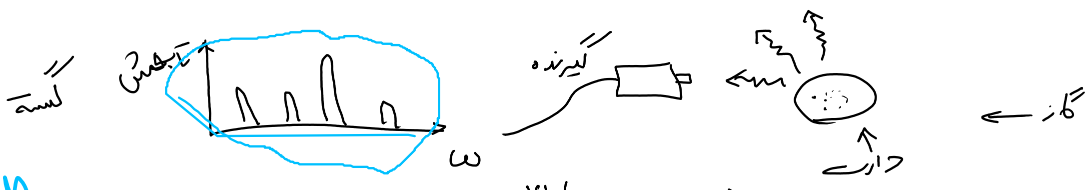
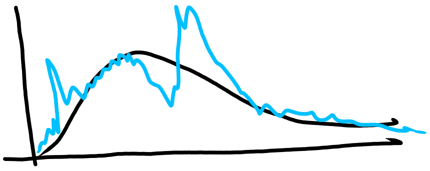
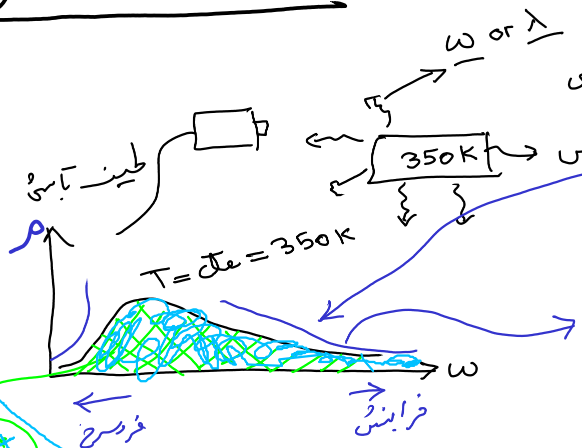




استفان-بولتزمن 1879 به صورت تجربی



طیف پیوسته

تئوری:
- وین 1889 ← فرکانس بالا
- ریلی - جینز 1900 ← فرکانس پایین (بعداً می‌پردازیم)
- پلانک: کل طیف را پیش‌بینی کند

جسم سیاه: $a=1$

جسم غیرسیاه: $a\neq 1$

$$J = a\sigma T^4$$

$$\sigma = 5.67\times 10^{-8}\ \frac{W}{m^2K^4}$$

ثابت استفان - بولتزمن

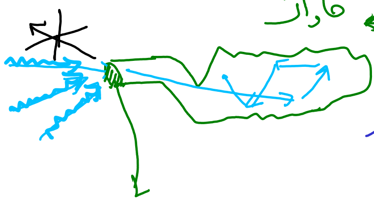
طیف تابشی:
- به جنس جسم وابسته
- به دما وابسته است
- به شکل جسم ارتباط دارد

فقط به دما مربوط باشه ← جسم سیاه

جسم سیاه ← کاواک

جسم سیاه ← جسمی که تمام تابش ورودی را جذب کند

طیف تابشی جسم سیاه: طیفی که جسم سیاه در دمای T از خود ساطع می‌کند

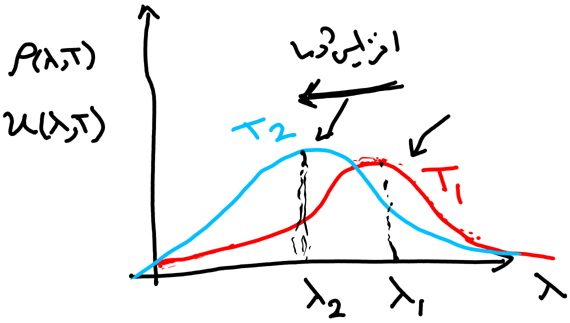


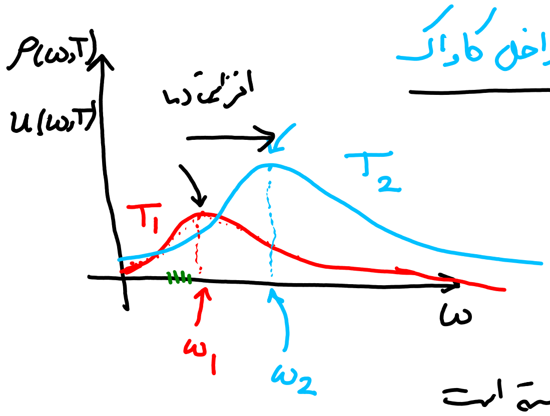
روزنه = جسم سیاه

جسم سیاه: هم جذب کننده خوب و هم گسیل کننده خوب

1. به جنس کاواک بستگی ندارد
2. به شکل کاواک بستگی ندارد
3. به دمای کاواک وابسته است

چگالی طیف تابشی داخل کاواک





$T_2 > T_1$

④ ← طیف پیوسته است

⑤ ← این طیف برای هر دما تنها یک بیشینه دارد

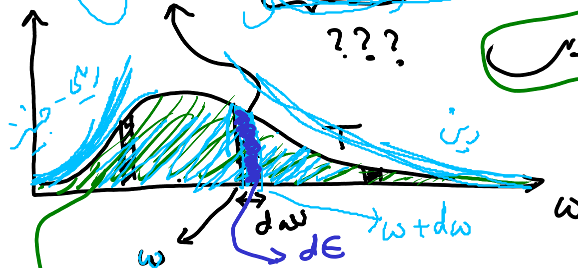
⑥ ← هرچه دما بالاتر ← طیف پهن‌تر

⑦ ← با افزایش دما فرکانس بیشینه به فرکانسهای بالاتر (طول موج کمتر) کشیده می‌شود ← قانون جابجایی وین

چگالی انرژی داخل کاواک: انرژی در واحد حجم کاواک در فرکانس ω

$$d\epsilon = \rho(\omega,T)\,d\omega$$

??? تئوری



$$\epsilon(T) = \int d\epsilon = \frac{E}{V} = \int_0^\infty \rho(\omega,T)\,d\omega$$

چگالی انرژی کل

مطالعه $\rho(\omega,T)$ ← وین از دانسته‌های ترمودینامیک ← تئوری او در فرکانسهای بالا با تجربه هم‌خوانی

ریلی-جینز ← از الکترومغناطیس استفاده کردند ← تئوری‌ها در فرکانسهای پایین جواب می‌داد

وین ← شکل پیشنهادی برای چگالی طیف تابشی

$$\rho(\omega,T) = \omega^3 F\left(\frac{\omega}{T}\right) \quad ①$$

$$\rho(\omega,T) = \underbrace{A(4\pi)^3\omega^3 e^{-2\pi B\frac{\omega}{T}}}_{F(\frac{\omega}{T})}$$

حل: محاسبه چگالی انرژی کل داخل کاواک

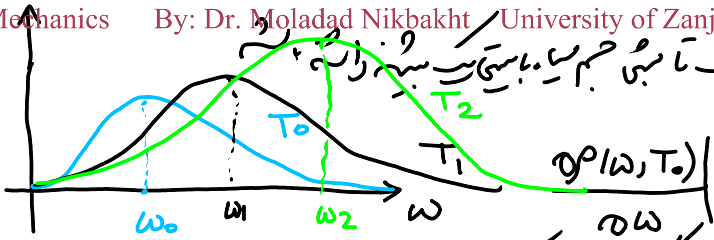
$$\epsilon(T) = \int_0^\infty \rho(\omega,T)\,d\omega \quad ②$$

$$x = \frac{\omega}{T} \rightsquigarrow \omega = xT \rightsquigarrow d\omega = T\,dx \quad ③$$

$$①③ \rightarrow ② \Longrightarrow \int_0^\infty \omega^3 F\left(\frac{\omega}{T}\right) d\omega = \int_0^\infty x^3 T^3 F(x)\, T\,dx = T^4 \int_0^\infty x^3 F(x)\,dx$$

با انتخاب مناسب $F(x)$ این انتگرال می‌تواند همگرا شود ← $\epsilon =$ عدد $\times T^4$ ← با قانون استفان-بولتزمن هم‌خوانی دارد

قید دیگر از نتایج تجربی: طیف تابش جسم سیاه بایستی یک بیشینه داشته باشد



$$\frac{\partial \rho(\omega,T_0)}{\partial \omega}\Big|_{\omega_0}=0$$

در فرمول وین F باید به گونه‌ای باشد که این رابطه ارضا شود ← پیشنهاد وین: رابطه خطی بین ω_0 و T

$$\left.\begin{aligned} \omega_0 &= \text{ثابت} \times T_0 \\ \omega_1 &= \text{ثابت} \times T_1 \\ \omega_2 &= \text{ثابت} \times T_2 \end{aligned}\right\}$$

قانون جابجایی وین

$$\frac{\partial \rho(\omega,T_0)}{\partial \omega}\Big|_{\omega_0} \xrightarrow{\frac{\omega}{T_0}=x} T_0^2\left[\frac{d}{dx}\left[x^3 F(x)\right]\right]\Big|_{x_0}=0$$

$$x=\frac{\omega}{T_0} \Rightarrow \omega = xT_0 \longrightarrow \frac{d}{d\omega}=T_0^{-1}\frac{d}{dx}=\frac{1}{T_0}\frac{d}{dx}$$

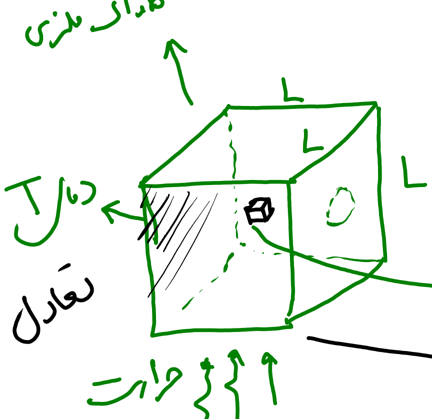
$$\frac{1}{T_0}\frac{d}{dx}\left[(xT_0)^3F(x)\right]\Big|_{x_0}$$

$$3x_0^2F(x_0)+x_0^3F'(x_0)=0 \longrightarrow x_0=\frac{-3F(x_0)}{F'(x_0)}=\frac{\omega_0}{T_0}$$

جمع‌بندی فرمول وین برای ρ ← در فرکانس‌های بالا با تجربه همخوانی دارد

← قانون استفان-بولتزمن با این F کار نمی‌کند

ریلی - جینز ← استفاده از نظریه کلاسیک تابش برای محاسبه تابع ρ



داخل حجم کاواک موج الکترومغناطیسی ناشی از تابش دیوارها

معادلات موج
$$\begin{cases}\nabla^2\bar{E}=\dfrac{1}{c^2}\dfrac{\partial^2\bar{E}}{\partial t^2}\\[2ex] \nabla^2\bar{B}=\dfrac{1}{c^2}\dfrac{\partial^2\bar{B}}{\partial t^2}\end{cases}$$

+

مؤلفه مماسی $\bar{E}$ روی دیواره کاواک $=0$

مؤلفه عمودی $\bar{B}$ روی دیواره کاواک $=0$

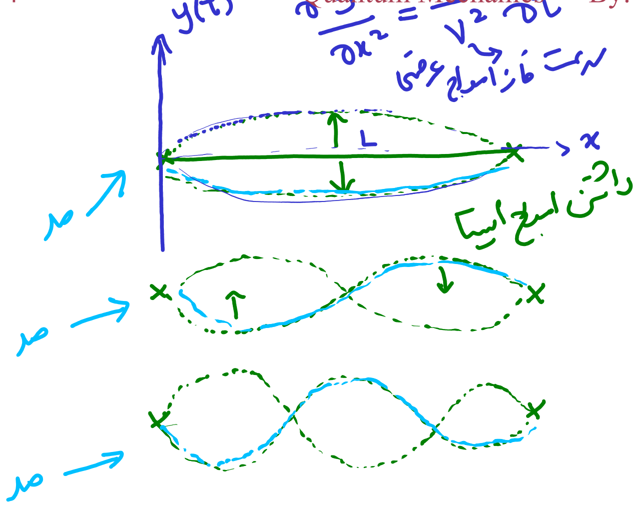
⇐

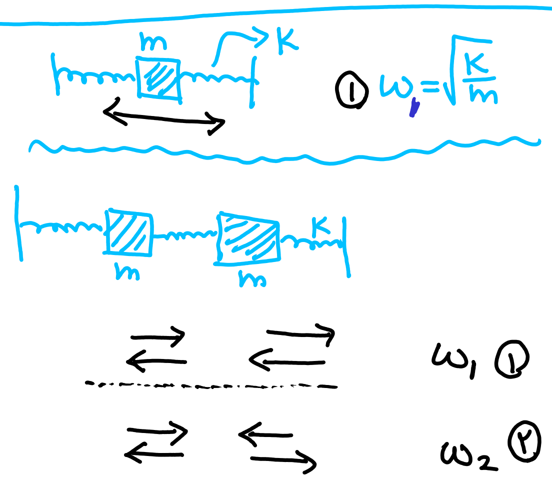
⟸ امواج داخل کاواک امواج ایستا هستند

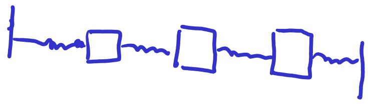
مثال: تار مرتعش قابلیت داشتن امواج ایستا

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 y}{\partial t^2}$$

v : سرعت فاز امواج







تعداد مد؟؟

$$y_n(t) = e^{-i\omega_n t}\sin\frac{n\pi}{L}x \qquad n=1,2,3,\dots$$

n : شماره مد

فرکانس مد n ام $= \omega_n$

جاگذاری y_n در معادله

$$\omega_n = \frac{v\pi}{L}n$$

موج الکترومغناطیسی سه بعدی ⟸ هر مد ۳ مشخصه دارد (n,m,l)

$$\omega_{n,m,l} = \frac{c\pi}{L}\sqrt{n^2+m^2+l^2} \qquad n,m,l=1,2,3,4,\dots$$

مثال

$(n=1, m=1, l=2) \longrightarrow \omega_{112} = \frac{c\pi}{L}\sqrt{1^2+1^2+2^2} = \sqrt{6}\,\frac{c\pi}{L}$

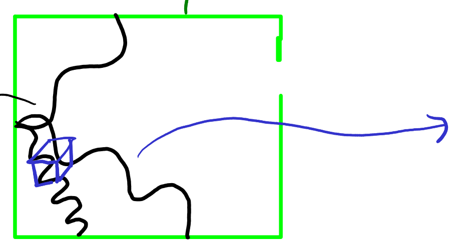
$(n=1, m=2, l=1) \longrightarrow \omega_{121} = \sqrt{6}\,\frac{c\pi}{L}$

$(n=2, m=1, l=1) \longrightarrow \omega_{211} = \sqrt{6}\,\frac{c\pi}{L}$

مدها با فرکانس یکسان ⟵ تبهگنی / دژنره / واگنی

degenerate

دما $= T$



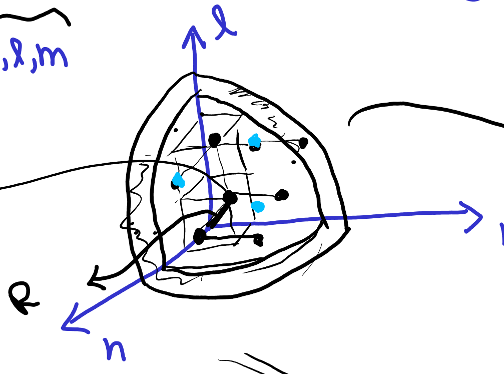
امواج ایستای الکترومغناطیسی داخل کاواک

هر مد فرکانس ω_{nml} دارد

ریلی - جینز ← هدف محاسبهٔ چگالی انرژی کل داخل کاواک

مد → $\omega_{n,l,m}$ $n,l,m = 1,2,3,\dots$

ω_{111}



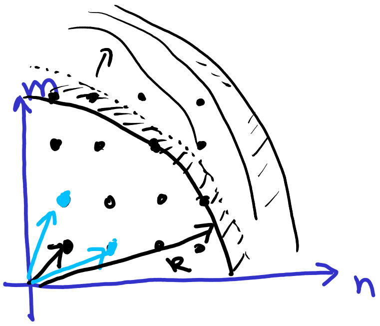
هر نقطه نشان یک مد

فرکانس $= \omega_{n,l,m} = \frac{c\pi}{L}\sqrt{n^2+l^2+m^2}$

$= \frac{c\pi}{L}R$

$R = \sqrt{n^2+l^2+m^2}$

حالت دو بعدی



مدهایی که فاصله‌شان تا مبدأ دستگاه (nml) یکسان باشد در تبهگنی هستند

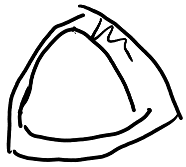
هرچه R بزرگتر ⇐ تبهگنی بیشتر ⇐ مرتبه تبهگنی ← تعداد مدها در فرکانس ω

چگالی انرژی کل داخل کاواک

$$E = \sum \underbrace{\bar{E}(\omega)}_{??} N(\omega) = \int \bar{E}(\omega)\, dN$$

متوسط انرژی مد با فرکانس ω ?

تعداد مدها داخل پوسته به شعاع داخلی R و خارجی R+dR ?



$$dN = 2\,\frac{1}{8}\,4\pi R^2 dR$$

2: قطبش امواج الکترومغناطیسی

ربع اول

و $\omega = \frac{c\pi}{L}R$

$d\omega = \frac{c\pi}{L}dR$

$$dN = \frac{L^3}{c^3\pi^2}\omega^2 d\omega = \frac{V}{c^3\pi^2}\omega^2 d\omega$$

V: حجم کاواک

پیوسته ← کلاسیکی

هر مد

انرژی $E = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$

$\bar{E}(\omega)$ انرژی متوسط هر مد ← نتیجه کلاسیکی (ریلی - جینز)

با استفاده از قانون کلاسیک بولتزمن تعداد مدها در انرژی E داخل کاواک با دمای T متناسب با $e^{-E/KT}$

$$\bar{E}(\omega) = \langle E(\omega)\rangle = \frac{\int_0^\infty E\, e^{-E/KT}\, dE}{\int_0^\infty e^{-E/KT}\, dE} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right) e^{-\left(p^2/2m+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)/KT}\, dp\, dx}{\iint e^{-(\cdots)/KT}\, dx\, dp}$$

$$\bar{E}(\omega) = KT$$ → انرژی هر مد داخل کاواک فقط تابع دما و نه فرکانس

چگالی انرژی در واحد حجم کاواک

جاگذاری

$$\epsilon = \frac{E}{V} = \frac{1}{V}\int \bar{E}(\omega)\, dN = \frac{1}{V}\int_0^\infty \frac{KTV}{c^3\pi^2}\omega^2 d\omega = \int \frac{K}{c^3\pi^2}\omega^3 \frac{T}{\omega}\, d\omega = \int \underbrace{\frac{K}{c^3\pi^2}\omega^3\left(\frac{\omega}{T}\right)^{-1}}\, d\omega$$

مقایسه

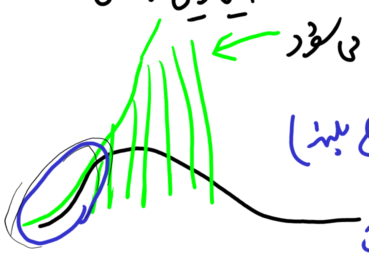
$$\epsilon = \int \rho(\omega,T)\, d\omega$$

$$\rho(\omega,T) = \omega^3 \boxed{\frac{K}{c^3\pi^2}\left(\frac{\omega}{T}\right)^{-1}} \qquad F\left(\frac{\omega}{T}\right)$$

خصوصیات

1- هیچ بیشینه‌ای ندارد ← قانون جابجایی وین را نقض می‌کند

2- چگالی انرژی کل بی‌نهایت می‌شود



3- در فرکانس‌های کوچک (طول موج بلند) با نتایج تجربی همخوانی داشت

پلانک ← نظریه کوانتوم ← انرژی می‌تواند گسسته باشد

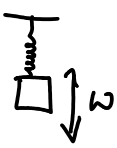
ثابت پلانک

$$E_n = n\hbar\omega = n\frac{h}{2\pi}\omega$$

انرژی هر مد با فرکانس ω مضرب صحیح از $\hbar\omega$ است

$n = 0, 1, 2, \dots$

با n مقادیر صحیحات بین اینها نمی‌گیرد



تابع فرکانس و دما

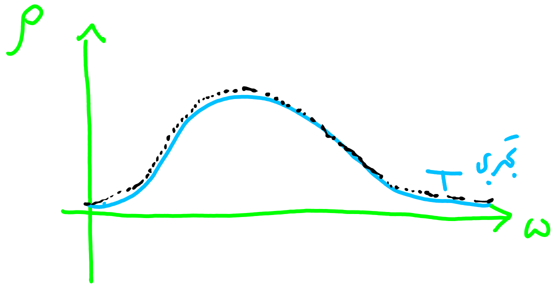
$$\bar{E}(\omega,T) = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} E_n e^{-E_n/KT}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-E_n/KT}} \underset{}{\overset{\text{تمرین}}{=\!=}} \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/KT}-1}$$

جواب کلی

حالت خاص: $T \to \infty \Longrightarrow \bar{E} \to KT$

پلانک $\rho(\omega,T) = \dfrac{\omega^2}{c^3\pi^2}\,\dfrac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT}-1}$

با تجربه همخوانی ۱۰۰٪ داشت



تمرین

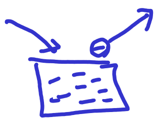
$$\begin{cases} \rho(\lambda,T) = \dfrac{8\pi hc}{\lambda^5}\,\dfrac{1}{e^{hc/\lambda kT}-1} \\ \rho(\nu,T) = \dfrac{8\pi\nu^2}{c^3}\,\dfrac{h\nu}{e^{h\nu/kT}-1} \end{cases}$$

$\boxed{\omega = 2\pi\nu}$

نسبت دادن ذره به امواج ← آزمایشات

① اثر فوتوالکتریک

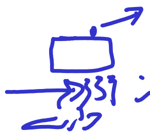
② اثر کامپتون



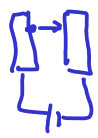
اگر به یک فلز انرژی بدهیم ← الکترونها از آن کنده می‌شود

گسیل الکترونی

۱ـ گرمایونی or حرارتی → ناشی از گرم کردن فلز



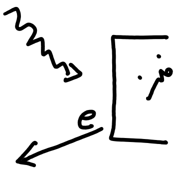
۲ـ گسیل تونلی → ناشی از اختلاف پتانسیل زیاد



۳ـ گسیل ثانویه → تابانیدن ذرات پرانرژی به ماده. مثلاً نوترون یا پروتون به فلز

۴ـ گسیل فوتونی (تک رنگ) → تابش الکترومغناطیسی به یک فلز

اثر فوتوالکتریک : هرتز (تجربی) 1888

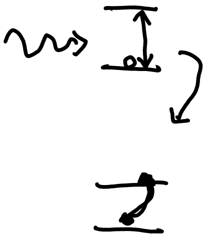


۱ـ چنانچه به صفحه فلزی موج الکترومغناطیسی تک فام بتابانیم ← الکترون گسیل می‌کند

موج تک فام ← تک رنگی

۲ - اینکه گسیل انجام شود یا خیر به $\underbrace{\text{فرکانس}}_{\omega}$ ربط دارد و نه $\overbrace{\text{شدت نور}}^{I}$.

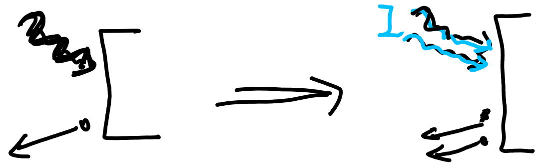
یک فرکانس آستانه برای گسیل داریم که جنس فلز ربط دارد



$\omega > \omega_0$

$W \leftarrow \hbar\omega_0 \rightarrow$ تابع کار

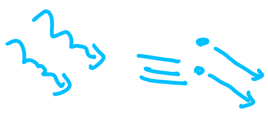
۳ - چنانچه گسیل داشته باشیم ← جریان الکترونی متناسب با شدت نور



۴ - انرژی الکترون‌های گسیل شده، به $\underbrace{\text{شدت نور}}_{I}$ ربطی ندارد

بلکه وابسته به فرکانس

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \hbar\omega - W$$
$$= \hbar(\omega - \omega_0)$$



توجیه اینشتین ← واژه فوتون را ارائه داد

← ذره بدون جرم

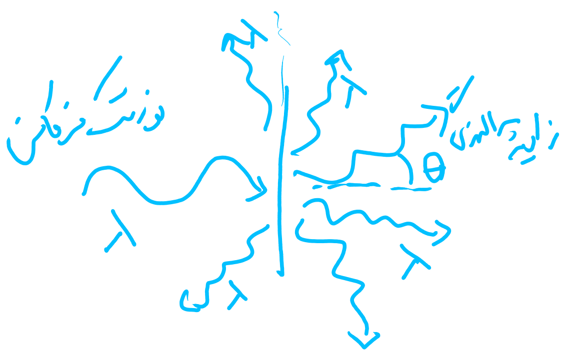
← حامل تکانه → $p = \cancel{mv}$

← حامل انرژی ← گسسته است $\hbar\omega$

تمرین: شکل 2-1 رسم به همراه توجیه اینشتین برای گسیل ها

---

② اثر کامپتون

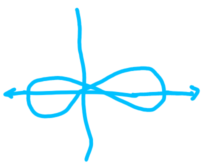


اثر تامسون ← پراکندگی نور توسط اتم

با طول موج بلند از اجسام

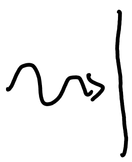
← مرئی .... رادیو

۱ - λ پراکنده با λ فرودی یکی



۲ - توزیع زاویه‌ای شدت موج پراکنده $I = \frac{I_0}{2}(1 + \cos^2\theta)$

← کامپتون: بررسی پراکندگی امواج انرژی بالا (طول موج کوتاه) از فلزات



۱- در هر اسکتر پراکندگی در طول موج ها مشاهده شد.

