیمه شفافی همچون گاسیروویچ ، شیف ... که عمدتاً در دهه ۶۰ تالیف شده اند فاقد این آویزگاه ها و به عبارت بهتر فاقد پداگوژی هستند. اما کتاب حاضر که یک کتاب قرن ۲۱ی است از لحاظ متدولوژی بر اساس اصول پداگوژی تالیف شده است. بدین معنا که سلسله مراتب آموزشی در آن رعایت شده است به گونه ای که هر مسئله در امتزاج با مسئله دیگری است که در پی آن می آید و اگر تمام مسائل حل شود دانشجو به راحتی به قله دست می یابد و در صورتی که با آزمایشگاه کوانتومی نیز خوب بگردد با یک پرش تجربی می تواند چاه های پتانسیل را در آزمایشگاه ایجاد کند ، با عدسی های مغناطیسی کار کند ، ذره را مهار کند و به زیباترین پایان که همانا مهندسی ساختن تراز است دست یابد.



مکانیک کوانتومی

مفاهیم و کاربردها

به همراه CD ی آزمایشگاه کامپیوتری مکانیک کوانتومی

مترجمان

نیما یوسفی

مسهر باقری

ویراستاران

علی مقدم

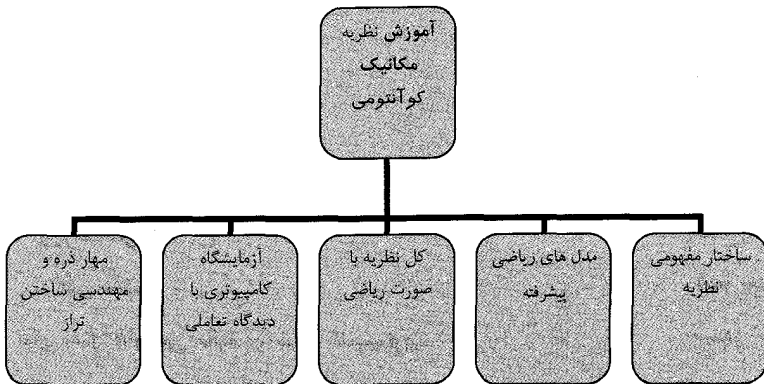
علی اصل هاشمی (تألیف و اجرای کامپیوتری)

گرچه درس مکانیک کوانتومی ، جدا از پیچیده بودن نظریه به واسطه ی عملکرد میکروسکوپی آن در کل یک درس چالش بر انگیز است ، با این حال می توان با رعایت اصول روانشناسی آموزشی و سلسله مراتب آن (پداگوژی ) و همچنین با ایجاد نقاطی روشن در تبیین مفاهیم و کاربردهای این درس تا مقدار زیادی از میزان چالشی بودن این درس کم کرد.

کتابهایی همچون گاسیروویچ ، شیف ، مرزباخر و ... که عمدتاً در دهه ۶۰ میلادی تالیف شده اند فاقد این پداگوژی هستند که گواه آن نیز عدم رضایت دانشجو یان است، به گونه ای که در پایان تدریس مثلاً کتابی چون فیزیک کوانتومی گاسیروویچ احساس عمیقی در یادگیری به آنها دست نداده است ، و یا اینکه در زمان کوتاهی مطالب را فراموش کرده اند.

اما ویژگی عمده ی این کتاب سوای آنچه در خود این کتاب خواهید دید رفع نسبتاً مناسب این معضل است و بر خلاف کتابهای دیگر به گونه ای نگاشته شده است که ضمن حس نکردن چالشی بزرگ در مسیر ، همان مفاهیم کتب دیگر را دنبال می کند چرا که بر اساس اصول پداگوژی نگاشته شده است. این کتاب که خود یک خود آموز پیشرفته ی مکانیک کوانتومی است می تواند بدون وجود متخصص این درس دانشجو را به قله برساند

از ویژگی های دیگر این کتاب وجود سی دی همراه ان است که به طور تعاملی دانشجو را درگیر مطالب کتاب می کند و در این میان دانشجو به وضوح مفهوم تصویری فرمولهای پیچیده ی مکانیک کوانتومی را درک می کند و در نهایت انکه اگر مسائل را به طور کامل حل کند در امتحانات ارشد و دکترای تخصصی در این درس رتبه برتر خواهد بود که در این باره تردیدی وجود ندارد. در پایان مسیر ایده آلی را رسم می کنیم که همواره خود مایل به انجام آن بوده ایم چرا که معتقدیم این مسیر همان مسیری است که برای انجام کارهای تجربی بزرگ در قرن ۲۱ باید آنرا بییمائیم.



## فهرست مطالب

۷		پیشگفتار ویرایش اول
۹		پیشگفتار ویرایش دوم
۱۱		فصل اول منشاء پیدایش فیزیک کوانتومی
۱۱	یادآوری تاریخی	۱-۱
۱۵	جنبه‌ی ذره‌ای تابش	۲-۱
۱۵	۱-۲-۱ تابش جسم سیاه	
۲۳	۲-۲-۱ اثر فتوالکتریک	
۲۷	۳-۲-۱ اثر کامپتون	
۳۰	۴-۲-۱ تولید زوج	
۳۳	جنبه‌ی موجی ذره‌ها	۳-۱
۳۳	۱-۳-۱ فرضیه‌ی دوبروی: موج‌های مادی	
۳۳	۲-۳-۱ تأیید تجربی فرضیه‌ی دوبروی	
۳۶	۳-۳-۱ موج‌های مادی اجسام ماکروسکوپی	
۳۷	ذره‌ها در مقابل موج‌ها	۴-۱
۳۷	۱-۴-۱ دیدگاه کلاسیک ذره‌ها و موج‌ها	
۳۹	۲-۴-۱ دیدگاه کوانتومی ذره‌ها و موج‌ها	
۴۲	۳-۴-۱ دوگانگی موج-ذره: اصل مکمل بودن	
۴۳	۴-۴-۱ اصل برهم‌نهی خطی	
۴۴	طبیعت غیرقطعی دنیای میکروفیزیکی	۵-۱
۴۵	۱-۵-۱ اصل عدم قطعیت هایزنبرگ	
۴۷	۲-۵-۱ تفسیر احتمالاتی	
۴۸	گذارهای اتمی و طیف‌نمایی	۶-۱
۴۸	۱-۶-۱ مدل سیاره‌ای رادرفورد برای اتم	
۴۹	۲-۶-۱ مدل بوهر برای اتم هیدروژن	
۵۶	قاعده‌های کوانتش	۷-۱
۵۸	بسته‌ای موج	۸-۱
۵۹	۱-۸-۱ بسته‌های موج جایگزیده	

۶۳	..... بسته‌های موج و رابطه‌های عدم قطعیت	۲-۸-۱
۶۵	..... حرکت بسته‌های موج	۳-۸-۱
۷۹	..... ملاحظات پایانی	۹-۱
۸۱	..... مسأله‌های حل شده	۱۰-۱
۱۰۲	..... تمرین‌ها	۱۱-۱

## فصل دوم ابزارهای مکانیک کوانتومی

۱۱۱	..... مقدمه	۱۲-۱
۱۱۲	..... فضای هیلبرت و تابع‌های موج	۱۳-۱
۱۱۲	..... فضای برداری خطی	۱-۱۳-۱
۱۱۳	..... فضای هیلبرت	۲-۱۳-۱
۱۱۴	..... بُعد و پایه‌ی یک فضای برداری	۳-۱۳-۱
۱۱۸	..... تابع‌های انتگرال‌پذیر مجذوری: تابع‌های موج	۴-۱۳-۱
۱۱۹	..... نمادگذاری دیراک	۱۴-۱
۱۲۵	..... عملگرها	۱۵-۱
۱۲۵	..... تعریف‌های عمومی	۱-۱۵-۱
۱۲۷	..... الحاقی‌هرمیتی	۲-۱۵-۱
۱۳۰	..... عملگرهای تصویر	۳-۱۵-۱
۱۳۰	..... جبر جابه‌جاگر	۴-۱۵-۱
۱۳۳	..... رابطه‌ی عدم قطعیت بین دو عملگر	۵-۱۵-۱
۱۳۵	..... تابع‌های عملگرها	۶-۱۵-۱
۱۳۶	..... عملگرهای وارون و یکانی	۷-۱۵-۱
۱۳۸	..... ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای یک عملگر	۸-۱۵-۱
۱۴۱	..... تبدیل‌های یکانی بی‌نهایت کوچک و متناهی	۹-۱۵-۱
۱۴۵	..... نمایش در پایه‌های گسسته	۱۶-۱
۱۴۵	..... نمایش ماتریسی کت‌ها، براها و عملگرها	۱-۱۶-۱
۱۵۹	..... تغییر پایه‌ها و تبدیلات یکانی	۲-۱۶-۱
۱۶۳	..... نمایش ماتریسی مسأله‌ی ویژه‌مقدار	۳-۱۶-۱
۱۶۸	..... نمایش در پایه‌های پیوسته	۱۷-۱
۱۶۸	..... بحث عمومی	۱-۱۷-۱

۱۷۰	نمایش مکان	۲-۱۷-۱
۱۷۱	نمایش تکانه	۳-۱۷-۱
۱۷۲	ارتباط بین نمایش‌های مکان و تکانه	۴-۱۷-۱
۱۷۷	عملگر پارите	۵-۱۷-۱
۱۷۹	مکانیک ماتریسی و مکانیک موجی	۱۸-۱
۱۸۰	مکانیک ماتریسی	۱-۱۸-۱
۱۸۱	مکانیک موجی	۲-۱۸-۱
۱۸۲	ملاحظات پایانی	۱۹-۱
۱۸۳	مسئله‌های حل شده	۲۰-۱
۲۱۲	تمرین‌ها	۲۱-۱

## فصل سوم اصول موضوعه‌ی مکانیک کوانتومی

۲۲۵	مقدمه	۱-۳
۲۲۸	اصول موضوعه‌ی پایه‌ی مکانیک کوانتومی	۲-۳
۲۲۸	حالت یک سیستم	۳-۳
۲۲۸	چگالی احتمال	۱-۳-۳
۲۲۹	اصل برهنه‌ی	۲-۳-۳
۲۳۲	مشاهده‌پذیرها و عملگرها	۴-۳
۲۳۴	اندازه‌گیری در مکانیک کوانتومی	۵-۳
۲۳۴	چگونه اندازه‌گیری سیستم‌ها را مختل می‌کند	۱-۵-۳
۲۳۶	مقدارهای چشمداشتی	۲-۵-۳
۲۳۸	مجموعه‌های کامل عملگرهای جابه‌جاشونده	۳-۵-۳
۲۴۱	اندازه‌گیری و رابطه‌های عدم قطعیت	۴-۵-۳
۲۴۲	تحول زمانی حالت سیستم	۶-۳
۲۴۲	عملگر تحول زمانی	۱-۶-۳
۲۴۳	حالت‌های مانا: پتانسیل‌های مستقل از زمان	۲-۶-۳
۲۴۵	معادله‌ی شرودینگر و بسته‌های موج	۳-۶-۳
۲۴۶	پایستگی احتمال	۴-۶-۳
۲۴۸	تحول زمانی مقدارهای چشمداشتی	۵-۶-۳
۲۴۹	تقارن‌ها و قانون‌های پایستگی	۷-۳

۲۴۹	تبدیل‌های یکانی بی‌نهایت کوچک	۱-۷-۳
۲۵۱	تبدیل‌های یکانی متناهی	۲-۷-۳
۲۵۲	تقارن‌های و قانون‌های پایستگی	۳-۷-۳
۲۵۴	ارتباط بین مکانیک کوانتومی و مکانیک کلاسیک	۸-۳
۲۵۴	براکت‌های پواسون و جابه‌جاگرها	۱-۸-۳
۲۵۶	قضیه‌ی اهرنفتست	۲-۸-۳
۲۵۸	مکانیک کوانتومی و مکانیک کلاسیک	۳-۸-۳
۲۶۰	مسئله‌های حل‌شده	۹-۳
۲۸۳	تمرین‌ها	۱۰-۳

### فصل چهارم مسئله‌های یک‌بعدی

۲۹۱	مقدمه	۱-۴
۲۹۲	ویژگی‌های حرکت یک‌بعدی	۲-۴
۲۹۲	طیف گسسته (حالت‌های مقید)	۱-۲-۴
۲۹۳	طیف پیوسته (حالت‌های نامقید)	۲-۲-۴
۲۹۴	طیف آمیخته	۳-۲-۴
۲۹۴	پتانسیل‌های متقارن و پاریته	۴-۲-۴
۲۹۵	ذره‌ی آزاد: حالت‌های پیوسته	۳-۴
۲۹۷	پله‌ی پتانسیل	۴-۴
۳۰۲	سد و چاه پتانسیل	۵-۴
۳۰۳	حالت $V. < E$	۱-۵-۴
۳۰۶	حالت $E : V.$ : تونل‌زنی	۲-۵-۴
۳۱۰	اثر تونل‌زنی	۳-۵-۴
۳۱۱	پتانسیل و چاه مربعی نامتناهی	۶-۴
۳۱۱	چاه مربعی نامتقارن	۱-۶-۴
۳۱۶	چاه پتانسیل متقارن	۲-۶-۴
۳۱۶	پتانسیل چاه مربعی متناهی	۷-۴
۳۱۷	جواب‌های پراکندگی ( $V. < E$ )	۱-۷-۴
۳۱۷	جواب‌های حالت مقید ( $0 < E < V.$ )	۲-۷-۴
۳۲۱	نوسانگر هماهنگ	۸-۴



۳۲۵	ویژه مقدارهای انرژی	۱-۸-۴
۳۲۷	ویژه حالت‌های انرژی	۲-۸-۴
۳۲۸	ویژه حالت‌های انرژی در فضای مکان	۳-۸-۴
۳۳۲	نمایش ماتریسی عملگرهای گوناگون	۴-۸-۴
۳۳۴	مقدارهای چشمداشتی عملگرهای مختلف	۵-۸-۴
۳۳۵	حل عددی معادله‌ی شرودینگر	۹-۴
۳۳۵	روش عددی	۱-۹-۴
۳۳۷	الگوریتم	۲-۹-۴
۳۴۰	مسئله‌های حل شده	۱۰-۴
۳۷۰	تمرین‌ها	۱۱-۴

### ۳۷۹ فصل پنجم تکانه‌ی زاویه‌ای

۳۷۹	مقدمه	۱-۵
۳۷۹	تکانه‌ی زاویه‌ای مداری	۲-۵
۳۸۲	صورت‌بندی عمومی تکانه‌ی زاویه‌ای	۳-۵
۳۸۸	نمایش ماتریسی تکانه‌ی زاویه‌ای	۴-۵
۳۹۲	نمایش هندسی تکانه‌ی زاویه‌ای	۵-۵
۳۹۴	تکانه‌ی زاویه‌ای اسپینی	۶-۵
۳۹۴	شواهد تجربی اسپین	۱-۶-۵
۳۹۸	نظریه‌ی عمومی اسپین	۲-۶-۵
۳۹۸	اسپین ۱/۲ و ماتریس‌های پائولی	۳-۶-۵
۴۰۳	ویژه تابع‌های تکانه‌ی زاویه‌ای مداری	۷-۵
۴۰۴	ویژه تابع‌ها و ویژه مقدارهای $L_z$	۱-۷-۵
۴۰۵	ویژه تابع‌های $L^2$	۲-۷-۵
۴۱۰	ویژگی‌های هماهنگ کروی	۳-۷-۵
۴۱۴	مسئله‌های حل شده	۸-۵
۴۳۳	تمرین‌ها	۹-۵

### ۴۲۵ فصل ششم مسئله‌های سه بعدی

۴۴۳	مقدمه	۱-۶
-----	-------	-----

۴۴۳	.....	مسئله‌های سه‌بعدی در مختصات دکارتی	۲-۶
۴۴۴	.....	بحث عمومی: جداسازی متغیرها	۱-۲-۶
۴۴۵	.....	ذره‌ی آزاد	۲-۲-۶
۴۴۷	.....	جعبه‌ی پتانسیل	۳-۲-۶
۴۴۹	.....	نوسانگر هماهنگ	۴-۲-۶
۴۵۲	.....	مسئله‌های سه‌بعدی در مختصات کروی	۳-۶
۴۵۲	.....	پتانسیل مرکزی: بحث عمومی	۱-۳-۶
۴۵۶	.....	ذره‌ی آزاد در مختصات کروی	۲-۳-۶
۴۵۹	.....	پتانسیل چاه مربعی کروی	۳-۳-۶
۴۶۱	.....	نوسانگر هماهنگ همسانگرد	۴-۳-۶
۴۶۷	.....	اتم هیدروژن	۵-۳-۶
۴۸۳	.....	اثر میدان‌های مغناطیسی روی پتانسیل مرکزی	۶-۳-۶
۴۸۷	.....	ملاحظات پایانی	۴-۶
۴۸۹	.....	مسئله‌های حل‌شده	۵-۶
۵۱۱	.....	تمرین‌ها	۶-۶
۵۱۸	.....	پیوست	

دقت کنید که جلد دوم از صفحه ۵۵۹ شروع می‌شود و نمایه در انتهای جلد دوم آمده است.

## پیشگفتار ویرایش اول

ارائه‌ی مجموعه‌ای غنی از مثال‌ها و مسأله‌های کاملاً حل شده. این قالب یکپارچه بدون هزینه نیست. دقت خاصی صورت گرفت تا همزمان با فشردن مطالب، ارتباط منطقی و کامل بودن آنها حفظ شود.

این کتاب نتیجه‌ی یادداشت‌های درسی است که بیش از یک دهه آنها را به دانشجویان کارشناسی و کارشناسی ارشد تدریس کرده‌ام. مسأله‌های منظور شده از مجموعه‌ی بزرگی از تمرین‌های خانگی و امتحانی گردآوری شده‌اند که به عهده‌ی دانشجویان واگذار کرده‌ام. این مسأله‌ها برای دانشجویان کارشناسی سال بالایی و دانشجویان سال اول کارشناسی ارشد است. می‌توان مطالب این کتاب را در سه نیمسال پوشش داد: فصل‌های ۱ تا ۵ (به استثنای بخش ۳-۷) در یک درس نیمساله‌ی کارشناسی؛ فصل ۶، بخش ۷-۳، فصل ۸، بخش ۹-۲. به استثنای ساختار ریز و اثر نابهنجار زمین) و بخش‌های ۱۱-۱ تا ۱۱-۳ در نیمسال دوم و بقیه‌ی کتاب در یک درس نیمساله‌ی کارشناسی ارشد.

کتاب با پایه‌های تجربی مکانیک کوانتومی شروع می‌شود که در آن، آن دسته از پدیده‌های اتمی و زیراتمی را بررسی می‌کنیم که ناکامی فیزیک کلاسیک در مقیاس میکروسکوپی را تأیید می‌کنند و نیاز به رهیافتی جدید را ایجاد می‌کنند. سپس ابزارهای ریاضی مکانیک کوانتومی مانند فضاهای خطی، جبر عملگرها، مکانیک ماتریسی و مسأله‌های ویژه‌مقداری آورده شده‌اند. به تمام این موضوعات به وسیله‌ی نمادگذاری برابکت دیراک پرداخته شده است. پس از آن در مورد مبانی صوری مکانیک کوانتومی بحث می‌کنیم و سپس به جواب‌های دقیق معادله‌ی شرودینگر، زمانی که بر مسأله‌های یک‌بعدی و سه‌بعدی اعمال می‌شود، می‌پردازیم. سپس روش‌های تقریبی مانا و وابسته به زمان را بررسی می‌کنیم

کتاب‌های پیرامون مکانیک کوانتومی را می‌توان به دو بخش عمده دسته‌بندی کرد: کتاب‌های درسی که در آنها تمرکز روی صورت‌بندی است و کتاب‌های صرفاً حل مسأله که در آنها تأکید روی کاربردها است. کتاب‌های درسی خوب بسیار زیادی پیرامون مکانیک کوانتومی وجود دارند ولی کتاب‌های حل مسأله‌ی بسیار کمی وجود دارد. هدف من صرفاً اضافه کردن یک کتاب به هر یک از این دو بخش نیست. هدف من ترکیب کردن دو قالب در یک کتاب است که هم شامل محتویات یک کتاب درسی باشد و هم یک کتاب حل مسأله را در بر داشته باشد. یک چنین کتاب‌هایی عملاً وجود ندارند. این ایده را به خصوص مفید می‌دانم زیرا به دانشجویان دسترسی ساده و آسانی، نه تنها به عناصر ضروری نظریه می‌دهد بلکه جنبه‌های عملی را نیز در یک مجموعه‌ی یکپارچه در اختیار وی می‌گذارد.

در طول سال‌های بسیار تدریس درس مکانیک کوانتومی، توجه کرده‌ام که دانشجویان عموماً ایده‌های اساسی مکانیک کوانتومی را راحت‌تر از کارکردن با جنبه‌های عملی آن فرا می‌گیرند. بدون آگاهی از چگونگی محاسبه و استخراج عددی از صورت‌بندی کلی، شخص توانایی کامل و مفید بودن نظریه را از دست می‌دهد. مهارت در روش‌های حل مسأله بخش اساسی یادگیری فیزیک است. برای مخاطب ساختن این موضوع، در این کتاب مسأله‌های حل شده‌ای طراحی شده‌اند که به دانشجویان چگونگی انجام محاسبات را می‌آموزند. بدون یادگیری چگونگی به دست آوردن و محاسبه‌ی کمیت‌ها نمی‌توان به مهارت در مکانیک کوانتومی رسید.

در این کتاب، می‌خواهم به هدف دوگانه‌ای برسم: ارائه‌ی بسیاری از موضوعات مکانیک کوانتومی غیرنسبیتی به صورت خود-شمول و فشرده و دیگری

و سرانجام نظریه‌ی پراکندگی را ارائه می‌کنیم.

با درکی صحیح از اصول مربوطه به دست می‌آورد. توانایی حل مسأله، بهترین دلیل مهارت در موضوع مربوطه است. همانند مورد شنا کردن، هرچه بیشتر مسأله حل کنید، مهارت‌های خود را در حل مسأله بهتر و بهتر می‌کنید.

برای بهره‌مندی هرچه بیشتر از مثال‌ها و مسأله‌های حل شده‌ی داخل کتاب، زود به سراغ حل‌های ارائه شده نروید. اگر نمی‌توانید مسأله را پس از نخستین تلاشتان حل کنید، دوباره سعی کنید! اگر تنها پس از چند بار تلاش به سراغ حل‌های ارائه شده بروید آنگاه این حل‌ها برای مدت طولانی در ذهن شما نقش خواهند بست. اما اگر از راه حل خودتان استفاده می‌کنید آنگاه باید حل خودتان را با حل ارائه شده در کتاب مقایسه کنید. ممکن است رهیافت کوتاه‌تر و بهتری بیابید.

یک نکته‌ی مهم: در حالی که کتاب مملو از مجموعه‌ای غنی از مثال‌ها و مسأله‌های کاملاً حل شده است، خواننده باید مطلقاً از وسوسه‌ی حفظ کردن روش‌ها و حل‌های آنها اجتناب کند بلکه به جای آن باید بر روی درک مفاهیم و پایه‌های صورت‌بندی مربوطه متمرکز شود. هدف من از این کتاب، آموختن تعدادی حقه یا تکنیک به دانشجو برای گرفتن نمره‌ی خوب در درس مکانیک کوانتومی بدون درک درست یا کسب مهارت در این موضوع نیست یعنی منظور من از نوشتن کتاب این نیست که به دانشجو پیاموزم چگونه در امتحان‌های مکانیک کوانتومی، بدون درکی عمیق و پایدار قبول شود. به هر حال، دانشجویی که بر روی درک پایه‌های مربوطه به این موضوع و تلاش برای حل مسأله‌های متعدد و درک آنها متمرکز می‌شود، بدون تردید، به دو هدف می‌رسد: به دست آوردن نمره‌های خوب و یادگیری درست و پایدار. ن. زتیلی

برخود لازم می‌دانم از پروفیسور اسماعیل زاهد (دانشگاه نیویورک در استونی بروک) و جری آ. سالیوان (کالج دانشگاهی دوبلین، ایرلند) برای مطالعه‌ی دقیق و ارائه‌ی پیشنهادهایی برای دست‌نوشته‌ی اولیه‌ی کتاب تشکر کنم. از چهار داور ناشناس کتاب که نظرات و پیشنهادات سازنده‌ای را ارائه نمودند نیز سپاسگزارم. سیاس ویژه‌ی من به ویراستارم دکتر اندی اسلید به خاطر پشتیبانی و تشویق مداوم و نظارت کارآمد وی بر این پروژه به او تقدیم می‌شود.

در اینجا می‌خواهم از میزبانی مرکز فیزیک نظری MIT، کمبریج، برای دو سال حضورم در آنجا به عنوان بازدیدکننده قدردانی کنم. به خصوص مایلم از پروفیسورها آلن گوث، رابرت جفی و جان نیگل برای حمایت‌هایشان تشکر کنم.

## خطاب به دانشجو

ما آنچه را که تکرار می‌کنیم، هستیم. در این صورت عالی بودن یک عمل نیست بلکه یک عادت است.

### ارسطو

هیچ‌کس نمی‌تواند انتظار داشته باشد که بدون خیس شدن شنا را یاد بگیرد و هیچ‌کس انتظار ندارد آن را صرفاً با مطالعه‌ی کتاب یا تماشای شنای دیگران فرا بگیرد. نمی‌توان شنا را بدون کار عملی یاد گرفت. مطلقاً هیچ جایگزینی برای انداختن خودتان در آب و صرف هفته‌ها یا حتی ماه‌ها وقت برای به دست آوردن تجربه در این زمینه وجود ندارد. به همین ترتیب، نمی‌توان فیزیک را به صورت منفعلانه یاد گرفت. بدون پرداختن به مسأله‌های چالش برانگیز گوناگون، دانشجو راه دیگری برای آموختن کیفیت درک خود از موضوع مورد نظر ندارد. اینجاست که دانشجو احساس رضایت‌مندی و احاطه بر موضوع را

## پیشگفتار ویرایش دوم

نکته اشاره کنم که تمام تمرین‌های انتهای هر فصل به صورت کامل در طی چند سال اخیر در کلاس درس مورد بررسی قرار گرفته‌اند.

در حال حاضر، کتاب تقریباً دارای ششصد مثال، مسأله و تمرین است. هر فصل شامل (الف) تعدادی مسأله‌ی حل شده است که هر یک از آنها برای نشان دادن یک مفهوم خاص مرتبط با یک بخش خاص در آن فصل طراحی شده است (ب) تعداد زیادی مسأله‌ی به طور کامل حل شده (که در انتهای هر فصل قرار داده شده‌اند) که عموماً جامع‌اند و از این رو چندین مفهوم را یکجا پوشش می‌دهند (پ) تمرین‌های حل نشده‌ی فراوان به عنوان تکلیف خانه اختصاص داده شده است. به واسطه‌ی این مجموعه از مثال‌ها، مسأله‌ها و تمرین‌ها می‌خواهم به دانشجو توانایی دهم تا خواننده‌ای مستقل و در مکانیک کوانتومی متبحر شود. توانایی در حل مسأله مدرکی قاطع از درک واقعی موضوع است.

ویرایش دوم دارای منابع مفید طراحی شده برای مدرسانی است که از این کتاب استفاده می‌کنند (لطفاً با نویسنده یا انتشارات وایلی برای دریافت این منابع رایگان تماس بگیرید).

محتوای این کتاب برای سه نیمسال تحصیلی مناسب است: دو نیمسال تحصیلی برای دانشجویان کارشناسی و یک نیمسال تحصیلی برای دانشجویان کارشناسی ارشد. بررسی مرتبگی که ممکن است در اینجا مطرح شود این است که در واقع چگونه می‌توان این کتاب را در درس‌های کارشناسی و کارشناسی ارشد مورد استفاده قرار داد؟ پاسخ ساده‌ای برای این بررسی وجود ندارد زیرا به زمینه‌ی علمی دانشجویان و طبیعت درس‌ها بستگی دارد. ابتدا باید این مطلب مهم را یادآوری کنم که چون کتاب اطلاعات زیادی را ارائه می‌کند، هر مدرس یقیناً باید موضوعاتی را انتخاب کند که بیشترین ارتباط را

هشت سال از چاپ ویرایش نخست این کتاب در سال ۲۰۰۱ می‌گذرد. در طول این مدت، بسیاری از کاربران فرهیخته (اساتیدی که این کتاب را مورد استفاده قرار داده‌اند، پژوهشگران و دانشجویان) زمانی را صرف کرده و با دقت بازخورد ارزشمندی را درباره‌ی کتاب به اینجانب منعکس کرده‌اند. در آماده‌سازی ویرایش دوم، نظرات باارزشی که از این کاربران دریافت کرده‌ام را لحاظ نمودم. در اینجا پیش از هر چیز می‌خواهم کمال سپاس و قدردانی عمیق خود را نسبت به آنها ابراز کنم. تمرکز اصلی کتاب بر روی همان محورهای قبلی ثابت مانده است: فراهم نمودن متنی با ساختار خوب و مناسب و خودشمول (ولی فشرده) که پشتوانه‌ی آن مجموعه‌ای غنی از مثال‌هایی است که کاملاً حل شده‌اند و جنبه‌های مختلف مکانیک کوانتومی غیرنسبیتی را به روشنی بیان می‌کنند. هدف کتاب به دو بخش تقسیم می‌شود: از یک سو، فراهم کردن ابزار آموزشی مناسب برای مدرسان و از سوی دیگر، کمک به دانشجویان تا نه تنها بر پایه‌های نظری مسلط شوند بلکه در کاربرد مکانیک کوانتومی واقعی به صورت مؤثری حرفه‌ای شوند. اگرچه با وجود اصرار بسیاری از کاربران ساختار کلی و محتوایی کتاب به همان صورت باقی مانده است، با این حال، تغییرات جراحی‌گونه و قابل ملاحظه‌ای در ساده و روان‌سازی کتاب در ویرایش دوم داده شده است. هدف از این تغییرات، برطرف کردن ضعف‌های مشاهده شده (مانند اشکالات چاپی) در ویرایش نخست و در همین حال تقویت و بهبود نقاط قوت کتاب بوده است. تعدادی از بخش‌ها، مثال‌ها و مسأله‌ها، جدید ارائه شده‌اند که در سراسر کتاب پخش شده‌اند. همچنین، تمرین‌های آخر هر فصل مورد بازنگری قرار گرفته‌اند. تعدادی تمرین جدید اضافه و برخی از تمرین‌های قبلی حذف و مابقی تمرین‌ها بهبود داده شده‌اند. باید به این

با دانشجویانش داشته باشد. با مطالعه‌ی منظم تمام بخش‌های یک فصل خاص (به ویژه فصل ۲) ممکن است شخص در باتلاق گرفتار شود و از این رو با صرف زمان بسیار زیادی روی موضوعات تخصصی، فصل را به پایان برساند. به جای آن، شخص باید بسیار گزینشگر باشد. به عنوان مثال، برای یک درس نیمساله که در آن دانشجویان بیشتر درس فیزیک جدید را نگذرانده‌اند، پیشنهاد می‌کنم که این موضوعات پوشش داده شوند: بخش‌های ۱-۱ تا ۱-۶، ۲-۲ تا ۲-۴، ۳-۲ تا ۳-۴، ۴-۲ تا ۴-۳، ۵-۲ تا ۵-۳، ۶-۲ تا ۶-۳، ۷-۲ تا ۷-۳، ۸-۲ تا ۸-۳، ۹-۲ تا ۹-۳، ۱۰-۲ تا ۱۰-۳، ۱۱-۲ تا ۱۱-۳. به هر حال، اگر دانشجویان درس فیزیک جدید را از قبل گذرانده باشند، در مجموع می‌توان از فصل ۱ گذشت و به این بخش‌ها پرداخت: ۲-۲ تا ۲-۴، ۳-۲ تا ۳-۴، ۴-۲ تا ۴-۳، ۵-۲ تا ۵-۳، ۶-۲ تا ۶-۳، ۷-۲ تا ۷-۳، ۸-۲ تا ۸-۳، ۹-۲ تا ۹-۳، ۱۰-۲ تا ۱۰-۳، ۱۱-۲ تا ۱۱-۳. برای یک درس دو نیمساله فکر می‌کنم که مدرس دارای وقت زیاد و انعطاف‌پذیری بالایی باشد، برای مانور دادن و انتخاب موضوعاتی که برای دانشجویانش مناسب‌تر هستند. در این صورت، یقیناً موضوعاتی از فصل‌های ۷ تا ۱۱ را نیز به بخش‌های ذکر شده‌ی قبلی اضافه خواهد کرد (البته نه تمام بخش‌های این فصل‌ها زیرا این کار بسیار زمان‌بر است). از سوی دیگر، برای یک درس نیمساله‌ی کارشناسی ارشد، موضوعاتی مانند بخش‌های ۷-۱ تا ۷-۱، ۸-۱ تا ۸-۱، ۹-۴ تا ۹-۴، ۱۰-۲ تا ۱۰-۲، ۱۱-۳ تا ۱۱-۳، ۱۲-۳ تا ۱۲-۳ و بیشتر موضوعات فصل‌های ۷ تا ۱۱ را پوشش می‌دهم.

## قدردانی

بازخوردهای بسیار مفیدی را از بسیاری از کاربران ویرایش نخست دریافت کرده‌ام و از هر یک از آنها کمال تشکر و امتنان را دارم. به خصوص مایلم از ریچارد لید (دانشگاه

ایالتی آریزونا) که با از خودگذشتگی و با تلاشی خستگی ناپذیر نظرات، تصحیح‌ها و پیشنهادهای باارزشی را برای من فراهم کرد، تشکر کنم. همچنین می‌خواهم از یرل واکر (دانشگاه ایالتی کالیفرنیا) مؤلف کتاب نمایش هیجان‌انگیز فیزیک و کتاب مبانی فیزیک هالیدی-رزنیک-واکر به خاطر مطالعه‌ی دست‌نوشته و پیشنهادهای مناسب ایشان، میتون چا (دانشگاه هاوایی سیستم) به خاطر برطرف کردن اشکالات کل کتاب و فلیکس چن (باورویو تکنولوژی) ساننا آنا) به خاطر مطالعه‌ی فصل نخست تشکر کنم. سپاس ویژه‌ی من به کاربران و خوانندگان فرهیخته‌ی زیر که فهرستی از اشکالات و خطاهای چاپی را که در ویرایش نخست مشاهده نمودند به من گوشزد کرده‌اند: توماس سایتا (دانشگاه کارولینای شرقی)، موریتس براون (دانشگاه آفریقای جنوبی، پرتوریا)، دیوید پرکویتس (دانشگاه ایالتی کالیفرنیا در نورث ریج)، جان داگلاس هی (دانشگاه کوازولو-ناتال، دوربان، آفریقای جنوبی)، ریچارد آرتور دودلی (دانشگاه کالگری، کانادا)، آندره دورلو (بنیانگذار A.I.F. انجمن آموزش فیزیک ایتالیا، فرارا، ایتالیا) و ریک میراندا (هلند). تشکر ویژه‌ی من به م. بولوت (دانشگاه آلاباما در بیرمنگام) و هایتر مولر-کرومبار (Forschungszentrum Juelich، آلمان) و دانشجوی دوره‌ی دکترایش ک. گوگن برگر به خاطر نوشتن و امتحان کد ++C فهرست شده در پیوست پ که برای حل معادله‌ی شرودینگر یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی و نیز برای پتانسیل چاه مربعی نامتناهی طراحی شده است.

سرانجام مایلم از ویراستارانم دکتر اندی اسلید، سیلیا کاردن و الکساندرا کاریک به خاطر تلاش‌های سخت‌کوشانه و پشتیبانی دوستانه‌ی آنها در طول انجام این پروژه تشکر کنم.

ن. زتیلی

دانشگاه ایالتی جکسونویل، آمریکا

ژانویه ۲۰۰۹

## فصل اول

# منشاء پیدایش فیزیک کوانتومی

در این فصل قصد داریم تا ایده‌های فیزیکی اساسی و حقایق تجربی‌ای که فیزیک کلاسیک را رد کرده‌اند و منجر به پیدایش مکانیک کوانتومی شده‌اند را مرور کنیم. توسعه‌ی مکانیک کوانتومی پس از شکست فیزیک کلاسیک در توضیح تعدادی از پدیده‌های میکروفیزیکی که در انتهای قرن نوزدهم و ابتدای قرن بیستم مشاهده شدند، انجام گرفت.

## ۱-۱ یادآوری تاریخی

در انتهای قرن نوزدهم فیزیک اساساً از مکانیک کلاسیک، نظریه‌ی الکترومغناطیس<sup>۱</sup> و ترمودینامیک تشکیل می‌شد. از مکانیک کلاسیک برای پیش‌بینی دینامیک اجسام مادی استفاده می‌شد و الکترومغناطیس ماکسول چارچوب مناسبی برای مطالعه‌ی تابش فراهم می‌نمود. ماده و تابش به ترتیب برحسب ذره‌ها و موج‌ها توصیف می‌شدند. در رابطه با برهمکنش‌های بین ماده و تابش باید گفت که به خوبی به وسیله‌ی نیروی لورنتس یا ترمودینامیک توصیف می‌شدند. موفقیت چشمگیر فیزیک کلاسیک (مکانیک کلاسیک، نظریه‌ی کلاسیکی الکترومغناطیس و ترمودینامیک) موجب ایجاد این تصور شد که توصیف کاملی از طبیعت به دست آمده است. به نظر می‌رسید که تمام پدیده‌های شناخته شده‌ی فیزیکی را می‌توان در چارچوب نظریه‌های عمومی ماده و تابش توضیح داد.

به هر حال با شروع قرن بیستم، فیزیک کلاسیک (که کاملاً غیرقابل انتقاد بود) به صورت جدی در دو جبهه به چالش گرفته شد:

۱. نظریه‌ی الکترومغناطیس ماکسول سه شاخه‌ی (به ظاهر متفاوت) الکتریسته، مغناطیس و نورشناسی را یکپارچه کرد.

• **حوزه‌ی نسبیتی:** نظریه‌ی نسبیت انیشتین در سال ۱۹۰۵ نشان داد که مکانیک نیوتنی در سرعت‌های بسیار بالا (یعنی در سرعت‌هایی قابل مقایسه با سرعت نور) دیگر اعتبار ندارد.

• **حوزه‌ی میکروسکوپی:** با توسعه‌ی تکنیک‌های تجربی جدید به نقطه‌ی کاوش اتم‌ها و ساختارهای زیراتمی، معلوم شد که فیزیک کلاسیک به صورت رقت‌باری در ارائه‌ی توضیحی صحیح از پدیده‌های تازه کشف شده با ناکامی روبرو می‌شود. بنابراین معلوم شد که فیزیک کلاسیک در سطح میکروسکوپی دیگر اعتبار ندارد و باید مفاهیم جدیدی برای توصیف (به عنوان مثال) ساختار اتم‌ها و مولکول‌ها و این که چگونه نور با آنها برهم‌کنش می‌کند، به کار گرفته شود.

ناکامی فیزیک کلاسیک در توضیح چندین پدیده‌ی میکروسکوپی (مانند تابش جسم سیاه، اثر فتوالکتریک، پایداری اتم و طیف‌نمایی اتمی) راه را برای جستجوی ایده‌های جدید خارج از محدوده‌ی فیزیک کلاسیک روشن کرد.

نخستین گام واقعی در سال ۱۹۰۰ و زمانی که ماکس پلانک مفهوم کوانتوم انرژی را معرفی کرد، برداشته شد. وی در تلاش برای توضیح پدیده‌ی تابش جسم سیاه، تنها پس از اصل موضوعه قرار دادن این که تبادل انرژی بین تابش و محیط اطراف آن در مقدارهای گسسته (یا کوانتیده) روی می‌دهد، موفق به توجیه نتیجه‌های تجربی شد. او نشان داد که تبادل انرژی بین یک موج الکترومغناطیسی با بسامد  $\nu$  و ماده تنها در ضرب‌های صحیح  $h\nu$  (که وی آن را یک کوانتوم نامید) روی می‌دهد که در آن  $h$  یک ثابت بنیادی است و ثابت پلانک نامیده می‌شود. معلوم شد که کوانتش تابش الکترومغناطیسی ایده‌ای با نتیجه‌های دور از انتظار است.

ایده‌ی پلانک (که توضیح دقیقی از تابش جسم سیاه را به دست می‌داد) موجب اندیشه‌ای نو شد و موجی از اکتشافات جدید را به راه انداخت که راه‌هایی برای مسأله‌های حل نشده‌ی آن زمان به راه انداخت.

در سال ۱۹۰۵ انیشتین مفهوم کوانتومی پلانک را قوت بخشید. وی در تلاش برای درک اثر فتوالکتریک دریافت که ایده‌ی کوانتش موج‌های الکترومغناطیسی پلانک باید برای نور نیز معتبر باشد. بنابراین با دنبال کردن رهیافت پلانک وی پیشنهاد کرد که نور خود از بسته‌های گسسته‌ی انرژی (یا ذره‌های کوچکی) بنام فوتون با انرژی  $h\nu$  (که  $\nu$  بسامد نور است) ساخته شده است. معرفی مفهوم فوتون انیشتین را قادر ساخت تا توضیح دقیقی برای مسأله‌ی فتوالکتریک (که جوابی برای آن از ابتدای نخستین آزمایش تجربی هرترز در سال ۱۸۸۷ تا آن زمان وجود نداشت) ارائه کند.

کشف مهم و بدیع دیگر حاصل تلاش نیلز بوهر بود. درست پس از کشف تجربی هسته‌ی اتم به وسیله‌ی رادرفورد در سال ۱۹۱۱ و با ترکیب مدل اتمی رادرفورد، مفهوم کوانتوم پلانک، و فوتون‌های انیشتین، بوهر در سال ۱۹۱۳ مدل اتم هیدروژن خود را معرفی کرد. وی در کار خود نشان داد که می‌توان اتم‌ها را در



حالت‌های گسسته‌ی انرژی یافت و برهمکنش اتم‌ها با تابش (یعنی گسیل و جذب تابش به وسیله‌ی اتم‌ها) تنها در مقدهای گسسته‌ی  $h\nu$  اتفاق می‌افتد زیرا از گذارهای بین حالت‌های انرژی گسسته‌ی متفاوت اتم نتیجه می‌شود. این کار توضیح رضایت‌بخشی برای چندین مسأله‌ی حل نشده مانند پایداری اتم و طیف‌نمایی اتمی فراهم نمود.

سپس در سال ۱۹۲۳ کامپتون کشف مهمی را انجام داد که قاطع‌ترین تأیید برای جنبه‌ی ذره‌ای نور بود. او با پراش پرتوهای  $x$  توسط الکترون‌ها نتیجه گرفت که فوتون‌های پرتوی  $x$  مانند ذره‌هایی با تکانه‌ی  $h\nu/c$  رفتار می‌کنند ( $\nu$  بسامد پرتوهای  $x$  است).

این مجموعه از کشفیات مهم (حاصل کارهای پلانک، انیشتین، بوهر و کامپتون) شالوده‌هایی نظری و تأیید تجربی قاطعی را برای جنبه‌ی ذره‌ای موج‌ها (یعنی این مفهوم که موج‌ها در مقیاس میکروسکوپی رفتاری ذره‌ای از خود نشان می‌دهند) ارائه نمود. در این مقیاس، فیزیک کلاسیک نه تنها از نظر کمی بلکه حتی از نظر کیفی و مفهومی با ناکامی روبرو است.

زمانی که اوضاع به اندازه‌ی کافی برای فیزیک کلاسیک بد نبود، دوبروی در سال ۱۹۲۳ مفهوم جدید و قدرتمند دیگری را معرفی کرد که فیزیک کلاسیک نمی‌توانست آن را بپذیرد: او به‌عنوان اصل موضوعه پذیرفت که نه تنها تابش، رفتاری ذره‌گونه از خود نشان می‌دهد بلکه (به عکس) ذره‌های مادی نیز خود رفتاری موج‌گونه نشان می‌دهند. این مفهوم به‌صورت تجربی در سال ۱۹۲۷ به وسیله‌ی دیویسون و ژرمر تأیید شد. آنها نشان دادند که طرح‌های تداخلی (یک ویژگی موج‌ها) را می‌توان با ذره‌های مادی مانند الکترون‌ها به‌دست آورد.

اگرچه مدل بوهر برای اتم نتایجی را به بار آورد که به خوبی با طیف‌نمایی تجربی توافق داشت اما برای نداشتن یک محتوای نظری مورد انتقاد قرار گرفت. مانند طرح «کوانتشن» مطرح شده به‌وسیله‌ی پلانک در سال ۱۹۰۰، اصول موضوعه و فرض‌های به کار گرفته شده به وسیله‌ی بوهر در سال ۱۹۱۳ کاملاً دلخواه بودند و اصول اولیه‌ی یک نظریه را دنبال نمی‌کردند. نارضایتی از طبیعت دلخواه ایده‌ی پلانک و اصول موضوعه‌ی بوهر و نیاز به برآزش آنها در چارچوب یک نظریه‌ی سازگار موجب شد تا هایزنبرگ و شرودینگر به جستجوی مبانی نظریه‌ای که این ایده‌ها را در بر بگیرد، بپردازند. تا این که در سال ۱۹۲۵ تلاش‌های آنها به نتیجه رسید: آنها ماهرانه یافته‌های تجربی گوناگون و همین‌طور اصول موضوعه‌ی بوهر را در قالب یک نظریه‌ی ظریف (مکانیک کوانتومی) به هم پیوند دادند. معلوم شد که این نظریه علاوه بر فراهم نمودن توضیحی دقیق برای داده‌های تجربی موجود، به‌صورت شگفت‌انگیزی دارای توانایی پیش‌بینی قابل اعتمادی است که آن را قادر می‌سازد تا به جستجو و حل معماهای بسیاری از حوزه‌های ناشناخته‌ی دنیای میکروفیزیکی بپردازد. این نظریه‌ی جدید به بیست و پنج سال (۱۹۰۰-۱۹۲۵) کار نامنسجم که ایده‌های پلانک و بوهر در آن جایگاه خاصی داشت پایان داد و به عنوان نظریه‌ی کوانتومی قدیمی شناخته شد. از نظر تاریخی، دو فرمول‌بندی مستقل مکانیک کوانتومی وجود داشت. فرمول‌بندی نخست (که مکانیک

ماتریسی نامیده می‌شود) توسط هایزنبرگ (۱۹۲۵) برای توصیف ساختار اتمی با شروع از خط‌های طیفی مشاهده شده توسعه داده شد. هایزنبرگ با الهام از کوانتتس موج‌های پلانک و مدل اتم هیدروژن بوهر، نظریه‌ی خود مبنی بر این که تنها مقدارهای مجاز انرژی بین سیستم‌های میکروفیزیکی مقدارهای گسسته‌ای هستند (کوانتوم‌ها)، بنیان نهاد. وی با بیان کمیت‌های دینامیکی مانند انرژی، مکان، تکانه و تکانه‌ی زاویه‌ای برحسب ماتریس‌ها، یک مسأله‌ی ویژه‌مقدار را به‌دست آورد که دینامیک سیستم‌های میکروسکوپی را توصیف می‌کرد (قطری کردن ماتریس هامیلتونی طیف انرژی و بردارهای حالت سیستم را نتیجه می‌دهد). مکانیک ماتریسی در توضیح کوانتوم‌های گسسته‌ی نور گسیل شده و جذب شده به وسیله‌ی اتم‌ها بسیار موفق بود.

فرمول‌بندی دوم (که مکانیک موجی نامیده می‌شود) حاصل کار شرودینگر (۱۹۲۶) بود که تعمیم اصل موضوعه‌ی دوبروی است. این روش (که شهودی‌تر از مکانیک ماتریسی است) دینامیک ماده‌ی میکروسکوپی را به وسیله‌ی یک معادله‌ی موج (که معادله‌ی شرودینگر نامیده می‌شود) توصیف می‌کند. وی به جای مسأله‌ی ویژه‌مقدار هایزنبرگ یک معادله‌ی دیفرانسیل را به‌دست آورد. جواب‌های این معادله، طیف انرژی و تابع موج سیستم مورد نظر را نتیجه می‌دهد. در سال ۱۹۲۷ ماکس بورن تفسیر احتمالاتی خود از مکانیک موجی را پیشنهاد کرد: او اندازه‌ی مجذور تابع‌های موجی که جواب‌های معادله‌ی شرودینگر هستند را در نظر گرفت و آنها را به عنوان چگالی‌های احتمال تفسیر کرد.

معلوم شده است که این دو فرمول‌بندی به ظاهر متفاوت (فرمول‌بندی موجی شرودینگر و رهیافت ماتریسی هایزنبرگ) معادل‌اند. سپس دیراک یک فرمول‌بندی عمومی‌تر از مکانیک کوانتومی را پیشنهاد کرد که با ابزار مختصری مانند کت‌ها (بردارهای حالت)، براها و عملگرها سروکار دارد. نمایش صورت‌بندی دیراک در یک پایه‌ی پیوسته (نمایش‌های مکان و تکانه) به مکانیک موجی شرودینگر بر می‌گردد. در رابطه با فرمول‌بندی ماتریسی هایزنبرگ باید گفت که می‌توان آن را با نمایش صورت‌بندی دیراک در یک پایه‌ی گسسته به‌دست آورد. در این کتاب، رهیافت‌های نمایش شرودینگر و هایزنبرگ به ترتیب فرمول‌بندی موجی و فرمول‌بندی ماتریسی نظریه‌ی عمومی مکانیک کوانتومی را نمایش می‌دهند.

دیراک در سال ۱۹۲۸ با ترکیب نسبیت خاص و مکانیک کوانتومی معادله‌ای را به دست آورد که حرکت الکترون‌ها را توصیف می‌کرد. این معادله که به معادله‌ی دیراک مشهور است وجود یک پادذره (پوزیترون) که ویژگی‌هایی مشابه با الکترون (اما با بار مخالف) دارد را پیش‌بینی کرد. پوزیترون در سال ۱۹۳۲ و چهار سال پس از پیش‌بینی آن به وسیله‌ی مکانیک کوانتومی کشف شد.

به طور خلاصه، مکانیک کوانتومی نظریه‌ای است که دینامیک ماده را در مقیاس میکروسکوپی توصیف می‌کند. اما آیا یادگیری آن اهمیت دارد؟ در پاسخ باید گفت که این پرسش یک پرسش بی‌پایه است زیرا مکانیک کوانتومی تنها چارچوب معتبر برای توصیف دنیای میکروفیزیکی است. برای درک فیزیک جامدات، لیزرها، ابزارهای نیمه‌رسانا و ابررسانا، پلاسما و ... ضروری است. به طور مختصر باید گفت که

مکانیک کوانتومی پایه‌ی تمام فیزیک مدرن است: فیزیک حالت جامد، فیزیک مولکولی، فیزیک اتمی، فیزیک هسته‌ای و فیزیک ذرات بنیادی، نورشناسی، ترمودینامیک، مکانیک آماری و . . . نه تنها می‌توان مکانیک کوانتومی را در مورد فیزیک بلکه شالوده‌ی شیمی و زیست‌شناسی نیز در نظر گرفت.

## ۲-۱ جنبه‌ی ذره‌ای تابش

مطابق با فیزیک کلاسیک، یک ذره با انرژی  $E$  و تکانه‌ی  $p$  مشخص می‌شود در حالی که یک موج با دامنه و بردار موج  $k$  ( $|k| = 2\pi\lambda$ ) که جهت انتشار موج را نشان می‌دهد، مشخص می‌شود. موج‌ها و ذره‌ها رفتاری کاملاً متفاوت را نشان می‌دهند. به عنوان مثال ویژگی‌های «ذره» و «موج» متقابلاً منحصر به فردند. باید یادآوری کنیم که موج‌ها می‌توانند هر مقدار (پیوسته‌ای) از انرژی را با ذره‌ها مبادله کنند.

در این بخش قصد داریم تا ببینیم که چگونه این مفاهیم انعطاف‌ناپذیر فیزیک کلاسیک به ناکامی آن در توضیح تعدادی از پدیده‌های میکروسکوپی مانند تابش جسم سیاه، اثر فتوالکتریک و اثر کامپتون منجر شد. همانطور که معلوم شده است، این پدیده‌ها را تنها می‌توان با دست کشیدن از مفاهیم انعطاف‌ناپذیر فیزیک کلاسیک و معرفی یک مفهوم کاملاً جدید (جنبه‌ی ذره‌ای تابش) توضیح داد.

### ۱-۲-۱ تابش جسم سیاه

در اینجا مسئله چگونگی برهمکنش تابش با ماده است. هنگامی که یک جسم جامد گرم می‌شود، شروع به تابش و گسیل تابش گرمایی می‌کند. با افزایش دما، جسم قرمز می‌شود و سپس زرد و سپس سفید می‌شود. تابش گرمایی گسیل شده به وسیله‌ی اجسام جامد تابان از توزیع پیوسته‌ای از بسامدها که در محدوده‌ی مادون قرمز تا ماوراء بنفش قرار می‌گیرند، تشکیل می‌شود. الگوی پیوسته‌ی طیف توزیع کاملاً برخلاف تابش گسیل شده از گازهای گرم است. تابش گسیل شده از گازها یک طیف توزیع گسسته دارد [خط‌های رنگی تیز (باریک) بدون نور (یعنی تاریک) در ناحیه بین آنها قرار دارد].

درک مشخصه‌ی پیوسته‌ی تابش گسیل شده توسط یک جسم جامد تابان، یکی از مسائل اصلی حل نشده را در نیمه‌ی دوم قرن نوزدهم بر جای گذاشت. تمام تلاش‌ها برای توضیح این پدیده به وسیله‌ی نظریه‌های موجود فیزیک کلاسیک (ترمودینامیک آماری و نظریه‌ی الکترومغناطیس کلاسیک) با ناکامی روبرو شد. این مسأله به ضرورت مشخص کردن نظریه‌ی ترمودینامیکی مناسبی که چگونگی تبادل انرژی بین تابش و ماده را توصیف می‌کرد، وابسته بود.

هنگامی که تابش به جسمی می‌رسد، مقداری از آن جذب جسم و مقداری نیز بازتابیده می‌شود. یک «جسم سیاه» ایده‌آل، جسمی مادی است که تمام تابش فرود آمده بر آن را جذب می‌کند و بنابراین هنگامی که از خارج به آن نور تابانده شود، تحت بازتاب سیاه به نظر می‌رسد. هنگامی که یک جسم گرم می‌شود، انرژی الکترومغناطیسی را در نتیجه‌ی اغتشاش گرمایی الکترون‌ها در سطح خود تابش می‌کند. شدت این

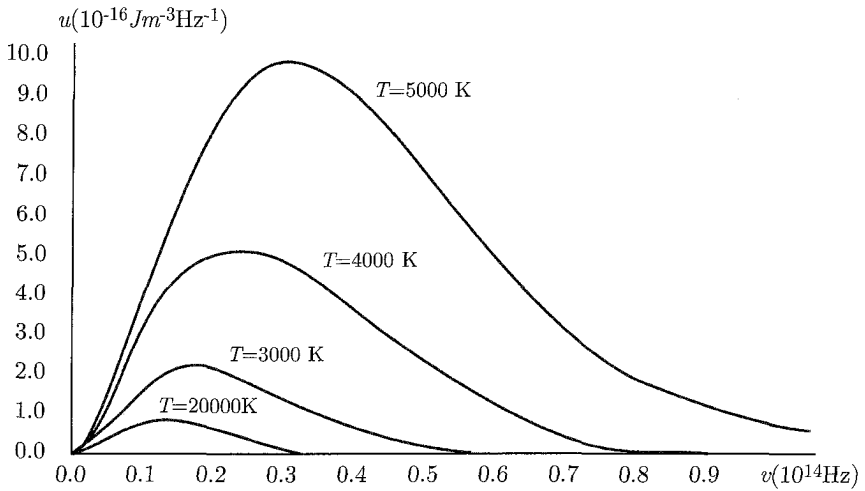
تابش به بسامد تابش و دما بستگی دارد و نوری که این جسم گسیل می‌کند، تمام طیف را در بر می‌گیرد. جسمی که در تعادل گرمایی با محیط اطراف خود باشد، همان مقدار انرژی را تابش می‌کند که جذب می‌کند. بنابراین نتیجه می‌شود که یک جسم سیاه یک جذب کننده‌ی کامل و یک گسیل کننده‌ی کامل تابش است. یک جسم سیاه واقعی را می‌توانیم با در نظر گرفتن یک کاواک حفره که دیواره‌های داخلی آن به طور کامل تابش الکترومغناطیسی را بازتاب می‌دهند (مثلاً دیواره‌های فلزی) و حفره‌ی بسیار کوچکی در سطح خود دارد، بسازیم. تابشی که به داخل حفره وارد می‌شود، در داخل کاواک به دام می‌افتد و پس از بازتاب‌های پیاپی به طور کامل در سطوح داخلی حفره جذب می‌شود. بنابراین حفره تابش را مانند یک جسم سیاه جذب می‌کند. از سوی دیگر، هنگامی که این کاواک تا دمای  $T$  گرم می‌شود<sup>۲</sup>، تابشی که حفره را ترک می‌کند تابش جسم سیاه است زیرا حفره به عنوان یک گسیل کننده‌ی کامل عمل می‌کند و سرانجام با افزایش دما حفره شروع به تابش می‌کند. برای درک تابش درون کاواک، تنها باید توزیع طیف تابشی در حال خروج از حفره را تحلیل کرد. در ادامه، منظور از تابش جسم سیاه همان تابش در حال خروج از حفره‌ی یک کاواک گرم شده است و تابش گسیل شده به وسیله‌ی یک جسم سیاه داغ، تابش جسم سیاه نامیده می‌شود.

تا اواسط دهه‌ی ۱۸۰۰، داده‌های تجربی غنی پیرامون تابش جسم سیاه برای اجسام گوناگون به دست آمده بود. تمام این نتیجه‌ها نشان می‌دادند که تابش گسیل شده (در حالت تعادل) یک توزیع انرژی پیوسته و خوش تعریفی دارد: به‌ازای هر بسامد، چگالی انرژی متناظری وجود دارد که به ترکیب شیمیایی جسم و شکل آن بستگی ندارد و تنها به دمای دیواره‌ی کاواک بستگی دارد (شکل ۱-۱). چگالی انرژی، بیشینه‌ی قابل ملاحظه‌ای را در یک بسامد معلوم نشان می‌دهد که با افزایش دما افزایش پیدا می‌کند یعنی قله‌ی طیف تابش در بسامدی روی می‌دهد که متناسب با دما است (رابطه‌ی (۱-۱۶)). این همان دلیل واقعی تغییر رنگ یک جسم داغ با افزایش دما است (به‌خصوص از قرمز به زرد و سفید) و معلوم شد که توضیح طیف جسم سیاه آنقدرها آسان نیست.

تلاش‌هایی برای توضیح منشاء مشخصه‌ی پیوسته‌ی این تابش صورت گرفت. در بین این تلاش‌ها، جدی‌ترین آنها (که از فیزیک کلاسیک بهره می‌برد) حاصل کار ویلهلم وین در سال ۱۸۸۹ و ریلی در سال ۱۹۰۰ بود. در سال ۱۸۷۹ ج. استفان به طور تجربی دریافت که شدت کل (یا توان کل در واحد سطح) گسیل شده به وسیله‌ی یک جسم تابان با دمای  $T$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$P = a\sigma T^4 \quad (1-1)$$

که به عنوان قانون استفان-بولتزمن شناخته می‌شود و در آن  $K^{-4}Wm^{-2}$   $\sigma = 5.67 \times 10^{-8}$  ثابت استفان-بولتزمن و  $a$  ضریبی کوچک‌تر از ۱ است. در مورد یک جسم سیاه  $a = 1$  است. سپس در سال ۲. هنگامی که دیواره‌ها به طور یکنواخت تا دمای  $T$  گرم می‌شوند، (به دلیل اغتشاش گرمایی یا ارتعاش الکترون‌ها در دیواره‌های فلزی) تابش می‌کنند.



شکل ۱-۱ چگالی انرژی طیفی  $u(\nu, T)$  تابش جسم سیاه در دماهای متفاوت به صورت تابعی از بسامد  $\nu$ .

۱۸۸۴ بولتزمن با ترکیب کردن ترمودینامیک و نظریه‌ی الکترومغناطیس ماکسول نتیجه‌ای نظری برای قانون تجربی استفان به دست آورد.

### توزیع چگالی انرژی وین<sup>۳</sup>

با استفاده از بحث‌های ترمودینامیک، وین قانون استفان-بولتزمن (۱-۱) را در نظر گرفت و در سال ۱۸۹۴ آن را برای به دست آوردن چگالی انرژی در واحد بسامد تابش گسیل شده از جسم سیاه گسترش داد:

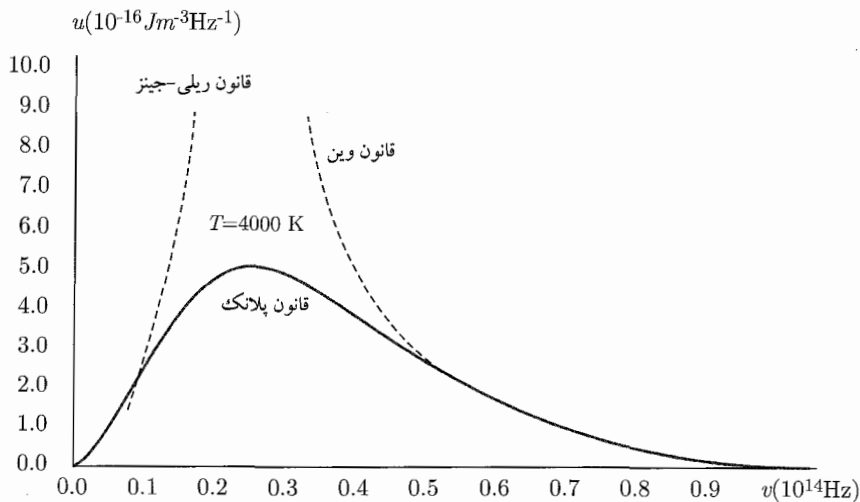
$$u(\nu, T) = A\nu^3 e^{-\beta\nu/T} \quad (۲-۱)$$

که در آن  $A$  و  $\beta$  دو پارامتر تجربی هستند (می‌توان آنها را برای برازش داده‌های تجربی تنظیم کرد).

توجه:  $u(\nu, T)$  دارای ابعاد انرژی در واحد حجم و در واحد بسامد و واحد آن در SI برابر با  $\text{Jm}^{-3}\text{Hz}^{-1}$  است. اگرچه فرمول وین به طور قابل ملاحظه‌ای داده‌های با بسامد بالا را به خوبی برازش می‌کند اما در بسامدهای پایین با ناکامی روبرو می‌شود (شکل ۲-۱).

### توزیع چگالی انرژی ریلی

در سال ۱۹۰۰ ریلی سعی کرد تا بر روی درک طبیعت تابش الکترومغناطیسی درون کاواک متمرکز شود. او تابش را متشکل از موج‌های ایستاده‌ای با دمای  $T$  با گره‌هایی در سطوح فلزی در نظر گرفت. موج‌های ایستاده‌ی او معادل با نوسانگرهای هماهنگ هستند زیرا از نوسان‌های هماهنگ تعداد زیادی بار الکتریکی



شکل ۱-۲ مقایسه‌ی چگالی‌های طیفی مختلف: در حالی که توزیع پلانک و توزیع تجربی کاملاً با هم تطابق دارند (منحنی سیاه)، تنها بخشی از توزیع‌های ریلی-جینز و وین (منحنی‌های نقطه‌چین) با توزیع تجربی تطابق دارند.

(الکترون‌ها) که در دیواره‌های کاواک وجود دارند، نتیجه می‌شوند. هنگامی که کاواک در تعادل گرمایی است، چگالی انرژی الکترومغناطیسی درون کاواک برابر چگالی انرژی ذره‌های باردار در دیواره‌های کاواک است و می‌توان انرژی کل میانگین تابشی خارج شده از کاواک را با ضرب کردن انرژی میانگین نوسانگرها در تعداد مدهای (موج‌های ایستاده‌ی) تابش در بازه‌ی بسامد  $\nu$  تا  $\nu + d\nu$  به دست آورد:

$$N(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \quad (3-1)$$

که در آن  $c = 3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}$  سرعت نور است. کمیت  $(8\pi\nu^2/c^3)d\nu$  تعداد مدهای نوسان در واحد حجم را در محدوده‌ی بسامد  $\nu$  تا  $\nu + d\nu$  به دست می‌دهد. بنابراین چگالی انرژی الکترومغناطیسی در محدوده‌ی  $\nu$  تا  $\nu + d\nu$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$u(\nu, T) = N(\nu)\langle E \rangle = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\langle E \rangle \quad (4-1)$$

که در آن  $\langle E \rangle$  میانگین نوسانگرهای موجود در دیواره‌های کاواک (یا انرژی میانگین تابش الکترومغناطیسی در آن بازه‌ی بسامدی) است. وابستگی دمایی  $u(\nu, T)$  در  $\langle E \rangle$  نهفته است.

اما  $\langle E \rangle$  چگونه محاسبه می‌شود؟ در پاسخ باید گفت که مطابق با نظریه‌ی همپاری ترمودینامیک

کلاسیک، تمام نوسانگرها در کاواک صرف‌نظر از بسامدشان انرژی میانگین یکسانی دارند<sup>۴</sup>:

۴. با استفاده از تغییر متغیر  $\beta = 1/(kT)$  داریم:  $\langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left( \int_0^\infty e^{-\beta E} dE \right) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln(1/\beta) = 1/\beta \equiv kT$

$$\langle E \rangle = \frac{\int_0^{\infty} E e^{-E/kT} dE}{\int_0^{\infty} e^{-E/kT} dE} = kT \quad (5-1)$$

که در آن  $k = ۱,۳۸۰۷ \times ۱۰^{-۲۳} \text{JK}^{-۱}$  ثابت بولتزمن است. وارد کردن (۵-۱) در (۴-۱) به فرمول ریلی-جینز می‌انجامد:

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT \quad (6-1)$$

این قانون به استثنای بسامدهای پایین، در توافق با داده‌های تجربی نیست:  $u(\nu, T)$  به دست آمده از (۶-۱) به ازای مقادیرهای زیاد  $\nu$  واگرا می‌شود در حالی که به طور تجربی باید متناهی باشد (شکل ۲-۱). علاوه بر این اگر از (۶-۱) روی تمام بسامدها انتگرال بگیریم آنگاه انتگرال واگرا می‌شود. این بیان می‌کند که کاواک محتوی مقدار نامتناهی انرژی است که یک نتیجه‌ی غیرمنطقی است و از نظر تاریخی، فاجعه‌ی ماوراء بنفش نامیده می‌شود زیرا (۶-۱) به ازای بسامدهای بالا (یعنی در محدوده‌ی ماوراء بنفش) واگرا می‌شود (درواقع یک ناکامی مصیبت‌بار واقعی برای فیزیک کلاسیک!). منشاء این ناکامی را می‌توان در به دست آوردن انرژی میانگین (۵-۱) ردیابی کرد. این معادله بر مبنای فرض نادرستی بنا شده است: تبادل انرژی بین تابش و ماده پیوسته است و هر مقدار انرژی می‌تواند بین آنها مبادله شود.

### توزیع چگالی انرژی پلانک

پلانک در سال ۱۹۰۰ با یک طرح ابتکاری و هوشمندانه (درونیابی بین قانون وین و قانون ریلی-جینز) موفق شد تا از فاجعه‌ی ماوراء بنفش اجتناب کند و توصیف دقیقی از تابش جسم سیاه را پیشنهاد کرد. پلانک برخلاف فرض ریلی که یک موج ایستاده می‌تواند هر مقدار (پیوستاری از) انرژی را با ماده مبادله کند، فرض کرد که تبادل انرژی بین تابش و ماده باید گسسته باشد. وی سپس این موضوع را که انرژی تابشی (با بسامد  $\nu$ ) گسیل شده توسط بارهای در حال نوسان (از دیواره‌های کاواک) باید تنها به صورت مضرب‌های صحیحی از  $h\nu$  باشد، اصل موضوعه قرار داد:

$$E = nh\nu \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (7-1)$$

که در آن  $h$  یک ثابت جهانی و  $h\nu$  انرژی یک «کوانتوم» تابش است ( $\nu$  علاوه بر بسامد تابش گسیل شده از دیواره‌ها، بسامد بار نوسان کننده در دیواره‌های کاواک را نیز نشان می‌دهد زیرا بسامد تابش گسیل شده به وسیله‌ی یک ذره‌ی باردار نوسان کننده برابر با بسامد نوسان خود ذره است). یعنی انرژی یک نوسانگر با بسامد طبیعی  $\nu$  (که متناظر با انرژی یک بار نوسان کننده با بسامد  $\nu$  است) باید مضرب صحیحی از  $h\nu$  باشد. به یاد داشته باشید که  $h\nu$  برای تمام نوسانگرها یکسان نیست زیرا به بسامد هر نوسانگر بستگی دارد. به هر حال مکانیک کلاسیک هیچ‌گونه محدودیتی روی بسامدی (و بنابراین روی انرژی)

که یک نوسانگر می‌تواند داشته باشد، نمی‌گذارد. انرژی نوسانگرها (مانند آونگ‌ها، سیستم‌های جرم-فنر و نوسانگرهای الکتریکی) به صورت پیوسته برحسب بسامد تغییر می‌کند. معادله‌ی (۷-۱) به عنوان قانون کوانتس پلانک برای انرژی یا اصل موضوعه‌ی پلانک شناخته می‌شود.

بنابراین پلانک با این فرض که انرژی یک نوسانگر کوانتیده است، نشان داد که رابطه‌ی ترمودینامیکی درست برای انرژی میانگین را می‌توان صرفاً به وسیله‌ی جایگزینی انتگرال (۵-۱) (که متناظر با یک پیوستار انرژی است) با جمع گسسته‌ی متناظر با گسستگی انرژی‌های نوسانگرها به دست آورد<sup>۵</sup>:

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} nh\nu e^{-nh\nu/kT}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nh\nu/kT}} = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad (۸-۱)$$

و بنابراین با وارد کردن (۸-۱) در (۴-۱)، چگالی انرژی در واحد بسامد تابش گسیل شده از حفره‌ی کاواک از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad (۹-۱)$$

این رابطه به عنوان توزیع پلانک شناخته می‌شود. این توزیع برازش دقیقی را با توزیع‌های تابش تجربی گوناگون ارائه می‌کند که در شکل ۲-۱ نشان داده شده است. مقدار عددی  $h$  که از برازش (۹-۱) با داده‌های تجربی به دست آمده برابر با  $6.626 \times 10^{-34}$  Js است. همانطور که در (۱۲-۱) نشان داده شده است، باید یادآوری کنیم که می‌توانیم چگالی انرژی پلانک (۹-۱) را برای به دست آوردن چگالی انرژی در واحد طول موج بازنویسی کنیم:

$$\tilde{u}(\nu, T) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/\lambda kT} - 1} \quad (۱۰-۱)$$

حال بیایید نگاهی به رفتار قانون پلانک (۹-۱) در حد بسامدهای پایین و بالا داشته باشیم و سپس ارتباطی بین آن و رابطه‌های وین و ریلی-جینز برقرار کنیم. ابتدا در مورد بسامدهای بسیار پایین  $h\nu \ll kT$  باید گفت می‌توانیم نشان دهیم که رابطه‌ی پلانک (۹-۱) به قانون ریلی-جینز (۶-۱) کاهش می‌یابد زیرا  $\exp(h\nu/kT) \simeq 1 + h\nu/kT$  است. علاوه بر این اگر از توزیع پلانک (۹-۱) روی تمام طیف انتگرال بگیریم (که در آن از تغییر متغیر خاص  $x = h\nu/kT$  و یک انتگرال خاص<sup>۶</sup> استفاده می‌کنیم) آنگاه چگالی انرژی

۵. برای به دست آوردن رابطه‌ی (۸-۱) به این رابطه‌ها نیاز است:  $x/(1-x) = \sum_{n=0}^{\infty} x^n$  و  $x/(1-x)^2 = \sum_{n=0}^{\infty} nx^n$  با  $x = e^{-h\nu/kT}$

۶. در انتگرال‌گیری از (۱۱-۱) باید از انتگرال  $\int_0^{+\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}$  استفاده کنیم.



کل که برحسب توان کل در واحد سطح استفان-بولتزمن بیان می‌شود را به صورت زیر به دست می‌آوریم:

$$\int_0^{\infty} u(\nu, T) d\nu = \frac{\lambda \pi h}{c^3} \int_0^{\infty} \frac{\nu^3}{e^{h\nu/kT} - 1} d\nu$$

$$= \frac{\lambda \pi k^4 T^4}{h^3 c^3} \int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\lambda \pi^5 k^4}{15 h^3 c^3} T^4 = \frac{4}{c} \sigma T^4 \quad (11-1)$$

که در آن  $\sigma = 2\pi^5 k^4 / 15 h^3 c^2 = 5,67 \times 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$  ثابت استفان-بولتزمن است. در این صورت، رابطه‌ی پلانک (۹-۱) به یک چگالی انرژی کل متناهی برای تابش گسیل شده از یک جسم سیاه می‌انجامد و بنابراین از فاجعه‌ی ماوراء بنفش اجتناب می‌کند. دوم این که در حد بسامدهای بالا به راحتی می‌توانیم تحقیق کنیم که توزیع پلانک (۹-۱) قانون وین (۲-۱) را نتیجه می‌دهد.

به صورت خلاصه، طیف تابش جسم سیاه کوانتش تابش (به خصوص رفتار ذره‌ای موج‌های الکترومغناطیسی) را آشکار می‌کند.

درواقع، معرفی ثابت  $h$  از پایان یافتن عصر فیزیک کلاسیک و طلوع عصری جدید (عصر فیزیک دنیای میکروفیزیکی) خبر می‌داد. موفقیت کوانتش تابش پلانک فیزیکدانان دیگر (به خصوص انیشتین، کامپتون، دو بروی و بوهر) را بر آن داشت تا به صورت ماهرانه‌ای از آن برای توضیح مجموعه‌ای از مسأله‌های حل نشده‌ی دیگر که تا دهه‌ها بدون پاسخ باقی مانده بودند، بهره ببرند.

### مثال ۱-۱ (قانون جابه‌جایی وین)

(الف) نشان دهید که بیشینه‌ی چگالی انرژی پلانک (۹-۱) به ازای طول موجی به شکل  $\lambda_{\max} = b/T$  روی می‌دهد که در آن  $T$  دما و  $b$  ثابتی است که باید تخمین زده شود.

(ب) از رابطه‌ی به دست آمده در (الف) برای تخمین دمای سطح یک ستاره در حالتی که تابش گسیل شده شدت بیشینه‌ای در طول موج  $446 \text{ nm}$  داشته باشد، استفاده کنید. شدت گسیل شده به وسیله‌ی ستاره چقدر است؟

(پ) طول موج و شدت تابش گسیل شده به وسیله‌ی رشته‌ی تنگستن تابان که دمای سطح آن  $3300 \text{ K}$  است را تخمین بزنید.

حل

(الف) چون  $\nu = c/\lambda$  است، داریم:  $d\nu = |d\nu/(d\lambda)|d\lambda = (c/\lambda^2)d\lambda$ . بنابراین می‌توانیم چگالی انرژی پلانک (۹-۱) را بر حسب طول موج به صورت زیر بنویسیم:

$$\tilde{u}(\lambda, T) = u(\nu, T) \left| \frac{d\nu}{d\lambda} \right| = \frac{\lambda \pi h c}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/\lambda kT} - 1} \quad (12-1)$$

بیشینه‌ی  $\tilde{u}(\lambda, T)$  متناظر با  $\partial \tilde{u}(\lambda, T) / \partial \lambda = 0$  است که نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\frac{\lambda \pi h c}{\lambda^6} \left[ -5 \left( 1 - e^{-hc/\lambda k T} \right) + \frac{hc}{\lambda k T} \right] \frac{e^{hc/\lambda k T}}{\left( e^{hc/\lambda k T} - 1 \right)^2} = 0 \quad (13-1)$$

و از این رو

$$\frac{\alpha}{\lambda} = 5 \left( 1 - e^{-\alpha/\lambda} \right) \quad (14-1)$$

است که در آن  $\alpha = hc/(kT)$ . می‌توانیم این معادله‌ی غیرجبری را به صورت ترسیمی و یا به صورت عددی با نوشتن  $\alpha/\lambda = 5 - \varepsilon$  حل کنیم. با وارد کردن این مقدار در (۱۴-۱) به دست می‌آوریم:  $5 - \varepsilon = 5 - 5e^{-5+\varepsilon}$  که به جواب تقریبی پیشنهادی  $5 - \varepsilon = 5 - 5e^{-5} = 0,0337$  و از این رو به  $\alpha/\lambda = 5 - 0,0337 = 4,9663$  می‌انجامد. چون  $\alpha = hc/(kT)$  است و با استفاده از مقدارهای  $h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ Js}$  و  $k = 1,3807 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$  می‌توانیم طول موجی که متناظر با بیشینه‌ی چگالی انرژی پلانک (۹-۱) است را به صورت زیر بنویسیم:

$$\lambda_{\max} = \frac{hc}{4,9663 k T} = \frac{2898,9 \times 10^{-6} \text{ mK}}{T} \quad (15-1)$$

این رابطه (که نشان می‌دهد  $\lambda_{\max}$  با افزایش دمای جسم کاهش می‌یابد) قانون جابه‌جایی وین نامیده می‌شود. در صورتی که دمای جسم معلوم باشد، می‌توان از این رابطه برای تعیین طول موج متناظر با شدت بیشینه و یا برعکس در صورتی که طول موج بزرگ‌ترین شدت معلوم باشد، برای تعیین دمای جسم تابش کننده استفاده کرد. به خصوص از این قانون می‌توان برای تخمین دمای ستارگان (یا اجسام تابان) از روی تابش آنها استفاده کرد که در قسمت (ب) نشان داده شده است. از (۱۵-۱) به دست می‌آوریم:

$$\nu_{\max} = \frac{c}{\lambda_{\max}} = \frac{4,9663}{h} k T \quad (16-1)$$

این رابطه نشان می‌دهد که قله‌ی طیف تابش در بسامدی که متناسب با دما است، روی می‌دهد. (ب) اگر تابش گسیل شده از ستاره شدت بیشینه‌ای در طول موج  $\lambda_{\max} = 446 \text{ nm}$  داشته باشد آنگاه دمای سطح آن از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$T = \frac{2898,9 \times 10^{-6} \text{ mK}}{446 \times 10^{-9} \text{ m}} \approx 6500 \text{ K} \quad (17-1)$$

با استفاده از قانون استفان-بولتزمن (۱-۱) و این فرض که ستاره مانند یک جسم سیاه تابش می‌کند،

می‌توانیم توان کل در واحد سطح گسیل شده در سطح ستاره را تخمین بزنیم:

$$P = \sigma T^4 = 5,67 \times 10^{-8} \text{Wm}^{-2}\text{K}^{-4} \times (6500 \text{K})^4 \simeq 10,12 \times 10^6 \text{Wm}^{-2} \quad (18-1)$$

این شدت، شدت بسیار زیادی است که با پخش شدن در فضا کاهش خواهد یافت. (پ) طول موج بزرگ‌ترین شدت تابش گسیل شده از یک رشته‌ی تنگستن تابان با دمای  $3300 \text{K}$  برابر است با

$$\lambda_{\max} = \frac{2898,9 \times 10^{-6} \text{mK}}{3300 \text{K}} \simeq 878,45 \text{nm} \quad (19-1)$$

شدت (یا توان کل در واحد سطح) تابیده شده از این رشته از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

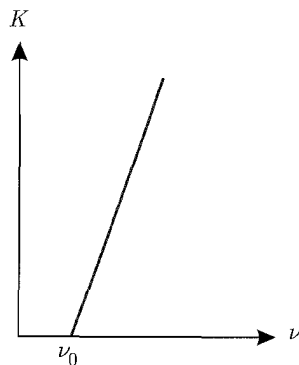
$$P = \sigma T^4 = 5,67 \times 10^{-8} \text{Wm}^{-2}\text{K}^{-4} \times (3300 \text{K})^4 \simeq 6,7 \times 10^6 \text{Wm}^{-2} \quad (20-1)$$

## ۲-۲-۱ اثر فتوالکتریک

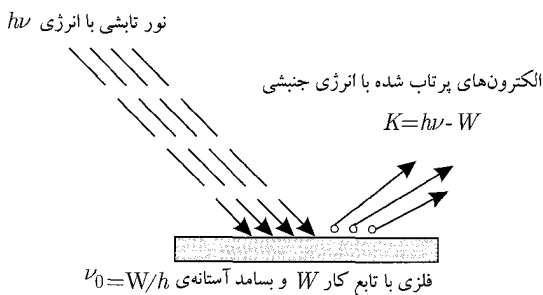
اثر فتوالکتریک تأییدی مستقیم برای کوانتس انرژی نور را فراهم می‌کند. هرگز در سال ۱۸۸۷ اثر فتوالکتریک را کشف کرد: هنگامی که نور به فلزات تابیده می‌شود، الکترون‌ها<sup>۷</sup> از آنها خارج می‌شوند (شکل ۱-۳ الف). علاوه بر این تا قبل از سال ۱۹۰۵ قانون‌های تجربی زیر کشف شده بودند:

- اگر بسامد تابش فرودی کوچک‌تر از بسامد آستانه‌ی فلز باشد (بسامدی که به ویژگی‌های فلز بستگی دارد) آنگاه صرف‌نظر از شدت تابش نمی‌توان الکترونی را گسیل کرد (فیلیپ لنارد ۱۹۰۲).
- پایین بودن شدت تابش فرودی اهمیتی ندارد و الکترون‌ها بی‌درنگ پس از آن که بسامد تابش از بسامد آستانه‌ی  $\nu_0$  تجاوز کند، خارج می‌شوند.
- در هر بسامد بالای  $\nu_0$  تعداد الکترون‌های خارج شده با افزایش شدت نور افزایش می‌یابد اما به بسامد نور بستگی ندارد.
- انرژی جنبشی الکترون‌های خارج شده به بسامد باریکه‌ی فرودی بستگی دارد اما به شدت باریکه بستگی ندارد. انرژی جنبشی الکترون خارج شده به صورت خطی با بسامد باریکه‌ی فرودی افزایش می‌یابد.

نمی‌توان این یافته‌های تجربی را صرفاً در چارچوب تصویر کلاسیکی تابش (به خصوص وابستگی اثر فتوالکتریک به بسامد آستانه) توضیح داد. مطابق با فیزیک کلاسیک، هر مقدار (پیوسته‌ی) انرژی می‌تواند <sup>۷</sup> ج.ج. تامسون در سال ۱۸۹۹ تأیید کرد که ذره‌هایی که باعث اثر فتوالکتریک می‌شوند (یعنی ذره‌هایی که از فلزات خارج می‌شوند) الکترون‌ها هستند.



(ب)



(الف)

شکل ۱-۳ (الف) اثر فتوالکتریک: هنگامی که یک فلز در معرض تابش نور قرار می‌گیرد، الکترون‌ها می‌توانند گسیل شوند. (ب) انرژی جنبشی  $K$  الکترونی که فلز را ترک می‌کند، هنگامی که فلز در معرض تابش نوری با بسامد  $\nu$  قرار می‌گیرد. هنگامی که  $\nu < \nu_0$  است، صرف‌نظر از شدت تابش، هیچ الکترونی از فلز خارج نمی‌شود.

با ماده مبادله شود. یعنی چون شدت یک موج الکترومغناطیسی متناسب با مجذور دامنه‌ی آن است، هر بسامد با شدت کافی می‌تواند انرژی لازم برای آزاد کردن الکترون از فلز را فراهم کند. اما هنگامی که از یک منبع نور ضعیف استفاده شود چه اتفاقی می‌افتد؟ مطابق با فیزیک کلاسیک، الکترون تا زمانی که جذب انرژی (با آهنگی پیوسته) ادامه می‌دهد که مقدار انرژی کافی را به دست آورد و سپس فلز را ترک می‌کند. اگر این موضوع صادق باشد در این صورت هنگام استفاده از تابش بسیار ضعیف، اثر فتوالکتریک برای مدت زمان طولانی (شاید ساعت‌ها) روی نمی‌دهد تا زمانی که یک الکترون به تدریج مقدار لازم انرژی را ذخیره کند. این نتیجه، کاملاً با مشاهده‌ی تجربی در تضاد است. آزمایش‌هایی با یک منبع نور که آنقدر ضعیف بود که ساعت‌ها طول می‌کشید تا یک الکترون انرژی لازم برای خروج از فلز را به دست آورد، انجام شد اما مشاهده شد که برخی از الکترون‌ها به صورت آنی فلز را ترک کردند. آزمایش‌های بیشتر نشان داد که افزایش شدت (روشنایی)، به هیچ وجه به تنهایی نمی‌تواند الکترون‌ها را از فلز خارج کند. اما با افزایش بسامد تابش فرودی به بیش از یک آستانه‌ی مشخص (حتی در شدت بسیار ضعیف) گسیل الکترون‌ها بی‌درنگ آغاز می‌شود. در واقع این حقایق تجربی نشان می‌دهند که مفهوم انبارش تدریجی (یا جذب پیوسته‌ی) انرژی به وسیله‌ی الکترون‌ها (به صورتی که به وسیله‌ی فیزیک کلاسیک پیش‌بینی می‌شد) نادرست است. انیشتین در سال ۱۹۰۵ با الهام از کوانتس تابش الکترومغناطیسی پلانک موفق شد تا توضیحی نظری برای وابستگی گسیل فتوالکتریک به بسامد تابش فرودی ارائه دهد. او فرض کرد که نور از بسته‌هایی که هر یک انرژی  $h\nu$  را حمل می‌کنند (و فوتون نامیده می‌شوند) تشکیل شده است. هنگامی که یک باریکه‌ی نور با بسامد  $\nu$  بر یک فلز فرود می‌آید، هر فوتون تمام انرژی  $h\nu$  خود را به یک الکترون نزدیک سطح می‌دهد. در این فرآیند، فوتون به صورت کامل به وسیله‌ی الکترون جذب می‌شود. بنابراین الکترون انرژی را صرف‌نظر

از شدت تابش فرودی، تنها به صورت کوانتوم‌های انرژی  $h\nu$  جذب می‌کند. اگر  $h\nu$  بزرگ‌تر از تابع کار  $W$  فلز (انرژی لازم برای خارج ساختن الکترون از فلز- هر فلز الکترون‌های آزادی دارد که از یک اتم به اتم دیگر می‌روند. کمینه‌ی انرژی لازم برای آزاد کردن الکترون از فلز، تابع کار آن فلز نامیده می‌شود) باشد آنگاه الکترون از فلز کنده می‌شود. بنابراین نمی‌توان الکترونی را از سطح فلز گسیل کرد مگر آن که  $h\nu > W$  باشد:

$$h\nu = W + K \quad (۲۱-۱)$$

که در آن  $K$  انرژی جنبشی الکترونی است که فلز را ترک می‌کند.

معادله‌ی (۲۱-۱) (که انیشتین آن را به دست آورد) توضیحی درست برای این مشاهده‌ی تجربی است که انرژی جنبشی الکترون خارج شده به صورت خطی با بسامد فرودی  $\nu$  افزایش می‌یابد (شکل ۱-۳ ب).

$$K = h\nu - W = h(\nu - \nu_0) \quad (۲۲-۱)$$

که در آن  $\nu_0 = W/h$  بسامد آستانه یا بسامد قطع فلز نامیده می‌شود. علاوه بر این رابطه به وضوح نشان می‌دهد که چرا نمی‌توان الکترونی را از فلز خارج کرد مگر این که  $\nu > \nu_0$  باشد: چون انرژی جنبشی نمی‌تواند منفی باشد، هنگامی که  $\nu < \nu_0$  است صرف نظر از شدت تابش، اثر فتوالکتریک نمی‌تواند رخ دهد. الکترون‌های خارج شده انرژی جنبشی خود را از انرژی اضافی  $h(\nu - \nu_0)$  که به وسیله‌ی تابش فرودی تأمین می‌شود، به دست می‌آورند.

می‌توان انرژی جنبشی الکترون‌های گسیل شده را به صورت تجربی و به صورتی که در ادامه می‌آید، تعیین کرد. دستگاه (که به وسیله‌ی لئارد ابداع شد) از فلز فتوالکتریکی تشکیل شده است که در نزدیکی آند و درون یک لوله‌ی شیشه‌ای خلاء قرار دارد. هنگامی که نور به سطح کاتد برخورد می‌کند، الکترون‌های خارج شده جذب آند می‌شوند و جریان فتوالکتریک را تولید می‌کنند. معلوم شده است که اندازه‌ی جریان فتوالکتریک تولید شده متناسب با شدت تابش فرودی است ولی سرعت الکترون‌ها به شدت تابش بستگی ندارد بلکه به بسامد آن بستگی دارد. برای اندازه‌گیری انرژی جنبشی الکترون‌ها تنها باید از یک منبع ولتاژ متغیر استفاده کرد و پایانه‌ها را معکوس نمود. هنگامی که پتانسیل  $V$  در لوله معکوس می‌شود، از رسیدن الکترون‌های آزاد شده به آند جلوگیری می‌شود. تنها الکترون‌های با انرژی جنبشی بزرگ‌تر از  $e|V|$  به صفحه‌ی منفی می‌رسند و در جریان سهمیم‌اند.  $V$  را تغییر می‌دهیم تا به مقدار  $V_s$  که پتانسیل ترمزی نامیده می‌شود برسد و در این مقدار تمام الکترون‌ها (حتی پراثری‌ترین آنها) پیش از رسیدن به جمع‌کننده برگردانده می‌شوند. بنابراین شارش جریان فتوالکتریک به طور کامل متوقف می‌شود. پتانسیل ترمزی  $V_s$  با رابطه‌ی  $e|V_s| = \frac{1}{2}m_e v^2 = K$  به انرژی جنبشی الکترون مربوط می‌شود (در ادامه  $V_s$  به طور صریح  $|V_s|$  را نشان می‌دهد). بنابراین رابطه‌ی (۲۲-۱) به صورت  $eV_s = h\nu - W$  یا

$$V_s = \frac{h}{e}\nu - \frac{W}{e} = \frac{hc}{e\lambda} - \frac{W}{e} \quad (۲۳-۱)$$

در می‌آید. شکل نمودار  $V_s$  برحسب بسامد (بسیار شبیه به شکل ۱-۳ ب با شیبی که اکنون با  $h/e$  داده می‌شود) یک خط راست است. این نشان می‌دهد که پتانسیل ترمزی به صورت خطی به بسامد تابش فرودی بستگی دارد.

در سال ۱۹۱۶ میلکان تأییدی تجربی و سیستماتیک برای نظریه‌ی فتوالکتریک انیشتین ارائه کرد. وی مجموعه‌ی گسترده‌ای از داده‌های فتوالکتریک را با استفاده از فلزات گوناگون به وجود آورد و ثابت کرد که رابطه‌ی انیشتین (۱-۲۳) دقیقاً با داده‌هایش همخوانی دارد. همچنین میلیکان دریافت که مقدار تجربی  $h$  او (که با اندازه‌گیری شیب  $h/e$  رابطه‌ی (۱-۲۳) به دست آورده بود (شکل ۱-۳ ب)) با خطای تجربی ۰/۵٪ برابر با ثابت پلانک است.

به صورت خلاصه، اثر فتوالکتریک مدرکی بسیار جالب برای طبیعت ذره‌ای تابش الکترومغناطیسی فراهم می‌کند.

### مثال ۱-۲ (تخمین ثابت پلانک)

هنگامی که دو باریکه‌ی ماوراء بنفش با طول موج‌های  $\lambda_1 = 80 \text{ nm}$  و  $\lambda_2 = 110 \text{ nm}$  به یک سطح سربی برخورد می‌کنند، به ترتیب فتوالکترن‌هایی با انرژی بیشینه‌ی  $11,390 \text{ eV}$  و  $7,154 \text{ eV}$  تولید می‌کنند.

(الف) مقدار عددی ثابت پلانک را تخمین بزنید.

(ب) تابع کار، بسامد و طول موج قطع سرب را محاسبه کنید.

حل

(الف) از (۱-۲۲) می‌توانیم انرژی جنبشی الکترون‌های گسیل شده را به صورت  $K_1 = hc/\lambda_1 - W$

و  $K_2 = hc/\lambda_2 - W$  بنویسیم. اختلاف بین این دو عبارت از رابطه‌ی  $K_1 - K_2 = hc(\lambda_2 - \lambda_1)/(\lambda_1\lambda_2)$  به دست می‌آید و بنابراین

$$h = \frac{K_1 - K_2}{c} \frac{\lambda_1\lambda_2}{\lambda_2 - \lambda_1} \quad (1-24)$$

چون  $1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$  است، مقدار عددی  $h$  برابر است با

$$h = \frac{(11,390 - 7,154) \times 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}}{3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}} \times \frac{(80 \times 10^{-9} \text{ m})(110 \times 10^{-9} \text{ m})}{110 \times 10^{-9} \text{ m} - 80 \times 10^{-9} \text{ m}} \\ \approx 6.627 \times 10^{-34} \text{ Js} \quad (1-25)$$

که در واقع یک نتیجه‌ی بسیار دقیق است.

(ب) می‌توان تابع کار فلز را از یکی از دو داده به‌دست آورد:

$$W = \frac{hc}{\lambda_1} - K_1 = \frac{6,627 \times 10^{-34} \text{ Js} \times 3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}}{80 \times 10^{-9} \text{ m}} - 11,390 \times 1,6 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$= 6,627 \times 10^{-19} \text{ J} = 4,14 \text{ eV} \quad (26-1)$$

بسامد قطع و طول موج سرب برابرند با

$$\nu_0 = \frac{W}{h} = \frac{6,627 \times 10^{-19} \text{ J}}{6,627 \times 10^{-34} \text{ Js}} = 10^{15}, \quad \lambda_0 = \frac{c}{\nu_0} = \frac{3 \times 10^8 \text{ m/s}}{10^{15} \text{ Hz}} = 300 \text{ nm} \quad (27-1)$$

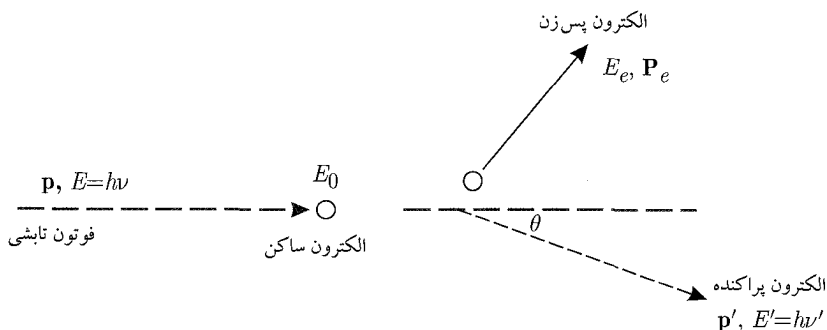
### ۳-۲-۱ اثر کامپتون

در سال ۱۹۲۳ کامپتون در یک آزمایش قاطع‌ترین تأیید جنبه‌ی ذره‌ای تابش را فراهم کرد. او با پراکنده کردن پرتوهای  $x$  توسط الکترون‌های آزاد دریافت که طول موج تابش پراکنده شده بزرگ‌تر از طول موج تابش فرودی است. این پدیده را تنها می‌توان با این فرض که فوتون‌های پرتو  $x$  مانند ذره رفتار می‌کنند، توضیح داد.

در اینجا موضوع مطالعه‌ی چگونگی پراکندگی پرتوهای  $x$  و کنده شدن الکترون‌ها است. مطابق با فیزیک کلاسیک، تابش فرودی و پراکنده شده باید طول موج یکسانی داشته باشند. می‌توان این مطلب را به این صورت در نظر گرفت که از نظر کلاسیکی چون انرژی تابش پرتو  $x$  خیلی بیشتر از آن است که به وسیله‌ی یک الکترون آزاد جذب شود بنابراین پرتو  $x$  فرودی یک میدان الکتریکی نوسانی ایجاد می‌کند که الکترون را به حرکت نوسانی در می‌آورد و بنابراین الکترون را و می‌دارد تا نوری با همان طول موج اما با یک شدت  $I$  که به شدت تابش فرودی  $I_0$  بستگی دارد (یعنی  $I \propto I_0$ ) تابش کند. هیچکدام از این دو پیش‌بینی فیزیک کلاسیک با آزمایش سازگار نیستند. یافته‌های تجربی کامپتون معلوم می‌کنند که طول موج تابش  $x$  پراکنده شده به اندازه‌ی  $\Delta\lambda$  (که جابه‌جایی طول موج نامیده می‌شود) افزایش می‌یابد و  $\Delta\lambda$  به شدت تابش فرودی بستگی نداشته بلکه به زاویه‌ی پراکندگی بستگی دارد.

کامپتون تنها پس از در نظر گرفتن تابش فرودی به صورت جریانی از ذره‌ها (فوتون‌ها) که به صورت کشسان با الکترون‌های منفرد برخورد می‌کنند، موفق شد تا نتیجه‌های تجربی خود را توجیه کند. در این فرآیند پراکندگی که می‌توان آن را با پراکندگی کشسان یک فوتون از یک الکترون آزاد<sup>۸</sup> (شکل ۱-۴) نشان داد، می‌توان از قوانین برخورد‌های کشسان (به‌خصوص پایستگی انرژی و تکانه) کمک گرفت.

۸. هنگامی که یک فلز در معرض تابش با انرژی بالا (و در بسامدهای به اندازه‌ی کافی بالا مانند پرتوهای  $x$ ) قرار می‌گیرد به صورتی که  $h\nu$  بسیار بزرگ‌تر از انرژی بستگی الکترون‌های فلز است، می‌توان این الکترون‌ها را به صورت آزاد در نظر گرفت.



شکل ۴-۱ پراکندگی کامپتون یک فوتون (با انرژی  $h\nu$  و تکانه  $\mathbf{p}$ ) از یک الکترون آزاد ساکن. فوتون پس از برخورد در زاویه  $\theta$  و با انرژی  $h\nu'$  پراکنده می‌شود.

فرض کنید فوتون فرودی (با انرژی  $E = h\nu$  و تکانه  $p = h\nu/c$ ) به یک الکترون که در ابتدا ساکن است، برخورد می‌کند. اگر فوتون با تکانه  $\mathbf{p}'$  و در زاویه  $\theta$  پراکنده شود<sup>۹</sup> و الکترون با تکانه  $\mathbf{P}_e$  پس زده شود آنگاه پایستگی تکانه خطی نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\mathbf{p} = \mathbf{P}_e + \mathbf{p}' \quad (28-1)$$

که به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\mathbf{P}_e^2 = (\mathbf{p} - \mathbf{p}')^2 = p^2 + p'^2 - 2pp' \cos \theta = \frac{h^2}{c^2} (\nu^2 + \nu'^2 - 2\nu\nu' \cos \theta) \quad (29-1)$$

حال بیایید به پایستگی انرژی برگردیم. انرژی الکترون قبل و بعد از برخورد به ترتیب از رابطه‌های زیر به دست می‌آید:

$$E_0 = m_e c^2 \quad (30-1)$$

$$E_e = \sqrt{\mathbf{P}_e^2 + m_e^2 c^4} = h \sqrt{\nu^2 + \nu'^2 - 2\nu\nu' \cos \theta + \frac{m_e^2 c^4}{h^2}} \quad (31-1)$$

در به دست آوردن این رابطه از (۲۹-۱) استفاده کرده‌ایم. چون انرژی فوتون‌های فرودی و پراکنده شده به ترتیب از  $E = h\nu$  و  $E' = h\nu'$  به دست می‌آیند، پایستگی انرژی ایجاب می‌کند که

$$E + E_0 = E' + E_e \quad (32-1)$$

یا

$$h\nu + m_e c^2 = h\nu' + h \sqrt{\nu^2 + \nu'^2 - 2\nu\nu' \cos \theta + \frac{m_e^2 c^4}{h^2}} \quad (33-1)$$

۹. در اینجا  $\theta$  زاویه‌ی بین  $\mathbf{p}$  و  $\mathbf{p}'$  (تکانه‌های فوتون قبل و بعد از برخورد) است



که به نوبه‌ی خود به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\nu - \nu' + \frac{m_e c^2}{h} = \sqrt{\nu^2 + \nu'^2 - 2\nu\nu' \cos \theta + \frac{m_e^2 c^4}{h^2}} \quad (۳۴-۱)$$

با به توان دو رساندن هر دو طرف (۳۴-۱) و ساده کردن آن به رابطه‌ی پایانی زیر می‌رسیم:

$$\frac{1}{\nu'} - \frac{1}{\nu} = \frac{h}{m_e c^2} (1 - \cos \theta) = \frac{2h}{m_e c^2} \sin^2 \left( \frac{\theta}{2} \right) \quad (۳۵-۱)$$

بنابراین جابه‌جایی طول موج از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\Delta \lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta) = 2\lambda_C \sin^2 \left( \frac{\theta}{2} \right) \quad (۳۶-۱)$$

که در آن  $\lambda_C = h/(m_e c) = 2,426 \times 10^{-12} \text{ m}$  طول موج کامپتون الکترون نامیده می‌شود. این رابطه (که طول موج‌های اولیه و نهایی را به زاویه‌ی پراکندگی مرتبط می‌کند) مشاهده‌ی تجربی کامپتون را تأیید می‌کند: جابه‌جایی طول موج پرتوهای  $x$  تنها به زاویه‌ای که در آن پراکنده می‌شوند، بستگی دارد و به بسامد (یا طول موج) فوتون‌های فرودی وابسته نیست.

به صورت خلاصه، اثر کامپتون تأیید می‌کند که فوتون‌ها مانند ذره‌ها رفتار می‌کنند: فوتون‌ها مانند ذره‌های مادی به الکترون‌ها برخورد می‌کنند.

### مثال ۳-۱ (اثر کامپتون)

فوتون‌های با انرژی بالا (پرتوهای  $\gamma$ ) از الکترون‌هایی که در ابتدا در حال سکون بوده‌اند، پراکنده می‌شوند. فرض کنید فوتون‌ها پس پراکنده  $1^\circ$  می‌شوند و انرژی آنها بسیار بزرگ‌تر از انرژی سکون الکترون است ( $E \gg m_e c^2$ ).

(الف) جابه‌جایی طول موج را محاسبه کنید.

(ب) نشان دهید که انرژی فوتون‌های پراکنده شده نصف انرژی جرم سکون الکترون (صرف نظر از انرژی فوتون‌های فرودی) است.

(پ) اگر انرژی فوتون‌های فرودی  $15^\circ \text{ MeV}$  باشد انرژی جنبشی پس‌زنی الکترون را محاسبه کنید.

حل

(الف) در حالتی که در آن فوتون‌ها پس پراکنده می‌شوند (یعنی  $\theta = \pi$ )، جابه‌جایی طول موج (۳۶-۱) به صورت زیر در می‌آید:

$$\Delta \lambda = \lambda' - \lambda = 2\lambda_C \sin^2 \left( \frac{\pi}{2} \right) = 2\lambda_C = 4,86 \times 10^{-12} \text{ m} \quad (۳۷-۱)$$

زیرا  $\lambda_C = h/(m_e c) = 2,426 \times 10^{-12} \text{m}$

(ب) چون انرژی فوتون‌های پراکنده شده  $E'$  به وسیله‌ی رابطه‌ی  $E' = hc/\lambda$  به طول موج  $\lambda'$  مربوط است، معادله‌ی (۳۷-۱) نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$E' = \frac{hc}{\lambda'} = \frac{hc}{\lambda + 2h/(m_e c)} = \frac{m_e c^2}{m_e c^2 \lambda / (hc) + 2} = \frac{m_e c^2}{m_e c^2 / E + 2} \quad (38-1)$$

که در آن  $E = hc/\lambda$  انرژی فوتون‌های فرودی است. اگر  $E \gg m_e c^2$  باشد آنگاه می‌توانیم (۳۸-۱) را به صورت زیر تخمین بزنیم:

$$E' = \frac{m_e c^2}{2} \left[ 1 + \frac{m_e c^2}{2E} \right]^{-1} \simeq \frac{m_e c^2}{2} - \frac{(m_e c^2)^2}{4E} \simeq \frac{m_e c^2}{2} = 0,25 \text{MeV} \quad (39-1)$$

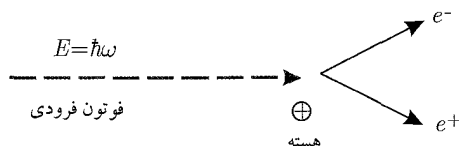
(پ) اگر  $E = 150 \text{MeV}$  باشد آنگاه می‌توان انرژی جنبشی الکترون‌های پس‌زده را از پایستگی انرژی به دست آورد:

$$K_e = E - E' \simeq 150 \text{MeV} - 0,25 \text{MeV} = 149,75 \text{MeV} \quad (40-1)$$

## ۴-۲-۱ تولید زوج

در اینجا با فرآیند فیزیکی دیگری سروکار داریم که تأیید می‌کند تابش (فوتون) ویژگی ذره‌ای دارد. نظریه‌ی مکانیک کوانتومی که شرودینگر و هایزنبرگ پیشنهاد کردند تنها برای پدیده‌های غیرنسبیتی برقرار است. این نظریه (که مکانیک کوانتومی غیرنسبیتی نامیده می‌شود) در توضیح محدوده‌ی وسیعی از چنین پدیده‌هایی بسیار موفق بود. دیراک در سال ۱۹۲۸ با ترکیب نسبیت خاص و مکانیک کوانتومی موفق شد تا مکانیک کوانتومی را به قلمرو پدیده‌های نسبیتی گسترش دهد. این نظریه‌ی جدید (که مکانیک کوانتومی نسبیتی نامیده می‌شود) وجود یک ذره‌ی جدید (پوزیترون) را پیش‌بینی کرد. پیش‌بینی می‌شد که این ذره (که به عنوان پادذره‌ی الکترون تعریف می‌شود) جرمی برابر با جرم الکترون و باری هم‌اندازه اما مخالف (مثبت) بار الکترون داشته باشد.

چهار سال پس از پیش‌بینی وجود این ذره به وسیله‌ی مکانیک کوانتومی نسبیتی دیراک، پوزیترون به وسیله‌ی اندرسون در سال ۱۹۳۲ و در حالی که وی در حال مطالعه‌ی ردهای به جا مانده به وسیله‌ی پروتوهای کیهانی در یک اتاقک ابر بود، کشف شد. هنگامی که تابش الکترومغناطیسی با بسامد بالا از داخل یک فویل (ورقه‌ی نازک فلزی) عبور می‌کند، فوتون‌های منفرد این تابش با تولید یک جفت ذره‌ی متشکل از یک الکترون ( $e^-$ ) و یک پوزیترون ( $e^+$ ) ناپدید می‌شوند:  $e^- + e^+ \rightarrow$  فوتون. این فرآیند



شکل ۵-۱ تولید زوج: یک فوتون پرانرژی که با هسته برهمکنش دارد، ناپدید می‌شود و یک الکترون و یک پوزیترون را تولید می‌کند.

تولید زوج نامیده می‌شود. اندرسون یک چنین فرآیندی را با در معرض قراردادن یک فویل یا ورقه‌ی نازک سربی در مقابل اشعه کیهانی [که از فضای خارج می‌آید و محتوی پرتوهای  $x$  پرانرژی است]. به وجود آورد. تلاش برای توضیح پدیده‌ی تولید زوج توسط فیزیک کلاسیک بی‌فایده است زیرا حتی مکانیک کوانتومی غیرنسبیتی هم به کلی در توجیه آن با ناکامی روبرو می‌شود.

به دلیل پایستگی بار، تکانه و انرژی، تولید زوج نمی‌تواند در فضای خالی روی دهد. برای این که فرآیند  $e^- + e^+ \rightarrow$  فوتون روی دهد، فوتون باید با یک میدان خارجی مانند میدان کولنی هسته‌ی یک اتم برای جذب مقداری از تکانه‌ی آن برهمکنش داشته باشد. در واکنش رسم شده در شکل ۵-۱ یک جفت الکترون-پوزیترون زمانی تولید می‌شود که فوتون به یک هسته‌ی ساکن نزدیک می‌شود (و با آن برهمکنش می‌کند). پایستگی انرژی ایجاب می‌کند که داشته باشیم:

$$\begin{aligned} \hbar\omega &= E_{e^-} + E_{e^+} + E_N = (m_e c^2 + k_{e^-}) + (m_e c^2 + k_{e^+}) + K_N \\ &\simeq 2m_e c^2 + k_{e^-} + k_{e^+} \end{aligned} \quad (4-1)$$

که در آن انرژی فوتون فرودی،  $2m_e c^2$  مجموع جرم‌های سکون الکترون و پوزیترون و  $k_{e^-}$  و  $k_{e^+}$  به ترتیب انرژی‌های جنبشی الکترون و پوزیترون هستند. در رابطه با  $E_N = K_N$  باید گفت که این تساوی انرژی پس‌زنی هسته را نشان می‌دهد که صرفاً جنبشی است. چون هسته در مقایسه با الکترون و پوزیترون بسیار سنگین است، با تقریب خوبی می‌توان از  $K_N$  صرف‌نظر کرد. توجه داشته باشید که فوتون نمی‌تواند یک الکترون یا پوزیترون تنها را تولید کند زیرا بار الکتریکی پایسته نمی‌ماند. همچنین یک جسم سنگین (مانند هسته) باید برای کاهش مقداری از تکانه‌ی فوتون در فرآیند شرکت کند.

عکس فرآیند تولید زوج (که نابودی زوج نامیده می‌شود) نیز روی می‌دهد. به عنوان مثال هنگامی که یک الکترون و یک پوزیترون با هم برخورد می‌کنند، یکدیگر را نابود می‌کنند و موجب تابش الکترومغناطیسی می‌شوند<sup>۱۱</sup>: فوتون  $e^- + e^+ \rightarrow$ . این فرآیند می‌تواند توضیح دهد که چرا پوزیترون‌ها عمر زیادی در طبیعت ندارند. هنگامی که یک پوزیترون در یک فرآیند تولید زوج به وجود می‌آید عبور آن از درون ماده<sup>۱۱</sup>. هنگامی که یک زوج الکترون-پوزیترون نابود می‌شود، دست کم دو فوتون که دارای انرژی  $0.511 \text{ MeV} = m_e c^2$  هستند، را تولید می‌کنند.

مقداری از انرژی آن را کم می‌کند و سرانجام پس از برخورد با یک الکترون نابود می‌شود. برخورد یک پوزیترون با یک الکترون، یک اتم هیدروژن‌گونه (که پوزیترونیم نامیده می‌شود) را با عمر میانگین حدود  $10^{-10}$  s تولید می‌کند. پوزیترونیم مانند اتم هیدروژن است که پوزیترون جایگزین پروتون شده است. به یاد داشته باشید که برخلاف تولید زوج انرژی و تکانه می‌توانند به صورت همزمان در فرایندهای نابودی زوج (بدون حضور میدان خارجی) یا جرم، همانند هسته پایسته بمانند.

فرآیند تولید زوج نتیجه مستقیمی از معادله جرم-انرژی انیشتین  $E = mc^2$  است که بیان می‌کند که می‌توان انرژی صرف را به جرم تبدیل کرد و برعکس. به عکس، نابودی زوج در نتیجه تبدیل جرم به انرژی صرف روی می‌دهد. تمام ذره‌های زیراتمی نیز پادذره دارند (مانند پادپروتون). حتی ذره‌های خنثی نیز پادذره دارند به عنوان مثال پادنوترون پادذره نوترون است. اگرچه این کتاب تنها به مکانیک کوانتومی غیرنسبیتی می‌پردازد ولی فرایندهای تولید زوج و نابودی زوج (که فرایندهایی نسبیتی هستند) را هم بررسی کردیم تا صرفاً نشان دهیم که چگونه تابش با ماده برهمکنش دارد و همچنین این واقعیت را نشان دهیم که نظریه کوانتومی شرودینگر و هایزنبرگ تنها محدود به پدیده‌های غیرنسبیتی هستند.

#### مثال ۱-۴ (کمینه انرژی برای تولید زوج)

کمینه انرژی یک فوتون برای این که به یک زوج الکترون-پوزیترون تبدیل شود را محاسبه کنید. بسامد و طول موج فوتون را بیابید.

حل

انرژی کمینه  $E_{\min}$  لازم برای یک فوتون برای تولید یک زوج الکترون-پوزیترون باید با مجموع انرژی‌های سکون الکترون و پوزیترون برابر باشد. این متناظر با حالتی است که در آن انرژی‌های جنبشی الکترون و پوزیترون صفرند. معادله (۱-۴۱) نتیجه زیر را می‌دهد:

$$E_{\min} = 2m_e c^2 = 2 \times 0.511 \text{ MeV} = 1.02 \text{ MeV} \quad (42-1)$$

اگر انرژی فوتون کوچک‌تر از  $1.02 \text{ MeV}$  باشد آنگاه زوجی تولید نخواهد شد. می‌توان بسامد و طول موج فوتون را بی‌درنگ از رابطه‌های  $E_{\min} = h\nu$  و  $\lambda = c/\nu$  به دست آورد:

$$\begin{aligned} \nu &= \frac{2m_e c^2}{h} = \frac{2 \times 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg} \times (3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1})^2}{6.63 \times 10^{-34} \text{ Js}} \\ &= 2.47 \times 10^{14} \text{ Hz} \end{aligned} \quad (43-1)$$

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}}{2.47 \times 10^{14} \text{ Hz}} = 1.2 \times 10^{-12} \text{ m} \quad (44-1)$$

## ۳-۱ جنبه‌ی موجی ذره‌ها

## ۱-۳-۱ فرضیه‌ی دوبروی: موج‌های مادی

همانطور که در بالا بحث شد (اثر فتوالکتریک، اثر کامپتون و اثر تولید زوج)، تابش علاوه بر طبیعت موجی خود، مشخصه‌های ذره‌گونه را نیز نشان می‌دهد. در سال ۱۹۲۳ دوبروی با این پیشنهاد که این دوگانگی موج-ذره محدود به تابش نیست و باید جهانی باشد، پا را فراتر نهاد: تمام ذره‌های مادی نیز باید رفتار دوگانه‌ی موج-ذره را از خود نشان دهند یعنی دوگانگی موج-ذره در نور باید در ماده نیز وجود داشته باشد. بنابراین با شروع از تکانه‌ی یک فوتون  $p = h\nu/c = h/\lambda$  می‌توانیم این رابطه را به هر ذره‌ی مادی<sup>۱۲</sup> با جرم غیرصفر تعمیم دهیم: هر ذره‌ی مادی با تکانه‌ی  $\mathbf{p}$  مانند دسته‌ای از موج‌ها رفتار می‌کند (موج‌های مادی) که طول موج  $\lambda$  و بردار موج  $\mathbf{k}$  آنها تحت کنترل سرعت و جرم است:

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar} \quad (۴۵-۱)$$

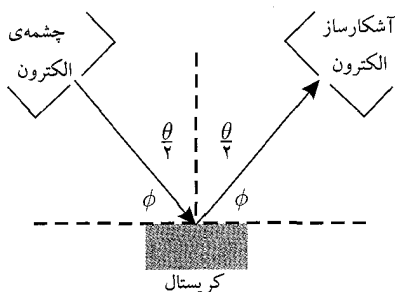
که در آن  $\hbar = h/2\pi$  است. عبارت (۴۵-۱) که به عنوان رابطه‌ی دوبروی شناخته می‌شود، تکانه‌ی یک ذره را به طول موج و بردار موج متناظر با آن ذره مرتبط می‌کند.

## ۲-۳-۱ تأیید تجربی فرضیه‌ی دوبروی

در سال ۱۹۲۷ ایده‌ی دوبروی به صورت تجربی به وسیله‌ی دیویسون و ژرمر (و بعدها به وسیله‌ی تامسون) که طرح‌های تداخلی را با الکترون به دست آوردند، تأیید شد.

## ۱-۲-۳-۱ آزمایش دیویسون-ژرمر

دیویسون و ژرمر در آزمایش خود باریکه‌ای از الکترون‌های با انرژی  $۵۴\text{eV}$  را از بلور نیکل (Ni) پراکنده کردند. همانطور که در شکل ۶-۱ نشان داده شده است، منبع الکترون‌ها و آشکارساز الکترون‌ها به صورت متقارن نسبت به خط عمود بر سطح بلور قرار دارند. این آزمایش مشابه آزمایش براگ برای پراش پرتو  $x$  به وسیله‌ی یک توری است. آنها دریافتند که اگرچه الکترون‌ها در تمامی جهات از بلور پراکنده می‌شوند اما شدت در  $\theta = ۳۵^\circ$  کمینه و در  $\theta = ۵^\circ$  بیشینه است یعنی توده‌ی الکترون‌ها تنها در جهت‌های کاملاً مشخصی پراکنده می‌شوند. آنها نشان دادند که این طرح حتی زمانی که شدت باریکه آنقدر پایین است که الکترون‌های فرودی به صورت انفرادی فرستاده می‌شدند نیز برقرار است. این پدیده را تنها می‌توان از تداخل سازنده‌ی الکترون‌های پراکنده شده نتیجه گرفت. بنابراین به جای الگوی توزیع پخشی که از ذره‌های مادی نتیجه می‌شود، الکترون‌های بازتابیده طرح‌های پراشی را تشکیل دادند که با پراش پرتو  $x$  براگ به وسیله‌ی ۱۲. در فیزیک کلاسیک، یک ذره با انرژی  $E$  و تکانه‌ی  $\mathbf{p}$  مشخص می‌شود در حالی که یک موج با طول موج  $\lambda$  و بردار موج  $\mathbf{k} = (2\pi/\lambda)\hat{n}$  مشخص می‌شود که در آن  $\hat{n}$  بردار باریکه‌ای است که جهت انتشار موج را نشان می‌دهد.



شکل ۶-۱ آزمایش دیویسون-ژرمر: الکترون‌ها در زاویه  $\phi$  به سطح فلز برخورد می‌کنند. آشکارساز به صورت متقارن نسبت به منبع الکترون واقع شده است و تعداد الکترون‌هایی که در زاویه  $\theta$  پراکنده شده‌اند را اندازه‌گیری می‌کند.  $\theta$  زاویه بین باریکه‌های الکترونی فرودی و پراکنده شده است.

یک توری یکسان بود. در واقع بیشینه‌ی شدت الکترون‌های پراکنده شده در آزمایش دیویسون-ژرمر متناظر با نخستین بیشینه‌ی ( $n = 1$ ) فرمول براگ است:

$$n\lambda = 2d \sin \phi \quad (۴۶-۱)$$

که در آن  $d$  فاصله‌ی بین صفحه‌های براگ،  $\phi$  زاویه‌ی بین پرتوی فرودی و صفحه‌های بازتابان بلور و در آخر،  $\theta$  زاویه‌ی بین باریکه‌ی فرودی است با باریکه‌ی پراکنده شده ( $d$  برحسب فاصله‌ی  $D$  بین لایه‌های اتمی مجاور در بلور و از رابطه‌ی  $d = D \sin \theta$  به دست می‌آید).

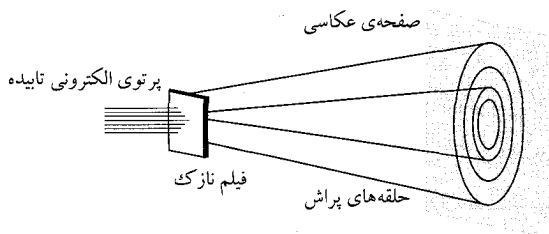
برای یک بلور نیکل داریم:  $d = 0.۰۹۱ \text{ nm}$  چرا که  $D = 0.۲۱۵ \text{ nm}$  است. چون تنها یک بیشینه در  $\theta = 50^\circ$  برای باریکه‌ای تک‌انرژی از الکترون‌ها با انرژی جنبشی  $54 \text{ eV}$  مشاهده می‌شود و چون  $\pi = 2\phi + \theta$  و در نتیجه  $\sin \phi = \cos(\theta/2)$  است (شکل ۶-۱)، می‌توانیم از (۴۶-۱) طول موج وابسته به الکترون‌های پراکنده شده را به دست آوریم:

$$\lambda = \frac{2d}{n} \sin \phi = \frac{2d}{n} \cos \frac{1}{2}\theta = \frac{2 \times 0.091 \text{ nm}}{1} \cos 25^\circ = 0.165 \text{ nm} \quad (۴۷-۱)$$

حال بیایید تا مقدار عددی  $\lambda$  را که از رابطه‌ی دوبروی نتیجه می‌شود، محاسبه کنیم. چون انرژی جنبشی الکترون‌ها برابر با  $K = 54 \text{ eV}$ ، تکانه برابر با  $p = \sqrt{2m_e K}$  با  $m_e c^2 = 0.511 \text{ MeV}$  (جرم سکون الکترون) و  $\hbar c \simeq 197.33 \text{ eV nm}$  است، می‌توانیم نشان دهیم که طول موج دوبروی برابر است با

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_e K}} = \frac{2\pi\hbar c}{\sqrt{2m_e c^2 K}} = 0.167 \text{ nm} \quad (۴۸-۱)$$

که در توافق بسیار خوبی با مقدار تجربی (۴۷-۱) است.



شکل ۷-۱ آزمایش تامسون: پراش الکترون‌ها از طریق فیلم نازکی که از یک ماده‌ی بس‌بلوری ساخته شده است، فریزهای را نتیجه می‌دهد که معمولاً از پراش نور نتیجه می‌شوند.

دیدیم که الکترون‌های پراکنده شده در آزمایش دیویسون-ژرمر فریزهای تداخلی‌ای را ایجاد کردند که با فریزهای تداخلی پراش پرتو  $x$  براگ یکسان بود. چون فرمول براگ پیش‌بینی دقیقی از فریزهای تداخلی الکترون‌ها را فراهم می‌کند بنابراین حرکت یک الکترون با تکانه‌ی  $\mathbf{p}$  باید به وسیله‌ی یک موج تخت توصیف شود:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} = Ae^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et/\hbar)} \quad (۴۹-۱)$$

که در آن  $A$  یک مقدار ثابت،  $\mathbf{k}$  بردار موج تخت و  $\omega$  بسامد زاویه‌ای آن است. پارامترهای موج  $\mathbf{k}$  و  $\omega$  به وسیله‌ی رابطه‌های دوبروی  $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$  و  $\omega = E/\hbar$  به تکانه‌ی  $\mathbf{p}$  و انرژی  $E$  الکترون مربوط می‌شوند. باید یادآوری کنیم که شرودینگر (با الهام از فرضیه‌ی دوبروی) نظریه‌ی مکانیک موجی را که به دینامیک ذره‌های میکروسکوپی می‌پردازد، بنیان نهاد. وی حرکت ذره‌ها را به وسیله‌ی یک تابع موج  $\psi(\mathbf{r}, t)$  که متناظر با موج دوبروی ذره است، توصیف کرد. در بخش بعد به تفسیر فیزیکی  $\psi(\mathbf{r}, t)$  خواهیم پرداخت.

### ۱-۲-۲-۲ آزمایش تامسون

در آزمایش تامسون (شکل ۷-۱) الکترون‌ها از طریق یک فیلم نازک چندبلوری پراشیده، و فریزهای پراش نیز مشاهده شدند. این نتیجه تأییدی دوباره بر رفتار موجی الکترون‌ها است.

آزمایش دیویسون-ژرمر الهام‌بخش دیگران برای به‌دست آوردن طرح‌های پراش با طیف وسیعی از ذره‌ها بود و طرح‌های تداخلی با ذره‌های بزرگ و بزرگ‌تر مانند نوترون‌ها، پروتون‌ها، اتم‌های هلیوم و مولکول‌های هیدروژن به‌دست آمدند. به تازگی تداخل موج دوبروی مولکول کربن  $60^\circ$  ( $C_{60}$ ) به وسیله‌ی پراش از یک توری جذبی مشاهده شده است.<sup>۱۳</sup> این مشاهدات دیدگاهی که هر مولکول  $C_{60}$  تنها با خودش تداخل می‌کند را تأیید کرد (مولکول  $C_{60}$  تقریباً یک جسم کلاسیکی است).

13. Markus Arndt, et al., "Wave-particle Duality of  $C_{60}$  Molecules," *Nature*, **V401**,n6754,680 (Oct. 14, 1999).

## ۱-۳-۳ موج‌های مادی اجسام ماکروسکوپی

دیدیم که ذره‌های میکروسکوپی (مانند الکترون‌ها) رفتاری موجی را به نمایش می‌گذارند. اما در مورد اجسام ماکروسکوپی چطور؟ آیا آنها نیز ویژگی‌های موجی را به نمایش می‌گذارند؟ در پاسخ باید با اطمینان گفت که بله. اگرچه ذره‌های ماکروسکوپی ویژگی‌های موجی را به نمایش می‌گذارند اما طول موج‌های متناظر برای آشکارسازی آنها بسیار کوچکند. اجسام ماکروسکوپی به دلیل جرم زیاد<sup>۱۴</sup> طول موج‌های بسیار کوچکی دارند. در سطح میکروسکوپی، موج‌های وابسته به ذره‌های مادی هم‌اندازه با اندازه‌ی سیستم هستند و یا از آن تجاوز می‌کنند بنابراین ذره‌های میکروسکوپی آشکارا جنبه‌ی قابل تشخیص موج-ذره را نشان می‌دهند.

این یک قاعده‌ی کلی است: هرگاه طول موج دوبروی یک جسم در محدوده‌ی (ویا بزرگ‌تر از) اندازه‌ی آن جسم باشد آنگاه طبیعت موجی آن جسم قابل آشکارسازی است و از این رو نمی‌توان از آن صرف نظر کرد. اما اگر طول موج دوبروی یک جسم بسیار کوچک‌تر از اندازه‌ی آن جسم باشد آنگاه رفتار موجی این جسم غیرقابل آشکارسازی خواهد بود. برای نشان دادن تصویری کمی از این قاعده‌ی کلی، بیایید در مثالی که در ادامه می‌آید، طول موج‌های متناظر با دو ذره (یکی میکروسکوپی و دیگری ماکروسکوپی) را محاسبه کنیم.

## مثال ۱-۵ (موج‌های مادی سیستم‌های میکروسکوپی و ماکروسکوپی)

طول موج دوبروی را برای مورد‌های زیر به دست آورید:

(الف) پروتونی با انرژی جنبشی  $70 \text{ MeV}$

(ب) یک گلوله‌ی  $100$  گرمی در حال حرکت با سرعت  $900 \text{ ms}^{-1}$ .

حل

(الف) چون انرژی جنبشی پروتون برابر با  $T = p^2 / (2m_p)$  است، تکانه‌ی آن برابر با  $p = \sqrt{2Tm_p}$  و طول موج دوبروی برابر با  $\lambda_p = h/p = h/\sqrt{2Tm_p}$  خواهد بود. برای محاسبه‌ی این کمیت به صورت عددی کافی است کمیت معروف  $\hbar c \simeq 197 \text{ MeV fm}$  و جرم سکون پروتون  $m_p c^2 = 938.3 \text{ MeV}$  که در آن  $c$  سرعت نور است را معرفی کنیم:

$$\begin{aligned} \lambda_p &= 2\pi \frac{\hbar c}{pc} = 2\pi \frac{\hbar c}{\sqrt{2Tm_p c^2}} = 2\pi \frac{197 \text{ MeV fm}}{\sqrt{2 \times 938.3 \times 70 \text{ MeV}^2}} \\ &= 3.4 \times 10^{-15} \text{ m} \quad (50-1) \end{aligned}$$

۱۴. جرم زیاد در مقابل ذره‌های میکروسکوپی، به عنوان مثال نسبت بین جرم یک الکترون و یک گلوله‌ی  $100 \text{ g}$  بی‌نهایت کوچک است:  $m_e/m_b \simeq 10^{-29}$ .



(ب) طول موج دوبروی گلوله برابر با  $\lambda_b = h/p = h/(mv)$  است و چون  $h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ Js}$  است، داریم:

$$\lambda_b = \frac{h}{mv} = \frac{6,626 \times 10^{-34} \text{ Js}}{0,1 \text{ kg} \times 900 \text{ ms}^{-1}} = 7,4 \times 10^{-36} \text{ m} \quad (51-1)$$

نسبت دو طول موج برابر با  $\lambda_b/\lambda_p \simeq 2,2 \times 10^{-21}$  است. واضح است که جنبه‌ی موجی این گلوله فراتر از توانایی انسان برای مشاهده‌ی آن است. اما نمی‌توان از جنبه‌ی موجی پروتون صرف‌نظر کرد. طول موج دوبروی پروتون  $3,4 \times 10^{-15} \text{ m}$  و از مرتبه‌ی اندازه‌ی هسته‌ی یک اتم نوعی است.

می‌توانیم نتیجه بگیریم که طول موج‌های وابسته به سیستم‌های میکروسکوپی متناهی‌اند و الگوهای موج‌گونه‌ی به آسانی قابل تشخیصی را نمایش می‌دهند درحالی‌که طول موج‌های وابسته به سیستم‌های ماکروسکوپی بی‌نهایت کوچک‌اند و رفتار موج‌گونه‌ی قابل تشخیصی را نمایش نمی‌دهند. بنابراین هنگامی که طول موج به صفر می‌رسد، ویژگی‌های موج‌گونه‌ی سیستم محو می‌شود. در مواردی که طول موج بی‌نهایت کوچک است، باید از نورشناسی هندسی برای توصیف حرکت جسم استفاده شود زیرا موج وابسته به آن همانند یک پرتو رفتار می‌کند.

## ۴-۱ ذره‌ها در مقابل موج‌ها

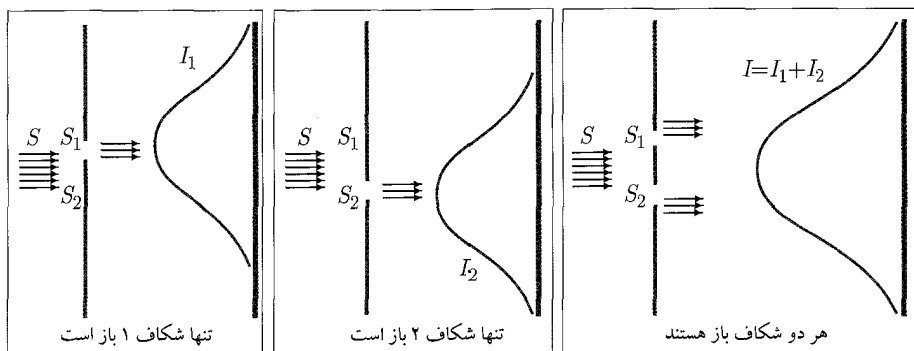
در این بخش قصد داریم تا به مطالعه‌ی ویژگی‌های ذره‌ها و موج‌ها در چارچوب مفاهیم فیزیک کلاسیک و کوانتومی بپردازیم. دستگاه تجربی برای مطالعه‌ی این جنبه‌ها آزمایش دو شکاف است که از یک چشمه‌ی  $S$ ،  $S_1$  می‌تواند منبع ذره‌های مادی یا موج باشد، یک دیواره با دو شکاف  $S_1$  و  $S_2$  و یک پرده‌ی مجهز به شمارنده‌هایی که ذرات و یا امواج را ثبت می‌کنند، تشکیل شده است.

### ۱-۴-۱ دیدگاه کلاسیک ذره‌ها و موج‌ها

در فیزیک کلاسیک ذره‌ها و موج‌ها از یکدیگر متمایزند و رفتارهای کاملاً متفاوتی را از خود به نمایش می‌گذارند. در حالی‌که توصیف کامل یک ذره تنها نیازمند یک پارامتر است (بردار مکان  $(\mathbf{r}(t))$ ، توصیف کامل یک موج نیازمند دو پارامتر دامنه و فاز است. به عنوان مثال می‌توان موج‌های تخت سه‌بعدی را با تابع‌های موج  $\psi(\mathbf{r}, t)$  توصیف نمود:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} = Ae^{i\phi} \quad (52-1)$$

که در آن  $A$  دامنه‌ی موج و  $\phi$  فاز آن است ( $\mathbf{k}$  بردار موج و  $\omega$  بسامد زاویه‌ای است). می‌توانیم معنی فیزیکی  $\psi$  را به یاد بیاوریم: شدت موج از رابطه‌ی  $I = |\psi|^2$  به دست می‌آید.



شکل ۸-۱ آزمایش دوشکاف با ذره‌ها:  $S$  منبع گلوله‌ها است و  $I_1$  و  $I_2$  به ترتیب شدت‌های ثبت شده روی پرده در هنگامی است که تنها شکاف  $S_1$  باز و سپس تنها شکاف  $S_2$  باز باشد. هنگامی که در دو شکاف باز هستند، شدت کل برابر با  $I = I_1 + I_2$  است.

### (الف) $S$ منبع جریانی از گلوله‌ها است

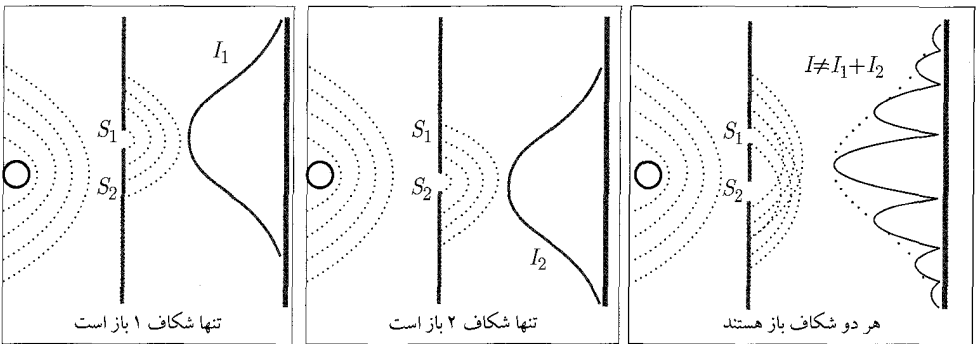
همانطور که در شکل ۸-۱ نشان داده شده است، سه آزمایش متفاوت را در نظر بگیرید که در آنها منبع  $S$  جریانی از گلوله‌ها را شلیک می‌کند. فرض می‌شود که گلوله‌ها فناپذیرند و از این رو با توده‌های یکسانی به پرده می‌رسند. در آزمایش نخست تنها شکاف  $S_1$  باز است. فرض کنید  $I_1(y)$  شدت متناظر (تعداد گلوله‌هایی که در هر ثانیه به نقطه‌ی معلوم  $y$  می‌رسند) اندازه‌گیری شده روی پرده باشد. در آزمایش دوم فرض کنید که  $I_2(y)$  شدت اندازه‌گیری شده روی پرده در هنگامی است که تنها  $S_2$  باز است. در آزمایش سوم اگر  $S_1$  و  $S_2$  هر دو باز باشند آنگاه شدت کل اندازه‌گیری شده‌ی روی پرده در پشت دو شکاف باید برابر با مجموع  $I_1$  و  $I_2$  باشد:

$$I(y) = I_1(y) + I_2(y) \quad (۵۳-۱)$$

### (ب) $S$ منبع موج‌ها است

اکنون همانطور که در شکل ۹-۱ نشان داده شده است،  $S$  منبع موج‌ها (مثلاً نور یا موج‌های آب) است. فرض کنید شدت اندازه‌گیری شده روی پرده هنگامی که تنها  $S_1$  باز است برابر با  $I_1$  و هنگامی که  $S_2$  باز است برابر با  $I_2$  باشد. به یاد بیاورید که یک موج به وسیله‌ی تابع مختلط  $\psi$  نشان داده می‌شود و شدت آن متناسب با مربع دامنه‌ی آن (مثلاً ارتفاع آب یا میدان الکتریکی) است:  $I_1 = |\psi_1|^2$  و  $I_2 = |\psi_2|^2$ . هنگامی که دو شکاف باز باشند، شدت کل اندازه‌گیری شده بر روی پرده یک طرح تداخلی را نشان می‌دهد و از این رو نمی‌تواند برابر با مجموع  $I_1$  و  $I_2$  باشد. دامنه‌ها (و نه شدت‌ها) باید با هم جمع شوند: دامنه‌ی کل  $\psi$  برابر با مجموع  $\psi_1$  و  $\psi_2$  است و بنابراین شدت کل از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$I = |\psi_1 + \psi_2|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + (\psi_1^* \psi_2 + \psi_2^* \psi_1) = I_1 + I_2 + 2\text{Re}(\psi_1^* \psi_2)$$



شکل ۹-۱ آزمایش دو شکاف:  $S$  منبع موج‌ها است و  $I_1$  و  $I_2$  به ترتیب شدت‌های ثبت شده روی پرده است هنگامی که تنها شکاف  $S_1$  و سپس هنگامی که تنها شکاف  $S_2$  باز است. هنگامی که هر دو شکاف باز هستند، شدت کل دیگر برابر با مجموع  $I_1$  و  $I_2$  نیست و باید یک جمله‌ی نوسانی به آن افزود.

$$= I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos \delta \quad (۵۴-۱)$$

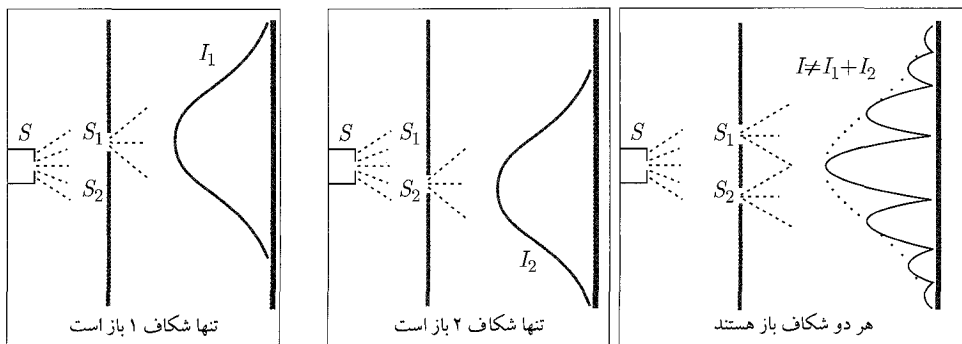
که در آن  $\delta$  اختلاف فاز بین  $\psi_1$  و  $\psi_2$  و  $2\sqrt{I_1 I_2} \cos \delta$  یک جمله‌ی نوسانی است که عامل ایجاد طرح تداخلی است (شکل ۹-۱). بنابراین نمی‌توان توزیع شدت به دست آمده را به تنهایی از  $I_1$  و  $I_2$  پیش‌بینی کرد زیرا به فاز  $\delta$  بستگی دارد که نمی‌توان آن را زمانی که تنها یک شکاف باز است، اندازه گرفت (می‌توان  $\delta$  را از فاصله‌ی شکاف یا شدت‌های مشاهده شده‌ی  $I_1$ ،  $I_2$  و  $I$  محاسبه کرد).

نتیجه: از نظر کلاسیکی موج‌ها طرح‌های تداخلی را نشان می‌دهند اما ذره‌ها خیر. هنگامی که دو جریان غیربرهمکنشی از ذره‌ها در یک ناحیه از فضا ترکیب می‌شوند، شدت‌های آنها با هم جمع می‌شوند. هنگامی که موج‌ها ترکیب می‌شوند، دامنه‌های آنها با هم جمع می‌شود اما شدت‌های آنها خیر.

### ۲-۴-۱ دیدگاه کوانتومی ذره‌ها و موج‌ها

اکنون بیایید تا پیرامون آزمایش دو شکاف با ذره‌های مادی کوانتومی مانند الکترون‌ها بحث کنیم. شکل ۱-۱۰ سه آزمایش متفاوت را نشان می‌دهد که در آنها منبع  $S$  جریانی از الکترون‌ها را شلیک می‌کند. (ابتدا تنها  $S_1$  باز، سپس تنها  $S_2$  باز و سرانجام هر دو شکاف باز). در دو حالت نخست، توزیع الکترون‌ها بر روی پرده هموار است. مجموع این توزیع‌ها نیز هموار است (یک منحنی به شکل ناقوس شبیه به منحنی به دست آمده برای ذره‌های کلاسیکی (شکل ۸-۱)).

اما زمانی که هر دو شکاف باز هستند، تغییرات سریعی (یک طرح تداخلی) را در توزیع مشاهده می‌کنیم. بنابراین با وجود ناپیوستگی به نظر می‌رسد که الکترون‌ها با خودشان تداخل می‌کنند. این بدان معنی است

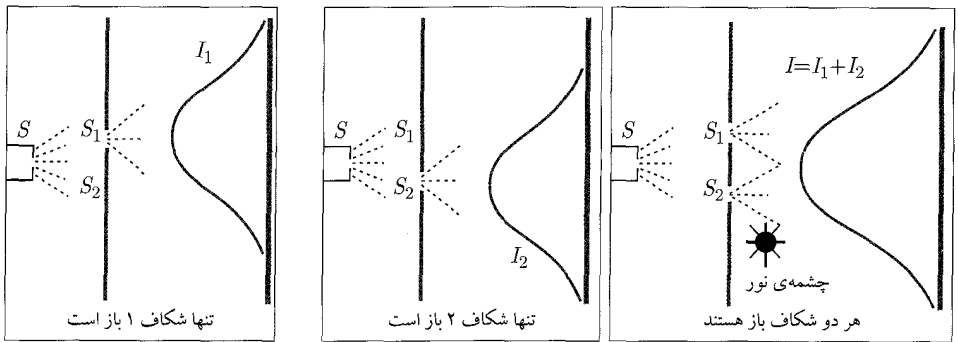


شکل ۱-۱۰ آزمایش دو شکاف:  $S$  منبعی از الکترون‌ها است و  $I_1$  و  $I_2$  به ترتیب شدت‌های ثبت شده روی پرده هنگامی که تنها شکاف  $S_1$  و سپس هنگامی که تنها شکاف  $S_2$  باز است. هنگامی که هر دو شکاف باز هستند، شدت کل برابر با مجموع  $I_1$ ،  $I_2$  و یک جمله‌ی نوسانی است.

که به نظر می‌رسد هر الکترون در یک لحظه از هر دو شکاف عبور کرده است! ممکن است این پرسش مطرح شود که اگر یک الکترون نمی‌تواند شکافته شود آنگاه چگونه به نظر می‌رسد که در یک لحظه از هر دو شکاف گذشته باشد؟ به یاد داشته باشید که این طرح تداخلی ارتباطی با شدت باریکه‌ی الکترونی ندارد. در واقع آزمایش‌های انجام شده با باریکه‌های بسیار ضعیف که در آنها الکترون‌ها به صورت انفرادی فرستاده می‌شدند (یعنی هر الکترون تنها پس از این که الکترون قبلی به پرده می‌رسید، فرستاده می‌شد) نیز این نتیجه را نشان می‌داد. در این حالت، اگر دو شکاف باز بودند و به اندازه‌ی کافی صبر می‌کردیم به طوری که برخوردهای کافی روی پرده جمع‌آوری می‌شدند، الگوی تداخلی دوباره پدیدار می‌شد.

اکنون پرسش اساسی مربوط به پیدا کردن شکافی است که الکترون از آن عبور کرده است. برای پاسخ دادن به این پرسش می‌توان آزمایشی برای مشاهده‌ی الکترون‌ها هنگام عبور از شکاف‌ها انجام داد. این آزمایش شامل قرار دادن یک منبع نور قوی در پشت دیواره‌ی محتوی شکاف‌ها (شکل ۱-۱۱) است. شمارنده‌های گایگر را در سراسر پرده قرار می‌دهیم به طوری که هر جا یک الکترون به پرده می‌رسد، صدای تیک را از شمارنده بشنویم.

از آنجایی که بارهای الکتریکی نور را پراکنده می‌کنند، هرگاه که یک الکترون در سر راه خود برای رسیدن به شمارنده، از هریک از شکاف‌ها عبور می‌کند، نور را به طرف چشمه‌ی پراکنده خواهد کرد. بنابراین هنگامی که صدای تیک را از شمارنده شنیدیم سوسوزدنی را در نزدیکی هریک از شکاف‌های  $S_1$  یا  $S_2$  می‌بینیم اما هرگز در نزدیکی هر دو شکاف و در یک لحظه نمی‌بینیم. پس از ثبت شمارش‌های متفاوت با هر دو شکاف باز درمی‌یابیم که توزیع حاصل مشابه با توزیع گلوله‌های کلاسیکی در شکل ۱-۸ است: طرح تداخلی ناپدید شده است! اما اگر منبع نور را خاموش کنیم آنگاه طرح تداخلی دوباره ظاهر می‌شود.



شکل ۱-۱۱ آزمایش دو شکاف:  $S$  منبعی از الکترون‌ها است. یک منبع نور در پشت دیواره‌ی محتوی  $S_1$  و  $S_2$  قرار دارد. هنگامی که هر دو شکاف باز هستند، طرح تداخلی از بین می‌رود و شدت کل برابر با  $I = I_1 + I_2$  است.

از این آزمایش نتیجه می‌گیریم که صرف عمل نگاه کردن به الکترون‌ها شدت توزیع آنها روی پرده را تحت تأثیر قرار می‌دهد. الکترون‌ها به وضوح بسیار حساس هستند: زمانی که شخص به الکترون‌ها نگاه می‌کند، حرکت آنها دستخوش تغییر می‌شود. در واقع این یک اصل مکانیک کوانتومی است که طبق آن اندازه‌گیری با حالت‌های اجسام میکروسکوپی تداخل می‌کند. ممکن است این پرسش مطرح شود که با کم کردن روشنایی (شدت) منبع نور به طوری که به اندازه‌ی کافی ضعیف باشد تا الکترون‌ها را آشفته نکند، وضع به چه صورت است؟ در عمل می‌بینیم که نور پراکنده شده از الکترون‌ها هنگام عبور الکترون‌ها ضعیف‌تر نمی‌شود. همان اندازه سوسوزدن مشاهده می‌شود اما تنها یک‌بار در هر لحظه. این بدان معنی است که در سطوح پایین روشنایی، به برخی از الکترون‌ها دست نمی‌باییم: صدای تیک را از شمارنده می‌شنویم ولی اصلاً سوسوزنی را نمی‌بینیم. در سطوح روشنایی هنوز پایین‌تر، الکترون‌های بیشتری را از دست می‌دهیم. در این حالت نتیجه می‌گیریم که تعدادی از الکترون‌ها بدون این که دیده شوند از شکاف‌ها عبور کرده‌اند زیرا فوتون‌ها در همان لحظه برای گیر انداختن آنها وجود نداشتند. این فرآیند مهم است زیرا تأیید می‌کند که نور ویژگی‌های ذره‌ای دارد: نور نیز در پرده به توده (فوتون‌ها) می‌رسد.

دو برش قائم توزیع این آزمایش با منبع نور بسیار ضعیف گردآوری می‌شوند: یکی متناظر با الکترون‌هایی که دیده می‌شوند و دیگری متناظر با الکترون‌هایی که دیده نمی‌شوند (اما به واسطه‌ی شمارنده شنیده می‌شوند) است. توزیع نخست محتوی تداخلی نیست (یعنی مشابه با گلوله‌های کلاسیکی است). اما توزیع دوم یک طرح تداخلی را نشان می‌دهد. این طرح تداخلی از این واقعیت نتیجه می‌شود که هنگامی که الکترون‌ها دیده نمی‌شوند، تداخل را از خود نشان می‌دهند. هنگامی که ما الکترون را نمی‌بینیم، هیچ فوتونی آن را آشفته نمی‌کند اما زمانی که آن را می‌بینیم، یک فوتون آن را آشفته کرده است.

برای الکترون‌هایی که تداخل را ایجاد می‌کنند، شناسایی شکافی که هر الکترون از آن عبور کرده است،

غیرممکن می‌باشد. این یافته‌ی تجربی مفهوم بنیادی جدیدی را معرفی می‌کند: دنیای میکروفیزیکی غیرقطعی است. برخلاف فیزیک کلاسیک (که در آن به دقت می‌توانیم به دنبال ذره‌ها در امتداد مسیرشان برویم) نمی‌توانیم به دنبال یک ذره‌ی میکروسکوپی در امتداد حرکت آن برویم و مسیر آن را تعیین کنیم. از نظر فنی، انجام چنین ردیابی دقیقی از حرکت ذره‌ها غیرممکن است. این نتیجه‌ها الهام‌بخش هایزنبرگ برای اصل موضوعه قرار دادن اصل عدم قطعیت بودند که بیان می‌کند که طراحی وسیله‌ای که به ما امکان آن را بدهد شکافی که الکترون از آن عبور کرده است را تعیین کنیم بدون این که الکترون را به اندازه‌ای آشفته کند که طرح تداخلی از بین برود، غیرممکن است (بعداً به این اصل برمی‌گردیم).

طرح تداخلی حاصل از آزمایش دو شکاف نشان می‌دهد که الکترون‌ها هر دو ویژگی ذره‌ای و موجی را دارا هستند. هنگامی که الکترون‌ها یک به یک مشاهده یا آشکار می‌شوند مانند ذره‌ها رفتار می‌کنند اما زمانی که پس از آزمایش‌های زیادی آشکار شدند (توزیع الکترون‌های آشکار شده) مانند موج‌هایی با طول موج  $\lambda = h/p$  رفتار می‌کنند و یک طرح تداخلی را نشان می‌دهند.

### ۱-۴-۳ دوگانگی موج-ذره: اصل مکمل بودن

یافته‌های آزمایشگاهی متفاوتی که تا اینجا مورد بحث قرار گرفته‌اند (تابش جسم سیاه، اثر فتوالکتریک و اثر کامپتون، تولید زوج، آزمایش دیویسون-ژرمر، آزمایش تامسون و آزمایش دو شکاف) معلوم می‌کنند که فوتون‌ها، الکترون‌ها و هر ذره‌ی میکروسکوپی دیگر برخلاف ذره‌ها و موج‌های کلاسیکی رفتار می‌کنند. این یافته‌ها نشان می‌دهند که (در مقیاس میکروسکوپی) طبیعت می‌تواند علاوه بر رفتار موجی، رفتار ذره‌ای را نشان دهد. اکنون این پرسش مطرح می‌شود که چگونه چیزی می‌تواند همزمان مانند ذره و موج رفتار کند؟ آیا این ایده‌ها متقابلاً منحصر به فرد نیستند؟ در حیطه‌ی فیزیک کلاسیک پاسخ مثبت است اما در حیطه‌ی فیزیک کوانتومی اینطور نیست. به هیچ عنوان نمی‌توان این رفتار دوگانه را در چارچوب فیزیک کلاسیک وفق داد زیرا ذره‌ها و موج‌ها متقابلاً دو موجود منحصر به فردند.

نظریه‌ی مکانیک کوانتومی چارچوب درست و مناسبی را فراهم می‌کند که جنبه‌های ذره‌ای و موجی ماده را با هم وفق می‌دهد. مکانیک کوانتومی با استفاده از تابع موج  $\psi(\mathbf{r}, t)$  (۱۱-۴۹) را ببینید) برای توصیف ذره‌های مادی مانند الکترون‌ها می‌تواند به صورت همزمان درباره‌ی رفتار ذره‌ای و موجی سیستم‌های میکروسکوپی اظهار نظر کند. مکانیک کوانتومی کوانتس انرژی یا شدت را با توصیف موجی ماده ترکیب می‌کند به عبارتی از هر دو تصویر ذره‌ای و موجی برای همان ذره‌ی مادی استفاده می‌کند.

بنابراین مفاهیم معمول ما از ذره‌ها یا موج‌ها هنگامی که بر سیستم‌های میکروسکوپی اعمال شوند، ناکافی هستند. این دو مفهوم (که در حیطه‌ی ماکروسکوپی با یکدیگر در تضادند) به صورت کامل بر دنیای فیزیکی اعمال نمی‌شوند. دیگر این عقیده که یک موج نمی‌تواند یک ذره باشد و برعکس در مقیاس میکروسکوپی معتبر نیست. واقعیت درست یک سیستم کوانتومی این است که این سیستم نه ذره‌ای صرف

است و نه موجی صرف. جنبه‌های ذره‌ای و موجی یک سیستم کوانتومی تنها زمانی خود را آشکار می‌کنند که در معرض یا تحت تأثیر (نامطلوب) ابزار اثرگذار مشاهده قرار گیرند (هر فرآیند مشاهده، حالت اولیه‌ی سیستم کوانتومی را از بین می‌برد. به عنوان مثال صرف عمل نگاه کردن به الکترون آن را از مدارش خارج می‌کند). الکترون بسته به نوع تجهیزات مورد استفاده برای مشاهده‌ی آن، ظرفیت نمایش هر یک از ویژگی‌های «دانه‌ای» یا موجی را دارا است. همانطور که در آزمایش دو شکاف نشان داده شد، اگر می‌خواستیم به جنبه‌ی ذره‌ای الکترون نگاه کنیم باید یک شکاف را می‌بستیم (یا هر دو شکاف را باز نگاه می‌داشتیم اما یک ابزار مشاهده را به کار می‌بردیم). اما اگر تنها به ویژگی‌های موجی آن علاقمند بودیم باید هر دو شکاف را باز می‌گذاشتیم و آن را تحت تأثیر ابزارهای مشاهده قرار نمی‌دادیم. این بدان معنی است که هر دو ویژگی «دانه‌ای» و «موجی» در الکترون وجود دارند و با اصلاح ابزار کاوش می‌توانیم جلوی یکی از این دو جنبه را بگیریم و دیگری را نگه داریم. آزمایش طراحی شده برای مجزا کردن ویژگی‌های ذره‌ای یک سیستم کوانتومی اطلاعاتی پیرامون ویژگی‌های موجی آن ذره را به دست نمی‌دهد و برعکس. هنگامی که یک الکترون را در معرض پراکندگی کامپتون قرار می‌دهیم تنها جنبه‌های ذره‌ای آن را مشاهده می‌کنیم اما هنگامی که آن را درگیر یک آزمایش پراش می‌کنیم (مانند آزمایش‌های دیویسون-ژرمر، تامسون یا دو شکاف) تنها رفتار موجی آن را مشاهده می‌کنیم. بنابراین اگر ویژگی‌های ذره‌ای یک سیستم کوانتومی را اندازه‌گیری کنیم این کار ویژگی‌های موجی آن را از بین می‌برد و برعکس. هر اندازه‌گیری یکی از این دو ویژگی را به دست می‌دهد اما هرگز هر دو ویژگی را یک‌باره به ما نمی‌دهد. می‌توانیم هر یک از دو ویژگی موجی یا ذره‌ای را به دست آوریم ولی نمی‌توانیم هر دوی آنها را با هم به دست آوریم.

بنابراین سیستم‌های میکروسکوپی، ذره‌ها یا موج‌های صرف نیستند بلکه هر دوی آنها هستند. بروز جنبه‌های ذره‌ای و موجی با هم در تضاد نیستند و همانطور که بوهر پیشنهاد کرد، آنها مکمل یکدیگرند. این دو مفهوم مکمل یکدیگر در توصیف طبیعت واقعی سیستم‌های میکروسکوپی هستند. با مکمل بودن ویژگی‌های ذره‌ای و موجی ماده، هر دو به صورت یکسان برای توصیف کامل سیستم‌های کوانتومی مهم هستند. از اینجا است که ضرورت اصل مکمل بودن مطرح می‌شود.

دیدیم وقتی مفهوم انعطاف‌ناپذیر هر یک از این دو ویژگی (یعنی ویژگی ذره‌ای یا موجی) به صورت نه‌چندان دقیقی بر سیستم‌های کوانتومی اعمال می‌شود، با واقعیت دچار مشکل می‌شویم. بدون در نظر گرفتن اصل مکمل بودن، مکانیک کوانتومی جایگاهی برای به دست دادن نتیجه‌های دقیق نمی‌داشت (که البته دارد).

#### ۴-۴-۱ اصل برهمنهی خطی

چگونه به صورت ریاضی می‌توانیم وجود طرح تداخلی در آزمایش دو شکاف با ذره‌های مادی مانند الکترون را توضیح دهیم؟ یک پاسخ به وسیله‌ی اصل برهمنهی ارائه می‌شود. تداخل از برهمنهی موج‌های گسیل

شده به وسیله‌ی شکاف‌های ۱ و ۲ نتیجه می‌شود. اگر تابع‌های  $\psi_1(\mathbf{r}, t)$  و  $\psi_2(\mathbf{r}, t)$  (که موج‌هایی را نشان می‌دهند که به ترتیب از شکاف‌های ۱ و ۲ گسیل شده و به پرده می‌رسند) دو حالت ممکن فیزیکی سیستم را نشان دهند آنگاه هر برهمنه‌ی خطی

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \alpha_1 \psi_1(\mathbf{r}, t) + \alpha_2 \psi_2(\mathbf{r}, t) \quad (۵۵-۱)$$

نیز یک نتیجه‌ی ممکن فیزیکی سیستم را نشان می‌دهد که در آن  $\alpha_1$  و  $\alpha_2$  ثابت‌های مختلط هستند. این اصل برهمنه‌ی است. شدت ایجاد شده بر روی پرده به وسیله‌ی تنها شکاف باز ۱ برابر با  $|\psi_1(\mathbf{r}, t)|^2$  و شدت ایجاد شده بر روی پرده زمانی که تنها شکاف ۲ باز باشد، برابر با  $|\psi_2(\mathbf{r}, t)|^2$  است. هنگامی که هر دو شکاف باز هستند، شدت برابر است با

$$\begin{aligned} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 &= |\psi_1(\mathbf{r}, t) + \psi_2(\mathbf{r}, t)|^2 \\ &= |\psi_1(\mathbf{r}, t)|^2 + |\psi_2(\mathbf{r}, t)|^2 + \psi_1^*(\mathbf{r}, t)\psi_2(\mathbf{r}, t) + \psi_1(\mathbf{r}, t)\psi_2^*(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (۵۶-۱)$$

که در آن ستاره‌ها مزدوج مختلط را نشان می‌دهند. به یاد داشته باشید که (۵۶-۱) برابر با مجموع  $|\psi_1(\mathbf{r}, t)|^2$  و  $|\psi_2(\mathbf{r}, t)|^2$  نیست بلکه شامل جمله‌ی اضافی  $\psi_1^*(\mathbf{r}, t)\psi_2(\mathbf{r}, t) + \psi_1(\mathbf{r}, t)\psi_2^*(\mathbf{r}, t)$  است. این همان جمله‌ای است که در مورد الکترون‌ها باعث ایجاد طرح تداخلی مشابه با امواج نوری می‌شود. بنابراین طرح تداخلی از وجود جابه‌جایی فاز بین  $\psi_1(\mathbf{r}, t)$  و  $\psi_2(\mathbf{r}, t)$  نتیجه می‌شود. می‌توانیم این جابه‌جایی فازی را از طرح تداخلی اندازه بگیریم ولی به هیچ عنوان نمی‌توانیم فازهای  $\psi_1$  و  $\psi_2$  را جداگانه اندازه بگیریم.

می‌توانیم نتیجه‌های آزمایش دو شکاف را در سه اصل زیر خلاصه کنیم:

- برای ذره‌های کلاسیک شدت‌ها با هم جمع می‌شوند:  $I = I_1 + I_2$ .
- برای ذره‌های کوانتومی دامنه‌ها (و نه شدت‌ها) با هم جمع می‌شوند:  $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_1(\mathbf{r}, t) + \psi_2(\mathbf{r}, t)$ .
- هرگاه کسی تلاش کند تا به صورت تجربی نتیجه‌ی رویدادهای منفرد را برای ذره‌های مادی میکروسکوپی تعیین کند (مانند تلاش برای مشخص کردن شکافی که الکترون از آن عبور کرده است) آنگاه طرح تداخلی از بین می‌رود. در این حالت شدت‌ها به همان روش ذره‌های کلاسیکی با هم جمع می‌شوند:  $I = I_1 + I_2$ .

## ۵-۱ طبیعت غیرقطعی دنیای میکروفیزیکی

ابتدا بیائید دو یافته‌ی تجربی مهم که به صورت مختصر در بالا به آنها اشاره شد را یادآوری کنیم. از یک سو آزمایش‌های دیویسون-ژرمر و دو شکاف نشان دادند که ذره‌های مادی میکروسکوپی موجب طرح‌های



تداخلی می‌شوند. برای توضیح طرح تداخلی دیدیم که توصیف ذره‌های میکروسکوپی به وسیله‌ی موج‌ها ضروری است. ذره‌ها در فضا جایگزیده نیستند در نتیجه باید در توصیف ذره‌های میکروسکوپی دقت را رها کنیم زیرا موج‌ها در بهترین شرایط توصیفی احتمالاتی را ارائه می‌کنند. از سوی دیگر در آزمایش دو شکاف دیدیم که ردیابی حرکت الکترون‌های منفرد غیرممکن است. وسیله‌ای تجربی که تعیین کند الکترون از کدام شکاف عبور کرده است، وجود ندارد. عدم توانایی در پیش‌بینی تک‌رویدادها در تناقض با اصل پیش‌بینی‌پذیری یا قطعیت فیزیک کلاسیک است. این یافته‌های تجربی الهام‌بخش هایزنبرگ برای اصل موضوعه قرار دادن طبیعت غیرقطعی دنیای میکروفیزیکی و نیز الهام‌بخش بورن برای معرفی تفسیر احتمالاتی مکانیک کوانتومی بوده‌اند.

### ۱-۵-۱ اصل عدم قطعیت هایزنبرگ

مطابق با فیزیک کلاسیک با معلوم بودن شرایط اولیه و نیروهای وارد بر یک سیستم می‌توان رفتار آتی (مسیر منحصر به فرد) این سیستم فیزیکی را دقیقاً تعیین نمود. یعنی اگر مختصات اولیه  $x$ ، سرعت  $v$  و تمام نیروهای وارد بر ذره معلوم باشند آنگاه مکان  $\mathbf{r}(t)$  و سرعت  $v(t)$  منحصرأً به وسیله‌ی قانون دوم نیوتن تعیین می‌شوند. بنابراین فیزیک کلاسیک کاملاً قطعیت دارد.

آیا این دیدگاه قطعی برای دنیای میکروفیزیکی نیز برقرار است؟ در پاسخ باید گفت که چون یک ذره در چارچوب مکانیک کوانتومی به وسیله‌ی تابع موج متناظر با موج ذره نشان داده می‌شود و تابع‌های موج نمی‌توانند جایگزیده باشند آنگاه یک ذره‌ی میکروسکوپی تا حدی در فضا گسترش دارد و (برخلاف ذره‌های کلاسیکی) نمی‌تواند در فضا جایگزیده باشد. علاوه بر این در آزمایش دو شکاف دیدیم که تعیین شکافی که الکترون از آن عبور کرده است، بدون آشفتن کردن آن غیرممکن است. بنابراین مفاهیم کلاسیک مکان دقیق، تکانه‌ی دقیق و مسیر یکنای ذره در مقیاس میکروسکوپی معنی ندارند. این اساس اصل عدم قطعیت هایزنبرگ است.

اصل عدم قطعیت هایزنبرگ در شکل اصلی خود بیان می‌کند: اگر مؤلفه‌ی  $x$  تکانه‌ی یک ذره با عدم قطعیت  $\Delta p_x$  اندازه‌گیری شود آنگاه نمی‌توان مکان  $x$  آن را (در همان زمان) با دقتی بیشتر از  $\Delta x = \hbar/(2\Delta p_x)$  اندازه گرفت. می‌توان شکل سه‌بعدی رابطه‌های عدم قطعیت برای مکان و تکانه را به صورت زیر نوشت:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{4}, \quad \Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{4}, \quad \Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{4} \quad (57-1)$$

این اصل نشان می‌دهد که اگرچه اندازه‌گیری دقیق تکانه یا مکان یک ذره ممکن است ولی اندازه‌گیری این دو مشاهده‌پذیر به صورت همزمان و با دقتی دلخواه غیرممکن است. یعنی نمی‌توانیم یک ذره‌ی میکروسکوپی را بدون افزایش قابل ملاحظه‌ی تکانه‌ی آن جایگزیده کنیم. نمی‌توانیم مکان ذره را بدون

آشفته کردن آن اندازه بگیریم و راهی برای انجام چنین اندازه‌گیری به صورت انفعالی وجود ندارد و این کار مستلزم تغییر تکانه است. برای درک این موضوع، اندازه‌گیری مکان یک جسم ماکروسکوپی (مثلاً یک خودرو) و مکان یک سیستم میکروسکوپی (مثلاً الکترون در اتم) را در نظر بگیرید. برای پیدا کردن مکان یک جسم ماکروسکوپی تنها به مشاهده‌ی آن نیاز دارید. نوری که به این جسم برخورد می‌کند و به آشکارساز (چشمانتان یا یک وسیله‌ی اندازه‌گیری) بازتابیده می‌شود، با هیچ روش قابل اندازه‌گیری‌ای نمی‌تواند حرکت جسم را تحت تأثیر قرار دهد. از سوی دیگر برای اندازه‌گیری مکان یک الکترون در یک اتم باید از تابشی با طول موج بسیار کوتاه (اندازه‌ی اتم) استفاده نمود. انرژی این تابش برای تغییر قابل ملاحظه‌ی تکانه‌ی الکترون به اندازه‌ی کافی زیاد است. صرف مشاهده‌ی الکترون حرکت آن را به اندازه‌ای تحت تأثیر قرار می‌دهد که می‌تواند الکترون را از مدارش کاملاً خارج کند. بنابراین تعیین همزمان مکان و تکانه با دقت دلخواه غیرممکن است. اگر یک ذره جایگزیده بود آنگاه تابع موج آن در هر جای دیگری صفر می‌شد و موج آن طول موج بسیار کوتاهی می‌داشت. طبق رابطه‌ی دوبروی  $p = h/\lambda$ ، تکانه‌ی این ذره نسبتاً زیاد خواهد بود. به طور رسمی، این بدان معنی است که اگر یک ذره دقیقاً جایگزیده باشد (یعنی  $\Delta x \rightarrow 0$ ) آنگاه عدم قطعیت کل حول تکانه‌ی آن وجود خواهد داشت (یعنی  $\Delta p \rightarrow \infty$ ). به صورت خلاصه باید گفت که چون تمام پدیده‌های کوانتومی به وسیله‌ی موج‌ها توصیف می‌شوند بنابراین باید محدودیت در تواناییمان در اندازه‌گیری همزمان هر یک از دو متغیر مکمل را بپذیریم.

می‌توان اصل عدم قطعیت هایزنبرگ را به هر جفت متغیر دینامیکی مکمل (یا مزدوج بندادی) تعمیم داد: نمی‌توان آزمایشی را ابداع کرد که بتواند به صورت همزمان دو متغیر مکمل را با دقت دلخواه اندازه بگیرد (اگر چنین بود نظریه‌ی مکانیک کوانتومی فرو می‌پاشید).

به عنوان مثال، انرژی و زمان یک جفت متغیر مکمل را تشکیل می‌دهند. اندازه‌گیری همزمان آنها باید از رابطه‌ی عدم قطعیت زمان-انرژی پیروی کند:

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{4} \quad (58-1)$$

این رابطه بیان می‌کند که اگر دو بار انرژی سیستم را اندازه بگیریم و بازه‌ی زمانی این دو اندازه‌گیری برابر با  $\Delta t$  باشد آنگاه انرژی‌های اندازه‌گیری شده به اندازه‌ی  $\Delta E$  تفاوت خواهند داشت که به هیچ عنوان نمی‌تواند کوچک‌تر از  $\hbar/\Delta t$  باشد. اگر بازه‌ی زمانی بین دو اندازه‌گیری بزرگ باشد آنگاه اختلاف انرژی کوچک خواهد بود. واقعیت این است که در هنگام اندازه‌گیری اول سیستم دچار اختلال می‌شود و زمان زیادی طول می‌کشد تا به حالت اولیه‌ی (مختل نشده‌ی) خود برگردد. این عبارت به خصوص در مطالعه‌ی فرآیندهای واپاشی مفید است زیرا رابطه‌ی بین عمر میانگین و پهنای انرژی حالت‌های برانگیخته را مشخص می‌کند.

می‌بینیم که مکانیک کوانتومی (در تضاد کامل با فیزیک کلاسیک) یک نظریه‌ی کاملاً غیرقطعی است. شخص با پرسش در مورد مکان یا تکانه‌ی الکترون نمی‌تواند یک پاسخ قطعی دریافت کند و تنها یک پاسخ احتمالاتی برای او ممکن است. طبق اصل عدم قطعیت اگر مکان یک سیستم کوانتومی به خوبی تعریف شود آنگاه تکانه‌ی آن در مجموع تعریف نشده خواهد بود. در این نظریه اصل عدم قطعیت به وضوح یکی از محترم‌ترین مفاهیم فیزیک کلاسیک یعنی طبیعت قطعی مکانیک نیوتنی را کنار می‌زند.

### مثال ۱-۶ (عدم قطعیت در سیستم‌های میکروسکوپی و ماکروسکوپی)

عدم قطعیت در مکان (الف) یک نوترون در حال حرکت با سرعت  $5 \times 10^6 \text{ ms}^{-1}$  و (ب) شخصی به جرم  $50 \text{ kg}$  که با سرعت  $2 \text{ ms}^{-1}$  حرکت می‌کند را تخمین بزنید.

حل

(الف) با استفاده از (۱-۵۷) می‌توانیم عدم قطعیت در مکان را به صورت زیر بنویسیم:

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{2\Delta p_x} \simeq \frac{\hbar}{2m_n v_x} = \frac{1.05 \times 10^{-34} \text{ Js}}{2 \times 1.65 \times 10^{-27} \text{ kg} \times 5 \times 10^6 \text{ ms}^{-1}} = 6.4 \times 10^{-15} \text{ m} \quad (1-59)$$

این فاصله قابل مقایسه با اندازه‌ی هسته است.

(ب) عدم قطعیت در مکان شخص برابر است با

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{2\Delta p_x} \simeq \frac{\hbar}{2m v_x} = \frac{1.05 \times 10^{-34} \text{ Js}}{2 \times 50 \text{ kg} \times 2 \text{ ms}^{-1}} = 0.75 \times 10^{-36} \text{ m} \quad (1-60)$$

عدم قطعیتی با این اندازه فراتر از توان آشکارسازی انسان است بنابراین می‌توان از آن صرف نظر کرد. دقت در مکان شخص تنها به عدم قطعیت‌های القاء شده به وسیله‌ی ابزار مورد استفاده در اندازه‌گیری محدود می‌شود. بنابراین عدم قطعیت‌های مکان و تکانه برای سیستم‌های میکروسکوپی مهم و برای سیستم‌های ماکروسکوپی قابل صرف نظر کردن هستند.

## ۲-۵-۱ تفسیر احتمالاتی

در مکانیک کوانتومی حالت (یا یکی از حالت‌های) یک ذره با تابع موج  $\psi(\mathbf{r}, t)$  متناظر با طول موج دوبروی آن ذره توصیف می‌شود. بنابراین  $\psi(\mathbf{r}, t)$  ویژگی‌های موجی یک ذره را توصیف می‌کند. در نتیجه هنگام بحث پیرامون اثرات کوانتومی، استفاده از تابع دامنه‌ی  $\psi$  که مجذور آن  $|\psi|^2$  برابر با شدت موج وابسته به این اثر کوانتومی است، مناسب به نظر می‌رسد. شدت یک موج در نقطه‌ی معلومی از فضا متناسب با احتمال یافتن ذره‌ی مادی در آن نقطه از فضا است.

در سال ۱۹۲۷ بورن  $|\psi|^2$  را به چگالی احتمال و  $d^3r |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$  را به احتمال یافتن  $dP(\mathbf{r}, t)$  یک ذره در زمان  $t$  و در المان حجم  $d^3r$  واقع در بین  $\mathbf{r}$  و  $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$  تفسیر کرد:

$$|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r = dP(\mathbf{r}, t) \quad (۶۱-۱)$$

که در آن  $|\psi|^2$  دارای بعد  $[\text{طول}]^{-۳}$  است. اگر روی تمام فضا انتگرال بگیریم آنگاه مطمئنیم که ذره جایی در آن فضا است. بنابراین احتمال کل یافتن ذره در جایی از فضا باید برابر با یک باشد:

$$\int_{\text{تمام فضا}} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r = ۱ \quad (۶۲-۱)$$

اکنون پرسش اساسی این است که چگونه می‌توان تابع موج  $\psi$  یک ذره را تعیین کرد؟ پاسخ به این پرسش با نظریه‌ی مکانیک کوانتومی داده می‌شود که در آن  $\psi$  به وسیله‌ی معادله‌ی شرودینگر تعیین می‌شود (فصل‌های ۳ و ۴).

## ۶-۱ گذارهای اتمی و طیف‌نمایی

فیزیک کلاسیک علاوه بر ناکامی در توضیح تابش جسم سیاه، اثر کامپتون، اثر فتوالکتریک، اثر تولید زوج و دوگانگی موج-ذره در توضیح بسیاری از پدیده‌های دیگر در مقیاس میکروسکوپی با ناکامی روبرو است. در این بخش حوزه‌ی دیگری (اتم) را در نظر می‌گیریم که فیزیک کلاسیک در توضیح آن نیز ناتوان است. مشاهدات تجربی نشان می‌دهند که اتم‌ها به صورت سیستم‌های پایدار و مقیدی وجود دارند و دارای تعدادی تراز گسسته‌ی انرژی هستند. فیزیک کلاسیک بیان می‌کند که هر سیستم مقید این‌چنینی باید پیوستاری از ترازهای انرژی را دارا باشد.

### ۱-۶-۱ مدل سیاره‌ای رادرفورد برای اتم

رادرفورد پس از کشف تجربی هسته‌ی اتم توسط خود وی در سال ۱۹۱۱ مدلی برای توضیح ویژگی‌های اتم پیشنهاد کرد. وی با الهام از حرکت مداری سیاره‌ها حول خورشید، اتم را متشکل از الکترون‌هایی که حول یک مرکز سنگین با بار مثبت (هسته) می‌گردند، در نظر گرفت. به زودی معلوم شد که این مدل (در چارچوب فیزیک کلاسیک) از دو نقص جدی رنج می‌برد: (الف) اتم‌ها ناپایدارند و (ب) اتم‌ها در محدوده‌ی پیوسته‌ای از بسامدها انرژی تابش می‌کنند.

اولین نقص از به کارگیری نظریه‌ی الکترومغناطیس ماکسول در مدل رادرفورد نتیجه می‌شود: با گردش الکترون حول هسته، الکترون شتاب می‌گیرد و ازاین رو انرژی تابش می‌کند بنابراین باید انرژی خود را از دست بدهد. سپس باید شعاع مدار به صورت پیوسته کاهش یابد (حرکت مارپیچ) تا زمانی که الکترون بر روی هسته فرو ریزد. زمان نوعی برای چنین فروریزشی در حدود  $۱۰^{-۸}$  s است. دوم این که چون بسامد انرژی

تابیده شده همان بسامد گردش حول هسته است و با کاهش شعاع مدار الکترون بسامد مداری به صورت پیوسته افزایش می‌یابد، بنابراین طیف تابشی گسیل شده از اتم باید پیوسته باشد. این دو نتیجه کاملاً در تضاد با آزمایش هستند، زیرا اتم‌ها پایدارند و انرژی را در محدوده‌ی بسامدهای گسسته تابش می‌کنند.

### ۱-۶-۲ مدل بوهر برای اتم هیدروژن

بوهر در سال ۱۹۱۳ با ترکیب مدل سیاره‌ای رادرفورد، فرضیه‌ی کوانتومی پلانک و مفهوم فوتون انیشتین، مدلی را پیشنهاد کرد که توضیحی دقیق برای طیف مشاهده شده‌ی اتم هیدروژن و توضیحی قانع‌کننده برای پایداری آن ارائه می‌داد.

بوهر (مانند رادرفورد) فرض کرد که هر الکترون اتم در مداری حول هسته تحت تأثیر جاذبه‌ی الکتروستاتیک هسته حرکت می‌کند. مدارهای دایره‌ای یا بیضوی در مکانیک کلاسیک مجازند. برای سادگی بوهر تنها مدارهای دایره‌ای را در نظر گرفت و چندین فرض نسبتاً دلخواه را که فیزیک کلاسیک را نقض می‌کردند ولی در توضیح بسیاری از ویژگی‌های اتم هیدروژن کاملاً موفق بودند را ارائه نمود:

- به جای پیوستاری از مدارها (که در مکانیک کلاسیک امکان‌پذیرند)، تنها مجموعه‌ی گسسته‌ای از مدارهای پایدار دایره‌ای (که حالت‌های مانا نامیده می‌شوند) مجازند. اتم‌ها تنها در حالت‌های پایدار مشخصی با انرژی معین  $E_1, E_2, E_3, \dots$  می‌توانند وجود داشته باشند.
- مدارهای (مانای) مجاز متناظر با مدارهایی هستند که تکانه‌ی زاویه‌ای مداری الکترون در آنها مضرب صحیحی از  $\hbar$  باشد ( $\hbar = h/2\pi$ ):

$$L = n\hbar \quad (۱-۶۳)$$

این رابطه به عنوان قاعده‌ی کوانتس تکانه‌ی زاویه‌ای بوهر شناخته می‌شود.

- تا زمانی که یک الکترون در یک مدار مانا می‌ماند، انرژی الکترومغناطیسی تابش نمی‌کند. گسیل یا جذب تابش تنها زمانی روی می‌دهد که یک الکترون از یک مدار به مدار مجاز دیگر جهش کند. تابش متناظر با گذار الکترون از مدار انرژی  $E_n$  به مدار انرژی دیگر  $E_m$  به اندازه‌ی انرژی یک فوتون صورت می‌پذیرد:

$$h\nu = E_n - E_m \quad (۱-۶۴)$$

بنابراین یک اتم می‌تواند تابش را با جهش الکترون به مدار پایین‌تر گسیل و یا با جهش به مدار بالاتر جذب کند.

در ادامه قصد داریم تا فرض‌های بوهر را بر اتم هیدروژن اعمال کنیم و توصیفی کمی از ترازهای انرژی و طیف‌نمایی اتم هیدروژن ارائه نماییم.

## ۱-۲-۶-۱ ترازهای انرژی اتم هیدروژن

بباید ببینیم چگونه شرط کوانتس بوهر (۱-۶۳) به مجموعه‌ی گسسته‌ای از انرژی‌های  $E_n$  و شعاع‌های  $r_n$  می‌انجامد. هنگامی که الکترون اتم هیدروژن در یک مدار دایره‌ای حرکت می‌کند، به کار بردن قانون دوم نیوتن برای الکترون رابطه‌ی  $F = m_e a_r = m_e v^2 / r$  را نتیجه می‌دهد. چون تنها نیروی  $15$  وارد بر الکترون نیروی الکتروستاتیک اعمال شده بر آن توسط پروتون است، می‌توانیم نیروی الکتروستاتیک را با نیروی مرکزگرا برابر قرار دهیم و به دست آوریم:

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = m_e \frac{v^2}{r} \quad (۱-۶۵)$$

حال فرض (۱-۶۳) نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$L = m_e v r = n \hbar \quad (۱-۶۶)$$

از این رو  $m_e v^2 / r = n^2 \hbar^2 / (m_e r^3)$  است که هنگامی که با (۱-۶۵) ترکیب شود رابطه‌ی  $e^2 / (4\pi\epsilon_0 r^2) = n^2 \hbar^2 / (m_e r^3)$  را نتیجه می‌دهد. این رابطه به نوبه‌ی خود به یک عبارت کوانتیده برای شعاع می‌انجامد:

$$r_n = \left( \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} \right) n^2 = n^2 a_0 \quad (۱-۶۷)$$

که در آن

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} \quad (۱-۶۸)$$

شعاع بوهر ( $a_0 = 0.053 \text{ nm}$ ) است. می‌توان سرعت الکترون در مدار را از (۱-۶۶) و (۱-۶۷) به دست آورد:

$$v_n = \frac{n \hbar}{m_e r_n} = \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{1}{n \hbar} \quad (۱-۶۹)$$

به یاد داشته باشید که نسبت بین سرعت الکترون در مدار نخست بوهر ( $v_1$ ) و سرعت نور برابر با ثابت بدون بعد  $\alpha$  است (که به عنوان ثابت ساختار ریز شناخته می‌شود):

$$\alpha = \frac{v_1}{c} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137} \Rightarrow v_1 = \alpha c = \frac{3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}}{137} \simeq 2.19 \times 10^6 \text{ ms}^{-1} \quad (۱-۷۰)$$

۱۵. در مقیاس اتمی، گرانش اثری قابل اندازه‌گیری ندارد. نیروی گرانش بین پروتون هیدروژن و الکترون  $F_G = (G m_e m_p) / r^2$  در مقایسه با نیروی الکتروستاتیک  $F_e = e^2 / (4\pi\epsilon_0 r^2)$  قابل چشم‌پوشی است زیرا  $F_G / F_e = (4\pi\epsilon_0) G m_e m_p / e^2 \simeq 10^{-42}$ .

در رابطه با انرژی کل الکترون باید گفت که این انرژی از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$E = \frac{1}{2} m_e v^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad (71-1)$$

در به دست آوردن این رابطه فرض کرده‌ایم که هسته (یعنی پروتون) در مقایسه با الکترون بی‌نهایت سنگین است و از این رو می‌توان آن را ساکن در نظر گرفت. یعنی انرژی سیستم الکترون-پروتون از انرژی جنبشی الکترون به اضافه‌ی انرژی پتانسیل الکتروستاتیک تشکیل شده است. از (۶۵-۱) می‌بینیم که انرژی جنبشی ( $\frac{1}{2} m_e v^2$ ) برابر با  $\frac{1}{2} e^2 / (4\pi\epsilon_0 r)$  است و هنگامی که با رابطه‌ی (۷۱-۱) ترکیب شود، به معادله‌ی زیر می‌انجامد:

$$E = -\frac{1}{2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \quad (72-1)$$

این معادله نشان می‌دهد که انرژی جنبشی الکترون در مداری به شعاع  $r$  برابر است با منفی نصف انرژی پتانسیل (که به قضیه‌ی ویربال در مکانیک کلاسیک مشهور است). با جاگذاری  $r_n$  از رابطه‌ی (۶۷-۱) در رابطه‌ی (۷۲-۱) به دست می‌آوریم:

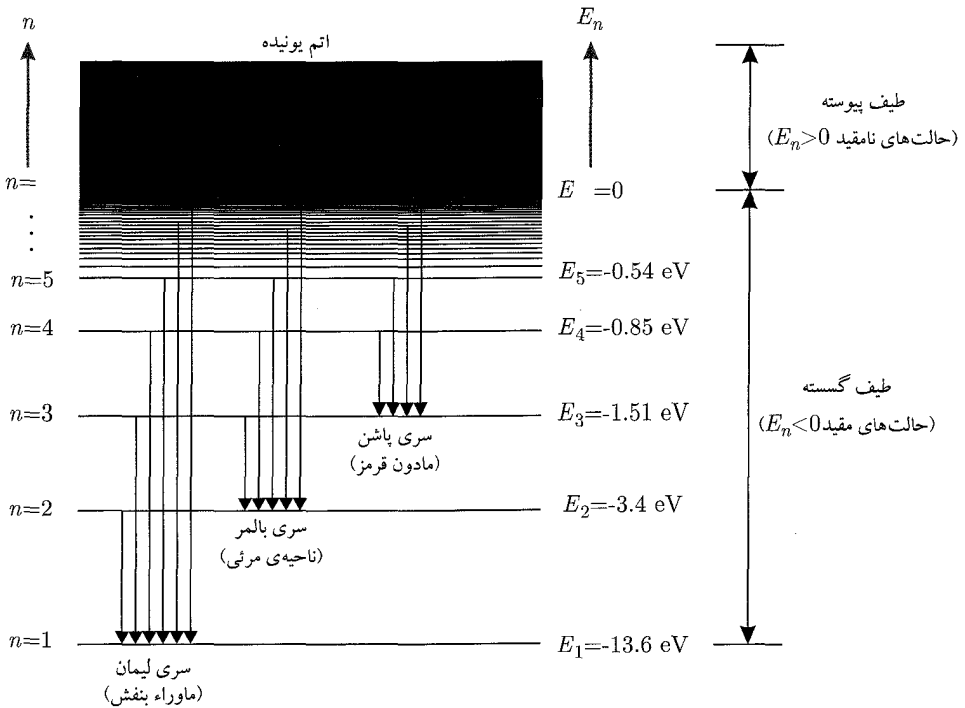
$$E_n = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_n} = -\frac{m_e}{2\hbar^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{1}{n^2} = -\frac{R}{n^2} \quad (73-1)$$

که در آن  $R$  ثابت ریذبرگ است و به عنوان انرژی بوهر شناخته می‌شود:

$$R = \frac{m_e}{2\hbar^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 = 13,6 \text{ eV} \quad (74-1)$$

انرژی  $E_n$  هر حالت اتم با مقدار عدد کوانتومی  $n$  تعیین می‌شود. علامت منفی انرژی (۷۳-۱) به دلیل طبیعت حالت مقید اتم است یعنی حالت‌های با انرژی منفی  $E_n < 0$  متناظر با حالت‌های مقید هستند. ساختار طیف انرژی اتم که از (۷۳-۱) به دست می‌آید، در شکل ۱۲-۱ نشان داده شده است (که در آن طبق قرارداد، ترازهای انرژی به صورت خط‌های افقی نشان داده شده‌اند). با افزایش  $n$  فاصله‌ی ترازهای انرژی به سرعت کاهش می‌یابد. چون  $n$  می‌تواند تمام مقادیر صحیح از  $n = 1$  تا  $n = +\infty$  را بگیرد، طیف انرژی اتم محتوی تعداد نامتناهی تراز انرژی گسسته است. در حالت پایه ( $n = 1$ ) اتم دارای انرژی  $E_1 = -R$  و شعاع  $a_0$  است. حالت‌های  $n = 2, 3, 4, \dots$  متناظر با حالت‌های برانگیخته‌ی اتم هستند زیرا انرژی آنها بزرگ‌تر از انرژی حالت پایه است.

هنگامی که عدد کوانتومی  $n$  بسیار بزرگ است ( $n \rightarrow +\infty$ )، شعاع  $r_n$  اتم نیز بسیار بزرگ خواهد بود اما مقادیر انرژی به سمت صفر میل می‌کنند ( $E_n \rightarrow 0$ ). این بدان معنی است که پروتون و الکترون بسیار دور از یکدیگر هستند و از این رو دیگر مقید نیستند و اتم یونیده است. در این حالت محدودیتی



شکل ۱-۱۲ ترازهای انرژی و گذارهای بین آنها برای اتم هیدروژن.

مقدار انرژی جنبشی الکترون وجود ندارد زیرا آزاد است. در شکل ۱-۱۲ این وضعیت با پیوستار حالت های انرژی مثبت ( $E_n > 0$ ) نمایش داده شده است.

به یاد بیاورید که در به دست آوردن (۱-۶۷) و (۱-۷۳) از جرم پروتون صرف نظر کردیم. اگر آن را نیز در نظر بگیریم آنگاه عبارت های (۱-۶۷) و (۱-۷۳) به صورت زیر در می آیند:

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{\mu e^2} n^2 = \left(1 + \frac{m_e}{m_p}\right) a_0 n^2 \quad (۷۵-۱)$$

$$E_n = -\frac{\mu}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{1}{n^2} = -\frac{1}{1 + m_e/m_p} \frac{\mathcal{R}}{n^2}$$

که در آن  $\mu = m_p m_e / (m_p + m_e) = m_e / (1 + m_e/m_p)$  جرم کاهش یافته سیستم پروتون-الکترون است.

باید یادآوری کنیم که می توان  $E_n$  و  $r_n$  در رابطه ی (۷۵-۱) (که برای اتم هیدروژن به دست آمد) را به یون های هیدروژن گونه که همه ی الکترون های آنها به استثنای یک الکترون خارج شده اند، تعمیم داد. برای به دست آوردن شعاع و انرژی الکترون در حال حرکت به دور یک هسته ی ثابت با  $Z$  پروتون تنها باید  $e^2$



در (۷۵-۱) را با  $Ze^2$  جایگزین کنیم:

$$r_n = \left(1 + \frac{m_e}{M}\right) \frac{a_0}{Z} n^2, \quad E_n = -\frac{Z^2}{1 + m_e/M} \frac{\mathcal{R}}{n^2} \quad (۷۶-۱)$$

که در آن  $M$  جرم هسته است. در حالی که  $m_e/M \ll 1$  است، می‌توانیم از جمله‌ی  $m_e/M$  صرف‌نظر کنیم.

### فرضیه‌ی دوبروی و شرط کوانتس بوه‌ر

می‌توان شرط کوانتس بوه‌ر (۶۳-۱) را تأییدی بر فرضیه‌ی دوبروی در نظر گرفت. به دلیل این که موج وابسته به الکترون یک اتم یک موج ایستاده است، محیط مدار الکترون باید برابر با مضرب صحیحی از طول موج الکترون باشد:

$$2\pi r = n\lambda \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (۷۷-۱)$$

اگر از رابطه‌ی دوبروی  $\lambda = h/p = h/(m_e v)$  استفاده کنیم می‌توانیم این رابطه را به رابطه‌ی (۶۳-۱) یا (۶۶-۱) کاهش دهیم. یعنی با وارد کردن  $\lambda = h/(m_e v)$  در رابطه‌ی (۷۷-۱) و استفاده از این واقعیت که تکانه‌ی زاویه‌ای مداری الکترون برابر با  $L = m_e v r$  است، داریم:

$$2\pi r = n\lambda = n \frac{h}{m_e v} \implies m_e v r = n \frac{h}{2\pi} \implies L = n\hbar \quad (۷۸-۱)$$

که با شرط کوانتس بوه‌ر (۶۳-۱) یکسان است. در واقع این رابطه بیان می‌کند که تنها مدارهای مجاز الکترون مدارهایی هستند که محیط آنها برابر با مضرب‌های صحیحی از طول موج دوبروی باشد. به عنوان مثال در اتم هیدروژن، هنگامی که اتم در حالت پایه‌ی خود ( $n = 1$ ) باشد، محیط مدار الکترون برابر با  $\lambda$  و زمانی که اتم در نخستین حالت برانگیخته‌ی خود باشد ( $n = 2$ )، برابر با  $2\lambda$  است و زمانی که اتم در دومین حالت برانگیخته‌ی خود باشد ( $n = 3$ )، برابر با  $3\lambda$  است و به همین ترتیب.

### ۶-۲-۱ طیف‌نمایی اتم هیدروژن

حال با مشخص شدن طیف اتم هیدروژن، به مطالعه‌ی طیف‌نمایی آن می‌پردازیم. برخلاف طبیعت پیوسته‌ی توزیع طیفی تابش گسیل شده به وسیله‌ی اجسام تابان، تابش گسیل شده یا جذب شده به وسیله‌ی یک گاز توزیع طیفی گسسته‌ای را نشان می‌دهد. هنگامی که گازی را در معرض تخلیه‌ی الکتریکی (یا در معرض شعله) قرار می‌دهیم، تابش گسیل شده از اتم‌های برانگیخته‌ی تخلیه‌ی گاز متشکل از تعدادی خط تیز است (خط‌های روشن با رنگ خالص همراه با تاریکی در بین آنها). موفقیت اصلی مدل بوه‌ر توانایی آن در

پیش‌بینی دقیق تیزی خط‌های طیفی گسیل شده یا جذب شده به وسیله‌ی اتم است. این مدل به وضوح نشان می‌دهد که این خط‌های گسسته متناظر با ترازهای انرژی دقیقاً تعریف شده‌ی اتم هستند. تابش گسیل شده از یک اتم از گذار الکترون از یک حالت مجاز  $n$  به حالت مجاز دیگر  $m$  نتیجه می‌شود. این تابش دارای یک بسامد خوش‌تعریف (تیز)  $\nu$  است:

$$h\nu = E_n - E_m = \mathcal{R} \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (79-1)$$

به عنوان مثال سری لیمان (که متناظر با گسیل تابش ماوراء بنفش است) به‌خاطر گذار از حالت‌های برانگیخته‌ی  $n = 2, 3, 4, 5, \dots$  به حالت پایه‌ی  $n = 1$  است (شکل ۱-۱۲):

$$h\nu_L = E_n - E_1 = \mathcal{R} \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n > 1) \quad (80-1)$$

سری گذار دیگر (سری بالمر) به‌خاطر گذار به نخستین حالت برانگیخته ( $n = 2$ ) است:

$$h\nu_B = E_n - E_2 = \mathcal{R} \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n > 2) \quad (81-1)$$

اتم تابش مرئی را در نتیجه‌ی گذارهای بالمر تابش می‌کند. سری‌های دیگر عبارتند از پاشن ( $n \rightarrow 3$ ) با  $n > 3$ ، براکت ( $n \rightarrow 4$  با  $n > 4$ )، پفوند ( $n \rightarrow 5$  با  $n > 5$ ) و به همین ترتیب. این سری‌ها متناظر با گسیل تابش مادون قرمز هستند. به یاد داشته باشید که نتیجه‌های به‌دست آمده از (۷۹-۱) هماهنگی چشمگیری با نتیجه‌های به‌دست آمده از طیف‌نمایی تجربی دارند.

تا اینجا ملاحظه کردیم وقتی یک فوتون از داخل ماده عبور می‌کند، به صورت زیر با ماده برهمکنش دارد:

- اگر فوتون با الکترونی که ساکن است تماس پیدا کند آنگاه مانند یک ذره از آن پراکنده می‌شود: تکانه‌ای را به الکترون منتقل می‌کند، پراکنده می‌شود و به حرکت خود با سرعت نور اما با بسامدی پایین‌تر (یا طول موج بالاتر) ادامه خواهد داد. این همان اثر کامپتون است.
- اگر فوتون با الکترون اتم تماس پیدا کند آنگاه مطابق با یکی از حالت‌های زیر برهمکنش خواهد داشت:

- اگر فوتون انرژی کافی داشته باشد آنگاه الکترون را به طور کامل از اتم خارج می‌کند و سپس ناپدید می‌شود زیرا تمام انرژی خود را به الکترون منتقل می‌کند. این همان اثر فتوالکتریک است. - رویهمرفته اگر انرژی  $h\nu$  فوتون برای خارج کردن الکترون کافی نباشد آنگاه الکترون را به مداری بالاتر می‌فرستد البته به شرط آن که  $h\nu$  برابر با اختلاف انرژی بین مدارهای اولیه و نهایی باشد:

$h\nu = E_n - E_m$ . در این فرآیند فوتون تمام انرژی خود را به الکترون منتقل خواهد کرد و سپس ناپدید می‌شود و اتم در یک حالت برانگیخته باقی خواهد ماند. به‌هرحال اگر  $h\nu \neq E_n - E_m$  باشد آنگاه هیچ اتفاقی نخواهد افتاد (فوتون به سادگی پراکنده می‌شود).

• اگر فوتون با هسته‌ی یک اتم تماس پیدا کند و انرژی فوتون به اندازه‌ی کافی بالا باشد ( $h\nu \geq 2m_e c^2$ ) آنگاه فوتون با تولید ماده ناپدید می‌شود: یک زوج الکترون-پوزیترون تولید خواهد شد. این همان تولید زوج است.

### مثال ۷-۱ (شعاع پوزیترونیم و طیف انرژی)

پوزیترونیم حالت مقید یک الکترون و یک پوزیترون است. این مجموعه یک اتم هیدروژن‌گونه با عمری کوتاه را تشکیل می‌دهد، که در آن پروتون با یک پوزیترون جایگزین شده است.  
(الف) عبارتهای مربوط به انرژی  $E_n$  و شعاع  $r_n$  را محاسبه کنید.  
(ب) مقادارهای انرژی و شعاع‌های پایین‌ترین سه حالت را تخمین بزنید.  
(پ) بسامد و طول موج تابش الکترومغناطیسی‌ای را محاسبه کنید که اتم پوزیترونیم را وقتی که در نخستین حالت برانگیخته‌ی خود است، یونیده می‌کند.

حل

(الف) می‌توان عبارتهای مربوط به شعاع و انرژی پوزیترونیم را یک‌بار از رابطه‌ی (۷۵-۱) و به سادگی با جاگذاری جرم کاهش یافته‌ی  $\mu$  با جرم کاهش یافته‌ی سیستم الکترون-پوزیترون  $\mu = m_e m_e / (m_e + m_e) = \frac{1}{2} m_e$  به‌دست آورد:

$$r_n = \left( \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} \right) n^2, \quad E_n = -\frac{m_e}{4\hbar^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{n^2} \quad (۸۲-۱)$$

می‌توانیم  $r_n$  و  $E_n$  را برحسب شعاع بوهر  $a_0 = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / (m_e e^2) = 0.053 \text{ nm}$  و ثابت ریذبرگ  $\mathcal{R} = \frac{m_e}{4\hbar^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 = 13.6 \text{ eV}$  به‌صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$r_n = 2a_0 n^2, \quad E_n = -\frac{\mathcal{R}}{2n^2} \quad (۸۳-۱)$$

که با رابطه‌های  $r_{n_{\text{pos}}} = \frac{1}{2} E_{n_H}$  و  $r_{n_{\text{pos}}} = 2r_{n_H}$  به عبارتهای متناظر هیدروژن مربوط می‌شوند.  
(ب) شعاع‌های پایین‌ترین سه حالت پوزیترونیم از رابطه‌های  $r_2 = 8a_0 = 0.424 \text{ nm}$  و  $r_1 = 2a_0 = 0.106 \text{ nm}$  و  $r_3 = 18a_0 = 0.954 \text{ nm}$  به‌دست می‌آیند. انرژی‌های متناظر با این شعاع‌ها عبارتند از  $E_3 = -\frac{1}{18}\mathcal{R} = -0.756 \text{ eV}$  و  $E_2 = -\frac{1}{4}\mathcal{R} = -1.7 \text{ eV}$ ،  $E_1 = -\frac{1}{2}\mathcal{R} = -6.8 \text{ eV}$

(پ) چون انرژی نخستین حالت برانگیخته‌ی پوزیترونیم برابر با

$$E_2 = -1,7\text{eV} = -1,7 \times 1,6 \times 10^{-19}\text{J} = -2,72 \times 10^{-19}\text{J}$$

است، انرژی تابش الکترومغناطیسی‌ای که پوزیترونیم را یونیده می‌کند برابر است با

$$h\nu = E_\infty - E_2 = 0 - (-2,72 \times 10^{-19}\text{J}) = 2,72 \times 10^{-19}\text{J} = E_{\text{ion}}$$

و از این رو بسامد و طول موج تابش یونیده کننده از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$\nu = \frac{E_{\text{ion}}}{h} = \frac{2,72 \times 10^{-19}\text{J}}{6,6 \times 10^{-34}\text{Js}} = 4,12 \times 10^{14}\text{Hz} \quad (۸۴-۱)$$

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3 \times 10^8\text{ms}^{-1}}{4,12 \times 10^{14}\text{Hz}} = 7,28 \times 10^{-7}\text{m} \quad (۸۵-۱)$$

## ۷-۱ قاعده‌های کوانتش

ایده‌هایی که منجر به توضیح موفق تابش جسم سیاه، اثر فتوالکتریک و ترازهای انرژی هیدروژن شدند بر مبنای دو قاعده‌ی کوانتش استوار هستند: (الف) رابطه‌ی (۷-۱) که پلانک آن را برای توضیح کوانتش انرژی ( $E = nh\nu$ ) اصل موضوعه قرار داد و (ب) شرط (۶۳-۱) که بوهر آن را برای توضیح کوانتش تکانه‌ی زاویه‌ای مدارای الکترون اصل موضوعه قرار داد ( $L = n\hbar$ ). تلاش‌هایی برای درک یا تفسیر این قاعده‌ها صورت گرفت. در سال ۱۹۱۶ ویلسون و زومرفیلد طرحی را پیشنهاد کردند که شامل هر دو قاعده‌ی کوانتش به صورت حالت‌های خاص بود. در اصل طرح آنها (که تنها برای سیستم‌هایی به کار می‌رود که مختصات دوره‌ای زمانی دارند) وابسته به کوانتیده کردن متغیر کنش ( $J = \oint pdq$ ) مکانیک کلاسیک است:

$$\oint pdq = nh \quad (n = 0, 1, 2, 3, \dots) \quad (۸۶-۱)$$

که در آن  $n$  یک عدد کوانتومی و  $p$  مزدوج تکانه‌ی وابسته به مختصه‌ی  $q$  است و انتگرال بسته‌ی  $\oint$  روی یک دوره‌ی  $q$  گرفته می‌شود. این رابطه به عنوان قاعده‌ی کوانتش ویلسون-زومرفیلد شناخته می‌شود.

### قاعده‌ی کوانتش ویلسون-زومرفیلد و رابطه‌ی کوانتش پلانک

در ادامه قصد داریم نشان دهیم که چگونه قاعده‌ی ویلسون-زومرفیلد (۸۶-۱) به رابطه‌ی کوانتش پلانک  $E = nh\nu$  می‌انجامد. برای روشن شدن موضوع، یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی که در آن یک ذره به جرم  $m$  به صورت هماهنگ بین  $-a \leq x \leq a$  نوسان می‌کند را در نظر بگیرید. انرژی کلاسیکی این

نوسانگر از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$E(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (۸۷-۱)$$

از این رو  $p(E, x) = \pm \sqrt{2mE - m^2\omega^2 x^2}$  است. در نقطه‌های بازگشت ( $x_{\min} = -a$  و  $x_{\max} = a$ ، انرژی صرفاً انرژی پتانسیل است:  $E = V(\pm a) = \frac{1}{2}m\omega^2 a^2$  و بنابراین  $a = \sqrt{2E/(m\omega^2)}$  است. با استفاده از  $p(E, x) = \pm \sqrt{2mE - m^2\omega^2 x^2}$  و از ملاحظات تقارنی می‌توانیم کنش را به صورت زیر بنویسیم:

$$\oint p dx = 2 \int_{-a}^a \sqrt{2mE - m^2\omega^2 x^2} dx = 4m\omega \int_0^a \sqrt{a^2 - x^2} dx \quad (۸۸-۱)$$

تغییر متغیر  $x = a \sin \theta$  به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\int_0^a \sqrt{a^2 - x^2} dx = a^2 \int_0^{\pi/2} \cos^2 \theta d\theta = \frac{a^2}{2} \int_0^{\pi/2} (1 + \cos 2\theta) d\theta = \frac{\pi a^2}{4} = \frac{\pi E}{2m\omega^2} \quad (۸۹-۱)$$

چون  $\omega = 2\pi\nu$  است (که در آن  $\nu$  بسامد نوسان‌ها است)، داریم:

$$\oint p dx = \frac{2\pi E}{\omega} = \frac{E}{\nu} \quad (۹۰-۱)$$

با وارد کردن (۹۰-۱) در (۸۶-۱) به قاعده‌ی کوانتس پلانک  $E = nh\nu$  می‌رسیم یعنی

$$\oint p dx = nh \quad \Rightarrow \quad \frac{E}{\nu} = nh \quad \Rightarrow \quad E_n = nh\nu \quad (۹۱-۱)$$

می‌توانیم این رابطه را به صورتی که در ادامه می‌آید، تفسیر کنیم. از مکانیک کلاسیک می‌دانیم که حرکت یک جسم تحت تأثیر نوسان‌های هماهنگ در فضای فاز  $xp$  و به وسیله‌ی پیوستاری از بیضی‌ها که مساحت آنها با  $\oint p dx = E/\nu$  مشخص می‌شود، نمایش داده می‌شود زیرا انتگرال  $\oint p(x) dx$  مساحت محاط به وسیله‌ی مسیر بسته‌ی ذره در فضای فاز  $xp$  را به دست می‌دهد. شرط (۸۶-۱) یا (۹۱-۱) سازوکاری برای انتخاب (از پیوستار مقدارهای انرژی نوسانگر) تنها انرژی‌های  $E_n$  که به ازای آنها مساحت پربندهای  $p(x, E_n) = \sqrt{2m(E_n - V(x))}$  برابر با  $nh$  با  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$  هستند را فراهم می‌کند. یعنی تنها حالت‌های مجاز نوسان حالت‌هایی هستند که در فضای فاز به وسیله‌ی مجموعه‌ای از بیضی‌ها با مساحت‌های «کوانتیده‌ی»  $\oint p dx = nh$  نمایش داده می‌شوند. به یاد داشته باشید که مساحت بین دو حالت متوالی برابر با  $h$  است:  $\oint p(x, E_{n+1}) dx - \oint p(x, E_n) dx = h$ . این محاسبه‌ی ساده نشان می‌دهد که قاعده‌ی پلانک برای کوانتس انرژی معادل با کوانتس کنش است.

### قاعده‌ی کوانتس و ویلسون-زومرفیلد و شرط کوانتس بوهر

حال بیابید نشان دهیم که چگونه قاعده‌ی ویلسون-زومرفیلد (۱-۸۶) به شرط کوانتس بوهر (۱-۶۳) می‌انجامد. برای الکترونی که در یک مدار دایره‌ای به شعاع  $r$  در حال حرکت است استفاده از مختصات قطبی  $(r, \varphi)$  مناسب است. کنش  $J = \oint pdq$  (که در مختصات دکارتی به وسیله‌ی تکانه‌ی خطی  $p$  و متغیر مزدوج  $x$  آن بیان می‌شود) در مختصات کروی به وسیله‌ی تکانه‌ی زاویه‌ای مداری  $L$  و متغیر مزدوج  $\varphi$  آن (زاویه‌ی قطبی) که  $\varphi$  برحسب زمان دوره‌ای است، مشخص می‌شود: یعنی  $J = \oint pdq$  در مختصات قطبی با  $\int_0^{2\pi} Ld\varphi$  داده می‌شود. در این حالت (۱-۸۶) به صورت زیر در می‌آید:

$$\int_0^{2\pi} Ld\varphi = nh \quad (۱-۹۲)$$

به‌ازای پتانسیل‌های متقارن کروی (مانند این حالت که در آن الکترون پتانسیل کولنی پروتون را تجربه می‌کند)، تکانه‌ی زاویه‌ای  $L$  یک ثابت حرکت است. از این رو (۱-۹۲) نشان می‌دهد که تکانه‌ی زاویه‌ای تنها می‌تواند برحسب واحدهای صحیح  $\hbar$  تغییر کند:

$$L \int_0^{2\pi} d\varphi = nh \quad \Rightarrow \quad L = n \frac{\hbar}{2\pi} = n\hbar \quad (۱-۹۳)$$

که با شرط کوانتس بوهر (۱-۶۳) یکسان است. همچنین این محاسبه نشان می‌دهد که کوانتس بوهر معادل با کوانتس کنش است. همانطور که در بالا بیان شد (۱-۷۸)، شرط کوانتس بوهر (۱-۶۳) این معنی فیزیکی را دارد که الکترون ضمن گردش به دور هسته، تنها در مدارهای به خوبی مشخصی حرکت می‌کند (مدارهایی با محیط‌هایی برابر با مضرب‌های صحیحی از طول موج دوبروی).

به یاد داشته باشید که قاعده‌ی کوانتس ویلسون-زومرفیلد (۱-۸۶) به ما نمی‌گوید که چگونه ترازهای انرژی سیستم‌های غیردوره‌ای را محاسبه کنیم. این قاعده تنها برای سیستم‌هایی که دوره‌ای‌اند، به کار می‌رود. به عنوان یک یادآوری تاریخی، قاعده‌های کوانتس پلانک و بوهر از سال ۱۹۰۰ تا سال ۱۹۲۵ در فیزیک کوانتومی غالب بوده‌اند. فیزیک کوانتومی این دوره به عنوان «نظریه‌ی کوانتومی قدیم» شناخته می‌شود. موفقیت این قاعده‌های کوانتس (که نتیجه‌های آنها با نتیجه‌های تجربی هماهنگی قابل ملاحظه‌ای داشت) مدرک غیرقابل انکاری برای فرضیه‌ی کوانتس تمام سیستم‌های مادی ارائه کرد و پیروزی «نظریه‌ی کوانتومی قدیم» را بنا نهاد. شرط‌های کوانتس با وجود موفقیت کمی که داشتند، از ناسازگاری‌هایی هم رنج می‌بردند. این قاعده‌ها اساسی نظری نداشتند و به صورت نسبتاً دلخواهی اصل موضوعه قرار گرفته بودند.

## ۸-۱ بسته‌های موج

در اینجا مسأله این است که چگونه یک ذره در چارچوب مکانیک کوانتومی توصیف می‌شود. همانطور که ذره‌های کوانتومی به صورت مشترک ویژگی‌های ذره‌ای و موجی را نمایش می‌دهند، باید به جستجوی

طرحی ریاضی پردازیم که بتواند به صورت همزمان آنها را در خود داشته باشد.

در فیزیک کلاسیک یک ذره به خوبی در فضا جایگزیده است زیرا می‌توان مکان و سرعت آن را با دقتی دلخواه به صورت همزمان محاسبه کرد. در مکانیک کوانتومی یک ذره به وسیله‌ی یک تابع موج متناظر با موج مادی وابسته به ذره (موج دوبروی) توصیف می‌شود. تابع‌های موج به تمام فضا بستگی دارند و از این رو نمی‌توانند جایگزیده باشند. اگر تابع موج طوری ساخته شود که در همه جا به استثنای همسایگی ذره یا در همسایگی «مسیر کلاسیکی» صفر شود آنگاه می‌توان از آن برای توصیف دینامیک ذره استفاده کرد. یعنی می‌توان ذره‌ای که در ناحیه‌ی مشخصی از فضا جایگزیده است را به وسیله‌ی یک موج مادی که دامنه‌ی آن در آن ناحیه بزرگ و در خارج از آن ناحیه صفر است، توصیف کرد. بنابراین، این موج مادی باید حول ناحیه‌ای از فضا که ذره در آنجا محدود شده است، جایگزیده باشد.

تابع موج جایگزیده یک بسته‌ی موج نامیده می‌شود. بنابراین یک بسته‌ی موج متشکل است از دسته‌ای از موج‌ها با طول موج‌های اندکی متفاوت و با فازها و دامنه‌هایی که در ناحیه‌ی کوچکی از فضا به گونه‌ای انتخاب می‌شوند که به صورت سازنده و در جاهای دیگر به صورت ویرانگر تداخل کنند. نه تنها بسته‌های موج در توصیف ذره‌ها «ی منفرد» که محدود به ناحیه‌ی فضایی مشخصی هستند، مفیدند بلکه نقشی کلیدی در درک ارتباط بین مکانیک کوانتومی و مکانیک کلاسیک بازی می‌کنند. بنابراین مفهوم بسته‌ی موج یک ابزار وحدت‌بخش ریاضی است که به صورت موفقیت‌آمیزی می‌تواند به رفتار ذره‌گونه‌ی طبیعت و همچنین رفتار موج‌گونه‌ی آن پردازد و آنها را شامل شود.

### ۱-۸-۱ بسته‌های موج جایگزیده

می‌توان بسته‌های موج جایگزیده را با برهنه‌ی موج‌هایی با طول موج اندکی متفاوت ساخت طوری که فازها و دامنه‌ها برهنه‌ی مورد نظر سازنده و در خارج از آن ناحیه ویرانگر کنند. از نظر ریاضی می‌توانیم این برهنه‌ی را به وسیله‌ی تبدیلات فوریه انجام دهیم. برای سادگی قصد داریم تا یک بسته‌ی موج یک‌بعدی را در نظر بگیریم. قرار است این بسته یک ذره‌ی «کلاسیکی» محدود به یک ناحیه‌ی یک‌بعدی (به عنوان مثال یک ذره‌ی در حال حرکت در امتداد محور  $x$ ) را توصیف کند. می‌توانیم بسته‌ی  $\psi(x, t)$  را از برهنه‌ی موج‌های تخت (در حال انتشار در امتداد محور  $x$ ) با بسامدهای (یا طول موج‌های) متفاوت بسازیم:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i(kx - \omega t)} dk \quad (94-1)$$

که در آن  $\phi(k)$  دامنه‌ی بسته‌ی موج است.

در ادامه می‌خواهیم در یک زمان معین نگاهی به شکل بسته بیندازیم. بعداً به تحول زمانی بسته‌های موج خواهیم پرداخت. با انتخاب این زمان به صورت  $t = 0$  و خلاصه‌نویسی  $\psi(x, 0)$  به صورت  $\psi_0(x)$

می‌توانیم (۹۴-۱) را به رابطه‌ی زیر کاهش دهیم:

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{ikx} dk \quad (۹۵-۱)$$

که در آن  $\phi(k)$  تبدیل فوریه‌ی  $\psi_0(x)$  است:

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0(x) e^{-ikx} dx \quad (۹۶-۱)$$

رابطه‌های (۹۵-۱) و (۹۶-۱) نشان می‌دهند که  $\psi_0(x)$  توسط  $\phi(k)$  تعیین می‌شود و برعکس. بسته‌ی (۹۵-۱) (که شکل آن به وسیله‌ی وابستگی  $\psi_0(x)$  به  $x$  تعیین می‌شود) در واقع ویژگی مورد نیاز جایگزیدگی را دارد:  $|\psi_0(x)|$  در  $x = 0$  دارای قله است و در فاصله‌های دور از  $x = 0$  صفر می‌شود. از یک سو هنگامی که  $x \rightarrow 0$  میل می‌کند داریم:  $e^{ikx} \rightarrow 1$  و از این رو موج‌های با بسامدهای متفاوت به صورت سازنده تداخل می‌کنند (یعنی انتگرال‌گیری روی  $k$ ‌های مختلف در (۹۵-۱) به صورت سازنده با یکدیگر جمع می‌شوند). از سوی دیگر در فاصله‌های دور از  $x = 0$  (یعنی  $|x| \gg 0$ ) فاز  $e^{ikx}$  دوره‌های زیادی را تجربه می‌کند که به نوسان‌های شدیدی می‌انجامد و در نتیجه به تداخل ویرانگر منجر می‌شود (یعنی جمع انتگرال‌گیری روی  $k$ ‌های متفاوت در (۹۵-۱) صفر می‌شود). این (به زبان تفسیر احتمالاتی بورن) بیان می‌کند که ذره با احتمال بیشتری در نزدیکی  $x = 0$  یافت می‌شود و شانس کمتری دارد که در فاصله‌های دور از  $x = 0$  یافت شود. توضیحات مشابهی نیز برای دامنه‌ی  $\phi(k)$  به کار می‌رود:  $\phi(k)$  در  $k = 0$  دارای قله است و در فاصله‌های دور از آن صفر می‌شود. شکل ۱-۱۳ یک بسته‌ی موج نوعی را نشان می‌دهد که ویژگی‌های جایگزیدگی مورد نیازی را که پیشتر در مورد آنها صحبت کردیم، دارد.

به صورت خلاصه ذره با یک تک‌طول موج دوبروی با بسامد و طول موج خوش‌تعریف نمایش داده نمی‌شود بلکه به وسیله‌ی بسته‌ی موجی که با جمع کردن تعداد زیادی از موج‌ها با بسامدهای متفاوت به دست می‌آید، نمایش داده می‌شود.

تفسیر فیزیکی بسته‌ی موج واضح است:  $\psi_0(x)$  تابع موج یا دامنه‌ی احتمال یافتن ذره در مکان  $x$  است و از این رو  $|\psi_0(x)|^2$  چگالی احتمال یافتن ذره در  $x$  و  $P(x)dx = |\psi_0(x)|^2 dx$  احتمال یافتن ذره بین  $x$  و  $x + dx$  را به دست می‌دهد. اما در مورد تفسیر فیزیکی  $\phi(k)$  چه می‌توان گفت؟ از (۹۵-۱) و (۹۶-۱) نتیجه می‌شود:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_0(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(k)|^2 dk \quad (۹۷-۱)$$

که اگر  $\psi(x)$  بهنجار باشد،  $\phi(k)$  نیز بهنجار است و برعکس. بنابراین می‌توان تابع  $\phi(k)$  را (مانند  $\psi_0(x)$ ) به صورت دامنه‌ی احتمال اندازه‌گیری بردار موج  $k$ ی یک ذره در حالت  $\phi(k)$  تفسیر کرد. علاوه بر این در



حالی که  $|\phi(k)|^2$  چگالی احتمال اندازه‌گیری  $k$  را به عنوان بردار موج یک ذره نمایش می‌دهد، کمیت  $P(k)dk = |\phi(k)|^2 dk$  احتمال یافتن بردار موج ذره را بین  $k$  و  $k + dk$  می‌دهد.

با بیان موج مادی متناظر با یک ذره برحسب انرژی ( $E$ ) و تکانه‌ی ( $p$ ) آن ذره به سادگی می‌توانیم اطلاعاتی را پیرامون حرکت ذره استخراج کنیم. با استفاده از رابطه‌های  $k = p/\hbar$ ،  $dk = dp/\hbar$ ،  $E = \hbar\omega$  و با تعریف دوباره‌ی  $\tilde{\phi}(p) = \phi(k)/\sqrt{\hbar}$  می‌توانیم رابطه‌های (۱-۹۴) تا (۱-۹۶) را به صورت زیر بنویسیم:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\phi}(p) e^{i(px - Et)/\hbar} dp \quad (۱-۹۸)$$

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\phi}(p) e^{ipx/\hbar} dp \quad (۱-۹۹)$$

$$\tilde{\phi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0(x) e^{-ipx/\hbar} dx \quad (۱-۱۰۰)$$

که در آن  $E(p)$  انرژی کل ذره‌ی توصیف شده توسط بسته‌ی موج  $\psi(x, t)$  و  $\tilde{\phi}(p)$  دامنه‌ی تکانه‌ی بسته است.