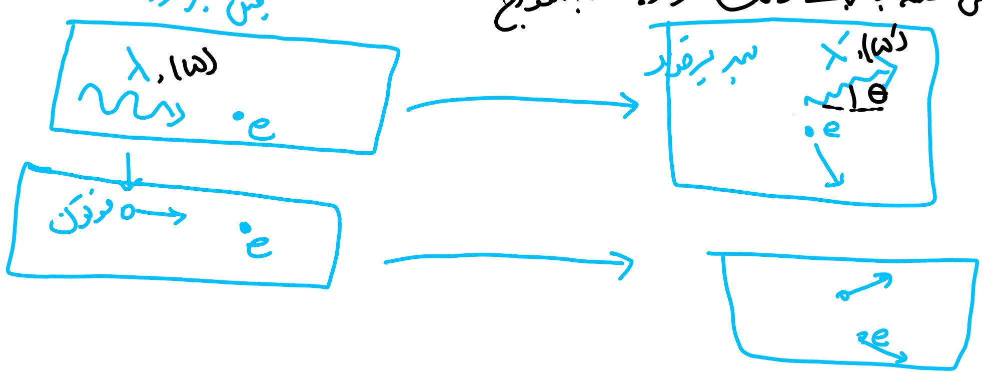
۲- طول موج دوم بزرگتر از طول موج فرودی

۳- توزیع زاویه ای شدت پراکنده با تامسون همخوانی ندارد

توجیه با الکترودینامیک کلاسیک

با تابش فرودی: ارتعاش

کامپتون ← بررسی مسئله با شباهت دادن ذره به امواج



تمرین: اثبات کنید

$$\lambda' = \lambda + \frac{h}{mc}(1-\cos\theta)$$

$$\lambda_c = 2.42\times 10^{-12}\,m = 2.42\,pm$$

$$\Delta\lambda = \lambda - \lambda' = \lambda_c(1-\cos\theta)$$

خصوصیت موجی برای ذرات:

- دوبروی ← نظریه: به هر ذره، موج نسبت دهیم
- رید برگ ← تجربی: بررسی اتم هیدروژن
- بوهر ← تئوری: اثبات نتایج رید برگ
- دیویسون - گرمر ← اثبات تجربی خاصیت موجی ذرات

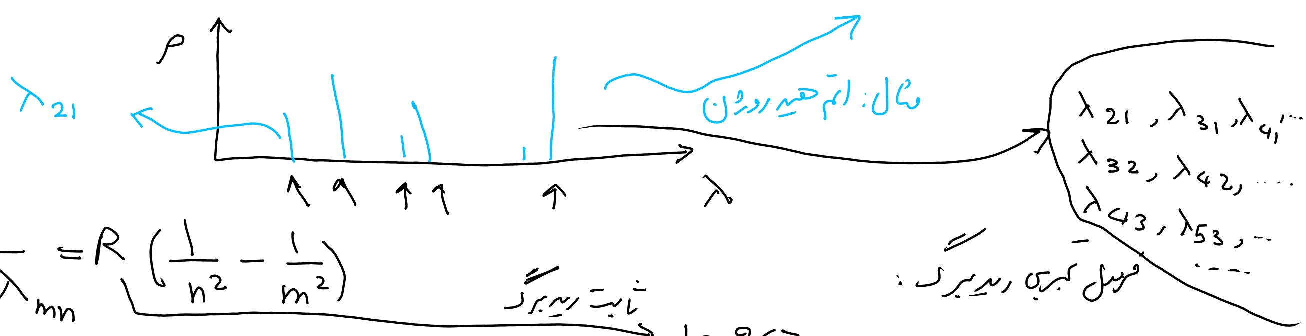
ریدبرگ (دید کلاسیکی)

(۱) الکترون حول هسته روی مدار بیضوی می چرخد

(۲) نیروی الکترستاتیکی شتاب جانب مرکز را ایجاد می کند

(۳) اگر شتاب دار باشد ← تابش کند ← انرژی از دست بدهد ← الکترون رمبش کرده و در هسته بیفتد

← انتظار: طیف تابشی پیوسته بود ← but طیف تابشی گازها گسسته

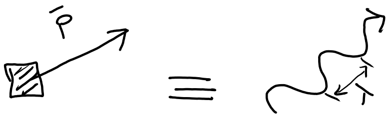


فرمول تجربی ریدبرگ:

$$\frac{1}{\lambda_{mn}} = R\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right)$$

ثابت ریدبرگ: $R = 109677.576\ cm^{-1}$

$m>n,\quad m,n = 1,2,3,4,\ldots$



دوبروی ⟵ به ذرات موج نسبت دهیم

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

h ⟵ ثابت پلانک

p ⟵ تکانه خطی جسم

p بزرگتر ⟸ λ کوچکتر ⟵ موج نمی‌توان نسبت داد

p کوچکتر ⟸ λ بزرگتر ⟵ ملموس‌تر

مثال/ آدم $m = 70\,kg$ $V = 2\,\frac{m}{s}$ $\rightarrow \lambda = \frac{h}{p} = \frac{6.63\times 10^{-34}}{2\times 70} \simeq 10^{-36}\,m$

الکترون $m = 9.11\times 10^{-27}\,kg$ $V = 1\,\frac{cm}{s} = 0.01\,\frac{m}{s} \rightarrow \lambda \sim 10^{-6}\,m \rightarrow 10^{3}\,nm$

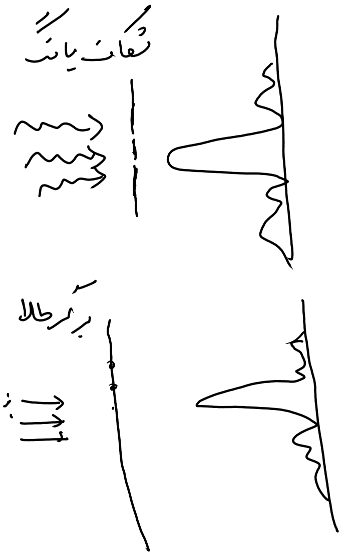
قابل تبدیل

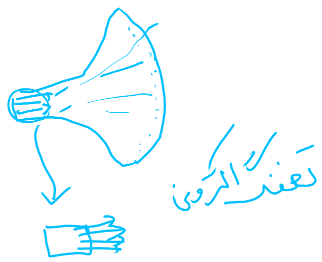
آزمایش تجربی دیویسون - گرمر

شکاف یانگ

نور تک فام (موج)

امواج می‌توانند طرح تداخلی ایجاد کنند



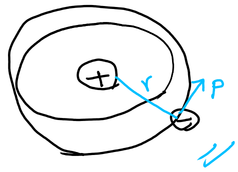


مشاهده طرح تداخلی الکترونها از ورقه طلا

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

ذرات خاصیت موجی دارند

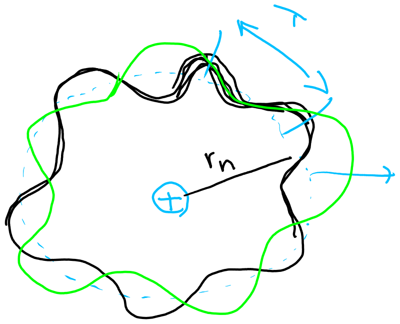
نظریه بوهر برای اتم هیدروژن: تئوری دوبروی + اصول موضوعه ⟵ اثبات شرط قبول بودن بوهر



① الکترون در مدارهای دایره‌ای حول هسته حرکت می‌کند

② در مدارهای خاصی حول هسته می‌چرخد ⟵ تکانه زاویه‌ای کوانتیده است

$$L_n = r_n p_n = r_n m V_n = n\hbar \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$



$n = 1, 2, 3, 4 \dots$

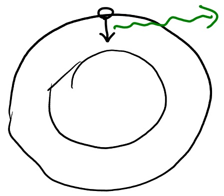
$$\underbrace{2\pi r_n}_{} = n\lambda = n\frac{h}{p} = n\underbrace{\frac{h}{mV_n}}_{}$$

$$r_n m V_n = n\frac{h}{2\pi}$$

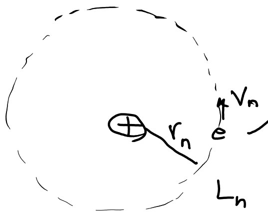
$$\boxed{L_n = n\hbar}$$

۳ اصل موضوعه: الکترون در حال حرکت در یک مدار تابش نمی‌کند ← گسیل (تابش) زمانی است که از مدار با انرژی بالاتر به مدار پایین‌تر برود

فوتون ساطع می‌کند



اثبات فرمول ریدبرگ با ایده بوهر



انرژی $\longrightarrow$

$$\epsilon_n = \underbrace{\frac{1}{2}mV_n^2}_{\text{جنبشی}} - \underbrace{\frac{e^2}{r_n}}_{\text{پتانسیل}} \qquad \boxed{1}$$

انرژی الکترون در مدار با تکانه زاویه‌ای L_n

$$ma_n = F_n = \boxed{\frac{e^2}{r_n^2} = \frac{mV_n^2}{r_n}} \longrightarrow \text{کولنی} \qquad \boxed{2}$$

نیروی جاذبه مرکز ← نیروی کولنی

$$L_n = r_n m V_n = n\hbar \longrightarrow \boxed{V_n = \frac{n\hbar}{mr_n}} \qquad \boxed{3}$$

$$\boxed{2},\boxed{3} \longrightarrow \frac{e^2}{r_n} = \frac{mn^2\hbar^2}{m^2 r_n^2} \longrightarrow \boxed{r_n = \frac{n^2\hbar^2}{me^2}}$$

$n = 1, 2, \dots$

کوانتیده r_n

$$r_n = an^2$$

شعاع بوهر: $a = \frac{\hbar^2}{me^2}$

$0.53 \times 10^{-8}\ cm$

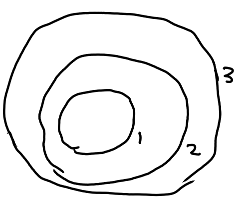
$0.53 \times 10^{-10}\ m$

$0.53\ \mathring{A}$

انرژی کوانتیده

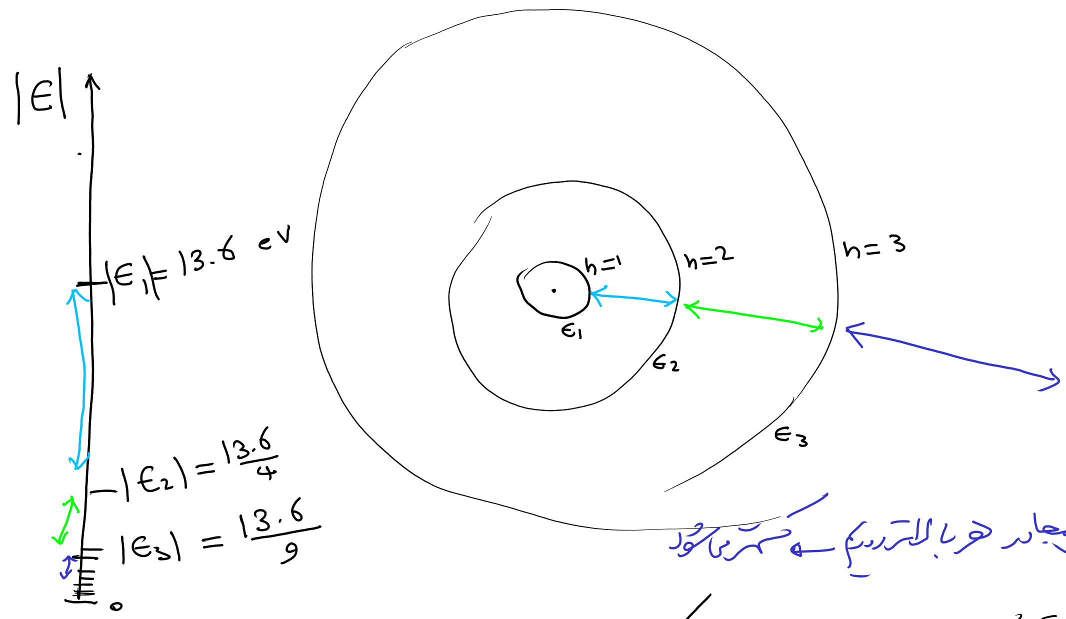
r_n, V_n جایگذاری $\longrightarrow \boxed{1}$

$$\epsilon_n = -\frac{\frac{me^4}{2\hbar^2}}{n^2} = \frac{\epsilon_1}{n^2} \qquad \epsilon_1 = -13.6\,eV$$



انرژی الکترون در مدار n ام $\quad \epsilon_n = -\frac{13.6}{n^2}$

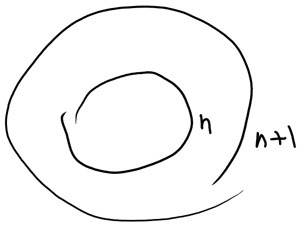
* انرژی منفی است ← چون الکترون مقید



اختلاف انرژی مدارهای مجاور هر چه بالاتر رویم ← کمتر می‌شود

هر چه از هسته دورتر شویم ← انرژی مدارها به هم نزدیکتر می‌شود ⟵ طیف انرژی پیوسته می‌شود

$$\Delta\epsilon_{n,n+1} = \frac{\epsilon_1}{(n+1)^2} - \frac{\epsilon_1}{n^2} = \epsilon_1\left[\frac{1}{(n+1)^2} - \frac{1}{n^2}\right]$$



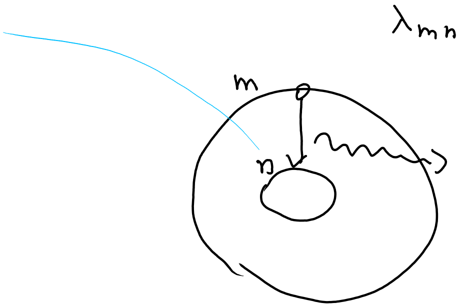
$$= \epsilon_1\left[\frac{n^2-(n+1)^2}{n^2(n+1)^2}\right]$$

$$= \epsilon_1\left[\frac{\cancel{n^2} - \cancel{n^2} - 1 - 2n}{n^2(n+1)^2}\right]$$

$$\lim_{n\to\infty} \Delta_{n,n+1} \longrightarrow 0$$

فرمول ریدبرگ

$$\frac{1}{\lambda_{mn}} = R\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right)$$



$$\epsilon_m - \epsilon_n = \hbar\omega_{mn} = h\nu_{mn} = h\frac{c}{\lambda_{mn}}$$

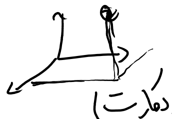
$$\left(\frac{\epsilon_1}{m^2} - \frac{\epsilon_1}{n^2}\right) = h\frac{c}{\lambda_{mn}}$$

$$\frac{1}{\lambda_{mn}} = \frac{c\,\epsilon_1}{h}\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) = \underbrace{\frac{c|\epsilon_1|}{h}}_{R}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right)$$

گذار به کوانتوم ← شرودینگر ← اینشتین ⟷ از ثبات جبری وارد می‌شود ← پیچیده

← هایزنبرگ ← ماتریسی و برداری ← نگاه ذره‌ای ← گذار از کلاسیک به کوانتوم مشهود

مکانیک نیوتن ← لاگرانژ ← هامیلتون ← کوانتوم



مکانیک نیوتونی ← از مختصات راست‌گرد استفاده می‌شود

(دستگاه کارتزین یا دکارت)

① ← ستون بنا نیرو ← که کمیت برداری است

② ← معادله نیوتون ← معادله مرتبه دوم ← به دو شرط اولیه برای حل نیاز دارد

$$\bar{F} = m\frac{d^2\bar{r}}{dt^2}$$

③ ← $\bar{r}(t)$ بر حسب زمان

← $\bar{V}(t)$ سرعت بر حسب زمان

$\bar{V}$ مشتق $\bar{r}$

$$\boxed{\begin{cases} F_x = m\dfrac{d^2x}{dt^2} \\ F_y = m\dfrac{d^2y}{dt^2} \\ F_z = m\dfrac{d^2z}{dt^2} \end{cases}} + \boxed{\bar{r}(0) \text{ و } \bar{V}(0)}$$

④ توابع دینامیکی، هر تابعی که از $\bar{r}(t)$ و $\bar{V}(t)$ ساخته شود

اسکالر ←

برداری ←

تابع دینامیکی اسکالر $T = \frac{1}{2}m\bar{V}(t)\cdot\bar{V}(t)$ $\quad U = \frac{1}{2}K\bar{r}\cdot\bar{r}$

$$L_z = (m\bar{r}\times\bar{V})_z$$

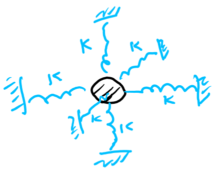
مثلا/ $\bar{P} = m\bar{V}(t)$ $\quad \bar{L} = m\bar{r}\times\bar{V}$

⑤ ثابت حرکت: تابع دینامیکی که وابستگی زمانی نداشته باشد

$x(t) = \checkmark$, $V_x(t) = \checkmark$

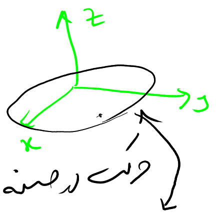
$P_x = mV_x(t) = P_x(t) \longrightarrow$ ثابت حرکت نیست

مثال/ نوسانگر هماهنگ سه‌بعدی



$$\bar{F} = -K\bar{r} \longrightarrow \begin{cases} F_x = -Kx = m\dfrac{d^2x}{dt^2} \\ F_y = -Ky = m\dfrac{d^2y}{dt^2} \\ F_z = -Kz = m\dfrac{d^2z}{dt^2} \end{cases} + \begin{matrix}\bar{r}(0) \\ \bar{V}(0)\end{matrix}$$

$\bar{V}(t) = ?$, $\bar{r}(t) = ?$



حرکت در صفحه x-y

شرایط اولیه
$$\begin{cases} x(0) = x_0 & , \quad V_x(0) = V_{x_0} \\ y(0) = y_0 & , \quad V_y(0) = V_{y_0} \\ z(0) = 0 & , \quad V_z(0) = 0 \end{cases} \xrightarrow{\text{حل}} \begin{cases} x(t) = A_x\cos(\omega t + \varphi_x) \\ y(t) = A_y\cos(\omega t + \varphi_y) \\ z(t) = 0 \\ V_x(t) = -A_x\omega\sin(\omega t + \varphi_x) \\ V_y(t) = -A_y\omega\sin(\omega t + \varphi_y) \\ V_z(t) = 0 \end{cases}$$

$A_x = \left(x_0^2 + \frac{V_{x_0}^2}{\omega^2}\right)^{1/2}$ $\quad A_y = \left(y_0^2 + \frac{V_{y_0}^2}{\omega^2}\right)^{1/2}$

$\varphi_x = \tan^{-1}\frac{V_{x_0}}{\omega x_0}$ $\quad \varphi_y = \tan^{-1}\frac{V_{y_0}}{\omega y_0}$

مثال شرایط اولیه

$$\begin{cases} x(0)=x_0 & V_x(0)=0 \\ y(0)=0 & V_y(0)=V_{y_0} \\ z(0)=0 & V_z(0)=0 \end{cases} \longrightarrow \begin{cases} x(t)=x_0\cos\omega t, & V_x(t)=-x_0\omega\sin\omega t \\ y(t)=\dfrac{V_{y_0}}{\omega}\sin\omega t, & V_y(t)=V_{y_0}\cos\omega t \\ z(t)=0, & V_z(t)=0 \end{cases}$$

سایر توابع دینامیکی این حالت

$$E = \text{انرژی کل} = \frac{1}{2}m\bar{V}\cdot\bar{V} + \frac{1}{2}k\bar{r}\cdot\bar{r} = \frac{1}{2}m\left(V_x^2(t)+V_y^2(t)+V_z^2(t)\right) + \frac{1}{2}K\left[x^2(t)+y^2(t)+z^2(t)\right]$$

$$= \frac{1}{2}m\left(x_0^2\omega^2\sin^2\omega t + V_{y_0}^2\cos^2\omega t + 0\right) + \frac{1}{2}K\left[x_0^2\cos^2\omega t + \frac{V_{y_0}^2}{\omega^2}\sin^2\omega t + 0\right]$$

$$\omega=\sqrt{\frac{K}{m}}$$

$$= \quad '' \quad \sim \quad \sim \quad + \frac{1}{2}m\omega^2\left[\ \sim \quad \sim\ \right]$$

$$= \frac{1}{2}mx_0^2\omega^2\left[\sin^2\omega t+\cos^2\omega t\right] + \frac{1}{2}mV_{y_0}^2\left[\cos^2\omega t+\sin^2\omega t\right]$$

$$\Rightarrow \boxed{E = \frac{1}{2}mx_0^2\omega^2 + \frac{1}{2}mV_{y_0}^2}$$

مستقل از زمان

ثابت حرکت است

تابع دینامیکی // تکانه خطی

$$\bar{P} = m\bar{V}(t) = mV_x(t)\hat{i} + mV_y(t)\hat{j} + mV_z(t)\hat{k}$$

$$= -mx_0\omega\sin\omega t\,\hat{i} + mV_{y_0}\cos\omega t\,\hat{j} + 0$$

وابسته به زمان

ثابت حرکت نیست

تابع دینامیکی // تکانه زاویه‌ای مداری

$$L_z = m\left[\bar{r}(t)\times\bar{V}(t)\right]_z = m\left[x(t)V_y(t) - y(t)V_x(t)\right]$$

$$= mx_0\cos\omega t\,V_{y_0}\cos\omega t + m\frac{V_{y_0}}{\omega}\sin\omega t\,x_0\omega\sin\omega t$$

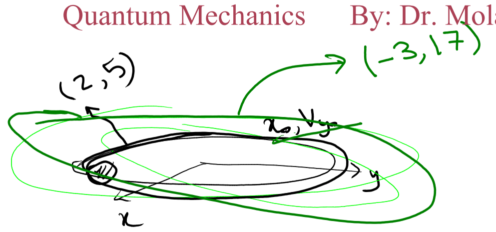
$$L_z = mx_0V_{y_0}$$

عدد

مستقل از زمان

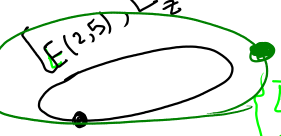
L_z ثابت حرکت

* اینکه تابع دینامیکی ثابت حرکت است یا خیر مستلزم حل مسئله است



$$\frac{x^2}{x_0^2}+\frac{y^2}{(V_{y_0}/\omega)^2}=1$$

معادله مدار در صفحه xy برحسب شرایط اولیه داریم، در فوق

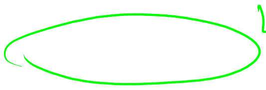


$E=E(x_0,V_{y_0})$

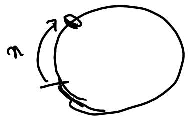
$L_z=L_z(x_0,V_{y_0})$

* مدار را میتوان با x_0 و V_{y_0} برچسب زد.

* مدار را با ثابت‌های حرکت $\boxed{E}$ و $\boxed{L_z}$ برچسب زد



ورود مختصات منحنی‌الخط به فیزیک توسط لاگرانژ



کروی (r,θ,φ)

استوانه (ρ,φ,z)

نگاه لاگرانژی

سنگ بنای کمیت اسکالر ⟸ لاگرانژی $\mathcal{L}$ ← انرژی

مختصات تعمیم یافته $q_i \, , i=1,2,3$

سرعت تعمیم یافته $\dot{q}_i \, , i=1,2,3$

q_i مستقل از $\dot{q}_i$ است

$$\mathcal{L}=\underbrace{T}_{\text{جنبشی}}-\underbrace{V}_{\text{پتانسیل}} \Longrightarrow \mathcal{L}(q_i,\dot{q}_i)$$

معادلات لاگرانژ معادلات مرتبه دوم هستند

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}-\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i}=0 \qquad i=1,2,3$$

+ شرایط اولیه $q_i(0), \dot{q}_i(0)$

حل معادله ⟶ $q_i(t)=\checkmark$

$\dot{q}_i(t)=\checkmark$

توابع دینامیکی: هر تابعی از مختصات تعمیم یافته و سرعت‌های تعمیم یافته را تابع دینامیکی گویند

ثابت حرکت: تابع دینامیکی مستقل از زمان

* در این دیدگاه، مسئله باید حل شود تا بدانیم تابع دینامیکی ثابت حرکت است یا خیر.

دیدگاه هامیلتون

انرژی ← H همیلتونی or هامیلتونی ← کمیت اسکالر

مختصات تعمیم یافته: $q_i \quad i=1,2,3$

تکانه تعمیم یافته: $p_i \quad i=1,2,3$

هم نوع or هم ارزش هستند ☆

$q_1, q_2, q_3, p_1, p_2, p_3$

$$H(q_i,p_i)=\sum_i p_i\dot{q}_i - L(q_i,\dot{q}_i)$$

$$p_i=\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \longrightarrow H(q_i,p_i)$$

سامانه پایستار

$$H=T+V$$

معادله هامیلتون

معادلات مرتبه اول

$$\dot{p}_i=-\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

$$\dot{q}_i=\frac{\partial H}{\partial p_i}$$

$+ \; p_i(0), \; q_i(0) \longrightarrow p_i(t)=\checkmark \quad q_i(t)=\checkmark$

تابع زمانی هر یک از q_iها و p_i

ثابت حرکت: هر تابع دینامیکی مستقل از زمان

☆ بدون حل مسئله باید متوجه شد که یک تابع دینامیکی ثابت حرکت است یا خیر ☆

مثال: نوسانگر ساده یک بعدی

$q_1=x \;,\; p_1=p_x$

$$H=p_1\dot{q}_1-L(q_1,\dot{q}_1) \;,\; L=T-V=\frac{1}{2}m\dot{x}^2-\frac{1}{2}kx^2$$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}=p_x \Rightarrow m\dot{x}=p_x \Rightarrow \dot{x}=\frac{p_x}{m}$$

$$H=p_x\dot{x}-\frac{1}{2}m\dot{x}^2+\frac{1}{2}kx^2$$

$$H(x,p_x)=p_x\frac{p_x}{m}-\frac{1}{2}m\frac{p_x^2}{m^2}+\frac{1}{2}kx^2$$

$$H=\frac{p_x^2}{2m}+\frac{1}{2}kx^2$$

$$\begin{cases}\dot{P}_x = -\dfrac{\partial H}{\partial x} \\ \dot{x} = \dfrac{\partial H}{\partial P_x}\end{cases} \longrightarrow \begin{cases}\dot{P}_x = -Kx \\ \dot{x} = \dfrac{P_x}{m}\end{cases}$$

کوپل شده

حل: تبدیلات کانونیک (تغییر متغیر)

$$q_i, P_i \longrightarrow q_i', P_i'$$

$$H(q_i, P_i) \longrightarrow H(q_i', P_i')$$

$$\begin{cases} x \longrightarrow \left(\dfrac{2P_x'}{m\omega}\right)^{1/2} \sin x' \\ P_x \longrightarrow (2m\omega P_x')^{1/2} \cos x' \end{cases} \Rightarrow H(x, P_x) \longrightarrow H(x', P_x')$$

$$H' = \frac{2m\omega P_x' \cos^2 x'}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \frac{2P_x'}{m\omega} \sin^2 x'$$

$$\underbrace{H' = \omega P_x'} = E$$

چون سامانه ایستاست ← هامیلتونی همان انرژی کل

$$\begin{cases}\dot{P}_x' = -\dfrac{\partial H'}{\partial x'} \\ \dot{x}' = \dfrac{\partial H'}{\partial P_x'}\end{cases} \longrightarrow \begin{cases}\dot{P}_x' = 0 \rightarrow \dfrac{d}{dt} P_x' = 0 \rightarrow P_x' = cte = \dfrac{E}{\omega} \\ \dot{x}' = \omega \rightarrow \dfrac{dx'}{dt} = \omega \rightarrow x' = \omega t + \varphi\end{cases}$$

$$\begin{cases} x(t) = \left(\dfrac{2E}{m\omega^2}\right)^{1/2} \sin(\omega t + \varphi) \\ P_x(t) = (2mE)^{1/2} \cos(\omega t + \varphi)\end{cases}$$

$f(q_i, P_i)$ or $g(q_i, P_i)$

کروشه پواسون: برای A و B که توابع دینامیکی هستند داریم

$A(q_1, q_2, q_3, P_1, P_2, P_3)$

$B(q_1, q_2, q_3, P_1, P_2, P_3)$

$$\{A, B\} = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial P_i} - \frac{\partial A}{\partial P_i}\frac{\partial B}{\partial q_i}$$

$$= \frac{\partial A}{\partial q_1}\frac{\partial B}{\partial P_1} - \frac{\partial A}{\partial P_1}\frac{\partial B}{\partial q_1} + \frac{\partial A}{\partial q_2}\frac{\partial B}{\partial P_2} - \frac{\partial A}{\partial P_2}\frac{\partial B}{\partial q_2} + \frac{\partial A}{\partial q_3}\frac{\partial B}{\partial P_3} - \frac{\partial A}{\partial P_3}\frac{\partial B}{\partial q_3}$$

$\{x, y, z, P_x, P_y, P_z\}$

مثال/ $A = x$ $B = x$

$$\{A, B\} = \{x, x\} = \frac{\partial A}{\partial x}\frac{\partial B}{\partial P_x} - \frac{\partial A}{\partial P_x}\frac{\partial B}{\partial x} + \frac{\partial A}{\partial y}\frac{\partial B}{\partial P_y} - \frac{\partial A}{\partial P_y}\frac{\partial B}{\partial y} + \frac{\partial A}{\partial z}\frac{\partial B}{\partial P_z} - \frac{\partial A}{\partial P_z}\frac{\partial B}{\partial z}$$

$$\underset{1}{\frac{\partial x}{\partial x}}\underset{0}{\cancel{\frac{\partial x}{\partial P_x}}} - \underset{0}{\cancel{\frac{\partial x}{\partial P_x}}}\underset{1}{\frac{\partial x}{\partial x}} + \underset{0}{\cancel{\frac{\partial x}{\partial y}}}\underset{0}{\cancel{\frac{\partial x}{\partial P_y}}} - \underset{0}{\cancel{\frac{\partial x}{\partial P_y}}}\underset{0}{\cancel{\frac{\partial x}{\partial y}}} + \underset{0}{\cancel{\frac{\partial x}{\partial z}}}\underset{0}{\cancel{\frac{\partial x}{\partial P_z}}} - \underset{0}{\cancel{\frac{\partial x}{\partial P_z}}}\underset{0}{\cancel{\frac{\partial x}{\partial z}}}$$

$$0 - 0 + 0 - 0 + 0 - 0 = 0$$

$$\{x, x\} = 0$$

مثال/ نشان دهید $\{y,y\}=0$, $\{z,z\}=0$, $\{x,y\}=0$ $\{y,z\}=0$

در حالت کلی $\{q_i, q_j\}=0$

مثال/ نشان دهید $\{P_x, P_x\}=0$ $\{P_x, P_y\}=0$

در حالت کلی $\{P_i, P_j\}=0$

مثال/ نشان دهید $\{x, P_x\}=1$ $\{y, P_y\}=1$ $\{z, P_z\}=1$

$\{x, P_y\}=0$ $\{x, P_z\}=0$

در حالت کلی $\{q_i, P_i\}=1$

مهم

$$\{q_i, P_j\}=\delta_{ij}$$

تمرین: تا جلسه آینده

$$\bar{L}=\bar{r}\times\bar{P}=\underbrace{(yP_z-zP_y)}_{L_x}\hat{i}+\underbrace{(zP_x-xP_z)}_{L_y}\hat{j}+\underbrace{(xP_y-yP_x)}_{L_z}\hat{k}$$

$\{L_x, L_y\}=?$ $\{L_y, L_z\}=?$ $\{L_z, L_x\}=?$

نکته

$$\{A,B\}=-\{B,A\}$$

استفاده کردیم - براکت در دیدگاه هامیلتون

سوال: یک تابع دینامیکی $G(q_1(t),q_2(t),q_3(t),P_1(t),P_2(t),P_3(t),t)=G(q_i,P_i,t)$ در چه صورتی ثابت حرکت است؟

می‌تواند صریحا تابع t باشد

if $\dfrac{dG}{dt}=0 \Rightarrow$ ثابت حرکت

$$\frac{dG}{dt}=\frac{\partial G}{\partial q_1}\frac{dq_1}{dt}+\frac{\partial G}{\partial q_2}\frac{dq_2}{dt}+\frac{\partial G}{\partial q_3}\frac{dq_3}{dt}+\frac{\partial G}{\partial P_1}\frac{dP_1}{dt}+\frac{\partial G}{\partial P_2}\frac{dP_2}{dt}+\frac{\partial G}{\partial P_3}\frac{dP_3}{dt}+\frac{\partial G}{\partial t}$$

$\dot{q}_1=\dfrac{\partial H}{\partial P_1}$ $\dot{q}_2=\dfrac{\partial H}{\partial P_2}$ $\dot{q}_3=\dfrac{\partial H}{\partial P_3}$ $\dot{P}_1=-\dfrac{\partial H}{\partial q_1}$ $\dot{P}_2=-\dfrac{\partial H}{\partial q_2}$ $\dot{P}_3=-\dfrac{\partial H}{\partial q_3}$

$$\frac{dG}{dt} = \frac{\partial G}{\partial q_1}\frac{\partial H}{\partial P_1} + \frac{\partial G}{\partial q_2}\frac{\partial H}{\partial P_2} + \frac{\partial G}{\partial q_3}\frac{\partial H}{\partial P_3} - \frac{\partial G}{\partial P_1}\frac{\partial H}{\partial q_1} - \frac{\partial G}{\partial P_2}\frac{\partial H}{\partial q_2} - \frac{\partial G}{\partial P_3}\frac{\partial H}{\partial q_3} + \frac{\partial G}{\partial t}$$

$$\frac{dG}{dt} = \left(\sum_{i=1}^{3} \frac{\partial G}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial P_i} - \frac{\partial G}{\partial P_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\right) + \frac{\partial G}{\partial t}$$

$$\boxed{\frac{dG}{dt} = \{G, H\} + \frac{\partial G}{\partial t}}$$

اگر G صریحاً تابع زمان نباشد: $G = G(q_i, P_i)$

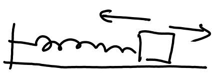
$$\frac{\partial G}{\partial t} = 0$$

$$\frac{dG}{dt} = \{G, H\} \longrightarrow \text{if } \{G, H\} = 0$$

$$\frac{dG}{dt} = 0$$

G ثابت حرکت است

مثال: نوسانگر یک بعدی را درنظر بگیرید



$$H = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

الف) نشان دهید P_x ثابت حرکت نیست:

$G = P_x$

$$\frac{dG}{dt} = \{P_x, H\} + \cancel{\frac{\partial G}{\partial t}}^{\,0}$$

$G = xP_x + \tilde{x}P_y$

حال G را برابر بگیرید

$$\frac{dP_x}{dt} = \{P_x, H\} = \left\{P_x, \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right\} = \frac{1}{2m}\underbrace{\{P_x, P_x^2\}}_{①\ =\ 0} + \underbrace{\frac{1}{2}m\omega^2\{P_x, x^2\}}_{②} \neq 0 \Rightarrow P_x \neq cte$$

① داریم $\{q_i, f(q_i)\} = \{P_i, f(P_i)\} = 0 \longrightarrow \{P_x, P_x^2\} = 0$

داریم: $\{A, BC\} = B\{A, C\} + \{A, B\}C$

یعنی $\{\underset{A}{P_x}, \underset{B}{P_x^2}\} = \frac{\partial P_x}{\partial x}\frac{\partial P_x^2}{\partial P_x} - \frac{\partial P_x}{\partial P_x}\frac{\partial P_x^2}{\partial x} + \frac{\partial P_x}{\partial y}\frac{\partial P_x^2}{\partial P_y} - \frac{\partial P_x}{\partial P_y}\frac{\partial P_x^2}{\partial y} + \frac{\partial P_x}{\partial z}\frac{\partial P_x^2}{\partial P_z} - \frac{\partial P_x}{\partial P_z}\frac{\partial P_x^2}{\partial z}$

$$\{P_x, P_x^2\} = 0$$

② داریم: $\{P_x, x^2\} = \{P_x, xx\} = x\{P_x, x\} + \{P_x, x\}x = x(-1) + (-1)x = -2x$

یعنی $\{P_x, x^2\} = \frac{\partial P_x}{\partial x}\frac{\partial x^2}{\partial P_x} - \underbrace{\frac{\partial P_x}{\partial P_x}}_{1}\underbrace{\frac{\partial x^2}{\partial x}}_{2x} + \cdots = -2x$

$-2x$

ب) نشان دهید انرژی کل برای نوسانگر فنری ثابت حرکت است

$$G = \text{انرژی کل} = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \rightarrow H$$

$$\frac{dG}{dt} = \{G, H\} + \cancel{\frac{\partial G}{\partial t}}^{\,0} = \left\{\frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 , H\right\} = \{H, H\}$$

but $\{A, A\} = 0$

$$\{H, H\} = 0$$

$$\frac{dG}{dt} = 0 \longrightarrow$$ انرژی کل (هامیلتونی) ثابت حرکت است

سه شنبه کوئیز (1.5 → 2) نمره حذفی

نکته: $A(q_i, p_i, t) \longrightarrow \{A, p_i\} = \frac{\partial A}{\partial q_i}$

لینک سخنرانی دکتر کاران ونا (دانشگاه هاروارد)

http://www.aparat.com/sut_ia/live

ریاضیات مورد استفاده در کوانتوم ← نوتاسیون دیراک ← ریاضیات در فضای ∞ بعدی (فضای هیلبرت) $N \to \infty$

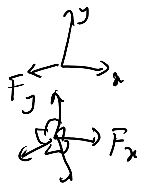
ریاضی در فضای N بعدی $(N = 2, 3, \ldots\ldots)$

→ فضای مختلط

← در کوانتوم: 1- نمایش حالت سیستم

2- تحول زمانی حالت سیستم

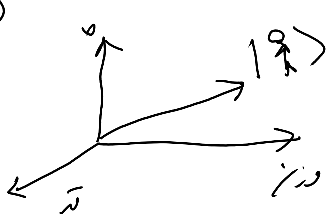
$\boxed{\cdot}$ الکترون داخل نشسته ← سوال؟



α کت $\longrightarrow |\alpha\rangle \longleftarrow$ حالت

$|\alpha, t\rangle$

اطلاعات را بیرون بکشیم $\longrightarrow$ کوانتوم علم احتمالات است



پایه‌ها و فضا؟

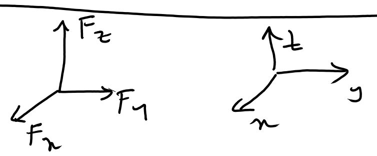
حالت

محیط

مثال از کمیت‌های مختلط در فیزیک:

$r = r' + i r''$ ضریب بازتاب

$\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon''$



مختصات کارتزین
مختصات کروی
مختصات استوانه‌ای

حالت خاص: فضای سه بعدی حقیقی

① پایه‌های فضا $\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}$

← متعامد $\hat{i} \perp \hat{j}, \ \hat{j} \perp \hat{k}, \ \hat{k} \perp \hat{i}$ ← $\hat{i}\cdot\hat{j} = \hat{j}\cdot\hat{k} = \hat{k}\cdot\hat{i} = 0$

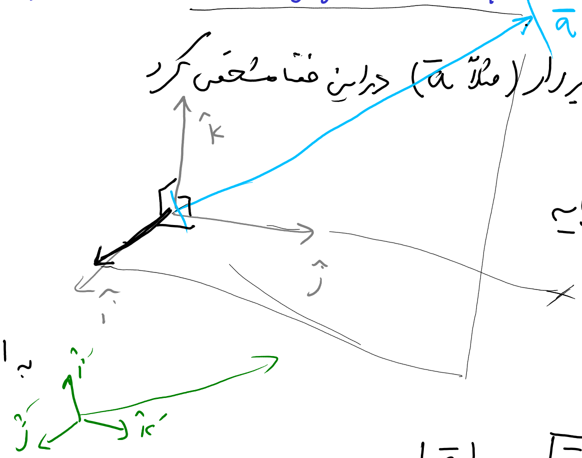
← نرمالیزه $\hat{i}\cdot\hat{i} = \hat{j}\cdot\hat{j} = \hat{k}\cdot\hat{k} = 1$ ← طول پایه‌های فضا واحد است

② حالت یک سیستم را می‌توان با یک بردار (مثلاً $\bar{a}$) در این فضا مشخص کرد

بسط بردار حالت در این پایه

$$\bar{a} = a_x \hat{i} + a_y \hat{j} + a_z \hat{k}$$

مؤلفه‌های بردار ← به انتخاب پایه وابسته ، حقیقی



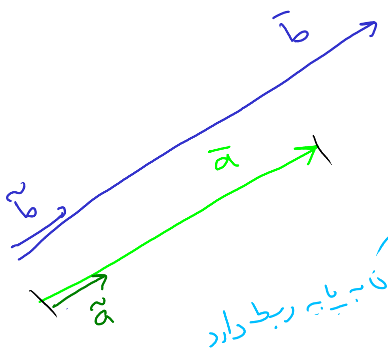
③ طول بردار (نرم بردار)

$$|\bar{a}| = \sqrt{\bar{a}\cdot\bar{a}} = \sqrt{a_x^2 + a_y^2 + a_z^2}$$

← عدد حقیقی

← مستقل از انتخاب پایه‌هاست

④ جهت بردار ← بردار یکه **



$$\tilde{a} = \frac{\bar{a}}{|\bar{a}|} = \frac{\bar{a}}{\sqrt{a_x^2 + a_y^2 + a_z^2}}$$

← نمایش آن به پایه ربط دارد

$|\tilde{a}| = 1$

⑤ نمایش ستونی بردار

$$\bar{a} = \begin{pmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}$$

⑥ نمایش سطری بردارها

$$\bar{a} = (a_x \ a_y \ a_z) \equiv (a_1 \ a_2 \ a_3)$$

⑦ نمایش استاندارد پایه‌ها / فضا
بسط پایه‌ها فقط در همان فضا

$$\hat{i} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{j} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{k} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{i} = (1 \ 0 \ 0), \quad \hat{j} = (0 \ 1 \ 0), \quad \hat{k} = (0 \ 0 \ 1)$$

* پایه‌ها حقیقی‌اند

⑧ ضرب نقطه‌ای (هم راستایی، تصویر کردن)

$$\bar{a}\cdot\bar{b} = a_1b_1 + a_2b_2 + a_3b_3 = |\bar{a}||\bar{b}|\cos\theta = (a_1 \;\; a_2 \;\; a_3)\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}$$

حاصل اسکالر ← عدد حقیقی

مستقل از پایه‌ها ←

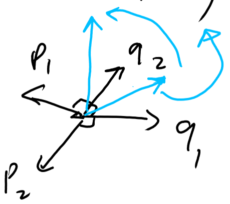
جابجا پذیر ←

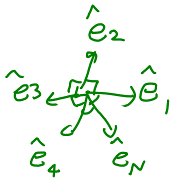
$$\bar{a}\cdot\bar{b} = \bar{b}\cdot\bar{a}$$

فضای N بعدی حقیقی

$(x \;\; y \;\; z \;\; t)$

(q_1, q_2, p_1, p_2)





① پایه‌های فضا (N تا)

$$\hat{e}_i \cdot \hat{e}_j = \delta_{ij}$$ ← که متعامد بهنجارند

② بسط بردار حالت در این فضا

مؤلفه‌ها حقیقی

$$\bar{a} = a_1\hat{e}_1 + a_2\hat{e}_2 + a_3\hat{e}_3 + \cdots a_N\hat{e}_N$$

* نمایش $\bar{a}$ ← به انتخاب پایه بستگی دارد

③ نمایش سطری و ستونی

$$\bar{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} \qquad \bar{a} = (a_1 \;\; a_2 \;\; \cdots \;\; a_N)$$

④ پایه‌ها استثنا ندارد

$$\hat{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ \cdot \\ \vdots \\ \cdot \end{pmatrix} \qquad \hat{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \qquad \cdots\cdots \qquad \hat{e}_N = \begin{pmatrix} 0 \\ \cdot \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{e}_1 = (1 \;\; \cdots \;\;) \qquad \cdots\cdots \qquad \hat{e}_N = (0 \;\; 0 \;\; \cdots \;\; 1)$$

⑤ ضرب نقطه‌ای

$$\bar{a}\cdot\bar{b} = (a_1 \;\; a_2 \;\; \cdots \;\; a_N)\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix}$$

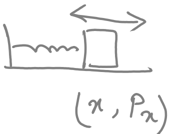
عدد حقیقی ←

مستقل از پایه ←

جابجا پذیر ←

$$\bar{a}\cdot\bar{b} = \bar{b}\cdot\bar{a}$$

کوانتوم: نوتاسیون دیراک



بستگی به سیستم دارد ← بعد فضا

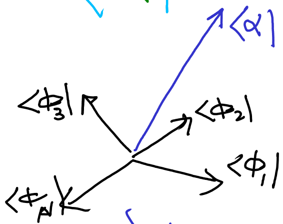
هیلبرت

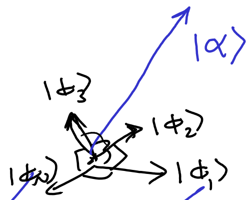
$$2 \leq N \leq \infty$$

فضای N بعدی مختلط

فضای برا { هم‌یوغ / همزاد فضای کت {

$\langle \alpha |$ $\qquad\qquad$ $| \alpha \rangle$





حالت: بردار در فضای برا {

حالت سیستم: کت در فضای کت {

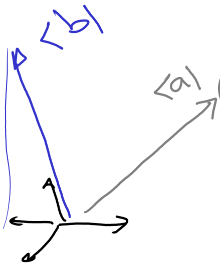
① پایه: نرمالیزه و متعامد

$\langle \phi_1 |, \langle \phi_2 | \cdots \langle \phi_N |$ پایه

$| \phi_1 \rangle, | \phi_2 \rangle, \cdots | \phi_N \rangle$ پایه‌ها

برا $\qquad$ کت

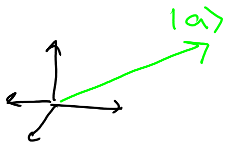
مؤلفه‌ها { در حالت کلی مختلط



$$\langle a | = (a_1^* \;\; a_2^* \;\; a_N^*)$$

هم‌یوغ

$$\underline{\underline{|a\rangle}} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}$$



بسط در فضای براها: برا را می‌توان در فضای براها بسط داد

بسط در فضای کت‌ها: کت را می‌توان در فضای کت‌ها بسط داد

$$\langle b | = b_1 \langle \phi_1 | + b_2 \langle \phi_2 | \cdots b_N \langle \phi_N |$$

مختلط

این بسط هم به انتخاب پایه وابسته است

$$| a \rangle = a_1 | \phi_1 \rangle + a_2 | \phi_2 \rangle \cdots + a_N | \phi_N \rangle$$

مختلط هستند

دامنه - تصویر - ضرایب بسط

این بسط به انتخاب پایه وابسته است

کت و برا دگر یکدیگرند

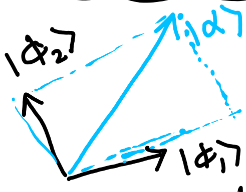
$$| a \rangle^{\dagger} = \langle a | \qquad \text{or} \qquad \langle a |^{\dagger} = | a \rangle$$

مثال ①

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 2 \\ 3-4i \\ 2i \end{pmatrix} \longrightarrow \langle\alpha| = \begin{pmatrix} 2 & 3+4i & -2i \end{pmatrix}$$

مثال ②: فرض کنید $|\phi_i\rangle$ ها پایه‌های فضا باشند

کت حالت $|\alpha\rangle$ در این پایه به صورت زیر است



بسط کت $|\alpha\rangle$ در پایه $|\phi_i\rangle$ ها ←

$$|\alpha\rangle = 2i\,|\phi_1\rangle + (3-4i)\,|\phi_2\rangle$$

$$\langle\alpha| = ?$$

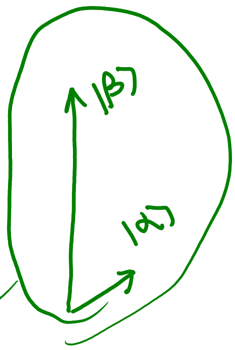
$$\langle\alpha| = -2i\,\langle\phi_1| + (3+4i)\,\langle\phi_2|$$

مثال:

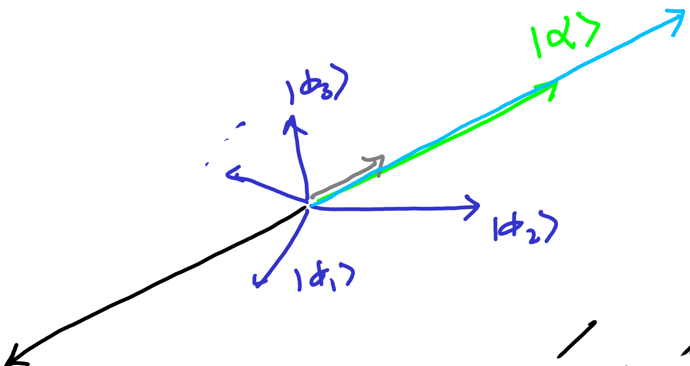
$$\langle\beta| = \begin{pmatrix} 3 & -i & 14 \end{pmatrix} \Rightarrow |\beta\rangle = ?$$

$$|\beta\rangle = \begin{pmatrix} 3 \\ i \\ 14 \end{pmatrix}$$

نکته: در کوانتوم حالت با کت در فضای کت‌ها یا بردار در فضای برداری



در حالت مختلف



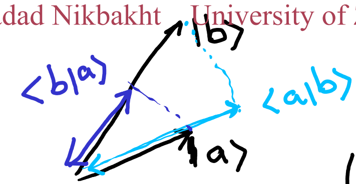
اگر $|\alpha\rangle$ یک حالت باشد $\Rightarrow c\,|\alpha\rangle$ هم در همان حالت است $\Leftrightarrow$ حالت جدیدی نیست ← راستای کت مهم است

عدد مختلط

$$c\,|\alpha\rangle = |\alpha\rangle\, c$$

مثال حالت‌های یکسان

$$|\alpha\rangle,\quad 2|\alpha\rangle,\quad |\alpha\rangle 15,\quad -3|\alpha\rangle,\quad 2i\,|\alpha\rangle,\quad (3+4i)\,|\alpha\rangle$$



ضرب نقطه‌ای (براکت)

$$\langle a|b\rangle = (a_1^* \;\; a_2^* \;\cdots\; a_N^*)\begin{pmatrix} b_1\\ b_2\\ \vdots\\ b_N\end{pmatrix} = a_1^*b_1 + a_2^*b_2 + \cdots + a_N^*b_N = \sum_{i=1}^{N} a_i^* b_i$$

براکت a, b ← تعریف $|b\rangle$ بر اساس $|a\rangle$

عدد و در حالت کلی مختلط است

** جابجایی‌پذیر نیست

$$\langle b|a\rangle \neq \langle a|b\rangle$$

تعریف a بر اساس b

$$\langle a|b\rangle^* = \langle b|a\rangle$$

$|a\rangle\langle b|$ بعداً خواهیم دید // ما حالا بحث نکنیم

مثال،

$$|\beta\rangle = \begin{pmatrix} 1+i\\ 3\\ 2i\end{pmatrix} \quad \text{و} \quad |\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 2\\ -i\\ 1\end{pmatrix}$$

حاصل عبارت‌های زیر را بیابید

$\langle\alpha|\beta\rangle = ?$ $\quad \langle\beta|\alpha\rangle = ?$ $\quad \langle\alpha|\alpha\rangle = ?$ $\quad \langle\beta|\beta\rangle = ?$

$$\langle\alpha|\beta\rangle = (2 \;\; i \;\; 1)\begin{pmatrix} 1+i\\ 3\\ 2i\end{pmatrix} = 2(1+i) + i3 + 1\times 2i = 2+2i+3i+2i = 2+7i$$

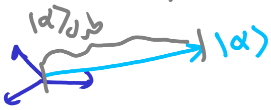
تعریف $|\beta\rangle$ بر اساس $|\alpha\rangle$

$$\langle\beta|\alpha\rangle = (1-i \;\; 3 \;\; -2i)\begin{pmatrix} 2\\ -i\\ 1\end{pmatrix} = 2-2i-3i-2i = 2-7i$$

تعریف $|\alpha\rangle$ بر اساس $|\beta\rangle$

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^*$$

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = (\alpha \text{ طول})^2 = (2 \;\; i \;\; 1)\begin{pmatrix} 2\\ -i\\ 1\end{pmatrix} = 4+1+1 = 6 \rightarrow \text{طول} = \sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle} = \sqrt{6}$$



$$\langle\beta|\beta\rangle = (\beta \text{ طول})^2 = (1-i \;\; 3 \;\; -2i)\begin{pmatrix} 1+i\\ 3\\ 2i\end{pmatrix} = 1+i-i+1+9+4 = 15$$

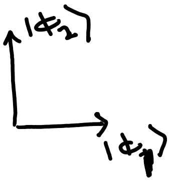
$$\rightarrow \text{طول} = \sqrt{15}$$

نکته: دو حالت $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$ که ضرب نقطه‌ای آنها صفر شود ⇐ دو حالت متعامد

$$\text{if} \quad \langle\alpha|\beta\rangle = 0 \quad \begin{cases} |\alpha\rangle \perp |\beta\rangle \\ |\alpha\rangle = 0 \\ |\beta\rangle = 0 \end{cases}$$

مثال/ نشان دهید دو کت زیر بر هم عمودند

$$|\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}, \quad |\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$$



$$\langle\phi_1|\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 \quad 1)\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix} = \frac{1}{2}(1-1) = 0 \longrightarrow |\phi_1\rangle \perp |\phi_2\rangle$$

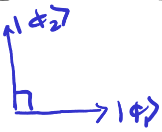
$$\langle\phi_2|\phi_1\rangle = \langle\phi_1|\phi_2\rangle^* = 0^* = 0$$

در ادامه نشان دهید که طول این کت‌ها واحد است

$$\sqrt{\langle\phi_1|\phi_1\rangle} = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{2}}(1 \quad 1)\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}} = \sqrt{\frac{1}{2}(1+1)} = \sqrt{1} = 1$$

$$\sqrt{\langle\phi_2|\phi_2\rangle} = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{2}}(1 \quad -1)\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}} = \sqrt{\frac{1}{2}(1+1)} = \sqrt{1} = 1$$

$$\langle\phi_i|\phi_j\rangle = \delta_{ij}$$



مثال/ نشان دهید که کت‌ها

$$|\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\i\end{pmatrix}, \quad |\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-i\end{pmatrix}$$

متعامد و نرمالیزه اند.

$$\langle\phi_1|\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 \quad -i)\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-i\end{pmatrix} = \frac{1}{2}(1-1) = 0 \longrightarrow \langle\phi_2|\phi_1\rangle = 0$$

$$\langle\phi_1|\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 \quad -i)\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\i\end{pmatrix} = \frac{1}{2}(1+1) = 1$$

$$\langle\phi_2|\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 \quad i)\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-i\end{pmatrix} = 1$$

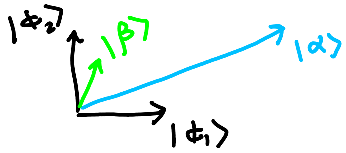
$$\langle\phi_i|\phi_j\rangle = \delta_{ij}$$

مثال/ که $\{|\phi_i\rangle\}$ پایه‌ها ست

$$|\alpha\rangle = 2|\phi_1\rangle + 3i|\phi_2\rangle \rightarrow \langle\alpha| = 2\langle\phi_1| - 3i\langle\phi_2|$$

$$|\beta\rangle = |\phi_1\rangle + (1+i)|\phi_2\rangle$$

فرض: $|\phi_2\rangle^\dagger = \langle\phi_2|$



حاصل عبارات زیر؟

$$\langle\alpha|\beta\rangle, \quad \langle\beta|\alpha\rangle, \quad \langle\alpha|\alpha\rangle, \quad \langle\beta|\beta\rangle$$

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \left[2\langle\phi_1| - 3i\langle\phi_2|\right]\left[|\phi_1\rangle + (1+i)|\phi_2\rangle\right]$$

$$= 2\underbrace{\langle\phi_1|\phi_1\rangle}_{1} + 2(1+i)\underbrace{\langle\phi_1|\phi_2\rangle}_{0} - 3i\underbrace{\langle\phi_2|\phi_1\rangle}_{0} - 3i(1+i)\underbrace{\langle\phi_2|\phi_2\rangle}_{1}$$

$$= 2 + 0 + 0 - 3i + 3 = \boxed{5 - 3i}$$

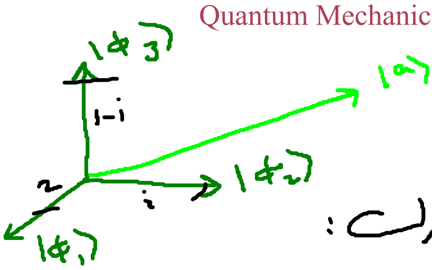
$$\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^* = (5-3i)^* = 5+3i$$

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = \left[2\langle\phi_1| - 3i\langle\phi_2|\right]\left[2|\phi_1\rangle + 3i|\phi_2\rangle\right] = 2\times2\langle\phi_1|\phi_1\rangle - 3i\times3i\langle\phi_2|\phi_2\rangle$$

$$= 4 + 9 = 13$$

$$\langle\beta|\beta\rangle = \left[\langle\phi_1| + (1-i)\langle\phi_2|\right]\left[|\phi_1\rangle + (1+i)|\phi_2\rangle\right] = \langle\phi_1|\phi_1\rangle + 0 + 0 + (1-i)(1+i)\langle\phi_2|\phi_2\rangle$$

$$= 1 + 2 = 3$$



مثال/ یک حالت سامانه به صورت زیر است.

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} 2 \\ i \\ 1-i \end{pmatrix} \begin{matrix} \rightarrow a_1 \\ \rightarrow a_2 \\ \rightarrow a_3 \end{matrix}$$

طول کت چیست:

$$\sqrt{\langle a|a\rangle} = \sqrt{(2 \quad -i \quad 1+i)\begin{pmatrix} 2 \\ i \\ 1-i \end{pmatrix}} = \sqrt{a_1 a_1^* + a_2 a_2^* + a_3 a_3^*} = \sqrt{4+1+2} = \sqrt{7}$$

نرمالیزاسیون: با تقسیم کت به طولش، کت نرمالیزه خواهیم داشت

$$|\alpha\rangle \longrightarrow \frac{|\alpha\rangle}{\sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}} = |\tilde{\alpha}\rangle$$

نرمالیزه شده

مثال/ یک حالت را نرمالیزه کنید

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} : \quad \text{طول} = \sqrt{1+1} = \sqrt{2}$$

$$|\alpha\rangle \rightarrow \frac{|\alpha\rangle}{\sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}}$$

$$|\alpha\rangle = \frac{\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} : \quad \text{طول} = \sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle} = \sqrt{1+1} = \sqrt{2}$$

نرمالیزه شده $\rightarrow |\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 3i \\ 2 \\ 1-i \end{pmatrix} \quad \text{طول} = \sqrt{9+4+2} = \sqrt{15}$$

نرمالیزه شده $\rightarrow |\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{15}}\begin{pmatrix} 3i \\ 2 \\ 1-i \end{pmatrix}$

---

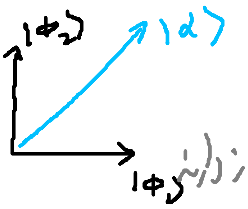
(۲۵)

یک حالت سامانه به صورت زیر داده شده است

$$|\alpha\rangle = \frac{3i}{5}|\phi_1\rangle + a|\phi_2\rangle$$

a را به گونه‌ای بیابید که کت نرمالیزه باشد.

$a = ?$



$a = \frac{4}{5}$ $\quad a = -\frac{4}{5}$ $\quad a = \frac{4i}{5}$ $\quad a = -\frac{4i}{5}$

هر ۴ تا جواب با هم اختلاف فاز دارند.

$$\left(\frac{3i}{5}\right)\left(-\frac{3i}{5}\right) + a a^* = 1 \rightarrow \frac{9}{25} + |a|^2 = 1 \Rightarrow |a|^2 = 1 - \frac{9}{25}$$

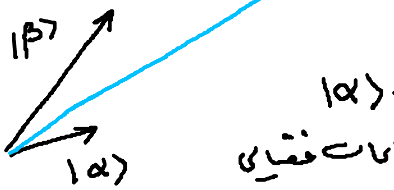
$$|a|^2 = 16/25 \rightarrow a = 4/5, \; -4/5, \; 4i/5, \; -4i/5$$

$$|\alpha\rangle = \frac{3i}{5}|\phi_1\rangle + \frac{4}{5}|\phi_2\rangle$$

دوتا برا

$$\langle\alpha| + \langle\beta| = \langle\gamma|$$

$$\boxed{\langle\gamma| = |\gamma\rangle^\dagger}$$

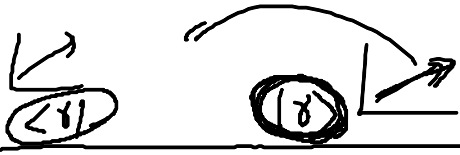


جمع و تفاضل کت

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle = |\alpha+\beta\rangle$$

اطلاعات فضایی
اطلاعات اسپینی

زیرفضای آن کت‌ها اشتراک

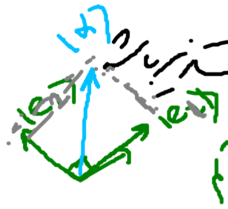


$$|\alpha\rangle - |\beta\rangle = |\eta\rangle = |\alpha-\beta\rangle$$

1.5

کت حالت سامانه در پایه استاندارد $|e_1\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$, $|e_2\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ به صورت زیر

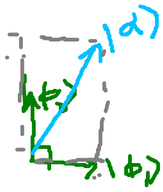
پایه e



$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix}2+i\\3-4i\end{pmatrix} = (2+i)|e_1\rangle + (3-4i)|e_2\rangle$$

تصویر $|\alpha\rangle$ بر $|e_1\rangle$

این کت در پایه زیر چگونه است



پایه جدید

$$|\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\i\end{pmatrix}, \quad |\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-i\end{pmatrix}$$

$i \quad j$

j

$$|\alpha\rangle = \;?\;|\phi_1\rangle + \;?\;|\phi_2\rangle$$

تصویر $|\alpha\rangle$ بر $|e_1\rangle$

$$\langle e_1|\alpha\rangle = (1 \;\; 0)\begin{pmatrix}2+i\\3-4i\end{pmatrix} = 2+i$$

تصویر $|\alpha\rangle$ بر $|\phi_1\rangle$

$$\langle\phi_1|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 \;\; -i)\begin{pmatrix}2+i\\3-4i\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(2+i-3i-4)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(-2-2i)$$

تصویر $|\alpha\rangle$ بر $|\phi_2\rangle$

$$\langle\phi_2|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 \;\; i)\begin{pmatrix}2+i\\3-4i\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(2+i+3i+4) = \frac{1}{\sqrt{2}}(6+4i)$$

$$|\alpha\rangle = -\frac{(2+2i)}{\sqrt{2}}|\phi_1\rangle + \frac{(6+4i)}{\sqrt{2}}|\phi_2\rangle$$

تمرین تحویلی :

1) کت های زیر را نرمالیزه کنید

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ i \end{pmatrix} \qquad |\beta\rangle = \begin{pmatrix} 3 \\ 4i \end{pmatrix} \qquad |\gamma\rangle = \begin{pmatrix} 2+i \\ 3 \end{pmatrix}$$

2) حالت های $|\alpha\rangle$ و $|\beta\rangle$ به صورت زیر داده شده است

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 2 \\ -3i \end{pmatrix} \qquad |\beta\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

الف) $\langle\alpha|\beta\rangle$ ب) $\langle\beta|\alpha\rangle$ ج) $\langle\alpha|\alpha\rangle$ د) $\langle\beta|\beta\rangle$

3) کت حالت یک سامانه به صورت زیر است

$$|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad |\beta\rangle = \begin{pmatrix} a \\ 3 \end{pmatrix}$$

a را به گونه ای بیابید که این حالت متعامد باشد

4) کت $|\alpha\rangle$ در پایه استاندارد به صورت زیر است:

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 3 \\ -4i \end{pmatrix}$$

این کت را در پایه جدید $|\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ و $|\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ بیابید.