در ادامه قصد داریم تا ایده‌های اساسی بسته‌های موج را در قالب یک مثال ساده و در عین حال آموزنده روشن کنیم: بسته‌های موج گاوسی و مربعی.

### مثال ۸-۱ (بسته‌های موج گاوسی و مربعی)

(الف)  $\psi(x, 0)$  را برای بسته‌ی موج گاوسی  $\phi(k) = A \exp[-a^2(k - k_0)^2/4]$  بیابید که در آن  $A$  ضریب بهنجاری است که باید به دست آید. احتمال یافتن ذره در ناحیه‌ی  $-a/2 \leq x \leq a/2$  را محاسبه کنید.

(ب)  $\phi(k)$  را برای بسته‌ی موج مربعی  $\psi_0(x) = \begin{cases} A e^{ik_0 x} & |x| \leq a \\ 0 & |x| > a \end{cases}$  بیابید. ضریب  $A$  را بیابید.

به طوری که  $\psi(x)$  بهنجار شود.

حل

(الف) به دست آوردن ضریب بهنجارش  $A$  کار ساده‌ای است:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(k)|^2 dk = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\frac{a^2}{2}(k - k_0)^2\right] dk \quad (۱-۱۰۱)$$

که (با استفاده از تغییر متغیر  $z = k - k_0$  و با استفاده از انتگرال  $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a^2 z^2 / 2} dz = \sqrt{2\pi}/a$ ) یک باره به  $A = \sqrt{a/\sqrt{2\pi}} = [a^2/(2\pi)]^{1/4}$  می‌انجامد. اکنون بسته‌ی موج متناظر با

$$\phi(k) = \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{a^2}{4}(k - k_0)^2\right] \quad (102-1)$$

برابر است با

$$\begin{aligned} \psi_0(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{ikx} dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a^2(k-k_0)^2/4 + ikx} dk \quad (103-1) \end{aligned}$$

برای انتگرال‌گیری تنها به بازآرایی آرگومان توان به صورت زیر نیاز داریم:

$$-\frac{a^2}{4}(k - k_0)^2 + ikx = -\left[\frac{a}{4}(k - k_0) - \frac{ix}{a}\right]^2 - \frac{x^2}{a^2} + ik_0 x \quad (104-1)$$

معرفی متغیر جدید  $y = a(k - k_0)/2 - ix/a$  را به دست می‌دهد و زمانی که با (103-1) و (104-1) ترکیب شود، به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\begin{aligned} \psi_0(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2/a^2} e^{ik_0 x} e^{-y^2} \left(\frac{2}{a} dy\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{-x^2/a^2} e^{ik_0 x} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} dy \quad (105-1) \end{aligned}$$

چون  $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} dy = \sqrt{\pi}$  است، این عبارت به صورت زیر درمی‌آید:

$$\psi_0(x) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{-x^2/a^2} e^{ik_0 x} \quad (106-1)$$

که در آن  $e^{ik_0 x}$  فاز  $\psi_0(x)$  است.  $\psi_0(x)$  یک موج نوسانی با عدد موج  $k_0$  مدوله شده با یک پوش گاوسی است که مرکز آن در مبدأ قرار دارد. بعداً خواهیم دید که عامل فاز  $e^{ik_0 x}$  دارای اهمیت فیزیکی است. تابع موج  $\psi_0(x)$  (همانطور که در مکانیک کوانتومی الزامی است) یک تابع مختلط است. به یاد داشته باشید که  $\psi_0(x)$  (مانند  $\phi(k)$ ) بهنجار است. علاوه بر این معادله‌های (102-1) و (106-1) نشان می‌دهند که تبدیل فوریه‌ی یک بسته‌ی موج گاوسی نیز یک بسته‌ی موج گاوسی است.

احتمال یافتن ذره در ناحیه‌ی  $-a/2 \leq x \leq a/2$  را می‌توان یک‌بارہ از (۱۰۶-۱) به‌دست آورد:

$$P = \int_{-a/2}^{+a/2} |\psi_0(x)|^2 dx = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \int_{-a/2}^{+a/2} e^{-2x^2/a^2} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-1}^{+1} e^{-z^2/2} dz \simeq \frac{2}{\sqrt{\pi}} \quad (107-1)$$

که در آن از تغییر متغیر  $z = 2x/a$  استفاده کرده‌ایم.

(ب) بهنجارش  $\psi_0(x)$  سراسر است:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_0(x)|^2 dx = |A|^2 \int_{-a}^{+a} e^{-ik_0 x} e^{ik_0 x} dx = |A|^2 \int_{-a}^{+a} dx = 2a|A|^2 \quad (108-1)$$

ازاین‌رو  $A = 1/\sqrt{2a}$  است. تبدیل فوریه‌ی  $\psi_0(x)$  برابر است با

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0(x) e^{-ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \int_{-a}^{+a} e^{ik_0 x} e^{-ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{\pi a}} \frac{\sin[(k-k_0)a]}{k-k_0} \quad (109-1)$$

### ۲-۸-۱ بسته‌های موج و رابطه‌های عدم قطعیت

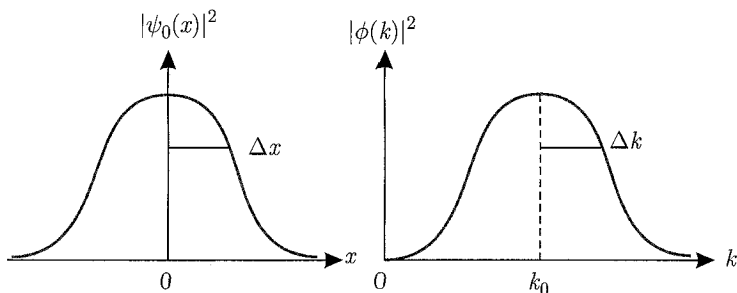
در اینجا می‌خواهیم نشان دهیم که پهنای بسته‌ی موج  $\psi_0(x)$  و پهنای دامنه‌ی  $\phi(k)$  آن مستقل نیستند و با یک رابطه‌ی وارون همبسته‌اند. همانطور که معلوم شده است، رابطه‌ی وارون بین پهنای  $x$  و  $k$  ارتباط مستقیمی با رابطه‌ی عدم قطعیت هایزنبرگ دارد.

برای سادگی بیابید ایده‌های اساسی را برای بسته موج گاوسی‌ای که در مثال قبل به آن پرداخته شد، نشان دهیم ((۱۰۲-۱) و (۱۰۶-۱) را ببینید):

$$\psi_0(x) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{-x^2/a^2} e^{ik_0 x}, \quad \phi(k) = \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} e^{-a^2(k-k_0)^2/2} \quad (110-1)$$

همانطور که در شکل ۱-۱۳ نشان داده شده است، مرکز  $|\psi_0(x)|^2$  و  $|\phi(k)|^2$  به ترتیب در  $x=0$  و  $k=k_0$  قرار دارد. بهتر است نیم‌پهنای  $\Delta x$  و  $\Delta k$  را متناظر با نیم‌بیشینه‌های  $|\psi_0(x)|^2$  و  $|\phi(k)|^2$  تعریف کنیم. در این صورت هنگامی که  $x$  از  $0$  تا  $\pm \Delta x$  و  $k$  از  $k_0$  تا  $k_0 \pm \Delta k$  تغییر می‌کند، تابع‌های  $|\psi_0(x)|^2$  و  $|\phi(k)|^2$  به  $e^{-1/2}$  کاهش می‌یابند:

$$\frac{|\psi(\pm \Delta x, 0)|^2}{|\psi(0, 0)|^2} = e^{-1/2}, \quad \frac{|\phi(k_0 \pm \Delta k)|^2}{|\phi(k_0)|^2} = e^{-1/2} \quad (111-1)$$



شکل ۱-۱۳ دو بسته‌ی موج جایگزیده:  $\psi_0(x) = (\frac{2}{\pi a^2})^{1/4} e^{-x^2/a^2} e^{ik_0 x}$  و  $\phi(k) = (a^2/2\pi)^{1/4} e^{-a^2(k-k_0)^2/2}$ . به ترتیب در  $x = 0$  و  $k = k_0$  دارای قله‌اند و در جاهای دورتر صفر می‌شوند.

این معادله‌ها، همراه با (۱-۱۱۰)، به ترتیب به  $e^{-2\Delta x^2/a^2} = e^{-1/2}$  و  $e^{-a^2\Delta k^2/2} = e^{-1/2}$  و یا به

$$\Delta x = \frac{a}{\sqrt{2}}, \quad \Delta k = \frac{1}{a} \quad (1-112)$$

می‌انجامند. بنابراین

$$\Delta x \Delta k = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (1-113)$$

چون  $\Delta k = \Delta p/\hbar$  است، داریم:

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \quad (1-114)$$

این رابطه نشان می‌دهد که اگر پهنای بسته در فضای  $x$  باریک باشد آنگاه پهنای آن در فضای تکانه باید بسیار پهن باشد و برعکس.

مقایسه‌ی (۱-۱۱۴) با رابطه‌های عدم قطعیت هایزنبرگ (۱-۵۷) معلوم می‌کند که بسته‌ی موج گاوسی (و نه یک نامساوی) را نتیجه می‌دهد. در حقیقت معادله‌ی (۱-۱۱۴) پایین‌ترین حد نامساوی هایزنبرگ است. در نتیجه بسته‌ی موج گاوسی، بسته‌ی موج عدم قطعیت کمینه نامیده می‌شود. تمام بسته‌های موج دیگر مقدارهای بیشتری را برای حاصل ضرب عدم قطعیت‌های  $x$  و  $p$  نتیجه می‌دهند:  $\Delta x \Delta p > \hbar/2$ . برای روشن شدن موضوع مسأله‌ی حل شده‌ی ۱-۱۱ را ببینید. در نتیجه مقدار حاصل ضرب عدم قطعیت‌های  $\Delta x \Delta p$  با انتخاب  $\psi$  تغییر می‌کند اما پایین‌ترین قید ( $\hbar/2$ ) به وسیله‌ی یک تابع موج گاوسی فراهم می‌شود. در اینجا دیدیم که چگونه مفهوم بسته‌ی موج راهی مکاشفه‌ای برای به دست آوردن رابطه‌های عدم قطعیت هایزنبرگ پیشنهاد می‌کند. شیوه‌ی استخراج دقیق‌تر در فصل ۲ ارائه خواهد شد.

## ۳-۸-۱ حرکت بسته‌های موج

پرسشی که در اینجا مطرح می‌شود این است که چگونه بسته‌های موج با گذشت زمان تحول می‌یابند؟ پاسخ به این پرسش بسیار مهم است زیرا نه تنها ایده‌ای پیرامون حرکت یک ذره‌ی کوانتومی در فضا ارائه می‌کند بلکه ایده‌ای پیرامون ارتباط بین مکانیک کلاسیک و کوانتومی به دست می‌دهد. در کنار مطالعه‌ی چگونگی انتشار بسته‌های موج در فضا، شرایطی را بررسی خواهیم کرد که تحت این شرایط، بسته‌ها می‌توانند گسترش یابند یا گسترش نیابند.

در اینجا (با دانستن بسته‌ی موج اولیه‌ی  $\psi_0(x)$  یا دامنه‌ی  $\phi(k)$ ) مسأله این است که چگونه  $\psi(x, t)$  را در لحظه‌ی بعدی  $t$  پیدا کنیم؟ این مسأله به محاسبه‌ی انتگرال  $\int \phi(k) e^{i(kx - \omega t)} dk$  در (۱-۹۴) کاهش می‌یابد. برای محاسبه‌ی این انتگرال باید بسامد زاویه‌ای  $\omega$  و دامنه‌ی  $\phi(k)$  را مشخص کنیم. خواهیم دید که گسترش یا عدم گسترش بسته به وسیله‌ی شکل تابع  $\omega(k)$  تعیین می‌شود.

## ۱-۳-۸-۱ انتشار یک بسته‌ی موج بدون واپیچش

ساده‌ترین شکل بسامد زاویه‌ای  $\omega$  زمانی است که متناسب با عدد موج  $k$  باشد. این حالت متناظر با یک انتشار غیرپاشنده است. چون ثابت تناسب دارای بعد سرعت است<sup>۱۶</sup> که آن را با  $v$  نمایش می‌دهیم (یعنی  $\omega = v \cdot k$ )، بسته‌ی موج (۱-۹۴) به صورت زیر درمی‌آید:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{ik(x - v \cdot t)} dk \quad (1-115)$$

این رابطه دارای همان ساختار (۱-۹۵) است که پیشنهاد می‌کند  $\psi(x, t)$  با  $\psi_0(x - v \cdot t)$  یکسان است:

$$\psi(x, t) = \psi_0(x - v \cdot t) \quad (1-116)$$

شکل بسته‌ی موج در زمان  $t$  با شکل اولیه یکسان است. بنابراین هنگامی که  $\omega$  متناسب با  $k$  است (به صورتی که  $\omega = v \cdot k$ )، بسته‌ی موج به سمت راست و با سرعت ثابت  $v$  بدون واپیچش حرکت می‌کند. چون ما به بسته‌های موجی که ذره‌ها را توصیف می‌کنند علاقمندیم، باید حالت عمومی‌تر محیط‌های پاشنده که موج‌های هماهنگ با بسامدهای متفاوت را با سرعت متفاوت منتقل می‌کنند، در نظر بگیریم. این بدان معنی است که  $\omega$  تابعی از  $k$  است:  $\omega = \omega(k)$ . شکل  $\omega(k)$  با این لازمه که بسته‌ی موج  $\psi(x, t)$  ذره را توصیف می‌کند، تعیین می‌شود. با این فرض که دامنه‌ی  $\phi(k)$  در  $k = k_0$  دارای قله است آنگاه  $\phi(k) = g(k - k_0)$  به صورت محسوسی تنها در محدوده‌ی باریک  $k = k_0 + \Delta k$  مخالف صفر

۱۶. برای انتشار نور در خلأ این ثابت برابر با  $c$  (سرعت نور) است.

است و می‌توانیم بسط تیلور  $\omega(k)$  را حول  $k_0$  انجام دهیم:

$$\omega(k) = \omega(k_0) + (k - k_0) \left. \frac{d\omega(k)}{dk} \right|_{k=k_0} + \frac{1}{2} (k - k_0)^2 \left. \frac{d^2\omega(k)}{dk^2} \right|_{k=k_0} + \dots \quad (117-1)$$

$$= \omega(k_0) + (k - k_0)v_g + (k - k_0)^2\alpha + \dots$$

که در آن  $v_g = \left. \frac{d\omega(k)}{dk} \right|_{k=k_0}$  و  $\alpha = \frac{1}{2} \left. \frac{d^2\omega(k)}{dk^2} \right|_{k=k_0}$  است.

حال برای تعیین  $\psi(x, t)$  تنها باید (117-1) را در (94-1) با  $\phi(k) = g(k - k_0)$  جایگزین کنیم. این کار به

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_0(x - v_{ph}t)} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k - k_0) e^{i(k - k_0)(x - v_g t)} e^{-i(k - k_0)^2 \alpha t + \dots} dk \quad (118-1)$$

می‌انجامد که در آن ۱۷

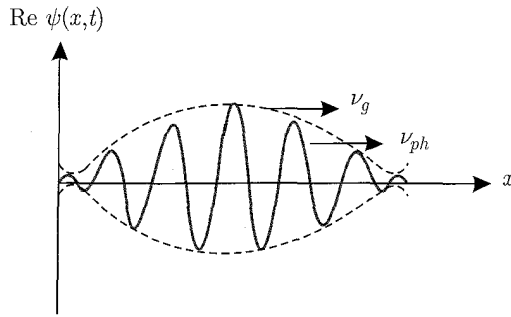
$$v_g = \frac{d\omega(k)}{dk}, \quad v_{ph} = \frac{\omega(k)}{k} \quad (119-1)$$

$v_g$  و  $v_{ph}$  به ترتیب سرعت فاز و سرعت گروه هستند. سرعت فاز سرعت انتشار فاز یک تک‌موج هماهنگ  $(e^{ik_0(x - v_{ph}t)})$  را نشان می‌دهد و سرعت گروه سرعت حرکت دسته‌ای از موج‌ها را نشان می‌دهد که بسته را می‌سازند. نباید سرعت فاز و سرعت گروه را با هم اشتباه گرفت. به طور کلی این دو سرعت با هم تفاوت دارند. همانطور که از (119-1) می‌توان نتیجه گرفت، تنها زمانی که  $\omega$  متناسب با  $k$  باشد این دو سرعت با هم برابرند.

### سرعت‌های گروه و فاز

بیانید کمی به توضیح معنی  $v_g$  و  $v_{ph}$  بپردازیم. همانطور که در بالا اشاره شد، هنگامی که برهنه‌ی موج‌های زیادی با دامنه و طول موج‌های متفاوت را انجام می‌دهیم، می‌توانیم یک بسته‌ی موج یا پالسی که با سرعت گروه  $v_g$  حرکت می‌کند را به دست آوریم. امواج منفردی که بسته را می‌سازند، با سرعت‌های متفاوتی حرکت می‌کنند و هر موج با سرعت فاز مربوط به خود حرکت می‌کند. شکل ۱-۱۴ تصویری کیفی را ارائه می‌کند: سرعت گروه سرعتی را نشان می‌دهد که با آن بسته‌ی موج به صورت یک کل منتشر می‌شود که در آن موج‌های منفرد (واقع در پوش بسته) که بسته را می‌سازند، با سرعت‌های فاز متفاوتی حرکت می‌کنند. همانطور که در شکل ۱-۱۴ نشان داده شده است، بسته‌ی موج تنها در ناحیه‌ی کوچکی دارای دامنه‌ی قابل ملاحظه‌ای است و در خارج از این ناحیه به سرعت کاهش می‌یابد.

۱۷. در این معادله‌ها،  $k_0$  را حذف کرده‌ایم زیرا این معادله‌ها به‌ازای هر انتخاب  $k_0$  معتبرند.



شکل ۱-۱۴ تابع  $Re\psi(x, t)$  بسته‌ی موج (۱-۱۱۸) که با منحنی سیاه نمایش داده شده است، و در پوش منحنی نقطه‌چین قرار دارد، با سرعت گروه  $v_g$  در امتداد محور  $x$  منتشر می‌شود؛ موج‌های منفردی (که در اینجا رسم نشده‌اند) که با هم جمع می‌شوند و منحنی سیاه را می‌سازند، با سرعت‌های فاز  $v_{ph}$  متفاوتی حرکت می‌کنند.

تفاوت بین سرعت گروه و سرعت فاز را می‌توان به صورت کمی به وسیله‌ی استخراج رابطه‌ی بین آنها درک کرد. مشتق‌گیری از رابطه‌ی  $\omega = kv_{ph}$  (۱-۱۱۹) را ببینید) نسبت به  $k$  نتیجه‌ی  $dv_{ph}/dk = d\omega/dk = v_{ph} + k(dv_{ph}/dk)$  را می‌دهد و چون  $k = 2\pi/\lambda$  است، داریم:  $k(dv_{ph}/dk) = -\lambda(dv_{ph}/d\lambda)$  یا  $(dv_{ph}/d\lambda)(d\lambda/dk) = -(2\pi/k^2)(dv_{ph}/d\lambda)$  این رابطه‌ها به دست می‌آوریم:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = v_{ph} + k \frac{dv_{ph}}{dk} = v_{ph} - \lambda \frac{dv_{ph}}{d\lambda} \quad (۱-۱۲۰)$$

که می‌توانیم آن را به صورت زیر نیز بنویسیم:

$$v_g = v_{ph} + p \frac{dv_{ph}}{dp} \quad (۱-۱۲۱)$$

چون  $k(dv_{ph}/dk) = (p/h)(dv_{ph}/dp)(dp/dk) = p(dv_{ph}/dp)$  است زیرا  $k = p/h$  می‌باشد. معادله‌های (۱-۱۲۰) و (۱-۱۲۱) نشان می‌دهند که سرعت گروه می‌تواند بزرگ‌تر یا کوچک‌تر از سرعت فاز و همچنین می‌تواند بسته به محیط برابر با سرعت فاز باشد. اگر سرعت فاز به طول موج بستگی نداشته باشد (این حالت زمانی اتفاق می‌افتد که محیط غیرپاشنده باشد) آنگاه سرعت‌های گروه و فاز برابرند زیرا  $dv_{ph}/d\lambda = 0$  است. اما اگر  $v_{ph}$  به طول موج بستگی داشته باشد (این حالت زمانی اتفاق می‌افتد که محیط پاشنده باشد) آنگاه  $dv_{ph}/d\lambda \neq 0$  و از این رو ممکن است سرعت گروه کوچک‌تر یا بزرگ‌تر از سرعت فاز باشد. ریسمان غیرقابل کشش مثالی از یک محیط غیرپاشنده است. انتظار داریم  $v_g = v_{ph}$  باشد. موج‌های آب یک محیط پاشنده‌ی نوعی را پیشنهاد می‌کنند. در مسأله‌ی ۱-۱۳ نشان می‌دهیم

که برای موج‌های آب در عمق بیشتر داریم:  $v_g = \frac{1}{4}v_{ph}$  و برای موج‌های سطحی داریم:  $v_g = \frac{3}{4}v_{ph}$  (۱-۲۱۲) و (۱-۲۱۴) را ببینید).

مورد یک ذره‌ی در حال حرکت در پتانسیل ثابت  $V$  را در نظر بگیرید. انرژی کل این ذره برابر است با  $E(p) = p^2/(2m) + V$  است. چون ویژگی‌های ذره‌ای (انرژی و تکانه‌ی) یک ذره به وسیله‌ی رابطه‌های  $E = \hbar\omega$  و  $p = \hbar k$  به مشخصه‌های موجی آن (بسامد و عدد موج) مربوط هستند، می‌توانیم (۱-۱۱۹) را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$v_g = \frac{dE(p)}{dp}, \quad v_{ph} = \frac{E(p)}{p} \quad (۱-۲۲)$$

که بعد از ترکیب شدن با  $E(p) = \frac{p^2}{2m} + V$ ، نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$v_g = \frac{d}{dp} \left( \frac{p^2}{2m} + V \right) = \frac{p}{m} = v_{\text{ذره}}, \quad v_{ph} = \frac{1}{p} \left( \frac{p^2}{2m} + V \right) = \frac{p}{2m} + \frac{V}{p} \quad (۱-۲۳)$$

بنابراین سرعت گروه بسته‌ی موج برابر با سرعت کلاسیکی ذره است ( $v_g = v_{\text{ذره}}$ ). این پیشنهاد می‌کند که باید «مرکز» بسته‌ی موج را مانند یک ذره‌ی کلاسیکی در حال حرکت که از قانون‌های مکانیک کلاسیک پیروی می‌کند، در نظر بگیریم: بنابراین مرکز «مسیر کلاسیکی» ذره را دنبال می‌کند. اکنون می‌بینیم که چگونه مفهوم بسته‌ی موج رابطه‌ی روشنی بین توصیف کلاسیکی یک ذره و توصیف کوانتومی آن ارائه می‌کند. در مورد یک ذره‌ی آزاد، وارد کردن  $V = 0$  در (۱-۲۳) نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$v_g = \frac{p}{m}, \quad v_{ph} = \frac{p}{2m} = \frac{1}{2}v_g \quad (۱-۲۴)$$

این نشان می‌دهد که در حالی که سرعت گروه بسته‌ی موج متناظر با یک ذره‌ی آزاد برابر با سرعت ذره ( $p/m$ ) است، سرعت فاز نصف سرعت گروه خواهد بود. عبارت  $v_{ph} = \frac{1}{2}v_g$  بی‌معنی است زیرا بیان می‌کند که تابع موج با نصف سرعت ذره‌ای که آن را نمایش می‌دهد، حرکت می‌کند که در واقع غیرفیزیکی است و به صورت کلی اهمیت فیزیکی بامعنائی ندارد.

### تحول زمانی بسته‌ی موج

پس از بحث مختصر پیرامون سرعت‌های فاز و گروه، اکنون به کار اصلی‌مان یعنی محاسبه‌ی بسته‌ی  $\psi(x, t)$  به صورتی که در (۱-۱۱۸) نوشته شد، برمی‌گردیم. برای این کار باید تصمیم بگیریم که در کجا بسط (۱-۱۱۷) یا توان در انتگرالدهی (۱-۱۱۸) را متوقف کنیم. قصد داریم دو حالت مجزا را بررسی کنیم و آن عبارت است از اینکه آیا توان در رابطه‌ی (۱-۱۱۸) تا جمله‌ی خطی  $[(k - k_0)v_g t]$  خاتمه یابد



یا تا جمله‌ی درجه دوی  $(k - k_0)^2 dt$ . این دو حالت به ترتیب به عنوان تقریب خطی و تقریب درجه‌ی دوم شناخته می‌شوند.

در تقریب خطی [که زمانی قابل قبول است که  $g(k - k_0)$  به اندازه‌ی کافی باریک باشد تا بتوان از جمله‌ی درجه‌ی دوم  $k^2$  صرف‌نظر کرد ( $(k - k_0)^2 at \ll 1$ )] بسته‌ی موج (۱۱۸-۱) به صورت زیر درمی‌آید:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_0(x-v_{ph}t)} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k - k_0) e^{i(k-k_0)(x-v_g t)} dk \quad (125-1)$$

می‌توان این رابطه را به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$\psi(x, t) = e^{ik_0(x-v_{ph}t)} \psi_0(x - v_g t) e^{-ik_0(x-v_g t)} \quad (126-1)$$

که در آن  $\psi_0$  بسته‌ی موج اولیه است (۹۵-۱) را ببینید:

$$\psi_0(x - v_g t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(q) e^{i(x-v_g t)q + ik_0(x-v_g t)} dq \quad (127-1)$$

متغیر جدید  $q$  رابطه‌ی  $q = k - k_0$  را نشان می‌دهد. معادله‌ی (۱۲۶-۱) به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$|\psi(x, t)|^2 = |\psi_0(x - v_g t)|^2 \quad (128-1)$$

معادله‌ی (۱۲۶-۱) بسته‌ی موجی که دامنه‌ی آن مدوله شده است را نشان می‌دهد. همانطور که در شکل ۱۴-۱ نشان داده شده است، موج مدوله‌کننده‌ی  $\psi_0(x - v_g t)$  با سرعت گروه  $v_g$  به سمت راست انتشار می‌یابد و موج مدوله‌شده‌ی  $e^{ik_0(x-v_{ph}t)}$  یک موج هماهنگ صرف با عدد موج ثابت  $k_0$  را نشان می‌دهد که با سرعت فاز  $v_{ph}$  به سمت راست حرکت می‌کند. یعنی (۱۲۶-۱) و (۱۲۸-۱) یک بسته‌ی موج که قله‌ی آن به صورت یک کل با سرعت  $v_g$  حرکت می‌کند را نشان می‌دهد در حالی که موج منفرد درون پوش با سرعت  $v_{ph}$  منتشر می‌شود. سرعت گروه که سرعت قله‌ی بسته را به دست می‌دهد، به وضوح سرعت ذره را نشان می‌دهد زیرا شانس یافتن ذره حول قله‌ی بسته‌ی موج بسیار بیشتر از یافتن آن در هر ناحیه‌ی دیگری از فضا است. بسته‌ی موج در همسایگی مکان ذره به شدت جایگزیده و در هر جای دیگر صفر است. بنابراین، این سرعت گروه (و نه سرعت فاز) است که سرعت ذره‌ی نشان داده شده با بسته‌ی موج را نشان می‌دهد. این پیشنهاد می‌کند که می‌توان حرکت یک ذره‌ی مادی را به خوبی با بسته‌های موج توصیف کرد. با ایجاد تناظر بین سرعت ذره و سرعت قله‌ی بسته‌ی موج می‌بینیم که مفهوم بسته‌ی موج به صورت مشترک جنبه‌ی ذره‌ای و جنبه‌ی موجی ذره‌های مادی را در نظر می‌گیرد.

پرسشی که مطرح می‌شود این است که در تقریب خطی اندازه‌ی بسته‌ی موج چگونه است؟ آیا تحت تأثیر انتشار ذره قرار می‌گیرد؟ واضح است که پاسخ منفی است. می‌توان این پاسخ را بی‌درنگ از (۱۲۶-۱)

استنباط کرد:  $\psi_0(x - v_g t)$  به زبان ریاضی یک منحنی را نشان می‌دهد که بدون تغییر شکل و با سرعت  $v_g$  به سمت راست حرکت می‌کند. این بدان معنی است که اگر بسته‌ی موج از ابتدا گاوسی باشد با انتشار در فضا، بدون هیچ‌گونه تغییری در اندازه‌ی آن گاوسی باقی خواهد ماند.

به صورت خلاصه، نشان دادیم که در تقریب خطی، بسته‌ی موج بدون واپیچش منتشر می‌شود و یک حرکت انتقالی یکنواخت را تجربه می‌کند. در ادامه قصد داریم تا به مطالعه‌ی شرایطی که تحت این شرایط بسته‌ی موج تغییر شکل را تجربه می‌کند، بپردازیم.

### ۱-۸-۳-۲ انتشار یک بسته‌ی موج با واپیچش

حال بیایید جمله‌ی درجه‌ی دوم  $k^2$  یعنی  $(k - k_0)^2 \alpha t$  در نمای انتگرالده‌ی (۱-۱۱۸) را در نظر بگیریم و جمله‌های مرتبه‌ی بالاتر را در نظر نگیریم. این کار به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\psi(x, t) = e^{ik_0(x - v_{ph}t)} f(x, t) \quad (1-129)$$

که در آن  $f(x, t)$  (که پوش بسته را نشان می‌دهد) از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$f(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(q) e^{iq(x - v_g t)} e^{-iq^2 \alpha t} dq \quad (1-130)$$

همراه با  $q = k - k_0$ . اگر تصحیح مرتبه‌ی دوم  $q^2$  نبود  $(iq^2 \alpha t)$  آنگاه بسته‌ی موج به صورت یکنواخت بدون هیچ‌گونه تغییری در شکل حرکت می‌کرد زیرا مشابه با (۱-۱۱۶)،  $f(x, t) = \psi_0(x - v_g t)$  به دست می‌آمد.

برای نشان دادن این که چگونه  $\alpha$  پهنای بسته‌ی موج را تحت تأثیر قرار می‌دهد، بیایید بسته‌ی گاوسی (۱-۱۰۲) را که دامنه‌ی آن از  $\phi(k) = (a^2/2\pi)^{1/4} \exp[-a^2(k - k_0)^2/4]$  به دست می‌آید و پهنای اولیه‌ی آن برابر با  $a/2$  و  $\Delta x_0 = a/2$  است، بررسی کنیم. با جاگذاری  $\phi(k)$  در معادله‌ی (۱-۱۲۹) به دست می‌آوریم:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left( \frac{a^2}{2\pi} \right)^{1/4} e^{ik_0(x - v_{ph}t)} \times \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[ iq(x - v_g t) - \left( \frac{a^2}{4} + i\alpha t \right) q^2 \right] dq \quad (1-131)$$

با محاسبه‌ی انتگرال می‌توانیم نشان دهیم که (جزئیات محاسبات در مثال زیر آمده است) توزیع چگالی بسته از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \Delta x(t)} \exp \left[ -\frac{(x - v_g t)^2}{[\Delta x(t)]^2} \right] \quad (1-132)$$

که در آن  $\Delta x(t)$  پهنای بسته‌ی موج در زمان  $t$  است:

$$\Delta x(t) = \frac{a}{2} \sqrt{1 + \frac{16\alpha^2}{a^2} t^2} = \Delta x_0 \sqrt{1 + \frac{\alpha^2 t^2}{(\Delta x_0)^4}} \quad (133-1)$$

می‌بینیم که پهنای بسته که در ابتدا برابر با  $a/2 = \Delta x_0$  بود، پس از گذشت زمان  $t$  با ضربی به اندازه‌ی  $\sqrt{1 + \alpha^2 t^2 / (\Delta x_0)^4}$  بزرگ شده است. بنابراین بسته‌ی موج در حال پهن شدن است. پهن شدن به دلیل به حساب آوردن جمله‌ی درجه‌ی دوم  $q^2$  (یعنی  $i q^2 \alpha t$ ) است. اگر از این جمله صرف نظر می‌کردیم آنگاه پهنای  $\Delta x(t)$  ثابت (و برابر با  $\Delta x_0$ ) باقی می‌ماند.

توزیع چگالی (۱۳۲-۱) دو نتیجه را نشان می‌دهد: (۱) مرکز بسته با سرعت گروه حرکت می‌کند (۲) پهنای بسته به صورت خطی با زمان افزایش می‌یابد. از (۱۳۳-۱) می‌بینیم که بسته تنها زمانی که  $\alpha^2 t^2 / (\Delta x_0)^4 \approx 1$  یا  $t \approx (\Delta x_0)^2 / \alpha$  باشد به صورت محسوسی شروع به پهن شدن می‌کند. در واقع اگر  $t \ll (\Delta x_0)^2 / \alpha$  باشد آنگاه پهن شدن بسته قابل چشم‌پوشی است در حالی که اگر  $t \gg (\Delta x_0)^2 / \alpha$  باشد آنگاه پهن شدن بسته قابل ملاحظه خواهد بود.

برای این که بتوانیم بحثی روشن پیرامون رشد بسته انجام دهیم (همانطور که در (۱۳۳-۱) نشان داده شده است) باید  $\alpha$  را مشخص کنیم. این کار به تعیین تابع  $\omega(k)$  کاهش می‌یابد زیرا  $\alpha = \left. \frac{1}{2} \frac{d^2 \omega}{dk^2} \right|_{k=k_0}$  است. بدین منظور بیاید مثالی را ارائه نماییم تا محاسبات صریح را نتیجه دهد. در واقع مثالی که قصد داریم تا آن را در نظر بگیریم (یک ذره‌ی آزاد با دامنه‌ی گاوسی) امکان انجام محاسبات دقیق را فراهم می‌کند بنابراین نیازی به بسط دادن  $\omega(k)$  نیست.

### مثال ۹-۱ (ذره‌ی آزاد با یک بسته‌ی موج گاوسی)

تعیین کنید که چگونه بسته‌ی موج متناظر با یک ذره‌ی آزاد با بسته‌ی اولیه‌ی گاوسی با گذشت زمان پهن می‌شود.

حل

در اینجا مسأله، یافتن چگونگی پهن شدن بسته‌ی موج متناظر با یک ذره‌ی آزاد با  $\phi(k) = (a^2/2\pi)^{1/4} e^{-a^2(k-k_0)^2/4}$  (۱۱۰-۱) را ببینید) با گذشت زمان است.

ابتدا باید شکل بسته‌ی موج  $\psi(x, t)$  را پیدا کنیم. با جاگذاری دامنه‌ی  $\phi(k) = (a^2/2\pi)^{1/4} e^{-a^2(k-k_0)^2/4}$  در انتگرال فوریه‌ی (۹۴-۱) به دست می‌آوریم:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left( \frac{a^2}{2\pi} \right)^{1/4} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[ -\frac{a^2}{4} (k - k_0)^2 + i(kx - \omega t) \right] dk \quad (134-1)$$

چون  $\omega(k) = \hbar k^2 / (2m)$  است (رابطه‌ی پاشندگی برای یک ذره‌ی آزاد) و با استفاده از تغییر متغیر  $q = k - k_0$  می‌توانیم نما در انتگرالدهی (۱۳۴-۱) را به صورت مربع کامل بر حسب  $q$  بنویسیم:

$$\begin{aligned} -\frac{a^2}{4}(k - k_0)^2 + i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right) &= -\left(\frac{a^2}{4} + i\frac{\hbar t}{2m}\right)q^2 + i\left(x - \frac{\hbar k_0 t}{m}\right)q \\ &\quad + ik_0\left(x - \frac{\hbar k_0 t}{2m}\right) \\ &= -\alpha q^2 + i\left(x - \frac{\hbar k_0 t}{m}\right)q + ik_0\left(x - \frac{\hbar k_0 t}{2m}\right) \\ &= -\alpha\left[q - \frac{i}{2\alpha}\left(x - \frac{\hbar k_0 t}{m}\right)\right]^2 - \frac{1}{4\alpha}\left(x - \frac{\hbar k_0 t}{m}\right)^2 \\ &\quad + ik_0\left(x - \frac{\hbar k_0 t}{2m}\right) \end{aligned} \quad (135-1)$$

که در آن از رابطه‌ی  $- \alpha q^2 + iyq = -\alpha[q - iy/(2\alpha)]^2 - y^2/(4\alpha)$  با  $y = x - \hbar k_0 t/m$

$$\alpha = \frac{a^2}{4} + i\frac{\hbar t}{2m} \quad (136-1)$$

استفاده کرده‌ایم. با جاگذاری (۱۳۵-۱) در (۱۳۴-۱) به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/2} \exp\left[ik_0\left(x - \frac{\hbar k_0 t}{m}\right)\right] \exp\left[-\frac{1}{4\alpha}\left(x - \frac{\hbar k_0 t}{m}\right)^2\right] \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\alpha\left[q - \frac{i}{2\alpha}\left(x - \frac{\hbar k_0 t}{m}\right)\right]^2\right] dq \end{aligned} \quad (137-1)$$

که در ترکیب با انتگرال  $\int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-\alpha(q - iy/(2\alpha))^2] dq = \sqrt{\pi/\alpha}$ <sup>۱۸</sup> به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \left(\frac{a^2}{4\pi}\right)^{1/2} \exp\left[ik_0\left(x - \frac{\hbar k_0 t}{2m}\right)\right] \exp\left[-\frac{1}{4\alpha}\left(x - \frac{\hbar k_0 t}{m}\right)^2\right] \quad (138-1)$$

۱۸. اگر  $\beta$  و  $\delta$  دو عدد مختلط باشند و  $\text{Re}\beta > 0$  باشد آنگاه داریم:  $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta(q+\delta)^2} dq = \sqrt{\pi/\beta}$

چون  $\alpha$  یک عدد مختلط است ((۱۳۶-۱) را ببینید)، می‌توانیم آن را برحسب مدول و فاز آن بنویسیم:

$$\alpha = \frac{a^2}{4} \left( 1 + i \frac{2\hbar t}{ma^2} \right) = \frac{a^2}{4} \left( 1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4} \right)^{1/2} e^{i\theta} \quad (139-1)$$

که در آن  $\theta = \tan^{-1}[2\hbar t/(ma^2)]$  است و از این رو

$$\frac{1}{\sqrt{\alpha}} = \frac{2}{a} \left( 1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4} \right)^{-1/4} e^{-i\theta/2} \quad (140-1)$$

با جاگذاری ((۱۳۶-۱) و ((۱۴۰-۱) در ((۱۳۸-۱) داریم:

$$\psi(x, t) = \left( \frac{2}{\pi a^2} \right)^{1/4} \left( 1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4} \right)^{-1/4} e^{-i\theta/2} e^{ik \cdot (x - \hbar k \cdot t/m)} \exp \left[ -\frac{(x - \hbar k \cdot t/m)^2}{a^2 + 2i\hbar t/m} \right] \quad (141-1)$$

چون  $\left| e^{-y^2/(a^2 + 2i\hbar t/m)} \right|^2 = e^{-y^2/(a^2 - 2i\hbar t/m)} e^{-y^2/(a^2 + 2i\hbar t/m)}$  است که در آن  $y = x - \hbar k \cdot t/m$  و با توجه به

$$y^2/(a^2 - 2i\hbar t/m) + y^2/(a^2 + 2i\hbar t/m) = 2a^2 y^2/(a^4 + 4\hbar^2 t^2/m^2)$$

داریم:

$$\left| \exp \left( -\frac{y^2}{a^2 + 2i\hbar t/m} \right) \right|^2 = \exp \left( -\frac{2a^2 y^2}{a^4 + 4\hbar^2 t^2/m^2} \right) \quad (142-1)$$

بنابراین

$$\begin{aligned} |\psi(x, t)|^2 &= \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \left( 1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4} \right)^{-1/2} \left| \exp \left[ -\frac{(x - \hbar k \cdot t/m)^2}{a^2 + 2i\hbar t/m} \right] \right|^2 \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \frac{1}{\gamma(t)} \exp \left[ -\frac{2}{[a\gamma(t)]^2} \left( x - \frac{\hbar k \cdot t}{m} \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (143-1)$$

که در آن  $\gamma(t) = \sqrt{1 + 4\hbar^2 t^2/(m^2 a^4)}$  است.

می‌بینیم که هم بسته‌ی موج ((۱۴۱-۱) و هم چگالی احتمال ((۱۴۳-۱) با تحول زمان، گاوسی باقی

می‌مانند. می‌توان این موضوع را در این واقعیت ردیابی کرد که (همانطور که در (۱-۱۱۰) نشان داده شد) وابستگی به  $x$  فاز  $e^{ik_0 x}$  یا بسته‌ی موج اولیه‌ی  $\psi_0(x)$  خطی است. اگر وابستگی به  $x$  فاز غیرخطی (فرض کنید درجه‌ی دو) بود آنگاه شکل بسته‌ی موج گاوسی باقی نمی‌ماند. بنابراین عامل فاز  $e^{ik_0 x}$  (که در  $\psi_0(x)$  حضور دارد) به ما امکان می‌دهد تا حرکت ذره را توضیح دهیم. چون سرعت گروه یک ذره‌ی آزاد برابر با  $\hbar k_0 / m$  با  $v_g = d\omega/dk = \left. \frac{d}{dk} \left( \frac{\hbar k^2}{2m} \right) \right|_{k_0}$  است، می‌توانیم (۱-۱۴۱) را به صورت زیر بنویسیم<sup>۱۹</sup>:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\Delta x(t)}} e^{-i\theta/2} e^{ik_0(x-v_g t/2)} \exp \left[ -\frac{(x-v_g t)^2}{a^2 + 2i\hbar t/m} \right] \quad (1-144)$$

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta x(t)} \exp \left[ -\frac{(x-v_g t)^2}{2[\Delta x(t)]^2} \right] \quad (1-145)$$

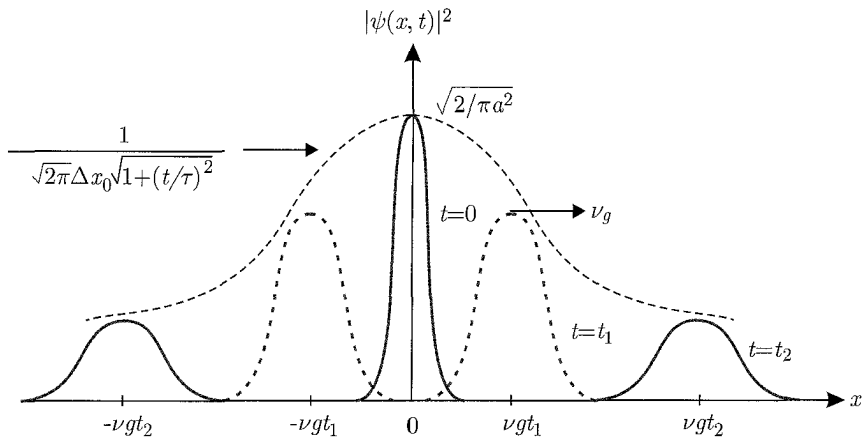
که در آنها<sup>۲۰</sup>

$$\Delta x(t) = \frac{a}{\gamma} t = \frac{a}{2} \sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^2}} \quad (1-146)$$

پهنای بسته‌ی موج در زمان  $t$  را نشان می‌دهد. معادله‌های (۱-۱۴۴) و (۱-۱۴۵) یک بسته‌ی موج گاوسی را توصیف می‌کنند که مرکز آن در  $x = v_g t$  قرار دارد و قله‌ی آن با سرعت گروه  $v_g = \hbar k_0 / m$  حرکت می‌کند و پهنای  $\Delta x(t)$  آن به صورت خطی با زمان افزایش می‌یابد. بنابراین در طول زمان  $t$ ، مرکز بسته از  $x = 0$  به  $x = v_g t$  حرکت کرده است و پهنای آن از  $a/2 = \Delta x_0$  به  $\Delta x(t) = \Delta x_0 \sqrt{1 + 4\hbar^2 t^2 / (m^2 a^2)}$  افزایش یافته است. بنابراین بسته‌ی موج اگرچه گاوسی باقی می‌ماند اما دچار واپیچش می‌شود و پهنای آن به صورت خطی با زمان افزایش می‌یابد. در حالی که ارتفاع آن  $(1/(\sqrt{2\pi}\Delta x(t)))$  با گذشت زمان کاهش می‌یابد. همانطور که در شکل ۱-۱۵ نشان داده است، بسته‌ی موج (که در  $t \rightarrow -\infty$  پهنای بسیار زیاد و دامنه‌ی بسیار کوچکی داشت) با افزایش زمان به سمت  $t = 0$  باریک و باریک‌تر و دامنه‌ی آن بزرگ و بزرگ‌تر می‌شود (در  $t = 0$  بسته بسیار جایگزیده است و پهنای و دامنه‌ی آن به ترتیب از رابطه‌های  $\Delta x_0 = a/2$  و  $\sqrt{2/\pi} a^2$  به دست می‌آیند. سپس با افزایش زمان ( $t > 0$ ) پهنای بسته پهن و پهن‌تر (و دامنه‌ی آن کوچک و کوچک‌تر) می‌شود.

<sup>۲۰</sup> همانطور که در (۱-۱۲۴) نشان داده شد جالب توجه است که موج هماهنگ  $e^{ik_0(x-v_g t/2)}$  با سرعت فازی منتشر می‌شود که نصف سرعت گروه است. این ویژگی ذره‌های آزاد است.

<sup>۲۰</sup> می‌توانیم (۱-۱۴۶) را از (۱-۱۱۱) نیز به دست آوریم: ترکیب نیم‌پهنای  $|\psi(\pm\Delta x, t)|^2 / |\psi(0, 0)|^2 = e^{-1/2}$  (۱-۱۴۳) تساوی  $e^{-2[\Delta x/a\gamma(t)]^2} = e^{-1/2}$  را نتیجه می‌دهد که به نوبه‌ی خود به (۱-۱۴۶) می‌انجامد.



شکل ۱۵-۱ تحول زمانی  $|\psi(x, t)|^2$ : قله‌ی بسته که مرکز آن در  $x = v_g t$  قرار دارد، با سرعت  $v_g$  از چپ به راست حرکت می‌کند. ارتفاع بسته (که در اینجا با پوش نقطه‌چین نمایش داده شده است) به وسیله‌ی تابع  $1/(\sqrt{2\pi}\Delta x(t))$  که در  $t \rightarrow \pm\infty$  به سمت صفر میل می‌کند و در  $t = 0$  برابر با  $\sqrt{2/\pi a^2}$  است، مدوله می‌شود. پهنای بسته  $\Delta x(t) = \Delta x_0 \sqrt{1 + (t/\tau)^2}$  به صورت خطی با زمان افزایش می‌یابد.

در ادامه‌ی این بخش قصد داریم تا چند ویژگی را که نه تنها به بسته‌ی موج گاوسی که در بالا در نظر گرفتیم بلکه به بسته‌های موج عمومی‌تر مربوط می‌شود را شرح دهیم. ابتدا بیائید از تخمین زمانی که در آن بسته‌ی موج به صورت محسوسی شروع به پهن شدن می‌کند، شروع کنیم. بسته (که در ابتدا باریک است) تنها زمانی به صورت قابل ملاحظه‌ای شروع به بزرگ شدن می‌کند که جمله‌ی دوم  $(\hbar t / (m a^2))^2$  زیر علامت رادیکال (۱-۱۴۶) از مرتبه‌ی واحد باشد. برای راحتی (۱-۱۴۶) را به شکل زیر می‌نویسیم

$$\Delta x(t) = \Delta x_0 \sqrt{1 + \left(\frac{t}{\tau}\right)^2} \quad (1-147)$$

که در آن

$$\tau = \frac{2m(\Delta x_0)^2}{\hbar} \quad (1-148)$$

یک ثابت زمانی را نشان می‌دهد که آهنگ پهن‌شدگی بسته را مشخص می‌کند. اکنون می‌توانیم مرتبه‌ی اندازه‌ی  $\tau$  را تخمین بزنیم. محاسبه‌ی این ثابت زمانی برای ذره‌های میکروسکوپی و همچنین برای ذره‌های ماکروسکوپی آموزنده است. به عنوان مثال  $\tau$  برای یک الکترون که مکان آن در محدوده‌ی  $10^{-10} \text{ m}$  تعریف شده است برابر با  $1.7 \times 10^{-16} \text{ s}$  می‌باشد. از سوی دیگر ثابت زمانی یک ذره‌ی  $2.1$ . اگر  $\Delta x_0 = 10^{-10} \text{ m}$  باشد و با توجه به این که انرژی سکون یک الکترون برابر با  $mc^2 = 0.511 \text{ MeV}$  است و با استفاده از  $\hbar c \simeq 197 \times 10^{-15} \text{ MeV m}$  داریم:  $\tau \simeq 2mc^2(\Delta x_0)^2 / (\hbar c) \simeq 1.7 \times 10^{-16} \text{ s}$ .

ماکروسکوپی (فرض کنید) به جرم  $1g$  که مکان آن در محدوده  $1mm$  تعریف شده است، از مرتبه  $22$   $\tau \simeq 2 \times 10^{24}s$  است (برای روشن شدن مطلب، مسأله‌های حل شده  $1-15$  و  $1-16$  را ببینید). این محاسبه‌ی نه چندان دقیق پیشنهاد می‌کند که بسته‌های موج سیستم‌های میکروسکوپی با سرعت زیادی رشد قابل ملاحظه‌ای پیدا می‌کنند در حالی که بسته‌های سیستم‌های ماکروسکوپی تنها پس از این که سیستم به‌ازای یک مدت نامعقول در حرکت بوده است (زمانی حدوداً از مرتبه‌ی عمر خود جهان که حدود  $10^{17}s \times 4.7$  است)، به‌صورت قابل ملاحظه‌ای شروع به بزرگ شدن می‌کند. پس از تخمین زمانی‌هایی که در آن پهن‌شدگی بسته‌ی موج محسوس می‌شود، اکنون بی‌تایید اندازه‌ی پهن‌شدگی را روشن کنیم. از  $(1-147)$  می‌بینیم هنگامی که  $t \gg \tau$  است، پهن‌شدگی بسته قابل ملاحظه است و برعکس هنگامی که  $t \ll \tau$  است، پهن‌شدگی قابل چشم‌پوشی است. چون حالت‌های  $t \gg \tau$  و  $t \ll \tau$  به ترتیب متناظر با سیستم‌های میکروسکوپی و ماکروسکوپی هستند، نتیجه می‌گیریم که پاشندگی بسته برای سیستم‌های میکروفیزیکی قابل ملاحظه و برای سیستم‌های ماکروسکوپی قابل چشم‌پوشی است. در مورد سیستم‌های ماکروسکوپی باید گفت که پهن‌شدگی وجود دارد ولی آنقدر کوچک است که قابل آشکارسازی نیست. برای روشن شدن موضوع، مسأله‌ی حل شده  $1-15$  را ببینید که در آن نشان می‌دهیم پهنای یک جسم  $10^0g$  با ضریب بسیار کوچکی در حدود  $10^{-29}$  و پس از طی مسافت  $10^0m$  افزایش می‌یابد ولی پهنای یک الکترون  $25eV$  پس از طی همان مسافت (در مدت زمان  $10^{-5}s \times 3.3$ ) با ضریب  $10^9$  افزایش می‌یابد. در واقع از نظر کلاسیکی تجسم چنین پاشندگی بزرگی در این مدت زمان کوتاه مشکل است و نمی‌توان این حرکت را به وسیله‌ی فیزیک کلاسیک توضیح داد.

بنابراین بسته‌های موج ذره‌های میکروسکوپی در حال انتشار مستعد پهن‌شدگی قابل ملاحظه در زمان کوتاهی هستند. به نظر می‌رسد که این پهن‌شدگی فضایی یک مشکل مفهومی را به وجود می‌آورد: پهن‌شدگی با این انتظار ما که بسته باید در تمام زمان‌ها جایگزیدگی زیادی داشته باشد، ناسازگار است. رویهمرفته فرض می‌شود که بسته‌ی موج نشان دهنده‌ی یک ذره است و از این رو انتظار می‌رود که بدون پاشندگی حرکت کند. به عنوان مثال باری مانند یک الکترون هنگام حرکت در فضا پهن نمی‌شود و بار باید درون بسته‌ی موج متناظر جایگزیده باقی بماند. در حقیقت هرگاه ذره‌های میکروسکوپی (الکترون‌ها، نوترون‌ها، پروتون‌ها و ...) مشاهده شوند، همیشه به ناحیه‌های متناهی و کوچکی از فضا محدودند و هرگز به صورتی که توسط معادله‌ی  $(1-146)$  پیشنهاد می‌شود، پهن نمی‌شوند. اما چگونه این تناقض آشکار را توضیح دهیم؟ در اینجا مسأله به تفسیر درست وضعیت مربوط می‌شود: باید مفاهیم کلاسیک مربوط به معنی مکان یک ذره را اصلاح کنیم. نمی‌توان تابع موج  $(1-141)$  را با یک ذره‌ی مادی یکسان دانست. کمیت  $\int |\psi(x,t)|^2 dx$  احتمال یافتن ذره‌ی توصیف شده توسط بسته‌ی  $\psi(x,t)$  در زمان  $t$  را در ناحیه‌ی

$$22. \tau = 2 \times 10^{24} \text{ s} \approx \frac{2 \times 10^0 \text{ kg} \times (10^0 \text{ m})^2}{(1.05 \times 10^{-35} \text{ Js})} \approx 2 \times 10^{25} \text{ s}; \text{ داریم, } \hbar = 1.05 \times 10^{-35} \text{ Js}$$



فضایی واقع در بین  $x$  و  $x + dx$  نشان می‌دهد (تفسیر بورن). ذره‌ی مادی پاشیده نمی‌شود اما نمی‌توان مکان آن را به صورت دقیق معلوم کرد. همانطور که در شکل ۱-۱۵ نشان داده شده است، پهن‌شدگی موج مادی که همراه با کوچک شدن ارتفاع آن است، متناظر با کاهش چگالی احتمال  $|\psi(x, t)|^2$  است و به هیچ وجه رشد در اندازه‌ی ذره را بیان نمی‌کند. بنابراین بسته‌ی موج تنها احتمال یافتن ذره‌ی که آن را نمایش می‌دهد (در یک مکان معلوم) به دست می‌دهد. اهمیتی ندارد که بسته چقدر پهن می‌شود، می‌توانیم نشان دهیم که هنجار آن همیشه پایسته است زیرا به زمان بستگی ندارد. در واقع همانطور که می‌توان از (۱۴۳-۱) نتیجه گرفت، هنجار بسته برابر با یک است:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \frac{1}{\gamma} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[ -\frac{2(x - \hbar k_0 t/m)^2}{(a\gamma)^2} \right] dx$$

$$= \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \frac{1}{\gamma} \sqrt{\frac{\pi a^2 \gamma^2}{2}} = 1 \quad (149-1)$$

زیرا  $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\pi/\alpha}$  است. این نتیجه مطابق با انتظار ما است زیرا احتمال یافتن ذره در جایی در امتداد محور  $x$  باید برابر با یک باشد. در اینجا مسأله‌ی مهم این است که هنجار بسته مستقل از زمان است و پهن‌شدگی آن بیان نمی‌کند که ذره‌ی مادی در طول حرکت خود بزرگ می‌شود اما به سادگی توزیع دوباره‌ی چگالی احتمال را بیان می‌کند. بنابراین با وجود پهن‌شدگی قابل ملاحظه‌ی بسته‌های موج ذره‌های میکروسکوپی، هنجار این بسته‌ها همیشه پایسته (بهنجار به یک) است.

علاوه‌براین باید یادآوری کنیم که مثال در نظر گرفته شده در اینجا یک حالت ایده‌آل است زیرا با یک ذره‌ی آزاد سروکار داریم. اگر ذره (به عنوان حالت عمومی) تحت تأثیر یک پتانسیل قرار داشته باشد آنگاه بسته‌ی موج آن به برجستگی یک ذره‌ی آزاد پهن نمی‌شود. در واقع یک پتانسیل متغیر می‌تواند موجب باریک شدن بسته‌ی موج شود. این در واقع همان چیزی است که در اندازه‌گیری یک سیستم میکروسکوپی روی می‌دهد. همانطور که در فصل ۳ خواهیم دید، برهمکنش سیستم با ابزار اندازه‌گیری بسته را بسیار باریک می‌کند.

حال بیائید این موضوع را مطالعه کنیم که چگونه پهن‌شدگی بسته‌ی موج حاصل ضرب عدم قطعیت‌های  $\Delta x(t)\Delta p(t)$  را تحت تأثیر قرار می‌دهد. ابتدا باید اشاره کنیم که تکانه‌ی میانگین بسته  $(\hbar k_0)$  و عدم قطعیت آن  $(\hbar \Delta k)$  با گذشت زمان تغییر نمی‌کنند. می‌توان به راحتی این موضوع را به صورتی که در ادامه می‌آید، نتیجه گرفت. با بازنویسی (۹۴-۱) به شکل

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k, \circ) e^{i(kx - \omega t)} dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k, t) e^{ikx} dk \quad (150-1)$$

داریم:

$$\phi(k, t) = e^{-i\omega(k)t} \phi(k, \circ) \quad (151-1)$$

که در آن  $\phi(k, 0) = (a^2/2\pi)^{1/4} e^{-a^2(k-k_0)^2/4}$  است. بنابراین

$$|\phi(k, t)|^2 = |\phi(k, 0)|^2 \quad (152-1)$$

این تساوی پیشنهاد می‌کند که پهنای  $\phi(k, t)$  و  $\phi(k, 0)$  با هم برابرند و از این رو  $\Delta k$  ثابت باقی می‌ماند و بنابراین پاشندگی تکانه  $\Delta p$  باید ثابت بماند (این واقعیت انتظار می‌رفت زیرا تکانه‌ی یک ذره‌ی آزاد ثابت حرکت است). چون پهنای  $\phi(k, 0)$  از رابطه‌ی  $\Delta k = 1/a$  به دست می‌آید (۱۱۲-۱) را ببینید)، داریم:

$$\Delta p = \hbar \Delta k = \frac{\hbar}{a} \quad (153-1)$$

با ضرب این رابطه در (۱۴۶-۱) داریم:

$$\Delta x(t) \Delta p = \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + \frac{4\hbar^2}{m^2 a^4} t^2} \quad (154-1)$$

این رابطه نشان می‌دهد که رابطه‌ی  $\Delta x(t) \Delta p \geq \hbar/2$  همیشه برقرار است. به خصوص هنگامی که  $t = 0$  است، حد مقید پایین را به دست می‌آوریم:  $\Delta x_0 \Delta p = \hbar/2$  که رابطه‌ی عدم قطعیت برای یک بسته‌ی گاوسی مانا است (۱۱۴-۱) را ببینید). با افزایش  $|t|$ ، به نامساوی  $\Delta x(t) \Delta p > \hbar/2$  می‌رسیم. پس از این که نشان دادیم پهنای بسته‌ی موج در فضای تکانه پاشیده نمی‌شود، بی‌اثید پاشندگی پهنای بسته‌ی موج در فضای  $x$  را مطالعه کنیم. چون  $\Delta x_0 = a/2$  است، می‌توانیم (۱۴۶-۱) را به صورت زیر بنویسیم:

$$\Delta x(t) = \frac{a}{2} \sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}} = \Delta x_0 \sqrt{1 + \left(\frac{\delta x_{cl}(t)}{\Delta x_0}\right)^2} \quad (155-1)$$

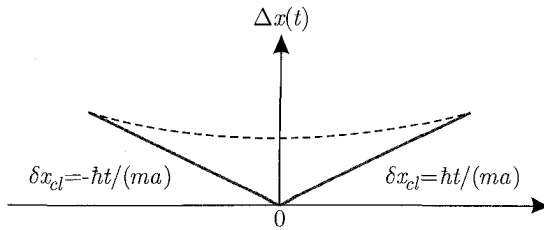
که در آن عامل پاشندگی  $\delta x_{cl}(t)/\Delta x_0$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\frac{\delta x_{cl}(t)}{\Delta x_0} = \pm \frac{2\hbar}{ma^2} t = \pm \frac{\hbar}{2m\Delta x_0^2} t \quad (156-1)$$

همانطور که در شکل ۱۶-۱ نشان داده شده است، هنگامی که  $|t|$  بزرگ است (یعنی  $t \rightarrow \pm\infty$ )،  $\Delta x(t) \rightarrow \delta x_{cl}(t)$  با

$$\delta x_{cl}(t) = \pm \frac{\hbar t}{ma} = \pm \frac{\Delta p}{m} t = \pm \Delta v t \quad (157-1)$$

که در آن  $\Delta v = \hbar/(ma)$  پاشیدگی در سرعت را نمایش می‌دهد. این بدان معنی است که اگر ذره در ابتدا ( $t = 0$ ) در  $x = 0$  با سرعت پاشندگی  $\Delta v$  شروع به حرکت کند آنگاه  $\Delta v$  ثابت باقی خواهد ماند



شکل ۱-۱۶ تحول زمانی پهنای بسته  $\Delta x(t) = \Delta x_0 \sqrt{1 + (\delta x_{cl}(t)/\Delta x_0)^2}$  (منحنی نقطه چین) و باشنگی کلاسیک  $\delta x_{cl}(t) = \pm \hbar t/(ma)$  (منحنی سیاه).  $\Delta x(t)$  به ازای مقادیرهای بزرگ  $|t|$  به  $\delta x_{cl}(t)$  می‌رسد و در  $t = 0$  داریم:  $\Delta x(0) = \Delta x_0 = a/2$ .

ولی پاشیدگی مکان ذره به صورت خطی با گذشت زمان افزایش خواهد یافت:  $\delta x_{cl}(t) = \hbar|t|/(ma)$  (شکل ۱-۱۶). از (۱-۱۵۵) می‌بینیم که اگر  $\delta x_{cl}(t)/\Delta x_0 \ll 1$  باشد آنگاه پهن شدن پهنای موج قابل چشم‌پوشی است اما اگر  $\delta x_{cl}(t)/\Delta x_0 \gg 1$  باشد آنگاه بسته‌ی موج بدون محدودیت پهن خواهد شد. در این مرحله باید اهمیت حد کلاسیکی (۱-۱۵۴) را بیان کنیم: در حد  $\hbar \rightarrow 0$  حاصل ضرب  $\Delta x(t)\Delta p$  به سمت صفر میل می‌کند این بدان معنی است که عدم قطعیت‌های  $x$  و  $p$  قابل چشم‌پوشی می‌شوند یعنی در حد کلاسیک، بسته‌ی موج بدون پهن شدن منتشر خواهد شد. در این حالت، مرکز بسته‌ی موج مانند یک ذره‌ی آزاد طبق قوانین مکانیک کلاسیک حرکت می‌کند. بنابراین پهن شدن پهنای موج یک اثر صرفاً کوانتومی است. بنابراین هنگامی که  $\hbar \rightarrow 0$  میل می‌کند، تمام اثرهای کوانتومی (پهن شدن پهنای بسته) ناپدید می‌شوند.

مطالعه‌ی بسته‌های موج را با برجسته نمودن اهمیت آنها به پایان می‌بریم:

- بسته‌های موج، ارتباط با اصل عدم قطعیت هایزنبرگ را فراهم می‌کنند.
- بسته‌های موج، مشخصه‌های ذره‌ای و موجی موج‌های مادی را یکجا جمع می‌کنند.
- بسته‌های موج، ارتباط بین شدت موج‌ها و احتمال‌ها را فراهم می‌کنند.
- بسته‌های موج، پیوندی بین مکانیک کلاسیک و مکانیک کوانتومی برقرار می‌کنند.

\* برای حرکت بسته‌ی موج و بررسی جوانب مختلف آن به CD مراجعه کنید.

## ۹-۱ ملاحظات پایانی

مدل بوهر با وجود موفقیت خیره‌کننده در پیش‌بینی ترازهای انرژی اتم هیدروژن و آهنگ‌های گذار، دچار محدودیت‌هایی نیز هست:

- این مدل تنها برای اتم هیدروژن و یون‌های هیدروژن‌گونه مانند  $\text{He}^+$  و  $\text{Li}^{2+}$  کارایی دارد.
  - این مدل توضیحی برای منشاء فرض‌های گوناگون خود ندارد. به عنوان مثال تأییدی نظری برای شرط کوانتس (۱-۶۳) ارائه نمی‌کند و توضیحی برای این که چرا حالت‌های مانا انرژی تابش نمی‌کنند، ندارد.
  - این مدل نمی‌تواند توضیح دهد که چرا الکترون‌ها به جای حرکت پیوسته از یک تراز انرژی به تراز انرژی دیگر، از یک تراز به تراز دیگر می‌جهند.
- بنابراین مدل بوهر نیازمند توسعه‌ی بیشتر برای توضیح ویژگی‌های الکترونی و توضیح طیف رده‌ی وسیعی از اتم‌ها است. مدل بوهر حتی در شکل محدود کنونی خود جدایی عمده و اساسی از فیزیک کلاسیک را نشان می‌دهد: فیزیک کلاسیک هیچ تأییدی بر وجود حالت‌های انرژی گسسته در سیستمی مانند اتم هیدروژن و همین‌طور کوانتس تکانه‌ی زاویه‌ای ندارد.
- مدل بوهر در شکل کنونی خود نه تنها کامل نیست بلکه از یک محتوای نظری محکم بی‌بهره است. این مدل بر اساس مجموعه‌ای از فرض‌های تدریجی تک‌منظوره بنا نهاده شده است. این فرض‌ها از اصول اولیه‌ی یک نظریه‌ی عمومی‌تر به دست نیامده‌اند اما به جای آن به صورت اختیاری اصل موضوعه قرار گرفته‌اند.
- فرمول‌بندی نظریه‌ی مکانیک کوانتومی عمده‌تاً در نیاز به یافتن یک اساس نظری برای ایده‌های بوهر و همچنین (با استفاده از اصول اولیه) برای توضیح دسته‌ی گسترده‌ای از پدیده‌های میکروفیزیکی دیگر مانند فرآیندهای معماگونه‌ای که در این فصل بحث شد، شتاب گرفت. در واقع این موضوع شگفت‌انگیز به نظر می‌رسد که یک نظریه (مکانیک کوانتومی) برای توضیح دقیق دسته‌ی وسیعی از پدیده‌هایی که در سطح مولکولی، اتمی و زیراتمی روی می‌دهند، قدرتمند و به اندازه‌ی کافی غنی باشد.
- در این فصل به مهم‌ترین واقعیت‌هایی پرداختیم که ناکامی فیزیک کلاسیک را تأیید کردند و در نتیجه منجر به پیدایش مکانیک کوانتومی شدند. در ادامه‌ی این کتاب بر روی صورت‌بندی مکانیک کوانتومی و کاربردهای آن در فرآیندهای میکروفیزیکی گوناگون متمرکز خواهیم شد. بدین منظور ابتدا باید به مطالعه‌ی ابزارهای ریاضی ضروری برای درک صورت‌بندی مکانیک کوانتومی بپردازیم. این کار در فصل ۲ انجام می‌شود.

## ۱۰-۱ مسأله‌های حل شده

با استفاده از واحدهای زیر می‌توان محاسبات عددی در مکانیک کوانتومی را ساده‌تر کرد. ابتدا بهتر است که انرژی‌ها برحسب واحدهای الکترون‌ولت (eV) بیان شوند: یک الکترون‌ولت انرژی‌ای است که توسط یک الکترون هنگام عبور از اختلاف پتانسیل یک ولت کسب می‌شود. می‌توان واحد الکترون‌ولت را برحسب ژول و برعکس بیان کرد:  $1\text{eV} = (1/6 \times 10^{-19}\text{C}) \times (1\text{V}) = 1/6 \times 10^{-19}\text{J}$  و  $1\text{J} = 0,625 \times 10^{19}\text{eV}$ .

همچنین بهتر است جرم ذره‌های زیراتمی (مانند الکترون، پروتون و نوترون) برحسب انرژی سکون آنها بیان شود:  $m_n c^2 = 939,56\text{MeV}$  و  $m_p c^2 = 938,27\text{MeV}$ ،  $m_e c^2 = 0,511\text{MeV}$ . علاوه‌براین گاهی اوقات استفاده از کمیت‌های  $hc = 197,33\text{MeV fm} = 197,33 \times 10^{-15}\text{MeV m}$  یا  $hc = 1242,37 \times 10^{-10}\text{eV m}$  مناسب‌تر از استفاده از  $\hbar = 1,05 \times 10^{-34}\text{Js}$  است. علاوه‌براین گاهی اوقات باید به جای  $1/((4\pi\epsilon_0)) = 8,9 \times 10^9\text{Nm}^2\text{C}^{-2}$  از ثابت ساختار ریز  $\alpha = e^2/[(4\pi\epsilon_0)\hbar c] = 1/137$  استفاده کرد.

## مسأله‌ی ۱-۱

یک آنتن  $45\text{kW}$  پخش برنامه‌های رادیویی، موج‌هایی با بسامد  $4\text{MHz}$  گسیل می‌کند. (الف) چه تعداد فوتون در هر ثانیه گسیل می‌شود؟

(ب) آیا طبیعت کوانتومی تابش الکترومغناطیسی در تحلیل تابش گسیل شده از این آنتن مهم است؟

حل

(الف) انرژی الکترومغناطیسی گسیل شده توسط آنتن در یک ثانیه برابر است با  $E = 45000\text{J}$ . بنابراین تعداد فوتون‌های گسیل شده در یک ثانیه برابر است با

$$n = \frac{E}{h\nu} = \frac{45000\text{J}}{6,63 \times 10^{-34}\text{Js} \times 4 \times 10^6\text{Hz}} = 1,7 \times 10^{31} \quad (158-1)$$

(ب) چون آنتن تعداد بسیار زیادی فوتون را در هر ثانیه گسیل می‌کند ( $1,7 \times 10^{31}$ )، طبیعت کوانتومی این تابش مهم نیست. در نتیجه با دقت نسبتاً زیادی می‌توان به وسیله‌ی نظریه‌ی الکترومغناطیس کلاسیک به این تابش پرداخت.

## مسأله‌ی ۲-۱

یک سیستم جرم-فنر را در نظر بگیرید که در آن یک جرم  $4\text{kg}$  به یک فنر بدون جرم با ثابت  $k = 196\text{Nm}^{-1}$  متصل است. سیستم روی یک میز افقی بدون اصطکاک نوسان می‌کند. این جرم به اندازه‌ی  $25\text{cm}$

نسبت به مکان تعادل کشیده و سپس رها می‌شود. (الف) از مکانیک کلاسیک برای پیدا کردن انرژی کل و بسامد نوسان‌های سیستم استفاده کنید.

(ب) با استفاده از نظریه‌ی مکانیک کوانتومی به مسأله‌ی نوسانگر بپردازید و فاصله‌ی بین دو تراز انرژی متوالی و تعداد کل کوانتوم‌های درگیر را بیابید. آیا در این سیستم اثرهای کوانتومی مهم‌اند؟

حل

(الف) مطابق با مکانیک کلاسیک، بسامد و انرژی کل نوسان‌ها از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{196}{4}} = 1,11 \text{ Hz}, \quad E = \frac{1}{2} k A^2 = \frac{196}{2} (0,25)^2 = 6,125 \text{ J} \quad (159-1)$$

(ب) فاصله‌ی بین دو تراز انرژی متوالی از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\Delta E = h\nu = (6,63 \times 10^{-34} \text{ Js}) \times (1,11 \text{ Hz}) = 7,4 \times 10^{-34} \text{ J} \quad (160-1)$$

و تعداد کل کوانتوم‌ها از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$n = \frac{E}{\Delta E} = \frac{6,125 \text{ J}}{7,4 \times 10^{-34} \text{ J}} = 8,3 \times 10^{33} \quad (161-1)$$

می‌بینیم که انرژی یک کوانتوم ( $7,4 \times 10^{-34} \text{ J}$ ) در مقایسه با انرژی کل  $6,125 \text{ J}$  کاملاً قابل چشم‌پوشی است و تعداد کوانتوم‌ها بسیار زیاد است. در نتیجه می‌توان ترازهای انرژی نوسانگر را به صورت پیوسته در نظر گرفت زیرا اندازه‌گیری فاصله‌ی بین آنها از نظر کلاسیکی امکان‌پذیر نیست. اگرچه اثرهای کوانتومی در این سیستم حضور دارند، با این وجود امکان آشکارسازی آنها برای بشر وجود ندارد. بنابراین اثرهای کوانتومی برای سیستم‌های ماکروسکوپی قابل چشم‌پوشی‌اند.

### مسأله‌ی ۳-۱

هنگامی که نوری با طول موج معلوم بر سطح یک فلز فرود می‌آید، پتانسیل ترمزی فتوالکترون‌ها  $3,27$  است. اگر از منبع نور دومی که طول موج آن دو برابر طول موج نور قبلی است، استفاده شود پتانسیل ترمزی به  $0,87$  کاهش می‌یابد. با استفاده از این داده‌ها:

(الف) طول موج تابش نخست را محاسبه کنید. (ب) تابع کار و بسامد قطع فلز را به دست آورید.

حل

(الف) با استفاده از (۲۳-۱) و با توجه به این که طول موج تابش دوم دو برابر طول موج تابش نخست است ( $\lambda_2 = 2\lambda_1$ )، می‌توانیم بنویسیم:

$$V_{s1} = \frac{hc}{e\lambda_1} - \frac{W}{e} \quad (162-1)$$

$$V_{s_2} = \frac{hc}{e\lambda_2} - \frac{W}{e} = \frac{hc}{2e\lambda_1} - \frac{W}{e} \quad (163-1)$$

برای به دست آوردن  $\lambda_1$  تنها باید (163-1) را از (162-1) کم کنیم:

$$V_{s_1} - V_{s_2} = \frac{hc}{e\lambda_1} \left(1 - \frac{1}{2}\right) = \frac{hc}{2e\lambda_1} \quad (164-1)$$

بنابراین طول موج از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\lambda_1 = \frac{hc}{2e(V_{s_1} - V_{s_2})} = \frac{6,6 \times 10^{-34} \text{Js} \times 3 \times 10^8 \text{ms}^{-1}}{2 \times 1,6 \times 10^{-19} \text{C} \times (3,2 \text{V} - 0,8 \text{V})} = 2,6 \times 10^{-7} \text{m} \quad (165-1)$$

(ب) برای به دست آوردن تابع کار تنها باید (163-1) را در ۲ ضرب کنیم و نتیجه را از (162-1) کم کنیم  
 $(V_{s_1} - 2V_{s_2} = W/e)$  که به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$W = e(V_{s_1} - 2V_{s_2}) = 1,6 \text{eV} = 1,6 \times 1,6 \times 10^{-19} \text{J} = 2,56 \times 10^{-19} \text{J} \quad (166-1)$$

بسامد قطع برابر است با

$$\nu = \frac{W}{h} = \frac{2,56 \times 10^{-19} \text{J}}{6,6 \times 10^{-34} \text{Js}} = 3,9 \times 10^{14} \text{Hz} \quad (167-1)$$

### مسأله‌ی ۴-۱

(الف) انرژی الکترونی‌هایی که نیاز داریم تا آنها را در یک میکروسکوپ الکترونی برای جداسازی فاصله‌ی  $0,27 \text{nm}$  استفاده کنیم تخمین بزنید.

(ب) در پراکندگی پروتون‌های  $2 \text{eV}$  از یک بلور، بیشینه‌ی پنجم شدت در زاویه‌ی  $30^\circ$  مشاهده شده است. فاصله‌ی صفحه‌های بلور را تخمین بزنید.

حل

(الف) چون تکانه‌ی الکترون برابر با  $p = 2\pi\hbar/\lambda$  جنبشی آن از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$E = \frac{p^2}{2m_e} = \frac{2\pi^2\hbar^2}{m_e\lambda^2} \quad (168-1)$$

چون  $m_e c^2 = 0,511 \text{MeV}$  و  $\hbar c = 197,33 \times 10^{-15} \text{MeV m}$  و  $\lambda = 0,27 \times 10^{-9} \text{m}$  است، داریم:

$$E = \frac{2\pi^2(\hbar c)^2}{(m_e c^2)\lambda^2} = \frac{2\pi^2(197,33 \times 10^{-15} \text{MeV m})^2}{(0,511 \text{MeV})(0,27 \times 10^{-9} \text{m})^2} = 20,6 \text{eV} \quad (169-1)$$

(ب) با استفاده از رابطه ی براگ (۴۶-۱) (یعنی رابطه ی  $\lambda = (2d/n) \sin \phi$ ) که در آن  $d$  فاصله ی صفحه های بلور است) می توانیم انرژی جنبشی پروتون را از (۱۶۸-۱) نتیجه بگیریم:

$$E = \frac{p^2}{2m_p} = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{m_p \lambda^2} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m_p d^2 \sin^2 \phi} \quad (170-1)$$

که به رابطه ی زیر می انجامد:

$$d = \frac{n\pi\hbar}{(\sin \phi) \sqrt{2m_p E}} = \frac{n\pi\hbar c}{(\sin \phi) \sqrt{2m_p c^2 E}} \quad (171-1)$$

چون  $n = 5$  (بیشینه ی پنجم)،  $\phi = 30^\circ$ ،  $E = 2\text{eV}$  و  $m_p c^2 = 938,27\text{MeV}$  است، داریم:

$$d = \frac{5\pi \times 197,33 \times 10^{-15}\text{MeV m}}{(\sin 30^\circ) \sqrt{2 \times 938,27\text{MeV} \times 2 \times 10^{-6}\text{MeV}}} = 0,101\text{nm} \quad (172-1)$$

### مسأله ی ۵-۱

یک فوتون با انرژی  $3\text{keV}$  به صورت کشسان با یک الکترون که در ابتدا ساکن است، برخورد می کند. اگر فوتون در زاویه ی  $60^\circ$  پدیدار شود آنگاه

(الف) انرژی جنبشی الکترون پس زده و

(ب) زاویه ای که در آن الکترون پس زده می شود را حساب کنید.

حل

(الف) از پایستگی انرژی داریم:

$$h\nu + m_e c^2 = h\nu' + (K_e + m_e c^2) \quad (173-1)$$

که در آن  $h\nu$  و  $h\nu'$  به ترتیب انرژی فوتون های اولیه و پراکنده شده،  $m_e c^2$  انرژی سکون الکترون اولیه،  $(K_e + m_e c^2)$  انرژی کل الکترون پس زده و  $K_e$  انرژی جنبشی پس زنی آن است. می توان عبارت مربوط به  $K_e$  را بی درنگ از (۱۷۳-۱) نتیجه گرفت:

$$K_e = h(\nu - \nu') = hc \left( \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \right) = \frac{hc}{\lambda} \frac{\lambda' - \lambda}{\lambda'} = (h\nu) \frac{\Delta\lambda}{\lambda'} \quad (174-1)$$

که در آن جابه جایی طول موج  $\Delta\lambda$  از رابطه ی (۳۶-۱) به دست می آید:

$$\begin{aligned} \Delta\lambda &= \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta) = \frac{2\pi\hbar c}{m_e c^2} (1 - \cos \theta) \\ &= \frac{2\pi \times 197,33 \times 10^{-15}\text{MeV m}}{0,511\text{MeV}} (1 - \cos 60^\circ) \\ &= 0,0012\text{nm} \end{aligned} \quad (175-1)$$



چون طول موج فوتون فرودی برابر با  $\lambda = 2\pi\hbar c/(h\nu)$  است، داریم:

$$\lambda = 2\pi \times 197,33 \times 10^{-15} \text{MeV m} / (0,003 \text{MeV}) = 0,414 \text{nm}$$

طول موج فوتون پراکنده شده از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\lambda' = \lambda + \Delta\lambda = 0,4152 \text{nm} \quad (176-1)$$

اکنون با جاگذاری مقدارهای عددی  $\lambda'$  و  $\Delta\lambda$  در (۱۷۴-۱) انرژی جنبشی الکترون پس زده را به دست می‌آوریم:

$$K_e = (h\nu) \frac{\Delta\lambda}{\lambda'} = (3 \text{keV}) \times \frac{0,0012 \text{nm}}{0,4152 \text{nm}} = 8,671 \text{eV} \quad (177-1)$$

(ب) برای به دست آوردن زاویه‌ای که در آن الکترون پس زده می‌شود، تنها باید از پایستگی تکانه‌ی کل در امتداد محورهای  $x$  و  $y$  استفاده کنیم:

$$p = p_e \cos \phi + p' \cos \theta, \quad 0 = p_e \sin \phi - p' \sin \theta \quad (178-1)$$

می‌توان این رابطه‌ها را به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$p_e \cos \phi = p - p' \cos \theta, \quad p_e \sin \phi = p' \sin \theta \quad (179-1)$$

که در آن  $p$  و  $p'$  تکانه‌ی فوتون‌های اولیه و نهایی،  $p_e$  تکانه‌ی الکترون پس زده و  $\theta$  و  $\phi$  به ترتیب زاویه‌هایی هستند که در آنها فوتون و الکترون پراکنده می‌شوند (شکل ۱-۴). با در نظر گرفتن (۱۷۹-۱) و تقسیم معادله‌ی دوم بر معادله‌ی اول به دست می‌آوریم:

$$\tan \phi = \frac{\sin \theta}{p/p' - \cos \theta} = \frac{\sin \theta}{\lambda'/\lambda - \cos \theta} \quad (180-1)$$

که در آن از عبارات‌های مربوط به تکانه‌ی فوتون فرودی  $p = h/\lambda$  و فوتون پراکنده شده  $p' = h/\lambda'$  استفاده کرده‌ایم. چون  $\lambda = 0,414 \text{nm}$  و  $\lambda' = 0,4152 \text{nm}$  است، زاویه‌ای که در آن الکترون پس زده می‌شود برابر است با

$$\phi = \tan^{-1} \left( \frac{\sin \theta}{\lambda'/\lambda - \cos \theta} \right) = \tan^{-1} \left( \frac{\sin 60^\circ}{0,4152/0,414 - \cos 60^\circ} \right) = 59,86^\circ \quad (181-1)$$

## مسئله ۱-۶

نشان دهید که بیشینه انرژی جنبشی منتقل شده به یک پروتون هنگامی که یک فوتون با انرژی  $h\nu$  به آن برخورد می‌کند، برابر با  $K_p = h\nu / [1 + m_p c^2 / (2h\nu)]$  است که در آن جرم پروتون است.

حل

با استفاده از (۱-۳۵) داریم:

$$\frac{1}{\nu'} = \frac{1}{\nu} + \frac{h}{m_p c^2} (1 - \cos \theta) \quad (1-182)$$

که به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$h\nu' = \frac{h\nu}{1 + (h\nu/m_p c^2)(1 - \cos \theta)} \quad (1-183)$$

چون انرژی جنبشی منتقل شده به پروتون از رابطه‌ی  $K_p = h\nu - h\nu'$  به دست می‌آید، رابطه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$K_p = h\nu - \frac{h\nu}{1 + (h\nu/m_p c^2)(1 - \cos \theta)} = \frac{h\nu}{1 + m_p c^2 / [h\nu(1 - \cos \theta)]} \quad (1-184)$$

واضح است که انرژی جنبشی بیشینه پروتون متناظر با حالتی است که در آن فوتون رو به عقب پراکنده می‌شود ( $\theta = \pi$ )

$$K_p = \frac{h\nu}{1 + m_p c^2 / (2h\nu)} \quad (1-185)$$

## مسئله ۱-۷

فوتونی را در نظر بگیرید که توسط یک الکترون ساکن پراکنده می‌شود. اگر جابه‌جایی طول موج کامیتون مشاهده شده سه برابر طول موج فوتون فرودی باشد و فوتون در زاویه‌ی  $60^\circ$  پراکنده شود آنگاه

(الف) طول موج فوتون فرودی

(ب) انرژی الکترون پس‌زده و

(پ) زاویه‌ای که در آن الکترون پراکنده می‌شود را محاسبه کنید.

حل

(الف) در حالتی که در آن فوتون‌ها در زاویه‌ی  $\theta = 60^\circ$  پراکنده می‌شوند و با توجه به این که  $\Delta\lambda = 3\lambda$  است، رابطه‌ی جابه‌جایی طول موج (۱-۳۶) نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$3\lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos 60^\circ) \quad (1-186)$$

که به نوبه‌ی خود به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\lambda = \frac{h}{\epsilon m_e c} = \frac{\pi \hbar c}{\epsilon m_e c^2} = \frac{3,14 \times 197,33 \times 10^{-15} \text{MeV m}}{3 \times 0,511 \text{MeV}} = 4,04 \times 10^{-13} \text{m} \quad (187-1)$$

(ب) می‌توان انرژی الکترون پس‌زده را از پایستگی انرژی به دست آورد:

$$K_e = hc \left( \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \right) = \frac{3 \hbar c}{4 \lambda} = \frac{3 \pi \hbar c}{2 \lambda} = \frac{3 \times 3,14 \times 197,33 \times 10^{-15} \text{MeV m}}{2 \times 4,04 \times 10^{-13} \text{m}} = 2,3 \text{MeV} \quad (188-1)$$

در به دست آوردن این رابطه از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که  $\lambda' = \lambda + \Delta \lambda = 4 \lambda$ . (پ) چون  $\lambda' = 4 \lambda$  است، زاویه‌ی  $\phi$  که در آن الکترون پس‌زده می‌شود را می‌توان از (۱۸۱-۱) نتیجه گرفت:

$$\phi = \tan^{-1} \left( \frac{\sin \theta}{\lambda'/\lambda - \cos \theta} \right) = \tan^{-1} \left( \frac{\sin 60^\circ}{4 - \cos 60^\circ} \right) = 13,9^\circ \quad (189-1)$$

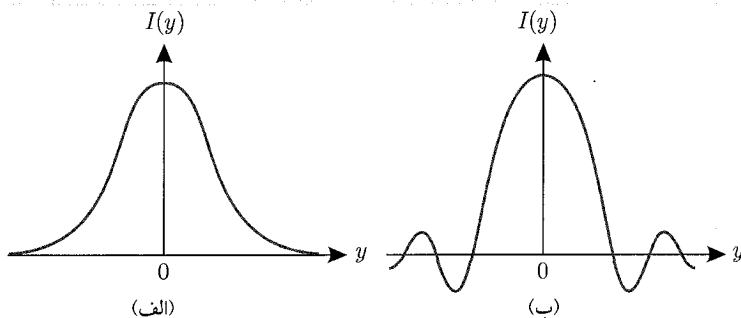
## مسأله‌ی ۸-۱

در آزمایش دو شکاف با منبع الکترون‌های تک‌انرژی، آشکارسازها در امتداد یک صفحه‌ی نمایش قائم موازی با محور  $y$  برای مشاهده‌ی نقش پراش الکترون‌های گسیل شده از دو شکاف قرار گرفته‌اند. هنگامی که تنها یک شکاف باز است، دامنه‌ی الکترون‌های آشکار شده روی صفحه‌ی نمایش برابر است با  $\psi_1(y, t) = A_1 e^{-i(ky - \omega t)} / \sqrt{1 + y^2}$  و هنگامی که تنها شکاف دیگر باز است، برابر با  $\psi_2(y, t) = A_2 e^{-i(ky + \pi y - \omega t)} / \sqrt{1 + y^2}$  است. باید به دست آیند. شدت آشکار شده روی صفحه‌ی نمایش هنگامی که (الف) هر دو شکاف باز است و از یک منبع نور برای تعیین این که الکترون از کدام شکاف عبور کرده‌است، استفاده می‌شود،

(ب) هر دو شکاف باز هستند و از منبع نوری استفاده نمی‌شود، را محاسبه کنید. شدت ثبت شده بر روی صفحه‌ی نمایش را به صورت تابعی از  $y$  برای حالت‌های (الف) و (ب) رسم کنید.

حل

با استفاده از انتگرال  $\int_{-\infty}^{+\infty} dy / (1 + y^2) = \pi$  می‌توانیم ثابت‌های بهنجارش را یک‌بار به دست آوریم:  $A_1 = A_2 = 1/\sqrt{\pi}$ . بنابراین  $\psi_1$  و  $\psi_2$  به صورت  $\psi_1(y, t) = e^{-i(ky - \omega t)} / \sqrt{\pi(1 + y^2)}$  و  $\psi_2(y, t) = e^{-i(ky + \pi y - \omega t)} / \sqrt{\pi(1 + y^2)}$  در می‌آیند. (الف) زمانی که از یک منبع نور برای مشاهده‌ی الکترون‌ها هنگام عبورشان از دو شکاف استفاده کنیم، شدت کل ثبت شده روی صفحه‌ی



شکل ۱۷-۱ شکل شدت کل تولید شده در یک آزمایش دو شکاف هنگامی که هر دو شکاف باز هستند و (الف) از یک منبع نور برای مشاهده‌ی حرکت الکترون استفاده شده است ( $I(y) = 2/\pi(1+y^2)$ ) و هیچ تداخلی ثبت نشده است. (ب) از هیچ منبع نوری استفاده نشده است ( $I(y) = 4/[\pi(1+y^2)] \cos^2(\pi y/2)$ ) و یک طرح تداخلی رخ می‌دهد.

نمایش قائم به سادگی با جمع چگالی‌های احتمال (یا شدت‌های منفرد) تعیین می‌شود:

$$I(y) = |\psi_1(y, t)|^2 + |\psi_2(y, t)|^2 = \frac{2}{\pi(1+y^2)} \quad (190-1)$$

همانطور که در شکل ۱۷-۱ الف نشان داده شده است، شکل شدت کل هیچ نقش تداخلی را نشان نمی‌دهد. با اعمال نور توسط منبع نور بر الکترون‌ها، حرکت آنها را دچار واپیچش می‌کنیم. (ب) زمانی که از هیچ منبع نوری برای مشاهده‌ی الکترون‌ها استفاده نشود، حرکت واپیچیده نخواهد شد و شدت کل از جمع دامنه‌ها (و نه شدت‌ها) تعیین می‌شود:

$$\begin{aligned} I(y) &= |\psi_1(y, t) + \psi_2(y, t)|^2 = \frac{1}{\pi(1+y^2)} \left| e^{-i(ky-\omega t)} + e^{-i(ky+\pi y-\omega t)} \right|^2 \\ &= \frac{1}{\pi(1+y^2)} (1 + e^{i\pi y}) (1 + e^{-i\pi y}) \\ &= \frac{4}{\pi(1+y^2)} \cos^2\left(\frac{\pi}{2}y\right) \end{aligned} \quad (191-1)$$

شکل این شدت یک نقش تداخلی را نشان می‌دهد که همانطور که در شکل ۱۷-۱ ب نشان داده شده است، از یک تابع نوسانی  $\cos^2(\pi y/2)$  مدوله شده توسط  $4/[\pi(1+y^2)]$  نتیجه می‌شود.

### مسأله‌ی ۹-۱

برخورد رودرروی بین یک ذره‌ی  $\alpha$  و یک هسته‌ی سرب را در نظر بگیرید. با چشم‌پوشی از پس‌زنی هسته‌ی سرب، نزدیک‌ترین فاصله‌ی یک ذره‌ی  $\alpha$  با انرژی  $9.0 \text{ MeV}$  به هسته را محاسبه کنید.

## حل

در این برخورد رودرو می‌توان نزدیک‌ترین فاصله‌ی  $r_0$  را از پایستگی انرژی  $E_i = E_f$  به دست آورد که در آن انرژی اولیه‌ی سیستم (ذره‌ی  $\alpha$  و هسته‌ی سرب) است هنگامی که ذره و هسته از یکدیگر دورند و بنابراین پتانسیل الکتروستاتیک بین خود را احساس نمی‌کنند، با فرض این که هسته‌ی سرب ساکن است،  $E_i = E_f$  انرژی ذره‌ی  $\alpha$  برابر است با  $10^{-19} \text{J} \times 1.6 \times 10^6 \times 9 = 9 \times 10^6 \text{MeV}$ .  
 نیز انرژی سیستم است هنگامی که ذره‌ی  $\alpha$  در نزدیک‌ترین فاصله‌ی خود به هسته است. در این مکان، ذره‌ی  $\alpha$  ساکن است و بنابراین انرژی جنبشی ندارد. تنها انرژی‌ای که سیستم دارد عبارت است از انرژی پتانسیل الکتروستاتیک بین ذره‌ی  $\alpha$  و هسته‌ی سرب که دارای بار مثبت  $82e$  است. با چشم‌پوشی از پس‌زنی هسته‌ی سرب و با توجه به این که بار ذره‌ی  $\alpha$  مثبت و برابر با  $2e$  است، داریم:  
 $E_f = (2e)(82e)/(4\pi\epsilon_0 r_0) = E_i$  یا  $E_i = E_f$ . پایستگی انرژی  $E_i = E_f$  یا  $E_i = E_f$  یک‌باره به‌رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$r_0 = \frac{(2e)(82e)}{4\pi\epsilon_0 E_i} = 2.62 \times 10^{-14} \text{m} \quad (192-1)$$

که در آن از مقدارهای  $e = 1.6 \times 10^{-19} \text{C}$  و  $1/(4\pi\epsilon_0) = 8.9 \times 10^9 \text{Nm}^2\text{C}^{-2}$  استفاده کرده‌ایم.

## مسأله‌ی ۱۰-۱

با در نظر گرفتن این که یک یون پنج‌بار یونیده‌ی کربن ( $\text{C}^{5+}$ ) مانند اتم هیدروژن رفتار می‌کند، (الف) شعاع  $r_n$  و انرژی  $E_n$  را برای یک حالت مشخص  $n$  محاسبه کنید و آنها را با عبارت‌های متناظر برای هیدروژن مقایسه کنید.

(ب) انرژی یونش  $\text{C}^{5+}$  را هنگامی که در نخستین حالت برانگیخته‌ی خود است، محاسبه کنید و آن را با مقدار متناظر برای هیدروژن مقایسه کنید. (پ) طول موج متناظر با گذار از حالت  $n = 3$  به حالت  $n = 1$  را محاسبه کنید و آن را با مقدار متناظر برای هیدروژن مقایسه کنید.

## حل

(الف) یون  $\text{C}^{5+}$  از خارج کردن چهار الکترون از اتم کربن به وجود می‌آید. برای یافتن عبارت‌های مربوط به  $r_{nC}$  و  $E_{nC}$  مربوط به یون  $\text{C}^{5+}$  (که ۶ پروتون دارد) تنها باید  $Z = 6$  را در (۷۶-۱) وارد کنیم:

$$r_{nC} = \frac{a_0}{6} n^2, \quad E_{nC} = -\frac{36}{n^2} R \quad (193-1)$$

که در آن جمله‌ی  $m_e/M$  را حذف کرده‌ایم زیرا بسیار کوچک‌تر از یک است. واضح است که این عبارت‌ها از طریق رابطه‌های زیر به عبارت‌های مشابه مربوط به اتم هیدروژن مربوط می‌شوند:

$$r_{nC} = \frac{a_0}{6} n^2 = \frac{r_{nH}}{6}, \quad E_{nC} = \frac{36R}{n^2} = 36E_{nH} \quad (194-1)$$

(ب) انرژی یونش عبارت است از انرژی لازم برای خارج ساختن تنها الکترون باقی مانده‌ی یون  $C^{5+}$ . هنگامی که یون  $C^{5+}$  در نخستین حالت برانگیخته‌ی خود است، انرژی یونش برابر است با

$$E_{\gamma C} = -\frac{36R}{4} = -9 \times 13,6 \text{ eV} = -122,4 \text{ eV} \quad (195-1)$$

که ۳۶ برابر انرژی لازم برای یونیده کردن اتم هیدروژن در نخستین حالت برانگیخته‌ی خود است:  $E_{\gamma H} = -3,4 \text{ eV}$  (توجه داشته باشید که  $n = 2$  را متناظر با نخستین حالت برانگیخته در نظر گرفته‌ایم در نتیجه حالت‌های  $n = 1$  و  $n = 3$  به ترتیب متناظر با حالت پایه و دومین حالت برانگیخته خواهند بود).

(پ) طول موج متناظر با گذار از حالت  $n = 3$  به حالت  $n = 1$  را می‌توان از رابطه‌ی  $hc/\lambda = E_{\gamma C} - E_{1C}$  نتیجه گرفت که هنگامی که با رابطه‌های  $E_{1C} = -489,6 \text{ eV}$  و  $E_{\gamma C} = -54,4 \text{ eV}$  ترکیب شود به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\lambda = \frac{hc}{E_{\gamma C} - E_{1C}} = \frac{2\pi\hbar c}{E_{\gamma C} - E_{1C}} = \frac{2\pi \times 197,33 \times 10^{-9} \text{ eV m}}{-54,4 \text{ eV} + 489,6 \text{ eV}} = 2,85 \text{ nm} \quad (196-1)$$

### مسئله‌ی ۱۱-۱

(الف) تبدیل فوریه‌ی  $\phi(k) = \begin{cases} A(a - |k|) & |k| \leq a \\ 0 & |k| > a \end{cases}$  را بیابید که در آن  $a$  یک پارامتر مثبت و  $A$  یک ضریب بهنجارش است که باید به دست آید.

(ب) عدم قطعیت‌های  $\Delta x$  و  $\Delta p$  را محاسبه کنید و بررسی کنید که آیا در اصل عدم قطعیت صدق می‌کند.

حل (الف) می‌توان ضریب بهنجارش  $A$  را یک‌بارہ پیدا کرد:

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(k)|^2 dk = |A|^2 \int_{-a}^0 (a+k)^2 dk + |A|^2 \int_0^a (a-k)^2 dk \\ &= 2|A|^2 \int_0^a (a-k)^2 dk = 2|A|^2 \int_0^a (a^2 - 2ak + k^2) dk \\ &= \frac{2a^3}{3} |A|^2 \end{aligned} \quad (197-1)$$

که به  $A = \sqrt{3/(2a^3)}$  می‌انجامد. شکل  $\phi(k) = \sqrt{3/(2a^3)}(a - |k|)$  در شکل ۱۸-۱ رسم شده است.

حال تبدیل فوریه‌ی  $\phi(k)$  برابر است با

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{ikx} dk$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{3}{2a^2}} \left[ \int_{-a}^0 (a+k)e^{ikx} dk + \int_0^a (a-k)e^{ikx} dk \right] \quad (198-1)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{3}{2a^2}} \left[ \int_{-a}^0 ke^{ikx} dk - \int_0^a ke^{ikx} dk + a \int_{-a}^a e^{ikx} dk \right]$$

با استفاده از انتگرال‌های

$$\int_{-a}^0 ke^{ikx} dk = \frac{a}{ix} e^{-iax} + \frac{1}{x^2} (1 - e^{-iax}) \quad (199-1)$$

$$\int_0^a ke^{ikx} dk = \frac{a}{ix} e^{iax} + \frac{1}{x^2} (e^{iax} - 1) \quad (200-1)$$

$$\int_{-a}^a e^{ikx} dk = \frac{1}{ix} (e^{iax} - e^{-iax}) = \frac{2 \sin(ax)}{x} \quad (201-1)$$

و پس از کمی محاسبه‌ی سراسر به جواب زیر می‌رسیم:

$$\psi_0(x) = \frac{4}{x^2} \sin^2\left(\frac{ax}{2}\right) \quad (202-1)$$

همانطور که در شکل ۱۸-۱ نشان داده شده است، این بسته‌ی موج جایگزیده است: در  $x = 0$  دارای قله است و با افزایش  $x$  به تدریج کاهش می‌یابد. می‌توانیم ثابت کنیم که بیشینه‌ی  $\psi_0(x)$  در  $x = 0$  روی می‌دهد (با نوشتن  $\psi_0(x)$  به صورت  $\sin^2(ax/2) a^2 (ax/2)^{-2}$  و با توجه به این که  $\lim_{x \rightarrow 0} \sin(bx)/(bx) \rightarrow 1$  به دست می‌آوریم:  $\psi_0(0) = a^2$ ).

(ب) شکل ۱۸-۱ الف در تعریف نیم‌پهنای  $\phi(k)$  کاملاً پیشنهادی است:  $\Delta k = a$  (از این رو عدم قطعیت در تکانه برابر با  $\Delta p = \hbar a$  است). با تعریف پهنای  $\Delta k = a$ ، با قطعیت کامل می‌دانیم که ذره بین  $-a \leq k \leq a$  قرار دارد. مطابق با شکل ۱۸-۱ الف احتمال یافتن ذره در خارج از این بازه برابر با صفر است زیرا زمانی که  $|k| > a$  است،  $\phi(k)$  صفر می‌شود.

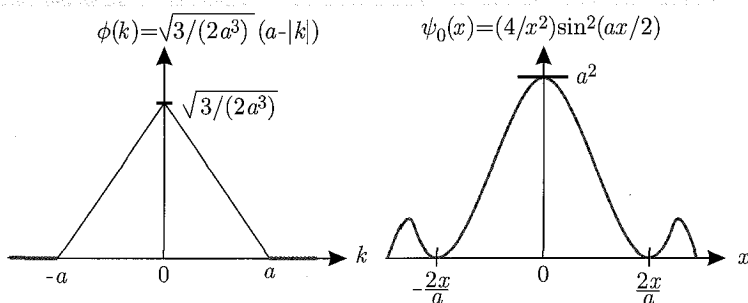
اکنون بیایید پهنای  $\Delta x$  تابع موج  $\psi_0(x)$  را پیدا کنیم. چون  $\sin(a\pi/2a) = 1$ ،  $\psi_0(\pi/a) = 4a^2/\pi^2$  و  $\psi_0(0) = a^2$  است، از رابطه‌ی (۲۰۲-۱) به دست می‌آوریم:  $\psi_0(\pi/a) = 4a^2/\pi^2 = 4/\pi^2 \psi_0(0)$  یا

$$\frac{\psi_0(\pi/a)}{\psi_0(0)} = \frac{4}{\pi^2} \quad (203-1)$$

این رابطه پیشنهاد می‌کند که  $\Delta x = \pi/a$  است: هنگامی که  $x = \pm \Delta x = \pm \pi/a$  است، بسته‌ی موج  $\psi_0(x)$  از مقدار بیشینه‌اش  $(\psi_0(0) = a^2)$  به  $4/\pi^2$  کاهش می‌یابد. به صورت خلاصه داریم:

$$\Delta k = a \text{ و } \Delta x = \pi/a$$

$$\Delta x \Delta k = \pi \quad (204-1)$$



شکل ۱۸-۱ شکل تابع  $\phi(k)$  و تبدیل فوریه  $\psi_0(x)$  آن.

یا

$$\Delta x \Delta p = \pi \hbar \quad (205-1)$$

زیرا  $\Delta k = \Delta p / \hbar$  است. این رابطه علاوه بر این که در اصل عدم قطعیت هایزنبرگ (۱-۵۷) صدق می‌کند، نشان می‌دهد که حاصل ضرب  $\Delta x \Delta p$  بزرگ‌تر از  $\hbar/2$  است:  $\Delta x \Delta p > \hbar/2$ . بنابراین بسته‌ی موج (۱-۲۰) تصویر روشنی از جمله‌ی عمومی‌ای است که در بالا بیان شد: یعنی تنها بسته‌های موج گاوسی پایین‌ترین حد، اصل عدم قطعیت هایزنبرگ  $\Delta x \Delta p = \hbar/2$  را نتیجه می‌دهند (۱-۱۱۴) را ببینید). تمام بسته‌های موج دیگر (مانند (۱-۲۰۲)) مقادیر بالاتری را برای حاصل ضرب  $\Delta x \Delta p$  نتیجه می‌دهند.

### مسأله‌ی ۱-۱۲

سرعت‌های گروه و فاز را برای بسته‌ی موج متناظر با یک ذره‌ی نسبیتی محاسبه کنید.

حل

به یاد بیاورید که انرژی و تکانه‌ی یک ذره‌ی نسبیتی از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$E = mc^2 = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \quad p = mv = \frac{m_0 v}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (206-1)$$

که در آن  $m_0$  جرم سکون ذره و  $c$  سرعت نور در خلاء است. با به توان دو رساندن و جمع کردن عبارت‌های مربوط به  $E$  و  $p$  به دست می‌آوریم:  $E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4$  بنابراین

$$E = c \sqrt{p^2 + m_0^2 c^2} \quad (207-1)$$

با استفاده از این رابطه همراه با  $p^2 + m_0^2 c^2 = m_0^2 c^2 / (1 - v^2/c^2)$  (۱-۱۲۲) می‌توانیم نشان دهیم که سرعت گروه به صورت زیر به دست می‌آید:

$$v_g = \frac{dE}{dp} = \frac{d}{dp} \left( c \sqrt{p^2 + m_0^2 c^2} \right) = \frac{pc}{\sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}} = v \quad (208-1)$$



بنابراین سرعت گروه برابر با سرعت ذره است ( $v_g = v$ ).

می‌توان سرعت فاز را از (۱۲۲-۱) و (۲۰۷-۱) پیدا کرد:  $v_{ph} = E/p = c\sqrt{1 + m_0^2 c^2/p^2}$  و زمانی که با رابطه‌ی  $p = m_0 v / \sqrt{1 - v^2/c^2}$  ترکیب شود، به رابطه‌ی  $\sqrt{1 + m_0^2 c^2/p^2} = c/v$  می‌انجامد بنابراین

$$v_{ph} = \frac{E}{p} = c\sqrt{1 + \frac{m_0^2 c^2}{p^2}} = \frac{c^2}{v} \quad (۲۰۹-۱)$$

این رابطه نشان می‌دهد که سرعت فاز موج متناظر با یک ذره‌ی نسبیتی با  $m_0 \neq 0$  بزرگ‌تر از سرعت نور است ( $v_{ph} = c^2/v > c$ ) که در واقع غیرفیزیکی است. به نظر می‌رسد که نتیجه‌ی  $v_{ph} > c$  نظریه‌ی نسبیت خاص (که مطابق با آن سرعت ذره‌های مادی نمی‌تواند از  $c$  تجاوز کند) را نقض می‌کند. در حقیقت این اصل نقض نمی‌شود زیرا  $v_{ph}$  سرعت ذره را نشان نمی‌دهد. سرعت ذره به وسیله‌ی سرعت گروه (۲۰۸-۱) نمایش داده می‌شود. در نتیجه سرعت فاز یک ذره‌ی نسبیتی اهمیت فیزیکی ندارد. سرانجام حاصل ضرب سرعت‌های گروه و فاز برابر با  $c^2$  است یعنی  $v_g v_{ph} = c^2$ .

### مسأله‌ی ۱۳-۱

بسامد زاویه‌ای موج‌های سطحی در یک مایع برحسب عدد موج  $k$  با رابطه‌ی  $\omega = \sqrt{gk + Tk^3/\rho}$  داده می‌شود که در آن  $g$  شتاب ناشی از گرانش،  $\rho$  چگالی مایع و  $T$  کشش سطحی است (که نیروی رو به بالایی را به یک المان از مایع سطحی وارد می‌کند). سرعت‌های فاز و گروه را به ازای حالت‌های حدی یعنی زمانی که موج‌های سطحی: (الف) طول موج‌های بسیار بزرگ و (ب) طول موج‌های بسیار کوچک دارند، بیابید.

حل

می‌توان سرعت فاز را یک باره از (۱۱۹-۱) یافت:

$$v_{ph} = \frac{\omega}{k} = \sqrt{\frac{g}{k} + \frac{T}{\rho}k} = \sqrt{\frac{g\lambda}{2\pi} + \frac{2\pi T}{\rho\lambda}} \quad (۲۱۰-۱)$$

که در آن از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که  $k = 2\pi/\lambda$  است ( $\lambda$  طول موج موج‌های سطحی است). (الف) اگر  $\lambda$  بسیار بزرگ باشد آنگاه می‌توانیم از جمله‌ی دوم در (۲۱۰-۱) چشم‌پوشی کنیم بنابراین

$$v_{ph} = \sqrt{\frac{g\lambda}{2\pi}} = \sqrt{\frac{g}{k}} \quad (۲۱۱-۱)$$

در این تقریب، سرعت فاز به طبیعت مایع بستگی ندارد زیرا به پارامتری که مربوط به مایع است مانند چگالی یا کشش سطحی آن بستگی ندارد. این حالت متناظر با (به عنوان مثال) موج‌های آب عمیق (که موج‌های گرانشی نامیده می‌شوند) است.

برای به دست آوردن سرعت گروه بیائید از (۱-۲۱۱) نسبت به  $k$  مشتق بگیریم:  
 $dv_{ph}/dk = -(1/2k)\sqrt{g/k} = -v_{ph}/2k$  جاگذاری این رابطه در (۱-۱۲۰) نشان می‌دهد که  
 سرعت گروه نصف سرعت فاز است:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = v_{ph} + k \frac{dv_{ph}}{dk} = v_{ph} - \frac{1}{2}v_{ph} = \frac{1}{2}v_{ph} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{g\lambda}{2\pi}} \quad (1-212)$$

هرچه طول موج بزرگ‌تر باشد، سرعت گروه بزرگ‌تر است. این رابطه توضیح می‌دهد که چرا باد مانای قوی موج‌هایی با طول موج بزرگ‌تر از موج‌های تولید شده توسط باد زودگذر تولید می‌کند.  
 (ب) اگر  $\lambda$  بسیار کوچک باشد آنگاه جمله‌ی دوم در (۱-۲۱۰) جمله‌ی غالب می‌شود. بنابراین با نگره داشتن جمله‌ی دوم داریم:

$$v_{ph} = \sqrt{\frac{2\pi T}{\rho\lambda}} = \sqrt{\frac{T}{\rho}k} \quad (1-213)$$

که به رابطه‌ی  $dv_{ph}/dk = \sqrt{Tk/\rho}/2k = v_{ph}/2k$  می‌انجامد. با وارد کردن این عبارت در (۱-۱۲۰) سرعت گروه را به دست می‌آوریم:

$$v_g = v_{ph} + k \frac{dv_{ph}}{dk} = v_{ph} + \frac{1}{2}v_{ph} = \frac{3}{2}v_{ph} \quad (1-214)$$

بنابراین هرچه طول موج کوچک‌تر باشد، سرعت گروه بزرگ‌تر است. این موج‌ها، موج‌های تشتکی نامیده می‌شوند. این موج‌ها (به عنوان مثال) زمانی که ظرف تحت تأثیر ارتعاشاتی با بسامد بالا و دامنه‌ی کم قرار بگیرد یا زمانی که بادی ملایم روی سطح یک شاره بوزد، به وجود می‌آیند.

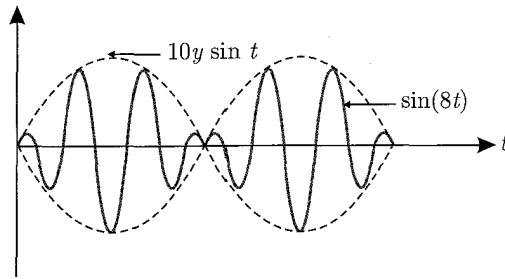
### مسأله‌ی ۱-۱۴

این مسأله برای نشان دادن اصل برهنه‌ی و مفاهیم تابع‌های مدوله و مدوله‌کننده در یک بسته‌ی موج طراحی شده است. دو تابع موج  $\psi_1(y, t) = \Delta y \cos \gamma t$  و  $\psi_2(y, t) = -\Delta y \cos \gamma t$  را در نظر بگیرید که در آنها  $y$  و  $t$  به ترتیب برحسب متر و ثانیه‌اند. نشان دهید که برهنه‌ی آنها یک بسته‌ی موج را تولید می‌کند. آن را رسم نموده و تابع‌های موج مدوله و مدوله‌کننده را مشخص کنید.

حل

با استفاده از رابطه‌ی  $\cos(\alpha \pm \beta) = \cos \alpha \cos \beta \mp \sin \alpha \sin \beta$  می‌توانیم برهنه‌ی  $\psi_1(y, t)$  و  $\psi_2(y, t)$  را به صورت زیر بنویسیم:

$$\begin{aligned} \psi(y, t) &= \psi_1(y, t) + \psi_2(y, t) = \Delta y \cos \gamma t - \Delta y \cos \gamma t \\ &= \Delta y (\cos \lambda t \cos t + \sin \lambda t \sin t) - \Delta y (\cos \lambda t \cos t - \sin \lambda t \sin t) \end{aligned}$$



شکل ۱-۱۹ شکل بسته‌ی موج  $\psi(y,t) = 10y \sin t \sin 8t$  تابع  $\sin 8t$  (منحنی سیاه) به وسیله‌ی  $10y \sin t$  (منحنی نقطه‌چین) مدوله شده است.

$$= 10y \sin t \sin 8t \quad (۱-۲۱۵)$$

دوره‌ی تناوب  $10y \sin t$  و  $\sin(8t)$  به ترتیب عبارتند از  $2\pi$  و  $2\pi/8$ . چون دوره‌ی تناوب  $10y \sin t$  بزرگ‌تر از دوره‌ی تناوب  $\sin 8t$  است بنابراین  $10y \sin t$  باید تابع مدوله‌کننده و  $\sin 8t$  باید تابع مدوله شده باشد. همانطور که در شکل ۱-۱۹ نشان داده شده است، می‌بینیم که  $\sin 8t$  به وسیله‌ی  $10y \sin t$  مدوله شده است.

### مسأله‌ی ۱-۱۵

(الف) اندازه‌ی نهایی بسته‌ی موج یک ذره‌ی آزاد را پس از طی مسافت  $10^6 \text{ m}$  در چهار حالت زیر به دست آورید که در آنها ذره

(۱) یک الکترون  $25 \text{ eV}$  است که بسته‌ی موج آن پهنای اولیه‌ی  $10^{-6} \text{ m}$  را دارا است.

(۲) یک الکترون  $25 \text{ eV}$  است که بسته‌ی موج آن پهنای اولیه‌ی  $10^{-8} \text{ m}$  را دارا است.

(۳) یک الکترون  $10^6 \text{ MeV}$  است که بسته‌های موج آن پهنای اولیه‌ی  $1 \text{ mm}$  را دارا است.

(۴) یک جسم  $10^6 \text{ g}$  به اندازه‌ی  $1 \text{ cm}$  است که با سرعت  $50 \text{ ms}^{-1}$  حرکت می‌کند.

(ب) زمان لازم برای این که بسته‌ی موج الکترون حالت (۱) و جسم حالت (۴) به ترتیب به اندازه‌ی  $10 \text{ mm}$  و  $10 \text{ cm}$  پهن شوند را تخمین بزنید. در مورد نتیجه‌های به دست آمده بحث کنید.

حل

(الف) اگر پهنای اولیه‌ی بسته‌ی موج ذره برابر با  $\Delta x_0$  باشد آنگاه پهنای آن در لحظه‌ی  $t$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\Delta x(t) = \Delta x_0 \sqrt{1 + \left(\frac{\delta x}{\Delta x_0}\right)^2} \quad (۱-۲۱۶)$$

که در آن عامل پاشندگی از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\frac{\delta x}{\Delta x_0} = \frac{2\hbar t}{ma^2} = \frac{\hbar t}{2m(a/2)^2} = \frac{\hbar t}{2m(\Delta x_0)^2} \quad (۱-۲۱۷)$$

(۱) برای یک الکترون  $25\text{eV}$  (که به وضوح غیرنسبیتی است) زمان لازم برای طی مسافت  $L = 10^0\text{m}$  از رابطه  $t = L/v = L\sqrt{mc^2/2E}/c$  یا  $E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}mc^2(v^2/c^2)$  زیرا  $t = L/v = L\sqrt{mc^2/2E}/c$  به دست می آید زیرا  $v = c\sqrt{2E/(mc^2)}$  بنابراین می توانیم عامل پاشندگی را به صورت زیر بنویسیم:

$$\frac{\delta x}{\Delta x_0} = \frac{\hbar}{2m\Delta x_0^2} t = \frac{\hbar}{2m\Delta x_0^2} \frac{L}{c} \sqrt{\frac{mc^2}{2E}} = \frac{\hbar c L}{2mc^2 \Delta x_0^2} \sqrt{\frac{mc^2}{2E}} \quad (218-1)$$

با استفاده از کمیت های  $\hbar c \simeq 197 \times 10^{-15} \text{MeV m}$ ، جرم سکون الکترون  $mc^2 = 0.5 \text{MeV}$  و  $E = 25\text{eV} = 25 \times 10^{-6} \text{MeV}$ ،  $\Delta x_0 = 10^{-6} \text{m}$  و  $L = 10^0 \text{m}$  می توان این عبارت را ساده تر کرد. با وارد کردن این کمیت ها در (218-1) به دست می آوریم:

$$\frac{\delta x}{\Delta x_0} \simeq \frac{197 \times 10^{-15} \text{MeV m} \times 10^0 \text{m}}{2 \times 0.5 \text{MeV} \times 10^{-12} \text{m}^2} \sqrt{\frac{0.5 \text{MeV}}{2 \times 25 \times 10^{-6} \text{MeV}}} \simeq 2 \times 10^3 \quad (219-1)$$

همانطور که در بالا نشان داده شد، با استفاده از رابطه ی زیر می توان زمانی را که طول می کشد الکترون مسافت  $10^0 \text{m}$  را طی کند، به دست آورد:

$$t = \frac{L}{c} \sqrt{\frac{mc^2}{2E}} = \frac{10^0 \text{m}}{3 \times 10^8 \text{ms}^{-1}} \sqrt{\frac{0.5 \text{MeV}}{2 \times 25 \times 10^{-6} \text{MeV}}} = 3.3 \times 10^{-5} \text{s} \quad (220-1)$$

با استفاده از  $t = 3.3 \times 10^{-5} \text{s}$  و با جاگذاری (219-1) در (216-1) به دست می آوریم:

$$\Delta x(t = 3.3 \times 10^{-5} \text{s}) = 10^{-6} \text{m} \times \sqrt{1 + 4 \times 10^6} \simeq 2 \times 10^{-3} \text{m} = 2 \text{mm} \quad (221-1)$$

پهنای بسته ی موجی که الکترون را نشان می دهد از مقدار اولیه ی  $10^{-6} \text{m}$  به  $2 \times 10^{-3} \text{m}$  (یعنی به اندازه ی عامل  $10^3$ ) افزایش یافته است. بنابراین پهن شدگی بسته ی موج الکترون کاملاً بزرگ است. (2) در اینجا محاسبات مورد نیاز با محاسبات قسمت (1) مشابه است به استثنای این که اکنون مقدار  $\Delta x_0$  به جای  $10^{-6} \text{m}$  برابر با  $10^{-8} \text{m}$  است که به  $2 \times 10^7$   $\delta x/\Delta x_0 \simeq 2 \times 10^7$  می انجامد بنابراین پهنای برابر است با  $20 \text{cm}$   $\Delta x(t) = 20 \text{cm}$ . بنابراین پهنای به اندازه ی عاملی در حدود  $10^7$  افزایش یافته است. هدف از انجام این محاسبات نشان دادن این موضوع است که هرچه بسته ی موج اولیه کوچک تر باشد، میزان پهن شدگی نهایی بیشتر است. در واقع در قسمت (1) با شروع از پهنای اولیه ی  $10^{-6} \text{m}$  پهنای نهایی با عاملی در حدود  $10^3$  به  $2 \times 10^{-3} \text{m}$  افزایش یافته است اما در قسمت (2) با پهنای اولیه ی  $10^{-8} \text{m}$  پهنای نهایی با عاملی در حدود  $10^7$  به  $20 \text{cm}$  افزایش یافت.

(۳) حرکت یک الکترون  $10^6 \text{ MeV}$  نسبیتی است (ازین رو با تقریب خوبی) سرعت آن برابر با سرعت نور است ( $v \simeq c$ ) بنابراین زمانی که طول می‌کشد تا الکترون مسافت  $L = 10^6 \text{ m}$  را طی کند برابر است با  $t \simeq L/c = 3/3 \times 10^{-7} \text{ s}$ . می‌توان عامل پاشندگی برای این الکترون را از (۱-۲۱۷) یافت که در آن  $\Delta x_0 = 10^{-3} \text{ m}$  است:

$$\frac{\delta x}{\Delta x_0} = \frac{\hbar L}{2mc\Delta x_0^2} = \frac{\hbar cL}{2mc^2\Delta x_0^2} \\ \simeq \frac{197 \times 10^{-15} \text{ MeV m} \times 10^6 \text{ m}}{2 \times 0.5 \text{ MeV} \times 10^{-6} \text{ m}^2} \simeq 2 \times 10^{-5} \quad (222-1)$$

افزایش پهنای بسته‌ی موج نسبتاً کوچک است:

$$\Delta x(t = 3/3 \times 10^{-7} \text{ s}) = 10^{-3} \text{ m} \times \sqrt{1 + 4 \times 10^{-10}} \simeq 10^{-3} \text{ m} = \Delta x_0. \quad (223-1)$$

به این ترتیب پهنای بسته افزایش قابل ملاحظه‌ای نیافت. از این محاسبات می‌توانیم نتیجه بگیریم که هنگامی که حرکت یک ذره میکروسکوپی نسبیتی است پهنای بسته‌ی موج متناظر به اندازه‌ی نسبتاً کوچکی افزایش می‌یابد.

(۴) در مورد یک ذره ماکروسکوپی به جرم  $m = 0.1 \text{ kg}$  باید گفت که زمان لازم برای این که فاصله‌ی  $L = 10^6 \text{ m}$  را طی کند برابر با  $t = L/v = 10^6 \text{ m} / 50 \text{ ms}^{-1} = 2 \text{ s}$  است. با توجه به این که اندازه‌ی سیستم در حدود  $1 \text{ cm} = 0.01 \text{ m}$  است،  $\hbar = 1.05 \times 10^{-34} \text{ Js}$  و  $\Delta x_0 = 1 \text{ cm} = 0.01 \text{ m}$  می‌توان عامل پاشندگی برای این جسم را از (۱-۲۱۷) به‌دست آورد:

$$\frac{\delta x}{\Delta x_0} = \frac{\hbar t}{2m\Delta x_0^2} \simeq \frac{1.05 \times 10^{-34} \text{ Js} \times 2 \text{ s}}{2 \times 0.1 \text{ kg} \times 10^{-4} \text{ m}^2} \simeq 10^{-29} \quad (224-1)$$

چون  $\delta x / \Delta x_0 = 10^{-29} \ll 1$  است، افزایش پهنای بسته‌ی موج به کلی غیرقابل آشکارسازی است:

$$\Delta x(2 \text{ s}) = 10^{-2} \text{ m} \times \sqrt{1 + 4 \times 10^{-58}} \simeq 10^{-2} \text{ m} = \Delta x_0. \quad (225-1)$$

(ب) با استفاده از (۱-۲۱۶) و (۱-۲۱۷) عبارتی برای لحظه‌ی  $t$  که در آن پهنای بسته‌ی موج به  $\Delta x(t)$  می‌رسد را به‌دست می‌آوریم:

$$t = \tau \sqrt{\left(\frac{\Delta x(t)}{\Delta x_0}\right)^2 - 1} \quad (226-1)$$

که در آن  $\tau$  ثابت زمانی  $\tau = 2m(\Delta x_0)^2/\hbar$  را نشان می‌دهد ((۱۴۸-۱) را ببینید). ثابت زمانی مربوط به الکترون قسمت (۱) از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\tau = \frac{2mc^2(\Delta x_0)^2}{\hbar c^2} \simeq \frac{2 \times 0,5 \text{ MeV} \times 10^{-12} \text{ m}^2}{197 \times 10^{-15} \text{ MeV m} \times 3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}} = 1,7 \times 10^{-8} \text{ s} \quad (227-1)$$

و ثابت زمانی مربوط به جسم قسمت (۴) برابر است با

$$\tau = \frac{2m(\Delta x_0)^2}{\hbar} \simeq \frac{2 \times 0,1 \text{ kg} \times 10^{-4} \text{ m}^2}{1,05 \times 10^{-34} \text{ Js}} = 1,9 \times 10^{29} \text{ s} \quad (228-1)$$

توجه داشته باشید که ثابت زمانی برای یک ذره‌ی میکروسکوپی کوچک است ولی برای اجسام ماکروسکوپی بسیار بزرگ است.

از یک سو جاگذاری ثابت زمانی ((۲۲۷-۱) در ((۲۲۶-۱) زمان لازم برای پهن‌شدگی بسته‌ی الکترون به  $10^6 \text{ mm}$  را نتیجه می‌دهد:

$$t = 1,7 \times 10^{-8} \text{ s} \sqrt{\left(\frac{10^{-2}}{10^{-6}}\right)^2 - 1} \simeq 1,7 \times 10^{-4} \text{ s} \quad (229-1)$$

از سوی دیگر جاگذاری ((۲۲۸-۱) در ((۲۲۶-۱) زمان لازم برای پهن‌شدگی بسته‌ی موج جسم به  $10^6 \text{ cm}$  را به دست می‌دهد:

$$t = 1,9 \times 10^{29} \text{ s} \sqrt{\left(\frac{10^{-1}}{10^{-2}}\right)^2 - 1} \simeq 1,9 \times 10^3 \text{ s} \quad (230-1)$$

نتیجه‌ی ((۲۲۹-۱) نشان می‌دهد که اندازه‌ی بسته‌ی موج الکترون در حدود  $1,7 \times 10^{-4} \text{ s}$  از  $10^{-6} \text{ m}$  به  $10^{-2} \text{ m}$  بزرگ می‌شود (پهن‌شدگی قابل ملاحظه در مدت زمان بسیار کوتاه). رابطه‌ی ((۲۳۰-۱) نشان می‌دهد که جسم باید در مدتی در حدود  $1,9 \times 10^3 \text{ s}$  به طور ثابت حرکت کند تا بسته‌ی موج آن از  $1 \text{ cm}$  به  $10^6 \text{ cm}$  افزایش یابد (پهن‌شدگی ناچیز در مدت زمان نامعقول). این زمان نامعقول است زیرا بسیار بزرگ‌تر از عمر جهان (که در حدود  $4,7 \times 10^{17} \text{ s}$  است) می‌باشد. می‌بینیم که پهن‌شدگی اجسام ماکروسکوپی تنها زمانی قابل ملاحظه می‌شود که حرکت آنها مدت زمان بسیار طولانی طول بکشد. به هر حال، پهن‌شدگی اجسام میکروسکوپی سریع و بزرگ است. می‌توانیم این ایده‌ها را در سه نکته‌ی زیر خلاصه کنیم:

- پهنای بسته‌ی موج یک ذره‌ی میکروسکوپی غیرنسبیتی به سرعت و به‌طور قابل ملاحظه‌ای افزایش می‌یابد. هرچه بسته‌ی موج در ابتدا باریک‌تر باشد، بیشتر و سریع‌تر پهن می‌شود.

• هنگامی که ذره میکروسکوپی و نسبیستی است، پهنای متناظر با بسته‌ی موج آن به طور قابل ملاحظه‌ای افزایش نمی‌یابد.

• پهنای بسته‌ی موج متناظر با یک ذره‌ی ماکروسکوپی غیرنسبیستی عملاً ثابت می‌ماند. پهن‌شدگی تنها پس از زمان‌های طولانی نامعقول (زمان‌هایی بزرگ‌تر از عمر خود جهان!) قابل ملاحظه می‌شود.

### مسأله‌ی ۱-۱۶

یک نوترون در فضایی به اندازه‌ی  $10^{-14} \text{m}$  محدود شده است. زمانی که طول می‌کشد تا بسته‌ی موج آن (الف) چهار برابر اندازه‌ی اولیه‌ی آن

(ب) به اندازه‌ی قطر زمین و

(پ) برابر با فاصله‌ی بین زمین و ماه شود را محاسبه کنید.

حل

چون انرژی سکون یک نوترون برابر با  $m_n c^2 = 939.6 \text{MeV}$  است، می‌توانیم ثابت زمانی نوترون را از (۱-۲۲۷) نتیجه بگیریم:

$$\tau = \frac{2m_n c^2 (\Delta x_0)^2}{\hbar c^2} \simeq \frac{2 \times 939.6 \text{MeV} \times (10^{-14} \text{m})^2}{1.97 \times 10^{-15} \text{MeV m} \times 3 \times 10^8 \text{ms}^{-1}} = 3.2 \times 10^{-21} \text{s} \quad (1-231)$$

با وارد کردن این مقدار در (۱-۲۲۶) زمانی که طول می‌کشد تا بسته‌ی موج نوترون از مقدار اولیه‌ی  $\Delta x_0$  آن به اندازه‌ی نهایی  $\Delta x(t)$  بزرگ‌تر شود را به دست می‌آوریم:

$$t = \tau \sqrt{\left(\frac{\Delta x(t)}{\Delta x_0}\right)^2 - 1} = 3.2 \times 10^{-21} \text{s} \sqrt{\left(\frac{\Delta x(t)}{\Delta x_0}\right)^2 - 1} \quad (1-232)$$

محاسبه‌ی  $t$  به جاگذاری‌های ساده‌ای کاهش می‌یابد. (الف) با جاگذاری  $\Delta x(t) = 4\Delta x_0$  در (۱-۲۳۲) زمان لازم برای این که بسته‌ی موج نوترون به چهار برابر اندازه‌ی اولیه‌اش گسترش یابد را به دست می‌آوریم:

$$t = 3.2 \times 10^{-21} \text{s} \sqrt{16 - 1} = 1.2 \times 10^{-20} \text{s} \quad (1-233)$$

(ب) بسته‌ی موج نوترون در بازه‌ی زمانی زیر از اندازه‌ی اولیه‌ی  $10^{-14} \text{m}$  به  $12.7 \times 10^6 \text{m}$  (قطر زمین) گسترش می‌یابد:

$$t = 3.2 \times 10^{-21} \text{s} \sqrt{\left(\frac{12.7 \times 10^6 \text{m}}{10^{-14} \text{m}}\right)^2 - 1} = 4.1 \text{s} \quad (1-234)$$

(پ) زمان لازم برای این که بسته‌ی موج نوترون از  $10^{-14} \text{m}$  تا  $3,84 \times 10^8 \text{m}$  (فاصله‌ی بین زمین و ماه) پهن شود، برابر است با

$$t = 3,2 \times 10^{-21} \text{s} \sqrt{\left(\frac{3,84 \times 10^8 \text{m}}{10^{-14} \text{m}}\right)^2 - 1} = 12,3 \text{s} \quad (235-1)$$

محاسبات انجام شده در این مسأله نشان می‌دهند که پهن‌شدگی بسته‌ی موج ذره‌های میکروسکوپی قابل ملاحظه است و به سرعت روی می‌دهد: تنها  $12,3 \text{s}$  طول می‌کشد تا اندازه‌ی بسته‌ی یک نوترون بتواند از زمین تا ماه گسترش یابد! در واقع از نظر کلاسیکی تصور چنین پهن‌شدگی بسیار بزرگی در چنین زمان کوتاهی دشوار است. نباید بزرگ شدن بسته را با بزرگ شدن اندازه‌ی سیستم اشتباه گرفت. همانطور که قبلاً یادآوری شد، پهن‌شدگی بسته‌ی موج به این معنی نیست که ذره‌ی مادی بزرگ می‌شود بلکه تنها توزیع دوباره‌ی چگالی احتمال را بیان می‌کند. با وجود پهن‌شدگی قابل ملاحظه‌ی بسته‌ی موج، هنجار بسته‌ی موج همیشه پایسته است (همانطور که در (۱-۱۴۹) نشان داده شد، هنجار برابر با ۱ است).

### مسأله‌ی ۱۷-۱

از اصل عدم قطعیت برای تخمین: (الف) شعاع حالت پایه‌ی اتم هیدروژن (ب) انرژی حالت پایه‌ی اتم هیدروژن استفاده کنید.

حل

(الف) مطابق با اصل عدم قطعیت، تکانه و شعاع مدار الکترون به وسیله‌ی رابطه‌ی  $rp \sim \hbar$  به هم مربوط هستند و از این رو  $p \sim \hbar/r$  است. برای پیدا کردن شعاع حالت پایه تنها باید انرژی الکترون-پروتون را کمینه کنیم:

$$E(r) = \frac{p^2}{2m_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = \frac{\hbar^2}{2m_e r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (236-1)$$

با مشتق‌گیری نسبت به  $r$  داریم:

$$0 = \frac{dE}{dr} = -\frac{\hbar^2}{m_e r^3} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (237-1)$$

که به شعاع بوهر می‌انجامد:

$$r_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} = 0,053 \text{nm} \quad (238-1)$$

(ب) با وارد کردن (۲۳۸-۱) در (۲۳۶-۱) انرژی بوهر را به دست می‌آوریم:



$$E(r_0) = \frac{\hbar^2}{2mr_0^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} = -\frac{m_e}{2\hbar^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 = -13.6 \text{ eV} \quad (239-1)$$

همانطور که در (۲۳۸-۱) و (۲۳۹-۱) نشان داده شد، نتیجه‌های به دست آمده برای  $r_0$  و  $E(r_0)$  با وجود تقریبی بودن، به صورت مؤثری دقیق هستند.

### مسئله ۱۸-۱

حالت مقید دو کوآرک با جرم‌های یکسان  $m$  را در نظر بگیرید که از طریق انرژی پتانسیل  $V(r) = kr$  که  $k$  یک ثابت است، برهمکنش دارند.

(الف) با استفاده از مدل بوهر سرعت، شعاع و انرژی این سیستم را در حالت مدارهای دایره‌ای بیابید. همچنین بسامد زاویه‌ای تابش ایجاد شده توسط گذار سیستم از حالت انرژی  $n$  به حالت انرژی  $m$  را تعیین کنید.

(ب) مقادیر عددی سرعت، شعاع و انرژی را برای حالت پایه ( $n = 1$ ) و با در نظر گرفتن جرم کوآرک  $mc^2 = 2 \text{ GeV}$  و  $k = 0.5 \text{ GeV fm}^{-1}$  به دست آورید.

### حل

(الف) دو کوآرک که به صورت دایره‌ای (بسیار شبیه به یک الکترون و پروتون در اتم هیدروژن) حرکت می‌کنند را در نظر بگیرید. آنگاه می‌توانیم نیروی بین آنها را به صورت زیر بنویسیم:

$$\mu \frac{v^2}{r} = \frac{dV(r)}{dr} = k \quad (240-1)$$

که در آن  $\mu = m/2$  جرم کاهش یافته و  $V(r)$  پتانسیل است. از شرط کوانتشن تکانه‌ی زاویه‌ای مداری بوهر داریم:

$$L = \mu vr = n\hbar \quad (241-1)$$

با ضرب (۲۴۰-۱) در (۲۴۱-۱) رابطه‌ی  $\mu^2 v^3 = n\hbar k$  را به دست می‌آوریم که سرعت (کوانتیده‌ی) حرکت نسبی مربوط به سیستم دو کوآرک را نتیجه می‌دهد:

$$v_n = \left( \frac{\hbar k}{\mu^2} \right)^{1/3} n^{1/3} \quad (242-1)$$

می‌توان شعاع را از (۲۴۱-۱) به دست آورد:  $r_n = n\hbar / (\mu v_n)$  که با استفاده از (۲۴۲-۱) به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$r_n = \left( \frac{\hbar^2}{\mu k} \right)^{1/3} n^{2/3} \quad (243-1)$$

می‌توانیم انرژی کل حرکت نسبی را با اضافه کردن انرژی‌های جنبشی و پتانسیل به دست آوریم:

$$E_n = \frac{1}{2} \mu v_n^2 + k r_n = \frac{3}{2} \left( \frac{\hbar^2 k^2}{\mu} \right)^{1/3} n^{2/3} \quad (244-1)$$

در به دست آوردن این رابطه از رابطه‌های مربوط به  $v_n$  و  $r_n$  که به ترتیب در (۲۴۲-۱) و (۲۴۳-۱) به دست آمدند، استفاده کرده‌ایم.

بسامه زاویه‌ای تابش تولید شده توسط گذار از  $n$  به  $m$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} = \frac{3}{2} \left( \frac{k^2}{\mu \hbar} \right)^{1/3} \left( n^{2/3} - m^{2/3} \right) \quad (245-1)$$

با وارد کردن  $n = 1$ ،  $\hbar c \simeq 0.197 \text{ GeV fm}$ ،  $mc^2/2 = 1 \text{ GeV}$ ،  $\mu c^2 = mc^2/2 = 1 \text{ GeV}$ ،  $k = 0.5 \text{ GeV fm}^{-1}$  و  $\mu c^2 = mc^2/2 = 1 \text{ GeV}$ ،  $n = 1$  با وارد کردن ۱ تا (۲۴۲-۱) تا (۲۴۴-۱) داریم:

$$v_1 = \left( \frac{\hbar c k}{(\mu c^2)^2} \right)^{1/3} c \simeq \left( \frac{(0.197 \text{ GeV fm} \times 0.5 \text{ GeV fm}^{-1})}{(1 \text{ GeV})^2} \right)^{1/3} c = 0.46c \quad (246-1)$$

که در آن  $c$  سرعت نور است و

$$r_1 = \left( \frac{(\hbar c)^2}{\mu c^2 k} \right)^{1/3} \simeq \left( \frac{(0.197 \text{ GeV fm})^2}{1 \text{ GeV} \times 0.5 \text{ GeV fm}^{-1}} \right)^{1/3} = 0.427 \text{ fm} \quad (247-1)$$

$$E_1 = \frac{3}{2} \left( \frac{(\hbar c)^2 k^2}{\mu c^2} \right)^{1/3} \simeq \frac{3}{2} \left( \frac{(0.197 \text{ GeV fm})^2 (0.5 \text{ GeV fm}^{-1})^2}{1 \text{ GeV}} \right)^{1/3} = 0.32 \text{ GeV} \quad (248-1)$$

## ۱۱-۱ تمرین‌های حل نشده

۱. فلزی را که روی آن جوشکاری انجام می‌شود در نظر بگیرید. (الف) هنگامی که فلز تابش شدیدی در  $490 \text{ nm}$  دارد، چقدر گرم است؟

(ب) با فرض آن که این فلز مانند یک جسم سیاه تابش می‌کند، شدت تابش آن را محاسبه کنید.

۲. یک ستاره، یک لامپ جبابی و یک قالب یخ را در نظر بگیرید. دمای آنها به ترتیب برابر با  $8500 \text{ K}$ ،  $273.15 \text{ K}$  و  $850 \text{ K}$  است.

(الف) طول موجی را که در آن انرژی تابشی آنها دارای قله است تخمین بزنید. (ب) شدت تابش آنها را تخمین بزنید.

۳. یک لامپ جابجی  $75W$  و یک اجاق میکروویو  $850W$  را در نظر بگیرید. اگر طول موج‌های تابشی که گسیل می‌کنند به ترتیب برابر با  $500nm$  و  $150mm$  باشد آنگاه تعداد فوتون‌هایی که در هر ثانیه گسیل می‌کنند را تخمین بزنید. آیا در اینجا اثرهای کوانتومی مهم‌اند؟

۴. با فرض آن که یک ستاره‌ی معین مانند یک جسم سیاه تابش می‌کند و شدت کل آن برابر با  $575MWm^{-2}$  است:  
(الف) دمای سطح این ستاره را تخمین بزنید.

(ب) طول موج شدیدترین تابش آن را تخمین بزنید.

۵. شدتی که از خورشید به سطح زمین می‌رسد در حدود  $1/36kWm^{-2}$  است. با فرض آن که خورشید کره‌ای (به شعاع  $10^8m \times 6/96$ ) باشد که مانند جسم سیاه تابش می‌کند،  
(الف) دمای سطح خورشید و طول موج شدیدترین تابش را تخمین بزنید.

(ب) توان کل تابش شده توسط خورشید را تخمین بزنید (فاصله‌ی زمین تا خورشید برابر با  $10^{11}m \times 1/5$  است).

۶. (الف) (۱) فاصله‌ی انرژی  $\Delta E$  بین حالت پایه و نخستین حالت برانگیخته‌ی اتم هیدروژن (۲) نسبت  $\Delta E/E_1$  بین این فاصله‌ی انرژی و انرژی حالت پایه را محاسبه کنید.

(ب) حال یک سیستم ماکروسکوپی را در نظر بگیرید: یک آونگ ساده که از یک جرم  $5g$  متصل به یک نخ بدون جرم و غیرقابل کشش به طول  $2m$  تشکیل شده است. (۱) هنگامی که نخ نسبت به قائم زاویه‌ی  $60^\circ$  می‌سازد، انرژی کل  $E_1$  آونگ، (۲) بسامد نوسان‌های کوچک آونگ و انرژی  $\Delta E$  یک کوانتوم و (۳) نسبت  $\Delta E/E_1$  را محاسبه کنید.

(پ) اندازه‌ی نسبت  $\Delta E/E_1$  محاسبه شده در قسمت‌های (الف) و (ب) را تعیین کنید و در مورد اهمیت اثرهای کوانتومی برای اتم هیدروژن و آونگ توضیح دهید.

۷. باریکه‌ای از پرتوهای  $x$  از یک منبع گوگرد ( $\lambda = 53.7nm$ ) و باریکه‌ای از پرتوهای  $\gamma$  از یک نمونه‌ی  $^{137}Cs$  ( $\lambda = 0.19nm$ ) بر روی یک هدف گرافیتی برخورد می‌کنند. دو آشکارساز در زاویه‌های  $30^\circ$  و  $120^\circ$  نسبت به جهت باریکه‌های فرودی قرار داده می‌شوند.

(الف) جابه‌جایی طول موج پرتوهای  $x$  و  $\gamma$  ثبت شده در هر دو آشکارساز را تخمین بزنید.

(ب) انرژی جنبشی الکترون پس‌زده را در هر چهار حالت به دست آورید. (پ) در هر یک از چهار حالت، چند درصد از انرژی فوتون فرودی در برخورد تلف می‌شود؟

۸. پیشنهاد شده است که می‌توان فوتون‌های پراثری را در تابش‌های کیهانی (در نتیجه‌ی اثر کامپتون معکوس یعنی اثری که در آن یک فوتون نور مرئی به وسیله‌ی پراکندگی از یک پروتون پراثری، انرژی دریافت می‌کند) یافت. اگر تکانه‌ی پروتون برابر با  $10^{10} \text{ eV}/c$  باشد آنگاه انرژی نهایی بیشینه‌ی یک فوتون در ابتدا زرد که توسط یک اتم سدیم گسیل می‌شود ( $\lambda_0 = 271 \text{ nm}$ ) را بیاید.

۹. تعداد فوتون‌های گسیل شده از یک لامپ حبابی  $75 \text{ mW}$  را در هر ثانیه تخمین بزنید. از مقدار  $575 \text{ nm}$  به عنوان طول موج گسیل شده‌ی میانگین نور (مرئی) استفاده کنید. آیا در اینجا طبیعت کوانتومی تابش مهم است؟

۱۰. یک فوتون  $0.7 \text{ MeV}$  از یک الکترون در ابتدا ساکن پراکنده می‌شود. اگر فوتون در زاویه‌ی  $35^\circ$  پراکنده شود آنگاه

(الف) انرژی و طول موج فوتون پراکنده شده

(ب) انرژی جنبشی الکترون پس‌زده و

(پ) زاویه‌ای که در آن، الکترون پس‌زده می‌شود را محاسبه کنید.

۱۱. نوری با طول موج  $350 \text{ nm}$  روی سطح یک فلز با تابع کار  $1.9 \text{ eV}$  فرود می‌آید.

(الف) انرژی جنبشی الکترون‌های جدا شده را محاسبه کنید. (ب) بسامد قطع فلز را محاسبه کنید.

۱۲. طول موج تابشی که می‌تواند الکترون‌ها را از سطح یک ورقه‌ی روی با انرژی جنبشی  $75 \text{ eV}$  بیرون براند را بیاید. تابع کار روی برابر با  $3.74 \text{ eV}$  است. همچنین طول موج قطع فلز را بیاید.

۱۳. اگر پتانسیل ترمزی یک فلز هنگامی که در معرض تابشی با طول موج  $480 \text{ nm}$  قرار گیرد برابر با  $1.27 \text{ V}$  باشد آنگاه

(الف) تابع کار فلز

(ب) طول موج قطع فلز و

(پ) انرژی بیشینه‌ی الکترون‌های بیرون رانده شده را بیاید.

۱۴. جابه‌جایی طول موج کامپتون بیشینه‌ی متناظر با برخورد بین یک فوتون و یک پروتون ساکن را بیاید.

۱۵. اگر پتانسیل ترمزی یک فلز هنگامی که در معرض تابشی با طول موج  $150 \text{ nm}$  قرار می‌گیرد برابر با  $7.5 \text{ V}$  باشد آنگاه پتانسیل ترمزی فلز را زمانی که در معرض تابشی با طول موج  $275 \text{ nm}$  قرار می‌گیرد، محاسبه کنید.

۱۶. منبع نوری با بسامد  $9.5 \times 10^{14} \text{ Hz}$  بر سطح یک فلز با تابع کار  $2.8 \text{ eV}$  می‌تابد و الکترون‌هایی را از آن خارج می‌کند.

(الف) پتانسیل ترمزی

(ب) بسامد قطع و

(پ) انرژی جنبشی الکترون‌های جدا شده را محاسبه کنید.

۱۷. فلزی با بسامد قطع  $10^{14} \text{ Hz} \times 1/2$  را در نظر بگیرید. (الف) تابع کار فلز را بیابید.

(ب) انرژی جنبشی الکترون‌های بیرون رانده شده را هنگامی که فلز در معرض تابشی با بسامد  $10^{14} \text{ Hz} \times 7$  قرار می‌گیرد، بیابید.

۱۸. نوری با بسامد  $10^{14} \text{ Hz} \times 7/2$  بر روی سطح چهار فلز متفاوت سزیم، آلومینیم، کبالت و پلاتین که تابع کار آنها به ترتیب برابر با  $2,14 \text{ eV}$ ،  $4,08 \text{ eV}$ ،  $3,9 \text{ eV}$  و  $6,35 \text{ eV}$  است، فرود می‌آید.

(الف) کدامیک از این فلزات اثر فتوالکتریک را نشان خواهد داد؟

(ب) انرژی جنبشی بیشینه‌ی الکترون‌های خارج شده را برای هریک از فلزاتی که فتوالکترون‌ها را تولید می‌کنند، محاسبه کنید.

۱۹. فلزی با پتانسیل‌های ترمزی  $9 \text{ V}$  و  $4 \text{ V}$  را، زمانی که در معرض تابش دو منبع به ترتیب با بسامدهای  $10^{14} \text{ Hz} \times 17$  و  $10^{14} \text{ Hz} \times 8$  قرار می‌گیرد، در نظر بگیرید.

(الف) از این داده‌ها برای پیدا کردن مقدار عددی ثابت پلانک استفاده کنید. (ب) تابع کار و بسامد قطع فلز را بیابید.

(پ) انرژی جنبشی بیشینه‌ی الکترون‌های خارج شده را زمانی که فلز در معرض تابشی با بسامد  $10^{14} \text{ Hz} \times 12$  قرار می‌گیرد، بیابید.

۲۰. با استفاده از الزامات پابستگی انرژی و تکانه نشان دهید که یک الکترون آزاد نمی‌تواند تمام انرژی یک فوتون را جذب کند.

۲۱. فوتون‌هایی با طول موج  $5 \text{ nm}$  از الکترون‌هایی ساکن پراکنده می‌شوند. اگر فوتون‌ها در زاویه‌ی  $60^\circ$  نسبت به فوتون‌های فرودی پراکنده شوند آنگاه

(الف) جابه‌جایی طول موج کامپتون

(ب) انرژی جنبشی داده شده به الکترون‌های پس‌زده

(پ) زاویه‌ای که در آن الکترون‌ها پس‌زده می‌شوند

را محاسبه کنید.

۲۲. پرتوهای  $x$  با طول موج  $0,0008 \text{ nm}$  با الکترون‌هایی که در ابتدا ساکن‌اند، برخورد می‌کنند. اگر طول موج فوتون‌های پراکنده شده برابر با  $0,0017 \text{ nm}$  باشد آنگاه

(الف) انرژی جنبشی الکترون‌های پس‌زده

(ب) زاویه‌ای که در آن فوتون‌ها پراکنده می‌شوند و  
(پ) زاویه‌ای که در آن الکترون‌ها پس‌زده می‌شوند را تعیین کنید.

۲۳. فوتون‌هایی با انرژی  $0.7 \text{ MeV}$  از الکترون‌هایی که در ابتدا ساکن‌اند، پراکنده می‌شوند. اگر انرژی فوتون‌های پراکنده شده برابر با  $0.5 \text{ MeV}$  باشد آنگاه  
(الف) جابه‌جایی طول موج

(ب) زاویه‌ای که در آن فوتون‌ها پراکنده می‌شوند

(پ) زاویه‌ای که در آن الکترون‌ها پس‌زده می‌شوند و

(ت) انرژی جنبشی الکترون‌های پس‌زده را بیابید.

۲۴. در پراکندگی کامپتون فوتون‌ها از الکترون‌های ساکن، اگر فوتون‌ها در زاویه  $45^\circ$  پراکنده شوند و طول موج فوتون‌های پراکنده شده برابر با  $1.3 \times 10^{-13} \text{ m}$  باشد آنگاه  
(الف) طول موج و انرژی فوتون‌های فرودی و

(ب) انرژی الکترون‌های پس‌زده و زاویه‌ای که در آن پس‌زده می‌شوند را بیابید.

۲۵. هنگام پراکندگی فوتون‌ها از الکترون‌های ساکن، اگر فوتون‌های پراکنده شده در زاویه  $90^\circ$  آشکارسازی شوند و طول موج آنها دو برابر طول موج فوتون‌های فرودی باشد آنگاه  
(الف) طول موج فوتون‌های فرودی

(ب) انرژی الکترون‌های پس‌زده و زاویه‌ای که در آن الکترون‌ها پس‌زده می‌شوند و

(پ) انرژی فوتون‌های فرودی و پراکنده شده را بیابید.

۲۶. در پراکندگی الکترون‌ها از یک بلور، نخستین بیشینه در زاویه  $60^\circ$  مشاهده می‌شود. انرژی الکترون‌هایی که ما را قادر می‌سازند تا عمق  $19 \text{ nm}$  درون بلور را کاوش کنیم، چقدر باید باشد؟

۲۷. قدرت جداسازی یک میکروسکوپ که از الکترون‌هایی با انرژی  $175 \text{ eV}$  استفاده می‌کند را تخمین بزنید.

۲۸. بلندترین و کوتاه‌ترین طول موج‌های سری بالمر و پاشن برای هیدروژن چقدرند؟

۲۹. (الف) انرژی حالت پایه یون لیتیوم دوبار یونیده‌ی  $(\text{Li}^{2+})$  حاصل را هنگامی که دو الکترون از اتم لیتیوم خارج می‌شوند، محاسبه کنید.

(ب) اگر یون لیتیوم  $\text{Li}^{2+}$  با یک فوتون بمباران شود و در نتیجه آن را جذب کند آنگاه انرژی و طول موج فوتون مورد نیاز برای برانگیختن یون  $\text{Li}^{2+}$  به سومین حالت برانگیخته را محاسبه کنید.

۳۰. یک یون سدیم ده‌بار یونیده  $(\text{Na}^{10+})$  که با خارج کردن ده الکترون از یک اتم  $\text{Na}$  به دست می‌آید

را در نظر بگیرید.

(الف) سرعت مداری و تکانه‌ی زاویه‌ای مداری الکترون (نسبت به مبدأ یون) را هنگامی که یون در چهارمین حالت برانگیخته‌ی خود است، محاسبه کنید.

(ب) بسامد تابش گسیل شده را هنگامی که یون از چهارمین حالت برانگیخته‌ی خود به نخستین حالت برانگیخته برمی‌گردد محاسبه کنید.

۳۱. طول موج تابش مورد نیاز برای برانگیختن یون سه‌بار یونیده‌ی اتم بریلیوم ( $\text{Be}^{3+}$ ) از حالت پایه به سومین حالت برانگیخته را محاسبه کنید.

۳۲. مطابق با مدل کلاسیکی اتم هیدروژن، یک الکترون در حال حرکت در یک مدار دایره‌ای به شعاع  $0.53 \text{ nm}$  حول یک پروتون ثابت در مرکز ناپایدار است و الکترون باید در نهایت روی پروتون فرو ریزد. تخمین بزنید که چه مدت طول می‌کشد تا الکترون روی پروتون فرو بریزد. راهنمایی: از عبارت کلاسیکی برای تابش از یک بار شتاب‌دار شروع کنید:

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{2}{3} \frac{e^2 a^2}{4\pi\epsilon_0 c^3}, \quad E = \frac{p^2}{2m} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

که در آن  $a$  شتاب الکترون و  $E$  انرژی کل آن است.

۳۳. طول موج دوپروی

(الف) یک الکترون با انرژی جنبشی  $54 \text{ eV}$

(ب) یک پروتون با انرژی جنبشی  $7 \text{ MeV}$  و

(پ) یک گلوله‌ی  $100 \text{ g}$  در حال حرکت با سرعت  $1200 \text{ ms}^{-1}$  را محاسبه کنید.

داده‌های مفید:  $m_e c^2 = 0.511 \text{ MeV}$ ،  $m_p c^2 = 938.27 \text{ MeV}$  و  $hc \simeq 197.3 \text{ eV nm}$

۳۴. یک نوسانگر هماهنگ ساده‌ی یک‌بعدی، ذره‌ای است که به آن یک نیروی بازگرداننده‌ی خطی به اندازه‌ی  $F(x) = -mw^2x$  وارد می‌شود. از نظر کلاسیکی، انرژی کمینه‌ی نوسانگر صفر است زیرا می‌توانیم مکان تعادل آن را (در حالی که سرعت اولیه‌ی آن صفر است) دقیقاً در  $x = 0$  قرار دهیم. از نظر مکانیک کوانتومی، اصل عدم قطعیت به ما اجازه نمی‌دهد تا ذره را دقیقاً و به صورت همزمان در حال سکون جایگزیده کنیم. با استفاده از اصل عدم قطعیت انرژی کمینه‌ی نوسانگر کوانتومی را تخمین بزنید.

۳۵. یک آزمایش دو شکاف را در نظر بگیرید که در آن موج‌های گسیل شده از شکاف‌ها روی یک پرده‌ی قائم موازی با محور  $y$  برهم‌نهاد می‌شوند. هنگامی که تنها یک شکاف باز است، دامنه‌ی موجی که از شکاف عبور می‌کند برابر است با  $\psi_1(y, t) = e^{-y^2/2\lambda} e^{i(\omega t - ay)}$  و هنگامی که تنها شکاف دیگر باز است، دامنه برابر است با  $\psi_2(y, t) = e^{-y^2/2\lambda} e^{i(\omega t - ay - \pi y)}$ .

(الف) طرح تداخلی در امتداد محور  $y$  در حالی که هر دو شکاف باز هستند، چگونه است؟ شدت موج را به صورت تابعی از  $y$  رسم کنید.

(ب) اگر از یک منبع نور در پشت پرده برای مشخص کردن این که نور از کدام شکاف عبور کرده است، استفاده می‌کردیم آنگاه شدت چگونه بود؟ شدت موج را به صورت تابعی از  $y$  رسم کنید.

۳۶. سه تابع موج زیر را در نظر بگیرید:

$$\psi_1(y) = A_1 e^{-y^2}, \quad \psi_2(y) = A_2 e^{-y^2/2}, \quad \psi_3(y) = A_3 (e^{-y^2} + y e^{-y^2/2})$$

که در آنها  $A_1$ ،  $A_2$  و  $A_3$  ثابت‌های بهنجارش هستند. (الف) ثابت‌های  $A_1$ ،  $A_2$  و  $A_3$  را بیابید به طوری که  $\psi_1$ ،  $\psi_2$  و  $\psi_3$  بهنجار باشند.

(ب) احتمال این که هر یک از این حالت‌ها در بازه  $-1 < y < 1$  باشند را بیابید.

۳۷. تبدیل فوریه  $\phi(p)$  تابع زیر را پیدا نموده و آن را رسم کنید:

$$\psi(x) = \begin{cases} 1 - |x| & |x| < 1 \\ 0 & |x| \geq 1 \end{cases}$$

۳۸. (الف) تبدیل فوریه  $\phi(k) = A e^{-a|k| - ibk}$  را بیابید که در آن  $a$  و  $b$  عددهای حقیقی‌اند ولی  $a$  مثبت است.

(ب)  $A$  را بیابید به طوری که  $\psi(x)$  بهنجار باشد.

(پ) عدم قطعیت‌های  $x$  و  $k$  را بیابید و حاصل ضرب عدم قطعیت  $\Delta x \Delta p$  را محاسبه کنید. آیا این حاصل ضرب در اصل عدم قطعیت هایزنبرگ صدق می‌کند؟

۳۹. (الف) تبدیل فوریه  $\psi(x)$  تابع زیر را بیابید:

$$\phi(p) = \begin{cases} 0 & p < -p_0 \\ A & -p_0 < p < p_0 \\ 0 & p > p_0 \end{cases}$$

که در آن  $A$  یک ثابت حقیقی است.

(ب)  $A$  را بیابید به طوری که  $\psi(x)$  بهنجار باشد و سپس  $\phi(p)$  و  $\psi(x)$  را رسم کنید. راهنمایی: ممکن

است به انتگرال  $\int_{-\infty}^{+\infty} dx (\sin^2(ax))/x^2 = \pi a$  نیاز داشته باشید. (پ) عدم قطعیت‌های  $\Delta p$  و  $\Delta x$

را تخمین بزنید و سپس نشان دهید که  $\Delta x \Delta p$  در رابطه‌ی عدم قطعیت هایزنبرگ صدق می‌کند.



۴۰. عمر میانگین حالت برانگیخته‌ی یک اتم که پهنای طبیعی آن  $10^{-4} \text{ eV}$  است را تخمین بزنید. ممکن است به مقدار  $10^{-15} \text{ eVs} = 4,14 \times 10^{-34} \text{ Js} = \hbar = 6,626 \times 10^{-34} \text{ Js}$  نیاز پیدا کنید.

۴۱. پهنای نهایی بسته‌ی موج متناظر با یک گلوله‌ی  $8^\circ \text{ g}$  را پس از طی مسافتی در مدت  $2^\circ \text{ s}$  محاسبه کنید. اندازه‌ی گلوله برابر است با  $2 \text{ cm}$ .

۴۲. یک پیکان  $10^\circ \text{ g}$  با سرعت  $3^\circ \text{ ms}^{-1}$  مسافتی برابر با  $5^\circ \text{ m}$  را طی می‌کند. اگر اندازه‌ی اولیه‌ی بسته‌ی موج برابر با  $5 \text{ cm}$  باشد آنگاه اندازه‌ی نهایی آن چقدر خواهد بود؟

۴۳. یک باریکه‌ی  $5^\circ \text{ MeV}$  از پروتون‌ها به سوی هدفی در فاصله‌ی  $1^\circ \text{ km}$  شلیک می‌شود. اگر اندازه‌ی اولیه‌ی بسته‌ی موج  $10^{-6} \text{ m}$  باشد آنگاه اندازه‌ی نهایی این باریکه هنگام رسیدن به هدف چقدر خواهد بود؟

۴۴. یک باریکه‌ی  $25^\circ \text{ GeV}$  از پروتون‌ها به سوی هدفی در فاصله‌ی  $1 \text{ km}$  شلیک می‌شود. اگر اندازه‌ی اولیه‌ی بسته‌ی موج  $1 \text{ mm}$  باشد آنگاه اندازه‌ی نهایی آن را بیابید.

۴۵. یک ریسمان غیرقابل کشش با چگالی خطی  $\mu$  (جرم واحد طول) را در نظر بگیرید. اگر ریسمان تحت تأثیر نیروی کشش  $T$  قرار بگیرد آنگاه بسامد زاویه‌ای موج‌های ریسمان برحسب عدد موج  $k$  از رابطه‌ی  $\omega = k\sqrt{T/\mu}$  به دست می‌آید. سرعت‌های فاز و گروه را بیابید.

۴۶. بسامد زاویه‌ای یک موج در حال انتشار درون یک موجبر برحسب عدد موج  $k$  و پهنای  $b$  موجبر از رابطه‌ی  $\omega = kc[1 - \pi^2/(b^2k^2)]^{-1/2}$  به دست می‌آید. سرعت‌های فاز و گروه این موج را بیابید.

۴۷. نشان دهید که برای آن دسته از موج‌هایی که بسامد زاویه‌ای  $\omega$  و عدد موج  $k$ ی آنها از رابطه‌ی پاشندگی مقدار ثابت  $\omega^2 = k^2c^2 + v_g^2$  پیروی می‌کنند، حاصل ضرب سرعت‌های فاز و گروه برابر است با  $c^2$ . ( $v_g v_{ph} = c^2$ ) که در آن  $c$  سرعت نور است.

۴۸. چقدر طول می‌کشد که بسته‌ی موج یک جسم  $1^\circ \text{ g}$  که در ابتدا به  $1 \text{ mm}$  محدود است، چهار برابر شود؟

۴۹. چقدر طول می‌کشد تا بسته‌ی موج یک پروتون محدود به  $10^{-15} \text{ m}$  به اندازه‌ی فاصله‌ی بین زمین و خورشید بزرگ شود؟ این فاصله برابر است با  $10^8 \text{ km}$ .

۵۰. با فرض آن که بسته‌ی موجی که ماه را نمایش می‌دهد به  $1 \text{ m}$  محدود باشد، چقدر طول می‌کشد تا این بسته سه برابر خورشید شود؟ شعاع خورشید برابر است با  $10^5 \text{ km}$ .

## فصل دوم

# ابزارهای ریاضی مکانیک کوانتومی

### ۱-۲ مقدمه

در اینجا به ابزارهای ریاضی مورد نیاز برای مطالعه‌ی مکانیک کوانتومی می‌پردازیم. اگرچه هدف از این فصل ریاضی است اما در ریاضیات خیلی دقیق نمی‌شویم و مطالب را از نظر ریاضی به طور کامل بررسی نمی‌کنیم و خودمان را به آن دسته از مسأله‌های عملی که به صورت بندی مکانیک کوانتومی مربوط می‌شوند، محدود می‌نماییم.

معادله‌ی شرودینگر یکی از پایه‌های نظریه‌ی مکانیک کوانتومی است. این معادله ساختار یک معادله‌ی خطی را دارد. صورت بندی مکانیک کوانتومی به عملگرهایی می‌پردازد که خطی‌اند و با تابع‌های موجی سروکار دارند که به فضای مجرد هیلبرت متعلق‌اند. ویژگی‌های ریاضی و ساختار فضاهای هیلبرت برای درک درستی از صورت بندی مکانیک کوانتومی ضروری‌اند. بدین منظور قصد داریم تا به صورت خلاصه ویژگی‌های فضاهای هیلبرت و عملگرهای خطی را مرور کنیم. سپس نمادگذاری براکت دیراک را در نظر خواهیم گرفت.

مکانیک کوانتومی به دو روش متفاوت توسط شرودینگر و هایزنبرگ فرمول بندی شد. مکانیک موجی شرودینگر و مکانیک ماتریسی هایزنبرگ به ترتیب دو نمایش صورت بندی عمومی مکانیک کوانتومی در سیستم‌های پایه‌ی پیوسته و گسسته هستند و به این دلیل ریاضیات مربوط به نمایش کت‌ها، براها، براکت‌ها و عملگرها را در پایه‌های گسسته و پیوسته نیز بررسی خواهیم نمود.

## ۲-۲ فضای هیلبرت و تابع‌های موج

## ۱-۲-۲ فضای برداری خطی

یک فضای برداری خطی از دو مجموعه از عنصرها و دو قاعده‌ی جبری تشکیل شده است:

- یک مجموعه از بردارهای  $\psi, \phi, \chi, \dots$  و مجموعه‌ای از نرده‌های  $a, b, c, \dots$
- یک قاعده برای جمع برداری و یک قاعده برای ضرب نرده‌ای

## (الف) قاعده‌ی جمع

قاعده‌ی جمع ویژگی‌ها و ساختار یک گروه آبدلی را دارا است:

- اگر  $\psi$  و  $\phi$  بردارهای (عناصر) یک فضا باشند آنگاه جمع آنها  $(\psi + \phi)$  نیز برداری در همان فضا است.
- جابه‌جایی‌پذیری:  $\psi + \phi = \phi + \psi$ .
- شرکت‌پذیری:  $(\psi + \phi) + \chi = \psi + (\phi + \chi)$ .
- وجود یک بردار صفر یا خنثی: به‌ازای هر بردار  $\psi$  باید یک بردار صفر  $O$  وجود داشته باشد به طوری که:  $O + \psi = \psi + O = \psi$ .
- وجود یک بردار متقارن یا وارون: هر بردار  $\psi$  باید یک بردار متقارن  $(-\psi)$  داشته باشد به طوری که:  $\psi + (-\psi) = (-\psi) + \psi = O$ .

## (ب) قاعده‌ی ضرب

ضرب نرده در بردار (نرده‌ها می‌توانند عددهای حقیقی یا مختلط باشند) ویژگی‌های زیر را دارا است:

- حاصل ضرب یک نرده در یک بردار، بردار دیگری را به‌دست می‌دهد. به‌صورت کلی، اگر  $\psi$  و  $\phi$  دو بردار در یک فضا باشند آنگاه هر ترکیب خطی  $a\psi + b\phi$  نیز یک بردار در آن فضا است که در آن  $a$  و  $b$  نرده‌اند.
- توزیع‌پذیری نسبت به جمع:

$$a(\psi + \phi) = a\psi + a\phi, \quad (a + b)\psi = a\psi + b\psi \quad (1-2)$$

- شرکت‌پذیری نسبت به ضرب نرده‌ها:

$$a(b\psi) = (ab)\psi \quad (2-2)$$

• به‌ازای هر عنصر  $\psi$  باید یک عنصر یکه‌ی  $I$  و یک نرده‌ی صفر ( $o$ ) وجود داشته باشد به طوری که

$$I\psi = \psi I = \psi \quad \text{و} \quad o\psi = \psi o = o \quad (۳-۲)$$

### ۲-۲-۲ فضای هیلبرت

یک فضای هیلبرت  $\mathcal{H}$  از مجموعه‌ای از بردارهای  $\psi, \phi, \chi, \dots$  و مجموعه‌ای از نرده‌های  $a, b, c, \dots$  تشکیل شده است که چهار ویژگی زیر را دارا است:

(الف)  $\mathcal{H}$  یک فضای خطی است

ویژگی‌های یک فضای خطی در بخش قبل بررسی شده‌اند.

(ب) ضرب نرده‌ای تعریف شده‌ای دارد که کاملاً مثبت است

به‌صورت کلی، ضرب نرده‌ای عنصر  $\psi$  با عنصر دیگر  $\phi$  یک عدد مختلط است که با  $(\psi, \phi)$  نمایش داده می‌شود که در آن؛ عدد مختلط  $(\psi, \phi)$ .

توجه: به ترتیب دو عنصر توجه کنید. چون حاصل ضرب نرده‌ای یک عدد مختلط است، به‌صورت کلی کمیت  $(\psi, \phi)$  با  $(\phi, \psi)$  برابر نیست:  $(\psi, \phi) = \psi^* \phi$  در حالی که  $(\phi, \psi) = \phi^* \psi$ . ضرب نرده‌ای ویژگی‌های زیر را برآورده می‌کند:

• ضرب نرده‌ای  $\psi$  و  $\phi$  برابر با مزدوج مختلط ضرب نرده‌ای  $\phi$  و  $\psi$  است:

$$(\psi, \phi) = (\phi, \psi)^* \quad (۴-۲)$$

• هرگاه  $\psi = a\psi_1 + b\psi_2$  باشد آنگاه ضرب نرده‌ای  $\phi$  و  $\psi$  نسبت به عامل دوم خطی است:

$$(\phi, a\psi + b\psi) = a(\phi, \psi_1) + b(\phi, \psi_2) \quad (۵-۲)$$

و هرگاه  $\phi = a\phi_1 + b\phi_2$  باشد آنگاه نسبت به عامل نخست پادخطی است:

$$(a\phi_1 + b\phi_2, \psi) = a^*(\phi_1, \psi) + b^*(\phi_2, \psi) \quad (۶-۲)$$

• ضرب نرده‌ای بردار  $\psi$  در خودش برابر با یک عدد حقیقی مثبت است:

$$(\psi, \psi) = \|\psi\|^2 \geq 0 \quad (۷-۲)$$

که در آن تساوی تنها به‌ازای  $\psi = O$  برقرار است.

(پ)  $\mathcal{H}$  قابل جداسازی است

یک دنباله‌ی کوشی  $\psi_n \in \mathcal{H}$  ( $n = 1, 2, \dots$ ) وجود دارد، به طوری که به‌ازای هر  $\psi$  متعلق به  $\mathcal{H}$  و  $\varepsilon > 0$ ، حداقل یک  $\psi_n$  از این دنباله موجود است که به‌ازای آن

$$\|\psi - \psi_n\| < \varepsilon \quad (۸-۲)$$

است.

(ت)  $\mathcal{H}$  کامل است

هر دنباله‌ی کوشی از عنصرهای  $\psi_n \in \mathcal{H}$  به یک عنصر  $\mathcal{H}$  همگرا می‌شود. یعنی به‌ازای هر  $\psi_n$ ، رابطه‌ی

$$\lim_{n,m \rightarrow \infty} \|\psi_n - \psi_m\| = 0 \quad (۹-۲)$$

یک  $\psi$  حدی یکتای  $\mathcal{H}$  را تعریف می‌کند به طوری که

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|\psi - \psi_n\| = 0 \quad (۱۰-۲)$$

### ملاحظات

باید یادآوری کنیم که در ضرب نرده‌ای  $(\phi, \psi)$ ، عامل دوم  $(\psi)$  به فضای هیلبرت  $\mathcal{H}$  تعلق دارد در حالی که عامل نخست  $(\phi)$  به فضای هیلبرت همزاد آن  $(\mathcal{H}_d)$  متعلق است. همانطور که در بالا اشاره شد، تمایز بین  $\mathcal{H}_d$  و  $\mathcal{H}$  ناشی از این واقعیت است که ضرب نرده‌ای جابه‌جاپذیر نیست:  $(\phi, \psi) \neq (\psi, \phi)$  و ترتیب آنها اهمیت دارد! از جبر خطی می‌دانیم که می‌توان هر فضای برداری را به یک فضای برداری همزاد وابسته کرد.

### ۳-۲-۲ بُعد و پایه‌ی یک فضای برداری

به مجموعه‌ای از  $N$  بردار غیرصفر  $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N$  مستقل خطی گویند اگر و تنها اگر جواب معادله‌ی

$$\sum_{i=1}^N a_i \phi_i = 0 \quad (۱۱-۲)$$

برابر با  $a_1 = a_2 = \dots = a_N = 0$  باشد. اما اگر مجموعه‌ای از نرده‌ها (که همه‌ی آنها صفر نیستند) وجود داشته باشد به طوری که بتوان یکی از بردارها (فرض کنید  $\phi_n$ ) را به صورت ترکیب خطی بردارهای دیگر بیان نمود:

$$\phi = \sum_{i=1}^{n-1} a_i \phi_i + \sum_{n+1}^N a_i \phi_i \quad (۱۲-۲)$$

آنگاه گفته می‌شود که مجموعه‌ی  $\{\phi_i\}$  وابسته‌ی خطی است.

بُعد: بُعد یک فضای برداری از تعداد بیشینه‌ی بردارهای مستقل خطی‌ای که آن فضا می‌تواند داشته باشد، به دست می‌آید. به عنوان مثال اگر تعداد بیشینه‌ی بردارهای مستقل خطی یک فضا برابر با  $N$  باشد (یعنی  $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N$ ) آنگاه به این فضا یک فضای  $N$  بعدی گفته می‌شود. در این حالت می‌توان هر بردار  $\psi$  از این فضای برداری  $N$  بعدی را به صورت یک ترکیب خطی بسط داد:

$$\psi = \sum_{i=1}^N a_i \phi_i \quad (۱۳-۲)$$

پایه: پایه‌ی یک فضای برداری از مجموعه‌ای از تعداد بردارهای مستقل خطی ممکن بیشینه‌ی متعلق به آن فضا تشکیل می‌شود. این مجموعه از بردارها  $(\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N)$  به صورت خلاصه با  $\{\phi_i\}$  نمایش داده می‌شوند و پایه‌ی فضای برداری نامیده می‌شوند. بردارهای  $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n$  بردارهای پایه نامیده می‌شوند. اگرچه مجموعه‌ی این بردارهای مستقل خطی دلخواه است ولی بهتر است آنها را متعامد بهنجار برگزینیم یعنی ضرب نرده‌ای آنها در رابطه‌ی  $(\phi_i, \phi_j) = \delta_{ij}$  صدق کند. پایه متعامد بهنجار است (به یاد بیاورید که هرگاه  $j = i$  باشد آنگاه  $\delta_{ij} = 1$  و در غیر این صورت صفر است). به پایه متعامد بهنجار گفته می‌شود هرگاه از مجموعه‌ای از بردارهای متعامد بهنجار تشکیل شود. علاوه بر این به پایه کامل گفته می‌شود هرگاه تمام فضا را پوشش دهد یعنی نیازی به معرفی هیچ بردار پایه‌ی اضافی نیست. ضریب‌های بسط  $a_i$  در (۱۳-۲) مؤلفه‌های بردار  $\psi$  در این پایه نامیده می‌شوند. هر مؤلفه، از ضرب نرده‌ای  $\psi$  در بردار پایه  $(a_j = (\phi_j, \psi))$  به دست می‌آید.

### مثال‌هایی از فضاهای برداری خطی

بیانید دو مثال از فضاهای خطی را ارائه کنیم که فضای هیلبرت هستند: یکی از آنها دارای مجموعه‌ی متناهی (گسسته‌ای) از بردارهای پایه و دیگری دارای یک پایه‌ی نامتناهی (پیوسته) است.

- مثال نخست فضای برداری اقلیدسی سه بعدی است. پایه‌ی این فضا از سه بردار مستقل خطی که معمولاً با  $\mathbf{i}$  و  $\mathbf{j}$  و  $\mathbf{k}$  نمایش داده می‌شوند، تشکیل شده است. می‌توان هر برداری از فضای اقلیدسی را برحسب بردارهای پایه و به صورت  $\mathbf{A} = a_1 \mathbf{i} + a_2 \mathbf{j} + a_3 \mathbf{k}$  نوشت که در آن  $a_1, a_2, a_3$  مؤلفه‌های  $\mathbf{A}$  در این پایه هستند. می‌توان هر مؤلفه را با انجام ضرب نرده‌ای  $\mathbf{A}$  در بردار پایه‌ی متناظر تعیین نمود:  $a_1 = \mathbf{i} \cdot \mathbf{A}$ ,  $a_2 = \mathbf{j} \cdot \mathbf{A}$  و  $a_3 = \mathbf{k} \cdot \mathbf{A}$ . توجه داشته باشید که ضرب نرده‌ای در فضای اقلیدسی حقیقی و بنابراین متقارن است. هنجار در این فضا، طول معمول بردارها است:  $\|\mathbf{A}\| = A$ . همچنین توجه داشته باشید که هرگاه  $a_1 \mathbf{i} + a_2 \mathbf{j} + a_3 \mathbf{k} = \mathbf{0}$  شود آنگاه داریم:  $a_1 = a_2 = a_3 = 0$  و هیچکدام از بردارهای یک‌ه‌ی  $\mathbf{i}$ ,  $\mathbf{j}$  و  $\mathbf{k}$  را نمی‌توان به صورت ترکیب خطی دو بردار دیگر بیان کرد.

- مثال دوم فضای تمام توابع مختلط  $\psi(x)$  است. بعد این فضا نامتناهی است زیرا تعدادی نامتناهی از بردارهای پایه مستقل خطی را دارا است.

### مثال ۱-۲

بررسی کنید که آیا مجموعه‌ی تابع‌های زیر روی محور حقیقی  $x$  مستقل خطی‌اند یا وابسته‌ی خطی؟

$$\text{(الف)} \quad h(x) = e^{2x}, g(x) = x^2, f(x) = 4$$

$$\text{(ب)} \quad h(x) = x^3, g(x) = x^2, f(x) = x$$

$$\text{(پ)} \quad h(x) = x^2, g(x) = 5x, f(x) = x$$

$$\text{(ت)} \quad h(x) = 2x + 3x^2 - 8x^3, g(x) = 3 - x + 4x^3, f(x) = 2 + x^2$$

حل

(الف) واضح است که مجموعه‌ی نخست مستقل خطی است زیرا

$$a_1 f(x) + a_2 g(x) + a_3 h(x) = 4a_1 + a_2 x^2 + a_3 e^{2x} = 0$$

بیان می‌کند که به‌ازای تمام مقادیرهای  $x$ ، ضریب‌های  $a_1 = a_2 = a_3 = 0$  است. (ب) تابع‌های  $f(x) = x$ ،  $g(x) = x^2$  و  $h(x) = x^3$  نیز مستقل خطی‌اند زیرا  $a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 = 0$  بیان می‌کند که  $a_1 = a_2 = a_3 = 0$  است و اهمیتی ندارد که  $x$  چه مقداری دارد. به عنوان مثال با قرار دادن  $x = -1, 1, 3$  دستگاه سه معادله‌ی

$$(2-14) \quad -a_1 + a_2 - a_3 = 0, \quad a_1 + a_2 + a_3 = 0, \quad 3a_1 + 9a_2 + 27a_3 = 0$$

$a_1 = a_2 = a_3 = 0$  را نتیجه می‌دهد.

(پ) تابع‌های  $f(x) = x$ ،  $g(x) = 5x$  و  $h(x) = x^2$  مستقل خطی نیستند زیرا

$$g(x) = 5f(x) + 0 \times h(x)$$

(ت) تابع‌های  $f(x) = 2 + x^2$ ،  $g(x) = 3 - x + 4x^3$  و  $h(x) = 2x + 3x^2 - 8x^3$  مستقل خطی نیستند زیرا  $h(x) = 3f(x) - 2g(x)$

### مثال ۲-۲

آیا مجموعه‌ی بردارهای زیر (در فضای اقلیدسی سه‌بعدی) مستقل خطی‌اند یا وابسته‌ی خطی؟

$$\text{(الف)} \quad \mathbf{A} = (3, 0, 0), \mathbf{B} = (0, -2, 0), \mathbf{C} = (0, 0, -1)$$

$$\text{(ب)} \quad \mathbf{A} = (6, -9, 0), \mathbf{B} = (-2, 3, 0)$$

(پ)  $\mathbf{A} = (2, 3, -1)$ ،  $\mathbf{B} = (0, 1, 2)$  و  $\mathbf{C} = (0, 0, -5)$

(ت)  $\mathbf{A} = (1, -2, 3)$ ،  $\mathbf{B} = (-4, 1, 7)$ ،  $\mathbf{C} = (0, 10, 11)$  و  $\mathbf{D} = (14, 3, -4)$

حل

(الف) سه بردار  $\mathbf{A} = (3, 0, 0)$ ،  $\mathbf{B} = (0, -2, 0)$  و  $\mathbf{C} = (0, 0, -1)$  مستقل خطی‌اند زیرا

$$a_1 \mathbf{A} + a_2 \mathbf{B} + a_3 \mathbf{C} = \mathbf{0} \implies 3a_1 \mathbf{i} - 2a_2 \mathbf{j} - a_3 \mathbf{k} = \mathbf{0} \quad (15-2)$$

به رابطه‌های زیر می‌انجامد:

$$3a_1 = 0, \quad -2a_2 = 0, \quad -a_3 = 0 \quad (16-2)$$

که  $a_1 = a_2 = a_3 = 0$  را نتیجه می‌دهد.

(ب) بردارهای  $\mathbf{A} = (6, -9, 0)$  و  $\mathbf{B} = (-2, 3, 0)$  وابسته‌ی خطی‌اند زیرا جواب

$$a_1 \mathbf{A} + a_2 \mathbf{B} = \mathbf{0} \implies (6a_1 - 2a_2) \mathbf{i} + (-9a_1 + 3a_2) \mathbf{j} = \mathbf{0} \quad (17-2)$$

برابر با  $a_1 = a_2/3$  است. بردار نخست برابر با  $-3$  برابر بردار دومی است:  $\mathbf{A} = -3\mathbf{B}$ .  
(پ) بردارهای  $\mathbf{A} = (2, 3, -1)$ ،  $\mathbf{B} = (0, 1, 2)$  و  $\mathbf{C} = (0, 0, -5)$  مستقل خطی‌اند زیرا

$$a_1 \mathbf{A} + a_2 \mathbf{B} + a_3 \mathbf{C} = \mathbf{0} \implies 2a_1 \mathbf{i} + (3a_1 + a_2) \mathbf{j} + (-a_1 + 2a_2 - 5a_3) \mathbf{k} = \mathbf{0} \quad (18-2)$$

به رابطه‌های زیر می‌انجامد:

$$2a_1 = 0, \quad 3a_1 + a_2 = 0, \quad -a_1 + 2a_2 - 5a_3 = 0 \quad (19-2)$$

تنها جواب این دستگاه برابر با  $a_1 = a_2 = a_3 = 0$  است.

(ت) بردارهای  $\mathbf{A} = (1, -2, 3)$ ،  $\mathbf{B} = (-4, 1, 7)$ ،  $\mathbf{C} = (0, 10, 11)$  و  $\mathbf{D} = (14, 3, -4)$

مستقل خطی نیستند زیرا می‌توان  $\mathbf{D}$  را برحسب بردارهای دیگر بیان کرد:

$$\mathbf{D} = 2\mathbf{A} - 3\mathbf{B} + \mathbf{C} \quad (20-2)$$



## ۴-۲-۲ تابع‌های انتگرال‌پذیر مجذوری: تابع‌های موج

در رابطه با فضای تابع‌ها باید گفت که یک عنصر «برداری» با یک تابع مختلط و ضرب نرده‌ای با انتگرال‌ها داده می‌شود. یعنی ضرب نرده‌ای دو تابع  $\psi(x)$  و  $\phi(x)$  از رابطه‌ی

$$(\psi, \phi) = \int \psi^*(x)\phi(x)dx \quad (۲۱-۲)$$

به دست می‌آید. اگر این انتگرال واگرا شود آنگاه ضرب نرده‌ای وجود ندارد. در نتیجه اگر بخواهیم فضای تابع دارای یک ضرب نرده‌ای باشد باید تنها آن دسته از تابع‌ها را انتخاب کنیم که به ازای آنها  $(\psi, \phi)$  متناهی باشد. به خصوص هرگاه ضرب نرده‌ای  $\psi$  در خودش

$$(\psi, \psi) = \int |\psi(x)|^2 dx \quad (۲۲-۲)$$

متناهی باشد آنگاه گفته می‌شود که تابع  $\psi(x)$  انتگرال‌پذیر مجذوری است.

اثبات این که فضای تابع‌های انتگرال‌پذیر مجذوری دارای ویژگی‌های یک فضای هیلبرت است، کار ساده‌ای است. به عنوان مثال، هر ترکیب خطی از تابع‌های انتگرال‌پذیر مجذوری نیز یک تابع انتگرال‌پذیر مجذوری است و  $(۲۱-۲)$  در تمام ویژگی‌های ضرب نرده‌ای یک فضای هیلبرت صدق می‌کند.

توجه داشته باشید که بعد فضای هیلبرت تابع‌های انتگرال‌پذیر مجذوری متناهی است زیرا می‌توان هر تابع موج را برحسب تعدادی متناهی از تابع‌های مستقل خطی بسط داد. بعد یک فضا از تعداد بیشینه‌ی بردارهای پایه‌ی مستقل خطی مورد نیاز برای پوشش دادن آن فضا به دست می‌آید.

معادله‌ی موج مکانیک کوانتومی  $\psi(\mathbf{r}, t)$  مثال خوبی از تابع‌های انتگرال‌پذیر مجذوری است (فصل ۱). دیدیم که مطابق با تفسیر احتمالاتی بورن از  $\psi(\mathbf{r}, t)$ ، کمیت  $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r$  احتمال یافتن ذره در حجم  $d^3r$  (که مرکز آن در نقطه‌ی  $\mathbf{r}$  است) را در لحظه‌ی  $t$  نمایش می‌دهد. آنگاه احتمال یافتن ذره در جایی از فضا باید برابر با ۱ باشد:

$$\int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dz = 1 \quad (۲۳-۲)$$

از این رو تابع‌های موج مکانیک کوانتومی انتگرال‌پذیر مجذوری‌اند. به تابع‌های موجی که در  $(۲۳-۲)$  صدق می‌کنند، بهنجار یا انتگرال‌پذیر مجذوری گفته می‌شود. همانطور که مکانیک موجی به تابع‌های موج انتگرال‌پذیر مجذوری می‌پردازد، هر تابع موجی که انتگرال‌پذیر مجذوری نباشد در مکانیک کوانتومی دارای معنی فیزیکی نیست.

## ۳-۲ نمادگذاری دیراک

حالت فیزیکی یک سیستم در مکانیک کوانتومی با عنصرهای یک فضای هیلبرت نمایش داده می‌شود. این عنصرها، بردارهای حالت نامیده می‌شوند. می‌توانیم بردارهای حالت در پایه‌های متفاوت را به وسیله‌ی بسط تابع‌ها نمایش دهیم. این کار مشابه با مشخص کردن یک بردار اقلیدسی به وسیله‌ی مؤلفه‌های آن در دستگاه‌های مختصات متفاوت است. به عنوان مثال، به صورت معادل می‌توانیم یک بردار را توسط مؤلفه‌های آن در دستگاه مختصات دکارتی، در دستگاه مختصات کروی یا در دستگاه مختصات استوانه‌ای نمایش دهیم. البته معنی یک بردار، مستقل از سیستم مختصات انتخابی برای نمایش مؤلفه‌های آن است. به صورت مشابه، حالت یک سیستم میکروسکوپی معنی مستقل از پایه‌ای که در آن بسط داده شده است، دارد. برای آزاد کردن بردارهای حالت از معنی مختصاتی آن، دیراک نمادگذاری را معرفی کرد که می‌رفت تا در مکانیک کوانتومی بی‌ارزش شود. این کار به شخص امکان می‌دهد که با صورت بندی مکانیک کوانتومی به آسانی و شفافیت کار کند. وی مفاهیم کت<sup>۱</sup>، برا<sup>۲</sup> و براکت<sup>۳</sup> را که در ادامه توضیح داده خواهند شد، معرفی کرد.

### کت‌ها: عنصرهای یک فضای برداری

دیراک بردار حالت  $\psi$  را با نماد  $|\psi\rangle$  که بردارکت یا به سادگی یک کت نامیده می‌شود، نمایش داد. کت‌ها به فضای (برداری) هیلبرت  $\mathcal{H}$  یا به اختصار، به فضای کت تعلق دارند.

### براهای: عنصرهای یک فضای همزاد

همانطور که در بالا اشاره شد، از جبر خطی می‌دانیم که به هر فضای برداری می‌توان یک فضای همزاد وابسته کرد. دیراک عنصرهای یک فضای همزاد را با نماد  $\langle |$  نمایش داد که یک بردار برا یا به سادگی یک برا نامیده می‌شود. به عنوان مثال، عنصر  $\langle\psi|$  یک برا را نمایش می‌دهد. توجه: به‌ازای هر کت  $|\psi\rangle$  یک برای منحصر به فرد  $\langle\psi|$  وجود دارد و برعکس. دوباره، در حالی که کت‌ها به فضای هیلبرت  $\mathcal{H}$  تعلق دارند، براهای متناظر به فضای (هیلبرت) همزاد  $\mathcal{H}_d$  آن تعلق دارند.

### براکت: نمادگذاری دیراک برای ضرب نرده‌ای

دیراک ضرب نرده‌ای (داخلی) را با نماد  $\langle |$  نمایش داد و آن را یک براکت نامید. به عنوان مثال، ضرب نرده‌ای  $(\phi, \psi)$  با براکت  $\langle\phi, \psi\rangle$  نمایش داده می‌شود:

$$(\phi, \psi) \longrightarrow \langle\phi|\psi\rangle \quad (۲۴-۲)$$

توجه: هنگامی که یک کت (یا یک برا) در یک عدد مختلط ضرب می‌شود نیز یک کت (یا یک برا) به دست می‌آوریم.

### ملاحظات

در مکانیک موجی با تابع‌های موج  $\psi(\mathbf{r}, t)$  سروکار داریم ولی در صورت بندی عمومی‌تر مکانیک کوانتومی با کت‌های عمومی  $|\psi\rangle$  سروکار داریم. تابع‌های موج (همانند کت‌ها) عنصرهای فضای هیلبرت هستند. باید یادآوری کنیم که یک کت (مانند یک تابع موج) سیستم را به صورت کامل نمایش می‌دهد و از این رو دانستن  $|\psi\rangle$  به معنی دانستن تمام دامنه‌های آن در تمام نمایش‌های ممکن است. همانطور که در بالا اشاره شد، کت‌ها مستقل از هر نمایش خاصی هستند. دلیلی برای انتخاب یک پایه‌ی نمایش خاص مانند نمایش در فضای مکان وجود ندارد. البته، اگر بخواهیم احتمال یافتن ذره در جایی از فضا را بدانیم باید با صورت بندی در چارچوب نمایش مختصه کار کنیم. بردار حالت این ذره در زمان  $t$  از تابع موج فضایی  $\langle \mathbf{r}, t | \psi \rangle = \psi(\mathbf{r}, t)$  به دست خواهد آمد. در نمایش مختصه، ضرب نرده‌ای  $\langle \phi | \psi \rangle$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int \phi^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) d^3 r \quad (25-2)$$

به صورت مشابه، اگر تکانه‌ی سه بعدی یک ذره مورد نظر ما باشد آنگاه کت  $|\psi\rangle$  باید در فضای تکانه بیان شود. در این حالت، حالت ذره به وسیله‌ی تابع موج  $\psi(\mathbf{p}, t)$  توصیف خواهد شد که در آن  $\mathbf{p}$  تکانه‌ی ذره است.

ویژگی‌های کت‌ها، براها و برا-کت‌ها

• هر کت یک برای متناظر دارد

به‌ازای هر کت  $|\psi\rangle$  یک برای  $\langle \psi|$  متناظر وجود دارد و برعکس:

$$|\psi\rangle \longleftrightarrow \langle \psi| \quad (26-2)$$

یک تناظر یک‌به‌یک بین براها و کت‌ها وجود دارد:

$$a|\psi\rangle + b|\phi\rangle \longleftrightarrow a^* \langle \psi| + b^* \langle \phi| \quad (27-2)$$

که در آن  $a$  و  $b$  عددهای مختلط‌اند. نمادگذاری زیر یک نمادگذاری متداول است:

$$|a\psi\rangle = a|\psi\rangle, \quad \langle a\psi| = a^* \langle \psi| \quad (28-2)$$

- ویژگی‌های ضرب نرده‌ای

چون در مکانیک کوانتومی حاصل ضرب نرده‌ای یک عدد مختلط است، ترتیب اهمیت زیادی دارد. باید مراقب باشیم تا بین ضرب نرده‌ای و مزدوج مختلط آن تمایز قائل شویم:  $\langle \psi | \phi \rangle$  با  $\langle \phi | \psi \rangle$  یکی نیست:

$$\langle \phi | \psi \rangle^* = \langle \psi | \phi \rangle \quad (29-2)$$

این ویژگی زمانی آشکارتر می‌شود که آن را در مورد (۲۱-۲) به کار ببریم:

$$\langle \phi | \psi \rangle^* = \left( \int \phi^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) d^3 r \right)^* = \int \psi^*(\mathbf{r}, t) \phi(\mathbf{r}, t) d^3 r = \langle \psi | \phi \rangle \quad (30-2)$$

هنگامی که  $|\psi\rangle$  و  $|\phi\rangle$  حقیقی باشند، داریم:  $\langle \psi | \phi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle$ . بیابید ویژگی‌های بیشتری از ضرب نرده‌ای را فهرست کنیم:

$$\langle \psi | a_1 \psi_1 + a_2 \psi_2 \rangle = a_1 \langle \psi | \psi_1 \rangle + a_2 \langle \psi | \psi_2 \rangle \quad (31-2)$$

$$\langle a_1 \phi_1 + a_2 \phi_2 | \psi \rangle = a_1^* \langle \phi_1 | \psi \rangle + a_2^* \langle \phi_2 | \psi \rangle \quad (32-2)$$

$$\begin{aligned} \langle a_1 \phi_1 + a_2 \phi_2 | b_1 \psi_1 + b_2 \psi_2 \rangle &= a_1^* b_1 \langle \phi_1 | \psi_1 \rangle + a_1^* b_2 \langle \phi_1 | \psi_2 \rangle \\ &+ a_2^* b_1 \langle \phi_2 | \psi_1 \rangle + a_2^* b_2 \langle \phi_2 | \psi_2 \rangle \end{aligned} \quad (33-2)$$

- هنجار حقیقی و مثبت است

به‌ازای هر بردار حالت  $|\psi\rangle$  فضای هیلبرت  $\mathcal{H}$ ، هنجار  $\langle \psi | \psi \rangle$  حقیقی و مثبت است و  $\langle \psi | \psi \rangle$  تنها برای حالتی که در آن  $|\psi\rangle = 0$  باشد، برابر با صفر است که در آن  $O$  بردار صفر است. اگر حالت  $|\psi\rangle$  به‌هنجار باشد آنگاه  $\langle \psi | \psi \rangle = 1$  است.

- نامساوی شوارتز

به‌ازای هر دو حالت  $|\psi\rangle$  و  $|\phi\rangle$  در فضای هیلبرت می‌توانیم نشان دهیم که

$$|\langle \psi | \phi \rangle|^2 \leq \langle \psi | \psi \rangle \langle \phi | \phi \rangle \quad (34-2)$$

اگر  $|\psi\rangle$  و  $|\phi\rangle$  وابسته‌ی خطی باشند (یعنی متناسب با یکدیگر باشند):  $\langle \psi | \psi \rangle = \alpha \langle \phi | \phi \rangle$  که در آن  $\alpha$  یک نرده است) آنگاه این رابطه به یک نامساوی تبدیل می‌شود. نامساوی شوارتز (۳۴-۲) مشابه با رابطه‌ی زیر در فضای حقیقی اقلیدسی است:

$$|\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}|^2 \leq |\mathbf{A}|^2 |\mathbf{B}|^2 \quad (35-2)$$

## • نامساوی مثلثی

$$\sqrt{\langle \psi + \phi | \psi + \phi \rangle} \leq \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle} + \sqrt{\langle \phi | \phi \rangle} \quad (۳۶-۲)$$

اگر  $|\psi\rangle$  و  $|\phi\rangle$  وابسته‌ی خطی باشند ( $|\psi\rangle = \alpha|\phi\rangle$ ) و ضریب زده‌ای تناسب  $\alpha$  حقیقی و مثبت باشد آنگاه نامساوی مثلثی به یک تساوی تبدیل می‌شود. همتای این نامساوی در فضای اقلیدسی رابطه‌ی  $|\mathbf{A} + \mathbf{B}| \leq |\mathbf{A}| + |\mathbf{B}|$  است.

## • حالت‌های متعامد

به دو کت  $|\psi\rangle$  و  $|\phi\rangle$  متعامد گفته می‌شود هرگاه حاصل ضرب زده‌ای آنها صفر باشد:

$$\langle \psi | \phi \rangle = 0 \quad (۳۷-۲)$$

## • حالت‌های متعامد بهنجار

به دو کت  $|\psi\rangle$  و  $|\phi\rangle$  متعامد بهنجار گفته می‌شود هرگاه این دو کت متعامد و بهنجار به یک باشند:

$$\langle \psi | \phi \rangle = 0, \quad \langle \psi | \psi \rangle = 1, \quad \langle \phi | \phi \rangle = 1 \quad (۳۸-۲)$$

## • کمیت‌های ممنوع

اگر  $|\psi\rangle$  و  $|\phi\rangle$  متعلق به یک فضای برداری (هیلبرت) باشند آنگاه ضرب‌هایی از نوع  $\langle \psi | \phi \rangle$  و  $|\psi\rangle\langle\phi|$  ممنوع‌اند. این نوع ضرب‌ها بی‌معنی‌اند زیرا  $|\psi\rangle\langle\phi|$  و  $\langle\psi|\phi\rangle$  نه کت و نه برا هستند (تصویر روشنی از این موضوع در ادامه و نیز بعداً هنگامی که نمایش در یک پایه‌ی گسسته را بررسی می‌کنیم، ارائه خواهد شد). اگر  $|\psi\rangle$  و  $|\phi\rangle$  به دو فضای برداری متفاوت تعلق داشته باشند (مثلاً  $|\psi\rangle$  به فضای اسپین و  $|\phi\rangle$  به فضای تکانه‌ی زاویه‌ای مداری تعلق داشته باشند) آنگاه ضرب  $\langle\psi|\phi\rangle$  (که به صورت  $|\phi\rangle \otimes |\psi\rangle$  نوشته می‌شود) یک ضرب تانسوری  $|\psi\rangle$  و  $|\phi\rangle$  را نمایش می‌دهد. این‌گونه ضرب‌ها تنها در این موارد نوعی معنی دارند.

## مثال ۳-۲

(توجه: بعداً در این فصل خواهیم دید که کت‌ها با ماتریس‌های ستونی و براها با ماتریس‌های سطری نمایش داده می‌شوند. این مثال زودتر از جایی که باید، ارائه شده است زیرا باید مثال‌هایی روشن از صورت‌بندی را نشان دهیم.) دو کت زیر را در نظر بگیرید:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} -3i \\ 2+i \\ 4 \end{pmatrix}, \quad |\phi\rangle = \begin{pmatrix} 2 \\ -i \\ 2-3i \end{pmatrix}$$

(الف) برای  $|\phi\rangle$  را بیابید.

(ب) ضرب نرده‌ای  $\langle\phi|\psi\rangle$  را حساب کنید.

(پ) بررسی کنید که آیا ضرب‌های  $\langle\phi|\psi\rangle$  و  $|\psi\rangle\langle\phi|$  معنی ندارند.

حل

(الف) همانطور که بعداً هنگام معرفی الحاقی هرمیتی کت‌ها و براها توضیح داده خواهد شد، می‌خواهیم یادآوری کنیم که می‌توان برای  $|\phi\rangle$  را به سادگی و با مزدوج مختلط کردن ترانهاده‌ی کت  $|\phi\rangle$  به دست آورد:

$$\langle\phi| = (2 - i \quad 2 + 3i) \quad (39-2)$$

(ب) می‌توان ضرب نرده‌ای  $\langle\phi|\psi\rangle$  را به صورت زیر محاسبه کرد:

$$\langle\phi|\psi\rangle = (2 - i \quad 2 + 3i) \begin{pmatrix} -3i \\ 2 + i \\ 4 \end{pmatrix} \quad (40-2)$$

$$= 2(-3i) + i(2 + i) + 4(2 + 3i)$$

$$= 7 + 8i$$

(پ) اولاً این که نمی‌توان ضرب  $\langle\phi|\psi\rangle$  را انجام داد زیرا (از جبر خطی) نمی‌توان ضرب دو ماتریس ستونی را انجام داد. به صورت مشابه، چون نمی‌توان دو ماتریس سطری را در هم ضرب کرد، ضرب  $\langle\phi|\psi\rangle$  بی‌معنی است.

### معنی فیزیکی ضرب نرده‌ای

می‌توان ضرب نرده‌ای را به دو روش تفسیر نمود. در روش نخست در تشابه با ضرب نرده‌ای بردارهای معمولی در فضای اقلیدسی که در آن  $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$  تصویر  $\mathbf{B}$  روی  $\mathbf{A}$  را نمایش می‌دهد، ضرب  $\langle\phi|\psi\rangle$  نیز تصویر  $|\psi\rangle$  بر روی  $|\phi\rangle$  را نشان می‌دهد. در روش دوم، در مورد حالت‌های بهنجار و مطابق با تفسیر احتمالاتی بورن، کمیت  $\langle\phi|\psi\rangle$  دامنه‌ی احتمالی را که حالت سیستم  $|\psi\rangle$  (پس از انجام یک اندازه‌گیری روی سیستم) در یک حالت دیگر  $|\phi\rangle$  باشد را نمایش می‌دهد.

### مثال ۲-۴ (جبر برا-کت)

حالت‌های  $|\psi\rangle = 3i|\phi_1\rangle - 7i|\phi_2\rangle$  و  $|\chi\rangle = -|\phi_1\rangle + 2i|\phi_2\rangle$  را در نظر بگیرید که در آنها  $|\phi_1\rangle$  و  $|\phi_2\rangle$  متعامد بهنجارند.

الف)  $\langle \psi + \chi | \psi + \chi \rangle$  را محاسبه کنید.

ب) ضرب‌های نرده‌ای  $\langle \chi | \psi \rangle$  و  $\langle \psi | \chi \rangle$  را محاسبه کنید. آیا این ضرب‌ها یکسانند؟

پ) نشان دهید که حالت‌های  $|\psi\rangle$  و  $|\chi\rangle$  در نامساوی شوارتز صدق می‌کنند.

ت) نشان دهید که حالت‌های  $|\psi\rangle$  و  $|\chi\rangle$  در نامساوی مثلثی صدق می‌کنند.

حل

الف) محاسبه‌ی  $|\psi + \chi\rangle$  سراسر است:

$$\begin{aligned} |\psi + \chi\rangle &= |\psi\rangle + |\chi\rangle = (3i|\phi_1\rangle - 7i|\phi_2\rangle) + (-|\phi_1\rangle + 2i|\phi_2\rangle) \\ &= (-1 + 3i)|\phi_1\rangle - 5i|\phi_2\rangle \end{aligned} \quad (41-2)$$

که یک‌باره به عبارت مربوط به  $|\psi + \chi\rangle$  می‌انجامد:

$$\langle \psi + \chi | = (-1 + 3i)^* \langle \phi_1 | + (-5i)^* \langle \phi_2 | = (-1 - 3i) \langle \phi_1 | + 5i \langle \phi_2 | \quad (42-2)$$

ب) چون  $\langle \phi_1 | \phi_1 \rangle = \langle \phi_2 | \phi_2 \rangle = 1$  و  $\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle = \langle \phi_2 | \phi_1 \rangle = 0$  و با توجه به این که براهای متناظر

باکت‌های  $|\psi\rangle = 3i|\phi_1\rangle - 7i|\phi_2\rangle$  و  $|\chi\rangle = -|\phi_1\rangle + 2i|\phi_2\rangle$  از  $\langle \psi | = -3i \langle \phi_1 | + 7i \langle \phi_2 |$

و  $\langle \chi | = -\langle \phi_1 | - 2i \langle \phi_2 |$  عبارتند از

$$\begin{aligned} \langle \psi | \chi \rangle &= (-3i \langle \phi_1 | + 7i \langle \phi_2 |) (-|\phi_1\rangle + 2i|\phi_2\rangle) \\ &= (-3i)(-1) \langle \phi_1 | \phi_1 \rangle + (7i)(2i) \langle \phi_2 | \phi_2 \rangle \end{aligned} \quad (43-2)$$

$$= -14 + 3i$$

$$\begin{aligned} \langle \chi | \psi \rangle &= (-\langle \phi_1 | - 2i \langle \phi_2 |) (3i|\phi_1\rangle - 7i|\phi_2\rangle) \\ &= (-1)(3i) \langle \phi_1 | \phi_1 \rangle + (-2i)(-7i) \langle \phi_2 | \phi_2 \rangle \end{aligned} \quad (44-2)$$

$$= -14 - 3i$$

می‌بینیم که  $\langle \psi | \chi \rangle$  برابر با مزدوج مختلط  $\langle \chi | \psi \rangle$  است.

پ) ابتدا بیایید  $\langle \psi | \psi \rangle$  و  $\langle \chi | \chi \rangle$  را محاسبه کنیم:

$$\langle \psi | \psi \rangle = (-3i \langle \phi_1 | + 7i \langle \phi_2 |) (3i|\phi_1\rangle - 7i|\phi_2\rangle) = (-3i)(3i) + (7i)(-7i) = 58 \quad (45-2)$$

$$\langle \chi | \chi \rangle = (-\langle \phi_1 | - 2i \langle \phi_2 |) (-|\phi_1\rangle + 2i|\phi_2\rangle) = (-1)(-1) + (-2i)(2i) = 5 \quad (46-2)$$

چون  $\langle \psi | \chi \rangle = -14 + 3i$  داریم:  $|\langle \psi | \chi \rangle|^2 = 14^2 + 3^2 = 205$ . با ترکیب مقادیرهای  $|\langle \psi | \chi \rangle|^2$  و  $\langle \psi | \psi \rangle$  و  $\langle \chi | \chi \rangle$  می‌بینیم که نامساوی شوارتز (۲-۳۴) برقرار است:

$$205 < (58)(5) \implies |\langle \psi | \chi \rangle|^2 < \langle \psi | \psi \rangle \langle \chi | \chi \rangle \quad (۲-۴۷)$$

(ت) ابتدا بیابید از (۲-۴۱) و (۲-۴۲) برای محاسبه‌ی  $\langle \psi + \chi | \psi + \chi \rangle$  استفاده کنیم:

$$\begin{aligned} \langle \psi + \chi | \psi + \chi \rangle &= [(-1 - 3i)\langle \phi_1 | + 5i\langle \phi_2 |][(-1 + 3i)\langle \phi_1 | - 5i\langle \phi_2 |] \\ &= (-1 - 3i)(-1 + 3i) + (5i)(-5i) = 35 \end{aligned} \quad (۲-۴۸)$$

چون  $\langle \psi | \psi \rangle = 58$  و  $\langle \chi | \chi \rangle = 5$  است، نتیجه می‌گیریم که نامساوی مثلثی (۲-۳۶) برقرار است:

$$\sqrt{35} < \sqrt{58} + \sqrt{5} \implies \sqrt{\langle \psi + \chi | \psi + \chi \rangle} < \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle} + \sqrt{\langle \chi | \chi \rangle} \quad (۲-۴۹)$$

## مثال ۵-۲

دو حالت  $|\psi_1\rangle = 2i|\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle - a|\phi_3\rangle + 4|\phi_4\rangle$  و  $|\psi_2\rangle = 3|\phi_1\rangle - i|\phi_2\rangle + 5|\phi_3\rangle - |\phi_4\rangle$  را در نظر بگیرید که در آنها  $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, |\phi_3\rangle$  و  $|\phi_4\rangle$  کت‌های متعامد بهنجار و  $a$  یک ثابت است. مقدار  $a$  را بیابید به طوری که  $|\psi_1\rangle$  و  $|\psi_2\rangle$  متعامد باشند.

حل

برای این که حالت‌های  $|\psi_1\rangle$  و  $|\psi_2\rangle$  متعامد باشند، ضرب ندره‌ای  $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$  باید صفر باشد. با استفاده از رابطه‌ی  $\langle \phi_2 | = 3\langle \phi_1 | + i\langle \phi_2 | + 5\langle \phi_3 | - \langle \phi_4 |$  می‌توانیم ضرب ندره‌ای را بیابیم:

$$\begin{aligned} \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle &= (3\langle \psi_1 | + i\langle \phi_2 | + 5\langle \phi_3 | - \langle \phi_4 |)(2i|\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle - a|\phi_3\rangle + 4|\phi_4\rangle) \\ &= 7i - 5a - 4 \end{aligned} \quad (۲-۵۰)$$

چون  $\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle = 7i - 5a - 4 = 0$  است، مقدار  $a$  برابر است با  $a = (7i - 4)/5$ .

## ۴-۲ عملگرها

### ۱-۴-۲ تعریف‌های عمومی

تعریف یک عملگر: یک عملگر  $\hat{A}$  یک قاعده‌ی ریاضی است که زمانی که بر یک کت  $|\psi\rangle$  اعمال شود، آن را به کت دیگر  $|\psi'\rangle$  در همان فضا تبدیل می‌کند و هنگامی که بر یک  $|\phi\rangle$  اثر کند، آن را به  $\hat{A}|\phi\rangle$  در سراسر کتاب از کلاه روی  $\hat{A}$  برای متمایز کردن عملگر  $\hat{A}$  از عدد مختلط یا ماتریس  $A$  استفاده خواهد شد.



برای دیگر  $\langle \phi' |$  تبدیل می‌کند:

$$\hat{A}|\psi\rangle = |\psi'\rangle, \quad \langle \phi|\hat{A} = \langle \phi'| \quad (51-2)$$

تعریف مشابهی برای تابع‌های موج به کار می‌رود:

$$\hat{A}\psi(\mathbf{r}) = \psi'(\mathbf{r}), \quad \phi(\mathbf{r})\hat{A} = \phi'(\mathbf{r}) \quad (52-2)$$

### مثال‌هایی از عملگرها

در اینجا عملگرهایی را می‌بینید که از آنها در این کتاب استفاده خواهیم کرد:

- عملگر یکانی: حرکت را بدون تغییر باقی می‌گذارد:  $\hat{I}|\psi\rangle = |\psi\rangle$ .
- عملگر گرادینان:  $\nabla\psi(\mathbf{r}) = (\partial\psi(\mathbf{r})/\partial x)\mathbf{i} + (\partial\psi(\mathbf{r})/\partial y)\mathbf{j} + (\partial\psi(\mathbf{r})/\partial z)\mathbf{k}$ .
- عملگر تکانه‌ی خطی:  $\mathbf{P}\psi(\mathbf{r}) = -i\hbar\nabla\psi(\mathbf{r})$ .
- عملگر لاپلاسی:  $\nabla^2\psi(\mathbf{r}) = \partial^2\psi(\mathbf{r})/\partial x^2 + \partial^2\psi(\mathbf{r})/\partial y^2 + \partial^2\psi(\mathbf{r})/\partial z^2$ .
- عملگر پارینه:  $\mathcal{P}\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r})$ .

### ضرب عملگرها

به صورت کلی، ضرب دو عملگر جابه‌جاپذیر نیست:

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A} \quad (53-2)$$

و ضرب عملگرها شرکت‌پذیر است:

$$\hat{A}\hat{B}\hat{C} = \hat{A}(\hat{B}\hat{C}) = (\hat{A}\hat{B})\hat{C} \quad (54-2)$$

همچنین می‌توانیم بنویسیم:  $\hat{A}^n\hat{A}^m = \hat{A}^{n+m}$ . هنگامی که ضرب  $\hat{A}\hat{B}$  روی یک کت  $|\psi\rangle$  اثر می‌گذارد (در اینجا ترتیب عملگرها مهم است)، ابتدا عملگر  $\hat{B}$  روی  $|\psi\rangle$  عمل می‌کند و سپس  $\hat{A}$  روی کت جدید  $(\hat{B}|\psi\rangle)$  اثر می‌گذارد:

$$\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle = \hat{A}(\hat{B}|\psi\rangle) \quad (55-2)$$

به صورت مشابه، هنگامی که  $\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D}$  روی کت  $|\psi\rangle$  عمل می‌کند، ابتدا  $\hat{D}$ ، سپس  $\hat{C}$ ، سپس  $\hat{B}$  و در آخر  $\hat{A}$  عمل می‌کنند.

به صورت کلی، هنگامی که عملگر  $\hat{A}$  بین یک برا  $\langle \phi |$  و یک کت  $|\psi\rangle$  قرار می‌گیرد، یک عدد مختلط را نتیجه می‌دهد: عدد مختلط  $\langle \phi|\hat{A}|\psi\rangle$ . همچنین کمیت  $\langle \phi|\hat{A}|\psi\rangle$  می‌تواند حقیقی محض یا موهومی محض باشد.

توجه: در محاسبه  $\langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle$  اهمیتی ندارد که ابتدا  $\hat{A}$  بروی کت عمل کند و سپس برکت را در نظر بگیرد یا ابتدا  $\hat{A}$  روی برا عمل کند و سپس برکت را در نظر بگیرد یعنی  $\langle \phi | (\hat{A} | \psi \rangle) = (\langle \phi | \hat{A}) | \psi \rangle$ .

### عملگرهای خطی

به عملگر  $\hat{A}$  خطی گفته می‌شود هرگاه از قانون توزیع‌پذیری پیروی کند و (مانند تمام عملگرها) با ثابت‌ها جابه‌جا شود یعنی عملگر  $\hat{A}$  خطی است هرگاه به‌ازای هر بردار  $|\psi_1\rangle$  و  $|\psi_2\rangle$  و به‌ازای عددهای مختلط  $a_1$  و  $a_2$  داشته باشیم:

$$\hat{A}(a_1|\psi_1\rangle + a_2|\psi_2\rangle) = a_1\hat{A}|\psi_1\rangle + a_2\hat{A}|\psi_2\rangle \quad (۵۶-۲)$$

و

$$(\langle \psi_1 | a_1 + \langle \psi_2 | a_2) \hat{A} = a_1 \langle \psi_1 | \hat{A} + a_2 \langle \psi_2 | \hat{A} \quad (۵۷-۲)$$

### ملاحظات

- مقدار چشمداشتی یا میانگین  $\langle \hat{A} \rangle$  عملگر  $\hat{A}$  نسبت به حالت  $|\psi\rangle$  به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \quad (۵۸-۲)$$

- در نمادگذاری دیراک، کمیت  $\langle \psi | \phi \rangle$  (یعنی ضرب یک کت در یک برا) یک عملگر خطی است. برای دیدن این مطلب، هنگامی که  $|\phi\rangle \langle \psi|$  برکت  $|\psi'\rangle$  اعمال می‌شود، کت دیگری را به‌دست می‌آوریم:

$$|\phi\rangle \langle \psi | \psi'\rangle = \langle \psi | \psi'\rangle |\phi\rangle \quad (۵۹-۲)$$

زیرا  $\langle \psi | \psi'\rangle$  یک عدد مختلط است.

- ضرب‌هایی از نوع  $\hat{A}|\psi\rangle$  و  $\langle \psi | \hat{A}$  (یعنی هنگامی که یک عملگر در سمت راست یک کت یا در طرف چپ یک برا قرار می‌گیرد) ممنوع‌اند و عملگر یا کت و یا برا نیستند و معنی ریاضی یا فیزیکی ندارند (معادله‌ی (۲-۲۱۹) را ببینید).

### ۲-۴-۲ الحاقی هرمیتی

الحاقی هرمیتی یا مزدوج  $\alpha^\dagger$  عدد مختلط  $\alpha$ ، مزدوج مختلط این عدد است:  $\alpha^\dagger = \alpha^*$ . الحاقی هرمیتی (یا برای سادگی الحاقی  $\hat{A}^\dagger$ ) عملگر  $\hat{A}$  با رابطه‌ی زیر تعریف می‌شود:

$$\langle \psi | \hat{A}^\dagger | \phi \rangle = \langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle^* \quad (۶۰-۲)$$

۵. عبارت‌های «الحاقی» و «مزدوج» بدون تمایز به کار می‌روند.

## ویژگی‌های قاعده‌ی مزدوج هرمیتی

برای به دست آوردن الحاقی هرمیتی هر عبارت باید به صورت چرخه‌ای ترتیب عامل‌ها را معکوس کنیم و سه جایگزینی زیر را انجام دهیم:

- ثابت‌ها را با مزدوج مختلط آنها جایگزین کنیم:  $\alpha^\dagger = \alpha^*$ .
- کت‌ها (براهای) را با براهای (کت‌های) متناظر جایگزین کنیم:  $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^\dagger = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ .
- عملگرها را با الحاقی آنها جایگزین کنیم.

با دنبال کردن این قاعده‌ها می‌توانیم بنویسیم:

$$(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A} \quad (۶۱-۲)$$

$$(a\hat{A})^\dagger = a^* \hat{A}^\dagger \quad (۶۲-۲)$$

$$(\hat{A}^n)^\dagger = (\hat{A}^\dagger)^n \quad (۶۳-۲)$$

$$(\hat{A} + \hat{B} + \hat{C} + \hat{D})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger + \hat{C}^\dagger + \hat{D}^\dagger \quad (۶۴-۲)$$

$$(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D})^\dagger = \hat{D}^\dagger \hat{C}^\dagger \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger \quad (۶۵-۲)$$

$$(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D}|\psi\rangle)^\dagger = \langle \psi | \hat{D}^\dagger \hat{C}^\dagger \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger \quad (۶۶-۲)$$

مزدوج هرمیتی عملگر  $|\psi\rangle\langle\phi|$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$(|\psi\rangle\langle\phi|)^\dagger = |\phi\rangle\langle\psi| \quad (۶۷-۲)$$

عملگرها به صورت زیر و به ترتیب درون کت‌ها و براها عمل می‌کنند:

$$|\alpha\hat{A}\psi\rangle = \alpha\hat{A}|\psi\rangle, \quad \langle\alpha\hat{A}\psi| = \alpha^*\langle\psi|\hat{A}^\dagger \quad (۶۸-۲)$$

همچنین توجه داشته باشید که  $\langle\alpha\hat{A}\psi| = \alpha^*\langle\psi|\hat{A}^\dagger$  از این رو می‌توانیم بنویسیم:

$$\langle\psi|\hat{A}|\phi\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\psi|\phi\rangle = \langle\psi|\hat{A}\phi\rangle \quad (۶۹-۲)$$

## عملگرهای هرمیتی و پادهرمیتی

به عملگر  $\hat{A}$  هرمیتی گفته می‌شود هرگاه این عملگر با عملگر الحاقی  $\hat{A}^\dagger$  خود برابر باشد:

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger \quad \text{یا} \quad \langle\psi|\hat{A}|\phi\rangle = \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle^* \quad (۷۰-۲)$$

از سوی دیگر، به عملگر  $\hat{B}$  پادهرمیتی گفته می‌شود هرگاه

$$\hat{B}^\dagger = -\hat{B} \quad \text{یا} \quad \langle\psi|\hat{B}|\phi\rangle = -\langle\phi|\hat{B}|\psi\rangle^* \quad (۷۱-۲)$$

## ملاحظات

به صورت کلی الحاقی هرمیتی یک عملگر با مزدوج مختلط آن عملگر برابر نیست:  $\hat{A}^\dagger \neq \hat{A}^*$ .

## مثال ۶-۲

(الف) درباره‌ی هرمیتی بودن عملگرهای  $(\hat{A} + \hat{A}^\dagger)$ ،  $i(\hat{A} + \hat{A}^\dagger)$  و  $i(\hat{A} - \hat{A}^\dagger)$  بحث کنید.

(ب) الحاقی هرمیتی  $f(\hat{A}) = (1 + i\hat{A} + 3\hat{A}^2)(1 - 2i\hat{A} - 9\hat{A}^2)/(5 + 7\hat{A})$  را بیابید.

(پ) نشان دهید که مقدار چشمداشتی یک عملگر هرمیتی حقیقی است و مقدار چشمداشتی یک عملگر پادهرمیتی موهومی است.

## حل

(الف) عملگر  $\hat{B} = \hat{A} + \hat{A}^\dagger$  صرف نظر از این که  $\hat{A}$  هرمیتی باشد یا خیر، هرمیتی است زیرا

$$\hat{B}^\dagger = (\hat{A} + \hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{A} = \hat{B} \quad (72-2)$$

به صورت مشابه، عملگر  $i(\hat{A} - \hat{A}^\dagger)$  نیز هرمیتی است ولی  $i(\hat{A} + \hat{A}^\dagger)$  پادهرمیتی است زیرا

$$[i(\hat{A} + \hat{A}^\dagger)]^\dagger = -i(\hat{A} + \hat{A}^\dagger)$$

(ب) چون الحاقی هرمیتی تابع عملگری  $f(\hat{A})$  از رابطه‌ی  $f^\dagger(\hat{A}) = f^*(\hat{A}^\dagger)$  به دست می‌آید، می‌توانیم بنویسیم:

$$\left( \frac{(1 + i\hat{A} + 3\hat{A}^2)(1 - 2i\hat{A} - 9\hat{A}^2)}{5 + 7\hat{A}} \right)^\dagger = \frac{(1 + 2i\hat{A}^\dagger - 9\hat{A}^{\dagger 2})(1 - i\hat{A}^\dagger + 3\hat{A}^{\dagger 2})}{5 + 7\hat{A}^\dagger} \quad (73-2)$$

(پ) از (۲-۷۰) بی‌درنگ نتیجه می‌گیریم که مقدار چشمداشتی یک عملگر هرمیتی حقیقی است زیرا در ویژگی زیر صدق می‌کند:

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^* \quad (74-2)$$

یعنی اگر  $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$  باشد آنگاه  $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$  حقیقی است. به صورت مشابه، برای یک عملگر پادهرمیتی داریم:  $\hat{B}^\dagger = -\hat{B}$

$$\langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle = -\langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle^* \quad (75-2)$$

که به این معنی است که  $\langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle$  یک عدد موهومی محض است.

## ۳-۴-۲ عملگرهای تصویر

به عملگر  $\hat{P}$  یک عملگر تصویر گفته می‌شود هرگاه این عملگر هرمیتی و برابر با مجذور خود باشد:

$$\hat{P}^\dagger = \hat{P}, \quad \hat{P}^2 = \hat{P} \quad (۷۶-۲)$$

عملگر یک‌ه‌ی  $\hat{I}$  مثال ساده‌ای از یک عملگر تصویر است زیرا  $\hat{I}^\dagger = \hat{I}$  و  $\hat{I}^2 = \hat{I}$ .

## ویژگی‌های عملگرهای تصویر

• ضرب عملگرهای تصویر جابه‌جاپذیر  $\hat{P}_1$  و  $\hat{P}_2$  نیز یک عملگر تصویر است زیرا

$$(\hat{P}_1 \hat{P}_2)^\dagger = \hat{P}_2^\dagger \hat{P}_1^\dagger = \hat{P}_2 \hat{P}_1 = \hat{P}_1 \hat{P}_2 \quad \text{و} \quad (\hat{P}_1 \hat{P}_2)^2 = \hat{P}_1 \hat{P}_2 \hat{P}_1 \hat{P}_2 \equiv \hat{P}_1^2 \hat{P}_2^2 = \hat{P}_1 \hat{P}_2 \quad (۷۷-۲)$$

- به صورت کلی، جمع دو عملگر تصویر یک عملگر تصویر نیست.
- به دو عملگر تصویر متعامد گفته می‌شود هرگاه ضرب آنها صفر باشد.
- برای این که جمع عملگرهای تصویر  $\hat{P}_1 + \hat{P}_2 + \hat{P}_3 + \dots$  یک عملگر تصویر باشد، لازم و کافی است که این عملگرها دو به دو متعامد باشند (یعنی جمله‌ی ضرب خارجی باید صفر شود).

## مثال ۷-۲

نشان دهید که عملگر  $|\psi\rangle\langle\psi|$  تنها زمانی یک عملگر تصویر است که  $|\psi\rangle$  بهنجار باشد.

حل

تحقیق این موضوع که عملگر  $|\psi\rangle\langle\psi|$  هرمیتی است، کار ساده‌ای است زیرا  $|\psi\rangle\langle\psi|^\dagger = |\psi\rangle\langle\psi|$ . در مورد مجذور این عملگر می‌توان نوشت:

$$(|\psi\rangle\langle\psi|)^2 = (|\psi\rangle\langle\psi|)(|\psi\rangle\langle\psi|) = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| \quad (۷۸-۲)$$

بنابراین اگر  $|\psi\rangle$  بهنجار باشد آنگاه داریم:  $|\psi\rangle\langle\psi| = (|\psi\rangle\langle\psi|)^2$ . در مجموع، اگر حالت  $|\psi\rangle$  بهنجار باشد آنگاه ضرب کت  $|\psi\rangle$  در برای  $\langle\psi|$  یک عملگر تصویر است.

## ۴-۴-۲ جبر جابه‌جاگر

جابه‌جاگر دو عملگر  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  که با  $[\hat{A}, \hat{B}]$  نمایش داده می‌شود، به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (۷۹-۲)$$

و پادجابیه جاگر  $\{\hat{A}, \hat{B}\}$  به صورت زیر تعریف می شود:

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} \quad (۸۰-۲)$$

به دو عملگر جابه‌جاپذیر گفته می‌شود هرگاه جابه‌جاگر آنها برابر با صفر باشد و از این رو  $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$  است. هر عملگری با خودش جابه‌جا می‌شود:

$$[\hat{A}, \hat{A}] = 0 \quad (۸۱-۲)$$

توجه داشته باشید که اگر دو عملگر هرمیتی باشند و ضرب آنها نیز هرمیتی باشد آنگاه این دو عملگر جابه‌جا می‌شوند:

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger = \hat{B}\hat{A} \quad (۸۲-۲)$$

و چون  $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{A}\hat{B}$ ، داریم:  $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ .

به عنوان یک مثال، جابه‌جاگرهای شامل عملگر مکان  $x$  ( $\hat{X}$ ) و مؤلفه‌ی  $x$  عملگر تکانه  $(\hat{P}_x = -i\hbar\partial/\partial x)$  و همچنین مؤلفه‌های  $y$  و  $z$  را یادآوری می‌کنیم:

$$[\hat{X}, \hat{P}_x] = i\hbar\hat{I}, \quad [\hat{Y}, \hat{P}_y] = i\hbar\hat{I}, \quad [\hat{Z}, \hat{P}_z] = i\hbar\hat{I} \quad (۸۳-۲)$$

که در آن  $\hat{I}$  عملگر یکه است.

### ویژگی جابه‌جاگرها

با استفاده از رابطه‌ی جابه‌جاگر (۷۹-۲) می‌توانیم ویژگی‌های زیر را برقرار کنیم:

- پادتقارن:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}] \quad (۸۴-۲)$$

- خطی بودن:

$$[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C} + \hat{D} + \dots] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{D}] + \dots \quad (۸۵-۲)$$

- مزدوج هرمیتی یک جابه‌جاگر:

$$[\hat{A}, \hat{B}]^\dagger = [\hat{B}^\dagger, \hat{A}^\dagger] \quad (۸۶-۲)$$

• توزیع پذیری:

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \quad (۸۷-۲)$$

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} \quad (۸۸-۲)$$

• اتحاد ژاکوبی:

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0 \quad (۸۹-۲)$$

• با تکرار (۸۷-۲) می‌توانیم نشان دهیم:

$$[\hat{A}, \hat{B}^n] = \sum_{j=0}^{n-1} \hat{B}^j [\hat{A}, \hat{B}] \hat{B}^{n-j-1} \quad (۹۰-۲)$$

$$[\hat{A}^n, \hat{B}] = \sum_{j=0}^{n-1} \hat{A}^{n-j-1} [\hat{A}, \hat{B}] \hat{A}^j \quad (۹۱-۲)$$

• عملگرها با نرده‌ها جابه‌جا می‌شوند: عملگر  $\hat{A}$  با هر نرده‌ی  $b$  جابه‌جا می‌شود:

$$[\hat{A}, b] = 0 \quad (۹۲-۲)$$

### مثال ۸-۲

(الف) نشان دهید که جابه‌جاگر دو عملگر هرمیتی یک عملگر پادهرمیتی است.

(ب) جابه‌جاگر  $[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]\hat{D}]$  را حساب کنید.

حل

(الف) اگر  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  هرمیتی باشند آنگاه می‌توانیم بنویسیم:

$$[\hat{A}, \hat{B}]^\dagger = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger - \hat{A}^\dagger \hat{B}^\dagger = \hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B} = -[\hat{A}, \hat{B}] \quad (۹۳-۲)$$

یعنی جابه‌جاگر  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  پادهرمیتی است:  $[\hat{A}, \hat{B}]^\dagger = -[\hat{A}, \hat{B}]$ .

(ب) با استفاده از رابطه‌ی توزیع‌پذیری (۸۷-۲) داریم:

$$\begin{aligned} [\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]\hat{D}] &= [\hat{B}, \hat{C}][\hat{A}, \hat{D}] + [\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]]\hat{D} \\ &= (\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{B})(\hat{A}\hat{D} - \hat{D}\hat{A}) + \hat{A}(\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{B})\hat{D} - (\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{B})\hat{A}\hat{D} \\ &= \hat{C}\hat{B}\hat{D}\hat{A} - \hat{B}\hat{C}\hat{D}\hat{A} + \hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D} - \hat{A}\hat{C}\hat{B}\hat{D} \end{aligned}$$

(۹۴-۲)

## ۵-۴-۲ رابطه‌ی عدم قطعیت بین دو عملگر

یک کاربرد جالب جبر جابه‌جاگری به‌دست آوردن یک رابطه‌ی کلی است که ضرب عدم قطعیت‌های دو عملگر  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  را به‌دست می‌دهد. به‌خصوص می‌خواهیم استخراج صوری رابطه‌های عدم قطعیت هایزنبرگ را ارائه کنیم.

فرض کنید  $\langle \hat{A} \rangle$  و  $\langle \hat{B} \rangle$  مقدارهای چشمداشتی دو عملگر هرمیتی  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  نسبت به بردار حالت بهنجار  $|\psi\rangle$  باشند:  $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$  و  $\langle \hat{B} \rangle = \langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle$ . با معرفی عملگرهای  $\Delta \hat{A}$  و  $\Delta \hat{B}$ :

$$\Delta \hat{A} = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle, \quad \Delta \hat{B} = \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle \quad (۹۵-۲)$$

داریم:  $\langle \hat{A} \rangle^2 = \hat{A}^2 - 2\hat{A}\langle \hat{A} \rangle + \langle \hat{A} \rangle^2$  و  $\langle \Delta \hat{A} \rangle^2 = \hat{B}^2 - 2\hat{B}\langle \hat{B} \rangle + \langle \hat{B} \rangle^2$  و ازاین‌رو

$$\langle \psi | (\Delta \hat{A})^2 | \psi \rangle = \langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2, \quad \langle (\Delta \hat{B})^2 \rangle = \langle \hat{B}^2 \rangle - \langle \hat{B} \rangle^2 \quad (۹۶-۲)$$

که در آن  $\langle \hat{A}^2 \rangle = \langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle$  و  $\langle \hat{B}^2 \rangle = \langle \psi | \hat{B}^2 | \psi \rangle$  است. عدم قطعیت‌های  $\Delta A$  و  $\Delta B$  به‌صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\Delta A = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2}, \quad \Delta B = \sqrt{\langle \hat{B}^2 \rangle - \langle \hat{B} \rangle^2} \quad (۹۷-۲)$$

که در آن  $\langle \hat{A}^2 \rangle = \langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle$  و  $\langle \hat{B}^2 \rangle = \langle \psi | \hat{B}^2 | \psi \rangle$ .

بیاید اثر عملگرهای (۹۵-۲) را روی هر حالت  $|\psi\rangle$  به‌صورت زیر بنویسیم:

$$|\chi\rangle = \Delta \hat{A} |\psi\rangle = (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) |\psi\rangle, \quad |\phi\rangle = \Delta \hat{B} |\psi\rangle = (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) |\psi\rangle \quad (۹۸-۲)$$

نامساوی شوارتز برای حالت‌های  $|\chi\rangle$  و  $|\phi\rangle$  از رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آید:

$$\langle \chi | \chi \rangle \langle \phi | \phi \rangle \geq |\langle \chi | \phi \rangle|^2 \quad (۹۹-۲)$$

چون  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  هرمیتی‌اند،  $\Delta \hat{A}$  و  $\Delta \hat{B}$  نیز باید هرمیتی باشند:  $\Delta \hat{A}^\dagger = \hat{A}^\dagger - \langle \hat{A} \rangle = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle = \Delta \hat{A}$  و  $\Delta \hat{B}^\dagger = \hat{B}^\dagger - \langle \hat{B} \rangle = \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle = \Delta \hat{B}$  بنابراین می‌توانیم سه رابطه‌ی زیر را نشان دهیم:

$$\langle \chi | \chi \rangle = \langle \psi | (\Delta \hat{A})^2 | \psi \rangle, \quad \langle \phi | \phi \rangle = \langle \psi | (\Delta \hat{B})^2 | \psi \rangle, \quad \langle \chi | \phi \rangle = \langle \psi | \Delta \hat{A} \Delta \hat{B} | \psi \rangle \quad (۱۰۰-۲)$$

به‌عنوان مثال، چون  $\Delta \hat{A}^\dagger = \Delta \hat{A}$  است، داریم:  $\langle \chi | \chi \rangle = \langle \psi | \Delta \hat{A}^\dagger \Delta \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | (\Delta \hat{A})^2 | \psi \rangle$ . ازاین‌رو نامساوی شوارتز (۹۹-۲) به‌صورت زیر در می‌آید:

$$\langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle \langle (\Delta \hat{B})^2 \rangle \geq |\langle \Delta \hat{A} \Delta \hat{B} \rangle|^2 \quad (۱۰۱-۲)$$



توجه کنید که جمله‌ی آخر  $\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}$  این معادله را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} = \frac{1}{2}[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] + \frac{1}{2}\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\} = \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2}\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\} \quad (102-2)$$

که در آن از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که  $[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] = [\hat{A}, \hat{B}]$  است. چون  $[\hat{A}, \hat{B}]$  پادهرمیتی و  $\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\}$  هرمیتی است و با توجه به این که مقدار چشمداشتی یک عملگر هرمیتی حقیقی و مقدار چشمداشتی یک عملگر پادهرمیتی موهومی است (مثال ۲-۶ را ببینید)، مقدار چشمداشتی  $\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\rangle$  رابطه‌ی (۱۰۲-۲) برابر با مجموع یک قسمت حقیقی  $\langle\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\}\rangle/2$  و یک قسمت موهومی  $\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle/2$  است و از این رو

$$\left|\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\rangle\right|^2 = \frac{1}{4}\left|\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle\right|^2 + \frac{1}{4}\left|\langle\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\}\rangle\right|^2 \quad (103-2)$$

چون جمله‌ی آخر یک عدد حقیقی مثبت است، می‌توانیم رابطه‌ی زیر را نتیجه بگیریم:

$$\left|\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\rangle\right|^2 \geq \frac{1}{4}\left|\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle\right|^2 \quad (104-2)$$

با مقایسه‌ی معادله‌های (۱۰۱-۲) و (۱۰۴-۲) نتیجه می‌گیریم که

$$\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle\langle(\Delta\hat{B})^2\rangle \geq \frac{1}{4}\left|\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle\right|^2 \quad (105-2)$$

که (با جذرگرفتن از آن) می‌توان آن را به رابطه‌ی زیر کاهش داد:

$$\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} \geq \frac{1}{2}|\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle| \quad (106-2)$$

این رابطه‌ی عدم قطعیت نقش مهمی در صورت‌بندی مکانیک کوانتومی بازی می‌کند. اعمال این رابطه بر عملگرهای مکان و تکانه، به رابطه‌های عدم قطعیت هایزنبرگ می‌انجامد که یکی از پایه‌های مکانیک کوانتومی است. مثال زیر را ببینید.

### مثال ۲-۹ (رابطه‌های عدم قطعیت هایزنبرگ)

رابطه‌های عدم قطعیت بین مؤلفه‌های عملگرهای مکان و تکانه را بیابید.

حل

با اعمال (۱۰۶-۲) بر مؤلفه‌های  $x$  عملگر مکان  $\hat{X}$  و عملگر تکانه  $\hat{P}_x$ ، رابطه‌ی  $\Delta x \Delta p_x \geq$  را بدست می‌آوریم. اما چون  $[\hat{X}, \hat{P}_x] = i\hbar\hat{I}$  است، داریم:  $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$ .

رابطه‌های عدم قطعیت برای مؤلفه‌های  $y$  و  $z$  بی‌درنگ نتیجه می‌شوند:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2} \quad (107-2)$$

که رابطه‌های عدم قطعیت هایزنبرگ هستند.

### ۶-۴-۲ تابع‌های عملگرها

فرض کنید  $F(\hat{A})$  تابعی از عملگر  $\hat{A}$  باشد. اگر  $\hat{A}$  یک عملگر خطی باشد آنگاه می‌توانیم  $F(\hat{A})$  را برحسب سری توانی  $\hat{A}$  بسط تیلور دهیم:

$$F(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \hat{A}^n \quad (108-2)$$

که در آن  $a_n$  ضریب بسط است. به عنوان مثالی از تابع عملگر،  $e^{a\hat{A}}$  را در نظر بگیرید که در آن  $a$  یک نرده است که می‌تواند حقیقی یا مختلط باشد. می‌توانیم این تابع را به صورت زیر بسط دهیم:

$$e^{a\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n}{n!} \hat{A}^n = \hat{I} + a\hat{A} + \frac{a^2}{2!} \hat{A}^2 + \frac{a^3}{3!} \hat{A}^3 + \dots \quad (109-2)$$

### جابه‌جاگرهای شامل عملگرهای تابعی

اگر عملگر  $\hat{A}$  با عملگر دیگر  $\hat{B}$  جابه‌جا شود آنگاه  $\hat{B}$  با هر تابع عملگری که به  $\hat{A}$  بستگی داشته باشد، جابه‌جا می‌شود:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \quad \implies \quad [\hat{B}, F(\hat{A})] = 0 \quad (110-2)$$

به خصوص،  $F(\hat{A})$  با  $\hat{A}$  و هر تابع دیگر  $G(\hat{A})$  بی‌از  $\hat{A}$  جابه‌جا می‌شود:

$$[\hat{A}, F(\hat{A})] = 0, \quad [\hat{A}^n, F(\hat{A})] = 0, \quad [F(\hat{A}), G(\hat{A})] = 0 \quad (111-2)$$

### الحاقی هرمیتی عملگرهای تابعی

الحاقی تابع  $F(\hat{A})$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$[F(\hat{A})]^\dagger = F^*(\hat{A}^\dagger) \quad (112-2)$$

توجه کنید که اگر  $\hat{A}$  هرمیتی باشد آنگاه  $F(\hat{A})$  الزماً هرمیتی نیست.  $F(\hat{A})$  تنها زمانی هرمیتی خواهد بود که  $F$  تابعی حقیقی و  $\hat{A}$  هرمیتی باشد. یک مثال

$$(e^{\hat{A}})^\dagger = e^{\hat{A}^\dagger}, \quad (e^{i\hat{A}})^\dagger = e^{-i\hat{A}^\dagger} \quad \text{و} \quad (e^{i\alpha\hat{A}})^\dagger = e^{-i\alpha^*\hat{A}^\dagger} \quad (۱۱۳-۲)$$

است که در آن  $\alpha$  یک عدد مختلط است. بنابراین اگر  $\hat{A}$  هرمیتی باشد آنگاه تابع عملگری که بتوان آن را به صورت  $F(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \hat{A}^n$  بسط داد تنها زمانی هرمیتی خواهد بود که ضریب‌های بسط  $a$  عددهایی حقیقی باشند. اما به صورت کلی حتی زمانی که  $\hat{A}$  هرمیتی باشد،  $F(\hat{A})$  هرمیتی نیست زیرا

$$F^*(\hat{A}^\dagger) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n^* (\hat{A}^\dagger)^n \quad (۱۱۴-۲)$$

رابطه‌های شامل عملگرهای تابعی

توجه داشته باشید که

$$[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0 \quad \Rightarrow \quad [\hat{B}, F(\hat{A})] \neq 0 \quad (۱۱۵-۲)$$

به خصوص  $e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} \neq e^{\hat{A}+\hat{B}}$ . با استفاده از (۱۰۹-۲) می‌توانیم تحقیق کنیم که

$$e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} = e^{\hat{A}+\hat{B}} e^{[\hat{A}, \hat{B}]/2} \quad (۱۱۶-۲)$$

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{1}{3!}[\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots \quad (۱۱۷-۲)$$

۷-۴-۲ عملگرهای وارون و یکانی

وارون یک عملگر: با فرض وجود<sup>۶</sup>، وارون  $\hat{A}^{-1}$  عملگر خطی  $\hat{A}$  با رابطه‌ی زیر تعریف می‌شود:

$$\hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{A}\hat{A}^{-1} = \hat{I} \quad (۱۱۸-۲)$$

که در آن  $\hat{I}$  عملگر یکه است (عملگری که حالتی مانند  $|\psi\rangle$  را بدون تغییر باقی می‌گذارد).

خارج قسمت دو عملگر: با تقسیم عملگر  $\hat{A}$  بر عملگر دیگر  $\hat{B}$  (به شرط آن که وارون  $\hat{B}^{-1}$  وجود داشته باشد) معادل با ضرب  $\hat{A}$  در  $\hat{B}^{-1}$  است:

$$\frac{\hat{A}}{\hat{B}} = \hat{A}\hat{B}^{-1} \quad (۱۱۹-۲)$$

۶. مانند ماتریس‌ها، همه‌ی عملگرها دارای وارون نیستند. وارون یک ماتریس تنها زمانی وجود دارد که دترمینان آن غیرصفر باشد.

طرفی که خارج قسمت گرفته می‌شود، اهمیت دارد:

$$\frac{\hat{A}}{\hat{B}} = \hat{A} \frac{\hat{I}}{\hat{B}} = \hat{A} \hat{B}^{-1} \quad \text{و} \quad \frac{\hat{I}}{\hat{B}} \hat{A} = \hat{B}^{-1} \hat{A} \quad (۱۲۰-۲)$$

به صورت کلی، داریم:  $\hat{A} \hat{B}^{-1} \neq \hat{B}^{-1} \hat{A}$ . به عنوان مثالی از این ایده‌ها، مسأله‌ی حل شده‌ی ۱۲-۲ را ببینید. در اینجا می‌توانیم ویژگی‌های زیر را پیرامون وارون عملگرها یادآوری کنیم:

$$(\hat{A} \hat{B} \hat{C} \hat{D})^{-1} = \hat{D}^{-1} \hat{C}^{-1} \hat{B}^{-1} \hat{A}^{-1}, \quad (\hat{A}^n)^{-1} = (\hat{A}^{-1})^n \quad (۱۲۱-۲)$$

عملگرهای یکانی: به عملگر  $\hat{U}$  یکانی گفته می‌شود هرگاه وارون  $\hat{U}^{-1}$  آن برابر الحاقی  $\hat{U}^\dagger$  آن باشد  
یا  $(\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1})$

$$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1} \quad \text{یا} \quad \hat{U} \hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{I} \quad (۱۲۲-۲)$$

ضرب دو عملگر یکانی نیز یکانی است زیرا

$$(\hat{U} \hat{V})(\hat{U} \hat{V})^\dagger = (\hat{U} \hat{V})(\hat{U}^\dagger \hat{V}^\dagger) = \hat{U}(\hat{V} \hat{V}^\dagger) \hat{U}^\dagger = \hat{U} \hat{U}^\dagger = \hat{I} \quad (۱۲۳-۲)$$

یا  $(\hat{U} \hat{V})^\dagger = (\hat{U} \hat{V})^{-1}$ . می‌توان این نتیجه را به هر تعداد عملگر تعمیم داد. ضرب تعدادی از عملگرهای یکانی نیز یکانی است:

$$\begin{aligned} (\hat{A} \hat{B} \hat{C} \hat{D} \dots)(\hat{A} \hat{B} \hat{C} \hat{D} \dots)^\dagger &= \hat{A} \hat{B} \hat{C} \hat{D} (\dots) \hat{D}^\dagger \hat{C}^\dagger \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger = \hat{A} \hat{B} \hat{C} (\hat{D} \hat{D}^\dagger) \hat{C}^\dagger \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger \\ &= \hat{A} \hat{B} (\hat{C} \hat{C}^\dagger) \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger = \hat{A} (\hat{B} \hat{B}^\dagger) \hat{A}^\dagger \\ &= \hat{A} \hat{A}^\dagger = \hat{I} \end{aligned} \quad (۱۲۴-۲)$$

$$(\hat{A} \hat{B} \hat{C} \hat{D} \dots)^\dagger = (\hat{A} \hat{B} \hat{C} \hat{D} \dots)^{-1} \quad \text{یا}$$

### مثال ۱۰-۲ (عملگر یکانی)

پارامتر  $\varepsilon$  و عملگر  $\hat{G}$  چه شرایطی باید داشته باشند تا عملگر  $\hat{U} = e^{i\varepsilon \hat{G}}$  یکانی باشد.

حل

واضح است که هرگاه  $\varepsilon$  حقیقی و  $\hat{G}$  هرمیتی باشد آنگاه عملگر  $e^{i\varepsilon \hat{G}}$  یکانی خواهد بود. با استفاده از

$$\text{ویژگی} \quad [F(\hat{A})]^\dagger = F^*(\hat{A}^\dagger) \quad \text{می‌بینیم که}$$

$$(e^{i\varepsilon \hat{G}})^\dagger = e^{-i\varepsilon \hat{G}} = (e^{i\varepsilon \hat{G}})^{-1} \quad (۱۲۵-۲)$$

یعنی  $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$  است.

## ۸-۴-۲ ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای یک عملگر

پس از مطالعه‌ی ویژگی‌های عملگرها و حالت‌ها، اکنون آماده‌ایم که روی چگونگی یافتن ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای یک عملگر بحث کنیم.

به بردار حالت  $|\psi\rangle$  ویژه‌بردار (همچنین ویژه‌کت یا ویژه‌حالت) عملگر  $\hat{A}$  گفته می‌شود هرگاه عملگر  $\hat{A}$  بر  $|\psi\rangle$  اعمال شود معادله‌ی زیر را به دست دهد:

$$\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle \quad (۱۲۶-۲)$$

که در آن  $a$  یک عدد مختلط است و ویژه‌مقدار  $\hat{A}$  نامیده می‌شود. این معادله به عنوان معادله‌ی ویژه‌مقدار (یا مسأله‌ی ویژه‌مقدار) عملگر  $\hat{A}$  شناخته می‌شود. جواب‌های این معادله، ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای  $\hat{A}$  را نتیجه می‌دهند. در بخش ۲-۵-۳ خواهیم دید که چگونه مسأله‌ی ویژه‌مقدار را در یک پایه‌ی گسسته حل کنیم.

یک مثال ساده، مسأله‌ی ویژه‌مقدار مربوط به عملگر یک‌ه‌ی  $\hat{I}$  است:

$$\hat{I}|\psi\rangle = |\psi\rangle \quad (۱۲۷-۲)$$

این بدان معنی است که تمام بردارها، ویژه‌بردارهای  $\hat{I}$  با ویژه‌مقدار ۱ هستند. توجه داشته باشید که

$$\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle \implies \hat{A}^n|\psi\rangle = a^n|\psi\rangle \quad \text{و} \quad F(\hat{A})|\psi\rangle = F(a)|\psi\rangle \quad (۱۲۸-۲)$$

به عنوان مثال داریم:

$$\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle \implies e^{i\hat{A}}|\psi\rangle = e^{ia}|\psi\rangle \quad (۱۲۹-۲)$$

## مثال ۱۱-۲ (ویژه‌مقدارهای وارون یک عملگر)

نشان دهید که اگر  $\hat{A}^{-1}$  وجود داشته باشد آنگاه ویژه‌مقدارهای  $\hat{A}^{-1}$  وارون ویژه‌مقدارهای  $\hat{A}$  هستند.

حل

چون  $\hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{I}$  است، از یک سو داریم:

$$\hat{A}^{-1}\hat{A}|\psi\rangle = |\psi\rangle \quad (۱۳۰-۲)$$

و از سوی دیگر داریم:

$$\hat{A}^{-1}\hat{A}|\psi\rangle = \hat{A}^{-1}(\hat{A}|\psi\rangle) = a\hat{A}^{-1}|\psi\rangle \quad (۱۳۱-۲)$$

با ترکیب دو معادله‌ی قبل به دست می‌آوریم:

$$a\hat{A}^{-1}|\psi\rangle = |\psi\rangle \quad (۱۳۲-۲)$$

و از این رو

$$\hat{A}^{-1}|\psi\rangle = \frac{1}{a}|\psi\rangle \quad (۱۳۳-۲)$$

این بدان معنی است که  $|\psi\rangle$  نیز یک ویژه بردار  $\hat{A}^{-1}$  با ویژه مقدار  $1/a$  است. یعنی اگر  $\hat{A}^{-1}$  وجود داشته باشد آنگاه

$$\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle \implies \hat{A}^{-1}|\psi\rangle = \frac{1}{a}|\psi\rangle \quad (۱۳۴-۲)$$

تعدادی قضیه‌ی مفید، مربوط به مسأله‌ی ویژه مقداری

قضیه‌ی ۱-۲ به ازای هر عملگر هرمیتی، همه‌ی ویژه مقدارهای آن حقیقی‌اند و ویژه بردارهای متناظر با ویژه مقدارهای متفاوت متعامند.

$$\text{اگر } \hat{A}^\dagger = \hat{A}, \quad \hat{A}|\phi_n\rangle = a_n|\phi_n\rangle \implies a_n = \text{عدد حقیقی و } \langle\phi_m|\phi_n\rangle = \delta_{mn} \quad (۱۳۵-۲)$$

اثبات قضیه‌ی ۱-۲

توجه داشته باشید که

$$\hat{A}|\phi_n\rangle = a_n|\phi_n\rangle \implies \langle\phi_m|\hat{A}|\phi_n\rangle = a_n\langle\phi_m|\phi_n\rangle \quad (۱۳۶-۲)$$

و

$$\langle\phi_m|\hat{A}^\dagger = a_m^*\langle\phi_m| \implies \langle\phi_m|\hat{A}^\dagger|\phi_n\rangle = a_m^*\langle\phi_m|\phi_n\rangle \quad (۱۳۷-۲)$$

با کم کردن (۱۳۷-۲) از (۱۳۶-۲) و استفاده از این واقعیت که  $\hat{A}$  هرمیتی است ( $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ ) داریم:

$$(a_n - a_m^*)\langle\phi_m|\phi_n\rangle = 0 \quad (۱۳۸-۲)$$

دو مورد را باید جداگانه در نظر گرفت:

- حالت  $m = n$ : چون  $\langle\phi_n|\phi_n\rangle > 0$  است، باید داشته باشیم:  $a_n = a_n^*$  و از این رو باید ویژه مقدارهای  $a_n$  حقیقی باشند.

• حالت  $m \neq n$ : چون به صورت کلی  $a_n \neq a_m^*$  است، باید داشته باشیم:  $\langle \phi_m | \phi_n \rangle = 0$  یعنی باید  $|\phi_m\rangle$  و  $|\phi_n\rangle$  متعامد باشند.

**قضیه ۲-۲** ویژه‌مقدارهای یک عملگر هرمیتی مجموعه‌ای کامل از حالت‌های پایه‌ی دو به دو متعامد بهنجار را تعریف می‌کنند. عملگر در این ویژه‌پایه قطری است و عنصرهای قطری آن برابر با ویژه‌مقدارها هستند. این مجموعه از پایه‌ها منحصر به فرد است هرگاه عملگر، ویژه‌مقدارهای واگن نداشته باشد و منحصر به فرد نیست (در واقع نامتناهی است) هرگاه واگنی وجود داشته باشد.

**قضیه ۳-۲** هرگاه دو عملگر هرمیتی  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  جابه‌جا شوند و هرگاه  $\hat{A}$  ویژه‌مقدار واگن نداشته باشد آنگاه هر ویژه‌بردار  $\hat{A}$  ویژه‌بردار  $\hat{B}$  نیز است. علاوه بر این می‌توانیم یک پایه‌ی متعامد بهنجار مشترک بسازیم که از ویژه‌بردارهای مشترک  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  ساخته شده باشد.

**اثبات قضیه ۳-۲**

چون  $\hat{A}$  هرمیتی است و ویژه‌مقدار واگنی ندارد، برای هر ویژه‌مقدار  $\hat{A}$  تنها یک ویژه‌بردار متناظر وجود دارد. معادله‌ی

$$\hat{A}|\phi_n\rangle = a_n|\phi_n\rangle \quad (۱۳۹-۲)$$

را در نظر بگیرید. چون  $\hat{A}$  با  $\hat{B}$  جابه‌جا می‌شود، می‌توانیم بنویسیم:

$$\hat{B}\hat{A}|\phi_n\rangle = \hat{A}\hat{B}|\phi_n\rangle \quad \text{یا} \quad \hat{A}(\hat{B}|\phi_n\rangle) = a_n(\hat{B}|\phi_n\rangle) \quad (۱۴۰-۲)$$

یعنی  $(\hat{B}|\phi_n\rangle)$  یک ویژه‌بردار  $\hat{A}$  با ویژه‌مقدار  $a_n$  است. ولی چون این ویژه‌بردار (جدای از یک ثابت فاز دلخواه) منحصر به فرد است، کت  $|\phi_n\rangle$  نیز باید یک ویژه‌بردار  $\hat{B}$  باشد:

$$\hat{B}|\phi_n\rangle = b_n|\phi_n\rangle \quad (۱۴۱-۲)$$

چون هر ویژه‌بردار  $\hat{A}$  یک ویژه‌بردار  $\hat{B}$  نیز هست (و برعکس)، هر دو عملگر باید یک پایه‌ی مشترک داشته باشند. این پایه منحصر به فرد است و از ویژه‌بردارهای مشترک  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  ساخته شده است. این قضیه برای هر تعداد از عملگرهای هرمیتی که دو به دو جابه‌جا می‌شوند نیز برقرار است.

حال اگر  $a_n$  یک ویژه‌مقدار واگن باشد آنگاه تنها می‌توانیم بگوییم که  $\hat{B}|\phi_n\rangle$  یک ویژه‌بردار  $\hat{A}$  با ویژه‌مقدار  $a_n$  است و  $|\phi_n\rangle$  الزاماً یک ویژه‌بردار  $\hat{B}$  نیست. اگر یکی از عملگرها واگن باشد آنگاه تعدادی نامتناهی از مجموعه‌های پایه‌ی متعامد بهنجار وجود دارند که نسبت به این دو عملگر مشترک‌اند. یعنی پایه‌ی مشترک وجود دارد و منحصر به فرد نیست.

**قضیه ۴-۲** ویژه‌مقدارهای یک عملگر پادهرمیتی، موهومی محض یا برابر با صفرند.

قضیه ۵-۲ ویژه مقدارهای یک عملگر یکانی عددهای مختلطی هستند که اندازه‌ی آنها برابر با یک است. ویژه بردارهای یک عملگر یکانی که ویژه مقدارهای واگن ندارد، دو به دو متعامدند.

### اثبات قضیه ۵-۲

فرض کنید  $|\phi_m\rangle$  و  $|\phi_n\rangle$  ویژه بردارهای عملگر یکانی  $\hat{U}$  به ترتیب با ویژه مقدارهای  $a_m$  و  $a_n$  باشند. می‌توانیم بنویسیم:

$$(\langle\phi_m|\hat{U}^\dagger)(\hat{U}|\phi_n\rangle) = a_m^* a_n \langle\phi_m|\phi_n\rangle \quad (۱۴۲-۲)$$

چون  $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{I}$  است، می‌توان این معادله را به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$(a_m^* a_n - 1) \langle\phi_m|\phi_n\rangle = 0 \quad (۱۴۳-۲)$$

که به نوبه‌ی خود به دو حالت زیر می‌انجامد:

- حالت  $n = m$ : چون  $\langle\phi_n|\phi_n\rangle > 0$  است آنگاه  $a_n^* a_n = |a_n|^2 = 1$  و از این رو  $|a_n| = 1$  است.

- حالت  $n \neq m$ : تنها امکان برای این حالت این است که  $|\phi_n\rangle$  و  $|\phi_m\rangle$  متعامد باشند  $(\langle\phi_m|\phi_n\rangle = 0)$ .

### ۹-۴-۲ تبدیل‌های یکانی بی‌نهایت کوچک و متناهی

در اینجا می‌خواهیم ببینیم که چگونه کمیت‌هایی مانند کت‌ها، براها، عملگرها و نرده‌ها تحت تبدیل‌های یکانی تبدیل می‌شوند. یک تبدیل یکانی، اعمال عملگر یکانی  $\hat{U}$  بر یکی از این کمیت‌ها است.

#### ۱-۹-۴-۲ تبدیل‌های یکانی

کت‌های  $|\psi\rangle$  و براهای  $\langle\psi|$  به صورت زیر تبدیل می‌شوند:

$$|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle, \quad \langle\psi'| = \langle\psi|\hat{U}^\dagger \quad (۱۴۴-۲)$$

حال بیابید ببینیم که چگونه عملگرها تحت تبدیل‌های یکانی تبدیل می‌شوند. چون تبدیل  $\hat{A}|\psi\rangle = |\phi\rangle$  برابر با  $\hat{A}'|\psi'\rangle = |\phi'\rangle$  است، می‌توانیم  $\hat{A}'|\psi'\rangle = |\phi'\rangle$  را به صورت  $\hat{A}'\hat{U}|\psi\rangle = \hat{U}\hat{A}|\psi\rangle$  بازنویسی کنیم که به نوبه‌ی خود به  $\hat{A}'\hat{U} = \hat{U}\hat{A}$  می‌انجامد. با ضرب دو طرف  $\hat{A}'\hat{U} = \hat{U}\hat{A}$  در  $\hat{U}^\dagger$  و با توجه به این که  $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{I}$  است، داریم:

$$\hat{A}' = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger, \quad \hat{A} = \hat{U}^\dagger\hat{A}'\hat{U} \quad (۱۴۵-۲)$$



می‌توان نتیجه‌های به‌دست آمده در (۲-۱۴۴) و (۲-۱۴۵) را به‌صورت زیر خلاصه کرد:

$$|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle, \quad \langle\psi'| = \langle\psi|\hat{U}^\dagger, \quad \hat{A}' = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger \quad (۱۴۶-۲)$$

$$|\psi\rangle = \hat{U}^\dagger|\psi'\rangle, \quad \langle\psi| = \langle\psi'|\hat{U}, \quad \hat{A} = \hat{U}^\dagger\hat{A}'\hat{U} \quad (۱۴۷-۲)$$

### ویژگی تبدیل‌های یکانی

• هرگاه عملگر  $\hat{A}$  هرمیتی باشد آنگاه تبدیل یافته‌ی  $\hat{A}'$  آن نیز هرمیتی است زیرا

$$\hat{A}'^\dagger = (\hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger)^\dagger = \hat{U}\hat{A}^\dagger\hat{U}^\dagger \equiv \hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger = \hat{A}' \quad (۱۴۸-۲)$$

• ویژه‌مقدارهای  $\hat{A}$  و ویژه‌مقدارهای تبدیل یافته‌ی  $\hat{A}'$  آن یکسان‌اند:

$$\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle \quad \Longrightarrow \quad \hat{A}'|\psi'_n\rangle = a_n|\psi'_n\rangle \quad (۱۴۹-۲)$$

زیرا

$$\begin{aligned} \hat{A}'|\psi'_n\rangle &= (\hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger)(\hat{U}|\psi_n\rangle) = \hat{U}\hat{A}(\hat{U}^\dagger\hat{U})|\psi_n\rangle \\ &= \hat{U}\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n(\hat{U}|\psi_n\rangle) \end{aligned} \quad (۱۵۰-۲)$$

• جابه‌جاگرهایی که برابر با عدد (های مختلط) هستند، تحت تبدیل‌های یکانی بدون تغییر باقی می‌مانند زیرا تبدیل  $[\hat{A}, \hat{B}] = a$  که در آن  $a$  یک عدد مختلط است، از رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آید:

$$\begin{aligned} [\hat{A}', \hat{B}'] &= [\hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger, \hat{U}\hat{B}\hat{U}^\dagger] = (\hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger)(\hat{U}\hat{B}\hat{U}^\dagger) - (\hat{U}\hat{B}\hat{U}^\dagger)(\hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger) \\ &= \hat{U}[\hat{A}, \hat{B}]\hat{U}^\dagger = \hat{U}a\hat{U}^\dagger = a\hat{U}\hat{U}^\dagger = a \\ &= [\hat{A}, \hat{B}] \end{aligned} \quad (۱۵۱-۲)$$

• می‌توانیم رابطه‌های کلی زیر را نیز نشان دهیم:

$$\hat{A} = \beta\hat{B} + \gamma\hat{C} \quad \Longrightarrow \quad \hat{A}' = \beta\hat{B}' + \gamma\hat{C}' \quad (۱۵۲-۲)$$

$$\hat{A} = \alpha\hat{B}\hat{C}\hat{D} \quad \Longrightarrow \quad \hat{A}' = \alpha\hat{B}'\hat{C}'\hat{D}' \quad (۱۵۳-۲)$$

که در آنها  $\hat{A}'$ ،  $\hat{B}'$ ،  $\hat{C}'$  و  $\hat{D}'$  به ترتیب تبدیل‌های  $\hat{A}$ ،  $\hat{B}$ ،  $\hat{C}$  و  $\hat{D}$  هستند.

- چون نتیجه‌ی (۲-۱۵۱) برای هر عدد مختلطی معتبر است، می‌توانیم بگوییم که عددهای مختلطی مانند  $\langle \psi | \hat{A} | \chi \rangle$  تحت تبدیل‌های یکانی بدون تغییر باقی می‌مانند زیرا

$$\langle \psi' | \hat{A}' | \chi' \rangle = (\langle \psi | \hat{U}^\dagger) (\hat{U} \hat{A} \hat{U}^\dagger) (\hat{U} | \chi \rangle) = \langle \psi | (\hat{U}^\dagger \hat{U}) \hat{A} (\hat{U}^\dagger \hat{U}) | \chi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \chi \rangle \quad (۲-۱۵۴)$$

با در نظر گرفتن  $\hat{A}' = \hat{I} \hat{A}$  می‌بینیم که ضرب‌های نرده‌ای از نوع

$$\langle \psi' | \chi' \rangle = \langle \psi | \chi \rangle \quad (۲-۱۵۵)$$

تحت تبدیل‌های یکانی ناوردا هستند. به‌خصوص، هنجار یک بردار حالت پایسته است:

$$\langle \psi' | \psi' \rangle = \langle \psi | \psi \rangle \quad (۲-۱۵۶)$$

- همچنین می‌توانیم نشان دهیم که  $(\hat{U} \hat{A} \hat{U}^\dagger)^n = \hat{U} \hat{A}^n \hat{U}^\dagger$  زیرا

$$\begin{aligned} (\hat{U} \hat{A} \hat{U}^\dagger)^n &= (\hat{U} \hat{A} \hat{U}^\dagger) (\hat{U} \hat{A} \hat{U}^\dagger) \dots (\hat{U} \hat{A} \hat{U}^\dagger) = \hat{U} \hat{A} (\hat{U}^\dagger \hat{U}) \hat{A} (\hat{U}^\dagger \hat{U}) \dots (\hat{U}^\dagger \hat{U}) \hat{A} \hat{U}^\dagger \\ &= \hat{U} \hat{A}^n \hat{U}^\dagger \end{aligned} \quad (۲-۱۵۷)$$

- می‌توانیم نتیجه‌ی قبلی را برای به‌دست آوردن تبدیل هر تابع عملگر  $f(\hat{A})$  تعمیم دهیم:

$$\hat{U} f(\hat{A}) \hat{U}^\dagger = f(\hat{U} \hat{A} \hat{U}^\dagger) = f(\hat{A}') \quad (۲-۱۵۸)$$

یا به‌صورت عمومی‌تر

$$\hat{U} f(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots) \hat{U}^\dagger = f(\hat{U} \hat{A} \hat{U}^\dagger, \hat{U} \hat{B} \hat{U}^\dagger, \hat{U} \hat{C} \hat{U}^\dagger, \dots) = f(\hat{A}', \hat{B}', \hat{C}', \dots) \quad (۲-۱۵۹)$$

تبدیل یکانی فیزیک یک سیستم را تغییر نمی‌دهد. این تبدیل صرفاً یک توصیف از این سیستم را به توصیف معادل فیزیکی دیگر تبدیل می‌کند.

در ادامه دو نوع از تبدیل‌های یکانی را در نظر می‌گیریم: تبدیل‌های بی‌نهایت کوچک و تبدیل‌های متناهی.

## ۲-۹-۴-۲ تبدیل‌های یکانی بی‌نهایت کوچک

عملگری مانند  $\hat{U}$  که به پارامتر حقیقی کوچک  $\varepsilon$  بستگی دارد و تنها اندکی متفاوت از عملگر یک‌ه‌ی  $\hat{I}$  است را در نظر بگیرد:

$$\hat{U}_\varepsilon(\hat{G}) = \hat{I} + i\varepsilon\hat{G} \quad (۱۶۰-۲)$$

که در آن  $\hat{G}$  مولد تبدیل بی‌نهایت کوچک نامیده می‌شود. واضح است که تنها زمانی که پارامتر  $\varepsilon$  حقیقی و  $\hat{G}$  هرمیتی باشد،  $\hat{U}_\varepsilon$  یک تبدیل یکانی است زیرا

$$\hat{U}_\varepsilon \hat{U}_\varepsilon^\dagger = (\hat{I} + i\varepsilon\hat{G})(\hat{I} - i\varepsilon\hat{G}^\dagger) \simeq \hat{I} + i\varepsilon(\hat{G} - \hat{G}^\dagger) = \hat{I} \quad (۱۶۱-۲)$$

که در آن از جمله‌های توان دو برحسب  $\varepsilon$  چشم‌پوشی کرده‌ایم.

تبدیل بردار حالت  $|\psi\rangle$  برابر است با

$$|\psi'\rangle = (\hat{I} + i\varepsilon\hat{G})|\psi\rangle = |\psi\rangle + \delta|\psi\rangle \quad (۱۶۲-۲)$$

که در آن

$$\delta|\psi\rangle = i\varepsilon\hat{G}|\psi\rangle \quad (۱۶۳-۲)$$

تبدیل عملگر  $\hat{A}$  از رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آید:

$$\hat{A}' = (\hat{I} + i\varepsilon\hat{G})\hat{A}(\hat{I} - i\varepsilon\hat{G}) \simeq \hat{A} + i\varepsilon[\hat{G}, \hat{A}] \quad (۱۶۴-۲)$$

اگر  $\hat{G}$  با  $\hat{A}$  جابه‌جا شود آنگاه تبدیل یکانی  $\hat{A}$  را بدون تغییر باقی می‌گذارد ( $\hat{A}' = \hat{A}$ ):

$$[\hat{G}, \hat{A}] = 0 \quad \implies \quad \hat{A}' = (\hat{I} + i\varepsilon\hat{G})\hat{A}(\hat{I} - i\varepsilon\hat{G}) = \hat{A} \quad (۱۶۵-۲)$$

## ۳-۹-۴-۲ تبدیل‌های یکانی متناهی

با انجام تبدیل‌های بی‌نهایت کوچک متوالی برحسب  $\varepsilon$  می‌توانیم یک تبدیل یکانی متناهی را از (۱۶۰-۲) بسازیم. انجام مجموعه‌ای از تبدیل‌های یکانی متوالی معادل با انجام یک تک‌تبدیل یکانی است. با نمایش  $\varepsilon = \alpha/N$  که در آن  $N$  یک عدد صحیح و  $\alpha$  یک پارامتر متناهی است، می‌توانیم همان تبدیل یکانی را  $N$  بار انجام دهیم. در حد  $N \rightarrow +\infty$  به‌دست می‌آوریم:

$$\hat{U}_\alpha(\hat{G}) = \lim_{N \rightarrow +\infty} \prod_{k=1}^N \left( 1 + i \frac{\alpha}{N} \hat{G} \right) = \lim_{N \rightarrow +\infty} \left( 1 + i \frac{\alpha}{N} \hat{G} \right)^N = e^{i\alpha\hat{G}} \quad (۱۶۶-۲)$$

که در آن  $\hat{G}$  مولد تبدیل متناهی و  $\alpha$  پارامتر آن است.

همانطور که در (۲-۱۲۵) نشان داده شد،  $\hat{U}$  تنها زمانی یکانی است که پارامتر  $\alpha$  حقیقی و  $\hat{G}$  هرمیتی

باشد زیرا

$$(e^{i\alpha\hat{G}})^\dagger = e^{-i\alpha\hat{G}} = (e^{i\alpha\hat{G}})^{-1} \quad (۲-۱۶۷)$$

با استفاده از رابطه‌ی جابه‌جایی (۲-۱۱۷) می‌توانیم تبدیل  $\hat{A}'$  عملگر  $\hat{A}$  را به صورت زیر بنویسیم:

$$e^{i\alpha\hat{G}}\hat{A}e^{-i\alpha\hat{G}} = \hat{A} + i\alpha[\hat{G}, \hat{A}] + \frac{(i\alpha)^2}{2!}[\hat{G}, [\hat{G}, \hat{A}]] + \frac{(i\alpha)^3}{3!}[\hat{G}, [\hat{G}, [\hat{G}, \hat{A}]]] + \dots \quad (۲-۱۶۸)$$

هرگاه  $\hat{G}$  با  $\hat{A}$  جابه‌جا شود آنگاه تبدیل یکانی  $\hat{A}$  را بدون تغییر باقی می‌گذارد ( $\hat{A}' = \hat{A}$ ):

$$[\hat{G}, \hat{A}] = 0 \implies \hat{A}' = e^{i\alpha\hat{G}}\hat{A}e^{-i\alpha\hat{G}} = \hat{A} \quad (۲-۱۶۹)$$

در فصل ۳ تعدادی از کاربردهای مهم تبدیل‌های یکانی بی‌نهایت کوچک را برای مطالعه‌ی انتقال زمان، انتقال فضا، چرخش‌های زمان و قانون‌های پایستگی بررسی خواهیم کرد.

## ۵-۲ نمایش در پایه‌های گسسته

در تشابه با بسط بردارهای فضای اقلیدسی برحسب بردارهای پایه، نیاز داریم که حرکت  $|\psi\rangle$  از فضای هیلبرت را برحسب مجموعه‌ی کاملی از کت‌های پایه‌ی دو به دو متعامد بهنجار بیان کنیم.

### ۱-۵-۲ نمایش ماتریسی کت‌ها، براها و عملگرها

یک پایه‌ی گسسته‌ی کامل و متعامد بهنجار را در نظر بگیرید که از یک مجموعه‌ی نامتناهی<sup>۷</sup> از کت‌های  $\langle\phi_1\rangle, \langle\phi_2\rangle, \langle\phi_3\rangle, \dots, \langle\phi_n\rangle$  ساخته شده است و آن را با  $\{|\phi_n\rangle\}$  نمایش می‌دهیم. توجه داشته باشید که پایه‌ی  $\{|\phi_n\rangle\}$  گسسته است ولی هنوز تعدادی نامتناهی از بردارهای یکه را دارا است. در حد  $n \rightarrow \infty$  شاخص ترتیب  $n$  بردارهای یکه‌ی  $|\phi_n\rangle$  گسسته یا قابل شمارش است یعنی دنباله‌ی  $\langle\phi_1\rangle, \langle\phi_2\rangle, \langle\phi_3\rangle, \dots$  نامتناهی قابل شمارش است. به عنوان مثال، تابع‌های خاصی مانند چندجمله‌ای‌های هرمیت، لژاندار یا لاگر  $(L_n(x), P_n(x), H_n(x))$  را در نظر بگیرید. این چندجمله‌ای‌ها به وسیله‌ی ضریب گسسته‌ی  $n$  و متغیر پیوسته‌ی  $x$  شناخته می‌شوند. اگرچه  $n$  به صورت گسسته تغییر می‌کند با این حال می‌تواند نامتناهی باشد.

در بخش ۲-۶ پایه‌هایی را در نظر خواهیم گرفت که تعدادی پیوسته و نامتناهی از بردارهای پایه را دارا هستند. در این پایه‌ها شاخص  $n$  به صورت پیوسته افزایش می‌یابد. بنابراین هر پایه پیوستاری از بردارهای پایه را دارد.

۷. کت‌ها عنصرهای فضای هیلبرت هستند و بعد یک فضای هیلبرت نامتناهی است.

که در آن  $\delta_{nm}$  نماد دلتای کرونکر است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 1 & n = m \\ 0 & n \neq m \end{cases} \quad (۱۷۱-۲)$$

رابطه‌ی کامل بودن (یا رابطه‌ی بستاری) برای این پایه از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\sum_{n=1}^{\infty} |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = \hat{I} \quad (۱۷۲-۲)$$

که در آن  $\hat{I}$  عملگر یکه است. هنگامی که عملگر یکه روی هر کت عمل کند، کت را بدون تغییر باقی می‌گذارد.

## ۱-۱-۵-۲ نمایش ماتریسی کت‌ها و براها

حال بیایید ببینیم چگونه بردار  $|\psi\rangle$  را در پایه‌ی  $\{|\phi_n\rangle\}$  نمایش دهیم. ویژگی کامل بودن این پایه ما را قادر می‌سازد تا هر بردار حالت  $|\psi\rangle$  را برحسب کت‌های پایه‌ی  $|\phi_n\rangle$  بسط دهیم:

$$|\psi\rangle = \hat{I}|\psi\rangle = \left( \sum_{n=1}^{\infty} |\phi_n\rangle\langle\phi_n| \right) |\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} a_n |\phi_n\rangle \quad (۱۷۳-۲)$$

که در آن ثابت  $a_n$  (که برابر با  $\langle\phi_n|\psi\rangle$  است) تصویر  $|\psi\rangle$  روی  $|\phi_n\rangle$  را نمایش می‌دهد.  $a_n$  مؤلفه‌ی  $|\psi\rangle$  در امتداد بردار  $|\phi_n\rangle$  است. به یاد بیاورید که ضریب‌های  $a_n$  عددهای مختلطی هستند. بنابراین (در چارچوب پایه‌ی  $\{|\phi_n\rangle\}$ ) کت  $|\psi\rangle$  توسط مجموعه‌ی مؤلفه‌های  $a_1, a_2, a_3, \dots$  و آن به ترتیب در امتداد  $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, |\phi_3\rangle, \dots$  نمایش داده می‌شود. از این رو می‌توان  $|\psi\rangle$  را به وسیله‌ی یک بردار ستونی که به تعداد نامتناهی اما قابل شمارش مؤلفه دارد، نمایش داد:

$$|\psi\rangle \longrightarrow \begin{pmatrix} \langle\phi_1|\psi\rangle \\ \langle\phi_2|\psi\rangle \\ \vdots \\ \langle\phi_n|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (۱۷۴-۲)$$

و می‌توان برای  $|\psi\rangle$  را توسط یک بردار سطری نمایش داد:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &\longrightarrow (\langle\psi|\phi_1\rangle \quad \langle\psi|\phi_2\rangle \quad \dots \quad \langle\psi|\phi_n\rangle \dots) \\ &= (\langle\phi_1|\psi\rangle^* \quad \langle\phi_2|\psi\rangle^* \quad \dots \quad \langle\phi_n|\psi\rangle^* \quad \dots) \quad (175-2) \\ &= (a_1^* \quad a_2^* \quad \dots \quad a_n^* \quad \dots) \end{aligned}$$

با استفاده از این نمایش می‌بینیم که براکت  $\langle\psi|\phi\rangle$  یک عدد مختلط برابر با ضرب ماتریسی ماتریس سطری متناظر با برای  $|\psi\rangle$  در ماتریس ستونی متناظر با کت  $|\phi\rangle$  است:

$$\langle\psi|\phi\rangle = (a_1^* \quad a_2^* \quad \dots \quad a_n^* \quad \dots) \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \\ \vdots \end{pmatrix} = \sum_n a_n^* b_n \quad (176-2)$$

که در آن  $b_n = \langle\phi_n|\phi\rangle$  است. می‌بینیم که (در چارچوب این نمایش) ماتریس‌های نمایش دهنده‌ی  $|\psi\rangle$  و  $|\phi\rangle$  الحاقی هرمیتی یکدیگرند.

### ملاحظات

یک کت  $|\psi\rangle$  بهنجار است هرگاه  $\langle\psi|\psi\rangle = \sum_n |a_n|^2 = 1$  باشد. اگر  $|\psi\rangle$  بهنجار نباشد و بخواهیم آن را بهنجار کنیم آنگاه به سادگی باید آن را در ثابت  $\alpha$  ضرب کنیم به طوری که  $\langle\alpha\psi|\alpha\psi\rangle = |\alpha|^2 \langle\psi|\psi\rangle = 1$  و از این رو  $\alpha = 1/\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$  است.

### مثال ۱۲-۲

دو کت زیر را در نظر بگیرید:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 5i \\ 2 \\ -i \end{pmatrix}, \quad |\phi\rangle = \begin{pmatrix} 3 \\ 8i \\ -9i \end{pmatrix}$$

(الف)  $|\psi\rangle^*$  و  $|\psi\rangle$  را بیابید.

(ب) آیا  $|\psi\rangle$  بهنجار است؟ در غیر این صورت آن را بهنجار کنید.

(پ) آیا  $|\psi\rangle$  و  $|\phi\rangle$  متعامند؟

حل

(الف) عبارتهای  $|\psi\rangle^*$  و  $\langle\psi|$  به صورت زیر مشخص می‌شوند:

$$|\psi\rangle^* = \begin{pmatrix} -5i \\ 2 \\ i \end{pmatrix}, \quad \langle\psi| = (-5i \quad 2 \quad i) \quad (177-2)$$

که در آن از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که  $\langle\psi|$  برابر با مزدوج مختلط ترانهاده‌ی کت  $|\psi\rangle$  است. از این رو باید این واقعیت مهم را دوباره تکرار کنیم که  $\langle\psi| \neq |\psi\rangle^*$  است. (ب) هنجار  $|\psi\rangle$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\langle\psi|\psi\rangle = (-5i \quad 2 \quad i) \begin{pmatrix} 5i \\ 2 \\ -i \end{pmatrix} = (-5i)(5i) + (2)(2) + (i)(-i) = 30 \quad (178-2)$$

بنابراین  $|\psi\rangle$  بهنجار نیست. با ضرب کردن آن در  $1/\sqrt{30}$  بهنجار می‌شود:

$$|\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{30}}|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{30}} \begin{pmatrix} 5i \\ 2 \\ -i \end{pmatrix} \implies \langle\chi|\chi\rangle = 1 \quad (179-2)$$

(پ) کتهای  $|\psi\rangle$  و  $|\phi\rangle$  متعامد نیستند زیرا ضرب نرده‌ای آنها صفر نیست:

$$\langle\psi|\phi\rangle = (-5i \quad 2 \quad i) \begin{pmatrix} 3 \\ 8i \\ -9i \end{pmatrix} = (-5i)(3) + (2)(8i) + (i)(-9i) = 9 + i \quad (180-2)$$

۲-۱-۵-۲ نمایش ماتریسی عملگرها

برای هر عملگر خطی  $\hat{A}$  می‌توانیم بنویسیم:

$$\hat{A} = \hat{I}\hat{A}\hat{I} = \left( \sum_{n=1}^{\infty} |\phi_n\rangle\langle\phi_n| \right) \hat{A} \left( \sum_{m=1}^{\infty} |\phi_m\rangle\langle\phi_m| \right) = \sum_{nm} A_{nm} |\phi_n\rangle\langle\phi_m| \quad (181-2)$$

که در آن  $A_{nm}$  عنصر ماتریسی  $nm$  عملگر  $\hat{A}$  است:

$$\hat{A}_{nm} = \langle \phi_n | \hat{A} | \phi_m \rangle \quad (۱۸۲-۲)$$

می‌بینیم که عملگر  $\hat{A}$  (در پایه‌ی  $\{|\phi_n\rangle\}$ ) توسط ماتریس مربعی  $A$  (بدون کلاه یک ماتریس را نمایش می‌دهد) که دارای تعداد نامتناهی ولی قابل شمارش ستون و سطر است، نمایش داده می‌شود:

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \dots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (۱۸۳-۲)$$

به عنوان مثال، عملگری که  $I$  به وسیله‌ی ماتریس یکه نمایش داده می‌شود. هنگامی که ماتریس یکه در ماتریس دیگری ضرب شود، آن ماتریس را بدون تغییر می‌گذارد:

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (۱۸۴-۲)$$

به صورت خلاصه، کت‌ها به وسیله‌ی بردارهای ستونی، براها به وسیله‌ی بردارهای سطری و عملگرها به وسیله‌ی ماتریس‌های مربعی نشان داده می‌شوند.

### ۲-۱-۵-۳ نمایش ماتریسی برخی از عملگرها

#### (الف) عملیات الحاقی هرمیتی

حال بیایید نگاهی به نمایش ماتریسی عملیات الحاقی هرمیتی یک عملگر بیندازیم. ابتدا به یاد بیاورید که ترانزپوزی ماتریس  $A$  (که با  $A^T$  نمایش داده می‌شود) از تعویض سطرها با ستون‌ها به دست می‌آید:

$$(A^T)_{nm} = A_{mn} \quad \text{یا} \quad \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \dots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}^T = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{21} & A_{31} & \dots \\ A_{12} & A_{22} & A_{32} & \dots \\ A_{13} & A_{23} & A_{33} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (۱۸۵-۲)$$



به صورت مشابه، ترانهادهی یک ماتریس ستونی یک ماتریس سطری است و ترانهادهی یک ماتریس سطری یک ماتریس ستونی است:

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \\ \vdots \end{pmatrix}^T = (a_1 \ a_2 \ \dots \ a_n \ \dots \ \text{و} \ a_1 \ a_2 \ \dots \ a_n \ \dots)^T = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (۱۸۶-۲)$$

بنابراین ماتریس مربعی  $A$  متقارن است هرگاه با ترانهادهی خود برابر باشد ( $A^T = A$ ). یک ماتریس پادمقارن یک ماتریس مربعی است که ترانهادهی آن برابر با منفی ماتریس است ( $A^T = -A$ ). مزدوج مختلط یک ماتریس به سادگی به وسیلهی مزدوج مختلط کردن تمام عنصرهای آن به دست می‌آید:  $(A^*)_{nm} = (A_{nm})^*$ .

ماتریسی که عملگر  $\hat{A}^\dagger$  را نمایش می‌دهد از مزدوج مختلط کردن ترانهادهی ماتریس  $A$  به دست می‌آید:

$$A^\dagger = (A^T)^* \quad \text{یا} \quad (\hat{A}^\dagger)_{nm} = \langle \phi_n | \hat{A}^\dagger | \phi_m \rangle = \langle \phi_m | \hat{A} | \phi_n \rangle^* = A_{mn}^* \quad (۱۸۷-۲)$$

یعنی

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \dots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}^\dagger = \begin{pmatrix} A_{11}^* & A_{21}^* & A_{31}^* & \dots \\ A_{12}^* & A_{22}^* & A_{32}^* & \dots \\ A_{13}^* & A_{23}^* & A_{33}^* & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (۱۸۸-۲)$$

هرگاه عملگر  $\hat{A}$  هرمیتی باشد آنگاه ماتریس آن در شرط زیر صدق می‌کند:

$$(A^T)^* = A \quad \text{یا} \quad A_{mn}^* = A_{nm} \quad (۱۸۹-۲)$$

بنابراین عنصرهای قطری یک ماتریس هرمیتی باید عددی حقیقی باشند. توجه کنید که یک ماتریس هرمیتی باید مربعی باشد.

### (ب) عملگرهای وارون و یکانی

یک ماتریس دارای وارون است تنها اگر مربع آن و دترمینان آن غیرصفر باشد. ماتریسی که دارای وارون باشد ماتریس غیرتکینه نامیده می‌شود و به ماتریسی که وارون نداشته باشد ماتریس تکینه گفته می‌شود. عنصرهای  $A_{nm}^{-1}$  ماتریس وارون  $A^{-1}$  (که عملگر  $\hat{A}^{-1}$  را نمایش می‌دهد) از رابطه‌ی زیر به دست می‌آیند:

$$A_{nm}^{-1} = \frac{\text{هم عامل } A_{mn}}{\text{دترمینان } A} \quad \text{یا} \quad A^{-1} = \frac{B^T}{A \text{ دترمینان}} \quad (۱۹۰-۲)$$

که در آن  $B$  ماتریس هم‌عامل‌ها (که کهاد نیز نامیده می‌شود) است. هم‌عامل عنصر  $A_{mn}$  برابر با  $(-1)^{m+n}$  ضربدر دترمینان زیرماتریس به‌دست آمده از  $A$  به وسیله‌ی خارج ساختن سطر  $m$ ام و ستون  $n$ ام است. توجه داشته باشید زمانی که ماتریس (نمایشگر یک عملگر) دترمینانی برابر صفر داشته باشد، این عملگر دارای وارون نیست. توجه کنید که  $A^{-1}A = AA^{-1} = I$  است که در آن  $I$  ماتریس یکه است. وارون ضرب ماتریس‌ها به‌صورت زیر به‌دست می‌آید:

$$(ABC \cdots PQ)^{-1} = Q^{-1}P^{-1} \cdots C^{-1}B^{-1}A^{-1} \quad (191-2)$$

وارون وارون یک ماتریس برابر با خود ماتریس است  $((A^{-1})^{-1} = A)$ .

عملگر یکانی  $\hat{U}$  به وسیله‌ی ماتریس یکانی نمایش داده می‌شود. به ماتریس  $U$  یکانی گفته می‌شود هرگاه وارون آن برابر با الحاقی آن باشد:

$$U^{-1} = U^\dagger \quad \text{یا} \quad U^\dagger U = I \quad (192-2)$$

که در آن  $I$  ماتریس یکه است.

مثال ۱۳-۲ (وارون یک ماتریس)

وارون ماتریس  $A = \begin{pmatrix} 2 & i & 0 \\ 3 & 1 & 5 \\ 0 & -i & -2 \end{pmatrix}$  را محاسبه کنید. آیا این ماتریس یکانی است؟

حل

چون دترمینان  $A$  برابر با  $\det(A) = -4 + 16i$  است، داریم:  $A^{-1} = B^T / (-4 + 16i)$  که در آن عنصرهای ماتریس هم‌عامل  $B$  از  $B_{nm} = (-1)^{n+m}$  ضربدر دترمینان زیرماتریس به‌دست آمده از  $A$  با خارج ساختن سطر  $n$ ام و ستون  $m$ ام به‌دست می‌آیند. در این صورت داریم:

$$B_{11} = (-1)^{1+1} \begin{vmatrix} A_{22} & A_{23} \\ A_{32} & A_{33} \end{vmatrix} = (-1)^2 \begin{vmatrix} 1 & 5 \\ -i & -2 \end{vmatrix} = -2 + 5i \quad (193-2)$$

$$B_{12} = (-1)^{1+2} \begin{vmatrix} A_{21} & A_{23} \\ A_{31} & A_{33} \end{vmatrix} = (-1)^3 \begin{vmatrix} 3 & 5 \\ 0 & -2 \end{vmatrix} = 6 \quad (194-2)$$

$$B_{13} = (-1)^{1+3} \begin{vmatrix} A_{21} & A_{22} \\ A_{31} & A_{32} \end{vmatrix} = (-1)^4 \begin{vmatrix} 3 & 1 \\ 0 & -i \end{vmatrix} = -3i \quad (195-2)$$

$$B_{21} = (-1)^3 \begin{vmatrix} i & 0 \\ -i & -2 \end{vmatrix} = 2i, \quad B_{22} = (-1)^4 \begin{vmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -2 \end{vmatrix} = -4 \quad (196-2)$$

$$B_{23} = (-1)^5 \begin{vmatrix} 2 & i \\ 0 & -i \end{vmatrix} = 2i, \quad B_{31} = (-1)^2 \begin{vmatrix} i & 0 \\ 1 & 5 \end{vmatrix} = 5i \quad (197-2)$$

$$B_{32} = (-1)^5 \begin{vmatrix} 2 & 0 \\ 3 & 5 \end{vmatrix} = -10, \quad B_{33} = (-1)^6 \begin{vmatrix} 2 & i \\ 3 & 1 \end{vmatrix} = 2 - 3i \quad (198-2)$$

و از این رو

$$B = \begin{pmatrix} -2 + 5i & 6 & -3i \\ 2i & -4 & 2i \\ 5i & -10 & 2 - 3i \end{pmatrix} \quad (199-2)$$

با در نظر گرفتن ترانزپوزیتهی  $B$  به دست می آوریم:

$$A^{-1} = \frac{1}{-4 + 16i} B^T = \frac{-1 - 4i}{68} \begin{pmatrix} -2 + 5i & 2i & 5i \\ 6 & -4 & -10 \\ -3i & 2i & 2 - 3i \end{pmatrix} \quad (200-2)$$

$$= \frac{1}{68} \begin{pmatrix} 22 + 3i & 8 - 2i & 20 - 5i \\ -6 - 24i & 4 + 16i & 10 + 40i \\ -12 + 3i & 8 - 2i & -14 - 5i \end{pmatrix}$$

واضح است که این ماتریس یکانی نیست زیرا وارون آن با الحاقی هرمیتی آن برابر نیست:  $A^{-1} \neq A^\dagger$ .(پ) نمایش ماتریسی  $|\psi\rangle\langle\psi|$ دیدن این مطلب که ضرب  $|\psi\rangle\langle\psi|$  در واقع یک عملگر است، کار ساده‌ای است زیرا نمایش آن در چارچوب  $\{|\psi_n\rangle\}$  یک ماتریس مربعی است:

$$|\psi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1^* & a_2^* & a_3^* & \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 a_1^* & a_1 a_2^* & a_1 a_3^* & \dots \\ a_2 a_1^* & a_2 a_2^* & a_2 a_3^* & \dots \\ a_3 a_1^* & a_3 a_2^* & a_3 a_3^* & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \ddots \end{pmatrix} \quad (201-2)$$

(ت) رد\* یک عملگر

رد یا  $\text{Tr}(\hat{A})$  عملگر  $\hat{A}$  در چارچوب پایه‌ی متعامد بهنجار  $\{|\phi_n\rangle\}$  از عبارت

$$\text{Tr}(\hat{A}) = \sum_n \langle \phi_n | \hat{A} | \phi_n \rangle = \sum_n A_{nn} \quad (202-2)$$

به دست می‌آید. بعداً خواهیم دید که رد یک عملگر به پایه بستگی ندارد. رد یک ماتریس برابر با مجموع عنصرهای قطری آن است:

$$\text{Tr} \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \dots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \ddots \end{pmatrix} = A_{11} + A_{22} + A_{33} + \dots \quad (203-2)$$

ویژگی‌های رد

می‌توانیم تحقیق کنیم که

$$\text{Tr}(\hat{A}^\dagger) = (\text{Tr}(\hat{A}))^* \quad (204-2)$$

$$\text{Tr}(\alpha\hat{A} + \beta\hat{B} + \gamma\hat{C} + \dots) = \alpha\text{Tr}(\hat{A}) + \beta\text{Tr}(\hat{B}) + \gamma\text{Tr}(\hat{C}) + \dots \quad (205-2)$$

و رد ضرب عملگرها تحت جایگشت‌های چرخه‌ای این عملگرها ناوردا است:

$$\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D}\hat{E}) = \text{Tr}(\hat{E}\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D}) = \text{Tr}(\hat{D}\hat{E}\hat{A}\hat{B}\hat{C}) = \text{Tr}(\hat{C}\hat{D}\hat{E}\hat{A}\hat{B}) = \dots \quad (206-2)$$

## مثال ۱۴-۲

(الف) نشان دهید که  $\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}) = \text{Tr}(\hat{B}\hat{A})$ .

(ب) نشان دهید که رد یک جابه‌جاگر همیشه صفر است.

(پ) نتیجه‌های نشان داده در (الف) و (ب) را روی ماتریس‌های زیر نشان دهید:

$$A = \begin{pmatrix} 1 - 2i & 4i & 0 \\ 1 & 0 & 1 - i \\ -1 & i & 6i \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} -i & 2 & 1 - i \\ 6 & 1 + i & 3i \\ 1 & 5 + 7i & 0 \end{pmatrix}$$

حل

(الف) با استفاده از تعریف رد

$$\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}) = \sum_n \langle \phi_n | \hat{A}\hat{B} | \phi_n \rangle \quad (207-2)$$

و وارد کردن عملگر یکه بین  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  داریم:

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\hat{A}\hat{B}) &= \sum_n \langle \phi_n | \hat{A} \left( \sum_m |\phi_m\rangle \langle \phi_m| \right) \hat{B} | \phi_n \rangle = \sum_{nm} \langle \phi_n | \hat{A} | \phi_m \rangle \langle \phi_m | \hat{B} | \phi_n \rangle \\ &= \sum_{nm} A_{nm} B_{mn} \end{aligned} \quad (208-2)$$

از سوی دیگر، با توجه به این که  $\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}) = \sum_n \langle \phi_n | \hat{A}\hat{B} | \phi_n \rangle$  داریم:

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\hat{B}\hat{A}) &= \sum_m \langle \phi_m | \hat{B} \left( \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| \right) \hat{A} | \phi_m \rangle = \sum_m \langle \phi_m | \hat{B} | \phi_n \rangle \langle \phi_n | \hat{A} | \phi_m \rangle \\ &= \sum_{nm} B_{mn} A_{nm} \end{aligned} \quad (209-2)$$

با مقایسه‌ی (۲۰۸-۲) و (۲۰۹-۲) می‌بینیم که  $\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}) = \text{Tr}(\hat{B}\hat{A})$  (ب) چون  $\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}) = \text{Tr}(\hat{B}\hat{A})$  است، یک‌باره می‌توانیم نتیجه بگیریم که رد هر جابه‌جاگری همیشه صفر است:

$$\text{Tr}([\hat{A}, \hat{B}]) = \text{Tr}(\hat{A}\hat{B}) - \text{Tr}(\hat{B}\hat{A}) = 0 \quad (210-2)$$

(پ) بیایید نشان دهیم که رد ضرب‌های  $AB$  و  $BA$  برابرند. با توجه به این که

$$\begin{aligned} AB &= \begin{pmatrix} -2 + 16i & 12 & -6 - 10i \\ 1 - 2i & 14 + 2i & 1 - i \\ 20i & -59 + 31i & -11 + 8i \end{pmatrix} \\ BA &= \begin{pmatrix} -8 & 5 + i & 8 + 4i \\ 49 - 35i & -3 + 24i & -16 \\ 13 + 5i & 4i & 12 + 2i \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (211-2)$$

داریم:

$$\text{Tr}(AB) = \text{Tr} \begin{pmatrix} -۲ + ۱۶i & ۱۲ & -۶ - ۱۰i \\ ۱ - ۲i & ۱۴ + ۲i & ۱ - i \\ ۲۰i & -۵۹ + ۳۱i & -۱۱ + ۸i \end{pmatrix} = ۱ + ۲۶i \quad (۲۱۲-۲)$$

$$\text{Tr}(BA) = \text{Tr} \begin{pmatrix} -۸ & ۵ + i & ۸ + ۴i \\ ۴۹ - ۳۵i & -۳ + ۲۴i & -۱۶ \\ ۱۳ + ۵i & ۴i & ۱۲ + ۲i \end{pmatrix} = ۱ + ۲۶i = \text{Tr}(AB) \quad (۲۱۳-۲)$$

که به  $\text{Tr}([A, B]) = ۰$  یا  $\text{Tr}(AB) - \text{Tr}(BA) = (۱ + ۲۶i) - (۱ + ۲۶i) = ۰$  می‌انجامد.

#### ۴-۱-۵-۲ نمایش ماتریسی چند کمیت دیگر

(الف) نمایش ماتریسی  $|\phi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$

می‌توان رابطه‌ی  $|\phi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$  را به شکل جبری  $\hat{I}|\phi\rangle = \hat{I}\hat{A}\hat{I}|\psi\rangle$  یا

$$\left( \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| \right) |\phi\rangle = \left( \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| \right) \hat{A} \left( \sum_m |\phi_m\rangle\langle\phi_m| \right) |\psi\rangle \quad (۲۱۴-۲)$$

نوشت که به نوبه‌ی خود می‌توان آن را به صورت زیر نوشت:

$$\sum_n b_n |\phi_n\rangle = \sum_{nm} a_m |\phi_n\rangle\langle\phi_n|\hat{A}|\phi_m\rangle = \sum_{nm} a_m A_{nm} |\phi_n\rangle \quad (۲۱۵-۲)$$

که در آن  $b_n = \langle\phi_n|\phi\rangle$ ،  $A_{nm} = \langle\phi_n|\hat{A}|\phi_m\rangle$  و  $a_m = \langle\phi_m|\psi\rangle$ . دیدن این مطلب که (۲۱۵-۲) رابطه‌ی  $b_n = \sum_m A_{nm} a_m$  را نتیجه می‌دهد، کار ساده‌ای است. از این رو نمایش ماتریسی  $|\phi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \dots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (۲۱۶-۲)$$

(ب) نمایش ماتریسی  $\langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle$ در رابطه با  $\langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle$  داریم:

$$\begin{aligned} \langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle &= \langle \phi | \hat{I} \hat{A} \hat{I} | \psi \rangle = \langle \phi | \left( \sum_{n=1}^{\infty} |\phi_n\rangle \langle \phi_n| \right) \hat{A} \left( \sum_{m=1}^{\infty} |\phi_m\rangle \langle \phi_m| \right) | \psi \rangle \\ &= \sum_{nm} \langle \phi | \phi_n \rangle \langle \phi_n | \hat{A} | \phi_m \rangle \langle \phi_m | \psi \rangle \quad (2-217) \\ &= \sum_{nm} b_n^* A_{nm} a_m \end{aligned}$$

که یک عدد مختلط است و نمایش ماتریسی آن به صورت زیر:

$$\langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle \rightarrow \begin{pmatrix} b_1^* & b_2^* & b_3^* & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \dots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (2-218)$$

## ملاحظات

اکنون مشاهده‌ی صریح این مطلب که چرا ضرب‌هایی از نوع  $\langle \psi | \langle \phi |$ ،  $|\psi\rangle | \phi \rangle$ ،  $\hat{A} \langle \psi |$  یا  $\hat{A} | \psi \rangle$  مجاز نیستند، کار ساده‌ای است. این نوع ضرب‌ها نمی‌توانند نمایش ماتریسی داشته باشند و بی‌معنی‌اند. به عنوان مثال  $|\psi\rangle | \phi \rangle$  یا ضرب دو ماتریس ستونی نمایش داده می‌شود:

$$|\psi\rangle | \phi \rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \langle \phi_1 | \psi \rangle \\ \langle \phi_2 | \psi \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle \phi_1 | \phi \rangle \\ \langle \phi_2 | \phi \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (2-219)$$

واضح است که این ضرب انجام‌شدنی نیست زیرا ضرب دو ماتریس ستونی تنها زمانی ممکن است که تعداد ستون‌های ماتریس نخست با تعداد سطرهای ماتریس دوم برابر باشد. در (2-219) ماتریس نخست یک تک‌ستون دارد و ماتریس دوم دارای تعداد نامتناهی سطر است.

۲-۵-۱-۵ ویژگی‌های ماتریس  $A$ 

• حقیقی است هرگاه  $A = A^*$  یا  $A_{mn} = A_{mn}^*$

- موهومی است هرگاه  $A = -A^*$  یا  $A_{mn} = -A_{mn}^*$ .
- متقارن است هرگاه  $A = A^T$  یا  $A_{mn} = A_{nm}$ .
- پادمتقارن است هرگاه  $A = -A^T$  یا  $A_{mn} = -A_{nm}$  با  $A_{mm} = 0$ .
- هرمیتی است هرگاه  $A = A^\dagger$  یا  $A_{mn} = A_{nm}^*$ .
- پادهرمیتی است هرگاه  $A = -A^\dagger$  یا  $A_{mn} = -A_{nm}^*$ .
- متعامد است هرگاه  $A^T = A^{-1}$  یا  $AA^T = I$  یا  $(AA^T)_{mn} = \delta_{mn}$ .
- یکانی است هرگاه  $A^\dagger = A^{-1}$  یا  $AA^\dagger = I$  یا  $(AA^\dagger)_{mn} = \delta_{mn}$ .

## مثال ۱۵-۲

ماتریس  $A$  (که عملگر  $\hat{A}$  را نمایش می‌دهد)، کت  $|\psi\rangle$  و برای  $\langle\phi|$  را در نظر بگیرید:

$$A = \begin{pmatrix} 5 & 3+2i & 3i \\ -i & 3i & 8 \\ 1-i & 1 & 4 \end{pmatrix}, \quad |\psi\rangle = \begin{pmatrix} -1+i \\ 3 \\ 2+3i \end{pmatrix}, \quad \langle\phi| = (6 \quad -i \quad 5)$$

- (الف) کمیت‌های  $\langle\phi|A|\psi\rangle$ ،  $\langle\phi|A$ ،  $A|\psi\rangle$ ،  $\langle\phi|A|\psi\rangle$  و  $|\psi\rangle\langle\phi|$  را محاسبه کنید.
- (ب) مزدوج مختلط، ترانهاده و مزدوج هرمیتی  $A$ ،  $|\psi\rangle$  و  $\langle\phi|$  را بیابید.
- (پ)  $\langle\phi|\psi\rangle$  و  $\langle\psi|\phi\rangle$  را محاسبه کنید. آیا این دو با هم برابرند؟ در مورد اختلاف بین مزدوج مختلط، مزدوج هرمیتی و ترانهاده‌ی کت‌ها و براها بحث کنید.

حل

(الف) محاسبات سرراستند:

$$A|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 5 & 3+2i & 3i \\ -i & 3i & 8 \\ 1-i & 1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1+i \\ 3 \\ 2+3i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -5+17i \\ 17+34i \\ 11+14i \end{pmatrix} \quad (220-2)$$

$$\langle\phi|A = (6 \quad -i \quad 5) \begin{pmatrix} 5 & 3+2i & 3i \\ -i & 3i & 8 \\ 1-i & 1 & 4 \end{pmatrix} = (34-5i \quad 26+12i \quad 20+10i)$$

(221-2)



$$\langle \phi | A | \psi \rangle = \begin{pmatrix} 6 & -i & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & 3+2i & 3i \\ -i & 3i & 8 \\ 1-i & 1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1+i \\ 3 \\ 2+3i \end{pmatrix} = 59 + 155i \quad (222-2)$$

$$| \psi \rangle \langle \phi | = \begin{pmatrix} -1+i \\ 3 \\ 2+3i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 6 & -i & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -6+6i & 1+i & -5+5i \\ 18 & -3i & 15 \\ 12+18i & 3-2i & 10+15i \end{pmatrix} \quad (223-2)$$

(ب) برای به دست آوردن مزدوج مختلط  $A$ ،  $| \psi \rangle$  و  $\langle \phi |$ ، تنها باید عنصرهای آنها را مزدوج مختلط کنیم:

$$A^* = \begin{pmatrix} 5 & 3-2i & -3i \\ i & -3i & 8 \\ 1+i & 1 & 4 \end{pmatrix}, \quad | \psi \rangle^* = \begin{pmatrix} -1-i \\ 3 \\ 2-3i \end{pmatrix}, \quad \langle \phi |^* = \begin{pmatrix} 6 & i & 5 \end{pmatrix} \quad (224-2)$$

برای ترانزادهی  $A$ ،  $| \psi \rangle$  و  $\langle \phi |$ ، به سادگی ستون‌ها را با سطرها تعویض می‌کنیم:

$$A^T = \begin{pmatrix} 5 & -i & 1-i \\ 3+2i & 3i & 1 \\ 3i & 8 & 4 \end{pmatrix}, \quad | \psi \rangle^T = \begin{pmatrix} 6 \\ -i \\ 5 \end{pmatrix}, \quad \langle \phi |^T = \begin{pmatrix} -1+i & 3 & 2+3i \end{pmatrix} \quad (225-2)$$

می‌توان مزدوج هرمیتی را با در نظر گرفتن مزدوج‌های مختلط عبارتهای مربوط به ترانزاده که در بالا محاسبه شدند، به دست آورد:  $\langle \phi |^\dagger = (\langle \phi |^T)^* = | \phi \rangle$  و  $| \psi \rangle^\dagger = (| \psi \rangle^T)^* = \langle \psi |$ ،  $A^\dagger = (A^T)^*$ .

$$A^\dagger = \begin{pmatrix} 5 & i & 1+i \\ 3-2i & -3i & 1 \\ -3i & 8 & 4 \end{pmatrix}, \quad \langle \psi | = \begin{pmatrix} -1-i & 3 & 2-3i \end{pmatrix}, \quad | \phi \rangle = \begin{pmatrix} 6 \\ i \\ 5 \end{pmatrix} \quad (226-2)$$

(پ) با استفاده از کت‌ها و براهای بالا، به آسانی می‌توانیم ضرب‌های زده‌ای مورد نیاز را محاسبه کنیم:

$$\begin{aligned}\langle \phi | \psi \rangle &= \begin{pmatrix} 6 & -i & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1+i \\ 3 \\ 2+3i \end{pmatrix} \\ &= 6(-1+i) + (-i)(3) + 5(2+3i) = 4 + 18i \quad (227-2)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle \psi | \phi \rangle &= \begin{pmatrix} -1-i & 3 & 2-3i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 6 \\ i \\ 5 \end{pmatrix} \\ &= 6(-1-i) + (i)(3) + 5(2-3i) = 4 - 18i \quad (228-2)\end{aligned}$$

می‌بینیم که  $\langle \phi | \psi \rangle$  و  $\langle \psi | \phi \rangle$  برابر نیستند بلکه مزدوج مختلط یکدیگرند:

$$\langle \psi | \phi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle^* = 4 - 18i \quad (229-2)$$

### ملاحظات

باید اهمیت اختلاف بین  $|\psi\rangle^*$ ،  $|\psi\rangle^T$  و  $|\psi\rangle^\dagger$  را بیان کنیم. به خصوص، باید (از معادله‌های (۲-۲۲۴) تا (۲-۲۲۶)) یادآوری کنیم که  $|\psi\rangle^*$  یک کت است در حالی که  $|\psi\rangle^T$  و  $|\psi\rangle^\dagger$  برا هستند. همچنین باید یادآوری کنیم که  $\langle \phi |^*$  یک برا است در حالی که  $\langle \phi |^T$  و  $\langle \phi |^\dagger$  کت هستند.

### ۲-۵-۲ تغییر پایه‌ها و تبدیلات یکانی

در فضای اقلیدسی می‌توان بردار  $\mathbf{A}$  را به وسیله‌ی مؤلفه‌های آن در دستگاه‌های مختصات متفاوت یا در پایه‌های متفاوت نمایش داد. تبدیل از یک پایه به پایه‌ی دیگر تغییر پایه نامیده می‌شود. می‌توان مؤلفه‌های  $\mathbf{A}$  در یک پایه‌ی معلوم را برحسب مؤلفه‌های  $\mathbf{A}$  در پایه‌ی دیگر به وسیله‌ی یک ماتریس تبدیل بیان نمود. به صورت مشابه، بردارهای حالت مکانیک کوانتومی را نیز می‌توان در پایه‌های متفاوت نمایش داد. در این بخش قصد داریم به مطالعه‌ی چگونگی تبدیل از یک پایه به پایه‌ی دیگر بپردازیم. یعنی با دانستن مؤلفه‌های کت‌ها، براها و عملگرها در پایه‌ی  $\{|\phi_n\rangle\}$  چگونه مؤلفه‌های متناظر در پایه‌ی متفاوت  $\{|\phi'_n\rangle\}$  تعیین می‌شوند؟ با فرض آن که  $\{|\phi_n\rangle\}$  و  $\{|\phi'_n\rangle\}$  دو پایه‌ی متفاوت باشند می‌توان هر کت  $|\phi_n\rangle$  پایه‌ی

قدیم را برحسب پایه‌ی جدید  $|\phi'_n\rangle$  به صورت زیر بسط داد:

$$|\phi_n\rangle = \left( \sum_m |\phi'_m\rangle \langle \phi'_m| \right) |\phi_n\rangle = \sum_m U_{mn} |\phi'_m\rangle \quad (۲۳۰-۲)$$

که در آن

$$U_{mn} = \langle \phi'_m | \phi_n \rangle \quad (۲۳۱-۲)$$

ماتریس  $U$  که تبدیل از پایه‌ی قدیم  $\{|\phi_n\rangle\}$  به پایه‌ی جدید  $\{|\phi'_n\rangle\}$  را انجام می‌دهد، از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$U = \begin{pmatrix} \langle \phi'_1 | \phi_1 \rangle & \langle \phi'_1 | \phi_2 \rangle & \langle \phi'_1 | \phi_3 \rangle \\ \langle \phi'_2 | \phi_1 \rangle & \langle \phi'_2 | \phi_2 \rangle & \langle \phi'_2 | \phi_3 \rangle \\ \langle \phi'_3 | \phi_1 \rangle & \langle \phi'_3 | \phi_2 \rangle & \langle \phi'_3 | \phi_3 \rangle \end{pmatrix} \quad (۲۳۲-۲)$$

مثال ۱۶-۲ (یکانی بودن ماتریس تبدیل)

فرض کنید  $U$  ماتریس تبدیلی باشد که دو پایه‌ی کامل و متعامد بهنجار  $\{|\phi_n\rangle\}$  و  $\{|\phi'_n\rangle\}$  را به هم مرتبط می‌کند. نشان دهید که  $U$  یکانی است.

حل

برای این کار باید ثابت کنیم که  $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{I}$  است که به نشان دادن این که  $\langle \phi_m | \hat{U}\hat{U}^\dagger | \phi_n \rangle = \delta_{mn}$  کاهش می‌یابد. این کار به صورت زیر انجام می‌شود:

$$\langle \phi_m | \hat{U}\hat{U}^\dagger | \phi_n \rangle = \langle \phi_m | \hat{U} \left( \sum_l |\phi_l\rangle \langle \phi_l| \right) \hat{U}^\dagger | \phi_n \rangle = \sum_l U_{ml} U_{nl}^* \quad (۲۳۳-۲)$$

که در آن  $U_{ml} = \langle \phi_m | \hat{U} | \phi_l \rangle$  و  $U_{nl}^* = \langle \phi_l | \hat{U}^\dagger | \phi_n \rangle = \langle \phi_l | \hat{U} | \phi_n \rangle^*$  است. مطابق با (۲۳۱-۲)،  $U_{ml} = \langle \phi'_m | \phi_l \rangle$  و  $U_{nl}^* = \langle \phi_l | \phi'_n \rangle$  بنابراین می‌توانیم (۲۳۳-۲) را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$\sum_l U_{ml} U_{nl}^* = \sum_l \langle \phi'_m | \phi_l \rangle \langle \phi_l | \phi'_n \rangle = \langle \phi'_m | \phi'_n \rangle = \delta_{mn} \quad (۲۳۴-۲)$$

با ترکیب کردن (۲۳۳-۲) و (۲۳۴-۲) نتیجه می‌گیریم  $\langle \phi_m | \hat{U}\hat{U}^\dagger | \phi_n \rangle = \delta_{mn}$  یا  $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{I}$

## ۱-۲-۵-۲ تبدیلات کت‌ها، براها و عملگرها

می‌توان مؤلفه‌های  $\langle \phi'_n | \psi \rangle$  بردار حالت  $|\psi\rangle$  در پایه‌ی جدید  $\{|\phi'_n\rangle\}$  را برحسب مؤلفه‌های  $\langle \phi_n | \psi \rangle$  کت  $|\psi\rangle$  در پایه‌ی قدیم  $\{|\phi_n\rangle\}$  به صورت زیر بیان کرد:

$$\langle \phi'_m | \psi \rangle = \langle \phi'_m | \hat{I} | \psi \rangle = \langle \phi'_m | \left( \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| \right) | \psi \rangle = \sum_n U_{mn} \langle \phi_n | \psi \rangle \quad (۲۳۵-۲)$$

می‌توان این رابطه (همراه با مزدوج مختلط آن) را به صورت زیر تعمیم داد:

$$|\psi_{\text{جدید}}\rangle = \hat{U} |\psi_{\text{قدیم}}\rangle, \quad \langle \psi_{\text{جدید}} | = \langle \psi_{\text{قدیم}} | \hat{U}^\dagger \quad (۲۳۶-۲)$$

حال بیائید بررسی کنیم هنگامی که یک پایه را به پایه‌ی دیگر تغییر می‌دهیم، عملگرها چگونه تبدیل می‌شوند. می‌توان عنصرهای ماتریسی  $A'_{mn} = \langle \phi'_m | \hat{A} | \phi'_n \rangle$  عملگر  $\hat{A}$  در پایه‌ی جدید را برحسب عنصرهای ماتریسی قدیمی ( $A_{jl} = \langle \phi_j | \hat{A} | \phi_l \rangle$ ) به صورت زیر بیان کرد:

$$A'_{mn} = \langle \phi'_m | \left( \sum_j |\phi_j\rangle \langle \phi_j| \right) \hat{A} \left( \sum_l |\phi_l\rangle \langle \phi_l| \right) | \phi'_n \rangle = \sum_{jl} U_{mj} A_{jl} U_{nl}^* \quad (۲۳۷-۲)$$

یعنی

$$\hat{A}_{\text{جدید}} = \hat{U} \hat{A}_{\text{قدیم}} \hat{U}^\dagger \quad \text{یا} \quad \hat{A}_{\text{قدیم}} = \hat{U}^\dagger \hat{A}_{\text{جدید}} \hat{U} \quad (۲۳۸-۲)$$

می‌توانیم نتیجه‌های مربوط به تغییر پایه را با رابطه‌های زیر خلاصه کنیم:

$$|\psi_{\text{جدید}}\rangle = \hat{U} |\psi_{\text{قدیم}}\rangle, \quad \langle \psi_{\text{جدید}} | = \langle \psi_{\text{قدیم}} | \hat{U}^\dagger, \quad \hat{A}_{\text{جدید}} = \hat{U} \hat{A}_{\text{قدیم}} \hat{U}^\dagger \quad (۲۳۹-۲)$$

یا

$$|\psi_{\text{قدیم}}\rangle = \hat{U}^\dagger |\psi_{\text{جدید}}\rangle, \quad \langle \psi_{\text{قدیم}} | = \langle \psi_{\text{جدید}} | \hat{U}, \quad \hat{A}_{\text{قدیم}} = \hat{U}^\dagger \hat{A}_{\text{جدید}} \hat{U} \quad (۲۴۰-۲)$$

این رابطه‌ها مشابه با رابطه‌هایی هستند که هنگام مطالعه‌ی تبدیلات یکانی به دست آوردیم ((۲-۱۴۶) و (۲-۱۴۷) را ببینید).

## مثال ۱۷-۲

نشان دهید که عملگر  $\hat{U} = \sum_n |\phi'_n\rangle \langle \phi_n|$  در تمام ویژگی‌هایی که در بالا بحث شد، صدق می‌کند.

حل

ابتدا توجه کنید که  $\hat{U}$  یکانی است:

$$\hat{U} \hat{U}^\dagger = \sum_{nl} |\phi'_n\rangle \langle \phi_n | \phi_l \rangle \langle \phi'_l | = \sum_{nl} |\phi'_n\rangle \langle \phi'_l | \delta_{nl} = \sum_n |\phi'_n\rangle \langle \phi'_n| = \hat{I} \quad (۲۴۱-۲)$$

دوم این که اثر  $\hat{U}$  روی یک کت از پایه قدیم، کت متناظر از پایه جدید را به دست می‌دهد:

$$\hat{U}|\phi_m\rangle = \sum_n |\phi'_n\rangle \langle \phi_n | \phi_m \rangle = \sum_n |\phi'_n\rangle \delta_{nm} = |\phi'_m\rangle \quad (2-242)$$

همچنین می‌توانیم نشان دهیم که اثر  $\hat{U}^\dagger$  روی یک کت از پایه جدید، کت متناظر از پایه قدیم را به دست می‌دهد:

$$\hat{U}^\dagger|\phi'_m\rangle = \sum_l |\phi_l\rangle \langle \phi'_l | \phi'_m \rangle = \sum_l |\phi_l\rangle \delta_{lm} = |\phi_m\rangle \quad (2-243)$$

اما رد تحت تبدیلات یکانی چگونه تبدیل می‌شود؟ در پاسخ باید گفت که با استفاده از ویژگی چرخه‌ای رد ( $\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}\hat{C}) = \text{Tr}(\hat{C}\hat{A}\hat{B}) = \text{Tr}(\hat{B}\hat{C}\hat{A})$ ) می‌توانیم تحقیق کنیم که

$$\text{Tr}(\hat{A}') = \text{Tr}(\hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger) = \text{Tr}(\hat{U}^\dagger\hat{U}\hat{A}) = \text{Tr}(\hat{A}) \quad (2-244)$$

$$\begin{aligned} \text{Tr}(|\phi_n\rangle\langle\phi_m|) &= \sum_l \langle \phi_l | \phi_n \rangle \langle \phi_m | \phi_l \rangle = \sum_l \langle \phi_m | \phi_l \rangle \langle \phi_l | \phi_n \rangle \\ &= \langle \phi_m | \left( \sum_l |\phi_l\rangle\langle\phi_l| \right) | \phi_n \rangle = \langle \phi_m | \phi_n \rangle = \delta_{mn} \end{aligned} \quad (2-245)$$

$$\text{Tr}(|\phi'_m\rangle\langle\phi_n|) = \langle \phi_n | \phi'_m \rangle \quad (2-246)$$

مثال ۲-۱۸ (رد مستقل از پایه است)

نشان دهید که رد یک عملگر به پایه‌ای که در آن بیان می‌شود، بستگی ندارد.

حل

بیانید نشان دهیم که رد عملگر  $\hat{A}$  در پایه  $\{|\phi_n\rangle\}$  برابر با رد آن در پایه دیگر  $\{|\phi'_n\rangle\}$  است. نخست این که رد  $\hat{A}$  در پایه  $\{|\phi_n\rangle\}$  از رابطه‌ی

$$\text{Tr}(\hat{A}) = \sum_n \langle \phi_n | \hat{A} | \phi_n \rangle \quad (2-247)$$

و در پایه  $\{|\phi'_n\rangle\}$  از رابطه‌ی

$$\text{Tr}(\hat{A}) = \sum_n \langle \phi'_n | \hat{A} | \phi'_n \rangle \quad (2-248)$$

به دست می‌آید. با شروع از (۲۴۷-۲) و با استفاده از کامل بودن پایه‌ی دیگر  $(\{|\phi'_n\rangle\})$  داریم:

$$\begin{aligned}\text{Tr}(\hat{A}) &= \sum_n \langle \phi_n | \hat{A} | \phi_n \rangle = \sum_n \langle \phi_n | \left( \sum_m |\phi'_m\rangle \langle \phi'_m| \right) \hat{A} | \phi_n \rangle \\ &= \sum_{nm} \langle \phi_n | \phi'_m \rangle \langle \phi'_m | \hat{A} | \phi_n \rangle\end{aligned}\quad (249-2)$$

اکنون تمام آنچه که باید انجام دهیم، تعویض مکان عددی‌های (زده‌های)  $\langle \phi'_m | \hat{A} | \phi_n \rangle$  و  $\langle \phi_n | \phi'_m \rangle$  است:

$$\text{Tr}(\hat{A}) = \sum_m \langle \phi'_m | \hat{A} \left( \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| \right) | \phi'_m \rangle = \sum_m \langle \phi'_m | \hat{A} | \phi'_m \rangle \quad (250-2)$$

از (۲۴۹-۲) و (۲۵۰-۲) می‌بینیم که

$$\text{Tr}(\hat{A}) = \sum_n \langle \phi_n | \hat{A} | \phi_n \rangle = \sum_n \langle \phi'_n | \hat{A} | \phi'_n \rangle \quad (251-2)$$

### ۳-۵-۲ نمایش ماتریسی مسأله‌ی ویژه‌مقدار

در اینجا مسأله‌ی ما کار کردن روی نمایش ماتریسی مسأله‌ی ویژه‌مقدار (۱۲۶-۲) و سپس حل آن است. یعنی می‌خواهیم ویژه‌مقدارهای  $a$  و ویژه‌بردارهای  $|\psi\rangle$  عملگر  $\hat{A}$  را طوری پیدا کنیم که

$$\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle \quad (252-2)$$

که در آن  $a$  یک عدد مختلط است. با وارد کردن عملگریکه بین  $\hat{A}$  و  $|\psi\rangle$  و ضرب آن در  $\langle \phi_m |$  می‌توانیم معادله‌ی ویژه‌مقدار را به شکل زیر بنویسیم:

$$\langle \phi_m | \hat{A} \left( \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| \right) |\psi\rangle = a \langle \phi_m | \left( \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| \right) |\psi\rangle \quad (253-2)$$

یا

$$\sum_n A_{mn} \langle \phi_n | \psi \rangle = a \sum_n \langle \phi_n | \psi \rangle \delta_{nm} \quad (254-2)$$

که می‌توان آن را به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$\sum_n [A_{mn} - a\delta_{nm}] \langle \phi_n | \psi \rangle = 0 \quad (255-2)$$

که در آن  $A_{mn} = \langle \phi_m | \hat{A} | \phi_n \rangle$  است.

این معادله دستگامی از معادله‌های نامتناهی و همگن را برای ضریب‌های  $\langle \phi_n | \psi \rangle$  نمایش می‌دهد زیرا پایه‌ی  $\{|\phi_n\rangle\}$  از تعدادی نامتناهی ازکت‌های پایه ساخته شده است. این دستگاه معادله‌ها تنها زمانی جواب‌های غیرصفر دارد که دترمینان آن صفر شود:

$$\det(A_{mn} - a\delta_{nm}) = 0 \quad (2-256)$$

مشکلی که در اینجا پیش می‌آید این است که این دترمینان متناظر با ماتریسی با تعداد نامتناهی ستون و سطر است. برای حل (2-256) باید پایه‌ی  $\{|\phi_n\rangle\}$  را کاهش دهیم و فرض کنیم که پایه تنها  $N$  جمله دارد که در آن  $N$  باید به اندازه‌ی کافی بزرگ باشد تا همگرایی را تضمین کند. در این حالت می‌توانیم (2-256) را به دترمینان درجه‌ی  $N$  ام زیرکاهش دهیم:

$$\begin{vmatrix} A_{11} - a & A_{12} & A_{13} & \dots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22} - a & A_{23} & \dots & A_{2N} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} - a & \dots & A_{3N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N1} & A_{N2} & A_{N3} & \dots & A_{NN} - a \end{vmatrix} = 0 \quad (2-257)$$

که به عنوان معادله‌ی مشخصه شناخته می‌شود. جواب‌های این معادله،  $N$  ویژه‌مقدار  $a_1, a_2, a_3, \dots, a_N$  و نتیجه می‌دهد زیرا این معادله یک معادله‌ی مرتبه‌ی  $N$  برحسب  $a$  است. مجموعه‌ی این  $N$  ویژه‌مقدار، طیف  $\hat{A}$  نامیده می‌شود. با دانستن مجموعه‌ی ویژه‌مقدارهای  $a_1, a_2, a_3, \dots, a_N$  و به سادگی می‌توانیم مجموعه‌ی ویژه‌بردارهای متناظر  $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, \dots$  و  $|\phi_N\rangle$  را تعیین کنیم. به‌ازای هر ویژه‌مقدار  $a_m$  عملگر  $\hat{A}$  می‌توانیم از معادله‌ی «مشخصه‌ی» (2-257)،  $N$  مؤلفه‌ی  $\langle \phi_1 | \psi \rangle, \langle \phi_2 | \psi \rangle, \dots, \langle \phi_N | \psi \rangle$  و ویژه‌بردار متناظر  $|\phi_m\rangle$  را به‌دست آوریم.

اگر تعدادی از ویژه‌بردارهای متفاوت (دو ویژه‌بردار یا بیشتر)، ویژه‌مقدار یکسانی داشته باشند آنگاه به این ویژه‌مقدار، واگن گفته می‌شود. مرتبه‌ی واگنی توسط تعداد ویژه‌بردارهای مستقل خطی که ویژه‌مقدار یکسانی دارند، تعیین می‌شود. به عنوان مثال، اگر یک ویژه‌مقدار پنج ویژه‌بردار متفاوت داشته باشد آنگاه به آن واگن پنج‌گانه گفته می‌شود.

در حالتی که در آن مجموعه‌ی ویژه‌بردارهای  $|\phi_n\rangle$  عملگر  $\hat{A}$  کامل و متعامد بهنجار باشند، می‌توان از

این مجموعه به عنوان پایه استفاده کرد. در این پایه ماتریس نمایش دهنده عملگر  $\hat{A}$  قطری است:

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & a_2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & a_3 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (2-258)$$

عناصرهای قطری ویژه‌مقدارهای  $a_n$  عملگر  $\hat{A}$  هستند زیرا

$$\langle \phi_m | \hat{A} | \phi_n \rangle = a_n \langle \phi_m | \phi_n \rangle = a_n \delta_{mn} \quad (2-259)$$

توجه کنید که رد و درمیان یک ماتریس به ترتیب از جمع و ضرب ویژه‌مقدارها به دست می‌آیند:

$$\text{Tr}(A) = \sum_n a_n = a_1 + a_2 + a_3 + \dots \quad (2-260)$$

$$\det(A) = \prod_n a_n = a_1 a_2 a_3 \dots \quad (2-261)$$

### ویژگی‌های درمیان‌ها

بیاید چند ویژگی مفید که به درمیان‌ها مربوط می‌شود را یادآوری کنیم. درمیان ضرب ماتریس‌ها برابر با ضرب درمیان آن ماتریس‌ها است:

$$\det(ABCD \dots) = \det(A) \cdot \det(B) \cdot \det(C) \cdot \det(D) \dots \quad (2-262)$$

$$\det(A^*) = (\det(A))^*, \quad \det(A^\dagger) = (\det(A))^* \quad (2-263)$$

$$\det(A^T) = \det(A), \quad \det(A) = e^{\text{Tr}(\ln A)} \quad (2-264)$$

### چند قضیه مربوط به مسأله‌ی ویژه‌مقدار

در اینجا فهرستی از قضیه‌های مفید را ارائه می‌کنیم (اثبات این قضیه‌ها به صورت تمرین باقی گذاشته شده است):

- ویژه‌مقدارهای یک ماتریس متقارن حقیقی‌اند و ویژه‌بردارها یک پایه‌ی متعامد بهنجار را تشکیل می‌دهند.

- ویژه‌مقدارهای یک ماتریس پادمتقارن موهومی محض یا صفرند.



- ویژه‌مقدارهای یک ماتریس هرمیتی حقیقی‌اند و ویژه‌بردارها یک پایه‌ی متعامد بهنجار را تشکیل می‌دهند.
- ویژه‌مقدارهای یک ماتریس پادهرمیتی موهومی محض یا صفرند.
- ویژه‌مقدارهای یک ماتریس یکانی مقدار مطلقاً برابر با یک دارند.
- هرگاه ویژه‌مقدارهای یک ماتریس مربعی واگن نباشند (متمايز باشند) آنگاه ویژه‌بردارهای متناظر یک پایه را تشکیل می‌دهند (یعنی یک مجموعه‌ی مستقل خطی را تشکیل می‌دهند).

مثال ۲-۱۹ (ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای یک ماتریس)

ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای بهنجار ماتریس زیر را بیابید.

$$A = \begin{pmatrix} 7 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -i \\ 0 & i & -1 \end{pmatrix}$$

حل

برای یافتن ویژه‌مقدارهای  $A$  کافی است معادله‌ی مشخصه‌ی  $\det(A - aI) = 0$  را حل کنیم.

$$0 = \begin{vmatrix} 7-a & 0 & 0 \\ 0 & 1-a & -i \\ 0 & i & -1-a \end{vmatrix} = (7-a) [-(1-a)(1+a) + i^2] = (7-a)(a^2 - 2) \quad (2-265)$$

بنابراین ویژه‌مقدارهای  $A$  به صورت زیر هستند:

$$a_1 = 7, \quad a_2 = \sqrt{2}, \quad a_3 = -\sqrt{2} \quad (2-266)$$

حال بیابید ویژه‌بردارهای  $A$  را محاسبه کنیم. برای یافتن ویژه‌بردار متناظر با ویژه‌مقدار نخست ( $a_1 = 7$ ) باید معادله‌ی ماتریسی زیر را حل کنیم:

$$\begin{pmatrix} 7 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -i \\ 0 & i & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = 7 \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \implies \begin{cases} 7x = 7x \\ y - iz = 7y \\ iy - z = 7z \end{cases} \quad (2-267)$$

این کار نتیجه‌ی؛  $x = 1$  (زیرا ویژه‌بردار بهنجار است) و  $y = z = 0$  را به‌دنبال دارد. بنابراین ویژه‌بردار متناظر با  $a_1 = 1$  با ماتریس ستونی زیر داده می‌شود:

$$|a_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (268-2)$$

این ویژه‌بردار بهنجار است زیرا  $\langle a_1 | a_1 \rangle = 1$ .

می‌توان ویژه‌بردار متناظر با ویژه‌مقدار دوم ( $a_2 = \sqrt{2}$ ) را از معادله‌ی ماتریسی زیر به‌دست

آورد:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -i \\ 0 & i & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \sqrt{2} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \implies \begin{aligned} (1 - \sqrt{2})x &= 0 \\ (1 - \sqrt{2})y - iz &= 0 \\ iy - (1 + \sqrt{2})z &= 0 \end{aligned} \quad (269-2)$$

که  $x = 0$  و  $z = i(\sqrt{2} - 1)y$  را نتیجه می‌دهد. بنابراین ویژه‌بردار متناظر با  $a_2 = \sqrt{2}$  از ماتریس ستونی زیر به‌دست می‌آید:

$$|a_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ y \\ i(\sqrt{2} - 1)y \end{pmatrix} \quad (270-2)$$

می‌توان مقدار متغیر  $y$  را از شرط بهنجارش  $|a_2\rangle$  به‌دست آورد:

$$1 = \langle a_2 | a_2 \rangle = \begin{pmatrix} 0 & y^* & -i(\sqrt{2} - 1)y^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ y \\ i(\sqrt{2} - 1)y \end{pmatrix} = 2(2 - \sqrt{2})|y|^2 \quad (271-2)$$

تنها با در نظر گرفتن مقدار مثبت  $y$  (اگر شخص علاقمند به مقدار منفی  $y$  باشد آنگاه می‌توان محاسبات مشابهی را به آسانی انجام داد) داریم:  $y = 1/\sqrt{2(2 - \sqrt{2})}$ . از این رو ویژه‌بردار (270-2) به صورت زیر در می‌آید:

$$|a_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2(2 - \sqrt{2})}} \\ \frac{i(\sqrt{2} - 1)}{\sqrt{2(2 - \sqrt{2})}} \end{pmatrix} \quad (272-2)$$

با پیروی از روندی که به (۲-۲۷۲) انجامید، می‌توانیم نشان دهیم که ویژه‌بردار سوم به صورت زیر است:

$$|a_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ y \\ -i(1 + \sqrt{2})y \end{pmatrix} \quad (2-273)$$

که بهنجارش آن به  $y = 1/\sqrt{2(2 + \sqrt{2})}$  می‌انجامد (تنها مقدار مثبت  $y$  را در نظر گرفته‌ایم) از این رو

$$|a_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2(2 + \sqrt{2})}} \\ \frac{-i(1 + \sqrt{2})}{\sqrt{2(2 + \sqrt{2})}} \end{pmatrix} \quad (2-274)$$

## ۶-۲ نمایش در پایه‌های پیوسته

در این بخش قصد داریم نمایش بردارهای حالت، براها و عملگرها را در پایه‌های پیوسته در نظر بگیریم. پس از ارائه‌ی صورت‌بندی کلی، دو کاربرد مهم را بررسی خواهیم کرد: نمایش در فضای مکان و فضای تکانه.

در بخش قبل دیدیم که نمایش کت‌ها، براها و عملگرها در یک پایه‌ی گسسته توسط ماتریس‌های گسسته صورت می‌پذیرد. در اینجا نشان خواهیم داد که این کمیت‌ها توسط ماتریس‌های پیوسته یعنی به وسیله‌ی ماتریس‌های نامتناهی غیرقابل شمارش در یک پایه‌ی پیوسته نمایش داده می‌شوند.

### ۱-۶-۲ بحث عمومی

شرط متعامد بهنجار بودن کت‌های پایه‌ی پیوسته  $|\chi_k\rangle$  به وسیله‌ی دلتای کرونکر گسسته‌ی معمول مانند (۲-۱۷۰) بیان نمی‌شود بلکه به جای آن باید از تابع دلتای پیوسته‌ی دیراک استفاده کنیم:

$$\langle \chi_k | \chi_{k'} \rangle = \delta(k' - k) \quad (2-275)$$

که در آن  $k$  و  $k'$  پارامتر پیوسته‌اند و  $\delta(k' - k)$  تابع دلتای دیراک است (پیوست الف را ببینید) که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk \quad (2-276)$$

در رابطه با شرط کامل بودن این پایه‌ی پیوسته باید گفت که این شرط به وسیله‌ی یک جمع گسسته مانند (۲-۱۷۲) داده نمی‌شود بلکه توسط یک انتگرال روی متغیر پیوسته داده می‌شود:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk |\chi_k\rangle \langle \chi_k| = \hat{I} \quad (2-277)$$

که در آن  $\hat{I}$  عملگر یکه است.

می‌توان هر بردار حالت  $|\psi\rangle$  را برحسب مجموعه‌ی کاملی از کت‌های پایه  $|\chi_k\rangle$  بسط داد:

$$|\psi\rangle = \hat{I}|\psi\rangle = \left( \int_{-\infty}^{+\infty} dk |\chi_k\rangle \langle \chi_k| \right) |\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dk b(k) |\chi_k\rangle \quad (2-278)$$

که در آن  $b(k)$  (که برابر با  $\langle \chi_k | \psi \rangle$  است) تصویر  $|\psi\rangle$  روی  $|\chi_k\rangle$  را نمایش می‌دهد.

هنجار کت‌های پایه‌ی گسسته متناهی است ( $\langle \phi_n | \phi_n \rangle = 1$ ) ولی هنجار کت‌های پایه‌ی پیوسته نامتناهی است. ترکیب (۲-۲۷۵) و (۲-۲۷۶) به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\langle \chi_k | \chi_k \rangle = \delta(0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \rightarrow \infty \quad (2-279)$$

این رابطه بیان می‌کند که کت‌های  $|\chi_k\rangle$  انتگرال‌پذیر مجذوری نیستند و از این رو عنصرهای فضای هیلبرت نیستند. به یاد بیاورید که فضای پوشش داده شده توسط تابع‌های انتگرال‌پذیر مجذوری یک فضای هیلبرت است. با وجود واگرایی هنجار  $|\chi_k\rangle$ ، مجموعه‌ی  $|\chi_k\rangle$  یک پایه‌ی معتبر از بردارهایی که فضای هیلبرت را پوشش می‌دهند، بنا می‌کند زیرا به‌ازای هر بردار حالت  $|\psi\rangle$  ضرب نرده‌ای  $\langle \chi_k | \psi \rangle$  متناهی است.

### تابع دلتای دیراک

قبل از پرداختن به نمایش کت‌ها، براها و عملگرها، بیایید برخی از مهمترین ویژگی‌های تابع دلتای دیراک را فهرست کنیم (برای جزئیات بیشتر، پیوست الف را ببینید):

$$\delta(x) = 0 \quad x \neq 0 \quad (2-280)$$

$$\int_a^b f(x) \delta(x - x_0) dx = \begin{cases} f(x_0) & \text{اگر } a < x_0 < b \\ 0 & \text{در جاهای دیگر} \end{cases} \quad (2-281)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \frac{d^n \delta(x-a)}{dx^n} dx = (-1)^n \frac{d^n f(x)}{dx^n} \Big|_{x=a} \quad (2-282)$$

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \delta(x - x') \delta(y - y') \delta(z - z') = \frac{1}{r^2 \sin \theta} \delta(r - r') \delta(\theta - \theta') \delta(\varphi - \varphi') \quad (2-283)$$

نمایش کت‌ها، براها و عملگرها

به آسانی می‌توان نمایش کت‌ها، براها و عملگرها را از مطالعه‌ای که در بخش قبل (که برای مورد یک پایه‌ی گسسته) انجام شد، نتیجه گرفت. به عنوان مثال کت  $|\psi\rangle$  به وسیله‌ی یک ماتریس تک‌ستونی (که دارای تعدادی مؤلفه‌ی پیوسته‌ی نامتناهی و غیرقابل شمارش سطری  $b(k)$  است) نمایش داده می‌شود:

$$|\psi\rangle \longrightarrow \begin{pmatrix} \vdots \\ \langle \chi_k | \psi \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (2-284)$$

برای  $|\psi\rangle$  به وسیله‌ی یک ماتریس تک‌سطری (که دارای تعدادی مؤلفه‌ی پیوسته‌ی نامتناهی و غیرقابل شمارش ستونی است) نمایش داده می‌شود:

$$\langle \psi | \longrightarrow (\dots \langle \psi | \chi_k \rangle \dots) \quad (2-285)$$

عملگرها به وسیله‌ی ماتریس‌های پیوسته‌ی مربعی که سطرها و ستون‌های آنها دارای تعداد پیوسته و نامتناهی مؤلفه است، نمایش داده می‌شوند:

$$\hat{A} \longrightarrow \begin{pmatrix} \ddots & \vdots & \ddots \\ \dots & A(k, k') & \dots \\ \ddots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (2-286)$$

به عنوان یک کاربرد، قصد داریم نمایش در پایه‌های مکان و تکانه را بررسی کنیم.

## ۲-۶-۲ نمایش مکان

در نمایش مکان، پایه از مجموعه‌ای نامتناهی از بردارهای  $\{|\mathbf{r}\rangle\}$  تشکیل شده است که ویژه‌کت‌های عملگر مکان  $\hat{\mathbf{R}}$  هستند:

$$\hat{\mathbf{R}}|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle \quad (2-287)$$

که در آن  $\mathbf{r}$  (بدون کلاه) (بردار مکان) ویژه‌مقدار عملگر  $\hat{\mathbf{R}}$  است. شرط‌های متعامد بهنجار و کامل بودن به ترتیب از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \delta(x - x')\delta(y - y')\delta(z - z') \quad (2-288)$$

$$\int d^3r |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}| = \hat{I} \quad (2-289)$$

چون (همانطور که در پیوست الف بحث شد) تابع دلتای سه‌بعدی از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \quad (2-290)$$

بنابراین می‌توان هر بردار حالت  $|\psi\rangle$  را به صورت زیر بسط داد:

$$|\psi\rangle = \int d^3r |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r} | \psi \rangle \equiv \int d^3r \psi(\mathbf{r}) |\mathbf{r}\rangle \quad (2-291)$$

که در آن  $\psi(\mathbf{r})$  مؤلفه‌های  $|\psi\rangle$  در پایه‌ی  $\{|\mathbf{r}\rangle\}$  را نمایش می‌دهد:

$$\langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \psi(\mathbf{r}) \quad (2-292)$$

که به عنوان تابع موج بردار حالت  $|\psi\rangle$  شناخته می‌شود. به یاد بیاورید که (مطابق با تفسیر احتمالاتی بورن) کمیت  $d^3r |\langle \mathbf{r} | \psi \rangle|^2$  احتمال یافتن سیستم در المان حجم  $d^3r$  را نشان می‌دهد. می‌توان ضرب نرده‌ای بین دو بردار حالت  $|\psi\rangle$  و  $|\phi\rangle$  را به صورت زیر بیان نمود:

$$\langle \phi | \psi \rangle = \langle \phi | \left( \int d^3r |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r} | \right) | \psi \rangle = \int d^3r \phi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad (2-293)$$

چون  $\langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{R}} | \mathbf{r} \rangle = \mathbf{r} | \mathbf{r} \rangle$  است، داریم:

$$\langle \mathbf{r}' | \hat{\mathbf{R}}^n | \mathbf{r} \rangle = \mathbf{r}^n \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \quad (2-294)$$

توجه کنید که عملگر  $\hat{\mathbf{R}}$  هرمیتی است زیرا

$$\begin{aligned} \langle \phi | \hat{\mathbf{R}} | \psi \rangle &= \int d^3r \mathbf{r} \langle \phi | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \left[ \int d^3r \mathbf{r} \langle \psi | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \phi \rangle \right]^* \\ &= \langle \psi | \hat{\mathbf{R}} | \phi \rangle^* \end{aligned} \quad (2-295)$$

### ۳-۶-۲ نمایش تکانه

پایه‌ی  $\{|\mathbf{p}\rangle\}$  نمایش تکانه از ویژه‌ت‌های عملگر تکانه  $\hat{\mathbf{P}}$  به دست می‌آید:

$$\hat{\mathbf{P}} |\mathbf{p}\rangle = \mathbf{p} |\mathbf{p}\rangle \quad (2-296)$$

که در آن  $\mathbf{p}$  بردار تکانه است. جبر مربوط به این نمایش را می‌توان به آسانی از نمایش مکان نتیجه گرفت. شرط‌های متعامد بهنجار و کامل بودن پایه‌ی فضای تکانه  $|\mathbf{p}\rangle$  از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$\langle \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \quad \text{و} \quad \int d^3p |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}| = \hat{I} \quad (2-297)$$

با بسط  $|\psi\rangle$  در این پایه به دست می‌آوریم:

$$|\psi\rangle = \int d^3p |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}|\psi\rangle = \int d^3p \Psi(\mathbf{p}) |\mathbf{p}\rangle \quad (2-298)$$

که در آن ضریب بسط  $\Psi(\mathbf{p})$  تابع موج فضای تکانه را نمایش می‌دهد. کمیت  $|\Psi(\mathbf{p})|^2 d^3p$  احتمال یافتن تکانه‌ی سیستم در المان حجم  $d^3p$  واقع بین  $\mathbf{p}$  و  $\mathbf{p} + d\mathbf{p}$  است.

در تشابه با (۲-۲۹۳)، ضرب نرده‌ای بین دو حالت در فضای تکانه از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\langle \phi|\psi\rangle = \langle \phi| \left( \int d^3p |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}| \right) |\psi\rangle = \int d^3p \Phi^*(\mathbf{p}) \Psi(\mathbf{p}) \quad (2-299)$$

چون  $\hat{\mathbf{P}}|\mathbf{p}\rangle = \mathbf{p}|\mathbf{p}\rangle$  است، داریم:

$$\langle \mathbf{p}'|\hat{\mathbf{P}}^n|\mathbf{p}\rangle = \mathbf{p}^n \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \quad (2-300)$$

## ۲-۶-۴ ارتباط بین نمایش‌های مکان و تکانه

حال بیایید به مطالعه‌ی چگونگی ایجاد ارتباط بین نمایش‌های مکان و تکانه بپردازیم. در تشابه با بحث پیشین (هنگام تغییر از پایه‌ی  $\{|r\rangle\}$  به پایه‌ی  $\{|\mathbf{p}\rangle\}$ ) با تابع تبدیل  $\langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle$  روبرو می‌شویم.

برای یافتن عبارت مربوط به تابع تبدیل  $\langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle$ ، ارتباطی بین نمایش‌های مکان و تکانه‌ی بردار حالت  $|\psi\rangle$  برقرار کنیم:

$$\langle \mathbf{r}|\psi\rangle = \langle \mathbf{r}| \left( \int d^3p |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}| \right) |\psi\rangle = \int d^3p \langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle \Psi(\mathbf{p}) \quad (2-301)$$

یعنی

$$\psi(\mathbf{r}) = \int d^3p \langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle \Psi(\mathbf{p}) \quad (2-302)$$

به صورت مشابه، می‌توانیم بنویسیم:

$$\Psi(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p}|\psi\rangle = \langle \mathbf{p}| \int d^3r |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}|\psi\rangle = \int d^3r \langle \mathbf{p}|\mathbf{r}\rangle \psi(\mathbf{r}) \quad (2-303)$$

دو رابطه‌ی آخر بیان می‌کنند که  $\Psi(\mathbf{p})$  و  $\psi(\mathbf{r})$  تبدیل فوریه‌ی یکدیگرند. در مکانیک کوانتومی تبدیل فوریه‌ی تابع  $f(\mathbf{r})$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$f(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} g(\mathbf{p}) \quad (2-304)$$

به حضور ثابت پلانک توجه کنید. از این رو تابع  $\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^{3/2}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \quad (305-2)$$

این تابع، تبدیل از نمایش تکانه به نمایش مکان را انجام می‌دهد. تابع متناظر با تبدیل وارون  $\langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle = \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle^* = \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^{3/2}} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \quad (306-2)$$

کمیت  $|\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle|^2$  چگالی احتمال یافتن ذره در ناحیه‌ای حول  $\mathbf{r}$  را، که در آن تکانه‌ی ذره برابر با  $\mathbf{p}$  است، نمایش می‌دهد.

### ملاحظات

هرگاه تابع موج مکان

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^{3/2}} \int d^3p e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \Psi(\mathbf{p}) \quad (307-2)$$

بهنجار باشد (یعنی  $\int d^3r \psi(\mathbf{r})\psi^*(\mathbf{r}) = 1$ ) آنگاه تبدیل فوریه‌ی آن

$$\Psi(\mathbf{p}) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^{3/2}} \int d^3r e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \psi(\mathbf{r}) \quad (308-2)$$

نیز باید بهنجار باشد زیرا

$$\begin{aligned} \int d^3p \Psi^*(\mathbf{p})\Psi(\mathbf{p}) &= \int d^3p \Psi^*(\mathbf{p}) \left[ \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^{3/2}} \int d^3r e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \psi(\mathbf{r}) \right] \\ &= \int d^3r \psi(\mathbf{r}) \left[ \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^{3/2}} \int d^3p \Psi^*(\mathbf{p}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \right] \\ &= \int d^3r \psi(\mathbf{r})\psi^*(\mathbf{r}) \\ &= 1 \end{aligned} \quad (309-2)$$

این نتیجه به عنوان قضیه‌ی پارسوال شناخته می‌شود.



## ۲-۶-۴ عملگر تکانه در نمایش مکان

برای تعیین شکل عملگر تکانه  $\hat{\mathbf{P}}$  در نمایش مکان،  $\langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{P}} | \psi \rangle$  را محاسبه می‌کنیم:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{P}} | \psi \rangle &= \int \langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{P}} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \psi \rangle d^3 p = \int \mathbf{p} \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \psi \rangle d^3 p \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \mathbf{p} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \Psi(\mathbf{p}) d^3 p \end{aligned} \quad (۳۱۰-۲)$$

که در آن از رابطه  $\int |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}| d^3 p = \hat{I}$  همراه با معادله‌ی (۲-۵-۳) استفاده کرده‌ایم. حال چون  $\mathbf{p} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} = -i\hbar \nabla e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}$  است و با استفاده‌ی دوباره از معادله‌ی (۲-۵-۳)، می‌توانیم (۲-۳۱۰) را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{P}} | \psi \rangle &= -i\hbar \nabla \left( \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \Psi(\mathbf{p}) d^3 p \right) \\ &= -i\hbar \nabla \left( \int \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \psi \rangle d^3 p \right) \\ &= -i\hbar \nabla \langle \mathbf{r} | \psi \rangle \end{aligned} \quad (۳۱۱-۲)$$

بنابراین  $\hat{\mathbf{P}}$  در نمایش مکان از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar \nabla \quad (۳۱۲-۲)$$

مؤلفه‌های دکارتی آن عبارتند از

$$\hat{P}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{P}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{P}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \quad (۳۱۳-۲)$$

توجه کنید که می‌توان شکل عملگر تکانه‌ی (۲-۳۱۲) را به سادگی و تنها با اعمال عملگر گرادینان  $\nabla$  روی تابع موج تخت  $\psi(\mathbf{r}, t) = A e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - Et)/\hbar}$  به دست آورد:

$$-i\hbar \nabla \psi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{p} \psi(\mathbf{r}, t) = \hat{\mathbf{P}} \psi(\mathbf{r}, t) \quad (۳۱۴-۲)$$

اثبات این که  $\hat{\mathbf{P}}$  هرمیتی است، کار ساده‌ای است (معادله‌ی (۲-۳۷۸) را ببینید).

حال چون  $\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar \nabla$  است، می‌توانیم عملگر هامیلتونی  $\hat{H} = \hat{\mathbf{P}}^2 / (2m) + \hat{V}$  در نمایش مکان را به صورت زیر بنویسیم:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \hat{V}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \hat{V}(\mathbf{r}) \quad (۳۱۵-۲)$$

که در آن  $\nabla^2$  عملگر لاپلاسی است و در مختصات دکارتی از رابطه‌ی  $\nabla^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$  به دست می‌آید.

## ۲-۴-۶-۲ عملگر مکان در نمایش تکانه

می‌توان شکل عملگر مکان  $\hat{R}$  در نمایش تکانه را به آسانی از نمایش  $\hat{P}$  در فضای مکان نتیجه گرفت. می‌توان در فضای تکانه عملگر مکان را به صورت زیر نوشت:

$$\hat{R}_j = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_j} \quad (j = x, y, z) \quad (۳۱۶-۲)$$

یا

$$\hat{X} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x}, \quad \hat{Y} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_y}, \quad \hat{Z} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_z} \quad (۳۱۷-۲)$$

## ۳-۴-۶-۲ رابطه‌های جابه‌جایی مهم

حال بیایید جابه‌جاگر  $[\hat{R}_j, \hat{P}_k]$  را در نمایش مکان محاسبه کنیم. چون اثرهای جداگانه‌ی  $\hat{P}_x \hat{X}$  و  $\hat{X} \hat{P}_x$  روی تابع موج  $\psi(\mathbf{r})$  از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$\hat{X} \hat{P}_x \psi(\mathbf{r}) = -i\hbar x \frac{\partial \psi(\mathbf{r})}{\partial x} \quad (۳۱۸-۲)$$

$$\hat{P}_x \hat{X} \psi(\mathbf{r}) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x\psi(\mathbf{r})) = -i\hbar \psi(\mathbf{r}) - i\hbar x \frac{\partial \psi(\mathbf{r})}{\partial x} \quad (۳۱۹-۲)$$

بنابراین داریم:

$$\begin{aligned} [\hat{X}, \hat{P}_x] \psi(\mathbf{r}) &= \hat{X} \hat{P}_x \psi(\mathbf{r}) - \hat{P}_x \hat{X} \psi(\mathbf{r}) = -i\hbar x \frac{\partial \psi(\mathbf{r})}{\partial x} + i\hbar \psi(\mathbf{r}) + i\hbar x \frac{\partial \psi(\mathbf{r})}{\partial x} \\ &= i\hbar \psi(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (۳۲۰-۲)$$

یا

$$[\hat{X}, \hat{P}_x] = i\hbar \quad (۳۲۱-۲)$$

یک باره می‌توان رابطه‌های مشابهی را برای مؤلفه‌های  $y$  و  $z$  به دست آورد:

$$[\hat{X}, \hat{P}_x] = i\hbar, \quad [\hat{Y}, \hat{P}_y] = i\hbar, \quad [\hat{Z}, \hat{P}_z] = i\hbar \quad (۳۲۲-۲)$$

می‌توانیم ثابت کنیم که

$$[\hat{X}, \hat{P}_y] = [\hat{X}, \hat{P}_z] = [\hat{Y}, \hat{P}_x] = [\hat{Y}, \hat{P}_z] = [\hat{Z}, \hat{P}_x] = [\hat{Z}, \hat{P}_y] = 0 \quad (۳۲۳-۲)$$

چون درجه‌های آزادی  $x$ ،  $y$  و  $z$  مستقل‌اند، می‌توان دو رابطه‌ی قبل را به صورت زیر دسته‌بندی نمود:

$$[\hat{R}_j, \hat{P}_k] = i\hbar \delta_{jk}, \quad [\hat{R}_j, \hat{R}_k] = 0, \quad [\hat{P}_j, \hat{P}_k] = 0, \quad (j, k = x, y, z)$$

$$(۳۲۴-۲)$$

این رابطه‌ها اغلب رابطه‌های جابه‌جایی بندادی نامیده می‌شوند.

حال از (۲-۳۲۰) می‌توانیم نشان دهیم که (برای اثبات، مسأله‌ی حل شده‌ی ۲-۸ را ببینید)

$$[\hat{X}^n, \hat{P}_x] = i\hbar n \hat{X}^{n-1}, \quad [\hat{X}, \hat{P}_x^n] = i\hbar n \hat{P}_x^{n-1} \quad (۲-۳۲۵)$$

با پیروی از همان روندی که به (۲-۳۲۰) انجامید، می‌توانیم رابطه‌ی جابه‌جایی عمومی‌تری برای  $\hat{P}_x$  با تابع دلخواه  $f(\hat{X})$  به دست آوریم:

$$[f(\hat{X}), \hat{P}_x] = i\hbar \frac{df(\hat{X})}{d\hat{X}} \implies [\hat{P}, F(\hat{\mathbf{R}})] = -i\hbar \nabla F(\hat{\mathbf{R}}) \quad (۲-۳۲۶)$$

که در آن  $F$  تابعی از عملگر  $\hat{\mathbf{R}}$  است.

بنابراین شکل صریح عملگرها به نمایش اختیار شده بستگی دارد. دیدیم که رابطه جابه‌جایی برای عملگرها مستقل از نمایش‌اند. به خصوص اینکه جابه‌جاگر  $[\hat{R}_j, \hat{P}_k]$  در نمایش‌های مکان و تکانه از  $i\hbar\delta_{jk}$  به دست می‌آید (مثال بعدی را ببینید).

مثال ۲-۲۰ (جابه‌جاگرها مستقل از نمایش هستند)

جابه‌جاگر  $[\hat{X}, \hat{P}]$  را در نمایش تکانه محاسبه کنید و ثابت کنید که برابر با  $i\hbar$  است.

حل

با توجه به این که عملگر  $\hat{X}$  در نمایش تکانه از رابطه‌ی  $\hat{X} = i\hbar\partial/\partial p$  به دست می‌آید، داریم:

$$\begin{aligned} [\hat{X}, \hat{P}]\psi(p) &= \hat{X}\hat{P}\psi(p) - \hat{P}\hat{X}\psi(p) = i\hbar \frac{\partial}{\partial p}(p\psi(p)) - i\hbar p \frac{\partial \psi(p)}{\partial p} \\ &= i\hbar\psi(p) + i\hbar p \frac{\partial \psi(p)}{\partial p} - i\hbar p \frac{\partial \psi(p)}{\partial p} = i\hbar\psi(p) \end{aligned} \quad (۲-۳۲۷)$$

بنابراین جابه‌جاگر  $[\hat{X}, \hat{P}]$  در نمایش تکانه از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$[\hat{X}, \hat{P}] = \left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial p}, \hat{P} \right] = i\hbar \quad (۲-۳۲۸)$$

همچنین بیشتر نشان داده شد که جابه‌جاگر  $[\hat{X}, \hat{P}]$  در نمایش مکان برابر با  $i\hbar$  است (معادله‌ی (۲-۳۲۱) را ببینید):

$$[\hat{X}, \hat{P}] = - \left[ \hat{X}, i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x} \right] = i\hbar \quad (۲-۳۲۹)$$

## ۵-۶-۲ عملگر پاریتته

بازتاب فضا حول مبدا دستگانه مختصات، عمل وارونی یا پاریتته نامیده می‌شود. این تبدیل یک تبدیل گسسته است. عملگر پاریتته  $\hat{P}$  توسط اثر آن روی کت‌های  $|\mathbf{r}\rangle$  فضای مکان تعریف می‌شود:

$$\hat{P}|\mathbf{r}\rangle = |-\mathbf{r}\rangle, \quad \langle \mathbf{r}|\hat{P}^\dagger = \langle -\mathbf{r}| \quad (۳۳۰-۲)$$

به طوری که

$$\hat{P}\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}) \quad (۳۳۱-۲)$$

عملگر پاریتته هرمیتی است ( $\hat{P}^\dagger = \hat{P}$ ) زیرا

$$\begin{aligned} \int d^3r \phi^*(\mathbf{r}) [\hat{P}\psi(\mathbf{r})] &= \int d^3r \phi^*(\mathbf{r})\psi(-\mathbf{r}) = \int d^3r \phi^*(-\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \\ &= \int d^3r [\hat{P}\phi(\mathbf{r})]^* \psi(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (۳۳۲-۲)$$

از تعریف (۳۳۱-۲) داریم:

$$\hat{P}^2\psi(\mathbf{r}) = \hat{P}\psi(-\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) \quad (۳۳۳-۲)$$

از این رو  $\hat{P}^2$  برابر با عملگر یکانی است:

$$\hat{P}^2 = \hat{I} \quad \text{یا} \quad \hat{P} = \hat{P}^{-1} \quad (۳۳۴-۲)$$

بنابراین عملگر پاریتته یکانی است زیرا الحاقی هرمیتی آن برابر با وارون آن است:

$$\hat{P}^\dagger = \hat{P}^{-1} \quad (۳۳۵-۲)$$

اکنون با توجه به این که  $\hat{P}^2 = \hat{I}$  است، ویژه‌مقدارهای  $\hat{P}$  عبارتند از  $+1$  یا  $-1$  با ویژه‌حالت‌های متناظر

$$\hat{P}\psi_+(\mathbf{r}) = \psi_+(-\mathbf{r}) = \psi_+(\mathbf{r}), \quad \hat{P}\psi_-(\mathbf{r}) = \psi_-(-\mathbf{r}) = -\psi_-(\mathbf{r}) \quad (۳۳۶-۲)$$

به ویژه‌حالت  $|\psi_+\rangle$  زوج و به ویژه‌حالت  $|\psi_-\rangle$  فرد گفته می‌شود. بنابراین ویژه‌تابع‌های عملگر پاریتته، پاریتته‌ی معینی دارند: این ویژه‌تابع‌ها زوج یا فردند.

چون  $|\psi_+\rangle$  و  $|\psi_-\rangle$  ویژه‌حالت‌های مشترک عملگر هرمیتی  $\hat{P}$  هستند و ویژه‌مقدارهای متفاوتی دارند، بنابراین باید متعامد باشند:

$$\langle \psi_+ | \psi_- \rangle = \int d^3r \psi_+^*(-\mathbf{r})\psi_-(-\mathbf{r}) \equiv - \int d^3r \psi_+^*(\mathbf{r})\psi_-(\mathbf{r}) = -\langle \psi_+ | \psi_- \rangle \quad (۳۳۷-۲)$$

از این رو  $\langle \psi_+ | \psi_- \rangle$  صفر است. حالت‌های  $|\psi_+\rangle$  و  $|\psi_-\rangle$  مجموعه‌ی کاملی را تشکیل می‌دهند زیرا می‌توان هر تابعی را به صورت  $\psi(\mathbf{r}) = \psi_+(\mathbf{r}) + \psi_-(\mathbf{r})$  نوشت که به

$$\psi_+(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi(\mathbf{r}) + \psi(-\mathbf{r})], \quad \psi_-(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi(\mathbf{r}) - \psi(-\mathbf{r})] \quad (۳۳۸-۲)$$

می‌انجامد. چون  $\hat{P}^2 = \hat{I}$  است، داریم:

$$\hat{P}^n = \begin{cases} \hat{P} & \text{هنگامی که } n \text{ فرد است} \\ \hat{I} & \text{هنگامی که } n \text{ زوج است} \end{cases} \quad (۳۳۹-۲)$$

عملگرهای زوج و فرد

به عملگر  $\hat{A}$  زوج گفته می‌شود هرگاه از شرط زیر پیروی کند:

$$\hat{P}\hat{A}\hat{P} = \hat{A} \quad (۳۴۰-۲)$$

و به عملگر  $\hat{B}$  فرد گفته می‌شود هرگاه

$$\hat{P}\hat{B}\hat{P} = -\hat{B} \quad (۳۴۱-۲)$$

به آسانی می‌توانیم ثابت کنیم که عملگرهای زوج با عملگر پاریته  $\hat{P}$  جابه‌جا می‌شوند و عملگرهای فرد با  $\hat{P}$  پادجابه‌جا می‌شوند:

$$\hat{A}\hat{P} = (\hat{P}\hat{A}\hat{P})\hat{P} = \hat{P}\hat{A}\hat{P}^2 = \hat{P}\hat{A} \quad (۳۴۲-۲)$$

$$\hat{B}\hat{P} = -(\hat{P}\hat{B}\hat{P})\hat{P} = -\hat{P}\hat{B}\hat{P}^2 = -\hat{P}\hat{B} \quad (۳۴۳-۲)$$

این واقعیت که عملگرهای زوج با عملگر پاریته جابه‌جا می‌شوند، نتیجه‌های بسیار مفیدی دارد. در اینجا دو حالت مهم زیر را که در ارتباط با واگن یا غیر واگن بودن ویژه‌مقدارهای یک عملگر زوج است بررسی می‌کنیم.

- هرگاه یک عملگر زوج هرمیتی باشد و هیچ‌یک از ویژه‌مقدارهای آن واگن نباشند آنگاه این عملگر همان ویژه‌بردارهای عملگر پاریته را دارد و چون ویژه‌بردارهای عملگر پاریته زوج یا فردند، ویژه‌بردارهای یک عملگر زوج هرمیتی غیرواگن نیز باید زوج یا فرد باشند و گفته می‌شود که پاریته‌ی معینی دارند. این ویژگی زمانی که معادله‌ی شرودینگر را برای هامیلتونی‌های زوج حل می‌کنیم، کاربردهای مفیدی خواهد داشت.

• هرگاه عملگر زوج یک طیف واگن داشته باشد آنگاه ویژه بردارهای آن الزاماً پارتهی معینی ندارند.

اما در مورد پارتهی عملگرهای مکان و تکانه ( $\hat{P}$  و  $\hat{R}$ ) چه می توان گفت؟ می توانیم به آسانی نشان دهیم که هر دوی آنها فردند زیرا با عملگر پارته پادجابه جا می شوند:

$$\hat{P}\hat{R} = -\hat{R}\hat{P}, \quad \hat{P}\hat{P} = -\hat{P}\hat{P} \quad (۳۴۴-۲)$$

از این رو

$$\hat{P}\hat{R}\hat{P}^\dagger = -\hat{R}, \quad \hat{P}\hat{P}\hat{P}^\dagger = -\hat{P} \quad (۳۴۵-۲)$$

زیرا  $\hat{P}\hat{P}^\dagger = ۱$  است. به عنوان مثال، برای نشان دادن این که  $\hat{R}$  با  $\hat{P}$  پادجابه جا می شود، کافیس رابطه های زیر را ببینیم:

$$\hat{P}\hat{R}|r\rangle = r\hat{P}|r\rangle = r| -r\rangle \quad (۳۴۶-۲)$$

$$\hat{R}\hat{P}|r\rangle = \hat{R}| -r\rangle = -r| -r\rangle \quad (۳۴۷-۲)$$

اگر عملگرهای  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  به ترتیب زوج و فرد باشند آنگاه می توانیم ثابت کنیم که

$$\hat{P}\hat{A}^n\hat{P} = \hat{A}^n, \quad \hat{P}\hat{B}^n\hat{P} = (-۱)^n\hat{B}^n \quad (۳۴۸-۲)$$

می توان این رابطه ها را به صورت زیر نشان داد:

$$\hat{P}\hat{A}^n\hat{P} = (\hat{P}\hat{A}\hat{P})(\hat{P}\hat{A}\hat{P}) \dots (\hat{P}\hat{A}\hat{P}) = \hat{A}^n \quad (۳۴۹-۲)$$

$$\hat{P}\hat{B}^n\hat{P} = (\hat{P}\hat{B}\hat{P})(\hat{P}\hat{B}\hat{P}) \dots (\hat{P}\hat{B}\hat{P}) = (-۱)^n\hat{B}^n \quad (۳۵۰-۲)$$

## ۷-۲ مکانیک ماتریسی و مکانیک موجی

در این فصل تا کنون ریاضیات مربوط به مکانیک کوانتومی را در دو نمایش متفاوت بررسی کردیم: سیستم های با پایه گسسته و سیستم های با پایه پیوسته. نظریه مکانیک کوانتومی اساساً به حل مسأله ویژه مقدار زیر می پردازد:

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (۳۵۱-۲)$$

که در آن  $\hat{H}$  هامیلتونی سیستم است. این معادله عمومی است و به هیچ سیستم مختصات یا نمایشی بستگی ندارد. اما برای حل آن باید آن را در یک مجموعه پایه معلوم نمایش دهیم. آنگاه پیچیدگی وابسته به حل این معادله ویژه مقدار از یک پایه به پایه دیگر فرق می کند.

در ادامه قصد داریم تا نمایش این معادله ویژه مقدار را در یک پایه گسسته و سپس در یک پایه

پیوسته بررسی نماییم.

## ۱-۷-۲ مکانیک ماتریسی

نمایش مکانیک کوانتومی در یک پایه گسسته، یک مسأله‌ی ویژه‌مقدار ماتریسی را نتیجه می‌دهد. یعنی نمایش (۲-۳۵۱) در پایه گسسته‌ی  $\{|\phi_n\rangle\}$  معادله‌ی ویژه‌مقدار ماتریسی زیر را نتیجه می‌دهد (۲-۲۵۷):  
را ببینید:

$$\begin{vmatrix} H_{11} - E & H_{12} & H_{13} & \dots & H_{1N} \\ H_{21} & H_{22} - E & H_{23} & \dots & H_{2N} \\ H_{31} & H_{32} & H_{33} - E & \dots & H_{3N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{N1} & H_{N2} & H_{N3} & \dots & H_{NN} - E \end{vmatrix} = 0 \quad (2-352)$$

که یک معادله‌ی مرتبه‌ی  $N$  برحسب  $E$  است و جواب‌های آن طیف انرژی سیستم را نتیجه می‌دهند:  $E_1, E_2, E_3, \dots, E_N$ . با دانستن مجموعی ویژه‌مقدارهای  $E_1, E_2, E_3, \dots, E_N$  به سادگی می‌توانیم مجموعی ویژه‌بردارهای متناظر  $\langle\phi_1\rangle, \langle\phi_2\rangle, \dots, \langle\phi_N\rangle$  را تعیین کنیم.

قطری کردن ماتریس هامیلتونی سیستم (۲-۳۵۲)، طیف انرژی را علاوه بر بردارهای حالت سیستم به دست می‌دهد. این رویه (که توسط هایزنبرگ در پیش گرفته شد) تنها شامل کمیت‌های ماتریسی و معادله‌های ویژه‌مقدار ماتریسی است. این فرمول‌بندی مکانیک کوانتومی به عنوان مکانیک ماتریسی شناخته می‌شود. نقطه‌ی شروع هایزنبرگ (در تلاش برای یافتن پایه‌ای نظری برای ایده‌های بوهر) رابطه‌ی گذار اتمی  $\nu_{mn} = (E_m - E_n)/h$  بود که بسامدهای تابش وابسته به گذار الکترون از مدار  $m$  به مدار  $n$  را به دست می‌دهد. می‌توان بسامدهای  $\nu_{mn}$  را در یک ماتریس مربعی (که در آن عنصر  $mn$  متناظر با گذار از حالت کوانتومی  $m$  به حالت کوانتومی  $n$  است) مرتب کرد.

همچنین می‌توانیم ماتریس‌هایی را برای کمیت‌های دینامیکی دیگر مربوط به گذار  $n \rightarrow m$  بنا کنیم. در این روش، هر کمیت فیزیکی به وسیله‌ی یک ماتریس نمایش داده می‌شود. به عنوان مثال ترازهای انرژی را با ماتریس انرژی، مکان را با ماتریس مکان، تکانه را با ماتریس تکانه، تکانه‌ی زاویه‌ای را با ماتریس تکانه‌ی زاویه‌ای و ... نمایش می‌دهیم. بنابراین در محاسبه‌ی بزرگی کمیت‌های فیزیکی گوناگون با کمیت‌هایی سروکار داریم که با هم جابه‌جا نمی‌شوند زیرا ضرب ماتریس‌ها جابه‌جا نمی‌شود. این یک ویژگی اساسی است که مکانیک ماتریسی را از مکانیک کلاسیک (که در آن تمام کمیت‌ها جابه‌جا می‌شوند) متمایز می‌کند. به عنوان مثال کمیت‌های مکان و تکانه را در نظر بگیرد. این دو کمیت در مکانیک کلاسیک جابه‌جا می‌شوند  $(px = xp)$ ، اما در چارچوب مکانیک ماتریسی این دو با یکدیگر جابه‌جا نمی‌شوند بلکه به وسیله‌ی رابطه‌ی جابه‌جایی  $[X, P_x] = i\hbar$  به هم مربوطند. مؤلفه‌های تکانه‌ی زاویه‌ای نیز چنین وضعی دارند. باید خاطر نشان کنیم نقشی که توسط رابطه‌های جابه‌جایی در چارچوب مکانیک ماتریسی ایفا می‌شود، مشابه

با نقشی است که شرط کوانتس بوه در نظریه‌ی اتمی ایفا می‌کند. بنابراین مکانیک ماتریسی هایزنبرگ به معرفی برخی ابزارهای ریاضی (فضاهای برداری خطی، فضای هیلبرت، جبر جابه‌جاگرها و جبر ماتریسی) نیاز دارد که کاملاً متفاوت از ابزارهای ریاضی مکانیک کلاسیک است. این توضیحات تأییدی برای اختصاص دادن یک بخش نسبتاً طولانی (بخش ۲-۵) برای مطالعه‌ی نمایش ماتریسی مکانیک کوانتومی است.

## ۲-۷-۲ مکانیک موجی

نمایش صورت‌بندی مکانیک کوانتومی در یک پایه‌ی پیوسته، یک مسأله‌ی ویژه‌مقدار را (که به شکل یک معادله‌ی ماتریسی با صورت فرمول‌بندی هایزنبرگ نیست بلکه به شکل یک معادله‌ی دیفرانسیل است) نتیجه می‌دهد. نمایش معادله‌ی ویژه‌مقدار (۲-۳۵۱) در فضای مکان نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\langle \mathbf{r} | \hat{H} | \psi \rangle = E \langle \mathbf{r} | \psi \rangle \quad (2-353)$$

همانطور که در (۲-۳۱۵) نشان داده شد، هامیلتونی در نمایش مکان از  $-\hbar^2 \nabla^2 / (2m) + \hat{V}(\mathbf{r})$  به‌دست می‌آید بنابراین می‌توانیم (۲-۳۵۳) را به شکل آشناتر زیر بازنویسی کنیم:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + \hat{V}(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) \quad (2-354)$$

که در آن  $\langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \psi(\mathbf{r})$  تابع موج سیستم است. این معادله‌ی دیفرانسیل به عنوان معادله‌ی شرودینگر شناخته می‌شود (به منشاء آن در فصل ۳ پرداخته خواهد شد). جواب‌های این معادله طیف انرژی سیستم را علاوه بر تابع موج آن نتیجه می‌دهد. این فرمول‌بندی مکانیک کوانتومی در نمایش مکان، مکانیک موجی نامیده می‌شود. شرودینگر برخلاف هایزنبرگ نقطه‌ی شروع کاملاً متفاوتی را در تلاش برای یافتن تأییدی نظری برای ایده‌های بوه در نظر گرفت. وی از فرضیه‌ی موج-ذره‌ی دوپرویی شروع کرد و آن را به الکترون‌های در حال گردش حول هسته گسترش داد. هدف شرودینگر یافتن معادله‌ای بود که حرکت الکترون در داخل اتم را توصیف کند. در اینجا تمرکز روی جنبه‌ی موجی الکترون است. می‌توانیم نشان دهیم که (این کار را در فصل ۱ انجام داده‌ایم) شرط کوانتس بوه ( $L = n\hbar$ ) معادل با رابطه‌ی دوپرویی ( $\lambda = 2\pi\hbar/p$ ) است. برای برقراری این ارتباط تنها باید سه فرض را در نظر بگیریم: (الف) طول موج موج وابسته به الکترون در حال گردش به وسیله‌ی رابطه‌ی  $\lambda = 2\pi\hbar/p$  به تکانه‌ی خطی  $p$  الکترون مربوط است، (ب) مدار الکترون دایره‌ای است و (پ) محیط مدار الکترون مضرب صحیحی از طول موج الکترون است (یعنی  $2\pi r = n\lambda$ ). این فرض یک‌باره به رابطه‌ی  $2\pi r = n \times (2\pi\hbar/p)$  یا  $n\hbar = rp \equiv L$  می‌انجامد. این به این معنی است که برای هر مدار تنها یک طول موج (یا یک موج) وابسته به الکترون هنگامی که در آن می‌چرخد، وجود دارد. می‌توان این طول موج را به وسیله‌ی یک تابع موج توصیف نمود. بنابراین شرط کوانتس



بهر اساساً یکتایی تابع موج برای هر مدار الکترون را بیان می‌کند. در فصل ۳ نشان خواهیم داد که چگونه شرودینگر معادله‌ی دیفرانسیل (۲-۳۵۴) را برای توصیف حرکت یک الکترون در یک اتم به دست آورد.

## ۸-۲ ملاحظات پایانی

از نظر تاریخی، فرمول‌بندی ماتریسی مکانیک کوانتومی توسط هایزنبرگ و مدت کوتاهی قبل از این که شرودینگر نظریه‌ی موجی خود را معرفی کند، انجام شد. معادل بودن فرمول‌بندی‌های ماتریسی و موجی چند سال بعد و با استفاده از نظریه‌ی تبدیلات یکانی ثابت شد. اگرچه مکانیک موجی و مکانیک ماتریسی ظاهری متفاوت دارند ولی دارای مفهوم یکسانی هستند و به یک هدف می‌رسند: یافتن طیف انرژی و حالت سیستم‌های کوانتومی.

فرمول‌بندی ماتریسی مزیت عمومی‌تر (و رسمی) بودن را دارا است ولی با این حال، دارای عیب‌هایی نیز هست. از نظر مفهومی، ایده‌ای بصری پیرامون ساختار اتم ارائه نمی‌کند و نسبت به مکانیک موجی کمتر شهودی است. از نظر فنی، استفاده از آن در مسأله‌های نسبتاً آسانی مانند یافتن حالت‌های مانای اتم‌ها کار مشکلی است. به هر حال، مکانیک ماتریسی در حل مسأله‌هایی مانند نوسانگر هماهنگ یا در بحث صورت‌بندی تکانه‌ی زاویه‌ای قدرتمند و عملی است.

اما بیشتر تلاش مکانیک کوانتومی بر روی حل معادله‌ی شرودینگر (و نه مسأله‌ی ویژه‌مقدار ماتریسی هایزنبرگ) متمرکز است. بنابراین در ادامه‌ی این کتاب بیشتر با مکانیک موجی سروکار داریم. از مکانیک ماتریسی تنها در مسأله‌های محدودی مانند نوسانگر هماهنگ (که در آن استفاده از مکانیک ماتریسی مناسب‌تر از مکانیک موجی شرودینگر است) استفاده می‌شود.

در مکانیک موجی کانیست پتانسیلی که ذره در آن حرکت می‌کند را مشخص کنیم و معادله‌ی شرودینگر مابقی کار را انجام می‌دهد. یعنی با دانستن  $\hat{V}(\mathbf{r})$  اصولاً می‌توانیم معادله‌ی (۲-۳۵۴) را برای به دست آوردن ترازهای انرژی مختلف ذره و تابع موج متناظر آنها حل کنیم. پیچیدگی‌ای که در حل معادله‌ی دیفرانسیلی که با آن روبرو می‌شویم، کاملاً به شکل پتانسیل بستگی دارد (هرچه پتانسیل ساده‌تر باشد، حل ساده‌تر است). جواب‌های دقیق معادله‌ی شرودینگر تنها برای سیستم‌های ایده‌آل محدودی وجود دارد (به این سیستم‌ها در فصل‌های ۴ و ۶ خواهیم پرداخت). به هر حال، جواب‌های دقیق معمولاً وجود ندارند زیرا سیستم‌های واقعی جواب‌های دقیق را نتیجه نمی‌دهند. در چنین حالت‌هایی باید از جواب‌های تقریبی استفاده کرد. در فصل‌های ۹ و ۱۰ به چنین بحث‌های تقریبی خواهیم پرداخت (فصل ۹ به پتانسیل‌های مستقل از زمان و فصل ۱۰ به پتانسیل‌های وابسته به زمان می‌پردازد).

قبل از پرداختن به کاربردهای معادله‌ی شرودینگر، ابتدا باید مبانی نظری مکانیک کوانتومی را وضع کنیم. این کار را در فصل ۳ که در آن به اصول موضوعه‌ی نظریه‌ی کوانتومی و الزامات آن می‌پردازیم، انجام می‌دهیم. این اصول موضوعه پایه‌هایی هستند که نظریه‌ی کوانتومی بر آنها بنا نهاده شده است.

## ۹-۲ مسأله‌های حل شده

### مسأله‌ی ۱-۲

حالت‌های  $|\psi\rangle = 9i|\phi_1\rangle + 2|\phi_2\rangle$  و  $|\chi\rangle = -\frac{i}{\sqrt{4}}|\phi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{4}}|\phi_2\rangle$  را در نظر بگیرید که در آنها دو بردار  $|\phi_1\rangle$  و  $|\phi_2\rangle$  یک پایه‌ی کامل و متعامد بهنجار را تشکیل می‌دهند. (الف) عملگرهای  $|\chi\rangle\langle\psi|$  و  $|\psi\rangle\langle\chi|$  را محاسبه کنید. آیا آنها با هم برابرند؟ (ب) مزدوج هرمیتی  $|\psi\rangle\langle\chi|$ ،  $|\chi\rangle\langle\psi|$ ،  $|\psi\rangle\langle\psi|$  و  $|\chi\rangle\langle\chi|$  را بیابید.

(پ)  $\text{Tr}(|\psi\rangle\langle\chi|)$  و  $\text{Tr}(|\chi\rangle\langle\psi|)$  را محاسبه کنید. آیا آنها برابرند؟

(ت)  $|\psi\rangle\langle\psi|$  و  $|\chi\rangle\langle\chi|$  و ردهای  $|\psi\rangle\langle\psi|$  و  $|\chi\rangle\langle\chi|$  را محاسبه کنید. آیا آنها عملگر تصویر هستند؟

### حل

(الف) براهای متناظر با  $|\psi\rangle = 9i|\phi_1\rangle + 2|\phi_2\rangle$  و  $|\chi\rangle = -i|\phi_1\rangle/\sqrt{2} + |\phi_2\rangle/\sqrt{2}$  به ترتیب عبارتند از  $\langle\psi| = -9i\langle\phi_1| + 2\langle\phi_2|$  و  $\langle\chi| = \frac{i}{\sqrt{4}}\langle\phi_1| + \frac{1}{\sqrt{4}}\langle\phi_2|$ . از این رو داریم:

$$|\psi\rangle\langle\chi| = \frac{1}{\sqrt{4}}(9i|\phi_1\rangle + 2|\phi_2\rangle)(i\langle\phi_1| + \langle\phi_2|) \quad (۳۵۵-۲)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{4}}(-9|\phi_1\rangle\langle\phi_1| + 9i|\phi_1\rangle\langle\phi_2| + 2i|\phi_2\rangle\langle\phi_1| + 2|\phi_2\rangle\langle\phi_2|)$$

$$|\chi\rangle\langle\psi| = \frac{1}{\sqrt{4}}(-9i|\phi_1\rangle\langle\phi_1| - 2i|\phi_1\rangle\langle\phi_2| - 9i|\phi_2\rangle\langle\phi_1| + 2|\phi_2\rangle\langle\phi_2|) \quad (۳۵۶-۲)$$

همانطور که انتظار می‌رفت،  $|\psi\rangle\langle\chi|$  و  $|\chi\rangle\langle\psi|$  برابر نیستند و تنها زمانی برابر می‌شدند که  $|\psi\rangle$  و  $|\chi\rangle$  متناسب بوده و ثابت تناسب حقیقی بود.

(ب) برای یافتن مزدوج هرمیتی  $|\psi\rangle\langle\chi|$ ،  $|\chi\rangle\langle\psi|$ ،  $|\psi\rangle\langle\psi|$  و  $|\chi\rangle\langle\chi|$  به سادگی عامل‌های آنها را با مزدوج مختلط مربوط به آنها، برآها را با کت‌ها و کت‌ها را با برآها، جایگزین می‌کنیم:

$$|\psi\rangle^\dagger = \langle\psi| = -9i\langle\phi_1| + 2\langle\phi_2|, \quad |\chi\rangle^\dagger = \langle\chi| = \frac{1}{\sqrt{4}}(i\langle\phi_1| + \langle\phi_2|) \quad (۳۵۷-۲)$$

داریم:

$$(|\psi\rangle\langle\chi|)^\dagger = |\chi\rangle\langle\psi| = \frac{1}{\sqrt{4}}(-9i|\phi_1\rangle\langle\phi_1| - 2i|\phi_1\rangle\langle\phi_2| - 9i|\phi_2\rangle\langle\phi_1| + 2|\phi_2\rangle\langle\phi_2|) \quad (۳۵۸-۲)$$

$$(|\chi\rangle\langle\psi|)^\dagger = |\psi\rangle\langle\chi| = \frac{1}{\sqrt{4}}(-9|\phi_1\rangle\langle\phi_1| + 9i|\phi_1\rangle\langle\phi_2| + 2i|\phi_2\rangle\langle\phi_1| + 2|\phi_2\rangle\langle\phi_2|) \quad (۳۵۹-۲)$$

(پ) با استفاده از ویژگی  $\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA)$  و چون  $\langle \phi_1 | \phi_1 \rangle = \langle \phi_2 | \phi_2 \rangle = 1$  و  $\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle = \langle \phi_2 | \phi_1 \rangle = 0$  به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} \text{Tr}(|\psi\rangle\langle\chi|) &= \text{Tr}(\langle\chi|\psi\rangle) = \langle\chi|\psi\rangle \\ &= \left( \frac{i}{\sqrt{2}}\langle\phi_1| + \frac{1}{\sqrt{2}}\langle\phi_2| \right) (9i|\phi_1\rangle + 2|\phi_2\rangle) = -\frac{9}{\sqrt{2}} \end{aligned} \quad (360-2)$$

$$\begin{aligned} \text{Tr}(|\chi\rangle\langle\psi|) &= \text{Tr}(\langle\psi|\chi\rangle) = \langle\psi|\chi\rangle \\ &= (-9i\langle\phi_1| + 2\langle\phi_2|) \left( -\frac{i}{\sqrt{2}}|\phi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\phi_2\rangle \right) = -\frac{9}{\sqrt{2}} \quad (361-2) \\ &= \text{Tr}(|\psi\rangle\langle\chi|) \end{aligned}$$

ردهای  $\text{Tr}(|\psi\rangle\langle\chi|)$  و  $\text{Tr}(|\chi\rangle\langle\psi|)$  برابرند تنها به این دلیل که ضرب  $|\psi\rangle$  و  $|\chi\rangle$  یک عدد حقیقی است. اگر این ضرب یک عدد مختلط می‌بود آنگاه ردها متفاوت بودند و در واقع مزدوج مختلط یکدیگر بودند. (ت) عبارت‌های  $|\psi\rangle\langle\psi|$  و  $|\chi\rangle\langle\chi|$  عبارتند از

$$\begin{aligned} |\psi\rangle\langle\psi| &= (9i|\phi_1\rangle + 2|\phi_2\rangle)(-9i\langle\phi_1| + 2\langle\phi_2|) \\ &= 81|\phi_1\rangle\langle\phi_1| + 18i|\phi_1\rangle\langle\phi_2| - 18i|\phi_2\rangle\langle\phi_1| + 4|\phi_2\rangle\langle\phi_2| \\ |\chi\rangle\langle\chi| &= \frac{1}{4}(|\phi_1\rangle\langle\phi_1| - i|\phi_1\rangle\langle\phi_2| + i|\phi_2\rangle\langle\phi_1| + |\phi_2\rangle\langle\phi_2|) \\ &= \frac{1}{4}(1 - i|\phi_1\rangle\langle\phi_2| + i|\phi_2\rangle\langle\phi_1|) \end{aligned} \quad (362-2) \quad (363-2)$$

در به دست آوردن (۳۶۳-۲) از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که پایه کامل است  $(|\phi_1\rangle\langle\phi_1| + |\phi_2\rangle\langle\phi_2| = 1)$ . سپس بی‌درنگ می‌توان ردهای  $\text{Tr}(|\psi\rangle\langle\psi|)$  و  $\text{Tr}(|\chi\rangle\langle\chi|)$  را محاسبه نمود:

$$\text{Tr}(|\psi\rangle\langle\psi|) = \langle\psi|\psi\rangle = (-9i\langle\phi_1| + 2\langle\phi_2|)(9i|\phi_1\rangle + 2|\phi_2\rangle) = 85 \quad (364-2)$$

$$\text{Tr}(|\chi\rangle\langle\chi|) = \langle\chi|\chi\rangle = \frac{1}{4}(i\langle\phi_1| + \langle\phi_2|)(-i|\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle) = 1 \quad (365-2)$$

بنابراین  $|\chi\rangle$  بهنجار است ولی  $|\psi\rangle$  بهنجار نیست. چون  $|\chi\rangle$  بهنجار است، به آسانی می‌توانیم تحقیق کنیم که  $|\chi\rangle\langle\chi|$  یک عملگر تصویر است زیرا هرمیتی  $(|\chi\rangle\langle\chi|)^\dagger = |\chi\rangle\langle\chi|$  و برابر با مجذور خود است:

$$(|\chi\rangle\langle\chi|)^2 = |\chi\rangle\langle\chi|\chi\rangle\langle\chi| = (|\chi\rangle\langle\chi|)|\chi\rangle\langle\chi| = |\chi\rangle\langle\chi| \quad (366-2)$$

در مورد  $|\psi\rangle\langle\psi|$  باید گفت که (با وجود این که هرمیتی است) نمی‌تواند یک عملگر تصویر باشد زیرا  $|\psi\rangle$  بهنجار نیست. یعنی  $|\psi\rangle\langle\psi|$  با مجذور خود برابر نیست:

$$(|\psi\rangle\langle\psi|)^2 = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = (|\psi\rangle\langle\psi|)|\psi\rangle\langle\psi| = 85|\psi\rangle\langle\psi| \quad (367-2)$$

مسأله‌ی ۲-۲

(الف) یک پایه‌ی کامل و متعامد بهنجار را برای فضای تابع‌های مثلثاتی به شکل  $\psi(\theta) = \sum_{n=0}^N a_n \cos(n\theta)$  بیابید.

(ب) نتیجه‌های به دست آمده در (الف) را به ازای  $N = ۱۰$  رسم کنید و بردارهای پایه را بیابید.

حل

(الف) چون  $\cos(n\theta) = \frac{1}{2}(e^{in\theta} + e^{-in\theta})$  می‌توانیم  $\sum_{n=0}^N a_n \cos(n\theta)$  را به صورت زیر بنویسیم:

$$\frac{1}{2} \sum_{n=0}^N a_n (e^{in\theta} + e^{-in\theta}) = \frac{1}{2} \left[ \sum_{n=0}^N a_n e^{in\theta} + \sum_{n=-N}^0 a_{-n} e^{in\theta} \right] = \sum_{n=-N}^N C_n e^{in\theta} \quad (۳۶۸-۲)$$

که در آن  $C_n = a_n/2$  به ازای  $n > 0$  و  $C_n = a_{-n}/2$  به ازای  $n < 0$  و  $C_0 = a_0$  است. چون هر تابع مثلثاتی به شکل  $\psi(x) = \sum_{n=0}^N a_n \cos(n\theta)$  را می‌توان برحسب تابع‌های  $\phi_n(\theta) = e^{in\theta}/\sqrt{2\pi}$  بیان کرد، می‌توانیم مجموعه‌ی  $\phi_n(\theta)$  را به عنوان پایه در نظر بگیریم. چون این مجموعه کامل است، می‌خواهیم ببینیم که آیا متعامد بهنجار نیز است. در واقع تابع‌های مختلف  $\phi_n(\theta)$  متعامد بهنجارند زیرا ضرب زده‌های آنها از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\langle \phi_m | \phi_n \rangle = \int_{-\pi}^{\pi} \phi_m^*(\theta) \phi_n(\theta) d\theta = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{i(n-m)\theta} d\theta = \delta_{nm} \quad (۳۶۹-۲)$$

در به دست آوردن این نتیجه دو حالت  $n = m$  و  $n \neq m$  را در نظر گرفته‌ایم. نخست این که حالت  $n = m$  واضح است زیرا  $\langle \phi_n | \phi_n \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta = 1$  از سوی دیگر هنگامی که  $n \neq m$  است، داریم:

$$\langle \phi_m | \phi_n \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{i(n-m)\theta} d\theta = \frac{1}{2\pi} \frac{e^{i(n-m)\pi} - e^{-i(n-m)\pi}}{i(n-m)} = \frac{2i \sin((n-m)\pi)}{2i\pi(n-m)} = 0 \quad (۳۷۰-۲)$$

زیرا  $\sin((n-m)\pi) = 0$  است. بنابراین تابع‌های  $\phi_n(\theta) = e^{in\theta}/\sqrt{2\pi}$  یک پایه‌ی کامل و متعامد بهنجار را تشکیل می‌دهند. از (۳۶۸-۲) می‌بینیم که پایه دارای  $2N + 1$  تابع  $\phi_n(\theta)$  است، از این رو بعد این فضای تابع‌ها برابر با  $2N + 1$  است.

(ب) در حالتی که در آن  $N = 5$  است، بعد فضا برابر با ۱۱ خواهد بود، زیرا پایه ۱۱ بردار دارد:  $\phi_0(\theta) = 1/\sqrt{2\pi}$ ،  $\dots$ ،  $\phi_{-4}(\theta) = e^{-4i\theta}/\sqrt{2\pi}$ ،  $\phi_{-5}(\theta) = e^{-5i\theta}/\sqrt{2\pi}$ ،  $\dots$ ،  $\phi_5(\theta) = e^{5i\theta}/\sqrt{2\pi}$ ،  $\phi_4(\theta) = e^{4i\theta}/\sqrt{2\pi}$

## مسئله‌ی ۲-۳

(الف) نشان دهید که جمع دو عملگر تصویر نمی‌تواند یک عملگر تصویر باشد مگر آن که ضرب آنها صفر باشد.

(ب) نشان دهید که ضرب دو عملگر تصویر نمی‌تواند یک عملگر تصویر باشد مگر آن که با هم جابه‌جا شوند.

## حل

به یاد بیارید که عملگر  $\hat{P}$  یک عملگر تصویر است هرگاه در رابطه‌های  $\hat{P}^\dagger = \hat{P}$  و  $\hat{P}^2 = \hat{P}$  صدق کند. (الف) اگر دو عملگر  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  عملگر تصویر باشند و  $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$  آنگاه می‌خواهیم نشان دهیم که  $(\hat{A} + \hat{B})^\dagger = \hat{A} + \hat{B}$  و  $(\hat{A} + \hat{B})^2 = \hat{A} + \hat{B}$ . در ابتدا تحقیق هرمیتی بودن ساده است زیرا  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  هر دو هرمیتی‌اند:  $(\hat{A} + \hat{B})^\dagger = \hat{A} + \hat{B}$ . حال بیایید نگاهی به مجذور  $(\hat{A} + \hat{B})$  بیندازیم. چون  $\hat{A}^2 = \hat{A}$  و  $\hat{B}^2 = \hat{B}$  است، می‌توانیم بنویسیم:

$$(\hat{A} + \hat{B})^2 = \hat{A}^2 + \hat{B}^2 + (\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}) = \hat{A} + \hat{B} + (\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}) \quad (371-2)$$

واضح است تنها زمانی که ضرب  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  صفر باشد، جمع آنها یک عملگر تصویر خواهد بود. (ب) در اینجا مسئله نشان دادن این موضوع است که هرگاه دو عملگر  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  عملگر تصویر باشند و با یکدیگر جابه‌جا شوند ( $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ ) آنگاه ضرب آنها یک عملگر تصویر است. یعنی باید نشان دهیم که  $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{A}\hat{B}$  و  $(\hat{A}\hat{B})^2 = \hat{A}\hat{B}$ . دوباره چون  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  هرمیتی‌اند و با یکدیگر جابه‌جا می‌شوند، می‌بینیم که  $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}$ . در مورد مجذور  $\hat{A}\hat{B}$  داریم:

$$(\hat{A}\hat{B})^2 = (\hat{A}\hat{B})(\hat{A}\hat{B}) = \hat{A}(\hat{B}\hat{A})\hat{B} = \hat{A}(\hat{A}\hat{B})\hat{B} = \hat{A}^2\hat{B}^2 = \hat{A}\hat{B} \quad (372-2)$$

از این رو ضرب  $\hat{A}\hat{B}$  یک عملگر تصویر است.

## مسئله‌ی ۲-۴

حالت  $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}}|\phi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{5}}|\phi_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{10}}|\phi_3\rangle$  را در نظر بگیرید که برحسب سه ویژه‌حالت متعامد بهنجار  $|\phi_1\rangle$ ،  $|\phi_2\rangle$  و  $|\phi_3\rangle$  عملگر  $\hat{B}$  داده شده است به طوری که  $\hat{B}|\phi_n\rangle = n^2|\phi_n\rangle$  است. مقدار چشمداشتی  $\hat{B}$  برای حالت  $|\psi\rangle$  را بیابید.

## حل

با استفاده از (۵۸-۲) می‌توانیم مقدار چشمداشتی  $\hat{B}$  برای حالت  $|\psi\rangle$  را به صورت  $\langle\hat{B}\rangle = \langle\psi|\hat{B}|\psi\rangle / \langle\psi|\psi\rangle$  بنویسیم که در آن

$$\langle\psi|\psi\rangle = \left( \frac{1}{\sqrt{4}}\langle\phi_1| + \frac{1}{\sqrt{5}}\langle\phi_2| + \frac{1}{\sqrt{10}}\langle\phi_3| \right) \left( \frac{1}{\sqrt{4}}|\phi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{5}}|\phi_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{10}}|\phi_3\rangle \right)$$

$$= \frac{1}{10} \quad (۳۷۳-۲)$$

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle &= \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \phi_1 | + \frac{1}{\sqrt{5}} \langle \phi_2 | + \frac{1}{\sqrt{10}} \langle \phi_3 | \right) \hat{B} \left( \frac{1}{\sqrt{2}} | \phi_1 \rangle + \frac{1}{\sqrt{5}} | \phi_2 \rangle + \frac{1}{\sqrt{10}} | \phi_3 \rangle \right) \\ &= \frac{1}{2} + \frac{22}{5} + \frac{32}{10} \\ &= \frac{22}{10} \end{aligned} \quad (۳۷۴-۲)$$

از این رو مقدار چشمداشتی  $\hat{B}$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\langle \hat{B} \rangle = \frac{\langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{22/10}{1/10} = \frac{11}{4} \quad (۳۷۵-۲)$$

### مسأله‌ی ۵-۲

(الف) هرمیتی بودن عملگرهای  $\hat{X}$  و  $d/dx$  را بررسی کنید. مزدوج مختلط این عملگرها چگونه است؟ آیا مزدوج هرمیتی عملگرهای مکان و تکانه با مزدوج مختلطشان برابرند؟

(ب) از نتیجه‌های (الف) برای بحث پیرامون هرمیتی بودن عملگرهای  $e^{\hat{X}}$  و  $e^{d/dx}$  استفاده کنید. (پ) مزدوج هرمیتی عملگر  $\hat{X} d/dx$  را بیابید.

(ت) از نتیجه‌های (الف) برای بحث پیرامون هرمیتی بودن مؤلفه‌های عملگر تکانه‌ی زاویه‌ای (فصل ۵) استفاده کنید:  $\hat{L}_y = -i\hbar (\hat{Z} \partial / \partial x - \hat{X} \partial / \partial z)$ ،  $\hat{L}_x = -i\hbar (\hat{Y} \partial / \partial z - \hat{Z} \partial / \partial y)$

$$\hat{L}_z = -i\hbar (\hat{X} \partial / \partial y - \hat{Y} \partial / \partial x)$$

حل

(الف) با استفاده از (۲-۶۹) و (۲-۷۰) و با استفاده از این واقعیت که ویژه‌مقدارهای  $\hat{X}$  حقیقی‌اند (یعنی  $\hat{X}^* = \hat{X}$  یا  $x^* = x$ )، می‌توانیم ثابت کنیم که  $\hat{X}$  هرمیتی است ( $\hat{X}^\dagger = \hat{X}$ ) زیرا

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{X} \psi \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) (x\psi(x)) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} (x\psi^*(x)) \psi(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} (x\psi(x))^* \psi(x) dx = \langle \hat{X} \psi | \psi \rangle \end{aligned} \quad (۳۷۶-۲)$$

حال با توجه به این که  $\psi(x)$  در  $x \rightarrow \pm\infty$  صفر می‌شود، انتگرال‌گیری جزء به جزء به نتایج زیر می‌انجامد:

$$\begin{aligned} \langle \psi | \frac{d}{dx} \psi \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \left( \frac{d\psi(x)}{dx} \right) dx = \psi^*(x) \psi(x) \Big|_{x=-\infty}^{x=+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \frac{d\psi^*(x)}{dx} \right) \psi(x) dx \\ &= - \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \frac{d\psi^*(x)}{dx} \right) \psi(x) dx = - \langle \frac{d}{dx} \psi | \psi \rangle \end{aligned} \quad (۳۷۷-۲)$$

بنابراین  $d/dx$  پادهرمیتی است:  $(d/dx)^\dagger = -d/dx$ . چون  $d/dx$  پادهرمیتی است،  $id/dx$  باید هرمیتی باشد زیرا  $(id/dx)^\dagger = -i(-d/dx) = id/dx$ . نتیجه‌های به‌دست آمده در بالا به صورت زیر است:

$$\hat{X}^\dagger = \hat{X}, \quad \left(\frac{d}{dx}\right)^\dagger = -\frac{d}{dx}, \quad \left(i\frac{d}{dx}\right)^\dagger = i\frac{d}{dx} \quad (۳۷۸-۲)$$

از این رابطه می‌بینیم که عملگر تکانه  $\hat{P} = -i\hbar d/dx$  هرمیتی است:  $\hat{P}^\dagger = \hat{P}$ . همچنین می‌توانیم نتیجه بگیریم که با وجود این که عملگر تکانه هرمیتی است، مزدوج مختلط آن با  $\hat{P}$  برابر نیست زیرا  $\hat{P}^* = (-i\hbar d/dx)^* = i\hbar d/dx = -\hat{P}$ . می‌توانیم این نتیجه‌ها را در رابطه زیر دسته‌بندی کنیم:

$$\hat{X}^\dagger = \hat{X}, \quad \hat{X}^* = \hat{X}, \quad \hat{P}^\dagger = \hat{P}, \quad \hat{P}^* = -\hat{P} \quad (۳۷۹-۲)$$

(ب) با استفاده از رابطه‌های  $(e^{\hat{A}})^\dagger = e^{\hat{A}^\dagger}$  و  $(e^{i\hat{A}})^\dagger = e^{-i\hat{A}^\dagger}$  به‌دست آمده در (۲-۱۱۳) نتیجه می‌گیریم که

$$(e^{\hat{X}})^\dagger = e^{\hat{X}}, \quad (e^{d/dx})^\dagger = e^{-d/dx}, \quad (e^{id/dx})^\dagger = e^{id/dx} \quad (۳۸۰-۲)$$

(پ) چون  $\hat{X}$  هرمیتی و  $d/dx$  پادهرمیتی است، داریم:

$$\left(\hat{X}\frac{d}{dx}\right)^\dagger = \left(\frac{d}{dx}\right)^\dagger (\hat{X})^\dagger = -\frac{d}{dx}\hat{X} \quad (۳۸۱-۲)$$

که در آن  $d\hat{X}/dx$  از رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آید:

$$\frac{d}{dx}(\hat{X}\psi(x)) = \left(1 + x\frac{d}{dx}\right)\psi(x) \quad (۳۸۲-۲)$$

ازاین‌رو

$$\left(\hat{X}\frac{d}{dx}\right)^\dagger = -\hat{X}\frac{d}{dx} - 1 \quad (۳۸۳-۲)$$

(ت) از نتیجه‌های به‌دست آمده در (الف) نتیجه می‌گیریم که عملگرهای  $\hat{Y}$ ،  $\hat{Z}$ ،  $i\partial/\partial y$  و  $i\partial/\partial x$  هرمیتی‌اند. می‌توانیم ثابت کنیم که  $\hat{L}_x$  نیز هرمیتی است:

$$\hat{L}_x^\dagger = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial z}\hat{Y} - \frac{\partial}{\partial y}\hat{Z}\right) = -i\hbar\left(\hat{Y}\frac{\partial}{\partial z} - \hat{Z}\frac{\partial}{\partial y}\right) = \hat{L}_x \quad (۳۸۴-۲)$$

در به‌دست آوردن این رابطه از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که درجه‌های آزادی  $y$  و  $z$  جابه‌جا می‌شوند (یعنی  $\partial\hat{Y}/\partial z = \hat{Y}\partial/\partial z$  و  $\partial\hat{Z}/\partial y = \hat{Z}\partial/\partial y$ ) زیرا مستقل از یکدیگرند. به‌صورت مشابه، هرمیتی

بودن  $\hat{L}_z = -i\hbar(\hat{X}\partial/\partial y - \hat{Y}\partial/\partial x)$  و  $\hat{L}_y = -i\hbar(\hat{Z}\partial/\partial x - \hat{X}\partial/\partial z)$  واضح است.

## مسأله‌ی ۶-۲

(الف) نشان دهید که عملگر  $\hat{A} = i(\hat{X}^2 + 1)d/dx + i\hat{X}$  هرمیتی است.

(ب) حالت  $\psi(x)$  که به ازای آن  $\hat{A}\psi(x) = 0$  است را بیابید و آن را بهنجار کنید.

(پ) احتمال یافتن ذره (که با  $\psi(x)$  نمایش داده می‌شود) را در ناحیه‌ی  $1 \leq x \leq -1$  محاسبه کنید.

حل

(الف) از مسأله‌ی قبل می‌دانیم که  $\hat{X}^\dagger = \hat{X}$  و  $(d/dx)^\dagger = -d/dx$ . بنابراین می‌توانیم مزدوج هرمیتی

$\hat{A}$  را نتیجه بگیریم:

$$\begin{aligned}\hat{A}^\dagger &= -i\left(\frac{d}{dx}\right)^\dagger(\hat{X}^2)^\dagger - i\left(\frac{d}{dx}\right)^\dagger - i\hat{X}^\dagger = i\left(\frac{d}{dx}\right)(\hat{X}^2) + i\left(\frac{d}{dx}\right) - i\hat{X} \\ &= i\hat{X}^2\frac{d}{dx} + i\left[\frac{d}{dx}, \hat{X}^2\right] + i\frac{d}{dx} - i\hat{X}\end{aligned}\quad (2-385)$$

با استفاده از رابطه‌ی  $[\hat{B}, \hat{C}^2] = \hat{C}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{C}]\hat{C}$  همراه با  $[d/dx, \hat{X}] = 1$  به آسانی می‌توانیم جابه‌جاگر  $[d/dx, \hat{X}^2]$  را محاسبه کنیم:

$$\left[\frac{d}{dx}, \hat{X}^2\right] = \hat{X}\left[\frac{d}{dx}, \hat{X}\right] + \left[\frac{d}{dx}, \hat{X}\right]\hat{X} = 2\hat{X}\quad (2-386)$$

ترکیب (۲-۳۸۵) و (۲-۳۸۶) نشان می‌دهد که  $\hat{A}$  هرمیتی است:

$$\hat{A}^\dagger = i(\hat{X}^2 + 1)\frac{d}{dx} + i\hat{X} = \hat{A}\quad (2-387)$$

(ب) حالت  $\psi(x)$  که به ازای آن  $\hat{A}\psi(x) = 0$  می‌شود یعنی

$$i(\hat{X}^2 + 1)\frac{d\psi(x)}{dx} + i\hat{X}\psi(x) = 0\quad (2-388)$$

متناظر با

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = -\frac{x}{x^2 + 1}\psi(x)\quad (2-389)$$

است. جواب این معادله از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\psi(x) = \frac{B}{\sqrt{x^2 + 1}}\quad (2-390)$$



چون  $\int_{-\infty}^{+\infty} dx/(x^2 + 1) = \pi$  است داریم:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = B^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{x^2 + 1} = B^2 \pi \quad (391-2)$$

که به  $B = 1/\sqrt{\pi}$  می‌انجامد و از این رو  $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi(x^2+1)}}$

(پ) با استفاده از انتگرال  $\int_{-1}^{+1} dx/(x^2 + 1) = \pi/2$  بی‌درنگ می‌توانیم احتمال را به دست آوریم:

$$P = \int_{-1}^{+1} |\psi(x)|^2 dx = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^{+1} \frac{dx}{x^2 + 1} = \frac{1}{2} \quad (392-2)$$

## مسئله ۷-۲

در مورد شرایطی که به‌ازای آنها عملگرهای زیر یکانی هستند، بحث کنید:

$$(1 + i\hat{A})/(1 - i\hat{A}) \quad (\text{الف})$$

$$(\hat{A} + i\hat{B})/\sqrt{\hat{A}^2 + \hat{B}^2} \quad (\text{ب})$$

حل

عملگر  $\hat{U}$  یکانی است هرگاه  $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^\dagger = \hat{I}$  باشد (۱۲۲-۲) را ببینید.

(الف) با توجه به این که

$$\left( \frac{1 + i\hat{A}}{1 - i\hat{A}} \right)^\dagger = \frac{1 - i\hat{A}^\dagger}{1 + i\hat{A}^\dagger} \quad (393-2)$$

می‌بینیم که اگر  $\hat{A}$  هرمیتی باشد آنگاه  $(1 + i\hat{A})/(1 - i\hat{A})$  یکانی است:

$$\left( \frac{1 + i\hat{A}}{1 - i\hat{A}} \right)^\dagger \frac{1 + i\hat{A}}{1 - i\hat{A}} = \frac{1 - i\hat{A}}{1 + i\hat{A}} \frac{1 + i\hat{A}}{1 - i\hat{A}} = \hat{I} \quad (394-2)$$

(ب) به صورت مشابه، اگر  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  هرمیتی باشند و با یکدیگر جابه‌جا شوند آنگاه  $(\hat{A} + i\hat{B})/\sqrt{\hat{A}^2 + \hat{B}^2}$  یکانی است:

$$\begin{aligned} \left( \frac{\hat{A} + i\hat{B}}{\sqrt{\hat{A}^2 + \hat{B}^2}} \right)^\dagger \frac{\hat{A} + i\hat{B}}{\sqrt{\hat{A}^2 + \hat{B}^2}} &= \frac{\hat{A} - i\hat{B}}{\sqrt{\hat{A}^2 + \hat{B}^2}} \frac{\hat{A} + i\hat{B}}{\sqrt{\hat{A}^2 + \hat{B}^2}} = \frac{\hat{A}^2 + \hat{B}^2 + i(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})}{\hat{A}^2 + \hat{B}^2} \\ &= \frac{\hat{A}^2 + \hat{B}^2}{\hat{A}^2 + \hat{B}^2} = \hat{I} \end{aligned}$$

(۳۹۵-۲)

## مسأله‌ی ۸-۲

(الف) با استفاده از جابه‌جاگر  $[\hat{X}, \hat{p}] = i\hbar$  نشان دهید که  $[\hat{X}^m, \hat{P}] = im\hbar\hat{X}^{m-1}$  که در آن  $m > 1$  است. آیا می‌توانید راهی مستقیم برای به‌دست آوردن همین نتیجه بیابید؟

(ب) از نتیجه‌ی (الف) استفاده کنید و رابطه‌ی عمومی  $[F(\hat{X}), \hat{P}] = i\hbar dF(\hat{X})/d\hat{X}$  را نشان دهید که در آن  $F(\hat{X})$  یک تابع عملگر قابل مشتق‌گیری از  $\hat{X}$  است.

حل

(الف) حال به وسیله‌ی استقراء اثبات را انجام می‌دهیم. با فرض آن که  $[\hat{X}^m, \hat{P}] = im\hbar\hat{X}^{m-1}$  به‌ازای  $m = k$  معتبر است (توجه کنید که این رابطه به‌ازای  $n = 1$  برقرار است یعنی  $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$ ):

$$[\hat{X}^k, \hat{P}] = ik\hbar\hat{X}^{k-1} \quad (۳۹۶-۲)$$

حال نشان می‌دهیم که به‌ازای  $m = k + 1$  این رابطه برقرار است:

$$[\hat{X}^{k+1}, \hat{P}] = [\hat{X}^k \hat{X}, \hat{P}] = \hat{X}^k [\hat{X}, \hat{P}] + [\hat{X}^k, \hat{P}] \hat{X} \quad (۳۹۷-۲)$$

که در آن از رابطه‌ی  $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$  استفاده کرده‌ایم. اکنون با توجه به این که  $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$  و  $[\hat{X}^k, \hat{P}] = ik\hbar\hat{X}^{k-1}$  (۳۹۷-۲) را به‌صورت زیر بازنویسی می‌کنیم:

$$[\hat{X}^{k+1}, \hat{P}] = i\hbar\hat{X}^k + (ik\hbar\hat{X}^{k-1})\hat{X} = i\hbar(k+1)\hat{X}^k \quad (۳۹۸-۲)$$

بنابراین، این رابطه به‌ازای هر مقدار  $k$  (به‌خصوص به‌ازای  $k = m - 1$ ) معتبر است:

$$[\hat{X}^m, \hat{P}] = im\hbar\hat{X}^{m-1} \quad (۳۹۹-۲)$$

درواقع رسیدن به این نتیجه به‌صورت مستقیم، به‌صورتی که در ادامه می‌آید، کار ساده‌ای است. با استفاده از رابطه‌ی  $[\hat{A}^n, \hat{B}] = \hat{A}^{n-1}[\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}^{n-1}, \hat{B}]\hat{A}$  همراه با  $[\hat{X}, \hat{P}_x] = i\hbar$  می‌توانیم به‌دست آوریم:

$$[\hat{X}^2, \hat{P}_x] = \hat{X}[\hat{X}, \hat{P}_x] + [\hat{X}, \hat{P}_x]\hat{X} = 2i\hbar\hat{X} \quad (۴۰۰-۲)$$

که به

$$[\hat{X}^3, \hat{P}_x] = \hat{X}^2[\hat{X}, \hat{P}_x] + [\hat{X}^2, \hat{P}_x]\hat{X} = 3i\hat{X}^2\hbar \quad (۴۰۱-۲)$$

می‌انجامد. این رابطه نیز به نوبه‌ی خود به

$$[\hat{X}^4, \hat{P}_x] = \hat{X}^3[\hat{X}, \hat{P}_x] + [\hat{X}^3, \hat{P}_x]\hat{X} = 4i\hat{X}^3\hbar \quad (۴۰۲-۲)$$

می‌انجامد. با ادامه دادن این روش می‌توانیم به هر توانی از  $\hat{X}$  برسیم:  $[\hat{X}^m, \hat{P}] = im\hbar\hat{X}^{m-1}$ .  
یک روش مستقیم‌تر و ساده‌تر اعمال جابه‌جاگر  $[\hat{X}^m, \hat{P}]$  روی تابع موج  $\psi(x)$  است:

$$\begin{aligned} [\hat{X}^m, \hat{P}_x]\psi(x) &= (\hat{X}^m \hat{P}_x - \hat{P}_x \hat{X}^m)\psi(x) \\ &= x^m \left( -i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx} \right) + i\hbar \frac{d}{dx} (x^m \psi(x)) \\ &= x^m \left( -i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx} \right) + im\hbar x^{m-1} \psi(x) - x^m \left( -i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx} \right) \\ &= im\hbar x^{m-1} \psi(x) \end{aligned} \quad (۴۰۳-۲)$$

چون  $[\hat{X}^m, \hat{P}] = im\hbar\hat{X}^{m-1}$  است، می‌بینیم که  $[\hat{X}^m, \hat{P}_x]\psi(x) = im\hbar x^{m-1} \psi(x)$  (ب) بیاید  $F(\hat{X})$  را برحسب توان‌های  $\hat{X}$  بسط نیلور دهیم  $(F(\hat{X}) = \sum_k a_k \hat{X}^k)$  و این عبارت را در  $[F(\hat{X}), \hat{P}]$  وارد کنیم:

$$[F(\hat{X}), \hat{P}] = \left[ \sum_k a_k \hat{X}^k, \hat{P} \right] = \sum_k a_k [\hat{X}^k, \hat{P}] \quad (۴۰۴-۲)$$

که در آن جابه‌جاگر  $[\hat{X}^k, \hat{P}]$  از (۲-۳۹۶) به‌دست می‌آید. بنابراین داریم:

$$[F(\hat{X}), \hat{P}] = i\hbar \sum_k k a_k \hat{X}^{k-1} = i\hbar \frac{d(\sum_k a_k \hat{X}^k)}{d\hat{X}} = i\hbar \frac{dF(\hat{X})}{d\hat{X}} \quad (۴۰۵-۲)$$

دوباره، یک روش ساده‌تر از اعمال جابه‌جاگر  $[F(\hat{X}), \hat{P}]$  روی همان تابع موج  $\psi(x)$  بوجود می‌آید. چون  $F(\hat{X})\psi(x) = F(x)\psi(x)$  داریم:

$$\begin{aligned} [F(\hat{X}), \hat{P}] \psi(x) &= F(\hat{X}) \hat{P} \psi(x) + i\hbar \frac{d}{dx} (F(\hat{X}) \psi(x)) \\ &= F(\hat{X}) \hat{P} \psi(x) - \left( -i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx} \right) F(\hat{X}) + i\hbar \frac{dF(\hat{X})}{dx} \psi(x) \\ &= F(\hat{X}) \hat{P} \psi(x) - F(\hat{X}) \hat{P} \psi(x) + i\hbar \frac{dF(\hat{X})}{dx} \psi(x) \\ &= i\hbar \frac{dF(\hat{X})}{dx} \psi(x) \end{aligned} \quad (۴۰۶-۲)$$

چون  $[F(\hat{X}), \hat{P}] \psi(x) = i\hbar \frac{dF(\hat{X})}{dx} \psi(x)$  می‌بینیم که  $[F(\hat{X}), \hat{P}] = i\hbar \frac{dF(\hat{X})}{dx}$

## مسئله ۹-۲

$$\text{ماتریس‌های } A = \begin{pmatrix} ۷ & ۰ & ۰ \\ ۰ & ۱ & -i \\ ۰ & i & -۱ \end{pmatrix} \text{ و } B = \begin{pmatrix} ۱ & ۰ & ۳ \\ ۰ & ۲i & ۰ \\ i & ۰ & -۵i \end{pmatrix} \text{ را در نظر بگیرید.}$$

(الف) آیا  $A$  و  $B$  هرمیتی‌اند؟  $AB$  و  $BA$  را محاسبه کنید و ثابت کنید که  $\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA)$ .

سپس  $[A, B]$  را محاسبه کنید و ثابت کنید که  $\text{Tr}([A, B]) = ۰$ .

(ب) ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای  $A$  را بیابید. ثابت کنید که جمع ویژه‌مقدارهای  $A$  با مقدار  $\text{Tr}(A)$  که در

قسمت (الف) محاسبه شد، برابر است و ثابت کنید که سه ویژه‌بردار یک پایه را تشکیل می‌دهند.

(پ) ثابت کنید که  $U^\dagger AU$  قطری است و  $U^{-1} = U$ ، که در آن  $U$  ماتریس تشکیل شده به وسیله‌ی

ویژه‌بردارهای بهنجار  $A$  است.

(ت) وارون  $A' = U^\dagger AU$  را محاسبه کنید و ثابت کنید که  $A'^{-1}$  یک ماتریس قطری است که ویژه‌مقدارهای

آن وارون ویژه‌مقدارهای  $A'$  است.

حل

(الف) با در نظر گرفتن الحاقی هرمیتی ماتریس‌های  $A$  و  $B$  ((۱۸۸-۲) را ببینید)

$$A^\dagger = \begin{pmatrix} ۷ & ۰ & ۰ \\ ۰ & ۱ & -i \\ ۰ & i & -۱ \end{pmatrix}, \quad B^\dagger = \begin{pmatrix} ۱ & ۰ & -i \\ ۰ & -۲i & ۰ \\ ۳ & ۰ & ۵i \end{pmatrix} \quad (۴۰۷-۲)$$

می‌بینیم که  $A$  هرمیتی است اما  $B$  هرمیتی نیست. با استفاده از ضرب‌های

$$AB = \begin{pmatrix} ۷ & ۰ & ۲۱ \\ ۱ & ۲i & -۵ \\ -i & -۲ & ۵i \end{pmatrix}, \quad BA = \begin{pmatrix} ۷ & ۳i & -۳ \\ ۰ & ۲i & ۲ \\ ۷i & ۵ & ۵i \end{pmatrix} \quad (۴۰۸-۲)$$

می‌توانیم جابه‌جاگر

$$[A, B] = \begin{pmatrix} ۰ & -۳i & ۲۴ \\ ۱ & ۰ & -۷ \\ -۸i & -۷ & ۰ \end{pmatrix} \quad (۴۰۹-۲)$$

را به دست آوریم. از ((۴۰۸-۲) می‌بینیم که

$$\text{Tr}(AB) = ۷ + ۲i + ۵i = ۷ + ۷i = \text{Tr}(BA) \quad (۴۱۰-۲)$$

یعنی جایگشت چرخه‌ای ماتریس‌ها رد را تغییر نمی‌دهد ((۲۰۶-۲) را ببینید). از سوی دیگر، (۴۰۹-۲) نشان می‌دهد که رد جابه‌جاگر  $[A, B]$  صفر است:  $\text{Tr}([A, B]) = 0 + 0 + 0 = 0$ .

(ب) ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای  $A$  در مثال ۱۹-۲ محاسبه شده‌اند ((۲۶۶-۲)، ((۲۶۸-۲)، ((۲۷۲-۲) و ((۲۷۴-۲) را ببینید). داریم:  $a_3 = -\sqrt{2}$  و  $a_2 = \sqrt{2}$ ،  $a_1 = 7$

$$|a_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |a_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2(2-\sqrt{2})}} \\ \frac{i(\sqrt{2}-1)}{\sqrt{2(2-\sqrt{2})}} \end{pmatrix}, \quad |a_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2(2+\sqrt{2})}} \\ -\frac{i(1+\sqrt{2})}{\sqrt{2(2+\sqrt{2})}} \end{pmatrix} \quad (۴۱۱-۲)$$

به سادگی می‌توان ثابت کرد که ویژه‌بردارهای  $|a_1\rangle$ ،  $|a_2\rangle$  و  $|a_3\rangle$  دو به دو متعامدند:  $\langle a_i | a_j \rangle = \delta_{ij}$  که در آن  $i, j = 1, 2, 3$  است. چون مجموعه‌ی  $\{|a_j\rangle\}$ ،  $|a_3\rangle$  و  $|a_2\rangle$  در شرط کامل بودن صدق می‌کنند:

$$\sum_{j=1}^3 |a_j\rangle \langle a_j| = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (۴۱۲-۲)$$

و با توجه به این که متعامد بهنجارند، یک پایه‌ی کامل متعامد بهنجار را تشکیل می‌دهند.

(پ) ستون‌های ماتریس  $U$  از ویژه‌بردارهای ((۴۱۱-۲) به دست می‌آیند:

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2(2-\sqrt{2})}} & \frac{1}{\sqrt{2(2+\sqrt{2})}} \\ 0 & \frac{i(\sqrt{2}-1)}{\sqrt{2(2-\sqrt{2})}} & -\frac{i(1+\sqrt{2})}{\sqrt{2(2+\sqrt{2})}} \end{pmatrix} \quad (۴۱۳-۲)$$

می‌توانیم نشان دهیم که ضرب  $U^\dagger A U$  قطری است که در آن عنصرهای قطری ویژه‌مقدارهای ماتریس  $A$  هستند.  $U^\dagger A U$  از

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2(2-\sqrt{2})}} & -\frac{i(\sqrt{2}-1)}{\sqrt{2(2-\sqrt{2})}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2(2+\sqrt{2})}} & \frac{i(1+\sqrt{2})}{\sqrt{2(2+\sqrt{2})}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 7 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -i \\ 0 & i & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2(2-\sqrt{2})}} & \frac{1}{\sqrt{2(2+\sqrt{2})}} \\ 0 & \frac{i(\sqrt{2}-1)}{\sqrt{2(2-\sqrt{2})}} & -\frac{i(1+\sqrt{2})}{\sqrt{2(2+\sqrt{2})}} \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} 7 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

به دست می‌آید. همچنین می‌توانیم نشان دهیم که  $U^\dagger U = 1$  است:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2(2-\sqrt{2})}} & -\frac{i(\sqrt{2}-1)}{\sqrt{2(2-\sqrt{2})}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2(2+\sqrt{2})}} & \frac{i(1+\sqrt{2})}{\sqrt{2(2+\sqrt{2})}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2(2-\sqrt{2})}} & \frac{1}{\sqrt{2(2+\sqrt{2})}} \\ 0 & \frac{i(\sqrt{2}-1)}{\sqrt{2(2-\sqrt{2})}} & -\frac{i(1+\sqrt{2})}{\sqrt{2(2+\sqrt{2})}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (۴۱۵-۲)$$

این رابطه بیان می‌کند که ماتریس  $U$  یکانی است:  $U^\dagger = U^{-1}$ . توجه داشته باشید که (از (۴۱۳-۲)) داریم:  $|\det(U)| = |-i| = 1$ .

(ت) با استفاده از (۴۱۴-۲) می‌توانیم ثابت کنیم که وارون  $A' = U^\dagger A U$  یک ماتریس قطری است که عنصرهای آن از وارون عنصرهای قطری  $A'$  به دست می‌آیند:

$$A' = \begin{pmatrix} 7 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{2} \end{pmatrix} \implies A'^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{7} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (۴۱۶-۲)$$

### مسأله‌ی ۲-۱۰

ذره‌ای که ماتریس هامیلتونی آن برابر  $H = \begin{pmatrix} 2 & i & 0 \\ -i & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$  است را در نظر بگیرید. (الف) آیا

$$|\lambda\rangle = \begin{pmatrix} i \\ 7i \\ -2 \end{pmatrix}$$

یک ویژه بردار  $H$  است؟ آیا  $H$  هرمیتی است؟

(ب) ویژه مقدارهای انرژی  $a_1, a_2$  و  $a_3$  و ویژه بردارهای بهنجار انرژی  $H$   $|a_1\rangle, |a_2\rangle$  و  $|a_3\rangle$  را بیابید.  
 (پ) ماتریس متناظر به دست آمده از ضرب براسکت ویژه بردار نخست  $|a_1\rangle\langle a_1| = P$  را بیابید. آیا  $P$  یک عملگر تصویر است؟ جابه جاگر  $[P, H]$  را ابتدا با استفاده از جبر جابه جاگر و سپس با استفاده از ضرب ماتریسی محاسبه کنید.

حل

(الف) کت  $|\lambda\rangle$  یک ویژه حالت  $H$  است تنها اگر اثر هامیلتونی روی  $|\lambda\rangle$  به شکل  $H|\lambda\rangle = b|\lambda\rangle$  باشد که در آن  $b$  یک ثابت است که در اینجا به دست آوردن آن مورد نظر نیست:

$$H|\lambda\rangle = \begin{pmatrix} 2 & i & 0 \\ -i & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i \\ 7i \\ -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -7 + 2i \\ -1 + 7i \\ 7i \end{pmatrix} \quad (۴۱۷-۲)$$

با استفاده از تعریف الحاقی هرمیتی ماتریس‌ها (۲-۱۸۸) تحقیق این مطلب که  $H$  هرمیتی است، کار ساده‌ای می‌باشد:

$$H^\dagger = \begin{pmatrix} 2 & i & 0 \\ -i & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = H \quad (۲-۱۸۸)$$

(ب) می‌توان ویژه‌مقدارهای انرژی را با حل معادله‌ی مشخصه‌ی

$$\begin{aligned} 0 &= \begin{vmatrix} 2-a & i & 0 \\ -i & 1-a & 1 \\ 0 & 1 & -a \end{vmatrix} = (2-a)[(1-a)(-a) - 1] - i(-i)(-a) \\ &= -(a-1)(a-1-\sqrt{3})(a-1+\sqrt{3}) \end{aligned} \quad (۲-۱۹۴)$$

به‌دست آورد که به

$$a_1 = 1, \quad a_2 = 1 - \sqrt{3}, \quad a_3 = 1 + \sqrt{3} \quad (۲-۲۲۰)$$

می‌انجامد. برای یافتن ویژه‌بردار متناظر با ویژه‌مقدار نخست ( $a_1 = 1$ ) باید معادله‌ی ماتریسی زیر را حل کنیم:

$$\begin{pmatrix} 2 & i & 0 \\ -i & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \implies \begin{aligned} x + iy &= 0 \\ -ix + z &= 0 \\ y - z &= 0 \end{aligned} \quad (۲-۲۲۱)$$

که  $x = 1$  و  $y = z = i$  را نتیجه می‌دهد. بنابراین ویژه‌بردار متناظر با  $a_1 = 1$  برابر است با

$$|a_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ i \end{pmatrix} \quad (۲-۲۲۲)$$

این ویژه‌بردار بهنجار نیست زیرا  $\langle a_1 | a_1 \rangle = 1 + (i^*)(i) + (i^*)(i) = 3$ . بنابراین  $|a_1\rangle$  ی بهنجار شده برابر است با

$$|a_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ i \end{pmatrix} \quad (۲-۲۲۳)$$

با حل (۲-۴۲۱) برای دو ویژه‌مقدار انرژی دیگر ( $a_2 = 1 - \sqrt{3}$ ,  $a_3 = 1 + \sqrt{3}$ ) و با بهنجار کردن به نتیجه‌های زیر می‌رسیم:

$$|a_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6(2-\sqrt{3})}} \begin{pmatrix} i(2-\sqrt{3}) \\ 1-\sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}, |a_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{6(2+\sqrt{3})}} \begin{pmatrix} i(2+\sqrt{3}) \\ 1+\sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (۴۲۴-۲)$$

(پ) عملگر  $P$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$P = |a_1\rangle\langle a_1| = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -i & -i \end{pmatrix} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 & -i & -i \\ i & 1 & 1 \\ i & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (۴۲۵-۲)$$

چون این ماتریس هرمیتی است و مجذور  $P$  برابر با  $P$  است خواهیم داشت:

$$P^2 = \frac{1}{9} \begin{pmatrix} 1 & -i & -i \\ i & 1 & 1 \\ i & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -i & -i \\ i & 1 & 1 \\ i & 1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 & -i & -i \\ i & 1 & 1 \\ i & 1 & 1 \end{pmatrix} = P \quad (۴۲۶-۲)$$

بنابراین  $P$  یک عملگر تصویر است. با استفاده از رابطه‌های  $\langle a_1|H = \langle a_1|$  و  $H|a_1\rangle = |a_1\rangle$  (زیرا  $H$  هرمیتی است) و با توجه به این که  $P = |a_1\rangle\langle a_1|$  است، می‌توانیم به صورت جبری جابه‌جاگر  $[P, H]$  را به صورت زیر محاسبه کنیم:

$$[P, H] = PH - HP = |a_1\rangle\langle a_1|H - H|a_1\rangle\langle a_1| = |a_1\rangle\langle a_1| - |a_1\rangle\langle a_1| = 0 \quad (۴۲۷-۲)$$

می‌توانیم با استفاده از ماتریس‌های  $H$  و  $P$  نیز به همین نتیجه برسیم:

$$[P, H] = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 & -i & -i \\ i & 1 & 1 \\ i & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & i & 0 \\ -i & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 2 & i & 0 \\ -i & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -i & -i \\ i & 1 & 1 \\ i & 1 & 1 \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (۴۲۸-۲)$$



## مسئله‌ی ۱۱-۲

ماتریس‌های  $A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 1 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}$  و  $B = \begin{pmatrix} 2 & i & 0 \\ 3 & 1 & 5 \\ 0 & -i & -2 \end{pmatrix}$  را در نظر بگیرید. (الف) بررسی کنید

که آیا  $A$  و  $B$  هرمیتی‌اند و ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای ماتریس  $A$  را بیابید. آیا واگنی وجود دارد؟  
(ب) ثابت کنید که  $\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA)$ ،  $\det(AB) = \det(A)\det(B)$  و  $\det(B^\dagger) = (\det(B))^*$ .

(پ) جابه‌جاگر  $[A, B]$  و پادجابه‌جاگر  $\{A, B\}$  را محاسبه کنید.

(ت) وارون  $A^{-1}$ ،  $B^{-1}$  و  $(AB)^{-1}$  را محاسبه کنید. ثابت کنید که  $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$ .

(ث)  $A^2$  را محاسبه کنید و عبارتهای مربوط به  $A^{2n}$  و  $A^{2n+1}$  را نتیجه بگیرید. از این نتیجه‌ها برای محاسبه‌ی ماتریس  $e^{xA}$  استفاده کنید.

حل

(الف) ماتریس  $A$  هرمیتی است ولی ماتریس  $B$  هرمیتی نیست. ویژه‌مقدارهای  $A$  عبارتند از  $a_1 = -1$  و  $a_2 = a_3 = 1$  و ویژه‌بردارهای بهنجار آن عبارتند از

$$|a_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ i \end{pmatrix}, \quad |a_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -i \end{pmatrix}, \quad |a_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (۴۲۹-۲)$$

توجه کنید که ویژه‌مقدار ۱ واگن دوگانه است زیرا دو ویژه‌بردار  $|a_2\rangle$  و  $|a_3\rangle$  متناظر با یک ویژه‌مقدار  $a_2 = a_3 = 1$  هستند.

(ب) محاسبه‌ی ضرب‌های  $(AB)$  و  $(BA)$  معلوم می‌کند که ردهای  $\text{Tr}(AB)$  و  $\text{Tr}(BA)$  برابرند:

$$\text{Tr}(AB) = \text{Tr} \begin{pmatrix} 0 & 1 & -2i \\ 3 & 1 & 5 \\ -2i & 1 & 0 \end{pmatrix} = 1 \quad (۴۳۰-۲)$$

$$\text{Tr}(BA) = \text{Tr} \begin{pmatrix} 0 & i & 2i \\ -5i & 1 & 3i \\ 2i & -i & 0 \end{pmatrix} = 1 = \text{Tr}(AB)$$

از ماتریس‌های  $A$  و  $B$  داریم:  $\det(A) = i(i) = -1$  و  $\det(B) = -4 + 16i$ . بنابراین می‌توانیم

نویسیم:

$$\det(AB) = \det \begin{pmatrix} 0 & 1 & -2i \\ 3 & 1 & 5 \\ -2i & 1 & 0 \end{pmatrix} = 4 - 16i = (-1)(-4 + 16i) = \det(A)\det(B)$$

(۴۳۱-۲)

از سوی دیگر، چون  $\det(B) = -4 + 16i$  و  $\det(B^\dagger) = -4 - 16i$  است، می‌بینیم که  $\det(B^\dagger) = -4 - 16i = (-4 + 16i)^* = (\det(B))^*$

(پ) جابه‌جاگر  $[A, B]$  به صورت

$$AB - BA = \begin{pmatrix} 0 & 1 & -2i \\ 3 & 1 & 5 \\ -2i & 1 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & i & 2i \\ -5i & 1 & 3i \\ 2i & -i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1-i & -4i \\ 3+5i & 0 & 5-3i \\ -4i & 1+i & 0 \end{pmatrix}$$

(۴۳۲-۲)

و پادجابه‌جاگر  $\{A, B\}$  به صورت زیر به دست می‌آید:

$$AB + BA = \begin{pmatrix} 0 & 1 & -2i \\ 3 & 1 & 5 \\ -2i & 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & i & 2i \\ -5i & 1 & 3i \\ 2i & -i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1+i & 0 \\ 3-5i & 2 & 5+3i \\ 0 & 1-i & 0 \end{pmatrix}$$

(۴۳۳-۲)

(ت) محاسباتی مشابه با (۲-۲۰۰) به وارون  $A$ ،  $B$  و  $AB$  می‌انجامد:

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 1 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad B^{-1} = \frac{1}{68} \begin{pmatrix} 22+3i & 8-2i & 20-5i \\ -6-24i & 4+16i & 10+40i \\ -12+3i & 8-2i & -14-5i \end{pmatrix}$$

(۴۳۴-۲)

$$(AB)^{-1} = \frac{1}{68} \begin{pmatrix} -5-20i & 8-2i & -3+22i \\ 40-10i & 4+16i & 24-6i \\ -5+14i & 8-2i & -3-12i \end{pmatrix}$$

(۴۳۵-۲)

با توجه به رابطه‌ی (۲-۴۳۴) اثبات این که ضرب  $B^{-1}A^{-1}$  با  $(AB)^{-1}$  برابر است، کار ساده‌ای است:

$$B^{-1}A^{-1} = \frac{1}{68} \begin{pmatrix} -5-20i & 8-2i & -3+22i \\ 40-10i & 4+16i & 24-6i \\ -5+14i & 8-2i & -3-12i \end{pmatrix} = (AB)^{-1}$$

(۴۳۶-۲)

(ث) با توجه به این که

$$A^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 1 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 1 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = I \quad (۴۳۷-۲)$$

می‌توانیم بنویسیم:  $A^3 = A$ ,  $A^4 = I$ ,  $A^5 = A$  و به همین ترتیب. می‌توانیم این نتیجه‌ها را به هر مقداری از  $n$  تعمیم دهیم:  $A^{2n} = I$  و  $A^{2n+1} = A$

$$A^{2n} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = I, \quad A^{2n+1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 1 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} = A \quad (۴۳۸-۲)$$

چون  $A^{2n} = I$  و  $A^{2n+1} = A$  می‌توانیم بنویسیم:

$$\begin{aligned} e^{xA} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n A^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^{2n} A^{2n}}{(2n)!} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^{2n+1} A^{2n+1}}{(2n+1)!} \\ &= I \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^{2n}}{(2n)!} + A \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} \end{aligned} \quad (۴۳۹-۲)$$

رابطه‌های

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^{2n}}{(2n)!} = \cosh x, \quad \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} = \sinh x \quad (۴۴۰-۲)$$

به رابطه‌ی زیر می‌انجامند:

$$\begin{aligned} e^{xA} &= I \cosh x + A \sinh x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cosh x + \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 1 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} \sinh x \\ &= \begin{pmatrix} \cosh x & 0 & i \sinh x \\ 0 & \cosh x + \sinh x & 0 \\ -i \sinh x & 0 & \cosh x \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (۴۴۱-۲)$$

مسئله‌ی ۱۲-۲

دو ماتریس  $A = \begin{pmatrix} 0 & i & 2 \\ 0 & 1 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}$  و  $B = \begin{pmatrix} 2 & i & 0 \\ 3 & 1 & 5 \\ 0 & -i & -2 \end{pmatrix}$  را در نظر بگیرید.  $BA^{-1}$  و  $A^{-1}B$

را محاسبه کنید. آیا با هم برابرند؟

حل

همانطور که در بالا یادآوری شد، محاسباتی مشابه با  $(۲-i)$ ، به وارون  $A$  می‌انجامد:

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 1 & 0 \\ 1/2 & -i/2 & 0 \end{pmatrix} \quad (۴۴۲-۲)$$

ضرب‌های  $A^{-1}B$  و  $BA^{-1}$  از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$A^{-1}B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 1 & 0 \\ 1/2 & -i/2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & i & 0 \\ 3 & 1 & 5 \\ 0 & -i & -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & -2i \\ 3 & 1 & 5 \\ 1 - 3i/2 & 0 & -5i/2 \end{pmatrix} \quad (۴۴۳-۲)$$

$$BA^{-1} = \begin{pmatrix} 2 & i & 0 \\ 3 & 1 & 5 \\ 0 & -i & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 1 & 0 \\ 1/2 & -i/2 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & i & 2i \\ 5/2 & 1 - 5i/2 & 3i \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (۴۴۴-۲)$$

می‌بینیم که  $A^{-1}B$  و  $BA^{-1}$  با هم برابر نیستند.