مثال/ کت $|b\rangle$ که به صورت زیر است:

$$|b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} i \\ i \end{pmatrix}$$

علاوه بر این کت $|a\rangle$ به صورت زیر است

$$|a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$|b\rangle = i\,|a\rangle$$

عدد

$$|b\rangle = c\,|a\rangle$$

$$|b\rangle = e^{i\pi/2}\,|a\rangle$$

$$\sqrt{\langle b|b\rangle} = \sqrt{\langle a|(-i)(i)|a\rangle} = \sqrt{\langle a|a\rangle}$$

* $|b\rangle$ و $|a\rangle$ عملاً نمایانگر یک حالت کوانتومی اند
* $|b\rangle$ و $|a\rangle$ اختلاف فاز دارند
* $|b\rangle$ و $|a\rangle$ طول یکسان دارند
* دو کت که باهم اختلاف فاز دارند

عملگر در کوانتوم ← هر تابع دینامیکی را می‌توان از کلاسیک به کوانتوم تبدیل کرد و عملگر به آن نسبت داد

$f(q_i, p_i)$

مثال:

کمیت‌های فیزیکی / مشاهده‌پذیر فیزیکی

$$x \xrightarrow{\text{به کوانتوم}} \hat{x}$$

$$L_z \qquad \hat{L}_z$$

$$p_x \qquad \hat{p}_x$$

$$\frac{p_x^2}{2m} \qquad \frac{\hat{p}_x^2}{2m}$$

$$\frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \qquad \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2$$

$$L = L_x\hat{i} + L_y\hat{j} + L_z\hat{k} \qquad \hat{L} = \hat{L}_x\hat{i} + \hat{L}_y\hat{j} + \hat{L}_z\hat{k}$$

مشاهده‌پذیر فیزیکی

مشاهده‌پذیر فیزیکی نیست

$$x \sin p_x \longrightarrow \hat{x}\sin\hat{p}_x \longrightarrow \text{عملگر ریاضی در کوانتوم}$$

$$xy^3 \longrightarrow \hat{x}\hat{y}^3$$

عملگرها ← شکل دیفرانسیلی دارند — مثال $i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

← شکل ماتریسی دارند — مثال $\begin{bmatrix} \frac{\hbar\omega}{2} & 0 \\ 0 & \frac{3\hbar\omega}{2} \end{bmatrix}$

← هم شکل ماتریسی دارند هم شکل دیفرانسیلی — مثال $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix}$

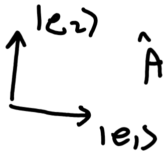
* ابتدا عملگرها با شکل ماتریسی را بررسی می‌کنیم سپس (بعداً) به عملگرها با شکل دیفرانسیلی می‌پردازیم

عملگری به نام A را با $\hat{A}$ نمایش می‌دهیم

$$\hat{A} \equiv \hat{A}_{N\times N} = \begin{bmatrix} \circ & \circ & \circ & \circ \\ \circ & & & \\ \vdots & & & \\ \circ & & \circ & \circ \end{bmatrix}_{N\times N}$$

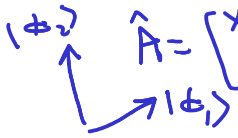
N بعد فضا

N^2 مؤلفه دارد

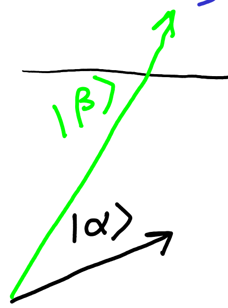


$\hat A = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$

* نمایش ماتریسی عملگر به انتخاب پایه وابسته است



$\hat A = \begin{bmatrix} x & x \\ x & x \end{bmatrix}$



چرا عملگر مهم است: می‌تواند روی یک حالت اثر کند

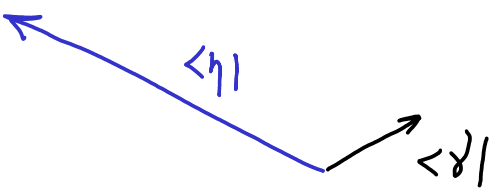
$$\hat A|\alpha\rangle = |\beta\rangle$$

← حالت جدید { می‌تواند امتداد متفاوت از $|\alpha\rangle$ داشته باشد
می‌تواند طول متفاوت از $|\alpha\rangle$ داشته باشد

$\cancel{|\alpha\rangle\hat A}$

* عملگر از سمت چپ روی کت اثر می‌کند

عملگر می‌تواند روی برا اثر کند:



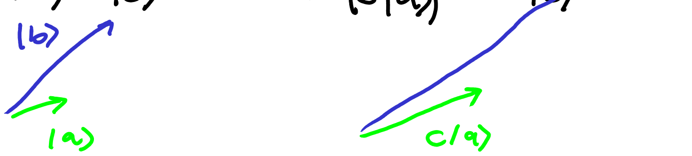
$$\langle\gamma|\hat A = \langle\eta|$$

← عملگر از سمت راست روی برا اثر می‌کند

در کوانتوم با عملگرهای خطی سروکار داریم — Linear operator

ویژگی‌ها

if $\hat A|a\rangle = |b\rangle \longrightarrow \hat A(c|a\rangle) = c|b\rangle$



به طور خلاصه

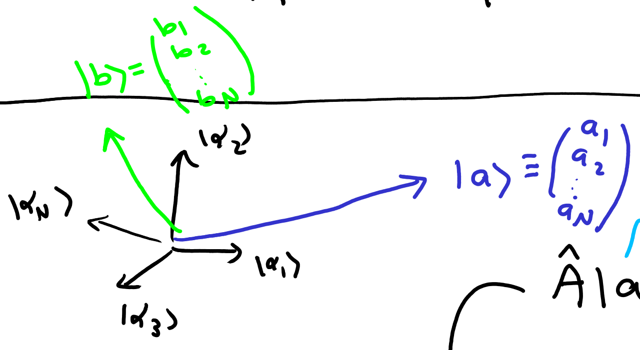
$$\hat A(\alpha|a\rangle + \beta|b\rangle) = \alpha\hat A|a\rangle + \beta\hat A|b\rangle$$

if $\begin{cases} \hat A|a\rangle = |b\rangle \\ \hat A|c\rangle = |d\rangle \end{cases} \longrightarrow \hat A(|a\rangle + |c\rangle) = (|b\rangle + |d\rangle)$

درنمایش ماتریسی و بردار به جای ضرب عملگر در کت

$$\hat A|a\rangle = |b\rangle \equiv \underbrace{\begin{bmatrix} \circ & \circ & \circ & \circ \\ \vdots & & & \\ \cdot & \cdots & & \circ \end{bmatrix}}_{N\times N} \underbrace{\begin{bmatrix} \circ \\ \circ \\ \vdots \\ \circ \end{bmatrix}}_{N\times 1} = \underbrace{\begin{bmatrix} \circ \\ \circ \\ \vdots \end{bmatrix}}_{N\times 1}$$

$$\langle c|\hat{A} = \langle d| \quad \equiv \quad [0\,0\,\cdots\,0]_{1\times N}\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ & \ddots & \\ & 0 & 0\end{bmatrix}_{N\times N} = [0\,0\,0\cdots]_{1\times N}$$



اثبات اینکه اثر هر ریاکت معادل ضرب ماتریس در بردار

$$\hat{A}|a\rangle = \hat{A}\left(a_1|\alpha_1\rangle + a_2|\alpha_2\rangle + a_3|\alpha_3\rangle + \cdots + a_N|\alpha_N\rangle\right)$$

$$= a_1\hat{A}|\alpha_1\rangle + a_2\hat{A}|\alpha_2\rangle + a_3\hat{A}|\alpha_3\rangle \cdots + a_N\hat{A}|\alpha_N\rangle$$

$|b\rangle$

$$= \sum_i a_i \hat{A}|\alpha_i\rangle$$

$\langle\alpha_j|\times$

$$b_j = \langle\alpha_j|b\rangle = \langle\alpha_j|\hat{A}|a\rangle = \langle\alpha_j|\sum_i a_i\hat{A}|\alpha_i\rangle = \sum_i a_i\langle\alpha_j|\hat{A}|\alpha_i\rangle$$

$$= \sum_i A_{ji}\,a_i$$

$$\begin{cases} b_1 = A_{11}a_1 + A_{12}a_2 + A_{13}a_3 + \cdots + A_{1N}a_N \\ b_2 = A_{21}a_1 + A_{22}a_2 + A_{23}a_3 + \cdots + A_{2N}a_N \\ \vdots \\ b_N = A_{N1}a_1 + A_{N2}a_2 + \cdots + A_{NN}a_N \end{cases}$$

2

$$\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2N} \\ \vdots & & & \\ A_{N1} & \cdots & & A_{NN} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{bmatrix}$$

عناصر ماتریس

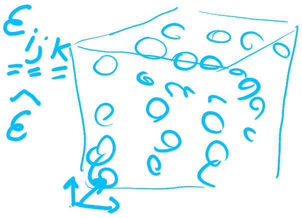
$$A_{ij} = \langle\alpha_i|\hat{A}|\alpha_j\rangle$$

معادله عمر و معادلات $\hat{}$ ندارد

مثلا: $A_{11} = \langle\alpha_1|\hat{A}|\alpha_1\rangle$

$A_{12} = \langle\alpha_1|\hat{A}|\alpha_2\rangle$

تانسور لویچیتا $\varepsilon_{ijk} \equiv \hat{\varepsilon}$



تانسور 2 A_{ij} $\begin{array}{c} j\uparrow \end{array}\begin{bmatrix} \circ & \circ & \circ \\ \circ & \circ & \circ \\ \circ & \circ & \circ \end{bmatrix}_{\overrightarrow{i}}$

تانسور 1 a_i $\begin{array}{c} i\uparrow \end{array}\begin{bmatrix} \circ \\ \circ \\ \circ \end{bmatrix}$

نمایش عملگرهای ماتریسی به صورت تصویرگری

مثال: فرض نمایش ماتریسی عملگر $\hat{A}$ در پایه استاندارد $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle\}$ $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ به شکل زیر باشد

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 5 & -i \\ 2i+1 & 3 \end{pmatrix} \qquad A_{11}=5 \qquad A_{12}=-i \qquad A_{21}=2i+1 \qquad A_{22}=3$$

عملگر تصویرگر

$$\hat{A} = 5|e_1\rangle\langle e_1| - i|e_1\rangle\langle e_2| + (2i+1)|e_2\rangle\langle e_1| + 3|e_2\rangle\langle e_2|$$

تست

$$\hat{A} = 5\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}(1\ \ 0) - i\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}(0\ \ 1) + (2i+1)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}(1\ \ 0) + 3\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}(0\ \ 1)$$

$$= 5\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 0\end{pmatrix} - i\begin{pmatrix}0 & 1\\0 & 0\end{pmatrix} + (2i+1)\begin{pmatrix}0 & 0\\1 & 0\end{pmatrix} + 3\begin{pmatrix}0 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix}5 & 0\\0 & 0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0 & -i\\0 & 0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0 & 0\\2i+1 & 0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0 & 0\\0 & 3\end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix}5 & -i\\2i+1 & 3\end{pmatrix}$$

تمرین: $\langle e_1|\hat{A}|e_2\rangle = A_{12} = (1\ \ 0)\begin{pmatrix}5 & -i\\2i+1 & 3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = (1\ \ 0)\begin{pmatrix}5\times 0 - i\times 1\\(2i+1)\times 0 + 3\times 1\end{pmatrix}$

$$= (1\ \ 0)\begin{pmatrix}-i\\3\end{pmatrix} = -i$$

راه دوم $\langle e_1|\hat{A}|e_2\rangle = \langle e_1|\big(5|e_1\rangle\langle e_1| - i|e_1\rangle\langle e_2| + (2i+1)|e_2\rangle\langle e_1| + 3|e_2\rangle\langle e_2|\big)|e_2\rangle$

$$5\langle e_1|e_1\rangle\underbrace{\langle e_1|e_2\rangle}_{0} - i\underbrace{\langle e_1|e_1\rangle}_{1}\underbrace{\langle e_2|e_2\rangle}_{1} + (2i+1)\underbrace{\langle e_1|e_2\rangle}_{0}\langle e_1|e_2\rangle + 3\underbrace{\langle e_1|e_2\rangle}_{0}\langle e_2|e_2\rangle = -i$$

اطلاعات تکمیلی درمورد عملگرها { (عملگرهای خطی)

← عملگرهای برابر کار یکسان انجام دهند

$$\hat{A}|a\rangle = \hat{B}|a\rangle \;\rightarrow\; \hat{A} = \hat{B} \longleftrightarrow A_{ij} = B_{ij}$$

هر دلخواه

← شرکت پذیری

$$\hat{A}(\hat{B}\hat{C})|a\rangle = (\hat{A}\hat{B})(\hat{C}|a\rangle) = \hat{A}\hat{B}\hat{C}|a\rangle$$

← توزیع پذیری

$$\hat{A}(\hat{B}+\hat{C})|a\rangle = (\hat{A}\hat{B}+\hat{A}\hat{C})|a\rangle = \hat{A}\hat{B}|a\rangle + \hat{A}\hat{C}|a\rangle$$

$$\hat{A}\hat{B}\hat{C} \neq \hat{A}\hat{C}\hat{B}$$

اجازه نداریم ترتیب عملگرها را تغییر دهیم

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A} \quad \text{or} \quad \hat{A}\hat{B}|a\rangle \neq \hat{B}\hat{A}|a\rangle$$

جابجایی ← ▲

استثناء ← عملگرهای جابجا پذیر

← توان

$$\hat{A}^m \hat{A}^n = \hat{A}^{m+n}$$

← چند عملگر خاص

← عملگر پوچ

$$\hat{A}|a\rangle = 0 \rightarrow \hat{A} = \hat{0} \qquad \text{Null operator}$$

برای هر کت دلخواه درفضا

← identity operator (عملگر واحد، عملگر همانی)

$$\hat{A}|a\rangle = |a\rangle$$

$$\hat{I} \;\text{or}\; \hat{1}$$

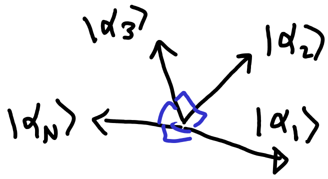
نمایش آن ربطی به انتخاب پایه ندارد

$$N=2: \quad \hat{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$N=3: \quad \hat{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\vdots$$

$$N: \quad \hat{I} = \begin{bmatrix} 1 & & \emptyset \\ & \ddots & \\ 0 & & 1 \end{bmatrix}_{N\times N}$$



* رابطه کاملیت

$\{|\alpha_i\rangle\}$ پایه‌ها/فضا

$$\text{if } \langle\alpha_i|\alpha_j\rangle = \delta_{ij} \longrightarrow \hat{I} = \sum_{i=1}^{N} |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$$

$$\hat{I} = |\alpha_1\rangle\langle\alpha_1| + |\alpha_2\rangle\langle\alpha_2| + \cdots + |\alpha_N\rangle\langle\alpha_N|$$

مثال/ در سامانه کوانتومی با پایه‌های $|\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$ ، $|\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$ رابطه کاملیت را تحقیق کنید

$$\hat{I} = |\phi_1\rangle\langle\phi_1| + |\phi_2\rangle\langle\phi_2| = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & -1\end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

مثال / $\hat{I}|a\rangle = |a\rangle$, $|a\rangle = \begin{pmatrix} 2 \\ 3i \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 \\ 3i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 3i \end{pmatrix}$

$\hat{A}\hat{B} \longrightarrow \hat{A}\hat{I}\hat{B}$

← وارون عملگر $\hat{A} \longrightarrow \hat{A}^{-1}$ (اثر عملگر $\hat{A}$ را خنثی می‌کند)

$\hat{A}|a\rangle = |b\rangle$ ② $\longrightarrow$ ① $\hat{A}^{-1}|b\rangle = |a\rangle$

نکته: ممکن است عملگر وارون نداشته باشد

نکته : $\hat{A}$ ① :

$$\hat{A}\hat{A}^{-1}|b\rangle = \hat{A}|a\rangle = |b\rangle$$

$$\hat{A}\hat{A}^{-1} = \hat{I} = \hat{A}^{-1}\hat{A}$$

???

← دترمینان عملگر $\det(\hat{A}) =$ عدد

← به انتخاب پایه ربطی ندارد

if $\det(\hat{A}) = 0 \Rightarrow$ singular عملگر تکین

* با تغییر پایه کماکان تکین خواهد بود

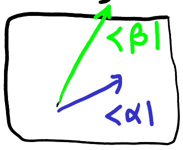
* عملگر تکین وارون ندارد $\longleftrightarrow$ با تغییر پایه کماکان این وضعیت برقرار است

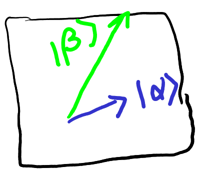
$\det(\hat{B}) \simeq 0$ بدوضع

الحاقی یک عملگر یا دگر یک عملگر

عملگری که کار مشابه عملگر را در فضای همیوغ انجام می‌دهد

برا { کت {





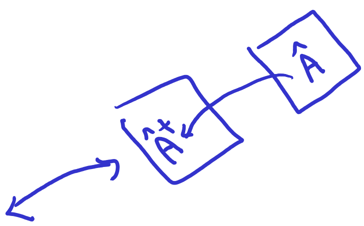
$$\hat{A}|\alpha\rangle = |\beta\rangle$$

?

$$\langle\alpha|\boxed{?} = \langle\beta|$$

جواب : $\langle\alpha|\hat{A}^\dagger = \langle\beta|$

$$\hat{A}|\alpha\rangle = |\beta\rangle \longrightarrow \langle\alpha|\hat{A}^\dagger = \langle\beta|$$



$$\hat{A}^{\dagger} = \left(\hat{A}^{*}\right)^{T} = \left(\hat{A}^{T}\right)^{*}$$

مثال/ $\hat{A} = \begin{pmatrix} 2+3i & 4i \\ -3 & 6-6i \end{pmatrix} \longrightarrow \hat{A}^{\dagger} = \begin{pmatrix} 2-3i & -3 \\ -4i & 6+6i \end{pmatrix}$

خصوصیات الحاقی هرمیتی

$\rightarrow \quad (\hat{A}\hat{B}\hat{C})^{\dagger} = \hat{C}^{\dagger}\hat{B}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger}$

مثال/ $\hat{A}\hat{B}|\alpha\rangle = |\beta\rangle \longrightarrow \langle\alpha|\hat{B}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger} = \langle\beta|$

$\rightarrow \quad (\hat{A}^{\dagger})^{\dagger} = \hat{A}$

$\rightarrow$ فرض c یک عدد مختلط $\quad (c\hat{A})^{\dagger} = c^{*}\hat{A}^{\dagger} = \hat{A}^{\dagger}c^{*}$

$\rightarrow \quad (\hat{A}^{n})^{\dagger} = (\hat{A}^{\dagger})^{n}$

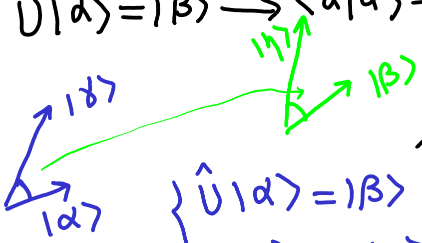
$\rightarrow \quad (\hat{A} + \hat{B} + \cdots + \hat{D})^{\dagger} = (\hat{A}^{\dagger} + \hat{B}^{\dagger} + \cdots + \hat{D}^{\dagger})$

عملگرهای unitary یونیتاری $\longrightarrow \hat{U}$

① طول کت ها را تغییر نمی‌دهد

② ضرب نقطه ای (زاویه میان کت ها) را تغییر نمی‌دهد

if $\hat{U}|\alpha\rangle = |\beta\rangle \longrightarrow \langle\alpha|\alpha\rangle = \langle\beta|\beta\rangle$



$$\begin{cases} \hat{U}|\alpha\rangle = |\beta\rangle \\ \hat{U}|\gamma\rangle = |\eta\rangle \end{cases}$$

تشخیص ریاضی ①

$\hat{A}$ یک عملگر یونیتاری است $\Longleftarrow \hat{A}\hat{A}^{\dagger} = \hat{A}^{\dagger}\hat{A} = \hat{I}$

تشخیص ریاضی ②

$\underbrace{\hat{A}^{-1}\hat{A}}_{\hat{I}}\hat{A}^{\dagger} = \hat{A}^{-1} \longrightarrow \hat{A}^{\dagger} = \hat{A}^{-1}$

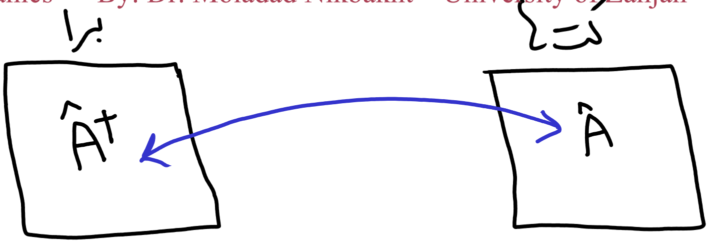
$$\hat{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots \\ \vdots & A_{22} & \\ & & A_{NN} \end{pmatrix}$$

رد یا تریس یک عملگر

$$Tr[\hat{A}] = \text{عناصر قطر}$$

$$Tr[\hat{A}] = A_{11} + A_{22} + \cdots + A_{NN} = \sum_i A_{ii}$$

این مقدار مستقل از پایه‌ی فضاست (با تغییر دستگاه، این مقدار تغییر نخواهد کرد)



* عملگرهای هرمیتی: (عملگرهای مشاهده‌پذیر فیزیکی)

اگر $\hat A = \hat A^\dagger \Longrightarrow \hat A$ is hermitian operator

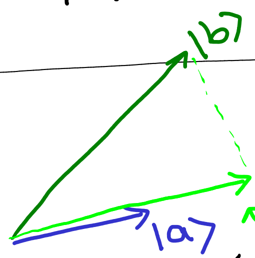
کدام یک از عملگرهای زیر هرمیتی‌اند/هستند

$$\hat A: \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ و } \begin{pmatrix} i & 2i \\ 3 & 5 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat A^\dagger: \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} -i & 3 \\ -2i & 5 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & -i \\ +i & 0 \end{pmatrix}$$

هرمیتی

تعریف دیگر از عملگر هرمیتی $\longrightarrow \quad \hat A|\alpha\rangle = |\beta\rangle \longrightarrow \langle\alpha|\hat A^\dagger = \langle\beta| \xrightarrow[\text{هرمیتی}]{\text{if } A} \langle\alpha|\hat A = \langle\beta|$



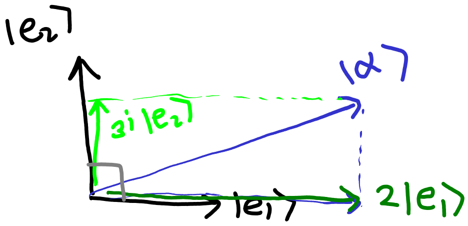
عملگر تصویر:

مثال / عملگر تصویرگر در راستای $|a\rangle$ (طول $|a\rangle$ باید واحد باشد)

این عملگر هرگاه اثر کند آن کت را در راستای $|a\rangle$ تصویر کند

$$\hat\Lambda_a = |a\rangle\langle a|$$

$$\hat\Lambda_a|b\rangle = \boxed{|a\rangle\langle a|b\rangle}$$



مثال) فرض کنید پایه‌های فضای ما به صورت زیر است

$$|e_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |e_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

عملگرهای تصویرگر در راستای این‌ها را بدست آورید

$$\hat\Lambda_{e_1} = |e_1\rangle\langle e_1| = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\Lambda}_{e_2} = |e_2\rangle\langle e_2| = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

حاصل تصویرگرهای فوق را روی این کت حساب کنید ← $|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 2 \\ 3i \end{pmatrix}$ در اینجا فرض کنید

$$\hat{\Lambda}_{e_1}|\alpha\rangle = 2|e_1\rangle = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

چرا:

$$\hat{\Lambda}_{e_1}|\alpha\rangle = |e_1\rangle\langle e_1|\left(2|e_1\rangle + 3i|e_2\rangle\right)$$

$$= 2|e_1\rangle\langle e_1|e_1\rangle + 3i\,\cancel{|e_1\rangle\langle e_1|e_2\rangle}$$

$$= 2|e_1\rangle$$

$$\hat{\Lambda}_{e_1}|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 \\ 3i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\Lambda}_{e_2}|\alpha\rangle = 3i|e_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 3i \end{pmatrix}$$

تمرین: عملگر تصویرگر در راستای پایه های فضا $|\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$ ، $|\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$ را بنویسید و اثر آن روی کت حالت $|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 2 \\ 3i \end{pmatrix}$ را به دست آورید

نکته: اگر $|\phi_i\rangle$ ها پایه های فضا باشند در رابطه کاملیت داشته باشیم $\langle\phi_i|\phi_j\rangle = \delta_{ij}$ آنگاه.

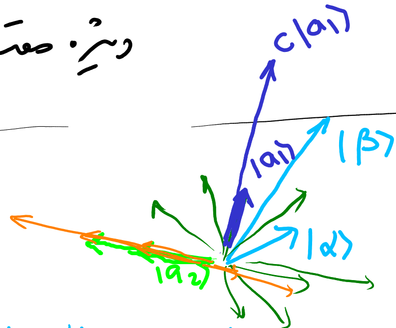
$$\hat{\Lambda}_{\phi_1} + \hat{\Lambda}_{\phi_2} + \cdots + \hat{\Lambda}_{\phi_N} = \hat{I}$$

$$|\phi_1\rangle\langle\phi_1| + |\phi_2\rangle\langle\phi_2| + \cdots + |\phi_N\rangle\langle\phi_N| = \sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i| = \hat{I}$$

---

eigen value & eigen vector

ویژه مقدار ویژه بردار



اگر $\hat{A}$ عملگر دلخواه باشد

$$\hat{A}|\alpha\rangle = |\beta\rangle$$

انتظار از عملگر $\hat{A}$

یعنی این کت در حالت می اندازد و اندازه و راستا متفاوت از $|\alpha\rangle$ است

ویژه بردار عملگر $\hat{A}$: بردارهایی هستند که اثر عملگر $\hat{A}$ روی آنها منجر به تغییر راستای آنها نگردد

(اینها یک سری برای عملگر $\hat{A}$ خاص هستند)

$$\hat{A}\,|a_i\rangle = \lambda_i\,|a_i\rangle \equiv a_i\,|a_i\rangle$$

$|a_i\rangle$: ویژه بردار عملگر $\hat{A}$ — eigenvector

λ_i : عدد در حالت کلی مختلط — eigen value ویژه مقدار مربوط به ویژه بردار $|a_i\rangle$

← به ازای هر ویژه بردار ← یک ویژه مقدار

← سوال: یک عملگر چند ویژه بردار دارد؟ (در یک فضای N بعدی) به عبارتی $\hat{A} = \left(\quad\right)_{N\times N}$

← ممکن است عملگر $\hat{A}$ هیچ ویژه بردار نداشته باشد $\longleftrightarrow$ عملگر تکین $\leftarrow$ if $\det\hat{A} = 0$

* با تغییر پایه هم داستان فرق نمی کند

مثال/ $\hat{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$ or $\hat{A} = \begin{pmatrix} 2 & 3i \\ 4 & 6i \end{pmatrix} \longrightarrow$ No eigenvector

← ممکن است عملگر $\hat{A}$ بی نهایت ویژه بردار داشته باشد $\longleftrightarrow$ عملگرهای Identity operator

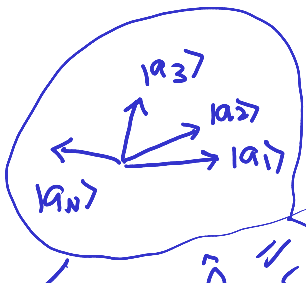
$$\hat{I}\,|a\rangle = |a\rangle$$
$$\hat{I}\,|b\rangle = |b\rangle$$

مثال/ $\hat{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ or $\hat{A} = \begin{pmatrix} 2i & 0 \\ 0 & 2i \end{pmatrix}$

با تغییر پایه اتفاقی رخ نمی دهد

← در حالت عمل عملگر در فضای N بعدی تعداد N ویژه بردار مستقل خطی دارد

$$\hat{A}_{N\times N} \rightarrow |a_1\rangle,\ |a_2\rangle,\ \dots,\ |a_N\rangle$$



ویژه بردارهای عملگر $\hat{A}$ ← ممکن است متعامد نباشند

با هم ... ولی تعدادشان N خواهد ماند

جابجاگری : چنانچه دو عملگر $\hat{A}$ و $\hat{B}$ داشته باشیم

$$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = \text{عملگر} = [\hat{A},\hat{B}]$$

مثال) جابجاگر دو عملگر زیر را حساب کنید

$$\hat{A} = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \qquad \hat{B} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}$$

$$\hat{A}\hat{B} = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3i & -4i \\ i & 2i \end{bmatrix} \quad , \quad \hat{B}\hat{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2i & -i \\ 4i & -3i \end{bmatrix}$$

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$$

* نکته : این دو عملگر جابجاپذیر نیستند چون جابجاگری آنها :

$$[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

$$= \begin{bmatrix} -3i & -4i \\ i & 2i \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 2i & -i \\ 4i & -3i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -5i & -3i \\ -3i & 5i \end{bmatrix}$$

خواص جابجاگری :

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

$\rightarrow \quad [\hat{A},\hat{B}] = -[\hat{B},\hat{A}]$

$\rightarrow \quad [\hat{A},\hat{B}]^\dagger = [\hat{B}^\dagger,\hat{A}^\dagger]$

$\rightarrow \quad [\hat{A},\hat{B}\hat{D}] = [\hat{A},\hat{B}]\hat{D} + \hat{B}[\hat{A},\hat{D}]$

$\rightarrow \quad [\hat{A},c] = 0 \quad \Leftarrow \hat{A}c = c\hat{A}$ اگر c یک عدد باشد

خواص رد یا تریس :

$$\mathrm{Tr}[\hat{A}] = \sum_{i=1}^{N} A_{ii}$$

$\longrightarrow \quad \mathrm{Tr}(\hat{A}\hat{B}) = \mathrm{Tr}(\hat{B}\hat{A}) \quad$ or $\quad \mathrm{Tr}(\hat{A}\hat{B}\hat{C}) = \mathrm{Tr}(\hat{C}\hat{A}\hat{B}) = \mathrm{Tr}(\hat{B}\hat{C}\hat{A})$

$$\hat{A}\,|a_i\rangle = \lambda_i\,|a_i\rangle$$

ویژه : مقادیر ویژه بردار }

$\lambda_i \rightarrow$ eigen value (ویژه مقدار) : $\{\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_N\} \longrightarrow$ طیف ویژه مقادیر عملگر $\hat{A}$

$|a_i\rangle \rightarrow$ eigen vector (ویژه بردار) : $|a_1\rangle, |a_2\rangle, \ldots, |a_N\rangle$

← طیف ویژه مقادیر در حالت کلی مختلط است.