### ۱-۹-۲ ملاحظات

باید یادآوری کنیم که خارج قسمت  $B/A$ ی دو ماتریس  $A$  و  $B$  برابر با حاصل ضرب  $BA^{-1}$  است و نه  $A^{-1}B$  یعنی

$$\frac{B}{A} = BA^{-1} = \frac{\begin{pmatrix} 2 & i & 0 \\ 3 & 1 & 5 \\ 0 & -i & -2 \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 1 & 0 \\ 1/2 & -i/2 & 0 \end{pmatrix}} = \begin{pmatrix} 0 & i & 2i \\ 5/2 & 1 - 5i/2 & 3i \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (۴۴۵-۲)$$

## مسئله‌ی ۲-۱۳

$$\text{ماتریس‌های } A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ و } B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \text{ را در نظر بگیرید.}$$

(الف) ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای بهنجار  $A$  و  $B$  را بیابید. ویژه‌بردارهای  $A$  را با  $|a_1\rangle, |a_2\rangle, |a_3\rangle$  و ویژه‌بردارهای  $B$  را با  $|b_1\rangle, |b_2\rangle, |b_3\rangle$  نمایش دهید. آیا ویژه‌مقدارهای واگن وجود دارند؟

(ب) نشان دهید که هر یک از مجموعه‌های  $|a_1\rangle, |a_2\rangle, |a_3\rangle$  و  $|b_1\rangle, |b_2\rangle, |b_3\rangle$  یک پایه‌ی متعامد بهنجار و کامل را تشکیل می‌دهند یعنی نشان دهید که  $\langle a_j | a_k \rangle = \delta_{jk}$  و  $\sum_{j=1}^3 |a_j\rangle\langle a_j| = I$  در آن ماتریس یک‌به‌یک  $3 \times 3$  است. سپس همین کار را برای  $|b_1\rangle, |b_2\rangle, |b_3\rangle$  تکرار کنید.

(پ) ماتریس تبدیل  $U$  از پایه‌ی  $\{|a\rangle\}$  به پایه‌ی  $\{|b\rangle\}$  را بیابید. نشان دهید که  $U^{-1} = U^\dagger$ . ثابت کنید که  $U^\dagger U = I$ . محاسبه کنید که چگونه ماتریس  $A$  تحت  $U$  تبدیل می‌شود یعنی  $A' = UAU^\dagger$  را محاسبه کنید.

حل

(الف) ثابت کردن این که ویژه‌مقدارهای  $A$  برابر با  $a_1 = 0, a_2 = \sqrt{2}, a_3 = -\sqrt{2}$  و ویژه‌بردارهای بهنجار متناظر آنها برابر با

$$|a_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |a_2\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |a_3\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2-244)$$

هستند، کار ساده‌ای است. ویژه‌مقدارهای  $B$  عبارتند از  $b_1 = 1, b_2 = 0, b_3 = -1$  و ویژه‌بردارهای بهنجار آنها عبارتند از

$$|b_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |b_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |b_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2-247)$$

هیچ‌یک از ویژه‌مقدارهای  $A$  و  $B$  واگن نیستند.

(ب) در واقع، مجموعه‌ی  $|a_1\rangle, |a_2\rangle, |a_3\rangle$  کامل است زیرا مجموع  $|a_1\rangle\langle a_1|, |a_2\rangle\langle a_2|, |a_3\rangle\langle a_3|$  که به صورت زیر داده می‌شوند:

$$|a_1\rangle\langle a_1| = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2-248)$$

$$|a_2\rangle\langle a_2| = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} (1 \quad \sqrt{2} \quad 1) = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \\ \sqrt{2} & 2 & \sqrt{2} \\ 1 & \sqrt{2} & 1 \end{pmatrix} \quad (۴۴۹-۲)$$

$$|a_3\rangle\langle a_3| = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} (1 \quad -\sqrt{2} \quad 1) = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & -\sqrt{2} & 1 \\ -\sqrt{2} & 2 & -\sqrt{2} \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix} \quad (۴۵۰-۲)$$

برابر با یک است:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^3 |a_j\rangle\langle a_j| &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \\ \sqrt{2} & 2 & \sqrt{2} \\ 1 & \sqrt{2} & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & -\sqrt{2} & 1 \\ -\sqrt{2} & 2 & -\sqrt{2} \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (۴۵۱-۲)$$

حالت‌های  $|a_1\rangle$ ،  $|a_2\rangle$  و  $|a_3\rangle$  متعامد بهنجارند زیرا  $\langle a_1|a_2\rangle = \langle a_1|a_3\rangle = \langle a_2|a_3\rangle = 0$  و  $\langle a_1|a_1\rangle = \langle a_2|a_2\rangle = \langle a_3|a_3\rangle = 1$  است. با انجام این روند می‌توانیم تحقیق کنیم که

$$|b_1\rangle\langle b_1| + |b_2\rangle\langle b_2| + |b_3\rangle\langle b_3| = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (۴۵۲-۲)$$

می‌توانیم ثابت کنیم که حالت‌های  $|b_1\rangle$ ،  $|b_2\rangle$  و  $|b_3\rangle$  متعامد بهنجارند زیرا  $\langle b_1|b_2\rangle = \langle b_1|b_3\rangle = \langle b_2|b_3\rangle = 0$  و  $\langle b_1|b_1\rangle = \langle b_2|b_2\rangle = \langle b_3|b_3\rangle = 1$ .

(پ) عنصرهای ماتریس  $U$  (که متناظر با تبدیل از پایه‌ی  $\{|a\rangle\}$  به پایه‌ی  $\{|b\rangle\}$  هستند) از رابطه‌ی  $U_{jk} = \langle b_j|a_k\rangle$  به دست می‌آیند که در آن  $k, j = 1, 2, 3$  است:

$$U = \begin{pmatrix} \langle b_1|a_1\rangle & \langle b_1|a_2\rangle & \langle b_1|a_3\rangle \\ \langle b_2|a_1\rangle & \langle b_2|a_2\rangle & \langle b_2|a_3\rangle \\ \langle b_3|a_1\rangle & \langle b_3|a_2\rangle & \langle b_3|a_3\rangle \end{pmatrix} \quad (۴۵۳-۲)$$

که در آن می‌توان عنصرهای  $\langle b_j | a_k \rangle$  را از (۲-۴۴۶) و (۲-۴۴۷) محاسبه کرد:

$$U_{11} = \langle b_1 | a_1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\sqrt{2}}{2} \quad (۲-۴۵۴)$$

$$U_{12} = \langle b_1 | a_2 \rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \quad (۲-۴۵۵)$$

$$U_{13} = \langle b_1 | a_3 \rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \quad (۲-۴۵۶)$$

$$U_{21} = \langle b_2 | a_1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0 \quad (۲-۴۵۷)$$

$$U_{22} = \langle b_2 | a_2 \rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{2}}{2} \quad (۲-۴۵۸)$$

$$U_{23} = \langle b_2 | a_3 \rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\sqrt{2}}{2} \quad (۲-۴۵۹)$$

$$U_{31} = \langle b_3 | a_1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{2}}{2} \quad (۲-۴۶۰)$$

$$U_{32} = \langle b_3 | a_2 \rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \quad (۲-۴۶۱)$$

$$U_{33} = \langle b_3 | a_3 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (۴۶۲-۲)$$

با گردآوری این عناصرها، به دست می‌آوریم:

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\sqrt{2} & 1 & 1 \\ 0 & \sqrt{2} & -\sqrt{2} \\ \sqrt{2} & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (۴۶۳-۲)$$

با محاسبه‌ی وارون  $U$  همانند آنچه که در (۲-۲۰۰) انجام دادیم، می‌بینیم که حاصل برابر با الحاقی هرمیتی آن است:

$$U^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 1 & \sqrt{2} & 1 \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix} = U^\dagger \quad (۴۶۴-۲)$$

این بیان می‌کند که ماتریس  $U$  یکانی است. ماتریس  $A$  به صورت زیر تبدیل می‌شود:

$$\begin{aligned} A' = UAU^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\sqrt{2} & 1 & 1 \\ 0 & \sqrt{2} & -\sqrt{2} \\ \sqrt{2} & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 1 & \sqrt{2} & 1 \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 - \sqrt{2} & -1 & 1 \\ -1 & -2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 + \sqrt{2} \end{pmatrix} \quad (۴۶۵-۲) \end{aligned}$$

### مسأله‌ی ۱۴-۲

عبارت‌های شامل تابع دلتای دیراک زیر را محاسبه کنید:

(الف)  $\int_{-5}^5 \cos(3x) \delta(x - \pi/3) dx$

(ب)  $\int_0^{10} [e^{2x-7} + 4] \delta(x + 3) dx$

(پ)  $\int [2 \cos^2(3x) - \sin(x/2)] \delta(x + \pi) dx$

(ت)  $\int_0^\pi \cos(3\theta) \delta'''(\theta - \pi/2) d\theta$

(ث)  $\int_{-1}^1 (x^2 - 5x + 2) \delta[2(x - 4)] dx$



حل

(الف) چون  $x = \pi/3$  در بازه  $(-5, 5)$  قرار دارد، معادله  $(2-281)$  نتیجه  $\delta$  زیر را می‌دهد:

$$\int_{-5}^5 \cos(3x) \delta(x - \pi/3) dx = \cos\left(3 \frac{\pi}{3}\right) = -1 \quad (2-466)$$

(ب) چون  $x = -3$  در خارج از بازه  $(-1, 0)$  قرار دارد، معادله  $(2-281)$  یک‌بار نتیجه  $\delta$  زیر را می‌دهد:

$$\int_0^{10} [e^{2x-7} + 4] \delta(x + 3) dx = 0 \quad (2-467)$$

(پ) با استفاده از رابطه  $f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a)$  که در پیوست الف فهرست شده است، داریم:

$$\begin{aligned} [2 \cos^2(3x) - \sin(x/2)] \delta(x + \pi) &= [2 \cos^2(3(-\pi)) - \sin((- \pi)/2)] \delta(x + \pi) \\ &= 3 \delta(x + \pi) \end{aligned} \quad (2-468)$$

(ت) با وارد کردن  $n = 3$  در معادله  $(2-282)$  و با توجه به این که  $\cos'''(3\theta) = 27 \sin(3\theta)$  است، به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} \int_0^\pi \cos(3\theta) \delta'''(\theta - \pi/2) d\theta &= (-1)^3 \cos'''(3\pi/2) = (-1)^3 27 \sin(3\pi/2) \\ &= 27 \end{aligned} \quad (2-469)$$

(ث) چون  $\delta[2(x-4)] = (1/2)\delta(x-4)$  است، داریم:

$$\begin{aligned} \int_2^9 (x^2 - 5x + 2) \delta[2(x-4)] dx &= \frac{1}{2} \int_2^9 (x^2 - 5x + 2) \delta(x-4) dx \\ &= \frac{1}{2} (4^2 - 5 \times 4 + 2) = -1 \end{aligned} \quad (2-470)$$

### مسئله ۱۵-۲

سیستمی که هامیلتونی آن از رابطه  $\hat{H} = \alpha(|\phi_1\rangle\langle\phi_2| + |\phi_2\rangle\langle\phi_1|)$  به دست می‌آید و در آن  $\alpha$  یک عدد حقیقی است که دارای بعد انرژی است و  $|\phi_1\rangle$  و  $|\phi_2\rangle$  ویژه حالت‌های بهنجار عملگر هرمیتی  $\hat{A}$  که ویژه مقدرهای واگن ندارد را در نظر بگیرید.

(الف) آیا  $\hat{H}$  یک عملگر تصویر است؟  $\alpha^{-2} \hat{H}^2$  چگونه؟

(ب) نشان دهید که  $|\phi_1\rangle$  و  $|\phi_2\rangle$  ویژه‌حالت‌های  $\hat{H}$  نیستند.

(پ) جابه‌جاگرهای  $[\hat{H}, |\phi_1\rangle\langle\phi_1|]$  و  $[\hat{H}, |\phi_2\rangle\langle\phi_2|]$  را محاسبه کنید و سپس رابطه‌ای که ممکن است بین آنها وجود داشته باشد را بیابید.

(ت) ویژه‌حالت‌های بهنجار  $\hat{H}$  و ویژه‌مقدارهای انرژی متناظر آنها را بیابید.

(ث) با فرض آن که  $|\phi_1\rangle$  و  $|\phi_2\rangle$  یک پایه‌ی کامل و متعامد بهنجار را تشکیل می‌دهند، ماتریس نمایش‌دهنده‌ی  $\hat{H}$  در این پایه را بیابید. ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای ماتریس را بیابید و نتیجه‌ها را با نتیجه‌های به‌دست آمده در (ت) مقایسه نمایید.

حل

(الف) چون  $|\phi_1\rangle$  و  $|\phi_2\rangle$  ویژه‌حالت‌های  $\hat{A}$  هستند و  $\hat{A}$  هرمیتی است، این کت‌ها باید متعامد باشند ( $\langle\phi_1|\phi_2\rangle = 0$ ) (مثالی از قضیه‌ی ۱-۲). اکنون با توجه به این که  $|\phi_1\rangle$  و  $|\phi_2\rangle$  هر دو بهنجارند و  $\langle\phi_1|\phi_2\rangle = 0$  است، می‌توانیم  $\hat{H}^2$  را به

$$\begin{aligned}\hat{H}^2 &= \alpha^2(|\phi_1\rangle\langle\phi_2| + |\phi_2\rangle\langle\phi_1|)(|\phi_1\rangle\langle\phi_1| + |\phi_2\rangle\langle\phi_2|) \\ &= \alpha^2(|\phi_1\rangle\langle\phi_2| + |\phi_2\rangle\langle\phi_1|)\end{aligned}\quad (471-2)$$

کاهش دهیم که متفاوت از  $\hat{H}$  است بنابراین  $\hat{H}$  یک عملگر تصویر نیست. عملگر  $\alpha^{-2}\hat{H}^2$  یک عملگر تصویر است زیرا هم هرمیتی و هم با مجذور خود برابر است. با استفاده از (471-2) می‌توانیم بنویسیم:

$$\begin{aligned}(\alpha^{-2}\hat{H}^2) &= (|\phi_1\rangle\langle\phi_2| + |\phi_2\rangle\langle\phi_1|)(|\phi_1\rangle\langle\phi_2| + |\phi_2\rangle\langle\phi_1|) \\ &= |\phi_1\rangle\langle\phi_1| + |\phi_2\rangle\langle\phi_2| = \alpha^{-2}\hat{H}^2\end{aligned}\quad (472-2)$$

(ب) چون  $|\phi_1\rangle$  و  $|\phi_2\rangle$  هر دو بهنجارند و  $\langle\phi_1|\phi_2\rangle = 0$  است، داریم:

$$\hat{H}|\phi_1\rangle = \alpha|\phi_1\rangle\langle\phi_2|\phi_1\rangle + \alpha|\phi_2\rangle\langle\phi_1|\phi_1\rangle = \alpha|\phi_2\rangle\quad (473-2)$$

$$\hat{H}|\phi_2\rangle = \alpha|\phi_1\rangle\quad (474-2)$$

از این رو  $|\phi_1\rangle$  و  $|\phi_2\rangle$  ویژه‌حالت‌های  $\hat{H}$  نیستند. علاوه‌براین داریم:

$$\langle\phi_1|\hat{H}|\phi_1\rangle = \langle\phi_2|\hat{H}|\phi_2\rangle = 0\quad (475-2)$$

(پ) با استفاده از رابطه‌های به‌دست آمده در بالا ( $\hat{H}|\phi_1\rangle = \alpha|\phi_2\rangle$  و  $\hat{H}|\phi_2\rangle = \alpha|\phi_1\rangle$ ) می‌توانیم بنویسیم:

$$[\hat{H}, |\phi_1\rangle\langle\phi_1|] = \alpha(|\phi_2\rangle\langle\phi_1| - |\phi_1\rangle\langle\phi_2|)\quad (476-2)$$

$$[\hat{H}, |\phi_2\rangle\langle\phi_2|] = \alpha(|\phi_1\rangle\langle\phi_2| - |\phi_2\rangle\langle\phi_1|) \quad (۴۷۷-۲)$$

ازاین رو

$$[\hat{H}, |\phi_1\rangle\langle\phi_1|] = -[\hat{H}, |\phi_2\rangle\langle\phi_2|] \quad (۴۷۸-۲)$$

(ت) حالت کلی  $|\psi\rangle = \lambda_1|\phi_1\rangle + \lambda_2|\phi_2\rangle$  را در نظر بگیرید. با اعمال  $\hat{H}$  بر این حالت، به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} \hat{H}|\psi\rangle &= \alpha(|\phi_1\rangle\langle\phi_2| + |\phi_2\rangle\langle\phi_1|)(\lambda_1|\phi_1\rangle + \lambda_2|\phi_2\rangle) \\ &= \alpha(\lambda_2|\phi_1\rangle + \lambda_1|\phi_2\rangle) \end{aligned} \quad (۴۷۹-۲)$$

حال با توجه به این که  $|\psi\rangle$  بهنجار است، داریم:

$$\langle\psi|\psi\rangle = |\lambda_1|^2 + |\lambda_2|^2 = 1 \quad (۴۸۰-۲)$$

دو معادله‌ی قبل نشان می‌دهند که  $\lambda_1 = \pm\lambda_2$  و  $|\lambda_1| = |\lambda_2| = 1/\sqrt{2}$  است. ازاین رو ویژه‌حالت‌های سیستم عبارتند از

$$|\psi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_1\rangle \pm |\phi_2\rangle) \quad (۴۸۱-۲)$$

ویژه‌مقدارهای متناظر عبارتند از  $\pm\alpha$ :

$$\hat{H}|\psi_{\pm}\rangle = \pm\alpha|\psi_{\pm}\rangle \quad (۴۸۲-۲)$$

(ث) چون  $\langle\phi_1|\phi_2\rangle = \langle\phi_2|\phi_1\rangle = 0$  و  $\langle\phi_1|\phi_1\rangle = \langle\phi_2|\phi_2\rangle = 1$  می‌توانیم ثابت کنیم که  $H_{11} = \langle\phi_1|\hat{H}|\phi_1\rangle = 0$ ،  $H_{22} = \langle\phi_2|\hat{H}|\phi_2\rangle = 0$ ،  $H_{12} = \langle\phi_1|\hat{H}|\phi_2\rangle = \alpha$  و  $H_{21} = \langle\phi_2|\hat{H}|\phi_1\rangle = \alpha$ . بنابراین ماتریس  $\hat{H}$  به صورت زیر است:

$$H = \alpha \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (۴۸۳-۲)$$

ویژه‌مقدارهای این ماتریس برابر با  $\pm\alpha$  هستند و ویژه‌بردارهای متناظر عبارتند از  $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}$ . در واقع این نتیجه‌ها مشابه با نتیجه‌های به دست آمده در (ت) هستند.

## مسأله‌ی ۱۶-۲

ماتریس‌های  $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 7 & -3i \\ 0 & 3i & 5 \end{pmatrix}$  و  $B = \begin{pmatrix} 0 & -i & 3i \\ -i & 0 & i \\ 3i & i & 0 \end{pmatrix}$  را در نظر بگیرید.

(الف) هرمیتی بودن  $A$  و  $B$  را بررسی کنید.

(ب) ویژه‌مقدارهای  $A$  و  $B$  را بیابید. ویژه‌مقدارهای  $A$  را با  $a_1, a_2$  و  $a_3$  نمایش دهید. توضیح دهید که چرا ویژه‌مقدارهای  $A$  حقیقی و ویژه‌مقدارهای  $B$  موهومی‌اند.

(پ)  $\det(A)$  و  $\text{Tr}(A)$  را محاسبه کنید. ثابت کنید که  $\det(A) = a_1 a_2 a_3$  و  $\text{Tr}(A) = a_1 + a_2 + a_3$  است.

حل

(الف) ماتریس  $A$  هرمیتی است ولی ماتریس  $B$  پادهرمیتی است:

$$A^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 7 & -3i \\ 0 & 3i & 5 \end{pmatrix} = A, \quad B^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & i & -3i \\ i & 0 & -i \\ -3i & -i & 0 \end{pmatrix} = -B \quad (۴۸۴-۲)$$

(ب) ویژه‌مقدارهای  $A$  عبارتند از  $a_1 = 6 - \sqrt{10}$ ,  $a_2 = 1$ ,  $a_3 = 6 + \sqrt{10}$  و ویژه‌مقدارهای  $B$  برابرند با  $b_1 = -i(3 + \sqrt{17})/2$ ,  $b_2 = 3i$ ,  $b_3 = i(-3 + \sqrt{17})/2$  و ویژه‌مقدارهای  $A$  حقیقی و ویژه‌مقدارهای  $B$  موهومی‌اند که انتظار آن می‌رفت زیرا (همانطور که در (۷۴-۲) و (۷۵-۲) نشان داده شد) مقدار چشمداشتی عملگرهای هرمیتی حقیقی و مقدار چشمداشتی عملگرهای پادهرمیتی موهومی است.

(پ) محاسبه‌ی مستقیم رد و دترمینان  $A$  جواب‌های  $\det(A) = 13$  و  $\text{Tr}(A) = 1 + 7 + 5 = 13$  را نتیجه می‌دهد. با اضافه و ضرب کردن ویژه‌مقدارهای  $a_1 = 6 - \sqrt{10}$ ,  $a_2 = 1$  و  $a_3 = 6 + \sqrt{10}$  داریم:  $a_1 a_2 a_3 = (6 - \sqrt{10})(1)(6 + \sqrt{10}) = 26$  و  $a_1 + a_2 + a_3 = 6 - \sqrt{10} + 1 + 6 + \sqrt{10} = 13$  که نتیجه‌های (۲۶۰-۲) و (۲۶۱-۲) را تأیید می‌کنند:

$$\text{Tr}(A) = a_1 + a_2 + a_3 = 13, \quad \det(A) = a_1 a_2 a_3 = 26 \quad (۴۸۵-۲)$$

## مسأله‌ی ۱۷-۲

یک ذره‌ی یک‌بعدی را در نظر بگیرید که در امتداد محور  $x$  حرکت می‌کند و هامیلتونی آن برابر با  $\hat{H} = -\mathcal{E}d^2/dx^2 + 16\mathcal{E}\hat{X}^2$  است که در آن  $\mathcal{E}$  یک ثابت حقیقی یا بعد انرژی است.

(الف) آیا  $\psi(x) = Ae^{-2x^2}$  در آن  $A$  ثابت بهنجارش است که باید پیدا شود، یک ویژه‌تابع  $\hat{H}$  است؟ اگر پاسخ مثبت است آنگاه ویژه‌مقدار انرژی را بیابید.

(ب) احتمال یافتن ذره جایی در امتداد منفی محور  $x$  را محاسبه کنید.

(پ) ویژه‌مقدار انرژی متناظر با تابع موج  $\phi(x) = 2x\psi(x)$  را بیابید.

(ت) پارته‌های  $\phi(x)$  و  $\psi(x)$  را مشخص کنید. آیا  $\phi(x)$  و  $\psi(x)$  متعامدند؟

حل

(الف) انتگرال  $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-4x^2} dx = \sqrt{\pi}/2$  به امکان می‌دهد تا ثابت بهنجارش را پیدا کنیم:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-4x^2} dx = A^2 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad (486-2)$$

که به  $A = \sqrt{2/\sqrt{\pi}}$  می‌انجامد، ازاین‌رو  $\psi(x) = \sqrt{2/\sqrt{\pi}} e^{-2x^2}$ . چون مشتق‌های اول و دوم  $\psi(x)$  از رابطه‌های

$$\psi'(x) = \frac{d\psi(x)}{dx} = -4x\psi(x), \quad \psi''(x) = \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = (16x^2 - 4)\psi(x) \quad (487-2)$$

به‌دست می‌آیند، می‌بینیم که  $\psi(x)$  یک ویژه‌تابع  $\hat{H}$  با ویژه‌مقدار انرژی برابر با  $4\mathcal{E}$  است:

$$\hat{H}\psi(x) = -\mathcal{E} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + 16\mathcal{E}x^2\psi(x) = -\mathcal{E}(16x^2 - 4)\psi(x) + 16\mathcal{E}x^2\psi(x) = 4\mathcal{E}\psi(x) \quad (488-2)$$

(ب) با توجه به این که  $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-4x^2} dx = \sqrt{\pi}/4$  است، احتمال یافتن ذره جایی در امتداد منفی محور  $x$  برابر با  $\frac{1}{4}$  است:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-4x^2} dx = \frac{1}{2} \quad (489-2)$$

که انتظار هم می‌رفت زیرا این احتمال نصف احتمال کل است که به نوبه‌ی خود برابر با یک است.

(پ) چون مشتق دوم  $\phi(x) = 2x\psi(x)$  برابر با

$$\phi''(x) = 4\psi'(x) + 2x\psi''(x) = 4x(-3 + 4x^2)\psi(x) = 4(-3 + 4x^2)\phi(x)$$

می‌بینیم که  $\phi(x)$  یک ویژه‌تابع  $\hat{H}$  با ویژه‌مقدار انرژی  $12\mathcal{E}$  است:

$$\hat{H}\phi(x) = -\mathcal{E} \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + 16\mathcal{E}x^2\phi(x) = -\mathcal{E}4(-3 + 4x^2)\phi(x) + 16\mathcal{E}x^2\phi(x) = 12\mathcal{E}\phi(x) \quad (490-2)$$

(ت) تابع‌های موج  $\psi(x)$  و  $\phi(x)$  به ترتیب زوج و فردند زیرا  $\psi(-x) = \psi(x)$  و  $\phi(-x) = -\phi(x)$

ازاین‌رو ضرب آنها یک تابع فرد است. بنابراین این دو تابع متعامدند زیرا انتگرال یک تابع فرد در بازه‌ی

متقارن برابر با صفر است:

$$\begin{aligned}\langle \phi | \psi \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x) \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(x) \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(-x) \psi(-x) (-dx) \\ &= - \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(x) \psi(x) dx = 0\end{aligned}\quad (۴۹۱-۲)$$

### مسأله‌ی ۱۸-۲

(الف) ویژه‌مقدارها و ویژه‌تابع‌های عملگر  $\hat{A} = -d^2/dx^2$  را بیابید. جستجوی ویژه‌تابع‌ها را به ویژه‌تابع‌های مختلطی که در همه‌جا به استثنای ناحیه‌ی  $0 < x < a$  صفر می‌شوند، محدود کنید.

(ب) ویژه‌تابع‌ها را به‌نحار کنید و احتمال در ناحیه‌ی  $0 < x < a/2$  را بیابید.

حل

(الف) مسأله‌ی ویژه‌مقدار برای  $-d^2/dx^2$  از حل معادله‌ی دیفرانسیل

$$-\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \alpha\psi(x) \quad (۴۹۲-۲)$$

و یافتن ویژه‌مقدارهای  $\alpha$  و ویژه‌تابع  $\psi(x)$  تشکیل شده است. عمومی‌ترین جواب برای این معادله به‌صورت

$$\psi(x) = Ae^{ibx} + Be^{-ibx} \quad (۴۹۳-۲)$$

با  $\alpha = b^2$  است. با استفاده از شرایط مرزی  $\psi(x)$  در  $x = 0$  و  $x = a$  داریم:

$$\psi(0) = A + B = 0 \quad \Rightarrow \quad B = -A, \quad \psi(a) = Ae^{iba} + Be^{-iba} = 0 \quad (۴۹۴-۲)$$

جاگذاری  $B = -A$  در معادله‌ی دوم به  $A(e^{iba} - e^{-iba}) = 0$  یا  $e^{iba} = e^{-iba}$  می‌انجامد که  $e^{2iba} = 1$  را نتیجه می‌دهد. بنابراین داریم:  $\sin^2 ba = 0$  بنابراین  $ba = n\pi$ . آنگاه ویژه‌مقدارها از رابطه‌ی  $\alpha_n = n^2\pi^2/a^2$  و ویژه‌بردارهای متناظر از  $\psi_n(x) = A(e^{in\pi x/a} - e^{-in\pi x/a})$  به‌دست می‌آیند یعنی

$$\alpha_n = \frac{n^2\pi^2}{a^2}, \quad \psi_n(x) = C_n \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad (۴۹۵-۲)$$

بنابراین طیف ویژه‌مقدار عملگر  $\hat{A} = -d^2/dx^2$  گسسته است زیرا ویژه‌مقدارها و ویژه‌تابع‌ها به عدد  $n$  بستگی دارند.

(ب) به‌نحارش  $\psi_n(x)$

$$1 = C_n^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = \frac{C_n^2}{2} \int_0^a \left[1 - \cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)\right] dx = \frac{C_n^2}{a} \quad (۴۹۶-۲)$$

$C_n = \sqrt{2/a}$  و از این رو  $\psi_n(x) = \sqrt{2/a} \sin(n\pi x/a)$  را نتیجه می‌دهد. احتمال در ناحیه  $0 < x < a/2$  از رابطه‌ی

$$\frac{2}{a} \int_0^{a/2} \sin^2 \left( \frac{n\pi x}{a} \right) dx = \frac{1}{a} \int_0^{a/2} \left[ 1 - \cos \left( \frac{2n\pi x}{a} \right) \right] dx = \frac{1}{2} \quad (2-497)$$

به دست می‌آید که انتظار آن می‌رفت زیرا احتمال کل برابر با ۱ است:  $\int_0^a |\psi_n(x)|^2 dx = 1$ .

## تمرین‌ها ۱۰-۲

۱. دو حالت  $|\psi\rangle = i|\phi_1\rangle + 3i|\phi_2\rangle - |\phi_3\rangle$  و  $|\chi\rangle = |\phi_1\rangle - i|\phi_2\rangle + 5i|\phi_3\rangle$  را در نظر بگیرید که در آنها  $|\phi_1\rangle$ ،  $|\phi_2\rangle$  و  $|\phi_3\rangle$  متعامد بهنجارند.

(الف)  $\langle\psi|\psi\rangle$ ،  $\langle\chi|\chi\rangle$ ،  $\langle\psi|\chi\rangle$ ،  $\langle\chi|\psi\rangle$  را محاسبه کنید و  $\langle\psi+\chi|\psi+\chi\rangle$  را نتیجه بگیرید. آیا ضرب‌های زده‌ای  $\langle\psi|\chi\rangle$  و  $\langle\chi|\psi\rangle$  با هم برابرند؟

(ب)  $|\psi\rangle\langle\chi|$  و  $|\chi\rangle\langle\psi|$  را محاسبه کنید. آیا با هم برابرند؟ ردهای آنها را محاسبه کنید و آنها را با یکدیگر مقایسه نمایید.

(پ) مزدوج هرمیتی  $|\psi\rangle\langle\chi|$ ،  $|\chi\rangle\langle\psi|$  و  $|\chi\rangle\langle\chi|$  را بیابید.

۲. دو حالت  $|\psi_1\rangle = |\phi_1\rangle + 4i|\phi_2\rangle + 5|\phi_3\rangle$  و  $|\psi_2\rangle = b|\phi_1\rangle + 4|\phi_2\rangle - 3i|\phi_3\rangle$  را در نظر بگیرید که در آنها  $|\phi_1\rangle$ ،  $|\phi_2\rangle$  و  $|\phi_3\rangle$  کتهای متعامد بهنجارند و  $b$  یک ثابت است. مقدار  $b$  را بیابید به طوری که  $|\psi_1\rangle$  و  $|\psi_2\rangle$  متعامد باشند.

۳. اگر  $|\phi_1\rangle$ ،  $|\phi_2\rangle$  و  $|\phi_3\rangle$  متعامد بهنجار باشند آنگاه نشان دهید که حالت‌های (الف) نامساوی مثلثی و (ب) نامساوی شوارتز صدق می‌کنند.

۴. ثابت  $\alpha$  را طوری بیابید که حالت‌های  $|\psi\rangle = \alpha|\phi_1\rangle + 5|\phi_2\rangle$  و  $|\chi\rangle = 3\alpha|\phi_1\rangle - 4|\phi_2\rangle$  متعامد باشند.  $|\phi_1\rangle$  و  $|\phi_2\rangle$  را متعامد بهنجار در نظر بگیرید.

۵. اگر  $|\psi\rangle = |\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle$  و  $|\chi\rangle = |\phi_1\rangle - |\phi_2\rangle$  باشند آنگاه رابطه‌های زیر را ثابت کنید (توجه کنید که  $|\phi_1\rangle$  و  $|\phi_2\rangle$  متعامد بهنجار نیستند):

$$\langle\psi|\psi\rangle + \langle\chi|\chi\rangle = 2\langle\phi_1|\phi_1\rangle + 2\langle\phi_2|\phi_2\rangle \quad (\text{الف})$$

$$\langle\psi|\psi\rangle - \langle\chi|\chi\rangle = 2\langle\phi_1|\phi_2\rangle + 2\langle\phi_2|\phi_1\rangle \quad (\text{ب})$$

۶. حالتی را در نظر بگیرید که بر حسب سه بردار متعامد بهنجار  $|\phi_1\rangle$ ،  $|\phi_2\rangle$  و  $|\phi_3\rangle$  به صورت زیر داده شده است:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{15}}|\phi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|\phi_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{5}}|\phi_3\rangle$$

که در آن  $|\phi_n\rangle$ ها ویژه حالت‌های عملگر  $\hat{B}$  هستند به طوری که:  $\hat{B}|\phi_n\rangle = (3n^2 - 1)|\phi_n\rangle$  با  $n = 1, 2, 3$ .

(الف) هنجار حالت  $|\psi\rangle$  را بیابید.

(ب) مقدار چشمداشتی  $\hat{B}$  برای حالت  $|\psi\rangle$  را بیابید.

(پ) مقدار چشمداشتی  $\hat{B}^2$  برای حالت  $|\psi\rangle$  را بیابید.

۷. آیا مجموعه‌ی تابع‌های زیر مستقل خطی‌اند یا وابسته‌ی خطی؟

(الف)  $e^x$ ،  $4e^x$  و  $5e^x$

(ب)  $e^{ix}$ ،  $\cos x$  و  $3 \sin x$

(پ)  $x^2$ ،  $9x^4$  و  $e^{-x}$

۸. آیا مجموعه‌ی تابع‌های زیر روی محور مثبت  $x$  مستقل خطی‌اند یا وابسته‌ی خطی؟

(الف)  $x$ ،  $x + 2$  و  $x + 5$

(ب)  $\cos x$ ،  $\cos 2x$  و  $\cos 3x$

(پ)  $\sin^2 x$ ،  $\cos^2 x$  و  $\sin 2x$

(ت)  $x$ ،  $(x - 1)^2$  و  $(x + 1)^2$

(ث)  $\sinh^2 x$ ،  $\cosh^2 x$  و  $1$

۹. آیا مجموعه‌ی بردارهای زیر در حوزه‌ی مختلط، مستقل خطی‌اند یا وابسته‌ی خطی؟

(الف)  $(2, -3, 0)$ ،  $(0, 0, 1)$  و  $(2i, i, -i)$

(ب)  $(0, 4, 0)$ ،  $(i, -3i, i)$  و  $(2, 0, 1)$

(پ)  $(i, 1, 2)$ ،  $(3, i, -1)$  و  $(-i, 3i, 5i)$

۱۰. آیا مجموعه‌ی بردارهای زیر (در فضای اقلیدسی سه بعدی) مستقل خطی‌اند یا وابسته‌ی خطی؟

(الف)  $(4, 5, 6)$ ،  $(1, 2, 3)$  و  $(7, 8, 9)$

(ب)  $(1, 0, 0)$ ،  $(0, -5, 0)$  و  $(0, 0, \sqrt{7})$

(پ)  $(5, 4, 1)$ ،  $(2, 0, -2)$  و  $(0, 6, -1)$

۱۱. نشان دهید که هرگاه  $\hat{A}$  یک عملگر تصویر باشد آنگاه عملگر  $1 - \hat{A}$  نیز یک عملگر تصویر است.



۱۲. نشان دهید که  $\langle \psi | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle$  صرف نظر از این که  $|\psi\rangle$  بهنجار باشد یا خیر، یک عملگر تصویر است.

۱۳. در عبارت‌های زیر که در آنها  $\hat{A}$  یک عملگر است، طبیعت هر عبارت را مشخص کنید (یعنی مشخص کنید که آیا آن عبارت یک عملگر، بریاکت است) سپس مزدوج هرمیتی آن را بیابید.

$$(الف) \langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle \langle \psi |$$

$$(ب) \langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle \langle \phi |$$

$$(پ) \langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle | \psi \rangle \langle \phi | \hat{A}$$

$$(ت) \langle \psi | \hat{A} | \phi \rangle | \phi \rangle + i \hat{A} | \psi \rangle$$

$$(ث) (|\phi\rangle \langle \phi | \hat{A}) - i (\hat{A} | \psi \rangle \langle \psi |)$$

۱۴. یک فضای دوبعدی که در آن عملگر هرمیتی  $\hat{A}$  به صورت  $\hat{A}|\phi_1\rangle = |\phi_1\rangle$  و  $\hat{A}|\phi_2\rangle = -|\phi_2\rangle$  تعریف می‌شود را در نظر بگیرید ( $|\phi_1\rangle$  و  $|\phi_2\rangle$  متعامد بهنجارند). (الف) آیا حالت‌های  $|\phi_1\rangle$  و  $|\phi_2\rangle$  یک پایه را تشکیل می‌دهند؟

(ب) عملگر  $\hat{B} = |\phi_1\rangle \langle \phi_2|$  را در نظر بگیرید. آیا  $\hat{B}$  هرمیتی است؟ نشان دهید که  $\hat{B}^2 = 0$  است.

(پ) نشان دهید که ضرب‌های  $\hat{B}\hat{B}^\dagger$  و  $\hat{B}^\dagger\hat{B}$  عملگرهای تصویر هستند.

(ت) نشان دهید که عملگر  $\hat{B}\hat{B}^\dagger - \hat{B}^\dagger\hat{B}$  یکانی است.

(ث) عملگر  $\hat{C} = \hat{B}\hat{B}^\dagger + \hat{B}^\dagger\hat{B}$  را در نظر بگیرید. نشان دهید که  $\hat{C}|\phi_1\rangle = |\phi_1\rangle$  و  $\hat{C}|\phi_2\rangle = |\phi_2\rangle$ .

۱۵. دو رابطه‌ی زیر را ثابت کنید:

$$(الف) e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\hat{A} + \hat{B}} e^{[\hat{A}, \hat{B}]/2}$$

$$(ب) e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{1}{3!} [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots$$

راهنمایی: برای اثبات رابطه‌ی نخست، می‌توانید تابع عملگر  $\hat{F}(t) = e^{\hat{A}t} e^{\hat{B}t}$  را که در آن  $t$  یک پارامتر است و  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  عملگرهای مستقل از  $t$  هستند، تعریف کنید و سپس از  $[\hat{A}, G(\hat{B})] = [\hat{A}, \hat{B}] dG(\hat{B})/d\hat{B}$  که در آن  $G(\hat{B})$  یک تابع وابسته به عملگر  $\hat{B}$  است، استفاده کنید.

۱۶. (الف) ثابت کنید که ماتریس زیر یکانی است:

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$

(ب) ویژه مقادیر و ویژه بردارهای بهنجار متناظر آن را بیابید.

۱۷. سه ماتریس زیر را در نظر بگیرید:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(الف) جابه‌جاگرهای  $[A, B]$ ،  $[B, C]$  و  $[C, A]$  را محاسبه کنید.

(ب) نشان دهید  $A^2 + B^2 + 2C^2 = 4I$  است که در آن  $I$  ماتریس یکه است.

(پ) ثابت کنید که  $\text{Tr}(ABC) = \text{Tr}(BCA) = \text{Tr}(CAB)$  است.

۱۸. دو ماتریس زیر را در نظر بگیرید:

$$A = \begin{pmatrix} 3 & i & 1 \\ -1 & -i & 2 \\ 4 & 3i & 1 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 2i & 5 & -3 \\ -i & 3 & 0 \\ 7i & 1 & i \end{pmatrix}$$

رابطه‌های زیر را ثابت کنید:

(الف)  $\det(AB) = \det(A)\det(B)$

(ب)  $\det(A^T) = \det(A)$

(پ)  $\det(A^\dagger) = (\det(A))^*$

(ت)  $\det(A^*) = (\det(A))^*$

۱۹. ماتریس زیر را در نظر بگیرید:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$$

(الف) ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای بهنجار ماتریس  $A$  را بیابید.

(ب) آیا این ویژه‌بردارها یک پایه را تشکیل می‌دهند؟ (یعنی آیا این پایه کامل و متعامد بهنجار است؟)

(پ) ماتریس  $U$  که از ویژه‌بردارهای بهنجار  $A$  تشکیل شده است را در نظر بگیرید. ثابت کنید که  $U$

یکانی است و در رابطه‌ی زیر صدق می‌کند:

$$U^\dagger AU = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}$$

که در آن  $\lambda_1$  و  $\lambda_2$  ویژه مقدارهای  $A$  هستند.

(ت) نشان دهید که  $e^{xA} = \cosh x + A \sinh x$ .

۲۰. با استفاده از جبر براکت نشان دهید  $\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}\hat{C}) = \text{Tr}(\hat{C}\hat{A}\hat{B}) = \text{Tr}(\hat{B}\hat{C}\hat{A})$  که در آن  $\hat{A}$ ،  $\hat{B}$  و  $\hat{C}$  عملگرند.

۲۱. برای هر دو کت  $|\psi\rangle$  و  $|\phi\rangle$  که هنجار متناهی دارند، نشان دهید که  $\text{Tr}(|\psi\rangle\langle\phi|) = \langle\phi|\psi\rangle$ .

۲۲. ماتریس  $A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1+i \\ 0 & 3 & 0 \\ -1-i & 0 & 0 \end{pmatrix}$  را در نظر بگیرید.

(الف) ویژه مقدارها و ویژه بردارهای بهنجار  $A$  را بیابید. ویژه بردارهای  $A$  را با  $|a_1\rangle$ ،  $|a_2\rangle$  و  $|a_3\rangle$  نمایش دهید. آیا ویژه مقدارهای به دست آمده واگن اند؟

(ب) نشان دهید که ویژه بردارهای  $|a_1\rangle$ ،  $|a_2\rangle$  و  $|a_3\rangle$  یک پایه متعامد بهنجار و کامل را تشکیل می دهند یعنی نشان دهید که  $\sum_{j=1}^3 |a_j\rangle\langle a_j| = I$  که در آن  $I$  ماتریس یکبه یک  $3 \times 3$  است و  $\langle a_j|a_k\rangle = \delta_{jk}$ .

(پ) ماتریس متناظر با عملگر به دست آمده از ضرب براکت ویژه بردار نخست  $P = |a_1\rangle\langle a_1|$  را بیابید. آیا  $P$  یک عملگر تصویر است؟

۲۳. در یک فضای برداری سه بعدی، عملگر زیر را که ماتریس آن در پایه  $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$  متعامد بهنجار است را در نظر بگیرید:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

(الف) آیا  $A$  هرمیتی است؟ ویژه مقدارها و ویژه بردارهای بهنجار متناظر آن را محاسبه کنید. ثابت کنید که ویژه بردارهای متناظر با دو ویژه مقدار غیرواگن متعامد بهنجارند.

(ب) ماتریس های نمایش دهنده عملگرهای تصویر را برای دو ویژه بردار غیرواگن به دست آمده در قسمت (الف) محاسبه کنید.

۲۴. دو عملگر  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  که ماتریس های آنها به صورت زیر است را در نظر بگیرید:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 4 \end{pmatrix}$$

(الف) آیا  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  هرمیتی‌اند؟

(ب) آیا  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  جابه‌جا می‌شوند؟

(پ) ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  را بیابید.

(ت) آیا ویژه‌بردارهای هر یک از این عملگرها متعامد بهنجارند؟

(ث) ثابت کنید که  $\hat{U}^\dagger \hat{B} \hat{U}$  قطری است ( $\hat{U}$  ماتریس ویژه‌بردارهای بهنجار  $\hat{B}$  است).

(ج) ثابت کنید که  $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger$  است.

۲۵. عملگر  $\hat{A}$  را در نظر بگیرید به طوری که  $[\hat{A}, \hat{A}^\dagger] = 1$  است.

(الف) جابه‌جاگرهای  $[\hat{A}^\dagger \hat{A}, \hat{A}^\dagger]$  و  $[\hat{A}^\dagger \hat{A}, \hat{A}]$  را محاسبه کنید.

(ب) اگر اثر  $\hat{A}$  و  $\hat{A}^\dagger$  روی حالت‌های  $\{|a\rangle\}$  از رابطه‌های  $\hat{A}|a\rangle = \sqrt{a}|a-1\rangle$  و  $\hat{A}^\dagger|a\rangle = \sqrt{a+1}|a+1\rangle$

به دست آید و  $\langle a'|a\rangle = \delta_{a'a}$  باشد آنگاه  $\langle a+1|\hat{A}^\dagger|a\rangle$ ،  $\langle a|\hat{A}|a+1\rangle$ ،  $\langle a|\hat{A}^\dagger\hat{A}^\dagger|a\rangle$  و  $\langle a|\hat{A}\hat{A}^\dagger|a\rangle$  را محاسبه کنید.

(پ)  $\langle a|(\hat{A} + \hat{A}^\dagger)^2|a\rangle$  و  $\langle a|(\hat{A} - \hat{A}^\dagger)^2|a\rangle$  را محاسبه کنید.

۲۶. ماتریس  $4 \times 4$  زیر را در نظر بگیرید:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

(الف) ماتریس‌های  $A^\dagger A$ ،  $A A^\dagger$ ،  $N = A^\dagger A$ ،  $H = N + \frac{1}{2}I$  (که در آن  $I$  ماتریس یکه است)،  $B = A + A^\dagger$

و  $C = i(A - A^\dagger)$  را بیابید.

(ب) ماتریس‌های متناظر با جابه‌جاگرهای  $[A, \hat{A}^\dagger]$ ،  $[B, C]$ ،  $[N, B]$  و  $[N, C]$  را بیابید.

(پ) ماتریس‌های متناظر با  $B^2$ ،  $C^2$ ،  $[N, B^2 + C^2]$ ،  $[H, A^\dagger]$ ،  $[H, A]$  و  $[H, N]$  را بیابید.

(ت) ثابت کنید که  $\det(C^\dagger) = (\det(C))^*$  و  $\det(ABC) = \det(A)\det(B)\det(C)$

۲۷. هرگاه  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  جابه‌جا شوند و  $|\psi_1\rangle$  و  $|\psi_2\rangle$  دو ویژه‌بردار  $\hat{A}$  با ویژه‌مقدارهای متفاوت باشند ( $\hat{A}$

هرمیتی است) آنگاه نشان دهید که

(الف)  $\langle \psi_1 | \hat{B} | \psi_2 \rangle = 0$  برابر با صفر است.

(ب)  $\hat{B}|\psi_1\rangle$  نیز یک ویژه‌بردار  $\hat{A}$  با همان ویژه‌مقدار  $|\psi_1\rangle$  است (یعنی اگر  $\hat{A}|\psi_1\rangle = a_1|\psi_1\rangle$  باشد

آنگاه نشان دهید که  $\hat{A}(\hat{B}|\psi_1\rangle) = a_1\hat{B}|\psi_1\rangle$ ).

۲۸. فرض کنید که  $A$  و  $B$  دو ماتریس  $n \times n$  باشند. با فرض آن که  $B^{-1}$  وجود داشته باشد آنگاه نشان

دهید که  $[A, B^{-1}] = -B^{-1}[A, B]B^{-1}$ .

۲۹. یک سیستم فیزیکی که هامیلتونی  $H$  آن و عملگر  $A$  در فضای سه بعدی از ماتریس های زیر به دست می آیند را در نظر بگیرید:

$$H = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad A = a \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

(الف) آیا  $H$  و  $A$  هرمیتی اند؟

(ب) نشان دهید که  $H$  و  $A$  جابه جا می شوند. پایه ای از ویژه بردارهای مشترک  $H$  و  $A$  را ارائه کنید.

۳۰. (الف) با استفاده از  $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$  نشان دهید که  $[\hat{X}^2, \hat{P}] = 2i\hbar\hat{X}$  و  $[\hat{X}, \hat{P}^2] = 2i\hbar\hat{P}$  است.

(ب) نشان دهید که  $[\hat{X}^2, \hat{P}^2] = 2i\hbar(i\hbar + 2\hat{P}\hat{X})$  است.

(پ) جابه جاگر  $[\hat{X}^2, \hat{P}^2]$  را محاسبه کنید.

۳۱. در مورد هرمیتی بودن جابه جاگرهای  $[\hat{X}, \hat{P}]$ ،  $[\hat{X}^2, \hat{P}]$  و  $[\hat{X}, \hat{P}^2]$  بحث کنید.

۳۲. (الف) جابه جاگر  $[\hat{X}^2, d/dx]$  را با اثر دادن آن روی یک تابع موج محاسبه کنید.

(ب) با استفاده از  $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$ ، جابه جاگر  $[\hat{X}\hat{P}^2, \hat{P}\hat{X}^2]$  را برحسب یک ترکیب خطی از  $\hat{X}^2\hat{P}^2$  و  $\hat{X}\hat{P}$  محاسبه کنید.

۳۳. نشان دهید که  $[\hat{X}, \hat{P}^n] = i\hbar\hat{X}\hat{P}^{n-1}$ .

۳۴. جابه جاگرهای  $[e^{i\hat{X}}, \hat{P}]$ ،  $[e^{i\hat{X}^2}, \hat{P}]$  و  $[e^{i\hat{X}}, \hat{P}^2]$  را محاسبه کنید.

۳۵. ماتریس زیر را در نظر بگیرید:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

(الف) ویژه مقدارها و ویژه بردارهای بهنجار  $A$  را بیابید.

(ب) آیا این ویژه بردارها یک پایه را تشکیل می دهند؟ (یعنی آیا این پایه کامل و متعامد بهنجار است؟)

(پ) ماتریس  $U$  که از ویژه بردارهای بهنجار  $A$  تشکیل شده است را در نظر بگیرید. ثابت کنید که  $U$

یکانی است و در رابطه‌ی زیر صدق می‌کند:

$$U^{\dagger}AU = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix}$$

که در آن  $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$  ویژه‌مقدارهای  $A$  هستند.

(ت) نشان دهید که  $e^{xA} = \cosh x + A \sinh x$  است.

راهنمایی:  $\cosh x = \sum_{n=0}^{\infty} x^{2n}/(2n)!$  و  $\sinh x = \sum_{n=0}^{\infty} x^{2n+1}/(2n+1)!$

۳۶. (الف) اگر  $[\hat{A}, \hat{B}] = c$  باشد که در آن  $c$  عدد است آنگاه دو رابطه‌ی  $e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + c$  و

$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-c/2}$  را ثابت کنید.

(ب) حال اگر  $[\hat{A}, \hat{B}] = c\hat{B}$  باشد که در آن دوباره  $c$  عدد است آنگاه نشان دهید که  $e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = e^c\hat{B}$

است.

۳۷. ماتریس زیر را در نظر بگیرید:

$$A = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & -1 \\ 0 & -1 & 3 \end{pmatrix}$$

(الف) ویژه‌مقدارهای  $A$  و ویژه‌بردارهای متناظر آنها را بیابید.

(ب) پایه‌ای را در نظر بگیرید که از سه ویژه‌بردار  $A$  ساخته می‌شود. با استفاده از جبر ماتریسی ثابت کنید

که این پایه هم متعامد بهنجار و هم کامل است.

۳۸. (الف) شرطی که باید یک ماتریس  $A$  در آن صدق کند به طوری که هم یکانی و هم هرمیتی باشد را

مشخص کنید.

(ب) سه ماتریس زیر را در نظر بگیرید:

$$M_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad M_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad M_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

وارون هر ماتریس را محاسبه کنید. آیا در شرط به‌دست آمده در (الف) صدق می‌کنند؟

۳۹. دو ماتریس زیر را در نظر بگیرید:

$$A = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix} \quad B = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+i & 1-i \\ 1-i & 1+i \end{pmatrix}$$

(الف) آیا این ماتریس‌ها هرمیتی‌اند؟

(ب) وارون این ماتریس‌ها را محاسبه کنید.

(پ) آیا این ماتریس‌ها یکانی‌اند؟

(ت) ثابت کنید که دترمینان‌های  $A$  و  $B$  به شکل  $e^{i\theta}$  هستند. مقادیرهای متناظر  $\theta$  را بیابید.

۴۰. نشان دهید که ماتریس تبدیل نمایش دهنده‌ی یک چرخش  $90^\circ$  پادساعتگرد بردارهای پایه‌ی  $(\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k})$  حول محور  $z$  از ماتریس زیر به دست می‌آید:

$$U = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

۴۱. نشان دهید که ماتریس تبدیل نمایش دهنده‌ی یک چرخش  $90^\circ$  ساعتگرد بردارهای پایه‌ی  $(\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k})$  حول محور  $y$  از ماتریس زیر به دست می‌آید:

$$U = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

۴۲. نشان دهید که عملگر  $(\hat{X}\hat{P} + \hat{P}\hat{X})^2$  برابر است با  $(\hat{X}^2\hat{P}^2 + \hat{P}^2\hat{X}^2)$  به اضافه‌ی یک جمله از مرتبه‌ی  $\hbar^2$ .

۴۳. دو ماتریس  $A = \begin{pmatrix} 4 & i & 7 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -i \end{pmatrix}$  و  $B = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & i & 0 \\ -i & 0 & i \end{pmatrix}$  را در نظر بگیرید. ضرب‌های  $B^{-1}A$  و  $AB^{-1}$  را محاسبه کنید. آیا با هم برابرند؟ اهمیت این نتیجه چیست؟

۴۴. از رابطه‌های فهرست شده در پیوست الف برای محاسبه‌ی انتگرال‌های شامل تابع دلتای دیراک زیر استفاده کنید:

$$\int_0^\pi \sin(3x) \cos^2(4x) \delta(x - \pi/2) dx \quad (\text{الف})$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} e^{yx+2} \delta(\Delta x) dx \text{ (ب)}$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \sin(\theta/2) \delta''(\theta + \pi) d\theta \text{ (پ)}$$

$$\int_0^{\pi} \cos^2 \theta \delta[(\theta - \pi)/4] d\theta \text{ (ت)}$$

۴۵. از رابطه‌های فهرست شده در پیوست الف برای محاسبه‌ی عبارت‌های زیر استفاده کنید:

$$\int_0^{\Delta} (3x^2 + 2) \delta(x - 1) dx \text{ (الف)}$$

$$(2x^5 - 4x^3 + 1) \delta(x + 2) \text{ (ب)}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\Delta x^2 - 7x^2 - 3) \delta(x^2 - 4) dx \text{ (پ)}$$

۴۶. از رابطه‌های فهرست شده در پیوست الف برای محاسبه‌ی عبارت‌های زیر استفاده کنید:

$$\int_{-1}^1 e^{6x-2} \delta(-4x) dx \text{ (الف)}$$

$$\cos(2\theta) \sin(\theta) \delta(\theta^2 - \pi^2/4) \text{ (ب)}$$

$$\int_{-1}^1 e^{5x-1} \delta'''(x) dx \text{ (پ)}$$

۴۷. اگر عملگرهای مکان و تکانه به ترتیب با  $\hat{R}$  و  $\hat{P}$  نمایش داده شوند آنگاه نشان دهید که  $\hat{P}^n \hat{R}^n = (-1)^n \hat{R}^n \hat{P}^n$  و  $\hat{P}^n \hat{P}^n = (-1)^n \hat{P}^n$  که در آنها  $\hat{P}$  عملگر پاریته و  $n$  یک عدد صحیح است.

۴۸. عملگر زیر را در نظر بگیرید:

$$\hat{A} = |\phi_1\rangle\langle\phi_1| + |\phi_2\rangle\langle\phi_2| + |\phi_3\rangle\langle\phi_3| - i|\phi_1\rangle\langle\phi_2| - |\phi_1\rangle\langle\phi_3| + i|\phi_2\rangle\langle\phi_1| - |\phi_2\rangle\langle\phi_1|$$

که در آن  $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, |\phi_3\rangle$  یک پایه‌ی کامل و متعامد بهنجار را تشکیل می‌دهند.  
 (الف) آیا  $\hat{A}$  هرمیتی است؟  $\hat{A}^2$  را محاسبه کنید و بگویید که آیا یک عملگر تصویر است؟  
 (ب) ماتریس  $3 \times 3$  نمایش‌دهنده‌ی  $\hat{A}$  را در پایه‌ی  $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, |\phi_3\rangle$  بیابید.  
 (پ) ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای ماتریس را بیابید.

۴۹. هامیلتونی یک سیستم دو حالتی از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\hat{H} = E(|\phi_1\rangle\langle\phi_1| - |\phi_2\rangle\langle\phi_2| - i|\phi_1\rangle\langle\phi_2| + i|\phi_2\rangle\langle\phi_1|)$$

که در آن  $|\phi_1\rangle$  و  $|\phi_2\rangle$  یک پایه‌ی کامل و متعامد بهنجار را تشکیل می‌دهند و  $E$  یک ثابت حقیقی با ابعاد انرژی است.  
 (الف) آیا  $\hat{H}$  هرمیتی است؟ رد  $\hat{H}$  را محاسبه کنید.  
 (ب) ماتریس نمایش‌دهنده‌ی  $\hat{H}$  را در پایه‌ی  $|\phi_1\rangle$  و  $|\phi_2\rangle$  بیابید و ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای این ماتریس



را محاسبه کنید. رد ماتریس را محاسبه نموده و آن را با نتیجه‌ای که در (الف) به دست آوردید، مقایسه نمایید.  
(پ) جابه‌جاگرهای  $[\hat{H}, |\phi_1\rangle\langle\phi_1|]$ ،  $[\hat{H}, |\phi_2\rangle\langle\phi_2|]$  و  $[\hat{H}, |\phi_1\rangle\langle\phi_2|]$  را محاسبه کنید.

۵۰. ذره‌ای را در نظر بگیرید که به حرکت در امتداد مثبت محور  $x$  محدود شده است و هامیلتونی آن برابر با  $\hat{H} = \mathcal{E}d^2/dx^2$  است که در آن  $\mathcal{E}$  یک ثابت حقیقی مثبت با ابعاد انرژی است.  
(الف) تابع موجی را بیابید که متناظر با ویژه‌مقدار انرژی  $9\mathcal{E}$  است. (اطمینان حاصل کنید تابعی که پیدا می‌کنید، در همه جا در امتداد مثبت محور  $x$  متناهی و انتگرال پذیر مجذوری است). این تابع موج را بهنجار کنید.

(ب) احتمال یافتن ذره را در ناحیه‌ی  $0 \leq x \leq 15$  محاسبه کنید.

(پ) آیا تابع موج به دست آمده در (الف) یک ویژه‌تابع عملگر  $\hat{A} = d/dx - 7$  است؟

(ت) جابه‌جاگر  $[\hat{H}, \hat{A}]$  را محاسبه کنید.

۵۱. تابع‌های موج زیر را در نظر بگیرید:

$$\psi(x, y) = \sin 2x \cos 5x, \quad \phi(x, y) = e^{-2(x^2+y^2)}, \quad \chi(x, y) = e^{-i(x+y)}$$

(الف) ثابت کنید که آیا هر یک از این تابع‌های موج یک ویژه‌تابع  $\hat{A} = \partial/\partial x + \partial/\partial y$  است.

(ب) تابع‌های موجی که ویژه‌تابع  $1 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial x^2 = \hat{B}$  هستند را پیدا کنید.

(پ) اثر  $\hat{A}\hat{B}$  و  $\hat{B}\hat{A}$  را روی هر یک از این تابع‌های موج محاسبه کنید و  $[\hat{A}, \hat{B}]$  را نتیجه بگیرید.

۵۲. (الف) آیا حالت  $\psi(\theta, \phi) = e^{-3i\phi} \cos \theta$  یک ویژه‌تابع  $\hat{A}_\phi = \partial/\partial \phi$  یا  $\hat{B}_\theta = \partial/\partial \theta$  است؟

(ب) آیا  $\hat{A}_\phi$  و  $\hat{B}_\theta$  هرمیتی‌اند؟

(پ) عبارتهای  $\langle \psi | \hat{A}_\phi | \psi \rangle$  و  $\langle \psi | \hat{B}_\theta | \psi \rangle$  را محاسبه نمایید.

(ت) جابه‌جاگر  $[\hat{A}_\phi, \hat{B}_\theta]$  را بیابید.

۵۳. عملگر  $\hat{A} = (\hat{X}d/dx + 2)$  را در نظر بگیرید.

(الف) ویژه‌تابع متناظر با ویژه‌مقدار صفر عملگر  $\hat{A}$  را بیابید. آیا این تابع قابل بهنجارش است؟

(ب) آیا عملگر  $\hat{A}$  هرمیتی است؟

(پ) جابه‌جاگرهای  $[\hat{A}, \hat{X}]$ ،  $[\hat{A}, d/dx]$ ،  $[\hat{A}, d^2/dx^2]$ ،  $[\hat{X}, [\hat{A}, \hat{X}]]$  و  $[d/dx, [\hat{A}, d/dx]]$  را

محاسبه کنید.

۵۴. هرگاه  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  دو عملگر هرمیتی باشند آنگاه ویژه‌مقدارهای آنها را بیابید به طوری که  $\hat{A}^2 = 2\hat{I}$  و

$\hat{B}^2 = \hat{I}$  باشد که در آنها  $\hat{I}$  عملگر یکانی است.

۵۵. فضای هیلبرت توابع مختلط دومتغیره‌ی  $\psi(x, y)$  را در نظر بگیرید. یک عملگر جایگشت توسط اثر

آن روی  $\psi(x, y)$  به صورت  $\hat{\pi}\psi(x, y) = \psi(y, x)$  تعریف می‌شود.

(الف) ثابت کنید که عملگر  $\hat{\pi}$  خطی و هرمیتی است.

(ب) نشان دهید که  $\hat{\pi}^2 = \hat{I}$  است. ویژه‌مقدارها را بیابید و نشان دهید که ویژه‌تابع‌های  $\hat{\pi}$  از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$\psi_+(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi(x, y) + \psi(y, x)] \quad \text{و} \quad \psi_-(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi(x, y) - \psi(y, x)]$$

## فصل سوم

# اصول موضوعه‌ی مکانیک کوانتومی

۱-۳ مقدمه

صورت‌بندی مکانیک کوانتومی بر مبنای چند اصل موضوعه است. این اصول موضوعه نیز به نوبه‌ی خود مبتنی بر گستره‌ی وسیعی از مشاهده‌های تجربی هستند. ایده‌های فیزیکی مربوط به این مشاهدات تجربی به صورت مختصر در فصل ۱ یادآوری شد. در این فصل، بحثی رسمی از این اصول موضوعه و چگونگی استفاده از آنها برای به دست آوردن اطلاعات کمی پیرامون سیستم‌های میکروفیزیکی ارائه می‌کنیم.

این اصول موضوعه را نمی‌توان به دست آورد و از آزمایش نتیجه می‌شوند. این اصول موضوعه کمینه‌ی مجموعه فرض‌های مورد نیاز برای توسعه‌ی نظریه‌ی مکانیک کوانتومی را نمایش می‌دهند. اما چگونه اعتبار این اصول موضوعه را بفهمیم؟ در پاسخ باید گفت که نمی‌توان به صورت مستقیم اعتبار آنها را درک کرد و تنها نتیجه‌گیری غیرمستقیم امکان‌پذیر است. برای این کار، باید به نظریه‌ی ساخته شده بر مبنای این اصول موضوعه بازگشت: اگر نظریه کارا باشد آنگاه این اصول موضوعه معتبر خواهند بود و در غیر این صورت این اصول موضوعه اعتباری نخواهند داشت. نظریه‌ی کوانتومی نه تنها کارایی دارد بلکه کارایی آن بسیار عالی است و این موضوع تأیید تجربی آن را نشان می‌دهد. این نظریه علاوه بر توانایی پیش‌بینی کمی دارای قدرت کیفی مؤثری نیز هست. این توانایی پیش‌بینی با مجموعه‌ای غنی از آزمایش‌ها ثابت شده است. بنابراین توانایی پیش‌بینی دقیق نظریه‌ی کوانتومی مدرک غیرقابل انکاری برای معتبر بودن اصول موضوعه‌ای که این نظریه بر اساس آنها شکل گرفته است را ارائه می‌کند.

## ۲-۳ اصول موضوعه‌ی پایه‌ی مکانیک کوانتومی

مطابق با مکانیک کلاسیک، حالت یک ذره در لحظه‌ی  $t$  توسط دو متغیر دینامیکی بنیادی مشخص می‌شود: مکان  $\mathbf{r}(t)$  و تکانه  $\mathbf{p}(t)$ . می‌توان هر کمیت فیزیکی دیگر مربوط به سیستم را برحسب این دو متغیر دینامیکی محاسبه کرد. علاوه بر این با دانستن این متغیرها در لحظه‌ی  $t$  می‌توانیم (به عنوان مثال با استفاده از معادله‌های هامیلتون  $dx/dt = \partial H/\partial p$  و  $dp/dt = -\partial H/\partial x$ ) مقادیر این متغیرها را در هر لحظه‌ی بعدی  $t'$  پیش‌بینی نماییم.

همتای این ایده‌ها در مکانیک کوانتومی توسط اصول موضوعه‌ای مشخص می‌شوند که ما را قادر می‌کنند تا درک کنیم که

- چگونه یک حالت کوانتومی در زمان معلوم  $t$  به صورت ریاضی توصیف می‌شود.
- چگونه کمیت‌های فیزیکی مختلف را از این حالت کوانتومی محاسبه کنیم.
- با دانستن حالت سیستم در لحظه‌ی  $t$  چگونه این حالت را در هر لحظه‌ی بعدی  $t'$  پیدا کنیم یعنی چگونه تحول زمانی سیستم را توصیف نماییم.

پاسخ این پرسش‌ها در مجموعه‌ی پنج اصل موضوعه‌ی زیر داده می‌شود:

### اصل موضوعه‌ی ۱: حالت یک سیستم

حالت هر سیستم فیزیکی در لحظه‌ی  $t$  توسط بردار حالت  $|\psi(t)\rangle$  در فضای هیلبرت  $\mathcal{H}$  مشخص می‌شود.  $|\psi(t)\rangle$  تمام اطلاعات مورد نیاز در مورد سیستم را در خود دارد (و به عنوان پایه‌ای برای استخراج این اطلاعات عمل می‌کند). برهنه‌ی بردارهای حالت نیز یک بردار حالت است.

### اصل موضوعه‌ی ۲: مشاهده‌پذیرها و عملگرها

برای هر کمیت فیزیکی قابل اندازه‌گیری  $A$  که یک مشاهده‌پذیر یا متغیر دینامیکی نامیده می‌شود، یک عملگر هرمیتی خطی  $\hat{A}$  متناظر وجود دارد که ویژه‌بردارهای آن یک پایه‌ی کامل را تشکیل می‌دهند.

### اصل موضوعه‌ی ۳: اندازه‌گیری و ویژه‌مقادیر عملگرها

می‌توان اندازه‌گیری مشاهده‌پذیر  $A$  را به صورت رسمی با اثر  $\hat{A}$  روی بردار حالت  $|\psi(t)\rangle$  نمایش داد. تنها نتیجه‌ی ممکن این اندازه‌گیری یکی از ویژه‌مقدارهای (حقیقی)  $a_n$  عملگر  $\hat{A}$  است. اگر نتیجه‌ی اندازه‌گیری روی  $A$  حالت  $|\psi(t)\rangle$  برابر با  $a_n$  باشد آنگاه حالت سیستم بی‌درنگ پس از اندازه‌گیری به  $|\psi_n\rangle$  تغییر می‌کند:

$$\hat{A}|\psi(t)\rangle = a_n|\psi_n\rangle \quad (۱-۳)$$

که در آن  $a_n = \langle \psi_n | \psi(t) \rangle$  است.

توجه:  $a_n$  مؤلفه‌ی  $|\psi(t)\rangle$  است هنگامی که روی ویژه‌بردار  $|\psi_n\rangle$  تصویر شود.<sup>۱</sup>

#### اصل موضوعه‌ی ۴: نتیجه‌ی احتمالاتی اندازه‌گیری‌ها

- طیف‌های گسسته: هنگام اندازه‌گیری مشاهده‌پذیر  $A$ ، روی یک سیستم در حالت  $|\psi\rangle$ ، احتمال به‌دست آوردن یکی از ویژه‌مقدارهای غیرواگن  $a_n$  عملگر متناظر  $\hat{A}$  از رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آید:

$$P_n(a_n) = \frac{|\langle \psi_n | \psi \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{|a_n|^2}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (۲-۳)$$

که در آن  $|\psi_n\rangle$  ویژه‌حالت  $\hat{A}$  با ویژه‌مقدار  $a_n$  است. هرگاه ویژه‌مقدار  $a_n$  واگن  $m$ گانه باشد آنگاه  $P_n$  به‌صورت زیر در می‌آید:

$$P_n(a_n) = \frac{\sum_{j=1}^m |\langle \psi_n^j | \psi \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\sum_{j=1}^m |a_n^{(j)}|^2}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (۳-۳)$$

- عمل اندازه‌گیری، حالت سیستم را از  $|\psi\rangle$  به  $|\psi_n\rangle$  تغییر می‌دهد. اگر سیستم پیشتر در ویژه‌حالت  $|\psi_n\rangle$  عملگر  $\hat{A}$  باشد آنگاه اندازه‌گیری  $A$  با قطعیت کامل ویژه‌مقدار متناظر  $a_n$  را نتیجه می‌دهد:  $\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle$

- طیف‌های پیوسته: می‌توان رابطه‌ی (۲-۳) را که برای طیف‌های گسسته معتبر است (برای تعیین چگالی احتمالی که اندازه‌گیری  $\hat{A}$  مقداری بین  $a$  و  $a + da$  را روی سیستمی که در ابتدا در حالت  $|\psi\rangle$  است نتیجه می‌دهد) گسترش داد:

$$\frac{dP(a)}{da} = \frac{|\psi(a)|^2}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{|\psi(a)|^2}{\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(a')|^2 da'} \quad (۴-۳)$$

به عنوان مثال، چگالی احتمال یافتن یک ذره بین  $x$  و  $x + dx$  از  $|\psi(x)|^2 / \langle \psi | \psi \rangle$  به‌دست می‌آید.

#### اصل موضوعه‌ی ۵: تحول زمانی یک سیستم

تحول زمانی بردار حالت  $|\psi(t)\rangle$  ی‌ی یک سیستم از معادله‌ی شرودینگر وابسته به زمان پیروی می‌کند:

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (۵-۳)$$

که در آن  $\hat{H}$  عملگر هامیلتونی متناظر با انرژی کل سیستم است.

۱. برای دیدن این مطلب، کفایت  $|\psi(t)\rangle$  را برحسب ویژه‌بردارهای  $\hat{A}$  که یک پایه‌ی کامل را تشکیل می‌دهند، بسط دهیم:  $|\psi(t)\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n | \psi(t) \rangle = \sum_n a_n |\psi_n\rangle$

## ملاحظات

این اصول موضوعه به دو بخش تقسیم می‌شوند:

- چهار اصل نخست، سیستم را در یک زمان معلوم توصیف می‌کنند.
- اصل پنجم نشان می‌دهد که چگونه این توصیف با زمان تحول می‌یابد.

در ادامه‌ی این فصل، قصد داریم الزامات فیزیکی هر یک از این چهار اصل موضوعه را بررسی نماییم. یعنی نگاهی به حالت یک سیستم کوانتومی و تفسیر آن، مشاهده‌پذیرهای فیزیکی، اندازه‌گیری در مکانیک کوانتومی و سرانجام تحول زمانی سیستم‌های کوانتومی خواهیم انداخت.

## ۳-۳ حالت یک سیستم

برای توصیف یک سیستم در مکانیک کوانتومی، از یک موجود ریاضی (یک تابع مختلط) متعلق به فضای هیلبرت استفاده می‌کنیم (یعنی بردار حالت  $|\psi(t)\rangle$ ) که تمام اطلاعات مورد نیازی را که باید از سیستم بدانیم در خود دارد و از روی آن می‌توان تمام کمیت‌های فیزیکی مورد نیاز را محاسبه نمود. همانطور که در فصل ۲ بحث شد، می‌توان بردار حالت  $|\psi(t)\rangle$  را به دو صورت نمایش داد:

- به صورت تابع موج  $\psi(\mathbf{r}, t)$  در فضای مکان:  $\psi(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r} | \psi(t) \rangle$ .
- به صورت تابع موج تکانه  $\Psi(\mathbf{p}, t)$  در فضای تکانه:  $\Psi(\mathbf{p}, t) = \langle \mathbf{p} | \psi(t) \rangle$ .

بنابراین به عنوان مثال، برای توصیف حالت یک ذره‌ی یک‌بعدی در مکانیک کوانتومی از تابع مختلط  $\psi(x, t)$  به جای دو عدد حقیقی  $(x, p)$  در فیزیک کلاسیک استفاده می‌کنیم.

توابع موج مورد استفاده، تنها آن دسته از توابعی هستند که متناظر با سیستم‌های فیزیکی باشند. پرسشی که در اینجا مطرح می‌شود این است که لازمه‌های ریاضی‌ای که یک تابع موج باید در آنها صدق کند تا یک سیستم فیزیکی را نمایش دهد، چیست؟ در پاسخ باید گفت که توابع موج  $\psi(x)$  که از نظر فیزیکی قابل قبول‌اند، همراه با مشتق نخست آنها  $(d\psi(x)/dx)$ ، باید در همه‌جا متناهی، پیوسته و تک‌مقدار باشند. همانطور که در فصل ۴ بحث خواهد شد، فیزیک نهفته در پشت شرط‌های پیوستگی  $\psi(x)$  و  $d\psi(x)/dx$  را بررسی خواهیم کرد (خواهیم دید که  $\psi(x)$  و  $d\psi(x)/dx$  باید پیوسته باشند زیرا چگالی احتمال و تکانه‌ی خطی تابع‌های پیوسته‌ای از  $x$  هستند).

## ۱-۳-۳ چگالی احتمال

پرسشی که در اینجا مطرح می‌شود این است که معنی فیزیکی تابع موج چیست؟ در پاسخ باید گفت که تنها مجذور هنجار آن  $(|\psi(\mathbf{r}, t)|^2)$  دارای معنی است. مطابق با تفسیر احتمالاتی بورن، مجذور هنجار

یعنی  $\psi(\mathbf{r}, t)$ :

$$P(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (۶-۳)$$

چگالی احتمال مکان را نمایش می‌دهد. یعنی کمیت  $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r$  احتمال یافتن ذره در لحظه  $t$  و در المان حجم  $d^3r$  که در بین  $\mathbf{r}$  و  $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$  واقع شده است را نمایش می‌دهد. بنابراین احتمال کل یافتن سیستم در جایی از فضا برابر با ۱ است:

$$\int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dz = 1 \quad (۷-۳)$$

به تابع موج  $\psi(\mathbf{r}, t)$  که در این رابطه صدق کند، بهنجار گفته می‌شود. باید یادآوری کنیم که  $\psi(\mathbf{r})$  دارای بعد فیزیکی  $1/\sqrt{L^3}$  است که در آن  $L$  طول است. از این رو بعد فیزیکی  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  برابر با  $1/L^3$  است:  $[\psi(\mathbf{r})]^2 = 1/L^3$ .

توجه کنید که تابع‌های موج  $\psi(\mathbf{r}, t)$  و  $e^{i\alpha}\psi(\mathbf{r}, t)$  که در آن  $\alpha$  یک عدد حقیقی است، یک حالت را نمایش می‌دهند.

### مثال ۳-۱) تابع‌های موج فیزیکی و غیرفیزیکی

کدام یک از تابع‌های موجی که در ادامه می‌آیند، تابع‌های موج فیزیکی قابل قبول را نمایش می‌دهند:

$$e(x) = x^2 \text{ و } h^2(x) = 5x, g(x) = 4 - |x|, f(x) = 3 \sin \pi x$$

حل

در بین این تابع‌های موج تنها تابع  $f(x) = 3 \sin \pi x$  یک تابع موج فیزیکی قابل قبول را نمایش می‌دهد زیرا  $f(x)$  و مشتق آن در همه جا متناهی، پیوسته، تک‌مقدار و انتگرال‌پذیر است.

تابع‌های دیگر، نمی‌توانند تابع موج باشند زیرا  $g(x) = 4 - |x|$  پیوسته، متناهی و انتگرال‌پذیر مجذوری نیست،  $h^2(x) = 5x$  متناهی و انتگرال‌پذیر مجذوری نیست و  $e(x) = x^2$  نه متناهی و نه انتگرال‌پذیر مجذوری است.

### ۲-۳-۳ اصل برهمنهی

حالت یک سیستم نباید با یک تک‌تابع موج نمایش داده شود. می‌توان آن را به وسیله‌ی برهمنهی دو یا چند تابع موج نمایش داد. یک مثال از دنیای ماکروسکوپی یک ریسمان مرتعش است. می‌توان حالت این ریسمان را به وسیله‌ی یک تک‌تابع موج یا برهمنهی (ترکیب خطی) چندین موج نمایش داد.

اگر  $\psi_1(\mathbf{r}, t)$  و  $\psi_2(\mathbf{r}, t)$  جداگانه در معادله‌ی شرودینگر صدق کنند آنگاه تابع موج  $\psi(\mathbf{r}, t) = \alpha_1 \psi_1(\mathbf{r}, t) + \alpha_2 \psi_2(\mathbf{r}, t)$  نیز در معادله‌ی موج صدق می‌کند که در آن  $\alpha_1$  و  $\alpha_2$

عددهای مختلط هستند. معادله‌ی شرودینگر یک معادله‌ی خطی است. بنابراین به صورت کلی (مطابق با اصل برهنه‌ی) برهنه‌ی خطی چندین تابع موج (که حالت‌های فیزیکی مجاز یک سیستم را توصیف می‌کنند) تابع موج جدیدی است، که حالت فیزیکی ممکن سیستم را نمایش می‌دهد:

$$|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i |\psi_i\rangle \quad (۸-۳)$$

که در آن  $\alpha_i$  ها عددهایی مختلط‌ند. کمیت

$$P = \left| \sum_i \alpha_i |\psi_i\rangle \right|^2 \quad (۹-۳)$$

چگالی احتمال را برای این برهنه‌ی نمایش می‌دهد. اگر حالت‌های  $|\psi_i\rangle$  دو به دو متعامد بهنجار باشند آنگاه احتمال برابر مجموع احتمال‌های منفرد خواهد بود:

$$P = \left| \sum_i \alpha_i |\psi_i\rangle \right|^2 = \sum_i |\alpha_i|^2 = P_1 + P_2 + P_3 + \dots \quad (۱۰-۳)$$

که در آن  $P_i = |\alpha_i|^2$  است.  $P_i$  احتمال یافتن سیستم در حالت  $|\psi_i\rangle$  است.

### مثال ۲-۳

سیستمی را در نظر بگیرید که حالت آن برحسب مجموعه‌ی متعامد بهنجار سه بردار  $|\phi_1\rangle$ ،  $|\phi_2\rangle$  و  $|\phi_3\rangle$  به صورت زیر است:

$$|\psi\rangle = \frac{\sqrt{3}}{3} |\phi_1\rangle + \frac{2}{3} |\phi_2\rangle + \frac{\sqrt{2}}{3} |\phi_3\rangle$$

(الف) ثابت کنید که  $|\psi\rangle$  بهنجار است سپس احتمال یافتن سیستم را در هر یک از حالت‌های  $|\phi_1\rangle$ ،  $|\phi_2\rangle$  و  $|\phi_3\rangle$  محاسبه کنید. ثابت کنید که احتمال کل برابر با یک است.

(ب) حال مجموعه‌ای از  $۸۱۰^\circ$  سیستم یکسان را در نظر بگیرید که هر یک از آنها در حالت  $|\psi\rangle$  قرار دارند. اگر اندازه‌گیری‌ها روی تمام آنها صورت گیرند چه تعداد سیستم در هر یک از حالت‌های  $|\phi_1\rangle$ ،  $|\phi_2\rangle$  و  $|\phi_3\rangle$  یافت خواهند شد؟

حل

(الف) با استفاده از شرط متعامد بهنجار بودن  $\langle \phi_j | \phi_k \rangle = \delta_{jk}$  که در آن  $j, k = 1, 2, 3$  است،



می‌توانیم ثابت کنیم که  $|\psi\rangle$  بهنجار است:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \frac{1}{3}\langle\phi_1|\phi_1\rangle + \frac{4}{9}\langle\phi_2|\phi_2\rangle + \frac{2}{9}\langle\phi_3|\phi_3\rangle = \frac{1}{3} + \frac{4}{9} + \frac{2}{9} = 1 \quad (11-3)$$

چون  $|\psi\rangle$  بهنجار است، احتمال یافتن سیستم در  $|\phi_1\rangle$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$P_1 = |\langle\phi_1|\psi\rangle|^2 = \left| \frac{\sqrt{3}}{3}\langle\phi_1|\phi_1\rangle + \frac{2}{3}\langle\phi_1|\phi_2\rangle + \frac{\sqrt{2}}{3}\langle\phi_1|\phi_3\rangle \right|^2 = \frac{1}{3} \quad (12-3)$$

زیرا  $\langle\phi_1|\phi_1\rangle = 1$  و  $\langle\phi_1|\phi_2\rangle = \langle\phi_1|\phi_3\rangle = 0$  است.

به صورت مشابه، از رابطه‌های  $\langle\phi_2|\phi_2\rangle = 1$  و  $\langle\phi_2|\phi_1\rangle = \langle\phi_2|\phi_3\rangle = 0$ ، احتمال یافتن

سیستم در  $|\phi_2\rangle$  را به دست می‌آوریم:

$$P_2 = |\langle\phi_2|\psi\rangle|^2 = \left| \frac{2}{3}\langle\phi_2|\phi_2\rangle \right|^2 = \frac{4}{9} \quad (13-3)$$

در رابطه با  $\langle\phi_3|\phi_3\rangle = 1$  و  $\langle\phi_3|\phi_1\rangle = \langle\phi_3|\phi_2\rangle = 0$  باید گفت که این رابطه‌ها به احتمال یافتن

سیستم در  $|\phi_3\rangle$  می‌انجامند:

$$P_3 = |\langle\phi_3|\psi\rangle|^2 = \left| \frac{2}{3}\langle\phi_3|\phi_3\rangle \right|^2 = \frac{2}{9} \quad (14-3)$$

همانطور که انتظار می‌رفت، احتمال کل برابر با یک است:

$$P = P_1 + P_2 + P_3 = \frac{1}{3} + \frac{4}{9} + \frac{2}{9} = 1 \quad (15-3)$$

(ب) تعداد سیستم‌هایی که در حالت  $|\phi_1\rangle$  یافت خواهند شد، برابر است با

$$N_1 = 810 \times P_1 = \frac{810}{3} = 270 \quad (16-3)$$

به صورت مشابه، تعداد سیستم‌هایی که در حالت‌های  $|\phi_2\rangle$  و  $|\phi_3\rangle$  یافت خواهند شد، به ترتیب از

رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$N_2 = 810 \times P_2 = \frac{810 \times 4}{9} = 360, \quad N_3 = 810 \times P_3 = \frac{810 \times 2}{9} = 180 \quad (17-3)$$

## ۴-۳ مشاهده‌پذیرها و عملگرها

یک مشاهده‌پذیر یک متغیر دینامیکی است که می‌توان آن را اندازه گرفت. متغیرهای دینامیکی که بیشتر با آنها در مکانیک کلاسیک روبرو می‌شویم، عبارتند از مکان، تکانه‌ی خطی، تکانه‌ی زاویه‌ای و انرژی. اما چگونه به صورت ریاضی، این متغیرها و متغیرهای دیگر را در مکانیک کوانتومی نمایش می‌دهیم؟ مطابق با اصل موضوعه‌ی دوم، به هر مشاهده‌پذیر فیزیکی یک عملگر هرمیتی وابسته است. در فصل قبل، دیدیم که نمایش مکان عملگر تکانه‌ی خطی در فضای یک بعدی از  $\hat{P} = -i\hbar\partial/\partial x$  و در فضای سه بعدی از  $\hat{P} = -i\hbar\nabla$  به دست می‌آید.

به صورت کلی، می‌توان هر تابعی مانند  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$  که به متغیرهای مکان و تکانه ( $\mathbf{p}$  و  $\mathbf{r}$ ) بستگی داشته باشد را کوانتیده کرد یا با جایگزین کردن  $\mathbf{p}$  و  $\mathbf{r}$  به عملگرهای متناظرشان تبدیل نمود:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \quad \longrightarrow \quad F(\hat{\mathbf{R}}, \hat{\mathbf{P}}) = f(\hat{\mathbf{R}}, -i\hbar\nabla) \quad (۱۸-۳)$$

یا  $f(x, p) \rightarrow F(\hat{X}, -i\hbar\partial/\partial x)$ . به عنوان مثال، عملگر متناظر با هامیلتونی

$$H = \frac{1}{2m}\mathbf{p}^2 + V(\mathbf{r}, t) \quad (۱۹-۳)$$

در نمایش مکان از

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\hat{\mathbf{R}}, t) \quad (۲۰-۳)$$

به دست می‌آید که در آن عملگر لاپلاسی  $\nabla^2$  عملگر لاپلاسی است و در مختصات دکارتی از  $\nabla^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$  به دست می‌آید.

چون عملگر تکانه  $\hat{\mathbf{P}}$  هرمیتی است و اگر پتانسیل  $V(\hat{\mathbf{R}}, t)$  یک تابع حقیقی باشد آنگاه هامیلتونی (۱۹-۳) هرمیتی است. در فصل ۲ دیدیم که ویژه‌مقدارهای عملگرهای هرمیتی حقیقی‌اند. از این رو طیف هامیلتونی که از مجموعه‌ی کاملی از ویژه‌مقدارهای آن تشکیل شده است، حقیقی است. این طیف می‌تواند گسسته، پیوسته یا آمیزه‌ای از هر دو باشد. در مورد حالت‌های مقید باید گفت که هامیلتونی طیف گسسته‌ای از مقدارها را دارد و حالت‌های نامقید طیف پیوسته‌ای دارند. به صورت کلی، یک عملگر به همان صورت متناظری که متغیر کلاسیکی دارای مدارهای مقید یا نامقید است، طیف‌های مقید یا نامقید خواهد داشت. در رابطه با  $\hat{\mathbf{P}}$  و  $\hat{\mathbf{R}}$  باید گفت که دارای طیف پیوسته‌ای هستند زیرا  $p$  و  $r$  می‌توانند پیوستاری از مقدارها را بگیرند.

مطابق با اصل موضوعه‌ی ۵، انرژی کل  $E$  سیستم‌های وابسته به زمان، به عملگر

$$\hat{H} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \quad (۲۱-۳)$$

جدول ۱-۳ تعدادی مشاهده‌پذیر و عملگرهای متناظر با آنها.

مشاهده‌پذیر	عملگر متناظر
$\hat{\mathbf{r}}$	$\mathbf{R}$
$\mathbf{p}$	$\mathbf{P} = -i\hbar\nabla$
$T = \frac{p^2}{2m}$	$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$
$E = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}, t)$	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}(\mathbf{R}, t)$
$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$	$\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar\hat{\mathbf{R}} \times \nabla$

وابسته است که می‌توان آن را به صورتی که در ادامه می‌آید، ملاحظه کرد. تابع موج یک ذره‌ی آزاد با تکانه‌ی  $\mathbf{p}$  و انرژی کل  $E$  از  $\psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-Et)/\hbar}$  به دست می‌آید که در آن  $A$  یک ثابت است. مشتق زمانی  $\psi(\mathbf{r}, t)$  برابر است با

$$-i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = E\psi(\mathbf{r}, t) \quad (۲۲-۳)$$

بیانید نگاهی به ویژه‌تابع‌ها و ویژه‌مقدارهای عملگر تکانه‌ی  $\hat{\mathbf{P}}$  بیندازیم. معادله‌ی ویژه‌مقدار

$$-i\hbar\nabla\psi(\mathbf{r}) = \mathbf{p}\psi(\mathbf{r}) \quad (۲۳-۳)$$

ویژه‌تابع  $\psi(\mathbf{r})$  متناظر با ویژه‌مقدار  $\mathbf{p}$  را نتیجه می‌دهد به طوری که  $|\psi(\mathbf{r})|^2 d^3r$  احتمال یافتن ذره با تکانه‌ی  $\mathbf{p}$  در المان حجم  $d^3r$  با مرکزیت حول  $\mathbf{r}$  است. جواب معادله‌ی ویژه‌مقدار (۲۳-۳) برابر است با

$$\psi(\mathbf{r}) = Ae^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \quad (۲۴-۳)$$

که در آن  $A$  ثابت بهنجارش است. چون  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$  ویژه‌مقدار عملگر  $\hat{\mathbf{P}}$  است، ویژه‌تابع (۲۴-۳) به  $\psi(\mathbf{r}) = Ae^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  کاهش می‌یابد از این رو معادله‌ی ویژه‌مقدار (۲۳-۳) به صورت زیر در می‌آید:

$$\hat{\mathbf{P}}\psi(\mathbf{r}) = \hbar\mathbf{k}\psi(\mathbf{r}) \quad (۲۵-۳)$$

به صورت خلاصه، یک تناظر یک‌به‌یک بین مشاهده‌پذیرها و عملگرها وجود دارد (جدول ۱-۳).

مثال ۳-۳ تکانه‌ی زاویه‌ای مداری

عملگر نمایش‌دهنده‌ی تکانه‌ی زاویه‌ای مداری کلاسیک را بیابید.

حل

عبارت کلاسیکی مربوط به تکانه‌ی زاویه‌ای یک ذره که مکان و تکانه‌ی خطی آن برابر با  $\mathbf{r}$  و  $\mathbf{p}$  است، از رابطه‌ی  $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = l_x \mathbf{i} + l_y \mathbf{j} + l_z \mathbf{k}$  به دست می‌آید که در آن  $l_x = yp_z - zp_y$  و  $l_y = zp_x - xp_z$  است.

برای یافتن عملگر نمایش دهنده‌ی تکانه‌ی زاویه‌ای کلاسیک کافیهست  $\mathbf{r}$  و  $\mathbf{p}$  را با عملگرهای متناظرشان یعنی  $\hat{\mathbf{R}}$  و  $\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar\nabla$  جایگزین کنیم:  $\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar\hat{\mathbf{R}} \times \nabla$ . این کار به

$$\hat{L}_x = \hat{Y}\hat{P}_z - \hat{Z}\hat{P}_y = -i\hbar\left(\hat{Y}\frac{\partial}{\partial z} - \hat{Z}\frac{\partial}{\partial y}\right) \quad (۲۶-۳)$$

$$\hat{L}_y = \hat{Z}\hat{P}_x - \hat{X}\hat{P}_z = -i\hbar\left(\hat{Z}\frac{\partial}{\partial x} - \hat{X}\frac{\partial}{\partial z}\right) \quad (۲۷-۳)$$

$$\hat{L}_z = \hat{X}\hat{P}_y - \hat{Y}\hat{P}_x = -i\hbar\left(\hat{X}\frac{\partial}{\partial y} - \hat{Y}\frac{\partial}{\partial x}\right) \quad (۲۸-۳)$$

می‌انجامد. به یاد بیاورید که در مکانیک کلاسیک، مؤلفه‌های مکان و تکانه جابه‌جا می‌شوند ( $xp_x = p_x x$ ) و همین موضوع برای مؤلفه‌های تکانه‌ی زاویه‌ای نیز برقرار است ( $l_x l_y = l_y l_x$ ). اما در مکانیک کوانتومی، این درست نیست زیرا  $\hat{X}\hat{P}_x = \hat{P}_x\hat{X} + i\hbar$  و همانطور که در فصل ۵ نشان داده خواهد شد،  $\hat{L}_x\hat{L}_y = \hat{L}_y\hat{L}_x + i\hbar\hat{L}_z$  و به همین ترتیب.

## ۵-۳ اندازه‌گیری در مکانیک کوانتومی

نظریه‌ی کوانتومی درباره‌ی نتیجه‌های اندازه‌گیری است و چیزی پیرامون آنچه که ممکن است در دنیای فیزیکی خارج از متن اندازه‌گیری اتفاق بیفتد، به ما نمی‌گوید. بنابراین تأکید روی اندازه‌گیری است.

### ۱-۵-۳ چگونه اندازه‌گیری سیستم‌ها را مختل می‌کند

در فیزیک کلاسیک انجام اندازه‌گیری روی یک سیستم بدون آشفته کردن قابل ملاحظه‌ی آن امکان‌پذیر است. اما در مکانیک کوانتومی فرآیند اندازه‌گیری سیستم را به صورت قابل ملاحظه‌ای مختل می‌کند. هنگام انجام اندازه‌گیری روی سیستم‌های کلاسیک، این اختلال وجود دارد ولی آنقدر کوچک است که قابل چشم‌پوشی است. در سیستم‌های اتمی و زیراتمی، عمل اندازه‌گیری آشفته‌گی‌های غیرقابل چشم‌پوشی یا قابل ملاحظه‌ای را القاء می‌کند.

به عنوان مثال، آزمایشی را در نظر بگیرید که مکان الکترون هیدروژن را اندازه می‌گیرد. برای این کار باید الکترون را با تابش الکترومغناطیسی (فوتون‌ها) بمباران کنیم. اگر بخواهیم مکان را به دقت تعیین کنیم آنگاه طول موج تابش باید به اندازه‌ی کافی کوتاه باشد. چون مدار الکترون از مرتبه‌ی  $10^{-10}$  m است، باید

از تابشی که طول موج آن کوچک‌تر از  $10^{-10}$  m باشد، استفاده کنیم. یعنی باید الکترون را با فوتون‌هایی با انرژی بزرگ‌تر از

$$h\nu = h\frac{c}{\lambda} = h\frac{3 \times 10^8}{10^{-10}} \sim 10^4 \text{ eV} \quad (29-3)$$

مباران کنیم. هنگامی که این فوتون‌ها به الکترون برخورد می‌کنند، نه تنها آن را آشفته می‌کنند بلکه آن را به طور کامل از مدارش خارج می‌سازند. به یاد بیاورید که انرژی یونش اتم هیدروژن در حدود  $13.6 \text{ eV}$  است. بنابراین صرف عمل اندازه‌گیری مکان الکترون، آن را به طور محسوسی آشفته می‌کند.

حال بیایید در مورد مفهوم کلی اندازه‌گیری در مکانیک کوانتومی بحث کنیم. به صورت کلی، عمل اندازه‌گیری حالت سیستم را تغییر می‌دهد. به صورت نظری می‌توانیم ابزار اندازه‌گیری را با یک عملگر نمایش دهیم به طوری که پس از انجام اندازه‌گیری، سیستم در یکی از ویژه‌حالت‌های این عملگر خواهد بود. سیستمی را در نظر بگیرید که در حالت  $|\psi\rangle$  قرار دارد. قبل از اندازه‌گیری مشاهده‌پذیر  $A$ ، می‌توان حالت  $|\psi\rangle$  را با برهمه‌نی خطی ویژه‌حالت‌های  $|\psi_n\rangle$  عملگر متناظر  $\hat{A}$  نمایش داد:

$$|\psi\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n | \psi \rangle = \sum_n a_n |\psi_n\rangle \quad (30-3)$$

مطابق با اصل موضوعه‌ی ۴، عمل اندازه‌گیری  $A$  حالت سیستم را از  $|\psi\rangle$  به یکی از ویژه‌حالت‌های  $|\psi_n\rangle$  عملگر  $\hat{A}$  تغییر می‌دهد و نتیجه‌ی به دست آمده ویژه‌مقدار  $a_n$  است. تنها استثنا برای این قاعده زمانی است که سیستم از قبل در یکی از ویژه‌حالت‌های مشاهده‌پذیری که در حال اندازه‌گیری آن هستیم، قرار داشته باشد. به عنوان مثال، اگر سیستم در ویژه‌حالت  $|\psi_n\rangle$  باشد آنگاه اندازه‌گیری مشاهده‌پذیر  $A$  با قطعیت کامل (یعنی با احتمال برابر با ۱) مقدار  $a_n$  را بدون تغییر دادن حالت  $|\psi_n\rangle$  نتیجه می‌دهد.

قبل از اندازه‌گیری، با قطعیت کامل نمی‌دانیم که پس از اندازه‌گیری، سیستم در کدام ویژه‌حالت (از بین حالت‌های مختلف  $|\psi_n\rangle$ ) خواهد بود. تنها یک نتیجه‌ی احتمالاتی امکان‌پذیر است. اصل موضوعه‌ی ۴ بیان می‌کند که احتمال یافتن سیستم در یک ویژه‌حالت غیرواگن خاص  $|\psi_n\rangle$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$P_n = \frac{|\langle \psi_n | \psi \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (31-3)$$

توجه کنید که تابع موج نتیجه‌ی اندازه‌گیری‌های منفرد را پیش‌بینی نمی‌کند بلکه به جای آن، توزیع احتمال  $P = |\psi|^2$  را تعیین می‌کند.

سرانجام باید بگوییم که مکانیک کوانتومی مکانیک قابل اعمال بر اجسامی است که برای آنها اندازه‌گیری الزاماً با حالت سیستم تداخل می‌کند. از نظر مکانیک کوانتومی، نمی‌توانیم از اثر تجهیزات اندازه‌گیری روی سیستم چشم‌پوشی کنیم زیرا این اثرها مهم‌اند. به صورت کلی، نمی‌توان اندازه‌گیری‌های مشخصی را بدون

برهم زدن ویژگی‌های دیگر سیستم کوانتومی انجام داد. در نتیجه، این اثر تداخل به وسیله‌ی تجهیزات بر روی سیستم است که اساس مکانیک کوانتومی است.

### ۲-۵-۳ مقادیر چشمداشتی

مقدار چشمداشتی  $\langle \hat{A} \rangle$  عملگر  $\hat{A}$  نسبت به حالت  $|\psi\rangle$  به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (۳۲-۳)$$

به عنوان مثال، انرژی یک سیستم از مقدار چشمداشتی هامیلتونی به دست می‌آید:  $E = \langle \hat{H} \rangle = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle$ .

اساساً مقدار چشمداشتی  $\langle \hat{A} \rangle$  نتیجه‌ی میانگین اندازه‌گیری  $\hat{A}$  روی حالت  $|\psi\rangle$  را نمایش می‌دهد. برای دیدن این موضوع، با استفاده از مجموعه‌ی کامل ویژه‌بردارهای  $|\psi_n\rangle$  عملگر  $\hat{A}$  به عنوان پایه (یعنی  $\hat{A}$  در  $\psi_n$  قطری است) می‌توانیم  $\langle \hat{A} \rangle$  را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{\langle \psi | \psi \rangle} \sum_{nm} \langle \psi | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \hat{A} | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \psi \rangle = \sum_n a_n \frac{|\langle \psi_n | \psi \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (۳۳-۳)$$

که در آن از  $\langle \psi_m | \hat{A} | \psi_n \rangle = a_n \delta_{nm}$  استفاده کرده‌ایم. چون کمیت  $|\langle \psi_n | \psi \rangle|^2 / \langle \psi | \psi \rangle$  احتمال  $P_n$  یافتن مقدار  $a_n$  را پس از اندازه‌گیری مشاهده‌پذیر  $A$  می‌دهد، در واقع می‌توانیم  $\langle \hat{A} \rangle$  را به عنوان میانگین مجموعه‌ای از اندازه‌گیری‌های  $A$  تفسیر کنیم:

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_n a_n \frac{|\langle \psi_n | \psi \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle} = \sum_n a_n P_n \quad (۳۴-۳)$$

یعنی مقدار چشمداشتی یک مشاهده‌پذیر از جمع تمام ویژه‌مقدارهای مجاز  $a_n$ ، با حاصل ضرب هر  $a_n$  در احتمال متناظر  $P_n$  به دست می‌آید.

به صورت زیر می‌توان رابطه‌ی (۳۴-۳) (که برای طیف‌های گسسته معتبر است) را به توزیع پیوسته‌ای از احتمال‌های  $P(a)$  توسعه داد:

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} a |\psi(a)|^2 da}{\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(a)|^2 da} = \int_{-\infty}^{+\infty} a dP(a) \quad (۳۵-۳)$$

می‌توان مقدار چشمداشتی یک مشاهده‌پذیر را به صورت فیزیکی به صورتی که در ادامه می‌آید، به دست آورد: تعداد بسیار زیادی از سیستم‌های یکسان را که هر یک در حالت یکسان  $|\psi\rangle$  قرار دارند را آماده کنید. آنگاه

مشاهده‌پذیر  $A$  روی تمام این سیستم‌های یکسان اندازه‌گیری می‌شود. نتیجه‌ی این اندازه‌گیری‌ها عبارت است از  $a_1, a_2, \dots, a_n, \dots$  و احتمال‌های وقوع متناظر با آنها عبارت است از  $P_1, P_2, \dots, P_n, \dots$ . مقدار میانگین تمام این اندازه‌گیری‌های تکرار شده، مقدار چشمداشتی  $\hat{A}$  نسبت به حالت  $|\psi\rangle$  نامیده می‌شود.

توجه کنید که فرآیند به‌دست آوردن نتیجه‌های متفاوت هنگام اندازه‌گیری همان مشاهده‌پذیر روی تعداد زیادی از سیستم‌هایی که به‌صورت یکسان آماده شده‌اند، برخلاف فیزیک کلاسیک است که در آن این اندازه‌گیری‌ها باید نتیجه‌ی یکسانی را بدهند. در مکانیک کوانتومی تنها می‌توانیم احتمال به‌دست آوردن مقدار مشخصی را برای یک مشاهده‌پذیر پیش‌بینی کنیم.

### مثال ۳-۴

سیستمی را در نظر بگیرید که حالت آن برحسب یک مجموعه‌ی کامل و متعامد بهنجار از پنج بردار  $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, |\phi_3\rangle, |\phi_4\rangle, |\phi_5\rangle$  به‌صورت زیر معلوم است:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{19}}|\phi_1\rangle + \frac{2}{\sqrt{19}}|\phi_2\rangle + \sqrt{\frac{2}{19}}|\phi_3\rangle + \sqrt{\frac{3}{19}}|\phi_4\rangle + \sqrt{\frac{5}{19}}|\phi_5\rangle$$

که در آن  $|\phi_n\rangle$ ‌ها ویژه‌حالت‌های هامیلتونی سیستم ( $\hat{H}|\phi_n\rangle = n\varepsilon_0|\phi_n\rangle$  با  $n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots$ ) هستند و  $\varepsilon_0$  دارای بعد انرژی است.

(الف) اگر انرژی روی تعداد زیادی از سیستم‌های یکسان که همه‌ی آنها در ابتدا در همان حالت  $|\psi\rangle$  قرار دارند، اندازه‌گیری شود آنگاه چه مقدارهایی و با چه احتمال‌هایی می‌توانند به‌دست آیند؟  
(ب) انرژی میانگین چنین سیستمی را بیابید.

حل

ابتدا توجه کنید که  $|\psi\rangle$  بهنجار نیست:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_{n=1}^5 a_n^* \langle\phi_n|\phi_n\rangle = \sum_{n=1}^5 a_n^2 = \frac{1}{19} + \frac{4}{19} + \frac{2}{19} + \frac{3}{19} + \frac{5}{19} = \frac{15}{19} \quad (36-3)$$

زیرا  $\langle\phi_j|\phi_k\rangle = \delta_{jk}$  با  $j, k = 1, 2, 3, 4, 5$  است.

(الف) با توجه به این  $E_n = \langle\phi_n|\hat{H}|\phi_n\rangle = n\varepsilon_0$  با  $n = 1, 2, 3, 4, 5$  است، اندازه‌گیری‌های مختلف روی انرژی سیستم مقدارهای  $E_1 = \varepsilon_0, E_2 = 2\varepsilon_0, E_3 = 3\varepsilon_0, E_4 = 4\varepsilon_0$  و  $E_5 = 5\varepsilon_0$  را با احتمال‌های زیر نتیجه می‌دهند:

$$P_1(E_1) = \frac{|\langle\phi_1|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} = \left| \frac{1}{\sqrt{19}} \langle\phi_1|\phi_1\rangle \right|^2 \times \frac{19}{15} = \frac{1}{15} \quad (37-3)$$

$$P_1(E_1) = \frac{|\langle \phi_1 | \psi \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle} = \left| \frac{2}{\sqrt{19}} \langle \phi_1 | \phi_1 \rangle \right|^2 \times \frac{19}{15} = \frac{4}{15} \quad (38-3)$$

$$P_2(E_2) = \frac{|\langle \phi_2 | \psi \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle} = \left| \sqrt{\frac{2}{19}} \langle \phi_2 | \phi_2 \rangle \right|^2 \times \frac{19}{15} = \frac{2}{15} \quad (39-3)$$

$$P_3(E_3) = \frac{|\langle \phi_3 | \psi \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle} = \left| \sqrt{\frac{3}{19}} \langle \phi_3 | \phi_3 \rangle \right|^2 \times \frac{19}{15} = \frac{3}{15} \quad (40-3)$$

و

$$P_5(E_5) = \frac{|\langle \phi_5 | \psi \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle} = \left| \sqrt{\frac{5}{19}} \langle \phi_5 | \phi_5 \rangle \right|^2 \times \frac{19}{15} = \frac{5}{15} \quad (41-3)$$

(ب) انرژی میانگین سیستم از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$E = \sum_{j=1}^5 P_j E_j = \frac{1}{15} \varepsilon_0 + \frac{1}{15} \varepsilon_0 + \frac{6}{15} \varepsilon_0 + \frac{12}{15} \varepsilon_0 + \frac{25}{15} \varepsilon_0 = \frac{52}{15} \varepsilon_0 \quad (42-3)$$

می‌توان این انرژی را از مقدار چشمداشتی هامیلتونی نیز به دست آورد:

$$\begin{aligned} E &= \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{19}{15} \sum_{n=1}^5 a_n^2 \langle \phi_n | \hat{H} | \phi_n \rangle = \frac{19}{15} \left( \frac{1}{19} + \frac{1}{19} + \frac{6}{19} + \frac{12}{19} + \frac{25}{19} \right) \varepsilon_0 \\ &= \frac{52}{15} \varepsilon_0 \end{aligned} \quad (43-3)$$

که در آن مقادیر ضریب‌های  $a_n^2$  در (۳۶-۳) فهرست شده‌اند.

### ۳-۵-۳ مجموعه‌های کامل عملگرهای جابه‌جا شونده

به دو مشاهده‌پذیر  $A$  و  $B$  سازگار گفته می‌شود هرگاه عملگرهای متناظرشان جابه‌جا شوند ( $[A, B] = 0$ ).

به مشاهده‌پذیرهای متناظر با عملگرهایی که با هم جابه‌جا نمی‌شوند، ناسازگار گفته می‌شود.

در ادامه قصد داریم تا به بررسی اندازه‌گیری دو مشاهده‌پذیر  $A$  و  $B$  در یک سیستم معلوم بپردازیم.

چون عموماً عمل اندازه‌گیری سیستم را مختل می‌کند، بنابراین نتیجه‌ی اندازه‌گیری  $A$  و  $B$  به ترتیب انجام آنها بستگی دارد. ابتدا اندازه‌گیری  $A$  و سپس  $B$  معمولاً به نتیجه‌هایی که متفاوت از نتیجه‌های به دست

آمده از اندازه‌گیری ابتدا  $B$  و سپس  $A$  است، می‌انجامد. اما این چگونه روی می‌دهد؟

اگر  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  جابه‌جا نشوند و سیستم در ویژه‌حالت  $|\psi_n^{(a)}\rangle$  عملگر  $\hat{A}$  باشد آنگاه با قطعیت کامل،

۲. عمل اندازه‌گیری ابتدا  $A$  و سپس  $B$  توسط عمل ضرب  $\hat{B}\hat{A}$  عملگرهای متناظرشان روی بردار حالت نمایش داده می‌شود.



اندازه‌گیری  $A$  مقدار  $a_n$  را نتیجه می‌دهد زیرا  $\hat{A}|\psi_n^{(a)}\rangle = a_n|\psi_n^{(a)}\rangle$  است. سپس هنگامی که  $B$  را اندازه می‌گیریم، حالت سیستم در یکی از ویژه‌حالت‌های  $B$  قرار خواهد گرفت. اگر دوباره  $A$  را اندازه بگیریم آنگاه مقداری را خواهیم یافت که متفاوت از  $a_n$  است. اما این مقدار جدید چقدر است؟ با قطعیت کامل نمی‌توانیم به این پرسش پاسخ دهیم: تنها یک نتیجه‌ی احتمالاتی امکان‌پذیر است. برای این کار باید ویژه‌حالت‌های  $B$  را برحسب ویژه‌حالت‌های  $A$  بسط دهیم و بنابراین پاسخی احتمالاتی برای مقدار حاصل از اندازه‌گیری  $A$  ارائه کنیم. بنابراین اگر  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  جابه‌جا نشوند آنگاه نمی‌توان آنها را همزمان اندازه‌گیری نمود و ترتیب اندازه‌گیری این دو اهمیت پیدا می‌کند.

اما هنگامی که  $A$  و  $B$  جابه‌جا شوند، چه اتفاقی می‌افتد؟ می‌توانیم نشان دهیم که نتیجه اندازه‌گیری آنها به ترتیبی که انجام می‌شوند، بستگی نخواهد داشت. قبل از نشان دادن این موضوع، بیائید یک قضیه‌ی مفید را یادآوری کنیم.

**قضیه‌ی ۱-۳** هرگاه دو مشاهده‌پذیر سازگار باشند آنگاه عملگرهای متناظر آنها مجموعه‌ای از ویژه‌حالت‌های مشترک (یا همزمان) دارند (این قضیه برای ویژه‌حالت‌های واگن و غیرواگن برقرار است).

**اثبات** در اینجا تنها اثبات حالت غیرواگن را ارائه می‌کنیم. هرگاه  $|\psi_n\rangle$  یک ویژه‌حالت غیرواگن  $\hat{A}$  باشد  $(\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle)$  آنگاه داریم:

$$\langle\psi_m|[\hat{A}, \hat{B}]|\psi_n\rangle = (a_m - a_n)\langle\psi_m|\hat{B}|\psi_n\rangle = 0 \quad (۴۴-۳)$$

زیرا  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  جابه‌جا می‌شوند. بنابراین  $\langle\psi_m|\hat{B}|\psi_n\rangle$  باید صفر شود مگر آن که  $a_m = a_n$  باشد. یعنی

$$\langle\psi_m|\hat{B}|\psi_n\rangle = \langle\psi_n|\hat{B}|\psi_n\rangle \propto \delta_{nm} \quad (۴۵-۳)$$

از این رو  $|\psi_n\rangle$  ها ویژه‌حالت‌های مشترک یا همزمان  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  هستند (و در اینجا اثبات کامل می‌شود).

با نمایش دادن ویژه‌حالت همزمان  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  با  $|\psi_{n_1}^{(a)}, \psi_{n_2}^{(b)}\rangle$  داریم:

$$\hat{A}|\psi_{n_1}^{(a)}, \psi_{n_2}^{(b)}\rangle = a_{n_1}|\psi_{n_1}^{(a)}, \psi_{n_2}^{(b)}\rangle \quad (۴۶-۳)$$

$$\hat{B}|\psi_{n_1}^{(a)}, \psi_{n_2}^{(b)}\rangle = b_{n_2}|\psi_{n_1}^{(a)}, \psi_{n_2}^{(b)}\rangle \quad (۴۷-۳)$$

می‌توان قضیه‌ی ۱-۳ را به حالت مشاهده‌پذیرهای بسیاری که دو به دو سازگارند ( $A, B, C, \dots$ )، تعمیم داد. این مشاهده‌پذیرهای سازگار مجموعه‌ی کاملی از ویژه‌حالت‌های مشترک را دارند:

$$|\psi_n\rangle = |\psi_{n_1}^{(a)}, \psi_{n_2}^{(b)}, \psi_{n_3}^{(c)}, \dots\rangle \quad (۴۸-۳)$$

شرط‌های کامل و متعامد بهنجار بودن این مجموعه عبارتند از

$$\sum_{n_1} \sum_{n_2} \sum_{n_3} \dots |\psi_{n_1}^{(a)}, \psi_{n_2}^{(b)}, \psi_{n_3}^{(c)}, \dots\rangle \langle \psi_{n_1}^{(a)}, \psi_{n_2}^{(b)}, \psi_{n_3}^{(c)}, \dots| = 1 \quad (۴۹-۳)$$

$$\langle \psi_{n'} | \psi_n \rangle = \delta_{n'n} = \delta_{n'_1 n_1} \delta_{n'_2 n_2} \delta_{n'_3 n_3} \dots \quad (۵۰-۳)$$

اکنون نشان می‌دهیم که چرا زمانی که دو مشاهده‌پذیر  $A$  و  $B$  سازگارند، ترتیب انجام آزمایش‌ها مهم نیست. ابتدا با اندازه‌گیری  $A$ ، مقدار  $a_n$  را پیدا می‌کنیم و سیستم را در یک ویژه‌حالت  $A$  قرار می‌دهیم. طبق قضیه ۱-۳، این ویژه‌حالت یک ویژه‌حالت  $B$  نیز هست. بنابراین اندازه‌گیری  $B$  با قطعیت کامل  $b_n$  را بدون تأثیر گذاشتن بر حالت سیستم نتیجه می‌دهد. در این صورت، هرگاه  $A$  را دوباره اندازه‌گیری کنیم آنگاه با قطعیت کامل همان مقدار اولیه‌ی  $a_n$  را به دست می‌آوریم. به صورت مشابه، انجام اندازه‌گیری دیگر روی  $B$ ، مقدار  $b_n$  را نتیجه خواهد داد و سیستم را در همان ویژه‌حالت مشترک  $A$  و  $B$  باقی خواهد گذاشت. بنابراین هرگاه دو مشاهده‌پذیر  $A$  و  $B$  سازگار باشند و سیستم از ابتدا در ویژه‌حالت یکی از عملگرهای آنها باشد آنگاه اندازه‌گیری آنها نه تنها مقدارهای دقیق (ویژه‌مقدارها) را نتیجه می‌دهد بلکه به ترتیب انجام آزمایش‌ها بستگی نخواهد داشت. در این حالت به  $A$  و  $B$  اندازه‌پذیر همزمان گفته می‌شود. بنابراین می‌توان مشاهده‌پذیرهای سازگار را با دقت دلخواه به صورت همزمان اندازه‌گیری کرد ولی در مورد مشاهده‌پذیرهای ناسازگار چنین نیست.

اگر یک عملگر (فرض کنید عملگر  $\hat{A}$ ) ویژه‌مقدارهای واگن داشته باشد آنگاه چه اتفاقی می‌افتد؟ در این حالت، مشخص کردن یک ویژه‌مقدار به تنهایی حالت سیستم را تعیین نمی‌کند. در بین ویژه‌حالت‌های واگن  $\hat{A}$  تنها زیرمجموعه‌ای از آنها ویژه‌حالت‌های  $\hat{B}$  نیز هستند. بنابراین مجموعه‌ی حالت‌هایی که ویژه‌حالت‌های مشترک  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  هستند، کامل نیست. برای از بین بردن واگنی می‌توانیم عملگر سوم  $\hat{C}$  را معرفی کنیم که با  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  جابه‌جا می‌شود و سپس می‌توانیم مجموعه‌ای از ویژه‌حالت‌های مشترک  $\hat{A}$ ،  $\hat{B}$ ،  $\hat{C}$  را که کامل است، بسازیم. اگر واگنی وجود داشته باشد آنگاه می‌توانیم عملگر چهارم  $\hat{D}$  را معرفی کنیم که با سه عملگر قبلی جابه‌جا می‌شود و سپس به دنبال ویژه‌حالت‌های مشترک آنها که مجموعه‌ی کاملی را تشکیل می‌دهند، بگردیم. با ادامه دادن این روش، سرانجام تمام عملگرهایی (یعنی عملگرهای مستقل بیشتری وجود ندارند) که با یکدیگر جابه‌جا می‌شوند را استخراج می‌کنیم. هنگامی که این اتفاق بیفتد آنگاه مجموعه‌ی کاملی از عملگرهای جابه‌جاشونده<sup>۳</sup> (CSCO) را به دست آورده‌ایم. تنها پس از آن حالت سیستم به وضوح مشخص خواهد شد زیرا ویژه‌حالت‌های مشترک CSCO به صورت یکتا تعیین می‌شوند و مجموعه‌ی کاملی را تشکیل خواهند داد (به یاد بیاورید که مجموعه‌ی کامل از ویژه‌بردارهای یک عملگر، پایه نامیده می‌شود). در اینجا باید تعریف زیر را بیان کنیم:

تعریف: به مجموعه‌ای از عملگرهای هرمیتی  $\hat{A}$ ،  $\hat{B}$ ،  $\hat{C}$  و ... یک CSCO گفته می‌شود هرگاه این عملگرها دو به دو جابه‌جا شوند و مجموعه‌ی ویژه‌حالت‌های مشترک آنها کامل باشد و واگن نباشد (یعنی یکتا باشد).

گاهی اوقات مجموعه‌ی جابه‌جاشونده‌ی کامل می‌تواند تنها از یک عملگر تشکیل شود. هر عملگر با ویژه‌مقدارهای غیرواگن به تنهایی یک CSCO را بنا می‌کند. به عنوان مثال، عملگر مکان  $\hat{X}$  یک ذره‌ی بدون اسپین یک‌بعدی یک مجموعه‌ی کامل را فراهم می‌کند. عملگر  $\hat{P}$ ی این ذره نیز یک مجموعه‌ی کامل است ولی به هر حال  $\hat{X}$  و  $\hat{P}$  با هم نمی‌توانند یک CSCO را تشکیل دهند زیرا با هم جابه‌جا نمی‌شوند. در مسأله‌های سه‌بعدی، سه مؤلفه‌ی عملگر مکان  $\hat{X}$ ،  $\hat{Y}$  و  $\hat{Z}$  یک CSCO را تشکیل می‌دهند. به صورت مشابه، مؤلفه‌های عملگر تکانه  $\hat{P}_x$ ،  $\hat{P}_y$  و  $\hat{P}_z$  نیز یک CSCO را تشکیل می‌دهند. در مورد پتانسیل‌های سه‌بعدی متقارن کروی باید گفت که مجموعه‌ی  $\hat{H}$ ،  $\hat{L}^2$  و  $\hat{L}_z$  یک CSCO را تشکیل می‌دهند. توجه کنید که در این حالت تقارن کروی، به سه عملگر برای تشکیل یک CSCO نیاز داریم زیرا  $\hat{H}$ ،  $\hat{L}^2$  و  $\hat{L}_z$  همگی واگن‌اند و از این رو نمی‌توان با یک یا دو عملگر، به تعیین کامل و منحصر به فرد تابع نایل آمد. به صورت خلاصه، هنگامی که یک عملگر معلوم (فرض کنید  $\hat{A}$ ) واگن باشد آنگاه نمی‌توان تابع موج را به صورت یکتا تعیین کرد مگر آن که یک یا دو عملگر اضافی را برای تشکیل یک مجموعه‌ی جابه‌جاشونده‌ی کامل معرفی کنیم.

### ۴-۵-۳ اندازه‌گیری و رابطه‌های عدم قطعیت

در فصل ۲ دیدیم که شرط عدم قطعیت مربوط به اندازه‌گیری دو مشاهده‌پذیر  $A$  و  $B$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle| \quad (۵۱-۳)$$

که در آن  $\Delta A = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2}$  است.

بیابید این رابطه را در مورد اندازه‌گیری مشترک مشاهده‌پذیرهای مکان و تکانه به کار گیریم. چون این مشاهده‌پذیرها سازگار نیستند، اندازه‌گیری همزمان آنها با دقت نامتناهی ممکن نیست. به عبارتی چون  $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$  است، حالتی که ویژه‌حالت همزمان  $\hat{X}$  و  $\hat{P}$  باشد، وجود ندارد. در مورد عملگرهای مکان و تکانه باید گفت که رابطه‌ی (۵۱-۳) نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (۵۲-۳)$$

این شرط نشان می‌دهد که نمی‌توان مکان و تکانه‌ی یک سیستم میکروسکوپی را همزمان با دقت نامتناهی اندازه گرفت. اگر مکان با عدم قطعیت  $\Delta x$  اندازه‌گیری شود آنگاه عدم قطعیت وابسته به اندازه‌گیری تکانه‌ی

آن نمی‌تواند کوچک‌تر از  $\hbar/2\Delta x$  باشد. این امر به دلیل تداخل بین دو اندازه‌گیری است. اگر ابتدا مکان را اندازه‌گیری کنیم آنگاه سیستم را با تغییر حالت آن به یک ویژه‌حالت عملگر مکان مختل می‌کنیم، سپس اندازه‌گیری تکانه، سیستم را به یک ویژه‌حالت عملگر تکانه می‌برد.

کاربرد جالب دیگر رابطه‌ی عدم قطعیت (۵۱-۳) در تکانه‌ی زاویه‌ای مداری یک ذره است. چون مؤلفه‌های عملگر تکانه‌ی زاویه‌ای مداری در جابه‌جاگر  $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$  صدق می‌کنند بنابراین نامساوی زیر را به دست می‌آوریم:

$$\Delta L_x \Delta L_y \geq \frac{1}{2} \hbar |\langle \hat{L}_z \rangle| \quad (53-3)$$

می‌توانیم دو نامساوی دیگر را به وسیله‌ی جایگشت چرخه‌ای  $x, y$  و  $z$  به دست آوریم. اگر  $\langle \hat{L}_z \rangle = 0$  باشد آنگاه  $\hat{L}_x$  و  $\hat{L}_y$  به طور همزمان مقدارهای تیزی خواهند داشت. این حالت زمانی روی می‌دهد که ذره در حالت  $s$  باشد. در واقع، هنگامی که یک ذره در حالت  $s$  است، داریم:  $\langle \hat{L}_x \rangle = \langle \hat{L}_y \rangle = \langle \hat{L}_z \rangle = 0$ . و از این رو تمام مؤلفه‌های تکانه‌ی زاویه‌ای مداری به صورت همزمان مقدارهای تیزی دارند.

### ۶-۳ تحول زمانی حالت سیستم

#### ۱-۶-۳ عملگر تحول زمانی

در اینجا می‌خواهیم ببینیم که حالت‌های کوانتومی چگونه با گذشت زمان تحول می‌یابند. یعنی با معلوم بودن حالت اولیه‌ی  $|\psi(t_0)\rangle$  چگونه می‌توان حالت  $|\psi(t)\rangle$  در زمان بعدی  $t$  یافت؟ می‌توان این دو حالت را به وسیله‌ی عملگر خطی  $\hat{U}(t, t_0)$  به هم مربوط کرد به صورتی که

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \quad (t > t_0) \quad (54-3)$$

عملگر  $\hat{U}(t, t_0)$  به عنوان عملگر تحول زمانی یا انتشارگر شناخته می‌شود. از (۵۴-۳) نتیجه می‌گیریم که

$$\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{I} \quad (55-3)$$

که در آن  $\hat{I}$  عملگر یکه (همانی) است.

اکنون مسأله، یافتن  $\hat{U}(t, t_0)$  است. برای این کار به سادگی باید (۵۴-۳) را در معادله‌ی شرودینگر وابسته به زمان (۵-۳) جاگذاری کنیم:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left( \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \right) = \hat{H} \left( \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \right) \quad (56-3)$$

یا

$$\frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{U}(t, t_0) \quad (57-3)$$

انتگرال‌گیری این معادله‌ی دیفرانسیل به این که آیا هامیلتونی به زمان بستگی دارد یا خیر، بستگی دارد. اگر هامیلتونی به زمان بستگی نداشته باشد و با به حساب آوردن شرط اولیه‌ی (۵۵-۳) می‌توانیم به آسانی تحقیق کنیم که انتگرال (۵۷-۳) به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-i(t-t_0)\hat{H}/\hbar} \quad \text{و} \quad |\psi(t)\rangle = e^{-i(t-t_0)\hat{H}/\hbar} |\psi(t_0)\rangle \quad (58-3)$$

در بخش ۷-۳ نشان خواهیم داد که عملگر  $\hat{U}(t, t_0) = e^{-i(t-t_0)\hat{H}/\hbar}$  انتقال زمانی متناهی را نمایش می‌دهد.

از سوی دیگر، هرگاه  $\hat{H}$  به زمان بستگی داشته باشد آنگاه انتگرال (۵۷-۳) دشوارتر می‌شود. در فصل ۱۰ زمانی که پتانسیل‌های وابسته به زمان یا نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان را بررسی می‌کنیم، به این مسأله خواهیم پرداخت. در این فصل (و در تمام فصل‌های باقیمانده تا فصل ۱۰) تنها هامیلتونی‌هایی که به زمان بستگی ندارند را در نظر خواهیم گرفت.

توجه کنید که  $\hat{U}(t, t_0)$  یک عملگر یکانی است زیرا

$$\hat{U}(t, t_0)\hat{U}^\dagger(t, t_0) = \hat{U}(t, t_0)\hat{U}^{-1}(t, t_0) = e^{-i(t-t_0)\hat{H}/\hbar}e^{i(t-t_0)\hat{H}/\hbar} = \hat{I} \quad (59-3)$$

یا  $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$  است.

### ۶-۳-۲ حالت‌های مانا: پتانسیل‌های مستقل از زمان

در نمایش مکان می‌توان معادله‌ی شرودینگر وابسته به زمان (۵-۳) را برای ذره‌ای به جرم  $m$  که در پتانسیل وابسته به زمان  $\hat{V}(\mathbf{r}, t)$  حرکت می‌کند، به صورت زیر نوشت:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + \hat{V}(\mathbf{r}, t)\Psi(\mathbf{r}, t) \quad (60-3)$$

حال بیایید حالت خاص پتانسیل‌های مستقل از زمان را در نظر بگیریم:  $\hat{V}(\mathbf{r}, t) = \hat{V}(\mathbf{r})$ . در این حالت، عملگر هامیلتونی نیز مستقل از زمان خواهد بود و از این رو معادله‌ی شرودینگر جواب‌هایی خواهد داشت که قابل جداسازی‌اند یعنی جواب‌هایی که از ضرب دو تابع تشکیل شده‌اند که یکی از آنها تنها به  $\mathbf{r}$  و دیگری تنها به زمان بستگی دارد:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})f(t) \quad (61-3)$$

با جاگذاری (۶۱-۳) در (۶۰-۳) و تقسیم هر دو طرف بر  $\psi(\mathbf{r})f(t)$  رابطه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{df(t)}{dt} = \frac{1}{\psi(\mathbf{r})} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}) + \hat{V}(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \right] \quad (62-3)$$

چون طرف چپ تنها به زمان و طرف راست تنها به  $r$  بستگی دارد، هر دو طرف باید برابر با یک مقدار ثابت باشند. این ثابت (که آن را با  $E$  نمایش می‌دهیم) دارای بعد انرژی است. بنابراین می‌توانیم (۶۲-۳) را به دو معادله‌ی دیفرانسیل مجزا جدا کنیم که یکی از آنها تنها به زمان:

$$i\hbar \frac{df(t)}{dt} = Ef(t) \quad (۶۳-۳)$$

و دیگری به متغیر فضایی  $r$  بستگی داشته باشد:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V}(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (۶۴-۳)$$

این معادله به عنوان معادله‌ی شرودینگر مستقل از زمان برای ذره‌ای به جرم  $m$  که در پتانسیل مستقل از زمان  $\hat{V}(\mathbf{r})$  حرکت می‌کند، شناخته می‌شود.

می‌توان جواب‌های (۶۳-۳) را به صورت  $f(t) = e^{-iEt/\hbar}$  نوشت از این رو حالت (۶۱-۳) به صورت زیر در می‌آید:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar} \quad (۶۵-۳)$$

این جواب خاص معادله‌ی شرودینگر (۶۰-۳) برای یک پتانسیل مستقل از زمان، یک حالت مانا نامیده می‌شود. ممکن است این پرسش مطرح شود که چرا این حالت مانا نامیده می‌شود؟ پاسخ روشن است: چگالی احتمال مانا است یعنی به زمان بستگی ندارد:

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |\psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar}|^2 = |\psi(\mathbf{r})|^2 \quad (۶۶-۳)$$

توجه کنید که چنین حالتی مقدار دقیقی برای انرژی دارد ( $E = \hbar\omega$ ).

به صورت خلاصه، حالت‌های مانا (که از جواب‌های (۶۴-۳) به دست می‌آیند) تنها برای پتانسیل‌های مستقل از زمان وجود دارند. مجموعه‌ی ترازهای انرژی که جواب‌های این معادله‌اند، طیف انرژی سیستم نامیده می‌شوند. حالت‌های متناظر با طیف‌های گسسته و پیوسته به ترتیب حالت‌های مقید و نامقید نامیده می‌شوند. این مسأله‌ها را با جزئیات بیشتر در فصل ۴ بررسی خواهیم کرد.

می‌توان عمومی‌ترین جواب برای معادله‌ی شرودینگر وابسته به زمان (۶۰-۳) را به صورت یک بسط برحسب حالت‌های مانای  $\psi_n(\mathbf{r}) \exp(-iE_n t/\hbar)$  نوشت:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n \psi_n(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) \quad (۶۷-۳)$$

که در آن  $c_n = \langle \psi_n | \Psi(t=0) \rangle = \int \psi_n^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d^3r$  جواب عمومی (۶۷-۳) یک حالت مانا نیست زیرا برهمنهی خطی حالت‌های مانا الزاماً یک حالت مانا نیست.

## ملاحظات

معادله‌های شرودینگر وابسته به زمان و مستقل از زمان در یک بعد از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند (۶۰-۳) و (۶۴-۳) را ببینید:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + \hat{V}(x, t) \Psi(x, t) \quad (۶۸-۳)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \hat{V}(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad (۶۹-۳)$$

## ۳-۶-۳ معادله‌ی شرودینگر و بسته‌های موج

آیا می‌توانیم معادله‌ی شرودینگر (۵-۳) را به‌طور رسمی از اصول اولیه به دست آوریم؟ در پاسخ باید گفت که خیر، نمی‌توانیم. تنها می‌توانیم آن را به صورت اصل موضوعه در نظر بگیریم. آنچه که می‌توانیم انجام دهیم این است که یک حدس آگاهانه در مورد مراحل رسمی‌ای که به این معادله می‌انجامد، بزنیم. بسته‌های موج ابزاری رسمی برای رسیدن به این هدف را فراهم می‌کنند. قصد داریم نشان دهیم که چگونه از یک بسته‌ی موج شروع کنیم و به معادله‌ی شرودینگر برسیم.

همانطور که در فصل ۱ دیدیم، بسته‌ی موج نمایش‌دهنده‌ی یک ذره با انرژی  $E$  و تکانه‌ی  $p$  که در پتانسیل  $V$  حرکت می‌کند، از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\phi}(p) \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (px - Et) \right] dp \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\phi}(p) \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \left( px - \left( \frac{p^2}{2m} + V \right) t \right) \right] dp \end{aligned} \quad (۷۰-۳)$$

به یاد بیاورید که بسته‌های موج مشخصه‌های ذره‌ای ( $E$  و  $p$ ) و موجی ( $k$  و  $\omega$ ) ذره‌ها را یکجا جمع می‌کنند:  $k = p/\hbar$  و  $\hbar\omega = E = p^2/(2m) + V$ . مشتق زمانی جزئی (۷۰-۳) نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\phi}(p) \left( \frac{p^2}{2m} + V \right) \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \left( px - \left( \frac{p^2}{2m} + V \right) t \right) \right] dp \quad (۷۱-۳)$$

چون  $p^2/(2m) = -(\hbar^2/2m)\partial^2/\partial x^2$  است و با فرض آن که  $V$  ثابت است، می‌توانیم جمله‌ی  $+(\hbar^2/2m)\partial^2/\partial x^2 + V$  را از علامت انتگرال خارج کنیم زیرا این جمله به  $p$  بستگی ندارد:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\phi}(p) \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \left( px - \left( \frac{p^2}{2m} + V \right) t \right) \right] dp \quad (۷۲-۳)$$

که می‌توان آن را به صورت زیر نوشت:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right] \Psi(x, t) \quad (۷۳-۳)$$

حال چون این معادله برای پتانسیل‌هایی که در فضا تغییر می‌کنند ( $V = V(x)$ ) نیز معتبر است، می‌بینیم که به معادله‌ی شرودینگر ( $۶۸-۳$ ) رسیده‌ایم.

### ۴-۶-۳ پایستگی احتمال

چون عملگر هامیلتونی هرمیتی است، می‌توانیم نشان دهیم که هنجار  $\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle$  که از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = \int |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r \quad (۷۴-۳)$$

مستقل از زمان است. یعنی اگر  $|\Psi(t)\rangle$  بهنجار باشد آنگاه در تمام لحظه‌های بعدی بهنجار باقی می‌ماند که نتیجه‌ی مستقیمی از هرمیتی بودن  $\hat{H}$  است.

برای اثبات این که  $\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle$  ثابت است، تنها باید نشان دهیم که مشتق زمانی آن صفر است. ابتدا مشتق زمانی  $\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle$  برابر است با

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = \left( \frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \right) |\Psi(t)\rangle + \langle \Psi(t) | \left( \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} \right) \quad (۷۵-۳)$$

که در آن می‌توان  $d|\Psi(t)\rangle/dt$  و  $d\langle \Psi(t) | / dt$  را از ( $۵-۳$ ) به دست آورد:

$$\frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} |\Psi(t)\rangle \quad (۷۶-۳)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | = \frac{i}{\hbar} \langle \Psi(t) | \hat{H}^\dagger = \frac{i}{\hbar} \langle \Psi(t) | \hat{H} \quad (۷۷-۳)$$

با وارد کردن این دو معادله در ( $۷۵-۳$ ) به نتیجه‌ی زیر می‌رسیم:

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = \left( \frac{i}{\hbar} - \frac{i}{\hbar} \right) \langle \Psi(t) | \hat{H} | \Psi(t) \rangle = 0 \quad (۷۸-۳)$$

بنابراین چگالی احتمال  $\langle \Psi | \Psi \rangle$  با گذشت زمان تحول نمی‌یابد.



در ادامه، قصد داریم تا چگالی احتمال در نمایش مکان را محاسبه کنیم. برای این کار باید از معادله‌ی شرودینگر وابسته به زمان

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + \hat{V}(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (۷۹-۳)$$

و مزدوج مختلط آن

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi^*(\mathbf{r}, t) + \hat{V}(\mathbf{r}, t) \Psi^*(\mathbf{r}, t) \quad (۸۰-۳)$$

استفاده کنیم. با ضرب هر دو طرف (۷۹-۳) در  $\Psi^*(\mathbf{r}, t)$  و هر دو طرف (۸۰-۳) در  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  و کم کردن دو معادله‌ی حاصل، به دست می‌آوریم:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [\Psi^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t)] = -\frac{\hbar^2}{2m} [\Psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi \nabla^2 \Psi^*] \quad (۸۱-۳)$$

می‌توانیم این معادله را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (۸۲-۳)$$

که در آن  $\rho(\mathbf{r}, t)$  و  $\mathbf{J}$  از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \Psi^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \quad (۸۳-۳)$$

کمیت  $\rho(\mathbf{r}, t)$  چگالی احتمال نامیده می‌شود و  $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$  چگالی جریان احتمال (یا به صورت ساده‌تر، چگالی جریان یا شار چگالی ذره) است. در تشابه با پایستگی بار در الکتروپنایمیک، معادله‌ی (۸۲-۳) به صورت پایستگی احتمال تفسیر می‌شود.

در اینجا رابطه‌ی بین عملگرهای  $\hat{\rho}(t)$  و  $\hat{\rho}(t_0)$  را پیدا می‌کنیم. چون  $|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle$  و  $\langle \Psi(t) | = \langle \Psi(t_0) | \hat{U}^\dagger(t, t_0)$  است، داریم:

$$\hat{\rho}(t) = |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)| = \hat{U}(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle \langle \Psi(t_0)| \hat{U}^\dagger(t, t_0) \quad (۸۴-۳)$$

که به عنوان عملگر چگالی برای حالت  $|\Psi(t)\rangle$  شناخته می‌شود. از این رو با دانستن  $\hat{\rho}(t_0)$  می‌توانیم  $\hat{\rho}(t)$  را به صورت زیر محاسبه کنیم:

$$\hat{\rho}(t) = \hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \hat{U}^\dagger(t, t_0) \quad (۸۵-۳)$$

## ۵-۶-۳ تحول زمانی مقدارهای چشمداشتی

در اینجا می‌خواهیم وابستگی زمانی مقدار چشمداشتی یک عملگر خطی را بررسی کنیم. هرگاه حالت  $|\Psi(t)\rangle$  بهنجار باشد آنگاه مقدار چشمداشتی از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi(t) \rangle \quad (۸۶-۳)$$

با استفاده از (۷۶-۳) و (۷۷-۳) می‌توانیم  $d\langle \hat{A} \rangle / dt$  را به صورت زیر بنویسیم:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi(t) | \hat{A} \hat{H} - \hat{H} \hat{A} | \Psi(t) \rangle + \langle \Psi(t) | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \Psi(t) \rangle \quad (۸۷-۳)$$

یا

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle \quad (۸۸-۳)$$

دو نتیجه‌ی مهم از این رابطه به دست می‌آید. ابتدا این که هرگاه مشاهده‌پذیر  $A$  وابستگی صریح زمانی نداشته باشد آنگاه جمله‌ی  $\partial \hat{A} / \partial t$  صفر می‌شود. بنابراین آهنگ تغییر مقدار چشمداشتی  $\hat{A}$  از رابطه‌ی  $\langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle / i\hbar$  به دست می‌آید. دوم این که هرگاه مشاهده‌پذیر  $A$  علاوه بر این که وابستگی صریح زمانی ندارد، با هامیلتونی نیز جابه‌جا شود آنگاه کمیت  $d\langle \hat{A} \rangle / dt$  صفر خواهد بود. از این رو مقدار چشمداشتی  $\langle \hat{A} \rangle$  با گذشت زمان ثابت خواهد بود. بنابراین هرگاه  $\hat{A}$  با هامیلتونی جابه‌جا شود و مستقل از زمان باشد آنگاه به مشاهده‌پذیر  $A$  ثابت حرکت گفته می‌شود. یعنی مقدار چشمداشتی یک عملگر که به زمان بستگی ندارد و با هامیلتونی جابه‌جا می‌شود، با گذشت زمان ثابت است:

$$\text{مقدار ثابت } \langle \hat{A} \rangle = \circ \implies \frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} = \circ \implies \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = \circ \text{ و } [\hat{H}, \hat{A}] = \circ \text{ اگر} \quad (۸۹-۳)$$

به عنوان مثال، می‌توانیم ثابت کنیم که انرژی، تکانه‌ی خطی و تکانه‌ی زاویه‌ای یک سیستم منزوی پایسته‌اند:  $d\langle \hat{H} \rangle / dt = \circ$ ،  $d\langle \hat{\mathbf{P}} \rangle / dt = \circ$  و  $d\langle \hat{\mathbf{L}} \rangle / dt = \circ$  است. این بیان می‌کند که مقدارهای چشمداشتی  $\hat{H}$ ،  $\hat{\mathbf{P}}$  و  $\hat{\mathbf{L}}$  ثابت‌اند. از فیزیک کلاسیک به یاد بیاورید که پایستگی انرژی، تکانه‌ی خطی و تکانه‌ی زاویه‌ای به ترتیب نتیجه‌ی تقارن‌های: همگنی زمان، همگنی فضا و همسانگردی فضا هستند. در بخش بعد نشان خواهیم داد که این تقارن‌ها به ترتیب به ناوردایی در انتقال زمان، انتقال فضا و چرخش فضا وابسته‌اند.

به عنوان مثال، بیایید تحول زمانی مقدار چشمداشتی عملگر چگالی  $\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|$  (۸۴-۳) را ببینید) را بررسی کنیم. از (۵-۳) که به  $\partial \langle \Psi(t) | / \partial t = \langle \Psi(t) | \hat{H} / i\hbar$  و  $\partial | \Psi(t) \rangle / \partial t = -i\hbar \langle \Psi(t) | \hat{H}$  می‌انجامد، داریم:

$$\frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} | \Psi(t) \rangle \langle \Psi(t) | - \frac{1}{i\hbar} | \Psi(t) \rangle \langle \Psi(t) | \hat{H} = -\frac{1}{i\hbar} [\hat{\rho}(t), \hat{H}] \quad (۹۰-۳)$$

جاگذاری این رابطه در (۳-۸۸) به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{\rho}(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{\rho}(t), \hat{H}]\rangle + \langle\frac{\partial\hat{\rho}(t)}{\partial t}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{\rho}(t), \hat{H}]\rangle - \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{\rho}(t), \hat{H}]\rangle = 0 \quad (۳-۹۱)$$

بنابراین عملگر چگالی یک ثابت حرکت است. در واقع، به سادگی می‌توانیم نشان دهیم که

$$\begin{aligned} \langle[\hat{\rho}(t), \hat{H}]\rangle &= \langle\Psi(t)|[\Psi(t)\langle\Psi(t)|, \hat{H}]\Psi(t)\rangle \\ &= \langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|\hat{H}|\Psi(t)\rangle - \langle\Psi(t)|\hat{H}|\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle \quad (۳-۹۲) \\ &= 0 \end{aligned}$$

که زمانی که با (۳-۹۰) ترکیب شود،  $\langle\partial\hat{\rho}(t)/\partial t\rangle = 0$  را نتیجه می‌دهد.

سرانجام باید این نکته را یادآوری کنیم که ثابت‌های حرکت چیزی به جز مشاهده‌پذیرهایی که می‌توان با دقت دلخواه آنها را (به صورت همزمان با انرژی) اندازه‌گیری کرد، نیستند. اگر یک سیستم مجموعه‌ی کاملی از عملگرهای جابه‌جاشونده (CSCO) داشته باشد آنگاه تعداد این عملگرها از تعداد کل ثابت‌های حرکت به دست می‌آید.

## ۷-۳ تقارن‌ها و قانون‌های پایستگی

در اینجا به تقارن‌هایی علاقمندیم که هامیلتونی یک سیستم منزوی را ناوردا باقی می‌گذارند. نشان خواهیم داد که به ازای هر یک از چنین تقارن‌هایی یک مشاهده‌پذیر متناظر که ثابت حرکت است، وجود دارد. اصول نوردایی مرتبط با بررسی ما عبارتند از نوردایی انتقال زمانی و نوردایی انتقال فضایی. می‌توانیم از مکانیک کلاسیک به یاد بیاوریم که هرگاه یک سیستم تحت انتقال‌های فضا ناوردا باشد آنگاه تکانه‌ی کل آن پایسته است و هرگاه سیستم تحت چرخش ناوردا باشد آنگاه تکانه‌ی زاویه‌ای کل آن نیز پایسته است. برای این که آماده شویم تا تقارن‌ها و قانون‌های پایستگی در مکانیک کوانتومی را بررسی کنیم، قصد داریم به بررسی ویژگی تبدیل‌های یکانی بی‌نهایت کوچک و متناهی بپردازیم، که در این اصول نوردایی اهمیت زیادی دارند.

### ۱-۷-۳ تبدیل‌های یکانی بی‌نهایت کوچک

در فصل ۲ دیدیم که تبدیل بردار حالت  $|\psi\rangle$  و عملگر  $\hat{A}$  تحت یک تبدیل یکانی بی‌نهایت کوچک  $U_\varepsilon(\hat{G}) = \hat{I} + i\varepsilon\hat{G}$  از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$|\psi'\rangle = (\hat{I} + i\varepsilon\hat{G})|\psi\rangle = |\psi\rangle + \delta|\psi\rangle \quad (۳-۹۳)$$

$$\hat{A}' = (\hat{I} + i\varepsilon\hat{G})\hat{A}(\hat{I} - i\varepsilon\hat{G}) \simeq \hat{A} + i\varepsilon[\hat{G}, \hat{A}] \quad (۳-۹۴)$$

که در آن  $\varepsilon$  و  $\hat{G}$  به ترتیب پارامتر و مولد تبدیل نامیده می‌شوند.

بیانید دو کاربرد مهم تبدیلات یکانی بی‌نهایت کوچک را در نظر بگیرید: انتقال‌های فضایی و زمانی.

### ۱-۱-۷-۳ انتقال زمانی: $\hat{G} = \hat{H}/\hbar$

اعمال  $\hat{U}_{\delta t}(\hat{H}) = \hat{I} + (i/\hbar)\delta t\hat{H}$  بر حالت  $|\psi(t)\rangle$  می‌دهد:

$$\left(\hat{I} + \frac{i}{\hbar}\delta t\hat{H}\right)|\psi(t)\rangle = |\psi(t)\rangle + \left(\frac{i}{\hbar}\delta t\right)\hat{H}|\psi(t)\rangle \quad (۹۵-۳)$$

چون  $\hat{H}|\psi(t)\rangle = i\hbar\partial|\psi(t)\rangle/\partial t$  است، داریم:

$$\left(\hat{I} + \frac{i}{\hbar}\delta t\hat{H}\right)|\psi(t)\rangle = |\psi(t)\rangle - \delta t\frac{\partial|\psi(t)\rangle}{\partial t} \simeq |\psi(t - \delta t)\rangle \quad (۹۶-۳)$$

زیرا  $|\psi(t)\rangle - \delta t\partial|\psi(t)\rangle/\partial t$  چیزی به جز بسط تیلور مرتبه‌ی اول  $|\psi(t - \delta t)\rangle$  نیست. از (۹۶-۳) نتیجه می‌گیریم که اعمال  $\hat{U}_{\delta t}(\hat{H})$  بر  $|\psi(t)\rangle$  حالت  $|\psi(t - \delta t)\rangle$  را تولید می‌کند که تنها از انتقال زمانی  $|\psi(t)\rangle$  به اندازه‌ی  $\delta t$  تشکیل شده است. بنابراین هامیلتونی در  $(\hat{I} + (i/\hbar)\delta t\hat{H})$  مولد انتقال‌های زمانی بی‌نهایت کوچک است. توجه کنید که این انتقال شکل حالت  $|\psi(t)\rangle$  را حفظ می‌کند زیرا شکل کلی آن با گذشت زمان صرفاً به اندازه‌ی  $\delta t$  منتقل می‌شود.

### ۲-۱-۷-۳ انتقال فضایی: $\hat{G} = \hat{P}_x/\hbar$

اعمال  $\hat{U}_{\varepsilon}(\hat{P}_x) = \hat{I} + (i/\hbar)\varepsilon\hat{P}_x$  بر  $\psi(x)$  می‌دهد:

$$\left(\hat{I} + \frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{P}_x\right)\psi(x) = \psi(x) + \left(\frac{i}{\hbar}\varepsilon\right)\hat{P}_x\psi(x) \quad (۹۷-۳)$$

چون  $\hat{P}_x = -i\hbar\partial/\partial x$  است و بسط تیلور مرتبه‌ی اول  $\psi(x + \varepsilon)$  از رابطه‌ی  $\psi(x + \varepsilon) = \psi(x) + \varepsilon\partial\psi(x)/\partial x$  به دست می‌آید، رابطه‌ی زیر را داریم:

$$\left(\hat{I} + \frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{P}_x\right)\psi(x) = \psi(x) + \varepsilon\frac{\partial\psi(x)}{\partial x} \simeq \psi(x + \varepsilon) \quad (۹۸-۳)$$

بنابراین هنگامی که  $\hat{U}_{\varepsilon}(\hat{P}_x)$  روی یک تابع موج اثر می‌کند، آن را از نظر فضایی به اندازه‌ی  $\varepsilon$  منتقل می‌کند. با استفاده از  $[\hat{X}, \hat{P}_x] = i\hbar$ ، از (۹۴-۳) نتیجه می‌گیریم که عملگر مکان  $\hat{X}$  به صورت زیر تبدیل می‌شود:

$$\hat{X}' = \left(\hat{I} + \frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{P}_x\right)\hat{X}\left(\hat{I} - \frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{P}_x\right) \simeq \hat{X} + \frac{i}{\hbar}\varepsilon[\hat{P}_x, \hat{X}] = \hat{X} + \varepsilon \quad (۹۹-۳)$$

رابطه‌های (۹۸-۳) و (۹۹-۳) نشان می‌دهند که عملگر تکانه‌ی خطی در  $(\hat{I} + (i/\hbar)\varepsilon\hat{P}_x)$  مولد انتقال‌های فضایی بی‌نهایت کوچک است.

### ۲-۷-۳ تبدیل‌های یکانی متناهی

در فصل ۲ دیدیم که می‌توانیم یک تبدیل یکانی متناهی را با انجام تبدیل‌های بی‌نهایت کوچک متوالی بسازیم. به عنوان مثال، با  $N$  بار اعمال انتقال زمانی بی‌نهایت کوچک، هر بار با اندازه‌ی  $\tau/N$  می‌توانیم یک انتقال زمانی متناهی را تولید کنیم:

$$\hat{U}_\tau(\hat{H}) = \lim_{N \rightarrow +\infty} \prod_{k=1}^N \left( \hat{I} + \frac{i}{\hbar} \frac{\tau}{N} \hat{H} \right) = \lim_{N \rightarrow +\infty} \left( \hat{I} + \frac{i}{\hbar} \tau \hat{H} \right)^N = \exp \left( \frac{i}{\hbar} \tau \hat{H} \right) \quad (۱۰۰-۳)$$

که در آن هامیلتونی مولد انتقال‌های زمانی متناهی است. باید یادآوری کنیم که عملگر تحول زمانی  $\hat{U}(t, t_0) = e^{-i(t-t_0)\hat{H}/\hbar}$  (که در (۵۸-۳) نشان داده شد) یک تبدیل یکانی متناهی را نشان می‌دهد که در آن مولد انتقال زمانی است.

در تشابه با (۹۶-۳) می‌توانیم نشان دهیم که اعمال  $\hat{U}_\tau(\hat{H})$  بر  $|\psi(t)\rangle$  نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\hat{U}_\tau(\hat{H})|\psi(t)\rangle = \exp \left( \frac{i}{\hbar} \tau \hat{H} \right) |\psi(t)\rangle = |\psi(t-\tau)\rangle \quad (۱۰۱-۳)$$

که در آن  $|\psi(t-\tau)\rangle$  صرفاً انتقال زمانی  $|\psi(t)\rangle$  است.

به صورت مشابه، می‌توانیم از (۹۸-۳) نتیجه بگیریم که اعمال  $\hat{U}_a(\hat{P}) = \exp(i\mathbf{a}\cdot\hat{P}/\hbar)$  بر یک تابع موج موجب می‌شود آن تابع موج به اندازه‌ی بردار  $\mathbf{a}$  در فضا منتقل شود:

$$\hat{U}_a(\hat{P})\psi(\mathbf{r}) = \exp \left( \frac{i}{\hbar} \mathbf{a}\cdot\hat{P} \right) \psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) \quad (۱۰۲-۳)$$

برای محاسبه‌ی عملگر بردار مکان تبدیل یافته‌ی  $\hat{\mathbf{R}}'$  از رابطه‌ای که در فصل ۲ به دست آوردیم، استفاده کنیم:

$$\hat{A}' = e^{i\alpha\hat{G}} \hat{A} e^{-i\alpha\hat{G}} = \hat{A} + i\alpha[\hat{G}, \hat{A}] + \frac{(i\alpha)^2}{2!} [\hat{G}, [\hat{G}, \hat{A}]] + \frac{(i\alpha)^3}{3!} [\hat{G}, [\hat{G}, [\hat{G}, \hat{A}]]] + \dots \quad (۱۰۳-۳)$$

اعمال این رابطه بر عملگر انتقال فضایی  $\hat{U}_a(\hat{P})$  نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\hat{\mathbf{R}}' = \exp \left( \frac{i}{\hbar} \mathbf{a}\cdot\hat{P} \right) \hat{\mathbf{R}} \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \mathbf{a}\cdot\hat{P} \right) = \hat{\mathbf{R}} + \frac{i}{\hbar} [\mathbf{a}\cdot\hat{P}, \hat{\mathbf{R}}] = \hat{\mathbf{R}} + \mathbf{a} \quad (۱۰۴-۳)$$

در به دست آوردن این رابطه از این واقعیت که  $[\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{R}}] = -i\hbar \mathbf{a}$  است استفاده کرده‌ایم و نیز از اینکه جابه‌جاگرهای دیگر صفر هستند (به خصوص  $[[\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{P}}, [\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{R}}]] = 0$ ). از (۳-۱۰۲) و (۳-۱۰۴) می‌بینیم که تکانه‌ی خطی در  $\exp(i\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{P}}/\hbar)$  مولد انتقال‌های فضایی متناهی است.

### ۳-۷-۳ تقارن‌ها و قانون‌های پایستگی

در اینجا می‌خواهیم نشان دهیم که هر اصل نوردایی  $\hat{H}$  به یک قانون پایستگی مربوط است. هامیلتونی یک سیستم تحت تبدیل یکانی  $e^{i\alpha\hat{G}}$  به صورت زیر تبدیل می‌شود ((۳-۱۰۳) را ببینید):

$$\hat{H}' = e^{i\alpha\hat{G}} \hat{H} e^{-i\alpha\hat{G}} = \hat{H} + i\alpha[\hat{G}, \hat{H}] + \frac{(i\alpha)^2}{2!} [\hat{G}, [\hat{G}, \hat{H}]] + \frac{(i\alpha)^3}{3!} [\hat{G}, [\hat{G}, [\hat{G}, \hat{H}]]] + \dots \quad (3-105)$$

هرگاه  $\hat{H}$  با  $\hat{G}$  جابه‌جا شود آنگاه با تبدیل یکانی  $\hat{U}_\alpha(\hat{G}) = e^{i\alpha\hat{G}}$  نیز جابه‌جا می‌شود. در این صورت می‌توانیم دو نتیجه‌ی مهم بگیریم. از یک سو، یک اصل نوردایی وجود دارد: هامیلتونی تحت تبدیل  $\hat{U}_\alpha(\hat{G})$  ناوردا است زیرا

$$\hat{H}' = e^{i\alpha\hat{G}} \hat{H} e^{-i\alpha\hat{G}} = e^{i\alpha\hat{G}} e^{-i\alpha\hat{G}} \hat{H} = \hat{H} \quad (3-106)$$

از سوی دیگر، هرگاه علاوه بر  $[\hat{G}, \hat{H}] = 0$ ، عملگر  $\hat{G}$  به صورت صریح به زمان بستگی نداشته باشد آنگاه یک قانون پایستگی وجود دارد: معادله‌ی (۳-۱۱۸) نشان می‌دهد که  $\hat{G}$  ثابت حرکت است زیرا

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{G} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{G}, \hat{H}] \rangle + \langle \frac{\partial \hat{G}}{\partial t} \rangle = 0 \quad (3-107)$$

و می‌گوییم  $\hat{G}$  پایسته است.

بنابراین هرگاه هامیلتونی تحت یک تبدیل یکانی ناوردا باشد آنگاه مولد تبدیل پایسته است. به صورت کلی می‌توانیم بگوییم که به‌ازای هر تقارن نوردایی هامیلتونی، یک قانون پایستگی متناظر وجود دارد.

### ۳-۷-۳-۱ پایستگی انرژی و تکانه‌ی خطی

بیانید دو کاربرد جالب مربوط به نوردایی هامیلتونی یک سیستم منزوی نسبت به انتقال‌های زمانی و فضایی را بررسی کنیم. ابتدا انتقال‌های زمانی را در نظر می‌گیریم. همانطور که در (۳-۵۸) نشان داده شد، انتقال‌های زمانی در مورد هامیلتونی‌های مستقل از زمان با عملگر تحول  $\hat{U}(t, t_0) = e^{-i(t-t_0)\hat{H}/\hbar}$  تولید می‌شوند. چون  $\hat{H}$  با مولد انتقال زمانی (که با خود  $\hat{H}$  داده می‌شود) جابه‌جا می‌شود، تحت انتقال‌های زمانی ناوردا است. چون  $\hat{H}$  تحت انتقال‌های زمانی ناوردا است، انرژی یک سیستم منزوی پایسته است. باید یادآوری کنیم که اگر سیستم تحت انتقال‌های زمانی ناوردا باشد آنگاه این بدان معنی است که تقارن

همگنی زمان وجود دارد. همگنی زمان بیان می‌کند که حالت جابه‌جا شده با گذشت زمان  $\psi(t - \tau)$  (مانند  $\psi(t)$ ) در معادله‌ی شرودینگر صدق می‌کند.

کاربرد دوم به انتقال‌های فضایی، یا به تبدیل‌های تحت  $\hat{U}_a(\hat{\mathbf{P}}) = \exp(i\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{P}}/\hbar)$  یک سیستم منزوی مربوط است. تکانه‌ی خطی تحت  $\hat{U}_a(\hat{\mathbf{P}})$  ناوردا است و عملگر مکان مطابق با (۱۰۴-۳) تبدیل می‌شود:

$$\hat{\mathbf{P}}' = \hat{\mathbf{P}}, \quad \hat{\mathbf{R}}' = \hat{\mathbf{R}} + \mathbf{a} \quad (108-3)$$

به عنوان مثال، چون هامیلتونی یک ذره‌ی آزاد به مختصات بستگی ندارد بنابراین با تکانه‌ی خطی جابه‌جا می‌شود:  $[\hat{H}, \hat{\mathbf{P}}] = 0$ . در این صورت هامیلتونی تحت انتقال‌های فضایی ناوردا است زیرا

$$\hat{H}' = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{P}}\right)\hat{H}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{P}}\right) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{P}}\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{P}}\right)\hat{H} = \hat{H} \quad (109-3)$$

با توجه به این که  $[\hat{H}, \hat{\mathbf{P}}] = 0$  است و عملگر تکانه‌ی خطی به صورت صریح به زمان بستگی ندارد، از (۸۸-۳) نتیجه می‌گیریم که  $\hat{\mathbf{P}}$  ثابت حرکت است زیرا

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{\mathbf{P}}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{\mathbf{P}}, \hat{H}]\rangle + \left\langle\frac{\partial\hat{\mathbf{P}}}{\partial t}\right\rangle = 0 \quad (110-3)$$

بنابراین هرگاه  $[\hat{H}, \hat{\mathbf{P}}] = 0$  باشد آنگاه هامیلتونی تحت انتقال‌های فضایی ناوردا و تکانه‌ی خطی پایسته خواهد بود. حالت کلی‌تری که در آن تکانه‌ی خطی ثابت حرکت است توسط یک سیستم منزوی فراهم می‌شود زیرا تکانه‌ی خطی کل آن پایسته است. توجه کنید که ناوردایی سیستم تحت انتقال‌های فضایی به این معنی است که تقارن همگنی فضایی وجود دارد. لازمه‌ی همگن بودن فضا ایجاب می‌کند که تابع موج جابه‌جا در فضای  $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a})$  (بسیار شبیه به  $\psi(\mathbf{r})$ ) در معادله‌ی شرودینگر صدق کند. به صورت خلاصه، تقارن همگنی زمان موجب پایستگی انرژی است در حالی که تقارن همگنی فضا موجب پایستگی تکانه‌ی خطی است.

در فصل ۷ خواهیم دید که تقارن همسانگردی فضا (یا ناوردایی هامیلتونی نسبت به چرخش‌های فضایی) به پایستگی تکانه‌ی زاویه‌ای می‌انجامد.

### عملگر پارایته

تبدیل‌های یکانی که تا اینجا بررسی کردیم (انتقال‌های فضایی و انتقال‌های زمانی) پیوسته‌اند. اکنون می‌توانیم یک تبدیل یکانی گسسته (پارایته) را بررسی کنیم. همانطور که در فصل ۲ دیدیم، تبدیل پارایته تبدیلی است که از یک وارونی یا بازتاب از مبدأ دستگاه مختصات تشکیل شده است:

$$\hat{P}\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}) \quad (111-3)$$

اگر عملگر پاریته با هامیلتونی سیستم جابه‌جا شود:

$$[\hat{H}, \hat{P}] = 0 \quad (۱۱۲-۳)$$

آنگاه پاریته پایسته و ازین رو یک ثابت حرکت خواهد بود. در این حالت، هامیلتونی و عملگر پاریته ویژه‌حالت‌های همزمان دارند. به عنوان مثال، در فصل ۴ خواهیم دید که تابع‌های موج ذره‌ای که در یک پتانسیل متقارن حرکت می‌کند ( $\hat{V}(\mathbf{r}) = \hat{V}(-\mathbf{r})$ ) پاریته‌های مشخصی دارند: تنها می‌توانند زوج یا فرد باشند. به صورت مشابه، می‌توانیم تحقیق کنیم که پاریته‌ی یک سیستم منزوی یک ثابت حرکت است.

### ۸-۳ ارتباط بین مکانیک کوانتومی و مکانیک کلاسیک

#### ۱-۸-۳ براکت‌های پواسون و جابه‌جاگرها

برای برقراری ارتباط بین مکانیک کوانتومی و مکانیک کلاسیک نگاهی به تحول زمانی مشاهده‌پذیرها می‌اندازیم.

قبل از توصیف تحول زمانی یک متغیر دینامیکی در چارچوب مکانیک کوانتومی، بیایید تا ایده‌های اساسی ریاضی مربوط به این توصیف (براکت پواسون) را مرور کنیم. براکت پواسون بین دو مشاهده‌پذیر دینامیکی  $A$  و  $B$  برحسب مختصات تعمیم یافته‌ی  $q_i$  و تکانه‌های تعمیم یافته‌ی  $p_i$  سیستم تعریف می‌شود:

$$\{A, B\} = \sum_j \left( \frac{\partial A}{\partial q_j} \frac{\partial B}{\partial p_j} - \frac{\partial A}{\partial p_j} \frac{\partial B}{\partial q_j} \right) \quad (۱۱۳-۳)$$

چون متغیرهای  $q_i$  مستقل از  $p_i$  هستند، داریم:  $\partial q_j / \partial p_k = 0$  و  $\partial p_j / \partial q_k = 0$ . بنابراین می‌توانیم نشان دهیم که

$$\{q_j, q_k\} = \{p_j, p_k\} = 0, \quad \{q_j, p_k\} = \delta_{jk} \quad (۱۱۴-۳)$$

با استفاده از (۱۱۳-۳) به آسانی می‌توانیم ویژگی‌های براکت‌های پواسون را نتیجه بگیریم:

• پادتقارن

$$\{A, B\} = -\{B, A\} \quad (۱۱۵-۳)$$

• خطی بودن

$$\{A, \alpha B + \beta C + \gamma D + \dots\} = \alpha \{A, B\} + \beta \{A, C\} + \gamma \{A, D\} + \dots \quad (۱۱۶-۳)$$

• مزدوج مختلط

$$\{A, B\}^* = \{A^*, B^*\} \quad (۱۱۷-۳)$$



• توزیع پذیری

$$\{A, BC\} = \{A, B\}C + B\{A, C\}, \quad \{AB, C\} = A\{B, C\} + \{A, C\}B \quad (۱۱۸-۳)$$

• اتحاد ژاکوبی

$$\{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} = 0 \quad (۱۱۹-۳)$$

• با استفاده از رابطه‌ی  $df^n(x)/dx = n f^{n-1}(x) df(x)/dx$  می‌توانیم نشان دهیم که

$$\{A, B^n\} = n B^{n-1} \{A, B\}, \quad \{A^n, B\} = n A^{n-1} \{A, B\} \quad (۱۲۰-۳)$$

این ویژگی‌ها مشابه با ویژگی‌های جابه‌جاگرهای مکانیک کوانتومی مشاهده شده در فصل ۲ هستند. مشتق زمانی کل متغیر دینامیکی  $A$  از رابطه‌ی

$$\frac{dA}{dt} = \sum_j \left( \frac{\partial A}{\partial q_j} \frac{\partial q_j}{\partial t} + \frac{\partial A}{\partial p_j} \frac{\partial p_j}{\partial t} \right) + \frac{\partial A}{\partial t} = \sum_j \left( \frac{\partial A}{\partial q_j} \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial A}{\partial p_j} \frac{\partial H}{\partial q_j} \right) + \frac{\partial A}{\partial t} \quad (۱۲۱-۳)$$

به دست می‌آید. در به دست آوردن این رابطه از معادله‌های هامیلتونی مکانیک کلاسیک استفاده کرده‌ایم:

$$\frac{dq_j}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_j}, \quad \frac{dp_j}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_j} \quad (۱۲۲-۳)$$

که در آن  $H$  هامیلتونی سیستم است. بنابراین تحول زمانی کل متغیر دینامیکی  $A$  از معادله‌ی حرکت زیر به دست می‌آید:

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\} + \frac{\partial A}{\partial t} \quad (۱۲۳-۳)$$

توجه کنید که هرگاه  $A$  به صورت صریح به زمان بستگی نداشته باشد آنگاه تحول زمانی آن به سادگی از رابطه‌ی  $dA/dt = \{A, H\}$  به دست می‌آید. اگر  $dA/dt = 0$  یا  $\{A, H\} = 0$  باشد آنگاه به  $A$  ثابت حرکت گفته می‌شود.

با مقایسه‌ی رابطه‌ی کلاسیکی (۱۲۳-۳) با همتای مکانیک کوانتومی (۸۸-۳) آن

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle \quad (۱۲۴-۳)$$

می‌بینیم که تنها زمانی یکسانند که براکت پواسون  $\{A, H\}$  را با جابه‌جاگر  $[\hat{A}, \hat{H}]/(i\hbar)$  برابر قرار دهیم. بنابراین می‌توانیم قاعده‌ی عمومی که در ادامه می‌آید را نتیجه بگیریم: می‌توان براکت پواسون هر جفت

متغیر کلاسیکی را از جابه‌جاگر بین جفت عملگرهای کوانتومی متناظر تقسیم بر  $i\hbar$  به دست آورد:

$$\frac{1}{i\hbar}[\hat{A}, \hat{B}] \longrightarrow \{A, B\}_{\text{کلاسیکی}} \quad (۱۲۵-۳)$$

توجه کنید که می‌توان عبارت‌های کلاسیکی را از همتهای کوانتومی آنها به دست آورد ولی عکس آن امکان‌پذیر نیست. یعنی تقسیم عبارت‌های مکانیک کوانتومی بر  $i\hbar$  به عبارت‌های کلاسیکی متناظر آنها می‌انجامد ولی ضرب عبارت‌های کلاسیکی در  $i\hbar$  الزاماً به همتهای کوانتومی آنها نمی‌انجامد.

### مثال ۳-۵

(الف) براکت پواسون  $\{x, p\}$  بین متغیرهای مکان  $x$  و تکانه‌ی  $p$  را محاسبه کنید.

(ب) جابه‌جاگر  $[\hat{X}, \hat{P}]$  را با براکت پواسون  $\{x, p\}$  محاسبه شده در قسمت (الف) مقایسه کنید.

حل

(الف) با اعمال رابطه‌ی عمومی

$$\{A, B\} = \sum_j \left( \frac{\partial A}{\partial x_j} \frac{\partial B}{\partial p_j} - \frac{\partial A}{\partial p_j} \frac{\partial B}{\partial x_j} \right) \quad (۱۲۶-۳)$$

بر  $x$  و  $p$ ، به آسانی می‌توانیم براکت پواسون داده شده را محاسبه کنیم:

$$\{x, p\} = \frac{\partial(x)}{\partial x} \frac{\partial(p)}{\partial p} - \frac{\partial(x)}{\partial p} \frac{\partial(p)}{\partial x} = \frac{\partial(x)}{\partial x} \frac{\partial(p)}{\partial p} = 1 \quad (۱۲۷-۳)$$

(ب) با استفاده از این واقعیت که  $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$  است، می‌بینیم که

$$\frac{1}{i\hbar}[\hat{X}, \hat{P}] = 1 \quad (۱۲۸-۳)$$

که برابر براکت پواسون (۱۲۷-۳) است. یعنی

$$\frac{1}{i\hbar}[\hat{X}, \hat{P}] = \{x, p\}_{\text{کلاسیکی}} = 1 \quad (۱۲۹-۳)$$

این نتیجه با معادله‌ی (۱۲۵-۳) هماهنگ است.

### ۲-۸-۳ قضیه‌ی اهرنفت

اگر قرار است که مکانیک کوانتومی عمومی‌تر از مکانیک کلاسیک باشد آنگاه باید مکانیک کلاسیک را به عنوان یک حالت حدی در خود داشته باشد. برای نشان دادن این ایده، بیایید نگاهی به تحول زمانی

مقدارهای چشمداشتی عملگرهای مکان و تکانه ( $\hat{\mathbf{P}}$  و  $\hat{\mathbf{R}}$ ) یک ذره‌ی در حال حرکت در پتانسیل  $\hat{V}(\mathbf{r})$  بیندازیم و سپس این کمیت‌ها را با همتهای کلاسیکی آنها مقایسه کنیم.

چون مشاهده‌پذیرهای مکان و تکانه به صورت صریح به زمان بستگی ندارند، در چارچوب مکانیک موجی جمله‌های  $\langle \partial \hat{\mathbf{R}} / \partial t \rangle$  و  $\langle \partial \hat{\mathbf{P}} / \partial t \rangle$  صفرند. از این رو وارد کردن  $\hat{H} = \hat{\mathbf{P}}^2 / (2m) + \hat{V}(\hat{\mathbf{R}}, t)$  در (۳-۸۸) و استفاده از این واقعیت که  $\hat{\mathbf{R}}$  با  $\hat{V}(\hat{\mathbf{R}}, t)$  جابه‌جا می‌شود، می‌توانیم بنویسیم:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{R}} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{\mathbf{R}}, \hat{H}] \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{\mathbf{R}}, \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{\mathbf{R}}, t)] \rangle = \frac{1}{2im\hbar} \langle [\hat{\mathbf{R}}, \hat{\mathbf{P}}^2] \rangle \quad (3-130)$$

چون

$$[\hat{\mathbf{R}}, \hat{\mathbf{P}}^2] = 2i\hbar \hat{\mathbf{P}} \quad (3-131)$$

داریم:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{R}} \rangle = \frac{1}{m} \langle \hat{\mathbf{P}} \rangle \quad (3-132)$$

در رابطه با  $d\langle \hat{\mathbf{P}} \rangle / dt$  باید گفت که می‌توانیم عبارت مربوط به آن را از بحثی مشابه با  $d\langle \hat{\mathbf{R}} \rangle / dt$  نتیجه بگیریم. با استفاده از

$$[\hat{\mathbf{P}}, \hat{V}(\hat{\mathbf{R}}, t)] = -i\hbar \nabla \hat{V}(\hat{\mathbf{R}}, t) \quad (3-133)$$

می‌توانیم بنویسیم:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{P}} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{\mathbf{P}}, \hat{V}(\hat{\mathbf{R}}, t)] \rangle = -\langle \nabla \hat{V}(\hat{\mathbf{R}}, t) \rangle \quad (3-134)$$

در رابطه‌ی (۳-۱۳۲) و (۳-۱۳۴) که تحول زمانی مقدارهای چشمداشتی عملگرهای مکان و تکانه را بیان می‌کنند، به عنوان قضیه‌ی اهرنفتست (یا معادله‌های اهرنفتست) شناخته می‌شوند. شکل هر یک از آنها یادآور معادله‌های هامیلتون-ژاکوبی در مکانیک کلاسیک است:

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\mathbf{p}}{m}, \quad \frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\nabla V(\mathbf{r}) \quad (3-135)$$

که به معادله‌ی حرکت نیوتن برای یک ذره‌ی کلاسیکی به جرم  $m$ ، مکان  $\mathbf{r}$  و تکانه‌ی  $\mathbf{p}$  کاهش می‌یابند:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = -\nabla V(\mathbf{r}) \quad (3-136)$$

توجه کنید که  $\hbar$  به صورت کامل از معادله‌های اهرنفتست (۳-۱۳۲) و (۳-۱۳۴) ناپدید شده است. این دو معادله به صورت مشخص رابطه‌ای بین مکانیک کوانتومی و مکانیک کلاسیک برقرار می‌کنند. در این چارچوب می‌توانیم مرکز بستگی موج را هنگامی که تحت تأثیر پتانسیل  $V(\mathbf{r})$  قرار می‌گیرد، مانند یک ذره‌ی کلاسیکی متحرک در نظر بگیریم.

## ۳-۸-۳ مکانیک کوانتومی و مکانیک کلاسیک

در فصل ۱ اساساً روی آن دسته از مشاهددهای تجربی متمرکز شدیم که ناکامی فیزیک کلاسیک را در مقیاس میکروسکوپی تأیید می‌کنند. باید به خاطر داشته باشیم که فیزیک کلاسیک در حیطه‌ی دنیای ماکروسکوپی به خوبی کار می‌کند. بنابراین اگر قرار است که نظریه‌ی مکانیک کوانتومی عمومی‌تر از فیزیک کلاسیک در نظر گرفته شود آنگاه باید نه تنها در مقیاس میکروسکوپی بلکه در حد کلاسیک نیز نتیجه‌های دقیقی را بیار آورد.

اما چه وقت باید از مکانیک کلاسیک یا مکانیک کوانتومی برای توصیف حرکت یک سیستم مشخص استفاده کنیم؟ به عبارت دیگر، از کجا بدانیم که چه زمانی توصیف کلاسیک توصیفی خوب و کافی است و چه زمانی توصیف کوانتومی لازم است؟ پاسخ با مقایسه‌ی اندازه‌ی آن دسته از کمیت‌هایی از سیستم که دارای ابعاد یک کنش با ثابت پلانک ( $h$ ) هستند، داده می‌شود. چون (همانطور که در (۳-۱۲۵) نشان داده شد) رابطه‌های کوانتومی با  $h$  مشخص می‌شوند بنابراین می‌توانیم بگوییم که هرگاه مقدار کنش یک سیستم بسیار بزرگ‌تر از  $h$  باشد می‌توان این سیستم را با فیزیک کلاسیک به دقت توصیف کرد. در غیر این صورت، استفاده از توصیف کوانتومی اجتناب ناپذیر است. باید به خاطر بیاوریم که برای سیستم‌های میکروسکوپی، اندازه‌ی متغیرهای کنش از مرتبه‌ی  $h$  است. به عنوان مثال، تکانه‌ی زاویه‌ای اتم هیدروژن برابر با  $L = n\hbar$  است که در آن  $n$  متناهی است.

راه معادل دیگر برای تعریف حد کلاسیک به وسیله‌ی طول است. چون  $\lambda = h/p$  است، می‌توان دامنه‌ی کلاسیک را توسط حد  $\lambda \rightarrow 0$  مشخص کرد. این بدان معنی است که هنگامی که طول موج دوبروی یک سیستم بسیار کوچک‌تر از اندازه‌ی آن است، می‌توان این سیستم را به دقت توسط فیزیک کلاسیک توصیف کرد.

به صورت خلاصه، می‌توان حد کلاسیک را توسط حد  $h \rightarrow 0$  یا (به صورت معادل) به وسیله‌ی حد  $\lambda \rightarrow 0$  توصیف نمود. در این حدها، نتایج مکانیک کوانتومی باید مشابه با نتایج فیزیک کلاسیک باشد:

$$\lim_{h \rightarrow 0} \text{مکانیک کوانتومی} \rightarrow \text{مکانیک کلاسیک} \quad (۳-۱۳۷)$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \text{مکانیک کوانتومی} \rightarrow \text{مکانیک کلاسیک} \quad (۳-۱۳۸)$$

بنابراین می‌توان مکانیک کلاسیک را به عنوان حد طول موج کوتاه مکانیک کوانتومی در نظر گرفت. در این صورت، مکانیک کوانتومی مکانیک کلاسیک را به عنوان یک حالت حدی در خود دارد. بنابراین در حد  $h \rightarrow 0$  یا  $\lambda \rightarrow 0$ ، کمیت‌های دینامیکی کوانتومی باید (آنطور که توسط بوهر پیشنهاد شد) یک تناظر یک به یک با همتهای کلاسیکی‌شان داشته باشند. این اساس اصل همخوانی است.

اما چگونه می‌توان در حد کلاسیک بین طبیعت احتمالاتی مکانیک کوانتومی با طبیعت قطعی فیزیک کلاسیک آشتی برقرار کرد؟ پاسخ کاملاً سراسر است: افت و خیزهای کوانتومی هنگامی که  $h \rightarrow 0$  میل

می‌کند باید قابل چشم‌پوشی یا حتی صفر شوند چرا که اصل عدم قطعیت هایزنبرگ وضعیت قطعیت کامل را به خود می‌گرفت. هنگامی که  $\hbar \rightarrow 0$  میل می‌کند، افت و خیزهای مکان و تکانه صفر خواهد شد ( $\Delta x \rightarrow 0$  و  $\Delta p \rightarrow 0$ ) بنابراین می‌توان مکان و تکانه را به صورت همزمان و با دقت دلخواه اندازه گرفت. این بیان می‌کند که ارزیابی‌های احتمالاتی کمیت‌های دینامیکی توسط مکانیک کوانتومی باید راهی برای محاسبات دقیق ارائه نماید (این ایده‌ها هنگامی که روش WKB را در فصل ۹ مطالعه می‌کنیم، بیشتر بررسی خواهند شد).

بنابراین برای حالت‌هایی که در آنها متغیرهای کنش یک سیستم در مقایسه با  $\hbar$  بسیار بزرگ‌اند (یا به صورت معادل، هنگامی که طول‌های این سیستم در مقایسه با طول موج دوبروی آن بسیار بزرگ است) مکانیک کوانتومی همان نتایج مکانیک کلاسیک را به دست می‌دهد.

در ادامه‌ی این کتاب به کاربردهای گوناگون معادله‌ی شرودینگر خواهیم پرداخت. در فصل ۴ از حالت ساده‌ی سیستم‌های یک‌بعدی شروع می‌کنیم و بعداً سیستم‌های واقعی‌تر را بررسی خواهیم کرد.

### ۹-۳ مسأله‌های حل شده

#### مسأله‌ی ۱-۳

یک ذره به جرم  $m$  که آزادانه درون یک چاه پتانسیل نامتناهی به طول  $a$  حرکت می‌کند، در لحظه‌ی  $t = 0$  دارای تابع موج اولیه‌ی زیر است:

$$\psi(x, 0) = \frac{A}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \sqrt{\frac{3}{5a}} \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) + \frac{1}{\sqrt{5a}} \sin\left(\frac{5\pi x}{a}\right)$$

که در آن  $A$  یک ثابت حقیقی است.

(الف)  $A$  را طوری بیابید که  $\psi(x, 0)$  بهنجار باشد.

(ب) اگر انرژی اندازه‌گیری شود، چه مقادیری به دست خواهد آمد و احتمال متناظر با آنها چقدر است؟ انرژی میانگین را محاسبه کنید.

(پ) تابع موج  $\psi(x, t)$  در زمان بعدی  $t$  بیابید.

(ت) احتمال یافتن سیستم در لحظه‌ی  $t$  در حالت  $\varphi(x, t) = \sqrt{2/a} \sin(\delta\pi x/a) \exp(-iE_\delta t/\hbar)$

را تعیین کنید. سپس احتمال یافتن آن را در حالت  $\chi(x, t) = \sqrt{2/a} \sin(2\pi x/a) \exp(-iE_2 t/\hbar)$  را مشخص کنید.

#### حل

چون تابع‌های

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad (۱۳۹-۳)$$

متعامد بهنجارند:

$$\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \int_0^a \phi_n^*(x) \phi_m(x) dx = \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) dx = \delta_{nm} \quad (۱۴۰-۳)$$

بهتر است  $\psi(x, 0)$  برحسب  $\phi_n(x)$  نوشته شود:

$$\begin{aligned} \psi(x, 0) &= \frac{A}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \sqrt{\frac{3}{5a}} \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) + \frac{1}{\sqrt{5a}} \sin\left(\frac{5\pi x}{a}\right) \\ &= \frac{A}{\sqrt{2}} \phi_1(x) + \sqrt{\frac{3}{10}} \phi_3(x) + \frac{1}{\sqrt{10}} \phi_5(x) \end{aligned} \quad (۱۴۱-۳)$$

(الف) چون  $\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{nm}$ ، بهنجار کردن  $\psi(x, 0)$  نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \frac{A^2}{2} + \frac{3}{10} + \frac{1}{10} \quad (۱۴۲-۳)$$

یا  $A = \sqrt{6/5}$  از این رو

$$\psi(x, 0) = \sqrt{\frac{3}{5}}\phi_1(x) + \sqrt{\frac{3}{10}}\phi_2(x) + \frac{1}{\sqrt{10}}\phi_5(x) \quad (۱۴۳-۳)$$

(ب) چون مشتق دوم (۳-۱۳۹) از  $(n^2\pi^2/a^2)\phi_n(x)$  به دست می‌آید و هامیلتونی یک ذره‌ی آزاد برابر با  $\hat{H} = -(\hbar^2/2m)d^2/dx^2$  است، مقدار چشمداشتی  $\hat{H}$  نسبت به  $\phi_n(x)$  برابر است با

$$E_n = \langle \phi_n | \hat{H} | \phi_n \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^a \phi_n^*(x) \frac{d^2 \phi_n(x)}{dx^2} dx = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (۱۴۴-۳)$$

اگر اندازه‌گیری روی سیستم انجام شود آنگاه  $E_n = n^2 \pi^2 \hbar^2 / (2ma^2)$  با احتمال متناظر  $P_n(E_n) = |\langle \phi_n | \psi \rangle|^2$  را به دست می‌آوریم. با توجه به این که تابع موج اولیه‌ی (۳-۱۴۳) تنها سه ویژه‌حالت  $\hat{H}$  ( $\phi_1(x)$ ،  $\phi_2(x)$  و  $\phi_5(x)$ ) را در خود دارد، نتایج اندازه‌گیری انرژی همراه با احتمال‌های متناظر عبارتند از

$$E_1 = \langle \phi_1 | \hat{H} | \phi_1 \rangle = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad P_1(E_1) = |\langle \phi_1 | \psi \rangle|^2 = \frac{3}{5} \quad (۱۴۵-۳)$$

$$E_2 = \langle \phi_2 | \hat{H} | \phi_2 \rangle = \frac{4\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad P_2(E_2) = |\langle \phi_2 | \psi \rangle|^2 = \frac{3}{10} \quad (۱۴۶-۳)$$

$$E_5 = \langle \phi_5 | \hat{H} | \phi_5 \rangle = \frac{25\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad P_5(E_5) = |\langle \phi_5 | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{10} \quad (۱۴۷-۳)$$

انرژی میانگین برابر است با

$$E = \sum_n P_n E_n = \frac{3}{5} E_1 + \frac{3}{10} E_2 + \frac{1}{10} E_5 = \frac{29\pi^2 \hbar^2}{10ma^2} \quad (۱۴۸-۳)$$

(ب) چون حالت اولیه‌ی  $\psi(x, 0)$  از (۳-۱۴۳) به دست می‌آید، تابع موج  $\psi(x, t)$  در زمان بعدی  $t$  برابر است با

$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{3}{5}}\phi_1(x)e^{-iE_1 t/\hbar} + \sqrt{\frac{3}{10}}\phi_2(x)e^{-iE_2 t/\hbar} + \frac{1}{\sqrt{10}}\phi_5(x)e^{-iE_5 t/\hbar} \quad (۱۴۹-۳)$$

که در آن عبارت‌های مربوط به  $E_n$  در (۳-۱۴۴) و عبارت‌های مربوط به  $\phi_n(x)$  در (۳-۱۳۹) فهرست شده‌اند.

(ت) ابتدا بیایید  $\varphi(x, t)$  را برحسب  $\phi_n(x)$  بیان کنیم:

$$\varphi(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{5\pi x}{a}\right) e^{-iE_5 t/\hbar} = \phi_5(x) e^{-iE_5 t/\hbar} \quad (۱۵۰-۳)$$

احتمال یافتن سیستم در حالت  $\varphi(x, t)$  در زمان  $t$  برابر است با

$$P = |\langle \varphi | \psi \rangle|^2 = \left| \int_0^a \varphi^*(x, t) \psi(x, t) dx \right|^2 = \frac{1}{10} \left| \int_0^a \phi_3^*(x) \phi_5(x) dx \right|^2 = \frac{1}{10} \quad (151-3)$$

زیرا  $\langle \varphi | \phi_5 \rangle = \exp(iE_5 t / \hbar)$  و  $\langle \varphi | \phi_1 \rangle = \langle \varphi | \phi_3 \rangle = 0$

به صورت مشابه، چون  $\chi(x, t) = \sqrt{2/a} \sin(2\pi x/a) \exp(-iE_2 t / \hbar) = \phi_2(x) \exp(-iE_2 t / \hbar)$  به آسانی می‌توانیم نشان دهیم که احتمال یافتن سیستم در حالت  $\chi(x, t)$  برابر با صفر است:

$$P = |\langle \chi | \psi \rangle|^2 = \left| \int_0^a \chi^*(x, t) \psi(x, t) dx \right|^2 = 0 \quad (152-3)$$

زیرا  $\langle \chi | \phi_1 \rangle = \langle \chi | \phi_3 \rangle = \langle \chi | \phi_5 \rangle = 0$

### مسأله‌ی ۲-۳

ذره‌ای به جرم  $m$  که آزادانه درون یک چاه پتانسیل نامتناهی به طول  $a$  حرکت می‌کند، در ابتدا در حالت  $\psi(x, 0) = \sqrt{3/5a} \sin(3\pi x/a) + (1/\sqrt{5a}) \sin(5\pi x/a)$  قرار دارد.

(الف)  $\psi(x, t)$  را در زمان بعدی  $t$  بیابید.

(ب) چگالی احتمال  $\rho(x, t)$  و چگالی جریان  $\mathbf{J}(x, t)$  را محاسبه کنید.

(پ) ثابت کنید که احتمال پایسته است یعنی  $\partial \rho / \partial t + \nabla \cdot \mathbf{J}(x, t) = 0$

حل

(الف) چون می‌توان  $\psi(x, 0) = \sqrt{2/a} \sin(n\pi x/a)$  زیر برحسب  $\phi_n(x)$  بیان کرد:

$$\psi(x, 0) = \sqrt{\frac{3}{5a}} \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) + \frac{1}{\sqrt{5a}} \sin\left(\frac{5\pi x}{a}\right) = \sqrt{\frac{3}{10}} \phi_3(x) + \frac{1}{\sqrt{10}} \phi_5(x) \quad (153-3)$$

می‌توانیم بنویسیم:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \sqrt{\frac{3}{5a}} \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) e^{-iE_3 t / \hbar} + \frac{1}{\sqrt{5a}} \sin\left(\frac{5\pi x}{a}\right) e^{-iE_5 t / \hbar} \\ &= \sqrt{\frac{3}{10}} \phi_3(x) e^{-iE_3 t / \hbar} + \frac{1}{\sqrt{10}} \phi_5(x) e^{-iE_5 t / \hbar} \end{aligned} \quad (154-3)$$

که در آن عبارت‌های مربوط به  $E_n$  در (۱۴۴-۳) فهرست شده‌اند:  $E_n = n^2 \pi^2 \hbar^2 / (2ma^2)$

(ب) چون  $\rho(x, t) = \psi^*(x, t) \psi(x, t)$  است که در آن  $\psi(x, t)$  از (۱۵۴-۳) به دست می‌آید، می‌توانیم

بنویسیم:



$$\rho(x, t) = \frac{3}{10} \phi_1^2(x) + \frac{\sqrt{3}}{10} \phi_2(x) \phi_5(x) \left[ e^{i(E_2 - E_5)t/\hbar} + e^{-i(E_2 - E_5)t/\hbar} \right] + \frac{1}{10} \phi_5^2(x) \quad (155-3)$$

از (۱۴۴-۳) داریم:  $E_2 - E_5 = 9E_1 - 25E_1 = -16E_1 = -16\pi^2 \hbar^2 / (ma^2)$ . بنابراین  $E_2 - E_5$  به صورت زیر در می‌آید:

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \frac{3}{10} \phi_1^2(x) + \frac{\sqrt{3}}{10} \phi_2(x) \phi_5(x) \cos\left(\frac{16E_1 t}{\hbar}\right) + \frac{1}{10} \phi_5^2(x) \\ &= \frac{3}{10} \sin^2\left(\frac{3\pi x}{a}\right) + \frac{2\sqrt{3}}{10} \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{5\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{16E_1 t}{\hbar}\right) \\ &\quad + \frac{1}{10} \sin^2\left(\frac{5\pi x}{a}\right) \end{aligned} \quad (156-3)$$

چون سیستم یک‌بعدی است، اثر عملگر گرادیان روی  $\psi(x, t)$  و  $\psi^*(x, t)$  از  $\nabla\psi(x, t) = (d\psi(x, t)/dx)\mathbf{i}$  و  $\nabla\psi^*(x, t) = (d\psi^*(x, t)/dx)\mathbf{i}$  به دست می‌آید. بنابراین می‌توانیم چگالی جریان  $\mathbf{J}(x, t) = (i\hbar/2m)(\psi(x, t)\nabla\psi^*(x, t) - \psi^*(x, t)\nabla\psi(x, t))$  را به صورت زیر بنویسیم:

$$\mathbf{J}(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} \left( \psi(x, t) \frac{d\psi^*(x, t)}{dx} - \psi^*(x, t) \frac{d\psi(x, t)}{dx} \right) \mathbf{i} \quad (157-3)$$

با استفاده از (۱۵۴-۳) داریم:

$$\frac{d\psi(x, t)}{dx} = \frac{3\pi}{a} \sqrt{\frac{3}{10}} \cos\left(\frac{3\pi x}{a}\right) e^{-iE_2 t/\hbar} + \frac{5\pi}{a} \frac{1}{\sqrt{10}} \cos\left(\frac{5\pi x}{a}\right) e^{-iE_5 t/\hbar} \quad (158-3)$$

$$\frac{d\psi^*(x, t)}{dx} = \frac{3\pi}{a} \sqrt{\frac{3}{10}} \cos\left(\frac{3\pi x}{a}\right) e^{iE_2 t/\hbar} + \frac{5\pi}{a} \frac{1}{\sqrt{10}} \cos\left(\frac{5\pi x}{a}\right) e^{iE_5 t/\hbar} \quad (159-3)$$

یک محاسبه‌ی سراسری نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\begin{aligned} \psi \frac{d\psi^*}{dx} - \psi^* \frac{d\psi}{dx} &= -2i\pi \frac{\sqrt{3}}{10a^2} \left[ 5 \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{5\pi x}{a}\right) \right. \\ &\quad \left. - 3 \sin\left(\frac{5\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{3\pi x}{a}\right) \right] \times \sin\left(\frac{E_2 - E_5}{\hbar} t\right) \end{aligned} \quad (160-3)$$

با وارد کردن این رابطه در (۱۵۷-۳) و استفاده از  $E_2 - E_0 = -16E_1$  داریم:

$$\mathbf{J}(x, t) = -\frac{\pi\hbar\sqrt{3}}{m\Delta a^2} \left[ 5 \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{5\pi x}{a}\right) - 3 \sin\left(\frac{5\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{3\pi x}{a}\right) \right] \times \sin\left(\frac{16E_1 t}{\hbar}\right) \mathbf{i} \quad (161-3)$$

(ب) با مشتق گرفتن از (۱۵۶-۳) نسبت به زمان و با استفاده از عبارت  $32\sqrt{3}E_1/(\Delta a\hbar) = 16\pi^2\hbar\sqrt{3}/(\Delta ma^2)$  (چون  $E_1 = \pi^2\hbar^2/(2ma^2)$ ) است به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} \frac{\partial\rho}{\partial t} &= -\frac{32\sqrt{3}E_1}{\Delta a\hbar} \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{5\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{16E_1 t}{\hbar}\right) \\ &= -\frac{16\pi^2\hbar\sqrt{3}}{\Delta ma^2} \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{5\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{16E_1 t}{\hbar}\right) \end{aligned} \quad (162-3)$$

حال با محاسبه دیورژانس (۱۶۱-۳) به نتیجه‌ی زیر می‌رسیم:

$$\nabla \cdot \mathbf{J}(x, t) = \frac{dJ(x, t)}{dx} = \frac{16\pi^2\hbar\sqrt{3}}{\Delta ma^2} \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{5\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{16E_1 t}{\hbar}\right) \quad (163-3)$$

جمع کردن (۱۶۲-۳) و (۱۶۳-۳) پایداری احتمال را تأیید می‌کند:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}(x, t) = 0 \quad (164-3)$$

### مسئله ۳-۳

یک ذره‌ی یک‌بعدی را در نظر بگیرید که در ناحیه‌ی  $0 \leq x \leq a$  محدود شده است و تابع موج آن برابر

$$\Psi(x, t) = \sin(\pi x/a) \exp(-i\omega t)$$

(الف) پتانسیل  $V(x)$  را بیابید.

(ب) احتمال یافتن ذره در بازه‌ی  $a/4 \leq x \leq 3a/4$  را محاسبه کنید.

حل

(الف) چون مشتق زمانی اول و مشتق دوم  $x$  تابع موج  $\Psi(x, t)$  از  $\partial\Psi(x, t)/\partial t = -i\omega\Psi(x, t)$

$\partial^2\Psi(x, t)/\partial x^2 = -(\pi^2/a^2)\Psi(x, t)$  به دست می‌آیند، معادله‌ی شرودینگر (۶۸-۳) نتیجه‌ی زیر را

می‌دهد:

$$i\hbar(-i\omega)\Psi(x, t) = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\Psi(x, t) + \hat{V}(x, t)\Psi(x, t) \quad (165-3)$$

از این رو  $V(x, t)$  مستقل از زمان است و از رابطه‌ی  $V(x) = \hbar\omega - \hbar^2\pi^2/(2ma^2)$  به دست می‌آید. (ب) می‌توان احتمال یافتن ذره در بازه‌ی  $a/4 \leq x \leq 3a/4$  را از (۳-۴) به دست آورد:

$$P = \frac{\int_{a/4}^{3a/4} |\psi(x)|^2 dx}{\int_0^a |\psi(x)|^2 dx} = \frac{\int_{a/4}^{3a/4} \sin^2(\pi x/a) dx}{\int_0^a \sin^2(\pi x/a) dx} = \frac{2 + \pi}{2\pi} = 0.82 \quad (۳-۱۶۶)$$

### مسأله‌ی ۳-۴

سیستمی را در نظر بگیرید که در ابتدا در حالت  $|\psi_0\rangle = [\sqrt{2}|\phi_1\rangle + \sqrt{3}|\phi_2\rangle + |\phi_3\rangle + |\phi_4\rangle]/\sqrt{7}$

قرار دارد و  $|\phi_n\rangle$  ها ویژه حالت‌های هامیلتونی سیستم هستند به طوری که  $\hat{H}|\phi_n\rangle = n^2\mathcal{E}_0|\phi_n\rangle$

(الف) اگر انرژی اندازه‌گیری شود آنگاه چه مقادیری و با چه احتمال‌هایی به دست خواهند آمد؟

(ب) عملگر  $\hat{A}$  را در نظر بگیرید که اثر آن روی  $|\phi_n\rangle$  به صورت  $\hat{A}|\phi_n\rangle = (n+1)a_0|\phi_n\rangle$  تعریف

می‌شود. اگر  $A$  اندازه‌گیری شود آنگاه چه مقادیری و با چه احتمال‌هایی به دست خواهند آمد؟

(پ) فرض کنید که اندازه‌گیری انرژی  $\mathcal{E}_0$  را نتیجه‌ی دهد. اگر بی‌درنگ پس از آن  $A$  را اندازه‌گیری کنیم

آنگاه چه مقداری به دست می‌آید؟

حل

(الف) اندازه‌گیری انرژی  $E_n = \langle\phi_n|\hat{H}|\phi_n\rangle = n^2\mathcal{E}_0$  را نتیجه می‌دهد یعنی

$$E_1 = \mathcal{E}_0, \quad E_2 = 4\mathcal{E}_0, \quad E_3 = 9\mathcal{E}_0, \quad E_4 = 16\mathcal{E}_0. \quad (۳-۱۶۷)$$

چون  $|\psi_0\rangle$  بهنجار است  $(\langle\psi_0|\psi_0\rangle = (2+3+1+1)/7 = 1)$  و با استفاده از (۳-۲) می‌توانیم

احتمال‌های متناظر با (۳-۱۶۷) را به صورت  $P(E_n) = |\langle\phi_n|\psi_0\rangle|^2 / \langle\psi_0|\psi_0\rangle = |\langle\phi_n|\psi_0\rangle|^2$

بنویسیم. از این رو با استفاده از این واقعیت که  $\langle\phi_n|\phi_m\rangle = \delta_{nm}$  است، داریم:

$$P(E_1) = \left| \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{7}} \langle\phi_1|\phi_1\rangle \right|^2 = \frac{2}{7}, \quad P(E_2) = \left| \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{7}} \langle\phi_2|\phi_2\rangle \right|^2 = \frac{3}{7} \quad (۳-۱۶۸)$$

$$P(E_3) = \left| \frac{1}{\sqrt{7}} \langle\phi_3|\phi_3\rangle \right|^2 = \frac{1}{7}, \quad P(E_4) = \left| \frac{1}{\sqrt{7}} \langle\phi_4|\phi_4\rangle \right|^2 = \frac{1}{7} \quad (۳-۱۶۹)$$

(ب) به صورت مشابه، اندازه‌گیری مشاهده‌پذیر  $\hat{A}$ ،  $\hat{A}|\phi_n\rangle = (n+1)a_0|\phi_n\rangle$  را نتیجه می‌دهد

یعنی

$$a_1 = 2a_0, \quad a_2 = 3a_0, \quad a_3 = 4a_0, \quad a_4 = 5a_0. \quad (۳-۱۷۰)$$

دوباره با استفاده از (۳-۲) و با توجه به این که  $|\psi_0\rangle$  بهنجار است، می‌توانیم تحقیق کنیم که احتمال‌های

متناظر با مقادیرهای (۳-۱۷۰) از  $P(a_n) = |\langle \phi_n | \psi_0 \rangle|^2 / \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = |\langle \phi_n | \psi_0 \rangle|^2$  یا

$$P(a_1) = \left| \sqrt{\frac{2}{V}} \langle \phi_1 | \phi_1 \rangle \right|^2 = \frac{2}{V}, \quad P(a_2) = \left| \sqrt{\frac{3}{V}} \langle \phi_2 | \phi_2 \rangle \right|^2 = \frac{3}{V} \quad (۳-۱۷۱)$$

$$P(a_3) = \left| \frac{1}{\sqrt{V}} \langle \phi_3 | \phi_3 \rangle \right|^2 = \frac{1}{V}, \quad P(a_4) = \left| \frac{1}{\sqrt{V}} \langle \phi_4 | \phi_4 \rangle \right|^2 = \frac{1}{V} \quad (۳-۱۷۲)$$

به دست می آیند.

(پ) اندازه گیری انرژی که  $\mathcal{E}_0$  را نتیجه می دهد بیان می کند که سیستم در حالت  $|\phi_2\rangle$  قرار گرفته است. اندازه گیری مشاهده پذیر  $A$  بی درنگ پس از آن به

$$\langle \phi_2 | \hat{A} | \phi_2 \rangle = 3a_0 \langle \phi_2 | \phi_2 \rangle = 3a_0 \quad (۳-۱۷۳)$$

می انجامد.

### مسئله ۳-۵

(الف) با فرض آن که سیستم مسئله ۳-۴ در ابتدا در حالت  $|\phi_3\rangle$  است، چه مقادیری برای انرژی و مشاهده پذیر  $A$  به دست خواهند آمد هرگاه (۱) ابتدا  $H$  و سپس  $A$  (۲) ابتدا  $A$  و سپس  $H$  را اندازه بگیریم.

(ب) نتیجه های به دست آمده در (۱) و (۲) را مقایسه کنید و نتیجه بگیرید که آیا  $\hat{H}$  و  $\hat{A}$  سازگارند یا خیر.  $[\hat{A}, \hat{H}]|\phi_3\rangle$  را محاسبه کنید.

حل

(الف) (۱) اندازه گیری ابتدا  $H$  و سپس  $A$  با  $\hat{A}\hat{H}|\phi_3\rangle$  نمایش داده می شود. با استفاده از رابطه های  $\hat{H}|\phi_n\rangle = n^2\mathcal{E}_0|\phi_n\rangle$  و  $\hat{A}|\phi_n\rangle = na_0|\phi_{n+1}\rangle$  داریم:

$$\hat{A}\hat{H}|\phi_3\rangle = 9\mathcal{E}_0\hat{A}|\phi_3\rangle = 27\mathcal{E}_0a_0|\phi_4\rangle \quad (۳-۱۷۴)$$

(۲) با اندازه گیری ابتدا  $A$  و سپس  $H$  به دست خواهیم آورد:

$$\hat{H}\hat{A}|\phi_3\rangle = 3a_0\hat{H}|\phi_4\rangle = 48\mathcal{E}_0a_0|\phi_4\rangle \quad (۳-۱۷۵)$$

(ب) معادله های (۳-۱۷۴) (۳-۱۷۵) نشان می دهند که اثر  $\hat{H}\hat{A}$  و  $\hat{A}\hat{H}$  نتیجه های متفاوتی را نتیجه می دهند. این به این معنی است که  $\hat{A}$  و  $\hat{H}$  جابه جا نمی شوند از این رو سازگار نیستند. بنابراین می توانیم

بنویسیم:

$$[\hat{H}, \hat{A}]|\phi_3\rangle = (48 - 27)\mathcal{E}_0a_0|\phi_4\rangle = 17\mathcal{E}_0a_0|\phi_4\rangle \quad (۳-۱۷۶)$$

## مسأله‌ی ۳-۶

یک سیستم فیزیکی را در نظر بگیرید که هامیلتونی  $H$  و حالت اولیه  $|\psi_0\rangle$  آن از

$$H = \mathcal{E} \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad |\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 1-i \\ 1-i \\ 1 \end{pmatrix}$$

به دست می‌آیند که در آن  $\mathcal{E}$  دارای بعد انرژی است.

(الف) هنگام اندازه‌گیری انرژی چه مقدارهایی و با چه احتمال‌هایی را به دست خواهیم آورد؟

(ب) مقدار چشمداشتی هامیلتونی  $\langle \hat{H} \rangle$  را محاسبه کنید.

حل

(الف) نتیجه‌های اندازه‌گیری انرژی از ویژه‌مقدارهای  $H$  به دست می‌آیند. قطری کردن  $H$  ویژه‌مقدار انرژی

غیرواگن  $E_1 = \mathcal{E}$  و ویژه‌مقدار واگن دوگانه‌ی  $E_2 = E_3 = -\mathcal{E}$  را نتیجه می‌دهد که ویژه‌بردارهای آنها

به ترتیب عبارتند از

$$|\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\phi_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (177-3)$$

این ویژه‌بردارها متعامدند زیرا  $H$  هرمیتی است. توجه کنید که می‌توان حالت اولیه  $|\psi_0\rangle$  را برحسب

$|\phi_1\rangle$ ،  $|\phi_2\rangle$  و  $|\phi_3\rangle$  به صورت زیر نوشت:

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 1-i \\ 1-i \\ 1 \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{2}{5}} |\phi_1\rangle + \sqrt{\frac{2}{5}} |\phi_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{5}} |\phi_3\rangle \quad (178-3)$$

چون  $|\phi_1\rangle$ ،  $|\phi_2\rangle$  و  $|\phi_3\rangle$  متعامد بهنجارند، احتمال اندازه‌گیری  $E_1 = \mathcal{E}$  از رابطه‌ی زیر به دست

می‌آید:

$$P_1(E_1) = |\langle \phi_1 | \psi_0 \rangle|^2 = \left| \sqrt{\frac{2}{5}} \langle \phi_1 | \phi_1 \rangle \right|^2 = \frac{2}{5} \quad (179-3)$$

حال چون ویژه‌مقدار دیگر واگن دوگانه است ( $E_2 = E_3 = -\mathcal{E}$ )، می‌توان احتمال اندازه‌گیری  $-\mathcal{E}$  را از

(۳-۳) به دست آورد:

$$P_2(E_2) = |\langle \phi_2 | \psi_0 \rangle|^2 + |\langle \phi_3 | \psi_0 \rangle|^2 = \frac{2}{5} + \frac{1}{5} = \frac{3}{5} \quad (180-3)$$

(ب) از (۳-۱۷۹) و (۳-۱۸۰) داریم:

$$\langle \hat{H} \rangle = P_1 E_1 + P_2 E_2 = \frac{2}{5} \mathcal{E} - \frac{3}{5} \mathcal{E} = -\frac{1}{5} \mathcal{E} \quad (۳-۱۸۱)$$

می‌توانیم همان نتیجه‌ها را با محاسبه‌ی مقدار چشمداشتی  $\hat{H}$  نسبت به  $|\psi_0\rangle$  به‌دست آوریم. چون  $\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = 1$  است،  $\langle \hat{H} \rangle = \langle \psi_0 | \hat{H} | \psi_0 \rangle / \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = \langle \psi_0 | \hat{H} | \psi_0 \rangle$  و داریم:

$$\langle \hat{H} \rangle = \langle \psi_0 | \hat{H} | \psi_0 \rangle = \frac{\mathcal{E}}{5} \begin{pmatrix} 1+i & 1+i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1-i \\ 1-i \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{1}{5} \mathcal{E} \quad (۳-۱۸۲)$$

### مسأله‌ی ۷-۳

سیستمی را در نظر بگیرید که هامیلتونی  $H$  آن و عملگر  $A$  از ماتریس زیر به‌دست می‌آیند:

$$H = \mathcal{E}_0 \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad A = a \begin{pmatrix} 0 & 4 & 0 \\ 4 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

که در آن  $\mathcal{E}_0$  دارای بعد انرژی است.

(الف) اگر انرژی را اندازه‌گیری کنیم آنگاه چه مقدارهایی را به‌دست خواهیم آورد؟

(ب) فرض کنید زمانی که انرژی را اندازه می‌گیریم، مقدار  $-\mathcal{E}_0$  را به‌دست می‌آوریم. سپس بی‌درنگ  $A$  را اندازه می‌گیریم. در این صورت چه مقدارهایی را برای  $A$  به‌دست خواهیم آورد و احتمال‌های متناظر با هر مقدار چقدر است؟

(پ) عدم قطعیت  $\Delta A$  را محاسبه کنید.

حل

(الف) انرژی‌های ممکن از ویژه‌مقدارهای  $H$  به‌دست می‌آیند. قطری کردن  $H$  سه ویژه‌مقدار انرژی غیرواکن  $E_1 = 0$ ،  $E_2 = -\mathcal{E}_0$  و  $E_3 = 2\mathcal{E}_0$  را نتیجه می‌دهد. ویژه‌بردارها به ترتیب عبارتند از

$$|\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\phi_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |\phi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (۳-۱۸۳)$$

این ویژه‌بردارها متعامد بهنجارند.

(ب) اگر اندازه‌گیری انرژی  $E$  را نتیجه دهد به این معنی است که سیستم در حالت  $|\phi_2\rangle$  قرار می‌گیرد. هنگامی که مشاهده‌پذیر بعدی  $(A)$  را اندازه می‌گیریم، سیستم در حالت  $|\phi_2\rangle$  است. نتیجه‌ای که برای  $A$  به دست می‌آوریم از هر یک از ویژه‌مقدارهای  $A$  به دست می‌آید. قطری کردن  $A$  سه مقدار غیرواکن را نتیجه می‌دهد:  $a_1 = -\sqrt{17}a$ ،  $a_2 = 0$  و  $a_3 = \sqrt{17}a$ . ویژه‌بردارهای آنها به ترتیب عبارتند از

$$|a_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{34}} \begin{pmatrix} 4 \\ -\sqrt{17} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |a_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{17}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -4 \end{pmatrix}, \quad |a_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 4 \\ \sqrt{17} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (184-3)$$

بنابراین هنگامی که  $A$  روی سیستمی که در حالت  $|\phi_2\rangle$  است، اندازه‌گیری می‌شود آنگاه احتمال یافتن  $-\sqrt{17}a$  به صورت زیر به دست می‌آید:

$$P_1(a_1) = |\langle a_1 | \phi_2 \rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{34}} \begin{pmatrix} 4 & -\sqrt{17} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{1}{34} \quad (185-3)$$

به صورت مشابه، احتمال اندازه‌گیری  $0$  و  $\sqrt{17}a$  عبارتند از

$$P_2(a_2) = |\langle a_2 | \phi_2 \rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{17}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{16}{17} \quad (186-3)$$

$$P_3(a_3) = |\langle a_3 | \phi_2 \rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{34}} \begin{pmatrix} 4 & \sqrt{17} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{1}{34} \quad (187-3)$$

(پ) چون سیستم هنگام اندازه‌گیری  $A$  در حالت  $|\phi_2\rangle$  قرار دارد، عدم قطعیت  $\Delta A$  از رابطه‌ی  $\Delta A = \sqrt{\langle \phi_2 | A^2 | \phi_2 \rangle - \langle \phi_2 | A | \phi_2 \rangle^2}$  به دست می‌آید که در آن

$$\langle \phi_2 | A | \phi_2 \rangle = a \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 4 & 0 \\ 4 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0 \quad (188-3)$$

$$\langle \phi_2 | A^2 | \phi_2 \rangle = a^2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 4 & 0 \\ 4 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 4 & 0 \\ 4 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = a^2 \quad (189-3)$$

بنابراین داریم:  $\Delta A = a$

### مسئله ۳-۸

سیستمی را در نظر بگیرید که حالت آن و دو مشاهده‌پذیر  $A$  و  $B$  از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad A = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(الف) احتمال این که اندازه‌گیری  $A$  در لحظه‌ی  $t$  نتیجه‌ی  $-1$  را بدهد، چقدر است؟

(ب) بیایید مجموعه‌ای از دو اندازه‌گیری که در آن ابتدا  $B$  و سپس (بی‌درنگ)  $A$  اندازه‌گیری می‌شود را

انجام دهیم. احتمال به دست آوردن مقدار  $0$  برای  $B$  و  $1$  برای  $A$  چقدر است؟

(پ) حال ابتدا  $A$  و سپس (بی‌درنگ)  $B$  را اندازه می‌گیریم. احتمال به دست آوردن مقدار  $1$  برای  $A$  و

مقدار  $0$  برای  $B$  را بیابید.

(ت) نتیجه‌های (ب) و (پ) را مقایسه کنید و در مورد آن توضیح دهید.

(ث) کدام یک از مجموعه عملگرهای  $\{\hat{A}\}$ ،  $\{\hat{B}\}$  و  $\{\hat{A}, \hat{B}\}$  مجموعه‌ی کاملی از عملگرهای جابه‌جاشونده

(CSCO) را تشکیل می‌دهد؟

حل

(الف) اندازه‌گیری  $A$  هر یک از ویژه‌مقدارهای  $A$  را که عبارتند از  $-1$ ،  $a_1$  و  $a_2 = 0$  و  $a_3 = 1$

به دست می‌دهد. ویژه‌حالت‌های (بهنجار) به ترتیب عبارتند از

$$|a_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix}, \quad |a_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |a_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (190-3)$$

احتمال به دست آوردن  $-1$  برابر است با

$$P(-1) = \frac{|\langle a_1 | \psi(t) \rangle|^2}{\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle} = \frac{1}{6} \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (-1 \quad \sqrt{2} \quad -1) \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{1}{3} \quad (191-3)$$

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = (-1 \quad 2 \quad 1) \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} = 6$$

که در آن از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که  $6$



(ب) اندازه‌گیری  $B$  مقداری را نتیجه می‌دهد که برابر با هر یک از ویژه‌مقدارهای  $B$  است:  $b_1 = -1$ ،  $b_2 = 0$  و  $b_3 = 1$ . ویژه‌بردارهای متناظر آنها برابرند با

$$|b_1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |b_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |b_3\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (192-3)$$

چون سیستم در حالت  $|\psi(t)\rangle$  بود، احتمال به دست آوردن مقدار  $b_2 = 0$  برای  $B$  برابر است با

$$P(b_2) = \frac{|\langle b_2 | \psi(t) \rangle|^2}{\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle} = \frac{1}{6} \left| \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{2}{3} \quad (193-3)$$

حال به اندازه‌گیری مشاهده‌پذیر دیگر ( $A$ ) می‌پردازیم. مشاهده‌پذیرهای  $A$  و  $B$  ویژه‌حالت‌های مشترک ندارند زیرا با هم جابه‌جا نمی‌شوند. پس از اندازه‌گیری  $B$  (نتیجه برابر با  $b_2 = 0$  است) سیستم طبق اصل موضوعه‌ی ۳ در حالت  $|\phi\rangle$  قرار می‌گیرد که می‌توان آن را با تصویر کردن  $|\psi(t)\rangle$  روی  $|b_2\rangle$  یافت:

$$|\phi\rangle = |b_2\rangle \langle b_2 | \psi(t) \rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (194-3)$$

احتمال یافتن ۱ هنگامی که  $A$  را اندازه می‌گیریم، به صورت زیر به دست می‌آید:

$$P(a_2) = \frac{|\langle a_2 | \phi \rangle|^2}{\langle \phi | \phi \rangle} = \frac{1}{4} \left| \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{1}{4} \quad (195-3)$$

زیرا  $\langle \phi | \phi \rangle = 4$  است. به صورت خلاصه، هنگامی که  $B$  و سپس  $A$  اندازه‌گیری می‌شوند، احتمال یافتن مقدار ۰ برای  $B$  و ۱ برای  $A$  از ضرب احتمال‌های (۱۹۳-۳) و (۱۹۵-۳) به دست می‌آید:

$$P(b_2, a_2) = P(b_2)P(a_2) = \frac{2}{3} \times \frac{1}{4} = \frac{1}{3} \quad (196-3)$$

(پ) سپس ابتدا  $A$  و بعد  $B$  را اندازه می‌گیریم. چون سیستم در حالت  $|\psi(t)\rangle$  است، احتمال اندازه‌گیری  $a_2 = 1$  برای  $A$  به صورت زیر به دست می‌آید:

$$P'(a_2) = \frac{|\langle a_2 | \psi(t) \rangle|^2}{\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle} = \frac{1}{6} \left| \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{1}{3} \quad (197-3)$$

که در آن از عبارت (۳-۱۹۰) برای  $|a_3\rangle$  استفاده کرده‌ایم.

سپس  $B$  را اندازه می‌گیریم. حالت سیستم درست پس از اندازه‌گیری  $A$  (با مقدار  $a_3 = 1$ ) از تصویر کردن  $|\psi(t)\rangle$  روی  $|a_3\rangle$  به دست می‌آید:

$$|\chi\rangle = |a_3\rangle\langle a_3|\psi(t)\rangle = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} (1 \quad \sqrt{2} \quad 1) \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3-198)$$

بنابراین احتمال یافتن مقدار  $b_2 = 0$  هنگامی که  $B$  اندازه‌گیری می‌شود، از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$P'(b_2) = \frac{|\langle b_2|\chi\rangle|^2}{\langle\chi|\chi\rangle} = \frac{1}{4} \left| \frac{\sqrt{2}}{2} (0 \quad 1 \quad 0) \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{1}{4} \quad (3-199)$$

زیرا  $\langle\chi|\chi\rangle = 2$  است.

بنابراین هنگامی که ابتدا  $A$  و سپس  $B$  اندازه‌گیری می‌شود، احتمال یافتن مقدار ۱ برای  $A$  و ۰ برای  $B$  از ضرب احتمال‌های (۳-۱۹۹) و (۳-۱۹۷) به دست می‌آید:

$$P(a_3, b_2) = P'(a_3)P'(b_2) = \frac{1}{3} \times \frac{1}{4} = \frac{1}{6} \quad (3-200)$$

(ت) همانطور که در (۳-۱۹۶) و (۳-۲۰۰) نشان داده شد، احتمال‌های  $P(a_3, b_2)$  و  $P(b_2, a_3)$  متفاوت‌اند که انتظار هم می‌رفت زیرا  $A$  و  $B$  با هم جابه‌جا نمی‌شوند. بنابراین نتیجه‌ی اندازه‌گیری‌های متوالی  $A$  و  $B$  به ترتیب انجام شدن آنها بستگی دارد. احتمال به دست آوردن ۰ برای  $B$  و سپس ۱ برای  $A$  برابر با  $\frac{1}{6}$  است. از سوی دیگر، احتمال به دست آوردن ۱ برای  $A$  و سپس ۰ برای  $B$  برابر با  $\frac{1}{6}$  است. به هر حال، هرگاه مشاهده‌پذیرهای  $A$  و  $B$  با هم جابه‌جا شوند آنگاه نتیجه‌ی اندازه‌گیری‌ها به ترتیب انجام شدن آنها بستگی نخواهد داشت (این ایده در مسأله‌ی حل شده‌ی بعدی نشان داده شده است).

(ث) همانطور که در متن بیان شد، هر عملگر با ویژه‌مقدارهای غیرواکن به تنهایی یک CSCO را بنا می‌کند. از این رو هر یک از  $\{\hat{A}\}$  و  $\{\hat{B}\}$  یک CSCO را تشکیل می‌دهند زیرا ویژه‌مقدارهای آنها واکن نیست. اما مجموعه‌ی  $\{\hat{A}, \hat{B}\}$  یک CSCO را تشکیل نمی‌دهد زیرا عملگرهای  $\{\hat{A}\}$  و  $\{\hat{B}\}$  جابه‌جا نمی‌شوند.

## مسئله ۹-۳

سیستمی را در نظر بگیرید که حالت آن و دو مشاهده‌پذیر  $A$  و  $B$  به صورت زیر هستند:

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 4 \end{pmatrix}, \quad A = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & i \\ 0 & -i & 1 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

(الف) یک اندازه‌گیری انجام می‌دهیم که در آن ابتدا  $A$  و سپس (بی‌درنگ)  $B$  اندازه‌گیری می‌شود. احتمال به دست آوردن مقدار  $0$  برای  $A$  و مقدار  $1$  برای  $B$  را بیابید.

(ب) حال ابتدا  $B$  و سپس (بی‌درنگ)  $A$  را اندازه می‌گیریم. احتمال به دست آوردن مقدار  $1$  برای  $B$  و مقدار  $0$  برای  $A$  را بیابید.

(پ) نتیجه‌های (الف) و (ب) را با هم مقایسه کنید و آن را توضیح دهید.

(ت) کدام یک از مجموعه عملگرهای  $\{\hat{A}\}$ ،  $\{\hat{B}\}$  و  $\{\hat{A}, \hat{B}\}$  مجموعه‌ی کاملی از عملگرهای جابه‌جاشونده (CSCO) را تشکیل می‌دهد؟

## حل

(الف) اندازه‌گیری  $A$  هر یک از ویژه‌مقدارهای  $A$  را نتیجه می‌دهد که عبارتند از  $a_1 = 0$  (غیرواکن) و  $a_2 = a_3 = 2$  (واکن دوگانه). ویژه‌حالت‌های (به‌نحوا) به ترتیب برابرند با

$$|a_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ -i \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |a_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ i \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |a_3\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (20-1-3)$$

احتمال این که اندازه‌گیری  $A$  مقدار  $a_1 = 0$  را نتیجه بدهد، به صورت زیر به دست می‌آید:

$$P(a_1) = \frac{|\langle a_1 | \psi(t) \rangle|^2}{\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle} = \frac{36}{17} \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \times \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 0 & i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 4 \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{1}{17} \quad (20-2-3)$$

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \frac{1}{36} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 4 \end{pmatrix} = \frac{17}{36}$$

چون سیستم در ابتدا در حالت  $|\psi(t)\rangle$  بود، پس از اندازه‌گیری  $A$  که  $a_1 = 0$  را نتیجه می‌دهد،

سیستم (همانطور که طبق اصل موضوعی ۳ یادآوری شد) در حالت زیر قرار می‌گیرد:

$$|\phi\rangle = |a_1\rangle \langle a_1 | \psi(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \times \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 0 \\ -i \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 4 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ -i \\ 1 \end{pmatrix} \quad (203-3)$$

در مورد اندازه‌گیری  $B$  باید گفت که هر یک از ویژه‌بردارهای  $-1$  و  $1$  و  $b_2 = b_3 = 1$  را به دست می‌آوریم. ویژه‌بردارهای متناظر آنها عبارتند از

$$|b_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ i \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |b_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ -i \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |b_3\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (204-3)$$

چون اکنون سیستم در حالت  $|\phi\rangle$  است، احتمال به دست آوردن مقدار (واگن دوگانه‌ی)  $1$  و  $b_2 = b_3 = 1$  برای  $B$  برابر است با

$$\begin{aligned} P(b_2) &= \frac{|\langle b_2 | \phi \rangle|^2}{\langle \phi | \phi \rangle} + \frac{|\langle b_3 | \phi \rangle|^2}{\langle \phi | \phi \rangle} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ -i \\ 1 \end{pmatrix} \right|^2 + \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ -i \\ 1 \end{pmatrix} \right|^2 \\ &= 1 \end{aligned} \quad (205-3)$$

دلیل اینکه  $1 = P(b_2)$  است این است که حالت جدید  $|\phi\rangle$  یک ویژه‌حالت  $B$  است. در واقع داریم  $|\phi\rangle = \sqrt{2/3} |b_2\rangle$ .

در مجموع، هنگامی که ابتدا  $A$  و سپس  $B$  اندازه‌گیری می‌شود، احتمال یافتن مقدار  $0$  برای  $A$  و مقدار  $1$  برای  $B$  از ضرب احتمال‌های  $(202-3)$  و  $(205-3)$  به دست می‌آید:

$$P(a_1, b_2) = P(a_1)P(b_2) = \frac{1}{18} \quad (206-3)$$

(ب) سپس ابتدا  $B$  و بعد  $A$  را اندازه‌گیری می‌گیریم. چون سیستم در حالت  $|\psi(t)\rangle$  است و مقدار  $1$  و  $b_2 = b_3 = 1$

واکن دوگانه است، احتمال اندازه‌گیری ۱ برای  $B$  به صورت زیر است:

$$\begin{aligned}
 P'(b_2) &= \frac{|\langle b_2 | \psi(t) \rangle|^2}{\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle} + \frac{|\langle b_3 | \psi(t) \rangle|^2}{\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle} \\
 &= \frac{36}{17} \times \frac{1}{36} \left[ \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 4 \end{pmatrix} \right|^2 + \left| \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 4 \end{pmatrix} \right|^2 \right] \quad (207-3) \\
 &= \frac{9}{17}
 \end{aligned}$$

حال  $A$  را اندازه‌گیری می‌کنیم. حالت سیستم بی‌درنگ پس از اندازه‌گیری  $B$  (با مقدار  $b_2 = b_3 = 1$ ) از تصویر  $|\psi(t)\rangle$  بر روی  $|b_2\rangle$  و  $|b_3\rangle$  به دست می‌آید:

$$\begin{aligned}
 |\chi\rangle &= |b_2\rangle \langle b_2 | \psi(t) \rangle + |b_3\rangle \langle b_3 | \psi(t) \rangle \\
 &= \frac{1}{12} \begin{pmatrix} 0 \\ -i \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 4 \end{pmatrix} + \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 4 \end{pmatrix} \quad (208-3) \\
 &= \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 1 \\ -2i \\ 2i \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

بنابراین هنگامی که  $A$  اندازه‌گیری می‌شود، احتمال یافتن مقدار  $a_1 = 0$  برابر است با

$$P'(a_1) = \frac{|\langle a_1 | \chi \rangle|^2}{\langle \chi | \chi \rangle} = \frac{36}{9} \left| \frac{1}{6\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -2i \\ 2i \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{1}{9} \quad (209-3)$$

زیرا  $\langle \chi | \chi \rangle = \frac{9}{36}$  است.

بنابراین هنگامی که ابتدا  $B$  و سپس  $A$  اندازه‌گیری می‌شود، احتمال یافتن مقدار ۱ برای  $B$  و مقدار ۰ برای  $A$  از ضرب احتمال‌های (۲۰۷-۳) و (۲۰۹-۳) به دست می‌آید:

$$P(b_2, a_1) = P'(b_2)P'(a_1) = \frac{9}{17} \times \frac{1}{9} = \frac{1}{17} \quad (210-3)$$

(پ) همانطور که در (۲۰۶-۳) و (۲۱۰-۳) نشان داده شد، احتمال‌های  $P(b_2, a_1)$  و  $P(a_1, b_2)$  با هم برابرند که انتظار هم می‌رفت زیرا  $A$  و  $B$  با هم جابه‌جا می‌شوند. نتیجه‌ی اندازه‌گیری‌های متوالی  $A$  و  $B$  به ترتیب انجام شدن آنها بستگی ندارد.

(ت) هیچ‌کدام از  $\{\hat{A}\}$  و  $\{\hat{B}\}$  یک CSCO را تشکیل نمی‌دهند زیرا ویژه‌مقدارهای آنها واگن‌اند. مجموعه‌ی  $\{\hat{A}, \hat{B}\}$  یک CSCO را تشکیل می‌دهد زیرا عملگرهای  $\{\hat{A}\}$  و  $\{\hat{B}\}$  جابه‌جا می‌شوند. مجموعه‌ی ویژه‌حالت‌هایی که با  $\{\hat{A}, \hat{B}\}$  مشترک‌اند، عبارتند از

$$|a_2, b_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ i \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |a_1, b_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ -i \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |a_3, b_3\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (211-3)$$

مسأله‌ی ۱۰-۳

یک سیستم فیزیکی را در نظر بگیرید که دارای تعدادی مشاهده‌پذیر است که توسط ماتریس‌های زیر نمایش داده می‌شوند:

$$A = \begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 2 & 1 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \\ 0 & 3 & 0 \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} 0 & 3 & 0 \\ 3 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

(الف) نتیجه‌ی اندازه‌گیری این مشاهده‌پذیرها را بیابید.

(ب) کدام‌یک از این مشاهده‌پذیرها سازگارند؟ پایه‌ای از ویژه‌بردارهای مشترک این مشاهده‌پذیرها را ارائه کنید.

(پ) کدام‌یک از مجموعه‌ی عملگرهای  $\{\hat{A}\}, \{\hat{B}\}, \{\hat{C}\}, \{\hat{D}\}$  و ترکیب‌های مختلف آنها مانند  $\{\hat{A}, \hat{B}\}, \{\hat{A}, \hat{C}\}, \{\hat{B}, \hat{C}\}, \{\hat{A}, \hat{D}\}, \{\hat{B}, \hat{C}\}, \{\hat{A}, \hat{D}\}, \{\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}\}$  مجموعه‌ی کاملی از عملگرهای جابه‌جاشونده (CSCO) را تشکیل می‌دهند؟

حل

(الف) اندازه‌گیری  $A, B, C$  و  $D$  نتیجه‌های  $a_1 = -1, a_2 = 3, a_3 = 5, b_1 = -3, b_2 = 1, c_1 = -1/\sqrt{2}, c_2 = 0, c_3 = 1/\sqrt{2}, d_1 = -1, d_2 = d_3 = 1$  را به دست می‌دهد. ویژه‌بردارهای  $A, B, C$  و  $D$  به ترتیب عبارتند از

$$|a_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |a_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |a_3\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (212-3)$$

$$|b_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |b_2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |b_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (213-3)$$

$$|c_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{26}} \begin{pmatrix} 3 \\ -\sqrt{13} \\ 2 \end{pmatrix}, \quad |c_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{13}} \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ -3 \end{pmatrix}, \quad |c_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{26}} \begin{pmatrix} 3 \\ \sqrt{13} \\ 2 \end{pmatrix} \quad (214-3)$$

$$|d_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ i \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |d_2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |d_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ i \end{pmatrix} \quad (215-3)$$

(ب) می‌توانیم ثابت کنیم که در بین مشاهده‌پذیرهای  $A$ ،  $B$ ،  $C$  و  $D$  تنها  $A$  و  $B$  سازگارند زیرا ماتریس‌های  $A$  و  $B$  با هم جابه‌جا می‌شوند و بقیه‌ی ماتریس‌ها با یکدیگر جابه‌جا نمی‌شوند ( $A$  با  $B$  یا  $C$  یا  $D$  و  $D$  با یکدیگر جابه‌جا نمی‌شوند).

از (۲۱۲-۳) و (۲۱۳-۳) می‌بینیم که سه حالت  $|a_1, b_1\rangle$ ،  $|a_2, b_2\rangle$  و  $|a_3, b_3\rangle$ :

$$|a_1, b_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |a_2, b_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |a_3, b_3\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (216-3)$$

یک پایه‌ی کامل مشترک را برای  $A$  و  $B$  تشکیل می‌دهند زیرا  $\hat{A}|a_n, b_m\rangle = a_n|a_n, b_m\rangle$  و  $\hat{B}|a_n, b_m\rangle = b_m|a_n, b_m\rangle$  است.

(پ) ابتدا با توجه به این که ویژه‌مقدارهای عملگرهای  $\{\hat{A}\}$ ،  $\{\hat{B}\}$  و  $\{\hat{C}\}$  همگی غیرواکن‌اند، هر یک از  $\{\hat{A}\}$ ،  $\{\hat{B}\}$  و  $\{\hat{C}\}$  جداگانه یک CSCO را تشکیل می‌دهد. علاوه بر این، چون دو ویژه‌مقدار  $\{\hat{D}\}$  واکن‌اند ( $d_2 = d_3 = 1$ )، عملگر  $\{\hat{D}\}$  یک CSCO را تشکیل نمی‌دهد.

حال از بین ترکیب‌های مختلف  $\{\hat{A}, \hat{B}\}$ ،  $\{\hat{A}, \hat{C}\}$ ،  $\{\hat{B}, \hat{C}\}$ ،  $\{\hat{A}, \hat{D}\}$  و  $\{\hat{B}, \hat{D}\}$  تنها  $\{\hat{A}, \hat{B}\}$  یک CSCO را تشکیل می‌دهد زیرا  $\{\hat{A}\}$  و  $\{\hat{B}\}$  تنها عملگرهایی هستند که جابه‌جا می‌شوند و مجموعه‌ی ویژه‌مقدارهای مشترک آنها با  $|a_1, b_1\rangle$ ،  $|a_2, b_2\rangle$  و  $|a_3, b_3\rangle$  داده می‌شود.

### مسأله‌ی ۱۱-۳

سیستمی را در نظر بگیرید که حالت اولیه‌ی آن  $|\psi(0)\rangle$  و هامیلتونی آن به صورت زیر باشد:

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \\ 4 \end{pmatrix}, \quad H = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 5 \\ 0 & 5 & 0 \end{pmatrix}$$

(الف) هرگاه انرژی اندازه‌گیری شود چه مقدارهایی را یا چه احتمال‌هایی به دست خواهیم آورد؟

(ب) حالت سیستم را در زمان بعدی  $t$  بیابید. شاید نیاز پیدا کنید  $|\psi(0)\rangle$  را برحسب ویژه‌بردارهای  $H$  بسط دهید.

(پ) انرژی کل سیستم را در لحظه‌ی  $t = 0$  و در زمان بعدی  $t$  بیابید. آیا این مقادارها با هم تفاوت دارند؟

(ت) آیا  $\{\hat{H}\}$  مجموعه‌ی کاملی از عملگرهای جابه‌جاشونده را تشکیل می‌دهد؟

حل

(الف) اندازه‌گیری انرژی مقدارهای  $E_1 = -5$ ,  $E_2 = 3$ ,  $E_3 = 5$  و به ترتیب ویژه‌بردارهای (متعامد بهنجار) این مقادارها را نتیجه می‌دهد:

$$|\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |\phi_2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\phi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (217-3)$$

احتمال‌های یافتن مقدارهای  $E_1 = -5$ ,  $E_2 = 3$ ,  $E_3 = 5$  از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$P(E_1) = |\langle \phi_1 | \psi(0) \rangle|^2 = \left| \frac{1}{5\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \\ 4 \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{1}{25} \quad (218-3)$$

$$P(E_2) = |\langle \phi_2 | \psi(0) \rangle|^2 = \left| \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \\ 4 \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{9}{25} \quad (219-3)$$

$$P(E_3) = |\langle \phi_3 | \psi(0) \rangle|^2 = \left| \frac{1}{5\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \\ 4 \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{1}{25} \quad (220-3)$$

(ب) برای یافتن  $|\psi(t)\rangle$  باید  $|\psi(0)\rangle$  را برحسب ویژه‌بردارهای (217-3) بسط دهیم:

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \\ 4 \end{pmatrix} = \frac{2\sqrt{2}}{5} |\phi_1\rangle + \frac{3}{5} |\phi_2\rangle + \frac{2\sqrt{2}}{5} |\phi_3\rangle \quad (221-3)$$



ازین رو

$$|\psi(t)\rangle = \frac{\sqrt{2}}{\delta} e^{-iE_1 t} |\phi_1\rangle + \frac{3}{\delta} e^{-iE_2 t} |\phi_2\rangle + \frac{\sqrt{2}}{\delta} e^{-iE_3 t} |\phi_3\rangle = \frac{1}{\delta} \begin{pmatrix} 3e^{-3it} \\ -2i \sin \delta t \\ 2 \cos \delta t \end{pmatrix} \quad (222-3)$$

(پ) می‌توانیم انرژی در لحظه‌ی  $t = 0$  را به سه روش کاملاً متفاوت محاسبه کنیم. روش نخست از نمادگذاری براکت استفاده می‌کند. چون  $\langle \psi(0) | \psi(0) \rangle = 1$ ،  $\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{nm}$  و  $\hat{H} |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle$  داریم:

$$\begin{aligned} E(0) &= \langle \psi(0) | \hat{H} | \psi(0) \rangle \\ &= \frac{\lambda}{2\delta} \langle \phi_1 | \hat{H} | \phi_1 \rangle + \frac{9}{2\delta} \langle \phi_2 | \hat{H} | \phi_2 \rangle + \frac{\lambda}{2\delta} \langle \phi_3 | \hat{H} | \phi_3 \rangle \quad (223-3) \\ &= \frac{\lambda}{2\delta} (-5) + \frac{9}{2\delta} (3) + \frac{\lambda}{2\delta} (5) = \frac{27}{2\delta} \end{aligned}$$

روش دوم از جبر ماتریسی استفاده می‌کند:

$$E(0) = \langle \phi(0) | \hat{H} | \psi(0) \rangle = \frac{1}{2\delta} \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 5 \\ 0 & 5 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix} = \frac{27}{2\delta} \quad (224-3)$$

روش سوم از احتمال‌ها استفاده می‌کند:

$$E(0) = \sum_{n=1}^3 P(E_n) E_n = \frac{\lambda}{2\delta} (-5) + \frac{9}{2\delta} (3) + \frac{\lambda}{2\delta} (5) = \frac{27}{2\delta} \quad (225-3)$$

انرژی در لحظه‌ی  $t$  برابر است با

$$\begin{aligned} E(t) &= \langle \psi(t) | \hat{H} | \psi(t) \rangle = \frac{\lambda}{2\delta} e^{iE_1 t} e^{-iE_1 t} \langle \phi_1 | \hat{H} | \phi_1 \rangle + \frac{9}{2\delta} e^{iE_2 t} e^{-iE_2 t} \langle \phi_2 | \hat{H} | \phi_2 \rangle \\ &+ \frac{\lambda}{2\delta} e^{iE_3 t} e^{-iE_3 t} \langle \phi_3 | \hat{H} | \phi_3 \rangle = \frac{\lambda}{2\delta} (-5) + \frac{9}{2\delta} (3) + \frac{\lambda}{2\delta} (5) = \frac{27}{2\delta} = E(0) \quad (226-3) \end{aligned}$$

همانطور که انتظار می‌رفت،  $E(t) = E(0)$  است زیرا  $d\langle \hat{H} \rangle / dt = 0$

(ت) چون هیچ‌یک از ویژه‌مقدارهای  $\hat{H}$  واگن نیستند، ویژه‌بردارهای  $|\phi_1\rangle$ ،  $|\phi_2\rangle$  و  $|\phi_3\rangle$  یک پایه‌ی کامل (متعامد بهنجار) را تشکیل می‌دهند. بنابراین  $\{\hat{H}\}$  مجموعه‌ی کاملی از عملگرهای جابه‌جاشونده را تشکیل می‌دهد.

## مسئله‌ی ۱۲-۳

- (الف) براکت پواسون بین مؤلفه‌های  $x$  و  $y$  تکانه‌ی زاویه‌ای مداری کلاسیک را محاسبه کنید.  
 (ب) جابه‌جاگر بین مؤلفه‌های  $x$  و  $y$  عملگر تکانه‌ی زاویه‌ای مداری را محاسبه کنید.  
 (پ) نتیجه‌های به‌دست آمده در (الف) و (ب) را مقایسه کنید.

حل

(الف) با استفاده از تعریف (۱۱۳-۳) می‌توانیم براکت پواسون  $\{l_x, l_y\}$  را به صورت زیر بنویسیم:

$$\{l_x, l_y\} = \sum_{j=1}^3 \left( \frac{\partial l_x}{\partial q_j} \frac{\partial l_y}{\partial p_j} - \frac{\partial l_x}{\partial p_j} \frac{\partial l_y}{\partial q_j} \right) \quad (۲۲۷-۳)$$

که در آن  $x = q_1, y = q_2, z = q_3, p_x = p_1, p_y = p_2, p_z = p_3$  چون  $l_x = yp_z - zp_y$  و  $l_y = zp_x - xp_z$  تنها مشتق‌های جزئی که باقی می‌مانند عبارتند از  $\partial l_x / \partial z = -p_y, \partial l_x / \partial p_z = y, \partial l_y / \partial z = p_x, \partial l_y / \partial p_z = -x$  بنابراین داریم:

$$\{l_x, l_y\} = \frac{\partial l_x}{\partial z} \frac{\partial l_y}{\partial p_z} - \frac{\partial l_x}{\partial p_z} \frac{\partial l_y}{\partial z} = xp_y - yp_x = l_z \quad (۲۲۸-۳)$$

(ب) مؤلفه‌های  $\hat{L}$  در رابطه‌های (۲۶-۳) تا (۲۸-۳) فهرست شده‌اند:  $\hat{L}_x = \hat{Y}\hat{P}_z - \hat{Z}\hat{P}_y$  و  $\hat{L}_y = \hat{Z}\hat{P}_x - \hat{X}\hat{P}_z$  و  $\hat{L}_z = \hat{X}\hat{P}_y - \hat{Y}\hat{P}_x$  چون  $\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z}$  و  $\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z$  دو به دو جابه‌جا می‌شوند، داریم:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= [\hat{Y}\hat{P}_z - \hat{Z}\hat{P}_y, \hat{Z}\hat{P}_x - \hat{X}\hat{P}_z] \\ &= [\hat{Y}\hat{P}_z, \hat{Z}\hat{P}_x] - [\hat{Y}\hat{P}_z, \hat{X}\hat{P}_z] - [\hat{Z}\hat{P}_y, \hat{Z}\hat{P}_x] + [\hat{Z}\hat{P}_y, \hat{X}\hat{P}_z] \\ &= \hat{Y}[\hat{P}_z, \hat{Z}]\hat{P}_x + \hat{X}[\hat{Z}, \hat{P}_z]\hat{P}_y = i\hbar(\hat{X}\hat{P}_y - \hat{Y}\hat{P}_x) \\ &= i\hbar\hat{L}_z \end{aligned} \quad (۲۲۹-۳)$$

(پ) مقایسه‌ی (۲۲۸-۳) و (۲۲۹-۳) نشان می‌دهد که

$$\{l_x, l_y\} = l_z \longrightarrow [\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z \quad (۲۳۰-۳)$$

## مسئله‌ی ۱۳-۳

یک نوسانگر باردار با بار مثبت  $q$  و جرم  $m$  را در نظر بگیرید که تحت تأثیر میدان الکتریکی نوسانی  $E \cos \omega t$  قرار می‌گیرد. هامیلتونی ذره برابر با  $\hat{H} = \hat{P}^2 / (2m) + k\hat{X}^2 / 2 + qE \cdot \hat{X} \cos \omega t$  است. (الف)  $d\langle \hat{H} \rangle / dt$  و  $d\langle \hat{P} \rangle / dt, d\langle \hat{X} \rangle / dt$  را محاسبه کنید.

(ب) معادله‌ی مربوط به  $d\langle\hat{X}\rangle/dt$  را حل کنید و  $\langle\hat{X}\rangle(t)$  را به دست آورید به طوری که  $\langle\hat{X}\rangle(0) = x_0$  باشد.

حل

(الف) چون عملگر مکان  $\hat{X}$  به صورت صریح به زمان بستگی ندارد (یعنی  $\partial\hat{X}/\partial t = 0$  است)، معادله‌ی (۳-۸۸) نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{X}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{X}, \hat{H}]\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle\left[\hat{X}, \frac{\hat{P}^2}{2m}\right]\rangle = \frac{\langle\hat{P}\rangle}{m} \quad (۳-۲۳۱)$$

حال چون  $[\hat{P}, \hat{X}] = -i\hbar$ ،  $[\hat{P}, \hat{X}^2] = -2i\hbar\hat{X}$  و  $\partial\hat{P}/\partial t = 0$  داریم:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle\hat{P}\rangle &= \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{P}, \hat{H}]\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle\left[\hat{P}, \frac{1}{2}k\hat{X}^2 + qE_0\hat{X}\cos\omega t\right]\rangle \\ &= -k\langle\hat{X}\rangle - qE_0\cos\omega t \end{aligned} \quad (۳-۲۳۲)$$

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{H}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{H}, \hat{H}]\rangle + \langle\frac{\partial\hat{H}}{\partial t}\rangle = \langle\frac{\partial\hat{H}}{\partial t}\rangle = -qE_0\omega\langle\hat{X}\rangle\sin\omega t \quad (۳-۲۳۳)$$

(ب) برای یافتن  $\langle\hat{X}\rangle$  باید از (۳-۲۳۱) نسبت به زمان مشتق بگیریم و سپس از (۳-۲۳۲) استفاده کنیم:

$$\frac{d^2}{dt^2}\langle\hat{X}\rangle = \frac{1}{m}\frac{d}{dt}\langle\hat{P}\rangle = -\frac{k}{m}\langle\hat{X}\rangle - \frac{qE_0}{m}\cos\omega t \quad (۳-۲۳۴)$$

جواب این معادله برابر است با

$$\langle\hat{X}\rangle(t) = \langle\hat{X}\rangle(0)\cos\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t\right) - \frac{qE_0}{m\omega}\sin\omega t + A \quad (۳-۲۳۵)$$

که در آن  $A$  ثابتی است که می‌توان آن را از شرایط اولیه تعیین کرد. چون  $\langle\hat{X}\rangle(0) = x_0$  است، داریم  $A = 0$ .

$$\langle\hat{X}\rangle(t) = x_0\cos\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t\right) - \frac{qE_0}{m\omega}\sin\omega t \quad (۳-۲۳۶)$$

### مسأله‌ی ۳-۱۴

یک ذره‌ی آزاد یک‌بعدی به جرم  $m$  را در نظر بگیرید که مکان و تکانه‌ی آن در لحظه‌ی  $t = 0$  به ترتیب با  $x_0$  و  $p_0$  مشخص می‌شوند.

(الف)  $\langle\hat{P}\rangle(t)$  را محاسبه کنید و نشان دهید که  $\langle\hat{X}(t)\rangle = p_0 t/m + x_0$ .

(ب) نشان دهید که  $d\langle\hat{P}^2\rangle/dt = 0$  و  $d\langle\hat{X}^2\rangle/dt = 2\langle\hat{P}\hat{X}\rangle/m + \hbar/m$ .

(ب) نشان دهید که افت و خیزهای مکان و تکانه به وسیله‌ی رابطه‌ی  $d^2(\Delta x)^2/dt^2 = 2(\Delta p)^2/m^2$  به هم مربوطند و جواب این معادله از رابطه‌ی  $(\Delta x)^2 = (\Delta p)^2 t^2/m^2 + (\Delta x)_0^2$  به دست می‌آید که در آن  $(\Delta x)_0$  و  $(\Delta p)_0$  افت و خیزهای اولیه‌اند.

حل

(الف) از معادله‌های اهرنفت  $d\langle\hat{P}\rangle/dt = \langle[\hat{P}, \hat{V}(x, t)]\rangle/i\hbar$  که در (۱۳۴-۳) نشان داده شد و با توجه به این که برای یک ذره‌ی آزاد  $\hat{V}(x, t) = 0$  است، می‌بینیم که  $d\langle\hat{P}\rangle/dt = 0$ . همانطور که انتظار می‌رفت، این به  $\langle\hat{P}\rangle(t) = p_0$  می‌انجامد زیرا تکانه‌ی خطی یک ذره‌ی آزاد پایسته است. با وارد کردن  $\langle\hat{P}\rangle = p_0$  در معادله‌ی دیگر اهرنفت  $d\langle\hat{X}\rangle/dt = \langle\hat{P}\rangle/m$  (۱۳۲-۳) را ببینید، به دست می‌آوریم:

$$\frac{d\langle\hat{X}\rangle}{dt} = \frac{1}{m}p_0 \quad (۲۳۷-۳)$$

جواب این معادله با شرط اولیه‌ی  $\langle\hat{X}\rangle(0) = x_0$  برابر است با

$$\langle\hat{X}\rangle(t) = \frac{p_0}{m}t + x_0 \quad (۲۳۸-۳)$$

(ب) ابتدا اثبات  $d\langle\hat{P}^2\rangle/dt = 0$  سراسر است. چون  $[\hat{P}^2, \hat{H}] = [\hat{P}^2, \hat{P}^2/2m] = 0$  و  $\partial\hat{P}^2/\partial t = 0$  است (عملگر تکانه به زمان بستگی ندارد)، (۱۲۴-۳) نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{P}^2\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{P}^2, \hat{H}]\rangle + \left\langle\frac{\partial\hat{P}^2}{\partial t}\right\rangle = 0 \quad (۲۳۹-۳)$$

برای  $d\langle\hat{X}^2\rangle/dt$  داریم:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{X}^2\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{X}^2, \hat{H}]\rangle = \frac{1}{2im\hbar}\langle[\hat{X}^2, \hat{P}^2]\rangle \quad (۲۴۰-۳)$$

زیرا  $\partial\hat{X}^2/\partial t = 0$  است. با استفاده از  $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$  به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} [\hat{X}^2, \hat{P}^2] &= \hat{P}[\hat{X}^2, \hat{P}] + [\hat{X}^2, \hat{P}]\hat{P} \\ &= \hat{P}\hat{X}[\hat{X}, \hat{P}] + \hat{P}[\hat{X}, \hat{P}]\hat{X} + \hat{X}[\hat{X}, \hat{P}]\hat{P} + [\hat{X}, \hat{P}]\hat{X}\hat{P} \quad (۲۴۱-۳) \\ &= 2i\hbar(\hat{P}\hat{X} + \hat{X}\hat{P}) = 2i\hbar(2\hat{P}\hat{X} + i\hbar) \end{aligned}$$

ازاین رو

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{X}^2\rangle = \frac{2}{m}\langle\hat{P}\hat{X}\rangle + \frac{i\hbar}{m} \quad (۲۴۲-۳)$$

(پ) چون افت و خیز مکان از رابطه‌ی  $\langle \hat{X}^2 \rangle - \langle \hat{X} \rangle^2 = (\Delta x)^2$  به دست می‌آید، داریم:

$$\frac{d(\Delta x)^2}{dt} = \frac{d\langle \hat{X}^2 \rangle}{dt} - 2\langle \hat{X} \rangle \frac{d\langle \hat{X} \rangle}{dt} = \frac{2}{m} \langle \hat{P} \hat{X} \rangle + \frac{i\hbar}{m} - \frac{2}{m} \langle \hat{X} \rangle \langle \hat{P} \rangle \quad (243-3)$$

در به دست آوردن این عبارت از (۲۴۲-۳) و  $d\langle \hat{X} \rangle/dt = \langle \hat{P} \rangle/m$  استفاده کرده‌ایم. حال با توجه به  $d(\langle \hat{X} \rangle \langle \hat{P} \rangle)/dt = \langle \hat{P} \rangle d\langle \hat{X} \rangle/dt = \langle \hat{P} \rangle^2/m$  و

$$\frac{d\langle \hat{P} \hat{X} \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{P} \hat{X}, \hat{H}] \rangle = \frac{1}{2im\hbar} \langle [\hat{P} \hat{X}, \hat{P}^2] \rangle = \frac{1}{m} \langle \hat{P}^2 \rangle \quad (244-3)$$

می‌توانیم مشتق دوم (۲۴۳-۳) نسبت به زمان را به صورت زیر بنویسیم:

$$\frac{d^2(\Delta x)^2}{dt^2} = \frac{2}{m} \left( \frac{d\langle \hat{P} \hat{X} \rangle}{dt} - \frac{d\langle \hat{X} \rangle \langle \hat{P} \rangle}{dt} \right) = \frac{2}{m^2} \left( \langle \hat{P}^2 \rangle - \langle \hat{P} \rangle^2 \right) = \frac{2}{m^2} (\Delta p)^2 \quad (245-3)$$

که در آن  $\langle \hat{P} \rangle^2 - \langle \hat{P} \rangle^2 = \langle \hat{P}^2 \rangle_0 - \langle \hat{P} \rangle_0^2 = (\Delta p)_0^2$ . تکانه‌ی یک ذره‌ی آزاد یک ثابت حرکت است. می‌توانیم ثابت کنیم که جواب معادله‌ی دیفرانسیل (۲۴۵-۳) از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$(\Delta x)^2 = \frac{1}{m^2} (\Delta p)_0^2 t^2 + (\Delta x)_0^2 \quad (246-3)$$

این افت و خیز مشابه با پهن‌شدگی بسته‌ی موج گاوسی است که در فصل ۱ به دست آوردیم.

## ۱۰-۳ تمرین‌ها

۱. یک ذره در یک جعبه‌ی پتانسیل نامتناهی با دیواره‌هایی در  $x = a$  و  $x = 0$  (یعنی پتانسیل به‌ازای  $x < 0$  و  $x > a$  نامتناهی و در بین آنها صفر است) تابع موج اولیه‌ی زیر را دارد:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{5a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \frac{2}{\sqrt{5a}} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)$$

(الف) نتیجه‌های ممکن اندازه‌گیری انرژی سیستم و احتمال‌های متناظر را بیابید.

(ب) شکل تابع موج را پس از این اندازه‌گیری بیابید.

(پ) اگر انرژی بی‌درنگ دوباره اندازه گرفته شود آنگاه احتمال‌های نسبی مقدارهای ممکن چقدرند؟

۲. فرض کنید که  $\psi_n(x)$  حالت‌های مانای متعامد بهنجار یک سیستم متناظر با انرژی  $E_n$  را نمایش می‌دهد و فرض کنید که تابع موج بهنجار سیستم در لحظه‌ی  $t = 0$  برابر با  $\psi(x, 0)$  است و اندازه‌گیری انرژی مقدار  $E_1$  با احتمال  $1/2$ ،  $E_2$  با احتمال  $3/8$  و  $E_3$  با احتمال  $1/8$  را نتیجه می‌دهد.

(الف) عمومی‌ترین بسط برای  $\psi(x, 0)$  که با این اطلاعات سازگار باشد را بنویسید.

(ب) بسط تابع موج سیستم در لحظه‌ی  $t$  ( $\psi(x, t)$ ) چیست؟

(پ) نشان دهید که مقدار چشمداشتی هامیلتونی با گذشت زمان تغییر نمی‌کند.

۳. نوترونی را در نظر بگیرید که به یک چاه پتانسیل نامتناهی به پهنای  $a = 8 \text{ fm}$  محدود است. فرض می‌شود که در لحظه‌ی  $t = 0$  نوترون در حالت زیر قرار دارد:

$$\Psi(x, 0) = \sqrt{\frac{4}{9a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \sqrt{\frac{2}{9a}} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) + \sqrt{\frac{8}{9a}} \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right)$$

(الف) اگر اندازه‌گیری انرژی روی سیستم انجام شود آنگاه چه مقدارهایی برای انرژی و با چه احتمال‌هایی یافت خواهد شد؟ پاسخ خود را برحسب MeV بیان کنید (جرم نوترون برابر با  $939 \text{ MeV}$  و  $m_n c^2 \simeq 197 \text{ MeV fm}$  است).

(ب) اگر این اندازه‌گیری روی تعداد زیادی سیستم یکسان تکرار شود آنگاه مقدار میانگین انرژی که به دست خواهد آمد، چقدر است؟ دوباره پاسخ خود را برحسب MeV بیان کنید.

(پ) با استفاده از اصل عدم قطعیت، مرتبه‌ی اندازه‌ی سرعت نوترون در این چاه را به صورت تابعی از سرعت نور  $c$  تخمین بزنید.

۴. هامیلتونی نوسانگر هماهنگ بدون بعد زیر را در نظر بگیرید:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \hat{P}^2 + \frac{1}{2} \hat{X}^2 \quad \text{با} \quad \hat{P} = -i \frac{d}{dx}$$

(الف) نشان دهید که دو تابع موج  $\psi_0(x) = e^{-x^2/2}$  و  $\psi_1(x) = x e^{-x^2/2}$  ویژه‌تابع‌های  $\hat{H}$  به ترتیب با ویژه‌مقدارهای  $1/2$  و  $3/2$  هستند.

(ب) مقدار ضریب  $\alpha$  را طوری بیابید که  $\psi_2(x) = (1 + \alpha x^2) e^{-x^2/2}$  نسبت به  $\psi_0(x)$  متعامد باشد. سپس نشان دهید که  $\psi_2(x)$  یک ویژه‌تابع  $\hat{H}$  با ویژه‌مقدار  $5/2$  است.

۵. تابع موج یک نوسانگر هماهنگ بدون بعد که هامیلتونی آن برابر با  $\hat{H} = \frac{1}{2} \hat{P}^2 + \frac{1}{2} \hat{X}^2$  است را در نظر بگیرید که در لحظه‌ی  $t = 0$  با تابع زیر داده می‌شود:

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{8\pi}} \phi_0(x) + \frac{1}{\sqrt{18\pi}} \phi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{8\pi}} e^{-x^2/2} + \frac{1}{\sqrt{18\pi}} (1 - 2x^2) e^{-x^2/2}$$

(الف) عبارت مربوط به تابع موج نوسانگر در زمان بعدی  $t$  را بیابید.

(ب) احتمال  $P_0$  برای یافتن سیستم در یک ویژه‌حالت با انرژی  $1/2$  و احتمال  $P_2$  یافتن سیستم در یک ویژه‌حالت با انرژی  $5/2$  را محاسبه کنید.

(پ) چگالی احتمال  $\rho(x, t)$  و چگالی جریان  $\mathbf{J}(x, t)$  را محاسبه کنید.

(ت) ثابت کنید که احتمال پایسته است یعنی نشان دهید که  $\partial\rho/\partial t + \nabla \cdot \mathbf{J}(x, t) = 0$ .

۶. ذره‌ای به جرم  $m$  در یک چاه پتانسیل نامتناهی به طول  $a$  در  $t = 0$  دارای تابع موج اولیه‌ی:

$$\psi(x, 0) = \sqrt{\frac{3}{5a}} \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) + \frac{1}{\sqrt{5a}} \sin\left(\frac{5\pi x}{a}\right)$$

و طیف انرژی  $E_n = -\hbar^2 \pi^2 n^2 / (2ma^2)$  است.

(الف)  $\psi(x, t)$  را در هر زمان بعدی  $t$  بیابید. سپس  $\frac{\partial\rho}{\partial t}$  و بردار چگالی جریان احتمال  $\mathbf{J}(x, t)$  را محاسبه کنید و ثابت کنید که  $\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}(x, t) = 0$ . به یاد بیاورید که  $\rho = \psi^*(x, t)\psi(x, t)$  و  $\mathbf{J}(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} (\psi(x, t)\nabla\psi^*(x, t) - \psi^*(x, t)\nabla\psi(x, t))$ .

۷. سیستمی را در نظر بگیرید که حالت اولیه‌ی آن در  $t = 0$  برحسب مجموعه‌ی کامل و متعامد بهنجار سه بردار  $|\phi_1\rangle$ ،  $|\phi_2\rangle$  و  $|\phi_3\rangle$  به صورت  $|\psi(0)\rangle = 1/\sqrt{3}|\phi_1\rangle + A|\phi_2\rangle + 1/\sqrt{6}|\phi_3\rangle$  معلوم است که در آن  $A$  یک ثابت حقیقی است.

(الف)  $A$  را بیابید به طوری که  $|\psi(0)\rangle$  بهنجار باشد.  
 (ب) اگر انرژی‌های متناظر با  $|\phi_1\rangle$ ،  $|\phi_2\rangle$  و  $|\phi_3\rangle$  به ترتیب به صورت  $E_1$ ،  $E_2$  و  $E_3$  معلوم باشند آنگاه حالت  $|\psi(t)\rangle$  سیستم را در زمان بعدی  $t$  بنویسید.  
 (پ) احتمال یافتن سیستم در لحظه‌ی  $t$  در حالت  $|\phi_3\rangle$  را تعیین کنید.

۸. مؤلفه‌های حالت اولیه‌ی  $|\psi_i\rangle$  یک سیستم کوانتومی برحسب یک پایه‌ی کامل و متعامد بهنجار سه حالت  $|\phi_1\rangle$ ،  $|\phi_2\rangle$  و  $|\phi_3\rangle$  به صورت زیر معلوم‌اند:

$$\langle\phi_1|\psi_i\rangle = \frac{i}{\sqrt{3}}, \quad \langle\phi_2|\psi_i\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}, \quad \langle\phi_3|\psi_i\rangle = 0$$

احتمال یافتن سیستم در حالت  $|\psi_f\rangle$  را محاسبه کنید که مؤلفه‌های آن برحسب همان پایه به صورت زیر داده می‌شوند:

$$\langle\phi_1|\psi_f\rangle = \frac{1+i}{\sqrt{3}}, \quad \langle\phi_2|\psi_f\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}, \quad \langle\phi_3|\psi_f\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}$$

۹. (الف) براکت پواسون  $\{x^2, p^2\}$  را حساب کنید.

(ب) جابه‌جاگر  $[\hat{X}^2, \hat{P}^2]$  را برحسب  $\hat{X}\hat{P}$  به اضافه‌ی یک ثابت برحسب  $\hbar^2$  بیان کنید.

(پ) حد کلاسیکی  $[\hat{x}^2, \hat{p}^2]$  را برای این عبارت بیابید و سپس آن را با نتیجه‌ی قسمت (الف) مقایسه کنید.

۱۰. یک ذره‌ی مقید در یک پتانسیل یک‌بعدی تابع موج زیر را دارد:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\delta ikx} \cos(\frac{3\pi x}{a}) & -a/2 \leq x \leq a/2 \\ 0 & |x| > a/2 \end{cases}$$

(الف) ثابت  $A$  را محاسبه کنید به طوری که  $\psi(x)$  بهنجار باشد.

(ب) احتمال یافتن ذره بین  $x = 0$  و  $x = a/4$  را محاسبه کنید.

۱۱. (الف) نشان دهید که هر یک از مؤلفه‌های عملگر تکانه‌ی یک ذره با عملگر انرژی جنبشی آن سازگار است.

(ب) نشان دهید که عملگر تکانه با عملگر هامیلتونی سازگار است تنها اگر عملگر پتانسیل در مختصات فضایی ثابت باشد.

۱۲. یک سیستم فیزیکی را در نظر بگیرید که هامیلتونی  $H$  آن و عملگر  $A$  به صورت زیر معلوم‌اند:

$$H = \mathcal{E}_0 \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad A = a_0 \begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

که در آن  $\mathcal{E}_0$  دارای ابعاد انرژی است.

(الف) آیا  $H$  و  $A$  جابه‌جا می‌شوند؟ اگر پاسخ مثبت است آنگاه پایه‌ای از ویژه‌بردارهای مشترک  $H$  و  $A$  را ارائه کنید.

(ب) کدام‌یک از مجموعه عملگرهای  $\{\hat{H}\}$ ،  $\{\hat{A}\}$ ،  $\{\hat{H}, \hat{A}\}$  و  $\{\hat{H}^2, \hat{A}\}$  مجموعه‌ی کاملی از عملگرهای جابه‌جاشونده (CSCO) را تشکیل می‌دهند؟

۱۳. نشان دهید که تنها زمانی می‌توان تکانه و انرژی کل را به صورت همزمان اندازه گرفت که پتانسیل در همه‌جا ثابت باشد.

۱۴. حالت اولیه‌ی یک سیستم برحسب چهار ویژه‌تابع متعامد بهنجار انرژی  $|\phi_1\rangle$ ،  $|\phi_2\rangle$ ،  $|\phi_3\rangle$  و  $|\phi_4\rangle$  به صورت زیر است:

$$|\psi_0\rangle = |\psi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|\phi_1\rangle + \frac{1}{4}|\phi_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|\phi_3\rangle + \frac{1}{4}|\phi_4\rangle$$

(الف) اگر چهارکت  $|\phi_1\rangle$ ،  $|\phi_2\rangle$ ،  $|\phi_3\rangle$  و  $|\phi_4\rangle$  ویژه‌بردارهای هامیلتونی  $\hat{H}$  باشند با انرژی‌های  $E_1$ ،  $E_2$ ،  $E_3$  و  $E_4$ ، آنگاه حالت  $|\psi(t)\rangle$  در زمان بعدی  $t$  را بیابید.



(ب) نتایج ممکن اندازه‌گیری انرژی این سیستم چیست و با چه احتمال‌هایی روی خواهند داد؟

(پ) مقدار چشمداشتی هامیلتونی سیستم در  $t = 0$  و  $t = 10s$  را بیابید.

۱۵. بسط مجموعه‌ی کامل تابع موج اولیه‌ی  $\psi(x, 0)$  یک سیستم برحسب ویژه‌تابع‌های متعامد بهنجار انرژی  $\phi_n(x)$  سیستم دارای سه جمله است ( $n = 1, 2, 3$ ). اندازه‌گیری انرژی روی سیستم نشان داده شده با  $\psi(x, 0)$  سه مقدار  $E_1$  و  $E_2$  را با احتمال  $1/4$  و  $E_3$  را با احتمال  $1/2$  نتیجه می‌دهد.

(الف)  $\psi(x, 0)$  را برحسب  $\phi_1(x)$ ،  $\phi_2(x)$  و  $\phi_3(x)$  بنویسید.

(ب)  $\psi(x, 0)$  را در زمان بعدی  $t$  (یعنی  $\psi(x, t)$ ) بیابید.

۱۶. سیستمی را در نظر بگیرید که هامیلتونی  $H$  و عملگر  $A$ ی آن از ماتریس‌های زیر به دست می‌آیند:

$$H = \mathcal{E}_0 \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 2i \\ 0 & -2i & 0 \end{pmatrix}, \quad A = a_0 \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

(الف) اگر انرژی را اندازه بگیریم آنگاه چه مقدارهایی را به دست خواهیم آورد؟

(ب) فرض کنید هنگامی که انرژی را اندازه‌گیری می‌کنیم، مقدار  $\sqrt{5}\mathcal{E}_0$  را به دست می‌آوریم. سپس بی‌درنگ  $A$  را اندازه می‌گیریم. چه مقدارهایی را برای  $A$  به دست خواهیم آورد و احتمال متناظر با هر

مقدار چقدر است؟

(پ) مقدار چشمداشتی  $\langle \hat{A} \rangle$  را محاسبه کنید.

۱۷. یک سیستم فیزیکی را در نظر بگیرید که هامیلتونی و حالت اولیه‌ی آن به صورت زیر می‌باشند:

$$H = \mathcal{E}_0 \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad |\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

که در آن  $\mathcal{E}_0$  دارای ابعاد انرژی است.

(الف) هنگامی که انرژی را اندازه‌گیری می‌کنیم، چه مقدارهایی را با چه احتمال‌هایی به دست خواهیم آورد؟

(ب) مقدار چشمداشتی هامیلتونی  $\langle \hat{H} \rangle$  را محاسبه کنید.

۱۸. سیستمی را در نظر بگیرید که حالت  $|\psi(t)\rangle$  آن و دو مشاهده‌پذیر  $A$  و  $B$  به صورت زیر معلوم‌اند:

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} 5 \\ 1 \\ 3 \end{pmatrix}, \quad A = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

(الف) یک اندازه‌گیری انجام می‌دهیم که در آن ابتدا  $A$  و سپس بی‌درنگ  $B$  اندازه گرفته می‌شود. احتمال به‌دست آوردن مقدار  $\sqrt{2}$  برای  $A$  و مقدار  $-1$  برای  $B$  را بیابید.

(ب) حال ابتدا  $B$  و سپس بی‌درنگ  $A$  را اندازه می‌گیریم. احتمال به‌دست آوردن مقدار  $-1$  برای  $B$  و مقدار  $\sqrt{2}$  برای  $A$  را بیابید.

(پ) نتیجه‌های (الف) و (ب) را مقایسه کنید و آن را توضیح دهید.

۱۹. سیستمی را در نظر بگیرید که حالت  $|\psi(t)\rangle$  آن و دو مشاهده‌پذیر  $A$  و  $B$  به‌صورت زیر معلوم‌اند:

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} -i \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad A = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i & 1 \\ -i & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & i \\ 0 & -i & 0 \end{pmatrix}$$

(الف) آیا  $A$  و  $B$  سازگارند؟ کدام یک از مجموعه‌ی عملگرهای  $\{\hat{A}\}$ ،  $\{\hat{B}\}$  و  $\{\hat{A}, \hat{B}\}$  یک مجموعه‌ی کامل از عملگرهای جابه‌جاشونده را تشکیل می‌دهند؟

(ب) با اندازه‌گیری ابتدا  $A$  و سپس بی‌درنگ  $B$ ، احتمال به‌دست آوردن مقدار  $-1$  برای  $A$  و مقدار  $3$  برای  $B$  را بیابید.

(پ) حال با اندازه‌گیری ابتدا  $B$  و سپس بی‌درنگ  $A$ ، احتمال به‌دست آوردن  $3$  برای  $B$  و  $-1$  برای  $A$  را بیابید. این نتیجه را با احتمال به‌دست آمده در (ب) مقایسه کنید.

۲۰. یک سیستم فیزیکی را در نظر بگیرید که دارای تعدادی مشاهده‌پذیر است که با ماتریس‌های زیر نمایش داده می‌شوند:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & i \\ -1 & -i & 4 \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 3 \\ 0 & 3 & 1 \end{pmatrix}$$

(الف) نتایج اندازه‌گیری مشاهده‌پذیرهای سازگار را بیابید.

(ب) کدام یک از این مشاهده‌پذیرها سازگارند؟ پایه‌ای از ویژه‌بردارهای مشترک را برای این مشاهده‌پذیرها ارائه کنید.

(پ) کدام یک از مجموعه‌ی عملگرهای  $\{\hat{A}\}$ ،  $\{\hat{B}\}$ ،  $\{\hat{C}\}$ ،  $\{\hat{A}, \hat{B}\}$ ،  $\{\hat{A}, \hat{C}\}$  و  $\{\hat{B}, \hat{C}\}$  مجموعه‌ی کاملی از عملگرهای جابه‌جاشونده را تشکیل می‌دهند؟

۲۱. سیستمی را در نظر بگیرید که در ابتدا در حالت  $|\psi(0)\rangle$  قرار دارد و دارای هامیلتونی  $\hat{H}$  است که در آن

$$|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} 4 - i \\ -2 + 5i \\ 3 + 2i \end{pmatrix}, \quad H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 3 & 3 \\ 0 & 3 & 0 \end{pmatrix}$$

(الف) اگر اندازه‌گیری  $\hat{H}$  انجام شود آنگاه چه مقدارهایی را با چه احتمال‌هایی به دست خواهیم آورد؟  
 (ب) حالت سیستم را در زمان بعدی  $t$  بیابید. ممکن است به بسط دادن  $|\psi(0)\rangle$  برحسب ویژه‌بردارهای  $\hat{H}$  نیاز پیدا کنید.

(پ) انرژی کل سیستم در لحظه‌ی  $t = 0$  و در زمان بعدی  $t$  را بیابید. آیا این مقادارها متفاوت‌اند؟  
 (ت) آیا  $\hat{H}$  مجموعه‌ی کاملی از عملگرهای جابه‌جاشونده را تشکیل می‌دهد؟

۲۲. ذره‌ای را در نظر بگیرید که در پتانسیل نرده‌ای  $V(\mathbf{r}) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z)$  حرکت می‌کند.  
 (الف) نشان دهید که می‌توان هامیلتونی این ذره را به صورت  $\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z$  نوشت که در آن  $\hat{H}_x = p_x^2/(2m) + V_x(x)$  و به همین ترتیب.

(ب) آیا  $\hat{H}_x$ ،  $\hat{H}_y$ ،  $\hat{H}_z$  و مجموعه‌ی کاملی از عملگرهای جابه‌جاشونده را تشکیل می‌دهند؟

۲۳. سیستمی را در نظر بگیرید که هامیلتونی آن برابر با  $H = \mathcal{E} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$  است که در آن  $\mathcal{E}$  یک ثابت حقیقی با ابعاد انرژی است.

(الف) ویژه‌مقدارهای انرژی  $E_1$  و  $E_2$  هامیلتونی  $\hat{H}$  را به دست آورید.

(ب) اگر سیستم ابتدا (یعنی در  $t = 0$ ) در حالت  $|\psi_0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  باشد آنگاه احتمال را به صورتی بیابید که اندازه‌گیری انرژی در  $t = 0$ :  $E_1$  (۱) و  $E_2$  (۲) را نتیجه دهد.

(پ) مقدار میانگین انرژی  $\langle \hat{H} \rangle$  و عدم قطعیت انرژی  $\sqrt{\langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2}$  را بیابید.  
 (ت) حالت  $|\psi(t)\rangle$  را بیابید.

۲۴. رابطه‌ی زیر را ثابت کنید:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A}\hat{B} \rangle = \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \hat{B} \right\rangle + \left\langle \hat{A} \frac{\partial \hat{B}}{\partial t} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \hat{B} \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \hat{A} [\hat{B}, \hat{H}] \rangle$$

۲۵. ذره‌ای به جرم  $m$  را در نظر بگیرید که تحت تأثیر گرانش حرکت می‌کند. هامیلتونی ذره برابر است با  $\hat{H} = \hat{P}_z^2/(2m) - mg\hat{Z}$  که در آن  $g$  شتاب ناشی از گرانش است ( $g = 9.8 \text{ ms}^{-2}$ ).

(الف)  $d\langle\hat{Z}\rangle/dt$ ،  $d\langle\hat{P}_z\rangle/dt$  و  $d\langle\hat{H}\rangle/dt$  را محاسبه کنید.

(ب) معادله‌ی  $d\langle\hat{Z}\rangle/dt$  را حل کنید و  $\langle\hat{Z}\rangle(t)$  را به دست آورید به طوری که  $\langle\hat{Z}\rangle(0) = h$  و  $\langle\hat{P}_z\rangle(0) = 0$  باشد. نتیجه را با رابطه‌ی کلاسیکی  $z(t) = -\frac{1}{2}gt^2 + h$  مقایسه کنید.

۲۶.  $\hat{H} = \hat{P}_x^2/(2m) + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{X}^2$  را برای ذره‌ای با هامیلتونی  $d\langle\hat{H}\rangle/dt$  و  $d\langle\hat{P}_x\rangle/dt$ ،  $d\langle\hat{X}\rangle/dt$  محاسبه کنید.

۲۷. سیستمی را در نظر بگیرید که حالت اولیه‌ی آن در  $t = 0$  برحسب یک مجموعه‌ی کامل و متعامد بهنجار چهار بردار  $|\phi_1\rangle$ ،  $|\phi_2\rangle$ ،  $|\phi_3\rangle$  و  $|\phi_4\rangle$  به صورت زیر مشخص است:

$$|\psi(0)\rangle = \frac{A}{\sqrt{12}}|\phi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|\phi_2\rangle + \frac{2}{\sqrt{12}}|\phi_3\rangle + \frac{1}{4}|\phi_4\rangle$$

که در آن  $A$  یک ثابت حقیقی است.

(الف)  $A$  را به صورتی بیابید که  $|\psi(0)\rangle$  بهنجار باشد.

(ب) اگر انرژی‌های متناظر با  $|\phi_1\rangle$ ،  $|\phi_2\rangle$ ،  $|\phi_3\rangle$  و  $|\phi_4\rangle$  به ترتیب برابر با  $E_1$ ،  $E_2$ ،  $E_3$  و  $E_4$  باشند آنگاه حالت  $|\psi(t)\rangle$  سیستم را در زمان بعدی  $t$  بنویسید.

(پ) احتمال یافتن سیستم در حالت  $|\phi_2\rangle$  را در لحظه‌ی  $t$  تعیین کنید.

## فصل چهارم

# مسئله‌های یک‌بعدی

### ۱-۴ مقدمه

پس از ارائه‌ی صورتبندی مکانیک کوانتومی در دو فصل قبل، اکنون به خوبی آماده‌ایم تا آن را برای مطالعه‌ی مسئله‌های فیزیکی به کار ببریم. در اینجا معادله‌ی شرودینگر را برای مسئله‌های یک‌بعدی به کار می‌بریم. این مسئله‌ها جالب هستند زیرا تعداد زیادی از پدیده‌های فیزیکی وجود دارند که حرکت آنها یک‌بعدی است. اعمال معادله‌ی شرودینگر بر مسئله‌های یک‌بعدی ما را قادر می‌سازد تا پیش‌بینی‌های مکانیک کلاسیک و مکانیک کوانتومی را در محیطی ساده مقایسه کنیم. از مسئله‌های یک‌بعدی علاوه بر ساده بودن حل آنها، برای نشان دادن برخی اثرهای غیرکلاسیکی نیز استفاده می‌شود.

معادله‌ی شرودینگر توصیف‌کننده‌ی دینامیک یک ذره‌ی میکروسکوپی به جرم  $m$  در پتانسیل مستقل از زمان یک‌بعدی  $V(x)$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (1-4)$$

که در آن  $E$  انرژی کل ذره است. جواب این معادله ویژه‌مقدارهای انرژی مجاز  $E_n$  و تابع‌های موج متناظر  $\psi_n(x)$  را نتیجه می‌دهد. برای حل این معادله‌ی دیفرانسیل جزئی باید پتانسیل  $V(x)$  و شرایط مرزی را مشخص کنیم. می‌توان شرایط مرزی را از الزامات فیزیکی سیستم به دست آورد. در فصل قبل دیدیم که جواب‌های معادله‌ی شرودینگر برای پتانسیل‌های مستقل از زمان، مانا هستند:

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar} \quad (2-4)$$

زیرا چگالی احتمال به زمان بستگی ندارد. به یاد بیاورید که حالت  $\psi(x)$  دارای بعد فیزیکی  $1/\sqrt{L}$  است که در آن  $L$  یک طول است. از این رو بعد فیزیکی  $|\psi(x)|^2$  برابر با  $1/L$  است:  $[\psi(x)]^2 = 1/L$ . با بررسی برخی از ویژگی‌های حرکت یک‌بعدی و بحث پیرامون مشخصه‌ی تقارن جواب‌ها شروع می‌کنیم. سپس در بقیه‌ی این فصل، معادله‌ی شرودینگر را بر پتانسیل‌های یک‌بعدی گوناگون مانند ذره‌ی آزاد، پله‌ی پتانسیل، چاه‌های پتانسیل متناهی و نامتناهی و نوسانگر هماهنگ اعمال می‌کنیم. در پایان نیز نشان می‌دهیم که چگونه معادله‌ی شرودینگر را به صورت عددی حل کنیم.

## ۲-۴ ویژگی‌های حرکت یک‌بعدی

برای مطالعه‌ی ویژگی‌های دینامیکی یک ذره‌ی در حال حرکت در یک پتانسیل یک‌بعدی، بیایید پتانسیل  $V(x)$  که به اندازه‌ی کافی عمومی است و به ما امکان نشان دادن تمام مشخصه‌های مورد نیاز را می‌دهد، بررسی کنیم. چنین پتانسیلی در شکل ۱-۴ نشان داده شده است. این پتانسیل در  $x \rightarrow \pm\infty$  متناهی  $(V(-\infty) = V_1$  و  $V(+\infty) = V_2$  با  $V_1$  کوچک‌تر از  $V_2$ ) و دارای کمینه‌ی  $V_{\min}$  است. به خصوص، می‌خواهیم شرایطی که تحت آن طیف‌های گسسته و پیوسته روی می‌دهند را مطالعه کنیم. چون مشخصه‌ی حالت‌ها کاملاً به وسیله‌ی اندازه‌ی انرژی سیستم تعیین می‌شود، حالت‌هایی را که در آنها انرژی کوچک‌تر و بزرگ‌تر از پتانسیل است را جداگانه در نظر خواهیم گرفت.

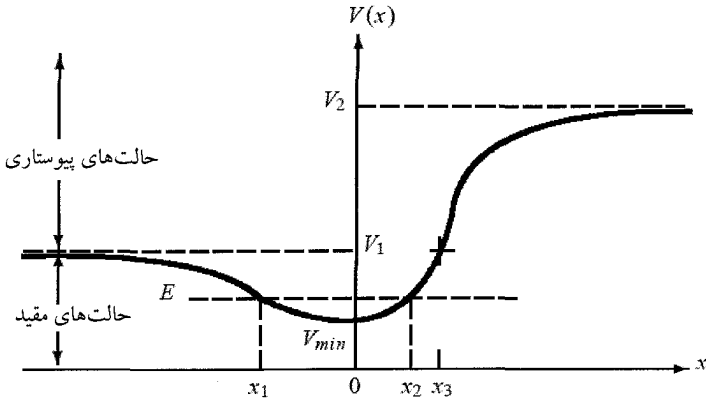
### ۱-۲-۴ طیف گسسته (حالت‌های مقید)

حالت‌های مقید زمانی روی می‌دهند که ذره نمی‌تواند به بی‌نهایت حرکت کند. یعنی ذره در تمام انرژی‌های محدود یا مقید به حرکت در داخل یک ناحیه‌ی متناهی و محدود از فضا است که توسط دو نقطه‌ی بازگشت کلاسیکی محدود می‌شود. در این ناحیه معادله‌ی شرودینگر تنها جواب‌هایی را قبول می‌کند که گسسته باشند. پتانسیل چاه مربعی نامتناهی و نوسانگر هماهنگ مثال‌هایی هستند که حالت‌های مقید را نمایش می‌دهند.

در پتانسیل شکل ۱-۴ حرکت ذره هنگامی که انرژی ذره بین  $V_{\min}$  و  $V_1$  قرار می‌گیرد، بین نقطه‌های بازگشت کلاسیکی  $x_1$  و  $x_2$  مقید می‌شود:

$$V_{\min} < E < V_1 \quad (۳-۴)$$

حالت‌های متناظر با این محدوده‌ی انرژی، حالت‌های مقید نامیده می‌شوند. این حالت‌ها به صورت حالت‌هایی که تابع موج آنها در  $x \rightarrow \pm\infty$  متناهی (یا صفر) اند، تعریف می‌شوند. معمولاً حالت‌های مقید انرژی‌هایی کوچک‌تر از پتانسیل دارند ( $E < V$ ). برای این که حالت‌های مقید وجود داشته باشند باید



شکل ۱-۴ شکل یک پتانسیل عمومی.

پتانسیل  $V(x)$  حداقل یک کمینه که کوچک‌تر از  $V_1$  است (یعنی  $V_{\min} < V_1$ )، داشته باشد. طیف‌های انرژی حالت‌های مقید گسسته‌اند. برای یافتن تابع موج و انرژی باید از شرایط مرزی<sup>۱</sup> استفاده کنیم.

حال دو قضیه را ارائه می‌دهیم که برای مطالعه‌ی حالت‌های مقید مهم‌اند.

**قضیه‌ی ۱-۴** در یک مسأله‌ی یک‌بعدی، ترازهای انرژی یک سیستم حالت مقید گسسته و غیرواکن‌اند.

**قضیه‌ی ۲-۴** تابع موج  $\psi_n(x)$  یک سیستم حالت مقید یک‌بعدی،  $n$  گره دارد (یعنی  $\psi_n(x)$ ،  $n$  بار صفر می‌شود) هرگاه  $n = 0$  متناظر با حالت پایه باشد و  $(n - 1)$  گره دارد هرگاه  $n = 1$  متناظر با حالت پایه باشد.

#### ۲-۲-۴ طیف پیوسته (حالت‌های نامقید)

حالت‌های نامقید در حالت‌هایی روی می‌دهند که در آنها حرکت سیستم محدود نیست. یک مثال نوعی ذره‌ی آزاد است. برای پتانسیل نشان داده شده در شکل ۱-۴، دو محدوده‌ی انرژی وجود دارند که در آنها حرکت ذره نامتناهی است:  $V_1 < E < V_2$  و  $E > V_2$ .

• حالت  $V_1 < E < V_2$

در این حالت، حرکت ذره تنها به سمت  $x = -\infty$  نامتناهی است یعنی ذره می‌تواند بین  $x = x_3$  و  $x = -\infty$  حرکت کند و  $x_3$  یک نقطه‌ی بازگشت کلاسیکی است. طیف انرژی پیوسته است و هیچ‌یک از ویژه‌مقدارهای انرژی واکن نیستند. می‌توان غیرواکن بودن را به این صورت نتیجه گرفت که چون معادله‌ی شرودینگر (۱-۴) یک معادله‌ی دیفرانسیل مرتبه‌ی دوم است، برای این حالت دو جواب مستقل خطی وجود دارد که تنها یکی از این جواب‌ها از نظر فیزیکی قابل قبول است.

۱. چون معادله‌ی شرودینگر یک معادله‌ی دیفرانسیل مرتبه‌ی دوم است، تنها دو شرط مرزی برای حل آن لازم است.

جواب به‌ازای  $x \leq x_3$  نوسانی است و به‌ازای  $x > x_3$  به سرعت کاهش می‌یابد به طوری که در  $x \rightarrow +\infty$  متناهی (صفر) است زیرا جواب‌های واگرا غیرفیزیکی‌اند.

• حالت  $E > V_2$

در این حالت، طیف انرژی پیوسته است و حرکت ذره در هر دو جهت  $x$  (یعنی به سمت  $\pm\infty$ ) نامتناهی است. تمام ترازهای انرژی این طیف واگن دوگانه‌اند. برای دیدن این موضوع، توجه کنید که جواب عمومی (۴-۱) یک ترکیب خطی از دو جواب نوسانی مستقل است که یکی به چپ و دیگری به راست حرکت می‌کند. در حالت غیرواگن قبلی تنها یک جواب نگه داشته می‌شود زیرا هنگامی که  $x \rightarrow +\infty$  میل می‌کند، جواب دیگر واگرا می‌شود و باید آن را رد کرد.

برخلاف حالت‌های مقید، نمی‌توان حالت‌های نامقید را بهنجار کرد و نمی‌توانیم از شرایط مرزی استفاده کنیم.

۴-۲-۳ طیف آمیخته

پتانسیل‌هایی که ذره را تنها به‌ازای برخی از انرژی‌ها محدود می‌کنند، موجب ایجاد طیف‌های آمیخته می‌شوند. حرکت ذره در چنین پتانسیل‌هایی تنها به‌ازای برخی از مقدارهای انرژی محدود است. به عنوان مثال، برای پتانسیل نمایش داده شده در شکل ۴-۱، اگر انرژی ذره بین  $V_{\min} < E < V_1$  باشد آنگاه حرکت ذره محدود (مقید) است و طیف آن گسسته است ولی اگر  $E > V_2$  باشد آنگاه حرکت ذره نامقید و طیف آن پیوسته است (اگر  $V_1 < E < V_2$  باشد آنگاه حرکت تنها در امتداد جهت  $x = -\infty$  نامقید است). مثال‌های نوعی دیگر که در آنها با طیف‌های آمیخته روبرو می‌شویم عبارتند از پتانسیل چاه مربعی متناهی و پتانسیل کولنی یا پتانسیل مولکولی.

۴-۲-۴ پتانسیل‌های متقارن و پاریته

بسیاری از پتانسیل‌هایی که در سطح میکروسکوپی با آنها روبرو می‌شویم نسبت به وارونی فضا متقارن (یا زوج)‌اند ( $\hat{V}(-x) = \hat{V}(x)$ ). این تقارن به صورت قابل ملاحظه‌ای محاسبات را ساده می‌کند. هنگامی که  $\hat{V}(x)$  زوج است، هامیلتونی متناظر  $\hat{H}(x) = -(\hbar^2/2m)d^2/dx^2 + \hat{V}(x)$  نیز زوج است. در فصل ۲ دیدیم که عملگرهای زوج با عملگر پاریته جابه‌جا می‌شوند از این رو می‌توانند ویژه‌پایه‌ی مشترکی داشته باشند.

بیابید دو حالت مرتبط با طیف‌های واگن و غیرواگن این هامیلتونی را بررسی کنیم:

• طیف غیرواگن

ابتدا حالت خاصی را در نظر می‌گیریم که در آن ویژه‌مقدارهای هامیلتونی متناظر با این پتانسیل



متقارن واگن نیستند. مطابق با قضیه‌ی ۴-۱، این هامیلتونی حالت‌های مقید را توصیف می‌کند. در فصل ۲ دیدیم که یک عملگر زوج غیرواگن همان ویژه‌حالت‌های عملگر پاریده را دارد. چون ویژه‌حالت‌های عملگر پاریده، پاریده‌ی معینی دارند، ویژه‌حالت‌های مقید یک ذره‌ی در حال حرکت در یک پتانسیل متقارن یک‌بعدی، پاریده‌ی معینی دارند یعنی یا زوج و یا فردند:

$$\hat{V}(-x) = \hat{V}(x) \implies \psi(-x) = \pm \psi(x) \quad (۴-۴)$$

### • طیف واگن

اگر طیف هامیلتونی متناظر با یک پتانسیل متقارن واگن باشد آنگاه ویژه‌حالت‌های آن تنها برحسب حالت‌های زوج و فرد بیان می‌شوند. یعنی ویژه‌حالت‌های آن پاریده‌ی معینی ندارند.

خلاصه: می‌توان ویژگی‌های مختلف حرکت یک‌بعدی که در این بخش به آنها پرداخته شد را به صورت زیر خلاصه کرد:

- طیف انرژی یک سیستم حالت مقید، گسسته و غیرواگن است.
- تابع موج حالت مقید  $\psi_n(x)$ : (الف) دارای  $n$  گره است هرگاه  $n = 0$  متناظر با حالت پایه باشد و (ب) دارای  $(n - 1)$  گره است هرگاه  $n = 1$  متناظر با حالت پایه باشد.
- ویژه‌تابع‌های حالت مقید در یک پتانسیل زوج، پاریده‌ی معینی دارند.
- ویژه‌تابع‌های یک طیف واگن در یک پتانسیل زوج، پاریده‌ی معینی ندارند.

### ۳-۴ ذره‌ی آزاد: حالت‌های پیوسته

این ساده‌ترین مسأله‌ی یک‌بعدی است و به‌ازای تمام مقدارهای  $x$ ، متناظر با  $V(x) = 0$  است. در این حالت معادله‌ی شرودینگر به صورت زیر است:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = E \psi(x) \implies \left( \frac{d^2}{dx^2} + k^2 \right) \psi(x) = 0 \quad (۵-۴)$$

که در آن  $k^2 = 2mE/\hbar^2$  و  $k$  عدد موج است. عمومی‌ترین جواب (۵-۴) ترکیبی از دو موج تخت مستقل خطی  $\psi_+(x) = e^{ikx}$  و  $\psi_-(x) = e^{-ikx}$  است:

$$\psi_k(x) = A_+ e^{ikx} + A_- e^{-ikx} \quad (۶-۴)$$

که در آن  $A_+$  و  $A_-$  دو ثابت دلخواه‌اند. بنابراین تابع موج کل از حالت مانای زیر به دست می‌آید:

$$\Psi_k(x, t) = A_+ e^{i(kx - \omega t)} + A_- e^{-i(kx + \omega t)} = A_+ e^{i(kx - \hbar k^2 t / 2m)} + A_- e^{-i(kx + \hbar k^2 t / 2m)} \quad (۷-۴)$$

زیرا  $\omega = E/\hbar = \hbar k^2/2m$  است. جمله‌ی نخست  $(\Psi_+(x, t) = A_+ e^{i(kx - \omega t)})$  یک موج رونده به راست و جمله‌ی دوم  $(\Psi_-(x, t) = A_- e^{-i(kx + \omega t)})$  یک موج رونده به چپ را نمایش می‌دهد. شدت این موج‌ها به ترتیب از  $|A_+|^2$  و  $|A_-|^2$  به دست می‌آید. باید توجه کنیم که موج‌های  $\Psi_+(x, t)$  و  $\Psi_-(x, t)$  به ترتیب وابسته به یک ذره‌ی آزاد رونده به راست و چپ با تکانه و انرژی خوش‌تعریف  $E_{\pm} = \hbar k^2/2m$  و  $p_{\pm} = \pm \hbar k$  هستند. به زودی در مورد الزامات فیزیکی آن توضیح خواهیم داد. چون شرایط مرزی وجود ندارد، محدودیتی روی  $k$  یا  $E$  وجود ندارد و تمام مقادیرها، جواب‌های این معادله را نتیجه می‌دهند.

حل مسئله‌ی ذره‌ی آزاد از نظر ریاضی ساده است ولی با این وجود تعدادی از نکته‌های ریز فیزیکی را ارائه می‌کند. در اینجا به اختصار به سه نکته می‌پردازیم. ابتدا این که چگالی‌های احتمال متناظر با هر یک از جواب‌ها ثابت‌اند

$$P_{\pm}(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 = |A_{\pm}|^2 \quad (۸-۴)$$

زیرا به  $x$  و  $t$  بستگی ندارند. این به دلیل از دست رفتن کامل اطلاعات پیرامون مکان و زمان برای یک حالت با مقدارهای معین تکانه  $(p = \pm \hbar k)$  و انرژی  $(E_{\pm} = \hbar^2 k^2/2m)$  است که نتیجه‌ای از اصل عدم قطعیت هایزنبرگ است: هنگامی که تکانه و انرژی یک ذره به صورت دقیق معلوم باشند  $(\Delta E = 0$  و  $\Delta p = 0)$ ، باید عدم قطعیت کل حول زمان و مکان آن وجود داشته باشد:  $\Delta x \rightarrow \infty$  و  $\Delta t \rightarrow \infty$ . دومین نکته به اختلاف فاحش بین سرعت موج و سرعت ذره که فرض می‌شود ذره آن را نمایش می‌دهد، مربوط است. سرعت موج‌های تخت  $\Psi_{\pm}(x, t)$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$v_{\text{موجی}} = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{\hbar k} = \frac{\hbar^2 k^2/2m}{\hbar k} = \frac{\hbar k}{2m} \quad (۹-۴)$$

از سوی دیگر، سرعت کلاسیکی ذره  $^2$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$v_{\text{کلاسیکی}} = \frac{p}{m} = \frac{\hbar k}{m} = 2v_{\text{موجی}} \quad (۱۰-۴)$$

این به این معنی است که ذره دو برابر سریع‌تر از موجی که آن را نمایش می‌دهد، حرکت می‌کند! سوم این که تابع موج قابل بهنجار کردن نیست:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{\pm}^*(x, t) \Psi_{\pm}(x, t) dx = |A_{\pm}|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \rightarrow \infty \quad (۱۱-۴)$$

۲. سرعت کلاسیکی می‌تواند به شار (یا چگالی جریان) وابسته باشد که همانطور که در فصل ۳ نشان داده شد، برابر است با  $J_{\pm} = i\hbar \frac{1}{2m} (\Psi_{\pm} \frac{\partial \Psi_{\pm}^*}{\partial x} - \Psi_{\pm}^* \frac{\partial \Psi_{\pm}}{\partial x}) = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m}$  که در آن از  $A_{\pm} = 1$  استفاده شده است.

بنابراین جواب‌های  $\Psi_{\pm}(x, t)$  غیرفیزیکی‌اند. تابع‌های موج فیزیکی باید انتگرال‌پذیر مجذوری باشند. می‌توان رد این مسأله را به این صورت دنبال کرد که یک ذره‌ی آزاد نمی‌تواند تکانه و انرژی تعریف‌شده‌ی کاملاً معینی داشته باشد.

از دید سه نکته‌ای که در بالا به آنها اشاره شد، جواب‌های معادله‌ی شرودینگر (۵-۴) که از نظر فیزیکی قابل قبول‌اند نمی‌توانند موج‌های تخت باشند. به جای آن می‌توانیم به وسیله‌ی برهنه‌ی خطی موج‌های تخت، جواب‌های فیزیکی را بسازیم. جواب توسط بسته‌های موجی فراهم می‌شود که در فصل ۱ دیدیم:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i(kx - \omega t)} dk \quad (12-4)$$

که در آن  $\phi(k)$  (دامنه‌ی بسته‌ی موج) از تبدیل فوریه‌ی  $\psi(x, 0)$  به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, 0) e^{-ikx} dx \quad (13-4)$$

این جواب بسته‌ی موج از عهده‌ی تمام نکته‌های ریز مطرح شده در بالا بر می‌آید و از آنها اجتناب می‌کند. اول این که تکانه، مکان و انرژی ذره دیگر به صورت دقیق معلوم نیست و تنها نتیجه‌های احتمالاتی امکان‌پذیرند. دوم این که همانطور که در فصل ۱ نشان داده شد، بسته‌ی موج (۱۲-۴) و ذره با سرعت یکسان  $v_g = p/m$  که سرعت گروه یا سرعت کل بسته نامیده می‌شود، حرکت می‌کنند. سوم این که بسته‌ی موج (۱۲-۴) قابل بهنجار کردن است.

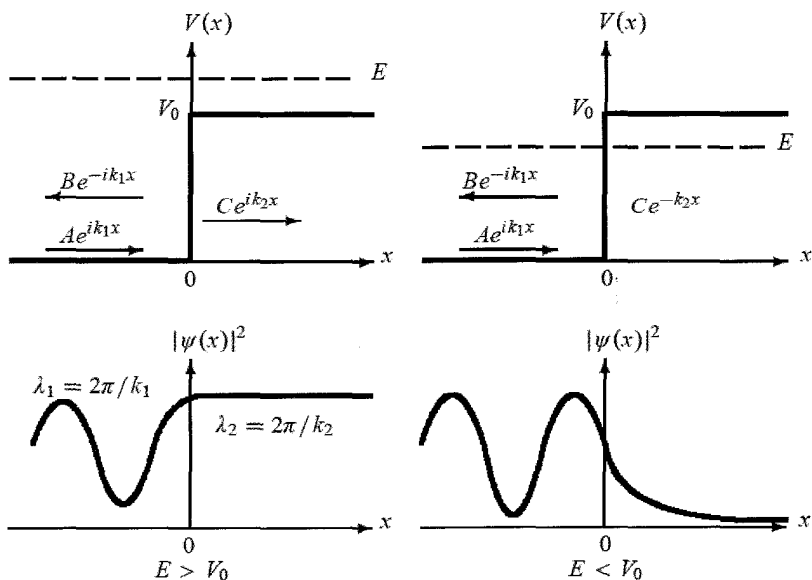
به صورت خلاصه، نمی‌توان توسط یک موج تخت (تک‌فام) یک ذره‌ی آزاد را نمایش داد بلکه باید این ذره را به وسیله‌ی یک بسته‌ی موج نمایش داد. بنابراین جواب‌های فیزیکی معادله‌ی شرودینگر با بسته‌های موج داده می‌شوند و نه با جواب‌های مانا.

## ۴-۴ پله‌ی پتانسیل

مسأله‌ی ساده‌ی دیگر شامل ذره‌ای است که در همه‌جا آزاد است ولی در ورای نقطه‌ی خاصی (فرض کنید  $x = 0$ ) پتانسیل به سرعت افزایش می‌یابد (یعنی دافعه (یا جاذبه) می‌شود). پتانسیلی از این نوع، پله‌ی پتانسیل نامیده می‌شود (شکل ۴-۲ را ببینید):

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x \geq 0 \end{cases} \quad (14-4)$$

در این مسأله، سعی می‌کنیم تا دینامیک، شاری از ذره‌ها که همه‌ی آنها دارای جرم یکسان  $m$  هستند و با سرعت یکسانی از چپ به راست حرکت می‌کنند را تحلیل کنیم. قصد داریم دو حالت را در نظر بگیریم. بسته به این که انرژی ذره‌ها بزرگ‌تر یا کوچک‌تر از  $V_0$  باشند.



شکل ۴-۲ پله‌ی پتانسیل و جهت انتشار موج‌های فرودی، بازتابیده و عبوری به اضافه‌ی چگالی احتمال  $|\psi(x)|^2$  آنها هنگامی که  $E < V_0$  و  $E > V_0$  است.

#### (الف) حالت $E > V_0$

به‌ازای  $x < 0$  ذره‌ها آزادند و پتانسیل دافعه‌ی  $V_0$  را که در  $x = 0$  شروع می‌شود و به‌ازای  $x > 0$  هموار (ثابت) می‌ماند را حس می‌کنند. در اینجا دینامیک این شار ذره‌ها را ابتدا از نظر کلاسیکی و سپس از نظر کوانتومی تحلیل کنیم.

از نظر کلاسیکی، ذره‌ها با تکانه‌ی ثابت  $\sqrt{2mE}$  از چپ به پله یا سد پتانسیل می‌رسند. با ورود ذره‌ها به ناحیه‌ی  $x \geq 0$  که در آن پتانسیل برابر با  $V = V_0$  است، تکانه‌ی آنها به مقدار  $\sqrt{2m(E - V_0)}$  کاهش می‌یابد و سپس این تکانه را با ادامه‌ی حرکت به سمت راست حفظ می‌کنند. چون ذره‌ها انرژی کافی برای نفوذ به ناحیه‌ی  $x \geq 0$  را دارند، عبور کل وجود خواهد داشت: در سمت راست، تمام ذره‌ها با انرژی جنبشی کوچک‌تر  $E - V_0$  ظاهر خواهند شد که آنگاه مسأله به یک مسأله‌ی پراکندگی ساده در یک بعد تبدیل می‌شود.

از نظر کوانتومی، دینامیک ذره از معادله‌ی شرودینگر به‌دست می‌آید که در این دو ناحیه از رابطه‌های زیر به‌دست می‌آید:

$$\left( \frac{d^2}{dx^2} + k_1^2 \right) \psi_1(x) = 0 \quad (x < 0) \quad (15-4)$$

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k_2^2\right) \psi_2(x) = 0 \quad (x \geq 0) \quad (۱۶-۴)$$

که در آنها  $k_1^2 = 2mE/\hbar^2$  و  $k_2^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$  است. عمومی‌ترین جواب‌های این معادله‌ها، موج‌های تخت هستند:

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad (x < 0) \quad (۱۷-۴)$$

$$\psi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} \quad (x \geq 0) \quad (۱۸-۴)$$

که در آنها  $Ae^{ik_1x}$  و  $Ce^{ik_2x}$  موج‌های رونده در جهت مثبت  $x$  را نمایش می‌دهند ولی  $Be^{-ik_1x}$  و  $De^{-ik_2x}$  متناظر با موج‌های رونده در جهت منفی  $x$  است. ما به حالتی علاقه‌مندیم که در آن ذره‌ها ابتدا از سمت چپ روی پله‌ی پتانسیل فرود می‌آیند: ذره‌ها می‌توانند در  $x = 0$  بازتابیده شوند یا عبور کنند. چون هیچ موجی از ناحیه‌ی  $x > 0$  به سمت چپ بازتابیده نمی‌شود، ثابت  $D$  باید صفر شود. چون با حالت‌های مانا سروکار داریم بنابراین تابع موج کامل به صورت زیر است:

$$\Psi(x, t) = \begin{cases} \psi_1(x)e^{-i\omega t} = Ae^{i(k_1x - \omega t)} + Be^{-i(k_1x + \omega t)} & x < 0 \\ \psi_2(x)e^{-i\omega t} = Ce^{i(k_2x - \omega t)} & x \geq 0 \end{cases} \quad (۱۹-۴)$$

که در آن  $A \exp[i(k_1x - \omega t)]$ ،  $B \exp[-i(k_1x + \omega t)]$  و  $C \exp[i(k_2x - \omega t)]$  به ترتیب موج‌های فرودی، بازتابیده و عبوری را نمایش می‌دهند. این موج‌ها به سمت راست، چپ و راست حرکت می‌کنند (شکل ۲-۴). توجه کنید که چگالی احتمال  $|\psi(x)|^2$  که در سمت چپ پایین شکل ۲-۴ نشان داده شده است، به ازای  $x > 0$  یک خط راست است زیرا  $|C|^2 = |C \exp i(k_2x - \omega t)|^2 = |\psi_2(x)|^2$ . حال بیایید ضریب‌های بازتاب و عبور  $R$  و  $T$  که به صورت زیر تعریف می‌شوند را حساب کنیم:

$$R = \left| \frac{\text{چگالی جریان بازتابیده}}{\text{چگالی جریان فرودی}} \right| = \left| \frac{J_{\text{بازتابیده}}}{J_{\text{فرودی}}} \right|, \quad T = \left| \frac{J_{\text{عبوری}}}{J_{\text{فرودی}}} \right| \quad (۲۰-۴)$$

که در آن  $R$  نسبت باریکه‌های بازتابیده به فرودی و  $T$  نسبت باریکه‌های عبوری به فرودی را نشان می‌دهد. برای محاسبه‌ی  $R$  و  $T$  باید فرودی  $J$ ، بازتابیده  $J$  و عبوری  $J$  را پیدا کنیم. چون موج فرودی  $\psi_i(x) = Ae^{ik_1x}$  است، چگالی جریان فرودی (یا شار فرودی) از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$J_{\text{فرودی}} = \frac{i\hbar}{2m} \left( \psi_i(x) \frac{d\psi_i^*(x)}{dx} - \psi_i^*(x) \frac{d\psi_i(x)}{dx} \right) = \frac{\hbar k_1}{m} |A|^2 \quad (۲۱-۴)$$

به صورت مشابه، چون موج‌های بازتابیده و عبوری عبارتند از  $\psi_r(x) = Be^{-ik_1x}$  و  $\psi_t(x) = Ce^{ik_2x}$  می‌توانیم ثابت کنیم که شارهای بازتابیده و عبوری برابرند با

$$J_{\text{بازتابیده}} = -\frac{\hbar k_1}{m} |B|^2, \quad J_{\text{عبوری}} = \frac{\hbar k_2}{m} |C|^2 \quad (۲۲-۴)$$

ترکیب (۲۰-۴) و (۲۲-۴) نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2}, \quad T = \frac{k_2 |C|^2}{k_1 |A|^2} \quad (23-4)$$

بنابراین محاسبه‌ی  $R$  و  $T$  به تعیین ثابت‌های  $B$  و  $C$  کاهش می‌یابد. برای این منظور باید از شرایط مرزی تابع موج در  $x = 0$  استفاده کنیم. چون هم تابع موج و هم مشتق نخست آن در  $x = 0$  پیوسته‌اند، داریم:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0), \quad \frac{d\psi_1(0)}{dx} = \frac{d\psi_2(0)}{dx} \quad (24-4)$$

معادله‌های (۱۷-۴) و (۱۸-۴) نتیجه‌ی زیر را می‌دهند:

$$A + B = C, \quad k_1(A - B) = k_2 C \quad (25-4)$$

ازاین‌رو

$$B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A, \quad C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A \quad (26-4)$$

در رابطه با ثابت  $A$  باید گفت که می‌توان آن را از شرط بهنجارش تابع موج تعیین کرد اما در اینجا به آن نیازی نداریم زیرا  $R$  و  $T$  برحسب نسبت‌ها بیان می‌شوند. ترکیب کردن (۲۳-۴) با (۲۶-۴) به رابطه‌های زیر می‌انجامد:

$$R = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{(1 - \mathcal{K})^2}{(1 + \mathcal{K})^2}, \quad T = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{4\mathcal{K}}{(1 + \mathcal{K})^2} \quad (27-4)$$

که در آنها  $\mathcal{K} = k_2/k_1 = \sqrt{1 - V_0/E}$  است. مجموع  $R$  و  $T$  برابر با ۱ است که باید به این صورت باشد.

برخلاف مکانیک کلاسیک که بیان می‌کند هیچ‌کدام از ذره‌ها بازتابیده نمی‌شوند، معادله‌ی (۲۷-۴) نشان می‌دهد که ضریب بازتاب کوانتومی  $R$  صفر نیست: ذره‌هایی وجود دارند که با وجود این که انرژی آنها بزرگ‌تر از پله‌ی  $V_0$  است، بازتابیده می‌شوند. باید این اثر را به رفتار موج‌گونه‌ی این ذره‌ها نسبت داد. از (۲۷-۴) می‌بینیم که با کوچک و کوچک‌تر شدن  $E$ ،  $T$  نیز کوچک و کوچک‌تر می‌شود به طوری که هنگامی که  $E = V_0$  می‌شود، ضریب عبور  $T$  صفر و  $R = 1$  می‌شود. از سوی دیگر، هنگامی که  $E \gg V_0$  است، داریم:  $\mathcal{K} = \sqrt{1 - V_0/E} \simeq 1$  و ازاین‌رو  $R = 0$  و  $T = 1$  می‌شود که انتظار هم می‌رفت زیرا هنگامی که ذره‌های فرودی انرژی‌های بالایی دارند، پله‌ی پتانسیل آنقدر ضعیف است که اثر چندانی روی حرکت آنها ندارد.

## ملاحظات: معنی فیزیکی شرایط مرزی

در سراسر این فصل، بارها به استفاده از شرایط مرزی تابع موج و مشتق نخست آن مانند معادله‌ی (۴-۲۴) بر خواهیم خورد. پرسشی که در اینجا مطرح می‌شود این است که فیزیک نهفته در پشت این شرایط مرزی چیست؟ در پاسخ می‌توانیم دو نکته را مد نظر قرار دهیم:

- چون چگالی احتمال  $|\psi(x)|^2$  برای یافتن ذره در هر ناحیه‌ی کوچکی به صورت پیوسته از یک نقطه به نقطه‌ی دیگر تغییر می‌کند، بنابراین تابع موج  $\psi(x)$  باید تابع پیوسته‌ای از  $x$  باشد. بنابراین همانطور که در (۴-۲۴) نشان داده شد، باید داشته باشیم:  $\psi_1(x) = \psi_2(x)$ .
- چون تکانه‌ی خطی ذره  $(\hat{P}\psi(x) = -i\hbar d\psi(x)/dx)$  با حرکت ذره از چپ به راست، باید تابع پیوسته‌ای از  $x$  باشد مشتق نخست تابع موج  $(d\psi(x)/dx)$  نیز باید تابع پیوسته‌ای از  $x$  باشد به خصوص در  $x = 0$ . از این رو همانطور که در (۴-۲۴) نشان داده شد، باید داشته باشیم:  $d\psi_1(0)/dx = d\psi_2(0)/dx$ .

(ب) حالت  $E < V$ 

از نظر کلاسیکی، ذره‌هایی که از سمت چپ (با تکانه‌ی  $p = \sqrt{2mE}$ ) به پله‌ی پتانسیل می‌رسند، در  $x = 0$  متوقف و سپس همه‌ی آنها به سمت چپ و بدون تغییر در اندازه‌ی تکانه و امی جهند. هیچ‌یک از ذره‌ها به سمت راست سد  $x = 0$  نمی‌روند و بازتاب کلی آنها روی می‌دهد. بنابراین حرکت ذره‌ها توسط سد پتانسیل وارون می‌شود.

از نظر مکانیک کوانتومی، قضیه تا حدی متفاوت است. در این حالت، معادله‌ی شرودینگر و تابع موج در ناحیه‌ی  $x < 0$  به ترتیب از (۴-۱۵) و (۴-۱۷) به دست می‌آیند. اما به ازای  $x > 0$  معادله‌ی شرودینگر از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\left( \frac{d^2}{dx^2} - k_2'^2 \right) \psi_2(x) = 0 \quad (x \geq 0) \quad (4-28)$$

که در آن  $k_2'^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$  است. جواب این معادله برابر است با

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2'x} + De^{k_2'x} \quad (x \geq 0) \quad (4-29)$$

چون تابع موج باید در همه جا متناهی باشد و چون جمله‌ی  $e^{k_2'x}$  هنگامی که  $x \rightarrow \infty$  میل می‌کند و اگر می‌شود، بنابراین ثابت  $D$  باید صفر باشد. بنابراین تابع موج کامل برابر است با

$$\Psi(x, t) = \begin{cases} Ae^{i(k_1x - \omega t)} + Be^{-i(k_1x + \omega t)} & x < 0 \\ Ce^{-k_2'x} e^{-i\omega t} & x \geq 0 \end{cases} \quad (4-30)$$

حال بیائید همانطور که در حالت قبل انجام دادیم، ضریب‌های بازتاب و عبوری را حساب کنیم. ابتدا باید یادآوری کنیم که ضریب عبوری متناظر با تابع موج عبوری  $\psi_t(x) = Ce^{-k'_p x}$  صفر است زیرا  $\psi_t(x)$  یک تابع حقیقی محض ( $\psi_t^*(x) = \psi_t(x)$ ) و بنابراین

$$J'_{\text{عبوری}} = \frac{\hbar}{\sqrt{im}} \left( \psi_t(x) \frac{d\psi_t(x)}{dx} - \psi_t(x) \frac{d\psi_t(x)}{dx} \right) = 0 \quad (31-4)$$

از این رو ضریب بازتاب  $R$  باید برابر با ۱ باشد. می‌توانیم این نتیجه را با اعمال شرایط پیوستگی در  $x = 0$  برای (۴-۱۷) و (۴-۲۹) به دست آوریم:

$$B = \frac{k_1 - ik'_p}{k_1 + ik'_p} A, \quad C = \frac{2k_1}{k_1 + ik'_p} A \quad (32-4)$$

بنابراین ضریب بازتاب از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{k_1^2 + k_p'^2}{k_1^2 + k_p'^2} = 1 \quad (33-4)$$

بنابراین مانند حالت کلاسیک، بازتاب کلی را داریم.

اما یک اختلاف با حالت کلاسیک وجود دارد: در حالی که از نظر کلاسیکی نمی‌توان هیچ‌یک از ذره‌ها را در ناحیه‌ی  $x > 0$  یافت، از نظر مکانیک کوانتومی احتمال این که تابع موج به این ناحیه‌ی ممنوع کلاسیکی نفوذ کند، غیرصفر است. برای دیدن این موضوع، توجه کنید که چگالی احتمال نسبی

$$P(x) = |\psi_t(x)|^2 = |C|^2 e^{-2k'_p x} = \frac{4k_1^2 |A|^2}{k_1^2 + k_p'^2} e^{-2k'_p x} \quad (34-4)$$

در نزدیکی  $x = 0$  قابل ملاحظه است و با بزرگ شدن  $x$ ، به صورت نمایی کاهش می‌یابد. رفتار چگالی احتمال در شکل ۴-۲ نشان داده شده است.

## ۵-۴ سد و چاه پتانسیل

باریکه‌ای از ذره‌هایی به جرم  $m$  را در نظر بگیرید که از سمت چپ به طرف سد پتانسیل زیر فرستاده شده‌اند:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & 0 \leq x \leq a \\ 0 & x > a \end{cases} \quad (35-4)$$



این پتانسیل (که دافعه است) هیچ حالت مقیدی ندارد (شکل ۴-۳). در اینجا مانند حالت پله‌ی پتانسیل با یک مسأله‌ی پراکندگی یک‌بعدی سروکار داریم.

دوباره در اینجا دو حالت زیر را در نظر می‌گیریم که به ترتیب، متناظر با بزرگ‌تر و کوچک‌تر بودن انرژی ذره نسبت به سد پتانسیل هستند.

#### ۱-۵-۴ حالت $V_0 < E$

از نظر کلاسیکی، تکانه‌ی ذره‌هایی که از سمت چپ و با تکانه‌ی ثابت  $p_1 = \sqrt{2mE}$  به ناحیه‌ی  $0 \leq x \leq a$  سد می‌رسند، به تکانه‌ی  $p_2 = \sqrt{2m(E - V_0)}$  کاهش می‌یابد و تا هنگام رسیدن به نقطه‌ی  $x = a$  آن را حفظ می‌کنند. سپس به محض این که از نقطه‌ی  $x = a$  عبور کنند، شتاب می‌گیرند و به تکانه‌ی  $p_3 = \sqrt{2mE}$  می‌رسند و این مقدار را در سراسر ناحیه‌ی  $x > a$  حفظ می‌کنند. چون ذره‌ها انرژی کافی برای گذشتن از سد را دارند، هیچ‌یک از آنها به عقب بازتابیده نمی‌شوند و تمام ذره‌ها در طرف راست  $x = a$  ظاهر خواهند شد: عبور کامل.

نتیجه‌گیری کوانتومی از بحث پله‌ی پتانسیل ارائه شده در بخش قبل کار ساده‌ای است. تنها باید یادآوری کنیم که تابع موج یک طرح نوسانی را در هر سه ناحیه نمایش خواهد داد و هر بار که ذره به ناحیه‌ی جدید وارد می‌شود، دامنه‌ی آن کاهش می‌یابد (شکل ۴-۳ را ببینید):

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} & x \leq 0 \\ \psi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} & 0 < x < a \\ \psi_3(x) = Ee^{ik_1x} & x \geq a \end{cases} \quad (36-4)$$

که در آن  $k_2 = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$  و  $k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$  می‌توان ثابت‌های  $B, C, D$  و  $E$  را از شرایط مرزی و برحسب  $A$  به دست آورد:  $\psi(x)$  و  $d\psi/dx$  باید به ترتیب در  $x = 0$  و  $x = a$  پیوسته باشند:

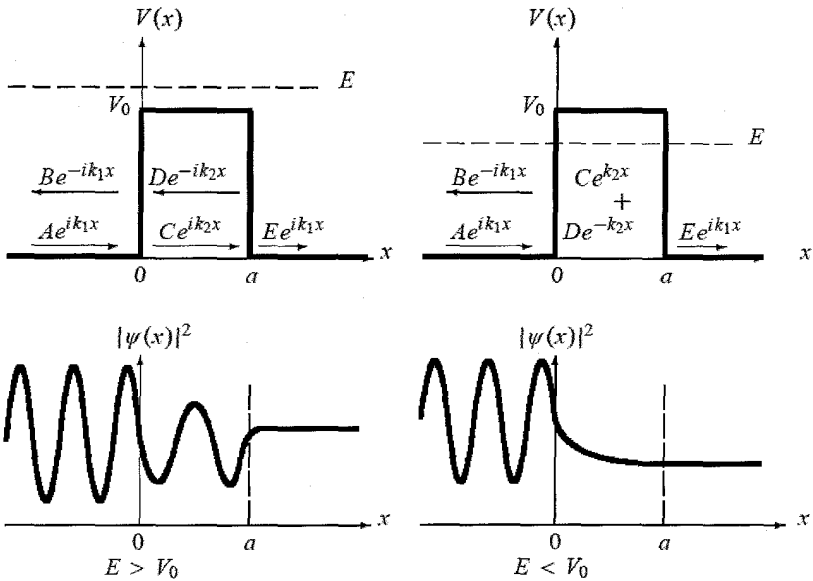
$$\psi_1(0) = \psi_2(0), \quad \frac{d\psi_1(0)}{dx} = \frac{d\psi_2(0)}{dx} \quad (37-4)$$

$$\psi_2(a) = \psi_3(a), \quad \frac{d\psi_2(a)}{dx} = \frac{d\psi_3(a)}{dx} \quad (38-4)$$

نتیجه‌ی این معادله‌ها عبارتند از

$$A + B = C + D, \quad ik_1(A - B) = ik_2(C - D) \quad (39-4)$$

$$Ce^{ik_2a} + De^{-ik_2a} = Ee^{ik_1a}, \quad ik_2(Ce^{ik_2a} - De^{-ik_2a}) = ik_1Ee^{ik_1a} \quad (40-4)$$



شکل ۳-۴ سد پتانسیل و جهت انتشار موج‌های فرودی، بازتابیده و عبوری به اضافه‌ی چگالی احتمال  $|\psi(x)|^2$  آنها، هنگامی که  $E < V_0$  و  $E > V_0$  است.

که از حل آنها برحسب  $E$  رابطه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$E = 4k_1 k_2 A e^{-ik_1 a} [(k_1 + k_2)^2 e^{-ik_2 a} - (k_1 - k_2)^2 e^{ik_2 a}]^{-1} \quad (41-4)$$

$$= 4k_1 k_2 A e^{-ik_1 a} \left[ 4k_1 k_2 \cos(k_2 a) - 2i(k_1^2 + k_2^2) \sin(k_2 a) \right]^{-1}$$

بنابراین ضریب عبور از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$T = \frac{k_1 |E|^2}{k_1 |A|^2} = \left[ 1 + \frac{1}{4} \left( \frac{k_1^2 - k_2^2}{k_1 k_2} \right)^2 \sin^2(k_2 a) \right]^{-1} \quad (42-4)$$

$$= \left[ 1 + \frac{V_0^2}{4E(E - V_0)} \sin^2 \left( a \sqrt{2mV_0/\hbar^2} \sqrt{E/V_0 - 1} \right) \right]^{-1}$$

زیرا

$$\left( \frac{k_1^2 - k_2^2}{k_1 k_2} \right)^2 = \frac{V_0^2}{E(E - V_0)} \quad (43-4)$$

با استفاده از نمادگذاری  $\lambda = a\sqrt{2mV_0}/\hbar^2$  و  $\varepsilon = E/V_0$  می‌توانیم  $T$  را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$T = \left[ 1 + \frac{1}{4\varepsilon(\varepsilon - 1)} \sin^2(\lambda\sqrt{\varepsilon - 1}) \right]^{-1} \quad (44-4)$$

به صورت مشابه، می‌توانیم نشان دهیم که

$$R = \frac{\sin^2(\lambda\sqrt{\varepsilon - 1})}{4\varepsilon(\varepsilon - 1) + \sin^2(\lambda\sqrt{\varepsilon - 1})} = \left[ 1 + \frac{4\varepsilon(\varepsilon - 1)}{\sin^2(\lambda\sqrt{\varepsilon - 1})} \right]^{-1} \quad (45-4)$$

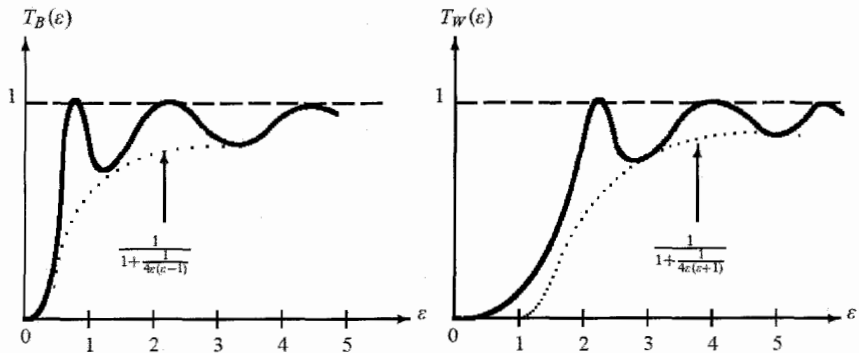
### حالت‌های خاص

- اگر  $E \gg V_0$  (و از این رو  $\varepsilon \gg 1$ ) باشد آنگاه ضریب عبور  $T$  به صورت مجانبی برابر با یک می‌شود:  $T \simeq 1$  و  $R \simeq 0$ . بنابراین در انرژی‌های بسیار زیاد و سد پتانسیل ضعیف، ذره‌ها اثر سد را احساس نمی‌کنند و عبور کامل را داریم.

- هنگامی که  $\sin(\lambda\sqrt{\varepsilon - 1}) = 0$  یا  $\lambda\sqrt{\varepsilon - 1} = n\pi$  باشد نیز عبور کامل را داریم. همانطور که در شکل ۴-۴ نشان داده شده است، هرگاه  $1 + n^2\pi^2\hbar^2/(2ma^2V_0) = \varepsilon_n = E_n/V_0$  باشد یا هرگاه انرژی فرودی ذره برابر با  $E_n = V_0 + n^2\pi^2\hbar^2/(2ma^2)$  باشد با  $n = 1, 2, 3, \dots$  آنگاه عبور کامل ( $T(\varepsilon_n) = 1$ ) روی می‌دهد. بیشینه‌های ضریب عبور با ویژه‌مقدارهای انرژی چاه پتانسیل مربعی نامتناهی مطابقت دارند و به عنوان تشدید شناخته می‌شوند. این پدیده تشدید (که در فیزیک کلاسیک روی نمی‌دهد) از تداخل سازنده بین موج‌های فرودی و بازتابیده نتیجه می‌شود. این پدیده به صورت تجربی در تعدادی از موارد مانند هنگام پراکنده شدن الکترون‌های کم انرژی ( $E \sim 0.1 \text{ eV}$ ) از اتم‌های بی‌اثر (که به عنوان اثر رامسائور-تاون‌سند<sup>۳</sup> شناخته می‌شود و نتیجه‌ای از تقارن اتم‌های بی‌اثر است) و در پراکنده شدن نوترون‌ها از هسته مشاهده شده است.

- در حد  $\varepsilon \rightarrow 1$  داریم:  $\sin(\lambda\sqrt{\varepsilon - 1}) \sim \lambda\sqrt{\varepsilon - 1}$  و از این رو (۴۴-۴) و (۴۵-۴) به صورت زیر در می‌آیند:

$$T = \left( 1 + \frac{ma^2V_0}{2\hbar^2} \right)^{-1}, \quad R = \left( 1 + \frac{2\hbar^2}{ma^2V_0} \right)^{-1} \quad (46-4)$$



شکل ۴-۴ ضریب‌های عبور مربوط به یک سد پتانسیل  $(T_B(\varepsilon) = \frac{\varepsilon(\varepsilon-1)}{\varepsilon(\varepsilon-1) + \sin^2(\lambda\sqrt{\varepsilon-1})})$  و یک چاه پتانسیل  $(T_W(\varepsilon) = \frac{\varepsilon(\varepsilon+1)}{\varepsilon(\varepsilon+1) + \sin^2(\lambda\sqrt{\varepsilon+1})})$ .

چاه پتانسیل ( $V_0 < 0$ )

ضریب عبور (۴۴-۴) برای حالتی که در آن  $V_0 > 0$  است یعنی برای یک پتانسیل سدی به دست آمد. با پیروی از همان رویه‌ای که به (۴۴-۴) انجامید، می‌توانیم نشان دهیم که ضریب عبور برای یک چاه پتانسیل متناهی ( $V_0 < 0$ ) از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$T_W = \left[ 1 + \frac{1}{4\varepsilon(\varepsilon+1)} \sin^2(\lambda\sqrt{\varepsilon+1}) \right]^{-1} \quad (47-4)$$

که در آن  $\varepsilon = E/|V_0|$  و  $\lambda = a\sqrt{2m|V_0|}/\hbar^2$  است. توجه کنید که هرگاه  $\sin(\lambda\sqrt{\varepsilon+1}) = 0$  شود آنگاه عبور کامل وجود دارد. همانطور که در شکل ۴-۴ نشان داده شده است، عبور کامل  $(T_W(\varepsilon_n) = 1)$  هنگامی روی می‌دهد که  $\varepsilon_n = E_n/|V_0| = n^2\pi^2\hbar^2/(2ma^2V_0) - 1$  باشد یا زمانی که انرژی فرودی ذره برابر با  $E_n = n^2\pi^2\hbar^2/(2ma^2) - |V_0|$  با  $n = 1, 2, 3, \dots$  باشد. چاه پتانسیل متقارن را با جزئیات بیشتر در بخش ۷-۴ مطالعه خواهیم کرد.

#### ۲-۵-۴ حالت $E < V_0$ : تونل زنی

از نظر کلاسیکی، انتظار بازتاب کلی را داریم: هر ذره که به سد ( $x = 0$ ) می‌رسد، به عقب بازتابیده خواهد شد و هیچ ذره‌ای نمی‌تواند در سد که در آن ذره جنبشی منفی دارد، نفوذ کند.

اکنون قصد داریم تا نشان دهیم که پیش‌بینی‌های مکانیک کوانتومی به روشنی از پیش‌بینی‌های کلاسیک متفاوت است زیرا تابع موج در ورای سد صفر نیست. جواب‌های معادله‌ی شرودینگر در سه ناحیه عبارت‌هایی را نتیجه می‌دهند که مشابه با (۳۶-۴) هستند به استثنای آن که  $\psi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}$  باید با

$\psi_2(x) = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x}$  جایگزین شود:

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} & x \leq 0 \\ \psi_2(x) = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x} & 0 < x < a \\ \psi_3(x) = Ee^{ik_1x} & x \geq a \end{cases} \quad (48-4)$$

که در آن  $k_1^2 = 2mE/\hbar^2$  و  $k_2^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$ . انتظار می‌رود که رفتار چگالی احتمال متناظر با این تابع موج (همانطور که در شکل ۴-۳ نشان داده شده است) در ناحیه‌های  $x < 0$  و  $x > a$  نوسانی باشد و به ازای  $0 \leq x \leq a$  به صورت نمایی کاهش یابد. برای یافتن ضریب‌های بازتاب و عبور

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2}, \quad T = \frac{|E|^2}{|A|^2} \quad (49-4)$$

تنها باید  $B$  و  $E$  را بر حسب  $A$  محاسبه کنیم. شرایط پیوستگی تابع موج و مشتق آن در  $x = 0$  و  $x = a$  نتیجه‌های زیر را می‌دهند:

$$A + B = C + D \quad (50-4)$$

$$ik_1(A - B) = k_2(C - D) \quad (51-4)$$

$$Ce^{k_2a} + De^{-k_2a} = Ee^{ik_1a} \quad (52-4)$$

$$k_2(Ce^{k_2a} - De^{-k_2a}) = ik_1Ee^{ik_1a} \quad (53-4)$$

دو معادله‌ی آخر به عبارتهای زیر برای  $C$  و  $D$  می‌انجامند:

$$C = \frac{E}{2} \left( 1 + i \frac{k_1}{k_2} \right) e^{(ik_1 - k_2)a}, \quad D = \frac{E}{2} \left( 1 - i \frac{k_1}{k_2} \right) e^{(ik_1 + k_2)a} \quad (54-4)$$

با وارد کردن این دو عبارت در دو معادله‌ی (۵۰-۴) و (۵۱-۴) و تقسیم آنها بر  $A$  می‌توانیم نشان دهیم که این دو معادله به ترتیب به معادله‌های زیر کاهش می‌یابند:

$$1 + \frac{B}{A} = \frac{E}{A} e^{ik_1a} \left[ \cosh(k_2a) - i \frac{k_1}{k_2} \sinh(k_2a) \right] \quad (55-4)$$

$$1 - \frac{B}{A} = \frac{E}{A} e^{ik_1a} \left[ \cosh(k_2a) + i \frac{k_1}{k_2} \sinh(k_2a) \right] \quad (56-4)$$

با حل این دو معادله به ازای  $B/A$  و  $E/A$  رابطه‌های زیر را به دست می‌آوریم:

$$\frac{B}{A} = -i \frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2} \sinh(k_2 a) \left[ 2 \cosh(k_2 a) + i \frac{k_2^2 - k_1^2}{k_1 k_2} \sinh(k_2 a) \right]^{-1} \quad (57-4)$$

$$\frac{E}{A} = 2 e^{-ik_1 a} \left[ 2 \cosh(k_2 a) + i \frac{k_2^2 - k_1^2}{k_1 k_2} \sinh(k_2 a) \right]^{-1} \quad (58-4)$$

بنابراین ضریب‌های  $R$  و  $T$  به صورت زیر در می‌آیند:

$$R = \left( \frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2} \right)^2 \sinh^2(k_2 a) \left[ 4 \cosh^2(k_2 a) + \left( \frac{k_2^2 - k_1^2}{k_1 k_2} \right)^2 \sinh^2(k_2 a) \right]^{-1} \quad (59-4)$$

$$T = \frac{|E|^2}{|A|^2} = 4 \left[ 4 \cosh^2(k_2 a) + \left( \frac{k_2^2 - k_1^2}{k_1 k_2} \right)^2 \sinh^2(k_2 a) \right]^{-1} \quad (60-4)$$

به صورت زیر می‌توانیم  $R$  را بر حسب  $T$  بازنویسی کنیم:

$$R = \frac{1}{4} T \left( \frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2} \right)^2 \sinh^2(k_2 a) \quad (61-4)$$

چون  $\cosh^2(k_2 a) = 1 + \sinh^2(k_2 a)$  می‌توانیم (۶۰-۴) را به رابطه‌ی زیر کاهش دهیم:

$$T = \left[ 1 + \frac{1}{4} \left( \frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2} \right)^2 \sinh^2(k_2 a) \right]^{-1} \quad (62-4)$$

توجه کنید که  $T$  متناهی است. این بدان معنی است که احتمال عبور ذره‌ها به داخل ناحیه‌ی  $x \geq a$  صفر نیست (در فیزیک کلاسیک، ذره به هیچ عنوان نمی‌تواند به ناحیه‌ی  $x \geq 0$  نفوذ کند). این یک اثر صرفاً کوانتومی است که به دلیل جنبه‌ی موجی اجسام ماکروسکوپی است و به عنوان اثر تونل زنی شناخته می‌شود: اجسام کوانتومی می‌توانند به داخل سدهای از نظر کلاسیکی غیرقابل نفوذ تونل بزنند. این اثر نفوذ در سد کاربردهای مهمی در شاخه‌های مختلف فیزیک مدرن از فیزیک ذرات و فیزیک هسته‌ای گرفته تا وسایل نیمه‌رسانا دارد. به عنوان مثال، واپاشی‌های رادیواکتیو و ترابرد بار در وسایل الکترونیکی مثال‌هایی نوعی از اثر تونل زنی هستند.

اکنون با توجه به

$$\left( \frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2} \right)^2 = \left( \frac{V_0}{\sqrt{E(V_0 - E)}} \right)^2 = \frac{V_0^2}{E(V_0 - E)} \quad (۶۳-۴)$$

می‌توانیم (۶۱-۴) و (۶۲-۴) را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$R = \frac{1}{4} \frac{V_0^2 T}{E(V_0 - E)} \sinh^2 \left( \frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \right) \quad (۶۴-۴)$$

$$T = \left[ 1 + \frac{1}{4} \frac{V_0^2}{E(V_0 - E)} \sinh^2 \left( \frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \right) \right]^{-1} \quad (۶۵-۴)$$

یا

$$R = \frac{T}{4\varepsilon(1-\varepsilon)} \sinh^2 \left( \lambda \sqrt{1-\varepsilon} \right) \quad (۶۶-۴)$$

$$T = \left[ 1 + \frac{1}{4\varepsilon(1-\varepsilon)} \sinh^2 \left( \lambda \sqrt{1-\varepsilon} \right) \right]^{-1} \quad (۶۷-۴)$$

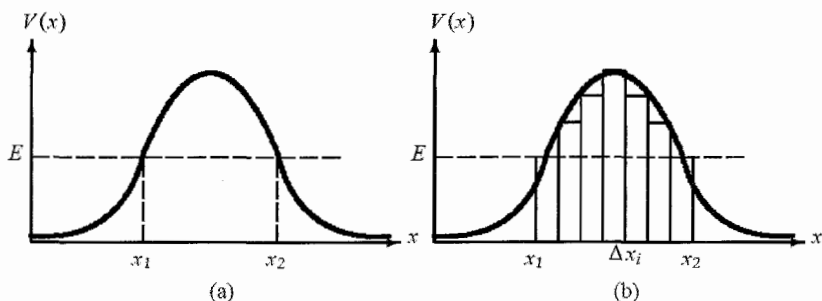
که در آنها  $\varepsilon = E/V_0$  و  $\lambda = a\sqrt{2mV_0}/\hbar$  است.

### حالت‌های خاص

- اگر  $E \ll V_0$  (ازین رو  $\varepsilon \ll 1$  یا  $\lambda \sqrt{1-\varepsilon} \gg 1$ ) باشد آنگاه می‌توانیم از تقریب  $\sinh(\lambda \sqrt{1-\varepsilon}) \simeq \frac{1}{2} \exp(\lambda \sqrt{1-\varepsilon})$  استفاده کنیم. بنابراین می‌توانیم نشان دهیم که ضریب عبور (۶۷-۴) به صورت مجانبی برابر است با

$$\begin{aligned} T &\simeq \left[ \frac{1}{4\varepsilon(1-\varepsilon)} \left[ \frac{1}{2} e^{\lambda \sqrt{1-\varepsilon}} \right]^2 \right]^{-1} = 16\varepsilon(1-\varepsilon) e^{-2\lambda \sqrt{1-\varepsilon}} \\ &= \frac{16E}{V_0} \left( 1 - \frac{E}{V_0} \right) e^{-(2a/\hbar) \sqrt{2m(V_0 - E)}} \end{aligned} \quad (۶۸-۴)$$

- این نشان می‌دهد که ضریب عبور (بر خلاف فیزیک کلاسیک) صفر نیست و مقداری متناهی دارد. بنابراین از نظر مکانیک کوانتومی یک تونل زنی متناهی در ورای سد ( $x > a$ ) وجود دارد.
- هنگامی که  $E \simeq V_0$  (و ازین رو  $\varepsilon \simeq 1$ ) است، می‌توانیم ثابت کنیم که (۶۶-۴) و (۶۷-۴) به رابطه‌های (۴۶-۴) می‌انجامند.
- با در نظر گرفتن حد کلاسیکی  $\hbar \rightarrow 0$ ، ضریب‌های (۶۶-۴) و (۶۷-۴) به نتیجه‌ی کلاسیکی  $R \rightarrow 1$  و  $T \rightarrow 0$  کاهش می‌یابند.



شکل ۴-۵ (الف) تونل‌زنی از طریق یک سد پتانسیل. (ب) تقریب پتانسیل آرام-تغییر  $V(x)$  با سدهای مربعی.

### ۳-۵-۴ اثر تونل‌زنی

به صورت کلی، مسئله‌ی تونل‌زنی عبارت است از انتشار یک ذره از ناحیه‌ای که انرژی ذره در آنجا کوچک‌تر از انرژی پتانسیل است ( $E < V(x)$ ). از نظر کلاسیکی، این ناحیه که به صورت  $x_1 < x < x_2$  تعریف می‌شود (شکل ۴-۵ الف) برای ذره‌ای با انرژی جنبشی منفی ممنوع است. نقطه‌های  $x = x_1$  و  $x = x_2$  به عنوان نقطه‌های بازگشت کلاسیکی شناخته می‌شوند. از نظر کوانتومی، چون ذره‌ها مشخصه‌های موجی از خود نشان می‌دهند، موج‌های کوانتومی می‌توانند از داخل سد تونل بزنند.

همانطور که در مثال سد مربعی نشان داده شد، ذره یک احتمال منتهای برای تونل‌زدن از داخل سد دارد. در این حالت، تنها به این دلیل که با یک پتانسیل مربعی ساده سروکار داریم، عبارت تحلیلی (۴-۶۷) را برای احتمال تونل‌زنی به دست آوردیم. در حالت کلی، نمی‌توان عبارت‌هایی تحلیلی برای پتانسیل‌های با وابستگی فضایی دلخواه به دست آورد. در چنین موردی باید از تقریب استفاده کرد. روش وینزل-کرامرز-بریلوئن<sup>۴</sup> (WKB) (فصل ۹) یکی از مفیدترین روش‌ها را ارائه می‌کند. نشان خواهیم داد که ضریب عبور برای پتانسیل سدی  $V(x)$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$T \sim \exp \left[ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} dx \sqrt{2m[V(x) - E]} \right] \quad (۴-۶۹)$$

می‌توانیم این رابطه را از یک تقریب خام به دست آوریم. برای این منظور، تنها باید ناحیه‌ی از نظر کلاسیکی ممنوع  $x_1 < x < x_2$  را در نظر بگیریم (شکل ۴-۵ ب) و آن را به مجموعه‌ای از بازه‌های کوچک  $\Delta x_i$  تقسیم کنیم. اگر  $\Delta x_i$  به اندازه‌ی کافی کوچک باشد آنگاه می‌توانیم پتانسیل  $V(x_i)$  را در هر نقطه‌ی  $x_i$  با یک سد پتانسیل مربعی تقریب بزنیم. بنابراین می‌توانیم از (۴-۶۸) برای محاسبه‌ی احتمال عبور متناظر



با  $V(x_i)$  استفاده کنیم:

$$T_i \sim \exp \left[ -\frac{\sqrt{2} \Delta x_i}{\hbar} \sqrt{2m(V(x_i) - E)} \right] \quad (۷۰-۴)$$

احتمال تراگسیل برای پتانسیل عمومی شکل ۴-۵ که در آن ناحیه‌ی  $x_1 < x < x_2$  را به تعداد بسیار زیادی بازه‌ی کوچک  $\Delta x_i$  تقسیم کرده‌ایم، از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} T &\sim \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^N \exp \left[ -\frac{\sqrt{2} \Delta x_i}{\hbar} \sqrt{2m(V(x_i) - E)} \right] \\ &= \exp \left[ -\frac{\sqrt{2}}{\hbar} \lim_{\Delta x_i \rightarrow 0} \sum_i \Delta x_i \sqrt{2m(V(x_i) - E)} \right] \quad (۷۱-۴) \\ &\rightarrow \exp \left[ -\frac{\sqrt{2}}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} dx \sqrt{2m[V(x) - E]} \right] \end{aligned}$$

همانطور که در فصل ۹ نشان داده خواهد شد، تقریبی که به این رابطه منجر شد، تنها زمانی معتبر است که پتانسیل  $V(x)$  تابعی هموار و آرام-تغییر از  $x$  باشد.

## ۶-۴ پتانسیل چاه مربعی نامتناهی

### ۱-۶-۴ چاه مربعی نامتقارن

ذره‌ای به جرم  $m$  را در نظر بگیرید که به حرکت درون یک چاه پتانسیل نامتقارن با عمق نامتناهی محدود شده است:

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & x < 0 \\ 0 & 0 \leq x \leq a \\ +\infty & x > a \end{cases} \quad (۷۲-۴)$$

از نظر کلاسیکی، ذره درون این چاه محدود باقی می‌ماند و در نتیجه‌ی بازتاب‌های پیاپی از دیواره‌های چاه، با تکانه‌ی ثابت  $p = \pm \sqrt{2mE}$  به عقب و جلو حرکت می‌کند.

از نظر کوانتومی، انتظار داریم این ذره تنها جواب‌های حالت مقید و یک طیف انرژی غیرواگن گسسته داشته باشد. چون  $V(x)$  در خارج از ناحیه‌ی  $0 \leq x \leq a$  نامتناهی است، تابع موج ذره باید در خارج از مرز صفر باشد. از این رو می‌توانیم تنها به جستجوی جواب‌ها درون چاه پردازیم:

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + k^2 \psi(x) = 0 \quad (۷۳-۴)$$

با  $k^2 = 2mE/\hbar^2$  جواب‌ها عبارتند از

$$\psi(x) = A'e^{ikx} + B'e^{-ikx} \implies \psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (74-4)$$

تابع موج در دیواره‌ها صفر می‌شود ( $\psi(0) = \psi(a) = 0$ ): شرط  $\psi(0) = 0$  نتیجه‌ی  $B = 0$  و  $\psi(a) = A \sin(ka) = 0$  را دارد:

$$k_n a = n\pi \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (75-4)$$

این شرط، انرژی را تعیین می‌کند:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} k_n^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2 \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (76-4)$$

انرژی کوانتیده است و تنها مقدارهای مشخصی مجازند. این انتظار هم می‌رفت زیرا حالت‌های یک ذره که در ناحیه‌ی محدودی از فضا محبوس‌اند، حالت‌های مقید هستند و طیف انرژی هم گسسته است. این به وضوح بر خلاف فیزیک کلاسیک است که در آن انرژی ذره (که از  $E = p^2/(2m)$  به دست می‌آید) هر مقداری را می‌گیرد و انرژی کلاسیکی به صورت پیوسته تغییر می‌کند.

همانطور که می‌توان از (76-4) نتیجه گرفت، باید یادآوری کنیم که انرژی بین ترازهای مجاور ثابت

نیست:

$$E_{n+1} - E_n = 2n + 1 \quad (77-4)$$

که به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} = \frac{(n+1)^2 - n^2}{n^2} = \frac{2n+1}{n^2} \quad (78-4)$$

در حد کلاسیکی  $n \rightarrow \infty$ :

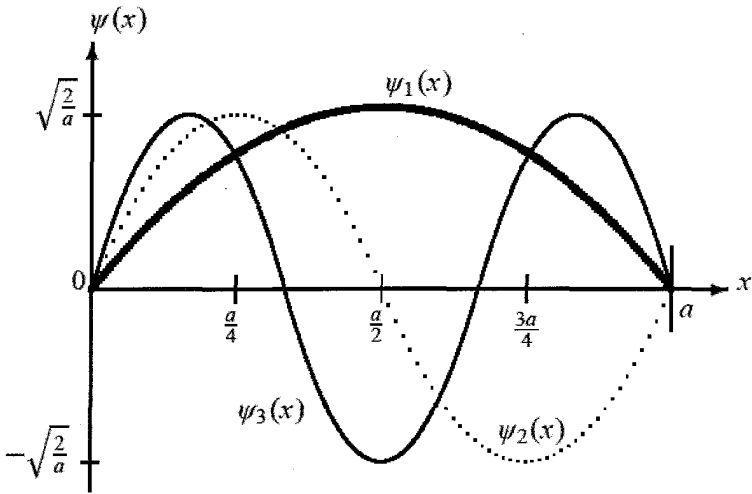
$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{2n+1}{n^2} = 0 \quad (79-4)$$

ترازها آنقدر به یکدیگر نزدیک می‌شوند که در عمل تمیزناپذیر می‌شوند.

چون  $B = 0$  و  $k_n = n\pi/a$  است، (74-4) رابطه‌ی  $\psi_n(x) = A \sin(n\pi x/a)$  را نتیجه می‌دهد.

می‌توانیم ثابت  $A$  را طوری انتخاب کنیم که  $\psi_n(x)$  بهنجار باشد:

$$1 = \int_0^a |\psi_n(x)|^2 dx = |A|^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \implies A = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad (80-4)$$



شکل ۶-۴ پایین‌ترین سه حالت یک چاه پتانسیل نامتناهی،  $\psi_n(x) = \sqrt{2/a} \sin(n\pi x/a)$ ، حالت‌های  $\psi_{2n+1}(x)$  و  $\psi_{2n}(x)$  به ترتیب نسبت به  $x = a/2$  زوج و فردند.

از این رو

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (۸۱-۴)$$

چند تابع نخست در شکل ۶-۴ رسم شده‌اند.

بنابراین جواب معادله‌ی شرودینگر مستقل از زمان به ما انرژی (۷۶-۴) و تابع موج (۸۱-۴) را داد. آنگاه دنباله‌ای نامتناهی از ترازهای انرژی گسسته‌ی متناظر با مقادیر مثبت عدد کوانتومی  $n$  وجود دارد. واضح است که  $n = 0$  نتیجه‌ی نه چندان جالبی را می‌دهد:  $\psi_0(x) = 0$  و  $E_0 = 0$ . بعداً با جزئیات بیشتری الزامات فیزیکی آن را بررسی خواهیم کرد. بنابراین پایین‌ترین انرژی (یا انرژی حالت پایه) متناظر با  $n = 1$  و برابر با  $E_1 = \hbar^2 \pi^2 / (2ma^2)$  است. همانطور که بعداً توضیح داده خواهد شد، این انرژی، انرژی نقطه‌ی صفر نامیده می‌شود زیرا حالتی با انرژی صفر وجود ندارد. حالت‌های متناظر با  $n = 2, 3, 4, \dots$  حالت‌های برانگیخته نامیده می‌شوند و انرژی آنها از رابطه‌ی  $E_n = n^2 E_1$  به دست می‌آید. همانطور که در قضیه‌ی ۲-۴ یادآوری شد، هر تابع  $\psi_n(x)$  دارای  $(n-1)$  گره است. شکل ۶-۴ نشان می‌دهد که تابع‌های  $\psi_{2n+1}(x)$  نسبت به مرکز چاه زوج و تابع‌های  $\psi_{2n}(x)$  فردند. این مطلب را در بخش ۲-۶-۴ زمانی که چاه پتانسیل متقارن را بررسی می‌کنیم، مطالعه خواهیم کرد. توجه کنید که هیچ‌کدام از ترازهای انرژی واگن نیستند (به‌ازای هر تراز انرژی تنها یک ویژه‌تابع وجود دارد) و تابع‌های موج

متناظر با ترازهای انرژی متفاوت، متعامدند:

$$\int_0^a \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = \delta_{mn} \quad (۸۲-۴)$$

چون با حالت‌های مانا سروکار داریم و  $E_n = n^2 E_1$  است، عمومی‌ترین جواب معادله‌ی شرودینگر وابسته به زمان از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) e^{-in^2 E_1 t/\hbar} \quad (۸۳-۴)$$

### انرژی نقطه‌ی صفر

سؤال این است که چرا حالتی با انرژی صفر برای پتانسیل یک چاه مربعی وجود ندارد. اگر ذره انرژی صفر داشته باشد آنگاه درون چاه ساکن خواهد بود و این اصل عدم قطعیت را نقض می‌کند زیرا با جایگزیده یا محدود کردن ذره به ناحیه‌ی محدودی از فضا، ذره تکانه‌ای متناهی به دست خواهد آورد که به یک انرژی جنبشی کمینه می‌انجامد. یعنی جایگزیده کردن حرکت ذره به  $0 \leq x \leq a$  عدم قطعیتی از مرتبه‌ی  $\Delta x \sim a$  را برای مکان بیان می‌کند که مطابق با اصل عدم قطعیت به عدم قطعیت کمینه‌ی  $\Delta p \sim \hbar/a$  برای تکانه می‌انجامد و این به نوبه‌ی خود به یک انرژی جنبشی کمینه از مرتبه‌ی  $\hbar^2/(2ma^2)$  می‌انجامد. این به صورت کیفی در توافق با مقدار دقیق  $E_1 = \pi^2 \hbar^2/(2ma^2)$  است. در واقع، همانطور که در (۴-۲۱۶) نشان داده خواهد شد، محاسبه‌ی دقیق  $\Delta p_1$  به انرژی نقطه‌ی صفر که برابر  $E_1$  است، می‌انجامد.

توجه کنید که چون عدم قطعیت تکانه به صورت وارون با پهنای چاه متناسب است ( $\Delta p \sim \hbar/a$ )، هرگاه پهنای چاهش یابد (یعنی مکان ذره محدود و محدودتر شود) آنگاه عدم قطعیت در  $\hat{P}$  افزایش خواهد یافت. این باعث می‌شود که ذره سریع و سریع‌تر حرکت کند و بنابراین انرژی نقطه‌ی صفر نیز افزایش خواهد یافت. بر عکس، هرگاه پهنای چاه افزایش یابد آنگاه انرژی نقطه‌ی صفر کاهش می‌یابد ولی هرگز صفر نخواهد شد. بنابراین انرژی نقطه‌ی صفر لزوم حرکت کمینه‌ی یک ذره به دلیل جایگزیدگی را منعکس می‌کند. انرژی نقطه‌ی صفر در تمام پتانسیل‌های حالت مقید روی می‌دهد. در حالت پتانسیل‌های بستگی، پایین‌ترین حالت انرژی، انرژی‌ای دارد که بزرگ‌تر از کمینه‌ی انرژی پتانسیل است. این به وضوح بر خلاف مکانیک کلاسیک است که در آن پایین‌ترین انرژی ممکن برابر با مقدار کمینه‌ی انرژی پتانسیل (با انرژی جنبشی صفر) است. در مکانیک کوانتومی، پایین‌ترین حالت به تنهایی پتانسیل را کمینه نمی‌کند ولی به مجموع انرژی‌های جنبشی و پتانسیل اعمال می‌شود و این به یک حالت پایه‌ی متناهی یا انرژی نقطه‌ی صفر می‌انجامد. این مفهوم نتایج فیزیکی دور از دسترسی را در حوزه‌ی دنیای میکروسکوپی دارد. به عنوان مثال، اتم‌ها بدون داشتن حرکت نقطه‌ی صفر نمی‌توانند پایدار باشند زیرا الکترون‌ها به داخل هسته سقوط می‌کنند. همچنین این انرژی نقطه‌ی صفر است که از انجماد هلیوم در دماهای بسیار پایین جلوگیری می‌کند.

مثال زیر نشان می‌دهد که انرژی نقطه‌ی صفر در سیستم‌های ماکروسکوپی نیز حضور دارد ولی بسیار کوچک است ولی در مورد سیستم‌های میکروسکوپی، اندازه‌ی غیرقابل اغمازی دارد.

### مثال ۱-۴ (انرژی نقطه‌ی صفر)

برای نشان دادن این ایده که انرژی نقطه‌ی صفر با رفتن از سیستم‌های ماکروسکوپی به سیستم‌های میکروسکوپی بزرگ‌تر می‌شود، انرژی نقطه‌ی صفر برای ذره‌ای در یک چاه پتانسیل نامتناهی را در سه حالت زیر محاسبه کنید:

(الف) یک توپ  $10^\circ\text{g}$  محدود بر روی خطی به طول  $5\text{m}$

(ب) یک اتم اکسیژن محدود به یک شبکه‌ی  $2 \times 10^{-10}\text{m}$

(پ) یک الکترون محدود به یک اتم  $10^{-10}\text{m}$

حل

(الف) انرژی نقطه‌ی صفر یک توپ  $10^\circ\text{g}$  که به خطی به طول  $5\text{m}$  محدود شده است برابر است با

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \simeq \frac{10 \times 10^{-68}\text{J}}{2 \times 0.1 \times 25} \simeq 2 \times 10^{-68}\text{J} = 1.25 \times 10^{-49}\text{eV} \quad (84-4)$$

این انرژی آنقدر کوچک است که نمی‌توان آن را با روش‌های آزمایشگاهی شناخته شده آشکار یا اندازه‌گیری کرد. (ب) در رابطه با انرژی نقطه‌ی صفر یک اتم اکسیژن محدود به یک شبکه‌ی  $2 \times 10^{-10}\text{m}$  باید گفت که چون اتم اکسیژن ۱۶ نوکلئون دارد، جرم آن از مرتبه‌ی  $26 \times 10^{-27}\text{kg}$   $\simeq 16 \times 1.6 \times 10^{-27}\text{kg}$  است. بنابراین داریم:

$$E = \frac{10^{-67}\text{J}}{2 \times 26 \times 10^{-27} \times 4 \times 10^{-20}} \simeq 0.5 \times 10^{-22}\text{J} \simeq 3 \times 10^{-4}\text{eV} \quad (85-4)$$

(پ) انرژی نقطه‌ی صفر یک الکترون ( $m \sim 10^{-30}\text{kg}$ ) که به یک اتم ( $a \sim 1 \times 10^{-10}\text{m}$ ) محدود است، برابر است با

$$E = \frac{10^{-67}\text{J}}{2 \times 10^{-30} \times 10^{-20}} \simeq 5 \times 10^{-18}\text{J} \simeq 30\text{eV} \quad (86-4)$$

این انرژی در مقیاس اتمی مهم است زیرا انرژی بستگی یک الکترون هیدروژن در حدود  $13\text{eV}$  است. بنابراین انرژی نقطه‌ی صفر برای اجسام ماکروسکوپی قابل چشم‌پوشی ولی برای سیستم‌های میکروسکوپی مهم است.

## ۲-۶-۴ چاه پتانسیل متقارن

اگر پتانسیل (۷۲-۴) به اندازه‌ی  $a/2$  به سمت چپ منتقل شود تا متقارن شود آنگاه چه اتفاقی می‌افتد؟

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & x < -a/2 \\ 0 & -a/2 \leq x \leq a/2 \\ +\infty & x > a/2 \end{cases} \quad (۸۷-۴)$$

ابتدا انتظار داریم که طیف انرژی (۷۶-۴) تحت تأثیر این انتقال قرار نگیرد زیرا هامیلتونی تحت انتقال‌های فضایی ناورد است. چون هامیلتونی تنها شامل قسمت جنبشی است، با تکانه‌ی ذره جابه‌جا می‌شود ( $[\hat{H}, \hat{P}] = 0$ ). طیف انرژی گسسته و غیرواگن است.

دوم این که پیشتر در این فصل دیدیم که برای پتانسیل‌های متقارن ( $V(-x) = V(x)$ )، تابع موج حالت‌های مقید باید زوج یا فرد باشد. می‌توان تابع موج متناظر با پتانسیل (۸۷-۴) را به صورت زیر نوشت:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \left[ \frac{n\pi}{a} \left( x + \frac{a}{2} \right) \right] = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \left( \frac{n\pi}{a} x \right) & (n = 1, 3, 5, 7, \dots) \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \left( \frac{n\pi}{a} x \right) & (n = 2, 4, 6, 8, \dots) \end{cases} \quad (۸۸-۴)$$

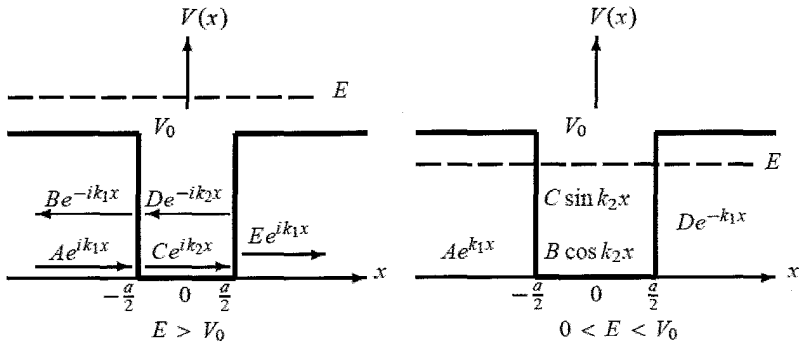
یعنی تابع‌های موج متناظر با عددهای کوانتومی فرد  $n = 1, 3, 5, \dots$  متقارن‌اند ( $\psi(-x) = \psi(x)$ ) و تابع‌های موج متناظر با عددهای زوج  $n = 2, 4, 6, \dots$  پادمقارن‌اند ( $\psi(-x) = -\psi(x)$ ).

## ۷-۴ پتانسیل چاه مربعی متناهی

ذره‌ای به جرم  $m$  را در نظر بگیرید که در پتانسیل متقارن زیر حرکت می‌کند:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x < -a/2 \\ 0 & -a/2 \leq x \leq a/2 \\ V_0 & x > a/2 \end{cases} \quad (۸۹-۴)$$

دو حالت فیزیکی جالب عبارتند از  $E > V_0$  و  $E < V_0$  (شکل ۷-۴ را ببینید). انتظار داریم که به‌ازای  $E > V_0$  جواب‌ها یک طیف انرژی پیوسته با واگنی دوگانه و به‌ازای  $0 < E < V_0$  یک طیف گسسته‌ی غیرواگن را نتیجه دهند.



شکل ۷-۴ پتانسیل چاه مربعی متناهی و جهت‌های انتشار موج‌های فرودی، بازتابیده و عبوری هنگامی که  $E > V_0$  و  $0 < E < V_0$  است.

#### ۱-۷-۴ جواب‌های پراکندگی ( $V_0 < E$ )

از نظر کلاسیکی، هرگاه ذره در ابتدا از سمت چپ با تکانه‌ی ثابت  $\sqrt{2m(E - V_0)}$  فرود بیاید آنگاه بین  $-a/2 \leq x \leq a/2$  تا مقدار  $\sqrt{2mE}$  سرعت خواهد گرفت و سپس در ناحیه‌ی  $x > a$  سرعت آن تا تکانه‌ی اولیه‌اش کاهش می‌یابد. تمام ذره‌هایی که از سمت چپ می‌آیند، عبور خواهند کرد و هیچ‌کدام به عقب بازتابیده نخواهند شد بنابراین  $T = 1$  و  $R = 0$  است.

از نظر کوانتومی و همانطور که برای پتانسیل‌های پله‌ای و سدی انجام دادیم، می‌توانیم ثابت کنیم که ضریب بازتاب سد متناهی است. به دست آوردن جواب کار سراسری است. کافی است روند صورت گرفته در دو بخش قبل را دنبال کنید. تابع موج یک الگوی نوسانی را در هر سه ناحیه دارد (شکل ۷-۴ را ببینید).

#### ۲-۷-۴ جواب‌های حالت مقید ( $0 < E < V_0$ )

از نظر کلاسیکی، هنگامی که  $E < V_0$  است، ذره به صورت کامل به ناحیه‌ی  $-a/2 \leq x \leq a/2$  محدود است و بین  $x = -a/2$  و  $x = a/2$  با تکانه‌ی ثابت  $p = \sqrt{2mE}$  به عقب و جلو می‌جهد. از نظر کوانتومی، جواب‌ها جالبند زیرا انتظار یک طیف انرژی گسسته همراه با توابع موجی را داریم که در دو ناحیه‌ی  $x < -a/2$  و  $x > a/2$  کاهش می‌یابند ولی در ناحیه‌ی  $-a/2 \leq x \leq a/2$  نوسان می‌کنند. در این سه ناحیه می‌توان معادله‌ی شرودینگر را به صورت زیر نوشت:

$$\left( \frac{d^2}{dx^2} - k_1^2 \right) \psi_1(x) = 0 \quad \left( x < -\frac{1}{2}a \right) \quad (90-4)$$

$$\left( \frac{d^2}{dx^2} + k_2^2 \right) \psi_2(x) = 0 \quad \left( -\frac{1}{2}a \leq x \leq \frac{1}{2}a \right) \quad (91-4)$$

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - k_1^2\right) \psi_3(x) = 0 \quad (x > \frac{1}{2}a) \quad (92-4)$$

که در آنها  $k_2^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$  و  $k_1^2 = 2mE/\hbar^2$ . با حذف جواب‌های از نظر فیزیکی غیرقابل قبول که به ازای مقادیرهای بزرگ  $|x|$  به صورت نمایی بزرگ می‌شوند، می‌توانیم جواب این معادله‌ی شرودینگر در ناحیه‌های  $x > a/2$  و  $x < -a/2$  را به صورت زیر بنویسیم:

$$\psi_1(x) = Ae^{k_1x} \quad (x < -\frac{1}{2}a) \quad (93-4)$$

$$\psi_3(x) = De^{-k_1x} \quad (x > \frac{1}{2}a) \quad (94-4)$$

همانطور که در (۴-۴) یادآوری شد، چون ویژه‌تابع‌های حالت مقید هامیلتونی‌های یک بعدی متقارن، تحت وارونی فضا زوج یا فردند بنابراین جواب‌های (۴-۹۰) تا (۴-۹۲) پادمقارنند (زوجند)

$$\psi_a(x) = \begin{cases} Ae^{k_1x} & x < -a/2 \\ C \sin(k_2x) & -a/2 \leq x \leq a/2 \\ De^{-k_1x} & x > a/2 \end{cases} \quad (95-4)$$

یا متقارنند (فردند):

$$\psi_s(x) = \begin{cases} Ae^{k_1x} & x < -a/2 \\ B \cos(k_2x) & -a/2 \leq x \leq a/2 \\ De^{-k_1x} & x > a/2 \end{cases} \quad (96-4)$$

برای تعیین ویژه‌مقادیر باید از شرایط پیوستگی در  $x = \pm a/2$  استفاده کنیم. پیوستگی مشتق لگاریتمی  $(1/\psi_a(x))d\psi_a(x)/dx$  تابع موج  $\psi_a(x)$  در  $x = \pm a/2$  نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$k_2 \cot\left(\frac{k_2 a}{2}\right) = -k_1 \quad (97-4)$$

به صورت مشابه، پیوستگی  $(1/\psi_s(x))d\psi_s(x)/dx$  در  $x = \pm a/2$  نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$k_2 \tan\left(\frac{k_2 a}{2}\right) = k_1 \quad (98-4)$$

معادله‌های غیرجبری (۴-۹۷) و (۴-۹۸) را نمی‌توان به صورت مستقیم حل کرد. می‌توانیم این معادله‌ها را به صورت ترسیمی یا عددی حل کنیم. برای حل این معادله‌ها به صورت ترسیمی، تنها باید آنها را به



شکل‌های پیشنهادی زیر بازنویسی کنیم:

$$-\alpha_n \cot \alpha_n = \sqrt{R^2 - \alpha_n^2} \quad (\text{به‌ازای حالت‌های فرد}) \quad (۹۹-۴)$$

$$\alpha_n \tan \alpha_n = \sqrt{R^2 - \alpha_n^2} \quad (\text{به‌ازای حالت‌های زوج}) \quad (۱۰۰-۴)$$

که در آن  $\alpha_n^2 = (k_2 a/2)^2 = ma^2 E_n / (2\hbar^2)$  و  $R^2 = ma^2 V_0 / (2\hbar^2)$  است. این معادله‌ها با وارد کردن  $k_2 = \sqrt{2mE/\hbar^2}$  و  $k_1 = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$  در (۹۷-۴) و (۹۸-۴) به‌دست آمده‌اند. طرف چپ (۹۹-۴) و (۱۰۰-۴) از تابع‌های مثلثاتی و طرف راست از دایره‌ای به شعاع  $R$  تشکیل شده است. جواب‌ها از نقطه‌هایی به‌دست می‌آیند که در آنها دایره  $\sqrt{R^2 - \alpha_n^2}$  تابع‌های  $-\alpha_n \cot \alpha_n$  و  $\alpha_n \tan \alpha_n$  را قطع می‌کند (شکل ۸-۴). این جواب‌ها یک مجموعه‌ی گسسته را تشکیل می‌دهند. همانطور که در شکل ۸-۴ نشان داده شده است، تقاطع دایره‌ی کوچک با منحنی  $\alpha_n \tan \alpha_n$  تنها یک حالت مقید ( $n = 0$ ) را نتیجه می‌دهد در حالی که تقاطع دایره‌ی بزرگ با  $\alpha_n \tan \alpha_n$  دو حالت مقید ( $n = 0, 2$ ) و تقاطع آن با  $-\alpha_n \cot \alpha_n$  دو حالت مقید دیگر ( $n = 1, 3$ ) را نتیجه می‌دهد.

تعداد جواب‌ها به اندازه‌ی  $R$  بستگی دارد که به نوبه‌ی خود به عمق  $V_0$  و پهنای  $a$  چاه بستگی دارد زیرا  $R = \sqrt{ma^2 V_0 / (2\hbar^2)}$ . هرچه چاه عمیق‌تر و پهن‌تر باشد، مقدار  $R$  بزرگ‌تر و از این رو تعداد حالت‌های مقید بیشتر می‌شود. توجه کنید که همیشه حداقل یک حالت مقید (یعنی یک تقاطع) وجود دارد و اهمیتی ندارد که  $V_0$  چقدر کوچک باشد. هنگامی که

$$0 < R < \frac{\pi}{2} \quad \text{یا} \quad 0 < V_0 < \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \frac{2\hbar^2}{ma^2} \quad (۱۰۱-۴)$$

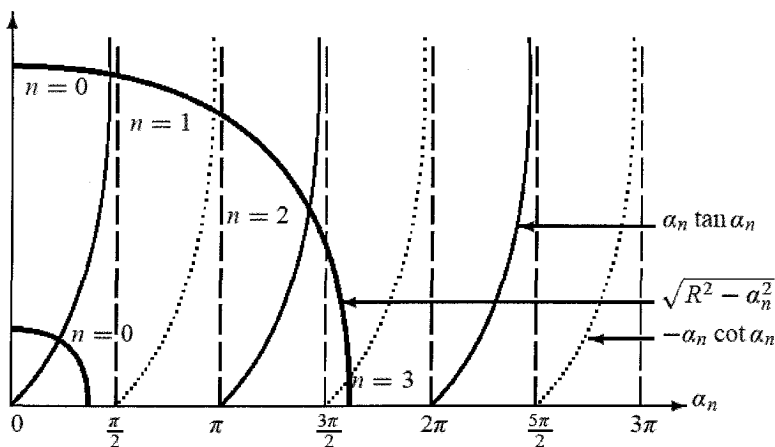
تنها یک حالت مقید متناظر با  $n = 0$  وجود دارد (شکل ۸-۴ را ببینید). این حالت (حالت پایه) زوج است. هنگامی که

$$\frac{\pi}{2} < R < \pi \quad \text{یا} \quad \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \frac{2\hbar^2}{ma^2} < V_0 < \pi^2 \frac{2\hbar^2}{ma^2} \quad (۱۰۲-۴)$$

دو حالت مقید وجود دارد: یک حالت زوج (حالت پایه) متناظر با  $n = 0$  و نخستین حالت فرد متناظر با  $n = 1$  حال اگر

$$\pi < R < \frac{3\pi}{2} \quad \text{یا} \quad \pi^2 \frac{2\hbar^2}{ma^2} < V_0 < \left(\frac{3\pi}{2}\right)^2 \frac{2\hbar^2}{ma^2} \quad (۱۰۳-۴)$$

سه حالت مقید وجود دارد: حالت پایه (حالت زوج)  $n = 0$ ، نخستین حالت برانگیخته (حالت فرد) متناظر با  $n = 1$  و دومین حالت برانگیخته (حالت زوج) که متناظر با  $n = 2$  است. به‌صورت کلی،



شکل ۸-۴ جواب‌های ترسیمی برای پتانسیل چاه مربعی منتهای: این جواب‌ها از تقاطع‌های  $\alpha_n \tan \alpha_n$  و  $\sqrt{R^2 - \alpha_n^2}$  و  $-\alpha_n \cot \alpha_n$  به دست می‌آیند که در آنها  $\alpha_n^2 = ma^2 E_n / (\hbar^2)$  و  $R^2 = ma^2 V_0 / (\hbar^2)$  است.

پهنای چاه که در آن  $n$  حالت مجازند، از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$R = \frac{n\pi}{2} \quad \text{یا} \quad V_0 = \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \frac{\hbar^2}{ma^2} n^2 \quad (۱۰۴-۴)$$

بنابراین طیف از مجموعه‌ای از حالت‌های زوج و فرد یک در میان تشکیل شده است: پایین‌ترین حالت (حالت پایه) زوج است، حالت بعدی (نخستین حالت برانگیخته) فرد است و به همین ترتیب.

در حالت حدی  $V_0 \rightarrow \infty$ ، شعاع  $R$  دایره نیز نامتناهی است و از این رو تابع  $\sqrt{R^2 - \alpha_n^2}$  تابع‌های  $\alpha_n \tan \alpha_n$  و  $-\alpha_n \cot \alpha_n$  را در مجانب‌های  $\alpha_n = n\pi/2$  قطع خواهد کرد زیرا هنگامی که  $V_0 \rightarrow \infty$  میل می‌کند، هر دو تابع  $\tan \alpha_n$  و  $\cot \alpha_n$  نامتناهی می‌شوند:

$$\tan \alpha_n \rightarrow \infty \quad \Rightarrow \quad \alpha_n = \frac{2n+1}{2}\pi \quad (n = 0, 1, 2, 3, \dots) \quad (۱۰۵-۴)$$

$$\cot \alpha_n \rightarrow \infty \quad \Rightarrow \quad \alpha_n = n\pi \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (۱۰۶-۴)$$

با ترکیب این دو حالت به دست می‌آوریم:

$$\alpha_n = \frac{n\pi}{2} \quad (1, 2, 3, \dots) \quad (۱۰۷-۴)$$

چون  $\alpha_n^2 = ma^2 E_n / (\hbar^2)$  است، می‌بینیم که دوباره عبارت مربوط به انرژی چاه نامتناهی به دست می‌آید:

$$\alpha_n = \frac{n\pi}{2} \rightarrow E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 \quad (۱۰۸-۴)$$

## مثال ۲-۴

تعداد حالت‌های مقید و انرژی‌های متناظر برای پتانسیل چاه مربعی متناهی را هنگامی که: (الف)  $R = 1$  (یعنی  $R = 1$ ) و (ب)  $R = 2$  است، بیابید.

حل

(الف) با توجه به شکل ۸-۴، هنگامی که  $R = \sqrt{ma^2 V_0 / (2\hbar^2)} = 1$  است، تنها یک حالت مقید وجود دارد زیرا  $\alpha_n \leq R$  است. این حالت مقید متناظر با  $n = 0$  است. انرژی متناظر با آن از تقاطع  $\alpha_0 \tan \alpha_0$  با  $\sqrt{1 - \alpha_0^2}$  به دست می‌آید:

$$\alpha_0 \tan \alpha_0 = \sqrt{1 - \alpha_0^2} \implies \alpha_0^2 (1 + \tan^2 \alpha_0) = 1 \implies \cos^2 \alpha_0 = \alpha_0^2 \quad (109-4)$$

جواب عددی  $\alpha_0 = \alpha_0^2$  به صورت عددی برابر با  $\alpha_0 = 0.73909$  است. بنابراین انرژی متناظر از رابطه‌ی  $\sqrt{ma^2 E_0 / (2\hbar^2)} = 0.73909$  به دست می‌آید که  $E_0 \simeq 1.7 \hbar^2 / (ma^2)$  را نتیجه می‌دهد.

(ب) هنگامی که  $R = 2$  است، دو حالت مقید حاصل از تقاطع‌های  $\sqrt{4 - \alpha_1^2}$  با  $\alpha_1 \tan \alpha_1$  و  $-\alpha_1 \cot \alpha_1$  وجود دارد که به ترتیب با  $n = 1$  و  $n = 0$  متناظرند. جواب‌های عددی معادله‌های متناظر

$$\alpha_0 \tan \alpha_0 = \sqrt{4 - \alpha_0^2} \implies 4 \cos^2 \alpha_0 = \alpha_0^2 \quad (110-4)$$

$$-\alpha_1 \cot \alpha_1 = \sqrt{4 - \alpha_1^2} \implies 4 \sin^2 \alpha_1 = \alpha_1^2 \quad (111-4)$$

به ترتیب  $\alpha_0 \simeq 1.03$  و  $\alpha_1 \simeq 1.9$  را نتیجه می‌دهند. انرژی‌های متناظر عبارتند از

$$\alpha_0 = \sqrt{\frac{ma^2 E_0}{2\hbar^2}} \simeq 1.03 \implies E_0 \simeq \frac{2.12 \hbar^2}{ma^2} \quad (112-4)$$

$$\alpha_1 = \sqrt{\frac{ma^2 E_1}{2\hbar^2}} \simeq 1.9 \implies E_1 \simeq \frac{7.22 \hbar^2}{ma^2} \quad (113-4)$$

## ۱-۴ نوسانگر هماهنگ

نوسانگر هماهنگ یکی از معدود مسأله‌هایی است که برای تمام شاخه‌های فیزیک مهم است و مدلی مفید برای دسته‌ای از پدیده‌های ارتعاشی که با آنها روبرو می‌شویم (به عنوان مثال در مکانیک کلاسیک،

الکتروینامیک، مکانیک آماری، فیزیک حالت جامد، فیزیک اتمی، فیزیک هسته‌ای و فیزیک ذرات بنیادی) را فراهم می‌کند. در مکانیک کوانتومی، مسأله‌ی نوسانگر هماهنگ ساده به عنوان ابزاری با ارزش برای نشان دادن مفاهیم پایه و صورت‌بندی نظریه عمل می‌کند.

هایملتونی ذره‌ای به جرم  $m$  که تحت تأثیر یک پتانسیل یک‌بعدی با بسامد  $\omega$  نوسان می‌کند، برابر است

با

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{X}^2 \quad (114-4)$$

در اینجا مسأله این است که چگونه ویژه‌مقدارهای انرژی و ویژه‌حالت‌های این هایملتونی را پیدا کنیم. می‌توان این مسأله را به دو روش جداگانه مطالعه کرد. روش نخست که روش تحلیلی نامیده می‌شود، از حل معادله‌ی شرودینگر مستقل از زمان (TISE) هایملتونی (۴-۱۱۴) تشکیل شده است. روش دوم که روش نزدبانی یا جبری نامیده می‌شود به حل معادله‌ی شرودینگر نمی‌پردازد بلکه به جای آن با جبر عملگری عملگرهایی سروکار دارد که به عنوان عملگرهای آفرینش<sup>۵</sup> و نابودی یا عملگرهای نزدبانی شناخته می‌شوند. این روش اصولاً یک فرمول‌بندی ماتریسی است زیرا کمیت‌های مختلف را برحسب ماتریس‌ها بیان می‌کند. در اینجا قصد داریم تا از روش دوم استفاده کنیم زیرا سراسرتر، زیباتر و بسیار ساده‌تر از حل معادله‌ی شرودینگر است. برخلاف مثال‌هایی که تاکنون دیدیم، حل معادله‌ی شرودینگر برای پتانسیل  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$  کار ساده‌ای نیست. قبل از این که به روش دوم بپردازیم، بیایید مرحله‌های اصلی مربوط به روش نخست را بیان کنیم.

### مختصری از روش تحلیلی

این رهیافت بر پایه‌ی استفاده از روش سری توانی برای حل معادله‌ی دیفرانسیلی (شرودینگر) زیر است:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi(x) = E\psi(x) \quad (115-4)$$

که می‌توان آن را به معادله‌ی دیفرانسیل زیر کاهش داد:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \left( \frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{x^2}{x_0^2} \right) \psi(x) = 0 \quad (116-4)$$

که در آن  $x_0 = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$  ثابتی است که دارای بعد طول است و همانطور که بعداً دیده خواهد شد، مقیاس طول نوسانگر را تنظیم می‌کند. ریاضیدانان مدت‌ها قبل از پیدایش مکانیک کوانتومی، روی جواب‌های معادله‌های دیفرانسیلی، مانند (۴-۱۱۶) کار کرده بودند (این جواب‌ها برحسب برخی از توابع خاص چندجمله‌ای‌های هرمیت بیان می‌شوند). وجود جمله‌ی  $x^2\psi(x)$  در (۴-۱۱۶) پیشنهاد می‌کند

که یک جواب گاوسی شکل را امتحان کنیم<sup>۶</sup>:  $\psi(x) = f(x) \exp(-x^2/2x_0^2)$  که در آن  $f(x)$  تابعی از  $x$  است. با وارد کردن این تابع آزمون در (۱۱۶-۴)، معادله‌ی دیفرانسیلی برای  $f(x)$  به دست می‌آوریم. می‌توان این معادله‌ی دیفرانسیل جدید را با بسط  $f(x)$  برحسب سری توانی (یعنی  $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n$ ) حل کرد که در آن  $a_n$  تنها یک ضریب است. و زمانی که در معادله‌ی دیفرانسیل وارد شود، به یک رابطه‌ی بازگشتی می‌انجامد. با پایان دادن به سری توانی در مقداری متناهی از  $n$  (زیرا تابع موج  $\psi(x)$  در همه‌جا به خصوص در  $x \rightarrow \pm\infty$  باید متناهی باشد)، رابطه‌ی بازگشتی عبارتی برای ویژه‌مقدارهای انرژی نتیجه می‌دهد که گسسته یا کوانتیده‌اند:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (n = 0, 1, 2, 3, \dots) \quad (117-4)$$

با کمی محاسبات، می‌توانیم نشان دهیم که توابع موجی که از نظر فیزیکی قابل قبول‌اند و در (۱۱۶-۴) صدق می‌کنند، با رابطه‌ی زیر داده می‌شوند:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} 2^n n! x_0}} e^{-x^2/2x_0^2} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right) \quad (118-4)$$

که در آن  $H_n(y)$  چندجمله‌ای‌های مرتبه‌ی  $n$ ام هستند و چندجمله‌ای‌های هرمیت نامیده می‌شوند:

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2} \quad (119-4)$$

از این رابطه، محاسبه‌ی چندجمله‌ای نخست کار ساده‌ای است:

$$\begin{aligned} H_0(y) &= 1, & H_1(y) &= 2y \\ H_2(y) &= 4y^2 - 2, & H_3(y) &= 8y^3 - 12y \\ H_4(y) &= 16y^4 - 48y^2 + 12, & H_5(y) &= 32y^5 - 160y^3 + 120y \end{aligned} \quad (120-4)$$

هنگام مطالعه‌ی روش دوم، به تفسیر فیزیکی نتایج نوسانگر هماهنگ خواهیم پرداخت.

### روش جبری

حال بیایید ببینیم که چگونه باید مسأله‌ی ویژه‌مقدار نوسانگر هماهنگ را با استفاده از روش جبری حل کنیم. برای این کار، باید هامیلتونی (۱۱۴-۴) را برحسب دو عملگر هرمیتی و بدون بعد  $\hat{p} = \hat{P}/\sqrt{m\hbar\omega}$  و  $\hat{q} = \hat{X}\sqrt{m\omega/\hbar}$  بازنویسی کنیم:

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{p}^2 + \hat{q}^2) \quad (121-4)$$

<sup>۶</sup> جواب‌هایی به شکل  $\psi(x) = f(x) \exp(x^2/2x_0^2)$  از نظر فیزیکی غیر قابل قبول‌اند زیرا در  $x \rightarrow \pm\infty$  واگرا می‌شوند.

و سپس دو عملگر غیرهرمیتی و بدون بعد زیر را معرفی کنیم:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{\hbar}}(\hat{q} + i\hat{p}), \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{\hbar}}(\hat{q} - i\hat{p}) \quad (122-4)$$

معنی فیزیکی عملگرهای  $\hat{a}$  و  $\hat{a}^\dagger$  بعداً توضیح داده خواهد شد. توجه کنید که

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} = \frac{1}{\hbar}(\hat{q} - i\hat{p})(\hat{q} + i\hat{p}) = \frac{1}{\hbar}(\hat{q}^2 + \hat{p}^2 + i\hat{q}\hat{p} - i\hat{p}\hat{q}) = \frac{1}{\hbar}(\hat{q}^2 + \hat{p}^2) + \frac{i}{\hbar}[\hat{q}, \hat{p}] \quad (123-4)$$

که در آن با استفاده از  $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$ ، می‌توانیم ثابت کنیم که جابه‌جاگر بین  $\hat{q}$  و  $\hat{p}$  برابر است با

$$[\hat{q}, \hat{p}] = \left[ \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{X}, \frac{1}{\sqrt{\hbar m\omega}} \hat{P} \right] = \frac{1}{\hbar} [\hat{X}, \hat{P}] = i \quad (124-4)$$

ازین رو

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} = \frac{1}{\hbar}(\hat{q}^2 + \hat{p}^2) - \frac{1}{\hbar} \quad (125-4)$$

یا

$$\frac{1}{\hbar}(\hat{q}^2 + \hat{p}^2) = \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{\hbar} \quad (126-4)$$

با وارد کردن (126-4) در (121-4)، رابطه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{\hbar} \right) = \hbar\omega \left( \hat{N} + \frac{1}{\hbar} \right) \quad \text{با} \quad \hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a} \quad (127-4)$$

که در آن  $\hat{N}$  به عنوان عملگر تعداد یا عملگر عدد اشغال نامیده می‌شود که به وضوح هرمیتی است.

حال بیایید جابه‌جاگر  $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]$  را به دست آوریم. چون  $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$  است، داریم:  $[\hat{q}, \hat{p}] =$

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i \quad \text{و ازین رو}$$

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \frac{1}{\hbar}[\hat{q} + i\hat{p}, \hat{q} - i\hat{p}] = -i[\hat{q}, \hat{p}] = 1 \quad (128-4)$$

یا

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad (129-4)$$

## ۱-۸-۴ ویژه‌مقدارهای انرژی

توجه کنید  $\hat{H}$  که از (۱۲۷-۴) به دست می‌آید، با  $\hat{N}$  جابه‌جا می‌شود زیرا  $\hat{H}$  برحسب  $\hat{N}$  خطی است. بنابراین  $\hat{H}$  و  $\hat{N}$  می‌توانند مجموعه‌ای از ویژه‌حالت‌های مشترک را که با  $|n\rangle$  نمایش داده می‌شوند داشته باشند:

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle \quad (۱۳۰-۴)$$

و

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (۱۳۱-۴)$$

حالت‌های  $|n\rangle$  ویژه‌حالت‌های انرژی نامیده می‌شوند. با ترکیب (۱۲۷-۴) و (۱۳۱-۴) مستقیماً ویژه‌مقدارهای انرژی را به دست می‌آوریم:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (۱۳۲-۴)$$

بعداً نشان خواهیم داد که  $n$  یک عدد صحیح مثبت است و نمی‌تواند مقادیر منفی داشته باشد. اکنون می‌توان معنی فیزیکی عملگرهای  $\hat{a}$ ،  $\hat{a}^\dagger$  و  $\hat{N}$  را روشن کرد. ابتدا به دو جابه‌جاگر زیر که آنها را می‌توان از (۱۲۹-۴) و (۱۲۷-۴) به دست آورد، نیاز داریم:

$$[\hat{a}, \hat{H}] = \hbar\omega\hat{a}, \quad [\hat{a}^\dagger, \hat{H}] = -\hbar\omega\hat{a}^\dagger \quad (۱۳۳-۴)$$

این رابطه‌های جابه‌جایی همراه با (۱۳۱-۴) به رابطه‌های زیر می‌انجامند:

$$\hat{H}(\hat{a}|n\rangle) = (\hat{a}\hat{H} - \hbar\omega\hat{a})|n\rangle = (E_n - \hbar\omega)(\hat{a}|n\rangle) \quad (۱۳۴-۴)$$

$$\hat{H}(\hat{a}^\dagger|n\rangle) = (\hat{a}^\dagger\hat{H} + \hbar\omega\hat{a}^\dagger)|n\rangle = (E_n + \hbar\omega)(\hat{a}^\dagger|n\rangle) \quad (۱۳۵-۴)$$

بنابراین  $\hat{a}|n\rangle$  و  $\hat{a}^\dagger|n\rangle$  به ترتیب ویژه‌حالت‌های  $\hat{H}$  با ویژه‌مقدارهای  $(E_n - \hbar\omega)$  و  $(E_n + \hbar\omega)$  هستند. بنابراین اثر  $\hat{a}$  و  $\hat{a}^\dagger$  حالت‌های انرژی جدیدی را تولید می‌کند که به ترتیب یک واحد پایین‌تر و بالاتر از  $\hbar\omega$  هستند. در نتیجه،  $\hat{a}$  و  $\hat{a}^\dagger$  به ترتیب به عنوان عملگرهای پایین‌برنده و بالا‌برنده (یا عملگرهای نابودی و آفرینش) شناخته می‌شوند. این عملگرها به عنوان عملگرهای نزدبانی نیز شناخته می‌شوند.

حال تعیین می‌کنیم که چگونه عملگرهای  $\hat{a}$  و  $\hat{a}^\dagger$  روی ویژه‌حالت‌های انرژی  $|n\rangle$  اثر می‌کنند. چون  $\hat{a}$  و  $\hat{a}^\dagger$  با  $\hat{N}$  جابه‌جا نمی‌شوند، حالت‌های  $|n\rangle$  ویژه‌حالت‌های  $\hat{a}$  و  $\hat{a}^\dagger$  نیستند. با استفاده از (۱۲۹-۴) همراه با  $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$  می‌توانیم نشان دهیم که

$$[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a}, \quad [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \quad (۱۳۶-۴)$$

از این رو  $\hat{N}\hat{a} = \hat{a}(\hat{N} - 1)$  و  $\hat{N}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger(\hat{N} + 1)$ . با ترکیب این رابطه‌ها با (۴-۱۳۰) رابطه‌های زیر را به دست می‌آوریم:

$$\hat{N}(\hat{a}|n\rangle) = \hat{a}(\hat{N} - 1)|n\rangle = (n - 1)(\hat{a}|n\rangle) \quad (۴-۱۳۷)$$

$$\hat{N}(\hat{a}^\dagger|n\rangle) = \hat{a}^\dagger(\hat{N} + 1)|n\rangle = (n + 1)(\hat{a}^\dagger|n\rangle) \quad (۴-۱۳۸)$$

این رابطه‌ها نشان می‌دهند که  $\hat{a}|n\rangle$  و  $\hat{a}^\dagger|n\rangle$  به ترتیب ویژه‌حالت‌های  $\hat{N}$  با ویژه‌مقدارهای  $(n - 1)$  و  $(n + 1)$  هستند. این بیان می‌کند که هنگامی که  $\hat{a}$  و  $\hat{a}^\dagger$  روی  $|n\rangle$  اثر می‌کنند، به ترتیب  $n$  را به اندازه‌ی یک واحد کاهش یا افزایش می‌دهند. یعنی اثر  $\hat{a}$  روی  $|n\rangle$ ، حالت جدید  $|n - 1\rangle$  را تولید می‌کند (یعنی  $|n - 1\rangle \sim \hat{a}|n\rangle$ ) و اثر  $\hat{a}^\dagger$  روی  $|n\rangle$ ، حالت  $|n + 1\rangle$  را به وجود می‌آورد. بنابراین از (۴-۱۳۷) می‌توانیم بنویسیم:

$$\hat{a}|n\rangle = c_n|n - 1\rangle \quad (۴-۱۳۹)$$

که در آن  $c_n$  ثابتی است که باید از این لازمه که حالت‌های  $|n\rangle$  باید به‌ازای تمام مقدارهای  $n$  بهنجار باشند، تعیین شود. از یک سو، (۴-۱۳۹) نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\langle n|\hat{a}^\dagger\rangle \cdot (\hat{a}|n\rangle) = \langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = |c_n|^2 \langle n - 1|n - 1\rangle = |c_n|^2 \quad (۴-۱۴۰)$$

و از سوی دیگر، (۴-۱۳۰) رابطه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\langle n|\hat{a}^\dagger\rangle \cdot (\hat{a}|n\rangle) = \langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n\langle n|n\rangle = n \quad (۴-۱۴۱)$$

هنگامی که دو رابطه‌ی آخر با هم ترکیب شوند، نتیجه‌ی زیر را می‌دهند:

$$|c_n|^2 = n \quad (۴-۱۴۲)$$

این رابطه بیان می‌کند که  $n$  (که برابر با هنجار  $\hat{a}|n\rangle$  است، (۴-۱۴۱) را ببینید) نمی‌تواند منفی باشد:  $n \geq 0$  است زیرا هنجار یک کمیت مثبت است. با جاگذاری (۴-۱۴۲) در (۴-۱۳۹) به نتیجه‌ی زیر

می‌رسیم:

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n - 1\rangle \quad (۴-۱۴۳)$$

این معادله نشان می‌دهد که اعمال متوالی عملگر  $\hat{a}$  روی  $|n\rangle$  دنباله‌ای از ویژه‌بردارهای  $|n - 1\rangle$ ،  $|n - 2\rangle$ ،  $|n - 3\rangle$  و ... را تولید می‌کند. چون  $n \geq 0$  و  $\langle n|\hat{a}^\dagger\rangle = 0$  است، این دنباله باید به  $n = 0$  ختم شود. این زمانی درست است که از یک مقدار صحیح  $n$  شروع کنیم. اما اگر از یک عد غیر صحیح  $n$  شروع کنیم آنگاه دنباله پایان نمی‌پذیرد و از این رو به ویژه‌بردارهایی با مقدارهای منفی  $n$  می‌انجامد. ولی همانطور



که در بالا نشان داده شد، چون  $n$  نمی‌تواند منفی باشد بنابراین نتیجه می‌گیریم که  $n$  باید یک عدد صحیح نامنفی باشد.

حال (همانطور که برای (۴-۱۴۳) انجام دادیم) به آسانی می‌توانیم نشان دهیم که

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad (۴-۱۴۴)$$

این معادله بیان می‌کند که اعمال متوالی  $\hat{a}^\dagger$  روی  $|n\rangle$  دنباله‌ای نامتناهی از ویژه‌بردارهای  $|n+1\rangle$ ،  $|n+2\rangle$ ،  $|n+3\rangle$  و ... را تولید می‌کند. چون  $n$  یک عدد صحیح مثبت است بنابراین طیف انرژی یک نوسانگر هماهنگ (که توسط (۴-۱۳۲) مشخص می‌شود) گسسته است:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (n = 0, 1, 2, 3, \dots) \quad (۴-۱۴۵)$$

این عبارت مشابه با عبارت به‌دست آمده از روش نخست است (معادله‌ی (۴-۱۱۷) را ببینید). طیف انرژی نوسانگر هماهنگ از ترازهای انرژی تشکیل شده است که فاصله‌ی یکسانی دارند:  $E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$ . که ایده‌ی مشهور انرژی هم‌فاصله‌ی پلانک است (انرژی تابش گسیل شده توسط بارهای در حال نوسان از دایواره‌های درونی کاواک) باید تنها به‌صورت بسته‌هایی (کوانتوم‌ها) با مضرب صحیحی از  $\hbar\omega$  باشند) که همانطور که در فصل ۱ یادآوری شد، به پیدایش مکانیک کوانتومی انجامید.

همانطور که برای حالت‌های مقید پتانسیل‌های یک‌بعدی انتظار می‌رفت، طیف انرژی هم‌گسسته و هم‌غیرواگن است. دوباره، مانند مورد پتانسیل چاه مربعی نامتناهی، با پدیده‌ی انرژی نقطه‌ی صفر روبرو می‌شویم: پایین‌ترین ویژه‌مقدار انرژی نوسانگر صفر نیست بلکه به جای آن برابر با  $E_0 = \hbar\omega/2$  است و انرژی نقطه‌ی صفر نوسانگر نامیده می‌شود زیرا متناظر با  $n = 0$  است. انرژی نقطه‌ی صفر سیستم‌های حالت مقید نمی‌تواند صفر باشد در غیر این صورت اصل عدم قطعیت نقض می‌شود. به عنوان مثال، برای نوسانگر هماهنگ، انرژی کمینه‌ی کلاسیکی متناظر با  $x = 0$  و  $p = 0$  می‌شد و در این حالت نوسان‌هایی وجود نمی‌داشت. این موضوع بیان می‌کند که ما به‌صورت همزمان و با دقت مطلق تکانه و مکان سیستم را می‌دانیم که این برخلاف اصل عدم قطعیت است.

#### ۴-۸-۲ ویژه‌حالت‌های انرژی

می‌توان روش جبری یا عملگری را برای تعیین ویژه‌بردارهای انرژی نیز به کار برد. ابتدا با استفاده از (۴-۱۴۴) می‌بینیم که می‌توان ویژه‌بردارهای مختلف را برحسب حالت پایه‌ی  $|0\rangle$  به‌صورت زیر نوشت:

$$|1\rangle = \hat{a}^\dagger |0\rangle \quad (۴-۱۴۶)$$

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{a}^\dagger |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2!}} (\hat{a}^\dagger)^2 |0\rangle \quad (۴-۱۴۷)$$

$$|3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3!}} \hat{a}^\dagger |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3!}} (\hat{a}^\dagger)^3 |0\rangle \quad (148-4)$$

⋮

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a}^\dagger |n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle \quad (149-4)$$

بنابراین برای یافتن هر ویژه‌حالت برانگیخته‌ی  $|n\rangle$ ، تنها باید  $n$  بار پیپای  $\hat{a}^\dagger$  را روی  $|0\rangle$  اثر دهیم.

توجه کنید که هر مجموعه‌ای از کت‌های  $|n\rangle$  و  $|n'\rangle$  (که متناظر با ویژه‌مقدارهای متفاوتی هستند) باید متعامد باشد ( $\langle n'|n\rangle \sim \delta_{n',n}$ ) زیرا  $\hat{H}$  هرمیتی است و هیچ‌یک از ویژه‌حالت‌های آن واگن نیست. علاوه‌براین حالت‌های  $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, \dots, |n\rangle, \dots$  ویژه‌حالت‌های همزمان  $\hat{H}$  و  $\hat{N}$  هستند. مجموعه‌ی  $\{|n\rangle\}$  یک پایه‌ی متعامد بهنجار و کامل را می‌سازد:

$$\langle n'|n\rangle = \delta_{n',n}, \quad \sum_{n=0}^{+\infty} |n\rangle \langle n| = 1 \quad (150-4)$$

#### ۳-۸-۴ ویژه‌حالت‌های انرژی در فضای مکان

حال بیائید تابع موج نوسانگر هماهنگ را در نمایش مکان تعیین می‌کنیم.

معادله‌های (۱۴۶-۴) تا (۱۴۹-۴) نشان می‌دهند که با دانستن تابع موج حالت پایه، می‌توانیم هر ویژه‌حالت دیگری را با اعمال پیپای عملگر  $\hat{a}^\dagger$  روی حالت پایه تعیین کنیم. بنابراین ابتدا تابع موج حالت پایه را در نمایش مکان تعیین می‌کنیم.

عملگر  $p$  (که به صورت  $\hat{p} = \hat{P}/\sqrt{m\hbar\omega}$  تعریف می‌شود) در فضای مکان از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\hat{p} = -\frac{i\hbar}{\sqrt{m\hbar\omega}} \frac{d}{dx} = -ix_0 \frac{d}{dx} \quad (151-4)$$

که در آن همانطور که در بالا بیان شد،  $x_0 = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$  ثابتی با بعد طول است و مقیاس طول نوسانگر را تنظیم می‌کند. به آسانی می‌توانیم نشان دهیم که می‌توان عملگرهای نابودی و آفرینش  $\hat{a}$  و  $\hat{a}^\dagger$  (که در (۱۲۲-۴) تعریف شده‌اند) را در نمایش مکان به صورت زیر نوشت:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\hat{X}}{x_0} + x_0 \frac{d}{dx} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}x_0} \left( \hat{X} + x_0^2 \frac{d}{dx} \right) \quad (152-4)$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\hat{X}}{x_0} - x_0 \frac{d}{dx} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}x_0} \left( \hat{X} - x_0^2 \frac{d}{dx} \right) \quad (153-4)$$

با استفاده از (۱۵۲-۴) می‌توانیم معادله‌ی  $\hat{a}|\circ\rangle = 0$  را در فضای مکان به صورت زیر بنویسیم:

$$\langle x|\hat{a}|\circ\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}x_0} \langle x|\hat{X} + x_0 \frac{d}{dx}|\circ\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}x_0} \left( x\psi_0(x) + x_0 \frac{d\psi_0(x)}{dx} \right) = 0 \quad (154-4)$$

از این رو

$$\frac{d\psi_0(x)}{dx} = -\frac{x}{x_0^2} \psi_0(x) \quad (155-4)$$

که در آن  $\psi_0(x) = \langle x|\circ\rangle$  تابع موج حالت پایه را نمایش می‌دهد. جواب این معادله‌ی دیفرانسیل برابر است با

$$\psi_0(x) = A \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right) \quad (156-4)$$

که در آن  $A$  ثابتی است که می‌توان آن را از شرط بهنجارش تعیین کرد:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi_0(x)|^2 = A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left(-\frac{x^2}{x_0^2}\right) = A^2 \sqrt{\pi} x_0 \quad (157-4)$$

از این رو  $A = (m\omega/(\pi\hbar))^{1/4} = 1/\sqrt{\sqrt{\pi}x_0}$  به‌دست می‌آید:

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}x_0}} \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right) \quad (158-4)$$

این تابع یک تابع گاوسی است.

آنگاه می‌توانیم تابع موج هر حالت برانگیخته‌ای را با مجموعه‌ای از اعمال  $\hat{a}^\dagger$  روی حالت پایه به‌دست آوریم. به عنوان مثال، نخستین حالت برانگیخته از یک بار اعمال عملگر  $\hat{a}^\dagger$  (۱۵۳-۴) روی حالت پایه به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} \langle x|1\rangle &= \langle x|\hat{a}^\dagger|\circ\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}x_0} \left( x - x_0 \frac{d}{dx} \right) \langle x|\circ\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}x_0} \left( x - x_0 \left( -\frac{x}{x_0^2} \right) \right) \psi_0(x) = \frac{\sqrt{2}}{x_0} x \psi_0(x) \end{aligned} \quad (159-4)$$

یا

$$\psi_1(x) = \frac{\sqrt{2}}{x_0} x \psi_0(x) = \sqrt{\frac{2}{\sqrt{\pi}x_0^3}} x \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right) \quad (160-4)$$

در رابطه با ویژه‌حالت‌های دومین و سومین حالت برانگیخته باید گفت که می‌توانیم آنها را به ترتیب با دو و سه بار اعمال  $\hat{a}^\dagger$  روی حالت پایه به دست آوریم:

$$\langle x|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2!}} \langle x|(\hat{a}^\dagger)^2|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2!}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}x_0}\right)^2 \left(x - x_0 \frac{d}{dx}\right)^2 \psi_0(x) \quad (161-4)$$

$$\langle x|3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3!}} \langle x|(\hat{a}^\dagger)^3|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3!}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}x_0}\right)^3 \left(x - x_0 \frac{d}{dx}\right)^3 \psi_0(x) \quad (162-4)$$

یا

$$\psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{\pi}x_0} \left(\frac{2x^2}{x_0^2} - 1\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right),$$

$$\psi_3(x) = \frac{1}{\sqrt{3}\sqrt{\pi}x_0} \left(\frac{2x^3}{x_0^3} - \frac{3x}{x_0}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right) \quad (163-4)$$

به صورت مشابه، با استفاده از (۴-۱۴۹)، (۴-۱۵۳) و (۴-۱۵۸) به آسانی می‌توانیم ویژه‌حالت انرژی  $n$  برای حالت برانگیخته  $n$  ام نتیجه بگیریم:

$$\langle x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle x|(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}x_0}\right)^n \left(x - x_0 \frac{d}{dx}\right)^n \psi_0(x) \quad (164-4)$$

که به نوبه‌ی خود می‌توان آن را به صورت زیر بازنویسی کرد:

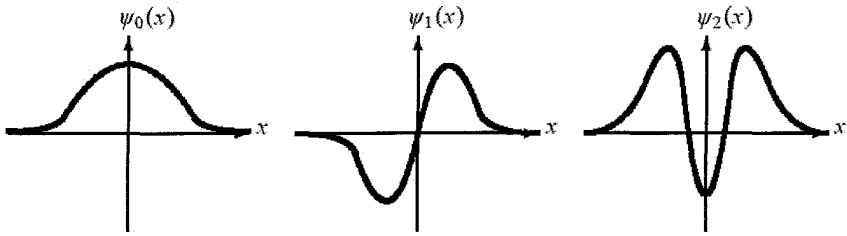
$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} 2^n n!}} \frac{1}{x_0^{n+1/2}} \left(x - x_0 \frac{d}{dx}\right)^n \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right) \quad (165-4)$$

به صورت خلاصه، با اعمال پایی  $\hat{a}^\dagger = (\hat{X} - x_0 d/dx)/(\sqrt{2}x_0)$  روی  $\psi_0(x)$  می‌توانیم تابع موج هر حالت برانگیخته‌ی  $\psi_n(x)$  را پیدا کنیم.

تابع‌های موج نوسانگر و چندجمله‌ای‌های هرمیت

در این مرحله، می‌توانیم نشان دهیم که تابع موج (۴-۱۶۵) به دست آمده از روش جبری مشابه با تابع موج به دست آمده از روش نخست (۴-۱۱۸) است. برای دیدن این موضوع، کافیت از اتحاد عملگری زیر استفاده کنیم:

$$e^{-x^2/2} \left(x - \frac{d}{dx}\right) e^{x^2/2} = -\frac{d}{dx} \quad \text{یا} \quad e^{-x^2/2x_0^2} \left(x - x_0 \frac{d}{dx}\right) e^{x^2/2x_0^2} = -x_0 \frac{d}{dx} \quad (166-4)$$



شکل ۹-۴ شکل‌های سه تابع موج نخست نوسانگر هماهنگ.

نبار اعمال این عملگر، یک‌باره به معادله‌ی زیر می‌انجامد:

$$e^{-x^2/2x_0^2} \left( x - x_0^2 \frac{d}{dx} \right)^n e^{x^2/2x_0^2} = (-1)^n (x_0^2)^n \frac{d^n}{dx^n} \quad (۱۶۷-۴)$$

که می‌توان نشان داد که معادله‌ی زیر را نتیجه می‌دهد:

$$\left( x - x_0^2 \frac{d}{dx} \right)^n e^{-x^2/2x_0^2} = (-1)^n (x_0^2)^n e^{x^2/2x_0^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2/2x_0^2} \quad (۱۶۸-۴)$$

اکنون می‌توانیم طرف راست این معادله را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$\begin{aligned} (-1)^n (x_0^2)^n e^{x^2/2x_0^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2/2x_0^2} &= x_0^n e^{-x^2/2x_0^2} \left[ (-1)^n e^{x^2/x_0^2} \frac{d^n}{d(x/x_0)} e^{-x^2/x_0^2} \right] \\ &= x_0^n e^{-x^2/2x_0^2} \left[ (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2} \right] \\ &= x_0^n e^{-x^2/2x_0^2} H_n(y) \end{aligned} \quad (۱۶۹-۴)$$

که در آن  $y = x/x_0$  و  $H_n(y)$  چندجمله‌ای‌های هرمیت فهرست شده در (۱۱۹-۴) هستند:

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2} \quad (۱۷۰-۴)$$

توجه کنید که چندجمله‌ای‌های  $H_{2n}(y)$  زوج و  $H_{2n+1}(y)$  فرد هستند زیرا  $H_n(-y) = (-1)^n H_n(y)$  است.

با وارد کردن (۱۶۹-۴) در (۱۶۸-۴) معادله‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$\left( x - x_0^2 \frac{d}{dx} \right)^n e^{-x^2/2x_0^2} = x_0^n e^{-x^2/2x_0^2} H_n \left( \frac{x}{x_0} \right) \quad (۱۷۱-۴)$$

با جاگذاری این معادله در (۱۶۵-۴)، به صورت زیر می‌توانیم تابع موج نوسانگر را برحسب چندجمله‌ای‌های هرمیت بنویسیم:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2} 2^n n! x_0}} e^{-x^2/2x_0^2} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right) \quad (172-4)$$

این تابع موج با تابع موج به دست آمده از روش نخست یکسان است (معادله‌ی (۱۱۸-۴) را ببینید).

### ملاحظات

این تابع موج بسته به این که  $n$  زوج یا فرد باشد، زوج یا فرد است. در واقع تابع‌های  $\psi_{2n}(x)$  زوج (یعنی  $\psi_{2n}(-x) = \psi_{2n}(x)$ ) و  $\psi_{2n+1}(x)$  فردند (یعنی  $\psi_{2n+1}(-x) = -\psi_{2n+1}(x)$ ) زیرا همانطور که می‌توان از معادله‌ی (۱۲۰-۴) نتیجه گرفت، چندجمله‌ای‌های هرمیت  $H_{2n}(x)$  زوج و  $H_{2n+1}(x)$  فردند که انتظار هم می‌رفت زیرا همانطور که در بخش ۴-۲-۴ یادآوری شد، تابع‌های موج پتانسیل‌های یک‌بعدی زوج پاریته‌ی معینی دارند. شکل ۹-۴ چند تابع موج نخست را نمایش می‌دهد.

### ۴-۸-۴ نمایش ماتریسی عملگرهای گوناگون

در اینجا نگاهی به نمایش ماتریسی چند عملگر در فضای  $N$  می‌اندازیم. به خصوص، بر روی نمایش عملگرهای  $\hat{a}$ ،  $\hat{a}^\dagger$ ،  $\hat{X}$  و  $\hat{P}$  متمرکز می‌شویم. ابتدا با توجه به این که حالت‌های  $|n\rangle$  ویژه‌حالت‌های مشترک  $\hat{H}$  و  $\hat{N}$  هستند، به آسانی از (۱۳۰-۴) و (۱۳۲-۴) می‌بینیم که  $\hat{H}$  و  $\hat{N}$  در پایه‌ی  $\{|n\rangle\}$  توسط ماتریس‌های قطری نامتناهی زیر نمایش داده می‌شوند:

$$\langle n' | \hat{N} | n \rangle = n \delta_{n',n}, \quad \langle n' | \hat{H} | n \rangle = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \delta_{n',n} \quad (173-4)$$

یعنی

$$\hat{N} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad \hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 3 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 5 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (174-4)$$

در رابطه با عملگرهای  $\hat{a}$ ،  $\hat{a}^\dagger$ ،  $\hat{X}$  و  $\hat{P}$  باید گفت که هیچ‌یک از آنها در نمایش  $N$  قطری نیستند زیرا با  $\hat{N}$  جابه‌جا نمی‌شوند. می‌توان عنصرهای ماتریسی  $\hat{a}$  و  $\hat{a}^\dagger$  را از (۱۴۳-۴) و (۱۴۴-۴) به دست آورد:

$$\langle n' | \hat{a} | n \rangle = \sqrt{n} \delta_{n',n-1}, \quad \langle n' | \hat{a}^\dagger | n \rangle = \sqrt{n+1} \delta_{n',n+1} \quad (175-4)$$

یعنی

$$\hat{a} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad \hat{a}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (۱۷۶-۴)$$

حال بیابید نمایش  $N$  عملگرهای مکان و تکانه ( $\hat{P}$  و  $\hat{X}$ ) را بیابیم. از (۱۲۲-۴) می‌توانیم نشان دهیم که  $\hat{P}$  و  $\hat{X}$  بر حسب  $\hat{a}$  و  $\hat{a}^\dagger$  به صورت زیر به دست می‌آیند:

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad \hat{P} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \quad (۱۷۷-۴)$$

عنصرهای ماتریسی آنها از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$\langle n' | \hat{X} | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n} \delta_{n', n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{n', n+1}) \quad (۱۷۸-۴)$$

$$\langle n' | \hat{P} | n \rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (-\sqrt{n} \delta_{n', n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{n', n+1}) \quad (۱۷۹-۴)$$

به خصوص

$$\langle n | \hat{X} | n \rangle = \langle n | \hat{P} | n \rangle = 0 \quad (۱۸۰-۴)$$

بنابراین ماتریس‌های متناظر با  $\hat{X}$  و  $\hat{P}$  از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (۱۸۱-۴)$$

$$\hat{P} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (۱۸۲-۴)$$

همانطور که در فصل ۲ یادآوری شد، عملگر تکانه هرمیتی است ولی با مزدوج مختلط خود برابر نیست: (۱۸۲-۴) نشان می‌دهد که  $\hat{P}^\dagger = \hat{P}$  و  $\hat{P}^* = -\hat{P}$  است. در مورد  $\hat{X}$  باید گفت که هم هرمیتی است و هم با مزدوج مختلط خود برابر است: از (۱۸۱-۴) داریم:  $\hat{X}^\dagger = \hat{X}^* = \hat{X}$ . سرانجام، باید یادآوری کنیم که ویژه‌حالت‌های  $|n\rangle$  توسط ماتریس‌های ستونی نامتناهی نمایش داده می‌شوند. می‌توان چند حالت نخست را به صورت زیر نوشت:

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad |3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \end{pmatrix}, \dots \quad (183-4)$$

درواقع، مجموعه‌ی حالت‌های  $\{|n\rangle\}$  یک پایه‌ی کامل و متعامد بهنجار را تشکیل می‌دهد.

#### ۵-۸-۴ مقدارهای چشمداشتی عملگرهای مختلف

حال مقدارهای چشمداشتی  $\hat{X}^2$  و  $\hat{P}^2$  را در نمایش  $N$  حساب می‌کنیم:

$$\hat{X}^2 = \frac{\hbar}{\sqrt{m\omega}} (\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) = \frac{\hbar}{\sqrt{m\omega}} (\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2} + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1) \quad (184-4)$$

$$\hat{P}^2 = -\frac{m\hbar\omega}{2} (\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2} - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}) = -\frac{m\hbar\omega}{2} (\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2} - 2\hat{a}^\dagger\hat{a} - 1) \quad (185-4)$$

که در آنها از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که  $\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} = 2\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1$ . چون مقدارهای چشمداشتی  $\hat{a}^2$  و  $\hat{a}^{\dagger 2}$  صفرند ( $\langle n|\hat{a}^2|n\rangle = \langle n|\hat{a}^{\dagger 2}|n\rangle = 0$ )، داریم:

$$\langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = \langle n|2\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1|n\rangle = 2n + 1 \quad (186-4)$$

ازاین رو

$$\langle n|\hat{X}^2|n\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{m\omega}} \langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{m\omega}} (2n + 1) \quad (187-4)$$

$$\langle n|\hat{P}^2|n\rangle = \frac{m\hbar\omega}{2} \langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = \frac{m\hbar\omega}{2} (2n + 1) \quad (188-4)$$

با مقایسه‌ی (۱۸۷-۴) و (۱۸۸-۴) می‌بینیم که مقدارهای چشمداشتی انرژی‌های پتانسیل و جنبشی با هم برابر و مساوی با نصف انرژی کل است:

$$\frac{m\omega^2}{2} \langle n|\hat{X}^2|n\rangle = \frac{1}{2m} \langle n|\hat{P}^2|n\rangle = \frac{1}{2} \langle n|\hat{H}|n\rangle \quad (189-4)$$



این نتیجه به عنوان قضیه‌ی ویریا شناخته می‌شود. اکنون از (۴-۱۸۷) و (۴-۱۸۸) به آسانی می‌توانیم حاصل ضرب  $\Delta x \Delta p$  را محاسبه کنیم. چون  $\langle \hat{X} \rangle = \langle \hat{P} \rangle = 0$  است، رابطه‌های زیر را داریم:

$$\Delta x = \sqrt{\langle \hat{X}^2 \rangle - \langle \hat{X} \rangle^2} = \sqrt{\langle \hat{X}^2 \rangle} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1)} \quad (4-190)$$

$$\Delta p = \sqrt{\langle \hat{P}^2 \rangle - \langle \hat{P} \rangle^2} = \sqrt{\langle \hat{P}^2 \rangle} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}(2n+1)} \quad (4-191)$$

زاین رو

$$\Delta x \Delta p = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \implies \Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (4-192)$$

زیرا  $n \geq 0$  است. این رابطه همان اصل عدم قطعیت هایزنبرگ است.

## ۹-۴ حل عددی معادله‌ی شرودینگر

در این بخش قصد داریم نشان دهیم که چگونه معادله‌ی شرودینگر یک بعدی را به صورت عددی حل کنیم. جواب‌های عددی ایده‌ای پیرامون ویژگی‌های حالت‌های مانا فراهم می‌کنند.

### ۱-۹-۴ روش عددی

می‌خواهیم معادله‌ی زیر را به صورت عددی حل کنیم:

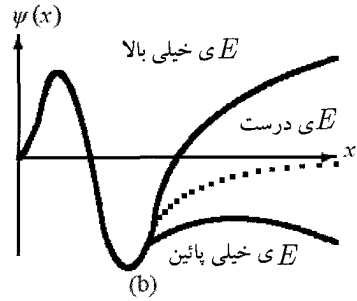
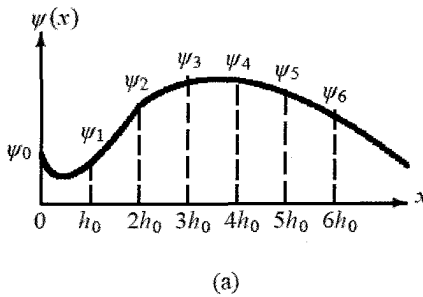
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \implies \frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0 \quad (4-193)$$

که در آن  $k^2 = 2m[E - V(x)]/\hbar^2$  است.

ابتدا همانطور که در شکل ۴-۱۰ الف نشان داده شده است، محور  $x$  را به مجموعه‌ای از نقطه‌ها با فاصله‌ی یکسان  $\Delta x = h_0$  تقسیم می‌کنیم. می‌توان تابع موج  $\psi(x)$  را به وسیله‌ی مقدارهای آن در نقطه‌های شبکه به صورت تقریبی توصیف نمود (یعنی  $\psi_0 = \psi(x=0)$ ،  $\psi_1 = \psi(h_0)$ ،  $\psi_2 = \psi(2h_0)$ ،  $\psi_3 = \psi(3h_0)$  و به همین ترتیب). آنگاه می‌توان مشتق اول  $\psi$  را با رابطه‌ی زیر تقریب زد:

$$\frac{d\psi}{dx} \approx \frac{\psi_{n+1} - \psi_n}{h_0} \quad (4-194)$$

در حقیقت، تقریب مشابه برای مشتق دوم اندکی دشوار است و چندین روش برای محاسبه‌ی آن وجود دارد ولی یک روند بسیار کارآمد الگوریتم نمرروف است (که در کتاب‌های درسی استاندارد آنالیز عددی



شکل ۴-۱۰ (الف) گسسته کردن تابع موج. (ب) اگر انرژی  $E$  مورد استفاده در محاسبه بسیار بزرگ (بسیار کوچک) باشد آنگاه وقتی  $x \rightarrow \pm\infty$  میل می‌کند، تابع موج واگرا می‌شود ولی در مقدار درست  $E$  تابع موج به مقدارهای درست همگرا می‌شود.

توصیف شده است). به صورت خلاصه، مشتق دوم توسط فرمولی که فرمول تفاضل سه نقطه‌ای نامیده می‌شود، تقریب زده می‌شود:

$$\frac{\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}}{h_0^2} = \psi_n'' + \frac{h_0^2}{12} \psi_n'''' + O(h_0^4) \quad (۱۹۵-۴)$$

از (۱۹۳-۴) داریم:

$$\psi_n'''' = \frac{d^2}{dx^2} (-k^2 \psi) \Big|_{x=x_n} = -\frac{(k^2 \psi)_{n+1} - 2(k^2 \psi)_n + (k^2 \psi)_{n-1}}{h_0^2} \quad (۱۹۶-۴)$$

با استفاده از  $\psi_n'' = -k_n^2 \psi_n$  و با جاگذاری (۱۹۶-۴) در (۱۹۵-۴) می‌توانیم نشان دهیم که

$$\psi_{n+1} = \frac{2 \left( 1 - \frac{5}{12} h_0^2 k_n^2 \right) \psi_n - \left( 1 + \frac{1}{12} h_0^2 k_{n-1}^2 \right) \psi_{n-1}}{1 + \frac{1}{12} h_0^2 k_{n+1}^2} \quad (۱۹۷-۴)$$

بنابراین می‌توانیم مقدارهای دلخواهی را به  $\psi_0$  و  $\psi_1$  نسبت دهیم. این کار معادل با فراهم کردن مقدارهای شروع (یا اولیه) برای  $\psi(x)$  و  $\psi'(x)$  است. با دانستن  $\psi_0$  و  $\psi_1$  می‌توانیم از (۱۹۷-۴) برای محاسبه  $\psi_2$ ، سپس  $\psi_3$ ، سپس  $\psi_4$  و به همین ترتیب استفاده کنیم. جواب یک معادله‌ی خطی (معادله‌ی (۱۹۷-۴)) برای هر یک از  $\psi_{n+1}$  و  $\psi_{n-1}$  رابطه‌ای بازگشتی (برای انتگرال‌گیری رو به جلو یا رو به عقب در جهت  $x$  با خطای موضعی  $O(h_0^6)$ ) را نتیجه می‌دهد. در این روش، جواب به دو ثابت اختیاری  $\psi_0$  و  $\psi_1$  بستگی دارد که باید برای هر معادله‌ی دیفرانسیل مرتبه‌ی دومی به این صورت باشد (یعنی دو جواب مستقل خطی وجود دارد).

شرایط مرزی نقشی حساس در حل معادله‌ی شرودینگر ایفا می‌کنند. هر شرط مرزی یک معادله‌ی همگن خطی را ارائه می‌کند که در تابع موج یا مشتق آن صدق می‌کند. به عنوان مثال، در مورد پتانسیل چاه مربعی نامتناهی و نوسانگر هماهنگ، شرایط  $\psi(x_{\min}) = 0$  و  $\psi(x_{\max}) = 0$  به صورت زیر برآورده می‌شوند:

• چاه مربعی نامتناهی:  $\psi(-a/2) = \psi(a/2) = 0$

• نوسانگر هماهنگ:  $\psi(-\infty) = \psi(+\infty) = 0$

### ۲-۹-۴ الگوریتم

برای حل معادله‌ی شرودینگر با شرایط مرزی  $\psi(x_{\min}) = \psi(x_{\max}) = 0$  می‌توانید به صورتی که در ادامه می‌آید، اقدام کنید. فرض کنید که می‌خواهید تابع موج  $\psi^{(n)}(x)$  و انرژی  $E_n$  را برای  $n$  امین حالت برانگیخته‌ی<sup>۷</sup> یک سیستم پیدا کنید:

•  $\psi_0 = 0$  را در نظر بگیرید و  $\psi_1$  را (با هر مقدار کوچکی که می‌خواهید) انتخاب کنید زیرا مقدار  $\psi_1$  باید بسیار نزدیک به مقدار  $\psi_0$  باشد.

• یک انرژی آزمون  $E_n$  را انتخاب کنید.

• با این مقدار انرژی ( $E_n$ ) همراه با  $\psi_0$  و  $\psi_1$  می‌توانید به صورت تکرار تابع موج را در مقدارهای مختلف  $x$  محاسبه کنید یعنی می‌توانید  $\psi_2, \psi_3, \psi_4$  و ... را محاسبه کنید. اما چگونه؟ تنها باید  $\psi_0 = 0$  و  $\psi_1$  را در  $E_n$  (۴-۱۹۷) قرار دهید و به صورت نمو،  $\psi_2$  را محاسبه کنید و سپس از  $\psi_1$  و  $\psi_2$  برای محاسبه‌ی  $\psi_3$  استفاده کنید و سپس  $\psi_2$  و  $\psi_3$  را برای محاسبه‌ی  $\psi_4$  مورد استفاده قرار دهید و به همین ترتیب تا زمانی که به مقدار تابع موج در  $x_n = nh_0$  و  $\psi_n = \psi(nh_0)$  برسید.

• در مرحله‌ی بعد، باید بررسی کنید که آیا  $\psi_n$  ای را که به دست آورده‌اید صفر است یا خیر. اگر  $\psi_n$  صفر شد به آن معنی است که انتخاب درستی برای انرژی آزمون انجام داده‌اید. آنگاه می‌توان این مقدار  $E_n$  را به عنوان ویژه‌انرژی ممکن سیستم در نظر گرفت. در این مقدار  $E_n$ ، تابع موج به مقدار درست همگرا می‌شود (منحنی نقطه‌چین در شکل ۴-۱۰ ب). البته احتمال زیادی دارد که از آزمون نخست، مقدار صحیح انرژی انتخاب نشود. در این صورت باید به صورتی که در ادامه می‌آید، اقدام کنید. اگر مقدار  $\psi_n$  به دست آمده، یک عدد مثبت مخالف صفر باشد یا واگرا شود به این معنی است که  $E_n$  آزمونی که با آن شروع کردید، بزرگ‌تر از ویژه‌مقدار درست است (شکل ۴-۱۰ ب). از سوی دیگر، اگر  $\psi_n$  یک عدد منفی مخالف صفر باشد به این معنی است که  $E_n$  ای

۷. در اینجا تابع موج  $n$  امین حالت برانگیخته را با  $\psi^{(n)}(x)$  نمایش داده‌ایم تا آن را از مقدار تابع موج در  $x_n = nh_0$  و  $\psi_n = \psi(nh_0)$  متمایز کنیم.

## مثال ۲-۵

$[\hat{J}_x^2, \hat{J}_y]$ ،  $[\hat{J}_z^2, \hat{J}_y]$  و  $[\hat{J}^2, \hat{J}_y]$  را محاسبه کنید و سپس نشان دهید که  $\langle j, m | \hat{J}_x^2 | j, m \rangle = \langle j, m | \hat{J}_y^2 | j, m \rangle$  است.

حل

چون  $[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z$  و  $[\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar\hat{J}_y$  است، داریم:

$$[\hat{J}_x^2, \hat{J}_y] = \hat{J}_x[\hat{J}_x, \hat{J}_y] + [\hat{J}_x, \hat{J}_y]\hat{J}_x = i\hbar(\hat{J}_x\hat{J}_z + \hat{J}_z\hat{J}_x) = i\hbar(2\hat{J}_x\hat{J}_z + i\hbar\hat{J}_y) \quad (61-5)$$

به صورت مشابه، چون  $[\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar\hat{J}_y$  و  $[\hat{J}_z, \hat{J}_y] = -i\hbar\hat{J}_x$  است، داریم:

$$[\hat{J}_z^2, \hat{J}_y] = \hat{J}_z[\hat{J}_z, \hat{J}_y] + [\hat{J}_z, \hat{J}_y]\hat{J}_z = -i\hbar(\hat{J}_z\hat{J}_x + \hat{J}_x\hat{J}_z) = -i\hbar(2\hat{J}_x\hat{J}_z + i\hbar\hat{J}_y) \quad (62-5)$$

دو عبارت قبل، نتیجه‌ی زیر را به دست می‌دهند:

$$\begin{aligned} [\hat{J}^2, \hat{J}_y] &= [\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2, \hat{J}_y] = [\hat{J}_x^2, \hat{J}_y] + [\hat{J}_z^2, \hat{J}_y] \\ &= i\hbar(2\hat{J}_x\hat{J}_z + i\hbar\hat{J}_y) - i\hbar(2\hat{J}_x\hat{J}_z + i\hbar\hat{J}_y) = 0 \end{aligned} \quad (63-5)$$

با توجه به این که داریم:

$$\hat{J}_x^2 = \frac{1}{4}(\hat{J}_+^2 + \hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_-\hat{J}_+ + \hat{J}_-^2), \quad \hat{J}_y^2 = -\frac{1}{4}(\hat{J}_+^2 - \hat{J}_+\hat{J}_- - \hat{J}_-\hat{J}_+ + \hat{J}_-^2) \quad (64-5)$$

و چون  $\langle j, m | \hat{J}_+^2 | j, m \rangle = \langle j, m | \hat{J}_-^2 | j, m \rangle = 0$  می‌توانیم بنویسیم:

$$\langle j, m | \hat{J}_x^2 | j, m \rangle = \frac{1}{4} \langle j, m | \hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_-\hat{J}_+ | j, m \rangle = \langle j, m | \hat{J}_y^2 | j, m \rangle \quad (65-5)$$

## ۴-۵ نمایش ماتریسی تکانه‌ی زاویه‌ای

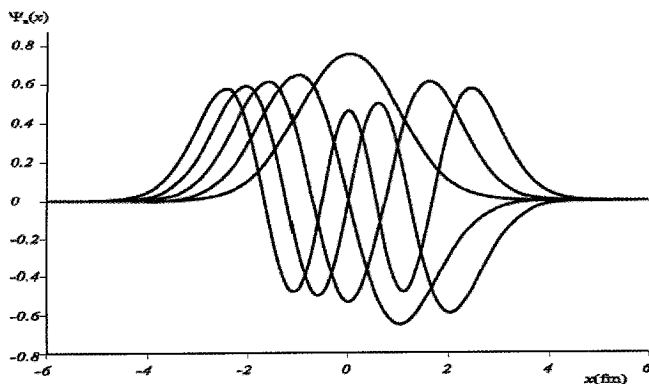
صورت‌بندی بخش قبل عمومی است و مستقل از هر نمایش بخصوصی است. راه‌های بسیاری برای نمایش عملگرهای تکانه‌ی زاویه‌ای و ویژه‌حالت‌های آنها وجود دارد. در این بخش قصد داریم تا در مورد نمایش ماتریسی تکانه‌ی زاویه‌ای که در آن ویژه‌کتابها و عملگرها به ترتیب به وسیله‌ی بردارهای ستونی و ماتریس‌های مربعی نمایش داده خواهند شد، بحث کنیم. این کار با بسط حالت‌ها و عملگرها در یک پایه‌ی گسسته صورت می‌گیرد. بعداً خواهیم دید که چگونه تکانه‌ی زاویه‌ای مداری را در نمایش مکان نمایش دهیم.

و  $x_{\max}$  طوری نسبت دهیم که به ترتیب دور از نقطه‌های بازگشت  $x_{\text{چپ}} = -\sqrt{2E_n/(m\omega^2)}$  و  $x_{\text{راست}} = \sqrt{2E_n/(m\omega^2)}$  باشند. به عنوان مثال، در مورد حالت پایه (که در آن  $E_0 = 1,75\text{MeV}$  است)، داریم:  $x_{\text{چپ}} = -3,38\text{fm}$  و  $x_{\text{راست}} = 3,38\text{fm}$ . سپس می‌توانیم  $x_{\min} = -2^\circ\text{fm}$  و  $x_{\max} = 2^\circ\text{fm}$  را در نظر بگیریم. تابع موج عملاً باید در  $x = \pm 2^\circ\text{fm}$  صفر باشد.

برای محاسبه‌ی انرژی‌ها برای پایین‌ترین پنج حالت به صورت عددی، یک کد کامپیوتری ++C آماده شده است (پیوست ج را ببینید). نتیجه‌های عددی تولید شده توسط این کد در جدول ۱-۴ فهرست شده‌اند که در توافق بسیار عالی با نتیجه‌های دقیق هستند. شکل ۱۱-۴ تابع‌های موج به دست آمده از این کد را برای پایین‌ترین پنج حالت مربوط به پروتون در حال حرکت در پتانسیل نوسانگر هماهنگ نمایش می‌دهد (این تابع‌های رسم شده بهنجار شده‌اند).

جدول ۱-۴ مقدارهای عددی و دقیق انرژی مربوط به پایین‌ترین پنج حالت نوسانگر هماهنگ.

$n$	$E_n^{\text{دقیق}}$ (MeV)	$E_n^{\text{عددی}}$ (MeV)
۰٫۰	۱٫۷۵۰۰۰۰	۱٫۷۴۹۹۹۹۹۹۹۹۷۹۵
۱٫۰	۵٫۲۵۰۰۰۰	۵٫۲۴۹۹۹۹۹۹۹۸۱۱۲
۲٫۰	۸٫۷۵۰۰۰۰	۸٫۷۴۹۹۹۹۹۹۹۲۸۲۹
۳٫۰	۱۲٫۲۵۰۰۰۰	۱۲٫۲۴۹۹۹۹۹۹۸۲۳۲۰
۴٫۰	۱۵٫۷۵۰۰۰۰	۱۵٫۷۴۹۹۹۹۹۹۶۷۵۹۰



شکل ۱۱-۴ تابع‌های موج  $\psi_n(x)$  مربوط به پایین‌ترین پنج حالت پتانسیل یک نوسانگر هماهنگ برحسب  $x$  که در آن مقایسه محور  $x$  برحسب fm هستند (این تابع‌های موج از کد ++C پیوست ج به دست آمده‌اند).

## ۱۰-۴ مسئله‌های حل شده

### مسئله‌ی ۱-۴

یک ذره‌ی در حال حرکت در یک‌بعد، در یک حالت مانا قرار دارد که تابع موج آن به صورت زیر است:

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & x < -a \\ A(1 + \cos \frac{\pi x}{a}) & -a \leq x \leq a \\ 0 & x > a \end{cases}$$

که در آن  $A$  و  $a$  ثابت‌های حقیقی‌اند.

(الف) آیا این تابع موج یک تابع موج فیزیکی قابل قبول است؟ توضیح دهید.

(ب) اندازه‌ی  $A$  را بیابید به صورتی که  $\psi(x)$  بهنجار باشد.

(پ)  $\Delta x$  و  $\Delta p$  را حساب کنید. ثابت کنید که  $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$  است.

(ت) ناحیه‌ی مجاز کلاسیکی را بیابید.

حل

(الف) چون  $\psi(x)$  انتگرال‌پذیر مجذوری، تک‌مقدار و پیوسته است (و مشتق اول آن نیز پیوسته است)

در واقع، از نظر فیزیکی هم قابل قبول خواهد بود. (ب) بهنجارش  $\psi(x)$ : با استفاده از رابطه‌ی  $\cos^2 y = (1 + \cos 2y)/2$

داریم:

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = A^2 \int_{-a}^a dx \left[ 1 + 2 \cos \frac{\pi x}{a} + \cos^2 \left( \frac{\pi x}{a} \right) \right] \\ &= A^2 \int_{-a}^a dx \left[ \frac{3}{2} + 2 \cos \frac{\pi x}{a} + \frac{1}{2} \cos \frac{2\pi x}{a} \right] \quad (200-4) \\ &= \frac{3}{2} A^2 \int_{-a}^a dx = 3aA^2 \end{aligned}$$

از این رو  $A = 1/\sqrt{3a}$

(ب) با توجه به این که  $\psi(x)$  زوج است، داریم:  $\langle \hat{X} \rangle = \int_{-a}^a \psi^*(x)x\psi(x)dx = 0$  زیرا انتگرال

متقارن یک تابع فرد صفر است (یعنی  $\psi^*(x)x\psi(x)$  فرد است). از سوی دیگر،  $\langle \hat{P} \rangle = 0$  را نیز داریم

زیرا  $\psi(x)$  حقیقی و زوج است. بنابراین می‌توانیم بنویسیم:

$$\Delta x = \sqrt{\langle \hat{X}^2 \rangle}, \quad \Delta p = \sqrt{\langle \hat{P}^2 \rangle} \quad (201-4)$$

زیرا  $\Delta A = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2}$  است. محاسبه‌ی  $\langle \hat{X}^2 \rangle$  و  $\langle \hat{P}^2 \rangle$  سراسر است:

$$\begin{aligned} \langle \hat{X}^2 \rangle &= -\hbar^2 \int_{-a}^a \psi^*(x) x^2 \psi(x) dx \\ &= \frac{1}{3a} \int_{-a}^a \left[ x^2 + 2x^2 \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) + x^2 \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right] dx \quad (202-4) \\ &= \frac{a^2}{6\pi^2} (2\pi^2 - 15) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{P}^2 \rangle &= -\hbar^2 \int_{-a}^{+a} \psi(x) \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} dx = \frac{\pi^2 \hbar^2}{a^2} A^2 \int_{-a}^a \left[ \cos \frac{\pi x}{a} + \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right] dx \\ &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{3a^2} \int_{-a}^a \left[ \frac{1}{2} + \cos \frac{\pi x}{2} + \frac{1}{2} \cos \frac{2\pi x}{a} \right] dx = \frac{\pi^2 \hbar^2}{3a^2} \quad (203-4) \end{aligned}$$

ازاین رو  $\Delta x = a\sqrt{1/3 - 5/(2\pi^2)}$  و  $\Delta p = \pi\hbar/(\sqrt{3}a)$  می‌بینیم که حاصل ضرب عدم قطعیت‌های

$$\Delta x \Delta p = \frac{\pi\hbar}{3} \sqrt{1 - \frac{15}{2\pi^2}} \quad (204-4)$$

در اصل عدم قطعیت هایزنبرگ صدق می‌کند ( $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$ ). (ت) چون  $d^2\psi/dx^2$  در نقطه‌های عطف صفر است، داریم:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{\pi^2}{a^2} A \cos \frac{\pi x}{a} = 0 \quad (205-4)$$

این رابطه هنگامی که  $x = \pm a/2$  باشد، برقرار است. بنابراین ناحیه‌ی از نظر کلاسیکی مجاز توسط بازه‌ی بین نقطه‌های عطف  $-a/2 \leq x \leq a/2$  تعریف می‌شود. یعنی چون  $\psi(x)$  به‌ازای  $x > a/2$  و  $x < -a/2$  به‌صورت نمایی کاهش می‌یابد، انرژی سیستم باید کوچک‌تر از پتانسیل باشد. از نظر کلاسیکی، نمی‌توان سیستم را در این ناحیه یافت.

#### مسأله‌ی ۲-۴

ذره‌ای به جرم  $m$  را در نظر بگیرید که آزادانه بین  $x = a$  و  $x = 0$  درون پتانسیل یک چاه مربعی نامتناهی حرکت می‌کند.

(الف) مقدارهای چشمداشتی  $\langle \hat{X} \rangle_n$ ،  $\langle \hat{P} \rangle_n$ ،  $\langle \hat{X}^2 \rangle_n$  و  $\langle \hat{P}^2 \rangle_n$  را محاسبه کنید و آنها را با همتهای کلاسیکی‌شان مقایسه نمایید.

(ب) حاصل ضرب عدم قطعیت‌های  $\Delta x_n \Delta p_n$  را محاسبه کنید.

(پ) از نتیجه‌ی (ب) برای تخمین انرژی نقطه‌ی صفر استفاده کنید.