← چنانچه در طیف ویژه مقادیر، اعداد تکراری داشته باشیم (مثلاً: $\lambda_2=\lambda_3\neq\cdots$ ، $\lambda_1\neq$) آن عملگر را تبهگن یا دژنره گویند

مثال: ویژه مقادیر (1) و ویژه بردارهای (2) عملگر زیر را حساب کنید.

$$\hat{A}=\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix} \qquad \hat{A}|a_i\rangle=\lambda_i|a_i\rangle=a_i|a_i\rangle$$

$$|a_1\rangle, |a_2\rangle=? \qquad \{a_1,a_2\}=? \qquad Tr[\hat{A}]=0+0=0 \rightarrow \boxed{\lambda_1+\lambda_2=0}$$

رابطه ویژه مقدار ویژه بردار

$$\rightarrow \begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\ y\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix}x\\ y\end{pmatrix}\rightarrow\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\ y\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}\lambda & 0\\ 0 & \lambda\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\ y\end{pmatrix}=0$$

ماتریس ضرایب معادله

$$\begin{pmatrix}-\lambda & -i\\ i & -\lambda\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\ y\end{pmatrix}=0 \rightarrow \begin{cases}-\lambda x-iy=0\\ ix-\lambda y=0\end{cases} \quad (1)$$

← شرط داشتن جواب (وجود x و y که در معادله صدق کند) این است که دترمینان ماتریس ضرایب صفر باشد

$$\begin{vmatrix}-\lambda & -i\\ i & -\lambda\end{vmatrix}=0 \rightarrow \lambda^2-(-i)(i)=0 \Rightarrow \lambda^2-1=0 \Rightarrow \lambda^2=1$$

ویژه مقادیر: لذا $\lambda_1\equiv a_1=1$ ، $\lambda_2\equiv a_2=-1$

اولین ویژه بردار $|a_1\rangle$

$$\hat{A}|a_1\rangle=\lambda_1|a_1\rangle \Rightarrow \hat{A}|a_1\rangle=|a_1\rangle$$

$\lambda=1$ را جایگذاری میکنیم (1)

$$\begin{cases}-x-iy=0\\ ix-y=0\end{cases} \longrightarrow x=1 \Rightarrow y=i \Rightarrow |a_1\rangle=\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix}$$

نرمالیزه میکنیم

$$|a_1\rangle=\frac{\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix}}{\sqrt{\langle a_1|a_1\rangle}}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix}$$

دومین ویژه بردار $|a_2\rangle$

$$\hat{A}|a_2\rangle=\lambda_2|a_2\rangle \Rightarrow \hat{A}|a_2\rangle=-1|a_2\rangle$$

$\lambda=-1$ را جایگذاری میکنیم (1)

$$\begin{cases}x-iy=0\\ ix+y=0\end{cases} \longrightarrow x=1 \Rightarrow y=-i \Rightarrow |a_2\rangle=\begin{pmatrix}1\\ -i\end{pmatrix}$$

نرمالیزه

$$|a_2\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -i\end{pmatrix}$$

نکته: چنانچه $|a_i\rangle$ ویژه بردار عملگر $\hat{A}$ با ویژه مقدار λ_i باشد ⇐ $c|a_i\rangle$ (عدد c) هر ویژه بردار عملگر $\hat{A}$ است با ویژه مقدار λ_i

$$\hat{A}|a_i\rangle=\lambda|a_i\rangle \qquad \hat{A}(c|a_i\rangle)=c\hat{A}|a_i\rangle=c\lambda_i|a_i\rangle=\lambda_i(c|a_i\rangle)$$

مثال: ویژه بردارها و ویژه مقادیر عملگر زیر را حساب کنید
هازنمره

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} i & 1 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}$$

$Tr[\hat{A}] = i+3 \longrightarrow \lambda_1 + \lambda_2 = i+3$

تمرین: از کتاب سرمشق دو سوال مربوط به ویژه مقادیر و ویژه بردارها را انتخاب و بازنویسی کنید

$$|\hat{A} - \lambda \hat{I}| = 0 \Rightarrow \begin{vmatrix} -\lambda + i & 1 \\ 2 & -\lambda + 3 \end{vmatrix} = 0$$

$$(-\lambda + i)(-\lambda + 3) - (1)(2) = 0$$

$$\lambda^2 - 3\lambda - i\lambda + 3i - 2 = 0$$

$$\lambda^2 - (3+i)\lambda + 3i - 2 = 0 \qquad \lambda = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

$$\lambda_i = \frac{3+i \pm \sqrt{9 - 1 + 6i - 4(1)(3i-2)}}{2} = \frac{3+i \pm \sqrt{9 - 1 + 6i - 12i + 8}}{2}$$

$$= \frac{3+i \pm \sqrt{16 - 6i}}{2} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_1 = \frac{1}{2}\left[3+i + \sqrt{16-6i}\right] \\ \lambda_2 = \frac{1}{2}\left[3+i - \sqrt{16-6i}\right] \end{cases}$$

مثال/ ویژه بردارها و ویژه مقادیر عملگر زیر را بیابید

3 eigen vector / مسأله در یافتن ویژه بردار
3 ویژه مقدار
ماتریس مرتبه 3 است

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} 2 & i & 0 \\ -i & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \xrightarrow{\text{یافتن ویژه مقادیر}} \begin{vmatrix} 2-\lambda & i & 0 \\ -i & 1-\lambda & 1 \\ 0 & 1 & -\lambda \end{vmatrix} = 0$$

$Tr(\hat{H}) = 2+1+0 = 3 \stackrel{?}{=}$

$\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = 3$

$$(2-\lambda)\left[(1-\lambda)(-\lambda) - 1\right] - i(-i)(-\lambda) + 0 = 0$$

$$(2-\lambda)\left[\lambda^2 - \lambda - 1\right] + \lambda = 0$$

$$\cancel{2}\lambda^2 - \cancel{2\lambda} - 2 - \lambda^3 + \cancel{\lambda^2} \cancel{+ \lambda} + \lambda = 0$$

$$\boxed{3\lambda^2 - \lambda^3 - 2 = 0}$$

$$\lambda^3 - 3\lambda^2 + 2 = 0$$

$\lambda = 1$

$$\begin{array}{l|l} \lambda^3 - 3\lambda^2 + 2 & (\lambda - 1) \\ \hline -\ \lambda^3 - \lambda^2 & \lambda^2 - 2\lambda - 2 \\ \hline -2\lambda^2 + 2 & \\ -\ -2\lambda^2 + 2\lambda & \\ \hline 0\ -2\lambda + 2 & \\ -\ -2\lambda + 2 & \\ \hline 0 \quad 0 & \end{array}$$

$$(\lambda - 1)(\lambda^2 - 2\lambda - 2) = 0$$

$$\lambda = \frac{2 \pm \sqrt{4+8}}{2} = \frac{2 \pm 2\sqrt{3}}{2} = 1 \pm \sqrt{3}$$

$$(\lambda - 1)(\lambda - (1+\sqrt{3}))(\lambda - (1-\sqrt{3})) = 0$$

$$\begin{cases} \lambda_1 = 1 \\ \lambda_2 = 1 + \sqrt{3} \\ \lambda_2 = 1 - \sqrt{3} \end{cases} \qquad \lambda_1 \neq \lambda_2 \neq \lambda_3$$

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = 1 + 1 + \sqrt{3} + 1 - \sqrt{3} = 3$$

$\lambda_1 = 1$: $|H_1\rangle = ?$ $\qquad \hat{H}|H_1\rangle = \lambda_1 |H_1\rangle$???

$$\begin{bmatrix} 2 & i & 0 \\ -i & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = 1\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{cases} 2x + iy = x \\ -ix + y + z = y \\ y = z \end{cases} \rightarrow \begin{cases} x + iy = 0 \\ -ix + z = 0 \\ y = z \end{cases}$$

$y = 1 \longrightarrow z = 1 \Rightarrow x = -i \Rightarrow \begin{bmatrix} -i \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{\text{طول}} \sqrt{1+1+1} = \sqrt{3}$

$$|H_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{bmatrix} -i \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$\lambda_2 = 1 + \sqrt{3}$ $\qquad |H_2\rangle = ?$

$$\begin{bmatrix} 2 & i & 0 \\ -i & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = (1+\sqrt{3})\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} \rightarrow \begin{cases} 2x + iy = (1+\sqrt{3})x \\ -ix + y + z = (1+\sqrt{3})y \\ y = (1+\sqrt{3})z \end{cases}$$

$z = 1 \longrightarrow y = (1+\sqrt{3})$

$2x + i(1+\sqrt{3}) = (1+\sqrt{3})x \longrightarrow (-1+\sqrt{3})x = i(1+\sqrt{3})$

$x = -i\,\dfrac{1+\sqrt{3}}{1-\sqrt{3}} \times \dfrac{(1+\sqrt{3})}{(1+\sqrt{3})} = -i\,\dfrac{(1+\sqrt{3})^2}{1-3} = \dfrac{i}{2}(1+\sqrt{3})^2$

$x = \frac{i}{2}(4+2\sqrt{3}) \rightarrow x = i(2+\sqrt{3})$

$\begin{bmatrix} i(2+\sqrt{3}) \\ 1+\sqrt{3} \\ 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{\text{طول}} \sqrt{7+4\sqrt{3}+4+2\sqrt{3}+1} = \sqrt{13+6\sqrt{3}}$

$$|H_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{13+6\sqrt{3}}}\begin{bmatrix} i(2+\sqrt{3}) \\ 1+\sqrt{3} \\ 1 \end{bmatrix}$$

$|H_3\rangle$ را محاسبه کنید.

قضیه: ویژه مقادیر عملگرهای هرمیتی حقیقی هستند.

$\hat{A} = \hat{A}^\dagger \Rightarrow \underbrace{a_i}_{\text{ویژه مقادیر}} = a_i^*$

تمرین: ① اثبات کنید

② یک عملگر هرمیتی مثال بزنید و ویژه مقادیر آن را حساب کنید.

اگر عملگری دژنره باشد ← ویژه مقادیر تکراری دارد ← تمرین ③ یک عملگر 3x3 مثال بزنید که تبهگنی داشته باشد

اگر عملگر دژنره (تبهگن) نباشد ← ویژه مقادیر آن همه با هم فرق دارند $\qquad a_1 \neq a_2 \neq a_3 \neq \dots \neq a_N$

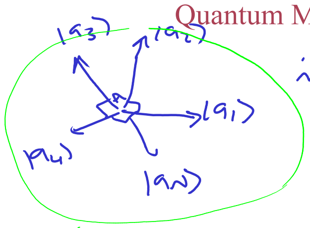
مرتبه تبهگنی: بیشینه تعداد تکرار در ویژه مقادیر یک عملگر

$\{a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6, a_7, \dots a_N\}$

مثال: $\underbrace{\boxed{a_1 = a_2 = a_3}}_{3} \neq a_4 \neq \boxed{a_5 = a_6} \neq a_7 \neq \dots a_N$

تعامد یا عدم تعامد ویژه‌بردارها

$\hat{A}_{N\times N} \rightarrow \left\{ |a_1\rangle, |a_2\rangle, \ldots, |a_N\rangle \right.$



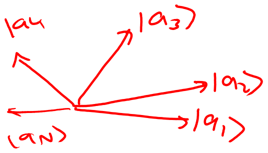
ویژه‌بردارها متعامد باشند

مورد علاقه ماست

دلیل: چون با برنامه‌ریزی ویژه‌بردارهای آن به عنوان پایه فضا استفاده کنیم

$|\phi_1\rangle = |a_1\rangle$
$|\phi_2\rangle = |a_2\rangle$
$|\phi_N\rangle = |a_N\rangle$

ویژه‌بردارها دو به دو عمود بر هم نباشند



← ممکن است ویژه‌بردارها که تعامد داشته باشند

← " " " " " " " نباشند

← تغییر پایه فضا در تعامد (عدم تعامد) و تبهگنی (عدم تبهگنی) تاثیری ندارد

← اگر $\{a_1, a_2, \ldots, a_N\}$ طیف ویژه‌مقادیر عملگر $\hat{A}$ باشند، با تغییر پایه این طیف عوض نخواهد شد

← رد (تریس) و دترمینان یک عملگر با تغییر پایه تغییر نمی‌کند

← مولفه‌ها عملگر با تغییر پایه، تغییر می‌کنند

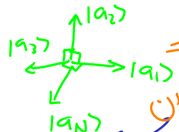
← مولفه‌های ویژه‌بردارهای یک عملگر با تغییر پایه عوض می‌شوند.

← اگر $\{a_1, a_2, \ldots, a_N\}$ ویژه‌مقادیر عملگر $\hat{A}$ باشند $\Leftarrow$

$$A_{11}+A_{22}+\cdots+A_{NN} \leftarrow Tr(\hat{A}) = a_1+a_2+\cdots+a_N$$

قضیه، اگر عملگری هرمیتی و ناتبهگن باشد آنگاه ویژه‌بردارهای آن دو به دو بر هم عمودند

$$\text{if} \begin{cases} \hat{A} = \hat{A}^\dagger \\ \{a_1 \neq a_2 \neq a_3 \neq \cdots \neq a_N\} \end{cases} \Longleftrightarrow \langle a_i | a_j \rangle = \delta_{ij}$$



$\Longrightarrow$ در نتیجه از این ویژه‌بردارها به عنوان پایه فضا می‌توان استفاده کرد (بهره برد)

تمرین ④ اثبات کنید که برای عملگرهای هرمیتی ناتبهگن، تعامد ویژه‌بردارها را داریم.

تمرین ⑤ عملگر هرمیتی و غیر دو در دو (غیرتبهگن) مثال بزنید و نشان دهید ویژه‌بردارهای آن متعامدند. (عملگر 2×2 مثال بزنید)

لم: اگر عملگری هرمیتی و تبهگن باشد ←

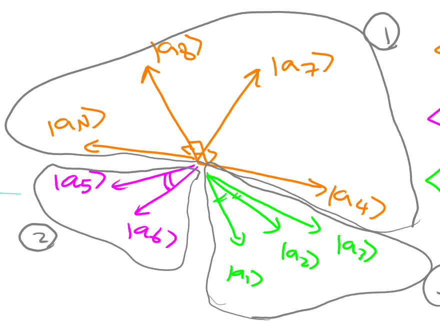
زیرفضایی که از ویژه‌بردارهای ناتبهگن ساخته می‌شود در این ویژه‌بردارها ۲ به ۲ بر هم عمودند

ویژه‌بردارهای تبهگن ممکن است بر یکدیگر عمود نباشند

ویژه‌بردارهای تبهگن ممکن است بر یکدیگر عمود نباشند

$$\text{if} \begin{cases} \hat{A} = \hat{A}^\dagger \\ \{\boxed{a_1 = a_2 = a_3} \neq a_4 \neq \boxed{a_5 = a_6} \neq a_7 \neq \cdots \neq a_N\} \end{cases}$$

مثال



$\hat{A}|a_5\rangle = a|a_5\rangle$
$\hat{A}|a_6\rangle = a|a_6\rangle$

← پایه‌های زیرفضای ① دو به دو بر هم عمودند $\langle a_i | a_j \rangle = 0$

" " " ② لزوماً متعامد نیستند $\langle a_i | a_j \rangle \stackrel{?}{=} 0$

← " " ③ لزوماً متعامد نیستند $\langle a_i | a_j \rangle \stackrel{?}{=} 0$

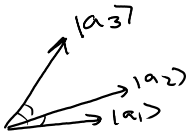
$\Leftarrow$ ویژه‌بردارهای متعلق به دو زیرفضای متفاوت بر هم عمودند

$\langle a_i | a_j \rangle = 0$

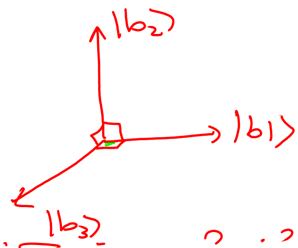
$\langle a_i | a_j \rangle = 0$

$\langle a_i | a_j \rangle = 0$

تمرین ۶: نرمالیزاسیون گرام ـ اشمیت چیست؟

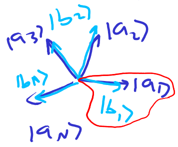


$\begin{cases} \langle a_i|a_j\rangle \neq 0 \\ |a_i\rangle \text{ مستقل خطی اند} \end{cases}$ $\xrightarrow{\text{نرمالیزاسیون گرام ـ اشمیت}}$



مهلت تا سه شنبه شب هفته آینده

$\begin{cases} \hat{A}: \{|a_1\rangle, |a_2\rangle, \dots |a_N\rangle\} \\ \hat{B}: \{|b_1\rangle, |b_2\rangle, \dots |b_N\rangle\} \end{cases} \Rightarrow \hat{A}, \hat{B}$



ویژه بردارها مشترک

قضیه: اگر دو عملگر داشته باشیم با ویژه بردارهای یکسان (مهم نیست که تبهگن باشند یا خیر) منطبق بر هم، آنگاه، آن دو عملگر جابجاپذیرند.

$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} \longleftrightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = 0 \longleftrightarrow$ ترتیب اندازه‌گیری‌ها اثری ندارد. هم زمان

اثبات

$$\begin{cases} \hat{A}\,|a_i, b_i\rangle = a_i\,|a_i, b_i\rangle \\ \hat{B}\,|a_i, b_i\rangle = b_i\,|a_i, b_i\rangle \end{cases} \longrightarrow (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|a_i, b_i\rangle = \hat{A}\hat{B}|a_i, b_i\rangle - \hat{B}\hat{A}|a_i, b_i\rangle$$

$$= b_i a_i |a_i, b_i\rangle - a_i b_i |a_i, b_i\rangle$$

$$= (b_i a_i - a_i b_i)|a_i, b_i\rangle = 0 \longrightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = 0$$

قضیه: اگر دو عملگر ناتبهگن جابجاپذیر باشند آنگاه، ویژه بردارهایشان مشترک (بر هم منطبق است)

اثبات

اگر ویژه بردارهای $\hat{A}$ به صورت $\{|a_1\rangle, |a_2\rangle, \dots, |a_N\rangle\}$ باشند و $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ آنگاه،

$\{|a_i\rangle\}$ ویژه بردارهای $\hat{B}$ هم هستند

$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0 \Rightarrow \hat{A}\hat{B}|a_i\rangle - \hat{B}\hat{A}|a_i\rangle = 0$

اثر $\hat{B}|a_i\rangle$ را نمی‌دانیم

$$\hat{A}\,[\hat{B}|a_i\rangle] = \hat{B}\hat{A}|a_i\rangle = a_i\,[\hat{B}|a_i\rangle]$$

از $\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$ مقایسه

$\boxed{\hat{B}|a_i\rangle \longrightarrow \text{ویژه بردار } a_i \hat{A}}$

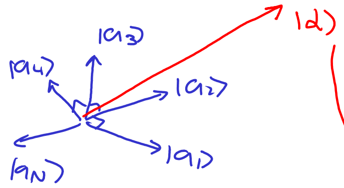
$\hat{B}|a_i\rangle \longrightarrow$ در راستای $|a_i\rangle$ است

لذا $|a_i\rangle$ ویژه بردار عملگر $\hat{B}$ است

نکات مهم:

① بطور کلی حالت در چپ ویژه بردارهای عملگر هرمیتی ناتبهگن

$\hat{A}: \begin{cases} |a_1\rangle \\ |a_2\rangle \\ \vdots \\ |a_N\rangle \end{cases}, \quad \{a_1 \neq a_2 \neq \dots \neq a_N\} \Longrightarrow$



کت حالت

$$|\alpha\rangle = \hat{1}|\alpha\rangle = \left(|a_1\rangle\langle a_1| + |a_2\rangle\langle a_2| + \dots + |a_N\rangle\langle a_N|\right)|\alpha\rangle$$

$$= |a_1\rangle\langle a_1|\alpha\rangle + |a_2\rangle\langle a_2|\alpha\rangle + \dots + |a_N\rangle\langle a_N|\alpha\rangle$$

$$|\alpha\rangle = \sum_{i=1}^{N} \langle a_i|\alpha\rangle\,|a_i\rangle = \sum C_{a_i}|a_i\rangle$$

$C_{a_i} \longleftarrow \begin{cases} \text{تصویر } |\alpha\rangle \text{ در راستای } |a_i\rangle \\ \text{یا مؤلفه } |\alpha\rangle \text{ در راستای } |a_i\rangle \end{cases}$

② مقدار چشمداشتی یا انتظاری

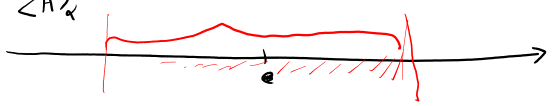
expectation value

اگر کت حالت $|\alpha\rangle$ داشته باشیم و بخواهیم کمیت $\hat{A}$ را اندازه‌گیری کنیم انتظار داریم عدد حاصله برابر مقدار چشمداشتی باشد.

$$\langle \hat{A}\rangle_\alpha = \frac{\langle\alpha|\hat{A}|\alpha\rangle}{\langle\alpha|\alpha\rangle} \xrightarrow{\text{اگر } |\alpha\rangle \text{ نرمالیزه باشد: } \langle\alpha|\alpha\rangle=1} \langle \hat{A}\rangle_\alpha = \langle\alpha|\hat{A}|\alpha\rangle$$

مقدار انتظاری عملگر $\hat{A}$ در حالت α

← مقدار چشمداشتی یک عملگر ← عدد (اگر $\hat{A}$ هرمیتی باشد) این عدد حقیقی است $\hat{A}=\hat{A}^\dagger$



همیشه می‌تواند مثبت و هم منفی باشد

$$\min\{a_i\} \leq \langle\hat{A}\rangle_\alpha \leq \max\{a_i\}$$

کوچکترین ویژه مقدار عملگر $\hat{A}$

بزرگترین ویژه مقدار عملگر $\hat{A}$

$\hat{A} \to |a_1\rangle, |a_2\rangle, \dots, |a_N\rangle$

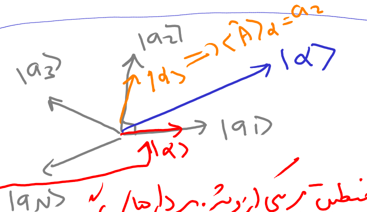
$\{a_1, a_2, \dots, a_N\} \to \max\{a_i\}, \ \min\{a_i\}$

مثال) $\hat{A} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \to a_1 = 1, \ a_2 = -1$

$$-1 \leq \langle\hat{A}\rangle_\alpha \leq 1$$

مثال) $\hat{H} = \begin{bmatrix} 2 & i & 0 \\ -i & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \to H_1 = 1, \ H_2 = 1+\sqrt{3}$ (بزرگترین), $H_3 = 1-\sqrt{3}$ (کوچکترین)

$$1-\sqrt{3} \leq \langle\hat{H}\rangle_\alpha \leq 1+\sqrt{3}$$



نکته: چنانچه $|\alpha\rangle$ منطبق بر یکی از ویژه بردارهای عملگر $\hat{A}$ باشد ($|a_1\rangle$ مثلاً) $\langle\hat{A}\rangle_\alpha = a_1$

نکته: چنانچه $|\alpha\rangle$ منطبق بر هیچ یک از ویژه بردارهای $\hat{A}$ نباشد ← $\langle\hat{A}\rangle_\alpha$ به ویژه مقدار ویژه بردارهایی که $|\alpha\rangle$ در همسایگی آن است نزدیکتر است.

اگر عملگر $\hat{A}$ هرمیتی نباشد ⇐ $\langle\hat{A}\rangle_\alpha$ یک عدد مختلط است

اگر عملگر $\hat{A}$ آنتی‌هرمیتی باشد $\hat{A}=-\hat{A}^\dagger$ ⇐ $\langle\hat{A}\rangle_\alpha$ یک عدد موهومی محض است

---

③ رابطه عدم قطعیت (هایزنبرگ)

اگر عملگر هرمیتی مانند $\hat{A}$ داشته باشیم و اندازه‌گیری روی حالت $|\alpha\rangle$ انجام دهیم ⇐ مقدار چشمداشتی $= \langle\hat{A}\rangle_\alpha$

$$\Delta\hat{A} = \hat{A} - \langle\hat{A}\rangle_\alpha \hat{1} \implies \langle(\Delta\hat{A})^2\rangle_\alpha = \langle(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle_\alpha\hat{1})^2\rangle_\alpha$$

عملگر واریانس

واریانس عملگر $\hat{A}$ در حالت $|\alpha\rangle$ ← خطا در اندازه‌گیری عملگر $\hat{A}$

اصل عدم قطعیت: اگر دو عملگر $\hat{A}$ و $\hat{B}$ داشته باشیم

$$\langle \Delta\hat{A}^2\rangle_\alpha \langle \Delta\hat{B}^2\rangle_\alpha \geq \frac{1}{4}\left|\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle_\alpha\right|^2 \longrightarrow$$

اثبات را شما پیدا کنید

* چنانچه دو عملگر جابجا نشوند ($[\hat{A},\hat{B}]\neq 0$) در اندازه‌گیری همزمان آنها قطعاً خطا داریم

* " " " جابجا شوند خطا در اندازه‌گیری همزمان آنها صفر است

مثال/ فرض کنید یک حالت کوانتومی به صورت زیر است

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 3/5 \\ 4i/5 \end{pmatrix} \longrightarrow \langle\alpha|\alpha\rangle = 1 \text{ نرمالیزه است}$$

چنانچه $\hat{A}=\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0\end{pmatrix}$ و $\hat{B}=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1\end{pmatrix}$ باشد. مقدار انتظاری عملگرهای $\hat{A}$ و $\hat{B}$ را در حالت $|\alpha\rangle$ حساب کنید

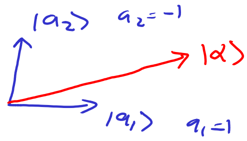
$$\langle\hat{A}\rangle_\alpha = \langle\alpha|\hat{A}|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 3/5 & -4i/5\end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} 3/5 \\ 4i/5\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3/5 & -4i/5\end{pmatrix}\begin{pmatrix} 4/5 \\ 3i/5\end{pmatrix} = \frac{12}{25}+\frac{12}{25} = \frac{24}{25} = 0.96$$

$$\langle\hat{B}\rangle_\alpha = \langle\alpha|\hat{B}|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 3/5 & -4i/5\end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix} 3/5 \\ +4i/5\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3/5 & -4i/5\end{pmatrix}\begin{pmatrix} 3/5 \\ -4i/5\end{pmatrix} = \frac{9}{25}-\frac{16}{25} = \frac{-7}{25} = -0.28$$

* چون ویژه مقادیر $\hat{A}$ برابر ± 1 بود و $\langle\hat{A}\rangle_\alpha \neq \pm 1$ لذا $|\alpha\rangle$ منطبق بر هیچکدام از ویژه بردارهای $\hat{A}$ نمی‌باشد

$$-1 \leq \langle\hat{A}\rangle_\alpha \leq +1$$

چون $\langle\hat{A}\rangle_\alpha$ در این محدوده است لذا تا اینجا احتمالاً اشتباه نداشته‌ام



چون $\langle\hat{A}\rangle_\alpha = 0.96$ به $+1$ نزدیک است

لذا $|\alpha\rangle$ به $|a_1\rangle$ نزدیک است

یا به تعبیری $|\alpha\rangle$ به $|a_1\rangle$ نزدیک‌تر است

یا $c_{a_1} > c_{a_2}$

اصل موضوعه کوانتوم مکانیک:

① به هر کمیت فیزیکی قابل اندازه‌گیری یک عملگر هرمیتی نسبت داد:

$F \longrightarrow \hat{r}t \qquad p_x \longrightarrow \hat{p}_x$

$x \longrightarrow \hat{x} \qquad p_y \longrightarrow \hat{p}_y \qquad V=\frac{1}{2}m\omega^2x^2 \longrightarrow \hat{V}=\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$

$y \longrightarrow \hat{y} \qquad p_z \longrightarrow \hat{p}_z \qquad T=\frac{p_x^2}{2m} \longrightarrow \hat{T}=\frac{\hat{p}_x^2}{2m}$

$z \longrightarrow \hat{z}$

$$\boxed{x p_x \longrightarrow \frac{1}{2}\left(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{p}_x\hat{x}\right)}$$

$p_x x$

نکته: برای عملگرهای جابجاناپذیر

② ربط کروشه پواسون با جابجاگر کمیت‌ها

* چنانچه کروشه پواسون در تابع دینامیکی صفر باشد ⟸ جابجاگر آن‌ها در کوانتوم صفر است.