حل

چون  $\psi_n(x) = \sqrt{2/a} \sin(n\pi x/a)$  یک تابع حقیقی است، داریم:  $\langle \psi_n | \hat{P} | \psi_n \rangle = 0$  زیرا به‌ازای هر تابع حقیقی  $\phi(x)$ ، انتگرال  $\langle \hat{P} \rangle = -i\hbar \int \phi^*(x) (d\phi(x)/dx) dx$  موهومی است و در تناقض با این حقیقت است که باید  $\langle \hat{P} \rangle$  حقیقی باشد. از سوی دیگر، مقادیرهای چشمداشتنی  $\hat{X}$ ،  $\hat{X}^2$  و  $\hat{P}^2$  برابرند با

$$\begin{aligned} \langle \psi_n | \hat{X} | \psi_n \rangle &= \int_0^a \psi_n^*(x) x \psi_n(x) dx = \frac{2}{a} \int_0^a x \sin^2 \left( \frac{n\pi x}{a} \right) dx \\ &= \frac{1}{a} \int_0^a x \left[ 1 - \cos \left( \frac{2n\pi x}{a} \right) \right] dx = \frac{a}{2} \end{aligned} \quad (206-4)$$

$$\begin{aligned} \langle \psi_n | \hat{X}^2 | \psi_n \rangle &= \frac{2}{a} \int_0^a x^2 \sin^2 \left( \frac{n\pi x}{a} \right) dx = \frac{1}{a} \int_0^a x^2 \left[ 1 - \cos \left( \frac{2n\pi x}{a} \right) \right] dx \\ &= \frac{a^3}{3} - \frac{1}{a} \int_0^a x^2 \cos \left( \frac{2n\pi x}{a} \right) dx \\ &= \frac{a^3}{3} - \frac{1}{2n\pi} x^2 \sin \left( \frac{2n\pi x}{a} \right) \Big|_{x=0}^{x=a} + \frac{1}{n\pi} \int_0^a x \sin \left( \frac{2n\pi x}{a} \right) dx \\ &= \frac{a^3}{3} - \frac{a^3}{2n^2\pi^2} \end{aligned} \quad (207-4)$$

$$\langle \psi_n | \hat{P}^2 | \psi_n \rangle = -\hbar^2 \int_0^a \psi_n^*(x) \frac{d^2 \psi_n(x)}{dx^2} dx = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{a^2} \int_0^a |\psi_n(x)|^2 dx = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{a^2} \quad (208-4)$$

در به‌دست آوردن این سه عبارت، از انتگرال‌گیری جزء‌به‌جزء استفاده کرده‌ایم. چون  $E_n = n^2 \pi^2 \hbar^2 / (2ma^2)$  است می‌توانیم بنویسیم:

$$\langle \psi_n | \hat{P}^2 | \psi_n \rangle = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{a^2} = 2mE_n \quad (209-4)$$

برای محاسبه‌ی مقادیرهای میانگین کلاسیکی  $x_{av}$ ،  $p_{av}$  و  $x_{av}^2$  ابتدا این نتیجه‌گیری که  $p_{av} = 0$  و  $p = -mv$  است کار ساده‌ای است. زیرا ذره با تکانه‌ی ثابت  $p = mv$  به سمت راست و از این رو به سمت چپ حرکت می‌کند. چون ذره با سرعت ثابت حرکت می‌کند، داریم:  $x = vt$

$$x_{av} = \frac{1}{T} \int_0^T x(t) dt = \frac{v}{T} \int_0^T t dt = v \frac{T}{2} = \frac{a}{2} \quad (210-4)$$

$$x_{av}^2 = \frac{1}{T} \int_0^T x^2(t) dt = \frac{v^2}{T} \int_0^T t^2 dt = \frac{1}{3} v^2 T = \frac{a^2}{3} \quad (211-4)$$



که در آن  $T$  نصف دوره‌ی حرکت با  $a = vT$  است.

نتیجه می‌گیریم در حالی که عبارت‌های میانگین کلاسیکی و کوانتومی برای  $x$ ،  $p$  و  $p^2$  یکسانند، مقایسه‌ی (۲۰۷-۴) و (۲۱۱-۴) نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\langle \psi_n | \hat{X}^2 | \psi_n \rangle = \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2n^2\pi^2} = x_{av}^2 - \frac{a^2}{2n^2\pi^2} \quad (212-4)$$

به طوری که در حد عددهای کوانتومی بزرگ، عبارت کوانتومی  $\langle \psi_n | \hat{X}^2 | \psi_n \rangle$  با همنای کلاسیکی خود  $(x_{av}^2)$  جور می‌شود:  $\lim_{n \rightarrow \infty} \langle \psi_n | \hat{X}^2 | \psi_n \rangle = a^2/3 = x_{av}^2$ .

(ب) می‌توان عدم قطعیت مکان و تکانه را از (۲۰۶-۴) تا (۲۰۸-۴) محاسبه کرد:

$$\Delta x_n = \sqrt{\langle \psi_n | \hat{X}^2 | \psi_n \rangle - \langle \psi_n | \hat{X} | \psi_n \rangle^2} = \sqrt{\frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2n^2\pi^2} - \frac{a^2}{4}} = a \sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\pi^2}} \quad (213-4)$$

$$\Delta p_n = \sqrt{\langle \psi_n | \hat{P}^2 | \psi_n \rangle - \langle \psi_n | \hat{P} | \psi_n \rangle^2} = \sqrt{\langle \psi_n | \hat{P}^2 | \psi_n \rangle} = \frac{n\pi\hbar}{a} \quad (214-4)$$

ازاین رو

$$\Delta x_n \Delta p_n = n\pi\hbar \sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\pi^2}} \quad (215-4)$$

(پ) معادله‌ی (۲۱۴-۴) نشان می‌دهد که عدم قطعیت تکانه برای حالت پایه صفر نیست ولی

$$\Delta p_1 = \frac{\pi\hbar}{a} \quad (216-4)$$

که به یک انرژی جنبشی غیرصفر می‌انجامد. بنابراین کمترین مقدار انرژی جنبشی ذره از مرتبه‌ی  $E_{\min} \sim (\Delta p_1)^2 / (2m) \sim \pi^2 \hbar^2 / (2ma^2)$  است. این مقدار که در توافق کامل با انرژی حالت پایه است  $(E_1 = \pi^2 \hbar^2 / (2ma^2))$ ، انرژی نقطه‌ی صفر ذره است.

### مسأله‌ی ۳-۴

یک الکترون آزادانه درون یک جعبه‌ی پتانسیل نامتناهی یک‌بعدی با دیواره‌هایی در  $x = 0$  و  $x = a$  حرکت می‌کند. اگر الکترون در ابتدا در حالت پایه‌ی جعبه ( $n = 1$ ) باشد و ما به صورت ناگهانی اندازه‌ی جعبه را چهار برابر کنیم (یعنی دیواره‌ی سمت راست یک‌بار از  $x = a$  به  $x = 4a$  منتقل شود) آنگاه احتمال یافتن الکترون را در حالت‌های زیر بیابید:

(الف) در حالت پایه‌ی جعبه‌ی جدید

۸. می‌توانیم نصف دیگر حرکت را با  $x = -vt$  پارامتری کنیم که هنگامی که در (۲۱۰-۴) و (۲۱۱-۴) وارد شود که در آن متغیر  $t$  بین  $-T$  و  $0$  تغییر می‌کند، انتگرال‌ها به ترتیب همین نتیجه را به دست می‌دهند یعنی  $x_{av} = a/2$  و  $x_{av}^2 = a^2/3$ .

(ب) در نخستین حالت برانگیخته‌ی جعبه‌ی جدید

حل

در ابتدا، الکترون در حالت پایه‌ی جعبه‌ی  $x = 0$  و  $x = a$  است و انرژی و تابع موج آن برابرند با

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad \phi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \quad (217-4)$$

(الف) در جعبه‌ی جدید ( $x = 0$  و  $x = 4a$ )، انرژی و تابع موج حالت پایه‌ی الکترون برابرند با

$$E'_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m(4a)^2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{32ma^2}, \quad \psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{4a}} \sin\left(\frac{\pi x}{4a}\right) \quad (218-4)$$

احتمال یافتن الکترون در  $\psi_1(x)$  برابر است با

$$P(E'_1) = |\langle \psi_1 | \phi_1 \rangle|^2 = \left| \int_0^a \psi_1^*(x) \phi_1(x) dx \right|^2 = \frac{1}{a^2} \left| \int_0^a \sin\left(\frac{\pi x}{4a}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx \right|^2 \quad (219-4)$$

حد بالای انتگرال برابر با  $a$  (و نه  $4a$ ) است زیرا  $\phi_1(x)$  به ناحیه‌ی بین  $0$  و  $a$  محدود است. با استفاده از رابطه‌ی  $\sin a \sin b = \frac{1}{2} \cos(a-b) - \frac{1}{2} \cos(a+b)$  داریم:

$$\sin(\pi x/4a) \sin(\pi x/a) = \frac{1}{2} \cos(3\pi x/4a) - \frac{1}{2} \cos(5\pi x/4a)$$

$$\begin{aligned} P(E'_1) &= \frac{1}{a^2} \left| \frac{1}{2} \int_0^a \cos\left(\frac{3\pi x}{4a}\right) dx - \frac{1}{2} \int_0^a \cos\left(\frac{5\pi x}{4a}\right) dx \right|^2 \\ &= \frac{128}{15^2 \pi^2} = 0,058 = 5,8\% \end{aligned} \quad (220-4)$$

(ب) اگر الکترون در نخستین حالت برانگیخته‌ی جعبه‌ی جدید باشد آنگاه انرژی و تابع موج آن برابرند با

$$E'_2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}, \quad \psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{4a}} \sin\left(\frac{\pi x}{2a}\right) \quad (221-4)$$

و احتمال متناظر برابر است با

$$\begin{aligned} P(E'_2) &= |\langle \psi_2 | \phi_1 \rangle|^2 = \left| \int_0^a \psi_2^*(x) \phi_1(x) dx \right|^2 = \frac{1}{a^2} \left| \int_0^a \sin\left(\frac{\pi x}{2a}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx \right|^2 \\ &= \frac{16}{9\pi^2} = 0,18 = 18\% \end{aligned} \quad (222-4)$$

#### مسأله‌ی ۴-۴

ذره‌ای به جرم  $m$  را در نظر بگیرید که تحت تأثیر پتانسیل دلتای جاذبه‌ی  $V(x) = -V_0 \delta(x)$  قرار دارد که در آن  $V_0 > 0$  است. ( $V_0$  دارای بعد انرژی  $\times$  فاصله است.)

(الف) در حالت انرژی‌های منفی، نشان دهید که این ذره تنها یک حالت مقید دارد. انرژی بستگی و تابع موج را بیابید.

(ب) احتمال یافتن ذره در بازه‌ی  $-a \leq x \leq a$  را محاسبه کنید.

(پ) هنگامی که  $V_0$  (۱) ناگهان نصف می‌شود (۲) ناگهان چهار برابر می‌شود، احتمال این که ذره مقید باقی بماند، چقدر است؟

(ت) حالت پراکندگی (یعنی  $E > 0$ ) را مطالعه کنید و ضریب‌های بازتاب و عبور را به صورت تابعی از عدد موج  $k$  محاسبه نمایید.

### حل

(الف) ابتدا مورد حالت مقید  $E < 0$  را در نظر می‌گیریم. می‌توانیم معادله‌ی شرودینگر را به صورت زیر بنویسیم:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mV_0}{\hbar^2}\delta(x)\psi(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0 \quad (223-4)$$

چون  $\delta(x)$  به ازای  $x \neq 0$  صفر می‌شود، این معادله به صورت زیر در می‌آید:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0 \quad (224-4)$$

جواب‌های مقید نیازمند آن هستند که  $\psi(x)$  در  $x = \pm\infty$  صفر شود. این جواب‌های مقید از رابطه‌ی زیر به دست می‌آیند:

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_-(x) = Ae^{kx} & x < 0 \\ \psi_+(x) = Be^{-kx} & x > 0 \end{cases} \quad (225-4)$$

که در آن  $k = \sqrt{2m|E|}/\hbar$  است. چون  $\psi(x)$  در  $x = 0$  پیوسته است ( $\psi_-(0) = \psi_+(0)$ )، داریم:  $A = B$ . بنابراین تابع موج برابر با  $\psi(x) = Ae^{-k|x|}$  است. توجه کنید که  $\psi(x)$  زوج است. می‌توان انرژی را از شرط ناپیوستگی مشتق اول تابع موج به دست می‌آورد که به نوبه‌ی خود آن را با انتگرال‌گیری (۲۲۳-۴) از  $-\varepsilon$  تا  $+\varepsilon$ :

$$\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} dx \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mV_0}{\hbar^2} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \delta(x)\psi(x)dx + \frac{2mE}{\hbar^2} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \psi(x)dx = 0 \quad (226-4)$$

و سپس قرار دادن  $\varepsilon \rightarrow 0$  به دست می‌آوریم. با استفاده از این واقعیت‌ها که

$$\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} dx \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \left. \frac{d\psi(x)}{dx} \right|_{x=+\varepsilon} - \left. \frac{d\psi(x)}{dx} \right|_{x=-\varepsilon} = \left. \frac{d\psi_+(x)}{dx} \right|_{x=+\varepsilon} - \left. \frac{d\psi_-(x)}{dx} \right|_{x=-\varepsilon} \quad (227-4)$$

و  $\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \psi(x) dx = 0$  است (زیرا  $\psi(x)$  زوج است)، می‌توانیم (۲۲۶-۴) را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left( \frac{d\psi_+(x)}{dx} \Big|_{x=+\varepsilon} - \frac{d\psi_-(x)}{dx} \Big|_{x=-\varepsilon} \right) + \frac{2mV_0}{\hbar^2} \psi(0) = 0 \quad (228-4)$$

زیرا تابع موج در  $x = 0$  پیوسته است ولی مشتق آن اینگونه نیست. با جاگذاری (۲۲۵-۴) در (۲۲۸-۴) و استفاده از  $A = B$ ، به دست می‌آوریم:

$$(-2kA) + \frac{2mV_0}{\hbar^2} A = 0 \quad (229-4)$$

یا  $k = mV_0/\hbar^2$  اما با توجه به این که  $k = \sqrt{2m|E|}/\hbar$  است، داریم:  $mV_0/\hbar^2 = \sqrt{2m|E|}/\hbar$ . نتیجه می‌گیریم که  $E = -mV_0^2/(2\hbar^2)$  است. بنابراین تنها یک جواب حالت مقید وجود دارد. در رابطه با حالت‌های برانگیخته باید گفت که تمام آنها نامقیدند. به صورت زیر می‌توانیم  $\psi(x)$  را بهنجار کنیم:

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x) dx = A^2 \int_{-\infty}^0 \exp(2kx) dx + A^2 \int_0^{\infty} \exp(-2kx) dx \\ &= 2A^2 \int_0^{\infty} \exp(-2kx) dx = \frac{A^2}{k} \end{aligned} \quad (230-4)$$

از این رو  $A = \sqrt{k}$  است. بنابراین تابع موج بهنجار از رابطه‌ی  $\psi(x) = \sqrt{k}e^{-k|x|}$  به دست می‌آید. بنابراین انرژی و تابع موج بهنجار حالت مقید از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$E = -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}, \quad \psi(x) = \sqrt{\frac{mV_0}{\hbar^2}} \exp\left(-\frac{mV_0}{\hbar^2}|x|\right) \quad (231-4)$$

(ب) چون تابع موج  $\psi(x) = \sqrt{k}e^{-k|x|}$  بهنجار است، احتمال یافتن ذره در بازه‌ی  $-a \leq x \leq a$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} P &= \frac{\int_{-a}^a |\psi(x)|^2 dx}{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx} = \frac{\int_{-a}^a |\psi(x)|^2 dx}{k \int_{-a}^a e^{-2k|x|} dx} \\ &= k \int_{-a}^0 e^{2kx} dx + k \int_0^a e^{-2kx} dx = 2k \int_0^a e^{-2kx} dx \quad (232-4) \\ &= 1 - e^{-2ka} = 1 - e^{-2mV_0 a/\hbar^2} \end{aligned}$$

(پ) اگر قدرت پتانسیل به صورت ناگهانی از  $V_0$  به  $V_1$  تغییر کند آنگاه تابع موج از رابطه‌ی  $\psi_1(x) = \sqrt{mV_1/\hbar^2} \exp(-mV_1|x|/\hbar^2)$  به دست خواهد آمد. احتمال این که ذره در حالت مقید  $\psi_1(x)$  باقی بماند برابر است با

$$\begin{aligned}
 P &= |\langle \psi_1 | \psi \rangle|^2 = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \psi(x) dx \right|^2 \\
 &= \left| \frac{m}{\hbar^2} \sqrt{V_0 V_1} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{m(V_0 + V_1)}{\hbar^2} |x|\right) dx \right|^2 \quad (233-4) \\
 &= \left| \frac{2m}{\hbar^2} \sqrt{V_0 V_1} \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{m(V_0 + V_1)}{\hbar^2} x\right) dx \right|^2 = \frac{4V_0 V_1}{(V_0 + V_1)^2}
 \end{aligned}$$

(۱) در حالتی که قدرت پتانسیل نصف می‌شود ( $V_1 = \frac{1}{2}V_0$ )، احتمال این که ذره مقید باقی بماند، برابر است با

$$P = \frac{2V_0^2}{(V_0 + \frac{1}{2}V_0)^2} = \frac{4}{9} = 44\% \quad (234-4)$$

(۲) هنگامی که قدرت پتانسیل چهار برابر شود ( $V_1 = 4V_0$ )، احتمال از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$P = \frac{16V_0^2}{(5V_0)^2} = \frac{16}{25} = 64\% \quad (235-4)$$

(ت) حالت  $E > 0$  متناظر با یک حرکت آزاد است و ترازهای انرژی یک پیوستار را نمایش می‌دهند. به ازای  $E > 0$ ، جواب معادله‌ی شرودینگر به صورت زیر است:

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_-(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x < 0 \\ \psi_+(x) = Ce^{ikx} & x > 0 \end{cases} \quad (236-4)$$

که در آن  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$  است. این رابطه متناظر با یک موج تخت فرودی از چپ همراه با یک موج بازتابیده در ناحیه‌ی  $x < 0$  و تنها یک موج عبوری به ازای  $x > 0$  است.

مقدار ثابت‌های  $A$  و  $B$  از رابطه‌های پیوستگی به دست می‌آیند. از یک سو، پیوستگی  $\psi(x)$  در  $x = 0$  نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$A + B = C \quad (237-4)$$

و از سوی دیگر، با جاگذاری (۲۳۶-۴) در (۲۲۸-۴) به نتیجه‌ی زیر می‌رسیم:

$$ik(C - A + B) + \frac{2mV_0}{\hbar^2}C = 0 \quad (238-4)$$

با حل (۴-۲۳۷) و (۴-۲۳۸) به ازای  $B/A$  و  $C/A$  به جواب‌های زیر می‌رسیم:

$$\frac{B}{A} = \frac{-1}{1 + \frac{ik\hbar^2}{mV_0}}, \quad \frac{C}{A} = \frac{1}{1 - \frac{imV_0}{\hbar^2 k}} \quad (۴-۲۳۹)$$

بنابراین ضریب‌های بازتاب و عبور برابرند با

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \frac{1}{1 + \frac{\hbar^2 k^2}{m^2 V_0^2}} = \frac{1}{1 + \frac{2\hbar^2 E}{mV_0^2}}, \quad T = \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \frac{1}{1 + \frac{m^2 V_0^2}{\hbar^2 k^2}} = \frac{1}{1 + \frac{mV_0^2}{2\hbar^2 E}} \quad (۴-۲۴۰)$$

$$R + T = 1 \text{ با}$$

#### مسئله‌ی ۵-۴

ذره‌ای به جرم  $m$  تحت تأثیر پتانسیل دلتای دوگانه‌ی جاذبه‌ی  $V(x) = -V_0 \delta(x-a) - V_0 \delta(x+a)$  قرار دارد که در آن  $V_0 > 0$  است. تنها حالت انرژی‌های منفی را در نظر بگیرید.

(الف) تابع‌های موج حالت‌های مقید را به دست آورید.

(ب) معادله‌های ویژه‌مقدار را به دست آورید.

(پ) تعداد حالت‌های مقید و حد انرژی‌های آنها را مشخص کنید. آیا حالت پایه یک حالت زوج است یا فرد؟

(ت) انرژی حالت پایه را در حدهای  $a \rightarrow \infty$  و  $a \rightarrow 0$  تخمین بزنید.

حل

(الف) معادله‌ی شرودینگر این مسئله به صورت زیر است:

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2mV_0}{\hbar^2} [\delta(x-a) + \delta(x+a)] \psi(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0 \quad (۴-۲۴۱)$$

به ازای  $x \neq \pm a$  این معادله به صورت زیر در می‌آید:

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0 \quad \text{یا} \quad \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} - k^2 \psi(x) = 0 \quad (۴-۲۴۲)$$

که در آن  $k^2 = -2mE/\hbar^2 = 2m|E|/\hbar^2$  است، زیرا این مسئله تنها با حالت‌های مقید  $E < 0$  سروکار دارد.

چون پتانسیل متقارن است ( $V(-x) = V(x)$ )، تابع موج زوج یا فرد است. حالت‌های زوج را با  $\psi_+(x)$  و حالت‌های فرد را با  $\psi_-(x)$  نمایش می‌دهیم. لازمه‌ی جواب‌های حالت مقید به ازای  $E < 0$

این است که  $\psi_{\pm}(x)$  در  $x = \pm\infty$  صفر شوند:

$$\psi_{\pm}(x) = \begin{cases} Ae^{-kx} & x > a \\ \frac{B}{\gamma} (e^{kx} \pm e^{-kx}) & -a < x < a \\ \pm Ae^{kx} & x < -a \end{cases} \quad (۲۴۳-۴)$$

ازاین رو

$$\psi_{+}(x) = \begin{cases} Ae^{-kx} \\ B \cosh kx \\ Ae^{kx} \end{cases} \quad \psi_{-}(x) = \begin{cases} Ae^{-kx} & x > a \\ B \sinh kx & -a < x < a \\ -Ae^{kx} & x < -a \end{cases} \quad (۲۴۴-۴)$$

شکل‌های  $\psi_{\pm}(x)$  در شکل ۱۲-۴ نشان داده‌اند. (ب) در رابطه با ویژه‌مقدارهای انرژی باید گفت که می‌توان آنها را از شرایط مرزی به دست آورد. شرط پیوستگی  $\psi_{+}(x)$  در  $x = a$  به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$Ae^{-ka} = B \cosh ka \quad (۲۴۵-۴)$$

و برای  $\psi_{-}(x)$  به

$$Ae^{-ka} = B \sinh ka \quad (۲۴۶-۴)$$

برای به دست آوردن شرط ناپیوستگی برای مشتق اول  $\psi_{+}(x)$  در  $x = a$  باید از (۲۴۱-۴) انتگرال بگیریم:

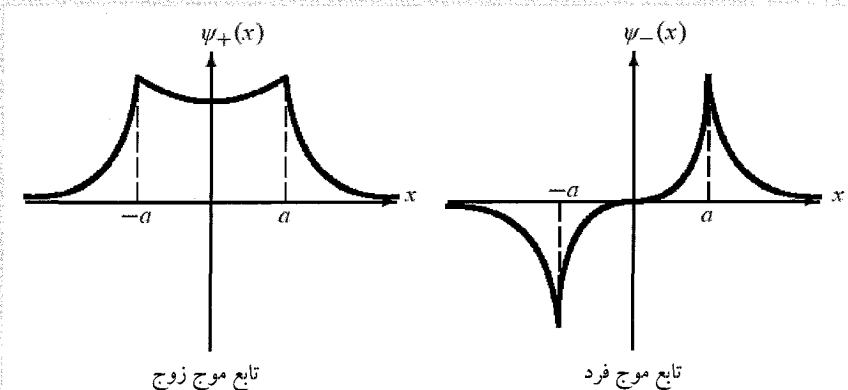
$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} [\psi'_{+}(a + \varepsilon) - \psi'_{+}(a - \varepsilon)] + \frac{2mV_0}{\hbar^2} \psi_{+}(a) = 0 \quad (۲۴۷-۴)$$

ازاین رو

$$\begin{aligned} -kAe^{-ka} - kB \sinh ka + \frac{2mV_0}{\hbar^2} Ae^{-ka} = 0 &\implies \\ A \left( \frac{2mV_0}{\hbar^2} - 1 \right) e^{-ka} = B \sinh ka &\quad (۲۴۸-۴) \end{aligned}$$

به صورت مشابه، پیوستگی مشتق اول  $\psi_{-}(x)$  در  $x = a$  نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\begin{aligned} -kAe^{-ka} - kB \cosh ka + \frac{2mV_0}{\hbar^2} Ae^{-ka} = 0 &\implies \\ A \left( \frac{2mV_0}{\hbar^2} - 1 \right) e^{-ka} = B \cosh ka &\quad (۲۴۹-۴) \end{aligned}$$



شکل ۴-۱۲ شکل تابع‌های موج زوج و فرد برای پتانسیل  $V(x) = -V_0 \delta(x-a) - V_0 \delta(x+a)$ .

با تقسیم (۴-۲۴۸) بر (۴-۲۴۵) معادله‌ی ویژه‌مقدار برای جواب‌های زوج را به دست می‌آوریم:

$$\frac{2mV_0}{k\hbar^2} - 1 = \tanh ka \implies \tanh y = \frac{\gamma}{y} - 1 \quad (4-250)$$

که در آن  $y = ka$  و  $\gamma = 2maV_0/\hbar^2$  است. می‌توان معادله‌ی ویژه‌مقدار برای جواب‌های فرد را از تقسیم (۴-۲۴۹) بر (۴-۲۴۶) به دست آورد:

$$\frac{2mV_0}{k\hbar^2} - 1 = \coth ka \implies \coth y = \frac{\gamma}{y} - 1 \implies \tanh y = \left(\frac{\gamma}{y} - 1\right)^{-1} \quad (4-251)$$

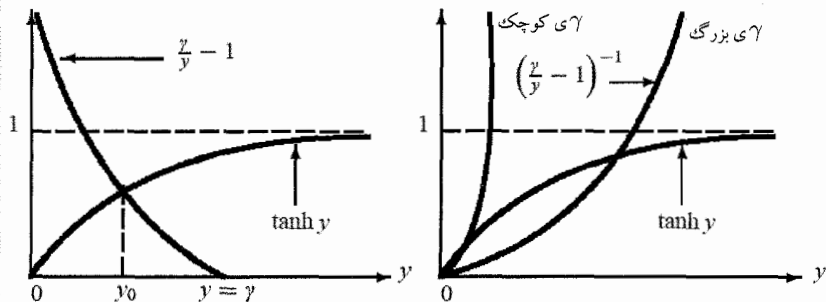
زیرا  $\coth y = 1/\tanh y$ .

برای به دست آوردن ویژه‌مقدارهای انرژی جواب‌های زوج و فرد باید معادله‌های غیرجبری (۴-۲۵۰) و (۴-۲۵۱) را حل کنیم. می‌توان این معادله‌ها را به صورت ترسیمی حل کرد. در ادامه، حدهای بالا و پایین انرژی را هم برای جواب‌های زوج و هم برای جواب‌های فرد تعیین می‌کنیم. (پ) برای یافتن تعداد حالت‌های مقید و حدهای انرژی، حالت‌های زوج و فرد را جداگانه در نظر می‌گیریم.

انرژی‌های متناظر با جواب‌های زوج

در اینجا تنها یک حالت مقید وجود دارد زیرا منحنی‌های  $\tanh y$  و  $1 - \gamma/y$  تنها یک‌بار همدیگر را قطع می‌کنند (شکل ۴-۱۳ الف). این نقطه را نقطه‌ی  $y = y_0$  می‌نامیم. هنگامی که  $y = \gamma$  است، داریم:  $1 - \gamma/y = 0$  در حالی که  $\tanh \gamma > 0$  است. بنابراین  $\gamma < y_0$  است. از سوی دیگر، چون  $\tanh y_0 < 1$  داریم،  $1 - \gamma/y_0 < 1$  یا  $\gamma/2 > y_0 > \gamma$ . آنگاه نتیجه می‌گیریم که  $\gamma < y_0 < \gamma/2$ .





(الف) ویژه مقادیر برای حالت‌های زوج

(ب) ویژه مقادیر برای حالت‌های فرد

شکل ۱۳-۴ جواب‌های ترسیمی معادله‌های ویژه مقدار به‌ازای حالت‌های زوج و حالت‌های فرد برای پتانسیل دلتای دوگانه‌ی  $V(x) = -V_0 \delta(x-a) - V_0 \delta(x+a)$ .

است یا

$$\frac{\gamma}{2} < y_0 < \gamma \implies -\frac{2mV_0^2}{\hbar^2} < E_{\text{زوج}} < -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2} \quad (252-4)$$

در به‌دست آوردن این رابطه، از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که  $\gamma^2/4 < y_0^2 < \gamma^2$  است که در آن  $\gamma = 2maV_0/\hbar^2$  و  $y_0^2 = k_0^2 a^2 = -2ma^2 E_{\text{زوج}}/\hbar^2$ . بنابراین همیشه یک حالت مقید زوج (حالت پایه) وجود دارد که انرژی آن در گستره‌ی مشخص شده با (۲۵۲-۴) قرار می‌گیرد.

انرژی‌های متناظر با جواب‌های فرد

همانطور که در شکل ۱۳-۴ ب نشان داده شده است، هرگاه شیب  $(\gamma/y - 1)^{-1}$  در  $y = 0$  کوچک‌تر از شیب  $\tanh y$  باشد یعنی

$$\left. \frac{d}{dy} \left( \frac{\gamma}{y} - 1 \right)^{-1} \right|_{y=0} < \left. \frac{d \tanh y}{dy} \right|_{y=0} \implies \frac{1}{\gamma} < 1 \quad (253-4)$$

یا

$$\gamma > 1 \implies V_0 > \frac{\hbar^2}{2ma} \quad (254-4)$$

آنگاه تنها یک حالت مقید وجود خواهد داشت زیرا منحنی‌های  $\tanh y$  و  $(\gamma/y - 1)^{-1}$  یک‌بار یکدیگر را قطع می‌کنند. ولی هرگاه  $\gamma < 1$  یا  $V_0 < \hbar^2/(2ma)$  باشد آنگاه حالت‌های مقید فرد وجود نخواهند داشت زیرا منحنی‌های  $\tanh y$  و  $(\gamma/y - 1)^{-1}$  هرگز یکدیگر را قطع نمی‌کنند.

توجه کنید که هرگاه  $y = \gamma/2$  شود آنگاه داریم:  $(\gamma/y - 1)^{-1} = 1$ . بنابراین تقاطع  $\tanh y$  و  $(\gamma/y - 1)^{-1}$  (اصولاً اگر روی دهد) باید به ازای  $\gamma/2 < y$  اتفاق بیفتد. یعنی حالت‌های مقید فرد تنها زمانی روی می‌دهند که

$$y < \frac{\gamma}{2} \implies E_{\text{فرد}} > -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2} \quad (255-4)$$

مقایسه‌ی (۲۵۲-۴) و (۲۵۵-۴) نشان می‌دهد که انرژی‌های متناظر با حالت‌های زوج کوچک‌تر از انرژی‌های متناظر با حالت‌های فرد است:

$$E_{\text{زوج}} < E_{\text{فرد}} \quad (256-4)$$

بنابراین حالت مقید زوج، حالت پایه است. با استفاده از این نتیجه می‌توانیم این نتیجه‌ها را بگیریم: (الف) اگر  $\gamma < 1$  باشد آنگاه حالت‌های مقید فرد وجود ندارند ولی همیشه یک حالت مقید زوج (حالت پایه) وجود دارد. (ب) اگر  $\gamma > 1$  باشد آنگاه دو حالت مقید وجود دارند: حالت پایه (زوج) و نخستین حالت برانگیخته (فرد).

می‌توانیم این نتیجه‌ها را به صورت زیر خلاصه کنیم:

$$(257-4) \quad \text{تنها یک حالت مقید وجود دارد.} \implies V_0 < \frac{\hbar^2}{2ma} \quad \text{یا} \quad \gamma < 1 \quad \text{اگر}$$

$$(258-4) \quad \text{دو حالت مقید وجود دارد.} \implies V_0 > \frac{\hbar^2}{2ma} \quad \text{یا} \quad \gamma > 1 \quad \text{اگر}$$

(ت) در حد  $a \rightarrow 0$  داریم:  $y \rightarrow 0$  و  $\gamma \rightarrow 0$  از این رو معادله‌ی غیرجبری زوج  $\tanh y = \gamma/y - 1$  به  $y \simeq \gamma/y - 1$  یا  $y = \gamma$  کاهش می‌یابد که به نوبه‌ی خود به  $y^2 = (ka)^2 = \gamma^2$  یا  $y^2 = (2ma^2 E_{\text{زوج}}/\hbar^2) = (2maV_0/\hbar^2)^2$  می‌انجامد:

$$E_{\text{زوج}} = -\frac{2mV_0^2}{\hbar^2} \quad (259-4)$$

توجه کنید که در حد  $a \rightarrow 0$ ، پتانسیل  $V(x) = -V_0 \delta(x-a) - V_0 \delta(x+a)$  به  $V(x) = -2V_0 \delta(x)$  کاهش می‌یابد. می‌بینیم که انرژی حالت پایه‌ی (۲۳۱-۴) پتانسیل دلتای یگانه با (۲۵۹-۴) یکسان است به شرط آن که  $V_0$  در (۲۳۱-۴) را با  $2V_0$  جایگزین کنیم.

در حد  $a \rightarrow \infty$  داریم:  $y \rightarrow \infty$  و  $\gamma \rightarrow \infty$  بنابراین معادله‌ی  $\tanh y = \gamma/y - 1$  به  $y \simeq \gamma/2$  یا  $y = \gamma/2$  کاهش می‌یابد که به  $y^2 = (ka)^2 = \gamma^2/4$  یا  $y^2 = (2ma^2 E_{\text{زوج}}/\hbar^2) = (maV_0/\hbar^2)^2$  می‌انجامد:

می‌انجامد:

$$E_{\text{عز}} = -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2} \quad (۲۶۰-۴)$$

این رابطه با رابطه‌ی مربوط به پتانسیل دلتای یگانه‌ی (۲۳۱-۴) یکسان است.

## مسأله‌ی ۶-۴

ذره‌ی  $m$  به جرم  $m$  را در نظر بگیرید که تحت تأثیر پتانسیل زیر قرار دارد:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x \leq 0 \\ -V_0 \delta(x-a) & x > 0 \end{cases}$$

که در آن  $V_0 > 0$  است. در مورد وجود حالت‌های مقید برحسب اندازه‌ی  $a$  بحث کنید. حل به‌ازای  $x > 0$  معادله‌ی شرودینگر به‌صورت زیر است:

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \left[ \frac{2mV_0}{\hbar^2} \delta(x-a) - k^2 \right] \psi(x) = 0 \quad (۲۶۱-۴)$$

که در آن  $k^2 = -2mE/\hbar^2$  است زیرا در اینجا تنها حالت‌های مقید ( $E < 0$ ) مد نظر ما است. جواب‌های این معادله عبارتند از

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = Ae^{kx} + Be^{-kx} & 0 < x < a \\ \psi_2(x) = Ce^{-kx} & x > a \end{cases} \quad (۲۶۲-۴)$$

می‌توان ویژه‌مقدارهای انرژی را از شرایط مرزی به‌دست آورد. چون تابع موج در  $x = 0$  صفر می‌شود، داریم:

$$\psi_1(0) = 0 \implies A + B = 0 \implies B = -A \quad (۲۶۳-۴)$$

شرط پیوستگی  $\psi(x)$  در  $x = a$  ( $\psi_1(a) = \psi_2(a)$ ) به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$Ae^{ka} - Ae^{-ka} = Ce^{-ka} \quad (۲۶۴-۴)$$

برای به‌دست آوردن شرط ناپیوستگی مشتق اول  $\psi(x)$  در  $x = a$  باید از (۲۶۱-۴) انتگرال بگیریم:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow a^+} [\psi_2'(a+\varepsilon) - \psi_1'(a-\varepsilon)] + \frac{2mV_0}{\hbar^2} \psi_2(a) = 0 \quad (۲۶۵-۴)$$

$$-kCe^{-ka} - kAe^{ka} - kAe^{-ka} + \frac{2mV_0}{\hbar^2} Ce^{-ka} = 0 \quad (۲۶۶-۴)$$

با جاگذاری  $Ce^{-ka} = Ae^{ka} - Ae^{-ka}$  یا (۲۶۴-۴) در (۲۶۶-۴) رابطه‌ی زیر را داریم:

$$-kAe^{ka} + kAe^{-ka} - kAe^{ka} - kAe^{-ka} + \frac{2mV_0}{\hbar^2} (Ae^{ka} - Ae^{-ka}) = 0 \quad (۲۶۷-۴)$$

از این مرحله به بعد، می‌توانیم به دو روش متفاوت (اما معادل) عمل کنیم. این دو روش صرفاً در شیوه‌ی بهره‌گیری از (۲۶۷-۴) تفاوت دارند. برای کامل شدن بحث، هر دو روش را مطالعه می‌کنیم.

روش اول

جمله‌های دوم و چهارم (۲۶۷-۴) یکدیگر را حذف می‌کنند بنابراین می‌توانیم آن را به معادله‌ی زیر کاهش دهیم:

$$-kAe^{ka} - kAe^{ka} + \frac{2mV_0}{\hbar^2} (Ae^{ka} - Ae^{-ka}) = 0 \quad (۲۶۸-۴)$$

که به نوبه‌ی خود به معادله‌ی غیرجبری زیر می‌انجامد:

$$k = \frac{mV_0}{\hbar^2} (1 - e^{-2ka}) \quad (۲۶۹-۴)$$

ویژه‌مقدارهای انرژی از تقاطع منحنی‌های  $f(k) = k$  و  $g(k) = mV_0(1 - e^{-2ka})/\hbar^2$  به دست می‌آیند. چون شیب  $f(k)$  برابر با ۱ است، هرگاه شیب  $g(k)$  در  $k=0$  کوچک‌تر از ۱ باشد (یعنی  $a < \hbar^2/(2mV_0)$ ) آنگاه حالت‌های مقید وجود نخواهند داشت (شکل ۱۴-۴ الف). ولی هرگاه شیب  $g(k)$  بزرگ‌تر از ۱ باشد (یعنی  $a > \hbar^2/(2mV_0)$ ):

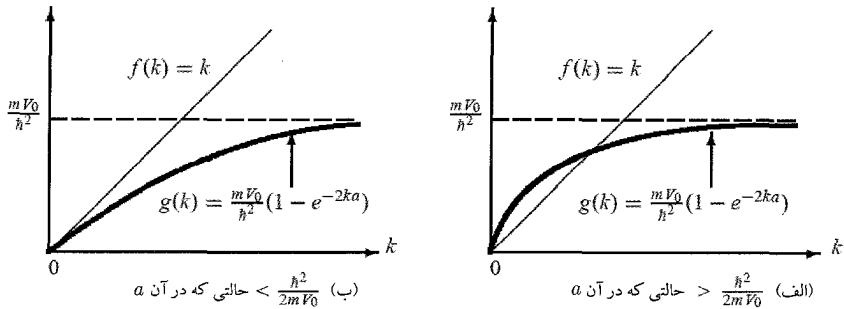
$$\left. \frac{dg(k)}{dk} \right|_{k=0} > 1 \quad \text{یا} \quad a > \frac{\hbar^2}{2mV_0} \quad (۲۷۰-۴)$$

آنگاه یک حالت مقید وجود خواهد داشت (شکل ۱۴-۴ ب).

روش دوم

در اینجا به سادگی جمله‌های اول و دوم (۲۶۷-۴) را برای تولید  $-2kA \sinh(ka)$  ترکیب می‌کنیم. ترکیب جمله‌های سوم و چهارم  $-2kA \cosh(ka)$  را نتیجه می‌دهد و جمله‌های پنجم و ششم به  $2A(2mV_0/\hbar^2) \sinh ka$  می‌انجامند. از این رو

$$-2kA \sinh ka - 2kA \cosh ka + (2A) \frac{2mV_0}{\hbar^2} \sinh ka = 0 \quad (۲۷۱-۴)$$



شکل ۴-۱۴ جواب‌های ترسیمی  $f(k) = g(k)$  یا  $k = (mV_0/h^2)(1 - e^{-2ka})$ . اگر شیب  $g(k)$  کوچک‌تر از ۱ باشد (یعنی  $a < h^2/(2mV_0)$ ) آنگاه هیچ حالت مقیدی وجود نخواهد داشت ولی اگر شیب  $g(k)$  بزرگ‌تر از ۱ باشد (یعنی  $a > h^2/(2mV_0)$ ) آنگاه تنها یک حالت مقید وجود خواهد داشت.

که به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\gamma \coth \gamma = \frac{2mV_0}{h^2} a - \gamma \quad (272-4)$$

که در آن  $\gamma = ka$  است. ویژه‌مقدارهای انرژی از تقاطع منحنی‌های  $h(\gamma) = \gamma \coth \gamma$  و  $u(\gamma) = \frac{2mV_0}{h^2} a - \gamma$  به دست می‌آیند. همانطور که در شکل ۴-۱۵ الف نشان داده است، هرگاه  $a < h^2/(2mV_0)$  باشد آنگاه جواب حالت مقید وجود نخواهد داشت زیرا منحنی‌های  $h(\gamma)$  و  $u(\gamma)$  یکدیگر را قطع نمی‌کنند. ولی اگر  $a > h^2/(2mV_0)$  باشد آنگاه منحنی‌ها تنها یک بار یکدیگر را قطع می‌کنند از این رو یک حالت مقید وجود خواهد داشت (شکل ۴-۱۵ ب).

می‌توانیم نتیجه‌های به دست آمده را به صورت زیر خلاصه کنیم:

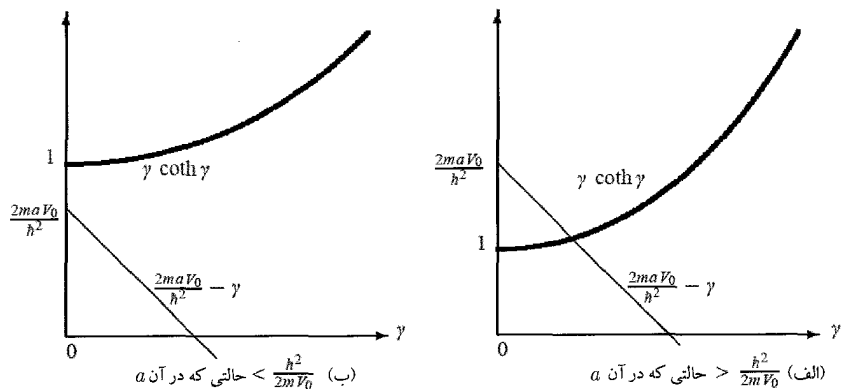
$$a < \frac{h^2}{2mV_0} \implies \text{حالت‌های مقید وجود ندارند.} \quad (273-4)$$

$$a > \frac{h^2}{2mV_0} \implies \text{یک حالت مقید وجود دارد.} \quad (274-4)$$

### مسأله‌ی ۴-۷

ذره‌ای به جرم  $m$  علاوه بر محدود بودن به حرکت درون یک چاه پتانسیل مربعی نامتناهی به اندازه‌ی  $a$  با دیواره‌هایی در  $x = a$  و  $x = 0$ ، تحت تأثیر یک پتانسیل دلتا به قدرت  $V$  است:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 \delta(x - a/2) & 0 < x < a \\ \infty & \text{در جاهای دیگر} \end{cases}$$



شکل ۱۵-۴ جواب‌های ترسیمی  $h(\gamma) = \gamma \coth \gamma$  با  $\gamma = ka$  و  $u(\gamma) = 2mV_0 a / \hbar^2 - \gamma$  اگر  $a < 2mV_0 / \hbar^2$  باشد آنگاه هیچ حالت مقیدی وجود ندارد. اگر  $a > 2mV_0 / \hbar^2$  باشد آنگاه یک حالت مقید وجود دارد.

که در آن  $V_0 > 0$  است. نشان دهید که چگونه ترازهای انرژی سیستم برحسب  $V_0$  و  $a$  محاسبه می‌شوند.

حل

معادله‌ی شرودینگر

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2mV_0}{\hbar^2} \delta\left(x - \frac{a}{2}\right) \psi(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0 \quad (۲۷۵-۴)$$

را می‌توان به‌ازای  $x \neq a/2$  به صورت زیر نوشت:

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0 \quad (۲۷۶-۴)$$

جواب‌های این معادله باید در  $x = 0$  و  $x = a$  صفر شوند:

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_L(x) = A \sin kx & 0 \leq x \leq a/2 \\ \psi_R(x) = B \sin k(x-a) & a/2 \leq x \leq a \end{cases} \quad (۲۷۷-۴)$$

که در آن  $k = \sqrt{2m|E|}/\hbar$  است. پیوستگی  $\psi(x)$  در  $x = a/2$  ( $\psi_L(a/2) = \psi_R(a/2)$ ) به رابطه‌ی  $A \sin(a/2) = -B \sin(a/2)$  می‌انجامد از این رو  $B = -A$  است. بنابراین تابع موج از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_L(x) = A \sin kx & 0 \leq x < a/2 \\ \psi_R(x) = -A \sin k(x-a) & a/2 < x \leq a \end{cases} \quad (۲۷۸-۴)$$

می‌توان ویژه‌مقدارهای انرژی را از شرط ناپیوستگی مشتق اول تابع موج که می‌توان آن را با انتگرال‌گیری (۲۷۵-۴) از  $a/2 - \varepsilon$  تا  $a/2 + \varepsilon$  و سپس با قرار دادن  $\varepsilon \rightarrow 0$  به‌دست آورد، محاسبه کرد:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left( \frac{d\psi_R(x)}{dx} \Big|_{x=a/2+\varepsilon} - \frac{d\psi_L(x)}{dx} \Big|_{x=a/2-\varepsilon} \right)_{\varepsilon=0} + \frac{2mV_0}{\hbar^2} \psi \left( \frac{a}{2} \right) = 0 \quad (279-4)$$

با جاگذاری (۲۷۸-۴) در (۲۷۹-۴) رابطه‌ی زیر را به‌دست می‌آوریم:

$$-kA \cos \left[ k \left( \frac{a}{2} - a \right) \right] - kA \cos \left( k \frac{a}{2} \right) + A \frac{2mV_0}{\hbar^2} \sin \left( k \frac{a}{2} \right) = 0 \quad (280-4)$$

یا

$$\tan \left( k \frac{a}{2} \right) = \frac{\hbar^2 k}{mV_0} \implies \tan \left( \sqrt{\frac{ma^2|E|}{2\hbar^2}} \right) = \sqrt{\frac{2\hbar^2|E|}{mV_0^2}} \quad (281-4)$$

که یک معادله‌ی غیرجبری برای انرژی است و جواب‌های آن (که می‌توان آنها را به‌صورت عددی یا ترسیمی به‌دست آورد) ویژه‌مقدارهای  $E$  را نتیجه می‌دهند.

#### مسأله‌ی ۸-۴

با استفاده از اصل عدم قطعیت نشان دهید که کمترین انرژی یک نوسانگر برابر با  $\hbar\omega/2$  است.

حل

حرکت ذره محدود به ناحیه‌ی  $-a/2 \leq x \leq a/2$  است، این به این معنی است که  $\Delta x \simeq a$  است. آنگاه در نتیجه‌ی اصل عدم قطعیت، کمترین مقدار تکانه‌ی این ذره برابر با  $\hbar/(2\Delta x) \simeq \hbar/(2a)$  است. انرژی کل به‌صورت تابعی از  $a$  برابر است با

$$E(a) \simeq \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{2a} \right)^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 a^2 \quad (282-4)$$

کمینه کردن  $E$  نسبت به  $a$

$$0 = \frac{dE}{da} \Big|_{a=a_0} = -\frac{\hbar^2}{4ma^3} + m\omega^2 a_0 \quad (283-4)$$

مقدار  $a_0 = \sqrt{\hbar/2m\omega}$  را نتیجه می‌دهد و از این رو  $E(a_0) \simeq \hbar\omega/2$  است که برابر با مقدار دقیق انرژی نقطه‌ی صفر نوسانگر است.

## مسئله‌ی ۹-۴

ترازهای انرژی ذره‌ای به جرم  $m$  که در پتانسیل یک بعدی زیر حرکت می‌کند را بیابید:

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & x \leq 0 \\ \frac{1}{4}m\omega^2 x^2 & x > 0 \end{cases}$$

حل

این یک نوسانگر هماهنگ نامتقارن است که در آن ذره تنها در ناحیه‌ی  $x > 0$  حرکت می‌کند. تنها جواب‌های قابل قبول، جواب‌هایی هستند که به ازای آنها تابع موج در  $x = 0$  صفر می‌شود. این جواب‌ها باید جواب‌های یک نوسانگر هماهنگ (متقارن) معمولی باشند که پاریته‌ی فرد دارند. زیرا تابع‌های موج متناظر با نوسانگر هماهنگ متقارن یا زوج ( $n$  زوج) هستند و یا فرد ( $n$  فرد). و تنها جواب‌های فرد در مبدأ صفر می‌شوند ( $\psi_{2n+1}(0) = 0, (n = 0, 1, 2, 3, \dots)$ ). بنابراین ترازهای انرژی این پتانسیل نامتقارن باید از ترازهایی که متناظر با ترازهای انرژی  $n$  فرد از پتانسیل متقارن هستند، به دست آیند. یعنی

$$E_n = \left[ (2n+1) + \frac{1}{4} \right] \hbar\omega = \left( 2n + \frac{3}{4} \right) \hbar\omega \quad (n = 0, 1, 2, 3, \dots) \quad (284-4)$$

## مسئله‌ی ۱۰-۴

جعبه‌ی پتانسیل زیر را در نظر بگیرید:

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

(الف) انرژی‌های حالت پایه و حالت‌های برانگیخته‌ی اول و دوم را برای موردهایی که در ادامه می‌آیند تخمین بزنید: (۱) الکترونی که در جعبه‌ای به اندازه‌ی  $a = 10^{-10} \text{ m}$  محصور شده است (جواب خود را برحسب الکترون‌ولت بیان کنید. می‌توانید از این مقادارها استفاده کنید:  $hc = 200 \text{ MeV fm}$  و  $m_e c^2 = 0.51 \text{ MeV}$ ) (۲) کره‌ای فلزی به جرم  $1 \text{ g}$  که در جعبه‌ای به اندازه‌ی  $a = 1 \text{ cm}$  حرکت می‌کند (جواب خود را برحسب ژول بیان کنید).

(ب) در مورد اهمیت اثرهای کوانتومی برای هر دو سیستم بحث کنید.

(پ) از اصل عدم قطعیت برای تخمین سرعت الکترون و کره‌ی فلزی استفاده کنید.

حل

انرژی ذره‌ای به جرم  $m$  در جعبه‌ای که دارای دیواره‌های کاملاً صلب است، از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8ma^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (285-4)$$



که در آن  $a$  اندازه‌ی جعبه است.

(الف) (۱) برای الکترون در جعبه‌ای به اندازه‌ی  $m \cdot 10^{-10}$  داریم:

$$E_n = \frac{\hbar^2 c^2}{m_e c^2 a^2} \frac{4\pi^2 n^2}{8} = \frac{4 \times 10^4 (\text{MeV fm})^2 \pi^2}{0,5 \text{MeV} \times 10^4 \text{fm}^2} n^2 \quad (286-4)$$

$$= 4\pi^2 n^2 \text{eV} \simeq 39n^2 \text{eV}$$

از این رو  $E_1 = 39 \text{eV}$ ,  $E_2 = 156 \text{eV}$  و  $E_3 = 351 \text{eV}$ .

(۲) برای کره در جعبه‌ای به ضلع  $10 \text{cm}$  داریم:

$$E_n = \frac{(6,6 \times 10^{-34} \text{Js})^2}{10^{-2} \text{kg} \times 10^{-2} \text{m}^2} n^2 = 43,6 \times 10^{-63} n^2 \text{J} \quad (287-4)$$

بنابراین  $E_1 = 43,6 \times 10^{-63} \text{J}$ ,  $E_2 = 174,4 \times 10^{-63} \text{J}$  و  $E_3 = 392,4 \times 10^{-63} \text{J}$ .

(ب) اختلاف‌های بین ترازهای انرژی برابرند با

$$(E_2 - E_1)_{\text{الکترون}} = 117 \text{eV}, \quad (E_3 - E_2)_{\text{الکترون}} = 195 \text{eV} \quad (288-4)$$

$$(E_2 - E_1)_{\text{کره}} = 130,8 \times 10^{-63} \text{J}, \quad (E_3 - E_2)_{\text{کره}} = 218 \times 10^{-63} \text{J} \quad (289-4)$$

این نتیجه‌ها نشان می‌دهند که

• فاصله‌ی بین ترازهای انرژی الکترون بسیار زیاد است و ترازها دور از یکدیگرند. بنابراین اثرهای کوانتومی مهم‌اند.

• ترازهای انرژی کره عملاً نمایانپذیرند و فاصله‌ی بین ترازها قابل چشم‌پوشی است. بنابراین طیف انرژی یک پیوستار را تشکیل می‌دهد و از این رو اثرهای کوانتومی برای کره قابل توجه نیست.

(پ) مطابق با اصل عدم قطعیت، سرعت متناسب با  $v \sim \hbar/(ma)$  است. فاصله‌های نوعی برای الکترون، فاصله‌های اتمی‌اند ( $a \simeq 10^{-10} \text{m}$ ) بنابراین

$$v \sim \frac{\hbar c}{m c^2 a} c \sim \frac{200 \text{MeV fm}}{0,5 \text{MeV} \times 10^4 \text{fm}} c \simeq 4 \times 10^{-3} c = 1,2 \times 10^6 \text{ms}^{-1} \quad (290-4)$$

که در آن  $c$  سرعت نور است. بنابراین الکترون کاملاً سریع حرکت می‌کند که انتظار هم می‌رفت زیرا الکترون را به حرکت در یک ناحیه‌ی کوچک محدود کرده‌ایم.

برای کره، فاصله‌های نوعی در محدوده‌ی  $1 \text{cm}$  هستند:

$$v \sim \frac{\hbar}{ma} \sim \frac{6,6 \times 10^{-34} \text{Js}}{10^{-3} \text{kg} \times 10^{-2} \text{m}} \simeq 6,6 \times 10^{-29} \text{ms}^{-1} \quad (291-4)$$

در این سرعت، کره عملاً ساکن است.

#### مسئله‌ی ۱۱-۴

(الف) ثابت کنید که ماتریس‌های نمایش‌دهنده‌ی عملگرهای  $\hat{X}$  و  $\hat{P}$  یک نوسانگر هماهنگ در فضای  $N$  از رابطه‌ی جابه‌جایی درست  $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$  پیروی می‌کند.

(ب) نشان دهید که می‌توان ترازهای انرژی نوسانگر هماهنگ را از وارد کردن ماتریس‌های  $\hat{X}$  و  $\hat{P}$  در هامیلتونی  $\hat{H} = \hat{P}^2/(2m) + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{X}^2$  به‌دست آورد.

حل

(الف) با استفاده از ماتریس‌های  $\hat{X}$  و  $\hat{P}$  در رابطه‌های (۱۸۱-۴) و (۱۸۲-۴)، رابطه‌های زیر را به‌دست می‌آوریم:

$$\hat{X}P = i\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -\sqrt{2} & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots \\ \sqrt{2} & 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad \hat{P}X = i\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} -1 & 0 & -\sqrt{2} & \dots \\ 0 & -1 & 0 & \dots \\ \sqrt{2} & 0 & -1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (292-4)$$

ازین‌رو

$$\hat{X}P - \hat{P}X = i\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (293-4)$$

یا  $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar I$  که در آن  $I$  ماتریس یکه است.

(ب) دوباره با استفاده از ماتریس‌های  $\hat{X}$  و  $\hat{P}$  در رابطه‌های (۱۸۱-۴) و (۱۸۲-۴) می‌توانیم ثابت کنیم که

$$\hat{X}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \sqrt{2} & \dots \\ 0 & 3 & 0 & \dots \\ \sqrt{2} & 0 & 5 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad \hat{P}^2 = -\frac{m\hbar\omega}{2} \begin{pmatrix} -1 & 0 & \sqrt{2} & \dots \\ 0 & -3 & 0 & \dots \\ \sqrt{2} & 0 & -5 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (294-4)$$

از این رو

$$\frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{X}^2 = \frac{\hbar\omega}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 3 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 5 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (295-4)$$

شکل این ماتریس مشابه با نتیجه‌ی به دست آمده از بحث تحلیلی است ( $E_n = \hbar\omega(2n+1)/2$ ) زیرا

$$H_{n'n} = \langle n' | \hat{H} | n \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} (2n+1) \delta_{n'n} \quad (296-4)$$

### مسأله‌ی ۱۲-۴

احتمال یافتن یک ذره در ناحیه‌ی ممنوع کلاسیکی یک نوسانگر هماهنگ را برای حالت‌های  $n = 0, 1, 2, 3, 4$  محاسبه کنید. آیا این نتیجه‌ها با همتهای کلاسیکی‌شان سازگارند؟

حل

نقطه‌های بازگشت کلاسیکی به صورت  $E_n = V(x_n)$  یا  $\frac{1}{2}m\omega^2 x_n^2 = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$  تعریف می‌شوند یعنی  $x_n = \pm \sqrt{\hbar/(m\omega)} \sqrt{2n+1}$ . بنابراین احتمال یافتن یک ذره در ناحیه‌ی ممنوع کلاسیکی برای حالت  $\psi_n(x)$  برابر است با

$$P_n = \int_{-\infty}^{-|x_n|} |\psi_n(x)|^2 dx + \int_{|x_n|}^{+\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = 2 \int_{|x_n|}^{+\infty} |\psi_n(x)|^2 dx \quad (297-4)$$

که در آن  $\psi_n(x)$  از (۱۷۲-۴) به دست می‌آید،  $\psi_n(x) = 1/\sqrt{\sqrt{\pi} 2^n n! x_0} e^{-x^2/2x_0^2} H_n(x/x_0)$ ،  $x_0 = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$  در آن  $x_0$  استفاده از تغییر متغیر  $y = x/x_0$  می‌توانیم  $P_n$  را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$P_n = \frac{2}{\sqrt{\pi} 2^n n!} \int_{\sqrt{2n+1}}^{+\infty} e^{-y^2} H_n^2(y) dy \quad (298-4)$$

که در آن چندجمله‌ای‌های هرمیت  $H_n(y)$  در (۱۲۰-۴) فهرست شده‌اند. انتگرال (۲۹۸-۴) را تنها می‌توان به صورت عددی حساب کرد. با استفاده از مقدارهای عددی

$$\int_1^{\infty} e^{-y^2} dy = 0,1394, \quad \int_{\sqrt{3}}^{\infty} y^2 e^{-y^2} dy = 0,0495 \quad (299-4)$$

$$\int_{\sqrt{5}}^{\infty} (4y^2 - 2)^2 e^{-y^2} dy = 0,6740, \quad \int_{\sqrt{7}}^{\infty} (8y^3 - 12y)^2 e^{-y^2} dy = 3,6363 \quad (300-4)$$

$$\int_{\sqrt{9}}^{\infty} (16y^2 - 48y^2 + 12)^2 e^{-y^2} dy = 26,86 \quad (301-4)$$

نتیجه‌های زیر را به دست می‌آوریم:

$$P_0 = 0,1573, \quad P_1 = 0,1116, \quad P_2 = 0,095069 \quad (302-4)$$

$$P_3 = 0,08548, \quad P_4 = 0,07893 \quad (303-4)$$

این نتیجه‌ها نشان می‌دهند که با افزایش  $n$  احتمال کاهش می‌یابد. بنابراین به ازای مقادیرهای بسیار بزرگ  $n$  احتمال بسیار کوچک می‌شود. بنابراین یافتن ذره در ناحیه ممنوع کلاسیکی هنگامی که ذره در حالتی با برانگیختگی بالا است، غیرمحمتمل است که انتظار هم می‌رفت زیرا در حد مقادیرهای بزرگ  $n$  به تقریب کلاسیکی می‌رسیم.

### مسئله‌ی ۱۳-۴

ذره‌ای به جرم  $m$  را در نظر بگیرید که در پتانسیل زیر حرکت می‌کند:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x \leq 0 \\ -V_0 & 0 < x < a \\ 0 & x \geq a \end{cases}$$

که در آن  $V_0 > 0$  است.

(الف) تابع موج را بیابید.

(ب) نشان دهید که چگونه می‌توان ویژه‌مقدارهای انرژی را از یک نمودار به دست آورد.

(پ) مقدار کمینه‌ی  $V_0$  را (بر حسب  $m, a, \hbar$ ) طوری بیابید که ذره یک حالت مقید داشته باشد. سپس

آن را برای دو حالت مقید محاسبه کنید. سعی کنید از این دو نتیجه، کمترین مقدار  $V_0$  را بیابید به طوری که سیستم  $n$  حالت مقید داشته باشد.

حل

(الف) همانطور که در شکل ۱۶-۴ نشان داده شده است، تابع موج در ناحیه‌ی  $x < 0$  صفر است

( $\psi(x) = 0$ ). در ناحیه‌ی  $x > 0$  معادله‌ی شرودینگر برای جواب‌های حالت مقید ( $-V_0 < E < 0$ )

از معادله‌های زیر به دست می‌آید:

$$\left( \frac{d^2}{dx^2} + k_1^2 \right) \psi_1(x) = 0 \quad (0 < x < a) \quad (304-4)$$

$$\left( \frac{d^2}{dx^2} - k_2^2 \right) \psi_2(x) = 0 \quad (x > a) \quad (305-4)$$

که در آنها  $k_1^2 = 2m(V_0 + E)/\hbar^2$  و  $k_2^2 = -2mE/\hbar^2$ . از یک سو، جواب (۳۰۴-۴) نوسانی است  $B = 0$ .  $\psi_1(x) = A \sin k_1 x + B \cos k_1 x$  ولی چون  $\psi_1(0) = 0$  است، باید داشته باشیم:  $B = 0$ . از سوی دیگر، با حذف جواب‌های از نظر فیزیکی غیرقابل قبول که به‌ازای مقادیرهای بزرگ  $x$  به‌صورت نمایی افزایش می‌یابند، جواب (۳۰۵-۴) برابر با  $\psi_2(x) = Ce^{-k_2 x}$  است. بنابراین تابع موج به‌صورت زیر است:

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ \psi_1(x) = A \sin k_1 x & 0 < x < a \\ \psi_2(x) = Ce^{-k_2 x} & x > a \end{cases} \quad (306-4)$$

(ب) برای تعیین ویژه‌مقادیر، باید از شرایط مرزی در  $x = a$  استفاده کنیم. شرط  $\psi_1(a) = \psi_2(a)$  نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$A \sin k_1 a = Ce^{-k_2 a} \quad (307-4)$$

و پیوستگی مشتق اول ( $\psi_1'(a) = \psi_2'(a)$ ) به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$Ak_1 \cos k_1 a = -Ck_2 e^{-k_2 a} \quad (308-4)$$

با تقسیم کردن (۳۰۸-۴) بر (۳۰۷-۴) رابطه‌ی زیر را به‌دست می‌آوریم:

$$k_1 a \cot k_1 a = -k_2 a \quad (309-4)$$

چون  $k_1^2 = 2m(V_0 + E)/\hbar^2$  و  $k_2^2 = -2mE/\hbar^2$ ، رابطه‌ی زیر را داریم:

$$(k_1 a)^2 + (k_2 a)^2 = \gamma^2 \quad (310-4)$$

که در آن  $\gamma = \sqrt{2mV_0}a/\hbar$  است.

می‌توان معادله‌های غیرجبری (۳۰۹-۴) و (۳۱۰-۴) را به‌صورت ترسیمی حل کرد. همانطور که در

شکل ۱۶-۴ نشان داده شده است، ترازهای انرژی از تقاطع منحنی دایره‌ای  $(k_1 a)^2 + (k_2 a)^2 = \gamma^2$

با  $k_1 a \cot k_1 a = -k_2 a$  به‌دست می‌آید.

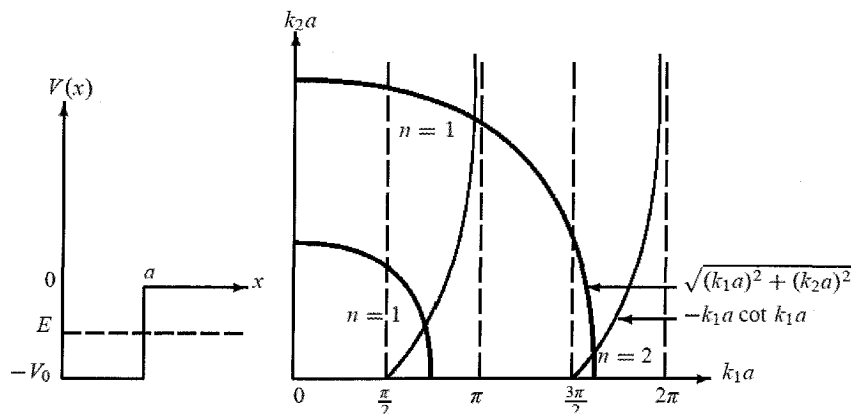
(پ) اگر  $\pi/2 < \gamma < 3\pi/2$  باشد آنگاه تنها یک حالت مقید وجود خواهد داشت (حالت پایه‌ی

$n = 1$ ) زیرا تنها یک تقاطع بین منحنی‌های  $(k_1 a)^2 + (k_2 a)^2 = \gamma^2$  و  $k_1 a \cot k_1 a = -k_2 a$  وجود دارد.

کمترین مقدار  $V_0$  که یک تک‌حالت مقید را نتیجه می‌دهد، از  $\gamma = \pi/2$  به‌دست می‌آید که

به  $\pi^2/4 = 2ma^2 V_0/\hbar^2$  یا به

$$V_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{4ma^2} \quad (311-4)$$



شکل ۴-۱۶ پتانسیل  $V(x)$  (منحنی سمت چپ). ترازهای انرژی  $V(x)$  به صورت ترسیمی از تقاطع منحنی دایره‌ای  $\sqrt{(k_1 a)^2 + (k_2 a)^2}$  با  $-k_1 a \cot k_1 a$  (منحنی سمت راست) بدست می‌آیند (منحنی سمت راست).

می‌انجامد. به صورت مشابه، اگر  $\gamma < 5\pi/2 < 3\pi/2$  باشد آنگاه دو تقاطع بین  $(k_1 a)^2 + (k_2 a)^2 = \gamma^2$  و  $k_1 a \cot k_1 a = -k_2 a$  وجود خواهد داشت. بنابراین دو حالت مقید وجود خواهد داشت: حالت پایه ( $n=1$ ) و نخستین حالت برانگیخته ( $n=2$ ). کمترین مقدار  $V_0$  که دو حالت مقید را نتیجه می‌دهد، متناظر است با  $2ma^2 V_0 / \hbar^2 = 9\pi^2/4$  یا

$$V_0 = \frac{9\pi^2 \hbar^2}{\lambda m a^2} \quad (۳۱۲-۴)$$

بنابراین می‌توانیم این نتیجه‌ی عمومی را بگیریم که هرگاه  $n\pi - \pi/2 < \gamma < n\pi + \pi/2$  باشد آنگاه  $n$  تقاطع و از این رو  $n$  حالت مقید وجود خواهد داشت:

$$n\pi - \frac{\pi}{2} < \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} a < n\pi + \frac{\pi}{2} \implies n \text{ حالت مقید وجود دارد.} \quad (۳۱۳-۴)$$

کمترین مقدار  $V_0$  که  $n$  حالت مقید را می‌دهد، برابر است با

$$V_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{\lambda m a^2} (2n - 1)^2 \quad (۳۱۴-۴)$$

#### مسئله‌ی ۴-۱۴

(الف) با فرض آن که پتانسیل تجربه‌شده توسط یک نوترون در یک هسته را بتوانیم به صورت طرح‌وار با یک پتانسیل یک‌بعدی با دیواره‌های صلب نامتناهی به طول  $10 \text{ fm}$  نمایش دهیم، انرژی پتانسیل کمینه‌ی نوترون را تخمین بزنید.

(ب) انرژی جنبشی کمینه‌ی یک الکترون مقید در هسته‌ی توصیف شده در قسمت (الف) را تخمین بزنید. آیا الکترون می‌تواند در هسته محدود شود؟ توضیح دهید.

حل

انرژی ذره‌ای به جرم  $m$  در یک جعبه‌ی پتانسیل یک‌بعدی که دارای دیواره‌های کاملاً صلب است از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (315-4)$$

که در آن  $a$  اندازه‌ی جعبه است.

(الف) با فرض آن که نوترون غیرنسبیتی است (یعنی انرژی آن  $E \ll m_n c^2$  است)، کمترین انرژی که نوترون در جعبه‌ای به اندازه‌ی  $a = 10 \text{ fm}$  می‌تواند داشته باشد، برابر است با

$$E_{\min} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_n a^2} = \frac{\pi^2 (\hbar^2 c^2)}{2(m_n c^2) a^2} \simeq 2,04 \text{ MeV} \quad (316-4)$$

که در آن از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که انرژی سکون نوترون برابر با  $m_n c^2 \simeq 939,57 \text{ MeV}$  و  $\hbar c \simeq 197,3 \text{ MeV fm}$  است. در واقع، می‌بینیم که  $E_{\min} \ll m_n c^2$  است.

(ب) کمینه‌ی انرژی یک الکترون (غیرنسبیتی) که در جعبه‌ای به اندازه‌ی  $a = 10 \text{ fm}$  حرکت می‌کند، از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$E_{\min} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e a^2} = \frac{\pi^2 (\hbar^2 c^2)}{2(m_e c^2) a^2} \simeq 3755,45 \text{ MeV} \quad (317-4)$$

انرژی سکون یک الکترون برابر با  $m_e c^2 \simeq 0,511 \text{ MeV}$  است بنابراین این الکترون فوق‌نسبیتی است زیرا  $E_{\min} \gg m_e c^2$  است و بیان می‌کند که الکترونی با این انرژی نمی‌تواند در چنین هسته‌ای محدود باشد.

#### مسأله‌ی ۱۵-۴

(الف) مقدار چشمداشتی عملگر  $\hat{X}^4$  را در نمایش  $N$  نسبت به حالت  $|n\rangle$  (یعنی  $\langle n | \hat{X}^4 | n \rangle$ ) حساب کنید.

(ب) از نتیجه‌ی (الف) برای محاسبه‌ی انرژی ذره‌ای که هامیلتونی آن برابر است با  $\hat{H} = \hat{P}^2 / (2m) + \frac{1}{4} m \omega^2 \hat{X}^2 - \lambda \hat{X}^4$  استفاده کنید.

حل

(الف) چون  $\sum_{m=0}^{\infty} |m\rangle \langle m| = 1$  است، می‌توانیم مقدار چشمداشتی  $\hat{X}^4$  را به صورت زیر بنویسیم:

$$\langle n | \hat{X}^4 | n \rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \langle n | \hat{X}^2 | m \rangle \langle m | \hat{X}^2 | n \rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \left| \langle m | \hat{X}^2 | n \rangle \right|^2 \quad (318-4)$$

حال با توجه به

$$\hat{X}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} (\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}\hat{a}^{\dagger} + \hat{a}^{\dagger}\hat{a}) = \frac{\hbar}{2m\omega} (\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2} + 2\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + 1) \quad (319-4)$$

تنها جمله‌های  $\langle m|\hat{X}^2|n\rangle$  که باقی می‌مانند، عبارتند از

$$\langle n|\hat{X}^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n|2\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + 1|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} (2n + 1) \quad (320-4)$$

$$\langle n-2|\hat{X}^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n-2|\hat{a}^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \sqrt{n(n-1)} \quad (321-4)$$

$$\langle n+2|\hat{X}^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n+2|\hat{a}^{\dagger 2}|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \sqrt{(n+1)(n+2)} \quad (322-4)$$

بنابراین

$$\begin{aligned} \langle n|\hat{X}^4|n\rangle &= \left| \langle n|\hat{X}^2|n\rangle \right|^2 + \left| \langle n-2|\hat{X}^2|n\rangle \right|^2 + \left| \langle n+2|\hat{X}^2|n\rangle \right|^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2} \left[ (2n+1)^2 + n(n-1) + (n+1)(n+2) \right] \\ &= \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2} (6n^2 + 6n + 3) \end{aligned} \quad (323-4)$$

(ب) با استفاده از (323-4) و با توجه به این که می‌توان هامیلتونی را برحسب نوسانگر هماهنگ نوشت  $(\hat{H} = \hat{H}_{HO} - \lambda\hat{X}^2)$ ، بی‌درنگ انرژی ذره را به دست می‌آوریم:

$$E_n = \langle n|\hat{H}_{HO}|n\rangle - \lambda \langle n|\hat{X}^2|n\rangle = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) - \frac{\lambda\hbar^2}{4m^2\omega^2} (6n^2 + 6n + 3) \quad (324-4)$$

مسئله‌ی ۱۶-۴

ترازهای انرژی و تابع‌های موج دو نوسانگر هماهنگ به جرم‌های  $m_1$  و  $m_2$  که دارای بسامدهای یکسان  $\omega$  هستند و به وسیله‌ی برهمکنش  $\frac{1}{2}k(\hat{X}_1 - \hat{X}_2)^2$  با هم جفت شده‌اند را بیابید. حل این مسئله به یافتن ویژه‌مقدارهای هامیلتونی زیر کاهش پیدا می‌کند:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \frac{1}{2}k(\hat{X}_1 - \hat{X}_2)^2 \\ &= \frac{1}{2m_1}\hat{P}_1^2 + \frac{1}{2}m_1\omega^2\hat{X}_1^2 + \frac{1}{2m_2}\hat{P}_2^2 + \frac{1}{2}m_2\omega^2\hat{X}_2^2 + \frac{1}{2}k(\hat{X}_1 - \hat{X}_2)^2 \end{aligned} \quad (325-4)$$



که یک مسأله‌ی دو ذره‌ای است. همانند مکانیک کلاسیک، بهتر است دینامیک سیستم دو ذره‌ای برحسب مرکز جرم (CM) و حرکت‌های نسبی توصیف شود. برای این کار، بیابید عملگرهای زیر را معرفی کنیم:

$$\hat{P} = \hat{p}_1 + \hat{p}_2, \quad \hat{X} = \frac{m_1 \hat{x}_1 + m_2 \hat{x}_2}{M} \quad (۳۲۶-۴)$$

$$\hat{p} = \frac{m_2 \hat{p}_1 - m_1 \hat{p}_2}{M}, \quad \hat{x} = \hat{x}_1 - \hat{x}_2 \quad (۳۲۷-۴)$$

که در آنها  $M = m_1 + m_2$  و  $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$  جرم کاهش یافته است.  $\hat{P}$  و  $\hat{X}$  به CM و  $\hat{p}$  و  $\hat{x}$  به حرکت نسبی مربوطند. این رابطه‌ها به رابطه‌های زیر می‌انجامند:

$$\hat{p}_1 = \frac{m_1}{M} \hat{P} + \hat{p}, \quad \hat{p}_2 = \frac{m_2}{M} \hat{P} - \hat{p} \quad (۳۲۸-۴)$$

$$\hat{x}_1 = \frac{m_2}{M} \hat{x} + \hat{X}, \quad \hat{x}_2 = -\frac{m_1}{M} \hat{x} + \hat{X} \quad (۳۲۹-۴)$$

توجه کنید که مجموعه‌های  $(x, p)$  و  $(X, P)$  جداگانه متغیر مختلط‌اند:  $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$ ،  $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$  و  $[\hat{X}, \hat{p}] = [\hat{x}, \hat{P}] = 0$ . با در نظر گرفتن  $\hat{p}_1, \hat{x}_1, \hat{p}_2, \hat{x}_2$  از رابطه‌های (۳۲۸-۴) و (۳۲۹-۴) و وارد کردن آنها در (۳۲۵-۴) هامیلتونی زیر را به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2m_1} \left( \frac{m_1}{M} \hat{P} + \hat{p} \right)^2 + \frac{1}{2} m_1 \omega^2 \left( \frac{m_2}{M} \hat{x} + \hat{X} \right)^2 \\ &+ \frac{1}{2m_2} \left( \frac{m_2}{M} \hat{P} - \hat{p} \right)^2 + \frac{1}{2} m_2 \omega^2 \left( -\frac{m_1}{M} \hat{x} + \hat{X} \right)^2 + \frac{1}{2} k x^2 \\ &= \hat{H}_{\text{CM}} + \hat{H}_{\text{rel}} \end{aligned} \quad (۳۳۰-۴)$$

که در آن

$$\hat{H}_{\text{CM}} = \frac{1}{2M} \hat{P}^2 + \frac{1}{2} M \omega^2 \hat{X}^2, \quad \hat{H}_{\text{rel}} = \frac{1}{2\mu} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} \mu \Omega^2 \hat{x}^2 \quad (۳۳۱-۴)$$

با  $\Omega^2 = \omega^2 + k/\mu$ . بنابراین هامیلتونی این دو نوسانگر هماهنگ جفت شده را به مجموع دو نوسانگر هماهنگ مستقل یکی با بسامد  $\omega$  و جرم  $M$  و دیگری به جرم  $\mu$  و بسامد  $\Omega = \sqrt{\omega^2 + k/\mu}$  کاهش داده‌ایم. یعنی با معرفی متغیرهای CM و حرکت نسبی، جمله‌ی جفت‌شدگی را از هامیلتونی حذف کردیم. می‌توان ترازهای انرژی این سیستم دو نوسانگر را یک‌باره از هامیلتونی‌های پیشنهادی (۳۳۱-۴) نتیجه گرفت:

$$E_{n_1 n_2} = \hbar \omega \left( n_1 + \frac{1}{2} \right) + \hbar \Omega \left( n_2 + \frac{1}{2} \right) \quad (۳۳۲-۴)$$

حالت‌های این سیستم دو ذره‌ای از حاصل ضرب دو حالت به دست می‌آید:  $|N\rangle = |n_1\rangle |n_2\rangle$  از این رو تابع موج کل  $\psi_n(X, x)$  برابر با حاصل ضرب تابع موج مرکز جرم  $\psi_{n_1}(X)$  و تابع موج حرکت نسبی

$\psi_{n_1}(X, x) = \psi_{n_1}(X)\psi_{n_2}(x)$  است: توجه کنید که این دو تابع موج، تابع‌های نوسانگر هماهنگ‌اند که می‌توان شکل آنها را از (۱۷۲-۴) یافت:

$$\psi_n(X, x) = \frac{1}{\sqrt{\pi} \sqrt{\frac{1}{2} n_1! \frac{1}{2} n_2! n_1! n_2! x_{0_1} x_{0_2}}} e^{-X^2/2x_{0_1}^2} e^{-x^2/2x_{0_2}^2} H_{n_1} \left( \frac{X}{x_{0_1}} \right) H_{n_2} \left( \frac{x}{x_{0_2}} \right) \quad (۳۳۳-۴)$$

که در آن  $x_{0_2} = \sqrt{\hbar/(\mu\Omega)}$  و  $x_{0_1} = \sqrt{\hbar/(M\omega)}$ ،  $n = (n_1, n_2)$  است.

#### مسئله‌ی ۱۷-۴

ذره‌ای به جرم  $m$  و بار  $q$  را در نظر بگیرید که تحت تأثیر پتانسیل یک نوسانگر هماهنگ یک بعدی حرکت می‌کند. فرض کنید که ذره در میدان الکتریکی ثابت  $\mathcal{E}$  قرار داده می‌شود. بنابراین هامیلتونی این ذره از  $\hat{H} = \hat{P}^2/(2m) + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{X}^2 - q\mathcal{E}\hat{X}$  عبارت مربوط به انرژی و تابع موج حالت برانگیخته‌ی  $n$ ام را به دست آورید.

حل

برای یافتن انرژی‌های هامیلتونی

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{P}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{X}^2 - q\mathcal{E}\hat{X} \quad (۳۳۴-۴)$$

بهرتر است از تغییر متغیر  $y = \hat{X} - q\mathcal{E}/(m\omega^2)$  استفاده شود. بنابراین هامیلتونی به صورت زیر در می‌آید:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{P}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{y}^2 - \frac{q^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2} \quad (۳۳۵-۴)$$

چون جمله  $q^2 \mathcal{E}^2 / (2m\omega^2)$  صرفاً یک ثابت است و  $\hat{H}_{\text{HO}} = \hat{P}^2 / (2m) + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{y}^2$  ساختار هامیلتونی یک نوسانگر هماهنگ را دارد، به آسانی می‌توانیم ترازهای انرژی را نتیجه بگیریم:

$$E_n = \langle n | \hat{H} | n \rangle = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) - \frac{q^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2} \quad (۳۳۶-۴)$$

تابع موج از رابطه‌ی  $\psi_n(y) = \psi_n(x - q\mathcal{E}/(m\omega^2))$  به دست می‌آید که در آن  $\psi_n(y)$  از (۱۷۲-۴) به دست می‌آید:

$$\psi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi} \sqrt{2^n n!} x_0} e^{-y^2/2x_0^2} H_n \left( \frac{y}{x_0} \right) \quad (۳۳۷-۴)$$

#### مسئله‌ی ۱۸-۴

ذره‌ای به جرم  $m$  را در نظر بگیرید که به صورت قائم و کشسان روی یک سطح بازتابنده‌ی صاف و در

میدان گرانشی زمین

$$V(z) = \begin{cases} mgz & z > 0 \\ +\infty & z \leq 0 \end{cases}$$

واجبیده می‌شود که در آن  $g$  یک ثابت (ثابت گرانش) است. ترازهای انرژی و تابع موج این ذره را بیابید.

حل

باید معادله‌ی شرودینگر با شرایط مرزی  $\psi(0) = 0$  و  $\psi(+\infty) = 0$  را حل کنیم:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(z)}{dz^2} + mgz \psi(z) = E \psi(z) \implies \frac{d^2 \psi(z)}{dz^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (mgz - E) \psi(z) = 0 \quad (338-4)$$

با تغییر متغیر  $x = (\hbar^2 / (2m^2 g))^{1/3} (2m/\hbar^2)(mgz - E)$  می‌توانیم این معادله را به معادله‌ی زیر کاهش دهیم:

$$\frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} - x \phi(x) = 0 \quad (339-4)$$

این معادله یک معادله‌ی دیفرانسیل استاندارد است و جواب آن (که در  $x = +\infty$  صفر می‌شود یعنی  $\phi(+\infty) = 0$ ) به صورت زیر است:

$$\phi(x) = B \text{Ai}(x) \quad \text{که در آن} \quad \text{Ai}(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \cos\left(\frac{1}{3}t^3 + xt\right) dt \quad (340-4)$$

که در آن  $\text{Ai}(x)$  تابع ایری نامیده می‌شود.

هنگامی که  $z = 0$  است، داریم:  $x = -(2/mg^2 \hbar^2)^{1/3} E$ . شرط مرزی  $\psi(0) = 0$  نتیجه‌ی  $\text{Ai}[-(2/(mg^2 \hbar^2))^{1/3} E] = 0$  یا  $\phi[-(2/(mg^2 \hbar^2))^{1/3} E] = 0$  تنها در مقدارهای مشخص  $R_n$  دارای صفر است:  $\text{Ai}(R_n) = 0$  با  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$  می‌توان ریشه‌های  $R_n$  تابع ایری را در جدول‌های استاندارد یافت. به عنوان مثال، چند ریشه‌ی نخست عبارتند از  $R_3 = -6,7887$  و  $R_2 = -5,521$ ،  $R_1 = -4,088$ ،  $R_0 = -2,338$

بنابراین شرط مرزی  $\psi(0) = 0$  مجموعه‌ی گسسته‌ای از ترازهای انرژی را می‌دهد که می‌توان آنها را برحسب ریشه‌های تابع ایری بیان کرد:

$$\text{Ai}\left[-\left(\frac{2}{mg^2 \hbar^2}\right)^{1/3} E\right] = 0 \implies -\left(\frac{2}{mg^2 \hbar^2}\right)^{1/3} E_n = R_n \quad (341-4)$$

$$E_n = - \left( \frac{1}{2} mg^2 \hbar^2 \right)^{1/3} R_n, \psi_n(z) = B_n \text{Ai} \left[ - \left( \frac{2m^2 g^2}{\hbar^2} \right)^{1/3} z - R_n \right] \quad (342-4)$$

چند نراز انرژی نخست عبارتند از

$$E_0 = 2,338 \left( \frac{1}{2} mg^2 \hbar^2 \right)^{1/3}, \quad E_1 = 4,088 \left( \frac{1}{2} mg^2 \hbar^2 \right)^{1/3} \quad (343-4)$$

$$E_2 = 5,521 \left( \frac{1}{2} mg^2 \hbar^2 \right)^{1/3}, \quad E_3 = 6,787 \left( \frac{1}{2} mg^2 \hbar^2 \right)^{1/3} \quad (344-4)$$

## تمرین‌ها ۱۱-۴

۱. ذره‌ای به جرم  $m$  تحت تأثیر پتانسیل زیر قرار می‌گیرد:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| < a/2 \\ \infty & |x| > a/2 \end{cases}$$

(الف) تابع‌های موج حالت پایه و حالت‌های برانگیخته‌ی اول و دوم را بیابید.

(ب) عبارت‌هایی برای  $E_3, E_2, E_1$  بیابید.

(پ) چگالی‌های احتمال  $P_2(x, t)$  و  $P_3(x, t)$  را رسم کنید.

(ت)  $\langle X \rangle_2, \langle X \rangle_3, \langle P \rangle_2$  و  $\langle P \rangle_3$  را بیابید.

(ث)  $\Delta x \Delta p$  را برای حالت‌های  $\psi_2(x, t)$  و  $\psi_3(x, t)$  حساب کنید.

۲. سیستمی را در نظر بگیرید که تابع موج آن در  $t = 0$  به صورت زیر است:

$$\psi(x, 0) = \frac{3}{\sqrt{30}} \phi_0(x) + \frac{4}{\sqrt{30}} \phi_1(x) + \frac{1}{\sqrt{6}} \phi_2(x)$$

که در آن  $\phi_n(x)$  تابع موج  $n$ امین حالت برانگیخته‌ی پتانسیل چاه مربعی نامتناهی به پهنای  $a$  و انرژی آن برابر با  $E_n = \pi^2 \hbar^2 n^2 / (2ma^2)$  است. (الف) انرژی میانگین این سیستم را بیابید.

(ب) حالت  $\psi(x, t)$  را در زمان بعدی  $t$  و مقدار میانگین انرژی را بیابید. نتیجه را با مقدار به دست آمده در (الف) مقایسه کنید.

۳. الکترونی با انرژی جنبشی  $۱۰\text{eV}$  در مقادارهای منفی بزرگ  $x$  از چپ به راست در امتداد محور  $x$  حرکت می‌کند. انرژی پتانسیل برابر است با

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x \leq 0) \\ ۲۰\text{eV} & (x > 0) \end{cases}$$

(الف) معادله‌ی شرودینگر مستقل از زمان را در ناحیه‌های  $x \leq 0$  و  $x > 0$  بنویسید.

(ب) شکل‌های مربوط به  $\psi(x)$  را به‌ازای  $x \leq 0$  و  $x > 0$  توصیف کنید.

(پ) طول موج الکترون (برحسب متر) را در  $-۱۰\text{m} < x < -۲۰\text{m}$  و  $x > ۱۰\text{m}$  محاسبه کنید.

(ت) شرایط مرزی در  $x = 0$  را بنویسید.

(ث) نسبت احتمال‌های یافتن الکترون در نزدیکی  $x = ۱۰^{-۱۰}\text{m}$  و  $x = 0$  را محاسبه کنید.

۴. ذره‌ای در چاه پتانسیل زیر حرکت می‌کند:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & -a \leq x \leq -b \\ V_0 & -b \leq x \leq b \\ 0 & b \leq x \leq a \\ +\infty & \text{در جاهای دیگر} \end{cases}$$

که در آن  $V_0$  مثبت است. در این مسأله  $E < V_0$  را در نظر بگیرید. فرض کنید  $\psi_1(x)$  و  $\psi_2(x)$

پایین‌ترین دو جواب انرژی معادله‌ی شرودینگر را نمایش می‌دهند و انرژی آنها را به ترتیب  $E_1$  و  $E_2$  بنامید.

(الف)  $E_1$  و  $E_2$  را برحسب eV و برای حالتی که در آن  $۱\text{GeV} = mc^2$  و  $a = ۱۰^{-۱۴}\text{m}$  و

$b = ۰٫۴ \times ۱۰^{-۱۴}\text{m}$  است، محاسبه کنید.  $hc \simeq ۲۰۰\text{MeV fm}$  را در نظر بگیرید.

(ب) می‌توان یک جواب خاص معادله‌ی شرودینگر را با برهنه‌ی  $\psi_1(x)e^{iE_1t/\hbar}$  و  $\psi_2(x)e^{iE_2t/\hbar}$

ساخت. یک بسته‌ی موج  $\psi$  که در  $t = 0$  (تقریباً) به‌صورت کامل در طرف چپ دیواره است را بسازید و

حرکت آن را با گذشت زمان توصیف کنید. دوره‌ی نوسان را بین دو جمله‌ی  $\psi$  بیابید.

۵. ذره‌ای در پتانسیل زیر حرکت می‌کند:

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{۲m} \left[ \frac{۲}{۲۲۵} \sinh^2 x - \frac{۲}{۵} \cosh x \right]$$

(الف)  $V(x)$  را رسم کنید و مکان دو کمینه را بیابید.

(ب) نشان دهید که  $\psi(x) = (1 + 4 \cosh x) \exp\left(-\frac{2}{5} \cosh x\right)$  یک جواب معادله‌ی شرودینگر مستقل از زمان ذره است. تراز انرژی متناظر را بیابید و مکان آن را روی نمودار  $V(x)$  مشخص کنید.  
 (پ)  $\psi(x)$  را رسم کنید و نشان دهید که در نقطه‌های بازگشت کلاسیکی و در ناحیه‌های ممنوع کلاسیکی رفتار درستی دارد.

۶. نشان دهید که حاصل ضرب عدم قطعیت‌های  $\Delta x_n \Delta p_n$  ذره‌ای به جرم  $m$  که در یک چاه پتانسیل نامتناهی یک‌بعدی به طول  $a$  حرکت می‌کند، از رابطه‌ی  $\Delta x_n \Delta p_n \simeq n\pi\hbar/\sqrt{12}$  به دست می‌آید.

۷. ذره‌ای به جرم  $m$  در چاه پتانسیل نامتناهی زیر حرکت می‌کند:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0 < x < a \\ \infty & \text{در جاهای دیگر} \end{cases}$$

(الف) معادله‌ی شرودینگر را حل کنید و ترازهای انرژی و تابع‌های موج بهنجار متناظر را بیابید.

(ب)  $\langle \hat{X}^2 \rangle_5$ ،  $\langle \hat{P} \rangle_5$ ،  $\langle \hat{X} \rangle_5$  و  $\langle \hat{P}^2 \rangle_5$  را برای چهارمین حالت برانگیخته محاسبه کنید و مقدار  $\Delta x \Delta p$  را نتیجه بگیرید.

۸. پله‌ی پتانسیل زیر را در نظر بگیرید:

$$V(x) = \begin{cases} 6 \text{ eV} & x < 0 \\ 0 & x > 0 \end{cases}$$

(الف) الکترونی با انرژی  $8 \text{ eV}$  در این پتانسیل از سمت چپ به سمت راست حرکت می‌کند. احتمال این که الکترون: (۱) پس از رسیدن به پله به حرکت در امتداد جهت اولیه‌ی خود ادامه دهد (۲) در پله‌ی پتانسیل بازتابیده شود را محاسبه کنید.

(ب) حال فرض کنید که الکترون با انرژی  $3 \text{ eV}$  از سمت راست به سمت چپ حرکت می‌کند.  
 (۱) مرتبه‌ی اندازه‌ی فاصله‌ای که الکترون می‌تواند در سد نفوذ کند را تخمین بزنید. (۲) قسمت (۱) را برای شخصی به جرم  $70 \text{ kg}$  تکرار کنید که در ابتدا با سرعت  $4 \text{ ms}^{-1}$  به طرف دیواری می‌دود که می‌توان آن را با پله‌ی پتانسیلی که به ارتفاع چهار برابر انرژی این شخص قبل از رسیدن به پله است، نمایش داد.

۹. سیستمی را در نظر بگیرید که تابع موج آن در لحظه‌ی  $t = 0$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\psi(x, 0) = \frac{5}{\sqrt{50}} \phi_0(x) + \frac{4}{\sqrt{50}} \phi_1(x) + \frac{3}{\sqrt{50}} \phi_2(x)$$

که در آن  $\phi_n(x)$  تابع موج  $n$  امین حالت برانگیخته‌ی یک نوسانگر هماهنگ با انرژی  $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$  است.

(الف) انرژی میانگین این سیستم را بیابید.

(ب) حالت  $\psi(x, t)$  را در زمان بعدی  $t$  و نیز مقدار میانگین انرژی را بیابید. نتیجه را با مقدار به دست آمده در (الف) مقایسه کنید.

(پ) مقدار چشمداشتی عملگر  $\hat{X}$  نسبت به حالت  $\psi(x, t)$  را بیابید (یعنی  $\langle \psi(x, t) | \hat{X} | \psi(x, t) \rangle$  را بیابید).

۱۰.  $\langle n | \hat{X}^2 | m \rangle$  و  $\langle m | \hat{X}^2 | n \rangle$  را در نمایش  $N$  محاسبه کنید.  $|n\rangle$  و  $|m\rangle$  حالت‌های نوسانگر هماهنگ‌اند.

۱۱. هامیلتونی بدون بعد  $\hat{H} = \frac{1}{2}\hat{P}^2 + \frac{1}{2}\hat{X}^2$  با  $\hat{P} = -id/dx$  را در نظر بگیرید.

(الف) نشان دهید که تابع‌های موج  $\psi_0(x) = e^{-x^2/2}/\sqrt{\sqrt{\pi}}$  و  $\psi_1(x) = \sqrt{2}/\sqrt{\sqrt{\pi}} x e^{-x^2/2}$  ویژه‌تابع‌های  $\hat{H}$  به ترتیب با ویژه‌مقدارهای  $1/2$  و  $3/2$  هستند.

(ب) مقدار ضریب‌های  $\alpha$  و  $\beta$  را بیابید به طوری که

$$\psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{\sqrt{\pi}}} (\alpha x^2 - 1) e^{-x^2/2} \quad \text{و} \quad \psi_3(x) = \frac{1}{\sqrt{6}\sqrt{\sqrt{\pi}}} x (1 + \beta x^2) e^{-x^2/2}$$

به ترتیب نسبت به  $\psi_0(x)$  و  $\psi_1(x)$  متعامد باشند. سپس نشان دهید که  $\psi_2(x)$  و  $\psi_3(x)$  ویژه‌تابع‌های  $\hat{H}$  به ترتیب با ویژه‌مقدارهای  $5/2$  و  $7/2$  هستند.

۱۲. هامیلتونی بدون بعد  $\hat{H} = \frac{1}{2}\hat{P}^2 + \frac{1}{2}\hat{X}^2$  (با  $\hat{P} = -id/dx$ ) را در نظر بگیرید که تابع موج آن در لحظه‌ی  $t = 0$  برابر است با

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_0(x) + \frac{1}{\sqrt{8}}\psi_1(x) + \frac{1}{\sqrt{10}}\psi_2(x)$$

که در آن  $\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}}} e^{-x^2/2}$ ،  $\psi_1(x) = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\sqrt{\pi}}} x e^{-x^2/2}$  و  $\psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{\sqrt{\pi}}} (2x^2 - 1) e^{-x^2/2}$

(الف)  $\Delta x_n \Delta p_n$  را به ازای  $n = 0, 1$  که در آن  $\Delta x_n = \sqrt{\langle \psi_n | \hat{X}^2 | \psi_n \rangle - \langle \psi_n | \hat{X} | \psi_n \rangle^2}$  محاسبه کنید.

(ب)  $\hat{a}^\dagger \psi_0(x)$ ،  $\hat{a} \psi_0(x)$ ،  $\hat{a}^\dagger \psi_1(x)$  و  $\hat{a} \psi_1(x)$  را که در آنها عملگرهای  $\hat{a}^\dagger$  و  $\hat{a}$  به صورت  $\hat{a}^\dagger = (\hat{X} - d/dx)/\sqrt{2}$  و  $\hat{a} = (\hat{X} + d/dx)/\sqrt{2}$  تعریف می‌شوند، محاسبه کنید.

۱۳. ذره‌ای به جرم  $m$  را در نظر بگیرید که در یک چاه پتانسیل نامتناهی یک بعدی با دیواره‌هایی در

$x = a$  و  $x = 0$  حرکت می‌کند و در ابتدا (یعنی در  $t = 0$ ) در حالت زیر قرار دارد:

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{4}}[\phi_1(x) + \phi_3(x)]$$

که در آن  $\phi_1(x)$  و  $\phi_3(x)$  به ترتیب حالت پایه و دومین حالت برانگیخته‌اند. (الف) به ازای  $t > 0$  بردار حالت  $\psi(x, t)$  در تصویر شرودینگر چیست؟

(ب) مقدارهای چشمداشتی  $\langle \hat{X} \rangle$ ،  $\langle \hat{P} \rangle$ ،  $\langle \hat{X}^2 \rangle$  و  $\langle \hat{P}^2 \rangle$  نسبت به  $|\psi\rangle$  را بیابید.

(پ)  $\Delta x \Delta p$  را محاسبه کنید و ثابت کنید که در اصل عدم قطعیت صدق می‌کند.

۱۴. اگر حالت یک ذره‌ی در حال حرکت در یک نوسانگر هماهنگ یک بعدی به صورت زیر باشد:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{17}}|0\rangle + \frac{3}{\sqrt{17}}|1\rangle - \frac{2}{\sqrt{17}}|2\rangle - \sqrt{\frac{3}{17}}|3\rangle$$

که در آن  $|n\rangle$  ویژه حالت بهنجار  $m$  را نمایش می‌دهد آنگاه مقدارهای چشمداشتی عملگر تعداد  $\hat{N}$  و عملگر هامیلتونی را بیابید.

۱۵. تعداد حالت‌های مقید و انرژی‌های متناظر را برای یک پتانسیل چاه مربعی متناهی بیابید هنگامی که (الف)  $R = 7$  (یعنی  $(\sqrt{ma^2 V_0}) / (2\hbar^2) = 7$ ) و (ب)  $R = 3\pi$  است.

۱۶. توبی به جرم  $m = 0.2 \text{ kg}$  روی میزی که در  $z = 0$  واقع است، تحت تأثیر پتانسیل زیر را می‌جهد:

$$V(z) = \begin{cases} V_0 & (z < 0) \\ mgz & (z > 0) \end{cases}$$

که در آن  $V_0 = 3 \text{ J}$  و  $g$  شتاب ناشی از گرانش است.

(الف) طیف انرژی‌های ممکن را با افزایش  $E$  از مقدارهای بزرگ منفی به مقدارهای بزرگ مثبت توصیف کنید (یعنی آیا پیوسته یا گسسته است و یا وجود ندارد).

(ب) مرتبه‌ی اندازه‌ی پایین‌ترین حالت انرژی را تخمین بزنید.

(پ) شکل عمومی تابع‌های موج  $\psi_0(z)$  و  $\psi_1(z)$  متناظر با پایین‌ترین دو حالت انرژی را توصیف کنید و چگالی‌های احتمال متناظر را رسم کنید.

۱۷. ذره‌ای به جرم  $m$  که در پتانسیل یک نوسانگر هماهنگ یک بعدی با  $\hat{X} = \sqrt{\hbar/(2mw)}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$  و  $\hat{P} = i\sqrt{m\hbar\omega/2}(\hat{a}^\dagger - \hat{a})$  حرکت می‌کند را در نظر بگیرید.



(الف) حاصل ضرب عدم قطعیت‌های مکان و تکانه‌ی ذره در پنجمین حالت برانگیخته (یعنی  $(\Delta X \Delta P)_5$ ) را محاسبه کنید. (ب) نتیجه‌ی (الف) را با حاصل ضرب عدم قطعیت هنگامی که ذره در پایین‌ترین حالت انرژی خود است، مقایسه کنید. توضیح دهید که چرا این دو حاصل ضرب عدم قطعیت متفاوت‌اند.

۱۸. ذره‌ای به جرم  $m$  در یک چاه پتانسیل نامتناهی به طول  $a$  در  $t = 0$  دارای تابع موج اولیه‌ی زیر است:

$$\psi(x, 0) = \frac{2}{\sqrt{4a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \sqrt{\frac{6}{4a}} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) + \frac{2}{\sqrt{4a}} \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right)$$

(الف) اگر انرژی را اندازه بگیریم آنگاه چه مقدارهایی را با چه احتمال‌هایی به دست خواهیم آورد؟ انرژی میانگین را محاسبه کنید.

(ب) تابع موج  $\psi(x, t)$  را در زمان بعدی  $t$  بیابید. احتمال یافتن ذره را در زمان  $t$  در حالت  $\varphi(x, t) = 1/\sqrt{a} \sin(2\pi x/a) \exp(-iE_2 t/\hbar)$  تعیین کنید.

(پ) چگالی احتمال  $\rho(x, t)$  و چگالی جریان  $\mathbf{J}(x, t)$  را محاسبه کنید. ثابت کنید که  $\partial\rho/\partial t + \nabla \cdot \mathbf{J}(x, t) = 0$  است.

۱۹. ذره‌ای را در یک چاه مربعی نامتناهی در نظر بگیرید که تابع موج آن به صورت زیر است:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ax(a^2 - x^2) & 0 < x < a \\ 0 & \text{در جاهای دیگر} \end{cases}$$

که در آن  $A$  یک ثابت حقیقی است.

(الف)  $A$  را بیابید به صورتی که  $\psi(x)$  بهنجار باشد.

(ب) عدم قطعیت‌های مکان و تکانه  $(\Delta p$  و  $\Delta x)$  و حاصل ضرب  $\Delta x \Delta p$  را محاسبه کنید.

(پ) احتمال یافتن  $(2ma^2)^2 / (5^2 \pi^2 \hbar^2)$  را برای اندازه‌گیری انرژی محاسبه کنید.

۲۰. عبارت نسبیتی برای انرژی یک ذره‌ی آزاد برابر با  $E^2 = m_0^2 c^4 + p^2 c^2$  است.

(الف) با کوانتیده کردن این عبارت انرژی (یعنی با جایگزین کردن  $E$  و  $p$  با عملگرهای متناظرشان)، معادله‌ی شرودینگر نسبیتی متناظر را بنویسید. این معادله، معادله‌ی کلاین-گوردون نامیده می‌شود.

(ب) جواب‌های متناظر با یک ذره‌ی آزاد که در امتداد محور  $x$  حرکت می‌کند را بیابید.

۲۱. (الف) انرژی (گرانشی) کلاسیکی  $E_c$  ذره‌ای به جرم  $m$  را به دست آورید که در حال سکون بوده و به ارتفاع  $h$  از زمین فاصله دارد (انرژی پتانسیل صفر را در سطح زمین در نظر بگیرید).

(ب) از اصل عدم قطعیت برای تخمین انرژی حالت پایه  $E_0$  ذره‌ی قسمت (الف) استفاده کنید. توجه کنید که این ذره تحت تأثیر گرانش است.  $E_0$  را با  $E_c$  مقایسه کنید.

(پ) اگر  $h_0 = 3\text{m}$  باشد آنگاه مقادیرهای عددی  $E_c$  و تصحیح کوانتومی  $(E_0 - E_c)$  را برای یک نوترون و سپس برای ذره‌ای به جرم  $m = 10^{-31}\text{kg}$  به دست آورید. اهمیت تصحیح کوانتومی را در هر دو مورد توضیح دهید.

۲۲. ترازهای انرژی و تابع‌های موج دو ذره‌ی غیربرهمکنشی با جرم‌های  $m_1$  و  $m_2$  که در پتانسیل چاه مربعی نامتناهی مشترک زیر حرکت می‌کنند را بیابید:

$$V(x_i) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x_i \leq a \\ +\infty & \text{در جاهای دیگر} \end{cases}$$

که در آن  $x_i$  مکان ذره‌ی  $i$ ام است (یعنی  $x_i, x_1, x_2$  یا  $x_2$  را نمایش می‌دهد).

۲۳. ذره‌ای به جرم  $m$  تحت تأثیر پتانسیل دلتای دافعه‌ی  $V(x) = V_0 \delta(x)$  قرار دارد که در آن  $V_0 > 0$  است. ( $V_0$  دارای بعد انرژی  $\times$  فاصله است). ضریب‌های بازتاب و عبور  $R$  و  $T$  را بیابید.

۲۴. ذره‌ای به جرم  $m$  توسط پتانسیل دلتای دوگانه‌ی  $V(x) = V_0 \delta(x - a) + V_0 \delta(x + a)$  پراکنده می‌شود که در آن  $V_0 > 0$  است.

(الف) ضریب عبور ذره در انرژی  $E > 0$  را بیابید.

(ب) هنگامی که  $V_0$  بسیار بزرگ است (یعنی  $V_0 \rightarrow \infty$ )، انرژی‌های متناظر با حالت تشدید (یعنی  $T = 1$ ) را بیابید و آنها را با انرژی‌های پتانسیل یک چاه مربعی نامتناهی به پهنای  $2a$  مقایسه کنید.

۲۵. ذره‌ای به جرم  $m$  تحت تأثیر پتانسیل دلتای نامتقارن  $V(x) = V_0 \delta(x + a) - V_0 \delta(x - a)$  قرار می‌گیرد که در آن  $V_0 > 0$  است.

(الف) نشان دهید که همیشه یک و تنها یک حالت مقید وجود دارد و عبارتی که انرژی آن حالت را به دست می‌دهد، بیابید.

(ب) ضریب عبور  $T$  را بیابید.

۲۶. ذره‌ای به جرم  $m$  تحت تأثیر پتانسیل دلتای زیر قرار می‌گیرد:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x \leq 0 \\ V_0 \delta(x - a) & x > 0 \end{cases}$$

که در آن  $V_0 > 0$  است.

(الف) تابع‌های موج متناظر با حالت‌های  $0 < x < a$  و  $x > a$  را بیابید. (ب) ضریب عبور را بیابید.

۲۷. ذره‌ای به جرم  $m$  علاوه بر محدود بودن به حرکت در پتانسیل یک چاه مربعی نامتناهی به اندازه‌ی  $2a$  با دیواره‌هایی در  $x = a$  و  $x = -a$ ، تحت تأثیر پتانسیل دلتای جاذبه‌ی زیر قرار می‌گیرد:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 \delta(x) & -a < x < a \\ \infty & \text{در جاهای دیگر} \end{cases}$$

که در آن  $V_0 > 0$  است.

(الف) هنگامی که  $E > 0$  است، تابع موج ذره که متناظر با جواب‌های زوج باشد را بیابید.

(ب) ترازهای انرژی متناظر با جواب‌های زوج را بیابید.

۲۸. ذره‌ای به جرم  $m$  علاوه بر محدود بودن به حرکت در پتانسیل یک چاه مربعی نامتناهی به اندازه‌ی  $2a$  با دیواره‌هایی در  $x = a$  و  $x = -a$ ، تحت تأثیر پتانسیل دلتای جاذبه‌ی زیر قرار می‌گیرد:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 \delta(x) & -a < x < a \\ \infty & \text{در جاهای دیگر} \end{cases}$$

که در آن  $V_0 > 0$  است.

(الف) هنگامی که  $E > 0$  است، تابع موج ذره که متناظر با جواب‌های فرد باشد را بیابید.

(ب) ترازهای انرژی متناظر با جواب‌های فرد را بیابید.

۲۹. ذره‌ای به جرم  $m$  را در نظر بگیرید که تحت تأثیر پتانسیل دلتای جاذبه‌ی زیر حرکت می‌کند:

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 \delta(x) & x > -a \\ \infty & x < -a \end{cases}$$

که در آن  $V_0 > 0$  است. در مورد وجود حالت‌های مقید برحسب  $V_0$  و  $a$  بحث کنید.

۳۰. سیستمی از دو نوسانگر هماهنگ یکسان (با بسامد زاویه‌ای  $\omega$ ) را در نظر بگیرید.

(الف) هنگامی که نوسانگرها مستقل (غیربرهمکنشی) هستند، ترازهای انرژی را بیابید.

(ب) هنگامی که نوسانگرها توسط برهمکنش  $\lambda \hat{X}_1 \hat{X}_2$  به هم جفت شده‌اند، که در آن  $\lambda$  یک ثابت است، ترازهای انرژی را بیابید.

(پ) با فرض آن که  $\lambda \ll m\omega^2$  باشد (حد جفت‌شدگی ضعیف)، مقداری تقریبی تا مرتبه‌ی اول برحسب  $\lambda/m\omega^2$  برای عبارت مربوط به انرژی به‌دست آمده در قسمت (ب) بیابید.

۳۱. ذره‌ای در ابتدا در حالت پایه‌ی خود در یک جعبه‌ی پتانسیل نامتناهی یک‌بعدی با دیواره‌هایی در  $x = 0$  و  $x = a$  قرار دارد. اگر دیواره‌ی جعبه در  $x = a$  ناگهان به  $x = 3a$  جابه‌جا شود آنگاه احتمال یافتن ذره در:

(الف) حالت پایه‌ی جعبه‌ی جدید را بیابید.

(ب) نخستین حالت برانگیخته‌ی جعبه‌ی جدید را بیابید.

(پ) حال با فرض آن که ذره در ابتدا در نخستین حالت برانگیخته‌ی جعبه‌ی قدیمی باشد، احتمال یافتن ذره در نخستین حالت برانگیخته‌ی جعبه‌ی جدید را محاسبه کنید.

۳۲. ذره‌ای در ابتدا در حالت پایه‌ی خود در پتانسیل نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی  $\hat{V}(x) = \frac{1}{2}kx^2$  قرار دارد. اگر ثابت فنر ناگهان دو برابر شود آنگاه احتمال یافتن ذره در حالت پایه‌ی پتانسیل جدید را محاسبه کنید.

۳۳. الکترونی را در چاه پتانسیل نامتناهی زیر در نظر بگیرید:

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

که در آن  $a = 10^{-10}$  m است.

(الف) ترازهای انرژی پایین‌ترین سه حالت الکترون (نتیجه‌ها باید برحسب eV بیان شوند) و طول موج‌های متناظر آنها را محاسبه کنید.

(ب) بسامد تابشی که موجب می‌شود الکترون از تراز انرژی پایه به سومین تراز انرژی برانگیخته جهش کند را محاسبه کنید.

(پ) هنگامی که الکترون به حالت اولیه‌ی خود باز می‌گردد، بسامدهای فوتون‌های گسیل شده چقدر است؟

(ت) چگالی‌های احتمال را برای این سه حالت مشخص و آنها را رسم کنید.

۳۴. الکترونی را در نظر بگیرید که به حرکت در یک چاه مربعی نامتناهی به پهنای  $a = 10^{-10}$  m

محدود است. (الف) انرژی‌های دقیق پایین‌ترین ۱۱ تراز را بیابید (آنها را برحسب eV بیان کنید). (ب)

معادله‌ی شرودینگر را به صورت عددی حل کنید و انرژی‌های پایین‌ترین ۱۱ حالت را بیابید و آنها را با نتیجه‌های دقیق به‌دست آمده در (الف) مقایسه کنید. تابع‌های موج پایین‌ترین پنج حالت را رسم کنید.

## فصل پنجم

# تکانه‌ی زاویه‌ای

### ۱-۵ مقدمه

پس از پرداختن به مسأله‌های یک‌بعدی در فصل ۴، اکنون باید به مسأله‌های سه‌بعدی بپردازیم. به هر حال، نمی‌توان به مطالعه‌ی سیستم‌های سه‌بعدی مانند اتم‌ها پرداخت مگر آن‌که ابتدا صورت‌بندی تکانه‌ی زاویه‌ای را پوشش دهیم. بنابراین این فصل به عنوان پیش‌درآمدی ضروری برای فصل ۶ است.

تکانه‌ی زاویه‌ای همان اهمیتی را در مکانیک کوانتومی دارد که در مکانیک کلاسیک دارا است و در مطالعه‌ی دینامیک سیستم‌هایی که تحت تأثیر پتانسیل‌های متقارن کروی (یا مرکزی،  $V(\mathbf{r}) = V(r)$ ) هستند بسیار مفید است زیرا تکانه‌ی زاویه‌ای مداری این سیستم‌ها پایسته است. به عنوان مثال، همانطور که در فصل ۱ یادآوری شد، یکی از سنگ‌بناهای مدل بوهر برای اتم هیدروژن (که در آن الکترون در پتانسیل کولنی پروتون حرکت می‌کند (یک پتانسیل مرکزی)) بر مبنای کوانتش تکانه‌ی زاویه‌ای است. علاوه‌براین تکانه‌ی زاویه‌ای نقش حساسی در توصیف چرخش‌های مولکولی، حرکت الکترون‌ها در اتم‌ها و حرکت نوکلئون‌ها در هسته ایفا می‌کند. بنابراین نظریه‌ی کوانتومی تکانه‌ی زاویه‌ای پیش‌نیاز مطالعه‌ی سیستم‌های مولکولی، اتمی و هسته‌ای است.

در این فصل، قصد داریم تا به بررسی صورت‌بندی عمومی تکانه‌ی زاویه‌ای بپردازیم. ویژگی‌های مختلف عملگر تکانه‌ی زاویه‌ای را بررسی خواهیم کرد و سپس بر روی تعیین ویژه‌مقادیر و ویژه‌حالت‌های آن متمرکز خواهیم شد. سرانجام، این صورت‌بندی را برای تعیین ویژه‌مقادیر و ویژه‌بردارهای تکانه‌های زاویه‌ای اسپینی و مداری به کار خواهیم برد.

## ۲-۵ تکانه‌ی زاویه‌ای مداری

در فیزیک کلاسیک، تکانه‌ی زاویه‌ای ذره‌ای با تکانه‌ی  $\mathbf{p}$  و مکان  $\mathbf{r}$  به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = (yp_z - zp_y)\mathbf{i} + (zp_x - xp_z)\mathbf{j} + (xp_y - yp_x)\mathbf{k} \quad (۱-۵)$$

می‌توان عملگر تکانه‌ی زاویه‌ای مداری  $\hat{\mathbf{L}}$  را یک‌باره با تعویض  $\mathbf{p}$  و  $\mathbf{r}$  با عملگرهای متناظر در نمایش مکان ( $\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar\nabla$  و  $\hat{\mathbf{R}}$ ) به‌دست آورد:

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{R}} \times \hat{\mathbf{P}} = -i\hbar\hat{\mathbf{R}} \times \nabla \quad (۲-۵)$$

مؤلفه‌های دکارتی  $\hat{\mathbf{L}}$  برابرند با

$$\hat{L}_x = \hat{Y}\hat{P}_z - \hat{Z}\hat{P}_y = -i\hbar\left(\hat{Y}\frac{\partial}{\partial z} - \hat{Z}\frac{\partial}{\partial y}\right) \quad (۳-۵)$$

$$\hat{L}_y = \hat{Z}\hat{P}_x - \hat{X}\hat{P}_z = -i\hbar\left(\hat{Z}\frac{\partial}{\partial x} - \hat{X}\frac{\partial}{\partial z}\right) \quad (۴-۵)$$

$$\hat{L}_z = \hat{X}\hat{P}_y - \hat{Y}\hat{P}_x = -i\hbar\left(\hat{X}\frac{\partial}{\partial y} - \hat{Y}\frac{\partial}{\partial x}\right) \quad (۵-۵)$$

به وضوح، تکانه‌ی زاویه‌ای در یک فضای یک‌بعدی وجود ندارد. باید یادآوری کنیم که مؤلفه‌های  $\hat{L}_x$ ،  $\hat{L}_y$  و  $\hat{L}_z$  مجذور  $\hat{\mathbf{L}}$ :

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \quad (۶-۵)$$

همگی هرمیتی‌اند.

رابطه‌های جابه‌جایی

چون  $\hat{X}$ ،  $\hat{Y}$  و  $\hat{Z}$  دو به دو جابه‌جا می‌شوند و  $\hat{P}_x$ ،  $\hat{P}_y$  و  $\hat{P}_z$  نیز دو به دو جابه‌جا می‌شوند و همین‌طور با توجه به این که  $[\hat{X}, \hat{P}_x] = i\hbar$ ،  $[\hat{Y}, \hat{P}_y] = i\hbar$  و  $[\hat{Z}, \hat{P}_z] = i\hbar$  است، داریم:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= [\hat{Y}\hat{P}_z - \hat{Z}\hat{P}_y, \hat{Z}\hat{P}_x - \hat{X}\hat{P}_z] \\ &= [\hat{Y}\hat{P}_z, \hat{Z}\hat{P}_x] - [\hat{Y}\hat{P}_z, \hat{X}\hat{P}_z] - [\hat{Z}\hat{P}_y, \hat{Z}\hat{P}_x] + [\hat{Z}\hat{P}_y, \hat{X}\hat{P}_z] \\ &= \hat{Y}[\hat{P}_z, \hat{Z}]\hat{P}_x + \hat{X}[\hat{Z}, \hat{P}_z]\hat{P}_y = i\hbar(\hat{X}\hat{P}_y - \hat{Y}\hat{P}_x) \\ &= i\hbar\hat{L}_z \end{aligned} \quad (۷-۵)$$

محاسباتی مشابه، دو رابطه‌ی جابه‌جایی دیگر را نتیجه می‌دهند ولی نتیجه‌گیری آنها از (۷-۵) و به وسیله‌ی جایگشت چرخه‌ای مؤلفه‌های  $xyz$  ( $x \rightarrow y \rightarrow z \rightarrow x$ ) بسیار ساده‌تر است:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z, \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y \quad (۸-۵)$$

همانطور که در فصل ۳ یادآوری شد، چون  $\hat{L}_x$ ،  $\hat{L}_y$  و  $\hat{L}_z$  با هم جابه‌جا نمی‌شوند بنابراین با دقت دلخواه نمی‌توانیم آنها را به صورت همزمان اندازه‌گیری کنیم.

توجه کنید که رابطه‌های جابه‌جایی (۸-۵) با بیان تکانه‌ی زاویه‌ای مداری در نمایش مکان به دست آمده‌اند ولی چون رابطه‌های عملگری هستند، باید در هر نمایشی معتبر باشند. در بخش بعد قصد داریم تا صورت‌بندی عمومی تکانه‌ی زاویه‌ای را در نظر بگیریم. این صورت‌بندی به نمایش خاصی محدود نیست.

### مثال ۱-۵

(الف) جابه‌جاگرهای  $[\hat{X}, \hat{L}_x]$ ،  $[\hat{X}, \hat{L}_y]$  و  $[\hat{X}, \hat{L}_z]$  را محاسبه کنید.

(ب) جابه‌جاگرهای  $[\hat{P}_x, \hat{L}_x]$ ،  $[\hat{P}_x, \hat{L}_y]$  و  $[\hat{P}_x, \hat{L}_z]$  را محاسبه کنید.

(پ) از نتیجه‌های (الف) و (ب) برای محاسبه‌ی  $[\hat{X}, \hat{L}^2]$  و  $[\hat{P}_x, \hat{L}^2]$  استفاده کنید.

### حل

(الف) تنها جابه‌جاگر غیرصفری که شامل  $\hat{X}$  و مؤلفه‌های مختلف  $\hat{L}_x$ ،  $\hat{L}_y$  و  $\hat{L}_z$  است، برابر است با  $[\hat{X}, \hat{P}_x] = i\hbar$ . با بیان این نتیجه، به آسانی می‌توانیم جابه‌جاگرهای مورد نظر را حساب کنیم. ابتدا چون  $\hat{L}_x = \hat{Y}\hat{P}_z - \hat{Z}\hat{P}_y$  شامل  $\hat{P}_x$  نیست، عملگر  $\hat{X}$  جداگانه با  $\hat{Y}$ ،  $\hat{P}_z$  و  $\hat{Z}$  جابه‌جا می‌شود و از این رو

$$[\hat{X}, \hat{L}_x] = [\hat{X}, \hat{Y}\hat{P}_z - \hat{Z}\hat{P}_y] = 0 \quad (۹-۵)$$

حساب کردن دو جابه‌جاگر دیگر، سراسر است:

$$[\hat{X}, \hat{L}_y] = [\hat{X}, \hat{Z}\hat{P}_x - \hat{X}\hat{P}_z] = [\hat{X}, \hat{Z}\hat{P}_x] = \hat{Z}[\hat{X}, \hat{P}_x] = i\hbar \hat{Z} \quad (۱۰-۵)$$

$$[\hat{X}, \hat{L}_z] = [\hat{X}, \hat{X}\hat{P}_y - \hat{Y}\hat{P}_x] = -[\hat{X}, \hat{Y}\hat{P}_x] = -\hat{Y}[\hat{X}, \hat{P}_x] = -i\hbar \hat{Y} \quad (۱۱-۵)$$

(ب) تنها جابه‌جاگر بین  $\hat{P}_x$  و مؤلفه‌های  $\hat{L}_x$ ،  $\hat{L}_y$  و  $\hat{L}_z$  که باقی می‌ماند، دوباره  $[\hat{P}_x, \hat{X}] = -i\hbar$  است. بنابراین می‌توانیم نتیجه بگیریم که

$$[\hat{P}_x, \hat{L}_x] = [\hat{P}_x, \hat{Y}\hat{P}_z - \hat{Z}\hat{P}_y] = 0 \quad (۱۲-۵)$$

$$[\hat{P}_x, \hat{L}_y] = [\hat{P}_x, \hat{Z}\hat{P}_x - \hat{X}\hat{P}_z] = -[\hat{P}_x, \hat{X}\hat{P}_z] = -[\hat{P}_x, \hat{X}]\hat{P}_z = i\hbar \hat{P}_z \quad (۱۳-۵)$$

$$[\hat{P}_x, \hat{L}_z] = [\hat{P}_x, \hat{X}\hat{P}_y - \hat{Y}\hat{P}_x] = [\hat{P}_x, \hat{X}\hat{P}_y] = [\hat{P}_x, \hat{X}]\hat{P}_y = -i\hbar\hat{P}_y \quad (۱۴-۵)$$

(پ) با استفاده از جابه‌جاگرهای به‌دست آمده در (الف) و (ب) نتیجه می‌گیریم که

$$\begin{aligned} [\hat{X}, \hat{\mathbf{L}}^2] &= [\hat{X}, \hat{L}_x^2] + [\hat{X}, \hat{L}_y^2] + [\hat{X}, \hat{L}_z^2] \\ &= 0 + \hat{L}_y[\hat{X}, \hat{L}_y] + [\hat{X}, \hat{L}_y]\hat{L}_y + \hat{L}_z[\hat{X}, \hat{L}_z] + [\hat{X}, \hat{L}_z]\hat{L}_z \quad (۱۵-۵) \\ &= i\hbar(\hat{L}_y\hat{Z} + \hat{Z}\hat{L}_y - \hat{L}_z\hat{Y} - \hat{Y}\hat{L}_z) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [\hat{P}_x, \hat{\mathbf{L}}^2] &= [\hat{P}_x, \hat{L}_x^2] + [\hat{P}_x, \hat{L}_y^2] + [\hat{P}_x, \hat{L}_z^2] \\ &= 0 + \hat{L}_y[\hat{P}_x, \hat{L}_y] + [\hat{P}_x, \hat{L}_y]\hat{L}_y + \hat{L}_z[\hat{P}_x, \hat{L}_z] + [\hat{P}_x, \hat{L}_z]\hat{L}_z \quad (۱۶-۵) \\ &= i\hbar(\hat{L}_y\hat{P}_z + \hat{P}_z\hat{L}_y - \hat{L}_z\hat{P}_y - \hat{P}_y\hat{L}_z) \end{aligned}$$

### ۳-۵ صورت‌بندی عمومی تکانه‌ی زاویه‌ای

اکنون بیائید عملگر عمومی‌تر تکانه‌ی زاویه‌ای  $\hat{\mathbf{J}}$  را معرفی کنیم که به وسیله‌ی سه مؤلفه‌ی  $\hat{J}_x$ ،  $\hat{J}_y$  و  $\hat{J}_z$  خود مؤلفه تعریف می‌شود. این مؤلفه‌ها در رابطه‌های جابه‌جایی زیر صدق می‌کنند:

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z, \quad [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar\hat{J}_x, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar\hat{J}_y \quad (۱۷-۵)$$

یا به‌صورت معادل توسط

$$\hat{\mathbf{J}} \times \hat{\mathbf{J}} = i\hbar\hat{\mathbf{J}} \quad (۱۸-۵)$$

چون  $\hat{J}_x$ ،  $\hat{J}_y$  و  $\hat{J}_z$  دو به دو با هم جابه‌جا نمی‌شوند بنابراین نمی‌توان آنها را به‌صورت همزمان قطری کرد یعنی مؤلفه‌های آن دارای حالت‌های مشترک نیستند. مجذور تکانه‌ی زاویه‌ای

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 \quad (۱۹-۵)$$

یک عملگر نرده‌ای است از این رو با  $\hat{J}_x$ ،  $\hat{J}_y$  و  $\hat{J}_z$  جابه‌جا می‌شود:

$$[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_k] = 0 \quad (۲۰-۵)$$

که در آن  $k$  مؤلفه‌های  $x$ ،  $y$  و  $z$  را نمایش می‌دهد. به عنوان مثال، در حالت  $k = x$  داریم:

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_x] &= [\hat{J}_x^2, \hat{J}_x] + \hat{J}_y[\hat{J}_y, \hat{J}_x] + [\hat{J}_y, \hat{J}_x]\hat{J}_y + \hat{J}_z[\hat{J}_z, \hat{J}_x] + [\hat{J}_z, \hat{J}_x]\hat{J}_z \\ &= \hat{J}_y(-i\hbar\hat{J}_z) + (-i\hbar\hat{J}_z)\hat{J}_y + \hat{J}_z(i\hbar\hat{J}_y) + (i\hbar\hat{J}_y)\hat{J}_z \\ &= 0 \end{aligned} \quad (۲۱-۵)$$



زیرا  $[\hat{J}_x^2, \hat{J}_x] = 0$ ,  $[\hat{J}_y, \hat{J}_x] = -i\hbar\hat{J}_z$  و  $[\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar\hat{J}_y$ . باید یادآوری کنیم که عملگرهای  $\hat{J}_x$ ,  $\hat{J}_y$  و  $\hat{J}_z$  همگی هرمیتی‌اند و ویژه‌مقدارهای آنها حقیقی‌اند.

ویژه‌حالت‌ها و ویژه‌مقدارهای عملگر تکانه‌ی زاویه‌ای

چون  $\hat{J}^2$  با  $\hat{J}_x$ ,  $\hat{J}_y$  و  $\hat{J}_z$  جابه‌جا می‌شود، می‌توان هر یک از مؤلفه‌های  $\hat{J}$  را جداگانه با  $\hat{J}^2$  قطری کرد (ازاین‌رو ویژه‌تابع‌های هم‌زمان با آن را دارا است). ولی چون مؤلفه‌های  $\hat{J}_x$ ,  $\hat{J}_y$  و  $\hat{J}_z$  دو به دو با هم جابه‌جا نمی‌شوند، تنها می‌توانیم یکی از آنها را انتخاب کنیم تا به صورت هم‌زمان با  $\hat{J}^2$  قطری شود. به صورت قراردادی، ما  $\hat{J}_z$  را انتخاب می‌کنیم. چیز خاصی در مورد جهت  $z$  وجود ندارد و ما می‌توانیم  $\hat{J}^2$  و  $\hat{J}_x$  یا  $\hat{J}^2$  و  $\hat{J}_y$  را در نظر بگیریم.

حال به دنبال ویژه‌حالت‌های  $\hat{J}^2$  و  $\hat{J}_z$  و ویژه‌مقدارهای متناظر آنها می‌گردیم. با نمایش ویژه‌حالت‌های مشترک با  $|\alpha, \beta\rangle$  و ویژه‌مقدارهای  $\hat{J}^2$  و  $\hat{J}_z$  به ترتیب با  $\hbar^2\alpha$  و  $\hbar\beta$  داریم:

$$\hat{J}^2|\alpha, \beta\rangle = \hbar^2\alpha|\alpha, \beta\rangle \quad (22-5)$$

$$\hat{J}_z|\alpha, \beta\rangle = \hbar\beta|\alpha, \beta\rangle \quad (23-5)$$

ضریب  $\hbar$  به صورتی تعریف می‌شود که  $\alpha$  و  $\beta$  بدون بعد باشند به یاد بیاورید که تکانه‌ی زاویه‌ای دارای بعد  $\hbar$  است و بعد فیزیکی  $\hbar$  برابر است با زمان  $\times$  انرژی  $= [\hbar]$ . برای سادگی، فرض می‌کنیم که این ویژه‌حالت‌ها متعامد بهنجارند:

$$\langle\alpha', \beta'|\alpha, \beta\rangle = \delta_{\alpha'\alpha}\delta_{\beta'\beta} \quad (24-5)$$

حال باید همانند آنچه که در هنگام مطالعه‌ی نوسانگر هماهنگ در فصل ۴ انجام دادیم، عملگرهای بالا برنده و پایین برنده‌ی  $\hat{J}_+$  و  $\hat{J}_-$  را معرفی کنیم:

$$\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y \quad (25-5)$$

که به رابطه‌های زیر می‌انجامد:

$$\hat{J}_x = \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + \hat{J}_-), \quad \hat{J}_y = \frac{1}{2i}(\hat{J}_+ - \hat{J}_-) \quad (26-5)$$

ازاین‌رو

$$\hat{J}_x^2 = \frac{1}{4}(\hat{J}_+^2 + \hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+ + \hat{J}_-^2), \quad \hat{J}_y^2 = -\frac{1}{4}(\hat{J}_+^2 - \hat{J}_+ \hat{J}_- - \hat{J}_- \hat{J}_+ + \hat{J}_-^2) \quad (27-5)$$

با استفاده از (۱۷-۵) به آسانی می‌توانیم رابطه‌های جابه‌جایی زیر را به دست آوریم:

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_{\pm}] = 0, \quad [\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hbar\hat{J}_z, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_{\pm}] = \pm\hbar\hat{J}_{\pm} \quad (28-5)$$

علاوه بر این،  $\hat{J}_+$  و  $\hat{J}_-$  در رابطه‌های زیر صدق می‌کنند:

$$\hat{J}_+\hat{J}_- = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hbar\hat{J}_z = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar\hat{J}_z \quad (29-5)$$

$$\hat{J}_-\hat{J}_+ = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 - \hbar\hat{J}_z = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar\hat{J}_z \quad (30-5)$$

این رابطه‌ها به رابطه‌ی زیر می‌انجامند:

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_{\pm}\hat{J}_{\mp} + \hat{J}_z^2 \mp \hbar\hat{J}_z \quad (31-5)$$

که به نوبه‌ی خود نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\hat{J}^2 = \frac{1}{4}(\hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_-\hat{J}_+) + \hat{J}_z^2 \quad (32-5)$$

حال ببینیم که چگونه  $\hat{J}_{\pm}$  روی  $|\alpha, \beta\rangle$  اثر می‌کند. ابتدا چون  $\hat{J}_z$  با  $\hat{J}_{\pm}$  جابه‌جا نمی‌شود، کت‌های  $|\alpha, \beta\rangle$  ویژه‌حالت‌های  $\hat{J}_{\pm}$  نیستند. با استفاده از رابطه‌های (۲۸-۵) داریم:

$$\hat{J}_z(\hat{J}_{\pm}|\alpha, \beta\rangle) = (\hat{J}_{\pm}\hat{J}_z \pm \hbar\hat{J}_{\pm})|\alpha, \beta\rangle = \hbar(\beta \pm 1)(\hat{J}_{\pm}|\alpha, \beta\rangle) \quad (33-5)$$

از این روکت  $(\hat{J}_{\pm}|\alpha, \beta\rangle)$  یک ویژه‌حالت  $\hat{J}_z$  با ویژه‌مقدارهای  $\hbar(\beta \pm 1)$  است. حال با توجه به این که  $\hat{J}_z$  و  $\hat{J}^2$  جابه‌جا می‌شوند،  $(\hat{J}_{\pm}|\alpha, \beta\rangle)$  نیز باید یک ویژه‌حالت  $\hat{J}^2$  باشد. هنگامی که  $\hat{J}^2$  روی  $\hat{J}_{\pm}|\alpha, \beta\rangle$  اثر می‌کند، می‌توان ویژه‌مقدار آن را با استفاده از جابه‌جاگر  $[\hat{J}^2, \hat{J}_{\pm}] = 0$  تعیین کرد. حالت  $(\hat{J}_{\pm}|\alpha, \beta\rangle)$  نیز یک ویژه‌حالت  $\hat{J}^2$  با ویژه‌مقدار  $\hbar^2\alpha$  است:

$$\hat{J}^2(\hat{J}_{\pm}|\alpha, \beta\rangle) = \hat{J}_{\pm}\hat{J}^2|\alpha, \beta\rangle = \hbar^2\alpha(\hat{J}_{\pm}|\alpha, \beta\rangle) \quad (34-5)$$

از (۳۳-۵) و (۳۴-۵) نتیجه می‌گیریم که هنگامی که  $\hat{J}_{\pm}$  روی  $|\alpha, \beta\rangle$  اثر می‌کند، عدد کوانتومی نخست  $\alpha$  را تحت تأثیر قرار نمی‌دهد ولی عدد کوانتومی دوم  $\beta$  را به اندازه‌ی یک واحد بالا یا پایین می‌برد. یعنی  $\hat{J}_{\pm}|\alpha, \beta\rangle$  متناسب با  $|\alpha, \beta \pm 1\rangle$  است:

$$\hat{J}_{\pm}|\alpha, \beta\rangle = C_{\alpha\beta}^{\pm}|\alpha, \beta \pm 1\rangle \quad (35-5)$$

بعداً ثابت  $C_{\alpha\beta}^{\pm}$  را تعیین خواهیم کرد.

توجه کنید که به‌ازای یک ویژه‌مقدار معلوم  $\alpha$  ی  $\hat{J}^2$ ، یک حد بالا برای عدد کوانتومی  $\beta$  وجود دارد. این ناشی از این واقعیت است که عملگر  $\hat{J}_z^2 - \hat{J}_z$  مثبت است زیرا عنصرهای ماتریسی  $\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 = \hat{J}_z^2 - \hat{J}_z$  بزرگ‌تر یا مساوی صفرند. بنابراین می‌توانیم بنویسیم:

$$\langle \alpha, \beta | \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 | \alpha, \beta \rangle = \hbar^2 (\alpha - \beta^2) \geq 0 \implies \alpha \geq \beta^2 \quad (36-5)$$

چون  $\beta$  دارای حد بالای  $\beta_{\max}$  است، باید یک حالت  $|\alpha, \beta_{\max}\rangle$  وجود داشته باشد که نتوان آن را بیشتر بالا برد:

$$\hat{J}_+ |\alpha, \beta_{\max}\rangle = 0 \quad (37-5)$$

با استفاده از این رابطه همراه با  $\hat{J}_- \hat{J}_z = \hat{J}_z^2 - \hat{J}_z - \hbar \hat{J}_z$  می‌بینیم که  $\hat{J}_- \hat{J}_+ |\alpha, \beta_{\max}\rangle = 0$  است یا

$$(\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z) |\alpha, \beta_{\max}\rangle = \hbar^2 (\alpha - \beta_{\max}^2 - \beta_{\max}) |\alpha, \beta_{\max}\rangle \quad (38-5)$$

ازاین‌رو

$$\alpha = \beta_{\max}(\beta_{\max} + 1) \quad (39-5)$$

پس از  $n$  بار اعمال متوالی  $\hat{J}_-$  روی  $|\alpha, \beta_{\max}\rangle$  باید بتوانیم به یک حالت  $|\alpha, \beta_{\min}\rangle$  که نمی‌توان آن را بیشتر پایین برد، برسیم:

$$\hat{J}_- |\alpha, \beta_{\min}\rangle = 0 \quad (40-5)$$

با استفاده از  $\hat{J}_+ \hat{J}_- = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar \hat{J}_z$  و در تشابه با (۳۸-۵) و (۳۹-۵) نتیجه می‌گیریم که

$$\alpha = \beta_{\min}(\beta_{\min} - 1) \quad (41-5)$$

با مقایسه‌ی (۳۹-۵) و (۴۱-۵) رابطه‌ی زیر را به‌دست می‌آوریم:

$$\beta_{\max} = -\beta_{\min} \quad (42-5)$$

چون  $\beta_{\min}$  با  $n$  بار اعمال  $\hat{J}_-$  روی  $|\alpha, \beta_{\max}\rangle$  به‌دست آمد، نتیجه می‌گیریم که

$$\beta_{\max} = \beta_{\min} + n \quad (43-5)$$

و چون  $\beta_{\min} = -\beta_{\max}$  است، نتیجه می‌گیریم که

$$\beta_{\max} = \frac{n}{2} \quad (44-5)$$

بنابراین  $\beta_{\max}$  می‌تواند عدد صحیح یا نصف عدد صحیح فرد (بسته به زوج یا فرد بودن  $n$ ) باشد. اکنون مناسب است تا نمادگذاری  $j$  و  $m$  را به ترتیب برای نمایش دادن  $\beta_{\max}$  و  $\beta$  معرفی کنیم:

$$j = \beta_{\max} = \frac{n}{2}, \quad m = \beta \quad (۴۵-۵)$$

بنابراین ویژه‌مقدار  $\hat{J}^2$  از رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آید:

$$\alpha = j(j+1) \quad (۴۶-۵)$$

حال چون  $\beta_{\min} = -\beta_{\max}$  (با  $n$  مثبت) است، نتیجه می‌گیریم که مقدارهای مجاز  $m$  بین  $-j$  و  $+j$  قرار می‌گیرند:

$$-j \leq m \leq j \quad (۴۷-۵)$$

بنابراین می‌توان نتایج به‌دست آمده تا اینجا را به این صورت خلاصه کرد: ویژه‌مقدارهای  $\hat{J}^2$  و  $\hat{J}_z$  متناظر با ویژه‌بردارهای مشترک  $|j, m\rangle$  به ترتیب از  $\hbar^2 j(j+1)$  و  $\hbar m$  به‌دست می‌آیند:

$$\hat{J}^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle \quad \text{و} \quad \hat{J}_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle \quad (۴۸-۵)$$

که در آنها  $j = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$  و  $m = -j, -(j-1), \dots, j-1, j$ . بنابراین به‌ازای هر  $j$  به تعداد  $2j+1$  مقدار  $m$  وجود دارد. به عنوان مثال، اگر  $j = 1$  باشد آنگاه  $m$  سه مقدار  $1, 0, -1$  را می‌گیرد و هرگاه  $j = 5/2$  باشد آنگاه  $m$  شش مقدار  $5/2, 3/2, 1/2, -1/2, -3/2, -5/2$  را می‌گیرد. مقادیر  $j$  عدد صحیح یا نیمه‌صحیح‌اند. می‌بینیم که طیف عملگرهای تکانه‌ی زاویه‌ای  $\hat{J}^2$  و  $\hat{J}_z$  گسسته‌اند. چون ویژه‌حالت‌های متناظر با تکانه‌های زاویه‌ای متفاوت متعامدند و طیف‌های تکانه‌ی زاویه‌ای گسسته‌اند، شرط متعامد بهنجار بودن به‌صورت زیر است:

$$\langle j', m' | j, m \rangle = \delta_{j'j} \delta_{m'm} \quad (۴۹-۵)$$

حال بیابید ویژه‌مقدارهای  $\hat{J}_{\pm}$  را در چارچوب پایه‌ی  $\{|j, m\rangle\}$  تعیین کنیم.  $|j, m\rangle$  یک ویژه‌حالت  $\hat{J}_{\pm}$  نیست. می‌توانیم معادله‌ی (۳۵-۵) را به‌صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$\hat{J}_{\pm} |j, m\rangle = C_{jm}^{\pm} |j, m \pm 1\rangle \quad (۵۰-۵)$$

قصد داریم تا  $C_{jm}^+$  را به‌دست آوریم و سپس  $C_{jm}^-$  را نتیجه بگیریم. چون  $|j, m\rangle$  بهنجار است، می‌توانیم از (۵۰-۵) برای به‌دست آوردن دو عبارت زیر استفاده کنیم:

$$(\hat{J}_+ |j, m\rangle)^\dagger (\hat{J}_+ |j, m\rangle) = |C_{jm}^+|^2 \langle j, m+1 | j, m+1 \rangle = |C_{jm}^+|^2 \quad (۵۱-۵)$$

$$|C_{jm}^+|^2 = \langle j, m | \hat{J}_- \hat{J}_+ | j, m \rangle \quad (52-5)$$

ولی چون  $\hat{J}_- \hat{J}_+$  برابر با  $(\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z)$  است و با فرض آن که فاز دلخواه  $C_{jm}^+$  برابر با صفر است، نتیجه می‌گیریم که

$$C_{jm}^+ = \sqrt{\langle j, m | \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z | j, m \rangle} = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \quad (53-5)$$

در تشابه با  $C_{jm}^+$ ، به آسانی می‌توانیم عبارت مربوط به  $C_{jm}^-$  را نتیجه بگیریم:

$$C_{jm}^- = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \quad (54-5)$$

بنابراین معادله‌های ویژه‌مقدار برای  $\hat{J}_+$  و  $\hat{J}_-$  از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$\hat{J}_{\pm} | j, m \rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} | j, m \pm 1 \rangle \quad (55-5)$$

یا

$$\hat{J}_{\pm} | j, m \rangle = \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} | j, m \pm 1 \rangle \quad (56-5)$$

که به نوبه‌ی خود به دو رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\begin{aligned} \hat{J}_x | j, m \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{J}_+ + \hat{J}_-) | j, m \rangle \\ &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \left[ \sqrt{(j-m)(j+m+1)} | j, m+1 \rangle + \sqrt{(j+m)(j-m+1)} | j, m-1 \rangle \right] \end{aligned} \quad (57-5)$$

$$\begin{aligned} \hat{J}_y | j, m \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}i} (\hat{J}_+ - \hat{J}_-) | j, m \rangle \\ &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}i} \left[ \sqrt{(j-m)(j+m+1)} | j, m+1 \rangle - \sqrt{(j+m)(j-m+1)} | j, m-1 \rangle \right] \end{aligned} \quad (58-5)$$

بنابراین مقدارهای چشمداشتی  $\hat{J}_y$  و  $\hat{J}_x$  صفرند:

$$\langle j, m | \hat{J}_x | j, m \rangle = \langle j, m | \hat{J}_y | j, m \rangle = 0 \quad (59-5)$$

بعداً در (۲۰۸-۵) نشان خواهیم داد که مقدارهای چشمداشتی  $\langle j, m | \hat{J}_x^2 | j, m \rangle$  و  $\langle j, m | \hat{J}_y^2 | j, m \rangle$  برابرند و از رابطه‌ی زیر به دست می‌آیند:

$$\langle \hat{J}_x^2 \rangle = \langle \hat{J}_y^2 \rangle = \frac{1}{2} \left[ \langle j, m | \hat{J}^2 | j, m \rangle - \langle j, m | \hat{J}_z^2 | j, m \rangle \right] = \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - m^2] \quad (60-5)$$

## مثال ۲-۵

$\langle j, m | \hat{J}_x^2 | j, m \rangle =$  را محاسبه کنید و سپس نشان دهید که  $\langle j, m | \hat{J}_y^2 | j, m \rangle$  است. حل

چون  $[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z$  و  $[\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar\hat{J}_y$  است، داریم:

$$[\hat{J}_x^2, \hat{J}_y] = \hat{J}_x[\hat{J}_x, \hat{J}_y] + [\hat{J}_x, \hat{J}_y]\hat{J}_x = i\hbar(\hat{J}_x\hat{J}_z + \hat{J}_z\hat{J}_x) = i\hbar(2\hat{J}_x\hat{J}_z + i\hbar\hat{J}_y) \quad (۶۱-۵)$$

به صورت مشابه، چون  $[\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar\hat{J}_y$  و  $[\hat{J}_z, \hat{J}_y] = -i\hbar\hat{J}_x$  است، داریم:

$$[\hat{J}_z^2, \hat{J}_y] = \hat{J}_z[\hat{J}_z, \hat{J}_y] + [\hat{J}_z, \hat{J}_y]\hat{J}_z = -i\hbar(\hat{J}_z\hat{J}_x + \hat{J}_x\hat{J}_z) = -i\hbar(2\hat{J}_x\hat{J}_z + i\hbar\hat{J}_y) \quad (۶۲-۵)$$

دو عبارت قبل، نتیجه‌ی زیر را به دست می‌دهند:

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_y] = [\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2, \hat{J}_y] = [\hat{J}_x^2, \hat{J}_y] + [\hat{J}_z^2, \hat{J}_y] \\ = i\hbar(2\hat{J}_x\hat{J}_z + i\hbar\hat{J}_y) - i\hbar(2\hat{J}_x\hat{J}_z + i\hbar\hat{J}_y) = 0 \quad (۶۳-۵)$$

با توجه به این که داریم:

$$\hat{J}_x^2 = \frac{1}{4}(\hat{J}_+^2 + \hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_-\hat{J}_+ + \hat{J}_-^2), \quad \hat{J}_y^2 = -\frac{1}{4}(\hat{J}_+^2 - \hat{J}_+\hat{J}_- - \hat{J}_-\hat{J}_+ + \hat{J}_-^2) \quad (۶۴-۵)$$

و چون  $\langle j, m | \hat{J}_+^2 | j, m \rangle = \langle j, m | \hat{J}_-^2 | j, m \rangle = 0$  می‌توانیم بنویسیم:

$$\langle j, m | \hat{J}_x^2 | j, m \rangle = \frac{1}{4} \langle j, m | \hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_-\hat{J}_+ | j, m \rangle = \langle j, m | \hat{J}_y^2 | j, m \rangle \quad (۶۵-۵)$$

## ۴-۵ نمایش ماتریسی تکانه‌ی زاویه‌ای

صورت‌بندی بخش قبل عمومی است و مستقل از هر نمایش بخصوصی است. راه‌های بسیاری برای نمایش عملگرهای تکانه‌ی زاویه‌ای و ویژه‌حالت‌های آنها وجود دارد. در این بخش قصد داریم تا در مورد نمایش ماتریسی تکانه‌ی زاویه‌ای که در آن ویژه‌کته‌ها و عملگرها به ترتیب به وسیله‌ی بردارهای ستونی و ماتریس‌های مربعی نمایش داده خواهند شد، بحث کنیم. این کار با بسط حالت‌ها و عملگرها در یک پایه‌ی گسسته صورت می‌گیرد. بعداً خواهیم دید که چگونه تکانه‌ی زاویه‌ای مداری را در نمایش مکان نمایش دهیم.

چون  $\hat{J}_z^2$  و  $\hat{J}_z$  جابه‌جا می‌شوند، می‌توان مجموعه‌ی ویژه‌حالت‌های مشترک  $\{|j, m\rangle\}$  آنها را به عنوان پایه انتخاب کرد. این پایه گسسته، متعامد بهنجار و کامل است. به ازای مقدار معلومی از  $j$ ، شرط متعامد بهنجار بودن برای این پایه از (۴۹-۵) به دست می‌آید و شرط کامل بودن به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\sum_{m=-j}^{+j} |j, m\rangle\langle j, m| = \hat{I} \quad (۶۶-۵)$$

که در آن  $\hat{I}$  ماتریس یکه است. عملگرهای  $\hat{J}_z^2$  و  $\hat{J}_z$  در پایه‌ی داده شده با ویژه‌حالت‌های مشترکشان قطری‌اند:

$$\langle j', m' | \hat{J}_z^2 | j, m \rangle = \hbar^2 j(j+1) \delta_{j',j} \delta_{m',m} \quad (۶۷-۵)$$

$$\langle j', m' | \hat{J}_z | j, m \rangle = \hbar m \delta_{j',j} \delta_{m',m} \quad (۶۸-۵)$$

بنابراین ماتریس‌های نمایش‌دهنده‌ی  $\hat{J}_z^2$  و  $\hat{J}_z$  در ویژه‌پایه‌ی  $\{|j, m\rangle\}$  قطری‌اند و عنصرهای قطری آنها به ترتیب برابر است با  $\hbar^2 j(j+1)$  و  $\hbar m$ .

حال چون عملگرهای  $\hat{J}_\pm$  با  $\hat{J}_z$  جابه‌جا نمی‌شوند، در پایه‌ی  $\{|j, m\rangle\}$  به وسیله‌ی ماتریس‌هایی که قطری نیستند، نمایش داده می‌شوند:

$$\langle j', m' | \hat{J}_\pm | j, m \rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \delta_{j',j} \delta_{m', m \pm 1} \quad (۶۹-۵)$$

می‌توانیم ماتریس‌های  $\hat{J}_x$  و  $\hat{J}_y$  را از (۵۷-۵) و (۵۸-۵) نتیجه بگیریم:

$$\begin{aligned} & \langle j', m' | \hat{J}_x | j, m \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2} \left[ \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \delta_{m', m+1} + \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \delta_{m', m-1} \right] \delta_{j', j} \end{aligned} \quad (۷۰-۵)$$

$$\begin{aligned} & \langle j', m' | \hat{J}_y | j, m \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2i} \left[ \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \delta_{m', m+1} - \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \delta_{m', m-1} \right] \delta_{j', j} \end{aligned} \quad (۷۱-۵)$$

مثال ۳-۵ (تکانه‌ی زاویه‌ای  $j=1$ )

حالتی را در نظر بگیرید که در آن  $j=1$  است.

(الف) ماتریس‌های نمایش‌دهنده‌ی عملگرهای  $\hat{J}_z$ ،  $\hat{J}_\pm$ ،  $\hat{J}_x$  و  $\hat{J}_y$  را بیابید.

(ب) ویژه‌حالت‌های مشترک  $\hat{J}^2$  و  $\hat{J}_z$  را بیابید و ثابت کنید که یک پایه‌ی متعامد بهنجار و کامل را تشکیل می‌دهند.

(پ) از ماتریس‌های  $\hat{J}_x$ ،  $\hat{J}_y$  و  $\hat{J}_z$  برای محاسبه‌ی  $[\hat{J}_x, \hat{J}_y]$ ،  $[\hat{J}_y, \hat{J}_z]$  و  $[\hat{J}_z, \hat{J}_x]$  استفاده کنید.

(ت) ثابت کنید که  $\hat{J}_z^3 = \hbar^2 \hat{J}_z$  و  $\hat{J}_\pm^3 = 0$  است.

حل

(الف) به‌ازای  $j = 1$  مقدارهای مجاز  $m$  برابرند با  $1, 0, -1$ . ویژه‌حالت‌های مشترک  $\hat{J}^2$  و  $\hat{J}_z$  عبارتند از  $|1, 1\rangle$ ،  $|1, 0\rangle$  و  $|1, -1\rangle$ . می‌توان نمایش ماتریسی عملگرهای  $\hat{J}_z$  و  $\hat{J}^2$  را از (۵-۶۷) و (۵-۶۸) نتیجه گرفت:

$$\hat{J}^2 = \begin{pmatrix} \langle 1, 1 | \hat{J}^2 | 1, 1 \rangle & \langle 1, 1 | \hat{J}^2 | 1, 0 \rangle & \langle 1, 1 | \hat{J}^2 | 1, -1 \rangle \\ \langle 1, 0 | \hat{J}^2 | 1, 1 \rangle & \langle 1, 0 | \hat{J}^2 | 1, 0 \rangle & \langle 1, 0 | \hat{J}^2 | 1, -1 \rangle \\ \langle 1, -1 | \hat{J}^2 | 1, 1 \rangle & \langle 1, -1 | \hat{J}^2 | 1, 0 \rangle & \langle 1, -1 | \hat{J}^2 | 1, -1 \rangle \end{pmatrix}$$

$$= 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (۷۲-۵)$$

$$\hat{J}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (۷۳-۵)$$

به‌صورت مشابه، با استفاده از (۵-۶۹) می‌توانیم تحقیق کنیم که ماتریس‌های  $\hat{J}_+$  و  $\hat{J}_-$  از ماتریس‌های زیر به‌دست می‌آیند:

$$\hat{J}_- = \hbar\sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{J}_+ = \hbar\sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (۷۴-۵)$$

ماتریس‌های  $\hat{J}_x$  و  $\hat{J}_y$  در پایه‌ی  $\{|j, m\rangle\}$  بی‌درنگ از رابطه‌های  $\hat{J}_x = (\hat{J}_+ + \hat{J}_-)/2$  و  $\hat{J}_y = i(\hat{J}_- - \hat{J}_+)/2$  نتیجه می‌شوند:

$$\hat{J}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{J}_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad (۷۵-۵)$$



(ب) می‌توان ویژه‌بردارهای مشترک  $\hat{J}^2$  و  $\hat{J}_z$  را به صورتی که در ادامه می‌آید، به دست آورد. معادله‌ی ماتریسی  $\hat{J}_z|j, m\rangle = m\hbar|j, m\rangle$  به صورت زیر است:

$$\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = m\hbar \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \implies \begin{aligned} \hbar a &= m\hbar a \\ 0 &= m\hbar b \\ -\hbar c &= m\hbar c \end{aligned} \quad (۷۶-۵)$$

جواب‌های بهنجار این معادله‌ها به ازای  $m = 1, 0, -1$  به ترتیب از  $a = 1, b = c = 0$ ،  $a = b = 0, c = 1$  و  $a = b = 0, c = 0, b = 1$  یعنی

$$|1, 1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1, 0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1, -1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (۷۷-۵)$$

می‌توانیم ثابت کنیم که این بردارها متعامد بهنجارند:

$$\langle 1, m' | 1, m \rangle = \delta_{m', m}, \quad (m', m = -1, 0, 1) \quad (۷۸-۵)$$

همچنین می‌توانیم ثابت کنیم که این ویژه‌بردارها کامل‌اند:

$$\begin{aligned} \sum_{m=-1}^1 |1, m\rangle\langle 1, m| &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (۷۹-۵)$$

(پ) با استفاده از ماتریس‌های (۷۵-۵) داریم:

$$\hat{J}_x \hat{J}_y = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} i & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & -i \end{pmatrix} \quad (۸۰-۵)$$

$$\hat{J}_y \hat{J}_x = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} -i & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & i \end{pmatrix} \quad (۸۱-۵)$$

از این رو

$$\hat{J}_x \hat{J}_y - \hat{J}_y \hat{J}_x = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 2i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2i \end{pmatrix} = i\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = i\hbar \hat{J}_z \quad (۸۲-۵)$$

که در آن ماتریس  $\hat{J}_z$  از (۷۳-۵) به دست می‌آید. محاسباتی مشابه به  $[\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar \hat{J}_x$  و  $[\hat{J}_x, \hat{J}_z] = i\hbar \hat{J}_y$  می‌انجامند. (ت) محاسبه‌ی  $\hat{J}_z^2$  و  $\hat{J}_\pm^2$  سراسر است:

$$\hat{J}_z^2 = \hbar^2 \left[ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \right]^2 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \hbar^2 \hat{J}_z \quad (۸۳-۵)$$

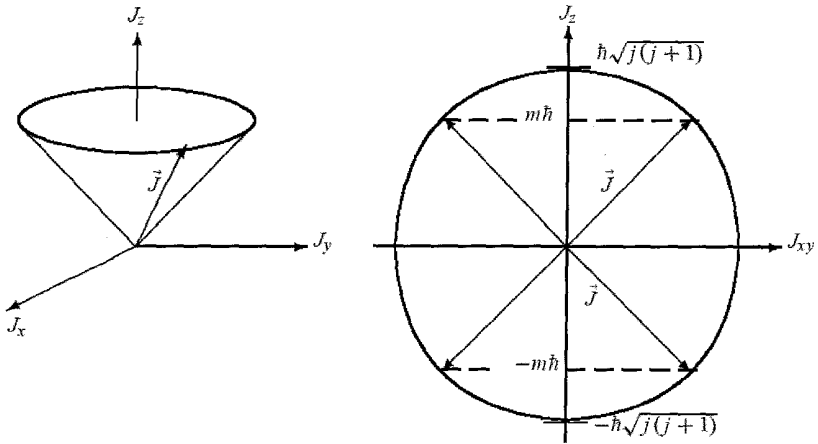
$$\hat{J}_+^2 = 2\hbar^2 \sqrt{2} \left[ \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right]^2 = 2\hbar^2 \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = 0 \quad (۸۴-۵)$$

و

$$\hat{J}_-^2 = 2\hbar^2 \sqrt{2} \left[ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \right]^2 = 2\hbar^2 \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = 0 \quad (۸۵-۵)$$

## ۵-۵ نمایش هندسی تکانه‌ی زاویه‌ای

در اینجا مسأله رابطه‌ی بین تکانه‌ی زاویه‌ای و مؤلفه‌ی  $z$  آن است. می‌توان این رابطه را به صورت هندسی به صورتی که در ادامه می‌آید، نمایش داد. همانطور که در شکل ۱-۵ نشان داده شده است، به ازای یک مقدار ثابت  $z$ ، می‌توان تکانه‌ی زاویه‌ای کل  $\hat{J}$  را به وسیله‌ی برداری که طول آن از رابطه‌ی  $\sqrt{\langle \hat{J}^2 \rangle} = \hbar \sqrt{j(j+1)}$  به دست می‌آید و مؤلفه‌ی  $z$  آن برابر با  $\langle \hat{J}_z \rangle = \hbar m$  است، نمایش داد. چون  $\hat{J}_x$  و  $\hat{J}_y$  جداگانه تعریف نشده‌اند، تنها مجموع  $\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2$  آنها که در داخل صفحه‌ی  $xy$  قرار می‌گیرد، خوش تعریف است. به صورت کلاسیکی می‌توانیم  $\hat{J}$  را به صورتی که بتوان آن را به صورت



شکل ۱-۵ نمایش هندسی تکانه‌ی زاویه‌ای  $\hat{J}$ : بردار  $\hat{J}$  در امتداد سطح یک مخروط حول محور آن می‌چرخد. ارتفاع مخروط (تصویر  $\hat{J}$  روی محور مخروط) برابر با  $m\hbar$  است. نوک  $\hat{J}$  در صفحه‌ی  $J_z J_{xy}$  روی دایره‌ای به شعاع  $\hbar\sqrt{j(j+1)}$  قرار می‌گیرد.

ترسیمی به وسیله‌ی یک بردار که انتهای آن روی دایره‌ای به شعاع  $\hbar\sqrt{j(j+1)}$  قرار می‌گیرد و در امتداد سطح مخروطی با نیم‌زاویه‌ی زیر می‌چرخد، نمایش دهیم:

$$\theta = \cos^{-1} \left( \frac{m}{\sqrt{j(j+1)}} \right) \quad (۸۶-۵)$$

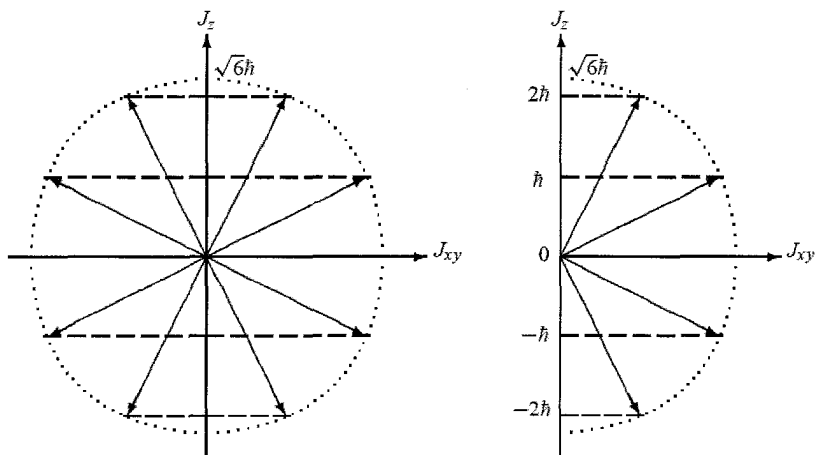
به طوری که تصویر آن در امتداد محور  $z$  همیشه برابر با  $m\hbar$  است. توجه کنید که چون مقدارهای عدد کوانتومی  $m$  به  $j, j-1, \dots, -j+1, -j$  محدودند، زاویه‌ی  $\theta$  کوانتیده است. تنها مقدارهای ممکن  $\theta$  از مجموعه‌ی گسسته‌ای از  $2j+1$  مقدار تشکیل شده است:

$$\theta = \cos^{-1} \left( -\frac{-j}{\sqrt{j(j+1)}} \right), \cos^{-1} \left( \frac{-j+1}{\sqrt{j(j+1)}} \right), \dots, \cos^{-1} \left( \frac{j-1}{\sqrt{j(j+1)}} \right), \cos^{-1} \left( \frac{j}{\sqrt{j(j+1)}} \right) \quad (۸۷-۵)$$

چون تمام جهت‌گیری‌های  $\hat{J}$  روی سطح این مخروط احتمال یکسانی دارند، میانگین تصویر  $\hat{J}$  روی هر دو محور  $x$  و  $y$  صفر است:

$$\langle \hat{J}_x \rangle = \langle \hat{J}_y \rangle = 0 \quad (۸۸-۵)$$

که در آن  $\langle \hat{J}_x \rangle$  نشان دهنده‌ی  $\langle j, m | \hat{J}_x | j, m \rangle$  است.



شکل ۲-۵ نمایش هندسی تکانه‌ی زاویه‌ای  $j = 2$  برای حالت  $|2, m\rangle$  با  $m = -2, -1, 0, 1, 2$ . شعاع دایره برابر است با  $\hbar\sqrt{2(2+1)} = \sqrt{6}\hbar$ .

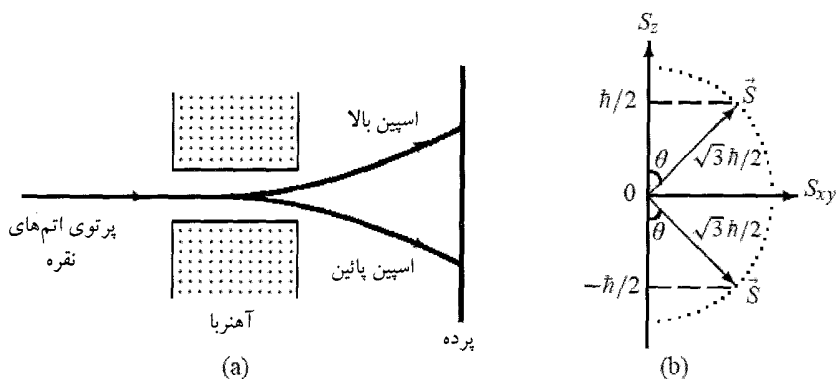
به عنوان مثال، شکل ۲-۵ نمایش ترسیمی حالت  $j = 2$  را نشان می‌دهد. همانطور که در (۸۷-۵) مشخص شد،  $\theta$  تنها مجموعه‌ی گسسته‌ای از مقادارها را می‌گیرد. در این حالت که در آن  $j = 2$  است، زاویه‌ی  $\theta$  تنها پنج مقدار به ترتیب متناظر با  $m = -2, -1, 0, 1, 2$  را می‌گیرد. این مقادارها عبارتند از

$$\theta = -35,26^\circ, -65,91^\circ, 90^\circ, 65,91^\circ, 35,26^\circ \quad (89-5)$$

## ۶-۵ تکانه‌ی زاویه‌ای اسپینی

### ۱-۶-۵ شواهد تجربی اسپین

وجود اسپین توسط اشترن و گریلاخ در سال ۱۹۲۲ و با استفاده از اتم‌های نقره (Ag) به صورت تجربی تأیید شد. نقره ۴۷ الکترون دارد که ۴۶ تایی آن یک توزیع بار متقارن کروی را تشکیل می‌دهند و الکترون چهل و هفتم اوربیتال ۵s را اشغال می‌کند. اگر اتم نقره در حالت پایه‌ی خود باشد آنگاه تکانه‌ی زاویه‌ای مداري کل آن صفر خواهد بود:  $l = 0$  (زیرا الکترون لایه‌ی پنجم در حالت ۵s خواهد بود). در آزمایش اشترن-گریلاخ باریکه‌ای از اتم‌های نقره از داخل یک میدان مغناطیسی غیرهمگن (غیریکنواخت) عبور می‌کند. اگر (برای راحت بودن بحث) میدان در جهت  $z$  باشد آنگاه از نظر کلاسیکی انتظار داریم روی پرده نوار پیوسته‌ای را ببینیم که حول جهتی بدون انحراف ( $z = 0$ ) متقارن است. طبق نظریه‌ی موجی شرودینگر هرگاه اتم‌ها دارای تکانه‌ی زاویه‌ای مداري  $l$  باشند آنگاه انتظار داریم که باریکه به  $2l + 1$  مؤلفه‌ی (گسسته‌ی) فرد شکافته شود. فرض کنید اتم‌های باریکه در حالت پایه‌ی خود باشند ( $l = 0$ ) آنگاه تنها یک نقطه روی پرده وجود داشت و هرگاه الکترون لایه‌ی پنجم در حالت ۵p ( $l = 1$ ) بود آنگاه انتظار

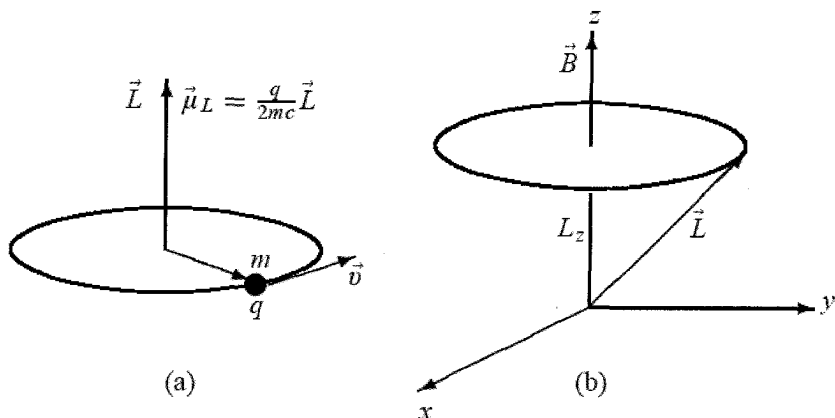


شکل ۳-۵ (الف) آزمایش اشترن-گرلاخ: هنگامی که باریکه‌ای از اتم‌های نقره از داخل یک میدان مغناطیسی ناهمگن عبور می‌کند، به دو مؤلفه‌ی متمایز متناظر با اسپین بالا و اسپین پایین شکافته می‌شود. (ب) نمایش هندسی اسپین  $\frac{1}{2}$ : نوک  $S$  روی دایره‌ای به شعاع  $|S| = \sqrt{3}\hbar/2$  قرار می‌گیرد به طوری که تصویر آن روی محور  $z$  تنها دو مقدار  $\pm\hbar/2$  را با  $\theta = 54.73^\circ$  می‌گیرد.

داشتیم که سه نقطه را ببینیم. به صورت تجربی، باریکه طبق پیش‌بینی‌های فیزیک کلاسیک و نظریه‌ی موجی شرودینگر رفتار نمی‌کند بلکه همانطور که در شکل ۳-۵ الف نشان داده شده است، به دو مؤلفه‌ی متمایز شکافته می‌شود. این نتیجه برای اتم‌های هیدروژن در حالت پایه‌ی آنها ( $l = 0$ ) نیز مشاهده شد که در آن انتظار هیچ شکافتگی نمی‌رود.

برای حل این معما، گود اسمیت و اوهلنبرگ در سال ۱۹۲۵ این مطلب را اصل موضوعه قرار دادند که الکترون علاوه بر تکانه‌ی زاویه‌ای مداری خود، دارای یک تکانه‌ی زاویه‌ای ذاتی است که بر خلاف تکانه‌ی زاویه‌ای مداری، ارتباطی با درجه‌های آزادی فضایی ندارد. در تشابه با حرکت زمین که از یک حرکت مداری حول خورشید و یک حرکت چرخشی داخلی یا اسپینی حول محور خود تشکیل شده است، الکترون یا بسته به موضوع، هر ذره‌ی میکروسکوپی مورد نظر دیگری نیز می‌تواند نوعی حرکت داخلی یا ذاتی داشته باشد. به این درجه‌ی آزادی ذاتی نام پیشنهادی تکانه‌ی زاویه‌ای اسپینی داده شد. باید به خاطر داشت که الکترون یک ذره‌ی بدون ساختار یا نقطه‌گونه باقی می‌ماند و از این رو هنگامی که سعی می‌کنیم اسپین الکترون را به یک حرکت چرخشی داخلی مربوط کنیم، باید احتیاط نماییم. تکانه‌ی زاویه‌ای اسپینی یک ذره به درجه‌ی آزادی فضایی آن بستگی ندارد. اسپین (یک درجه‌ی آزادی ذاتی) صرفاً یک مفهوم کوانتومی است که مشابه کلاسیکی ندارد. بر خلاف تکانه‌ی زاویه‌ای مداری، نمی‌توان اسپین را با یک عملگر دیفرانسیلی توصیف کرد.

از نظریه‌ی الکترومغناطیس کلاسیک، می‌دانیم که گشتاور دوقطبی مغناطیسی مداری به واسطه‌ی



شکل ۴-۵ (الف) گشتاور دوقطبی مغناطیسی بار مثبت  $q$ . (ب) هنگامی که یک میدان مغناطیسی خارجی اعمال می‌شود، گشتاور دوقطبی مداری حول آن حرکت تقدیمی انجام می‌دهد.

حرکت مداری ذره‌ای با بار  $q$  به وجود می‌آید:

$$\mu_L = \frac{q}{2mc} \mathbf{L} \quad (۹۰-۵)$$

که در آن  $\mathbf{L}$  تکانه‌ی زاویه‌ای مداری ذره،  $m$  جرم آن و  $c$  سرعت نور است. همانطور که در شکل ۴-۵ الف نشان داده شده است، اگر بار  $q$  مثبت باشد آنگاه  $\mu_L$  و  $\mathbf{L}$  در یک جهت خواهند بود و برای یک بار منفی مانند الکترون ( $q = -e$ )، گشتاور دوقطبی مغناطیسی  $\mu_L = -e\mathbf{L}/(2m_e c)$  و تکانه‌ی زاویه‌ای مداری در خلاف جهت یکدیگر خواهند بود. به صورت مشابه، اگر تحلیلی کلاسیکی را دنبال کنیم و الکترون را به صورت یک بارکروی چرخان در نظر بگیریم آنگاه گشتاور دوقطبی مغناطیسی اسپینی یا ذاتی الکترون را به صورت یک بارکروی چرخان در نظر گرفت. در واقع، معلوم شده است که گشتاور دوقطبی اسپینی الکترون دو برابر عبارت کلاسیکی آن است. با وجود این که نمی‌توان به صورت کلاسیکی گشتاور دوقطبی مغناطیسی اسپینی را به دست آورد (به صورتی که برای گشتاور مغناطیسی مداری انجام دادیم) ولی در تشابه با (۹۰-۵) هنوز می‌توان آن را اصل موضوعه قرار داد:

$$\mu_S = -g_s \frac{e}{2m_e c} \mathbf{S} \quad (۹۱-۵)$$

که در آن  $g_s$  عامل لانده یا نسبت زیرومغناطیسی الکترون نامیده می‌شود و مقدار تجربی آن  $g_s \simeq 2$  است (می‌توان این ضریب را با استفاده از نظریه‌ی الکترون نسبیتی دیراک محاسبه کرد).

هنگامی که الکترون در میدان مغناطیسی  $B$  قرار داده می‌شود و میدان غیرهمگن است، نیرویی بر گشتاور دوقطبی ذاتی الکترون وارد خواهد شد. جهت و اندازه‌ی این نیرو به جهت‌گیری نسبی میدان و دوقطبی بستگی دارد. این نیرو تمایل دارد تا  $\mu_S$  را در امتداد  $B$  همخط کند و حرکت تقدیمی  $\mu_S$  حول  $B$  را ایجاد کند (شکل ۴-۵ ب). به عنوان مثال، اگر  $\mu_S$  موازی با  $B$  باشد آنگاه الکترون در جهتی که میدان افزایش می‌یابد، حرکت خواهد کرد. برعکس، اگر  $\mu_S$  در خلاف جهت  $B$  باشد آنگاه الکترون در جهتی که میدان کاهش می‌یابد، حرکت خواهد کرد. برای اتم‌های هیدروژن‌گونه (مانند نقره) که در حالت پایه قرار دارند، تکانه‌ی زاویه‌ای مداری صفر خواهد بود. از این رو گشتاور دوقطبی اتم کاملاً ناشی از اسپین الکترون خواهد بود. بنابراین باریکه‌ی اتمی مطابق با جهت‌گیری اسپین الکترون منحرف خواهد شد. چون به صورت تجربی، باریکه به دو مؤلفه شکافته می‌شود، اسپین الکترون باید تنها دو جهت‌گیری ممکن نسبت به میدان مغناطیسی (موازی یا پادموازی) داشته باشد.

در تشابه با تکانه‌ی زاویه‌ای مداری یک ذره که با دو عدد کوانتومی عدد مداری  $l$  و عدد سمتی  $m_l$  (با  $m_l = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$ ) مشخص می‌شود، تکانه‌ی زاویه‌ای اسپینی نیز با دو عدد کوانتومی اسپینی  $s$  و تصویر  $m_s$  آن روی محور  $z$  (جهت میدان مغناطیسی) مشخص می‌شود که در آن  $m_s = -s, -s + 1, \dots, s - 1, s$  است. چون در آزمایش اشترن-گرلاخ تنها دو مؤلفه مشاهده شده‌اند، باید داشته باشیم:  $2s + 1 = 2$ . آنگاه عددهای کوانتومی مربوط به الکترون باید از  $s = \frac{1}{2}$  و  $m_s = \pm \frac{1}{2}$  به دست آیند.

معلوم شده است که در طبیعت، هر ذره‌ی بنیادی دارای یک اسپین خاص است. برخی از ذره‌ها دارای اسپین‌های صحیح  $s = 0, 1, 2, \dots$  هستند (مزون‌های پی دارای اسپین  $s = 0$ ، فوتون‌ها دارای اسپین  $s = 1$  هستند و به همین ترتیب) و ذره‌های دیگر دارای اسپین نیمه‌صحیح فرزند  $s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$  (الکترون‌ها، پروتون‌ها و نوترون‌ها دارای اسپین  $s = \frac{1}{2}$ ، دلتاها دارای اسپین  $s = \frac{3}{2}$  هستند و به همین ترتیب). در فصل ۸ خواهیم دید که ذره‌های با اسپین نیمه‌صحیح فرد، فرمیون نامیده می‌شوند (مانند کوارک‌ها، الکترون‌ها، پروتون‌ها، نوترون‌ها و ...) و ذره‌های با اسپین صحیح، بوزون نامیده می‌شوند (مانند پيون‌ها، فوتون‌ها، گراویتون‌ها و ...).

آزمایش اشترن-گرلاخ علاوه بر تأیید وجود اسپین و اندازه‌گیری آن، کاربردهای مهم دیگری را نیز در مکانیک کوانتومی پیشنهاد می‌کند. ابتدا با نشان دادن این که باریکه به جای یک نوار پیوسته به مجموعه‌ی گسسته‌ای از مؤلفه‌ها شکافته می‌شود، تأییدی دوباره بر این فرضیه‌ی کوانتومی که دنیای میکروفیزیکی دارای مشخصه‌ای گسسته است را فراهم می‌کند. همچنین معلوم شده است که این آزمایش تکنیکی باارزشی برای فراهم کردن یک حالت کوانتومی است. فرض کنید می‌خواهیم باریکه‌ای از اتم‌های اسپین بالا را فراهم کنیم. برای این کار به سادگی یک باریکه‌ی غیرقطبیده را از داخل یک آهن‌ربای ناهمگن عبور می‌دهیم و سپس مؤلفه‌ی دلخواه را گردآوری و مؤلفه‌ی دیگر را سد می‌کنیم. همچنین می‌توان از آزمایش اشترن-گرلاخ

برای تعیین تکانه‌ی زاویه‌ای کل اتمی که (در حالت  $l \neq 0$ ) از مجموع تکانه‌های زاویه‌ای مداری و اسپینی به دست می‌آید نیز استفاده کرد:  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ . به جمع تکانه‌های زاویه‌ای در فصل ۷ پرداخته شده است.

### ۲-۶-۵ نظریه‌ی عمومی اسپین

نظریه‌ی اسپین با نظریه‌ی عمومی تکانه‌ی زاویه‌ای (بخش ۳-۵) یکسان است. در تشابه با تکانه‌ی زاویه‌ای برداری  $\hat{J}$ ، اسپین نیز با عملگر برداری  $\hat{S}$  که مؤلفه‌های  $\hat{S}_x$ ،  $\hat{S}_y$  و  $\hat{S}_z$  آن از همان رابطه‌های جابه‌جایی مربوط به  $\hat{J}_x$ ،  $\hat{J}_y$  و  $\hat{J}_z$  پیروی می‌کنند، نمایش داده می‌شود:

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z, \quad [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x, \quad [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y \quad (۹۲-۵)$$

علاوه بر این،  $\hat{S}_z$  و  $\hat{S}^2$  جابه‌جا می‌شوند و از این رو ویژه‌بردارهای مشترکی دارند:

$$\hat{S}^2 |s, m_s\rangle = \hbar^2 s(s+1) |s, m_s\rangle, \quad \hat{S}_z |s, m_s\rangle = \hbar m_s |s, m_s\rangle \quad (۹۳-۵)$$

که در آنها  $s, -s, -s+1, \dots, -s+1, \dots, s$  است. به صورت مشابه، داریم:

$$\hat{S}_{\pm} |s, m_s\rangle = \hbar \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s \pm 1)} |s, m_s \pm 1\rangle \quad (۹۴-۵)$$

که در آن  $\hat{S}_{\pm} = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$  است و

$$\langle \hat{S}_x^2 \rangle = \langle \hat{S}_y^2 \rangle = \frac{1}{4} (\langle \hat{S}^2 \rangle - \langle \hat{S}_z^2 \rangle) = \frac{\hbar^2}{4} [s(s+1) - m_s^2] \quad (۹۵-۵)$$

که در آن  $\langle \hat{A} \rangle$  رابطه‌ی  $\langle s, m_s | \hat{A} | s, m_s \rangle = \langle \hat{A} \rangle$  را نشان می‌دهد.

حالت‌های اسپینی یک پایه‌ی متعامد بهنجار و کامل را تشکیل می‌دهند:

$$\langle s', m'_s | s, m_s \rangle = \delta_{s',s} \delta_{m'_s, m_s}, \quad \sum_{m_s=-s}^s |s, m_s\rangle \langle s, m_s| = I \quad (۹۶-۵)$$

که در آن  $I$  ماتریس یکه است.

### ۳-۶-۵ اسپین ۱/۲ و ماتریس‌های پائولی

برای ذره‌ای با اسپین  $\frac{1}{2}$ ، عدد کوانتومی  $m_s$  تنها دو مقدار را می‌گیرد:  $\frac{1}{2}$ ،  $-\frac{1}{2}$ . بنابراین می‌توان ذره را در یکی از این دو حالت یافت:  $|s, m_s\rangle = |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$  و  $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ . ویژه‌مقدارهای  $\hat{S}_z$  و  $\hat{S}^2$  از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$\hat{S}^2 \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle, \quad \hat{S}_z \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle \quad (۹۷-۵)$$



از این رو می‌توان اسپین را (همانند شکل ۳-۵ ب) با برداری به طول  $|S| = \sqrt{3}\hbar/2$  به صورت ترسیمی نمایش داد که انتهای آن روی دایره‌ای به شعاع  $\sqrt{3}\hbar/2$  قرار می‌گیرد و در امتداد سطحی مخروطی با نیم‌زاویه‌ی زیر می‌چرخد:

$$\theta = \cos^{-1} \left( \frac{|m_s|}{\sqrt{s(s+1)}} \right) = \cos^{-1} \left( \frac{\hbar/2}{\sqrt{3}\hbar/2} \right) = \cos^{-1} \left( \frac{1}{\sqrt{3}} \right) = 54,73^\circ \quad (98-5)$$

تصویر  $\hat{S}$  روی محور  $z$  تنها به دو مقدار  $\pm\hbar/2$  محدود می‌شود که متناظر با اسپین بالا و اسپین پایین است.

حال بیائید نمایش ماتریسی اسپین  $s = 1/2$  را بررسی کنیم. با استفاده از (۶۷-۵) و (۶۸-۵) می‌توانیم عملگرهای  $\hat{S}_z$  و  $\hat{S}^2$  را به وسیله‌ی ماتریس‌های زیر در پایه‌ی  $\{|\frac{1}{2}, m_s\rangle\}$  نمایش دهیم:

$$\hat{S}^2 = \begin{pmatrix} \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | \hat{S}^2 | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle & \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | \hat{S}^2 | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle \\ \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | \hat{S}^2 | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle & \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | \hat{S}^2 | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle \end{pmatrix} = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (99-5)$$

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (100-5)$$

می‌توان ماتریس‌های  $\hat{S}_+$  و  $\hat{S}_-$  را از (۹۹-۵) نتیجه گرفت:

$$\hat{S}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (101-5)$$

و چون  $\hat{S}_x = \frac{1}{2}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-)$  و  $\hat{S}_y = \frac{i}{2}(\hat{S}_- - \hat{S}_+)$  است، داریم:

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (102-5)$$

ویژه‌بردارهای مشترک  $\hat{S}^2$  و  $\hat{S}_z$  برحسب ماتریس‌های ستونی دو عنصری که به عنوان اسپینور شناخته می‌شوند، بیان می‌شوند:

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (103-5)$$

ثابت کردن این مطلب که این ویژه‌بردارها یک پایه‌ی کامل

$$\sum_{m_s = -\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \left| \frac{1}{2}, m_s \right\rangle \left\langle \frac{1}{2}, m_s \right| = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (104-5)$$

و متعامد بهنجار

$$\left\langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle = (1 \ 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1 \quad (105-5)$$

$$\left\langle \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle = (0 \ 1) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 1 \quad (106-5)$$

$$\left\langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle = 0 \quad (107-5)$$

را تشکیل می‌دهند، کار ساده‌ای است. حال بیائید ویژه‌بردارهای  $\hat{S}_y$  و  $\hat{S}_x$  را بیابیم. ابتدا توجه کنید که بردارهای پایه‌ی  $|s, m_s\rangle$  ویژه‌بردارهای  $\hat{S}_y$  و  $\hat{S}_x$  نیستند. اما به هر حال، به صورت زیر می‌توان ویژه‌بردارهای آنها را برحسب  $|s, m_s\rangle$  بیان کرد:

$$|\psi_x\rangle_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \pm \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right] \quad (108-5)$$

$$|\psi_y\rangle_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \pm i \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right] \quad (109-5)$$

بنابراین معادله‌های ویژه‌مقدار  $\hat{S}_x$  و  $\hat{S}_y$  از معادله‌های زیر به دست می‌آیند:

$$\hat{S}_x |\psi_x\rangle_{\pm} = \pm \frac{\hbar}{2} |\psi_x\rangle_{\pm}, \quad \hat{S}_y |\psi_y\rangle_{\pm} = \pm \frac{\hbar}{2} |\psi_y\rangle_{\pm} \quad (110-5)$$

ماتریس‌های پائولی

هنگامی که  $s = \frac{1}{2}$  است، بهتر است ماتریس‌های پائولی  $\sigma_x$ ،  $\sigma_y$  و  $\sigma_z$  که به صورت زیر به بردار اسپین مربوط می‌شوند را معرفی کنیم:

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \sigma \quad (111-5)$$

با استفاده از این رابطه همراه با (105-5) و (102-5) داریم:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (112-5)$$

این ماتریس‌ها در دو ویژگی ماتریسی زیر صدق می‌کنند:

$$\sigma_j^2 = \hat{I} \quad (j = x, y, z) \quad (113-5)$$

$$\sigma_j \sigma_k + \sigma_k \sigma_j = 0 \quad (j \neq k) \quad (114-5)$$

که در آنها اندیس‌های  $i, j$  و  $k$  به  $x$  و  $y$  و  $z$  اشاره دارند و  $\hat{I}$  یک ماتریس یکه‌ی  $2 \times 2$  است. این دو معادله با رابطه‌ی پادجابه‌جایی زیر معادل‌اند:

$$\{\sigma_j, \sigma_k\} = 2\hat{I}\sigma_{j,k} \quad (115-5)$$

می‌توانیم ثابت کنیم که ماتریس‌های پائولی در رابطه‌های جابه‌جایی زیر صدق می‌کنند:

$$[\sigma_j, \sigma_k] = 2i\varepsilon_{jkl}\sigma_l \quad (116-5)$$

که در آن  $\varepsilon_{jkl}$  تانسور پادمتقارن (که تانسور لوی-چی ویتا نیز شناخته می‌شود) است:

$$\varepsilon_{jkl} = \begin{cases} 1 & \text{اگر } jkl \text{ جایگشت زوجی از } x, y \text{ و } z \text{ باشد} \\ -1 & \text{اگر } jkl \text{ جایگشت فردی از } x, y \text{ و } z \text{ باشد} \\ 0 & \text{اگر دو اندیس بین } j, k \text{ و } l \text{ مساوی باشند} \end{cases} \quad (117-5)$$

می‌توانیم رابطه‌های (۱۱۳-۵)، (۱۱۴-۵) و (۱۱۶-۵) را در رابطه‌ی زیر فشرده کنیم:

$$\sigma_j \sigma_k = \delta_{j,k} + i \sum_l \varepsilon_{jkl} \sigma_l \quad (118-5)$$

با استفاده از این رابطه می‌توانیم ثابت کنیم که به‌ازای هر دو بردار  $\mathbf{A}$  و  $\mathbf{B}$  که با  $\sigma$  جابه‌جا می‌شوند، داریم:

$$(\sigma \cdot \mathbf{A})(\sigma \cdot \mathbf{B}) = (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})\hat{I} + i\sigma \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \quad (119-5)$$

که در آن  $\hat{I}$  ماتریس یکه است. ماتریس‌های پائولی هرمیتی و بدون رد هستند و دترمینان آنها برابر با  $-1$  است:

$$\sigma_j^\dagger = \sigma_j, \quad \text{Tr}(\sigma_j) = 0, \quad \det(\sigma_j) = -1 \quad (j = x, y, z) \quad (120-5)$$

با استفاده از رابطه‌ی  $\sigma_x \sigma_y = i\sigma_z$  همراه با  $\sigma_z^2 = \hat{I}$  رابطه‌ی زیر را به‌دست می‌آوریم:

$$\sigma_x \sigma_y \sigma_z = i\hat{I} \quad (121-5)$$

از رابطه‌های جابه‌جایی (۱۱۶-۵) می‌توانیم نشان دهیم که

$$e^{i\alpha\sigma_j} = I \cos \alpha + i\sigma_j \sin \alpha \quad (j = x, y, z) \quad (122-5)$$

که در آن  $I$  ماتریس یکه و  $\alpha$  یک ثابت حقیقی دلخواه است.

## ملاحظات

- با توجه به این که اسپین به درجه‌های آزادی فضایی بستگی ندارد، مؤلفه‌های  $\hat{S}_x$ ،  $\hat{S}_y$  و  $\hat{S}_z$  عملگر اسپین با تمام عملگرهای فضایی (به‌خصوص تکانه‌ی زاویه‌ای مداری  $\hat{\mathbf{L}}$  و عملگرهای مکان  $\hat{\mathbf{R}}$  و تکانه  $\hat{\mathbf{P}}$ ) جابه‌جا می‌شود:

$$[\hat{S}_j, \hat{L}_k] = 0, \quad [\hat{S}_j, \hat{R}_k] = 0, \quad [\hat{S}_j, \hat{P}_k] = 0 \quad (j, k = x, y, z) \quad (۱۲۳-۵)$$

- تابع موج کل  $|\Psi\rangle$  ی‌ی یک سیستم با اسپین، از ضرب دو قسمت تشکیل شده است: بخش فضایی  $\psi(\mathbf{r})$  و بخش اسپینی  $|s, m_s\rangle$ :

$$|\Psi\rangle = |\psi\rangle |s, m_s\rangle \quad (۱۲۴-۵)$$

این ضرب درجه‌های آزادی فضایی و اسپینی یک ضرب معمولی نیست بلکه ضرب مستقیم یا تانسوری است که در فصل ۷ پیرامون آن بحث شده است. در فصل ۶ نشان خواهیم داد که چهار عدد کوانتومی  $n, l, m, m_s$  برای توصیف کامل حالت یک الکترون در حال حرکت در یک میدان مرکزی ضروری‌اند. تابع موج این الکترون برابر است با

$$\Psi_{nlm_l m_s}(\mathbf{r}) = \psi_{nlm_l}(\mathbf{r}) |s, m_s\rangle \quad (۱۲۵-۵)$$

چون عملگر اسپین به درجه‌های آزادی فضایی بستگی ندارد، تنها روی قسمت اسپینی  $|s, m_s\rangle$  اثر می‌گذارد و تابع موج فضایی  $\psi_{nlm_l}(\mathbf{r})$  را بدون تغییر باقی می‌گذارد. برعکس، عملگرهای فضایی  $\hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{R}}, \hat{\mathbf{P}}$  روی قسمت فضایی تابع موج اثر می‌گذارند و روی قسمت اسپینی اثری ندارند. برای ذره‌هایی با اسپین  $\frac{1}{2}$ ، تابع موج کل متناظر با حالت‌های اسپین بالا و اسپین پایین، به ترتیب برحسب اسپینورها بیان می‌شوند:

$$\Psi_{nlm_l \frac{1}{2}}(\mathbf{r}) = \psi_{nlm_l}(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_{nlm_l}(\mathbf{r}) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (۱۲۶-۵)$$

$$\Psi_{nlm_l -\frac{1}{2}}(\mathbf{r}) = \psi_{nlm_l}(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{nlm_l}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (۱۲۷-۵)$$

## مثال ۴-۵

ترازهای انرژی یک ذره با اسپین  $s = \frac{3}{4}$  که هامیلتونی آن از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید را بیابید:

$$\hat{H} = \frac{\alpha}{\hbar^2} (\hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 - 2\hat{S}_z^2) - \frac{\beta}{\hbar} \hat{S}_z$$

که در آن  $\alpha$  و  $\beta$  ثابت‌اند. آیا این ترازها واکن‌اند؟

حل

با بازنویسی  $\hat{H}$  به شکل

$$\hat{H} = \frac{\alpha}{\hbar^2} (\hat{S}^2 - 3\hat{S}_z^2) - \frac{\beta}{\hbar} \hat{S}_z \quad (128-5)$$

می‌بینیم که  $\hat{H}$  در پایه‌ی  $\{|s, m\rangle\}$  قطری است:

$$E_m = \langle s, m | \hat{H} | s, m \rangle = \frac{\alpha}{\hbar^2} [\hbar^2 s(s+1) - 3\hbar^2 m^2] - \frac{\beta}{\hbar} \hbar m = \frac{15}{4} \alpha - m(3\alpha m + \beta) \quad (129-5)$$

که در آن  $m$  هر یک از چهار مقدار  $\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, -\frac{1}{4}, -\frac{3}{4}$  را می‌گیرد. چون  $E_m$  به  $m$  بستگی دارد. ترازهای انرژی این ذره غیرواکن‌اند.

## ۷-۵ ویژه‌تابع‌های تکانه‌ی زاویه‌ای مداری

اکنون به نمایش مختصه‌ای تکانه‌ی زاویه‌ای برمی‌گردیم. در این بخش، قصد داریم در چارچوب دستگاه مختصات کروی کار کنیم. در اینجا ویژه‌حالت‌های مشترک  $\hat{L}^2$  و  $\hat{L}_z$  را با  $|l, m\rangle$  نمایش می‌دهیم:

$$\hat{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle \quad (130-5)$$

$$\hat{L}_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle \quad (131-5)$$

عملگرهای  $\hat{L}_z$ ،  $\hat{L}_\pm$  و  $\hat{L}^2$  که مؤلفه‌های دکارتی آنها در (۳-۵) تا (۵-۵) مشخص شده‌اند را می‌توان برحسب مختصات کروی بیان کرد (پیوست ب):

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (132-5)$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (133-5)$$

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y = \pm \hbar e^{\pm i\varphi} \left[ \frac{\partial}{\partial \theta} \pm i \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \quad (134-5)$$

چون عملگرهای  $\hat{L}_z$  و  $\hat{L}$  تنها به زاویه‌های  $\theta$  و  $\varphi$  بستگی دارند، ویژه‌حالت‌های آنها نیز تنها به  $\theta$  و  $\varphi$  بستگی دارند. با نشان دادن ویژه‌حالت‌های مشترک آنها با

$$\langle \theta, \varphi | l, m \rangle = Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (۱۳۵-۵)$$

که در آن  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  ها تابع‌های پیوسته‌ای از  $\theta$  و  $\varphi$  هستند، می‌توانیم معادله‌های ویژه‌مقدار (۱۳۰-۵) و (۱۳۱-۵) را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (۱۳۶-۵)$$

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = m \hbar Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (۱۳۷-۵)$$

چون همانطور که در (۱۳۲-۵) نشان داده شده است،  $\hat{L}_z$  تنها به  $\varphi$  بستگی دارد. دو معادله‌ی قبل پیشنهاد می‌کنند که ویژه‌تابع‌های  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  قابل جدا شدن هستند:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\varphi) \quad (۱۳۸-۵)$$

می‌توانیم تحقیق کنیم که

$$\hat{L}_{\pm} Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} Y_{lm \pm 1}(\theta, \varphi) \quad (۱۳۹-۵)$$

### ۱-۷-۵ ویژه‌تابع‌ها و ویژه‌مقدارهای $\hat{L}_z$

با وارد کردن (۱۳۸-۵) در (۱۳۷-۵)، رابطه‌ی  $\hat{L}_z \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\varphi) = m \hbar \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\varphi)$  را به دست می‌آوریم. حال با توجه به  $\hat{L}_z = -i \hbar \partial / \partial \varphi$  معادله‌ی زیر را داریم:

$$-i \hbar \Theta_{lm}(\theta) \frac{\partial \Phi_m(\varphi)}{\partial \varphi} = m \hbar \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\varphi) \quad (۱۴۰-۵)$$

که به معادله‌ی زیر کاهش می‌یابد:

$$-i \frac{\partial \Phi_m(\varphi)}{\partial \varphi} = m \Phi_m(\varphi) \quad (۱۴۱-۵)$$

جواب‌های بهنجار این معادله از رابطه‌ی زیر به دست می‌آیند:

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad (۱۴۲-۵)$$

که در آن  $1/\sqrt{2\pi}$  ثابت بهنجارش است:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \Phi_{m'}^*(\varphi) \Phi_m(\varphi) = \delta_{m',m} \quad (143-5)$$

برای این که  $\Phi_m(\varphi)$  تک‌مقدار باشد، باید برحسب  $\varphi$  دوره‌ای با دوره‌ی  $2\pi$  باشد  $(\Phi_m(\varphi + 2\pi) = \Phi_m(\varphi))$  از این رو

$$e^{im(\varphi+2\pi)} = e^{im\varphi} \quad (144-5)$$

این رابطه نشان می‌دهد که مقدار چشمداشتی  $\hat{L}_z$  ( $l_z = \langle l, m | \hat{L}_z | l, m \rangle$ ) به مجموعه‌ی گسسته‌ای از مقدارهای زیر محدود است:

$$l_z = m\hbar \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (145-5)$$

بنابراین مقدارهای  $m$  از  $-l$  تا  $l$  تغییر می‌کنند:

$$m = -l, -(l-1), -(l-2), \dots, 0, 1, 2, \dots, l-2, l-1, l \quad (146-5)$$

از این رو عدد کوانتومی  $l$  نیز باید یک عدد صحیح باشد که انتظار هم می‌رفت زیرا تکانه زاویه‌ای مداری باید مقدارهای صحیحی داشته باشد.

## ۲-۷-۵ ویژه‌تابع‌های $\hat{L}^2$

حال بیایید بر روی تعیین ویژه‌تابع‌های  $\Theta_{lm}(\theta)$  عملگر  $\hat{L}^2$  متمرکز شویم. قصد داریم تا دو روش را دنبال کنیم. روش نخست شامل معادله‌های دیفرانسیل است و  $\Theta_{lm}(\theta)$  را برحسب تابع‌های شناخته شده‌ی لژاندر وابسته به دست می‌دهد. روش دوم جبری است و با عملگرهای  $\hat{L}_{\pm}$  سروکار دارد و ما را قادر می‌سازد تا به صورت صریح هماهنگ‌های کروی  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  را بسازیم.

### ۱-۲-۷-۵ روش نخست برای تعیین ویژه‌تابع‌های $\hat{L}^2$

با اعمال  $\hat{L}^2$  از (۱۳۳-۵) بر ویژه‌تابع‌های زیر کار را شروع می‌کنیم:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \Theta_{lm}(\theta) e^{im\varphi} \quad (147-5)$$

که رابطه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = -\frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi}} \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \Theta_{lm}(\theta) e^{im\varphi}$$

$$= \frac{\hbar^2 l(l+1)}{\sqrt{2\pi}} \Theta_{lm}(\theta) e^{im\varphi} \quad (148-5)$$

که پس از حذف وابستگی به  $\varphi$ ، به معادله‌ی زیر کاهش می‌یابد:

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin\theta \frac{d\Theta_{lm}(\theta)}{d\theta} \right) + \left[ l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta} \right] \Theta_{lm}(\theta) = 0 \quad (149-5)$$

این معادله به عنوان معادله‌ی دیفرانسیل ژاندر شناخته می‌شود. می‌توان جواب‌های این معادله را برحسب تابع‌های ژاندر وابسته‌ی  $P_l^m(\cos\theta)$  بیان کرد:

$$\Theta_{lm}(\theta) = C_{lm} P_l^m(\cos\theta) \quad (150-5)$$

که به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l(x) \quad (151-5)$$

این رابطه نشان می‌دهد که

$$P_l^{-m}(x) = P_l^m(x) \quad (152-5)$$

که در آن  $P_l(x)$  برابر با امین چندجمله‌ای ژاندر است که به وسیله‌ی فرمول رودریگز تعریف می‌شود:

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l \quad (153-5)$$

بی‌ردنگ می‌توانیم تعدادی از چندجمله‌ای‌های نخست ژاندر را به دست آوریم:

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = \frac{1}{2} \frac{d(x^2 - 1)}{dx} = x \quad (154-5)$$

$$P_2(x) = \frac{1}{8} \frac{d^2(x^2 - 1)^2}{dx^2} = \frac{1}{2} (3x^2 - 1),$$

$$P_3(x) = \frac{1}{48} \frac{d^3(x^2 - 1)^3}{dx^3} = \frac{1}{2} (5x^3 - 3x) \quad (155-5)$$

$$P_4(x) = \frac{1}{8} (35x^4 - 30x^2 + 3),$$

$$P_5(x) = \frac{1}{8} (63x^5 - 70x^3 + 15x) \quad (156-5)$$

چندجمله‌ای‌های ژاندر در رابطه‌های بستاری یا کامل بودن زیر صدق می‌کنند:

$$\frac{1}{2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(x') P_l(x) = \delta(x-x') \quad (157-5)$$



جدول ۱-۵ تعدادی از چندجمله‌ای‌های نخست لژاندر و تابع‌های وابسته‌ی لژاندر.

چندجمله‌ای‌های لژاندر	تابع‌های لژاندر وابسته
$P_0(\cos \theta) = 1$	$P_1^1(\cos \theta) = \sin \theta$
$P_1(\cos \theta) = \cos \theta$	$P_2^1(\cos \theta) = 3 \cos \theta \sin \theta$
$P_2(\cos \theta) = \frac{1}{2}(3 \cos^2 \theta - 1)$	$P_2^2(\cos \theta) = 3 \sin^2 \theta$
$P_3(\cos \theta) = \frac{1}{2}(5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta)$	$P_3^1(\cos \theta) = \frac{3}{2} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1)$
$P_4(\cos \theta) = \frac{1}{8}(35 \cos^4 \theta - 30 \cos^2 \theta + 3)$	$P_4^2(\cos \theta) = 15 \sin^2 \theta \cos \theta$
$P_5(\cos \theta) = \frac{1}{8}(63 \cos^5 \theta - 70 \cos^3 \theta + 15 \cos \theta)$	$P_4^3(\cos \theta) = 15 \sin^3 \theta$

از (۱۵۳-۵) یک‌بار می‌توانیم نتیجه بگیریم:

$$P_l(-x) = (-1)^l P_l(x) \quad (158-5)$$

محاسباتی مشابه به چند تا از تابع‌های نخست لژاندر وابسته می‌انجامد:

$$P_1^1(x) = \sqrt{1-x^2} \quad (159-5)$$

$$P_2^1(x) = 3x\sqrt{1-x^2}, \quad P_2^2(x) = 3(1-x^2) \quad (160-5)$$

$$P_3^1(x) = \frac{3}{2}(5x^2-1)\sqrt{1-x^2}, \quad P_3^2(x) = 15x(1-x^2), \quad P_3^3(x) = 15(1-x^2)^{3/2} \quad (161-5)$$

که در آن  $P_l^m(x) = P_l(x)$  با  $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ . چند عبارت نخست مربوط به تابع‌های لژاندر وابسته و چندجمله‌ای‌های لژاندر در جدول ۱-۵ فهرست شده‌اند. توجه کنید که

$$P_l^m(-x) = (-1)^{l+m} P_l^m(x) \quad (162-5)$$

می‌توان ثابت  $C_{lm}$  رابطه‌ی (۱۵۰-۵) را از شرط متعامد بهنجار بودن تعیین کرد:

$$\langle l', m' | l, m \rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \langle l', m' | \theta, \varphi \rangle \langle \theta, \varphi | l, m \rangle = \delta_{l'l} \delta_{m'm} \quad (163-5)$$

که می‌توان آن را به صورت زیر نوشت:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin \theta Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) = \delta_{l'l} \delta_{m'm} \quad (164-5)$$

این رابطه به عنوان شرط بهنجارش هماهنگ‌های کروی شناخته می‌شود. با استفاده از شکل (۱۴۷-۵) برای  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  رابطه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 = \frac{|C_{lm}|^2}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta |P_l^m(\cos\theta)|^2 = 1 \quad (۱۶۵-۵)$$

از نظریه‌ی تابع‌های لژاندر وابسته داریم:

$$\int_0^\pi d\theta \sin\theta P_l^m(\cos\theta) P_{l'}^m(\cos\theta) = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{ll'} \quad (۱۶۶-۵)$$

که به عنوان شرط بهنجارش تابع‌های لژاندر وابسته شناخته می‌شود. ترکیب دو رابطه‌ی قبل به عبارتی برای ضریب  $C_{lm}$  می‌انجامد:

$$C_{lm} = (-1)^m \sqrt{\left(\frac{2l+1}{2}\right) \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \quad (m \geq 0) \quad (۱۶۷-۵)$$

با وارد کردن این معادله در (۱۵۰-۵) ویژه‌تابع‌های  $\hat{L}^2$  را به دست می‌آوریم:

$$\Theta_{lm}(\theta) = (-1)^m \sqrt{\left(\frac{2l+1}{2}\right) \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) \quad (۱۶۸-۵)$$

سرانجام، می‌توان ویژه‌تابع‌های مشترک  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  عملگرهای  $\hat{L}_z$  و  $\hat{L}^2$  را با جاگذاری (۱۴۲-۵) و (۱۶۸-۵) در (۱۳۸-۵) به دست آورد:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\left(\frac{2l+1}{2\pi}\right) \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi} \quad (m \geq 0) \quad (۱۶۹-۵)$$

که هماهنگ‌های کروی بهنجار نامیده می‌شوند.

### ۲-۲-۷-۵ روش دوم برای تعیین ویژه‌تابع‌های $\hat{L}^2$

روش دوم با ساختن مستقیم  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  سروکار دارد و با حالت  $m = l$  شروع می‌شود (این بیشترین مقدار  $m$  است). در تشابه با جبر عمومی تکانه‌ی زاویه‌ای که در بخش قبل توسعه داده شد، اثر  $\hat{L}_+$  روی  $Y_{ll}$  مقدار صفر را به دست می‌دهد:

$$\langle \theta, \varphi | \hat{L}_+ | l, l \rangle = \hat{L}_+ Y_{ll}(\theta, \varphi) = 0 \quad (۱۷۰-۵)$$

زیرا نمی‌توان  $Y_{ll}$  را به بیشتر از  $Y_{lm_{\max}}$  افزایش داد.

با استفاده از عبارت (۵-۱۳۴) برای  $\hat{L}_+$  در مختصات کروی، می‌توانیم (۵-۱۷۰) را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$\frac{\hbar e^{i\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \left[ \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \Theta_{ll}(\theta) e^{il\varphi} = 0 \quad (5-171)$$

که به معادله‌ی زیر می‌انجامد:

$$\frac{1}{\Theta_{ll}} \frac{\partial \Theta_{ll}(\theta)}{\partial \theta} = l \cot \theta \quad (5-172)$$

جواب این معادله‌ی دیفرانسیل به شکل زیر است:

$$\Theta_{ll}(\theta) = C_l \sin^l \theta \quad (5-173)$$

که در آن  $C_l$  ثابتی است که باید آن را از شرط بهنجارش (۵-۱۶۴) برای  $Y_{ll}(\theta, \varphi)$  تعیین کرد:

$$Y_{ll}(\theta, \varphi) = \frac{C_l}{\sqrt{2\pi}} e^{il\varphi} \sin^l \theta \quad (5-174)$$

می‌توانیم تحقیق کنیم که  $C_l$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$C_l = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{2}} \quad (5-175)$$

از یک سو، اثر  $\hat{L}_-$  روی  $Y_{ll}(\theta, \varphi)$  از رابطه‌ی

$$\hat{L}_- Y_{ll}(\theta, \varphi) = \hbar \sqrt{2l} Y_{l, l-1}(\theta, \varphi) \quad (5-176)$$

و از سوی دیگر، از رابطه‌ی

$$\hat{L}_- Y_{ll}(\theta, \varphi) = \hbar \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{2\pi}} e^{i(l-1)\varphi} (\sin \theta)^{l-1} \frac{d}{d(\cos \theta)} \left[ (\sin \theta)^{2l} \right] \quad (5-177)$$

به دست می‌آید که در آن از مختصات کروی به شکل (۵-۱۳۴) استفاده کرده‌ایم.

به صورت مشابه، می‌توانیم نشان دهیم که از یک سو، اثر  $\hat{L}_-^{l-m}$  روی  $Y_{ll}(\theta, \varphi)$  از

$$\hat{L}_-^{l-m} Y_{ll}(\theta, \varphi) = \hbar^{l-m} \sqrt{\frac{(2l)!(l+m)!}{(l-m)!}} Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (5-178)$$

و از سوی دیگر، از

$$\hat{L}_-^{l-m} Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^{l-m} \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l)!(2l+1)!}{4\pi}} e^{im\varphi} \frac{1}{\sin^m \theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l} \quad (179-5)$$

به دست می‌آید که در آن  $m \geq 0$  است. با مساوی قرار دادن دو رابطه‌ی قبل، عبارت مربوط به هماهنگ‌کروی  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  را به ازای  $m \geq 0$  به دست می‌آوریم:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\left(\frac{2l+1}{4\pi}\right) \frac{(l+m)!}{(l-m)!}} e^{im\varphi} \frac{1}{\sin^m \theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l} \quad (180-5)$$

### ۳-۷-۵ ویژگی‌های هماهنگ‌های کروی

چون هماهنگ‌های کروی  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  ویژه‌تابع‌های مشترک  $\hat{L}_z^2$  و  $\hat{L}_z$  بوده و متعامد بهنجارند، (۱۶۴-۵)، یک پایه‌ی متعامد بهنجار را در فضای هیلبرت تابع‌های انتگرال‌پذیر مجزوری  $\theta$  و  $\varphi$  بنا می‌کنند. رابطه‌ی کامل بودن به صورت زیر است:

$$\sum_{m=-l}^l |l, m\rangle \langle l, m| = 1 \quad (181-5)$$

یا

$$\begin{aligned} \sum_m \langle \theta, \varphi | l, m \rangle \langle l, m | \theta', \varphi' \rangle &= \sum_m Y_{lm}^*(\theta', \varphi') Y_{lm}(\theta, \varphi) = \delta(\cos \theta - \cos \theta') \delta(\varphi - \varphi') \\ &= \frac{\delta(\theta - \theta')}{\sin \theta} \delta(\varphi - \varphi') \end{aligned} \quad (182-5)$$

در اینجا برخی از ویژگی‌های اساسی هماهنگ‌های کروی را یادآوری می‌کنیم. ابتدا این که هماهنگ‌های کروی تابع‌هایی مختلط هستند و مزدوج مختلط آنها از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$[Y_{lm}(\theta, \varphi)]^* = (-1)^m Y_{l, -m}(\theta, \varphi) \quad (183-5)$$

می‌توانیم ثابت کنیم که  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  یک ویژه‌حالت عملگر پاریته  $\hat{P}$  با ویژه‌مقدار  $(-1)^l$  است:

$$\hat{P} Y_{lm}(\theta, \varphi) = Y_{lm}(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (184-5)$$

زیرا بازتاب فضایی حول مبدأ ( $\mathbf{r}' = -\mathbf{r}$ ) متناظر با  $r' = r$ ،  $\theta' = \pi - \theta$  و  $\varphi' = \pi + \varphi$  است که به  $P_l^m(\cos \theta') = P_l^m(-\cos \theta) = (-1)^{l+m} P_l^m(\cos \theta)$  و  $e^{im\varphi'} = e^{im\pi} e^{im\varphi} = (-1)^m e^{im\varphi}$  می‌انجامد.

جدول ۲-۵ هماهنگ‌های کروی و عبارت‌های مربوط به آنها در مختصات دکارتی.

$Y_{lm}(\theta, \varphi)$	$Y_{lm}(x, y, z)$
$Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$	$Y_{00}(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
$Y_{10}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$	$Y_{10}(x, y, z) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r}$
$Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{\pm i\varphi} \sin \theta$	$Y_{1,\pm 1}(x, y, z) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{x \pm iy}{r}$
$Y_{20}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$	$Y_{20}(x, y, z) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \frac{r^2 - 3z^2}{r^2}$
$Y_{2,\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} e^{\pm i\varphi} \sin \theta \cos \theta$	$Y_{2,\pm 1}(x, y, z) = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \frac{(x \pm iy)z}{r^2}$
$Y_{2,\pm 2}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} e^{\pm 2i\varphi} \sin^2 \theta$	$Y_{2,\pm 2}(x, y, z) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \frac{x^2 - y^2 \pm 2ixy}{r^2}$

به سادگی می‌توانیم با در نظر گرفتن  $m = 0$ ، رابطه‌ای بین هماهنگ‌های کروی و چند جمله‌ای‌های لژاندر برقرار کنیم. آنگاه معادله‌ی (۱۸۵-۵) نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$Y_{l0}(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^l}{\sqrt{4\pi}} \sqrt{\frac{2l+1}{2l!}} \frac{d^l}{d(\cos \theta)^l} (\sin \theta)^{2l} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta) \quad (185-5)$$

با

$$P_l(\cos \theta) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d(\cos \theta)^l} (\cos^2 \theta - 1)^l \quad (186-5)$$

از عبارت مربوط به  $Y_{lm}$  می‌توانیم ثابت کنیم که

$$Y_{lm}(0, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \delta_{m,0} \quad (187-5)$$

عبارت‌های مربوط به هماهنگ‌های کروی متناظر با  $l = 0, 1, 2$  در جدول ۲-۵ فهرست شده‌اند.

### هماهنگ‌های کروی در مختصات دکارتی

توجه کنید که می‌توان  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  را برحسب مختصات دکارتی نیز بیان کرد. برای این کار، تنها باید جاگذاری‌های زیر را در عبارت مربوط به  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  انجام دهیم:

$$\sin \theta \cos \varphi = \frac{x}{r}, \quad \sin \theta \sin \varphi = \frac{y}{r}, \quad \cos \theta = \frac{z}{r} \quad (188-5)$$

برای روشن شدن موضوع، بیایید نشان دهیم که چگونه عبارت‌های دکارتی مربوط به  $Y_{1,\pm 1}$  و  $Y_{10}$  به دست می‌آیند. با جاگذاری  $\cos \theta = z/r$  در  $Y_{10}(\theta, \varphi) = \sqrt{3/4\pi} \cos \theta Y_{10}$  داریم:

$$Y_{10}(x, y, z) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \quad (189-5)$$

با استفاده از  $\sin \theta \cos \varphi = x/r$  و  $\sin \theta \sin \varphi = y/r$  رابطه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$\frac{x \pm iy}{r} = \sin \theta \cos \varphi \pm i \sin \theta \sin \varphi = \sin \theta e^{\pm i\varphi} \quad (۱۹۰-۵)$$

که هنگامی که در  $Y_{\lambda, \pm \lambda}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{3/\lambda\pi} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$  جاگذاری شود، به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$Y_{\lambda, \pm \lambda}(x, y, z) = \mp \sqrt{\frac{3}{\lambda\pi}} \frac{x \pm iy}{r} \quad (۱۹۱-۵)$$

به همین شکل می‌توانیم عبارت‌های دکارتی را برای هماهنگ‌های باقیمانده به دست آوریم (جدول ۲-۵ را ببینید).

### مثال ۵-۵ (کاربرد عملگرهای نردبانی در هماهنگ‌های کروی)

(الف) از رابطه‌ی  $Y_{l_0}(\theta, \varphi) = \sqrt{(2l+1)/4\pi} P_l(\cos \theta)$  برای یافتن عبارتی برای  $Y_{3_0}(\theta, \varphi)$  استفاده کنید.

(ب) عبارت مربوط به  $Y_{3_0}$  را در مختصات دکارتی بیابید.

(پ) از عبارت مربوط به  $Y_{3_0}(\theta, \varphi)$  برای به دست آوردن  $Y_{3, \pm 1}(\theta, \varphi)$  استفاده کنید.

حل

(الف) از جدول ۱-۵ داریم:  $P_3(\cos \theta) = \frac{1}{4}(\Delta \cos^3 \theta - 3 \cos \theta)$  ازاین‌رو

$$Y_{3_0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} P_3(\cos \theta) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (\Delta \cos^3 \theta - 3 \cos \theta) \quad (۱۹۲-۵)$$

(ب) چون  $\cos \theta = z/r$  است، داریم:  $\Delta \cos^3 \theta - 3 \cos \theta = \Delta \cos \theta (\Delta \cos^2 \theta - 3) = \Delta \cos \theta z (\Delta z^2 - 3r^2)/r^3$  ازاین‌رو

$$Y_{3_0}(x, y, z) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \frac{z}{r^3} (\Delta z^2 - 3r^2) \quad (۱۹۳-۵)$$

(پ) برای یافتن  $Y_{3_1}$  از  $Y_{3_0}$  باید عملگر نردبانی  $\hat{L}_+$  را به دو روش روی  $Y_{3_0}$  اثر دهیم. ابتدا به صورت جبری داریم:

$$\hat{L}_+ Y_{3_0} = \hbar \sqrt{3(3+1)} Y_{3_1} = 2\hbar \sqrt{3} Y_{3_1} \quad (۱۹۴-۵)$$

و ازاین‌رو

$$Y_{3_1} = \frac{1}{2\hbar \sqrt{3}} \hat{L}_+ Y_{3_0} \quad (۱۹۵-۵)$$

سپس از شکل دیفرانسیلی (۱۳۴-۵) عملگر  $\hat{L}_+$  استفاده می‌کنیم:

$$\begin{aligned} \hat{L}_+ Y_{3,0}(\theta, \varphi) &= \hbar e^{i\varphi} \left[ \frac{\partial}{\partial \theta} + i \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] Y_{3,0}(\theta, \varphi) \\ &= \hbar \sqrt{\frac{7}{16\pi}} e^{i\varphi} \left[ \frac{\partial}{\partial \theta} + i \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] (\Delta \cos^2 \theta - 3 \cos \theta) \quad (196-5) \\ &= -3\hbar \sqrt{\frac{7}{16\pi}} \sin \theta (\Delta \cos^2 \theta - 1) e^{i\varphi} \end{aligned}$$

با وارد کردن (۱۹۶-۵) در (۱۹۵-۵) به نتیجه‌ی زیر می‌رسیم:

$$Y_{3,1} = \frac{1}{2\hbar\sqrt{3}} \hat{L}_+ Y_{3,0} = -\sqrt{\frac{21}{64\pi}} \sin \theta (\Delta \cos^2 \theta - 1) e^{i\varphi} \quad (197-5)$$

حال برای یافتن  $Y_{3,-1}$  از  $Y_{3,0}$  نیز باید  $\hat{L}_-$  را به دو روش روی  $Y_{3,0}$  اثر دهیم:

$$\hat{L}_- Y_{3,0} = \hbar \sqrt{3(3+1)} Y_{3,-1} = 2\hbar\sqrt{3} Y_{3,-1} \quad (198-5)$$

و ازاین‌رو

$$Y_{3,-1} = \frac{1}{2\hbar\sqrt{3}} \hat{L}_- Y_{3,0} \quad (199-5)$$

سپس از شکل دیفرانسیلی (۱۳۴-۵) عملگر  $\hat{L}_-$  استفاده می‌کنیم:

$$\begin{aligned} \hat{L}_- Y_{3,0}(\theta, \varphi) &= -\hbar e^{-i\varphi} \left[ \frac{\partial}{\partial \theta} - i \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] Y_{3,0}(\theta, \varphi) \\ &= -\hbar \sqrt{\frac{7}{16\pi}} e^{-i\varphi} \left[ \frac{\partial}{\partial \theta} - i \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] (\Delta \cos^2 \theta - 3 \cos \theta) \quad (200-5) \\ &= 3\hbar \sqrt{\frac{7}{16\pi}} \sin \theta (\Delta \cos^2 \theta - 1) e^{-i\varphi} \end{aligned}$$

با وارد کردن (۲۰۰-۵) در (۱۹۹-۵) رابطه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$Y_{3,-1} = \frac{1}{2\hbar\sqrt{3}} \hat{L}_- Y_{3,0} = \sqrt{\frac{21}{64\pi}} \sin \theta (\Delta \cos^2 \theta - 1) e^{-i\varphi} \quad (201-5)$$

## ۸-۵ مسأله‌های حل شده

## مسأله‌ی ۱-۵

(الف) نشان دهید که  $\Delta J_x \Delta J_y = \hbar^2 [j(j+1) - m^2] / 2$  در آن  $\langle \hat{J}_x \rangle = \langle \hat{J}_y \rangle = 0$  و مشابه این رابطه برای  $\Delta J_y$  نیز برقرار است.

(ب) نشان دهید که این رابطه با رابطه‌ی  $\Delta J_x \Delta J_y \geq (\hbar/2) |\langle \hat{J}_z \rangle| = \hbar^2 m/2$  سازگار است.

حل

(الف) ابتدا توجه کنید که  $\langle \hat{J}_x \rangle$  و  $\langle \hat{J}_y \rangle$  صفرند زیرا

$$\langle \hat{J}_x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle j, m | \hat{J}_+ | j, m \rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \langle j, m | \hat{J}_- | j, m \rangle = 0 \quad (202-5)$$

در رابطه با  $\langle \hat{J}_x^2 \rangle$  و  $\langle \hat{J}_y^2 \rangle$  باید گفت که از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$\langle \hat{J}_x^2 \rangle = \frac{1}{4} \langle (\hat{J}_+ + \hat{J}_-)^2 \rangle = \frac{1}{4} \langle \hat{J}_+^2 + \hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+ + \hat{J}_-^2 \rangle \quad (203-5)$$

$$\langle \hat{J}_y^2 \rangle = -\frac{1}{4} \langle (\hat{J}_+ - \hat{J}_-)^2 \rangle = -\frac{1}{4} \langle \hat{J}_+^2 - \hat{J}_+ \hat{J}_- - \hat{J}_- \hat{J}_+ + \hat{J}_-^2 \rangle \quad (204-5)$$

چون  $\langle \hat{J}_+^2 \rangle = \langle \hat{J}_-^2 \rangle = 0$  است، می‌بینیم که

$$\langle \hat{J}_x^2 \rangle = \frac{1}{4} \langle \hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+ \rangle = \langle \hat{J}_y^2 \rangle \quad (205-5)$$

با استفاده از این واقعیت که

$$\langle \hat{J}_x^2 \rangle + \langle \hat{J}_y^2 \rangle = \langle \hat{J}^2 \rangle - \langle \hat{J}_z^2 \rangle \quad (206-5)$$

همراه با  $\langle \hat{J}_x^2 \rangle = \langle \hat{J}_y^2 \rangle$ ، می‌بینیم که

$$\langle \hat{J}_x^2 \rangle = \langle \hat{J}_y^2 \rangle = \frac{1}{2} [\langle \hat{J}^2 \rangle - \langle \hat{J}_z^2 \rangle] \quad (207-5)$$

حال با توجه به این که  $|j, m\rangle$  یک ویژه‌حالت مشترک  $\hat{J}_z^2$  و  $\hat{J}_z$  با ویژه‌مقدارهای  $\hbar^2 j(j+1)$  و  $m\hbar$  است، به آسانی می‌توانیم ببینیم که عبارت‌های  $\langle \hat{J}_x^2 \rangle$  و  $\langle \hat{J}_y^2 \rangle$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آیند:

$$\langle \hat{J}_x^2 \rangle = \langle \hat{J}_y^2 \rangle = \frac{1}{2} [\langle \hat{J}^2 \rangle - \langle \hat{J}_z^2 \rangle] = \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - m^2] \quad (208-5)$$

از این رو  $\Delta J_x \Delta J_y$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\Delta J_x \Delta J_y = \sqrt{\langle \hat{J}_x^2 \rangle \langle \hat{J}_y^2 \rangle} = \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - m^2] \quad (209-5)$$



(ب) چون  $j \geq m$  است (زیرا  $j, j-1, \dots, -j+1, -j, m = -j$ )، داریم:

$$j(j+1) - m^2 \geq m(m+1) - m^2 = m \quad (۲۱۰-۵)$$

که از آن نتیجه می‌گیریم که  $\Delta J_x \Delta J_y \geq \hbar^2 m/2$  است یا

$$\Delta J_x \Delta J_y \geq \frac{\hbar}{2} |\langle \hat{J}_z \rangle| \quad (۲۱۱-۵)$$

## مسأله‌ی ۲-۵

ترازهای انرژی ذره‌ی آزاد (به استثنای اینکه مقید به حرکت بر روی سطح کره‌ای به شعاع  $r$  باشد) را بیابید.

حل

این سیستم از ذره‌ای تشکیل شده است که محدود به حرکت روی سطح یک کره است ولی تحت تأثیر هیچ پتانسیل دیگری نیست و یک چرخنده‌ی صلب نامیده می‌شود. چون  $V = 0$  است، انرژی این سیستم صرفاً جنبشی است و هامیلتونی چرخنده برابر است با

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2I} \quad (۲۱۲-۵)$$

که در آن  $I = mr^2$  گشتاور لختی ذره نسبت به مبدا است. در به‌دست آوردن این رابطه از این واقعیت

$$\text{استفاده کرده‌ایم که } H = p^2/2m = (rp)^2/2mr^2 = L^2/2I \text{ زیرا } L = |\mathbf{r} \times \mathbf{p}| = rp$$

تابع موج سیستم به وضوح مستقل از درجه‌ی آزادی شعاعی است زیرا شعاع ثابت است. بنابراین معادله‌ی شرودینگر از رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آید:

$$\hat{H}\psi(\theta, \varphi) = \frac{\hat{L}^2}{2I}\psi(\theta, \varphi) = E\psi(\theta, \varphi) \quad (۲۱۳-۵)$$

چون ویژه‌حالت‌های  $\hat{L}^2$  هماهنگ‌های کروی  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  هستند، ویژه‌مقدارهای انرژی متناظر از رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آیند:

$$E_l = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1) \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (۲۱۴-۵)$$

و معادله‌ی شرودینگر به‌صورت زیر در می‌آید:

$$\frac{\hat{L}^2}{2I} Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (۲۱۵-۵)$$

توجه کنید که ترازهای انرژی به عدد کوانتومی سمتی  $m$  بستگی ندارند. این به این معنی است که  $(2l+1)$  ویژه‌تابع  $Y_{l-1}, Y_{l-1+1}, \dots, Y_{l-1}, Y_l$  متناظر با همان انرژی وجود دارد. بنابراین هر تراز انرژی  $E_l$  یک

تراز با واگنی  $(l + 1)$  گانه است. این ناشی از این واقعیت است که هامیلتونی چرخنده  $(\hat{L}^2/2I)$  با  $\hat{L}_z$  جابه‌جا می‌شود. یعنی هامیلتونی مستقل از جهت‌گیری  $\hat{L}_z$  در فضا است از این رو طیف انرژی به مؤلفه‌ی  $\hat{L}_z$  در جهت خاصی بستگی ندارد.

### مسئله‌ی ۳-۵

ترازهای انرژی چرخشی یک مولکول دو اتمی را بیابید.

حل

دو مولکول به جرم‌های  $m_1$  و  $m_2$  که در فاصله‌ی ثابت  $r$  از یکدیگر قرار دارند را در نظر بگیرید. فرض کنید  $r_1$  و  $r_2$  فاصله‌ی هر یک از این مولکول‌ها از مرکز جرم باشد یعنی  $m_1 r_1 = m_2 r_2$  است. گشتاور لختی مولکول دو اتمی برابر است با

$$I = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2 \equiv \mu r^2 \quad (216-5)$$

که در آن  $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$  و  $\mu$  جرم کاهش یافته‌ی آنها است  $(\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2))$ . تکانه‌ی زاویه‌ای کل از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$|\hat{L}| = m_1 r_1 r_1 \omega + m_2 r_2 r_2 \omega = I \omega = \mu r^2 \omega \quad (217-5)$$

و هامیلتونی برابر است با

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2I} = \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} \quad (218-5)$$

معادله‌ی ویژه‌مقدار متناظر

$$\hat{H}|l, m\rangle = \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2}|l, m\rangle = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}|l, m\rangle \quad (219-5)$$

شان می‌دهد که ویژه‌مقدارهای انرژی واگن  $(l + 1)$  گانه هستند و از رابطه‌ی زیر به دست می‌آیند:

$$E_l = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \quad (220-5)$$

### مسئله‌ی ۴-۵

(الف) ویژه‌مقدارها و ویژه‌حالت‌های عملگر اسپین  $\hat{S}$  یک الکترون در جهتی با بردار یکه‌ی  $\mathbf{n}$  را بیابید. فرض کنید  $\mathbf{n}$  در صفحه‌ی  $xz$  قرار دارد.

(ب) احتمال اندازه‌گیری  $\hat{S}_z = +\hbar/2$  را بیابید.

حل

(الف) در این پرسش می‌خواهیم معادله‌ی زیر را حل کنیم:

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{S} |\lambda\rangle = \frac{\hbar}{2} \lambda |\lambda\rangle \quad (۲۲۱-۵)$$

که در آن  $\mathbf{n}$  از رابطه‌ی  $\mathbf{n} = (\sin \theta \mathbf{i} + \cos \theta \mathbf{k})$  به دست می‌آید زیرا این بردار در صفحه‌ی  $xz$  با  $0 \leq \theta \leq \pi$  قرار دارد. بنابراین می‌توانیم بنویسیم:

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{S} = (\sin \theta \mathbf{i} + \cos \theta \mathbf{k}) \cdot (S_x \mathbf{i} + S_y \mathbf{j} + S_z \mathbf{k}) = S_x \sin \theta + S_z \cos \theta \quad (۲۲۲-۵)$$

با استفاده از ماتریس‌های اسپین

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (۲۲۳-۵)$$

می‌توانیم (۲۲۲-۵) را به شکل ماتریسی زیر بنویسیم:

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \sin \theta + \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \cos \theta = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (۲۲۴-۵)$$

قطری کردن این ماتریس به معادله‌ی مشخصه‌ی زیر می‌انجامد:

$$-\frac{\hbar^2}{4} (\cos \theta - \lambda)(\cos \theta + \lambda) - \frac{\hbar^2}{4} \sin^2 \theta = 0 \quad (۲۲۵-۵)$$

که همانطور که انتظار می‌رفت، به نوبه‌ی خود به ویژه‌مقدارهای  $\lambda = \pm 1$  می‌انجامد.

می‌توان ویژه‌بردار متناظر با  $\lambda = 1$  را از معادله‌ی زیر به دست آورد:

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (۲۲۶-۵)$$

می‌توان این معادله‌ی ماتریسی را به تک‌معادله‌ی زیر کاهش داد:

$$a \sin \frac{1}{2} \theta = b \cos \frac{1}{2} \theta \quad (۲۲۷-۵)$$

با ترکیب این معادله با شرط بهنجارش  $|a|^2 + |b|^2 = 1$  نتیجه می‌گیریم که  $a = \cos \frac{1}{2} \theta$  و  $b = \sin \frac{1}{2} \theta$

است از این رو ویژه‌بردار متناظر با  $\lambda = 1$  برابر است با

$$|\lambda_+\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \end{pmatrix} \quad (۲۲۸-۵)$$

به صورت مشابه و به آسانی می‌توانیم ویژه‌بردار به‌ازای  $\lambda = -1$  را به دست آوریم:

$$|\lambda_{-}\rangle = \begin{pmatrix} -\sin(\theta/2) \\ \cos(\theta/2) \end{pmatrix} \quad (229-5)$$

(ب) بیابید  $|\lambda_{\pm}\rangle$  رابطه‌های (5-228) و (5-229) را برحسب ویژه‌بردارهای اسپین بالا و اسپین پایین

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ و } |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ بنویسیم:}$$

$$|\lambda_{+}\rangle = \cos \frac{1}{2}\theta \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \sin \frac{1}{2}\theta \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (230-5)$$

$$|\lambda_{-}\rangle = -\sin \frac{1}{2}\theta \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \cos \frac{1}{2}\theta \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (231-5)$$

می‌بینیم که احتمال اندازه‌گیری  $\hat{S}_z = +\hbar/2$  برابر است با

$$\left| \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| \lambda_{+} \right\rangle \right|^2 = \cos^2 \frac{1}{2}\theta \quad (232-5)$$

### مسأله‌ی ۵-۵

(الف) ویژه‌مقدارها و ویژه‌حالت‌های عملگر اسپین  $\hat{S}$  یک الکترون در جهتی با بردار یکه‌ی  $\mathbf{n}$  را بیابید که در آن  $\mathbf{n}$  دلخواه است.

(ب) احتمال اندازه‌گیری  $\hat{S}_z = -\hbar/2$  را بیابید.

(پ) با فرض آن که ویژه‌بردارهای اسپین محاسبه شده در (الف) متناظر با  $t = 0$  است، این ویژه‌بردارها را در لحظه‌ی  $t$  بیابید.

حل

(الف) باید معادله‌ی زیر را حل کنیم:

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{S} |\lambda\rangle = \frac{\hbar}{2} \lambda |\lambda\rangle \quad (233-5)$$

که در آن  $\mathbf{n}$  یک بردار یکه در جهتی دلخواه است و در مختصات کروی از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \varphi) \mathbf{i} + (\sin \theta \sin \varphi) \mathbf{j} + (\cos \theta) \mathbf{k} \quad (234-5)$$

با  $0 \leq \theta \leq \pi$  و  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ . بنابراین می‌توانیم بنویسیم:

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \cdot \mathbf{S} &= (\sin \theta \cos \varphi \mathbf{i} + \sin \theta \sin \varphi \mathbf{j} + \cos \theta \mathbf{k}) \cdot (S_x \mathbf{i} + S_y \mathbf{j} + S_z \mathbf{k}) \\ &= S_x \sin \theta \cos \varphi + S_y \sin \theta \sin \varphi + S_z \cos \theta \end{aligned} \quad (235-5)$$

با استفاده از ماتریس‌های اسپین می‌توانیم این معادله را به شکل ماتریسی زیر بنویسیم:

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \cdot \mathbf{S} &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi + \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \sin \theta \sin \varphi + \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \cos \theta \\ &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta (\cos \varphi - i \sin \varphi) \\ \sin \theta (\cos \varphi + i \sin \varphi) & -\cos \theta \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\varphi} \sin \theta \\ e^{i\varphi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (236-5)$$

قطری کردن این ماتریس به معادله‌ی مشخصه‌ی زیر می‌انجامد:

$$-\frac{\hbar^2}{4} (\cos \theta - \lambda)(\cos \theta + \lambda) - \frac{\hbar^2}{4} \sin^2 \theta = 0 \quad (237-5)$$

که به نوبه‌ی خود به ویژه‌مقدارهای  $\lambda = \pm 1$  می‌انجامد.

می‌توان ویژه‌بردار متناظر با  $\lambda = 1$  را از معادله‌ی زیر به دست آورد:

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\varphi} \sin \theta \\ e^{i\varphi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (238-5)$$

که به

$$a \cos \theta + b^{-i\varphi} \sin \theta = a \quad (239-5)$$

یا

$$a(1 - \cos \theta) = b e^{-i\varphi} \sin \theta \quad (240-5)$$

می‌انجامد. با استفاده از رابطه‌های  $\sin \theta = 2 \cos \frac{1}{2}\theta \sin \frac{1}{2}\theta$  و  $1 - \cos \theta = 2 \sin^2 \frac{1}{2}\theta$

زیر را داریم:

$$b = a \tan \frac{1}{2}\theta e^{i\varphi} \quad (241-5)$$

با ترکیب کردن این معادله با شرط بهنجارش  $|a|^2 + |b|^2 = 1$ ، نتیجه‌ی  $a = \cos \frac{1}{2}\theta$  و  $b = e^{i\varphi} \sin \frac{1}{2}\theta$  را به دست می‌آوریم. بنابراین ویژه‌بردار متناظر با  $\lambda = 1$  برابر است با

$$|\lambda_+\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ e^{i\varphi} \sin(\theta/2) \end{pmatrix} \quad (242-5)$$

محاسباتی مشابه به ویژه بردار به‌ازای  $\lambda = -1$  می‌انجامد:

$$|\lambda_{-}\rangle = \begin{pmatrix} -\sin(\theta/2) \\ e^{i\varphi} \cos(\theta/2) \end{pmatrix} \quad (243-5)$$

(ب)  $|\lambda_{-}\rangle$  از رابطه‌ی (243-5) را برحسب  $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$  و  $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$  می‌نویسیم:

$$|\lambda_{+}\rangle = \cos \frac{1}{2}\theta \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + e^{i\varphi} \sin \frac{1}{2}\theta \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (244-5)$$

$$|\lambda_{-}\rangle = -\sin \frac{1}{2}\theta \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + e^{i\varphi} \cos \frac{1}{2}\theta \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (245-5)$$

آنگاه می‌توانیم احتمال اندازه‌گیری  $S_z = -\hbar/2$  را به‌دست آوریم:

$$\left| \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| \lambda_{-} \right\rangle \right|^2 = \cos^2 \frac{1}{2}\theta \quad (246-5)$$

(ب) ویژه‌حالت‌های اسپین در لحظه‌ی  $t$  از رابطه‌های زیر به‌دست می‌آیند:

$$|\lambda_{+}(t)\rangle = e^{-iE_{+}t/\hbar} \cos \frac{1}{2}\theta \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + e^{i(\varphi - E_{-}t/\hbar)} \sin \frac{1}{2}\theta \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (247-5)$$

$$|\lambda_{-}(t)\rangle = -e^{-iE_{+}t/\hbar} \sin \frac{1}{2}\theta \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + e^{i(\varphi - E_{-}t/\hbar)} \cos \frac{1}{2}\theta \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (248-5)$$

که در آنها  $E_{\pm}$  به ترتیب ویژه‌مقدارهای انرژی متناظر با حالت اسپین بالا و اسپین پایین هستند.

### مسئله‌ی ۶-۵

هامیلتونی یک سیستم برابر با  $\hat{H} = \varepsilon \sigma \cdot \mathbf{n}$  است که در آن  $\varepsilon$  ثابتی است که دارای ابعاد انرژی و  $\mathbf{n}$  یک بردار یکه‌ی دلخواه است و  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  ماتریس‌های پائولی هستند.

(الف) ویژه‌مقدارهای انرژی و ویژه‌بردارهای بهنجار  $\hat{H}$  را بیابید.

(ب) ماتریس تبدیلی که  $\hat{H}$  را قطری می‌کند، بیابید.

حل

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

(الف) با استفاده از ماتریس‌های پائولی  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  و عبارت مربوط به بردار یکه‌ی دلخواه در مختصات کروی  $\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \varphi)\mathbf{i} + (\sin \theta \sin \varphi)\mathbf{j} + (\cos \theta)\mathbf{k}$  می‌توانیم هامیلتونی

$$\hat{H} = \varepsilon \sigma \cdot \mathbf{n} = \varepsilon (\sigma_x \sin \theta \cos \varphi + \sigma_y \sin \theta \sin \varphi + \sigma_z \cos \theta) \quad (249-5)$$

را به شکل ماتریسی زیر بازنویسی کنیم:

$$\hat{H} = \varepsilon \begin{pmatrix} \cos \theta & \exp(-i\varphi) \sin \theta \\ \exp(i\varphi) \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (250-5)$$

ویژه‌مقدارهای  $\hat{H}$  از حل معادله‌ی مشخصه‌ی  $\det(H - E) = 0$  یا

$$(\varepsilon \cos \theta - E)(-\varepsilon \cos \theta - E) - \varepsilon^2 \sin^2 \theta = 0 \quad (251-5)$$

به دست می‌آیند که دو ویژه‌مقدار انرژی  $E_1 = \varepsilon$  و  $E_2 = -\varepsilon$  را نتیجه می‌دهد. ویژه‌تابع‌های انرژی از

$$\varepsilon \begin{pmatrix} \cos \theta & \exp(-i\varphi) \sin \theta \\ \exp(i\varphi) \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad (252-5)$$

به دست می‌آیند. به ازای حالت  $E = E_1 = \varepsilon$ ، این معادله نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$(\cos \theta - 1)x + y \sin \theta \exp(-i\varphi) = 0 \quad (253-5)$$

که به نوبه‌ی خود به

$$\frac{x}{y} = \frac{\sin \theta \exp(-i\varphi)}{1 - \cos \theta} = \frac{\cos \theta/2 \exp(-i\varphi/2)}{\sin \theta/2 \exp(i\varphi/2)} \quad (254-5)$$

می‌انجامد. از این رو

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp(-i\varphi/2) \cos(\theta/2) \\ \exp(i\varphi/2) \sin(\theta/2) \end{pmatrix} \quad (255-5)$$

این بردار بهنجار است. به صورت مشابه، در حالتی که در آن  $E = E_2 = -\varepsilon$  است، می‌توانیم نشان دهیم که ویژه‌برداری بهنجار دوم برابر است با

$$\begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\exp(-i\varphi/2) \sin(\theta/2) \\ \exp(i\varphi/2) \cos(\theta/2) \end{pmatrix} \quad (256-5)$$

(ب) ماتریس تبدیل  $\hat{U}$  که  $\hat{H}$  را قطری می‌کند را می‌توان از دو ویژه‌برداری به دست آمده در قسمت (الف) به دست آورد:  $U_{11} = x_1$ ،  $U_{21} = y_1$ ،  $U_{12} = x_2$  و  $U_{22} = y_2$ . یعنی

$$U = \begin{pmatrix} \exp(-i\varphi/2) \cos(\theta/2) & -\exp(-i\varphi/2) \sin(\theta/2) \\ \exp(i\varphi/2) \sin(\theta/2) & \exp(i\varphi/2) \cos(\theta/2) \end{pmatrix} \quad (257-5)$$

توجه کنید که این ماتریس یکانی است زیرا  $U^\dagger = U^{-1}$  و  $\det(U) = 1$  است. می‌توانیم تحقیق کنیم که

$$\hat{U} \hat{H} \hat{U}^\dagger = \begin{pmatrix} \varepsilon & 0 \\ 0 & -\varepsilon \end{pmatrix} \quad (258-5)$$

### مسئله‌ی ۷-۵

سیستمی با تکانه‌ی زاویه‌ای کل  $J = 1$  را در نظر بگیرید. همانطور که در (۷۳-۵) و (۷۵-۵) نشان داده شد، عملگرهای  $\hat{J}_x$ ،  $\hat{J}_y$  و  $\hat{J}_z$  از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$\hat{J}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{J}_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{J}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (259-5)$$

(الف) مقدارهای ممکن هنگام اندازه‌گیری  $\hat{J}_x$  چقدرند؟

(ب) اگر سیستم در حالت  $J_x = -\hbar$  باشد آنگاه  $\langle \hat{J}_z \rangle$ ،  $\langle \hat{J}_z^2 \rangle$  را محاسبه کنید.

(پ) قسمت (ب) را برای  $\langle \hat{J}_y \rangle$ ،  $\langle \hat{J}_y^2 \rangle$  و  $\Delta J_y$  تکرار کنید.

(ت) هرگاه سیستم در ابتدا در حالت  $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{14}} \begin{pmatrix} -\sqrt{3} \\ 2\sqrt{2} \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}$  باشد آنگاه هنگام اندازه‌گیری  $\hat{J}_x$  چه

مقدارهایی و با چه احتمال‌هایی به دست خواهند آمد؟

### حل

(الف) طبق اصل موضوعی ۲ از فصل ۳، نتیجه‌ی اندازه‌گیری‌ها از ویژه‌مقدارهای کمیت اندازه‌گیری شده

به دست می‌آیند. در اینجا ویژه‌مقدارهای  $\hat{J}_x$  (که از قطری کردن ماتریس  $J_x$  به دست می‌آیند) برابرند با

$J_x = -\hbar, 0, \hbar$  و ویژه‌حالت‌های (بهنجار) مربوط به آنها عبارتند از

$$|-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix}, \quad |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (260-5)$$

(ب) هرگاه سیستم در حالت  $J_x = -\hbar$  باشد آنگاه ویژه‌حالت آن از  $|-1\rangle$  به دست می‌آید. در این

حالت  $\langle \hat{J}_z \rangle$  و  $\langle \hat{J}_z^2 \rangle$  از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$\langle -1 | \hat{J}_z | -1 \rangle = \frac{\hbar}{4} (-1 \quad \sqrt{2} \quad -1) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix} = 0 \quad (261-5)$$



$$\langle -1 | \hat{J}_z^2 | -1 \rangle = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} -1 & \sqrt{2} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{2} \quad (262-5)$$

بنابراین عدم قطعیت  $\Delta J_z$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\Delta J_z = \sqrt{\langle -1 | \hat{J}_z^2 | -1 \rangle - \langle -1 | \hat{J}_z | -1 \rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2}} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \quad (263-5)$$

(پ) با دنبال کردن همان روند قسمت (ب) داریم:

$$\langle -1 | \hat{J}_y | -1 \rangle = \frac{\hbar}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & \sqrt{2} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix} = 0 \quad (264-5)$$

$$\langle -1 | \hat{J}_y^2 | -1 \rangle = \frac{\hbar^2}{8} \begin{pmatrix} -1 & \sqrt{2} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{2} \quad (265-5)$$

ازین رو

$$\Delta J_y = \sqrt{\langle -1 | \hat{J}_y^2 | -1 \rangle - \langle -1 | \hat{J}_y | -1 \rangle^2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \quad (266-5)$$

(ت) به صورت زیر می‌توانیم  $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{12}} \begin{pmatrix} -\sqrt{3} \\ 2\sqrt{2} \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}$  را برحسب ویژه حالت‌های (۵-۲۶۰) بیان کنیم:

$$\frac{1}{\sqrt{12}} \begin{pmatrix} -\sqrt{3} \\ 2\sqrt{2} \\ \sqrt{3} \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix} + \sqrt{\frac{3}{5}} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \sqrt{\frac{2}{5}} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (267-5)$$

یا

$$|\psi\rangle = \sqrt{\frac{2}{5}} | -1 \rangle + \sqrt{\frac{3}{5}} | 0 \rangle + \sqrt{\frac{2}{5}} | 1 \rangle \quad (268-5)$$

اندازه‌گیری  $\hat{J}_x$  روی سیستمی که در ابتدا در حالت (۵-۲۶۸) است، مقدار  $J_x = -\hbar$  را با احتمال زیر نتیجه می‌دهد:

$$P_{-1} = |\langle -1 | \psi \rangle|^2 = \left| \sqrt{\frac{2}{5}} \langle -1 | -1 \rangle + \sqrt{\frac{3}{5}} \langle -1 | 0 \rangle + \sqrt{\frac{2}{5}} \langle -1 | 1 \rangle \right|^2 = \frac{2}{5} \quad (269-5)$$

زیرا  $\langle -1|1 \rangle = \langle -1|0 \rangle = \langle -1|-1 \rangle = 1$  و احتمال به‌دست آوردن مقادیرهای  $j_x = 0$  و  $j_x = \hbar$  به ترتیب برابر است با

$$P_0 = |\langle 0|\psi \rangle|^2 = \left| \sqrt{\frac{3}{4}} \langle 0|0 \rangle \right|^2 = \frac{3}{4}, \quad P_1 = |\langle 1|\psi \rangle|^2 = \left| \sqrt{\frac{1}{4}} \langle 1|1 \rangle \right|^2 = \frac{1}{4} \quad (270-5)$$

### مسأله‌ی ۸-۵

ذره‌ای با تکانه‌ی زاویه‌ای کل  $J = 1$  را در نظر بگیرید. ماتریس مربوط به مؤلفه‌ی  $J$  در امتداد یک بردار یکه با جهت اختیاری  $\mathbf{n}$  را بیابید. ویژه‌مقادیرها و ویژه‌بردارهای آن را بیابید.

حل

چون  $\mathbf{J} = J_x \mathbf{i} + J_y \mathbf{j} + J_z \mathbf{k}$  و  $\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \varphi) \mathbf{i} + (\sin \theta \sin \varphi) \mathbf{j} + (\cos \theta) \mathbf{k}$  مؤلفه‌ی  $J$  در امتداد  $\mathbf{n}$  برابر است با

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{J} = J_x \sin \theta \cos \varphi + J_y \sin \theta \sin \varphi + J_z \cos \theta \quad (271-5)$$

با  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$  و  $0 \leq \theta \leq \pi$  ماتریس‌های  $J_x$ ،  $J_y$  و  $J_z$  از (۲۵۹-۵) به‌دست می‌آیند. بنابراین می‌توانیم این معادله را به شکل ماتریسی زیر بنویسیم:

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \cdot \mathbf{J} &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi + \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \sin \theta \sin \varphi \\ &+ \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cos \theta = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{2} \cos \theta & e^{-i\varphi} \sin \theta & 0 \\ e^{i\varphi} \sin \theta & 0 & e^{-i\varphi} \sin \theta \\ 0 & e^{i\varphi} \sin \theta & -\sqrt{2} \cos \theta \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (272-5)$$

قطری کردن این ماتریس به ویژه‌مقادیرهای  $\lambda_1 = -\hbar$ ،  $\lambda_2 = 0$  و  $\lambda_3 = \hbar$  می‌انجامد. ویژه‌بردارهای متناظر برابرند با

$$|\lambda_1\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (1 - \cos \theta) e^{-i\varphi} \\ -\frac{2}{\sqrt{2}} \sin \theta \\ (1 + \cos \theta) e^{i\varphi} \end{pmatrix}, \quad |\lambda_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi} \sin \theta \\ \sqrt{2} \cos \theta \\ e^{i\varphi} \sin \theta \end{pmatrix}, \quad (273-5)$$

$$|\lambda_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} (1 + \cos \theta)e^{-i\varphi} \\ \frac{r}{\sqrt{r}} \sin \theta \\ (1 - \cos \theta)e^{i\varphi} \end{pmatrix} \quad (274-5)$$

### مسأله‌ی ۹-۵

سیستمی را در نظر بگیرید که در ابتدا در حالت زیر قرار دارد:

$$\psi(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{5}} Y_{1,-1}(\theta, \varphi) + \sqrt{\frac{3}{5}} Y_{1,0}(\theta, \varphi) + \frac{1}{\sqrt{5}} Y_{1,1}(\theta, \varphi)$$

(الف)  $\langle \psi | \hat{L}_+ | \psi \rangle$  را بیابید.

(ب) اگر اندازه‌گیری شود آنگاه چه مقدارهایی و با چه احتمال‌هایی به دست خواهند آمد؟

(پ) اگر پس از اندازه‌گیری  $\hat{L}_z$  مقدار  $l_z = -\hbar$  را به دست آوریم آنگاه عدم قطعیت‌های  $\Delta L_x$  و  $\Delta L_y$  و حاصل ضرب  $\Delta L_x \Delta L_y$  آنها را محاسبه کنید.

حل

(الف) از نمادگذاری سبک‌تری برای  $|\psi\rangle$  استفاده می‌کنیم:  $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} |1, -1\rangle + \sqrt{\frac{3}{5}} |1, 0\rangle + \frac{1}{\sqrt{5}} |1, 1\rangle$ . از (۵۶-۵) می‌توانیم بنویسیم:  $\langle \psi | \hat{L}_+ | \psi \rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} |l, m+1\rangle$  از این رو تنها جمله‌هایی که در  $\langle \psi | \hat{L}_+ | \psi \rangle$  باقی می‌مانند، عبارتند از

$$\langle \psi | \hat{L}_+ | \psi \rangle = \frac{\sqrt{3}}{5} \langle 1, 0 | \hat{L}_+ | 1, -1 \rangle + \frac{\sqrt{3}}{5} \langle 1, 1 | \hat{L}_+ | 1, 0 \rangle = \frac{2\sqrt{6}}{5} \hbar \quad (275-5)$$

زیرا  $\langle 1, 0 | \hat{L}_+ | 1, -1 \rangle = \langle 1, 1 | \hat{L}_+ | 1, 0 \rangle = \sqrt{2} \hbar$ .

(ب) اگر  $\hat{L}_z$  اندازه‌گیری شود آنگاه سه مقدار  $0, \hbar, -\hbar$  را خواهیم یافت. احتمال یافتن مقدار  $-\hbar$  برابر است با

$$P_{-1} = |\langle 1, -1 | \psi \rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{5}} \langle 1, -1 | 1, -1 \rangle + \sqrt{\frac{3}{5}} \langle 1, -1 | 1, 0 \rangle + \frac{1}{\sqrt{5}} \langle 1, -1 | 1, 1 \rangle \right|^2 = \frac{1}{5} \quad (276-5)$$

زیرا  $\langle 1, -1 | 1, 1 \rangle = 0$  و  $\langle 1, -1 | 1, 0 \rangle = 1$  و  $\langle 1, -1 | 1, -1 \rangle = 0$  است. به صورت مشابه، می‌توانیم ثابت کنیم که احتمال اندازه‌گیری  $0$  و  $l_z = \hbar$  به ترتیب برابرند با

$$P_0 = |\langle 1, 0 | \psi \rangle|^2 = \left| \sqrt{\frac{3}{5}} \langle 1, 0 | 1, 0 \rangle \right|^2 = \frac{3}{5} \quad (277-5)$$

$$P_1 = |\langle 1, 1 | \psi \rangle|^2 = \left| \sqrt{\frac{1}{5}} \langle 1, 1 | 1, 1 \rangle \right|^2 = \frac{1}{5} \quad (278-5)$$

(پ) پس از اندازه‌گیری  $l_z = -\hbar$  سیستم در ویژه‌حالت  $|1, -1\rangle$  خواهد بود یعنی  $\hat{L}_x^\psi, \hat{L}_y^\psi, \hat{L}_x^\psi$  چشمداشتی  $|1, -1\rangle$  استفاده از  $\langle 1, -1 | \hat{L}_y | 1, -1 \rangle = \langle 1, -1 | \hat{L}_x | 1, -1 \rangle = 0$  تقارن نیازمند آن است که  $\hat{L}_y^\psi$  را محاسبه کنیم. همانطور که در (۶۰-۵) نشان داده شد، مقدارهای چشمداشتی  $\hat{L}_x^\psi$  و  $\hat{L}_y^\psi$  با هم برابرند و از رابطه‌ی زیر به دست می‌آیند:

$$\langle \hat{L}_x^\psi \rangle = \langle \hat{L}_y^\psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [\langle \hat{L}_y^\psi \rangle - \langle \hat{L}_z^\psi \rangle] = \frac{\hbar^2}{\sqrt{2}} [l(l+1) - m^2] = \frac{\hbar^2}{\sqrt{2}} \quad (279-5)$$

در این رابطه از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که  $l = 1$  و  $m = -1$  است. بنابراین

$$\Delta L_x = \sqrt{\langle \hat{L}_x^2 \rangle} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} = \Delta L_y \quad (280-5)$$

و حاصل ضرب عدم قطعیت‌های  $\Delta L_x \Delta L_y$  برابر است با

$$\Delta L_x \Delta L_y = \sqrt{\langle \hat{L}_x^\psi \rangle \langle \hat{L}_y^\psi \rangle} = \frac{\hbar^2}{2} \quad (281-5)$$

### مسئله‌ی ۵-۱۰

زاویه‌ی بین تکانه‌ی زاویه‌ای  $l = 4$  و محور  $z$  را برای تمام جهت‌گیری‌های ممکن بیابید.

حل

چون  $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$  است و زاویه‌ی بین تکانه‌ی زاویه‌ای مدار  $l$  و محور  $z$  برابر با  $\cos \theta_{ml} = m_l / \sqrt{l(l+1)}$  داریم:

$$\theta_{ml} = \cos^{-1} \left[ \frac{m_l}{\sqrt{l(l+1)}} \right] = \cos^{-1} \left[ \frac{m_l}{2\sqrt{5}} \right] \quad (282-5)$$

از این رو

$$\theta_0 = \cos^{-1}(0) = 90^\circ \quad (283-5)$$

$$\theta_1 = \cos^{-1} \left[ \frac{1}{2\sqrt{5}} \right] = 77,08^\circ, \quad \theta_2 = \cos^{-1} \left[ \frac{2}{2\sqrt{5}} \right] = 63,43^\circ \quad (284-5)$$

$$\theta_3 = \cos^{-1} \left[ \frac{3}{2\sqrt{5}} \right] = 47,87^\circ, \quad \theta_4 = \cos^{-1} \left[ \frac{4}{2\sqrt{5}} \right] = 26,57^\circ \quad (285-5)$$

می‌توان زاویه‌های مربوط به عددهای کوانتومی باقیمانده‌ی ۱، -۲، -۳، -۴ را یک‌باره از رابطه‌ی زیر نتیجه گرفت:

$$\theta_{-ml} = 180^\circ - \theta_{ml} \quad (286-5)$$

ازاین‌رو

$$\theta_{-1} = 180^\circ - 77,08^\circ = 102,92^\circ, \quad \theta_{-2} = 180^\circ - 63,43^\circ = 116,57^\circ \quad (287-5)$$

$$\theta_{-3} = 180^\circ - 47,87^\circ = 132,13^\circ, \quad \theta_{-4} = 180^\circ - 26,57^\circ = 153,43^\circ \quad (288-5)$$

### مسأله‌ی ۱۱-۵

با استفاده از  $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$ ، رابطه‌های جابه‌جایی گوناگون بین عملگرهای زیر<sup>۲</sup> را محاسبه کنید:

$$\hat{T}_1 = \frac{1}{4}(\hat{P}^2 - \hat{X}^2), \quad \hat{T}_2 = \frac{1}{4}(\hat{X}\hat{P} + \hat{P}\hat{X}), \quad \hat{T}_3 = \frac{1}{4}(\hat{P}^2 + \hat{X}^2)$$

حل

می‌توان عملگرهای  $\hat{T}_1$ ،  $\hat{T}_2$  و  $\hat{T}_3$  را به مثابه نوعی ارتعاش جمعی در نظر گرفت.  $\hat{T}_3$  دارای ساختار هامیلتونی نوسانگر هماهنگ است. می‌توان جابه‌جاگر نخست را به صورت زیر محاسبه کرد:

$$[\hat{T}_1, \hat{T}_2] = \frac{1}{4}[\hat{P}^2 - \hat{X}^2, \hat{T}_2] = \frac{1}{4}[\hat{P}^2, \hat{T}_2] - \frac{1}{4}[\hat{X}^2, \hat{T}_2] \quad (289-5)$$

که در آن با استفاده از رابطه‌ی جابه‌جایی  $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$  داریم:

$$\begin{aligned} [\hat{P}^2, \hat{T}_2] &= \frac{1}{4}[\hat{P}^2, \hat{X}\hat{P}] + \frac{1}{4}[\hat{P}^2, \hat{P}\hat{X}] \\ &= \frac{1}{4}\hat{P}[\hat{P}, \hat{X}\hat{P}] + \frac{1}{4}[\hat{P}, \hat{X}\hat{P}]\hat{P} + \frac{1}{4}\hat{P}[\hat{P}, \hat{P}\hat{X}] + \frac{1}{4}[\hat{P}, \hat{P}\hat{X}]\hat{P} \\ &= \frac{1}{4}\hat{P}[\hat{P}, \hat{X}]\hat{P} + \frac{1}{4}[\hat{P}, \hat{X}]\hat{P}^2 + \frac{1}{4}\hat{P}^2[\hat{P}, \hat{X}] + \frac{1}{4}\hat{P}[\hat{P}, \hat{X}]\hat{P} \\ &= -\frac{i\hbar}{4}\hat{P}^2 - \frac{i\hbar}{4}\hat{P}^2 - \frac{i\hbar}{4}\hat{P}^2 - \frac{i\hbar}{4}\hat{P}^2 = -i\hbar\hat{P}^2 \end{aligned} \quad (290-5)$$

$$\begin{aligned}
 [\hat{X}^2, \hat{T}_\nu] &= \frac{1}{\nu} [\hat{X}^2, \hat{X}\hat{P}] + \frac{1}{\nu} [\hat{X}^2, \hat{P}\hat{X}] \\
 &= \frac{1}{\nu} \hat{X} [\hat{X}, \hat{X}\hat{P}] + \frac{1}{\nu} [\hat{X}, \hat{X}\hat{P}] \hat{X} + \frac{1}{\nu} \hat{X} [\hat{X}, \hat{P}\hat{X}] + \frac{1}{\nu} [\hat{X}, \hat{P}\hat{X}] \hat{X} \\
 &= \frac{1}{\nu} \hat{X}^2 [\hat{X}, \hat{P}] + \frac{1}{\nu} \hat{X} [\hat{P}, \hat{X}] \hat{X} + \frac{1}{\nu} \hat{X} [\hat{X}, \hat{P}] \hat{X} + \frac{1}{\nu} [\hat{X}, \hat{P}] \hat{X}^2 \\
 &= \frac{i\hbar}{\nu} \hat{X}^2 + \frac{i\hbar}{\nu} \hat{X}^2 + \frac{i\hbar}{\nu} \hat{X}^2 + \frac{i\hbar}{\nu} \hat{X}^2 = i\hbar \hat{X}^2
 \end{aligned}
 \tag{۲۹۱-۵}$$

ازاین رو

$$[\hat{T}_\nu, \hat{T}_\nu] = \frac{1}{\nu} [\hat{P}^2 - \hat{X}^2, \hat{T}_\nu] = -\frac{1}{\nu} (i\hbar \hat{P}^2 + i\hbar \hat{X}^2) = -i\hbar \hat{T}_\nu
 \tag{۲۹۲-۵}$$

جابه‌جاگر دوم به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$[\hat{T}_\nu, \hat{T}_\nu] = \frac{1}{\nu} [\hat{T}_\nu, \hat{P}^2 + \hat{X}^2] = \frac{1}{\nu} [\hat{T}_\nu, \hat{P}^2] + \frac{1}{\nu} [\hat{T}_\nu, \hat{X}^2]
 \tag{۲۹۳-۵}$$

که در آن  $[\hat{T}_\nu, \hat{P}^2]$  و  $[\hat{T}_\nu, \hat{X}^2]$  در (۲۹۰-۵) و (۲۹۱-۵) محاسبه شده‌اند:

$$[\hat{T}_\nu, \hat{P}^2] = i\hbar \hat{P}^2, \quad [\hat{T}_\nu, \hat{X}^2] = -i\hbar \hat{X}^2
 \tag{۲۹۴-۵}$$

بنابراین داریم:

$$[\hat{T}_\nu, \hat{T}_\nu] = \frac{1}{\nu} (i\hbar \hat{P}^2 - i\hbar \hat{X}^2) = i\hbar \hat{T}_\nu
 \tag{۲۹۵-۵}$$

جابه‌جاگر سوم برابر است با

$$[\hat{T}_\nu, \hat{T}_\nu] = \frac{1}{\nu} [\hat{T}_\nu, \hat{P}^2 - \hat{X}^2] = \frac{1}{\nu} [\hat{T}_\nu, \hat{P}^2] - \frac{1}{\nu} [\hat{T}_\nu, \hat{X}^2]
 \tag{۲۹۶-۵}$$

که در آن

$$\begin{aligned}
 [\hat{T}_\nu, \hat{P}^2] &= \frac{1}{\nu} [\hat{P}^2, \hat{P}^2] + \frac{1}{\nu} [\hat{X}^2, \hat{P}^2] = \frac{1}{\nu} [\hat{X}^2, \hat{P}^2] = \frac{1}{\nu} \hat{X} [\hat{X}, \hat{P}^2] + \frac{1}{\nu} [\hat{X}, \hat{P}^2] \hat{X} \\
 &= \frac{1}{\nu} \hat{X} \hat{P} [\hat{X}, \hat{P}] + \frac{1}{\nu} \hat{X} [\hat{X}, \hat{P}] \hat{P} + \frac{1}{\nu} \hat{P} [\hat{X}, \hat{P}] \hat{X} + \frac{1}{\nu} [\hat{X}, \hat{P}] \hat{P} \hat{X} \\
 &= \frac{i\hbar}{\nu} (2\hat{X}\hat{P} + 2\hat{P}\hat{X}) = \frac{i\hbar}{\nu} (\hat{X}\hat{P} + \hat{P}\hat{X})
 \end{aligned}
 \tag{۲۹۷-۵}$$

$$[\hat{T}_\nu, \hat{X}^2] = \frac{1}{\nu} [\hat{P}^2, \hat{X}^2] + \frac{1}{\nu} [\hat{X}^2, \hat{X}^2] = \frac{1}{\nu} [\hat{P}^2, \hat{X}^2] = -\frac{i\hbar}{\nu} (\hat{X}\hat{P} + \hat{P}\hat{X})
 \tag{۲۹۸-۵}$$

از این رو

$$\begin{aligned}
 [\hat{T}_z, \hat{T}_x] &= \frac{1}{\hbar} [\hat{T}_z, \hat{P}^2] - \frac{1}{\hbar} [\hat{T}_z, \hat{X}^2] = \frac{i\hbar}{\hbar} (\hat{X}\hat{P} + \hat{P}\hat{X}) + \frac{i\hbar}{\hbar} (\hat{X}\hat{P} + \hat{P}\hat{X}) \\
 &= \frac{i\hbar}{\hbar} (\hat{X}\hat{P} + \hat{P}\hat{X}) = i\hbar\hat{T}_y \quad (۲۹۹-۵)
 \end{aligned}$$

در مجموع، رابطه‌های جابه‌جایی بین  $\hat{T}_x, \hat{T}_y, \hat{T}_z$  برابرند با

$$[\hat{T}_x, \hat{T}_y] = -i\hbar\hat{T}_z, \quad [\hat{T}_y, \hat{T}_z] = i\hbar\hat{T}_x, \quad [\hat{T}_z, \hat{T}_x] = i\hbar\hat{T}_y \quad (۳۰۰-۵)$$

این رابطه‌ها مشابه با رابطه‌های مربوط به تکانه‌ی زاویه‌ای معمولی هستند به استثنای علامت منفی در  $[\hat{T}_x, \hat{T}_y] = -i\hbar\hat{T}_z$ .

### مسئله‌ی ۱۲-۵

ذره‌ای را در نظر بگیرید که تابع موج آن به صورت زیر است:

$$\psi(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{z^2 - x^2 - y^2}{r^2} + \sqrt{\frac{3}{\pi}} \frac{xz}{r^2}$$

(الف)  $\hat{L}_z\psi(x, y, z)$  و  $\hat{L}^2\psi(x, y, z)$  را محاسبه کنید. تکانه‌ی زاویه‌ای کل این ذره را بیابید.

(ب)  $\langle \psi | \hat{L}_+ | \psi \rangle$  و  $\hat{L}_+\psi(x, y, z)$  را محاسبه کنید.

(پ) هرگاه اندازه‌گیری مؤلفه‌ی  $z$  تکانه‌ی زاویه‌ای مداری انجام گیرد آنگاه احتمال‌های متناظر با یافتن نتیجه‌های  $\hbar, 0$  و  $-\hbar$  را بیابید.

(ت) احتمال یافتن ذره در مکان  $\theta = \pi/3$  و  $\varphi = \pi/2$  در محدوده‌ی  $d\theta = 0.03 \text{ rad}$  و  $d\varphi = 0.03 \text{ rad}$  چقدر است؟

حل

(الف) چون  $Y_{2,0}(x, y, z) = \sqrt{5/16\pi}(3z^2 - r^2)/r^2$  و  $Y_{2,\pm 1}(x, y, z) = \mp \sqrt{15/8\pi}(x \pm iy)z/r^2$  می‌توانیم بنویسیم:

$$\frac{(z^2 - x^2 - y^2)}{r^2} = \frac{(3z^2 - r^2)}{r^2} = \sqrt{\frac{16\pi}{5}} Y_{2,0} \quad \text{و} \quad \frac{xz}{r^2} = \sqrt{\frac{2\pi}{15}} (Y_{2,-1} - Y_{2,1}) \quad (۳۰۱-۵)$$

از این رو

$$\psi(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sqrt{\frac{16\pi}{5}} Y_{2,0} + \sqrt{\frac{3}{\pi}} \sqrt{\frac{2\pi}{15}}$$

$$(Y_{2,-1} - Y_{21}) = \frac{1}{\sqrt{5}} Y_{20} + \sqrt{\frac{2}{5}} (Y_{2,-1} - Y_{21}) \quad (302-5)$$

حال با بیان  $\psi$  برحسب هماهنگ‌های کروی، به آسانی می‌توانیم بنویسیم:

$$\hat{L}^2 \psi(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{5}} \hat{L}^2 Y_{20} + \sqrt{\frac{2}{5}} \hat{L}^2 (Y_{2,-1} - Y_{21}) = 6\hbar^2 \psi(x, y, z) \quad (303-5)$$

و

$$\hat{L}_z \psi(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{5}} \hat{L}_z Y_{20} + \sqrt{\frac{2}{5}} \hat{L}_z (Y_{2,-1} - Y_{21}) = -\hbar \sqrt{\frac{2}{5}} \hat{L}_z (Y_{2,-1} + Y_{21}) \quad (304-5)$$

این رابطه‌ها نشان می‌دهند که  $\psi(x, y, z)$  یک ویژه‌حالت  $\hat{L}^2$  با ویژه‌مقدار  $6\hbar^2$  است ولی ویژه‌حالت  $\hat{L}_z$  نیست. بنابراین تکانه‌ی زاویه‌ای کل ذره برابر است با

$$\sqrt{\langle \psi | \hat{L}^2 | \psi \rangle} = \sqrt{6}\hbar \quad (305-5)$$

(ب) با استفاده از رابطه‌ی  $\hat{L}_+ Y_{lm} = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} Y_{l, m+1}$  داریم:

$$\begin{aligned} \hat{L}_+ \psi(x, y, z) &= \frac{1}{\sqrt{5}} \hat{L}_+ Y_{20} + \sqrt{\frac{2}{5}} \hat{L}_+ (Y_{2,-1} - Y_{21}) \\ &= \hbar \sqrt{\frac{6}{5}} Y_{21} + \hbar \sqrt{\frac{2}{5}} (\sqrt{6} Y_{20} - 2Y_{22}) \end{aligned} \quad (306-5)$$

ازاین‌رو

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{L}_+ | \psi \rangle &= \left[ \frac{1}{\sqrt{5}} \langle 2, 0 | + \sqrt{\frac{2}{5}} (\langle 2, -1 | - \langle 2, 1 |) \right] \\ &\times \left[ \hbar \sqrt{\frac{6}{5}} Y_{21} + \hbar \sqrt{\frac{2}{5}} (\sqrt{6} Y_{20} - 2Y_{22}) \right] \\ &= 0 \end{aligned} \quad (307-5)$$

(پ) چون  $|\psi\rangle = (1/\sqrt{5}) Y_{20} + \sqrt{2/5} (Y_{2,-1} - Y_{21})$  است، محاسبه‌ی  $\langle \psi | \hat{L}_z | \psi \rangle$  نتیجه‌های زیر را می‌دهد:

$$\langle \psi | \hat{L}_z | \psi \rangle = 0 \quad \text{با احتمال} \quad P_0 = \frac{1}{5} \quad (308-5)$$

$$\langle \psi | \hat{L}_z | \psi \rangle = -\hbar \quad \text{با احتمال} \quad P_{-1} = \frac{2}{5} \quad (309-5)$$



$$\langle \psi | \hat{L}_z | \psi \rangle = \hbar \quad \text{با احتمال} \quad P_1 = \frac{2}{5} \quad (310-5)$$

(ت) چون به صورت زیر می‌توان  $\psi(x, y, z) = (1/4\sqrt{\pi})(2z^2 - x^2 - y^2)/r^2 + \sqrt{3/\pi}xz/r^2$  برحسب مختصات کروی نوشت:

$$\psi(\theta, \varphi) = \frac{1}{4\sqrt{\pi}}(3 \cos^2 \theta - 1) + \sqrt{\frac{3}{\pi}} \sin \theta \cos \theta \cos \varphi \quad (311-5)$$

احتمال یافتن ذره در مکان  $\theta$  و  $\varphi$  برابر است با

$$P(\theta, \varphi) = |\psi(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi$$

$$= \left[ \frac{1}{4\sqrt{\pi}}(3 \cos^2 \theta - 1) + \sqrt{\frac{3}{\pi}} \sin \theta \cos \theta \cos \varphi \right]^2 \sin \theta d\theta d\varphi \quad (312-5)$$

ازاین رو

$$P\left(\frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{3}\right) = \left[ \frac{1}{4\sqrt{\pi}}\left(3 \cos^2 \frac{\pi}{3} - 1\right) + 0 \right]^2 (\pi/3)^2 \sin \frac{\pi}{3} = 9.7 \times 10^{-7} \quad (313-5)$$

### مسأله‌ی ۱۳-۵

ذره‌ای با اسپین  $s = 3/2$  را در نظر بگیرید.

(الف) ماتریس‌های نمایش دهنده‌ی عملگرهای  $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$  و  $\hat{S}_x^2$  و  $\hat{S}_y^2$  را در پایه‌ی  $\hat{S}_z$  و  $\hat{S}^2$  بیابید.

(ب) هنگامی که هامیلتونی این ذره به صورت زیر است:

$$\hat{H} = \frac{\varepsilon_0}{\hbar^2}(\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2) - \frac{\varepsilon_0}{\hbar} \hat{S}_z$$

که در آن  $\varepsilon_0$  ثابتی است که دارای ابعاد انرژی است، ترازهای انرژی این ذره را بیابید. آیا این ترازها واگن‌اند؟

(پ) اگر سیستم در ابتدا در ویژه‌حالت  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$  باشد آنگاه حالت سیستم را در زمان  $t$  بیابید.

حل

(الف) با پیگیری همان روندی که به (۷۳-۵) و (۷۵-۵) انجامید، می‌توانیم ثابت کنیم که به‌ازای  $s = 3/2$

داریم:

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix} \quad (314-5)$$

$$\hat{S}_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (315-5)$$

که هنگامی که با  $\hat{S}_x = (\hat{S}_+ + \hat{S}_-)/2$  و  $\hat{S}_y = i(\hat{S}_- - \hat{S}_+)/2$  ترکیب شوند، به ماتریس‌های زیر می‌انجامند:

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y = \frac{i\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -\sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix} \quad (316-5)$$

بنابراین داریم:

$$\hat{S}_x^2 = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 3 & 0 & 2\sqrt{3} & 0 \\ 0 & 7 & 0 & 2\sqrt{3} \\ 2\sqrt{3} & 0 & 7 & 0 \\ 0 & 2\sqrt{3} & 0 & 3 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y^2 = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 3 & 0 & -2\sqrt{3} & 0 \\ 0 & 7 & 0 & -2\sqrt{3} \\ -2\sqrt{3} & 0 & 7 & 0 \\ 0 & -2\sqrt{3} & 0 & 3 \end{pmatrix} \quad (317-5)$$

(ب) آنگاه هامیلتونی از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\hat{H} = \frac{\epsilon_0}{\hbar^2} (\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2) - \frac{\epsilon_0}{\hbar} \hat{S}_z = \frac{1}{2} \epsilon_0 \begin{pmatrix} -3 & 0 & 2\sqrt{3} & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 2\sqrt{3} \\ 2\sqrt{3} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2\sqrt{3} & 0 & 3 \end{pmatrix} \quad (318-5)$$

قطری کردن این هامیلتونی، ویژه‌مقدارهای انرژی زیر را نتیجه می‌دهد:

$$E_1 = -\frac{5}{2} \epsilon_0, \quad E_2 = -\frac{3}{2} \epsilon_0, \quad E_3 = \frac{3}{2} \epsilon_0, \quad E_4 = \frac{5}{2} \epsilon_0. \quad (319-5)$$

ویژه بردارهای بهنجار متناظر عبارتند از

$$|1\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\sqrt{3} \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |2\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ -\sqrt{3} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, |3\rangle = \frac{1}{\sqrt{12}} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 0 \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix}, |4\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix} \quad (320-5)$$

هیچ‌یک از ترازهای انرژی واگن نیستند. (پ) چون به صورت زیر می‌توان حالت اولیه  $|\psi_0\rangle$  را برحسب ویژه بردارهای (۳۲۰-۵) نوشت:

$$|\psi_0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = -\frac{\sqrt{3}}{2}|1\rangle + \frac{1}{2}|3\rangle \quad (321-5)$$

ویژه تابع در زمان بعدی  $t$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= -\frac{\sqrt{3}}{2}|1\rangle e^{-iE_1 t/\hbar} + \frac{1}{2}|3\rangle e^{-iE_3 t/\hbar} \\ &= -\frac{\sqrt{3}}{4} \begin{pmatrix} -\sqrt{3} \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \exp\left[\frac{5i\varepsilon_0 t}{2\hbar}\right] + \frac{1}{2\sqrt{12}} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 0 \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix} \exp\left[-\frac{3i\varepsilon_0 t}{2\hbar}\right] \end{aligned} \quad (322-5)$$

### ۹-۵ تمرین‌ها

۱. (الف) رابطه‌های جابه‌جایی زیر را نشان دهید:

$$\begin{aligned} [\hat{Y}, \hat{L}_y] &= 0, & [\hat{Y}, \hat{L}_z] &= i\hbar\hat{X}, & [\hat{Y}, \hat{L}_x] &= -i\hbar\hat{Z} \\ [\hat{Z}, \hat{L}_z] &= 0, & [\hat{Z}, \hat{L}_x] &= i\hbar\hat{Y}, & [\hat{Z}, \hat{L}_y] &= -i\hbar\hat{X} \end{aligned}$$

(ب) با استفاده از جایگشت چرخه‌ای  $xyz$ ، نتیجه‌های (الف) را برای نتیجه‌گیری عبارت‌های مربوط به  $[\hat{X}, \hat{L}_y]$ ،  $[\hat{X}, \hat{L}_z]$  و  $[\hat{X}, \hat{L}_x]$  به کار ببرید.  
 (پ) از نتیجه‌های (الف) و (ب) برای محاسبه‌ی  $[\hat{R}^2, \hat{L}_x]$ ،  $[\hat{R}^2, \hat{L}_y]$  و  $[\hat{R}^2, \hat{L}_z]$  استفاده کنید که در آنها  $\hat{R}^2 = \hat{X}^2 + \hat{Y}^2 + \hat{Z}^2$  است.

۲. (الف) رابطه‌های جابه‌جایی زیر را نشان دهید:

$$[\hat{P}_y, \hat{L}_y] = 0, \quad [\hat{P}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{P}_x, \quad [\hat{P}_y, \hat{L}_x] = -i\hbar\hat{P}_z$$

$$[\hat{P}_z, \hat{L}_z] = 0, \quad [\hat{P}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{P}_y, \quad [\hat{P}_z, \hat{L}_y] = -i\hbar\hat{P}_x$$

(ب) از نتیجه‌های (الف) برای نتیجه‌گیری عبارت‌های مربوط به  $[\hat{P}_x, \hat{L}_x]$ ،  $[\hat{P}_x, \hat{L}_y]$  و  $[\hat{P}_x, \hat{L}_z]$  به وسیله‌ی جایگشت چرخه‌ای استفاده کنید.

(پ) از نتیجه‌های (الف) و (ب) برای محاسبه‌ی  $[\hat{P}^2, \hat{L}_x]$ ،  $[\hat{P}^2, \hat{L}_y]$  و  $[\hat{P}^2, \hat{L}_z]$  استفاده کنید که در آنها  $\hat{P}^2 = \hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2$  است.

۳. اگر  $\hat{L}_\pm$  و  $\hat{R}_\pm$  به صورت  $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$  و  $\hat{R}_\pm = \hat{X} \pm i\hat{Y}$  تعریف شوند آنگاه جابه‌جاگرهای (الف)  $[\hat{L}_\pm, \hat{R}_\pm] = \pm 2\hbar\hat{Z}$  و (ب)  $[\hat{L}_\pm, \hat{R}_\mp] = 0$  را ثابت کنید.

۴. اگر  $\hat{L}_\pm$  و  $\hat{R}_\pm$  به صورت  $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$  و  $\hat{R}_\pm = \hat{X} \pm i\hat{Y}$  تعریف شوند آنگاه جابه‌جاگرهای (الف)  $[\hat{L}_\pm, \hat{Z}] = \mp\hbar\hat{R}_\pm$  و (ب)  $[\hat{L}_z, \hat{R}_\pm] = \pm\hbar\hat{R}_\pm$  و (پ)  $[\hat{L}_z, \hat{Z}] = 0$  را ثابت کنید.

۵. دو رابطه‌ی  $\hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = 0$  و  $\hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = 0$  را ثابت کنید.

۶. هامیلتونی ناشی از برهمکنش ذره‌ای با اسپین  $\mathbf{S}$  با میدان مغناطیسی  $\mathbf{B}$  از رابطه‌ی  $\hat{H} = -\mathbf{S} \cdot \mathbf{B}$  به دست می‌آید که در آن  $\mathbf{S}$  اسپین است. جابه‌جاگر  $[\mathbf{S}, \hat{H}]$  را محاسبه کنید.

۷. رابطه‌ی زیر را ثابت کنید:

$$[\hat{L}_z, \cos \varphi] = i\hbar \sin \varphi$$

که در آن  $\varphi$  زاویه‌ی سمتی است.

۸. رابطه‌ی زیر را ثابت کنید:

$$[\hat{L}_z, \sin^2 \varphi] = 2i\hbar(\sin^2 \varphi - \cos^2 \varphi)$$

که در آن  $\varphi$  زاویه‌ی سمتی است. راهنمایی:  $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}$ .

۹. با استفاده از ویژگی‌های  $\hat{J}_+$  و  $\hat{J}_-$ ،  $|j, \pm j\rangle$  و  $|j, \pm m\rangle$  را به صورت تابع‌هایی از اثر  $\hat{J}_\pm$  به ترتیب روی حالت‌های  $|j, \pm m\rangle$  و  $|j, \pm j\rangle$  محاسبه کنید.

۱۰. عملگر  $\hat{A} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{J}_x\hat{J}_y + \hat{J}_y\hat{J}_x)$  را در نظر بگیرید.

(الف) مقدار چشمداشتی  $\hat{A}$  و  $\hat{A}^2$  را نسبت به حالت  $|j, m\rangle$  محاسبه کنید.

(ب) از نتیجه‌ی (الف) برای یافتن عبارتی برای  $\hat{A}^2$  برحسب  $\hat{J}_x^2, \hat{J}_y^2, \hat{J}_z^2, \hat{J}_+^2$  و  $\hat{J}_-^2$  استفاده کنید.  
۱۱. تابع موج زیر را در نظر بگیرید:

$$\psi(\theta, \varphi) = 3 \sin \theta \cos \theta e^{i\varphi} - 2(1 - \cos^2 \theta) e^{2i\varphi}$$

(الف)  $\psi(\theta, \varphi)$  را برحسب هماهنگ‌های کروی بنویسید.

(ب) عبارت به‌دست آمده در (الف) را برحسب مختصات دکارتی بنویسید.

(پ) آیا  $\psi(\theta, \varphi)$  یک ویژه‌حالت  $\hat{L}^2$  یا  $\hat{L}_z$  است؟

(ت) احتمال اندازه‌گیری  $2\hbar$  را برای مؤلفه‌ی  $z$  تکانه‌ی زاویه‌ای مداری بیابید.

۱۲. نشان دهید که  $2\hbar^2 i \varphi = \hat{L}_z(\cos^2 \varphi - \sin^2 \varphi + 2i \sin \varphi \cos \varphi) = 2\hbar^2 i \varphi$  که در آن  $\varphi$  زاویه‌ی سمتی است.

۱۳. عبارت‌هایی برای هماهنگ‌های کروی  $Y_{3,0}(\theta, \varphi)$  و  $Y_{3,\pm 1}(\theta, \varphi)$ :

$$Y_{3,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{7/16\pi} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta),$$

$$Y_{3,\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{21/64\pi} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) e^{\pm i\varphi}$$

برحسب مختصات دکارتی  $x, y$  و  $z$  بیابید.

۱۴. (الف) نشان دهید که مقدرهای چشمداشتی بین حالت‌های  $|l, m\rangle$  که در ادامه می‌آیند، در رابطه‌های  $\langle \hat{L}_x \rangle = \langle \hat{L}_y \rangle = 0$  و  $\langle \hat{L}_x^2 \rangle = \langle \hat{L}_y^2 \rangle = \frac{1}{4} [l(l+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2]$  صدق می‌کنند.

(ب) نامساوی  $\Delta L_x \Delta L_y \geq \hbar^2 m/2$  را ثابت کنید که در آن  $\Delta L_x = \sqrt{\langle \hat{L}_x^2 \rangle - \langle \hat{L}_x \rangle^2}$ .

۱۵. ذره‌ای به جرم  $m$  در انتهای یک میله‌ی صلب به جرم ناچیز و طول  $R$  محکم شده است. انتهای دیگر میله در صفحه‌ی  $xy$  حول محور  $z$  می‌چرخد.

(الف) انرژی کل سیستم را برحسب تکانه‌ی زاویه‌ای  $L$  آن بنویسید.

(ب) معادله‌ی شرودینگر مستقل از زمان سیستم را بنویسید. راهنمایی: در مختصات کروی تنها  $\varphi$  تغییر می‌کند.

(پ) این معادله را برای ترازهای انرژی ممکن سیستم، برحسب  $m$  و گشتاور لختی  $I = mR^2$  حل کنید.

(ت) توضیح دهید که چرا انرژی نقطه‌ی صفر وجود ندارد.

۱۶. سیستمی را در نظر بگیرید که با حالت زیر توصیف می‌شود:

$$\psi(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8}} Y_{1,1}(\theta, \varphi) + \sqrt{\frac{1}{8}} Y_{1,0}(\theta, \varphi) + A Y_{1,-1}(\theta, \varphi)$$

که در آن  $A$  یک ثابت حقیقی است.

(الف)  $A$  را محاسبه کنید به صورتی که  $\langle \psi | \psi \rangle$  بهنجار باشد.

(ب)  $\hat{L}_+ \psi(\theta, \varphi)$  را بیابید.

(پ) مقدارهای چشمداشتی  $\hat{L}_x$  و  $\hat{L}^2$  را در حالت  $\langle \psi |$  محاسبه کنید.

(ت) احتمال وابسته به یک اندازه‌گیری که صفر را برای مؤلفه‌ی  $z$  تکانه‌ی زاویه‌ای نتیجه می‌دهد، بیابید.

(ث)  $\langle \psi | \hat{L}_z | \psi \rangle$  و  $\langle \psi | \hat{L}_- | \psi \rangle$  را محاسبه کنید که در آنها

$$\Phi(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{8}{15}} Y_{11}(\theta, \varphi) + \sqrt{\frac{4}{15}} Y_{10}(\theta, \varphi) + \sqrt{\frac{3}{15}} Y_{2,-1}(\theta, \varphi)$$

است.

۱۷. (الف) با استفاده از رابطه‌های جابه‌جایی تکانه‌ی زاویه‌ای، اعتبار اتحاد (ژاکوبی)

$$[\hat{J}_x, [\hat{J}_y, \hat{J}_z]] + [\hat{J}_y, [\hat{J}_z, \hat{J}_x]] + [\hat{J}_z, [\hat{J}_x, \hat{J}_y]] = 0$$

(ب) اتحاد  $[\hat{J}_x^2, \hat{J}_y^2] = [\hat{J}_y^2, \hat{J}_z^2] = [\hat{J}_z^2, \hat{J}_x^2]$  را ثابت کنید.

(پ) عبارت‌های  $\hat{L}_- \hat{L}_+ Y_{lm}(\theta, \varphi)$  و  $\hat{L}_+ \hat{L}_- Y_{lm}(\theta, \varphi)$  را محاسبه کنید و سپس جابه‌جاگر

$$[\hat{L}_+ \hat{L}_-, \hat{L}_- \hat{L}_+] Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

۱۸. ذره‌ای را در نظر بگیرید که تابع موج آن از  $A/3 - A[(x+z)y + z^2]/r^2 = \psi(x, y, z)$  که

در آن  $A$  یک ثابت است، به‌دست می‌آید.

(الف) آیا  $\psi$  یک ویژه‌حالت  $\hat{L}^2$  است؟ در صورت مثبت بودن پاسخ، ویژه‌مقدار متناظر آن چقدر است؟

آیا این تابع موج یک ویژه‌حالت  $\hat{L}_z$  نیز است؟

(ب) ثابت  $A$  را به صورتی بیابید که  $\psi$  بهنجار باشد.

(پ) احتمال‌های نسبی اندازه‌گیری مقدارهای مختلف  $\hat{L}_z$  و  $\hat{L}^2$  را بیابید و سپس مقدارهای چشمداشتی

$$\hat{L}_z \text{ و } \hat{L}^2 \text{ را محاسبه کنید.}$$

(ت)  $\langle \psi | \hat{L}_\pm | \psi \rangle$  را محاسبه کنید و سپس  $\langle \psi | \hat{L}_\pm | \psi \rangle$  را نتیجه بگیرید.

۱۹. سیستمی را در نظر بگیرید که در حالت زیر است:

$$\psi(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2}{13}} Y_{3,-2} + \sqrt{\frac{3}{13}} Y_{3,-1} + \sqrt{\frac{3}{13}} Y_{30} + \sqrt{\frac{3}{13}} Y_{3,1} + \sqrt{\frac{2}{13}} Y_{32}$$

(الف) اگر  $\hat{L}_z$  اندازه‌گیری شود آنگاه چه مقدارهایی و با احتمال‌هایی به‌دست خواهند آمد؟

(ب) اگر پس از اندازه‌گیری  $\hat{L}_z$  مقدار  $l_z = 2\hbar$  به‌دست آید آنگاه عدم قطعیت‌های  $\Delta L_x$  و  $\Delta L_y$  و

حاصل ضرب  $\Delta L_x \Delta L_y$  آنها را محاسبه کنید.

(پ)  $\langle \psi | \hat{L}_x | \psi \rangle$  و  $\langle \psi | \hat{L}_y | \psi \rangle$  را بیابید.

۲۰. (الف) ویژه‌مقدارهای انرژی یک چرخنده با تقارن محوری را محاسبه کنید و واگنی هر تراز انرژی را بیابید (یعنی به‌ازای هر مقدار عدد کوانتومی سمتی  $m$ ، چه تعداد حالت  $|l, m\rangle$  متناظر با همان انرژی است). به یاد بیاورید که هامیلتونی یک چرخنده با تقارن محوری از رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آید:

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2}{2I_1} + \frac{\hat{L}_z^2}{2I_2}$$

که در آن  $I_1$  و  $I_2$  گشتاورهای لختی‌اند.

(ب) از قسمت (الف) ویژه‌مقدارهای انرژی را برای ترازهای مختلف  $l = 3$  به‌دست آورید.

(پ) در مورد یک چرخنده‌ی صلب (یعنی  $I_1 = I_2 = I$ ) عبارت مربوط به انرژی و رابطه‌ی واگنی متناظر را بیابید.

(ت) عدد کوانتومی مداری  $l$  و واگنی انرژی متناظر برای یک چرخنده‌ی صلب که در آن اندازه‌ی تکانه‌ی زاویه‌ای کل برابر با  $\sqrt{56}\hbar$  است را محاسبه کنید.

۲۱. سیستمی با تکانه‌ی زاویه‌ای کل  $j = 1$  را در نظر بگیرید. در اینجا می‌خواهیم  $\hat{J}_y$  را اندازه بگیریم. ماتریس این عملگر از رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آید:

$$\hat{J}_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

(الف) هنگام اندازه‌گیری  $\hat{J}_y$  چه مقدارهای ممکن به‌دست خواهند آمد؟

(ب) هرگاه سیستم در حالت  $j_y = \hbar$  باشد آنگاه  $\langle \hat{J}_z \rangle$ ،  $\langle \hat{J}_z^2 \rangle$  و  $\Delta J_z$  را محاسبه کنید.

(پ) قسمت (ب) را برای  $\langle \hat{J}_x \rangle$ ،  $\langle \hat{J}_x^2 \rangle$  و  $\Delta J_x$  تکرار کنید.

۲۲.  $Y_{3,\pm 2}(\theta, \varphi)$  را با اعمال عملگرهای نردبانی  $\hat{L}_{\pm}$  روی  $Y_{3,\pm 1}(\theta, \varphi)$  محاسبه کنید.

۲۳. سیستمی با تکانه‌ی زاویه‌ای کل  $j = 1$  را در نظر بگیرید. می‌خواهیم اندازه‌گیری‌هایی روی

$$\hat{J}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

انجام دهیم.

(الف) هنگام اندازه‌گیری  $\hat{J}_z$  چه مقدارهای ممکن به‌دست خواهد آمد؟

(ب) هرگاه سیستم در حالت  $j_z = -\hbar$  باشد آنگاه  $\langle \hat{J}_x \rangle$ ،  $\langle \hat{J}_y \rangle$  و  $\Delta J_x$  را محاسبه کنید.  
 (پ) قسمت (ب) را برای  $\langle \hat{J}_y \rangle$ ،  $\langle \hat{J}_x \rangle$  و  $\Delta J_y$  تکرار کنید.

۲۴. سیستمی را در نظر بگیرید که در حالت زیر است:

$$\psi(x, y, z) = \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \frac{z}{r} + \frac{1}{\sqrt{3\pi}} \frac{x}{r}$$

(الف)  $\psi(x, y, z)$  را برحسب هماهنگ‌های کروی بیان کنید سپس  $\hat{L}^2 \psi(x, y, z)$  و  $\hat{L}_z \psi(x, y, z)$  را محاسبه کنید. آیا  $\psi(x, y, z)$  یک ویژه‌حالت  $\hat{L}^2$  یا  $\hat{L}_z$  است؟

(ب)  $\langle \psi | \hat{L}_\pm | \psi \rangle$  و  $\hat{L}_\pm \psi(x, y, z)$  را محاسبه کنید.

(پ) هرگاه اندازه‌گیری مؤلفه‌ی  $z$  تکانه‌ی زاویه‌ای مداری انجام شود آنگاه احتمال‌های متناظر با یافتن نتیجه‌های  $0$ ،  $\hbar$  و  $-\hbar$  را بیابید.

۲۵. سیستمی را در نظر بگیرید که تابع موج آن به صورت زیر است:

$$\psi(\theta, \varphi) = \frac{1}{4} Y_{00}(\theta, \varphi) + \frac{1}{\sqrt{3}} Y_{11}(\theta, \varphi) + \frac{1}{4} Y_{1,-1}(\theta, \varphi) + \frac{1}{\sqrt{6}} Y_{22}(\theta, \varphi)$$

(الف) آیا  $\psi(\theta, \varphi)$  بهنجار است؟

(ب) آیا  $\psi(\theta, \varphi)$  یک ویژه‌حالت  $\hat{L}^2$  یا  $\hat{L}_z$  است؟

(پ)  $\langle \psi | \hat{L}_\pm | \psi \rangle$  و  $\hat{L}_\pm \psi(\theta, \varphi)$  را محاسبه کنید.

(ت) هرگاه اندازه‌گیری مؤلفه‌ی  $z$  تکانه‌ی زاویه‌ای مداری انجام شود آنگاه احتمال‌های متناظر با یافتن نتیجه‌های  $0$ ،  $\hbar$ ،  $-\hbar$  و  $2\hbar$  را بیابید.

۲۶. با استفاده از عبارت مربوط به  $\hat{L}_-$  در مختصات کروی ثابت کنید که  $[ \hat{L}_-, e^{-i\varphi} \sin \theta ] = 0$  و  $[ \hat{L}_-, \cos \theta ] = \hbar e^{-i\varphi} \sin \theta$  است.

۲۷. ذره‌ای را در نظر بگیرید که تکانه‌ی زاویه‌ای آن برابر با  $l$  است.

(الف) ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای  $(1, m_x)$  عملگر  $\hat{L}_x$  را بیابید.

(ب) حالت  $(1, m_x = 1)$  را به صورت برهمنهی خطی ویژه‌حالت‌های  $\hat{L}_z$  بیان کنید. راهنمایی: ابتدا باید ویژه‌حالت‌های  $\hat{L}_x$  را بیابید و دریابید که کدام یک از آنها متناظر با ویژه‌مقدار  $m_x = 1$  است. این ویژه‌بردار در پایه‌ی  $z$  بسط داده می‌شود.

(پ) هنگامی که ذره در ویژه‌حالت  $(1, m_x = 1)$  است، احتمال اندازه‌گیری  $m_z = 1$  چقدر است؟ احتمال متناظر با اندازه‌گیری  $m_z = 0$  چطور؟



(ت) فرض کنید اندازه‌گیری مؤلفه‌ی  $z$  تکانه‌ی زاویه‌ای انجام می‌شود و نتیجه‌ی  $1 = m_z$  به دست می‌آید. حال مؤلفه‌ی  $x$  تکانه‌ی زاویه‌ای را اندازه‌گیری می‌کنیم. نتیجه‌های ممکن چه مقدارهایی و با چه احتمال‌هایی هستند؟  
 ۲۸. سیستمی را در نظر بگیرید که به صورت زیر برحسب ویژه‌حالت‌های تکانه‌ی زاویه‌ای  $|l, m\rangle$  معلوم است:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}}|1, -1\rangle + A|1, 0\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|1, 1\rangle$$

که در آن  $A$  یک ثابت حقیقی است.

(الف)  $A$  را طوری بیابید که  $|\psi\rangle$  بهنجار باشد.

(ب) مقدارهای چشمداشتی  $\hat{L}_x$ ،  $\hat{L}_y$ ،  $\hat{L}_z$  و  $\hat{L}^2$  را در حالت  $|\psi\rangle$  محاسبه کنید.

(پ) احتمال این که در اندازه‌گیری مؤلفه‌ی  $z$  تکانه‌ی زاویه‌ای مقدار  $1\hbar$  به دست آید چقدر است.

(ت)  $\langle 1, m | \hat{L}_+^2 | \psi \rangle$  و  $\langle 1, m | \hat{L}_-^2 | \psi \rangle$  را محاسبه کنید.

۲۹. ذره‌ای با تکانه‌ی زاویه‌ای  $j = 3/2$  را در نظر بگیرید.

(الف) ماتریس‌های نمایش‌دهنده‌ی عملگرهای  $\hat{J}^2$ ،  $\hat{J}_x$ ،  $\hat{J}_y$  و  $\hat{J}_z$  را در پایه‌ی  $\{|j, m\rangle\}$  بیابید.

(ب) با استفاده از این ماتریس‌ها، نشان دهید که  $\hat{J}_x$ ،  $\hat{J}_y$  و  $\hat{J}_z$  در جابه‌جاگر  $[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z$  صدق

می‌کنند. (پ) مقدارهای میانگین  $\hat{J}_x$  و  $\hat{J}_x^2$  را نسبت به حالت  $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  محاسبه کنید.

(ت)  $\Delta J_x \Delta J_y$  را نسبت به حالت زیر محاسبه کنید:

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

و ثابت کنید که این حاصل ضرب در اصل عدم قطعیت هایزنبرگ صدق می‌کند.

۳۰. ماتریس‌های پائولی زیر را در نظر بگیرید:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(الف) ثابت کنید  $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I$  که در آن  $I$  ماتریس یکه است:

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

(ب) جابه‌جاگرهای  $[\sigma_x, \sigma_z]$ ،  $[\sigma_x, \sigma_y]$  و  $[\sigma_y, \sigma_z]$  را محاسبه کنید.

(پ) پادجابه‌جاگر  $\sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_x$  را محاسبه کنید.

(ت) نشان دهید که  $e^{i\theta \sigma_y} = I \cos \theta + i \sigma_y \sin \theta$  که در آن  $I$  ماتریس یکه است.

(ث) در تشابه با عبارت مربوط به  $\sigma_z$ ، عبارتی برای  $e^{i\theta \sigma_z}$  به دست آورید.

۳۱. یک ذره با اسپین  $\frac{3}{2}$  را در نظر بگیرید که هامیلتونی آن به صورت زیر است:

$$\hat{H} = \frac{\varepsilon_0}{\hbar^2} (\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2) - \frac{\varepsilon_0}{\hbar^2} \hat{S}_z^2$$

که در آن  $\varepsilon_0$  ثابتی با ابعاد انرژی است.

(الف) ماتریس هامیلتونی را بیابید و آن را برای یافتن ترازهای انرژی قطری کنید.

(ب) ویژه‌بردارها را بیابید و ثابت کنید که ترازهای انرژی واگن دوگانه‌اند.

۳۲. ترازهای انرژی یک ذره با اسپین  $\frac{5}{2}$  را بیابید که هامیلتونی آن به صورت زیر است:

$$\hat{H} = \frac{\varepsilon_0}{\hbar^2} (\hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2) + \frac{\varepsilon_0}{\hbar} \hat{S}_z$$

که در آن  $\varepsilon_0$  ثابتی با ابعاد انرژی است. آیا ترازهای انرژی واگن‌اند؟

۳۳. الکترونی را در نظر بگیرید که جهت اسپین آن در صفحه‌ی  $xy$  واقع شده است.

(الف) ویژه‌مقدارها (آنها را  $\lambda_1$  و  $\lambda_2$  بنامید) و ویژه‌بردارهای  $(|\lambda_1\rangle$  و  $|\lambda_2\rangle)$  عملگر اسپین  $\hat{S}$  الکترون را بیابید.

(ب) با فرض آن که حالت اولیه‌ی الکترون به صورت زیر است:

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{3} |\lambda_1\rangle + \frac{2\sqrt{2}}{3} |\lambda_2\rangle$$

احتمال به دست آوردن مقدار  $\hat{S} = -\hbar/2$  پس از اندازه‌گیری اسپین الکترون را بیابید.

۳۴. (الف) ویژه‌مقدارها (آنها را  $\lambda_1$  و  $\lambda_2$  بنامید) و ویژه‌حالت‌های  $(|\lambda_1\rangle$  و  $|\lambda_2\rangle)$  عملگر اسپین  $\mathbf{S}$  یک

الکترون را هنگامی که  $\mathbf{S}$  در امتداد جهت دلخواه برداریکمی  $\mathbf{n}$  (در صفحه‌ی  $yz$ ) قرار گرفته است، بیابید.

(ب) با فرض آن که حالت اولیه‌ی الکترون به صورت زیر است:

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{4} |\lambda_1\rangle + \frac{\sqrt{3}}{4} |\lambda_2\rangle$$

احتمال به دست آوردن مقدار  $\hat{S} = \hbar/2$  پس از اندازه‌گیری اسپین الکترون را بیابید.

۳۵. ذره‌ای با اسپین  $\frac{3}{2}$  را در نظر بگیرید. ماتریس مربوط به مؤلفه‌ی اسپین را در امتداد بردار یکه‌ای با جهت دلخواه  $\mathbf{n}$  را بیابید. ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای آن را بیابید. راهنمایی:

$$\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \varphi)\mathbf{i} + (\sin \theta \sin \varphi)\mathbf{j} + (\cos \theta)\mathbf{k}$$

۳۶. نشان دهید که  $[\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z] + [\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar (\hat{J}_x^2 - 2\hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2)$ .

۳۷. ویژه‌مقدارهای عملگرهای  $\hat{L}^2$  و  $\hat{L}_z$  را برای هر یک از حالت‌های زیر بیابید:

الف)  $Y_{2,1}(\theta, \varphi)$

ب)  $Y_{3,-2}(\theta, \varphi)$

پ)  $\frac{1}{\sqrt{4}}[Y_{3,3}(\theta, \varphi) + Y_{3,-3}(\theta, \varphi)]$

ت)  $Y_{4,0}(\theta, \varphi)$

۳۸. از رابطه‌های جابه‌جایی

$$|\psi_x\rangle_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \pm \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right], \quad |\psi_y\rangle_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \pm i \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right]$$

برای اثبات معادله‌های ویژه‌مقدار زیر استفاده کنید:

$$\hat{S}_x |\psi_x\rangle_{\pm} = \pm \frac{\hbar}{2} |\psi_x\rangle_{\pm} \quad \text{و} \quad \hat{S}_y |\psi_y\rangle_{\pm} = \pm \frac{\hbar}{2} |\psi_y\rangle_{\pm}$$

## فصل ششم

# مسأله‌های سه‌بعدی

### ۱-۶ مقدمه

در این فصل بررسی خواهیم کرد که چگونه معادله‌ی شرودینگر را برای ذره‌های بدون اسپین در حال حرکت در پتانسیل‌های سه‌بعدی حل کنیم. این بررسی را در دو دستگاه مختصات متفاوت یعنی دستگاه دکارتی و دستگاه کروی انجام می‌دهیم.

ابتدا با کار کردن در چارچوب دستگاه دکارتی، حرکت یک ذره در پتانسیل‌های متفاوت را مطالعه می‌کنیم: ذره‌ی آزاد، ذره در یک پتانسیل مستطیلی (سه‌بعدی) و ذره در پتانسیل نوسانگر هماهنگ. این بررسی تعمیم ساده‌ای از مسأله‌های یک‌بعدی ارائه شده در فصل ۴ است. برخلاف حالت یک‌بعدی، مسأله‌های سه‌بعدی اغلب واگنی از خود نشان می‌دهند (واگنی زمانی روی می‌دهد که پتانسیل دارای تقارن باشد).

دوم این که با استفاده از مختصات کروی، حرکت یک ذره را در پتانسیل‌های متقارن کروی توصیف می‌کنیم. پس از ارائه‌ی یک بحث کلی، چند کاربرد از ذره‌ی آزاد و نوسانگر هماهنگ همسانگرد گرفته تا اتم هیدروژن را در نظر خواهیم گرفت. این فصل را با محاسبه‌ی ترازهای انرژی اتم هیدروژن زمانی که در یک میدان مغناطیسی ثابت قرار می‌گیرد (و موجب اثر زمین می‌شود)، به پایان می‌بریم.

### ۲-۶ مسأله‌های سه‌بعدی در مختصات دکارتی

در اینجا بررسی می‌کنیم که چگونه نظریه‌ی شرودینگر مسأله‌های یک‌بعدی (فصل ۴) را به سه‌بعد گسترش دهیم.

## ۱-۲-۶ بحث عمومی: جداسازی متغیرها

معادله‌ی شرودینگر وابسته به زمان برای یک ذره‌ی بدون اسپین به جرم  $m$  که تحت تأثیر یک پتانسیل سه‌بعدی حرکت می‌کند، برابر است با

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(x,y,z,t) + \hat{V}(x,y,z,t)\Psi(x,y,z,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,y,z,t)}{\partial t} \quad (1-6)$$

که در آن  $\nabla^2$  لاپلاسی است ( $\nabla^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$ ). همانطور که در فصل ۴ دیدیم، می‌توان تابع موج ذره‌ای که در یک پتانسیل مستقل از زمان حرکت می‌کند را به صورت حاصل ضرب مؤلفه‌های فضایی و زمانی نوشت:

$$\Psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)e^{-iEt/\hbar} \quad (2-6)$$

که در آن  $\psi(x,y,z)$  جواب معادله‌ی شرودینگر مستقل از زمان است:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z) + \hat{V}(x,y,z)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z) \quad (3-6)$$

که به شکل  $\hat{H}\psi = E\psi$  است.

معمولاً حل این معادله‌ی دیفرانسیل جزئی مشکل است. ولی برای آن دسته از حالت‌هایی که پتانسیل  $\hat{V}(x,y,z)$  به مجموع سه جمله‌ی مستقل یک‌بعدی جدا می‌شود (که نباید با یک بردار اشتباه گرفته شود):

$$V(x,y,z) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z) \quad (4-6)$$

می‌توانیم (۳-۶) را با روش جداسازی متغیرها حل کنیم. این روش، از جداسازی معادله‌ی شرودینگر سه‌بعدی (۳-۶) به سه معادله‌ی شرودینگر یک‌بعدی مستقل، تشکیل شده است. بیایید ببینیم چگونه می‌توان این کار را انجام داد. توجه کنید که می‌توان (۳-۶) را (با در نظر گرفتن (۴-۶)) به صورت زیر نوشت:

$$\left[\hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z\right]\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z) \quad (5-6)$$

که در آن  $\hat{H}_x$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\hat{H}_x = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_x(x) \quad (6-6)$$

عبارت‌های مشابهی نیز برای  $\hat{H}_y$  و  $\hat{H}_z$  برقرارند.

چون  $\hat{V}(x,y,z)$  به سه جمله‌ی مستقل جدا می‌شود، می‌توانیم  $\psi(x,y,z)$  را نیز به صورت حاصل ضرب سه تابع با یک متغیر بنویسیم:

$$\psi(x,y,z) = X(x)Y(y)Z(z) \quad (7-6)$$

با جاگذاری (۷-۶) در (۵-۶) و تقسیم آن بر  $X(x)Y(y)Z(z)$  به دست می‌آوریم:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2} + V_x(x) \right] + \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{Y} \frac{d^2 Y}{dy^2} + V_y(y) \right] + \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} + V_z(z) \right] = E \quad (۸-۶)$$

چون هر عبارت در داخل کروشه تنها به یکی از متغیرهای  $x$ ،  $y$  و  $z$  بستگی دارد و مجموع این عبارتها برابر با یک مقدار ثابت  $E$  است آنگاه هر یک از این عبارتها باید جداگانه برابر با یک مقدار ثابت باشند به طوری که مجموع این سه ثابت برابر با  $E$  باشد. به عنوان مثال عبارت مربوط به مؤلفه‌ی  $x$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_x(x) \right] X(x) = E_x X(x) \quad (۹-۶)$$

معادله‌های مشابهی برای مؤلفه‌های  $y$  و  $z$  همراه با رابطه‌ی زیر برقرار است:

$$E_x + E_y + E_z = E \quad (۱۰-۶)$$

اساساً روش جداسازی متغیرها از کاهش معادله‌ی شرودینگر سه‌بعدی (۳-۶) به سه معادله‌ی جداگانه‌ی یک‌بعدی (۹-۶) تشکیل شده است.

### ۲-۲-۶ ذره‌ی آزاد

در مورد ساده‌ی یک ذره‌ی آزاد، معادله‌ی شرودینگر (۳-۶) به سه معادله‌ی مشابه با (۹-۶) با  $V_x = 0$ ،  $V_y = 0$  و  $V_z = 0$  کاهش می‌یابد. می‌توان معادله‌ی مربوط به  $x$  را از (۹-۶) به دست آورد:

$$\frac{d^2 X(x)}{dx^2} = -k_x^2 X(x) \quad (۱۱-۶)$$

که در آن  $k_x^2 = 2mE_x/\hbar^2$  و از این رو  $E_x = \hbar^2 k_x^2 / (2m)$  است. همانطور که در فصل ۴ نشان داده شد، جواب‌های بهنجار (۱۱-۶) موج‌های تخت هستند:

$$X(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_x x} \quad (۱۲-۶)$$

بنابراین جواب معادله‌ی شرودینگر سه‌بعدی (۳-۶) از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\psi_{\mathbf{k}}(x, y, z) = (2\pi)^{-3/2} e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} = (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (۱۳-۶)$$

که در آن  $\mathbf{k}$  و  $\mathbf{r}$  به ترتیب بردارهای موج و مکان ذره‌اند. در رابطه با انرژی  $E$  باید گفت که برابر با مجموع ویژه‌مقدارهای سه معادله‌ی یک‌بعدی (۱۱-۶) است:

$$E = E_x + E_y + E_z = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \quad (14-6)$$

توجه کنید که چون انرژی (۱۴-۶) تنها به اندازه‌ی  $\mathbf{k}$  بستگی دارد، تمام جهت‌گیری‌های متفاوت  $\mathbf{k}$  (که با تغییر دادن  $k_x$ ،  $k_y$  و  $k_z$  به دست می‌آیند) تابع شرط زیر هستند:

$$|\mathbf{k}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} = \text{مقدار ثابت} \quad (15-6)$$

ویژه‌تابع‌های متفاوت (۱۳-۶) را بدون تغییری در انرژی تولید می‌کنند. چون تعداد کل جهت‌گیری‌های  $\mathbf{k}$  که اندازه‌ی آن را حفظ می‌کنند نامتناهی است، انرژی یک ذره‌ی آزاد به صورت نامتناهی واگن است. توجه کنید که جواب‌های معادله‌ی شرودینگر وابسته به زمان (۱-۶) از جاگذاری (۱۳-۶) در (۲-۶) به دست می‌آیند:

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-i\omega t} = (2\pi)^{-3/2} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} \quad (16-6)$$

که در آن  $\omega = E/\hbar$  است و یک موج در حال انتشار با بردار موج  $\mathbf{k}$  را نمایش می‌دهد. شرط متعامد بهنجار بودن این تابع موج به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\int \Psi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}, t) \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) d^3r = \int \psi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d^3r = (2\pi)^{-3} \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} d^3r = \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \quad (17-6)$$

که می‌توان آن را در نمادگذاری دیراک به صورت زیر نوشت:

$$\langle \Psi_{\mathbf{k}'}(t) | \psi_{\mathbf{k}}(t) \rangle = \langle \psi_{\mathbf{k}'} | \psi_{\mathbf{k}} \rangle = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (18-6)$$

همانطور که در فصل ۳ دیدیم، می‌توان ذره‌ی آزاد را به وسیله‌ی یک بسته‌ی موج (برهم‌نهی تابع‌های موج متناظر با بردارهای موج مختلف) نمایش داد:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = (2\pi)^{-3/2} \int A(\mathbf{k}, t) \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) d^3k = (2\pi)^{-3/2} \int A(\mathbf{k}, t) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} d^3k \quad (19-6)$$

که در آن  $A(\mathbf{k}, t)$  تبدیل فوریه‌ی  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  است:

$$A(\mathbf{k}, t) = (2\pi)^{-3/2} \int \Psi(\mathbf{r}, t) e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} d^3r \quad (20-6)$$

همانطور که در فصل‌های ۱ و ۴ دیدیم، می‌توان مکان ذره را به صورت کلاسیکی با مرکز بسته‌ی موج نمایش داد.

## ۳-۲-۶ جعبه‌ی پتانسیل

قصد داریم با جعبه‌ی پتانسیل مستطیلی (که دارای تقارن نیست) شروع کنیم و سپس پتانسیل مکعبی را در نظر می‌گیریم که تقارن بسیار زیادی دارد زیرا محورهای  $xyz$  معادل‌اند.

## ۱-۳-۲-۶ جعبه‌ی پتانسیل مستطیلی

ابتدا مورد یک ذره‌ی بدون اسپین به جرم  $m$  را در نظر بگیرید که در یک جعبه‌ی مستطیلی به ضلع‌های  $a$ ،  $b$  و  $c$  محدود شده است:

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 & 0 < x < a, 0 < y < b, 0 < z < c \\ \infty & \text{در جاهای دیگر} \end{cases} \quad (۲۱-۶)$$

که می‌توان آن را به صورت  $V(x, y, z) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z)$  نوشت همراه با

$$V_x(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < a \\ \infty & \text{در جاهای دیگر} \end{cases} \quad (۲۲-۶)$$

پتانسیل‌های  $V_y(y)$  و  $V_z(z)$  شکل مشابهی دارند.

تابع موج  $\psi(x, y, z)$  باید در دیواره‌های جعبه صفر شود. در فصل ۴ دیدیم که جواب‌های این پتانسیل به شکل زیر هستند:

$$X(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \quad n_x = 1, 2, 3, \dots \quad (۲۳-۶)$$

و ویژه‌مقدارهای انرژی متناظر برابرند با

$$E_{n_x} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n_x^2 \quad (۲۴-۶)$$

از این عبارت‌ها می‌توانیم ویژه‌تابع‌های سه‌بعدی بهنجار و انرژی‌های متناظر آنها را بنویسیم:

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{b} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{c} z\right) \quad (۲۵-۶)$$

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left( \frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right) \quad (۲۶-۶)$$



## ۲-۳-۲-۶ پتانسیل مکعبی

برای حالت ساده‌ی یک جعبه‌ی مکعبی به ضلع  $L$ ، می‌توان عبارت مربوط به انرژی را از (۶-۲۶) و با جاگذاری  $a = b = c = L$  نتیجه گرفت:

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots \quad (۲۷-۶)$$

حالت پایه متناظر با  $n_x = n_y = n_z = 1$  است و انرژی آن از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$E_{111} = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = 3E_1 \quad (۲۸-۶)$$

که همانطور که در فصل ۴ نشان داده شد،  $E_1 = \pi^2 \hbar^2 / (2mL^2)$  انرژی نقطه‌ی صفر یک ذره در یک جعبه‌ی یک بعدی است. بنابراین انرژی نقطه‌ی صفر یک ذره در یک جعبه‌ی سه بعدی، سه برابر انرژی نقطه‌ی صفر یک جعبه‌ی یک بعدی است. ضریب ۳ نشأت گرفته از این واقعیت است که ذره را به صورت متقارن در تمام سه بعد محدود کرده‌ایم.

نخستین حالت برانگیخته‌ی مربوط به سه مجموعه‌ی ممکن از عددهای کوانتومی  $(n_x, n_y, n_z) = (2, 1, 1), (1, 2, 1), (1, 1, 2)$  متفاوت  $\psi_{211}(x, y, z)$  است که در آن

$$\psi_{211}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{L^3}} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{\pi}{L}y\right) \sin\left(\frac{\pi}{L}z\right) \quad (۲۹-۶)$$

می‌توان عبارت‌های مربوط به  $\psi_{112}(x, y, z)$  و  $\psi_{121}(x, y, z)$  را از  $\psi_{211}(x, y, z)$  نتیجه گرفت. توجه کنید که تمام سه حالت دارای انرژی یکسانند:

$$E_{211} = E_{121} = E_{112} = 6 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = 6E_1 \quad (۳۰-۶)$$

بنابراین نخستین حالت برانگیخته واگن سه‌گانه است.

واگنی تنها زمانی روی می‌دهد که تقارنی در مسئله وجود داشته باشد. برای مورد حاضر یک ذره در یک جعبه‌ی مکعبی، تقارن بالایی وجود دارد زیرا تمام سه بعد معادل‌اند. توجه کنید که برای جعبه‌ی مستطیلی، واگنی وجود ندارد زیرا سه بعد معادل نیستند. علاوه بر این هنگامی که در فصل ۴ به مسئله‌های یک بعدی می‌پرداختیم، واگنی وجود نداشت زیرا تنها به یک عدد کوانتومی منجر می‌شدند.

دومین حالت برانگیخته نیز سه حالت متفاوت دارد و از این رو واگن سه‌گانه است و انرژی آن برابر با

$$E_{221} = E_{212} = E_{122} = 9E_1 \text{ است}$$

طیف انرژی در جدول ۶-۱ نشان داده شده است که در آن تراز  $m$ ام به وسیله‌ی انرژی، عددهای

کوانتومی و واگنی  $g_n$  آن مشخص می‌شود.

جدول ۱-۶ ترازهای انرژی و واگنی آنها برای پتانسیل مکعبی با  $E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$ .

$E_{n_x n_y n_z} / E_1$	$(n_x, n_y, n_z)$	$g_n$
۳	(۱۱۱)	۱
۶	(۲۱۱), (۱۲۱), (۱۱۲)	۳
۹	(۲۲۱), (۲۱۲), (۱۲۲)	۳
۱۱	(۳۱۱), (۱۳۱), (۱۱۳)	۳
۱۲	(۲۲۲)	۱
۱۴	(۳۲۱), (۳۱۲), (۲۳۱), (۲۱۳), (۱۳۲), (۱۲۳)	۶

### ۴-۲-۶ نوسانگر هماهنگ

قصد داریم از نوسانگر ناهمسانگرد (که هیچ تقارنی را نشان نمی‌دهد) شروع کنیم و سپس نوسانگر همسانگرد که در آن محور  $x$  و  $y$  و  $z$  همگی معادل‌اند را در نظر می‌گیریم.

### ۱-۴-۲-۶ نوسانگر ناهمسانگرد

ذره‌ای به جرم  $m$  را در نظر بگیرید که در پتانسیل نوسانگر ناهمسانگرد سه‌بعدی حرکت می‌کند:

$$\hat{V}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) = \frac{1}{2} m \omega_x^2 \hat{X}^2 + \frac{1}{2} m \omega_y^2 \hat{Y}^2 + \frac{1}{2} m \omega_z^2 \hat{Z}^2 \quad (۳۱-۶)$$

معادله‌ی شرودینگر آن به سه معادله‌ی مشابه با (۹-۶) جدا می‌شود:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 X(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2 X(x) = E_x X(x) \quad (۳۲-۶)$$

معادله‌های مشابهی برای  $Y(y)$  و  $Z(z)$  برقرارند. می‌توان ویژه‌مقدارهای انرژی متناظر با پتانسیل (۳۱-۶) را به صورت زیر بیان کرد:

$$E_{n_x n_y n_z} = E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z} = \left(n_x + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_x + \left(n_y + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_y + \left(n_z + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_z \quad (۳۳-۶)$$

با  $n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, 3, \dots$  حالت‌های مانای متناظر عبارتند از

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = X_{n_x}(x) Y_{n_y}(y) Z_{n_z}(z) \quad (۳۴-۶)$$

که در آن  $X_{n_x}(x)$ ,  $Y_{n_y}(y)$  و  $Z_{n_z}(z)$  تابع‌های موج نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی هستند. این حالت‌ها واگن نیستند زیرا پتانسیل (۳۱-۶) تقارنی ندارد (ناهمسانگرد است).

جدول ۲-۶-۲ ترازهای انرژی و واگنی‌های آنها برای یک نوسانگر هماهنگ همسانگرد.

$n$	$3E_n/(\hbar\omega)$	$(n_x n_y n_z)$	$g_n$
۰	۳	(۰۰۰)	۱
۱	۵	(۱۰۰), (۰۱۰), (۰۰۱)	۳
۲	۷	(۲۰۰), (۰۲۰), (۰۰۲) (۱۱۰), (۱۰۱), (۰۱۱)	۶
۳	۹	(۳۰۰), (۰۳۰), (۰۰۳) (۲۱۰), (۲۰۱), (۰۲۱) (۱۲۰), (۱۰۲), (۰۱۲) (۱۱۱)	۱۰

### ۲-۴-۲-۶ نوسانگر هماهنگ همسانگرد

حال پتانسیل نوسانگر هماهنگ همسانگرد را در نظر بگیرید. می‌توان ویژه‌مقدارهای انرژی آن را از (۳۳-۶) و با جاگذاری  $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$  نتیجه گرفت:

$$E_{n_x n_y n_z} = \left( n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right) \hbar\omega \quad (۳۵-۶)$$

چون انرژی به مجموع  $n_x$ ,  $n_y$  و  $n_z$  بستگی دارد، هر مجموعه‌ای از عددهای کوانتومی که همان حاصل جمع را دارند، حالت‌های انرژی یکسان را نمایش خواهند داد.

حالت پایه که انرژی آن برابر با  $3\hbar\omega/2 = E_{000}$  است، واگن نیست. نخستین حالت برانگیخته واگن سه‌گانه است زیرا سه حالت متفاوت  $\psi_{100}$ ,  $\psi_{010}$  و  $\psi_{001}$  وجود دارند که متناظر با انرژی یکسان  $5\hbar\omega/2$  هستند.

به صورت کلی، می‌توانیم نشان دهیم که واگنی  $g_n$  حالت برانگیخته  $n$ ام (که برابر با تعداد راه‌های انتخاب ممکن عددهای صحیح نامنفی  $n_x$ ,  $n_y$  و  $n_z$  برابر با  $n$  است) از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$g_n = \frac{1}{6}(n+1)(n+2) \quad (۳۶-۶)$$

که در آن  $n = n_x + n_y + n_z$  است. جدول ۲-۶-۲ چند تراز انرژی نخست را همراه با واگنی‌های آنها نشان می‌دهد.

## مثال ۱-۶ (واگنی یک نوسانگر هماهنگ)

نشان دهید که چگونه رابطه‌ی واگنی (۳۶-۶) به دست می‌آید.

حل

به ازای یک مقدار ثابت  $n$ ، واگنی  $g_n$  از تعداد راه‌های انتخاب  $n_x$ ،  $n_y$  و  $n_z$  به دست می‌آید به طوری که  $n = n_x + n_y + n_z$

به ازای یک مقدار ثابت  $n_x$ ، تعداد راه‌های انتخاب  $n_y$  و  $n_z$  به طوری که  $n_y + n_z = n - n_x$  باشد، از رابطه‌ی  $(n - n_x + 1)$  به دست می‌آید. می‌توان این مطلب را به صورتی که در ادامه می‌آید، نشان داد. به ازای یک مقدار معلوم  $n_x$ ، مقدارهای مجاز مختلف:

$$(n_y, n_z) = (0, n - n_x), (1, n - n_x - 1), (2, n - n_x - 2), (3, n - n_x - 3), \dots, (n - n_x - 2, 2), (n - n_x - 1, 1), (n - n_x, 0)$$

به دست می‌آید. در مجموع،  $(n - n_x + 1)$  مجموعه‌ی  $(n_y, n_z)$  وجود دارد به طوری که  $n_y + n_z = n - n_x$  باشد. حال چون مقدارهای  $n_x$  می‌توانند از  $0$  تا  $n$  تغییر کنند آنگاه واگنی از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$g_n = \sum_{n_x=0}^n (n - n_x + 1) = (n + 1) \sum_{n_x=0}^n 1 - \sum_{n_x=0}^n n_x$$

$$= (n + 1)^2 - \frac{1}{2}n(n + 1) = \frac{1}{2}(n + 1)(n + 2) \quad (37-6)$$

راه ابتدایی تر محاسبه‌ی این سری استفاده از روش گاوس است: به سادگی، سری  $\sum_{n_x=0}^n (n - n_x + 1)$  را به دو شکل معادل زیر بنویسید:

$$g_n = (n + 1) + n + (n - 1) + (n - 2) + \dots + 4 + 3 + 2 + 1 \quad (38-6)$$

$$g_n = 1 + 2 + 3 + 4 + \dots + (n - 2) + (n - 1) + n + (n + 1) \quad (39-6)$$

چون هر کدام از این دو سری شامل  $(n + 1)$  جمله است، جمع جمله به جمله‌ی این رابطه‌ها نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$2g_n = (n + 2) + (n + 2) + (n + 2) + \dots + (n + 2) + (n + 2) + (n + 2)$$

$$= (n + 1)(n + 2) \quad (40-6)$$

از این رو  $g_n = \frac{1}{2}(n + 1)(n + 2)$

## ۳-۶ مسأله‌های سه‌بعدی در مختصات کروی

### ۱-۳-۶ پتانسیل مرکزی: بحث عمومی

در این بخش به مطالعه‌ی ساختار معادله‌ی شرودینگر ذره‌ای به جرم  $M$  که در پتانسیل متقارن کروی حرکت می‌کند، می‌پردازیم:

$$V(\mathbf{r}) = V(r) \quad (۴۱-۶)$$

که به عنوان پتانسیل مرکزی نیز شناخته می‌شود.

معادله‌ی شرودینگر مستقل از زمان این ذره (با تکانه‌ی  $-i\hbar\nabla$  و بردار مکان  $\mathbf{r}$ ) به صورت زیر است:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (۴۲-۶)$$

چون هامیلتونی متقارن کروی است، قصد داریم از مختصات کروی  $(r, \theta, \varphi)$  استفاده کنیم که به وسیله‌ی رابطه‌های زیر به همتهای دکارتی خود مرتبط می‌شوند:

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta \quad (۴۳-۶)$$

لاپلاسی  $\nabla^2$  به صورت زیر به یک بخش شعاعی  $\nabla_r^2$  و یک بخش زاویه‌ای  $\nabla_\Omega^2$  جدا می‌شود (فصل ۵ را ببینید):

$$\nabla^2 = \nabla_r^2 - \frac{1}{\hbar^2 r^2} \nabla_\Omega^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{\hbar^2 r^2} \hat{\mathbf{L}}^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{\hbar^2 r^2} \hat{\mathbf{L}}^2 \quad (۴۴-۶)$$

که در آن  $\hat{\mathbf{L}}$  تکانه‌ی زاویه‌ای مداری با

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (۴۵-۶)$$

است. بنابراین در مختصات کروی، معادله‌ی شرودینگر به شکل زیر در می‌آید:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{2Mr^2} \hat{\mathbf{L}}^2 + V(r) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (۴۶-۶)$$

می‌توان جمله‌ی نخست این معادله را به صورت انرژی جنبشی شعاعی در نظر گرفت:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r = \frac{\hat{P}_r^2}{2M} \quad (۴۷-۶)$$

۱. در سراسر این بخش، جرم ذره را با حرف  $M$  بزرگ نمایش می‌دهیم تا با عدد کوانتومی سمتی  $m$  اشتباه گرفته نشود.

چون عملگر تکانه‌ی شعاعی به شکل هرمیتی به دست می‌آید<sup>۲</sup>:

$$\hat{P}_r = \frac{1}{r} \left[ \left( \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \cdot \hat{\mathbf{P}} + \hat{\mathbf{P}} \cdot \left( \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \right] = -i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \equiv -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \quad (۴۸-۶)$$

می‌توان جمله‌ی دوم  $\hat{\mathbf{L}}^2 / (2Mr^2)$  در معادله‌ی (۴۶-۶) را به عنوان انرژی جنبشی چرخشی در نظر گرفت زیرا این جمله از چرخش «صرف» ذره حول مبدا به وجود می‌آید (یعنی متغیر شعاعی  $r$  تغییر نمی‌کند که در آن  $Mr^2$  گشتاور لختی آن نسبت به مبدا است).

حال چون، همانطور که در (۴۵-۶) نشان داده شد،  $\hat{\mathbf{L}}^2$  به  $r$  بستگی ندارد، هم با  $\hat{V}(r)$  و هم با انرژی جنبشی شعاعی جابه‌جا می‌شود و از این رو با هامیلتونی  $\hat{H}$  نیز جابه‌جا می‌شود. علاوه بر این چون  $\hat{L}_z$  با  $\hat{\mathbf{L}}^2$  جابه‌جا می‌شود، سه عملگر  $\hat{H}$ ،  $\hat{\mathbf{L}}^2$  و  $\hat{L}_z$  دو به دو با هم جابه‌جا می‌شوند:

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}^2] = [\hat{H}, \hat{L}_z] = 0 \quad (۴۹-۶)$$

بنابراین  $\hat{H}$ ،  $\hat{\mathbf{L}}^2$  و  $\hat{L}_z$  ویژه‌تابع‌های مشترک دارند. در فصل ۵ دیدیم که ویژه‌تابع‌های همزمان  $\hat{\mathbf{L}}^2$  و  $\hat{L}_z$  از هماهنگ‌های کروی  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  به دست می‌آیند:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (۵۰-۶)$$

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = m\hbar Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (۵۱-۶)$$

چون هامیلتونی در (۴۶-۶) مجموع یک بخش شعاعی و یک بخش زاویه‌ای است، می‌توانیم به دنبال جواب‌هایی بگردیم که حاصل ضرب یک بخش شعاعی و یک بخش زاویه‌ای باشند که در آن بخش زاویه‌ای هماهنگ کروی  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  است:

$$\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | nlm \rangle = \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (۵۲-۶)$$

توجه کنید که تکانه‌ی زاویه‌ای مداری یک سیستم در حال حرکت در یک پتانسیل مرکزی پایسته است زیرا همانطور که در (۴۹-۶) نشان داده شد، با هامیلتونی جابه‌جا می‌شود.

اما هنوز تابع موج شعاعی  $R_{nl}(r)$  را باید یافت. عدد کوانتومی  $n$  برای شناسایی ویژه‌مقدارهای  $\hat{H}$  معرفی می‌شود:

$$\hat{H} |nlm\rangle = E_n |nlm\rangle \quad (۵۳-۶)$$

با جاگذاری (۵۲-۶) در (۴۶-۶) و استفاده از این واقعیت که  $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$  یک ویژه‌تابع  $\hat{\mathbf{L}}^2$  با ویژه‌مقدار  $l(l+1)\hbar^2$  است و سپس تقسیم آن بر  $R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$  و ضرب آن در  $2Mr^2$ ، به معادله‌ای

۲. توجه کنید که می‌توانیم نشان دهیم که جابه‌جاگر بین عملگر مکان  $\hat{r}$  و عملگر تکانه‌ی شعاعی  $\hat{p}_r$  از  $[\hat{r}, \hat{p}_r] = i\hbar$  به دست می‌آید (اثبات به عنوان تمرین باقی گذاشته شده است).

می‌رسیم که در آن درجه‌های آزادی شعاعی و زاویه‌ای از هم جدا هستند:

$$\left[ -\hbar^2 \frac{r}{R_{nl}} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r R_{nl}) + 2Mr^2 (V(r) - E) \right] + \left[ \frac{\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi)}{Y_{lm}(\theta, \varphi)} \right] = 0 \quad (54-6)$$

جمله‌های داخل کروشه‌ی نخست مستقل از  $\theta$  و  $\varphi$  هستند و جمله‌های داخل کروشه‌ی دوم مستقل از  $r$ ، و هر کدام باید جداگانه برابر با یک ثابت و مجموع آنها برابر با صفر باشد. کروشه‌ی دوم چیزی جز (۶-۵۰) (معادله‌ی ویژه مقدار  $\hat{\mathbf{L}}^2$ ) نیست از این رو برابر با  $\hbar^2 l(l+1)$  است. در مورد کروشه‌ی نخست باید گفت که باید برابر با  $l(l+1)\hbar^2 -$  باشد. این به معادله‌ای می‌انجامد که به عنوان معادله‌ی شعاعی یک پتانسیل مرکزی شناخته می‌شود:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dr^2} (r R_{nl}(r)) + \left[ V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2} \right] (r R_{nl}(r)) = E_n (r R_{nl}(r)) \quad (55-6)$$

توجه کنید که (۶-۵۵) (که ترازهای انرژی سیستم را به دست می‌دهد) به عدد کوانتومی سمتی  $m$  بستگی ندارد. بنابراین انرژی  $E_n$  واگن  $(2l+1)$  گانه است. این ناشی از این واقعیت است که به ازای یک  $l$  معلوم،  $(2l+1)$  ویژه‌تابع متفاوت  $\psi_{nlm}$  (یعنی  $\psi_{nl0}, \psi_{nl1}, \dots, \psi_{nl, l-1}, \psi_{nl, l}$ ) وجود دارند که متناظر با همان ویژه‌مقدار  $E_n$  هستند. این ویژگی واگنی مختص پتانسیل‌های مرکزی است. توجه کنید که (۶-۵۵) ساختار یک معادله‌ی یک بعدی برحسب  $r$  را دارد:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2 U_{nl}(r)}{dr^2} + \left[ V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2} \right] U_{nl}(r) = E_n U_{nl}(r) \quad (56-6)$$

یا

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2 U_{nl}(r)}{dr^2} + V_{eff}(r) U_{nl}(r) = E_n U_{nl}(r) \quad (57-6)$$

که جواب‌های آن ترازهای انرژی سیستم را به دست می‌دهند. تابع موج  $U_{nl}(r)$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$U_{nl}(r) = r R_{nl}(r) \quad (58-6)$$

و پتانسیل با رابطه‌ی زیر داده می‌شود:

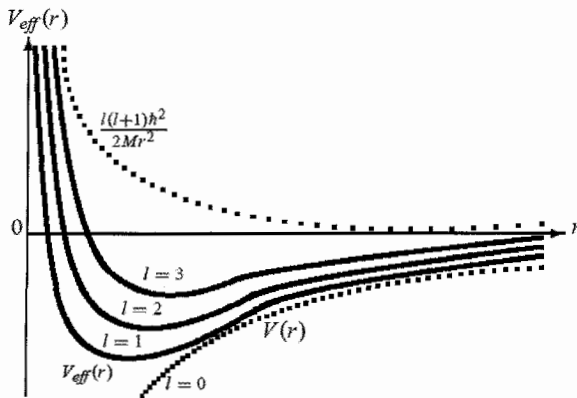
$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2} \quad (59-6)$$

که به عنوان پتانسیل موثر یا گریز از مرکز شناخته می‌شود و در آن  $V(r)$  پتانسیل مرکزی و  $l(l+1)\hbar^2/(2Mr^2)$  یک پتانسیل دافعه یا گریز از مرکز وابسته به تکانه‌ی زاویه‌ای مداری است که

تمایل به دفع ذره از مرکز دارد. همانطور که بعداً خواهیم دید، در مورد اتم‌ها،  $V(r)$  پتانسیل کولنی حاصل از نیروهای جاذبه‌ی بین الکترون‌ها و هسته است. توجه کنید که اگرچه (۵۷-۶) دارای ساختار یک معادله‌ی ویژه‌مقدار یک‌بعدی است ولی در یک جنبه‌ی اساسی با معادله‌ی شرودینگر یک‌بعدی تفاوت دارد: متغیر  $r$  نمی‌تواند مقدارهای منفی داشته باشد زیرا از  $r = 0$  تا  $r \rightarrow +\infty$  تغییر می‌کند. بنابراین تابع موج  $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$  باید به‌ازای تمام مقدارهای  $r$  بین  $0$  و  $\infty$  (به‌خصوص به‌ازای  $r = 0$ ) متناهی باشد. اما اگر  $R_{nl}(0)$  متناهی باشد آنگاه باید  $rR_{nl}(r)$  در  $r = 0$  صفر شود یعنی

$$\lim_{r \rightarrow 0} [rR_{nl}(r)] = U_{nl}(0) = 0 \quad (۶۰-۶)$$

بنابراین برای معادل کردن معادله‌ی شعاعی (۵۷-۶) با یک مسأله‌ی ویژه‌مقدار یک‌بعدی باید فرض کنیم که پتانسیل ذره به‌ازای  $r > 0$  از پتانسیل مؤثر  $V_{eff}(r)$  و به‌ازای  $r \leq 0$  از یک پتانسیل نامتناهی به‌دست می‌آید. برای این که معادله‌ی ویژه‌مقدار (۵۷-۶) حالت‌های مقید را توصیف کند، پتانسیل  $V(r)$  باید جاذبه (یعنی منفی) باشد زیرا  $(2Mr^2)/\hbar^2 l(l+1)$  دافعه است. شکل ۱-۶ نشان می‌دهد که با افزایش  $l$ ، عمق  $V_{eff}(r)$  کاهش می‌یابد و کمینه‌ی آن از مبدا فاصله‌ی بیشتری می‌گیرد. هرچه فاصله‌ی ذره از مبدا بیشتر باشد آنگاه کمتر مقید خواهد بود. این به دلیل این واقعیت است که با افزایش تکانه‌ی زاویه‌ای، ذره کمتر و کمتر مقید می‌شود.



شکل ۱-۶ پتانسیل مؤثر  $V_{eff}(r) = V(r) + \hbar^2 l(l+1)/(2Mr^2)$  متناظر با چند مقدار  $l = 0, 1, 2, 3$ .  $V(r)$  یک پتانسیل مرکزی جاذبه در حالی که  $\hbar^2 l(l+1)/(2Mr^2)$  یک پتانسیل دافعه (گریز از مرکز) است.

به‌صورت خلاصه، می‌خواهیم بر این واقعیت تأکید کنیم که (به‌ازای پتانسیل‌های متقارن کروی) معادله‌ی شرودینگر (۴۶-۶) به یک معادله‌ی زاویه‌ای بدیهی (۵۰-۶) و برای  $\hat{L}^2$  و یک معادله‌ی شعاعی یک‌بعدی (۵۷-۶) کاهش می‌یابد.



## ملاحظات

هنگامی که یک ذره درجه‌های آزادی مداری و اسپینی دارد، تابع موج کل  $|\Psi\rangle$  آن از حاصل ضرب دو قسمت فضایی  $\psi(\mathbf{r})$  و اسپینی  $|s, m_s\rangle$  تشکیل می‌شود یعنی  $|\Psi\rangle = |\psi\rangle |s, m_s\rangle$ . در مورد یک الکترون در حال حرکت در یک میدان مرکزی باید گفت که علاوه بر عددهای کوانتومی  $n, l$  و  $m_l$  به یک عدد کوانتومی چهارم یعنی عدد کوانتومی اسپینی  $m_s$  نیاز است تا این الکترون به صورت کامل توصیف شود:  $|nlm_l m_s\rangle = |nlm_l\rangle |s, m_s\rangle$  از این رو

$$\Psi_{nlm_l m_s}(\mathbf{r}) = \psi_{nlm_l}(\mathbf{r}) |s, m_s\rangle = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \varphi) |s, m_s\rangle \quad (۶۱-۶)$$

چون اسپین به درجه‌های آزادی فضایی بستگی ندارد، عملگر اسپین روی تابع موج فضایی  $\psi_{nlm_l}(\mathbf{r})$  اثری ندارد و تنها روی بخش اسپینی  $|s, m_s\rangle$  مؤثر است. بر عکس،  $\hat{L}$  تنها روی بخش فضایی اثر می‌گذارد.

## ۶-۳-۲ ذره‌ی آزاد در مختصات کروی

در ادامه می‌خواهیم صورت‌بندی عمومی توسعه داده شده در بالا را برای مطالعه‌ی حرکت یک ذره‌ی آزاد به جرم  $M$  و انرژی  $E_k = \hbar^2 k^2 / (2M)$  که در آن  $k$  عدد موج است ( $k = |\mathbf{k}|$ )، به کار ببریم. هامیلتونی  $\hat{H} = -\hbar^2 \nabla^2 / (2M)$  یک ذره‌ی آزاد با  $\hat{L}^2$  و  $\hat{L}_z$  جابه‌جا می‌شود. چون  $V(r) = 0$  است، هامیلتونی یک ذره‌ی آزاد ناوردای چرخشی است. آنگاه می‌توان ذره‌ی آزاد را به عنوان حالت خاص پتانسیل‌های مرکزی در نظر گرفت. در بالا نشان دادیم که می‌توان بخش‌های شعاعی و زاویه‌ای تابع موج را از هم جدا کرد،  $\psi_{klm}(r, \theta, \varphi) = \langle r\theta\varphi | klm \rangle = R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$  معادله‌ی شعاعی یک ذره‌ی آزاد از قرار دادن  $V(r) = 0$  در (۶-۵۵) به دست می‌آید:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r R_{kl}(r)) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2M r^2} R_{kl}(r) = E_k R_{kl}(r) \quad (۶۲-۶)$$

که می‌توان آن را به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$-\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r R_{kl}(r)) + \frac{l(l+1)}{r^2} R_{kl}(r) = k^2 R_{kl}(r) \quad (۶۳-۶)$$

که در آن  $k^2 = 2ME_k / \hbar^2$  است.

با استفاده از تغییر متغیر  $\rho = kr$  می‌توانیم این معادله را به معادله‌ی زیر کاهش دهیم:

$$\frac{d^2 \mathcal{R}_l(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d\mathcal{R}_l(\rho)}{d\rho} + \left[ 1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] \mathcal{R}_l(\rho) = 0 \quad (۶۴-۶)$$

جدول ۳-۶ چند تابع نخست بسل و نیومن.

تابع‌های بسل $j_l(r)$	تابع‌های نیومن $n_l(r)$
$j_0(r) = \frac{\sin r}{r}$	$n_0(r) = -\frac{\cos r}{r}$
$j_1(r) = \frac{\sin r}{r} - \frac{\cos r}{r^2}$	$n_1(r) = -\frac{\cos r}{r^2} - \frac{\sin r}{r}$
$j_2(r) = \left(\frac{3}{r^3} - \frac{1}{r}\right) \sin r - \frac{3 \cos r}{r^3}$	$n_2(r) = -\left(\frac{3}{r^3} - \frac{1}{r}\right) \cos r - \frac{3}{r^3} \sin r$

که در آن  $\mathcal{R}_l(\rho) = R_l(kr) = R_{kl}(r)$  این معادله‌ی دیفرانسیل به عنوان معادله‌ی بسل کروی شناخته می‌شود. جواب‌های عمومی این معادله از ترکیب خطی مستقل تابع‌های بسل کروی  $j_l(\rho)$  و تابع‌های نیومن کروی  $n_l(\rho)$  به دست می‌آیند:

$$\mathcal{R}_l(\rho) = A_l j_l(\rho) + B_l n_l(\rho) \quad (۶۵-۶)$$

که در آن  $j_l(\rho)$  و  $n_l(\rho)$  از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$j_l(\rho) = (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho}\right)^l \frac{\sin \rho}{\rho}, \quad n_l(\rho) = -(-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho}\right)^l \frac{\cos \rho}{\rho} \quad (۶۶-۶)$$

چند تابع نخست تابع‌های بسل و نیومن در جدول ۳-۶ فهرست شده‌اند و شکل‌های آنها در شکل ۲-۶ نمایش داده شده است.

با بسط  $\sin \rho / \rho$  و  $\cos \rho / \rho$  برحسب سری توانی  $\rho$ ، می‌بینیم که تابع‌های  $j_l(\rho)$  و  $n_l(\rho)$  به‌ازای مقادیرهای کوچک  $\rho$  (یعنی نزدیک مبدا) به رابطه‌های زیر کاهش می‌یابند:

$$j_l(\rho) \simeq \frac{2^l l!}{(2^l + 1)!} \rho^l, \quad n_l(\rho) \simeq -\frac{(2^l)!}{2^l l!} \rho^{-l-1} \quad \rho \ll 1 \quad (۶۷-۶)$$

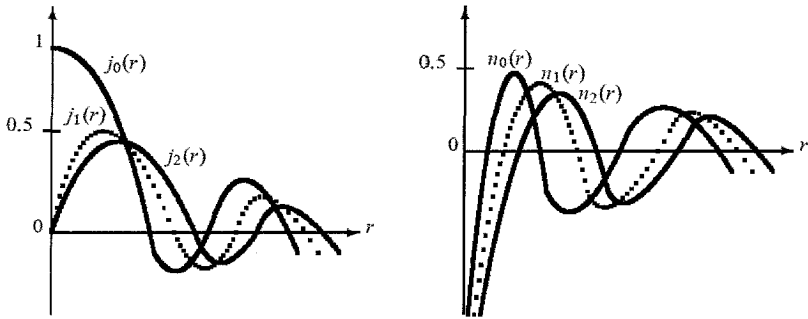
و به‌ازای مقادیرهای بزرگ  $\rho$  به

$$j_l(\rho) \simeq \frac{1}{\rho} \sin \left( \rho - \frac{l\pi}{2} \right), \quad n_l(\rho) \simeq -\frac{1}{\rho} \cos \left( \rho - \frac{l\pi}{2} \right) \quad \rho \gg 1 \quad (۶۸-۶)$$

چون تابع‌های نیومن  $n_l(\rho)$  در مبدا واگرا می‌شوند و تابع‌های موج  $\psi_{klm}$  باید در همه‌جای فضا متناهی باشند، تابع‌های  $n_l(\rho)$  جواب‌های غیرقابل قبول مسأله هستند. از این رو تنها تابع‌های بسل کروی  $j_l(kr)$  در ویژه‌تابع‌های ذره‌ی آزاد سهیم‌اند:

$$\psi_{klm}(r, \theta, \varphi) = j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (۶۹-۶)$$

که در آن  $k = \sqrt{2ME_k}/\hbar$  است. همانطور که در شکل ۲-۶ نشان داده شده است، دامنه‌ی تابع‌های موج با افزایش  $r$  کوچک و کوچک‌تر می‌شود. در فاصله‌های زیاد، تابع‌های موج با موج‌های کروی نمایش داده می‌شوند.



شکل ۲-۶ تابع‌های بسل کروی  $j_l(r)$  و نیومن کروی  $n_l(r)$ . تنها تابع‌های بسل در مبداء متناهی‌اند.

توجه کنید که چون شاخص  $k$  در  $E_k = \hbar^2 k^2 / (2M)$  به صورت پیوسته تغییر می‌کند، طیف انرژی یک ذره‌ی آزاد به صورت نامتناهی واگن است. این به این دلیل است که تمام جهت‌گیری‌های  $k$  در فضا متناظر با یک مقدار انرژی است.

### ملاحظات

ذره‌ی آزاد را در چارچوب دستگاه‌های مختصات دکارتی و کروی مطالعه کردیم. در حالی که انرژی در هر دو دستگاه مختصات از یک عبارت به دست می‌آید ( $E_k = \hbar^2 k^2 / (2M)$ )، تابع‌های موج در مختصات دکارتی از موج‌های تخت  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  (۶-۱۳) را ببینید) و در مختصات کروی از موج‌های کروی  $j_l(kr)Y_{lm}(\theta, \varphi)$  (۶-۶۹) را ببینید. می‌توانیم نشان دهیم که هر دو جمله‌ی مربوط به تابع‌های موج معادل‌اند زیرا می‌توانیم موج تخت  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  را برحسب حالت‌های موج کروی  $j_l(kr)Y_{lm}(\theta, \varphi)$  بیان کنیم. به خصوص می‌توانیم از یک ترکیب خطی حالت‌های کروی که دارای  $k$  یکسان ولی مقدارهای متفاوت  $l$  و  $m$  هستند، موج‌های تخت را تولید کنیم:

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l a_{lm} j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (70-6)$$

بنابراین مسئله به یافتن ضریب‌های بسط  $a_{lm}$  منجر می‌شود. به عنوان مثال، در حالتی که در آن  $k$  در امتداد محور  $z$  است ( $m=0$ )، می‌توانیم نشان دهیم:

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (71-6)$$

که در آن  $P_l(\cos \theta)$  ها چند جمله‌ای‌های لژاندر با  $P_l(\cos \theta) \sim Y_{l0}(\theta, \varphi)$  هستند. تابع‌های موج می‌کنند ولی هیچ اطلاعاتی پیرامون تکانه‌ی خطی  $\mathbf{p}$  به ما نمی‌دهند  $\psi_{klm}(r, \theta, \varphi) = j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi)$  یک ذره‌ی آزاد با انرژی  $E_k$  و تکانه‌ی زاویه‌ای  $l$  را توصیف می‌کنند ولی ویژه حالت  $\hat{P}$  نیست). از سوی دیگر، موج تخت  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  که یک ویژه تابع  $\hat{H}$  و  $\hat{P}$  است (ولی ویژه حالت  $\hat{L}^2$  و  $\hat{L}_z$  نیست) هیچ اطلاعاتی در مورد تکانه‌ی زاویه‌ای ذره به ما نمی‌دهد. به عبارت دیگر، موج‌های تخت حالت‌های با تکانه‌های خطی خوش تعریف و تکانه‌های زاویه‌ای تعریف نشده را توصیف می‌کنند. برعکس، موج‌های کروی حالت‌های با تکانه‌های زاویه‌ای خوش تعریف و تکانه‌های خطی تعریف نشده را توصیف می‌کنند.

### ۳-۳-۶ پتانسیل چاه مربعی کروی

اکنون مسأله‌ی ذره‌ای به جرم  $M$  در پتانسیل یک چاه مربعی جاذبه را در نظر بگیرید:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r < a \\ 0 & r > a \end{cases} \quad (۷۲-۶)$$

بیانید حالت‌های  $0 < r < a$  و  $r > a$  را جداگانه بررسی کنیم.

### ۱-۳-۳-۶ حالت $0 < r < a$

درون چاه ( $0 < r < a$ ) می‌توان معادله‌ی شرودینگر مستقل از زمان این ذره را از (۵۵-۶) به دست آورد:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r R_l(r)) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2} R_l(r) = (E + V_0) R_l(r) \quad (۷۳-۶)$$

با استفاده از تغییر متغیر  $\rho = k_1 r$  که در آن  $k_1$  از رابطه‌ی  $k_1 = \sqrt{2M(E + V_0)}/\hbar$  به دست می‌آید، می‌بینیم که (۷۳-۶) به معادله‌ی دیفرانسیل بسل کروی (۶۴-۶) کاهش می‌یابد. مانند مورد یک ذره‌ی آزاد، تابع موج شعاعی باید در همه جا متناهی باشد و به صورت زیر برحسب تابع‌های بسل کروی  $j_l(k_1 r)$  به دست می‌آید:

$$R_l(r) = A j_l(k_1 r) = A j_l\left(\frac{\sqrt{2M(E + V_0)}}{\hbar} r\right) \quad \text{به ازای} \quad r < a \quad (۷۴-۶)$$

که در آن  $A$  ثابت بهنجارش است.

۲-۳-۳-۶ حالت  $r > a$ 

در بیرون چاه ( $r > a$ )، ذره آزادانه حرکت می‌کند و معادله‌ی شرودینگر آن به صورت (۶۲-۶) است:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r R_{kl}(r)) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2} R_{kl}(r) = E_k R_{kl}(r) \quad (r > a) \quad (۷۵-۶)$$

در اینجا بسته به این که آیا انرژی منفی یا مثبت است، دو امکان به وجود می‌آید.

- حالت انرژی منفی متناظر با حالت‌های مقید (یعنی متناظر با طیف انرژی گسسته) است. جواب‌های عمومی (۷۵-۶) مشابه با (۶۳-۶) هستند ولی اکنون  $k$  یک عدد موهومی است یعنی باید  $ik_2$  را جایگزین  $k$  کنیم و از این رو جواب‌ها از ترکیب خطی  $j_l(ik_2 r)$  و  $n_l(ik_2 r)$  به دست می‌آیند:

$$R_l(ik_2 r) = B [j_l(ik_2 r) \pm n_l(ik_2 r)] \quad (۷۶-۶)$$

که در آن  $B$  ثابت بهنجارش و  $k_2 = \sqrt{-2ME}/\hbar$  است.

توجه: به صورت زیر می‌توان ترکیب‌های خطی  $j_l(\rho)$  و  $n_l(\rho)$  را برحسب تابع‌های هنکل کروی نوع اول،  $h_l^{(1)}(\rho)$ ، و نوع دوم،  $h_l^{(2)}(\rho)$ ، بیان کرد:

$$h_l^{(1)}(\rho) = j_l(\rho) + in_l(\rho) \quad (۷۷-۶)$$

$$h_l^{(2)}(\rho) = j_l(\rho) - in_l(\rho) = \left( h_l^{(1)}(\rho) \right)^* \quad (۷۸-۶)$$

چند تابع نخست هنکل کروی نوع اول عبارتند از

$$h_0^{(1)}(\rho) = -i \frac{e^{i\rho}}{\rho}, \quad h_1^{(1)}(\rho) = - \left( \frac{1}{\rho} + \frac{i}{\rho^2} \right) e^{i\rho}, \quad h_2^{(1)}(\rho) = \left( \frac{i}{\rho} - \frac{3}{\rho^2} - \frac{3i}{\rho^3} \right) e^{i\rho} \quad (۷۹-۶)$$

هنگامی که  $\rho \rightarrow \infty$  میل می‌کند، می‌توان رفتار مجانبی تابع‌های هنکل را از (۶۸-۶) نتیجه گرفت:

$$h_l^{(1)}(\rho) \rightarrow -\frac{i}{\rho} e^{i(\rho - l\pi/2)}, \quad h_l^{(2)}(\rho) \rightarrow \frac{i}{\rho} e^{-i(\rho - l\pi/2)} \quad (۸۰-۶)$$

جواب‌هایی که باید در (۷۶-۶) نگه داشته شوند، باید در همه جا متناهی باشند. همانطور که می‌توان از معادله‌ی (۸۰-۶) نتیجه گرفت، تنها تابع‌های هنکل نوع اول  $h_l^{(1)}(ik_2 r)$  به ازای مقدارهای بزرگ  $r$  متناهی‌اند (تابع‌های  $h_l^{(2)}(ik_2 r)$  به ازای مقدارهای بزرگ  $r$  واگرا می‌شوند). بنابراین تابع‌های

موجی که در خارج از چاه از نظر فیزیکی معنی دارند، تابع‌هایی هستند که برحسب تابع‌های هنکل نوع اول بیان می‌شوند ((۶-۷۶) را ببینید):

$$R_l(ik_2 r) = B h_l^{(1)} \left( i \frac{\sqrt{-2ME}}{\hbar} r \right) = B j_l \left( i \frac{\sqrt{-2ME}}{\hbar} r \right) + i B n_l \left( i \frac{\sqrt{-2ME}}{\hbar} r \right) \quad (۸۱-۶)$$

پیوستگی تابع شعاعی و مشتق آن در  $r = a$  نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\frac{1}{h_l^{(1)}(ik_2 r)} \frac{dh_l^{(1)}(ik_2 r)}{dr} \Big|_{r=a} = \frac{1}{j_l(k_1 r)} \frac{dj_l(k_1 r)}{dr} \Big|_{r=a} \quad (۸۲-۶)$$

به ازای حالت‌های  $l = 0$ ، این معادله به رابطه‌ی زیر کاهش می‌یابد:

$$-k_2 = k_1 \cot(k_1 a) \quad (۸۳-۶)$$

این شرط پیوستگی مشابه با معادله‌ی غیرجبری‌ای است که در فصل ۴ هنگام مطالعه‌ی پتانسیل چاه مربعی متناهی یک بعدی به دست آوریم.

- حالت انرژی مثبت متناظر با طیف پیوسته (حالت‌های نامقید یا حالت‌های پراکنندگی) است که در آن جواب به‌طور مجانبی نوسانی است. جواب از ترکیب خطی  $j_l(k'r)$  و  $n_l(k'r)$  تشکیل شده است که در آن  $k' = \sqrt{2ME}/\hbar$  است. چون جواب باید در همه‌جا متناهی باشد، شرط پیوستگی در  $r = a$  ضریب‌های ترکیب خطی را تعیین می‌کند.

### ۴-۳-۶ نوسانگر هماهنگ همسانگرد

معادله‌ی شرودینگر شعاعی ذره‌ای به جرم  $M$  در پتانسیل نوسانگر هماهنگ همسانگرد

$$V(r) = \frac{1}{2} M \omega^2 r^2 \quad (۸۴-۶)$$

از (۵۷-۶) به دست می‌آید:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2 U_{nl}(r)}{dr^2} + \left[ \frac{1}{2} M \omega^2 r^2 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2} \right] U_{nl}(r) = E U_{nl}(r) \quad (۸۵-۶)$$

قصد داریم تا این معادله را با بررسی رفتار جواب‌ها در حدهای مجانبی (مقدارهای بسیار کوچک و بسیار بزرگ  $r$ ) حل کنیم. از یک سو، هنگامی که  $r \rightarrow 0$  میل می‌کند، جمله‌های  $E$  و  $M\omega^2 r^2/2$  در مقایسه با

$l(l+1)\hbar^2/2Mr^2$  بسیار کوچک می‌شوند. از این رو هنگامی که  $r \rightarrow 0$  میل می‌کند، معادله‌ی (۸۵-۶) به معادله‌ی زیر کاهش می‌یابد:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2 U(r)}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2} U(r) = 0 \quad (۸۶-۶)$$

جواب‌های این معادله به شکل  $U(r) \sim r^{l+1}$  هستند. از سوی دیگر، هنگامی که  $r \rightarrow \infty$  میل می‌کند، شکل مجانبی (۸۵-۶) برابر است با

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2 U(r)}{dr^2} + \frac{1}{2} M\omega^2 r^2 U(r) = 0 \quad (۸۷-۶)$$

جواب‌هایی از نوع  $U(r) \sim e^{-M\omega r^2/2\hbar}$  را می‌پذیرد. با ترکیب (۸۶-۶) و (۸۷-۶) می‌توانیم جواب‌های (۸۵-۶) را به صورت زیر بنویسیم:

$$U(r) = f(r)r^{l+1}e^{-M\omega r^2/2\hbar} \quad (۸۸-۶)$$

که در آن  $f(r)$  تابعی از  $r$  است. با جاگذاری این عبارت در (۸۵-۶) معادله‌ی زیر را برای  $f(r)$  به دست می‌آوریم:

$$\frac{d^2 f(r)}{dr^2} + 2 \left( \frac{l+1}{r} - \frac{M\omega}{\hbar} r \right) \frac{df(r)}{dr} + \left[ \frac{2ME}{\hbar^2} - (2l+3) \frac{M\omega}{\hbar} \right] f(r) = 0 \quad (۸۹-۶)$$

بیانید جواب سری توانی زیر را امتحان کنیم:

$$f(r) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n r^n = a_0 + a_1 r + a_2 r^2 + \dots + a_n r^n + \dots \quad (۹۰-۶)$$

با جاگذاری این تابع در (۸۹-۶) معادله‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left[ n(n-1)a_n r^{n-2} + 2 \left( \frac{l+1}{r} - \frac{M\omega}{\hbar} r \right) n a_n r^{n-1} + \left[ \frac{2ME}{\hbar^2} - (2l+3) \frac{M\omega}{\hbar} \right] a_n r^n \right] = 0 \quad (۹۱-۶)$$

که به نوبه‌ی خود به معادله‌ی زیر کاهش می‌یابد:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left[ n(n+2l+1)a_n r^{n-2} + \left[ -\frac{2M\omega}{\hbar} n + \frac{2ME}{\hbar^2} - (2l+3) \frac{M\omega}{\hbar} \right] a_n r^n \right] = 0 \quad (۹۲-۶)$$

برای این که این معادله برقرار باشد، ضریب‌های توان‌های مختلف  $r$  باید جداگانه صفر شوند. به عنوان مثال، هنگامی که  $n = 0$  است، ضریب  $r^{-2}$  در واقع، صفر است:

$$0 \times (2l + 1)a_0 = 0 \quad (93-6)$$

توجه کنید که برای برقراری این معادله نیازی به این نیست که  $a_0$  صفر باشد. ضریب  $r^{-1}$  متناظر با  $n = 1$  در (۹۲-۶) است. برای این که این ضریب صفر شود، باید داشته باشیم:

$$1 \times (2l + 2)a_1 = 0 \quad (94-6)$$

چون  $(2l + 2)$  نمی‌تواند صفر باشد (زیرا عدد کوانتومی  $l$  یک عدد صحیح مثبت است)،  $a_1$  باید صفر شود.

ضریب‌های  $r^n$  از رابطه‌ی زیر نتیجه می‌شوند:

$$\sum_{n=0} \left[ (n+2)(n+2l+3)a_{n+2} + \left[ \frac{2ME}{\hbar^2} - \frac{M\omega}{\hbar}(2n+2l+3) \right] a_n \right] r^n = 0 \quad (95-6)$$

که به فرمول بازگشتی زیر می‌انجامد:

$$(n+2)(n+2l+3)a_{n+2} = \left[ \frac{-2ME}{\hbar^2} + \frac{M\omega}{\hbar}(2n+2l+3) \right] a_n \quad (96-6)$$

این فرمول بازگشتی نشان می‌دهد که تمام ضریب‌های  $a_n$  متناظر با مقادیر  $n$  فرد، صفرند زیرا  $a_1 = 0$  است (۹۴-۶) را ببینید). بنابراین تابع  $f(r)$  باید تنها توان‌های زوج  $r$  را داشته باشد:

$$f(r) = \sum_{n=0}^{\infty} a_{2n} r^{2n} = \sum_{n'=0,2,4,\dots}^{\infty} a_{n'} r^{n'} \quad (97-6)$$

که در آن تمام ضریب‌های  $a_{2n}$  (با  $n \geq 1$ ) متناسب با  $a_0$  هستند.

اکنون توجه کنید که هنگامی که  $n \rightarrow \infty$  میل می‌کند، تابع  $f(r)$  واگرا می‌شود زیرا به صورت مجانبی مانند  $e^{r^2}$  رفتار می‌کند. برای به دست آوردن یک جواب متناهی، باید سری (۹۷-۶) در توان بیشینه‌ی  $r^{n'}$

متوقف شود از این رو باید چند جمله‌ای باشد. بدین منظور نیاز داریم تا  $a_{n'+2} = 0$  صفر باشد. بنابراین با قرار دادن  $a_{n'+2} = 0$  در فرمول بازگشتی (۹۶-۶) و چون  $a_{n'} \neq 0$  است، یک باره شرط کوانتش زیر را به دست می‌آوریم:

$$2 \frac{M}{\hbar^2} E_{n'l} - \frac{M\omega}{\hbar}(2n'+2l+3) = 0 \quad (98-6)$$



یا

$$E_{n'l} = \left( n' + l + \frac{3}{4} \right) \hbar \omega \quad (۹۹-۶)$$

که در آن  $n'$  زوج است ((۹۷-۶) را ببینید). با نمایش  $n'$  با  $2N$  که در آن  $N = 0, 1, 2, 3, \dots$  است، این عبارت مربوط به انرژی را به صورت زیر بازنویسی می‌کنیم:

$$E_n = \left( n + \frac{3}{4} \right) \hbar \omega \quad (n = 0, 1, 2, 3, \dots) \quad (۱۰۰-۶)$$

که در آن  $n = n' + l = 2N + l$  است.

حالت پایه (که انرژی آن برابر با  $\frac{3}{4}\hbar\omega = E_0$  است) واگن نیست. نخستین حالت برانگیخته ( $E_1 = \frac{5}{4}\hbar\omega$ ) واگن سه‌گانه و دومین حالت برانگیخته ( $E_2 = \frac{7}{4}\hbar\omega$ ) واگن شش‌گانه است (جدول ۴-۶). همانطور که در مثال زیر نشان داده شده است، رابطه‌ی واگنی تراز  $m$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$g_m = \frac{1}{4}(n+1)(n+2) \quad (۱۰۱-۶)$$

این عبارت در توافق با (۳۶-۶) است که برای یک نوسانگر هماهنگ همسانگرد در مختصات دکارتی به دست آمد.

سرانجام چون تابع موج شعاعی از  $R_{nl}(r) = U_{nl}(r)/r$  به دست می‌آید [که در آن  $U_{nl}(r)$  در (۸۸-۶) اشاره شده است همراه با  $f(r)$  که یک چندجمله‌ای درجه‌ی  $(n-l)/2$  بر حسب  $r^{2l}$  است] تابع موج کل برای نوسانگر هماهنگ همسانگرد برابر است با

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{U_{nl}(r)}{r}Y_{lm}(\theta, \varphi) = r^l f(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)e^{-M\omega r^2/2\hbar} \quad (۱۰۲-۶)$$

که در آن  $l$  تنها مقادیرهای فرد یا تنها مقادیرهای زوج را می‌گیرد. به عنوان مثال، حالت پایه متناظر با  $(n, l, m) = (0, 0, 0)$  است و تابع موج آن برابر است با

$$\psi_{000}(r, \theta, \varphi) = R_{00}(r)Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{2}{\sqrt{\sqrt{\pi}}} \left( \frac{M\omega}{\hbar} \right)^{3/4} e^{-M\omega r^2/2\hbar} Y_{00}(\theta, \varphi) \quad (۱۰۳-۶)$$

می‌توان پیکربندی‌های  $(n, l, m)$  اولین، دومین و سومین حالت برانگیخته را به صورتی که در ادامه می‌آید، تعیین کرد. نخستین حالت برانگیخته دارای سه حالت واگن است:  $(1, 1, m)$  با  $m = -1, 0, 1$ . دومین حالت برانگیخته دارای ۶ حالت واگن است:  $(2, 0, 0)$  و  $(2, 2, m)$  با  $m = -2, -1, 0, 1, 2$ .

جدول ۴-۶ ترازهای انرژی  $E_n$  و واگنی‌های  $g_n$  مربوط به یک نوسانگر هماهنگ همسانگرد.

$n$	$E_n$	$Nl$	$m$	$g_n$
۰	$\frac{3}{4}\hbar\omega$	۰۰	۰	۱
۱	$\frac{5}{4}\hbar\omega$	۰۱	$\pm 1, 0$	۳
۲	$\frac{7}{4}\hbar\omega$	۱۰	۰	۶
		۰۲	$\pm 2, \pm 1, 0$	
۳	$\frac{9}{4}\hbar\omega$	۱۱	$\pm 1, 0$	۱۰
		۰۳	$\pm 3, \pm 2, \pm 1, 0$	

سومین حالت برانگیخته دارای  $l=0$  حالت واگن است:  $(3, 1, m)$  با  $m = -1, 0, 1$  و  $(3, 3, m)$  با  $m = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$  تعدادی از این تابع‌ها از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$\begin{aligned}\psi_{11m}(r, \theta, \varphi) &= R_{11}(r)Y_{1m}(\theta, \varphi) \\ &= \sqrt{\frac{\lambda}{3\sqrt{\pi}}} \left(\frac{M\omega}{\hbar}\right)^{5/4} r e^{-M\omega r^2/2\hbar} Y_{1m}(\theta, \varphi) \quad (104-6)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\psi_{200}(r, \theta, \varphi) &= R_{20}(r)Y_{00}(\theta, \varphi) \\ &= \sqrt{\frac{\lambda}{3\sqrt{\pi}}} \left(\frac{M\omega}{\hbar}\right)^{3/4} \left(\frac{3}{2} - \frac{M\omega}{\hbar} r^2\right) e^{-M\omega r^2/2\hbar} Y_{00}(\theta, \varphi) \quad (105-6)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\psi_{31m}(r, \theta, \varphi) &= R_{31}(r)Y_{1m}(\theta, \varphi) \\ &= \frac{4}{\sqrt{15\sqrt{\pi}}} \left(\frac{M\omega}{\hbar}\right)^{7/4} r^2 e^{-M\omega r^2/2\hbar} Y_{1m}(\theta, \varphi) \quad (106-6)\end{aligned}$$

مثال ۲-۶ (رابطه‌ی واگنی برای یک نوسانگر همسانگرد)

رابطه‌ی واگنی (۱۰۱-۶) را برای یک نوسانگر هماهنگ همسانگرد ثابت کنید.

حل

چون  $n = 2N + l$  است، عددهای کوانتومی  $n$  و  $l$  باید پاریته‌ی یکسانی داشته باشند. همچنین چون نوسانگر هماهنگ همسانگرد دارای  $l$  موازی است، حالت‌ها  $l$ ،  $l-1$ ،  $l-2$ ،  $l-3$ ،  $l-4$ ،  $l-5$ ،  $l-6$ ،  $l-7$ ،  $l-8$ ،  $l-9$ ،  $l-10$ ،  $l-11$ ،  $l-12$ ،  $l-13$ ،  $l-14$ ،  $l-15$ ،  $l-16$ ،  $l-17$ ،  $l-18$ ،  $l-19$ ،  $l-20$ ،  $l-21$ ،  $l-22$ ،  $l-23$ ،  $l-24$ ،  $l-25$ ،  $l-26$ ،  $l-27$ ،  $l-28$ ،  $l-29$ ،  $l-30$ ،  $l-31$ ،  $l-32$ ،  $l-33$ ،  $l-34$ ،  $l-35$ ،  $l-36$ ،  $l-37$ ،  $l-38$ ،  $l-39$ ،  $l-40$ ،  $l-41$ ،  $l-42$ ،  $l-43$ ،  $l-44$ ،  $l-45$ ،  $l-46$ ،  $l-47$ ،  $l-48$ ،  $l-49$ ،  $l-50$ ،  $l-51$ ،  $l-52$ ،  $l-53$ ،  $l-54$ ،  $l-55$ ،  $l-56$ ،  $l-57$ ،  $l-58$ ،  $l-59$ ،  $l-60$ ،  $l-61$ ،  $l-62$ ،  $l-63$ ،  $l-64$ ،  $l-65$ ،  $l-66$ ،  $l-67$ ،  $l-68$ ،  $l-69$ ،  $l-70$ ،  $l-71$ ،  $l-72$ ،  $l-73$ ،  $l-74$ ،  $l-75$ ،  $l-76$ ،  $l-77$ ،  $l-78$ ،  $l-79$ ،  $l-80$ ،  $l-81$ ،  $l-82$ ،  $l-83$ ،  $l-84$ ،  $l-85$ ،  $l-86$ ،  $l-87$ ،  $l-88$ ،  $l-89$ ،  $l-90$ ،  $l-91$ ،  $l-92$ ،  $l-93$ ،  $l-94$ ،  $l-95$ ،  $l-96$ ،  $l-97$ ،  $l-98$ ،  $l-99$ ،  $l-100$ ،  $l-101$ ،  $l-102$ ،  $l-103$ ،  $l-104$ ،  $l-105$ ،  $l-106$ ،  $l-107$ ،  $l-108$ ،  $l-109$ ،  $l-110$ ،  $l-111$ ،  $l-112$ ،  $l-113$ ،  $l-114$ ،  $l-115$ ،  $l-116$ ،  $l-117$ ،  $l-118$ ،  $l-119$ ،  $l-120$ ،  $l-121$ ،  $l-122$ ،  $l-123$ ،  $l-124$ ،  $l-125$ ،  $l-126$ ،  $l-127$ ،  $l-128$ ،  $l-129$ ،  $l-130$ ،  $l-131$ ،  $l-132$ ،  $l-133$ ،  $l-134$ ،  $l-135$ ،  $l-136$ ،  $l-137$ ،  $l-138$ ،  $l-139$ ،  $l-140$ ،  $l-141$ ،  $l-142$ ،  $l-143$ ،  $l-144$ ،  $l-145$ ،  $l-146$ ،  $l-147$ ،  $l-148$ ،  $l-149$ ،  $l-150$ ،  $l-151$ ،  $l-152$ ،  $l-153$ ،  $l-154$ ،  $l-155$ ،  $l-156$ ،  $l-157$ ،  $l-158$ ،  $l-159$ ،  $l-160$ ،  $l-161$ ،  $l-162$ ،  $l-163$ ،  $l-164$ ،  $l-165$ ،  $l-166$ ،  $l-167$ ،  $l-168$ ،  $l-169$ ،  $l-170$ ،  $l-171$ ،  $l-172$ ،  $l-173$ ،  $l-174$ ،  $l-175$ ،  $l-176$ ،  $l-177$ ،  $l-178$ ،  $l-179$ ،  $l-180$ ،  $l-181$ ،  $l-182$ ،  $l-183$ ،  $l-184$ ،  $l-185$ ،  $l-186$ ،  $l-187$ ،  $l-188$ ،  $l-189$ ،  $l-190$ ،  $l-191$ ،  $l-192$ ،  $l-193$ ،  $l-194$ ،  $l-195$ ،  $l-196$ ،  $l-197$ ،  $l-198$ ،  $l-199$ ،  $l-200$ ،  $l-201$ ،  $l-202$ ،  $l-203$ ،  $l-204$ ،  $l-205$ ،  $l-206$ ،  $l-207$ ،  $l-208$ ،  $l-209$ ،  $l-210$ ،  $l-211$ ،  $l-212$ ،  $l-213$ ،  $l-214$ ،  $l-215$ ،  $l-216$ ،  $l-217$ ،  $l-218$ ،  $l-219$ ،  $l-220$ ،  $l-221$ ،  $l-222$ ،  $l-223$ ،  $l-224$ ،  $l-225$ ،  $l-226$ ،  $l-227$ ،  $l-228$ ،  $l-229$ ،  $l-230$ ،  $l-231$ ،  $l-232$ ،  $l-233$ ،  $l-234$ ،  $l-235$ ،  $l-236$ ،  $l-237$ ،  $l-238$ ،  $l-239$ ،  $l-240$ ،  $l-241$ ،  $l-242$ ،  $l-243$ ،  $l-244$ ،  $l-245$ ،  $l-246$ ،  $l-247$ ،  $l-248$ ،  $l-249$ ،  $l-250$ ،  $l-251$ ،  $l-252$ ،  $l-253$ ،  $l-254$ ،  $l-255$ ،  $l-256$ ،  $l-257$ ،  $l-258$ ،  $l-259$ ،  $l-260$ ،  $l-261$ ،  $l-262$ ،  $l-263$ ،  $l-264$ ،  $l-265$ ،  $l-266$ ،  $l-267$ ،  $l-268$ ،  $l-269$ ،  $l-270$ ،  $l-271$ ،  $l-272$ ،  $l-273$ ،  $l-274$ ،  $l-275$ ،  $l-276$ ،  $l-277$ ،  $l-278$ ،  $l-279$ ،  $l-280$ ،  $l-281$ ،  $l-282$ ،  $l-283$ ،  $l-284$ ،  $l-285$ ،  $l-286$ ،  $l-287$ ،  $l-288$ ،  $l-289$ ،  $l-290$ ،  $l-291$ ،  $l-292$ ،  $l-293$ ،  $l-294$ ،  $l-295$ ،  $l-296$ ،  $l-297$ ،  $l-298$ ،  $l-299$ ،  $l-300$ ،  $l-301$ ،  $l-302$ ،  $l-303$ ،  $l-304$ ،  $l-305$ ،  $l-306$ ،  $l-307$ ،  $l-308$ ،  $l-309$ ،  $l-310$ ،  $l-311$ ،  $l-312$ ،  $l-313$ ،  $l-314$ ،  $l-315$ ،  $l-316$ ،  $l-317$ ،  $l-318$ ،  $l-319$ ،  $l-320$ ،  $l-321$ ،  $l-322$ ،  $l-323$ ،  $l-324$ ،  $l-325$ ،  $l-326$ ،  $l-327$ ،  $l-328$ ،  $l-329$ ،  $l-330$ ،  $l-331$ ،  $l-332$ ،  $l-333$ ،  $l-334$ ،  $l-335$ ،  $l-336$ ،  $l-337$ ،  $l-338$ ،  $l-339$ ،  $l-340$ ،  $l-341$ ،  $l-342$ ،  $l-343$ ،  $l-344$ ،  $l-345$ ،  $l-346$ ،  $l-347$ ،  $l-348$ ،  $l-349$ ،  $l-350$ ،  $l-351$ ،  $l-352$ ،  $l-353$ ،  $l-354$ ،  $l-355$ ،  $l-356$ ،  $l-357$ ،  $l-358$ ،  $l-359$ ،  $l-360$ ،  $l-361$ ،  $l-362$ ،  $l-363$ ،  $l-364$ ،  $l-365$ ،  $l-366$ ،  $l-367$ ،  $l-368$ ،  $l-369$ ،  $l-370$ ،  $l-371$ ،  $l-372$ ،  $l-373$ ،  $l-374$ ،  $l-375$ ،  $l-376$ ،  $l-377$ ،  $l-378$ ،  $l-379$ ،  $l-380$ ،  $l-381$ ،  $l-382$ ،  $l-383$ ،  $l-384$ ،  $l-385$ ،  $l-386$ ،  $l-387$ ،  $l-388$ ،  $l-389$ ،  $l-390$ ،  $l-391$ ،  $l-392$ ،  $l-393$ ،  $l-394$ ،  $l-395$ ،  $l-396$ ،  $l-397$ ،  $l-398$ ،  $l-399$ ،  $l-400$ ،  $l-401$ ،  $l-402$ ،  $l-403$ ،  $l-404$ ،  $l-405$ ،  $l-406$ ،  $l-407$ ،  $l-408$ ،  $l-409$ ،  $l-410$ ،  $l-411$ ،  $l-412$ ،  $l-413$ ،  $l-414$ ،  $l-415$ ،  $l-416$ ،  $l-417$ ،  $l-418$ ،  $l-419$ ،  $l-420$ ،  $l-421$ ،  $l-422$ ،  $l-423$ ،  $l-424$ ،  $l-425$ ،  $l-426$ ،  $l-427$ ،  $l-428$ ،  $l-429$ ،  $l-430$ ،  $l-431$ ،  $l-432$ ،  $l-433$ ،  $l-434$ ،  $l-435$ ،  $l-436$ ،  $l-437$ ،  $l-438$ ،  $l-439$ ،  $l-440$ ،  $l-441$ ،  $l-442$ ،  $l-443$ ،  $l-444$ ،  $l-445$ ،  $l-446$ ،  $l-447$ ،  $l-448$ ،  $l-449$ ،  $l-450$ ،  $l-451$ ،  $l-452$ ،  $l-453$ ،  $l-454$ ،  $l-455$ ،  $l-456$ ،  $l-457$ ،  $l-458$ ،  $l-459$ ،  $l-460$ ،  $l-461$ ،  $l-462$ ،  $l-463$ ،  $l-464$ ،  $l-465$ ،  $l-466$ ،  $l-467$ ،  $l-468$ ،  $l-469$ ،  $l-470$ ،  $l-471$ ،  $l-472$ ،  $l-473$ ،  $l-474$ ،  $l-475$ ،  $l-476$ ،  $l-477$ ،  $l-478$ ،  $l-479$ ،  $l-480$ ،  $l-481$ ،  $l-482$ ،  $l-483$ ،  $l-484$ ،  $l-485$ ،  $l-486$ ،  $l-487$ ،  $l-488$ ،  $l-489$ ،  $l-490$ ،  $l-491$ ،  $l-492$ ،  $l-493$ ،  $l-494$ ،  $l-495$ ،  $l-496$ ،  $l-497$ ،  $l-498$ ،  $l-499$ ،  $l-500$ ،  $l-501$ ،  $l-502$ ،  $l-503$ ،  $l-504$ ،  $l-505$ ،  $l-506$ ،  $l-507$ ،  $l-508$ ،  $l-509$ ،  $l-510$ ،  $l-511$ ،  $l-512$ ،  $l-513$ ،  $l-514$ ،  $l-515$ ،  $l-516$ ،  $l-517$ ،  $l-518$ ،  $l-519$ ،  $l-520$ ،  $l-521$ ،  $l-522$ ،  $l-523$ ،  $l-524$ ،  $l-525$ ،  $l-526$ ،  $l-527$ ،  $l-528$ ،  $l-529$ ،  $l-530$ ،  $l-531$ ،  $l-532$ ،  $l-533$ ،  $l-534$ ،  $l-535$ ،  $l-536$ ،  $l-537$ ،  $l-538$ ،  $l-539$ ،  $l-540$ ،  $l-541$ ،  $l-542$ ،  $l-543$ ،  $l-544$ ،  $l-545$ ،  $l-546$ ،  $l-547$ ،  $l-548$ ،  $l-549$ ،  $l-550$ ،  $l-551$ ،  $l-552$ ،  $l-553$ ،  $l-554$ ،  $l-555$ ،  $l-556$ ،  $l-557$ ،  $l-558$ ،  $l-559$ ،  $l-560$ ،  $l-561$ ،  $l-562$ ،  $l-563$ ،  $l-564$ ،  $l-565$ ،  $l-566$ ،  $l-567$ ،  $l-568$ ،  $l-569$ ،  $l-570$ ،  $l-571$ ،  $l-572$ ،  $l-573$ ،  $l-574$ ،  $l-575$ ،  $l-576$ ،  $l-577$ ،  $l-578$ ،  $l-579$ ،  $l-580$ ،  $l-581$ ،  $l-582$ ،  $l-583$ ،  $l-584$ ،  $l-585$ ،  $l-586$ ،  $l-587$ ،  $l-588$ ،  $l-589$ ،  $l-590$ ،  $l-591$ ،  $l-592$ ،  $l-593$ ،  $l-594$ ،  $l-595$ ،  $l-596$ ،  $l-597$ ،  $l-598$ ،  $l-599$ ،  $l-600$ ،  $l-601$ ،  $l-602$ ،  $l-603$ ،  $l-604$ ،  $l-605$ ،  $l-606$ ،  $l-607$ ،  $l-608$ ،  $l-609$ ،  $l-610$ ،  $l-611$ ،  $l-612$ ،  $l-613$ ،  $l-614$ ،  $l-615$ ،  $l-616$ ،  $l-617$ ،  $l-618$ ،  $l-619$ ،  $l-620$ ،  $l-621$ ،  $l-622$ ،  $l-623$ ،  $l-624$ ،  $l-625$ ،  $l-626$ ،  $l-627$ ،  $l-628$ ،  $l-629$ ،  $l-630$ ،  $l-631$ ،  $l-632$ ،  $l-633$ ،  $l-634$ ،  $l-635$ ،  $l-636$ ،  $l-637$ ،  $l-638$ ،  $l-639$ ،  $l-640$ ،  $l-641$ ،  $l-642$ ،  $l-643$ ،  $l-644$ ،  $l-645$ ،  $l-646$ ،  $l-647$ ،  $l-648$ ،  $l-649$ ،  $l-650$ ،  $l-651$ ،  $l-652$ ،  $l-653$ ،  $l-654$ ،  $l-655$ ،  $l-656$ ،  $l-657$ ،  $l-658$ ،  $l-659$ ،  $l-660$ ،  $l-661$ ،  $l-662$ ،  $l-663$ ،  $l-664$ ،  $l-665$ ،  $l-666$ ،  $l-667$ ،  $l-668$ ،  $l-669$ ،  $l-670$ ،  $l-671$ ،  $l-672$ ،  $l-673$ ،  $l-674$ ،  $l-675$ ،  $l-676$ ،  $l-677$ ،  $l-678$ ،  $l-679$ ،  $l-680$ ،  $l-681$ ،  $l-682$ ،  $l-683$ ،  $l-684$ ،  $l-685$ ،  $l-686$ ،  $l-687$ ،  $l-688$ ،  $l-689$ ،  $l-690$ ،  $l-691$ ،  $l-692$ ،  $l-693$ ،  $l-694$ ،  $l-695$ ،  $l-696$ ،  $l-697$ ،  $l-698$ ،  $l-699$ ،  $l-700$ ،  $l-701$ ،  $l-702$ ،  $l-703$ ،  $l-704$ ،  $l-705$ ،  $l-706$ ،  $l-707$ ،  $l-708$ ،  $l-709$ ،  $l-710$ ،  $l-711$ ،  $l-712$ ،  $l-713$ ،  $l-714$ ،  $l-715$ ،  $l-716$ ،  $l-717$ ،  $l-718$ ،  $l-719$ ،  $l-720$ ،  $l-721$ ،  $l-722$ ،  $l-723$ ،  $l-724$ ،  $l-725$ ،  $l-726$ ،  $l-727$ ،  $l-728$ ،  $l-729$ ،  $l-730$ ،  $l-731$ ،  $l-732$ ،  $l-733$ ،  $l-734$ ،  $l-735$ ،  $l-736$ ،  $l-737$ ،  $l-738$ ،  $l-739$ ،  $l-740$ ،  $l-741$ ،  $l-742$ ،  $l-743$ ،  $l-744$ ،  $l-745$ ،  $l-746$ ،  $l-747$ ،  $l-748$ ،  $l-749$ ،  $l-750$ ،  $l-751$ ،  $l-752$ ،  $l-753$ ،  $l-754$ ،  $l-755$ ،  $l-756$ ،  $l-757$ ،  $l-758$ ،  $l-759$ ،  $l-760$ ،  $l-761$ ،  $l-762$ ،  $l-763$ ،  $l-764$ ،  $l-765$ ،  $l-766$ ،  $l-767$ ،  $l-768$ ،  $l-769$ ،  $l-770$ ،  $l-771$ ،  $l-772$ ،  $l-773$ ،  $l-774$ ،  $l-775$ ،  $l-776$ ،  $l-777$ ،  $l-778$ ،  $l-779$ ،  $l-780$ ،  $l-781$ ،  $l-782$ ،  $l-783$ ،  $l-784$ ،  $l-785$ ،  $l-786$ ،  $l-787$ ،  $l-788$ ،  $l-789$ ،  $l-790$ ،  $l-791$ ،  $l-792$ ،  $l-793$ ،  $l-794$ ،  $l-795$ ،  $l-796$ ،  $l-797$ ،  $l-798$ ،  $l-799$ ،  $l-800$ ،  $l-801$ ،  $l-802$ ،  $l-803$ ،  $l-804$ ،  $l-805$ ،  $l-806$ ،  $l-807$ ،  $l-808$ ،  $l-809$ ،  $l-810$ ،  $l-811$ ،  $l-812$ ،  $l-813$ ،  $l-814$ ،  $l-815$ ،  $l-816$ ،  $l-817$ ،  $l-818$ ،  $l-819$ ،  $l-820$ ،  $l-821$ ،  $l-822$ ،  $l-823$ ،  $l-824$ ،  $l-825$ ،  $l-826$ ،  $l-827$ ،  $l-828$ ،  $l-829$ ،  $l-830$ ،  $l-831$ ،  $l-832$ ،  $l-833$ ،  $l-834$ ،  $l-835$ ،  $l-836$ ،  $l-837$ ،  $l-838$ ،  $l-839$ ،  $l-840$ ،  $l-841$ ،  $l-842$ ،  $l-843$ ،  $l-844$ ،  $l-845$ ،  $l-846$ ،  $l-847$ ،  $l-848$ ،  $l-849$ ،  $l-850$ ،  $l-851$ ،  $l-852$ ،  $l-853$ ،  $l-854$ ،  $l-855$ ،  $l-856$ ،  $l-857$ ،  $l-858$ ،  $l-859$ ،  $l-860$ ،  $l-861$ ،  $l-862$ ،  $l-863$ ،  $l-864$ ،  $l-865$ ،  $l-866$ ،  $l-867$ ،  $l-868$ ،  $l-869$ ،  $l-870$ ،  $l-871$ ،  $l-872$ ،  $l-873$ ،  $l-874$ ،  $l-875$ ،  $l-876$ ،  $l-877$ ،  $l-878$ ،  $l-879$ ،  $l-880$ ،  $l-881$ ،  $l-882$ ،  $l-883$ ،  $l-884$ ،  $l-885$ ،  $l-886$ ،  $l-887$ ،  $l-888$ ،  $l-889$ ،  $l-890$ ،  $l-891$ ،  $l-892$ ،  $l-893$ ،  $l-894$ ،  $l-895$ ،  $l-896$ ،  $l-897$ ،  $l-898$ ،  $l-899$ ،  $l-900$ ،  $l-901$ ،  $l-902$ ،  $l-903$ ،  $l-904$ ،  $l-905$ ،  $l-906$ ،  $l-907$ ، <

چون پاریتی حالت‌های متناظر با یک پتانسیل مرکزی از  $(-1)^l$  به دست می‌آید، عدد کوانتومی  $l$  (و از این رو  $n$ ) می‌تواند تنها مقادیر زوج یا تنها مقادیر فرد را بگیرد. بیایید حالت‌هایی که در آنها  $n$  زوج یا فرد است را جداگانه بررسی کنیم.

ابتدا زمانی که  $n$  زوج است، واگنی  $g_n$ ،  $n$  امین حالت برانگیخته از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$g_n = \sum_{l=0,2,4,\dots}^n (2l+1) = \sum_{l=0,2,4,\dots}^n 1 + 2 \sum_{l=0,2,4,\dots}^n l$$

$$l = \frac{1}{2}(n+2) + \frac{n(n+2)}{4} = \frac{1}{4}(n+1)(n+2) \quad (107-6)$$

راه صریح‌تر به دست آوردن این سری از نوشتن آن به دو شکل معادل زیر تشکیل شده است:

$$g_n = 1 + 5 + 9 + 13 + \dots + (2n-7) + (2n-3) + (2n+1) \quad (108-6)$$

$$g_n = (2n+1) + (2n-3) + (2n-7) + (2n-11) + \dots + 13 + 9 + 5 + 1 \quad (109-6)$$

سپس آنها را جمله به جمله با هم جمع می‌کنیم تا رابطه‌ی زیر را به دست آوریم:

$$2g_n = (2n+2) + (2n+2) + (2n+2) + (2n+2) + \dots + (2n+2) = (2n+2) \left( \frac{n}{2} + 1 \right) \quad (110-6)$$

این رابطه  $g_n = \frac{1}{4}(n+1)(n+2)$  را نتیجه می‌دهد که زمانی که  $n$  زوج باشد،  $(101-6)$  را ثابت می‌کند.

دوم این که زمانی که  $n$  فرد است، بحث مشابهی به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$g_n = \sum_{l=1,3,5,7,\dots}^n (2l+1) = \sum_{l=1,3,5,7,\dots}^n 1 + 2 \sum_{l=1,3,5,7,\dots}^n l \quad (111-6)$$

$$= \frac{1}{2}(n+1) + \frac{1}{2}(n+1)^2 = \frac{1}{4}(n+1)(n+2)$$

که زمانی که  $n$  فرد باشد،  $(101-6)$  را ثابت می‌کند. توجه کنید که همانطور که انتظار می‌رفت، این رابطه‌ی واگنی با عبارت واگنی  $(36-6)$  که در مختصات دکارتی برای یک نوسانگر هماهنگ به دست آمد، یکسان است.

## ۵-۳-۶ اتم هیدروژن

اتم هیدروژن از یک الکترون و یک پروتون تشکیل شده است. برای سادگی، از اسپین آنها صرف نظر خواهیم کرد. آنگاه تابع موج به شش مختصه  $\mathbf{r}_e(x_e, y_e, z_e)$  و  $\mathbf{r}_p(x_p, y_p, z_p)$  بستگی دارد که در آن  $\mathbf{r}_e$  و  $\mathbf{r}_p$  به ترتیب بردارهای مکان الکترون و پروتون هستند. مطابق با تفسیر احتمالاتی تابع موج، کمیت  $\int |\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p, t)|^2 d^3r_e d^3r_p$  این احتمال را نمایش می‌دهد که اندازه‌گیری همزمان مکان الکترون و پروتون در زمان  $t$  به حضور الکترون در المان حجم  $d^3r_e$  و پروتون در  $d^3r_p$  خواهد انجامید.

معادله‌ی شرودینگر وابسته به زمان اتم هیدروژن به صورت زیر است:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_p} \nabla_p^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 + V(r) \right] \Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p, t) \quad (۱۱۲-۶)$$

که در آن  $\nabla_e^2$  و  $\nabla_p^2$  لاپلاسی نسبت به درجه‌های آزادی پروتون و الکترون (با  $\nabla_p^2 = \partial^2/\partial x_p^2 + \partial^2/\partial y_p^2 + \partial^2/\partial z_p^2$  و  $\nabla_e^2 = \partial^2/\partial x_e^2 + \partial^2/\partial y_e^2 + \partial^2/\partial z_e^2$ ) هستند و  $V(r)$  پتانسیل (برهمکش) بین الکترون و پروتون است. این برهمکش که تنها به فاصله‌ای که الکترون و پروتون را جدا می‌کند ( $r = r_e - r_p$ ) بستگی دارد، از پتانسیل کولن به دست می‌آید:

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} \quad (۱۱۳-۶)$$

توجه: در سراسر کتاب، از یکاهای CGS برای پتانسیل کولنی که از  $V(r) = -e^2/r$  به دست می‌آید، استفاده خواهیم کرد (به هر حال، این رابطه در یکاهای MKS از  $V(r) = -e^2/(4\pi\epsilon_0 r)$  به دست می‌آید).

چون  $V$  به زمان بستگی ندارد، جواب‌های (۱۱۲-۶) مانا هستند، از این رو می‌توان آنها را به صورت زیر نوشت:

$$\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p, t) = \chi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p) e^{-iEt/\hbar} \quad (۱۱۴-۶)$$

که در آن  $E$  انرژی کل سیستم الکترون-پروتون است. با جاگذاری این رابطه در (۱۱۲-۶) معادله‌ی شرودینگر مستقل از زمان اتم هیدروژن را به دست می‌آوریم:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_p} \nabla_p^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p|} \right] \chi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p) = E\chi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p) \quad (۱۱۵-۶)$$

## ۱-۵-۳-۶ جداسازی حرکت مرکز جرم

چون  $V$  به جای مختصه‌های  $\mathbf{r}_e$  و  $\mathbf{r}_p$  (بردارهای مکان الکترون و پروتون)، تنها به فاصله‌ی نسبی بین الکترون و پروتون بستگی دارد، مناسب‌تر است از مختصات مرکز جرم،  $\mathbf{R} = X\mathbf{i} + Y\mathbf{j} + Z\mathbf{k}$  و

مختصات نسبی الکترون نسبت به پروتون،  $\mathbf{r} = x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k}$  استفاده شود. تبدیل از  $\mathbf{r}_e$  و  $\mathbf{r}_p$  به  $\mathbf{R}$  و  $\mathbf{r}$  از رابطه‌های زیر به دست می‌آید:

$$\mathbf{R} = \frac{m_e \mathbf{r}_e + m_p \mathbf{r}_p}{m_e + m_p}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p \quad (۱۱۶-۶)$$

می‌توانیم ثابت کنیم که لاپلاسی‌های  $\nabla_e^2$  و  $\nabla_p^2$  به لاپلاسی‌های

$$\nabla_R^2 = \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2}, \quad \nabla_r^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (۱۱۷-۶)$$

به صورت زیر مربوط می‌شوند:

$$\frac{1}{m_e} \nabla_e^2 + \frac{1}{m_p} \nabla_p^2 = \frac{1}{M} \nabla_R^2 + \frac{1}{\mu} \nabla_r^2 \quad (۱۱۸-۶)$$

که در آن

$$M = m_e + m_p, \quad \mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \quad (۱۱۹-۶)$$

به ترتیب جرم کلی و کاهش یافته‌اند. آنگاه معادله‌ی شرودینگر مستقل از زمان (۱۱۵-۶) به صورت زیر در می‌آید:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 + V(r) \right] \Psi_E(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E \Psi_E(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \quad (۱۲۰-۶)$$

که در آن  $\Psi_E(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \chi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p)$  است. حال بیایید این معادله را با جداسازی متغیرها حل کنیم. یعنی به دنبال جواب‌هایی به شکل زیر هستیم:

$$\Psi_E(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r}) \quad (۱۲۱-۶)$$

که در آن  $\Phi(\mathbf{R})$  و  $\psi(\mathbf{r})$  به ترتیب تابع‌های موج حرکت CM و نسبی هستند. با جاگذاری این تابع موج در (۱۲۰-۶) و تقسیم آن بر  $\Phi(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r})$  معادله‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{\Phi(\mathbf{R})} \nabla_R^2 \Phi(\mathbf{R}) \right] + \left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{\psi(\mathbf{r})} \nabla_r^2 \psi(\mathbf{r}) + V(r) \right] = E \quad (۱۲۲-۶)$$

کروشه‌ی نخست تنها به  $\mathbf{R}$  بستگی دارد در حالی که کروشه‌ی دوم تنها به  $\mathbf{r}$  بستگی دارد. چون  $\mathbf{R}$  و  $\mathbf{r}$  بردارهای مستقلی هستند، دو عبارت طرف چپ (۱۲۲-۶) باید جداگانه ثابت باشند. بنابراین می‌توانیم (۱۲۲-۶) را به دو معادله‌ی جداگانه‌ی زیر کاهش دهیم:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 \Phi(\mathbf{R}) = E_R \Phi(\mathbf{R}) \quad (۱۲۳-۶)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 \psi(\mathbf{r}) + V(r)\psi(\mathbf{r}) = E_r \psi(\mathbf{r}) \quad (۱۲۴-۶)$$

با شرط

$$E_R + E_r = E \quad (۱۲۵-۶)$$

بنابراین معادله‌ی شرودینگر (۶-۱۲۰) که شامل دو متغیر  $\mathbf{R}$  و  $\mathbf{r}$  است را به دو معادله‌ی جداگانه‌ی (۶-۱۲۳) و (۶-۱۲۴) که هر یک شامل یک متغیرند، کاهش داده‌ایم. توجه کنید که معادله‌ی (۶-۱۲۳) نشان می‌دهد که مرکز جرم مانند یک ذره‌ی آزاد به جرم  $M$  حرکت می‌کند. جواب چنین معادله‌ای پیشتر و در همین فصل بررسی شد که به شکل زیر است:

$$\Phi(\mathbf{R}) = (2\pi)^{-3/2} e^{ik \cdot \mathbf{R}} \quad (۱۲۶-۶)$$

که در آن  $\mathbf{k}$  بردار موج وابسته به مرکز جرم است. ثابت  $E_R = \hbar^2 k^2 / (2M)$  انرژی جنبشی مرکز جرم را در دستگاه آزمایشگاه به دست می‌دهد (جرم کل  $M$  در میانه مرکز جرم دستگاه مختصات واقع شده است). معادله‌ی دوم (۶-۱۲۴) معادله‌ی شرودینگر یک ذره‌ی فرضی است به جرم  $\mu$  که در پتانسیل مرکزی  $-e^2/r$  حرکت می‌کند.

باید توجه کنیم که تابع موج کل  $\Psi_E(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r})$  به ندرت مورد استفاده قرار می‌گیرد. هرگاه به مسأله‌ی اتم هیدروژن اشاره شود، به‌طور ضمنی به  $\psi(\mathbf{r})$  و  $E_r$  اشاره دارد. یعنی تابع موج و انرژی هیدروژن به‌صورت  $\psi(\mathbf{r})$  و  $E_r$  در نظر گرفته می‌شوند و نه به‌صورت  $\Psi_E$  و  $E$ .

### ۶-۳-۵-۲ جواب معادله‌ی شعاعی اتم هیدروژن

شکل معادله‌ی شرودینگر (۶-۱۲۴) برای حرکت نسبی مشابه شکل این معادله برای یک پتانسیل مرکزی است. تابع موج  $\psi(\mathbf{r})$  که یک جواب این معادله است، حاصل ضرب یک قسمت زاویه‌ای و یک قسمت شعاعی است. قسمت زاویه‌ای از هماهنگ کروی  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  به دست می‌آید. می‌توان قسمت شعاعی  $R(r)$  را از حل معادله‌ی شعاعی زیر به دست آورد:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 U(r)}{dr^2} + \left[ \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r} \right] U(r) = E U(r) \quad (۱۲۷-۶)$$

که در آن  $U(r) = rR(r)$  است. برای حل این معادله‌ی شعاعی قصد داریم تا ابتدا جواب‌های مجانبی آن را بررسی کنیم و سپس یک جواب سری نمایی را آزمایش کنیم.

(الف) رفتار مجانبی تابع موج شعاعی

به ازای مقادیرهای بسیار کوچک  $r$ ، (۱۲۷-۶) به معادله‌ی زیر کاهش می‌یابد:

$$-\frac{d^2 U(r)}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} U(r) = 0 \quad (128-6)$$

که جواب‌های آن به شکل زیر هستند:

$$U(r) = Ar^{l+1} + Br^{-l} \quad (129-6)$$

که در آن  $A$  و  $B$  ثابت‌اند. چون  $U(r)$  در  $r = 0$  صفر می‌شود، جمله‌ی دوم ( $r^{-l}$ ) که در  $r = 0$  واگرا می‌شود باید کنار گذاشته شود. بنابراین به ازای مقادیرهای کوچک  $r$ ، جواب به صورت زیر است:

$$U(r) \sim r^{l+1} \quad (130-6)$$

حال در مقادیرهای بسیار بزرگ  $r$ ، می‌توانیم (۱۲۷-۶) را به صورت زیر تقریب بزنیم:

$$\frac{d^2 U(r)}{dr^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2} U(r) = 0 \quad (131-6)$$

توجه کنید که به ازای جواب‌های حالت مقید (که متناظر با حالت‌هایی هستند که در آنها الکترون و پروتون به یکدیگر مقیدند)، انرژی  $E$  باید منفی باشد. از این رو جواب‌های این معادله به شکل  $U(r) \sim e^{\pm\lambda r}$  هستند که در آن  $\lambda = \sqrt{2\mu(-E)}/\hbar$  است. تنها جواب با علامت منفی از نظر فیزیکی قابل قبول است زیرا  $e^{\lambda r}$  به ازای مقادیرهای بزرگ  $r$  واگرا می‌شود. بنابراین  $U(r)$  به ازای مقادیرهای بزرگ  $r$ ، مانند

$$U(r) \longrightarrow e^{-\lambda r} \quad (132-6)$$

رفتار می‌کند. می‌توان جواب‌های (۱۲۷-۶) را از ترکیب کردن (۱۳۰-۶) و (۱۳۲-۶) به دست آورد:

$$U(r) = r^{l+1} f(r) e^{-\lambda r} \quad (133-6)$$

که در آن  $f(r)$  یک تابع وابسته به  $r$  است. با جاگذاری (۱۳۳-۶) در (۱۲۷-۶) به معادله‌ی دیفرانسیلی می‌رسیم که شکل  $f(r)$  را تعیین می‌کند:

$$\frac{d^2 f}{dr^2} + 2 \left( \frac{l+1}{r} - \lambda \right) \frac{df}{dr} + 2 \left[ \frac{-\lambda(l+1) + \mu e^{\lambda r}/\hbar^2}{r} \right] f(r) = 0 \quad (134-6)$$

(ب) جواب‌های سری توانی معادله‌ی شعاعی

همانند مورد نوسانگر هماهنگ سه‌بعدی، بی‌اثید یک جواب سری توانی را برای (۱۳۴-۶) امتحان کنیم:

$$f(r) = \sum_{k=0}^{\infty} b_k r^k \quad (135-6)$$

که زمانی که در (۱۳۴-۶) قرار گیرد، نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left[ k(k+2l+1)b_k r^{k-2} + 2 \left[ -\lambda(k+l+1) + \frac{\mu e^2}{\hbar^2} \right] b_k r^{k-1} \right] = 0 \quad (136-6)$$

این معادله (با تغییر  $k$  به  $k-1$  در جمله‌ی آخر)، به رابطه‌ی بازگشتی زیر می‌انجامد:

$$k(k+2l+1)b_k = 2 \left[ \lambda(k+1) - \frac{\mu e^2}{\hbar^2} \right] b_{k-1} \quad (137-6)$$

در حد مقادیرهای بزرگ  $k$ ، نسبت ضریب‌های متوالی

$$\frac{b_k}{b_{k-1}} = \frac{2[\lambda(k+l) - \mu e^2/\hbar^2]}{k(k+2l+1)} \quad (138-6)$$

از مرتبه‌ی

$$\frac{b_k}{b_{k-1}} \rightarrow \frac{2\lambda}{k} \quad (139-6)$$

است که رفتار یک سری نمایی است زیرا نسبت ضریب‌های متوالی رابطه‌ی  $e^{2x} = \sum_{k=0}^{\infty} (2x)^k/k!$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\frac{2^k (k-1)!}{k! 2^{k-1}} = \frac{2}{k} \quad (140-6)$$

یعنی رفتار مجانبی (۱۳۵-۶) به صورت زیر است:

$$f(r) = \sum_{k=0}^{\infty} b_k r^k \rightarrow e^{2\lambda r} \quad (141-6)$$

از این رو جواب شعاعی (۱۳۳-۶) به صورت زیر در می‌آید:

$$U(r) = r^{l+1} e^{2\lambda r} e^{-\lambda r} = r^{l+1} e^{\lambda r} \quad (142-6)$$

اما این در تناقض با (۱۳۳-۶) است: به ازای مقادیرهای بزرگ  $r$ ، رفتار مجانبی تابع شعاعی، از نظر فیزیکی قابل قبول (۱۳۳-۶) با  $e^{-\lambda r}$  مشخص می‌شود در حالی که در مورد (۱۴۲-۶) با  $e^{\lambda r}$ . بنابراین شکل (۱۴۲-۶) از نظر فیزیکی غیرقابل قبول است.



## (ب) کوانتس انرژی

برای به دست آوردن جواب قابل قبول فیزیکی، سری (۶-۱۳۵) باید در توان مشخصی از  $N$  پایان یابد از این رو تابع  $f(r)$  یک چندجمله‌ای مرتبه‌ی  $N$  می‌شود:

$$f(r) = \sum_{k=0}^N b_k r^k \quad (۶-۱۴۳)$$

این نیازمند آن است که تمام ضرایب‌های  $b_{N+1}, b_{N+2}, b_{N+3}, \dots$  صفر شوند. هنگامی که  $a_{N+1} = 0$  است، فرمول بازگشتی (۶-۱۳۷) نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\lambda(N+l+1) - \frac{\mu e^2}{\hbar^2} = 0 \quad (۶-۱۴۴)$$

چون  $\lambda = \sqrt{-2\mu E/\hbar^2}$  است و با استفاده از نمادگذاری

$$n = N + l + 1 \quad (۶-۱۴۵)$$

که در آن  $n$  به عنوان عدد کوانتومی اصلی و  $N$  به عنوان عدد کوانتومی شعاعی شناخته می‌شوند، می‌توانیم رابطه‌ی انرژی زیر را نتیجه بگیریم:

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2 n^2} \quad (۶-۱۴۶)$$

که به نوبه‌ی خود می‌توان آن را به صورت زیر نوشت:

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{e^2}{2a_0} \frac{1}{n^2} \quad (۶-۱۴۷)$$

زیرا (از نظریه‌ی بوهر برای اتم هیدروژن) شعاع بوهر از رابطه‌ی  $a_0 = \hbar^2/(\mu e^2)$  به دست می‌آید و از این رو  $\mu/\hbar^2 = 1/(e^2 a_0)$  توجه کنید که می‌توانیم  $\lambda$  را به صورت زیر برحسب  $a_0$  بنویسیم:

$$\lambda = \sqrt{-2\frac{\mu}{\hbar^2} E_n} = \sqrt{2 \frac{1}{e^2 a_0} \frac{e^2}{2a_0 n^2}} = \frac{1}{na_0} \quad (۶-۱۴۸)$$

چون  $N = 0, 1, 2, 3, \dots$  است، مقدارهای مجاز  $n$  عددهای صحیح غیرصفرند  $(n = l + 1, l + 2, l + 3, \dots)$ . به‌ازای مقدارهای معلوم  $n$ ، عدد کوانتومی مداری  $l$  می‌تواند تنها مقدارهای بین  $0$  و  $n - 1$  را داشته باشد (یعنی  $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ ).

## ملاحظات

- توجه کنید که (۶-۱۴۷) مشابه با عبارت انرژی به‌دست آمده از شرط کوانتس بوه‌ر (که در فصل ۱ بحث شد) است. می‌توان آن را به‌صورت زیر برحسب ثابت ری‌دبرگ  $R = m_e e^4 / (2\hbar^2)$  بازنویسی کرد:

$$E_n = -\frac{m_p}{m_p + m_e} \frac{R}{n^2} \quad (۶-۱۴۹)$$

- که در آن  $R = ۱۳/۶ eV$  است. چون نسبت  $m_e/m_p$  بسیار کوچک است ( $m_e/m_p \ll ۱$ )، می‌توانیم این عبارت را به‌صورت زیر تقریب بزنیم:

$$E_n = -\left(1 + \frac{m_e}{m_p}\right)^{-1} \frac{R}{n^2} \simeq -\left(1 - \frac{m_e}{m_p}\right) \frac{R}{n^2} \quad (۶-۱۵۰)$$

- بنابراین اگر پروتون را بسیار سنگین‌تر از الکترون در نظر بگیریم آنگاه به عبارت انرژی که بوه‌ر به‌دست آورد، می‌رسیم:  $E_n = -R/n^2$ .

- انرژی اتم‌های هیدروژن‌گونه: چگونه می‌توان انرژی یک اتم یا یون با بار هسته‌ی  $Ze$  که تنها یک الکترون دارد<sup>۴</sup> را به‌دست آورد؟ چون پتانسیل کولنی‌ای که یک الکترون به دلیل بار  $Ze$  احساس می‌کند از رابطه‌ی  $V(r) = -Ze^2/r$  به دست می‌آید، می‌توان انرژی الکترون را از (۶-۱۴۷) و با جایگزینی  $e^2$  با  $Ze^2$  نتیجه گرفت:

$$E_n = -\frac{m_e (Ze^2)^2}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{Z^2 E_0}{n^2} \quad (۶-۱۵۱)$$

- که در آن  $E_0 = e^2/(2a_0) = ۱۳/۶ eV$  است. در به‌دست آوردن این رابطه فرض کرده‌ایم که جرم هسته در مقایسه با جرم الکترون بسیار بزرگ است.

## (ت) تابع‌های موج شعاعی اتم هیدروژن

می‌توان تابع موج شعاعی  $R_{nl}(r)$  را با وارد کردن (۶-۱۴۳) در (۶-۱۳۳) به‌دست آورد:

$$R_{nl}(r) = \frac{1}{r} U_{nl}(r) = A_{nl} r^l e^{-\lambda r} \sum_{k=0}^N b_k r^k = A_{nl} r^l e^{-r/na_0} \sum_{k=0}^N b_k r^k \quad (۶-۱۵۲)$$

چون همانطور که در (۶-۱۴۸) نشان داده شد،  $\lambda = 1/(na_0)$  و  $A_{nl}$  یک ثابت بهنجارش است.

۴. به عنوان مثال،  $Z = ۱$  به  $H$ ،  $Z = ۲$  به  $He^+$ ،  $Z = ۳$  به  $Li^{2+}$ ،  $Z = ۴$  به  $Be^{3+}$ ،  $Z = ۵$  به  $B^{4+}$ ،  $Z = ۶$  به  $C^{5+}$  اشاره دارند و به همین ترتیب.

اما چگونه می‌توان عبارت  $R_{nl}(r)$  را تعیین کرد؟ در پاسخ باید گفت که این مسأله به، به‌دست آوردن شکل چندجمله‌ای  $r^l \sum_{k=0}^N b_k r^k$  و ثابت بهنجارش  $A_{nl}$  منجر می‌شود. بدین منظور، قصد داریم تا دو روش را بررسی کنیم: رهیافت نخست یک محاسبه‌ی سرراست را دنبال می‌کند و رهیافت دوم از تابع‌های خاص استفاده می‌کند.

### (۱) رهیافت نخست: محاسبه‌ی سرراست $R_{nl}(r)$

این رهیافت از بنا کردن سرراست  $R_{nl}(r)$  تشکیل شده است. می‌خواهیم نشان دهیم که چگونه می‌توان تنها چندجمله‌ی نخست را بنا کرد. به عنوان مثال، هرگاه  $n = 1$  و  $l = 0$  باشد آنگاه  $N = 0$  است. چون  $N = n - l - 1$  و  $\lambda = 1/(na_0)$  است، می‌توانیم (۱۵۲-۶) را به‌صورت زیر بنویسیم:

$$R_{10}(r) = A_{10} e^{-r/a_0} \sum_{k=0}^0 b_k r^k = A_{10} b_0 e^{-r/a_0} \quad (153-6)$$

که در آن می‌توان  $A_{10} b_0$  را از بهنجارش  $R_{10}(r)$  به‌دست آورد: با استفاده از  $\int_0^\infty x^n e^{-ax} dx = n!/a^{n+1}$  داریم:

$$1 = \int_0^\infty r^2 |R_{10}(r)|^2 dr = A_{10}^2 b_0^2 \int_0^\infty r^2 e^{-2r/a_0} dr = A_{10}^2 b_0^2 \frac{a_0^3}{4} \quad (154-6)$$

ازاین رو  $A_{10} = 1$  و  $b_0 = 2(a_0)^{-3/2}$  است. بنابراین  $R_{10}(r)$  از رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آید:

$$R_{10}(r) = 2(a_0)^{-3/2} e^{-r/a_0} \quad (155-6)$$

حال می‌خواهیم  $R_{20}(r)$  را پیدا کنیم. چون  $n = 2$  و  $l = 0$  است، داریم:  $N = 2 - 0 - 1 = 1$  و

$$R_{20}(r) = A_{20} e^{-r/2a_0} \sum_{k=0}^1 b_k r^k = A_{20} (b_0 + b_1 r) e^{-r/2a_0} \quad (156-6)$$

از (۱۳۸-۶) می‌توانیم  $b_1$  را به‌صورت زیر برحسب  $b_0$  بیان کنیم:

$$b_1 = \frac{2\lambda(k+l) - 2/a_0}{k(k+2l+1)} b_0 = -\frac{1}{2a_0} b_0 = -\frac{1}{a_0 \sqrt{a_0^3}} \quad (157-6)$$

زیرا  $l = 0$  و  $k = 1$ ،  $\lambda = 1/(2a_0)$  است. بنابراین با جاگذاری (۱۵۷-۶) در (۱۵۶-۶) و بهنجار کردن آن،  $A_{20} = 1/(2\sqrt{2})$  را به‌دست می‌آوریم ازاین رو

$$R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{2} a_0^2} \left( 1 - \frac{r}{2a_0} \right) e^{-r/2a_0} \quad (158-6)$$

جدول ۵-۶ چند چندجمله‌ای نخست لاگَر و چندجمله‌ای‌های لاگَر وابسته.

چندجمله‌ای‌های لاگَر $L_k(r)$	چندجمله‌ای‌های لاگَر وابسته $L_k^N(r)$
$L_0 = 1$	
$L_1 = 1 - r$	$L_1^N = -1$
$L_2 = 2 - 4r + r^2$	$L_2^N = -4 + 2r, L_2^Y = 2$
$L_3 = 6 - 18r + 9r^2 - r^3$	$L_3^N = -18 + 18r - 3r^2, L_3^Y = 18 - 6r, L_3^Z = -6$
$L_4 = 24 - 96r + 72r^2 - 16r^3 + r^4$	$L_4^N = -96 + 144r - 48r^2 + 4r^3$
	$L_4^Y = 144 - 96r + 12r^2, L_4^Z = 24r - 96, L_4^W = 24$
$L_5 = 120 - 600r + 600r^2 - 200r^3 + 25r^4 - r^5$	$L_5^N = -600 + 1200r - 600r^2 + 100r^3 - 5r^4$
	$L_5^Y = 1200 - 1200r + 300r^2 - 20r^3$
	$L_5^Z = -1200 + 600r - 60r^2, L_5^W = 600 - 120r$
	$L_5^V = -120$

با ادامه دادن این روش، می‌توانیم عبارت مربوط به هر تابع موج شعاعی  $R_{nl}(r)$  را به دست آوریم. توجه کنید که با دانستن  $b_0 = 2(a_0)^{-3/2}$  می‌توانیم از رابطه‌ی بازگشتی (۱۳۸-۶) برای به دست آوردن تمام ضریب‌های دیگر  $b_2, b_3$  و ... استفاده کنیم.

### (۲) رهیافت دوم: تعیین $R_{nl}(r)$ به وسیله‌ی تابع‌های خاص

چندجمله‌ای  $r^l \sum_{k=0}^N b_k r^k$  حاضر در (۱۵۲-۶) یک چندجمله‌ای درجه‌ی  $N+l$  یا  $n-1$  است زیرا  $n = N+l+1$  است. این چندجمله‌ای که با  $L_k^N(r)$  نمایش داده می‌شود، به عنوان چندجمله‌ای لاگَر وابسته شناخته می‌شود و یک جواب معادله‌ی شرودینگر (۱۳۴-۶) است. جواب‌های معادله‌های دیفرانسیل به شکل (۱۳۴-۶) مدت‌ها قبل از پیدایش مکانیک کوانتومی توسط لاگَر مطالعه شده بود. چندجمله‌ای لاگَر وابسته برحسب چندجمله‌ای‌های لاگَر مرتبه‌ی  $k$  ( $L_k(r)$ ) به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$L_k^N(r) = \frac{d^N}{dr^N} L_k(r) \quad (159-6)$$

که در آن

$$L_k(r) = e^r \frac{d^k}{dr^k} (r^k e^{-r}) \quad (160-6)$$

تعدادی چندجمله‌ای نخست لاگَر در جدول ۵-۶ فهرست شده‌اند.

می‌توانیم ثابت کنیم که  $L_k(r)$  و  $L_k^N(r)$  در معادله‌های دیفرانسیل زیر صدق می‌کنند:

$$r \frac{d^2 L_k(r)}{dr^2} + (1-r) \frac{dL_k(r)}{dr} + kL_k(r) = 0 \quad (161-6)$$

$$r \frac{d^2 L_k^N(r)}{dr^2} + (N+1-r) \frac{dL_k^N(r)}{dr} + (k-N)L_k^N(r) = 0 \quad (162-6)$$

معادله‌ی آخر با معادله‌ی شعاعی اتم هیدروژن (۱۳۴-۶) یکسان است. اثبات به صورتی است که در ادامه می‌آید. با استفاده از تغییر متغیر

$$\rho = 2\lambda r = 2 \frac{\sqrt{-2\mu E}}{\hbar} r \quad (163-6)$$

همراه با این واقعیت که  $a_0 = \hbar^2/(\mu e^2)$  (شعاع بوهر) است، می‌توانیم نشان دهیم که (۱۳۴-۶) به معادله‌ی زیر کاهش می‌یابد:

$$\rho \frac{d^2 g(\rho)}{d\rho^2} + [(2l+1) + 1 - \rho] \frac{dg(\rho)}{d\rho} + [(n+l) - (2l+1)]g(\rho) = 0 \quad (164-6)$$

که در آن  $f(r) = g(\rho)$  است. در به دست آوردن (۱۶۴-۶) از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که  $1/\lambda a_0 = n$  است ((۱۴۸-۶) را ببینید). توجه کنید که معادله‌های (۱۶۲-۶) و (۱۶۴-۶) یکسانند بنابراین جواب‌های (۱۳۴-۶) از چند جمله‌ای‌های لاگر وابسته  $L_{n+l}^{2l+1}(2\lambda r)$  به دست می‌آیند.

آنگاه تابع موج شعاعی اتم هیدروژن از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$R_{nl}(r) = N_{nl} \left( \frac{2r}{na_0} \right)^l e^{-r/na_0} L_{n+l}^{2l+1} \left( \frac{2r}{na_0} \right) \quad (165-6)$$

که در آن  $N_{nl}$  ثابتی است که از بهنجار کردن تابع شعاعی  $R_{nl}(r)$  به دست می‌آید:

$$\int_0^\infty r^2 R_{nl}^2(r) dr = 1 \quad (166-6)$$

با استفاده از شرط بهنجارش توابع لاگر وابسته

$$\int_0^\infty e^{-\rho} \rho^{2l} [L_{n+l}^{2l+1}(\rho)]^2 \rho^2 d\rho = \frac{2n[(n+l)!]^2}{(n-l-1)!} \quad (167-6)$$

که در آن  $\rho = 2\lambda r = 2r/(na_0)$  است، می‌توانیم نشان دهیم که  $N_{nl}$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$N_{nl} = - \left( \frac{2}{na_0} \right)^{3/2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^2}} \quad (168-6)$$

تابع‌های موج اتم هیدروژن از رابطه‌ی زیر به دست می‌آیند:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (169-6)$$

جدول ۶-۶ چند تابع موج شعاعی نخست  $R_{nl}(r)$  اتم هیدروژن.

$R_{10}(r) = 2a_0^{-3/2} e^{-r/a_0}$	$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{6}a_0^2} \frac{r}{2a_0} e^{-r/2a_0}$
$R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{2}a_0^2} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0}$	$R_{31}(r) = \frac{4}{9\sqrt{6}a_0^2} \left(1 - \frac{r}{3a_0}\right) \left(\frac{r}{3a_0}\right) e^{-r/3a_0}$
$R_{30}(r) = \frac{2}{3\sqrt{3}a_0^2} \left(1 - \frac{2r}{3a_0} + \frac{2r^2}{27a_0^2}\right) e^{-r/3a_0}$	$R_{32}(r) = \frac{4}{9\sqrt{30}a_0^2} \left(\frac{r}{3a_0}\right)^2 e^{-r/3a_0}$

که در آن تابع‌های شعاعی  $R_{nl}(r)$  عبارتند از

$$R_{nl}(r) = - \left(\frac{2}{na_0}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l e^{-r/na_0} L_{n+l}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na_0}\right) \quad (۱۷۰-۶)$$

چند تابع موج شعاعی نخست در جدول ۶-۶ فهرست شده‌اند. همانطور که در (۱۵۵-۶) و (۱۵۸-۶) نشان داده شد، این تابع‌ها با تابع‌های به‌دست آمده از بنا کردن سراسر  $R_{nl}(r)$  یکسانند. شکل برخی از این تابع‌های شعاعی در شکل ۳-۶ رسم شده است.

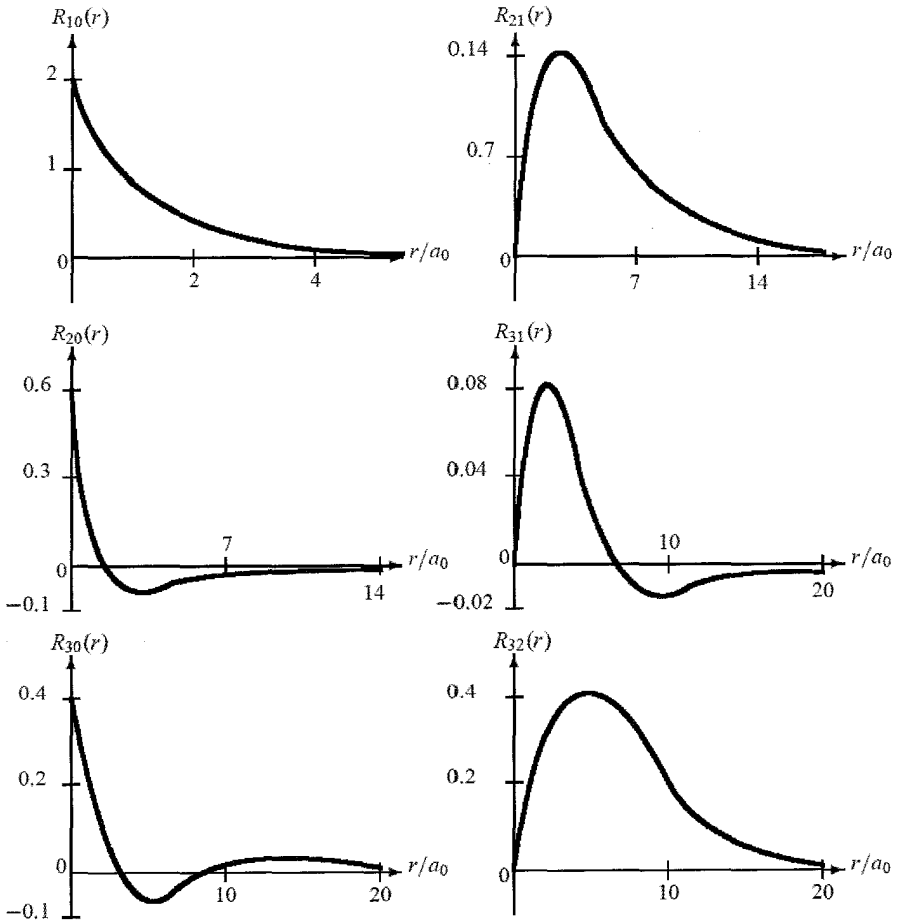
(ث) ویژگی‌های تابع‌های موج شعاعی هیدروژن

تابع‌های موج شعاعی اتم هیدروژن به‌صورت زیر رفتار می‌کنند (شکل ۳-۶ را ببینید):

- این تابع‌ها به‌ازای  $r$ ‌های کوچک مانند  $r^l$  رفتار می‌کنند.
- این تابع‌ها در  $r$ ‌های بزرگ به‌صورت نمایی کاهش می‌یابند زیرا  $L_{n+l}^{2l+1}$  به وسیله‌ی بالاترین توان  $r^{n-l-1}$  مغلوب می‌شود.
- هر تابع  $R_{nl}(r)$  دارای  $n-l-1$  گره شعاعی است زیرا  $L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$  یک چندجمله‌ای درجه‌ی  $n-l-1$  است.

۳-۵-۳-۶ واگنی حالت‌های مقید هیدروژن

ترازهای انرژی (۱۴۷-۶) علاوه‌براین که مستقل از  $m$  هستند (که یک ویژگی پتانسیل‌های مرکزی است، (۵۵-۶) را ببینید)، مستقل از  $l$  نیز می‌باشند. این واگنی اضافی برحسب  $l$  ویژگی پتانسیل‌های مرکزی نیست بلکه یک مشخصه‌ی خاص پتانسیل کولنی است. در رابطه با پتانسیل‌های مرکزی باید گفت که انرژی  $E$  معمولاً به دو عدد کوانتومی شعاعی  $n$  و مداری  $l$  که  $E_{nl}$  را نتیجه می‌دهند، بستگی دارد. عدد کوانتومی کل  $n$  تنها مقدارهای غیرصفر ۱، ۲، ۳ و ... را می‌گیرد. همانطور که در جدول ۶-۷ نشان داده شده است، به‌ازای یک مقدار معلوم  $n$ ، عدد کوانتومی  $l$  می‌تواند از ۰ تا  $n-1$  تغییر کند و



شکل ۳-۶ چند تابع موج شعاعی نخست برای  $R_{nl}(r)$  برای هیدروژن. طول شعاعی برحسب شعاع بوهر  $a_0 = \hbar^2 / (\mu e^2)$  است. توجه کنید که  $R_{nl}(r)$  دارای  $(n - l - 1)$  گره است.

به ازای هر  $l$ ،  $m$  می‌تواند  $(2l + 1)$  مقدار را بگیرد:  $l, l - 1, \dots, -l + 1, -l$ . آنگاه واگنی حالت  $n$  (که با تعداد حالت‌های متفاوت کل وابسته به  $n$  مشخص می‌شود) از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید (مثال ۳-۶ را ببینید):

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2 \quad (۱۷۱-۶)$$

جدول ۶-۷ ترازهای انرژی هیدروژن و واگنی‌های آنها هنگامی که اسپین الکترون نادیده گرفته شود.

$n$	$l$	اوربیتال	$m$	$g_n$	$E_n$
۱	۰	s	۰	۱	$-e^2/(2a_0)$
۲	۰	s	۰	۴	$-e^2/(4a_0)$
	۱	p	$-1, 0, 1$		
۳	۰	s	۰	۹	$-e^2/(6a_0)$
	۱	p	$-1, 0, 1$		
	۲	d	$-2, -1, 0, 1, 2$		
۴	۰	s	۰	۱۶	$-e^2/(8a_0)$
	۱	p	$-1, 0, 1$		
	۲	d	$-2, -1, 0, 1, 2$		
	۳	f	$-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$		
۵	۰	s	۰	۲۵	$-e^2/(5a_0)$
	۱	p	$-1, 0, 1$		
	۲	d	$-2, -1, 0, 1, 2$		
	۳	f	$-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$		
	۴	g	$-4, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, 4$		

### ملاحظات

- حالت هر الکترون هیدروژن به وسیله‌ی سه عدد کوانتومی  $(n, l, m)$  مشخص می‌شود که حالت تک‌ذره یا اوربیتال نامیده می‌شود  $(|nlm\rangle)$ . مطابق با نمادگذاری طیف‌نمایی، حالت‌های متناظر با مقدارهای عددی  $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots$  به ترتیب حالت‌های s, p, d, f, g, h, ... نامیده می‌شوند. حرف‌های s, p, d, f به ترتیب به برجسب‌های تیز، اصلی، پخشیده و بنیادی اشاره می‌کنند (چون حرف‌های g, h و ... برجسب‌گذاری نشده‌اند، خواننده آزاد است که راه ارجاع به آنها را بفهمد!). از این رو همانطور که در جدول ۶-۷ نشان داده شده است، به ازای یک مقدار معلوم  $m$  حالت s دارای ۱ اوربیتال  $(n00)$ ، حالت p دارای ۳ اوربیتال  $(n1m)$  متناظر با  $l = 1, 0, -1$ ، حالت d دارای ۵ اوربیتال  $(n2m)$  متناظر با  $l = 2, 1, 0, -1, -2$  است و به همین ترتیب.
- اگر اسپین الکترون را به حساب آوریم آنگاه حالت هر الکترون با چهار عدد کوانتومی اصلی



مشخص می‌شود که در آن  $m_s = \pm \frac{1}{2}$  مؤلفه‌ی  $z$  اسپین الکترون است. از این رو تابع موج کامل اتم هیدروژن باید مساوی با حاصل ضرب یک قسمت فضایی یا اوربیتالی  $\psi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta, \varphi)$  و یک قسمت اسپینی  $|\frac{1}{2}, m_s\rangle$  باشد:

$$\Psi_{nlm_l m_s}(\mathbf{r}) = \psi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi) \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \varphi) \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle \quad (۱۷۲-۶)$$

با استفاده از اسپینورهای فصل ۵ می‌توانیم تابع موج اسپین بالا را به صورت

$$\Psi_{nlm_l \frac{1}{2}}(\mathbf{r}) = \psi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi) \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \psi_{nlm_l} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_{nlm_l} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (۱۷۳-۶)$$

و تابع موج اسپین پایین را به صورت

$$\Psi_{nlm_l -\frac{1}{2}}(\mathbf{r}) = \psi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi) \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \psi_{nlm_l} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{nlm_l} \end{pmatrix} \quad (۱۷۴-۶)$$

بنویسیم. به عنوان مثال، تابع‌های موج حالت پایه‌ی اسپین بالا و اسپین پایین هیدروژن از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$\Psi_{100 \frac{1}{2}}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_{100} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1/\sqrt{\pi}) a_0^{-3/2} e^{-r/a_0} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (۱۷۵-۶)$$

$$\Psi_{100 -\frac{1}{2}}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{100} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ (1/\sqrt{\pi}) a_0^{-3/2} e^{-r/a_0} \end{pmatrix} \quad (۱۷۶-۶)$$

• هنگامی که اسپین در نظر گرفته شود، واکنی ترازهای انرژی هیدروژن از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$2 \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2n^2 \quad (۱۷۷-۶)$$

زیرا علاوه بر واکنی (۱۷۱-۶)، هر تراز نسبت به درجه‌ی آزادی اسپین، واکن دوگانه است. به عنوان مثال، حالت پایه‌ی هیدروژن واکن دوگانه است زیرا  $\Psi_{100 \frac{1}{2}}(\mathbf{r})$  و  $\Psi_{100 -\frac{1}{2}}(\mathbf{r})$  متناظر با انرژی یکسان  $13/6 \text{ eV} -$  هستند. به صورت مشابه، نخستین حالت برانگیخته واکن هشت‌گانه ( $2(2)^2 = 8$ ) است زیرا هشت حالت  $\Psi_{200 \pm \frac{1}{2}}(\mathbf{r})$ ،  $\Psi_{211 \pm \frac{1}{2}}(\mathbf{r})$ ،  $\Psi_{210 \pm \frac{1}{2}}(\mathbf{r})$  و  $\Psi_{21-1 \pm \frac{1}{2}}(\mathbf{r})$  متناظر با انرژی یکسان  $13/6 \text{ eV}/4 = -3/4 \text{ eV} -$  هستند.

## ۴-۵-۳-۶ احتمال‌ها و میانگین‌ها

هنگامی که اتم هیدروژن در حالت مانای  $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$  است، کمیت  $d^3r$  احتمال یافتن الکترون در المان حجم  $d^3r$  را نمایش می‌دهد که در آن  $d^3r = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$  است. احتمال یافتن الکترون در یک پوسته‌ی کروی واقع در بین  $r$  و  $r + dr$  (یعنی پوسته‌ای به ضخامت  $dr$ ) از رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آید:

$$\begin{aligned} P_{nl}(r)dr &= \left( \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi |\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)|^2 \right) r^2 dr \\ &= |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) d\varphi \quad (۱۷۸-۶) \\ &= |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr \end{aligned}$$

اگر از این کمیت از  $r = 0$  تا  $r = a$  انتگرال بگیریم آنگاه احتمال یافتن الکترون در کره‌ای به شعاع  $a$  که مرکز آن حول مبدا است را به‌دست می‌آوریم. از این رو با انتگرال‌گیری بین  $r = 0$  و  $r = \infty$  نتیجه‌ی ۱ را به‌دست می‌آوریم که احتمال یافتن الکترون در جایی از فضا است.

حال بیایید مقادیرهای میانگین توان‌های مختلف  $r$  را مشخص کنیم. چون  $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$  است، می‌توانیم ببینیم که میانگین  $r^k$  مستقل از عدد کوانتومی سمتی  $m$  است:

$$\begin{aligned} \langle nlm | r^k | nlm \rangle &= \int r^k |\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)|^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi \\ &= \int_0^\infty r^{k+2} |R_{nl}(r)|^2 dr \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) d\varphi \\ &= \int_0^\infty r^{k+2} |R_{nl}(r)|^2 dr \\ &= \langle nl | r^k | nl \rangle \quad (۱۷۹-۶) \end{aligned}$$

با استفاده از ویژگی چندجمله‌ای‌های لاگر می‌توانیم نشان دهیم (مسأله‌ی حل شده‌ی ۶-۲):

$$\langle nl | r | nl \rangle = \frac{1}{4} [3n^2 - l(l+1)] a_0 \quad (۱۸۰-۶)$$

$$\langle nl | r^2 | nl \rangle = \frac{1}{4} n^2 [5n^2 + 1 - 3l(l+1)] a_0^2 \quad (۱۸۱-۶)$$

$$\langle nl | r^{-1} | nl \rangle = \frac{1}{n^2 a_0} \quad (۱۸۲-۶)$$

$$\langle nl|r^{-2}|nl\rangle = \frac{2}{n^3(2l+1)a_0^2} \quad (۱۸۳-۶)$$

که در آنها  $a_0$  شعاع بوهر است ( $a_0 = \hbar^2/(me^2)$ ). به آسانی می‌توان میانگین‌های (۶-۱۸۰) تا (۶-۱۸۳) را از رابطه‌ی بازگشتی کرامرز به‌دست آورد (مسئله‌ی حل شده‌ی ۶-۳):

$$\frac{k+1}{n^2} \langle nl|r^k|nl\rangle - (2k+1)a_0 \langle nl|r^{k-1}|nl\rangle + \frac{ka_0^2}{4} [(2l+1)^2 - k^2] \langle nl|r^{k-2}|nl\rangle = 0 \quad (۱۸۴-۶)$$

معادله‌های (۶-۱۸۰) و (۶-۱۸۲) معلوم می‌کنند که  $\langle 1/r \rangle$  و  $1/\langle r \rangle$  یکسان نیستند بلکه مرتبه‌ی اندازه‌ی یکسانی دارند:

$$\langle r \rangle \sim n^2 a_0 \quad (۱۸۵-۶)$$

این رابطه در توافق با عبارت به‌دست آمده از نظریه‌ی هیدروژن بوهر است: شعاع‌های کوانتیده‌ی مدارهای دایره‌ای اتم هیدروژن از رابطه‌ی  $r_n = n^2 a_0$  به‌دست می‌آیند. در مسئله‌ی حل شده‌ی ۶-۶ نشان خواهیم داد که شعاع‌های بوهر مدارهای دایره‌ای مکان‌هایی را می‌دهند که در آنها چگالی احتمال یافتن الکترون به بیشینه‌ی خود می‌رسد.