مثال/ $\{x, P_x\} = 1$ $\qquad [\hat{x}, \hat{P}_x] = i\hbar$

کلاسیک $\{A,B\} = \dfrac{[\hat{A},\hat{B}]}{i\hbar}$ کوانتوم $\Rightarrow [\hat{A},\hat{B}] = i\hbar\{A,B\}$

مثال/ $\{x, P_y\} = 0 \longrightarrow [\hat{x}, \hat{P}_y] = 0$

$\{x, P_z\} = 0 \longrightarrow [\hat{x}, \hat{P}_z] = 0$

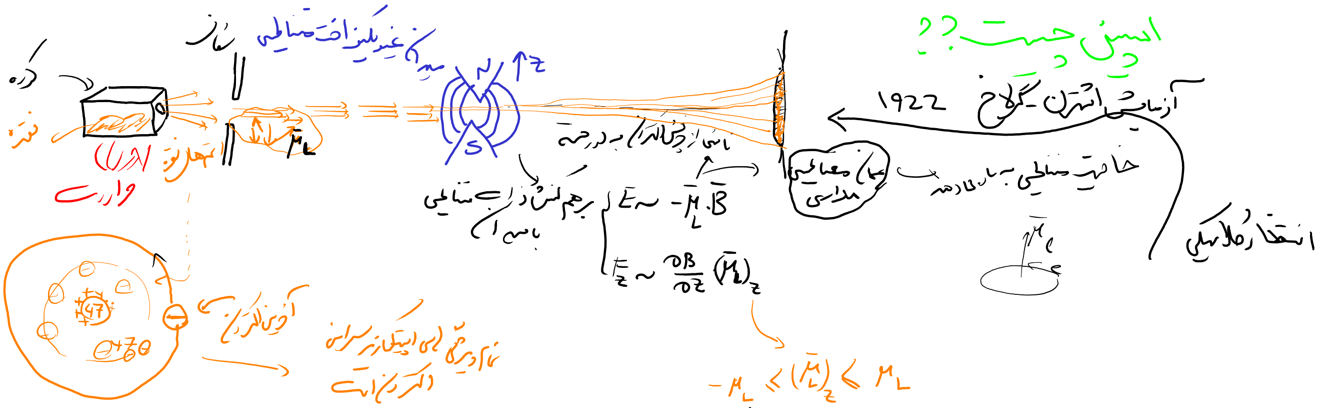
$\{L_i, L_j\} = \varepsilon_{ijk} L_k \longrightarrow [\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk} L_k$

$$\begin{cases} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z \\ [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x \\ [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y \end{cases}$$

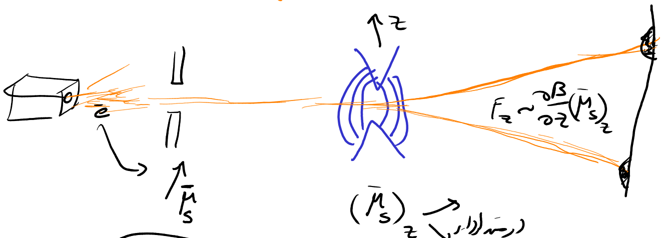
* نکته: عملگرهای اسپین ($\hat{S}_x$، $\hat{S}_y$ و $\hat{S}_z$) است به کلاسیکی ندارند ⟵ روابط جابجاگری آن‌ها مشابه با عملگرهای تکانه زاویه‌ای مداری است

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

اسپین چیست؟؟



$-\mu_L < (\vec{\mu}_L)_z < \mu_L$



واقعیت ⟵

دو لکه مشاهده شد

50٪ اتم‌ها (الکترون‌ها) به سمت بالا

و 50٪ 〃 〃 به سمت پایین منحرف شدند

$\boxed{\text{اسپین } \vec{S}}$ ⟵ الکترون خاصیت مغناطیسی ذاتی دارد

$\vec{S} = S_x\hat{i} + S_y\hat{j} + S_z\hat{k}$

در حضور میدان غیر یکنواخت در امتداد z

$S_z \begin{cases} \to +\hbar/2 \\ \to -\hbar/2 \end{cases}$

این مؤلفه کمیته است

* اسپین همتای کلاسیکی ندارد $\boxed{L_x \longrightarrow \hat{L}_x}$ but $\boxed{\cancel{x} \longrightarrow \hat{S}_x}$

---

③ مسأله سوم (ماهیت اندازه‌گیری) برای یک مشاهده‌پذیر با ویژه مقادیر آن داده می‌شود.

طیف ویژه مقادیر:
- ⟵ گسسته باشد
- ⟵ عملگرهای مکان و تکانه ⟸ طیف پیوسته باشد
- ⟵ بعضی از طیف گسسته و بعضی از طیف پیوسته

$\hat{A} \longrightarrow$ اندازه‌گیری $\begin{cases} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \\ a_N \end{cases}$

مثال/ $\hat{A} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \longrightarrow$ اندازه‌گیری $\begin{cases} +1 \\ -1 \end{cases}$

④ قبل از اندازه‌گیری می‌توان راجع به احتمال صحبت کرد

$|\alpha\rangle$ یک حالت حاوی اطلاعات سامانه

$\hat{A}$ شاهده‌پذیر فیزیکی که می‌خواهیم اندازه‌گیری کنیم

یکی از این اعداد در اندازه‌گیری بدست می‌آید

مشاهده‌پذیر $\hat{A}$ → ویژه‌مقادیر

eigen vector

$$\begin{cases} a_1 \longrightarrow |a_1\rangle \\ a_2 \longrightarrow |a_2\rangle \\ \vdots \\ a_N \longrightarrow |a_N\rangle \end{cases}$$

نکته: یک حالت $|\alpha\rangle$ و ویژه‌بردارهای $|a_i\rangle$ حتماً باید نرمالیزه باشند

با چه احتمالی در اندازه‌گیری عدد a_1 خواهد بود؟ $P(a_1) = |\langle a_1|\alpha\rangle|^2 \equiv |C_{a_1}|^2$ (تصویر $|\alpha\rangle$ راستای $|a_1\rangle$)^2

~ ~ a_2 ~ ~ ~ با چه احتمالی $P(a_2) = |\langle a_2|\alpha\rangle|^2 \equiv |C_{a_2}|^2$

$$P(a_i) = |\langle a_i|\alpha\rangle|^2 \equiv |C_{a_i}|^2$$

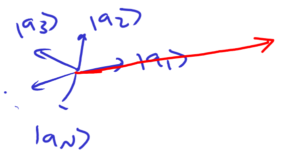
$$\langle a_i|\alpha\rangle = C_{a_i}$$

$$0 \le P(a_i) \le 1$$

$$P(a_1)+P(a_2)+\cdots+P(a_N) = \sum_{i=1}^{N} P(a_i) = 1$$

نکته: احتمال کوچکتر مساوی با واحد
جمع احتمال‌ها برابر با واحد است

نکته، چنانچه یک حالت منطبق بر یکی از ویژه‌بردارهای $\hat{A}$ باشد



حالا ←
$$\begin{cases} P(a_1) = 1 \\ P(a_2) = 0 \\ P(a_3) = 0 \\ \vdots \\ P(a_N) = 0 \end{cases}$$

مثال/ شاهده‌پذیر فیزیکی با کمک $\hat{A} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -4 \end{bmatrix}$ داده شده است. یک حالت سامانه عبارت است $|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$

الف) در اندازه‌گیری $\hat{A}$ چه مقادیری قابل حصول است. ویژه‌مقادیر $\hat{A}$ ← $\begin{cases} a_1 = +2 \\ a_2 = -4 \end{cases}$

ب) احتمال اینکه در اندازه‌گیری $\hat{A}$ عدد $+2$ بدست آید چقدر است.

$P(2) = P(a_1) = |\langle a_1|\alpha\rangle|^2$ but $|a_1\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$

$$P(2) = \left|(1 \;\; 0)\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}\right|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{1}{2}$$

ج) احتمال اینکه در اندازه‌گیری $\hat{A}$ عدد -4 بدست آید چقدر است؟

(راه اول) $P(-4)+P(2) = 1 \Rightarrow P(-4) = \frac{1}{2}$

(راه دوم) $P(-4) = |\langle a_2|\alpha\rangle|^2 = \left|(0 \;\; 1)\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}\right|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{1}{2}$

نکته در این تمرین

عناصر روی قطر همان ویژه‌مقادیر

ویژه‌بردارها هم $\begin{pmatrix}1\\0\\\vdots\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0\\1\\\vdots\end{pmatrix}, \ldots, \begin{pmatrix}\vdots\\1\end{pmatrix}$ هستند

د) احتمال اینکه در اندازه‌گیری $\hat{A}$ عدد $+6$ بدست آید چقدر است؟

$$P(6) = 0$$

و) اگر کت حالت به صورت $|\alpha\rangle = \begin{bmatrix}3/5\\ 4i/5\end{bmatrix}$ بود احتمال اینکه در اندازه‌گیری $\hat{A}$ ‏ $+2$ بدست آید چقدر است؟

($|\alpha\rangle$ نرمالیزه است)

در تمرین قبلی صورت با سیستم نرمالیزه کرد

$$P(+2) = |\langle a_1|\alpha\rangle|^2 = \left|(1\ \ 0)\begin{bmatrix}3/5\\ 4i/5\end{bmatrix}\right|^2 = \frac{9}{25} = 36\%$$

ه) برای همین کت احتمال اینکه در اندازه‌گیری $\hat{A}$ عدد -4 بدست آید چقدر است؟

چون دو ویژه مقدار

$$P(-4) + P(+2) = 1 \longrightarrow P(-4) = 1 - \frac{9}{25} = \frac{16}{25} = 64\%$$

فرمول ویژه‌ی برای مقدار انتظاری

از متن / فرض کنید $\hat{A}$ روی کت حالت $|\alpha\rangle$

$$\text{مقدار انتظاری } A = \frac{\langle\alpha|\hat{A}|\alpha\rangle}{\langle\alpha|\alpha\rangle} \xrightarrow{\text{if } \langle\alpha|\alpha\rangle = 1} \Rightarrow \boxed{\langle\hat{A}\rangle_\alpha = \langle\alpha|\hat{A}|\alpha\rangle} \quad (1)$$

کت ویژه دارد / ویژه دارد $\hat{A}$

$\hat{1} = \sum_{j=1}^{N} |a_j\rangle\langle a_j|$

$$\langle\hat{A}\rangle_\alpha = \langle\alpha|\hat{1}\hat{A}\hat{1}|\alpha\rangle = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\langle\alpha|a_i\rangle\langle a_i|\underbrace{\hat{A}|a_j\rangle}_{a_j|a_j\rangle}\langle a_j|\alpha\rangle$$

$\hat{1} = \sum_{i=1}^{N}|a_i\rangle\langle a_i|$

$$= \sum_{i,j} a_j \langle\alpha|a_i\rangle\underbrace{\langle a_i|a_j\rangle}_{\delta_{ij}}\langle a_j|\alpha\rangle$$

$$= \sum_i a_i \underbrace{\langle\alpha|a_i\rangle}_{\langle a_i|\alpha\rangle^*}\langle a_i|\alpha\rangle$$

$$\langle\hat{A}\rangle_\alpha = \sum_i a_i \langle a_i|\alpha\rangle^*\langle a_i|\alpha\rangle = \sum_i a_i \underbrace{|\langle a_i|\alpha\rangle|^2}_{P(a_i)}$$

$$\boxed{\langle\hat{A}\rangle_\alpha = \sum_{i=1}^{N} a_i P(a_i)}$$

ویژه مقادیر عملگر $\hat{A}$ با ضریب احتمال اندازه‌گیری هر ویژه مقدار

$$\text{if } \langle\alpha|\alpha\rangle \neq 1 \Longrightarrow \langle\hat{A}\rangle_\alpha = \frac{\sum_{i=1}^{N} a_i P(a_i)}{\sum_{i=1}^{N} P(a_i)} \Leftarrow$$

اگر کت حالت $|\alpha\rangle$ نرمالیزه نباشد

مثال/ فرض کنید عملگر $\hat{A}$ به صورت زیر است:

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}$$

و کت حالت سامانه به صورت زیر است

$$|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} i\\ 1\\ 0\end{pmatrix}$$

$|a_3\rangle$, $|a_2\rangle$, $|a_1\rangle$

بتعمیم مت / هرمیتی است / ویژه بردارها متعامد دارد / حساب کنید

$$|a_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-1\\ 0\\ 1\end{pmatrix} \qquad |a_2\rangle = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\ \sqrt{2}\\ 1\end{pmatrix} \qquad |a_3\rangle = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\ -\sqrt{2}\\ 1\end{pmatrix}$$

$a_1 = 0$, $a_2 = \sqrt{2}$, $a_3 = -\sqrt{2}$

← چه نتایجی در اندازه‌گیری $\hat{A}$ ممکن است حاصل شود. ← ویژه مقادیر عملگر $\hat{A}$ حساب شود

← احتمال اینکه در اندازه‌گیری $\hat{A}$ روی کت $|\alpha\rangle$ مقدار صفر بدست آید چقدر است؟ $P(0)$

$$P(a_1) = |\langle a_1|\alpha\rangle|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}(-1\ \ 0\ \ 1)\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}i\\ 1\\ 0\end{pmatrix}\right|^2 = \frac{1}{4} = 25\%$$

← چه احتمالی در اندازه‌گیری $\hat{A}$ روی کت $|\alpha\rangle$ مقدار $\sqrt{2}$ بدست می‌آید؟ $P(\sqrt{2})$

$$P(a_2) = |\langle a_2|\alpha\rangle|^2 = \left|\frac{1}{2}(1\ \ \sqrt{2}\ \ 1)\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}i\\ 1\\ 0\end{pmatrix}\right|^2 = \left|\frac{i+\sqrt{2}}{2\sqrt{2}}\right|^2$$

$$= \frac{(i+\sqrt{2})(-i+\sqrt{2})}{8} = \frac{1+2}{8} = \frac{3}{8} = 37.5\%$$

← با چه احتمالی در اندازه‌گیری $\hat{A}$ در حالت $|\alpha\rangle$ مقدار $-\sqrt{2}$ بدست می‌آید؟

$$P(-\sqrt{2}) \to P(0) + P(\sqrt{2}) + P(-\sqrt{2}) = 1$$

$$P(-\sqrt{2}) = 1 - P(0) - P(\sqrt{2}) = 1 - \frac{1}{4} - \frac{3}{8} = \frac{3}{8} = 37.5\%$$

$$|\alpha\rangle \longrightarrow \boxed{\hat{A} \text{ اندازه‌گیری}} \begin{cases} \xrightarrow{a_1} \%25 \\ \xrightarrow{a_2} \%37.5 \\ \xrightarrow{a_3} \%37.5 \end{cases}$$

← مقدار انتظاری عملگر $\hat{A}$ در حالت $|\alpha\rangle$ چقدر است

$$\langle \hat{A} \rangle_\alpha = \langle \alpha | \hat{A} | \alpha \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -i & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -i & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(-i + i + 0) = 0$$

← حاصل اندازه‌گیری به طور متوسط صفر می‌شود

$$\langle \hat{A} \rangle_\alpha = \sum_{i=1}^{N} a_i P(a_i) = a_1 P(a_1) + a_2 P(a_2) + a_3 P(a_3) = 0 \times \frac{1}{4} + \sqrt{2} \times \frac{3}{8} + (-\sqrt{2}) \times \frac{3}{8} = 0$$

۱۷٫۵ چنانچه در سوال بالا یک حالت سامانه به صورت $|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 3/5 \\ 0 \\ 4i/5 \end{pmatrix}$ باشد

مقادیر زیر چقدر می‌شود: $P(0)$, $P(\sqrt{2})$, $P(-\sqrt{2})$, $\langle \hat{A} \rangle_\alpha$

$P(0) \to \frac{1}{2}$ or 50% ; $P(\sqrt{2}), P(-\sqrt{2}) \to \frac{1}{4}$ or 25% ; $\langle \hat{A} \rangle_\alpha \to 0$

۰/۵ یک حالت $|\alpha\rangle$ به صورت زیر است

$$|\alpha\rangle = \frac{i}{2}|b_1\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2}|b_3\rangle$$

که $|b_i\rangle$ها ویژه بردارهای عملگر $\hat{B}$ هستند

$$\hat{B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad b_1 \to |b_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},\quad b_2 \to |b_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},\quad b_3 \to |b_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

نکته: B قطری است. عناصر قطری ویژه مقادیر هستند و ویژه بردارها پایه‌های استاندارد $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

← احتمال اینکه در اندازه‌گیری $\hat{B}$ روی کت $|\alpha\rangle$ عدد $+1$ بدست آید چقدر است؟ $\quad P(1) = \frac{1}{4}$

← 〃 〃 〃 2 〃 〃 ؟ $\quad P(2) = 0$

← 〃 〃 〃 0 〃 〃 ؟ $\quad P(0) = 0$

← 〃 〃 〃 -1 〃 〃 ؟ $\quad P(-1) = \frac{3}{4}$

← مقدار انتظاری عملگر $\hat{B}$ در حالت $|\alpha\rangle$ چقدر است؟

$$\langle \hat{B} \rangle_\alpha = 1 \times \frac{1}{4} + 0 \times 0 + (-1) \times \frac{3}{4} = -\frac{1}{2}$$

$$-1 < \langle B \rangle < +1$$

---

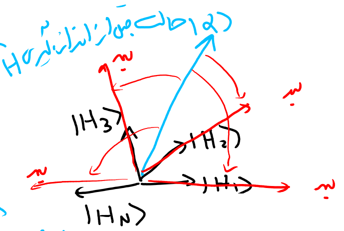
۵ بعد از اندازه‌گیری در کوانتوم ← حالت سامانه روی یکی از ویژه بردارهای عملگر فرو می‌ریزد ⟷ تأثیر مشاهده‌کننده (آزمایشگر) روی سامانه

قبل از اندازه‌گیری: $|\alpha\rangle \longrightarrow \hat{A} \begin{cases} |a_1\rangle \\ |a_2\rangle \\ \vdots \\ |a_N\rangle \end{cases}$

بعد از اندازه‌گیری: $\longrightarrow |\alpha\rangle \begin{cases} \to |a_1\rangle & \leftarrow \text{با احتمال } P(a_1) \\ \to |a_2\rangle & \leftarrow \text{با احتمال } P(a_2) \\ \to |a_3\rangle & \\ \quad \vdots & \\ \to |a_N\rangle & \leftarrow \text{با احتمال } P(a_N) \end{cases}$

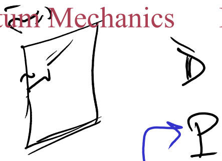
فرض می‌خواهیم انرژی را در سامانه اندازه‌گیری کنیم (مثال)

$$\hat{H} \xrightarrow{\text{عملگر انرژی}} \begin{cases} |H_1\rangle \\ |H_2\rangle \\ \vdots \\ |H_N\rangle \end{cases} \quad \text{ویژه بردارها}$$



$|\alpha\rangle$ بعد از اندازه‌گیری

داستان گربه شرودینگر



گربه

P (مرده)

P (زنده)

قبل از اندازه‌گیری

بعد از اندازه‌گیری

گربه

ورود به کوانتوم: عملگر هامیلتونی $\hat{H}$ ← هر سامانه‌ای در کوانتوم این عملگر را دارد.

ممکن است ماتریسی باشد

" " " دیفرانسیلی "

" " " ماتریسی یا دیفرانسیلی داشته باشد

مثال/ هامیلتونی یک ذره‌ی آزاد بنویسید. (دیفرانسیلی است) — یک بعدی

هیچ نیرویی نداریم ↔ پتانسیل نداریم $V=0$

کلاسیکی: $H = T + \cancel{V} = \frac{P_x^2}{2m} \Longrightarrow \boxed{\hat{H} = \frac{\hat{P}_x^2}{2m}}$

مثال/ هامیلتونی یک نوسانگر یک بعدی را بنویسید. (دیفرانسیلی و ماتریسی)

کلاسیکی: $H = T + V = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$

$$\boxed{\hat{H} = \frac{\hat{P}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2}$$

با داشتن هامیلتونی ← حل معادله شرودینگر مستقل از زمان

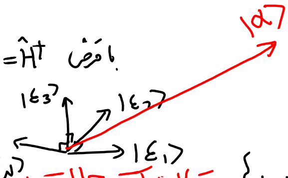
فرمالیسم ماتریسی: $\hat{H}|\varepsilon_i\rangle = \varepsilon_i|\varepsilon_i\rangle$

فرمالیسم موجی (دیفرانسیلی)

یافتن ویژه‌مقادیر و ویژه‌بردارها عملگر هامیلتونی

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right]\psi_i(r) = \varepsilon_i\, \psi_i(r)}$$

با فرض $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$



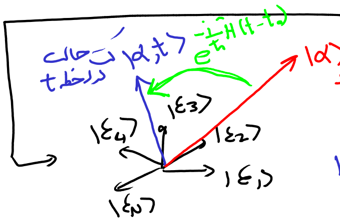
با داشتن $\{|\varepsilon_i\rangle\}$ می‌توان یک حالت را در این پایه بسط داد

در ادامه می‌توان از احتمال، مقدار چشمداشتی و ... سخن به میان آورد

دینامیک کوانتومی: بررسی تحول حالت سامانه

حل معادله وابسته به زمان شرودینگر ← فرمالیسم ماتریسی:

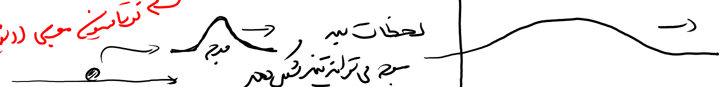
فرمالیسم موجی (دیفرانسیلی):



یک حالت $|\alpha,t\rangle$ در لحظه t

$e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}$

$|\alpha\rangle \equiv |\alpha, t_0\rangle$ در لحظه t_0



لحظات بعد

موج

موج می‌تواند تغییر شکل دهد

دینامیک کوانتومی موجی

$|\alpha, t_0\rangle = \checkmark \Longrightarrow |\alpha, t\rangle = ?$ دینامیک کوانتومی ماتریسی

فرمالیسم ماتریسی ⟵ $\hat{H}|\alpha,t\rangle = i\hbar\frac{d}{dt}|\alpha,t\rangle$ معادله شرودینگر *

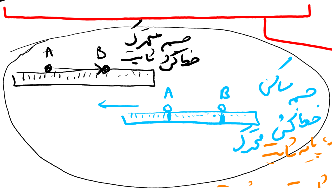
با داشتن یک حالت در لحظه اولیه $|\alpha, t_0\rangle$ ⟸ یک حالت در لحظه t ← $|\alpha,t\rangle$ از حل این معادله به دست می‌آید

** زمان در کوانتوم یک پارامتر است (عملگر نمی‌باشد)

در ادامه راجع به احتمال، مقدار چشمداشتی عملگرها در این حالت صحبت کنیم

احتمالاً تابع زمان خواهد بود

تا به حال در کوانتوم



- تصویر شرودینگر: عملگر ثابت، کت متغیر، پایه ثابت
- تصویر هایزنبرگ: عملگر متغیر، کت ثابت، پایه‌ها
- تصویر برهم‌کنشی: عملگر متغیر، کت متغیر، پایه ثابت

(۳) عملگر

(۲) کت حالت

(۱) پایه‌ها مقا

حل تحلیلی معادله شرودینگر

$$i\hbar\frac{d|\alpha,t\rangle}{dt} = \hat{H}|\alpha,t\rangle \longrightarrow \frac{d|\alpha,t\rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}|\alpha,t\rangle \longrightarrow \frac{d|\alpha,t\rangle}{|\alpha,t\rangle} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\,dt$$

$$\int_{|\alpha,t_0\rangle}^{|\alpha,t\rangle} \frac{d|\alpha,t\rangle}{|\alpha,t\rangle} = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat H\,dt$$

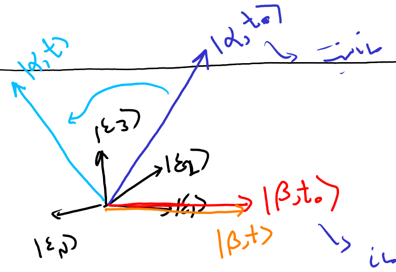
→ $\hat H$ مستقل از زمان : $\ln|\alpha,t\rangle - \ln|\alpha,t_0\rangle = -\frac{i}{\hbar}\hat H\int_{t_0}^{t} dt = -\frac{i}{\hbar}\hat H\times(t-t_0)$

$|\alpha,t\rangle = \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H\times(t-t_0)}}_{\text{انتشارگر زمانی}}|\alpha,t_0\rangle$

→ $\hat H(t)$ وابسته به زمان

→ $[\hat H(t_1),\hat H(t_2)]=0$ → هامیلتونی در زمان‌های مختلف جابجا شوند → سری

→ $[\hat H(t_1),\hat H(t_2)]\neq 0$ → ...



حالت‌های مانا در کوانتوم:

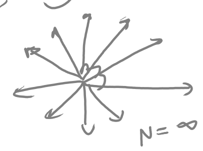
چنانچه که حالت سامانه منطبق بر یکی از ویژه بردارهای هامیلتونی باشد، کت مربوطه مانا است: در لحظات بعدی تغییر نخواهد کرد.

گذار به مکانیک کوانتومی موجی ← ماتریس بینهایت

← عملگرهایی که شکل ماتریسی ندارند

← بعد فضای کوانتومی بی‌نهایت است: $N=\infty$ ← فضای هیلبرت

فضای بی‌نهایت بعدی



مثال/ $\hat x$, $\hat p_x$ عملگرهای دیفرانسیلی هستند

استدلال بر این که این دو عملگر نمایش ماتریسی ندارند

$[\hat x,\hat p_x]=1$ → ...

$\boxed{[\hat x,\hat p_x]=i\hbar\hat 1}$ ← قانون حاکم بر عملگرهای مستقل از ارائه نمایش ماتریسی دارند یا دیفرانسیلی

$$\hat x\hat p_x - \hat p_x\hat x = i\hbar\hat 1$$

$$Tr(\hat x\hat p_x - \hat p_x\hat x) = Tr(i\hbar\hat 1)$$

$$\cancel{Tr(\hat x\hat p_x)} - \cancel{Tr(\hat p_x\hat x)} = i\hbar\, Tr(\hat 1)$$

$$\begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ & 1 & \\ 0 & & 1 \end{pmatrix}_{N\times N}$$

$0 \qquad = i\hbar N$ ← تضاد

لذا $\hat x$, $\hat p_x$ نمی‌توانند ماتریسی $N\times N$ باشند

عملگر در فضای هیلبرت ←

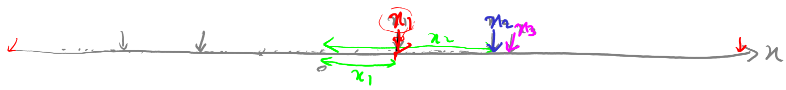
← می‌تواند ∞ ویژه بردار داشته باشد

← می‌تواند ∞ ویژه مقدار داشته باشد

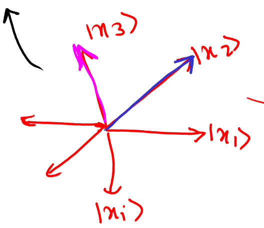
← طیف ویژه مقادیر ممکن است پیوسته باشند

عملگرهای مکان $\hat x$, $\hat y$, $\hat z$ (کارتزین)

$\hat x|x\rangle = x|x\rangle$ $\qquad$ $\hat x = \hat x^\dagger$



بی‌نهایت بعدی (فضای هیلبرت)



ویژه بردارهای عملگر $\hat x$. هرمیتی هستند

طیف ویژه مقادیر پیوسته است $\{-\infty \,\ldots\ldots\, +\infty\}$

طیف ویژه مقادیر ناپیوسته

همین داستان برای عملگرهای $\hat y$ و $\hat z$ ←

$\hat y|y\rangle = y|y\rangle$ $\qquad$ $\hat y = \hat y^\dagger$

$\hat z|z\rangle = z|z\rangle$ $\qquad$ $\hat z = \hat z^\dagger$

روابط جابجایی $[\hat x,\hat y]=0 \quad [\hat y,\hat z]=0 \quad [\hat z,\hat x]=0 \Longrightarrow$ ویژه بردارهای منطبق دارند

ویژه بردارهای مشترک عملگرهای $\hat x$, $\hat y$, $\hat z$: $|x,y,z\rangle = |\vec r\rangle$

$$\underbrace{\hat{x}|x,y,z\rangle \equiv \hat{x}|\bar{r}\rangle}=\underbrace{x|x,y,z\rangle \equiv x|\bar{r}\rangle}$$

$$\hat{y}|\bar{r}\rangle = y|\bar{r}\rangle$$

$$\hat{z}|\bar{r}\rangle = z|\bar{r}\rangle$$

مثلا

$$\hat{x}|x+dx,y,z\rangle = (x+dx)|x+dx,y,z\rangle$$

عملگر برداری ← $\hat{r}=\hat{x}\hat{i}+\hat{y}\hat{j}+\hat{z}\hat{k}$

$$\hat{r}|x,y,z\rangle = \bar{r}|x,y,z\rangle = \bar{r}|\bar{r}\rangle$$

(تکانه $\equiv$ تکانه خطی)

$\hat{P}_x$, $\hat{P}_y$, $\hat{P}_z$

عملگر تکانه خطی (کارتزین)

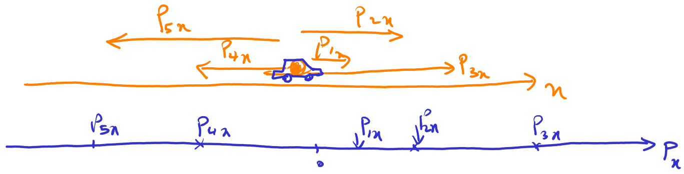
$\hat{P}_x=\hat{P}_x^{\dagger}$, $\hat{P}_y=\hat{P}_y^{\dagger}$, $\hat{P}_z=\hat{P}_z^{\dagger}$ ← هرمیتی‌اند (نامتناهی)

← طیف ویژه‌مقادیر پیوسته دارند

$P_x=\{-\infty \cdots +\infty\}$

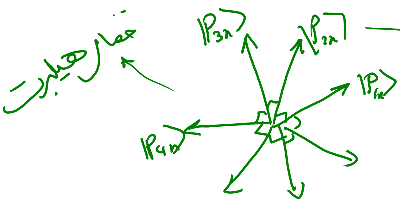
$P_y=\{-\infty \quad +\infty\}$

$P_z=\{-\infty \cdots +\infty\}$



← این عملگرها ناتبهگن هستند

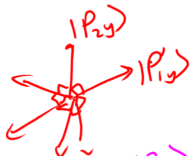
⇐ ویژه‌بردارها متعامدند $\langle P_{1x}|P_{2x}\rangle=0 , \ldots$



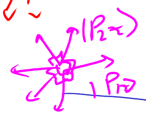
ویژه‌بردارهای عملگر تکانه خطی $\hat{P}_x$

$$\hat{P}_x|P_x\rangle = P_x|P_x\rangle$$

به طریق مشابه برای مؤلفه y و z تکانه خطی



$$\hat{P}_y|P_y\rangle = P_y|P_y\rangle$$



$$\hat{P}_z|P_z\rangle = P_z|P_z\rangle$$

روابط جابجایی $[\hat{P}_x,\hat{P}_y]=0$ $[\hat{P}_y,\hat{P}_z]=0$ $[\hat{P}_x,\hat{P}_z]=0$ → ویژه‌بردارهای مشترک

$$\underbrace{|P_x,P_y,P_z\rangle \equiv |\bar{P}\rangle}$$

$$\hat{P}_x|\bar{P}\rangle = P_x|\bar{P}\rangle$$

$$\hat{P}_y|\bar{P}\rangle = P_y|\bar{P}\rangle$$

$$\hat{P}_z|\bar{P}\rangle = P_z|\bar{P}\rangle$$

عملگر برداری تکانه خطی $\hat{P}=\hat{P}_x\hat{i}+\hat{P}_y\hat{j}+\hat{P}_z\hat{k}$ ⟶

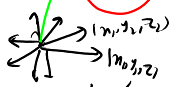
$$\hat{P}|\bar{P}\rangle = \bar{P}|\bar{P}\rangle$$

چون عملگر برداری است ← ویژه‌مقدارش برداریست ← $(P_x\hat{i}+P_y\hat{j}+P_z\hat{k})$

گذار به کوانتوم موجی ← در بررسی مسائل دو راه پیش رو داریم

- نمایش مختصه‌ای ← محورهای مکان محور هستند ①
- نمایش تکانه‌ای ← محورهای تکانه خطی محور هستند ②