سپس با استفاده از عبارت (۶-۱۸۲) برای  $\langle r^{-1} \rangle$ ، می‌توانیم مقدار میانگین پتانسیل کولنی را به‌دست آوریم:

$$\langle V(r) \rangle = -e^2 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = -\frac{e^2}{a_0} \frac{1}{n^2} \quad (۱۸۶-۶)$$

که همانطور که در (۶-۱۴۷) مشخص شد، مساوی با دو برابر انرژی کل است:

$$E_n = \frac{1}{2} \langle V(r) \rangle = -\frac{e^2}{2a_0} \frac{1}{n^2} \quad (۱۸۷-۶)$$

و به عنوان قضیه‌ی ویریال شناخته می‌شود که بیان می‌کند که هرگاه  $V(\alpha r) = \alpha^m V(r)$  باشد آنگاه عبارت‌های میانگین انرژی‌های جنبشی و پتانسیل به وسیله‌ی رابطه‌ی زیر به هم مربوط می‌شوند:

$$\langle T \rangle = \frac{n}{2} \langle V(r) \rangle \quad (۱۸۸-۶)$$

به عنوان مثال، در مورد پتانسیل کولنی  $V(\alpha r) = \alpha^{-1} V(r)$  داریم:  $\langle T \rangle = -\frac{1}{2} \langle V \rangle$  و  $E = -\frac{1}{2} \langle V \rangle + \langle V \rangle = \frac{1}{2} \langle V \rangle$  است.

مثال ۶-۳ (رابطه‌ی واگنی اتم هیدروژن)

رابطه‌ی واگنی (۶-۱۷۱) را برای اتم هیدروژن ثابت کنید.

حل

انرژی  $E_n = -e^2/(2a_0 n^2)$  اتم هیدروژن (۱۴۷-۶) به عدد کوانتومی مداری  $l$  یا به عدد کوانتومی سمتی  $m$  بستگی ندارد و تنها به عدد کوانتومی اصلی  $n$  بستگی دارد. به‌ازای یک  $n$  معلوم، عدد کوانتومی مداری  $l$  می‌تواند  $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$  مقدار را بگیرد؛  $l = 0$  در حالی که به‌ازای هر  $l$ ، عدد کوانتومی سمتی  $m$ ،  $2l+1$  مقدار را می‌گیرد:  $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$ . بنابراین به‌ازای هر  $m$ ، تابع موج متفاوت  $\psi_{nlm}(r)$  وجود دارند که متناظر با انرژی یکسان  $E_n$  هستند و

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2 \sum_{l=0}^{n-1} l + \sum_{l=0}^{n-1} 1 = n(n-1) + n = n^2 \quad (189-6)$$

راه دیگر یافتن این نتیجه از نوشتن  $\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1)$  به دو شکل معادل زیر تشکیل شده است:

$$g_n = 1 + 3 + 5 + 7 + \dots + (2n-7) + (2n-5) + (2n-3) + (2n-1) \quad (190-6)$$

$$g_n = (2n-1) + (2n-3) + (2n-5) + (2n-7) + \dots + 7 + 5 + 3 + 1 \quad (191-6)$$

سپس با جمع کردن جمله به جمله این دو عبارت به رابطه‌ی زیر می‌رسیم:

$$2g_n = (2n) + (2n) + (2n) + (2n) + \dots + (2n) + (2n) + (2n) + (2n) \quad (192-6)$$

چون  $n$  جمله وجود دارد (زیرا  $l$  می‌تواند  $n$  مقدار را بگیرد:  $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$ )، داریم:  $2g_n = n(2n)$  از این رو  $g_n = n^2$  است.

### ۶-۳-۶ اثر میدان‌های مغناطیسی روی پتانسیل‌های مرکزی

همانطور که پیشتر بحث شد ((۵۵-۶))، ترازهای انرژی یک ذره در یک پتانسیل مرکزی به عدد کوانتومی سمتی  $m$  بستگی ندارند. هرگاه ذره را در میدان مغناطیسی یکنواخت  $\mathbf{B}$  قرار دهیم آنگاه می‌توان این واگنی را از بین برد (اگر  $\mathbf{B}$  یکنواخت باشد آنگاه مشتق‌های فضایی آن صفر می‌شوند).

### ۱-۶-۳-۶ اثر میدان مغناطیسی روی یک ذره‌ی باردار

ذره‌ای به جرم  $\mu$  و بار  $q$  را در نظر بگیرید که علاوه بر حرکت در پتانسیل مرکزی  $V(r)$ ، تحت تأثیر میدان مغناطیسی یکنواخت  $\mathbf{B}$  نیز قرار دارد.

از نظریه‌ی الکترومغناطیس کلاسیک می‌دانیم که می‌توان پتانسیل برداری متناظر با یک میدان مغناطیسی یکنواخت را به صورت  $\mathbf{A} = \frac{1}{c}(\mathbf{B} \times \mathbf{r})$  نوشت زیرا با استفاده از رابطه‌ی  $\nabla \times (\mathbf{C} \times \mathbf{D}) = \mathbf{C}(\nabla \cdot \mathbf{D}) - \mathbf{D}(\nabla \cdot \mathbf{C}) + (\mathbf{D} \cdot \nabla)\mathbf{C} - (\mathbf{C} \cdot \nabla)\mathbf{D}$  داریم:

$$\nabla \times \mathbf{A} = \frac{1}{c} \nabla \times (\mathbf{B} \times \mathbf{r}) = \frac{1}{c} [\mathbf{B}(\nabla \cdot \mathbf{r}) - (\mathbf{B} \cdot \nabla)\mathbf{r}] = \frac{1}{c} [3\mathbf{B} - \mathbf{B}] = \mathbf{B} \quad (۱۹۳-۶)$$

که در آن از رابطه‌های  $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ ،  $(\mathbf{r} \cdot \nabla)\mathbf{B} = 0$ ،  $\nabla \cdot \mathbf{r} = 3$  و  $(\mathbf{B} \cdot \nabla)\mathbf{r} = \mathbf{B}$  استفاده کرده‌ایم. هنگامی که بار در میدان مغناطیسی  $\mathbf{B}$  قرار می‌گیرد، تکانه‌ی خطی آن به صورت  $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - (q/c)\mathbf{A}$  می‌آید که در آن  $c$  سرعت نور است. بنابراین هامیلتونی ذره به صورت زیر در می‌آید (۱۲۴-۶) را ببینید):

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} \left( \mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A} \right)^2 + V(r) = \hat{H}_0 - \frac{q}{\mu c} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) + \frac{q^2}{2\mu c^2} \mathbf{A}^2 \quad (۱۹۴-۶)$$

که در آن  $\hat{H}_0 = \mathbf{p}^2/(2\mu) + V(r)$  هامیلتونی ذره در عدم حضور میدان مغناطیسی  $\mathbf{B}$  است. می‌توان جمله‌ی  $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}$  را در تشابه با جابه‌جاگر  $[\hat{p}, \hat{F}(x)] = -i\hbar d\hat{F}(x)/dx$  محاسبه کرد:

$$(\mathbf{p} \cdot \mathbf{A})|\psi\rangle = -i\hbar(\nabla \cdot \mathbf{A})|\psi\rangle - i\hbar\mathbf{A} \cdot \nabla|\psi\rangle = -i\hbar(\nabla \cdot \mathbf{A})|\psi\rangle + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}|\psi\rangle \quad (۱۹۵-۶)$$

می‌بینیم که هرگاه  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$  معتبر باشد (پیمانه‌ی کولن) آنگاه  $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$  برابر با  $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}$  است:

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} = -i\hbar(\nabla \cdot \mathbf{A}) = 0 \quad \implies \quad \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} = \mathbf{p} \cdot \mathbf{A} \quad (۱۹۶-۶)$$

از سوی دیگر، چون  $\mathbf{A} = \frac{1}{c}(\mathbf{B} \times \mathbf{r})$  است، داریم:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} = \frac{1}{c}(\mathbf{B} \times \mathbf{r}) \cdot \mathbf{p} = \frac{1}{c}\mathbf{B} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) = \frac{1}{c}\mathbf{B} \cdot \mathbf{L} \quad (۱۹۷-۶)$$

که در آن  $\hat{\mathbf{L}}$  عملگر تکانه‌ی زاویه‌ای مداری ذره است. حال ترکیب (۱۹۶-۶) و (۱۹۷-۶) به رابطه‌ی  $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} = \frac{1}{c}\mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{L}}$  می‌انجامد که هنگامی که در هامیلتونی (۱۹۴-۶) وارد شود، نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_0 - \frac{q}{\mu c} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + \frac{q^2}{2\mu c^2} \mathbf{A}^2 = \hat{H}_0 - \frac{q}{2\mu c} \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{L}} \\ &\quad + \frac{q^2}{2\mu c^2} \mathbf{A}^2 = \hat{H}_0 - \mu_L \cdot \mathbf{B} + \frac{q^2}{2\mu c^2} \mathbf{A}^2 \quad (۱۹۸-۶) \end{aligned}$$

که در آن

$$\mu_L = \frac{q}{2\mu c} \mathbf{L} = \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{L} \quad (۱۹۹-۶)$$

گشتاور دوقطبی مغناطیسی مداری بار  $q$  است و  $\mu_B = q\hbar/(2\mu c)$  به عنوان مگنتون بوهر شناخته می‌شود. همانطور که در فصل ۵ یادآوری شد،  $\mu_L$  ناشی از حرکت مداری بار حول مرکز پتانسیل است. جمله  $-\mu_L \cdot \mathbf{B}$  در (۶-۱۹۸) انرژی حاصل از برهمکنش بین گشتاور دوقطبی مغناطیسی مداری ذره ( $\mu_L = q\mathbf{L}/(2\mu c)$ ) و میدان مغناطیسی  $\mathbf{B}$  است. باید یادآوری کنیم که هرگاه بار  $q$  دارای اسپین ذاتی  $\mathbf{S}$  باشد آنگاه حرکت اسپینی آن موجب گشتاور دوقطبی مغناطیسی  $\mu_S = q\mathbf{S}/(2\mu c)$  می‌شود و هنگامی که با میدان مغناطیسی خارجی  $\mathbf{B}$  برهمکنش پیدا کند، به نوبه‌ی خود جمله‌ی مربوط به انرژی  $-\mu_S \cdot \mathbf{B}$  که باید به هامیلتونی اضافه شود را تولید می‌کند.

سرانجام، با استفاده از رابطه‌ی  $(\mathbf{C} \times \mathbf{D}) \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{F}) = (\mathbf{C} \cdot \mathbf{E})(\mathbf{D} \cdot \mathbf{F}) - (\mathbf{C} \cdot \mathbf{F})(\mathbf{D} \cdot \mathbf{E})$  و با توجه به این که  $\mathbf{A} = \frac{1}{c}(\mathbf{B} \times \mathbf{r})$  است، رابطه‌ی زیر را داریم:

$$\mathbf{A}^2 = \frac{1}{c^2}(\mathbf{B} \times \mathbf{r}) \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{r}) = \frac{1}{c^2} [B^2 r^2 - (\mathbf{B} \cdot \mathbf{r})^2] \quad (۶-۲۰۰)$$

بنابراین می‌توانیم (۶-۱۹۸) را به صورت زیر بنویسیم:

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} \mathbf{p}^2 + V(r) - \frac{q}{2\mu c} \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{L}} + \frac{q^2}{4\mu c^2} [B^2 r^2 - (\mathbf{B} \cdot \mathbf{r})^2] \quad (۶-۲۰۱)$$

این رابطه هامیلتونی ذره‌ای به جرم  $\mu$  و بار  $q$  است که در پتانسیل مرکزی  $V(r)$  و تحت تأثیر میدان مغناطیسی یکنواخت  $\mathbf{B}$  حرکت می‌کند.

### ۶-۳-۲ اثر بهنجار زمین ( $\mathbf{S} = 0$ )

هنگامی که اتم هیدروژن در یک میدان مغناطیسی یکنواخت خارجی قرار می‌گیرد، ترازهای انرژی آن جابه‌جا می‌شوند. این جابه‌جایی انرژی به عنوان اثر زمین شناخته می‌شود.

در مطالعه‌ی این بخش، اسپین الکترون هیدروژن را نادیده می‌گیریم. اثر زمین بدون در نظر گرفتن اسپین الکترون، اثر بهنجار زمین نامیده می‌شود. هنگامی که اسپین الکترون نیز در نظر گرفته شود، با اثری که اثر ناهنجار زمین نامیده می‌شود، روبرو هستیم که در فصل ۹ به مطالعه‌ی آن خواهیم پرداخت زیرا مطالعه‌ی آن نیازمند آشنایی با صورت‌بندی‌های جمع تکانه‌های زاویه‌ای و نظریه‌ی اختلال است که به ترتیب در فصل‌های ۷ و ۹ مطالعه خواهند شد.

برای راحتی کار،  $\mathbf{B}$  را در امتداد جهت  $z$  در نظر می‌گیریم:  $\mathbf{B} = B\hat{z}$ . می‌توان هامیلتونی اتم هیدروژن را زمانی که تحت تأثیر یک میدان مغناطیسی قرار می‌گیرد، از (۶-۲۰۱) و با جایگزینی  $q$  با بار الکترون

( $q \rightarrow -e$ ) به دست آورد:

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} \mathbf{p}^2 - \frac{e^2}{r} + \frac{e}{2\mu c} B \hat{L}_z + \frac{e^2 B^2}{4\mu c^2} (x^2 + y^2) = \hat{H}_0 + \frac{e}{2\mu c} B \hat{L}_z + \frac{e^2 B^2}{4\mu c^2} (x^2 + y^2) \quad (202-6)$$

که در آن  $\hat{H}_0 = \mathbf{p}^2/(2\mu) - e^2/r$  هامیلتونی اتم در غیاب میدان مغناطیسی است. می‌توانیم از جمله‌ی درجه‌ی دوم  $e^2 B^2 (x^2 + y^2)/(4\mu c^2)$  صرف‌نظر کنیم زیرا برای یک اتم تک‌الکترونی حتی در یک میدان  $\mathbf{B}$  قوی، بسیار کوچک است. آنگاه (202-6) به رابطه‌ی زیر کاهش می‌یابد:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{B\mu_B}{\hbar} \hat{L}_z \quad (203-6)$$

که در آن  $\mu_B = e\hbar/(2\mu c) = 9.2740 \times 10^{-24} \text{JT}^{-1} = 5.78834 \times 10^{-5} \text{eV T}^{-1}$  مگنتون بوهر است. گشتاور دوقطبی مغناطیسی مداری (که از حرکت مداری الکترون حول پروتون نتیجه می‌شود) از رابطه‌ی  $\mu_L = -e\mathbf{B}/(2\mu c)$  به دست می‌آید. چون  $\hat{H}_0$  با  $\hat{L}_z$  جابه‌جا می‌شود، عملگرهای  $\hat{H}$ ،  $\hat{H}_0$  و  $\hat{L}_z$  دو به دو با هم جابه‌جا می‌شوند ازاین‌رو دارای مجموعه‌ای از ویژه‌تابع‌های مشترک هستند:  $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$  ویژه‌مقدارهای (203-6) عبارتند از

$$E_{nlm} = \langle nlm | \hat{H} | nlm \rangle = \langle nlm | \hat{H}_0 | nlm \rangle + \frac{B\mu_B}{\hbar} \langle nlm | \hat{L}_z | nlm \rangle \quad (204-6)$$

یا

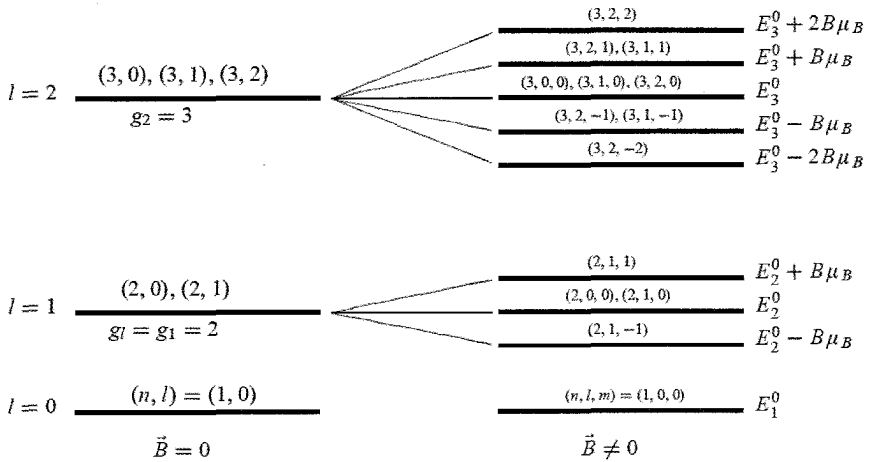
$$E_{nlm} = E_n^0 + m\mu_B B = E_n^0 + m\hbar\omega_L \quad (205-6)$$

که در آن  $E_n^0$  ها ترازهای انرژی هیدروژن هستند ( $E_n^0 = -\mu e^4/(2\hbar^2 n^2)$ ) (204-6) و  $\omega_L$  بسامد لازم‌نامیده می‌شود:

$$\omega_L = \frac{eB}{2\mu c} \quad (206-6)$$

بنابراین هنگامی که اتم هیدروژن در یک میدان مغناطیسی یکنواخت قرار می‌گیرد (با چشم‌پوشی از اسپین الکترون)، تقارن کروی اتم شکسته خواهد شد: هر تراز با تکانه‌ی زاویه‌ای  $l$  به  $(2l+1)$  تراز با فاصله‌های مساوی تقسیم خواهد شد (شکل 4-6) که در آن فاصله‌ی این ترازها از رابطه‌ی  $\Delta E = \hbar\omega_L = B\mu_B$  به دست می‌آید و این فاصله مستقل از  $l$  است. این شکافتگی ترازها با فاصله‌های یکسان به عنوان اثر بهنجار زمین شناخته می‌شود. این شکافتگی به گذارهایی می‌انجامد که به وسیله‌ی قاعده‌ی گزینش محدود می‌شوند:  $\Delta m = -1, 0, 1$ . گذارهای  $m' = 0 \rightarrow m = 0$  مجاز نیستند.

اثر بهنجار زمین تنها بخشی از واکنی ترازها را از بین می‌برد و واکنی نسبت به  $l$  باقی می‌ماند. به عنوان مثال، همانطور که در شکل 4-6 نشان داده شده است، ترازهای  $E_{210} = E_{200} = E_{210}$ ،



شکل ۴-۶ اثر بهنجار زمین در هیدروژن. چپ: هنگامی که  $\mathbf{B} = 0$  است، ترازهای انرژی نسبت به  $l$  و  $m$  واکنش دارند. راست: هنگامی که  $\mathbf{B} \neq 0$  است، واکنش نسبت به  $m$  از بین می‌رود ولی واکنش نسبت به  $l$  وجود دارد ( $\mu_B = e\hbar/(2\mu c)$ ).

نتیجه‌های اثر بهنجار زمین که نشان می‌دهند که هر تراز انرژی به  $(2l + 1)$  تراز فرد با فاصله‌های مساوی شکافته می‌شود، با مشاهده‌های تجربی توافق ندارند. به عنوان مثال، در واقع هر تراز در اتم هیدروژن به تعداد ترازهای زوج شکافته می‌شود. این واقعیت پیشنهاد می‌کند که تکانه‌ی زاویه‌ای یک عدد صحیح نیست بلکه یک عدد نیمه صحیح است. این عدم توافق ناشی از فرض ساده کننده‌ای است که در آن از اسپین الکترون چشم‌پوشی شده است. بحث کامل‌تر که اسپین الکترون را نیز در نظر می‌گیرد، تأیید می‌کند که تکانه‌ی زاویه‌ای صرفاً مداری نیست بلکه شامل یک مؤلفه‌ی اسپینی نیز هست که به شکافتگی هر تراز به تعداد زوج  $^5(2l + 1)$  تراز انرژی با فاصله‌های نامساوی می‌انجامد. این اثر که به عنوان اثر ناهنجار زمین شناخته می‌شود، در توافق کامل با یافته‌های تجربی است.

## ۴-۶ ملاحظات پایانی

نتیجه‌ی مهمی که باید در این فصل آنرا برجسته کنیم حل معادله‌ی شرودینگر برای اتم هیدروژن است. برخلاف مدل نیمه‌کلاسیکی بوهر (که بر مبنای فرض‌های تدریجی است) دیدیم که چگونه معادله‌ی شرودینگر ۵. هنگامی که اسپین الکترون در نظر گرفته شود، تکانه‌ی زاویه‌ای کل  $z$  الکترون نیمه صحیح خواهد شد و آنگاه  $(2l + 1)$  یک عدد زوج می‌شود.



به صورت منظم ترازهای انرژی را نتیجه می‌دهد و بدون هیچ بحث خاصی کوانتس ترازهای انرژی به عنوان نتیجه‌ی جانبی این صورت‌بندی (و نه به صورت یک فرض تأیید نشده) به دست می‌آید: کوانتس ترازهای انرژی نتیجه‌ی شرایط مرزی است که لازم می‌دارد تابع موج وقتی  $\infty \rightarrow r$  میل می‌کند، متناهی باشد ((۱۴۴-۶) و (۱۴۷-۶) را ببینید). بنابراین دیدیم که با حل یک معادله‌ی دیفرانسیل (معادله‌ی شرودینگر) تمام آنچه را که نیاز داریم در مورد اتم هیدروژن بدانیم، به دست می‌آوریم. بدین لحاظ، معادله‌ی شرودینگر بر مبنای وعده‌ای که در فصل ۱ داده شد، عمل کرد. یعنی این معادله از جنبه‌های نامطلوب مدل بوهر (فرض‌های تک‌منظوره و ...) اجتناب کرد در حالی که نقاط قوت آن (یعنی عبارتهای مربوط به ترازهای انرژی و رابطه‌های مربوط به شعاع‌ها و گذارها) را حفظ نمود.

## ۵-۶ مسأله‌های حل شده

### مسأله‌ی ۱-۶

یک ذره‌ی بدون اسپین به جرم  $m$  را در نظر بگیرید که در پتانسیل سه‌بعدی زیر حرکت می‌کند:

$$V(x, y, z) = \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega^2 z^2 & 0 < x < a, 0 < y < a \\ \infty & \text{در جاهای دیگر} \end{cases}$$

(الف) انرژی کل و تابع موج کل این ذره را بنویسید.

(ب) با فرض آن که  $\hbar\omega > 3\pi^2\hbar^2/(2ma^2)$  باشد، انرژی‌ها و واگنی‌های متناظر را برای حالت پایه و نخستین حالت برانگیخته بیابید.

(پ) حال با فرض آن که این ذره علاوه بر پتانسیل  $V(x, y, z)$  دارای بار الکتریکی منفی  $-q$  نیز باشد و تحت تأثیر میدان الکتریکی ثابت  $\epsilon$  در جهت محور  $z$  قرار گیرد آنگاه هامیلتونی در امتداد محور  $z$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\hat{H}_z = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 z^2 - q\epsilon z$$

عبارت مربوط به انرژی  $E_{n_z}$  این ذره و همچنین انرژی کل  $E_{n_x n_y n_z}$  آن را به دست آورید. سپس انرژی‌ها و واگنی‌های مربوط به حالت پایه و نخستین حالت برانگیخته را بیابید.

حل

(الف) این پتانسیل سه‌بعدی از سه پتانسیل یک‌بعدی مستقل تشکیل شده است: (۱) یک چاه پتانسیل در امتداد محور  $x$  (۲) یک چاه پتانسیل در امتداد محور  $y$  و (۳) یک پتانسیل نوسانگر هماهنگ در امتداد محور  $z$ . بنابراین انرژی باید از رابطه‌ی زیر به دست آید:

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2) + \hbar\omega \left( n_z + \frac{1}{2} \right) \quad (207-6)$$

و تابع موج از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = X_{n_x}(x) Y_{n_y}(y) Z_{n_z}(z) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi n_x}{a} x\right) \sin\left(\frac{\pi n_y}{a} y\right) Z_{n_z}(z) \quad (208-6)$$

که در آن  $Z_{n_z}(z)$  تابع موج نوسانگر هماهنگ است و همانطور که در فصل ۴ نشان داده شد، برحسب چندجمله‌ای‌های هرمیت  $H_{n_z}\left(\frac{z}{z_0}\right)$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$Z_{n_z}(z) = \frac{1}{\sqrt{\pi^2 n_z! z_0^2}} e^{-z^2/2z_0^2} H_{n_z}\left(\frac{z}{z_0}\right) \quad (209-6)$$

$$z_0 = \sqrt{\pi\hbar/(m\omega)}$$

(ب) انرژی حالت پایه از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$E_{110} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{ma^2} + \frac{\hbar\omega}{2} \quad (210-ع)$$

و انرژی نخستین حالت برانگیخته با رابطه‌ی زیر داده می‌شود:

$$E_{120} = E_{210} = \frac{5\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} + \frac{\hbar\omega}{2} \quad (211-ع)$$

توجه کنید که در حالی که حالت پایه واگن نیست، نخستین حالت برانگیخته واگن دوگانه است. همچنین باید یادآوری کنیم که چون  $\hbar\omega > 3\pi^2 \hbar^2 / (2ma^2)$  است، داریم:  $E_{120} < E_{111}$  یا

$$E_{111} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{ma^2} + \frac{3\hbar\omega}{2} = E_{120} + \hbar\omega - \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (212-ع)$$

و از این رو نخستین حالت برانگیخته از  $E_{120}$  به دست می‌آید و نه از  $E_{111}$ .

(پ) برای به دست آوردن انرژی‌های هامیلتونی

$$\hat{H}_z = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 z^2 - q\epsilon z \quad (213-ع)$$

تنها باید تغییر متغیر  $\lambda = z - q\epsilon/(m\omega^2)$  را انجام دهیم از این رو  $dz = d\lambda$  است. آنگاه هامیلتونی  $\hat{H}_z$  به هامیلتونی زیر کاهش می‌یابد:

$$\hat{H}_z = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 \lambda^2 - \frac{q^2 \epsilon^2}{2m\omega^2} \quad (214-ع)$$

این شکل پیشنهادی بیان می‌کند که ویژه‌مقدارهای انرژی  $\hat{H}_z$  ویژه‌مقدارهای انرژی یک نوسانگر هماهنگ هستند که به اندازه‌ی  $(2m\omega^2)^{-1} q^2 \epsilon^2$  رو به پایین جابه‌جا شده‌اند:

$$E_{n_z} = \langle n_z | \hat{H}_z | n_z \rangle = \hbar\omega \left( n_z + \frac{1}{2} \right) - \frac{q^2 \epsilon^2}{2m\omega^2} \quad (215-ع)$$

در نتیجه اکنون انرژی کل از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2) + \hbar\omega \left( n_z + \frac{1}{2} \right) - \frac{q^2 \epsilon^2}{2m\omega^2} \quad (216-ع)$$

انرژی‌های حالت پایه و نخستین حالت برانگیخته عبارتند از

$$E_{110} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{ma^2} + \frac{\hbar\omega}{2} - \frac{q^2 \epsilon^2}{2m\omega^2}, \quad E_{120} = E_{210} = \frac{5\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} + \frac{\hbar\omega}{2} - \frac{q^2 \epsilon^2}{2m\omega^2} \quad (217-ع)$$

مسأله‌ی ۲-۶

نشان دهید که چگونه عبارت‌های (الف)  $\langle nl|r^{-2}|nl\rangle$  و (ب)  $\langle nl|r^{-1}|nl\rangle$  به دست می‌آیند. یعنی (۱۸۳-۶) و (۱۸۲-۶) را ثابت کنید.

حل

نقطه‌ی شروع، معادله‌ی شعاعی (۱۲۷-۶) است:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 U_{nl}(r)}{dr^2} + \left[ \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r} \right] U_{nl}(r) = E_n U_{nl}(r) \quad (218-6)$$

که می‌توان آن را به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$\frac{U_{nl}''(r)}{U_{nl}(r)} = \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2\mu e^2}{\hbar^2 r} + \frac{\mu^2 e^4}{\hbar^4 n^2} \quad (219-6)$$

که در آن  $U_{nl}(r) = rR_{nl}(r)$ ،  $U_{nl}'(r) = d^2 U_{nl}(r)/dr^2$  و  $E_n = -\mu e^4/(2\hbar^2 n^2)$  است. (الف) برای یافتن  $\langle r^{-2} \rangle_{nl}$  بیاثید عدد کوانتومی مدار  $l$  را به صورت یک متغیر پیوسته در نظر بگیریم و مشتق اول (۲۱۹-۶) را نسبت به  $l$  حساب کنیم:

$$\frac{\partial}{\partial l} \left[ \frac{U_{nl}''(r)}{U_{nl}(r)} \right] = \frac{2l+1}{r^2} - \frac{2\mu^2 e^4}{\hbar^4 n^2} \quad (220-6)$$

که در آن از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که  $n$  به  $l$  بستگی دارد زیرا همانطور که در (۱۴۵-۶) نشان داده شد،  $\int_0^\infty U_{nl}^2(r) dr = \int_0^\infty r^2 R_{nl}^2(r) dr = 1$  و  $n = N+l+1$  و  $\partial n/\partial l = 1$  است. حال با توجه به این که  $\int_0^\infty U_{nl}^2(r) dr = 1$  است، با ضرب کردن هر دو طرف (۲۲۰-۶) در  $U_{nl}^2(r)$  و انتگرال‌گیری روی  $r$  رابطه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$\int_0^\infty U_{nl}^2(r) \frac{\partial}{\partial l} \left[ \frac{U_{nl}''(r)}{U_{nl}(r)} \right] dr = (2l+1) \int_0^\infty U_{nl}^2(r) \frac{1}{r^2} dr - \frac{2\mu^2 e^4}{\hbar^4 n^2} \int_0^\infty U_{nl}^2(r) dr \quad (221-6)$$

یا

$$\int_0^\infty U_{nl}^2(r) \frac{\partial}{\partial l} \left[ \frac{U_{nl}''(r)}{U_{nl}(r)} \right] dr = (2l+1) \left\langle nl \left| \frac{1}{r^2} \right| nl \right\rangle - \frac{2\mu^2 e^4}{\hbar^4 n^2} \quad (222-6)$$

طرف چپ این رابطه برابر با صفر است زیرا

$$\int_0^\infty U_{nl}^2(r) \frac{\partial}{\partial l} \left[ \frac{U_{nl}''(r)}{U_{nl}(r)} \right] dr = \int_0^\infty U_{nl}(r) \frac{\partial U_{nl}''(r)}{\partial l} dr - \int_0^\infty U_{nl}''(r) \frac{\partial U_{nl}(r)}{\partial l} dr = 0 \quad (223-6)$$

بنابراین می‌توانیم (۲۲۲-۶) را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$(2l+1) \left\langle nl \left| \frac{1}{r^2} \right| nl \right\rangle = \frac{2\mu^2 e^2}{\hbar^2 n^3} \quad (224-6)$$

ازاین رو

$$\left\langle nl \left| \frac{1}{r^2} \right| nl \right\rangle = \frac{2}{n^3 (2l+1) a_0^2} \quad (225-6)$$

زیرا  $a_0 = \hbar^2 / (\mu e^2)$  است.

(ب) اکنون برای یافتن  $\langle r^{-1} \rangle_{nl}$  باید بار الکترون  $e$  در (۲۱۹-۶) را به صورت یک متغیر پیوسته در نظر بگیریم. مشتق اول (۲۱۹-۶) نسبت به  $e$  نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\frac{\partial}{\partial e} \left[ \frac{U''_{nl}(r)}{U_{nl}(r)} \right] = -\frac{2\mu e}{\hbar^2} \frac{1}{r} + \frac{2\mu^2 e^2}{\hbar^2 n^2} \quad (226-6)$$

دوباره چون  $\int_0^\infty U''_{nl}(r) dr = 1$  است، با ضرب کردن هر دو طرف (۲۲۶-۶) در  $U'_{nl}(r)$  و انتگرال‌گیری روی  $r$  رابطه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$\int_0^\infty U'_{nl}(r) \frac{\partial}{\partial e} \left[ \frac{U''_{nl}(r)}{U_{nl}(r)} \right] dr = -\frac{2\mu e}{\hbar^2} \int_0^\infty U'_{nl}(r) \frac{1}{r} dr + \frac{2\mu^2 e^2}{\hbar^2 n^2} \int_0^\infty U'_{nl}(r) dr \quad (227-6)$$

یا

$$\int_0^\infty U'_{nl}(r) \frac{\partial}{\partial e} \left[ \frac{U''_{nl}(r)}{U_{nl}(r)} \right] dr = -\frac{2\mu e}{\hbar^2} \left\langle nl \left| \frac{1}{r} \right| nl \right\rangle + \frac{2\mu^2 e^2}{\hbar^2 n^2} \quad (228-6)$$

همانطور که در (۲۲۳-۶) نشان داده شد، طرف چپ این تساوی برابر با صفر است. بنابراین داریم:

$$\frac{2\mu e}{\hbar^2} \left\langle nl \left| \frac{1}{r} \right| nl \right\rangle = \frac{2\mu^2 e^2}{\hbar^2 n^2} \implies \left\langle nl \left| \frac{1}{r} \right| nl \right\rangle = \frac{1}{n^2 a_0} \quad (229-6)$$

زیرا  $a_0 = \hbar^2 / (\mu e^2)$  است.

### مسئله‌ی ۳-۶

(الف) از قاعده‌ی بازگشتی کرامرز (۱۸۴-۶) برای به دست آوردن رابطه‌های (۱۸۰-۶) تا (۱۸۲-۶) برای  $\langle nl | r^{-1} | nl \rangle$ ،  $\langle nl | r | nl \rangle$  و  $\langle nl | r^2 | nl \rangle$  استفاده کنید.

(ب) با استفاده از (۲۲۵-۶) برای  $\langle nl | r^{-2} | nl \rangle$  و ترکیب کردن آن با قاعده‌ی کرامرز، عبارت مربوط به  $\langle nl | r^{-3} | nl \rangle$  را به دست آورید.

(پ) قسمت (ب) را برای به‌دست آوردن عبارت مربوط به  $\langle nl|r^{-۴}|nl\rangle$  تکرار کنید.

حل

(الف) ابتدا برای به‌دست آوردن  $\langle nl|r^{-۱}|nl\rangle$  تنها باید  $k = ۰$  را در قاعده‌ی بازگشتی کرامرز (۱۸۴-۶) وارد کنیم:

$$\frac{1}{n^2} \langle nl|r^0|nl\rangle - a_0 \langle nl|r^{-1}|nl\rangle = 0 \quad (۲۳۰-۶)$$

از این رو

$$\left\langle nl \left| \frac{1}{r} \right| nl \right\rangle = \frac{1}{n^2 a_0} \quad (۲۳۱-۶)$$

دوم این که وارد کردن  $k = ۱$  در (۱۸۴-۶) به رابطه‌ی زیر برای  $\langle nl|r|nl\rangle$  می‌انجامد:

$$\frac{2}{n^2} \langle nl|r|nl\rangle - 3a_0 \langle nl|r^0|nl\rangle + \frac{a_0^2}{4} [(2l+1)^2 - 1] \langle nl|r^{-1}|nl\rangle = 0 \quad (۲۳۲-۶)$$

و با توجه به  $\langle nl|r^{-1}|nl\rangle = 1/(n^2 a_0)$  داریم:

$$\langle nl|r|nl\rangle = \frac{1}{4} [3n^2 - l(l+1)] a_0 \quad (۲۳۳-۶)$$

سوم این که با جاگذاری  $k = ۲$  در (۱۸۴-۶) رابطه‌ی زیر را به‌دست می‌آوریم:

$$\frac{3}{n^2} \langle nl|r^2|nl\rangle - 5a_0 \langle nl|r|nl\rangle + \frac{a_0^2}{4} [(2l+1)^2 - 4] \langle nl|r^0|nl\rangle = 0 \quad (۲۳۴-۶)$$

هنگامی که این رابطه با رابطه‌ی  $\langle nl|r|nl\rangle = \frac{1}{4} [3n^2 - l(l+1)] a_0$  ترکیب شود، نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\langle nl|r^2|nl\rangle = \frac{1}{4} n^2 [5n^2 + 1 - 3l(l+1)] a_0^2 \quad (۲۳۵-۶)$$

می‌توانیم این روش را برای به‌دست آوردن توان‌های مثبت  $r$  ( $\langle nl|r^k|nl\rangle$ ) ادامه دهیم.

(ب) با وارد کردن  $k = -۱$  در قاعده‌ی کرامرز

$$0 + a_0 \langle nl|r^{-2}|nl\rangle - \frac{1}{4} [(2l+1)^2 - 1] a_0^2 \langle nl|r^{-3}|nl\rangle \quad (۲۳۶-۶)$$

نتیجه‌ی زیر را به‌دست می‌آوریم:

$$\left\langle nl \left| \frac{1}{r^3} \right| nl \right\rangle = \frac{1}{l(l+1)a_0} \left\langle nl \left| \frac{1}{r^2} \right| nl \right\rangle \quad (۲۳۷-۶)$$

که در آن عبارت مربوط به  $\langle nl|r^{-2}|nl\rangle$  از (۲۲۵-۶) به دست می‌آید بنابراین رابطه‌ی زیر را داریم:

$$\langle nl|\frac{1}{r^3}|nl\rangle = \frac{2}{n^3 l(l+1)(2l+1)a^3} \quad (۲۳۸-۶)$$

(پ) برای به دست آوردن عبارت مربوط به  $\langle nl|r^{-4}|nl\rangle$  باید  $k = -2$  را در قاعده‌ی کرامرز جاگذاری کنیم:

$$-\frac{1}{n^2} \langle nl|r^{-2}|nl\rangle + 3a_0 \langle nl|r^{-3}|nl\rangle - \frac{a_0^2}{4} [(2l+1)^2 - 4] \langle nl|r^{-4}|nl\rangle = 0 \quad (۲۳۹-۶)$$

با وارد کردن (۲۲۵-۶) و (۲۳۸-۶) برای  $\langle nl|r^{-2}|nl\rangle$  و  $\langle nl|r^{-3}|nl\rangle$  نتیجه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$\langle nl|\frac{1}{r^4}|nl\rangle = \frac{4[3n^2 - l(l+1)]}{n^5 l(l+1)(2l+1)[(2l+1)^2 - 4]} a_0^4 \quad (۲۴۰-۶)$$

می‌توانیم این روش را برای به دست آوردن توان‌های منفی  $r$  ( $\langle nl|r^{-k}|nl\rangle$ ) ادامه دهیم.

#### مسئله‌ی ۴-۶

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r < a \\ +\infty & r > a \end{cases}$$

الکترونی درون چاه کروی نامتناهی

(الف) با استفاده از معادله‌ی شرودینگر شعاعی، ویژه‌مقدارهای انرژی مقید و تابع‌های موج شعاعی بهنجار را برای حالتی که در آن تکانه‌ی زاویه‌ای مداری الکترون صفر است (یعنی  $l = 0$ )، تعیین کنید.

(ب) نشان دهید که پایین‌ترین حالت انرژی به ازای  $l = 7$  بالای پایین‌ترین حالت انرژی دوم به ازای  $l = 0$  قرار می‌گیرد.

(پ) احتمال یافتن الکترون در کره‌ای به شعاع  $a/2$  و سپس در پوسته‌ای کروی به ضخامت  $a/2$  که بین  $r = 3a/2$  و  $r = a$  واقع شده است را محاسبه کنید.

#### حل

(الف) چون در ناحیه‌ی  $r \leq a$ ،  $V(r) = 0$  است، معادله‌ی شرودینگر شعاعی (۵۷-۶) به صورت زیر در می‌آید:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{d^2 U_{nl}(r)}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} U_{nl}(r) \right] = E U_{nl}(r) \quad (۲۴۱-۶)$$

که در آن  $U_{nl}(r) = rR_{nl}(r)$  است. برای حالتی که در آن  $l = 0$  است، این معادله به معادله‌ی زیر کاهش می‌یابد:

$$\frac{d^2 U_{n0}(r)}{dr^2} = -k_n^2 U_{n0}(r) \quad (۲۴۲-۶)$$

که در آن  $k_n^2 = 2mE_n/\hbar^2$  است. جواب عمومی این معادله‌ی دیفرانسیل از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$U_{n^{\circ}}(r) = A \cos(k_n r) + B \sin(k_n r) \quad (۲۴۳-۶)$$

یا

$$R_{n^{\circ}}(r) = \frac{1}{r} (A \cos(k_n r) + B \sin(k_n r)) \quad (۲۴۴-۶)$$

چون  $R_{n^{\circ}}(r)$  در مبدا متناهی یا  $U_{n^{\circ}}(0) = 0$  است، ضریب  $A$  باید صفر باشد. علاوه بر این چون پتانسیل در  $r = a$  (دیواره‌ی صلب) نامتناهی است، تابع شعاعی  $R_{n^{\circ}}(a)$  باید صفر شود:

$$R_{n^{\circ}}(a) = B \frac{\sin k_n a}{a} = 0 \quad (۲۴۵-۶)$$

از این رو  $ka = n\pi$  با  $n = 1, 2, 3, \dots$  است. این رابطه به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2 \quad (۲۴۶-۶)$$

بهنجارش تابع موج شعاعی  $R(r)$  ( $\int_0^a |R_{n^{\circ}}(r)|^2 r^2 dr = 1$ ) به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\begin{aligned} 1 &= |B|^2 \int_0^a \frac{1}{r^2} \sin^2(k_n r) r^2 dr = \frac{|B|^2}{k_n} \int_0^{k_n a} \sin^2 \rho d\rho = \frac{|B|^2}{k_n} \left( \frac{\rho}{2} - \frac{\sin 2\rho}{4} \right) \Big|_{\rho=0}^{\rho=k_n a} \\ &= \frac{1}{2} |B|^2 a \end{aligned} \quad (۲۴۷-۶)$$

از این رو  $B = \sqrt{2/a}$  است. بنابراین تابع موج شعاعی بهنجار از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$R_{n^{\circ}}(r) = \sqrt{\frac{2}{a}} \frac{1}{r} \sin \left( \sqrt{\frac{2mE_n}{\hbar^2}} r \right) \quad (۲۴۸-۶)$$

(ب) به‌ازای  $l = 1$  داریم:

$$E_1(l=1) > V_{eff}(l=1) = \frac{56\hbar^2}{2ma^2} = \frac{28\hbar^2}{ma^2} \quad (۲۴۹-۶)$$

به‌ازای  $l = 0$ ، پایین‌ترین حالت دوم از حالت ۳s به دست می‌آید و انرژی آن برابر است با

$$E_2(l=0) = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{ma^2} \quad (۲۵۰-۶)$$

زیرا  $n = 2$  است. می‌بینیم که

$$E_1(l=1) > E_2(l=0) \quad (۲۵۱-۶)$$



(پ) چون احتمال یافتن الکترون در کره‌ای به شعاع  $a$  برابر با ۱ است، احتمال یافتن این الکترون در کره‌ای به شعاع  $a/2$  برابر با  $1/2$  است.

در رابطه با احتمال یافتن الکترون در پوسته‌ی کروی بین  $r = a$  و  $r = 3a/2$  باید گفت که این احتمال برابر با صفر است زیرا الکترون نمی‌تواند با وجود پتانسیل نامتناهی، از  $r < a$  به  $r > a$  تونل بزند.

### مسأله‌ی ۵-۶

به‌ازای  $l = 0$ ، انرژی و تابع موج ذره‌ای به جرم  $m$  که تحت تأثیر پتانسیل مرکزی

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

است را بیابید.

حل

این ذره بین دو کره‌ی سخت و هم‌مرکز به شعاع‌های  $r = a$  و  $r = b$  حرکت می‌کند. به‌ازای  $l = 0$  می‌توان معادله‌ی شعاعی بین  $a < r < b$  را از (۵۷-۶) به‌دست آورد:

$$\frac{d^2 U_{n0}(r)}{dr^2} + k^2 U_{n0}(r) = 0 \quad (252-6)$$

که در آن  $U_{n0}(r) = rR_{n0}(r)$  و  $k^2 = 2mE/\hbar^2$  است. چون جواب‌های این معادله باید در شرط  $U_{n0}(a) = 0$  صدق کنند، می‌توانیم بنویسیم:

$$U_{n0}(r) = A \sin[k(r-a)] \quad (253-6)$$

تابع موج شعاعی در جاهای دیگر صفر است یعنی به‌ازای  $0 < r < a$  و  $r > b$ ،  $U_{n0}(r) = 0$  است. علاوه‌براین چون تابع شعاعی باید در  $r = b$  صفر شود ( $U_{n0}(b) = 0$ )، داریم:

$$A \sin[k(b-a)] = 0 \quad \implies \quad k(b-a) = n\pi \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (254-6)$$

این شرط همراه با این واقعیت که  $k^2 = 2mE/(\hbar^2)$  است، به رابطه‌ی انرژی زیر می‌انجامد:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m(a-b)^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (255-6)$$

می‌توانیم تابع شعاعی (۲۵۳-۶) را برای به‌دست آوردن ثابت  $A$  به‌نجار کنیم:

$$\begin{aligned} 1 &= \int_a^b r^2 R_{n0}^2(r) dr = \int_a^b U_{n0}^2(r) dr = A^2 \int_a^b \sin^2[k(r-a)] dr \\ &= \frac{A^2}{2} \int_a^b \{1 - \cos[2k(r-a)]\} dr = \frac{b-a}{2} A^2 \end{aligned} \quad (256-6)$$

از این رو  $A = \sqrt{2/(b-a)}$  است. چون  $k_n = n\pi/(b-a)$  است، تابع شعاعی بهنجار از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$R_{n^{\circ}}(r) = \frac{1}{r} U_{n^{\circ}}(r) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{b-a}} \frac{1}{r} \sin\left[\frac{n\pi(r-a)}{b-a}\right] & a < r < b \\ 0 & \text{در جاهای دیگر} \end{cases} \quad (257-6)$$

برای به دست آوردن تابع موج کل  $\psi_{nlm}(\mathbf{r})$  تنها باید تابع شعاعی را بر ضریب  $1/\sqrt{4\pi}$  تقسیم کنیم زیرا در حالت  $l = 0$  تابع موج  $\psi_{n^{\circ}0}(\mathbf{r})$  به درجه‌های آزادی زاویه‌ای بستگی ندارد بلکه تنها وابسته به شعاع است:

$$\psi_{n^{\circ}0}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R_{n^{\circ}}(r) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{4\pi(b-a)}} \frac{1}{r} \sin\left[\frac{n\pi(r-a)}{b-a}\right] & a < r < b \\ 0 & \text{در جاهای دیگر} \end{cases} \quad (258-6)$$

### مسأله‌ی ۶-۶

(الف) برای حالت‌های زیر، مقدار  $r$  که به ازای آن چگالی احتمال شعاعی اتم هیدروژن به بیشینه‌اش می‌رسد را محاسبه کنید: (۱)  $n = 1, l = 0, m = 0$  (۲)  $n = 2, l = 1, m = 0$  (۳)  $n = 2, l = 1, m = 0$  (ب) مقدارهای به دست آمده را با شعاع بوهر مدارهای دایره‌ای مقایسه کنید.

حل

(الف) چون تابع موج شعاعی به ازای  $n = 1$  و  $l = 0$  برابر با  $R_{1^{\circ}}(r) = 2a_0^{-3/2} e^{-r/a_0}$  است، چگالی احتمال از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$P_{1^{\circ}}(r) = r^2 |R_{1^{\circ}}(r)|^2 = \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-2r/a_0} \quad (259-6)$$

(۱) بیشینه‌ی  $P_{1^{\circ}}(r)$  در  $r_1$  روی می‌دهد:

$$\left. \frac{dP_{1^{\circ}}(r)}{dr} \right|_{r=r_1} = 0 \implies 2r_1 - \frac{2r_1^2}{a_0} = 0 \implies r_1 = a_0. \quad (260-6)$$

(۲) به صورت مشابه، چون  $R_{21}(r) = 1/(2\sqrt{6}a_0^{5/2}) r e^{-r/2a_0}$  است، داریم:

$$P_{21}(r) = r^2 |R_{21}(r)|^2 = \frac{1}{24a_0^5} r^4 e^{-r/a_0} \quad (261-6)$$

بیشینه‌ی چگالی احتمال از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\left. \frac{dP_{21}(r)}{dr} \right|_{r=r_2} = 0 \implies 4r_2^3 - \frac{r_2^4}{a_0} = 0 \implies r_2 = 4a_0. \quad (262-6)$$

(۳) به‌ازای  $l = n - 1$  می‌توان تابع شعاعی را از (۶-۱۷) به‌دست آورد:

$$R_{n(n-1)}(r) = - \left( \frac{2}{na_0} \right)^{3/2} \frac{1}{\sqrt{2n[(2n-1)!]^{3/2}}} \left( \frac{2r}{na_0} \right)^{(n-1)} e^{-r/na_0} L_{2n-1}^{2n-1} \left( \frac{2r}{na_0} \right) \quad (263-6)$$

از (۶-۱۵۹) و (۶-۱۶۰) می‌توانیم ثابت کنیم که چندجمله‌ای لاگر وابسته‌ی  $L_{2n-1}^{2n-1}$  مقداری ثابت

است:  $L_{2n-1}^{2n-1}(y) = -(2n-1)!$ . بنابراین می‌توانیم  $R_{n(n-1)}(r)$  را به‌صورت  $R_{n(n-1)}(r) = A_n r^{n-1} e^{-r/na_0}$  بنویسیم که در آن  $A_n$  یک مقدار ثابت است. از این‌رو چگالی احتمال از رابطه‌ی زیر

به‌دست می‌آید:

$$P_{n(n-1)}(r) = r^2 |R_{n(n-1)}(r)|^2 = A_n^2 r^{2n} e^{-2r/na_0} \quad (264-6)$$

بیشینه‌ی چگالی احتمال از رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آید:

$$\left. \frac{dP_{n(n-1)}(r)}{dr} \right|_{r=r_n} = 0 \quad \Rightarrow \quad 2nr_n^{2n-1} - \frac{2r_n^{2n}}{na_0} = 0 \quad \Rightarrow \quad r_n = n^2 a_0 \quad (265-6)$$

(ب) مقدارهای  $r_n$  نمایش داده شده در (۶-۲۶۰)، (۶-۲۶۲) و (۶-۲۶۵) چیزی جز شعاع‌های بوهر مدارهای دایره‌ای نیستند ( $r_n = n^2 a_0$ ). شعاع بوهر  $r_n = n^2 a_0$  مکان چگالی احتمال بیشینه را برای یک الکترون در اتم هیدروژن به‌دست می‌دهد.

## مسئله‌ی ۶-۷

(الف) مقدار چشمداشتی  $\langle r \rangle_{21}$  را برای یک اتم هیدروژن به‌دست آورید و آن را با مقدار  $r$  که در آن چگالی احتمال شعاعی به‌ازای حالت  $l = 1, n = 2$  به بیشینه‌اش می‌رسد را محاسبه کنید.

(ب) پهنای توزیع چگالی احتمال را برای  $r$  محاسبه کنید.

حل

(الف) چون  $R_{21}(r) = re^{-r/2a_0} / \sqrt{24a_0^5}$  است، مقدار میانگین  $r$  در حالت  $R_{21}(r)$  برابر است با

$$\langle r \rangle_{21} = \frac{1}{24a_0^5} \int_0^\infty r^5 e^{-r/a_0} dr = \frac{a_0}{24} \int_0^\infty u^5 e^{-u} du = \frac{120a_0}{24} = 5a_0 \quad (266-6)$$

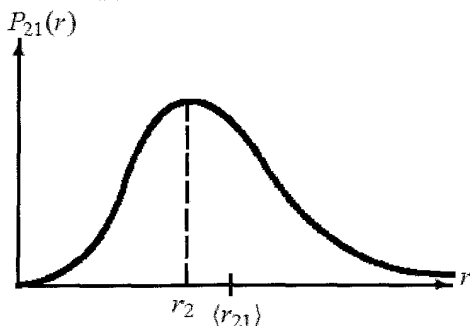
در به‌دست آوردن این رابطه از  $\int_0^\infty x^n e^{-x} dx = n!$  استفاده کرده‌ایم.

همان‌طور که در (۶-۲۶۲) نشان داده شد، مقدار  $r$  که در آن چگالی احتمال شعاعی به‌ازای  $l = 1, n = 2$

به بیشینه‌اش می‌رسد، از رابطه‌ی  $r_2 = 4a_0$  به‌دست می‌آید.

پرسشی که در اینجا مطرح می‌شود این است که چرا نتیجه‌های  $r_2 = 4a_0$  و  $\langle r \rangle_{21} = 5a_0$  با هم

تفاوت دارند؟ در پاسخ باید گفت دلیل این که  $\langle r \rangle_{21}$  متفاوت از  $r_2$  است را می‌توان به این واقعیت نسبت



شکل ۵-۶ چگالی احتمال  $P_{21}(r) = r^2 e^{-r/a_0} / (24a_0^3)$  حول بیشینه‌اش ( $r_2 = 4a_0$ ) نامتقارن است. میانگین  $r$  برابر  $\langle r \rangle_{21} = 5a_0$  و پهنای چگالی احتمال برابر با  $\Delta r_{21} = \sqrt{5}a_0$  است.

داد که همانطور که در شکل ۵-۶ نشان داده شده است، چگالی احتمال  $P_{21}(r)$  حول بیشینه‌اش نامتقارن است. با وجود این که محتمل‌ترین مکان الکترون در  $r_0 = 4a_0$  است مقدار میانگین اندازه‌گیری مکان آن برابر با  $\langle r \rangle_{21} = 5a_0$  است.

(ب) پهنای توزیع احتمال از رابطه‌ی  $\Delta r = \sqrt{\langle r^2 \rangle_{21} - \langle r \rangle_{21}^2}$  به دست می‌آید که در آن مقدار چشمداشتی  $r^2$  برابر است با

$$\langle r^2 \rangle_{21} = \int_0^\infty r^4 R_{21}^2(r) dr = \frac{1}{24a_0^3} \int_0^\infty r^6 \exp\left(-\frac{1}{a_0}r\right) dr = \frac{6!a_0^4}{24a_0^3} = 3^0 a_0^2 \quad (267-6)$$

بنابراین پهنای توزیع احتمال نشان داده شده در شکل ۵-۶ از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\Delta r_{21} = \sqrt{\langle r^2 \rangle_{21} - \langle r \rangle_{21}^2} = \sqrt{3^0 a_0^2 - (5a_0)^2} = \sqrt{5}a_0. \quad (268-6)$$

### مسأله‌ی ۸-۶

عملگرهای وابسته به مؤلفه‌ی شعاعی تکانه  $p_r$  و مختصه‌ی شعاعی  $r$  به ترتیب با  $\hat{P}_r$  و  $\hat{R}$  نمایش داده می‌شوند. اثر آنها روی تابع موج شعاعی  $\psi(r)$  از معادله‌های  $\hat{P}_r \psi(r) = -i\hbar(1/r)(\partial/\partial r)(r\psi(r))$  و  $\hat{R}\psi(r) = r\psi(r)$  به دست می‌آید.

(الف) جابه‌جاگر  $[\hat{P}_r, \hat{R}]$  و  $\Delta P_r \Delta r$  که در آن  $\Delta P_r = \sqrt{\langle \hat{P}_r^2 \rangle - \langle \hat{P}_r \rangle^2}$  و  $\Delta r = \sqrt{\langle \hat{R}^2 \rangle - \langle \hat{R} \rangle^2}$  است را بیابید.

(ب) نشان دهید که  $\hat{P}_r^2 = -(\hbar^2/r)(\partial^2/\partial r^2)r$  است.

حل

(الف) چون  $\hat{R}\psi(\mathbf{r}) = r\psi(\mathbf{r})$  است و

$$\hat{P}_r\psi(\mathbf{r}) = -i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\psi(\mathbf{r})) = -i\hbar\frac{1}{r}\psi(\mathbf{r}) - i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial r} \quad (۲۶۹-۶)$$

و با توجه به این که

$$\hat{P}_r(\hat{R}\psi(\mathbf{r})) = -i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\psi(\mathbf{r})) = -2i\hbar\psi(\mathbf{r}) - i\hbar r\frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial r} \quad (۲۷۰-۶)$$

است، اثر جابه‌جاگر  $[\hat{P}_r, \hat{R}]$  روی تابع  $\psi(\mathbf{r})$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} [\hat{P}_r, \hat{R}]\psi(\mathbf{r}) &= -i\hbar\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r, \hat{R}\right]\psi(\mathbf{r}) = -i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\psi(\mathbf{r})) + i\hbar\frac{\partial}{\partial r}(r\psi(\mathbf{r})) \\ &= -2i\hbar\psi(\mathbf{r}) - i\hbar r\frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial r} + i\hbar\psi(\mathbf{r}) + i\hbar r\frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial r} \\ &= -i\hbar\psi(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (۲۷۱-۶)$$

بنابراین داریم:

$$[\hat{P}_r, \hat{R}] = -i\hbar \quad (۲۷۲-۶)$$

با استفاده از رابطه‌ی عدم قطعیت جفت عملگرهای  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  ( $\Delta A\Delta B \geq \frac{1}{2}|\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle|$ ) می‌توانیم رابطه‌ی زیر را بنویسیم:

$$\Delta P_r\Delta r \geq \frac{1}{2}\left|\langle[\hat{P}_r, \hat{R}]\rangle\right| \quad (۲۷۳-۶)$$

یا

$$\Delta P_r\Delta r \geq \frac{\hbar}{2} \quad (۲۷۴-۶)$$

(ب) اثر  $\hat{P}_r^2$  روی  $\psi(\mathbf{r})$  به صورت زیر است:

$$\hat{P}_r^2\psi(\mathbf{r}) = -\hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[r\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\psi)\right] = -\hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\psi(\mathbf{r})) \quad (۲۷۵-۶)$$

ازاین رو

$$\hat{P}_r^2 = -\hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r) \quad (۲۷۶-۶)$$

### مسئله‌ی ۹-۶

تعداد حالت‌های مقید ذره‌ای به جرم  $m$  که در پتانسیل دلتای  $V(r) = -V_0\delta(r-a)$  حرکت می‌کند

و در آن  $V_0 > 0$  است را بیابید. در مورد وجود حالت‌های مقید برحسب اندازه‌ی  $a$  بحث کنید. تابع موج بهنجار حالت(های) مقید را بیابید.

حل

می‌توان معادله‌ی شعاعی به‌ازای  $l = 0$  را از (۵۷-۶) به‌دست آورد:

$$\frac{d^2 U_{n0}(r)}{dr^2} + \left[ \frac{2mV_0}{\hbar^2} \delta(r-a) - k^2 \right] U_{n0}(r) = 0 \quad (277-6)$$

که در آن  $U_{nl}(r) = U_{n0}(r) = rR_{n0}(r)$  و  $k^2 = -2mE/\hbar^2$  است زیرا در اینجا تنها به دنبال حالت‌های مقید ( $E < 0$ ) هستیم. جواب‌های این معادله عبارتند از

$$U_{n0}(r) = \begin{cases} U_{n0,\lambda}(r) = Ae^{kr} + Be^{-kr} & 0 < r < a \\ U_{n0,\gamma}(r) = Ce^{-kr} & r > a \end{cases} \quad (278-6)$$

می‌توان ویژه‌مقدارهای انرژی را از شرایط مرزی به‌دست آورد. چون تابع موج در  $r = 0$  صفر می‌شود ( $U_{n0}(0) = 0$ )، داریم:  $A + B = 0$  یا  $B = -A$  از این رو  $U_{n0,\lambda}(r) = D \sinh kr$  است:

$$U_{n0}(r) = D \sinh kr \quad 0 < r < a \quad (279-6)$$

با  $D = 2A$ . شرط پیوستگی در  $r = a$  برای  $U_{n0}(r)$   $U_{n0,\lambda}(a) = U_{n0,\gamma}(a)$  به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$D \sinh ka = Ce^{-ka} \quad (280-6)$$

برای به‌دست آوردن شرط ناپیوستگی برای مشتق اول  $U_{n0}(r)$  در  $r = a$  باید از (۲۷۷-۶) انتگرال بگیریم:

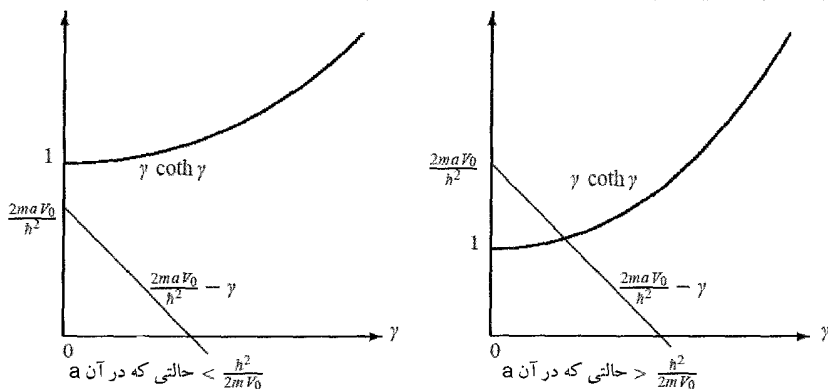
$$\lim_{\varepsilon \rightarrow a} [U'_{n0,\gamma}(a + \varepsilon) - U'_{n0,\lambda}(a - \varepsilon)] + \frac{2mV_0}{\hbar^2} U_{n0,\gamma}(a) = 0 \quad (281-6)$$

یا

$$-kCe^{-ka} - kD \cosh ka + \frac{2mV_0}{\hbar^2} Ce^{-ka} = 0 \quad (282-6)$$

با در نظر گرفتن  $Ce^{-ka} = D \sinh ka$  (۲۸۰-۶) داده می‌شود و جاگذاری آن در (۲۸۲-۶) نتیجه‌ی زیر را به‌دست می‌آوریم:

$$-k \sinh ka - k \cosh ka + \frac{2mV_0}{\hbar^2} \sinh ka = 0 \quad (283-6)$$



شکل ۶-۶ جواب‌های ترسیمی  $f(\gamma) = g(\gamma)$  با  $\gamma = ka$  و  $f(\gamma) = \gamma \coth \gamma$  و  $g(\gamma) = 2mV_0 a / \hbar^2 - \gamma$ . اگر  $a < \hbar^2 / (2mV_0)$  باشد آنگاه حالت مقیدی وجود ندارد. اگر  $a > \hbar^2 / (2mV_0)$  باشد آنگاه یک حالت مقید وجود دارد.

ازاین‌رو

$$\gamma \coth \gamma = \frac{2mV_0}{\hbar^2} a - \gamma \quad (۲۸۴-۶)$$

که در آن  $\gamma = ka$  است.

ویژه‌مقدارهای انرژی از تقاطع منحنی‌های  $f(\gamma) = \gamma \coth \gamma$  و  $g(\gamma) = 2mV_0 a / \hbar^2 - \gamma$  به دست می‌آیند. همانطور که در شکل ۶-۶ نشان داده شده است، هرگاه  $a < \hbar^2 / (2mV_0)$  باشد آنگاه هیچ جواب حالت مقیدی نمی‌تواند وجود داشته باشد زیرا منحنی‌های  $f(\gamma)$  و  $g(\gamma)$  یکدیگر را قطع نمی‌کنند. ولی هرگاه  $a > \hbar^2 / (2mV_0)$  باشد آنگاه این منحنی‌ها تنها یک‌بار همدیگر را قطع می‌کنند ازاین‌رو تنها یک حالت مقید وجود دارد. می‌توانیم این نتیجه‌ها را به صورت زیر خلاصه کنیم:

$$a < \frac{\hbar^2}{2mV_0} \implies \text{حالت مقیدی وجود ندارد.} \quad (۲۸۵-۶)$$

$$a > \frac{\hbar^2}{2mV_0} \implies \text{تنها یک حالت مقید وجود دارد.} \quad (۲۸۶-۶)$$

تابع موج شعاعی از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$R_{n_0}(r) = \frac{1}{r} U_{n_0}(r) = \begin{cases} (D/r) \sinh kr & 0 < r < a \\ (C/r) e^{-kr} & r > a \end{cases} \quad (۲۸۷-۶)$$

به‌نجار کردن این تابع نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\begin{aligned} \psi &= \int_0^\infty r^\nu R_{n^0}^\nu(r) dr = \int_0^\infty U_{n^0}^\nu(r) dr \\ &= D^\nu \int_0^a \sinh^\nu kr dr + C^\nu \int_a^\infty e^{-\nu kr} dr = \frac{D^\nu}{\nu} \int_0^a [\cosh \nu kr - 1] dr + \frac{C^\nu}{\nu k} e^{-\nu ka} \\ &= D^\nu \left[ \frac{1}{4k} \sinh \nu ka - \frac{a}{\nu} \right] + \frac{C^\nu}{\nu k} e^{-\nu ka} \end{aligned} \quad (288-6)$$

از (۲۸۰-۶) داریم:  $C e^{-ka} = D \sinh ka$  بنابراین می‌توانیم این رابطه را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$\psi = D^\nu \left[ \frac{1}{4k} \sinh \nu ka - \frac{a}{\nu} \right] + \frac{D^\nu}{\nu k} \sinh^\nu ka = D^\nu \left[ \frac{\sinh \nu ka + \nu \sinh^\nu ka}{4k} - \frac{a}{\nu} \right] \quad (289-6)$$

از این رو

$$D = \frac{2\sqrt{k}}{\sqrt{\sinh \nu ka + \nu \sinh^\nu ka - \nu a k}} \quad (290-6)$$

بنابراین تابع موج به‌نجار از رابطه‌ی  $(1/\sqrt{4\pi})R_{n^0}^\nu(r)$  یا  $\psi_{n^0\nu}(r) = \psi_{n^0\nu}(r)$

$$\psi_{n^0\nu}(r) = \frac{\sqrt{k}}{\sqrt{\pi \sinh \nu ka + \nu \pi \sinh^\nu ka - \nu \pi a k}} \begin{cases} (1/r) \sinh(kr) & 0 < r < a \\ (1/r) \sinh(ka) e^{-k(r-a)} & r > a \end{cases} \quad (291-6)$$

به دست می‌آید.

### مسأله‌ی ۱۰-۶

حالت‌های  $l = 0$  یک سیستم مقید دو کوارک را در نظر بگیرید که دارای جرم یکسان  $m$  هستند و از طریق پتانسیل  $V(r) = kr$  با هم برهمکنش دارند.

(الف) با استفاده از مدل بوهر سرعت، شعاع و انرژی این سیستم را در حالت مدارهای دایره‌ای بیابید. همچنین بسامد زاویه‌ای تابش تولید شده به وسیله‌ی گذار سیستم از حالت انرژی  $n$  به  $m$  را نیز تعیین کنید.

(ب) معادله‌ی شرودینگر به‌ازای پتانسیل مرکزی  $V(r) = kr$  را برای سیستم دو کوارک حل کنید و عبارت‌های مربوط به انرژی و تابع شعاعی  $R_{nl}(r)$  را بیابید. این انرژی را با مقدار به دست آمده در قسمت

(الف) مقایسه کنید. (پ) از عبارت‌های به دست آمده در (الف) و (ب) برای محاسبه‌ی پایین‌ترین چهار تراز



انرژی سیستم کوآرک پایین-پادپایین (باتمونیم) با  $k = 15 \text{ GeV fm}^{-1}$  استفاده کنید. جرم-انرژی کوآرک پایین برابر است با  $mc^2 = 4.4 \text{ GeV}$ .

حل

(الف) فرض کنید که دو کوآرک روی دایره‌ای حرکت می‌کنند (بسیار شبیه به الکترون و پروتون در اتم هیدروژن). می‌توانیم نیروی بین آنها را به صورت زیر بنویسیم:

$$\mu \frac{v^2}{r} = \frac{dV(r)}{dr} = k \quad (292-ع)$$

که در آن  $\mu = m/2$  جرم کاهش یافته است. از شرط کوانتس تکانه‌ی زاویه‌ای بوه‌ر داریم:

$$L = \mu v r = n \hbar \quad (293-ع)$$

با ضرب (292-ع) در (293-ع) به رابطه‌ی  $\mu^2 v^3 = n \hbar k$  می‌رسیم که سرعت حرکت نسبی سیستم دو کوآرک را نتیجه می‌دهد:

$$v_n = \left( \frac{n \hbar k}{\mu^2} \right)^{1/3} \quad (294-ع)$$

می‌توان شعاع را از (293-ع) به دست آورد:  $r_n = n \hbar / (\mu v_n)$ . با استفاده از (294-ع) این رابطه به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$r_n = \left( \frac{n^2 \hbar^2}{\mu k} \right)^{1/3} \quad (295-ع)$$

می‌توانیم انرژی کل حرکت نسبی را با جمع انرژی‌های جنبشی و پتانسیل به دست آوریم:

$$E_n = \frac{1}{2} \mu v_n^2 + k r_n = \frac{3}{2} \left( \frac{n^2 \hbar^2 k^2}{\mu} \right)^{1/3} \quad (296-ع)$$

در به دست آوردن این رابطه از رابطه‌های مربوط به  $v_n$  و  $r_n$  که به ترتیب از (294-ع) و (295-ع) به دست می‌آیند، استفاده کرده‌ایم. بسامد زاویه‌ای تابش تولید شده توسط گذار از  $n$  به  $m$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} = \frac{3}{2\hbar} \left( \frac{k^2}{\mu \hbar} \right)^{1/3} \left( n^{2/3} - m^{2/3} \right) \quad (297-ع)$$

(ب) معادله‌ی شعاعی از رابطه‌ی (297-ع) به دست می‌آید:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 U_{nl}(r)}{dr^2} + \left[ kr + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2} \right] U_{nl}(r) = E_n U_{nl}(r) \quad (298-ع)$$

که در آن  $U_{nl}(r) = rR_{nl}(r)$  است. چون به حالت  $l = 0$  می‌پردازیم، داریم:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 U_{n0}(r)}{dr^2} + krU_{n0}(r) = E_n U_{n0}(r) \quad (299-6)$$

که می‌توان آن را به معادله‌ی زیر کاهش داد:

$$\frac{d^2 U_{n0}(r)}{dr^2} - \frac{2\mu k}{\hbar^2} \left( r - \frac{E}{k} \right) U_{n0}(r) = 0 \quad (300-6)$$

با انجام تغییر متغیر  $x = (2\mu k/\hbar^2)^{1/3} (r - E/k)$  می‌توانیم (۳۰۰-۶) را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$\frac{d^2 \phi_n(x)}{dx^2} - x\phi_n(x) = 0 \quad (301-6)$$

بیشتر جواب‌های این معادله را در فصل ۴ مطالعه کردیم. این جواب‌ها از تابع‌های ایری  $\text{Ai}(x)$  به دست می‌آیند:  $\phi(x) = B\text{Ai}(x)$ . انرژی‌های حالت مقید از صفرهای  $\text{Ai}(x)$  نتیجه می‌شوند. شرایط مرزی روی  $U_{nl}$  معادله‌ی (۳۰۱-۶) عبارتند از  $U_{nl}(r=0) = 0$  و  $U_{nl}(r \rightarrow +\infty) = 0$ . شرط دوم به وسیله‌ی تابع‌های ایری برآورده می‌شود زیرا  $\text{Ai}(x \rightarrow +\infty) = 0$  است. شرط نخست متناظر با  $\phi[-(2\mu k/\hbar^2)^{1/3} E/k] = 0$  یا  $\text{Ai}[-(2\mu k/\hbar^2)^{1/3} E/k] = \text{Ai}(R_n) = 0$  است که در آن  $R_n$ ها صفرهای تابع ایری هستند.

آنگاه شرط مرزی  $U_{nl}(r=0) = 0$  مجموعه‌ی گسسته‌ای از ترازهای انرژی را نتیجه می‌دهد که می‌توان آنها را به صورت زیر برحسب ریشه‌های تابع ایری بیان کرد:

$$\text{Ai} \left[ - \left( \frac{2\mu k}{\hbar^2} \right)^{1/3} \frac{E}{k} \right] = 0 \quad \Rightarrow \quad - \left( \frac{2\mu k}{\hbar^2} \right)^{1/3} \frac{E_n}{k} = R_n \quad (302-6)$$

ازاین رو

$$E_n = - \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \right)^{1/3} R_n \quad (303-6)$$

تابع شعاعی سیستم از رابطه‌ی  $R_{n0}(r) = (1/r)U_{n0}(r) = (B_n/r)\text{Ai}(x)$

$$R_{n0}(r) = \frac{B_n}{r} \text{Ai}(x) = \frac{B_n}{r} \text{Ai} \left[ \left( \frac{2\mu k}{\hbar^2} \right)^{1/3} r + R_n \right] \quad (304-6)$$

به دست می‌آید. عبارت مربوط به انرژی (۳۰۳-۶) دارای همان ساختار انرژی (۲۹۶-۶) است که از مدل بوهر به دست آمد:  $E_n^B = \frac{2}{3} (n^2 \hbar^2 k^2 / \mu)^{1/3}$ . نسبت این دو عبارت برابر است با

$$\frac{E_n}{E_n^B} = - \frac{2}{3} \frac{R_n}{(2n^2)^{1/3}} \quad (305-6)$$

از (۳۱۵-۶) داریم:

$$\frac{R'_n(a)_1}{R_n(a)_1} = k_1 \cot(k_1 a) - \frac{1}{a}, \quad \frac{R'_n(a)_2}{R_n(a)_2} = -k_2 - \frac{1}{a} \quad (317-6)$$

با جاگذاری (۳۱۷-۶) در (۳۱۶-۶) نتیجه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$-k_1 \cot(k_1 a) = k_2 \quad (318-6)$$

یا

$$\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}(V_0 + E)} \cot \left[ \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}(V_0 + E)} a \right] = -\sqrt{\frac{-2\mu E}{\hbar^2}} \quad (319-6)$$

زیرا  $k_2 = \sqrt{-2\mu E/\hbar^2}$  و  $k_1 = \sqrt{2\mu(V_0 + E)/\hbar^2}$ 

(پ) در حد  $E \rightarrow 0$  سیستم دارای حالت‌های مقید بسیار اندکی است. در این حد، معادله‌ی (۳۱۹-۶) به صورت زیر در می‌آید:

$$\sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}} \cot \left( \sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}} a \right) = 0 \quad (320-6)$$

که به  $(2n+1)\pi/2 = a\sqrt{2\mu V_{0n}/\hbar^2}$  می‌انجامد از این رو

$$V_{0n} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{\lambda \mu a^2} (2n+1)^2 \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (321-6)$$

بنابراین مقدارهای کمینه‌ی  $V_0$  متناظر با یک، دو و سه حالت مقید به ترتیب عبارتند از

$$V_{00} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{\lambda \mu a^2}, \quad V_{01} = \frac{9\pi^2 \hbar^2}{\lambda \mu a^2}, \quad V_{02} = \frac{25\pi^2 \hbar^2}{\lambda \mu a^2} \quad (322-6)$$

(ت) با استفاده از نمادگذاری  $\alpha = ak_1$  و  $\beta = ak_2$  از یک سو می‌توانیم بنویسیم:

$$\alpha^2 + \beta^2 = \frac{2\mu a^2 V_0}{\hbar^2} \quad (323-6)$$

و از سوی دیگر، می‌توانیم معادله‌ی غیرجبری (۳۱۸-۶) را به معادله‌ی زیر کاهش دهیم:

$$-\alpha \cot \alpha = \beta \quad (324-6)$$

زیرا  $k_2 = \sqrt{-2\mu E/\hbar^2}$  و  $k_1 = \sqrt{2\mu(V_0 + E)/\hbar^2}$

(پ) از این شرط پیوستگی برای یافتن مقدارهای کمینه‌ی  $V_0$  استفاده کنید به طوری که سیستم یک، دو و سه حالت مقید داشته باشد.

(ت) نتیجه‌های قسمت (پ) را از حل ترسیمی معادله‌ی غیرجبری به دست آمده در (ب) به دست آورید.

(ث) از عبارت به دست آمده در (پ) برای تخمین مقدار عددی  $V_0$  برای هسته‌ی یک دوترون با  $m = 1.67 \times 10^{-27} \text{ kg}$  استفاده کنید. هسته‌ی یک دوترون از یک نوترون و یک پروتون تشکیل شده است.

حل

(الف) هنگامی که  $l = 0$  و  $0 < E < V_0$  است، می‌توان معادله‌ی شعاعی (۶-۵۶)

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 U_{nl}(r)}{dr^2} + \left[ \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] U_{nl}(r) = E_n U_{nl}(r) \quad (۶-۳۱۰)$$

را درون چاه که ما آن را ناحیه‌ی (۱) می‌نامیم، به صورت:

$$U_n''(r)_1 + k_1^2 U_n(r)_1 = 0 \quad 0 \leq r \leq a \quad (۶-۳۱۱)$$

و برای بیرون چاه که ما آن را ناحیه‌ی (۲) می‌نامیم، به صورت زیر نوشت:

$$U_n''(r)_2 - k_2^2 U_n(r)_2 = 0 \quad r > a \quad (۶-۳۱۲)$$

که در آن  $k_1 = \sqrt{2\mu(E + V_0)}/\hbar$ ،  $k_2 = \sqrt{2\mu(E - V_0)}/\hbar$  است. چون باید  $U_n(r)_1$  در  $r = 0$  صفر شود در حالی که  $U_n(r)_2$  در  $r \rightarrow \infty$  متناهی باشد، جواب‌های (۶-۳۱۱) و (۶-۳۱۲) به ترتیب از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$U_n(r)_1 = A \sin(k_1 r) \quad 0 \leq r \leq a \quad (۶-۳۱۳)$$

$$U_n(r)_2 = B e^{-k_2 r} \quad r > a \quad (۶-۳۱۴)$$

تابع‌های شعاعی متناظر عبارتند از

$$R_n(r)_1 = A \frac{\sin(k_1 r)}{r}, \quad R_n(r)_2 = B \frac{e^{-k_2 r}}{r} \quad (۶-۳۱۵)$$

(ب) چون مشتق لگاریتمی تابع شعاعی در  $r = a$  پیوسته است، می‌توانیم بنویسیم:

$$\frac{R_n'(a)_1}{R_n(a)_1} = \frac{R_n'(a)_2}{R_n(a)_2} \quad (۶-۳۱۶)$$

(پ) در محاسبات زیر از مقادیرهای  $k = ۱۵ \text{ GeV fm}^{-1}$ ،  $\mu c^2 = mc^2/2 = ۲,۲ \text{ GeV}$  و  $hc = ۱۹۷,۳ \text{ MeV fm}$  استفاده خواهیم کرد. مقادیرهای پایین‌ترین چهار تراز پایین متناظر با عبارت  $E_n^B = \frac{3}{4}(n^2 \hbar^2 k^2 / \mu)^{1/2}$  عبارتند از

$$E_1^B = \frac{3}{4} \left( \frac{\hbar^2 k^2}{\mu} \right)^{1/2} = ۲,۳۸ \text{ GeV}, \quad E_2^B = 2^{2/3} E_1^B = ۳,۷۷ \text{ GeV} \quad (۳۰۶-۶)$$

$$E_3^B = 3^{2/3} E_1^B = ۴,۹۵ \text{ GeV}, \quad E_4^B = 4^{2/3} E_1^B = ۵,۹۹ \text{ GeV} \quad (۳۰۷-۶)$$

اکنون بیایید ترازهای انرژی دقیق را محاسبه کنیم. همانطور که در فصل ۴ یادآوری شد، چند ریشه‌ی نخست تابع ایری عبارتند از  $R_1 = -۲,۳۳۸$ ،  $R_2 = -۴,۰۸۸$ ،  $R_3 = -۵,۵۲۱$  و  $R_4 = -۶,۷۸۷$ . بنابراین می‌توانیم بی‌درنگ چند تراز انرژی نخست را به دست آوریم:

$$E_1 = \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \right)^{1/2} R_1 = ۲,۹۴ \text{ GeV}, \quad E_2 = \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \right)^{1/2} R_2 = ۵,۱۴ \text{ GeV} \quad (۳۰۸-۶)$$

$$E_3 = \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \right)^{1/2} R_3 = ۶,۹۵ \text{ GeV}, \quad E_4 = \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \right)^{1/2} R_4 = ۸,۵۴ \text{ GeV} \quad (۳۰۹-۶)$$

### مسأله‌ی ۱۱-۶

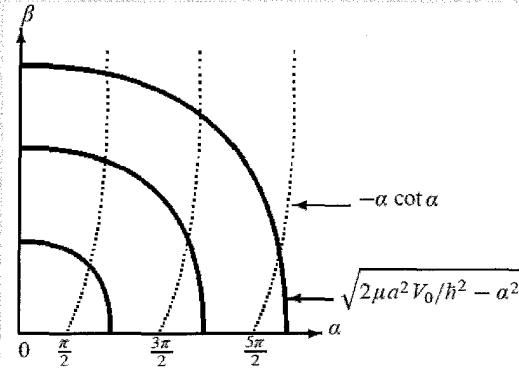
سیستمی از دو ذره‌ی بدون اسپین با جرم کاهش یافته‌ی  $\mu$  را در نظر بگیرید که تحت تأثیر چاه پتانسیل مرکزی و متناهی زیر قرار دارد:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & 0 \leq r \leq a \\ 0 & r > a \end{cases}$$

که در آن  $V_0$  مثبت است. هدف از طرح این مسأله نشان دادن این موضوع است که چگونه مقدار کمینه‌ی  $V_0$  را بیابیم به طوری که چاه پتانسیل یک حالت مقید  $l = 0$  داشته باشد.

(الف) جواب معادله‌ی شرودینگر شعاعی در هر دو ناحیه‌ی  $0 \leq r \leq a$  و  $r > a$  را در حالتی که در آن ذره دارای تکانه‌ی زاویه‌ای صفر است و انرژی آن در گستره‌ی  $-V_0 < E < 0$  واقع است، بیابید.

(ب) نشان دهید که می‌توان شرط پیوستگی تابع شعاعی در  $r = a$  را به یک معادله‌ی غیرجبری برحسب  $E$  کاهش داد.



شکل ۶-۷ جواب‌های ترسیمی برای چاه پتانسیل مربعی کروی منتهایی: این جواب‌ها از تقاطع دایره‌ی  $\alpha^2 + \beta^2 = 2\mu a^2 V_0 / \hbar^2$  با منحنی  $-\alpha \cot \alpha$  به دست می‌آیند که در آن  $\alpha^2 = \mu a^2 (V_0 + E) / \hbar^2$  و  $\beta^2 = -\mu a^2 E / \hbar^2$  با  $0 < E < V_0$ .

همانطور که در شکل ۶-۷ نشان داده شده است، هنگامی که  $\pi/2 < \alpha < 3\pi/2$  است که در حد  $E \rightarrow 0$  به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\frac{\pi^2 \hbar^2}{\lambda \mu a^2} < V_0 < \frac{9\pi^2 \hbar^2}{\lambda \mu a^2} \quad (۳۲۵-۶)$$

تنها یک حالت مقید وجود دارد زیرا دایره تنها یک بار منحنی  $-\alpha \cot \alpha$  را قطع می‌کند. به صورت مشابه، اگر  $3\pi/2 < \alpha < 5\pi/2$  باشد یا

$$\frac{9\pi^2 \hbar^2}{\lambda \mu a^2} < V_0 < \frac{25\pi^2 \hbar^2}{\lambda \mu a^2} \quad (۳۲۶-۶)$$

آنگاه دو حالت مقید وجود دارد و هرگاه  $5\pi/2 < \alpha < 7\pi/2$  باشد آنگاه سه حالت مقید وجود دارد:

$$\frac{25\pi^2 \hbar^2}{\lambda \mu a^2} < V_0 < \frac{49\pi^2 \hbar^2}{\lambda \mu a^2} \quad (۳۲۷-۶)$$

(ث) چون  $m_p c^2 \simeq 938 \text{ MeV}$  و  $m_n c^2 \simeq 940 \text{ MeV}$  است، جرم کاهش یافته‌ی دوترون از رابطه‌ی  $\mu c^2 = (m_p c^2)(m_n c^2) / (m_p c^2 + m_n c^2) \simeq 469,5 \text{ MeV}$  چون  $a = 2 \times 10^{-15} \text{ m}$  مقدار کمی است،  $V_0$  متناظر با یک حالت مقید برابر است با

$$V_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{\lambda \mu a^2} = \frac{\pi^2 (\hbar c)^2}{\lambda (\mu c^2) a^2} = \frac{\pi^2 (197 \text{ MeV fm})^2}{\lambda (469,5 \text{ MeV}) (2 \times 10^{-15} \text{ m})^2} \simeq 25,5 \text{ MeV} \quad (۳۲۸-۶)$$

## مسئله‌ی ۱۲-۶

در یک حالت مانای  $|nl\rangle$  اتم هیدروژن،  $\langle nl|\hat{P}^4|nl\rangle$  را محاسبه کنید.

حل

برای محاسبه‌ی  $\langle nl|\hat{P}^4|nl\rangle$  می‌توانیم  $\hat{P}^4$  را برحسب هامیلتونی هیدروژن بیان کنیم. چون  $\hat{H} = \hat{P}^2/(2m_e) - e^2/r$  است، داریم:  $\hat{P}^2 = 2m_e(\hat{H} + e^2/r)$  از این رو

$$\begin{aligned}\langle nl|\hat{P}^4|nl\rangle &= (2m_e)^2 \left\langle nl \left| \left( \hat{H} + \frac{e^2}{r} \right)^2 \right| nl \right\rangle \\ &= (2m_e)^2 \left\langle nl \left| \hat{H}^2 + \hat{H} \frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{r} \hat{H} + \frac{e^4}{r^2} \right| nl \right\rangle \quad (329-6) \\ &= (2m_e)^2 \left[ E_n^2 + E_n \left\langle nl \left| \frac{e^2}{r} \right| nl \right\rangle + \left\langle nl \left| \frac{e^2}{r} \right| nl \right\rangle E_n + \left\langle nl \left| \frac{e^4}{r^2} \right| nl \right\rangle \right]\end{aligned}$$

که در آن از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که  $|nl\rangle$  یک ویژه‌حالت  $\hat{H}$  است:  $\hat{H}|nl\rangle = E_n|nl\rangle$  با  $E_n = -e^2/(2a_0 n^2) = -13.6 \text{ eV}/n^2$  و مقادیرهای چشمداشتی  $1/r$  و  $1/r^2$  از (۱۸۲-۶) و (۱۸۳-۶) به‌دست می‌آیند ( $\langle nl|r^{-1}|nl\rangle = 1/(n^2 a_0)$ ) و  $\langle nl|r^{-2}|nl\rangle = 2/[n^3(2l+1)a_0^2]$  بنابراین می‌توانیم (۳۲۹-۶) را به‌صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$\begin{aligned}\langle nl|\hat{P}^4|nl\rangle &= (2m_e)^2 \left[ E_n^2 + 2E_n \left\langle nl \left| \frac{e^2}{r} \right| nl \right\rangle + \left\langle nl \left| \frac{e^4}{r^2} \right| nl \right\rangle \right] \\ &= (2m_e E_n)^2 \left[ 1 + \frac{2e^2}{E_n} \frac{1}{n^2 a_0} + \frac{e^4}{E_n^2} \frac{2}{n^3(2l+1)a_0^2} \right] \quad (330-6) \\ &= (2m_e E_n)^2 \left[ 1 - 4 + \frac{\lambda n}{2l+1} \right]\end{aligned}$$

در به‌دست آوردن رابطه‌ی آخر، از رابطه‌ی  $E_n = -e^2/(2a_0 n^2)$  استفاده کرده‌ایم. حال چون  $E_n = -e^2/(2a_0 n^2) = -m_e e^4/(2\hbar^2 n^2)$  به‌صورت  $a_0 = \hbar^2/(m_e e^2)$  است، انرژی  $E_n$  به‌صورت  $E_n = -m_e e^4/(2\hbar^2 n^2)$  وارد شود، به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\langle nl|\hat{P}^4|nl\rangle = \frac{m_e^2 e^8}{\hbar^4 n^4} \left[ \frac{\lambda n}{2l+1} - 3 \right] \quad (331-6)$$

## ۶-۶ تمرین‌ها

۱. یک ذره‌ی بدون اسپین به جرم  $m$  را در نظر بگیرید که به حرکت در صفحه‌ی  $xy$  محدود شده است و به‌ازای تمام مقادیرهای  $x$  و  $y$  تحت تأثیر پتانسیل نوسانگر هماهنگ  $V(x, y) = \frac{1}{2}m\omega^2(\hat{x}^2 + \hat{y}^2)$  قرار دارد.

(الف) نشان دهید که می‌توان هامیلتونی  $\hat{H}$  این ذره را به صورت مجموع دو هامیلتونی آشنای یک‌بعدی  $\hat{H}_x$  و  $\hat{H}_y$  نوشت. سپس نشان دهید که  $\hat{H}$  با  $\hat{X}\hat{P}_y - \hat{Y}\hat{P}_x$  یا  $\hat{L}_z$  جابه‌جا می‌شود.

(ب) عبارت مربوط به ترازهای انرژی  $E_{n_x n_y}$  را بیابید.

(پ) انرژی‌های پایین‌ترین چهار حالت و واگنی‌های متناظر آنها را بیابید.

(ت) واگنی  $g_n$  حالت پرانگیخته‌ی  $n$ ام را به صورت تابعی از عدد کوانتومی  $n$  بیابید ( $n = n_x + n_y$ ).

(ث) اگر بردار حالت  $n$ امین حالت پرانگیخته برابر با  $|n\rangle = |n_x\rangle|n_y\rangle$  یا

$$\langle xy|n\rangle = \langle x|n_x\rangle\langle y|n_y\rangle = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)$$

باشد آنگاه مقدار چشمداشتی عملگر  $\hat{A} = \hat{x}^4 + \hat{y}^4$  را در حالت  $|n\rangle$  به صورت تابعی از عددهای کوانتومی  $n_x$  و  $n_y$  بیابید.

۲. ذره‌ای به جرم  $m$  در صفحه‌ی  $xy$  و در پتانسیل زیر حرکت می‌کند:

$$V(x, y) = \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega^2 y^2 & 0 < x < a \text{ و } y \text{ تمام مقادیرهای } y \\ +\infty & \text{در جاهای دیگر} \end{cases}$$

(الف) معادله‌ی شرودینگر مستقل از زمان این ذره را بنویسید و آن را به مجموعه‌ای از معادله‌های آشنای یک‌بعدی کاهش دهید.

(ب) ویژه‌تابع‌های بهنجار و ویژه‌مقادیرهای انرژی را بیابید.

۳. ذره‌ای به جرم  $m$  در چاه مستطیلی دوبعدی زیر در صفحه‌ی  $xy$  حرکت می‌کند:

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

با کاهش دادن معادله‌ی شرودینگر مستقل از زمان به مجموعه‌ای از معادله‌های یک‌بعدی آشناتر، تابع‌های موج بهنجار و ترازهای انرژی این ذره را بیابید.



۴. پتانسیل نوسانگر هماهنگ ناهمسانگرد سه بعدی زیر را در نظر بگیرید:

$$V(x, y, z) = \frac{1}{4}m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2)$$

(الف) ترازهای انرژی را برحسب  $\omega_x$ ,  $\omega_y$  و  $\omega_z$  محاسبه کنید.

(ب)  $[\hat{H}, \hat{L}_z]$  را محاسبه کنید. آیا انتظار دارید که تابع‌های موج ویژه تابع‌های  $\hat{L}_z$  باشند؟

(پ) پایین‌ترین سه تراز را در حالت  $\omega_x = \omega_y = 2\omega_z/3$  بیابید و واگنی هر تراز را تعیین کنید.

۵. یک ذره‌ی بدون اسپین به جرم  $m$  را در نظر بگیرید که به حرکت تحت تأثیر پتانسیل سه بعدی زیر محدود شده است:

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

(الف) عبارت مربوط به ترازهای انرژی  $E_{n_x n_y n_z}$  و تابع‌های موج متناظر آنها را بیابید.

(ب) اگر  $a = 2b$  باشد آنگاه انرژی پایین‌ترین پنج تراز و واگنی آنها را بیابید.

۶. ذره‌ای به جرم  $m$  در پتانسیل سه بعدی زیر حرکت می‌کند:

$$V(x, y, z) = \begin{cases} \frac{1}{4}m\omega^2 z^2 & 0 < x < a, 0 < y < a \text{ و } z > 0 \\ +\infty & \text{در جاهای دیگر} \end{cases}$$

(الف) معادله‌ی شرودینگر مستقل از زمان این ذره را بنویسید و آن را به مجموعه‌ای از معادله‌های آشنای یک بعدی کاهش دهید. سپس تابع موج بهنجار  $\psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z)$  را بیابید.

(ب) ویژه مقادیرهای انرژی مجاز این ذره را بیابید و نشان دهید که می‌توان آنها را به صورت  $E_{n_x n_y n_z} = E_{n_x n_y} + E_{n_z}$  نوشت.

(پ) پایین‌ترین چهار تراز انرژی را در صفحه‌ی  $xy$  (یعنی  $E_{n_x n_y}$ ) و واگنی‌های متناظر آنها را بیابید.

۷. ذره‌ای به جرم  $m$  در پتانسیل  $V(x, y, z) = V_1(x, y) + V_2(z)$  حرکت می‌کند که در آن

$$V_1(x, y) = \frac{1}{4}m\omega^2(x^2 + y^2), \quad V_2(z) = \begin{cases} 0 & 0 \leq z \leq a \\ +\infty & \text{در جاهای دیگر} \end{cases}$$

(الف) ترازهای انرژی و تابع موج این ذره را محاسبه کنید.

(ب) حال  $V_2(z)$  را خاموش می‌کنیم (یعنی  $m$  تنها تحت تأثیر  $V_1(x, y)$  قرار دارد). واگنی  $g_n$  تراز انرژی  $m$  را محاسبه کنید (توجه کنید که  $n = n_x + n_y$ ).

۸. اتم موثونی را در نظر بگیرید که از یک هسته که دارای  $Z$  پروتون (بدون نوترون) است و یک موثون منفی که پیرامون آن حرکت می‌کند، تشکیل شده است. بار موثون برابر با  $-e$  و جرم آن  $207$  برابر جرم الکترون است ( $m_{\mu^-} = 207m_e$ ). برای یک اتم موثون با  $Z = 6$  کمیت‌های زیر را محاسبه کنید:

(الف) شعاع مدار اول بوهر.

(ب) انرژی حالت پایه و انرژی حالت‌های برانگیخته‌ی اول و دوم.

(پ) بسامد وابسته به گذارهای  $n_i = 2 \rightarrow n_f = 1$ ،  $n_i = 3 \rightarrow n_f = 1$  و  $n_i = 3 \rightarrow n_f = 2$ .

۹. یک اتم هیدروژن دارای تابع موج  $\Psi_{nlm}(r)$  با  $n = 4$ ،  $l = 3$  و  $m = 3$  است.

(الف) اندازه‌ی تکانه‌ی زاویه‌ای مداری الکترون پیرامون پروتون چقدر است؟

(ب) زاویه‌ی بین بردار تکانه‌ی زاویه‌ای مداری و محور  $z$  چقدر است؟ هرگاه  $l$  ثابت نگه داشته شود آیا

می‌توان با تغییر دادن  $n$  یا  $m$  این زاویه را کاهش داد؟ اهمیت فیزیکی این نتیجه در چیست؟

(پ) شکل تابع شعاعی و احتمال یافتن الکترون در فاصله‌ی  $r$  از پروتون را رسم کنید.

۱۰. الکترونی در یک اتم هیدروژن در ویژه‌حالت انرژی زیر قرار دارد:

$$\psi_{21-1}(r, \theta, \varphi) = N r e^{-r/2a_0} Y_{1-1}(\theta, \varphi)$$

(الف) ثابت بهنجارش  $N$  را بیابید.

(ب) احتمال یافتن الکترون در  $r = a_0$ ،  $\theta = 45^\circ$  و  $\varphi = 60^\circ$  در واحد حجم چقدر است؟

(پ) احتمال یافتن الکترون در  $r = 2a_0$  در واحد حجم و در بازه‌ی شعاعی یکه  $(dr)$  چقدر است؟ (باید

در  $r = 2a_0$  روی  $\theta$  و  $\varphi$  انتگرال گرفته شود.)

(ت) اگر اندازه‌گیری‌های  $\hat{L}^2$  و  $\hat{L}_z$  انجام شوند آنگاه نتیجه‌ها به چه صورت است؟

۱۱. یک اتم هیدروژن را در نظر بگیرید که در حالت پایه‌ی خود قرار دارد. تابع موج حالت پایه از رابطه‌ی

زیر به دست می‌آید:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$$

که در آن  $a_0$  شعاع بوهر است.

(الف) محتمل‌ترین فاصله‌ی بین الکترون و پروتون را هنگامی که اتم هیدروژن در حالت پایه‌ی خود است،

بیابید.

(ب) فاصله‌ی میانگین بین الکترون و پروتون را بیابید.

۱۲. یک اتم هیدروژن که حالت آن در  $t = 0$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید را در نظر بگیرید:

$$\Psi(\mathbf{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_{200}(\mathbf{r}) + \frac{1}{\sqrt{3}}\phi_{211}(\mathbf{r}) + \frac{1}{\sqrt{6}}\phi_{222}(\mathbf{r})$$

(الف) تابع موج وابسته به زمان چیست؟

(ب) اگر اندازه‌گیری انرژی انجام شود آنگاه چه مقدارهایی و با چه احتمال‌هایی به دست خواهند آمد؟  
 (ب) قسمت (ب) را برای  $\hat{L}_z$  و  $\hat{L}^2$  تکرار کنید. یعنی اگر اندازه‌گیری  $\hat{L}_z$  و  $\hat{L}^2$  انجام شود آنگاه چه مقدارهایی و با چه احتمال‌هایی به دست خواهند آمد؟

۱۳. تابع موج یک الکترون در اتم هیدروژن از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\psi_{21m_l m_s}(r, \theta, \varphi) = R_{21}(r) \left[ \frac{1}{\sqrt{3}}Y_{10}(\theta, \varphi) \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}Y_{11}(\theta, \varphi) \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right]$$

که در آن  $\left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle$  بردارهای حالت اسپینی هستند. (الف) آیا این تابع موج یک ویژه‌حالت  $\hat{J}_z$  (مؤلفه‌ی  $z$  تکانه‌ی زاویه‌ای کل الکترون) است؟ اگر پاسخ مثبت است، ویژه‌مقدار را بیابید. (راهنمایی: برای این کار باید  $\hat{J}_z \psi_{21m_l m_s}$  را محاسبه کنید.)

(ب) اگر مؤلفه‌ی  $z$  تکانه‌ی زاویه‌ای اسپینی الکترون را اندازه بگیرید آنگاه چه مقدارهایی را به دست خواهید آورد؟ احتمال‌های متناظر چقدرند؟

(ب) اگر  $\hat{J}^2$  را اندازه بگیرید آنگاه چه مقدارهایی را به دست خواهید آورد؟ احتمال‌های متناظر چقدرند؟

۱۴. اتم هیدروژنی را در نظر بگیرید که حالت آن در زمان  $t = 0$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\Psi(\mathbf{r}, 0) = A\phi_{200}(\mathbf{r}) + \frac{1}{\sqrt{5}}\phi_{211}(\mathbf{r}) + \frac{1}{\sqrt{3}}\phi_{222}(\mathbf{r})$$

که در آن  $A$  ثابت بهنجارش است.

(الف)  $A$  را بیابید به طوری که این حالت بهنجار باشد.

(ب) حالت این اتم را در هر زمان بعدی  $t$  بیابید.

(ب) هرگاه اندازه‌گیری انرژی انجام شود آنگاه چه مقدارهایی و با چه احتمال‌هایی به دست خواهند آمد؟

(ت) انرژی میانگین اتم را بیابید.

۱۵. بهنای توزیع چگالی احتمال  $r$  را برای حالت پایه‌ی اتم هیدروژن محاسبه کنید:

$$\Delta r = \sqrt{\langle r^2 \rangle_{10} - \langle r \rangle_{10}^2}$$

$t = 0$  از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\psi(\mathbf{r}, 0) = \frac{A}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{1}{a_0} \right)^{3/2} e^{-r/a_0} + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left( \frac{z - \sqrt{2}x}{r} \right) R_{21}(r)$$

که در آن  $A$  یک ثابت حقیقی،  $a_0$  شعاع بوهر و  $R_{21}(r)$  تابع موج شعاعی است:  $R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{6}}(1/a_0)^{3/2}(r/2a_0)e^{-r/2a_0}$ .

(الف)  $\psi(\mathbf{r}, \theta)$  را برحسب  $\sum_{nlm} \phi_{nlm}(\mathbf{r})$  بنویسید که در آن  $\phi_{nlm}(\mathbf{r})$  تابع موج هیدروژن است:  $\phi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$ .

(ب)  $A$  را بیابید به طوری که  $\psi(\mathbf{r}, \theta)$  بهنجار باشد (به یاد بیاورید که  $\int \phi_{n'l'm'}^* \phi_{nlm}(\mathbf{r}) d^3r = \delta_{n',n} \delta_{l',l} \delta_{m',m}$  است).

(پ) تابع موج  $\psi(\mathbf{r}, t)$  در زمان‌های بعدی  $t$  را بنویسید.

(ت) آیا  $\psi(\mathbf{r}, \theta)$  یک ویژه‌تابع  $\hat{L}_z$  و  $\hat{L}^2$  است؟ اگر پاسخ مثبت است آنگاه ویژه‌مقدارها چقدرند؟

(ث) هرگاه اندازه‌گیری انرژی انجام شود آنگاه چه مقدار و با چه احتمالی به دست خواهد آمد؟

(ج) احتمال این که اندازه‌گیری  $\hat{L}_z$  نتیجه‌ی  $\hbar$  را بدهد، چقدر است؟

(چ) مقدار میانگین  $r$  را در حالت  $\psi(\mathbf{r}, \theta)$  به دست آورید.

۱۷. آونگی را در نظر بگیرید که نوسان‌های هماهنگ کوچکی (با بسامد زاویه‌ای  $\omega = \sqrt{g/l}$ ) که در آن  $g$  شتاب ناشی از گرانش و  $l$  طول آونگ است)، انجام می‌دهد. نشان دهید که ترازهای انرژی کوانتومی و واگنی‌های متناظر آونگ به ترتیب از رابطه‌های  $E_n = (n+1)\hbar\omega$  و  $g_n = n+1$  به دست می‌آیند.

۱۸. پروتونی را در نظر بگیرید که درون چاه پتانسیل مرکزی و نامتناهی زیر به دام می‌افتد:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & 0 < r < a \\ +\infty & r \geq a \end{cases}$$

که در آن  $a = 10 \text{ fm}$  و  $V_0 = 51.4/34 \text{ MeV}$  است.

(الف) انرژی و تابع موج شعاعی (بهنجار) این ذره را برای حالت‌های  $s$  (یعنی  $l=0$ ) بیابید.

(ب) تعداد حالت‌های مقیدی را بیابید که انرژی‌هایی کوچک‌تر از صفر دارند. می‌توانید از مقدارهای  $mc^2 = 938 \text{ MeV}$  و  $\hbar c = 197 \text{ MeV fm}$  استفاده کنید.

(پ) انرژی ترازهایی که درست زیر و بالای تراز انرژی صفر قرار می‌گیرند را محاسبه کنید. پاسخ خود را برحسب  $\text{MeV}$  بیان کنید.

۱۹. تابع  $\psi(\mathbf{r}) = -A(x+iy)e^{-r/2a_0}$  را در نظر بگیرید که در آن  $a_0$  شعاع بوهر و  $A$  یک ثابت حقیقی است.

(الف) آیا  $\psi(\mathbf{r})$  یک ویژه‌تابع  $\hat{L}_z$  و  $\hat{L}^2$  است؟ اگر پاسخ مثبت است آنگاه  $\psi(\mathbf{r})$  را برحسب  $R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$  بنویسید و مقدار عددهای کوانتومی  $n$ ،  $l$  و  $m$  را بیابید.  $R_{nl}(r)$ ها تابع‌های موج شعاعی اتم هیدروژنند.

- (ب) ثابت  $A$  را بیابید به طوری که  $\psi(\mathbf{r})$  بهنجار باشد.  
 (پ) مقدار میانگین  $r$  و محتمل‌ترین مقدار  $r$  را در این حالت بیابید.  
 ۲۰. تابع موج یک اتم هیدروژن گونه در لحظه  $t = 0$  برابر است با

$$\Psi(\mathbf{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{11}} \left[ \sqrt{3}\psi_{21-1}(\mathbf{r}) - \psi_{210}(\mathbf{r}) + \sqrt{5}\psi_{211}(\mathbf{r}) + \sqrt{2}\psi_{311}(\mathbf{r}) \right]$$

که در آن  $\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$  یعنی  $(\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi))$  یک ویژه تابع بهنجار است (الف) تابع موج وابسته به زمان چیست؟

- (ب) اگر اندازه‌گیری انرژی انجام شود آنگاه چه مقدارهایی و با چه احتمال‌هایی ممکن است به دست آید؟  
 (پ) احتمال این که اندازه‌گیری  $\hat{L}_z$  نتیجه  $-\hbar$  را بدهد، چقدر است؟

۲۱. با استفاده از این واقعیت که عملگر تکانه‌ی شعاعی از  $\hat{p}_r = -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r$  به دست می‌آید، جابه‌جاگر  $[\hat{r}, \hat{p}_r]$  بین عملگر مکان  $\hat{r}$  و عملگر تکانه‌ی شعاعی را محاسبه کنید.

۲۲.  $\Delta r \Delta p_r$  را نسبت به حالت زیر محاسبه کنید:

$$\psi_{210}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{6}} \left( \frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \frac{r}{2a_0} e^{-r/2a_0} Y_{10}(\theta, \varphi)$$

و ثابت کنید که  $\Delta r \Delta p_r$  در اصل عدم قطعیت هایزنبرگ صدق می‌کند.

# پیوست برنامه‌های کامپیوتری

آزمایشگاه کامپیوتری مکانیک کوانتومی

... برنامه‌های کامپیوتری ارائه شده تقریباً به طور کامل با مطالب کتاب منطبق است، لذا توصیه می‌شود استاد درس در هر جلسه تدریس نظری، متناظر با مطلب مورد تدریس در کتاب، یک جلسه را نیز به آزمایش آن موضوع اختصاص دهد. برای مثال در جلسه اول اگر موضوع مورد تدریس بسته‌ی موج و تبیین نظری آن است (۲ ساعت کار نظری روی بسته‌ی موج) یک ساعت نیز به آزمایش کامپیوتری بسته‌ی موج و تعویض پارامترهای مختلف آن و مشاهده‌ی نتایج بپردازد و در این میان تمرین‌های مهندسی ارائه شده در کتاب *interactive Q.mech* که در CD و در فایل مخصوص به خود قرار دارد نیز مورد بحث قرار گیرند. تمام این مسائل و تمرین‌ها با دید مهندسی کوانتومی طراحی شده‌اند و حاوی جذاب‌ترین و ریزترین مطالب مهندسی مکانیک کوانتومی است ...

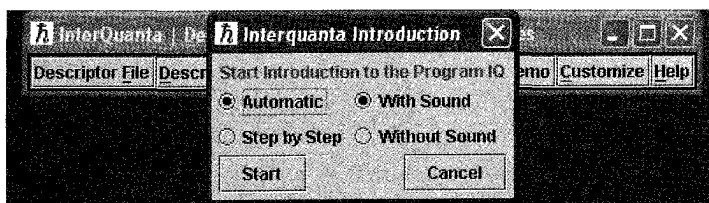
## مقدمه

مکانیک کوانتومی به دلیل مشکل تجسم فرآیندهای آن و نیز برخورداری از یک ریاضیات نسبتاً پیچیده، در بین بیشتر دانشجویان به عنوان یک درس بسیار مشکل معروف است. به عنوان مثال در مکانیک کلاسیک، اکثراً مسائل به شکل تجربی قابل آزمایش هستند و همین امر کمک می‌کند تا اگر در فهم مطلب مشکلی وجود داشت، دانشجو با بهره‌گیری از آموزه‌های تجربی بر آن مشکل غلبه کند. اما به لحاظ این که دایره قلمرو مکانیک کوانتومی، ابعاد اتمی و کوچک‌تر است، این کار بسیار دشوار است.

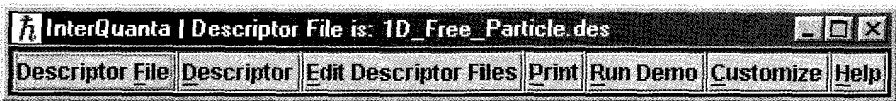
هم‌چنین به لحاظ این که مباحث مکانیک کوانتومی نه تنها در فیزیک، بلکه در رشته‌های دیگری همچون شیمی و رشته‌های مهندسی نیز مطرح است، لذا مشکل بودن این درس گریبان‌گیر تعداد زیادی از دانشجویان رشته‌های مختلف است. در این مجموعه سعی شده است تا با بهره‌گیری از توانمندی‌های کامپیوتری، این مشکل تا حد بسیار زیادی مرتفع گردد. این مجموعه علاوه بر تشریح تصویری تعدادی مسئله آماده و استاندارد، به دانشجو این امکان را می‌دهد تا خود بتواند با انتخاب داده‌های ورودی، آنچه را که در ذهن خود تصور می‌کند، به شکل عملی ببیند و نتایج را براساس آموزه‌های نظری خود مقایسه و تجزیه و تحلیل نماید.

## شرح برنامه

بعد از نصب کامل برنامه در صفحه desktop کامپیوتر شما یک shortcut با نماد  $\hbar$  ظاهر می‌شود که با کلیک کردن روی این shortcut برنامه اجرا می‌شود و شکل زیر در صفحه کامپیوتر شما ظاهر می‌گردد. (شکل ۱)



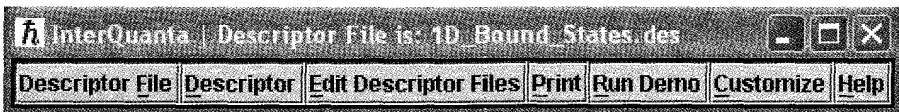
با انتخاب گزینه‌های Automatic و with sound یک فایل صوتی همراه با تصویر اجرا می‌شود که تعدادی در ارتباط با برنامه به زبان انگلیسی است. بعد از اجرای کامل این برنامه پنجره مربوط به آن خودبه‌خود بسته می‌شود. اگر شما در ابتدا گزینه‌های step by step و without sound را انتخاب می‌کردید در این صورت یک فایل تصویری همراه با نوشته‌هایی به زبان لاتین ظاهر می‌شد و شما با زدن کلید Enter می‌توانستید به صفحه بعدی بروید. اگر تمایلی به مرور این فایل نداشته باشید، می‌توانید پنجره مربوط را ببندید. به این ترتیب در صفحه کامپیوتر خود، فقط نوار ابزار مطابق شکل زیر خواهید داشت (شکل ۲). در روی این نوار ابزار آیکن‌های مختلفی وجود دارد که تک‌تک آن‌ها را توضیح می‌دهیم.



شکل ۲

### :Descriptor file

این آیکن در سمت چپ نوار ابزار قرار دارد. با کلیک کردن بر روی آن پنجره‌ای ظاهر می‌شود که شامل عناوین مباحث مکانیک کوانتومی است. با انتخاب هر کدام از آن‌ها، عنوان مربوط به آن بر روی نوار ابزار ظاهر می‌شود. در واقع می‌توان این عناوین را به عنوان فصول یک کتاب مکانیک کوانتومی در نظر گرفت. به عنوان مثال، جمله 1D-Bound-state.des را انتخاب نموده و روی کلید open کلیک کنید. در این صورت این پنجره بسته شده و روی نوار ابزار این عنوان ظاهر می‌گردد. (شکل ۳)

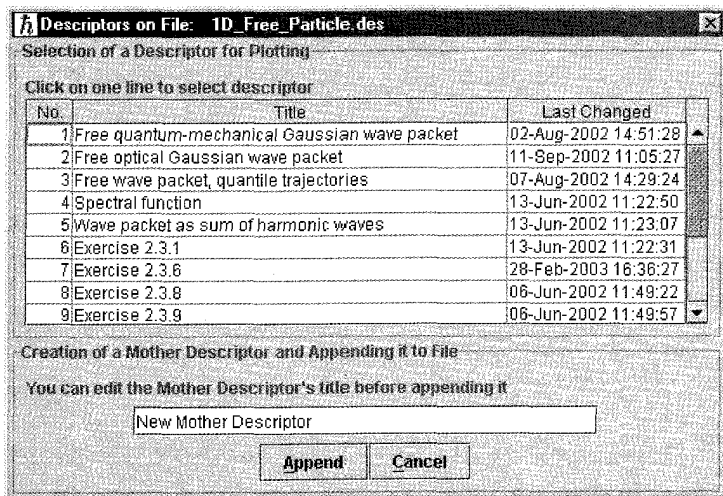
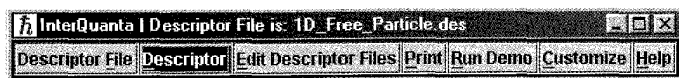


شکل ۳

### :Descriptor

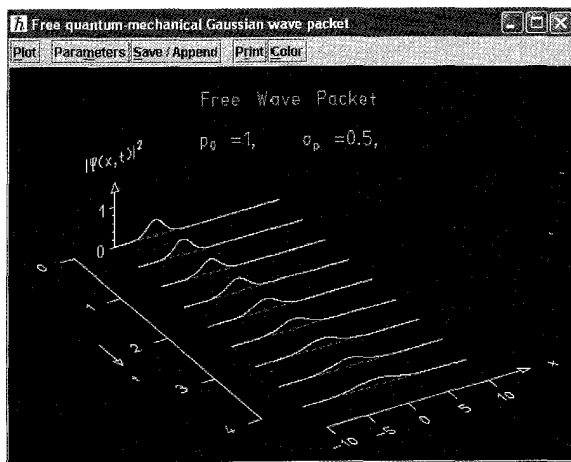
دومین گزینه از سمت چپ بر روی نوار ابزار با این نام مشخص شده است. با کلیک کردن بر روی آن پنجره‌ای ظاهر خواهد شد که شامل زیرعناوین مربوط به عنوان‌هایی است که در بخش مربوط به Descriptor file انتخاب کرده‌اید. به عنوان مثال اگر در بخش قبلی جمله 1D.Free-Particle.des را انتخاب کرده باشید، در این صورت با کلیک کردن روی کلید Descriptor شکل زیر را مشاهده خواهید کرد.





شکل ۴

حال می‌توانید با انتخاب هر کدام از سطرهای مربوط به این پنجره، شکل مربوط به آن را مشاهده کنید. به‌عنوان مثال سطر اول [Free quantum-mechanical Gaussian wave packet] را انتخاب کنید، در این صورت شکل مربوط به مربع تابع موج یک ذره آزاد ( $|\psi(x, t)|^2$ ) را در حالت یک‌بعدی مشاهده می‌کنید. (شکل ۵)



شکل ۵

## :Edit Descriptor Files

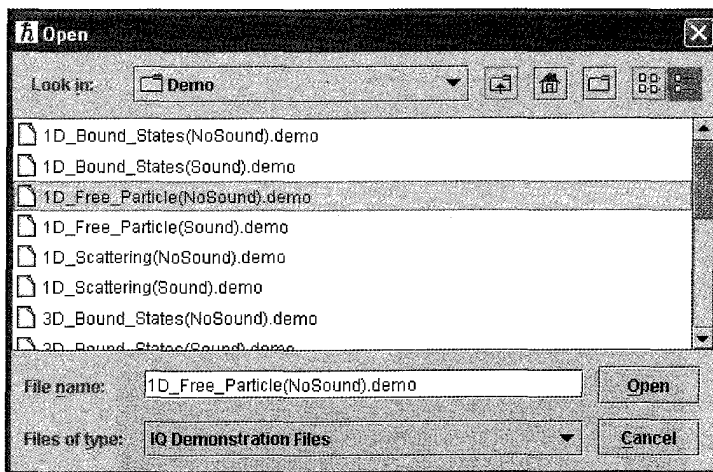
این کلید برای شما امکان تغییر در Descriptor file را فراهم می‌کند. به بیان دیگر با انتخاب این آیکن شما می‌توانید یک Descriptor file شخصی برای خود درست کنید و هر عنوانی را که بخواهید، با استفاده از کلیدهای cut، copy و delet در این پنجره شخصی ایجاد کرده و یا عنوانی را حذف کنید. توجه کنید که تنها با فشردن کلید save در مرحله آخر این تغییرات در کامپیوتر شما ذخیره خواهد شد.

## :Print

با کلیک کردن روی این آیکن، یک پنجره شامل عناوین مربوط به Descriptor ظاهر می‌شود. شما می‌توانید در اینجا با استفاده از کلیدهای shift و control چند عنوان را با هم انتخاب کرده و سپس با فشردن کلید پرینت، در صورت متصل بودن پرینتر به کامپیوتر خود، آن‌ها را چاپ کنید.

## :Run Pemo

بر روی نوار ابزار این آیکن را کلیک کنید. در این صورت شکل زیر ظاهر می‌شود. (شکل ۶)

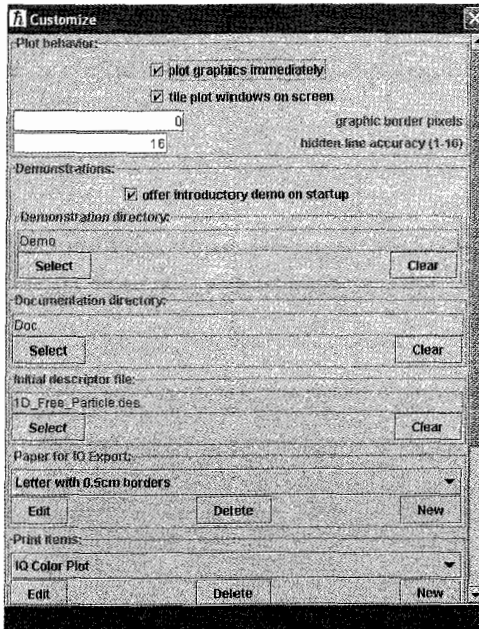


شکل ۶

حال یکی از عناوین موجود در این پنجره را انتخاب کنید (به عنوان مثال 1D-Bound-state (NoSound).demo). با فشردن کلید open، برنامه از شما سؤال می‌کند که آیا تشریح این برنامه به صورت اتوماتیک یا گام به گام صورت گیرد. به عنوان مثال اگر کلید automatic را انتخاب کنید در این صورت یک فایل صوتی - تصویری مطالب موجود در این عنوان را تشریح می‌کند. از آنجا که در انتخاب اول کلمه No sound را برگزیده‌ایم، لذا فایل پخش شده به صورت تصویری - نوشتاری است. اگر عنوان sound را انتخاب می‌کردیم، یک فایل صوتی - تصویری پخش می‌شد.

**:Customize**

این آیکن به شما امکان تغییر در نحوه اجرای برنامه را می‌دهد.

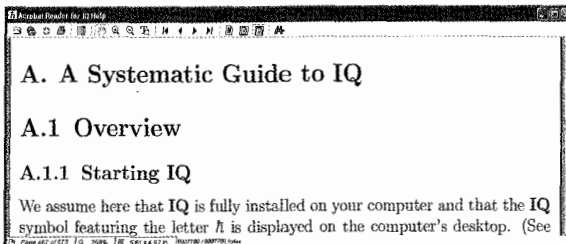


شکل ۷

به شما توصیه می‌کنیم که تنظیمات اولیه برنامه را تغییر ندهید و اجازه دهید تا این تنظیمات باقی بمانند.

**:Help**

آخرین آیکن در سمت راست نوار ابزار کلید Help است. با کلیک کردن روی آن پنجره‌ای باز می‌شود که یک راهنمایی کامل در مورد برنامه و نحوه نصب CD در کامپیوتر را در اختیار شما قرار می‌دهد. (شکل ۸)



شکل ۸

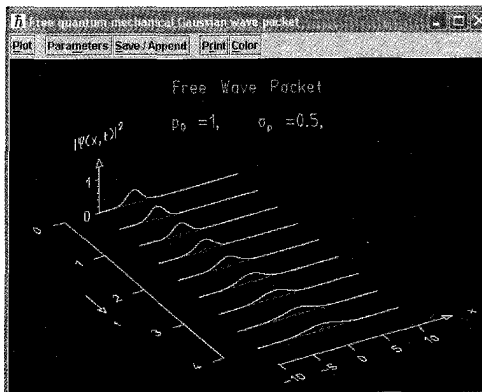
توصیه می‌کنیم قبل از اجرای سایر قسمت‌های برنامه، ابتدا این صفحه را به طور کامل مطالعه کنید.

## شرح جزئیات برنامه

حال که یک دید کلی در مورد برنامه پیدا کردیم، در این مرحله به بررسی تعدادی از مسائل مکانیک کوانتومی با استفاده از این برنامه می‌پردازیم. در هر کتاب مکانیک کوانتومی، معمولاً اولین مطلبی که مورد مطالعه قرار می‌گیرد، بحث مربوط به ذره آزاد است. ما نیز این قاعده را پیروی می‌کنیم.

### ۱) ذره آزاد

همان‌گونه که می‌دانیم، اگر ذره تحت تأثیر هیچ‌گونه پتانسیلی قرار نگیرد، چنین ذره‌ای را آزاد می‌گوییم. تابع موج مربوط به این ذره که جواب معادله شرودینگر است یک تابع گاوسی است که مجذور این تابع موج بیانگر احتمال وجود ذره است. برای سادگی کار ابتدا حالت یک‌بعدی را در نظر می‌گیریم.

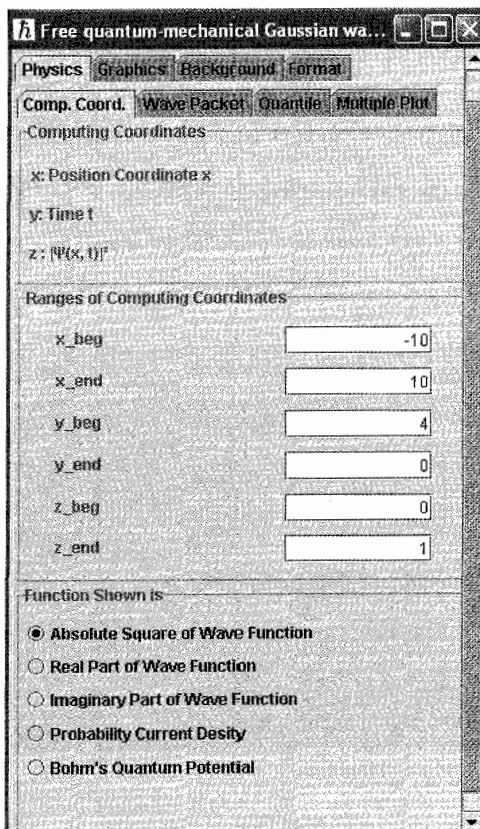


شکل ۹

بعد از اجرای برنامه و ظاهر شدن نوار ابزار، روی Descriptor file کلیک کنید (پنجره مربوط به Interquanta Introduction را ببندید). حال در پنجره ظاهر شده جمله 1D-Free-particle.des را انتخاب نموده و روی کلید open کلیک کنید. به این ترتیب جمله فوق در روی نوار ابزار ظاهر می‌شود. حال روی Descriptor کلیک کرده و در پنجره ظاهر شده جمله Free quantum-mechanical Gaussian wave packet را انتخاب کنید. به این ترتیب شکلی ظاهر می‌شود که مجذور تابع موج مربوط به یک ذره آزاد را در حالت یک‌بعدی نشان می‌دهد. (شکل ۹)

در این تصویر شما شکل مجذور تابع موج را به صورت تابعی از زمان مشاهده می‌کنید. هر جا که این تابع بیشینه است، احتمال وجود ذره بیش‌تر است. هم‌چنین ذره‌ای که در لحظه  $t = 0$  در یک نقطه از محور  $x$  قرار دارد، در لحظات دیگر احتمال وجود آن ذره در همان نقطه قبلی کاهش پیدا می‌کند و با گذشت زمان به صفر میل می‌کند. بالای پنجره مربوط به شکل کلیدهای مختلفی وجود دارد. روی کلید

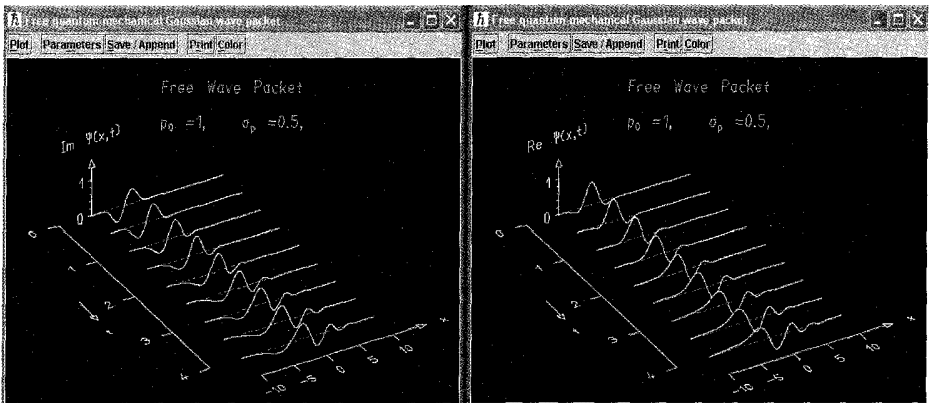
parameters کلیک کنید. در این صورت پنجره مربوط به پارامترها باز می‌شود. (شکل ۱۰)



شکل ۱۰

در قسمت بالای این پنجره نیز چندین کلید وجود دارد. با انتخاب کلیدهای physics و comp. coord شما می‌توانید نقاط ابتدا و انتهای محورها را تغییر دهید. توجه داشته باشید که در شکل محور  $x$  بیان‌گر مکان و محور  $y$  بیان‌گر محور زمان بوده و مجذور تابع موج  $(|\psi(x,t)|^2)$  نیز روی محور  $z$  نشان داده شده است. در قسمت پایین پنجره مربوط به پارامترها پنج گزینه وجود دارد. با انتخاب گزینه اول و کلیک کردن روی دکمه plot شما می‌توانید تصویر مجذور تابع موج را ببینید. هم‌چنین با انتخاب گزینه‌های دیگر می‌توانید به ترتیب اشکال مربوط به قسمت حقیقی، قسمت موهومی، چگالی تابع احتمال و درنهایت پتانسیل کوانتومی بوهم را مشاهده کنید. هم‌چنین اگر بخواهید هم‌زمان چندین تصویر را با هم ایجاد کرده و مقایسه کنید، برنامه این امکان را در اختیار شما قرار می‌دهد. به‌عنوان مثال فرض کنید بخواهیم شکل مربوط به قسمت حقیقی و موهومی تابع موج را هم‌زمان رسم کرده و با یکدیگر مقایسه کنیم. برای این کار

ابتدا در نوار ابزار روی Descriptor کلیک می‌کنیم و بعد از ظاهر شدن شکل دکمه parameters را انتخاب می‌کنیم. در پایین صفحه پارامتر روی جمله دوم Real part of wave function کلیک می‌کنیم و دکمه Plot را فشار می‌دهیم. به این ترتیب شکل مربوط به قسمت حقیقی تابع موج ظاهر می‌گردد. حال پنجره پارامتر را بسته و دوباره روی نوار ابزار کلید Descriptor را کلیک کنید و بعد از انتخاب سطر اول و ظاهر شدن شکل مجذور تابع موج، باز روی کلید parameters کلیک کنید. این بار در پنجره پارامتر جمله Imaginary part of wave function را انتخاب کرده و روی Plot کلیک کنید. به این ترتیب شما در صفحه کامپیوتر خود دو تصویر خواهید داشت که تصویر اول مربوط به قسمت حقیقی و تصویر دوم مربوط به قسمت موهومی تابع موج است. (شکل ۱۱)

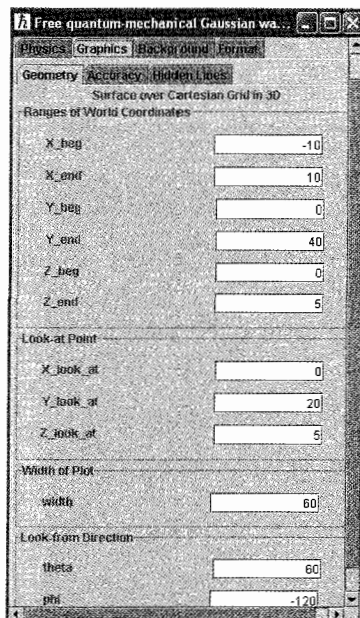


شکل ۱۱

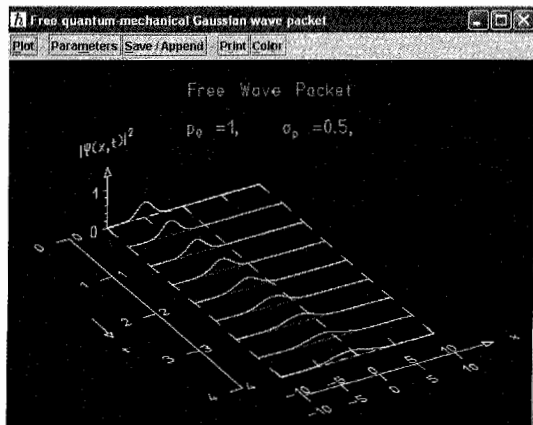
اما اگر در پنجره پارامتر گزینه‌های Graphics و Geometry را انتخاب کنید در این صورت پنجره‌ای باز می‌شود که تنظیمات مربوط به شکل از قبیل طول، عرض و سایر مشخصات آن را نشان می‌دهد. شما می‌توانید به دلخواه خود این پارامترها را تغییر دهید (شکل ۱۲).

هم چنین با انتخاب گزینه Background صفحه‌ای باز می‌شود که این صفحه به شما امکان می‌دهد تا تغییراتی در تصویر ظاهر شده ایجاد کنید. به عنوان مثال با انتخاب گزینه‌های Box of Dashed lines, Ticks and Numbers و Axes within Box as Dashed lines شکل به صورت زیر درمی‌آید (شکل ۱۳).

به این ترتیب شما می‌توانید در روی تصویر خطوطی به موازات محور  $x$  رسم کنید. با تعقیب این خطوط موازی می‌توانیم عملاً حرکت ذره (درواقع پیشروی نقطه بیشینه) را مشاهده کنیم. سایر کلیدهای دیگر روی پنجره پارامتر نیز به نوعی جهت ایجاد تغییر (برای مطالعه بهتر) در تصویر وجود دارند.



شکل ۱۲

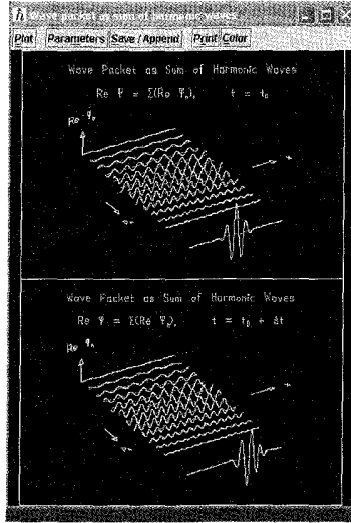


شکل ۱۳

در بالای پنجره مربوط به تصویر تابع موج کلیده‌های دیگری نیز وجود دارند. با استفاده از کلید color می‌توانید رنگ زمینه و یا رنگ نمودار را تغییر دهید و با کلید print در صورت داشتن پرینتر، می‌توانید تصویر مربوطه را چاپ کنید.

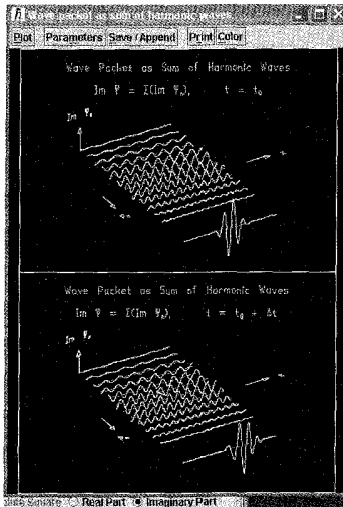
از مکانیک کوانتومی می‌دانیم که تابع موج مربوط به ذره یک بسته موج است که به صورت برهم‌نهشی از امواج ساده است. با استفاده از برنامه می‌توانیم این مطلب را به شکل تصویری مشاهده کنیم. برای

این کار در نوار ابزار روی گزینه Descriptor کلیک کنید. حال در پنجره ظاهر شده جمله wave packet را as sum of harmonic waves انتخاب کنید. (شکل ۱۴)



شکل ۱۴

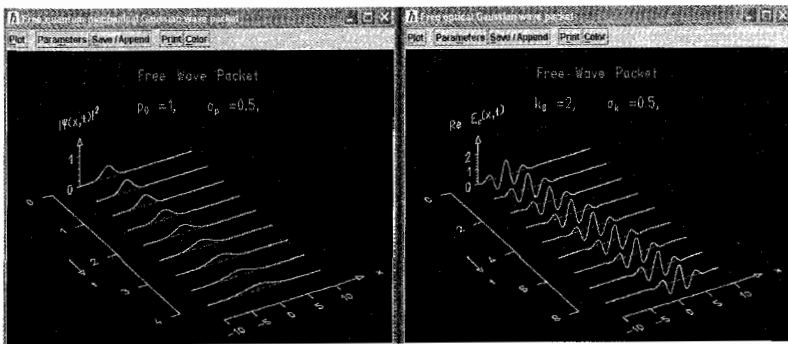
در این تصویر شما قسمت حقیقی را مشاهده می‌کنید. برای مشاهده قسمت موهومی بعد از انتخاب کلید parameters در پنجره ظاهر شده جمله Imaginary part را انتخاب کرده و روی کلید Plot کلیک کنید. (شکل ۱۵)



شکل ۱۵

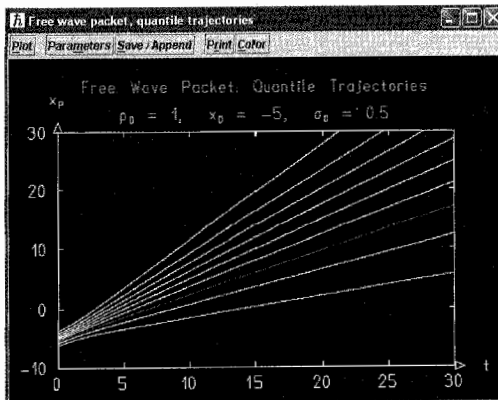


با کلیک کردن روی Descriptor پنجره‌ای ظاهر می‌شود که در این پنجره [شکل شماره (۴)] گزینه‌های دیگری علاوه بر دو مورد فوق وجود دارد. شما می‌توانید با انتخاب گزینه شماره (۲) در این پنجره شکل مربوط به یک بسته موج گاوسی مربوط به امواج اپتیکی را مشاهده کنید. از مکانیک کوانتومی می‌دانیم که امواج نوری بدون تضعیف در فضا منتشر می‌شوند. شما می‌توانید با مقایسه شکل مربوط به بسته موج نوری با شکل مربوط به بسته موج ذره آزاد بیشتر با این موضوع آشنا شوید. برای این منظور ابتدا روی نوار ابزار گزینه Descriptor را کلیک کنید و در پنجره ظاهر شده گزینه اول را انتخاب کنید. حال بار دیگر در نوار ابزار روی Descriptor کلیک کرده و این بار در پنجره ظاهر شده گزینه دوم را انتخاب کنید. به این ترتیب دو تصویر در صفحه کامپیوتر شما ظاهر می‌شود. (شکل ۱۶)



شکل ۱۶

در پنجره‌ای که بعد از کلیک کردن روی Descriptor ظاهر می‌شود، در سطر سوم این پنجره جمله‌ای به صورت Free wave packet و quantile trajectories وجود دارد. با انتخاب این جمله شما می‌توانید نمودار  $x_p = x_p(t)$  را مشاهده کنید که در آن  $p$  تابع احتمال و  $t$  پارامتر زمان هستند. (شکل ۱۷)

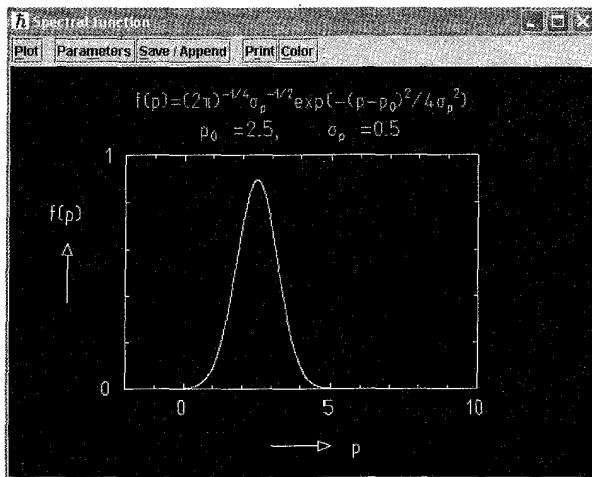


شکل ۱۷

و در نهایت اگر سطر چهارم را انتخاب کنید در این صورت می‌توانید شکل تابع موج در فضای تکانه را مشاهده کنید:

$$f(p) = \frac{1}{(2\pi)^{1/4} \sqrt{\sigma_p}} \exp \left[ -\frac{(p - p_0)^2}{4\sigma_p^2} \right]$$

که در آن  $p_0$  تکانه متوسط و  $\sigma_p$  پهنای تکانه است. (شکل ۱۸)



شکل ۱۸

## ۲) ذره آزاد در حالت سه‌بعدی

در بخش قبل ذره آزاد را در حالت یک‌بعدی مورد بررسی قرار دادیم. در این بخش می‌خواهیم این مطالب را به حالت سه‌بعدی تعمیم دهیم. برای این کار در نوار ابزار روی گزینه Descriptor file کلیک کرده و در پنجره ظاهرشده جمله 3D-Free-Particle.des را انتخاب می‌کنیم. حال با کلیک کردن روی کلید open در بالای نوار ابزار این جمله ظاهر می‌شود. (شکل ۱۹)

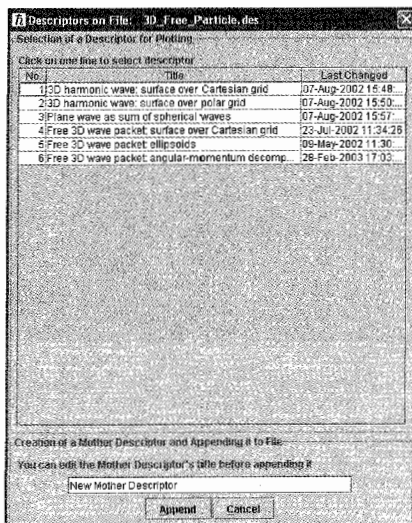


شکل ۱۹

در این مرحله روی گزینه Descriptor در نوار ابزار کلیک می‌کنیم. به این ترتیب پنجره‌ای شامل ۶ گزینه ظاهر می‌شود. (شکل ۲۰)

در مکانیک کوانتومی می‌دانیم که تابع موج ذره آزاد در حالت سه‌بعدی عبارت است از:

$$\psi(r, t) = \frac{1}{(\sqrt[3]{2\pi\hbar})} e^{-i(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})/\hbar}$$



شکل ۲۰

و چون  $E = \hbar\omega$  و  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$  است، لذا داریم:

$$\psi(r, t) = \frac{1}{(\sqrt[3]{2\pi\hbar})} e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}$$

با صرف نظر کردن از وابستگی زمانی تابع موجی خواهیم داشت که جواب معادله شرودینگر مستقل از زمان است:

$$\psi(r) = \frac{1}{(\sqrt[3]{2\pi\hbar})} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

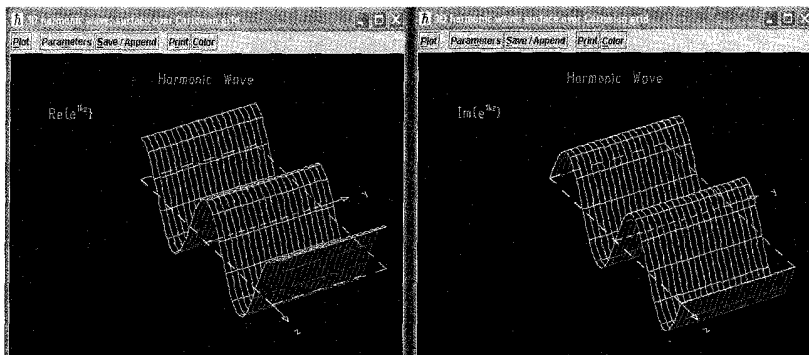
اگر راستای انتشار و یا بردار موج  $\mathbf{k}$  در امتداد محور  $z$  باشد، در این صورت خواهیم داشت:

$$\psi(r) = \frac{1}{(\sqrt[3]{2\pi\hbar})} e^{ikz}$$

می‌توانیم بخش‌های حقیقی و موهومی این تابع را جدا کنیم:

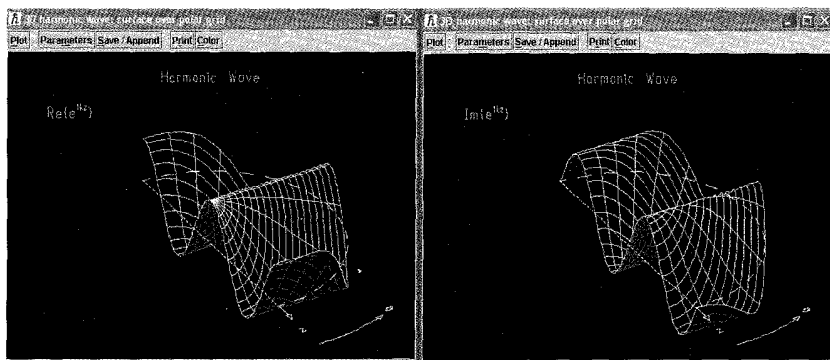
$$\text{Re}[\psi(r)] = \frac{1}{(\sqrt[3]{2\pi\hbar})} \cos kz \quad , \quad \text{Im}[\psi(r)] = \frac{1}{(\sqrt[3]{2\pi\hbar})} \sin kz$$

با انتخاب سطر اول شکل (۲۰)، تصویر مربوط به قسمت حقیقی را مشاهده می‌کنیم. می‌توانیم با تکرار همین مراحل و انتخاب گزینه پارامتر در تصویر حاصل و کلیک کردن روی کلمه  $Im$  و کلید  $open$  در پنجره در پارامترها شاهد بخش موهومی نیز باشیم. حال با داشتن دو تصویر می‌توانیم آن‌ها را با هم مقایسه کنیم. (شکل ۲۱)

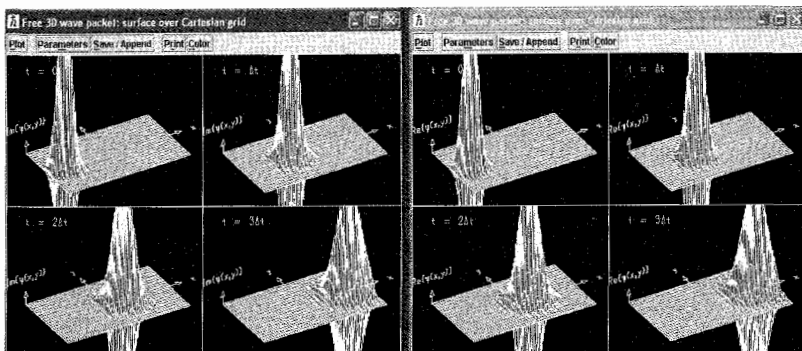


شکل ۲۱

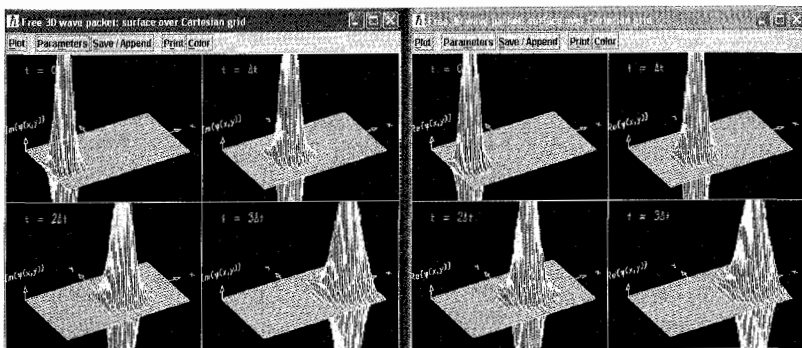
با انتخاب سطرهای دیگر می‌توانیم شکل تابع موج در سیستم مختصات قطبی، قطبی کروی و استوانه‌ای و نیز شکل تابع موج برحسب هارمونیک‌های کروی را مشاهده کنیم. در شکل (۲۲) تصویر مربوط به قسمت حقیقی و موهومی تابع موج در مختصات کروی با هم مقایسه شده است. در شکل (۲۳) تصویر تابع موج در مختصات کارتزین نشان داده شده است. از مقایسه تمام این اشکال می‌توان به این واقعیت پی برد که مفهوم فیزیکی مستقل از شکل نمایش تابع است. چون هر سه شکل بیانگر یک مفهوم فیزیکی هستند. در نهایت شکل (۲۵) مجذور تابع موج در سیستم مختصات دکارتی است.



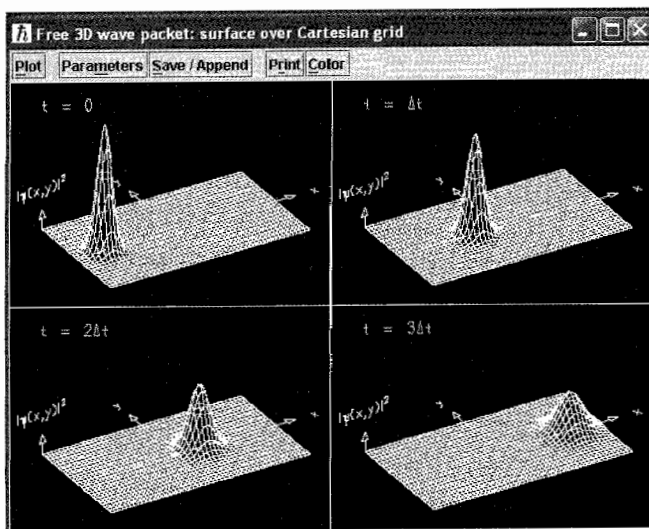
شکل ۲۲



شکل ۲۳



شکل ۲۴



شکل ۲۵

## ۳) حالت‌های مقید تک بعدی

اگر ذره آزاد نبوده و تحت تأثیر پتانسیلی قرار داشته باشد در این صورت حرکت چنین ذره‌ای توسط تابع موجی بیان می‌شود که این تابع جواب معادله شرودینگر زیر است:

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

با تعریف عملگر هامیلتونی به صورت

$$H = E + T$$

معادله شرودینگر به شکل زیر درمی‌آید:

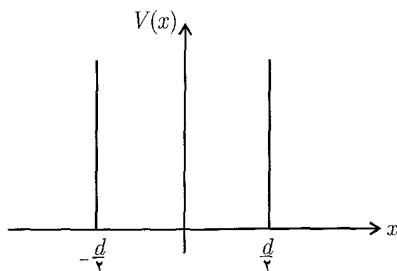
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H\psi(x, t)$$

جواب‌های این معادله را می‌توان به شکل زیر بیان کرد:

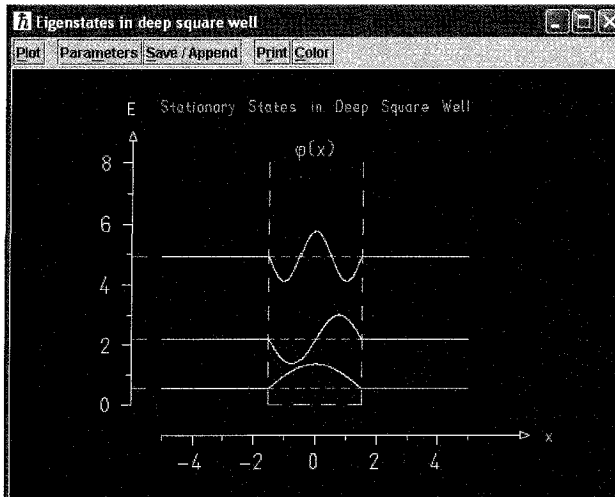
$$\psi_E(x, t) = e^{-iEt/\hbar} \phi_E(x)$$

در رابطه فوق  $\phi_E(x)$  جواب‌های معادله ویژه مقدراری  $H\phi_E(x) = E\phi_E(x)$  است. برحسب این که پتانسیل اعمالی چگونه باشد، شکل تابع موج نیز متفاوت خواهد شد. اگر پتانسیل به صورت یک چاه مربعی با دیواره‌های بینهایت باشد، یعنی:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & -\frac{d}{2} \leq x \leq \frac{d}{2} \\ \infty & \text{جاهای دیگر} \end{cases}$$

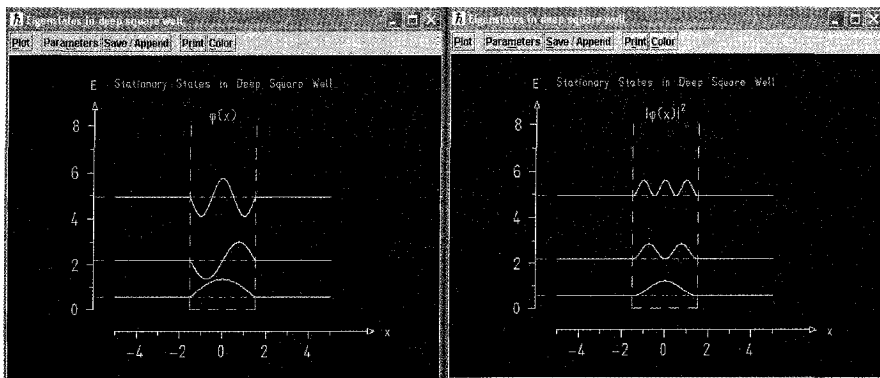


به این ترتیب جواب‌های معادله ویژه مقدراری  $H\phi_E(x) = E\phi_E(x)$  به صورت ترکیبی از توابع  $\sin$  و  $\cos$  خواهد بود. برای مشاهده تصویر مربوط به این جواب‌ها ابتدا در نوار ابزار اصلی روی Descriptor file کلیک می‌کنیم. در پنجره ظاهر شده جمله 1D-Bound-states.des را انتخاب می‌کنیم. حال اگر در نوار ابزار اصلی روی Descriptor کلیک کنیم، پنجره‌ای باز می‌شود که در سطر اول آن عنوان Eigenstates in deep square well نوشته شده است. با انتخاب این گزینه شکل مربوط به ویژه توابع ظاهر می‌شود. (شکل ۲۶)



شکل ۲۶

همان‌گونه که در شکل دیده می‌شود حالت پایه ( $n = 0$ ) یک تابع  $\cos$  است، در صورتی‌که اولین حالت برانگیخته می‌تواند تابع  $\sin$  باشد. برای مشاهده مجذور تابع موج که بیانگر احتمال وجود ذره در هر نقطه دلخواه از فضا است و مقایسه آن با خود تابع موج بار دیگر مراحل قبلی را انجام می‌دهیم. حال در تصویر ظاهر شده روی دکمه parameters کلیک کرده و بعد از ظاهر شدن پنجره پارامترگزین  $|\phi(x)|^2$  را انتخاب نموده و روی دکمه Plot کلیک می‌کنیم. (شکل ۲۷)

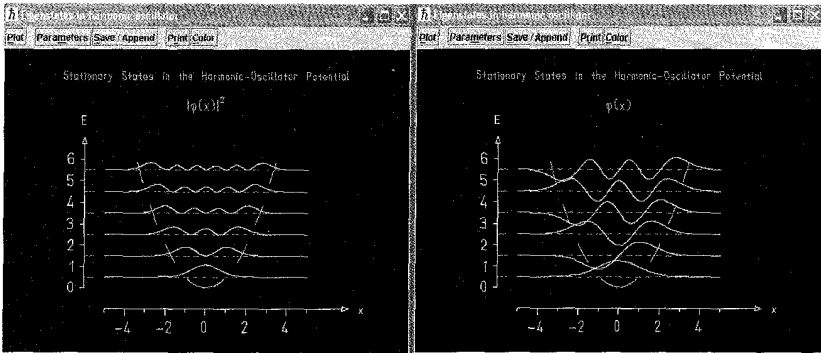


شکل ۲۷

اما اگر پتانسیل به صورت پتانسیل نوسانگر هماهنگ ساده باشد

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

در این صورت جواب‌ها به صورت چند جمله‌ای‌های هرمیت خواهند بود. برای مشاهده جواب‌ها در این حالت، بعد از کلیک کردن روی گزینه Descriptor جمله دوم را از پنجره ظاهر شده انتخاب می‌کنیم. در این حالت نیز می‌توانیم خود تابع موج را با مجذور آن مقایسه کنیم. (شکل ۲۸)

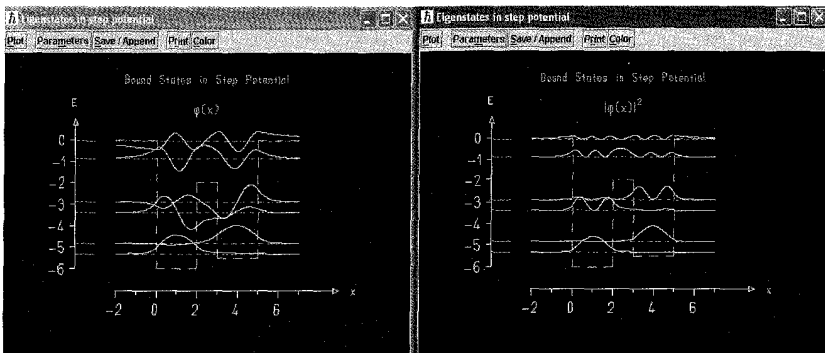


شکل ۲۸

پتانسیل می‌تواند به صورت یک تابع پله‌ای باشد. یعنی:

$$V(x) = \begin{cases} V_1 \geq 0 & x < x_1 = 0 \\ V_2 & x_1 \leq x \leq x_2 \\ \vdots & \\ V_{N-1} & x_{N-2} \leq x < x_{N-1} \\ V_N = 0 & x_{N-1} \leq x \end{cases}$$

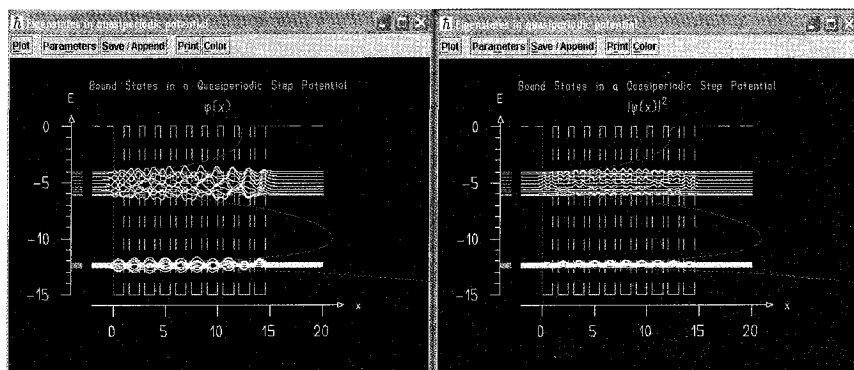
اگر در پنجره‌ای که بعد از انتخاب گزینه Descriptor ظاهر می‌شود، سطر سوم را انتخاب کنیم، می‌توانیم شکل ویژه توابع مربوط به این پتانسیل را مشاهده کنیم. (شکل ۲۹)



شکل ۲۹

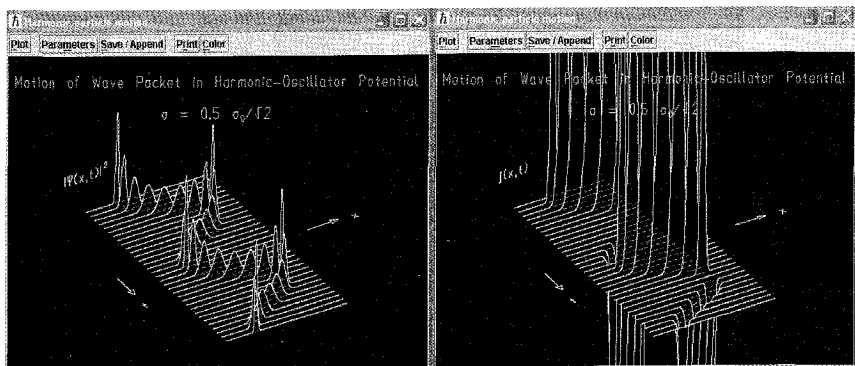


حالت دیگری از پتانسیل که می‌تواند مورد مطالعه قرار داد، پتانسیل شبه‌تناوبی است. در این حالت ویژه توابع به صورت شکل (۳۰) خواهند بود. لازم به ذکر است که توابع ریاضی مربوط به هر کدام از این اشکال را به راحتی می‌توان با حل معادله شرودینگر محاسبه نمود.



شکل ۳۰

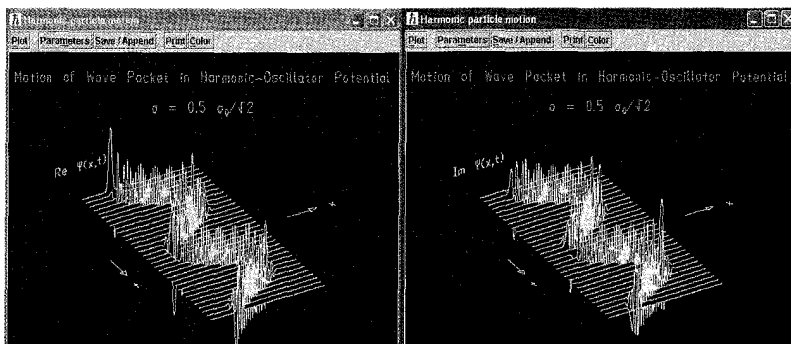
در کلیه مسائلی که تاکنون در این بخش مورد مطالعه قرار گرفت از وابستگی زمانی توابع موج صرف نظر کردیم و آنچه نشان دادیم شکل ویژه توابع مستقل از زمان بود. در این قسمت می‌خواهیم وابستگی زمانی را نیز اضافه کنیم. ابتدا مورد نوسانگر هماهنگ ساده را مورد توجه قرار می‌دهیم. در این حالت تابع پتانسیل به شکل تابع نمایی است.



شکل ۳۱

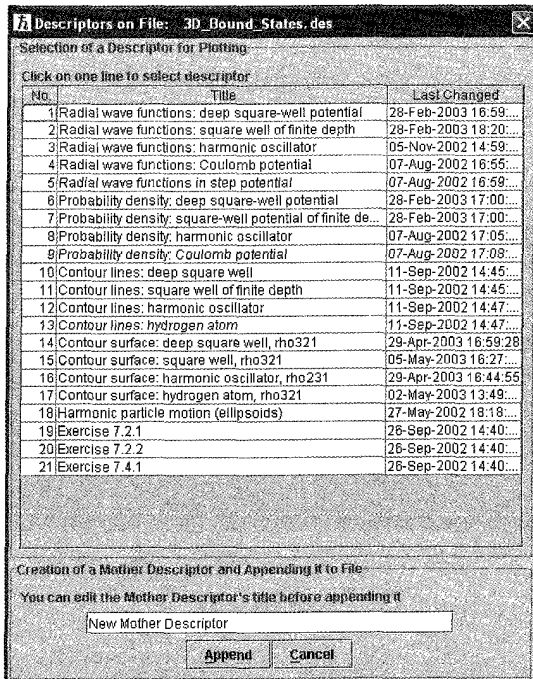
برای مشاهده شکل بسته موج نوسانگر هماهنگ ساده بعد از انتخاب گزینه Descriptor در پنجره ظاهر شده جمله Harmonic particle motion را انتخاب می‌کنیم. در اینجا بهتر است شکل مربوط به مجذور تابع موج را با شکل چگالی احتمال (شکل ۳۱) و شکل مربوط به قسمت حقیقی را با شکل

مربوط به قسمت موهومی (شکل ۳۲) مقایسه کنیم.



شکل ۳۲

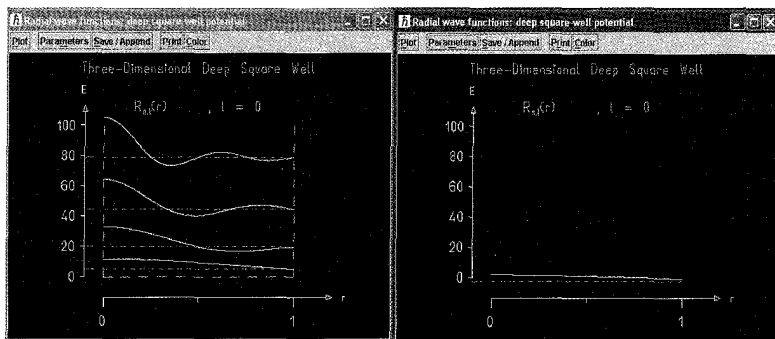
اگر در مورد پتانسیل مربعی با دیواره‌های بینهایت نیز، وابستگی زمانی را لحاظ کنیم در این صورت شکل تابع موج به صورت زیر خواهد بود (شکل ۳۳). با مطالعه این تصویر به راحتی می‌توان تصویری از حرکت ذره را تصور نمود.



شکل ۳۳

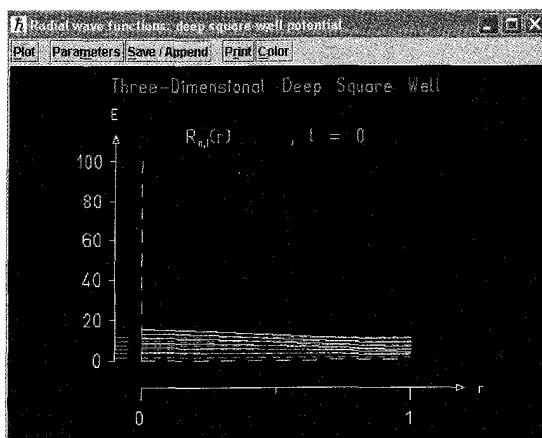
## ۴) حالت‌های مقید سه‌بعدی

مشابه کاری که در مورد ذره آزاد انجام دادیم، در اینجا نیز بحث حالت‌های مقید را به حالت سه‌بعدی تعمیم می‌دهیم. برای این کار در پنجره‌ای که بعد از کلیک کردن بر روی Descriptor file باز می‌شود جمله 3D-Bound-states.des را انتخاب می‌کنیم. حال اگر روی گزینه Descriptor کلیک کنیم، پنجره زیر ظاهر می‌شود. (شکل ۳۴)



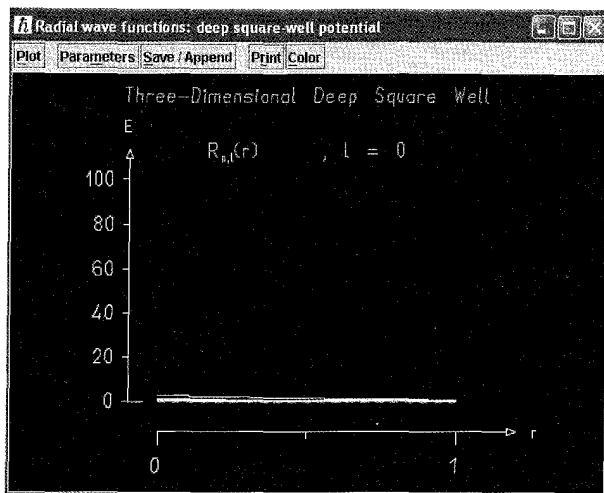
شکل ۳۴

جمله اول را انتخاب می‌کنیم. با این انتخاب شکل مربوط به قسمت شعاعی تابع موج یک ذره که تحت یک پتانسیل مربعی عمیق قرار دارد، نمایش داده می‌شود. در این حالت امکان نفوذ ذره به خارج از چاه وجود ندارد، اما اگر دیواره‌ها بینهایت نبوده و ارتفاع آن‌ها معین باشد، در این صورت ذره امکان تونل‌زنی و نفوذ به خارج از چاه را خواهد داشت. این دو مورد را می‌توانیم به صورت تصویری با یکدیگر مقایسه کنیم (شکل ۳۴). حال اگر پتانسیل علاوه بر داشتن دیواره‌های بینهایت، یک پتانسیل هماهنگ باشد، در این صورت شکل تابع موج، یک موج نوسانی که فقط محدود به داخل یک چاه است، خواهد بود. (شکل ۳۵)



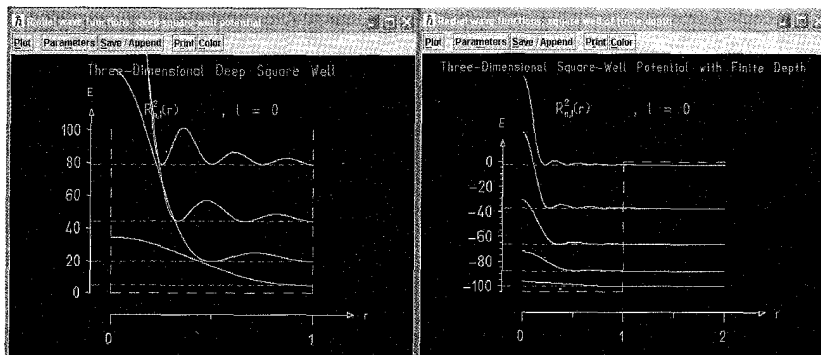
شکل ۳۵

و در نهایت اگر پتانسیل علاوه بر بینهایت بودن شکل کولونی داشته باشد، در این صورت تصویر زیر حاصل می‌شود. (شکل ۳۶)



شکل ۳۶

در مطالب قبلی گفتیم که مجذور تابع موج بیانگر تابع احتمال وجود ذره در هر نقطه از فضا است. حال می‌توانیم به صورت تصویری تابع احتمال وجود ذره در یک چاه پتانسیل با عمق متناهی را با تابع احتمال وجود ذره در یک چاه پتانسیل با عمق معین مقایسه کنیم. (شکل ۳۷)

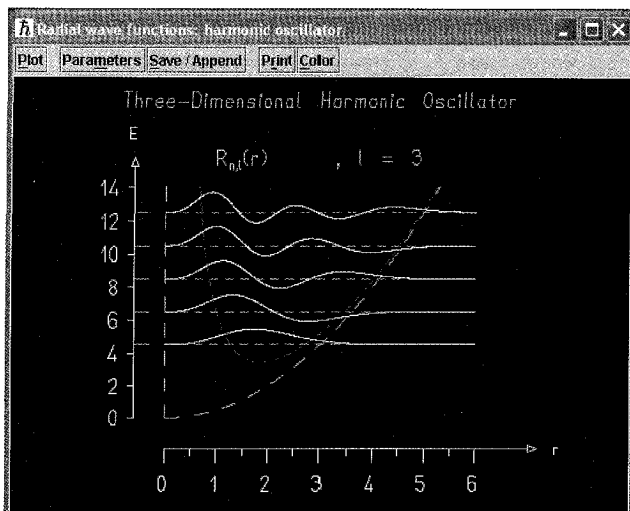


شکل ۳۷

همین‌کار را در مورد پتانسیل کولونی نیز می‌توانیم انجام دهیم.

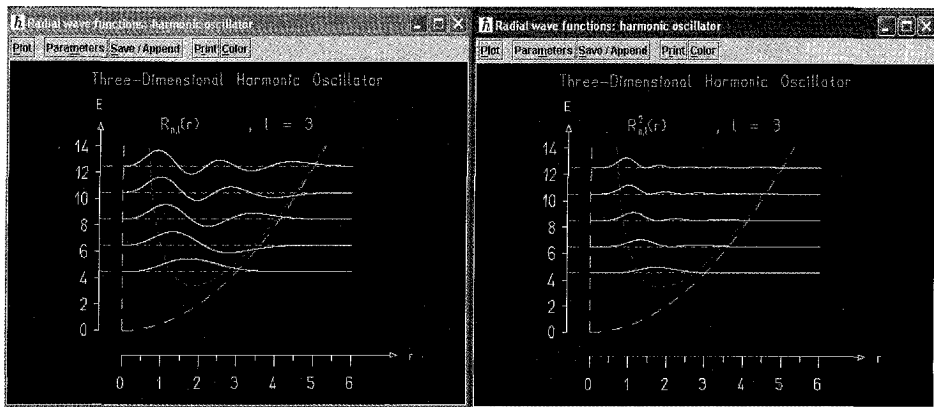
اگر در شکل (۳۳) سطر سوم را انتخاب کنیم، در این صورت می‌توانیم مورد پتانسیل هماهنگ ساده را

مورد مطالعه قرار دهیم. در این حالت تابع موج به شکل زیر خواهد بود. (شکل ۳۹)



شکل ۳۹

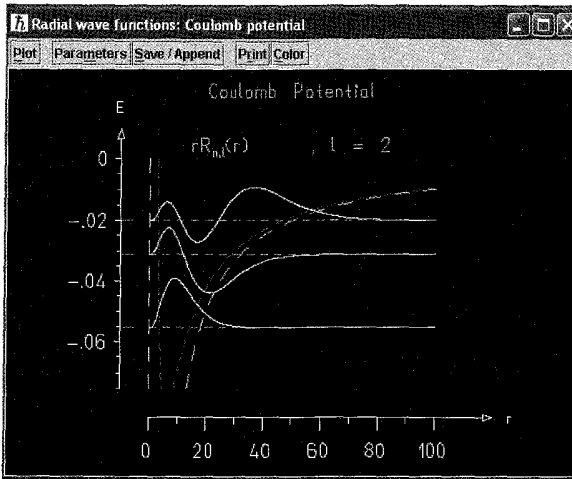
اگر تابع موج را به توان دو برسانیم، می‌توانیم شکل تابع احتمال را به دست آوریم. این شکل با استفاده از شکل تابع موج قابل پیش‌بینی است. شما نیز پیش‌بینی خود را با آنچه که در شکل زیر مشاهده می‌کنید، مقایسه نمایید. (شکل ۴۰)



شکل ۴۰

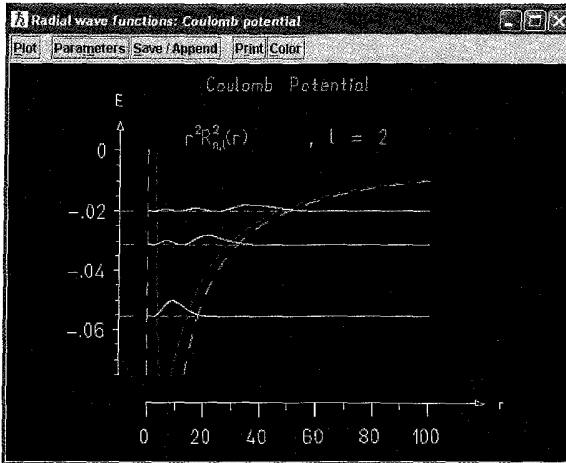
از مکانیک کوانتومی می‌دانیم که پتانسیلی که الکترون در اتم احساس می‌کند، از نوع پتانسیل کولونی است. در شکل زیر قسمت شعاعی تابع موج ذره‌ای که تحت تأثیر یک پتانسیل کولونی قرار دارد، نمایش

داده شده است. (شکل ۴۱)



شکل ۴۱

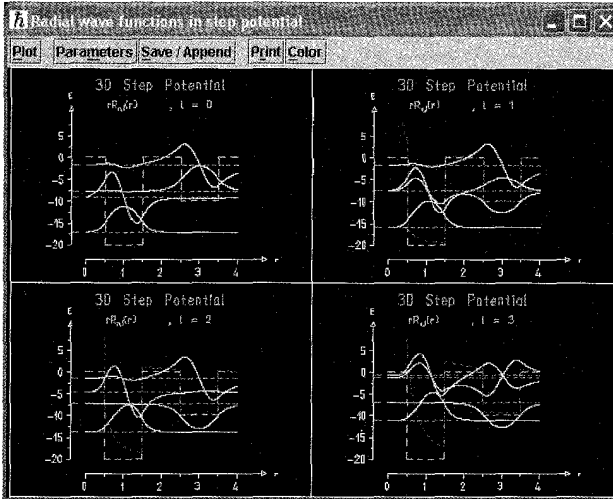
همان‌گونه که در شکل دیده می‌شود، شکل پتانسیل با خطوط بریده نمایش داده شده است. در ترازهای پایین وابستگی الکترون به هسته بیشتر است، اما در ترازهای بالاتر الکترون وابستگی کمتری به هسته دارد. این مطلب با مشاهده مجذور تابع موج بیشتر آشکار می‌شود. (شکل ۴۲)



شکل ۴۲

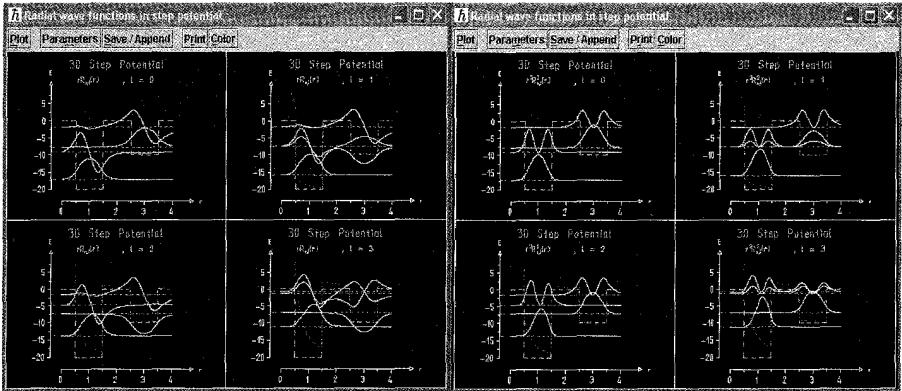
همان‌گونه که در شکل دیده می‌شود، در ترازهای بالاتر احتمال کمتری وجود دارد که الکترون نزدیک هسته باشد. اما اگر پتانسیلی که ذره تحت تأثیر آن قرار دارد، از نوع پتانسیل پله‌ای باشد، در این صورت قسمت شعاعی

تابع موج در حالت سه بعدی به ازای مقادیر مختلف  $l$  به شکل زیر خواهد بود. (شکل ۴۳)



شکل ۴۳

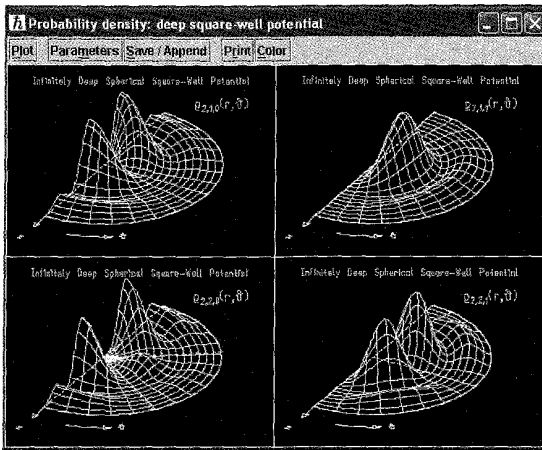
اگر مجذور قسمت شعاعی تابع موج را با خود قسمت شعاعی تابع موج مقایسه کنیم، می توانیم به نوعی آن تصویری را که از یک پتانسیل پله ای داریم، مورد ارزیابی قرار دهیم. (شکل ۴۴)



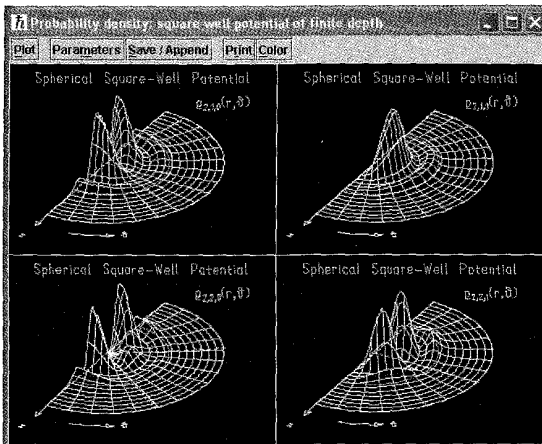
شکل ۴۴

یعنی ابتدا با استفاده از شکل تابع موج، تصویر مجذور تابع موج را خودمان حدس می زنیم و سپس آنچه را که در این برنامه مشاهده می کنیم با حدس خود مقایسه می کنیم. پنجره ظاهر شده در تصویر شماره (۳۳)، این امکان را به ما می دهد که شکل چگالی احتمال را نیز در هر کدام از موارد فوق مشاهده کنیم. بهتر است ابتدا این تابع را خودمان محاسبه کنیم و شکل آن را حدس بزنیم،

سپس به این برنامه مراجعه کرده و درست یا غلط بودن حدس خود را مورد ارزیابی قرار دهیم. شکل چگالی احتمال در مورد چاه پتانسیل مربعی بینهایت در شکل (۴۵) و در مورد چاه پتانسیل مربعی با عمق معین در شکل (۴۶) و در مورد پتانسیل‌های هارمونیک و کولونی نیز به ترتیب در شکل‌های (۴۷) و (۴۸) رسم شده است. در شکل (۴۹) چگالی احتمال در مورد اتم هیدروژن بیان شده است. در کتاب‌های مکانیک کوانتومی در مورد اتم هیدروژن تابع موج شعاعی به صورت تحلیلی محاسبه می‌شود. لذا خواننده می‌تواند نتیجه محاسبات خود و نیز تعبیری را که در ذهن خود از این توابع دارد با آنچه در این برنامه می‌بینید، مقایسه کند.

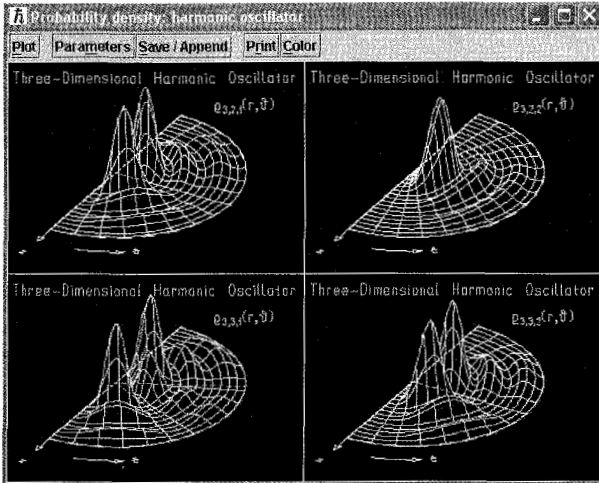


شکل ۴۵

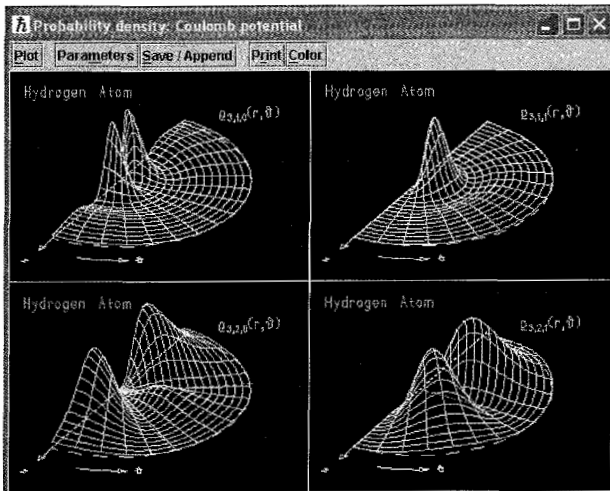


شکل ۴۶





شکل ۴۷

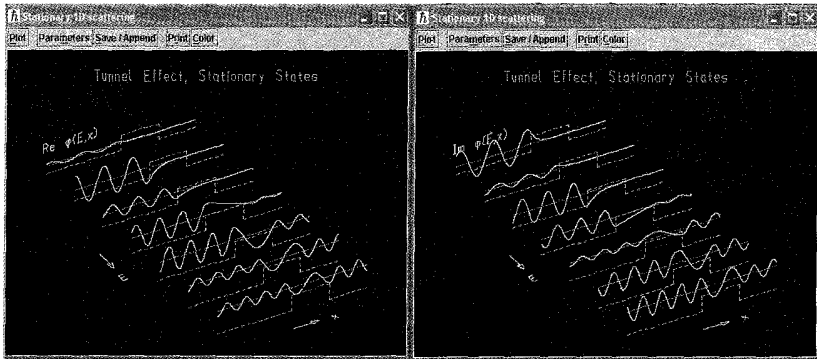


شکل ۴۹

### ۵) پراکندگی در حالت تک بعدی

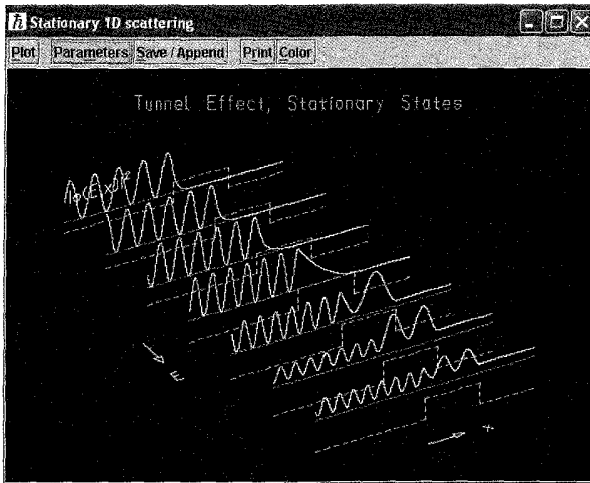
در این بخش پراکندگی ذرات از پتانسیل‌های مختلف را به صورت تصویری مورد مطالعه قرار می‌دهیم و در بخش بعد این مطالب را به حالت سه بعدی تعمیم می‌دهیم. بنابراین در روی نوار ابزار ابتدا روی Descriptor file کلیک کرده و سپس در پنجره ظاهر شده، عنوان 1D-scating.des را انتخاب می‌کنیم. حال اگر در

نوار ابزار روی گزینه Descriptor کلیک کنیم، پنجره‌ای باز می‌شود که اولین مورد آن پراکندگی یک‌بعدی را در حالت ایستا مورد بررسی قرار می‌دهد. روی این جمله کلیک می‌کنیم تا شکل مربوط را مشاهده کنیم. در این حالت ذره‌ای که دارای تابع موج مستقل از زمان است، با انرژی‌های مختلف به طرف یک سد پتانسیل حرکت می‌کند و با برخورد به این سد پتانسیل عمل پراکندگی اتفاق می‌افتد. از نظر کلاسیکی هرگاه انرژی ذره فرودی از ارتفاع سد کم‌تر باشد، عملاً در طرف دیگر سد نباید هیچ ذره‌ای وجود داشته باشد، اما در مکانیک کوانتومی تعدادی هرچند بسیار ضعیفی عبور در طرف دیگر سد خواهیم داشت. این مطالب به‌وضوح می‌تواند در اشکال زیر مشاهده کرد. ما در اینجا قسمت حقیقی و موهومی را همراه با یکدیگر در یک تصویر نشان داده‌ایم.



شکل ۵۰

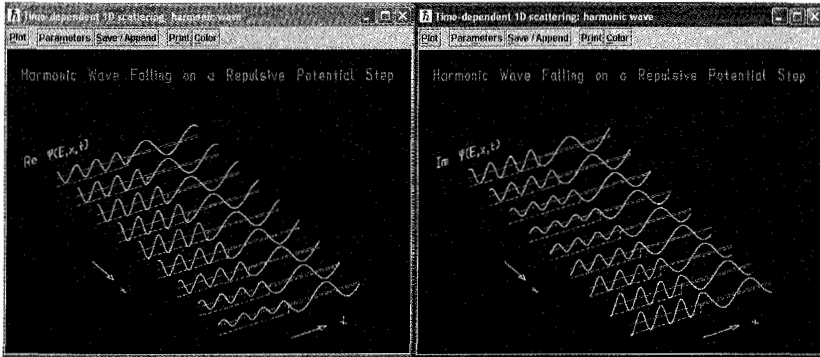
اما شکل مربوط به مجذور تابع موج را به‌طور جداگانه نشان می‌دهیم. (شکل ۵۱)



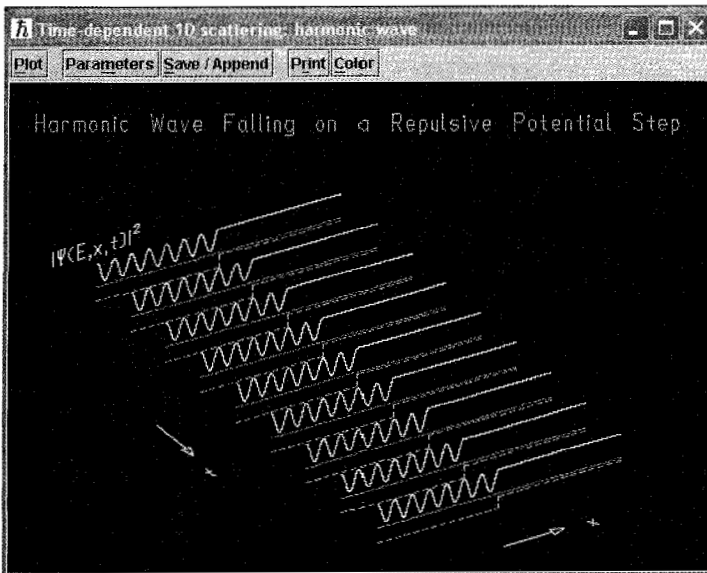
شکل ۵۱

همان‌گونه که در شکل (۵۱) دیده می‌شود، در حالت  $E < V(x)$  عملاً احتمال وجود ذره در طرف دیگر سد ناچیز است.

در سطر دوم پنجره Descriptor می‌توانیم پراکندگی یک‌بعدی وابسته به زمان را در مورد تابع موج هماهنگ مشاهده کنیم. در این حالت یک موج هارمونیک به سد پتانسیل برخورد نموده و عمل پراکندگی صورت می‌گیرد. در این حالت نیز ابتدا قسمت‌های حقیقی و موهومی را با هم (شکل (۵۲)) و مجذور تابع موج (شکل (۵۳)) را جداگانه نشان می‌دهیم.



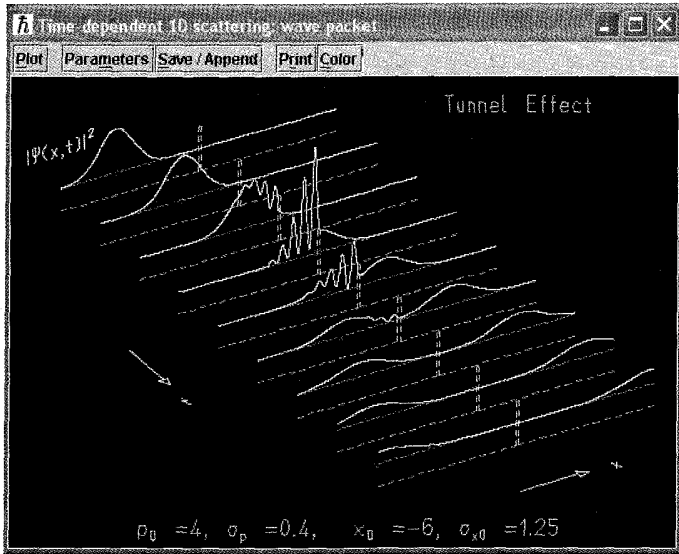
شکل ۵۲



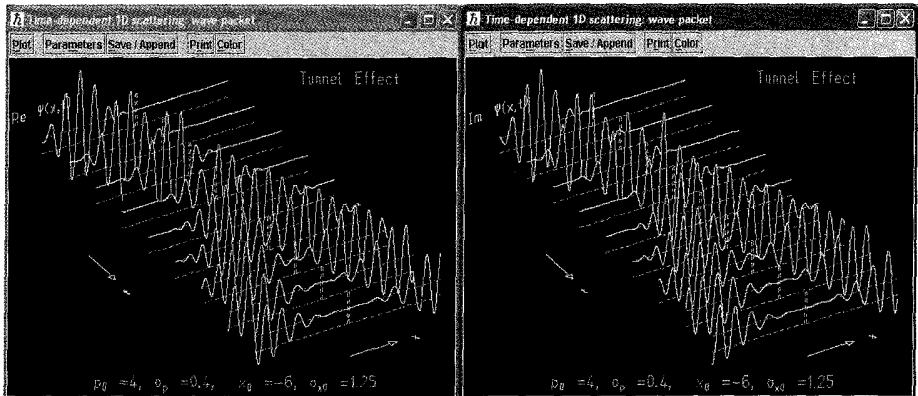
شکل ۵۳

در سطر سوم پنجره Descriptor پراکندگی وابسته به زمان تک‌بعدی یک بسته موج مورد ارزیابی قرار

می‌گیرد. همان‌گونه که در شکل (۵۴) نشان داده شده است، ذره با گذشت زمان به طرف دیواره حرکت می‌کند و با برخورد به آن قسمتی از موج به بیرون تونل زده و خارج می‌شود، اما قسمت دیگری از آن از دیواره انعکاس پیدا می‌کند. می‌توانیم اشکال مربوط به قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع موج را نیز در شکل (۵۵) مشاهده کنیم.

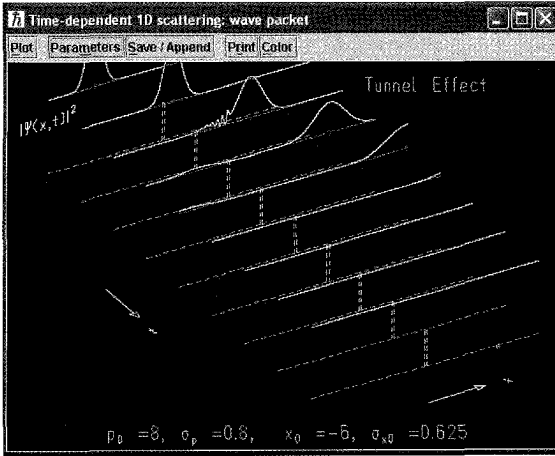


شکل ۵۴



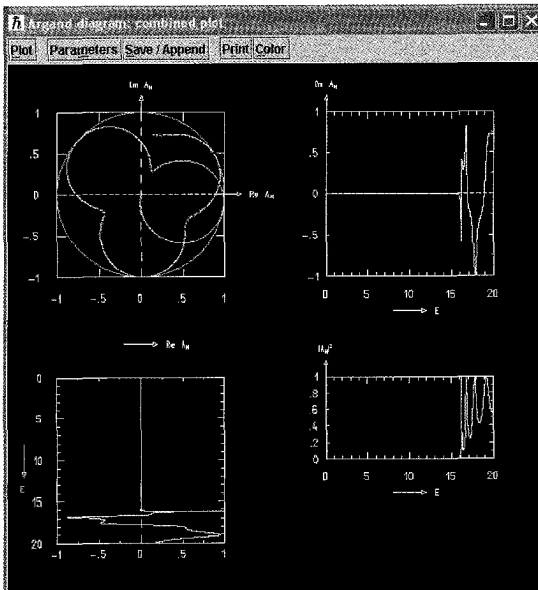
شکل ۵۵

در اشکال فوق ما تابع موج ذره فرودی را به صورت تابعی از انرژی بیان کردیم. این برنامه به ما این امکان را می‌دهد که تابع موج ذره فرودی را به صورت تابعی از تکانه نیز بیان کنیم. در این صورت شکل مربوط به مجذور تابع موج به صورت شکل (۵۶) خواهد بود.



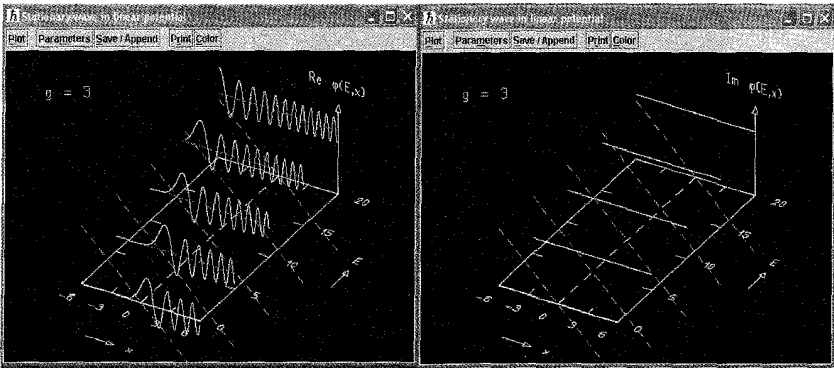
شکل ۵۶

از مکانیک کوانتومی می‌دانیم که در حالت گسسته می‌توانیم هر تابع دلخواه را برحسب ویژه توابع یک عملگر هرمیتی بسط دهیم. در اینجا ضرایب بسط دارای مفهوم فیزیکی است و مجذور این ضرایب دارای مفهوم احتمال است. در این برنامه می‌توانیم به صورت تصویری این مطالب را نیز مطالعه کنیم. به عنوان مثال اگر در پنجره Descriptor روی سطر چهارم کلیک کنیم، در این صورت شکل زیر حاصل خواهد شد. (شکل ۵۷)

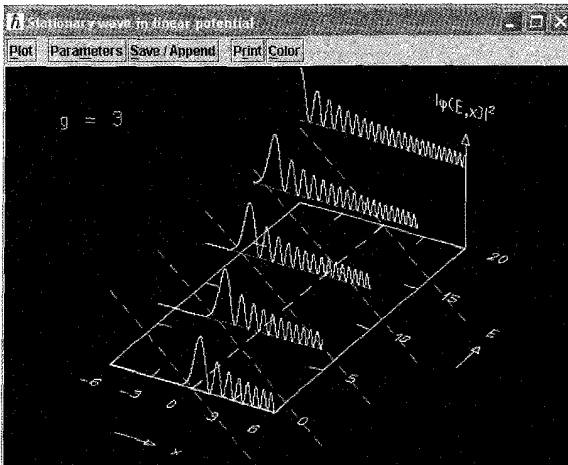


شکل ۵۷

ضرایب بسط اعداد مختلط است. در اینجا شکل مربوط به قسمت‌های حقیقی موهومی و نیز مجذور آن با هم نشان داده شده است. با انتخاب سطرهای چهارم تا هشتم عنوان موجود در پنجره Descriptor می‌توانید شکل مربوط به ضرایب بسط را در حالت‌های مختلف مشاهده کرده و مورد ارزیابی قرار دهید. در سطر نهم این پنجره عنوان مربوط به تابع موج ایستای یک ذره که از یک پتانسیل خطی پراکنده می‌شود، درج شده است. در اینجا ما ابتدا شکل مربوط به قسمت‌های حقیقی و موهومی را با هم (شکل ۵۸) و شکل مربوط به مجذور تابع موج را (شکل ۵۹) جداگانه نشان می‌دهیم.



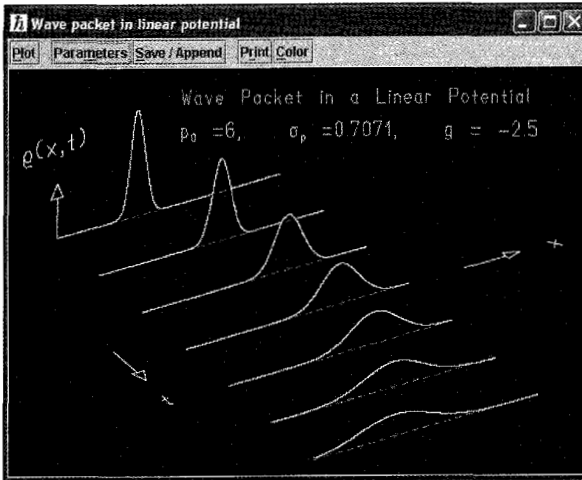
شکل ۵۸



شکل ۵۹

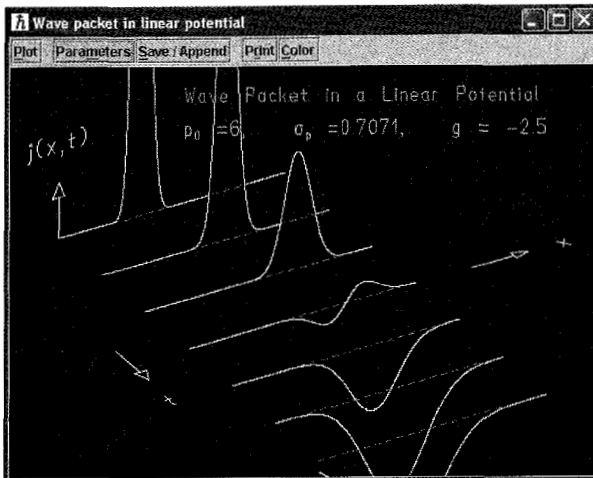
اگر تمایل داشته باشید می‌توانیم پراکندگی یک بسته موج منتسب به یک ذره را در یک پتانسیل خطی مورد مطالعه قرار دهیم، سطر دهم پنجره مربوط به Descriptor را انتخاب می‌کنیم. با این انتخاب

می‌توانیم این نوع پراکندگی را مشاهده کنیم. (شکل ۶۰)



شکل ۶۰

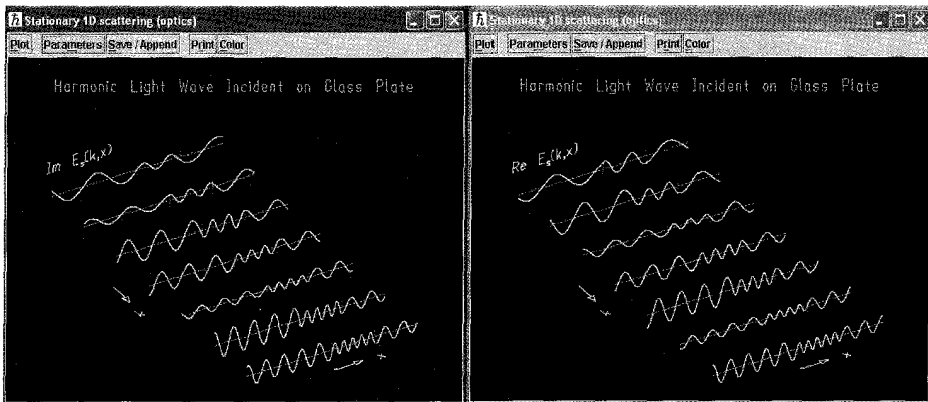
اگر در شکل شماره (۶۰) روی پارامتر کلیک کنید و سپس در پنجره ظاهر شده جمله Probability Current Density را انتخاب کنید، در این صورت تصویری ظاهر می‌شود که بسیار گویاست و شما عملاً می‌توانید تصویری از پراکندگی در ذهن خود داشته باشید. (شکل ۶۱)



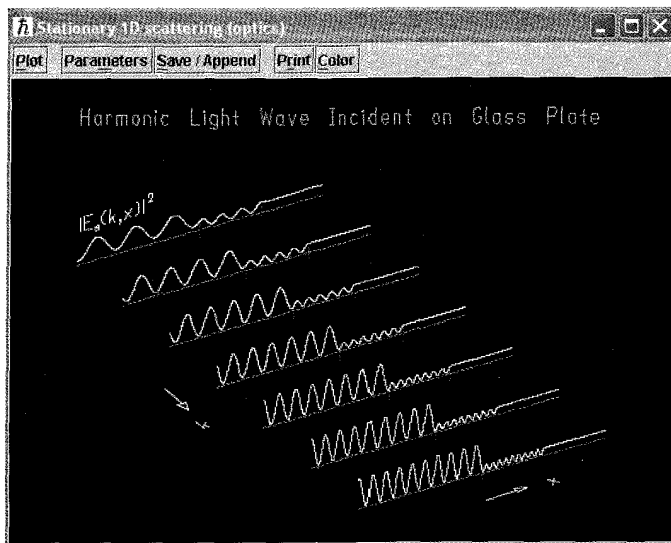
شکل ۶۱

نکته جالبی که شما می‌توانید در این پنجره مشاهده کنید، پراکندگی مربوط به امواج نوری است. در مورد پراکندگی این امواج اطلاعاتی را از اپتیک داریم. حال می‌توانیم با مشاهده تصویر موجود در این قسمت،

دیدگاه مکانیک کوانتومی را در مورد پراکندگی امواج نوری مورد مطالعه قرار دهیم. برای این منظور در پنجره Descriptor ابتدا سطر دوازدهم را انتخاب می‌کنیم. شکلی که ظاهر می‌شود، بیانگر پراکندگی امواج الکترومغناطیسی مستقل از زمان است. بهتر است در این قسمت تصاویر مربوط به قسمت موهومی، قسمت حقیقی و مجذور تابع موج را ببینیم. (شکل ۶۲ و ۶۳)



شکل ۶۲

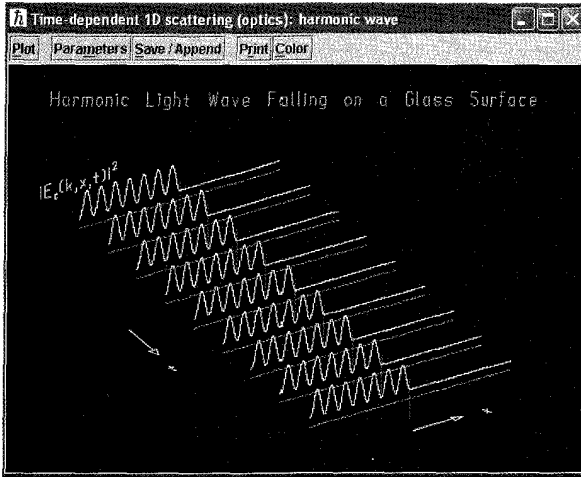


شکل ۶۳

اما اگر موج نوری ما وابستگی زمانی نیز داشته باشد، در این صورت اگر این موج را به صورت امواج

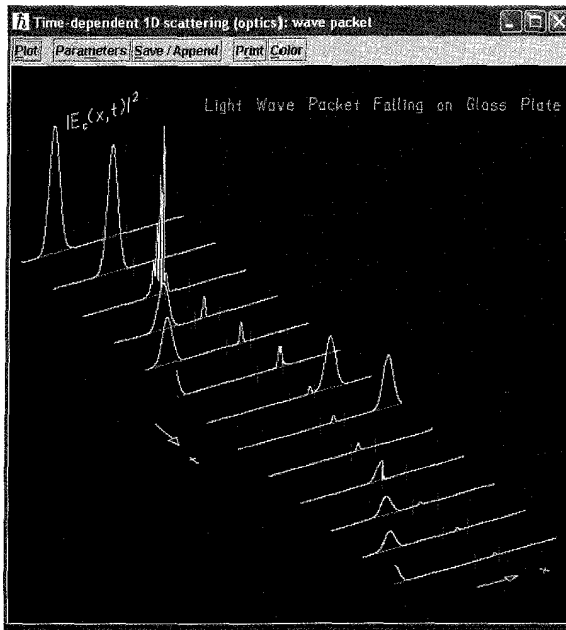


هماهنگ فرض کنیم پراکندگی آن از یک سطح شیشه‌ای مطابق شکل زیر خواهد بود. (شکل ۶۴)



شکل ۶۴

اما اگر موج را به صورت یک بسته موج نوری فرض کنیم، در این صورت پراکندگی آن از یک سطح شیشه‌ای متفاوت خواهد بود. (شکل ۶۵)

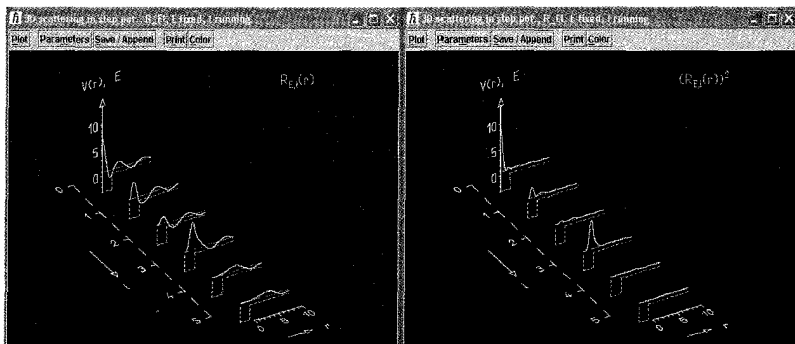


شکل ۶۵

## ۶) پراکندگی در حالت سه بعدی

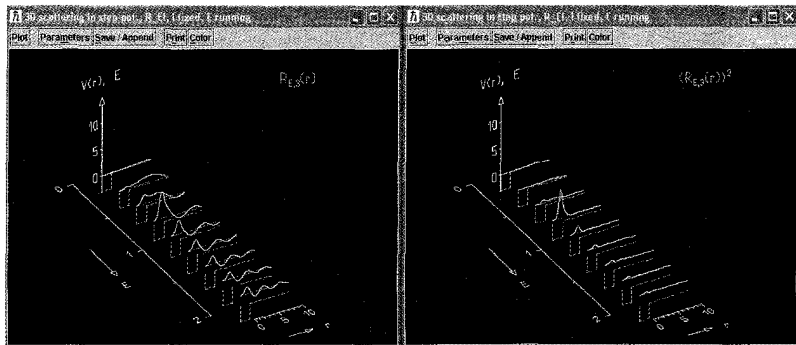
در این قسمت قسمتی از مطالب بخش قبل را به حالت سه بعدی تعمیم می‌دهیم. برای این منظور در نوار ابزار اصلی روی گزینه Descriptor کلیک می‌کنیم و در پنجره ظاهر شده، جمله 3D-scattering-des را انتخاب می‌کنیم. حال اگر گزینه Descriptor را در نوار ابزار اصلی کلیک کنیم، در این صورت پنجره‌ای باز می‌شود که شامل تعدادی از موضوعات مکانیک کوانتومی در مورد پراکندگی است.

در مکانیک کوانتومی تابع موج شعاعی را با اندیس  $n$  و  $l$  مشخص می‌کنیم، که  $n$  را عدد کوانتومی اصلی و  $l$  را عدد کوانتومی مداری می‌گویند. از طرف دیگر چون انرژی کوانتیده را به صورت تابعی از عدد کوانتومی اصلی بیان می‌کنیم، لذا می‌توانیم گاهی اوقات به جای اندیس  $n$  از اندیس  $E$  نیز استفاده کنیم و تابع موج شعاعی را به صورت  $R_{El}$  نشان دهیم. حال اگر  $E$  ثابت و  $l$  متغیر باشد، در این صورت در پنجره Descriptor سطر اول را انتخاب می‌کنیم. جهت واضح شدن مطلب و امکان مقایسه، تابع موج و مجذور آن را با هم نشان می‌دهیم. (شکل ۶۶)



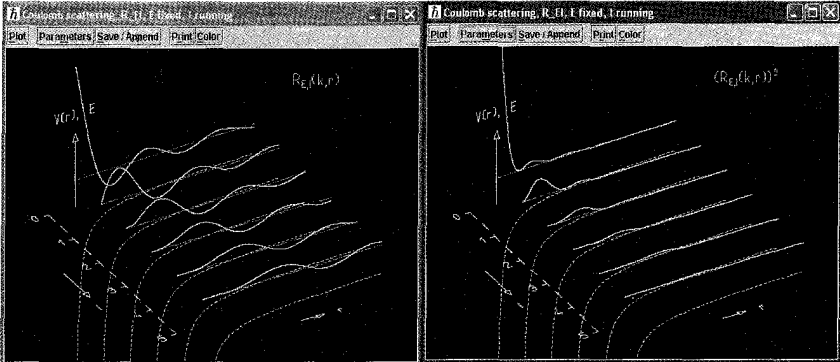
شکل ۶۶

اما اگر  $E$  متغیر و  $l$  ثابت باشد، در این صورت شکل تابع موج و در نتیجه مجذور آن متفاوت خواهد بود. (شکل ۶۷)



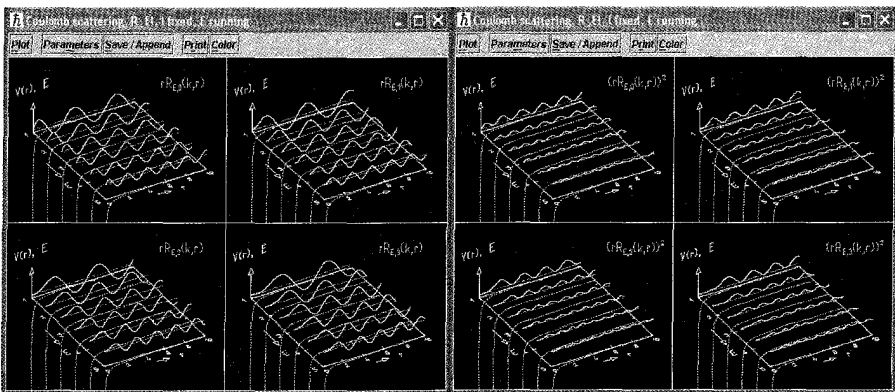
شکل ۶۷

در پنجره Descriptor شما می‌توانید پراکندگی تحت پتانسیل‌های مختلف از جمله پتانسیل‌های دلتا را مشاهده کنید. نکته جالب که معمولاً بیش‌تر مورد توجه است، پراکندگی کولونی است. با انتخاب سطر ۱۶ از پنجره Descriptor، پراکندگی از نوع کولونی را در حالت  $E$  ثابت و  $l$  متغیر، می‌توانید به صورت تصویری مشاهده کنید. (شکل ۶۸)



شکل ۶۸

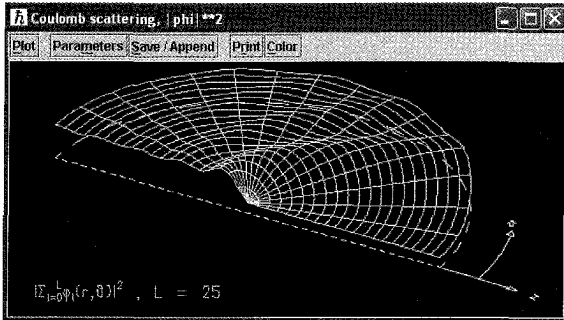
اما اگر در همین نوع پراکندگی  $E$  متغیر و  $l$  ثابت باشد، تصاویر مربوط به قسمت شعاعی تابع موج و مجذور آن به شکل زیر خواهد بود. (شکل ۶۹)



شکل ۶۹

و در نهایت اگر پراکندگی کولونی بخواهیم قسمت زاویه‌ای را نیز به تابع شعاعی اضافه کنیم،  $(\phi(r, \theta))$ ، در

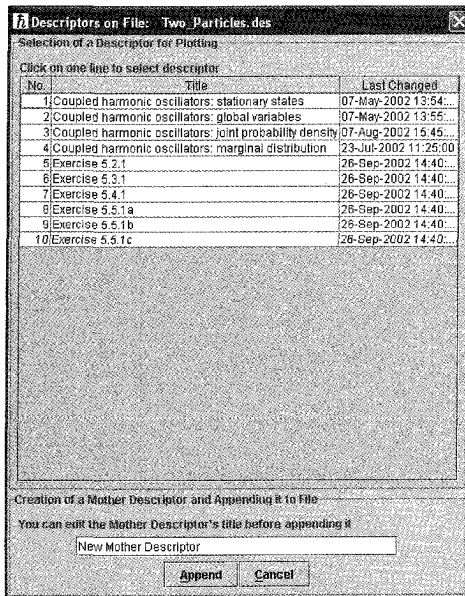
این صورت آنچه را که مشاهده می‌کنیم به صورت زیر خواهد بود. (شکل ۷۰)



شکل ۷۰

### ۷ سیستم‌های دوزره‌ای

یکی از مطالب بسیار جالبی که در مکانیک کوانتومی مورد توجه است، بحث سیستم‌های چندزره‌ای است. در این قسمت از برنامه مطالبی به صورت تصویری در مورد یک سیستم دوزره‌ای (شامل دو نوسانگر هماهنگ ساده) بیان می‌گردد. برای این کار در نوار ابزار اصلی بعد از کلیک کردن روی Descriptor file و ظاهر شدن پنجره مربوط به آن، گزینه Two-Particle.des را انتخاب کنید. حال اگر روی گزینه Descriptor کلیک کنید، پنجره‌ای به شکل زیر ظاهر می‌شود.



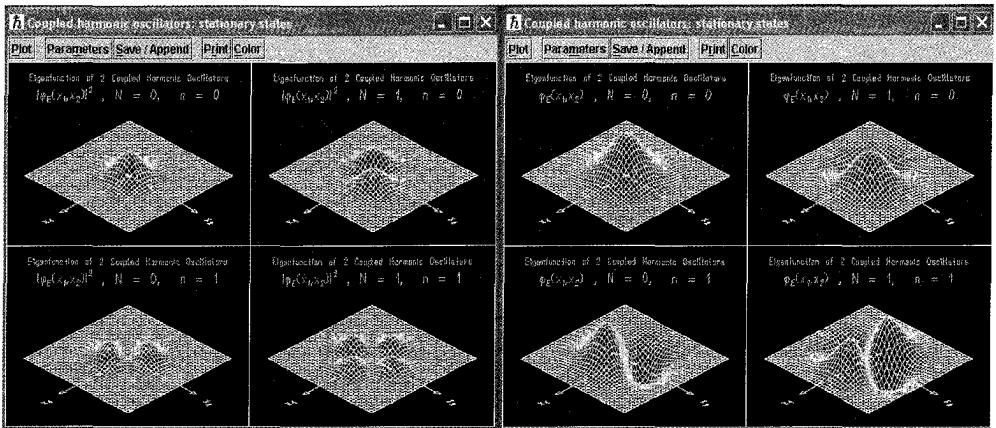
شکل ۷۱

اولین گزینه در این پنجره در مورد توابع موج مستقل از زمان مربوط به دو نوسانگر هماهنگ است. شکل مربوط به مجذور تابع موج مستقل از زمان و نیز شکل مربوط به خود تابع موج مستقل از زمان را می‌توانید در تصویر شماره (۷۲) مشاهده کنید.

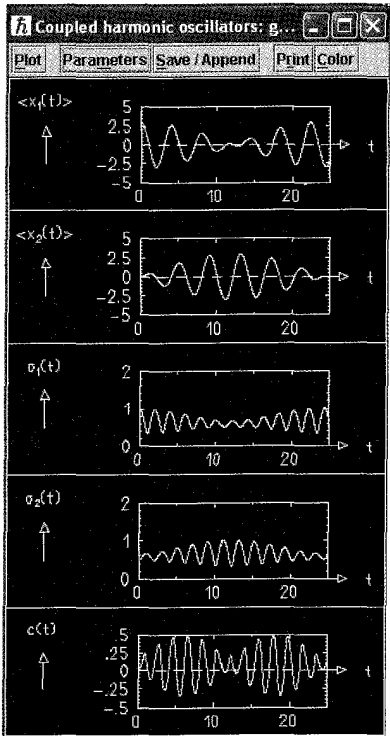
مطلب دیگری که معمولاً در اکثر کتاب‌های مکانیک کوانتومی مورد بحث قرار می‌گیرد، محاسبه مقادیر انتظار کمیت‌ها است، که با استفاده از آن می‌توان رابطه عدم قطعیت و روابط پاشندگی را بیان کرد. در این برنامه شما می‌توانید این مطالب را نیز به صورت تصویری دنبال کنید. برای این کار در پنجره Descriptor روی گزینه دوم کلیک کنید و تصاویر مربوط به این کمیت‌ها را ببینید. (شکل ۷۳) در دو سطر دیگر پنجره Descriptor، می‌توانید سایر مطالب مربوط به نوسانگرهای جفت‌شده از قبیل چگالی احتمال جفت‌شدگی را به صورت تصویری مطالعه کنید.

### نکته آخر:

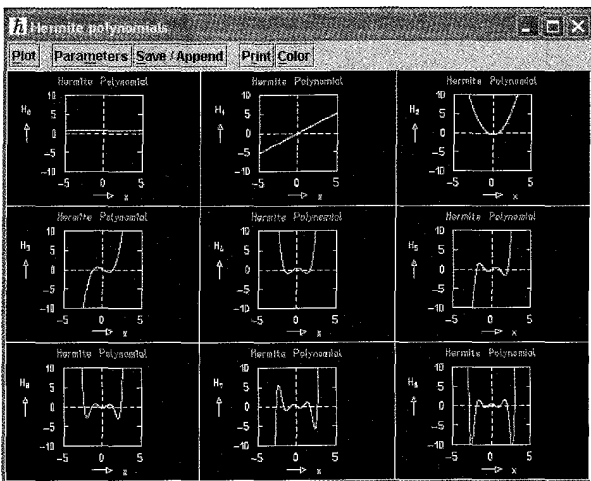
شاید کسی بخواهد شکل تعدادی از توابع ریاضی از قبیل چندجمله‌ای‌های هرمیت، توابع لژاندر و سایر توابع ریاضی را مطالعه کند. در این برنامه این امکان نیز فراهم شده است و شما می‌توانید با انتخاب گزینه Math-Function.des در پنجره Descriptor شاهد تصاویر مربوط به این توابع باشید. به عنوان مثال شکل مربوط به چندجمله‌ای‌های هرمیت در تصویر شماره (۷۴) ارائه شده است.



شکل ۷۲



شکل ۷۳



شکل ۷۴