① نمایش مختصه‌ای



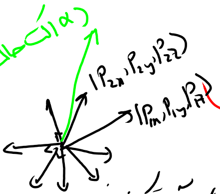
← پایه‌ها فضا $|\bar{r}\rangle$ ها هستند
ویژه‌بردارهای عملگر مکان

← کت حالت در این پایه بسط داده و بررسی می‌شود

$\{|\bar{r}\rangle\}$ ← عملگرها را باید در این نمایش نوشت

← معادله شرودینگر باید در این پایه حل شود

② نمایش تکانه‌ای



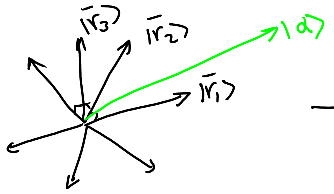
← پایه‌ها فضا $|\bar{p}\rangle$ ها هستند
ویژه‌بردارهای عملگر تکانه خطی

← کت حالت در این فضا بسط و بررسی می‌شود

$\{|\bar{p}\rangle\}$ ← عملگرها را باید در این پایه نوشت

← معادله شرودینگر باید در این پایه حل شود

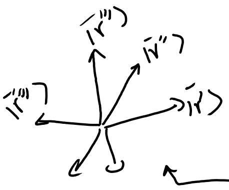
دیگر ویژگی‌های نمایش مختصه‌ای:



→ پایه کامل $\langle \bar{r}_i|\bar{r}_j\rangle = \delta_{ij}$

← دلتا کرونکر

← از آنجایی که طیف پیوسته است



$$\langle \bar{r}'|\bar{r}''\rangle = \delta(\bar{r}'-\bar{r}'')$$

← دلتا دیراک

ویژگی: $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(\bar{r}'-\bar{r}'')\,d\bar{r}' = 1 \xrightarrow{\text{کارتزین}} \iiint_{x'=y'=z'=-\infty}^{+\infty} \delta(x'-x'')\,\delta(y'-y'')\,\delta(z'-z'')\,dx'dy'dz' = 1$

ویژگی: $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} f(\bar{r})\,\delta(\bar{r}-\bar{r}')\,d\bar{r} = f(\bar{r}')$

بعضی ویژگی‌های دلتای دیراک با تمرین

بسط کت حالت در این پایه:

$$|\alpha\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \langle \bar{r}_i|\alpha\rangle\,|\bar{r}_i\rangle \longrightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \bar{r}|\alpha\rangle|\bar{r}\rangle\,d\bar{r}$$

با توجه فضاهای هیلبرت

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} |\bar{r}\rangle\underbrace{\langle \bar{r}|\alpha\rangle}_{?}\,d\bar{r}$$

تصویر $|\alpha\rangle$ روی $|\bar{r}\rangle$ ؟؟

$$\langle \bar{r}|\alpha\rangle = \psi_\alpha(\bar{r})$$

تابعی از $\bar{r}$

تابع موج: Wave function

← موجی که به ذره با کت $|\alpha\rangle$ نسبت می‌دهیم

$\psi_\alpha(x,y,z)$

از آنجا که x و y و z پیوسته هستند ← تابع موج پیوسته است و این تابع می‌تواند مختلط باشد

نکته: در دینامیک کوانتومی

$$\langle \bar{r}|\alpha,t\rangle = \psi_\alpha(x,y,z,t) \equiv \psi_\alpha(\bar{r},t)$$

تابع موج تابعیت زمانی نیز دارد

مثال/ ذره آزاد در کوانتوم : ذره در هیچ نیرویی احساس نمی‌کند ≡ پتانسیل صفر

کلاسیک $H = T + \cancel{V} = T$

کوانتوم : $\hat{H} = \hat{T} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$

از حل معادله شرودینگر مستقل از زمان

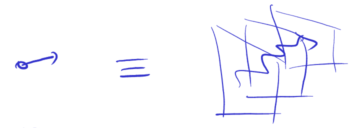
موج ≡ ذره

$\langle r|\alpha\rangle$

$\psi_\alpha(\bar{r}) = Ae^{i\bar{k}\cdot\bar{r}} = Ae^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}$

ضریب

مؤلفه‌های بردار موج



احتمالات در فضای پیوسته:

در فضای گسسته: ← از قبل می‌دانیم که اگر روی حالت $|\alpha\rangle$ یک اندازه‌گیری برای کمیت $\hat{A}$ انجام دهیم، یکی از ویژه مقادیر $\hat{A}$ را به عنوان پاسخ انتخاب می‌کنیم

فضای غیر هیلبرت ⟶

$|a_1\rangle \longrightarrow a_1$

$|a_2\rangle \longrightarrow a_2$

$\vdots$

$|a_N\rangle \longrightarrow a_N$

$P(a_i) = |\langle a_i|\alpha\rangle|^2$ احتمال اینکه اندازه‌گیری $\hat{A}$ مقدار a_i را به دست آید

$|\alpha\rangle = \sum_i |a_i\rangle\langle a_i|\alpha\rangle = \langle a_1|\alpha\rangle|a_1\rangle + \langle a_2|\alpha\rangle|a_2\rangle + \cdots + \langle a_N|\alpha\rangle|a_N\rangle$

فضای هیلبرت ⟶

در فضای پیوسته: احتمال اینکه ذره در ناحیه $\bar{r}$ و $\bar{r}+d\bar{r}$ باشد:

$|\langle r|\alpha\rangle|^2 d\bar{r} = \langle r|\alpha\rangle\langle r|\alpha\rangle^* d\bar{r} = \underbrace{\psi_\alpha(\bar{r})\psi_\alpha^*(\bar{r})}_{\text{احتمال}} d\bar{r}$

$dx\,dy\,dz$

المان حجم dV

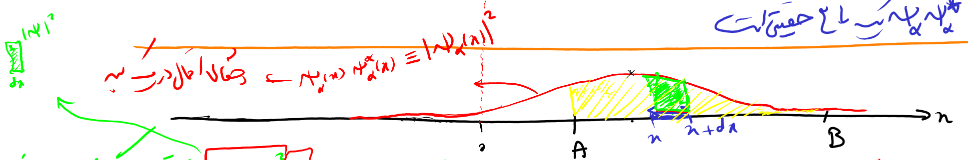
احتمال اینکه ذره در حجم dV در محل $\bar{r}$ باشد

$1 \geq$ احتمال ≥ 0

$0 <$ چگالی احتمال $< \infty$

$|\langle\bar{r}|\alpha\rangle|^2 = \psi_\alpha(\bar{r})\psi_\alpha^*(\bar{r}) = |\psi_\alpha(\bar{r})|^2$ ⟵ چگالی احتمال = حقیقی

* توجه: $\psi_\alpha(\bar{r})$ یک تابع مختلط است اما $\psi_\alpha\psi_\alpha^*$ یک تابع حقیقی است



احتمال در یک بعد: $\psi_\alpha(x)$ تابع موج ذره

$\psi_\alpha(x)$ تابع موجی است که به ذره نسبت داده‌ایم ⟵ چگالی احتمال: $|\psi_\alpha(x)|^2$

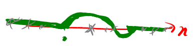
$(x, x+dx)$ احتمال اینکه ذره در بازه $\boxed{|\psi_\alpha(x)|^2 dx} = \psi_\alpha(x)\psi_\alpha^*(x)dx$

باشد ≡ ناحیه هاشور زده شده. در نمودار $|\psi|^2$ یا به عبارتی مساحت ناحیه هاشور زده

نکته: از آنجا که ذره یک جایی در محور x است ← احتمال کل = مساحت کل زیر منحنی قرمز = واحد ⟶

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_\alpha(x)|^2 dx = 1$$

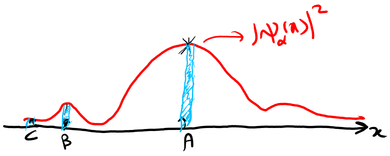
مثال: $\psi_\alpha(x) = \begin{cases} \sin(5x) & 0 < x < 7 \\ 0 & x < 0 \\ 0 & x > 7 \end{cases}$



نکته: احتمال اینکه ذره در ناحیه‌ای بین a تا b باشد چقدر است؟؟

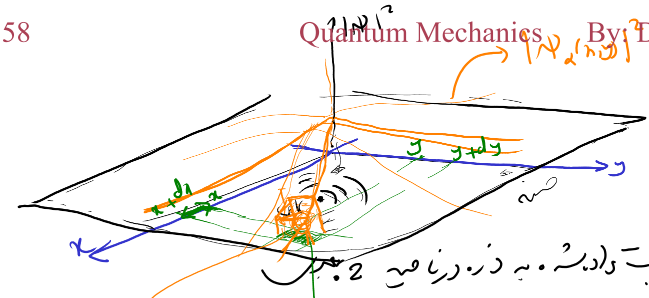
$$\int_{x=A}^{B} |\psi_\alpha(x)|^2 dx = \int_A^B \psi_\alpha(x)\psi_\alpha^*(x)dx \Rightarrow$$ مساحت ناحیه زرد رنگ

مثال:



نکته: هر جا که تابع $|\psi_\alpha(x)|^2$ بیشتر باشد، احتمال حضور ذره در آن نقطه بیشتر است:

$P(A) > P(B) > P(C)$



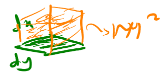
احتمال در دو بعد (مختصات کارتزین)

$\psi_\alpha(x,y)$ تابع موج نسبت داده شده به ذره در ناحیه 2 بعدی $\rightarrow$ $\psi_\alpha(x,y)\,\psi^*_\alpha(x,y) = |\psi_\alpha(x,y)|^2$

تابع حقیقی از x و y $\leftarrow$ چگالی احتمال

?? احتمال اینکه ذره در این ناحیه باشد $= |\psi_\alpha(x,y)|^2\, dx\,dy = \boxed{\psi_\alpha(x,y)\psi^*_\alpha(x,y)}\boxed{dx\,dy}$

حجم محصور زیر رویه در ناحیه $(y \to y+dy)$, $(x \to x+dx)$



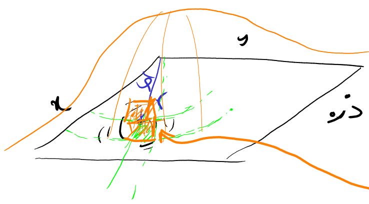
حجم کل زیر این رویه برابر واحد است $\leftarrow$ $\displaystyle\int_{x=-\infty}^{+\infty}\int_{y=-\infty}^{+\infty} \psi_\alpha(x,y)\,\psi^*_\alpha(x,y)\,dx\,dy = 1$

نکته: ذره یک جایی روی صفحه هست

شرط نرمالیزاسیون تابع موج

$\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$

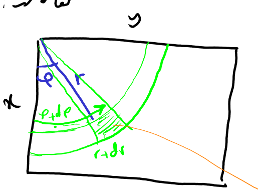
احتمال در دو بعد (مختصات قطبی)



$\psi_\alpha(r,\varphi)$ تابع موج برحسب مختصات قطبی ذره در دو بعد $\rightarrow$ $|\psi_\alpha(r,\varphi)\,\psi^*_\alpha(r,\varphi)|^2 \rightarrow |\psi_\alpha(r,\varphi)|^2$

چگالی احتمال

نگاه از بالا



احتمال اینکه ذره در ناحیه $(r \to r+dr)$ و $(\varphi \to \varphi+d\varphi)$ ناحیه هاشور زده در شکل $\equiv$ حجم زیر رویه محدود به ناحیه گفته شده $\equiv$ $\boxed{|\psi_\alpha(r,\varphi)|^2}\boxed{r\,dr\,d\varphi}$

ارتفاع

(۱) سطح در مختصات قطبی

مساحت (۱)

نکته: شرط نرمالیزاسیون در مختصات قطبی

$$\int_{r=0}^{\infty}\int_{\varphi=0}^{2\pi} |\psi_\alpha(r,\varphi)|^2\, r\,dr\,d\varphi = 1$$

رابطه کاملیت فضا:

$$\sum_i |\bar{r}_i\rangle\langle\bar{r}_i| = \hat{1}$$

چون فضا بی‌نهایت بعدی است

$$\iiint_{x=-\infty}^{+\infty} |\bar{r}\rangle\langle\bar{r}|\, d\bar{r} = \hat{1}$$

حالت خاص: $\displaystyle\int_{x=-\infty}^{+\infty} |x\rangle\langle x|\,dx = \hat{1}$ or $\displaystyle\int_{y=-\infty}^{+\infty} |y\rangle\langle y|\,dy = \hat{1}$

$\iint |x,y\rangle\langle x,y|\,dx\,dy = \hat{1}$

کاربرد:

اگر یک حالت نرمالیزه داشته باشیم $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$

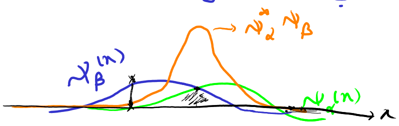
$$\langle\alpha|\hat{1}|\alpha\rangle = \langle\alpha|\int_{-\infty}^{+\infty}|\bar{r}\rangle\langle\bar{r}|\,d\bar{r}\,|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\langle\alpha|\bar{r}\rangle\langle\bar{r}|\alpha\rangle\,d\bar{r} = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*_\alpha(\bar{r})\,\psi_\alpha(\bar{r})\,d\bar{r}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_\alpha(\bar{r})|^2\, d\bar{r} = 1$$

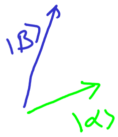
{ حجم کل زیر تابع چگالی احتمال برابر 1 است $\equiv$ منطقه محصور در زیر

★ ★

مثال / همپوشانی توابع موج ≡ ضرب نقطه‌ای



≡



دو سامانه بالکت‌های $|\alpha\rangle$ و $|\beta\rangle$ تعریف کنید

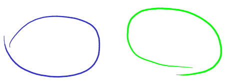
$$\langle\alpha|\beta\rangle = \langle\alpha|\hat{1}|\beta\rangle = \langle\alpha|\int_{-\infty}^{+\infty}|x\rangle\langle x|dx\,|\beta\rangle = \int_{x=-\infty}^{+\infty}\langle\alpha|x\rangle\langle x|\beta\rangle dx$$

معیاری از همراستا بودن دو حالت

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|x\rangle\langle x|dx = \hat{1}$$

$$= \int_{x=-\infty}^{+\infty}\psi_\alpha^*(x)\ \psi_\beta(x)\, dx$$

همپوشانی دو تابع موج را می‌دهد



⇒ همپوشانی صفر → یا $\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_\alpha^*\psi_\beta\, dx = 0$

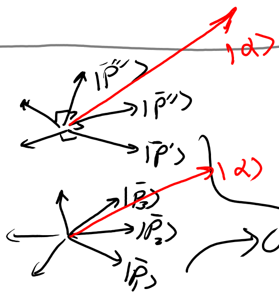
این دو تابع موج همپوشانی ندارند

$\psi_\alpha(x)$ بر $\psi_\beta(x)$ عمود است

⇒ همپوشانی جزئی

⇒ همپوشانی زیاد

نمایش تکانه ای (ویژگی‌ها) ← پایه‌ها فضا و شده بردارای عملگر تکانه خطی باشند



بردار کامل $\langle\bar{p}_i|\bar{p}_j\rangle = \delta_{ij}$ ⟷ $\langle\bar{p}'|\bar{p}''\rangle = \delta(\bar{p}'-\bar{p}'')$

دلتا دیراک

ویژگی دلتا / مثال $\int_{-\infty}^{\infty}\delta(\bar{p}-\bar{p}'')f(\bar{p}'')d\bar{p}'' = f(\bar{p}')$

کت حالت را در این فضا بسط می‌دهیم

$$|\alpha\rangle = \sum_{i=1}^{\infty}\langle\bar{p}_i|\alpha\rangle|\bar{p}_i\rangle \longrightarrow |\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\langle\bar{p}|\alpha\rangle|\bar{p}\rangle d\bar{p}$$

ناشی می‌شود چون این فضا نیز هیلبرت است

تعریف کت حالت $|\alpha\rangle$ در فضای تکانه $|\bar{p}\rangle$ است

$$\langle\bar{p}|\alpha\rangle = \Phi_\alpha(\bar{p}) = \Phi_\alpha(p_x, p_y, p_z)$$

نکته: Φ_α و $\psi_\alpha(\bar{r})$ به هم ربط دارند

تابع موج ذره در فضای تکانه = تابع برحسب تکانه ← می‌تواند تابعی مختلط باشد

مثال الکترون مقید به حرکت در یک سیم

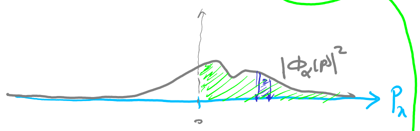
موج در فضای تکانه $\Phi_\alpha(p_x)$

مثال ذره مقید به حرکت در صفحه x-y

$\Phi_\alpha(p_x, p_y)$ تابع موج دو بعدی در فضای تکانه

مثال: الکترونی مقید به حرکت در یک بعد است و تابع موج آن در فضای تکانه به صورت $\Phi_\alpha(p_x)$ است.

الف) احتمال اینکه ذره به سمت راست در حال حرکت باشد چقدر است $\Leftarrow p_x>0$



چگالی احتمال در فضای تکانه $\quad \Phi_\alpha(p_x)\Phi^*_\alpha(p_x)=|\Phi_\alpha(p_x)|^2$

احتمال اینکه تکانه ذره بین p_x و p_x+dp_x باشد $\equiv |\Phi_\alpha(p_x)|^2\,dp_x$

$$\int_{p_x=0}^{\infty}|\Phi_\alpha(p_x)|^2\,dx$$

ب) شرط نرمالیزاسیون تابع موج ؟؟

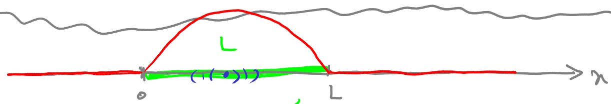
$$\int_{-\infty}^{+\infty}\Phi_\alpha(p_x)\Phi^*_\alpha(p_x)\,dp_x=\int_{-\infty}^{+\infty}|\Phi_\alpha(p_x)|^2\,dp_x=1$$

نمایش مختصه‌ای

چگالی احتمال $\quad \rho(x)=\psi_\alpha(x)\psi^*_\alpha(x)=|\psi_\alpha(x)|^2$

اگر تحول زمانی وارد مسئله گردد:

چگالی احتمال تابع زمان $\quad \rho(x,t)=\psi_\alpha(x,t)\psi^*_\alpha(x,t)=|\psi_\alpha(x,t)|^2$



سیم رسانای عالی به طول L

مثال: فرض کنید سیم رسانای کاملی داریم

یک الکترون مقید به حرکت یک بعدی داخل سیم (پتانسیل صفر فرض شده)

فرض کنیم حالت ذره $|\alpha\rangle$ و در نتیجه تابع موج آن در نمایش مختصه‌ای به صورت زیر باشد

چون در $x<0$ ذره حضور ندارد

$$\psi_\alpha(x)=\begin{cases}0 & x<0\\ a\sin\frac{2\pi}{L}x & 0\leq x\leq L\\ 0 & x>L\end{cases}$$

چون در $x>0$ ذره حضور ندارد

الف) ضریب a را به گونه‌ای بیابید که تابع موج ذره نرمالیزه باشد.

$$\langle\alpha|\alpha\rangle=1 \Longleftrightarrow \int_{x=-\infty}^{+\infty}\psi_\alpha(x)\psi^*_\alpha(x)\,dx=1 \equiv \int_{x=-\infty}^{+\infty}\rho(x)\,dx \equiv \int_{x=-\infty}^{+\infty}\underbrace{dP(x)}_{\text{احتمال}}$$

نکته: تابع موج داده شده ضابطه‌ای است

$$\int_{x=-\infty}^{0}\psi\psi^*dx+\int_{x=0}^{L}\psi\psi^*dx+\int_{x=L}^{\infty}\psi\psi^*dx=1$$

چون $\psi(x<0)=0$ $\qquad$ چون $\psi(x>L)=0$

$$\int_0^L\left(a\sin\tfrac{2\pi}{L}x\right)\left(a^*\sin\tfrac{2\pi}{L}x\right)dx=\int_0^L|a|^2\sin^2\tfrac{2\pi}{L}x\,dx=1$$

$\sin^2\theta = \frac{1-\cos 2\theta}{2}$

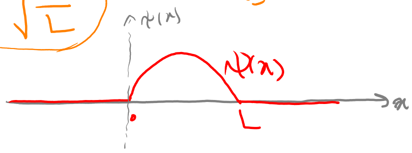
$$|a|^2 \int_0^L \frac{1-\cos\frac{4\pi}{L}x}{2}\,dx = |a|^2\left(\int_0^L \frac{1}{2}\,dx - \int_0^L \frac{1}{2}\cos\frac{4\pi}{L}x\,dx\right) = |a|^2\left(\frac{x}{2}\Big]_0^L - \frac{1}{2}\,\frac{L}{4\pi}\sin\frac{4\pi}{L}x\Big]_0^L\right)$$

$$\rightarrow |a|^2\left(\frac{L}{2}-0\right) = 1 \quad \Longrightarrow \quad |a|^2 = \frac{2}{L}$$

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & x<0 \\ \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{2\pi}{L}x & 0\leq x\leq L \\ 0 & x>L \end{cases}$$

ساده‌ترین انتخاب

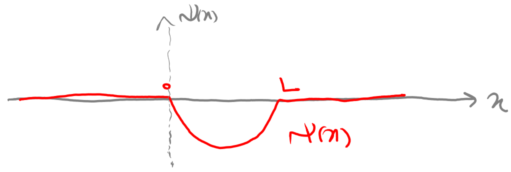
$$\leftarrow a = \sqrt{\frac{2}{L}}$$



$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & x<0 \\ -\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{2\pi}{L}x & 0\leq x\leq L \\ 0 & x>L \end{cases}$$

* ممکن است انتخاب فردی به صورت زیر باشد

$$a = -\sqrt{\frac{2}{L}}$$



$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & x<0 \\ i\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{2\pi}{L}x & 0\leq x\leq L \\ 0 & x>L \end{cases}$$

* ممکن است انتخاب فردی به صورت زیر باشد

$$a = i\sqrt{\frac{2}{L}} \longrightarrow aa^* = i\sqrt{\frac{2}{L}}\left(-i\sqrt{\frac{2}{L}}\right) = \frac{2}{L}$$

ψ درست است اما چون مختلط است نمی‌توان مانند دو مثال قبلی رسم کرد

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & x<0 \\ e^{i\delta}\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{2\pi}{L}x & 0\leq x\leq L \\ 0 & x>L \end{cases}$$

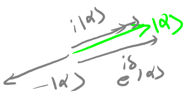
* ممکن است انتخاب فردی به صورت زیر باشد

$e^{i\delta} = \cos\delta + i\sin\delta$

$$a = \underbrace{e^{i\delta}}_{\text{فاز}}\sqrt{\frac{2}{L}} \longrightarrow aa^* = \frac{2}{L} = e^{i\delta}\sqrt{\frac{2}{L}}\;e^{-i\delta}\sqrt{\frac{2}{L}}$$

ψ درست است اما چون مختلط است نمی‌توان آن را رسم کرد

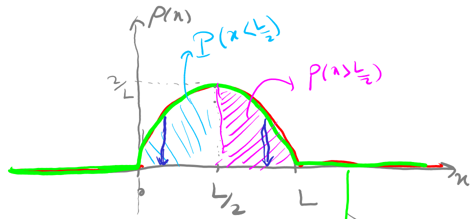
از قبل می‌دانستیم در کوانتوم امتداد مهم است



لذا توابع موج که با الگوریتم فوق حاصل شد با هم معادلند ⟵ تنها اختلاف فاز دارند

چگالی احتمال آن‌ها یکسان است

$$\underbrace{P(x)}_{\text{تابع حقیقی}} = \psi(x)\,\psi^*(x) = \begin{cases} 0 & x<0 \\ \frac{2}{L}\sin^2\frac{2\pi}{L}x & 0\leq x\leq L \\ 0 & x>L \end{cases} \Longrightarrow$$



مساحت کل زیر منحنی باید ۱ باشد ⟸ شرط نرمالیزاسیون

نکته: از ظاهر تابع چگالی احتمال پیداست که احتمال حضور ذره در مرکز سیم $(x=\frac{L}{2})$ از همه جا بالاتر است.

ب) احتمال حضور ذره در نیمه راست سیم چقدر است؟

$$P(x>\tfrac{L}{2}) = \int_{x=\frac{L}{2}}^{L}\psi(x)\psi^*(x)\,dx = \int_{x=\frac{L}{2}}^{L}P(x)\,dx$$

از لحاظ منطقی احتمال حضور در $x>\frac{L}{2}$ با احتمال حضور در $x<\frac{L}{2}$ یکی است

$$P(\underbrace{x}_{\text{ذره}}<\tfrac{L}{2}) = P(\underbrace{x}_{\text{ذره}}>\tfrac{L}{2}) = \frac{1}{2}$$

$$= \int_{x=\frac{L}{2}}^{L} \frac{2}{L}\sin^2\frac{2\pi}{L}x \, dx = \frac{2}{L}\int_{\frac{L}{2}}^{L} \frac{1-\cos\frac{4\pi}{L}x}{2}\,dx = \frac{2}{L}\left(\int_{\frac{L}{2}}^{L}\frac{dx}{2} - \int_{\frac{L}{2}}^{L}\frac{\cos\frac{4\pi}{L}x}{2}\,dx\right)$$

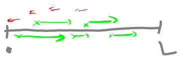
$$= \frac{2}{L}\left(\frac{x}{2}\Big]_{L/2}^{L} - \frac{1}{2}\frac{L}{4\pi}\sin\frac{4\pi}{L}x\Big]_{L/2}^{L}\right) = \frac{2}{L}\left(\frac{L}{2} - \left(\frac{L}{4}\right) - \left(\frac{L}{8\pi}\cancel{\sin 4\pi} - \frac{L}{8\pi}\cancel{\sin 2\pi}\right)\right) = \frac{1}{2}$$

ج) احتمال اینکه الکترون در حال حرکت به سمت راست باشد چقدر است؟

$\underbrace{\text{در حال حرکت به سمت راست}}_{\text{یعنی } P_x > 0}$

برای محاسبه به تابع موج در فضای تکانه نیاز داریم ← فقط کافیست مقدار آن را حساب کنیم

$$\int_{P_x=0}^{\infty} \Phi_\alpha(P_x)\Phi_\alpha^*(P_x)\,dP_x = \frac{1}{2}$$



از تقارن مسئله پیداست که الکترون همان شانسی را که برای تکانه مثبت دارد همان شانس را برای تکانه منفی دارد لذا هر دو احتمال برابر

د) مقدار انتظاری $\hat{x}$ را حساب کنید. ←

$$\int \psi^*(x)\,\hat{x}\,\psi_\alpha(x)\,dx$$

استخراج فرمول برای کل درس: فرض مقدار چشمداشتی عملگر $\hat{A}$ را بخواهیم در نمایش موجی چطور حساب کرد

مقدار انتظاری با فرض نرمالیزه بودن $|\alpha\rangle$

$$\langle\alpha|\hat{A}|\alpha\rangle = \langle\alpha|\hat{1}\hat{A}\hat{1}|\alpha\rangle = \iint_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{\langle\alpha|x\rangle}_{\psi_\alpha^*(x)}\underbrace{\langle x|\hat{A}|x'\rangle}_{\text{نمایش مختصاتی عملگر } \hat{A}}\underbrace{\langle x'|\alpha\rangle}_{\psi_\alpha(x')}\,dx'\,dx$$

در نمایش مختصات

$$\hat{1} = \int_{-\infty}^{+\infty}|x\rangle\langle x|\,dx \qquad \hat{1} = \int_{-\infty}^{+\infty}|x'\rangle\langle x'|\,dx'$$

برای مثال خودمان $\hat{A} = \hat{x}$

$$\langle x|\hat{x}|x'\rangle = x'\langle x|x'\rangle = x'\delta(x-x')$$

$$\langle\alpha|\hat{x}|\alpha\rangle = \iint_{-\infty}^{+\infty} \psi_\alpha^*(x)\,\psi_\alpha(x')\,x'\,\delta(x-x')\,dx\,dx' = \int_{x=-\infty}^{+\infty}\psi_\alpha^*(x)\,\psi_\alpha(x)\,x\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x\,|\psi(x)|^2\,dx$$

مقدار چشمداشتی عملگر $\hat{x}$ در نمایش مختصاتی

$$\boxed{\langle\hat{x}\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x\,\rho(x)\,dx}$$

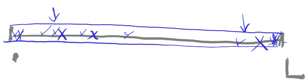
بعد طول

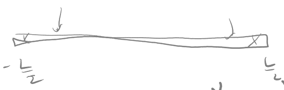
احتمال بدون بعد

سوال: بعد $\langle\hat{x}\rangle$ چیست ← بعد طول داشته باشد

مقدار انتظاری ≡ متوسط تعداد زیادی اندازه‌گیری

مقدار انتظاری $\hat{x}$ ≡ ~ ~ ~ میانگین x ذره

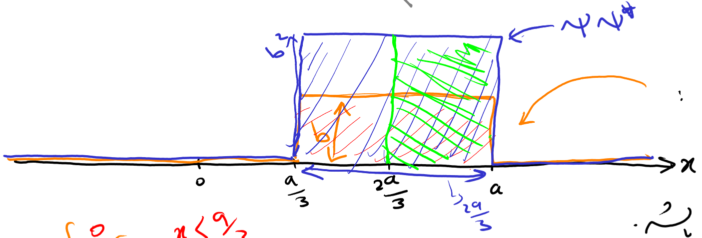




تمرین: مهلت ارسال امشب قبل از ۲۰

(عکس از پاسخ آماده باشم) ۲۵ دقیقه زمان (۱ نمره) کوئیز

فرض کنید تابع موج ذره‌ای به صورت زیر است:



$$\psi(x)=\begin{cases}0 & x<a/3\\ b & \frac{a}{3}<x<a\\ 0 & x>a\end{cases}$$

الف) طوری b را بیابید که تابع موج نرمالیزه باشد.

$b^2 \times \frac{2a}{3}=1 \rightarrow b=\sqrt{\frac{3a}{2}}$ تابع موج را بنویسید

ب) احتمال حضور ذره در ناحیه $x>\frac{2a}{3}$ چقدر است.

$$\psi\psi^*=\begin{cases}0 & x<\frac{a}{3}\\ b^2 & \frac{a}{3}<x<a\\ 0 & x>a\end{cases} \longrightarrow \int_{-\infty}^{+\infty}\psi\psi^* dx=1 \rightarrow 0+\int_{x=a/3}^{a} b^2 dx+0=1$$

$$b^2\left(a-\frac{a}{3}\right)=1 \rightarrow 2b^2\frac{a}{3}=1 \rightarrow \boxed{b=\sqrt{\frac{3}{2a}}}$$

ب) $b^2\times\frac{a}{3}=\frac{3}{2a}\,\frac{a}{3}=\frac{1}{2}$

$$\psi=\begin{cases}0 & x<0\\ \sqrt{\frac{3}{2a}} & \frac{a}{3}<x<a\\ 0 & x>a\end{cases} \longrightarrow \psi\psi^*=\begin{cases}0 & x<0\\ \frac{3}{2a} & 0<x<a\\ 0 & x>a\end{cases} \qquad P\left(x>\frac{2a}{3}\right)=\int_{2a/3}^{\infty}\psi\psi^* dx=\int_{2a/3}^{a}\frac{3}{2a}dx=\frac{1}{2}$$

نمایش عملگرها در فضای مختصات (نگاه موجی)

سوال: عملگرهای چون $\hat{x}$, $\hat{p}_x$, $\hat{y}$, $\hat{p}_y$, ... در نمایش مختصات چه شکلی دارند؟

یا اگر $|\alpha\rangle$ یک حالت باشد $\Leftarrow$ $\hat{x}|\alpha\rangle=?$ یا $\hat{p}_x|\alpha\rangle=?$

پاسخ: ① عملگرهای مکان $\hat{x}$, $\hat{y}$, $\hat{z}$

$\hat{x}|x\rangle=x|x\rangle$
$\langle x|\hat{x}=x\langle x|$

از قبل می‌دانستیم: $\boxed{\hat{x}|\alpha\rangle=|\beta\rangle}$

ضرب طرفین از چپ در $\langle x|$

$$\langle x|\hat{x}|\alpha\rangle=\langle x|\beta\rangle \Rightarrow x\langle x|\alpha\rangle=\langle x|\beta\rangle$$

$$\boxed{x\,\psi_\alpha(x)=\psi_\beta(x)}$$

در فضای مختصات $\quad \hat{x}\longrightarrow x$

به طور مشابه $\quad \hat{y}\longrightarrow y$, $\hat{z}=z$, $\hat{r}=\hat{x}\hat{i}+\hat{y}\hat{j}+\hat{z}\hat{k}\longrightarrow x\hat{i}+y\hat{j}+z\hat{k}$

پاسخ ② عملگرهای تکانه خطی $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$ در نمایش مختصات

$\cancel{\hat{p}_x\longrightarrow p_x}$

نشان خواهیم داد این عملگرها شکل دیفرانسیلی (مشتق) دارند

تکانه خطی (کلاسیک): $(P_x = mV_x$ چه در کلاسیک چه در کوانتم عامل جابجایی، عامل انتقال

$\hat{P}_x$ مولد انتقال در راستای x ← چرا؟ اگر $P_x=0$ آنگاه در راستای x حرکتی نخواهد داشت

$\hat{P}_y$ مولد انتقال در راستای y ← ~

$\hat{P}_z$ مولد انتقال در راستای z ← ~

تمرین: عملگر انتقال خرد در راستای x به صورت زیر است (خودتان) اثبات را پیدا کنید

$$\left(\hat{1} - \frac{i\hat{P}_x}{\hbar}dx\right)|x,y,z\rangle = |x+dx, y, z\rangle$$

به طور مشابه

$$\left(\hat{1} - \frac{i\hat{P}_y}{\hbar}dy\right)|x,y,z\rangle = |x, y+dy, z\rangle$$

$$\left(\hat{1} - i\frac{\hat{P}_z}{\hbar}dz\right)|x,y,z\rangle = |x, y, z+dz\rangle$$

$$|x,y,z\rangle - dx\frac{i\hat{P}_x}{\hbar}|x,y,z\rangle = |x+dx, y, z\rangle$$

$$\hat{P}_x|x,y,z\rangle = i\hbar\left(\frac{|x+dx,y,z\rangle - |x,y,z\rangle}{dx}\right)$$

از طرفین دوگان می‌گیریم

$$\langle x,y,z|\hat{P}_x = -i\hbar\left(\frac{\langle x+dx,y,z| - \langle x,y,z|}{dx}\right)$$

از سمت راست طرفین را در $|\alpha\rangle$ ضرب می‌کنیم

$$\boxed{\langle x,y,z|\hat{P}_x|\alpha\rangle} = -i\hbar\left(\frac{\langle x+dx,y,z|\alpha\rangle - \langle x,y,z|\alpha\rangle}{dx}\right)$$

$$= -i\hbar\left(\frac{\psi_\alpha(x+dx,y,z) - \psi_\alpha(x,y,z)}{dx}\right)$$

$$= -i\hbar\frac{\partial\psi_\alpha(x,y,z)}{\partial x} = \boxed{-i\hbar\frac{d\psi_\alpha(x,y,z)}{dx}}$$

در نمایش مختصات $\quad \hat{P}_x \longrightarrow -i\hbar\frac{d}{dx} \quad$ or $\quad \hat{P}_x \longrightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$

به طور مشابه:

در نمایش مختصاتی $\hat{P}_y \longrightarrow -i\hbar \frac{d}{dy}$ or $\hat{P}_y \longrightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dy}$

$$\hat{P}_z \longrightarrow -i\hbar \frac{d}{dz} \quad \text{or} \quad \hat{P}_z \longrightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dz}$$

$$\hat{\mathbf{P}} = \hat{P}_x \hat{i} + \hat{P}_y \hat{j} + \hat{P}_z \hat{k} \longrightarrow \left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\hat{i} + \left(-i\hbar\frac{d}{dy}\right)\hat{j} + \left(-i\hbar\frac{d}{dz}\right)\hat{k}$$

$$\hat{\mathbf{P}} \longrightarrow -i\hbar\nabla$$

در حالت کلی در نمایش مختصاتی:

$$\hat{f}(\hat{x},\hat{y},\hat{z},\hat{P}_x,\hat{P}_y,\hat{P}_z) \longrightarrow f\left(x,y,z,\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx},\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dy},\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dz}\right)$$

مثال:

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{P}_z - \hat{z}\hat{P}_y \xrightarrow{\text{نمایش مختصاتی}} \hat{L}_x = y\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dz}\right) - z\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dy}\right)$$

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{d}{dz} - z\frac{d}{dy}\right)$$

$$\hat{L}_y = \hat{z}\hat{P}_x - \hat{x}\hat{P}_z \xrightarrow{\text{نمایش مختصاتی}} \hat{L}_y = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{d}{dx} - x\frac{d}{dz}\right)$$

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{P}_y - \hat{y}\hat{P}_x \xrightarrow{\text{نمایش مختصاتی}} \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{d}{dy} - y\frac{d}{dx}\right)$$

تمرین: شکل عملگرهای $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z$ را در نمایش تکانه (تابع موج‌ها) بنویسید. (راهنمایی ۰)

$$\hat{x} \longrightarrow ?\ i\hbar\frac{d}{dP_x} \qquad \hat{P}_x \longrightarrow ?\ P_x$$

$$\hat{y} \longrightarrow ?\ i\hbar\frac{d}{dP_y} \qquad \hat{P}_y \longrightarrow ?\ P_y$$

$$\hat{z} \longrightarrow ?\ i\hbar\frac{d}{dP_z} \qquad \hat{P}_z \longrightarrow ?\ P_z$$

خلاصه: نما. مختصاتی برای کوانتوم موجی: یک هم $\Psi_\alpha(x)$ تابع موج

عملگر مختصاتی $\boxed{\hat{x},\hat{y},\hat{z} \longrightarrow x, y, z}$

عملگرهای تکانه خطی $\hat{P}_x \longrightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$, $\hat{P}_y \longrightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dy}$, $\hat{P}_z \longrightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dz}$

هر عملگر برحسب عملگرهای فوق در نمایش مختصاتی:

$$\hat{f}(\hat{x},\hat{y},\hat{z},\hat{P}_x,\hat{P}_y,\hat{P}_z) \longrightarrow \hat{f}\left(x,y,z,\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx},\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dy},\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dy}\right)$$

مثال: هامیلتونی نوسانگر یک بعدی کوانتومی را در نمایش مختصاتی بنویسید:

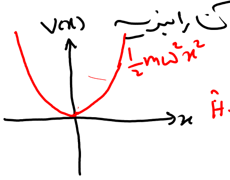
$\boxed{\text{کلاسیک}\quad H = T+V = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2}$

کوانتومی $\hat{H} = \frac{\hat{P}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$

$$\xrightarrow{\text{نمایش مختصاتی}} \hat{H} = \frac{\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \longrightarrow \boxed{\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2}$$

$$\xrightarrow{\text{نمایش تکانه‌ای}} \hat{H} = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\left(i\hbar\frac{d}{dP_x}\right)^2 \longrightarrow \boxed{\hat{H} = \frac{P_x^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2\hbar^2\frac{d^2}{dP_x^2}}$$

مثال: پتانسیل حاکم بر ذره به صورت زیر است هامیلتونی آن را بنویسید

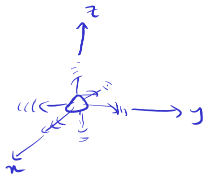


$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

مثال: هامیلتونی نوسانگر دو بعدی را بنویسید.

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

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{d^2}{dy^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2)$$



مثال: هامیلتونی نوسانگر سه بعدی را بنویسید:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\underbrace{\left(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{d^2}{dy^2}+\frac{d^2}{dz^2}\right)}_{\nabla^2} + \frac{1}{2}m\omega^2\underbrace{(x^2+y^2+z^2)}_{r^2} \quad (1)$$

در مختصات کارتزین

در مختصات (کارتزین)

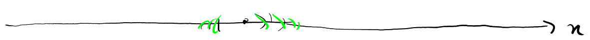
$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{1}{2}m\omega^2r^2$$

$$\rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2_{\text{کروی}} + \frac{1}{2}m\omega^2r^2 \quad (2)$$

در مختصات (کروی)

$$\rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2_{\text{استوانه‌ای}} + \frac{1}{2}m\omega^2(\rho^2+z^2) \quad (3)$$

در مختصات (استوانه‌ای)



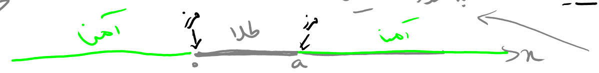
مثال: هامیلتونی ذره آزاد یک بعدی را بنویسید.

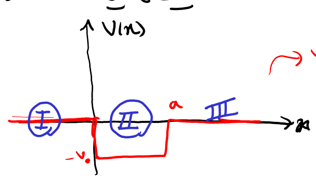
$F=0 \rightarrow V(x)=0$ پتانسیل

$$\hat{H} = \hat{T} + \cancel{\hat{V}} \Rightarrow \boxed{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}}$$

مثال: پتانسیل حاکم بر ذره به شکل زیر است. هامیلتونی این سامانه را بنویسید.

پتانسیلی که الکترون آزاد (تقریباً آزاد) در سیم با سطح مقطع کم حس می‌کند به صورت تقریبی



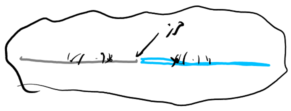


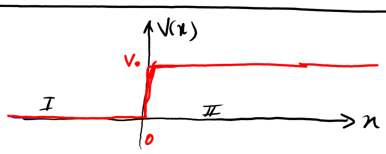
$$V(x) = \begin{cases} 0 & x<0 \quad \text{I} \\ -V_0 & 0\leq x\leq a \quad \text{II} \\ 0 & x>a \quad \text{III} \end{cases}$$

هامیلتونی برای هر ناحیه متفاوت از دیگری است

$$\hat{H} = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} & x<0 \quad \text{I} \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - V_0 & 0\leq x\leq a \quad \text{II} \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} & x>a \quad \text{III} \end{cases}$$

مثال/ پتانسیل اعمال شده بر جسمی به صورت پله پتانسیل به شکل زیر است:





$$V(x) = \begin{cases} 0 & x<0 \quad : \text{I} \\ V_0 & x>0 \quad : \text{II} \end{cases}$$

$$\hat{H} = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} & x<0 \quad \text{I} \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V_0 & x>0 \quad \text{II} \end{cases}$$

ما به دنبال چه هستیم در نمایش موجی ؟؟

یادآوری گذشته ⟵ نمایش ماتریسی : کمیتی داریم $\hat{A}$

$$\hat{A} \longrightarrow \begin{cases} |a_1\rangle \\ |a_2\rangle \\ \vdots \\ |a_N\rangle \end{cases} \text{eigen vector} \quad , \quad \{a_1, a_2, \dots, a_N\} \text{ eigen value}$$

پیدا کردیم

به دنبال کت‌های ویژه‌ی $\hat{A}$ خاص هستیم

در نمایش موجی، به دنبال eigen function , eigen value هستیم ⟸ به دنبال توابع موجی هستیم که ویژه‌ی $\hat{H}$ خاص هستند

* $\hat{H}$ برای ما مهم است

معادله شرودینگر مستقل از زمان ⟶ نمایش ماتریسی

$$\boxed{\hat{H}|\varepsilon_i\rangle = \varepsilon_i|\varepsilon_i\rangle}$$

رابطه ویژه مقداری - ویژه برداری

نمایش موجی

$$\langle x|\hat{H}|\varepsilon_i\rangle = \varepsilon_i\langle x|\varepsilon_i\rangle$$

فرض $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ ⟶

$$\langle x|\hat{T}+\hat{V}|\varepsilon_i\rangle = \varepsilon_i\langle x|\varepsilon_i\rangle$$

ویژه بردار eigen vector

معادله شرودینگر مستقل از زمان در نمایش موجی

$$\boxed{\underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]}_{\text{هامیلتونی در نمایش مختصه}}\psi_{\varepsilon_i}(x) = \underbrace{\varepsilon_i}_{\text{ویژه مقدار}}\,\psi_{\varepsilon_i}(x)}$$

$\psi_{\varepsilon_i}(x)$ ⟶ eigen function ویژه تابع

ψ_{ε_i} خاص ⟸ آنهایی که $\psi(x)$ در این معادله صدق کند

به دنبال توابعی هستیم که ویژه‌ی هامیلتونی ما خاص هستند ⟸ هامیلتونی ما روی آنها اثر کند آنها را تغییر نمی‌دهد (فقط در یک عدد ضرب کند)

مثال

$\hat{H}\,(\sin(x)) = \cos(x)$ ⟵ خاص نیست

$\hat{H}\,(1+2x^2) = i\,(1+2x^2)$ ⟵ خاص

eigenvalue ، eigen function

مثال معادله شرودینگر برای ذره در پتانسیل دو بعدی $V(x,y)$ را بنویسید

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dy^2}+V(x,y)\right]\psi_{\varepsilon_i}(x,y) = \varepsilon_i\,\psi_{\varepsilon_i}(x,y)$$

مثال معادله شرودینگر را برای نوسانگر یک بعدی بنویسید.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\psi_i(x) = \varepsilon_i\,\psi_i(x)$$

جمع‌بندی : در نمایش موجی یا مختصه

فرض تک بعدی : $\hat{H} \longrightarrow \begin{cases} \psi_1(x)=? \longrightarrow \varepsilon_1 \\ \psi_2(x)=? \longrightarrow \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \psi_N(x)=? \longrightarrow \varepsilon_N \end{cases}$

⟶ $\{\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_N\}$ ⟶ طیف ویژه مقادیر ⟶ گسسته / پیوسته

انرژی‌های مجاز سامانه

ویژه توابع آن چه‌ها هستند ⟵ به شرایط مرزی ربط دارد

⟶ ویژه مقادیر هامیلتونی (طیف انرژی)

داستان تبهگنی مشابه قبل است. اگر اعداد تکراری در طیف ویژه مقادیر هامیلتونی نباشد ⟸ آن هامیلتونی تبهگنی ندارد

مثال (لا تمرین) معادله شرودینگر ذره آزاد یک بعدی را حل کنید. (ویژه توابع هامیلتونی ذره آزاد یک بعدی را بیابید)
(توابعی که معادله شرودینگر ذره آزاد یک بعدی را ارضا می‌کند)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+0\right)\psi_i(x)=\varepsilon_i\psi_i(x)$$

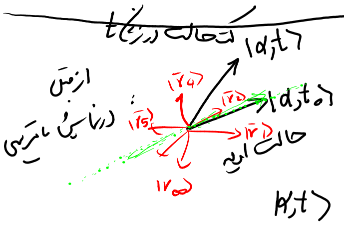
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_i(x)}{dx^2}=\varepsilon_i\psi_i(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_i''(x)=\varepsilon_i\psi_i(x)$$ ⟵ معادله شرودینگر برای این مثال

اول ویژه مقادیر (ویژه مقادیر) باید حساب شود
دوم ψ_i ها (ویژه توابع) باید حساب شود

مشابه با حل در ابلیک ویژه مقدار ویژه برداری در ماتریس‌ها ⟵

حل برای بعد



معادله شرودینگر وابسته به زمان ⟶

$$\hat{H}|\alpha,t\rangle=i\hbar\frac{d}{dt}|\alpha,t\rangle$$
به همراه شرط اولیه $|\alpha\rangle=|\alpha,t_0\rangle$

$|\alpha,t\rangle$ را می‌دهد ⟵

دینامیک کوانتمی در نمایش موجی (نگاه. خصوصی)

$$\langle\bar{r}|\hat{H}|\alpha,t\rangle=i\hbar\frac{d}{dt}\langle\bar{r}|\alpha,t\rangle$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\bar{r})\right]\langle\bar{r}|\alpha,t\rangle=i\hbar\frac{d}{dt}\langle\bar{r}|\alpha,t\rangle$$

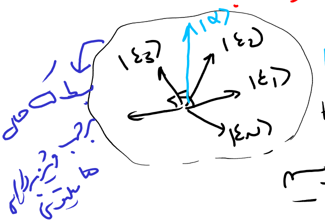
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\bar{r})\right]\psi_\alpha(\bar{r},t)=i\hbar\frac{d}{dt}\psi_\alpha(\bar{r},t)$$ ⟵ معادله شرودینگر وابسته به زمان در نمایش موجی (نگاه. خصوصی)

* نسبت به مکان مرتبه دوم * نسبت به زمان مرتبه اول است

* اگر $\psi_\alpha(\bar{r},t_0)$ را داشته باشیم (شرط اولیه) از حل معادله $\psi_\alpha(\bar{r},t)$ بدست آوریم

نکات: چنانچه $\psi_\alpha(\bar{r},t_0)$ حالت مانا باشد ⟸ تابع موج در لحظات بعد تغییر نمی‌کند، صرفاً در یک فاز ضرب می‌شود

ویژه توابع هامیلتونی ⟵



$|\alpha\rangle=c_1|\varepsilon_1\rangle+c_2|\varepsilon_2\rangle+\dots+c_N|\varepsilon_N\rangle$

$H|\varepsilon_i\rangle=\varepsilon_i|\varepsilon_i\rangle$

مثال: هامیلتونی سامانه را داریم ⟵ با داشتن هامیلتونی: معادله شرودینگر مستقل از زمان را بنویسیم

از حل معادله شرودینگر ⟵

$$\begin{Bmatrix}\varepsilon_1, & \psi_1(x)\\ \varepsilon_2, & \psi_2(x)\\ \vdots & \vdots\\ \varepsilon_N, & \psi_N(x)\end{Bmatrix}$$ ویژه مقادیر و ویژه توابع حساب می‌شود

تابع موج اگر ترکیب خطی از ψ_iها باشد

$$\psi_\alpha(x)=c_1\psi_1(x)+c_2\psi_2(x)+\dots+c_N\psi_N(x)$$

بسط تابع موج ذره برحسب ویژه توابع هامیلتونی

چنانچه تابع موج ذره، منطبق بر یکی از ویژه‌توابع باشد، در حالت مانا است.

مثال/ $\psi_\alpha(x,t_0) = \psi_1(x) \longrightarrow$ مانا

$\psi_\alpha(x,t_0) = i\,\psi_5(x) \longrightarrow$ مانا

$\psi_\alpha(x,t_0) = e^{i\delta}\,\psi_{17}(x) \longrightarrow$ مانا

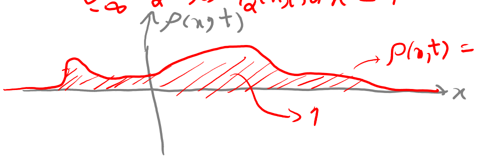
$\psi_\alpha(x,t_0) = \frac{1}{\sqrt2}\psi_1(x) + \frac{1}{\sqrt2}\psi_3(x) \longrightarrow$ غیرمانا

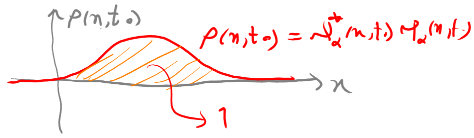
$\psi_\alpha(x,t_0) = \frac{3}{5}\psi_3(x) + \frac{4i}{5}\psi_8(x) \longrightarrow$ غیرمانا

$\psi_\alpha(x,t_0) = \frac{1}{\sqrt3}\psi_1(x) + \frac{1}{\sqrt3}\psi_3(x) + \frac{1}{\sqrt3}\psi_4(x) \longrightarrow$ غیرمانا

اگر $\psi_\alpha(x,t_0)$ نرمالیزه باشد $\longleftarrow$ تابع موج در لحظه t : $\psi_\alpha(x,t)$ نرمالیزه خواهد بود

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_\alpha^*(x,t_0)\,\psi_\alpha(x,t_0)\,dx = 1 \qquad\qquad \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_\alpha^*(x,t)\,\psi_\alpha(x,t)\,dx = 1$$





* اگر حالت مانا باشد $\rho(x,t)$ مستقل از زمان خواهد بود

چگالی جریان (جریان احتمال): $\bar{J}(\bar{r},t)$ کمیتی برداری است که آن را به صورت زیر می‌سازیم. اما برای ساختن شهود $J(x,t)$ ابتدا بررسی کنیم

$\downarrow$ اثبات

① معادله شرودینگر وابسته به زمان

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

② ← از مزدوج مختلط

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

تابع حقیقی

$$\psi^*(r,t) \times ① = \cdots$$
$$-\ \psi(r,t) \times ② = \cdots$$

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

$$-\frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*\right] = \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}$$

$$\frac{i\hbar}{2m}\left[\psi^*\nabla^2\psi-\psi\nabla^2\psi^*\right]=\frac{\partial}{\partial t}(\psi\psi^*)=\frac{\partial}{\partial t}\rho(\bar r,t)$$

$\nabla\cdot\bar J+\frac{\partial\rho}{\partial t}=0$ از فیزیک داریم ⟵

$$-\frac{i\hbar}{2m}\left[\psi^*\nabla^2\psi-\psi\nabla^2\psi^*\right]+\frac{\partial\rho}{\partial t}=0$$

$\bar\nabla\cdot\bar J \longrightarrow$ $\boxed{\bar J(\bar r,t)=\frac{-i\hbar}{2m}\left[\psi^*\bar\nabla\psi-\psi\bar\nabla\psi^*\right]}$

تحقیق: ارتباط $\bar\nabla\cdot\bar J$ ببینید

خلاصه: با داشتن تابع موج ذره $\psi_a(\bar r,t)$:
- $\rho(\bar r,t)$ حساب می‌شود
- $\bar J(\bar r,t)$ حساب می‌شود ⟵ یک بعدی $J(x,t)=\frac{-i\hbar}{2m}\left[\psi^*\frac{d\psi}{dx}-\psi\frac{d\psi^*}{dx}\right]$

نکته: اگر تابع موج ذره حقیقی باشد $\psi=\psi^*$ ⟸ چگالی جریان صفر خواهد شد $J(x,t)=0$

تمرین: توابع موج به صورت های زیر داده شده است. چگالی جریان را برای آنها حساب کنید.

الف) $\psi(x)=Ae^{ikx}\longrightarrow\langle\hat p_x\rangle\neq0$ $\quad\langle\hat p_x\rangle=\hbar k\geq0$ $\quad J=\frac{\langle\hat p_x\rangle}{m}$ درست

ب) $\psi(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}$

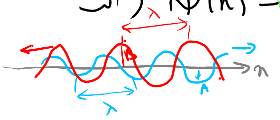
ج) $\psi(x)=\begin{cases}0 & x<0\\ \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{2\pi}{a}x) & 0\leq x\leq a\\ 0 & x>a\end{cases}$

د) $\psi(x)=Ae^{-\alpha x}$

مثال/ برای تابع موج زیر چگالی جریان را حساب کنید.

موج تخت در راستای جهت $+x$ — موج تخت در راستای جهت $-x$

الف) $\psi(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}$ ⟶ مختلط



عدد موج $K=\frac{2\pi}{\lambda}$

ذره

ذره

موج تخت

$$J(x)=\frac{-i\hbar}{2m}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}-\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)$$

$$=-\frac{i\hbar}{2m}\left[\left(A^*e^{-ikx}+B^*e^{ikx}\right)\left(Aike^{ikx}-Bike^{-ikx}\right)-\left(Ae^{ikx}+Be^{-ikx}\right)\left(-A^*ike^{-ikx}+B^*ike^{ikx}\right)\right]$$

$$=\frac{\hbar k}{2m}\left[2AA^*-2BB^*\right]=\frac{\hbar k}{m}\left[|A|^2-|B|^2\right]=\boxed{\frac{\hbar k}{m}|A|^2}\boxed{-\frac{\hbar k}{m}|B|^2}$$

$\frac{\hbar k}{m}=\frac{P_x}{m}=V_x$ ⟸ $\hbar K$ بعد تکانه خطی دارد

که اینجا $|A|^2\equiv$ نقش شدت موج

شدت $|B|^2$ و $\frac{\hbar k}{m}$ سرعت ذرات بازتابیده در مرحله

$|A|^2 dx \to$ بی‌بعد $\quad [A] = \frac{1}{\sqrt{طول}}$ $\quad$ احتمال $= \psi^*\psi dx \leftarrow$ بی‌بعد است

ب) $\psi(x) = Ae^{-\alpha x}$ (حقیقی) $\quad$ نمای حقیقی برای تابع نمایی $\rightsquigarrow$ حقیقی $\rightsquigarrow j(x) = 0$

$$j(x) = \frac{\hbar}{2im}\left[\psi^*\psi' - \psi\psi^{*\prime}\right] = \frac{\hbar}{2im}\left\{A^* e^{-\alpha x}(-A\alpha)e^{-\alpha x} - Ae^{-\alpha x}(-A^*\alpha)e^{-\alpha x}\right\}$$

$$= \frac{\hbar}{2im}\left\{-|A|^2\alpha e^{-2\alpha x} + |A|^2 \alpha e^{-2\alpha x}\right\} = 0$$

حقیقی یا مختلط بودن A مهم نیست

ج) $$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{8\pi}}e^{-x^2/2} + \frac{1}{\sqrt{18\pi}}(1-2x^2)e^{-x^2/2}$$

$j(x) = 0 \Leftarrow$ کاملاً حقیقی

$[\psi\psi^* dx] = 1 \quad [A\, طول\, A^*\, طول\, طول] = 1 \to [|A|^2 طول^3] = 1 \to [A] = \frac{1}{طول^{3/2}}$

مثال: تابع موج ذره‌ای به صورت زیر است.

$$\psi(x) = \begin{cases} Axe^{-\alpha x} & x>0 \\ 0 & x<0 \end{cases}$$

α عدد مثبت، حقیقی و A ضریب نرمالیزاسیون است. α بعد $\frac{1}{طول}$ دارد

الف) تابع موج را نرمالیزه کنید. ← احتمال کل واحد شود $\int_{-\infty}^{+\infty}\rho(x)dx = 1$

ب) احتمال مشاهده (حضور) ذره در چه نقطه‌ای حداکثر است.

ج) $\langle \hat{x} \rangle$ و $\langle \hat{x}^2 \rangle$ را حساب کنید.

د) احتمال یافتن ذره در ناحیه بین $x=0$ تا $x=\frac{1}{\alpha}$ چقدر است؟

و) تابع موج در فضای تکانه را حساب کنید: $\Phi(p_x)$

هـ) $\langle \hat{p}_x \rangle$ و $\langle \hat{p}_x^2 \rangle$ را حساب کنید. (مثلاً $\frac{\langle \hat{p}_x^2\rangle}{2m} = \langle \hat{T} \rangle$)

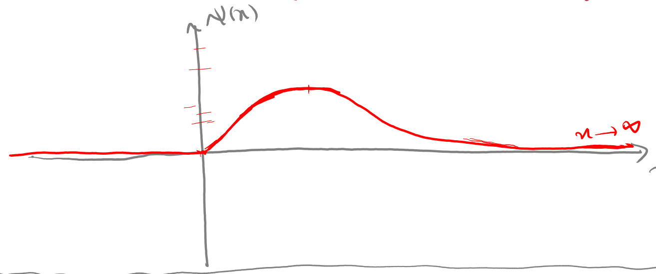
ی) چگالی جریان را حساب کنید.

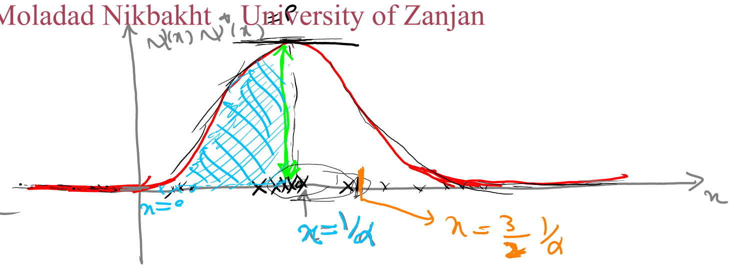
آ) احتمال اینکه ذره تکانه‌ای بین $p_x = 0$ تا $p_x = \alpha\hbar$ داشته باشد چقدر است؟

الف/ $$\int_{-\infty}^{+\infty}\rho(x)dx = 1 \to \int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\psi^*(x)dx = 1 \to \int_0^\infty Axe^{-\alpha x}A^*xe^{-\alpha x}dx = 1$$

$$|A|^2\underbrace{\int_0^\infty x^2e^{-2\alpha x}dx}_{\frac{1}{4\alpha^3}} = 1 \longrightarrow \frac{|A|^2}{4\alpha^3} = 1 \longrightarrow A = 2\alpha\sqrt{\alpha}$$

$$\psi(x) = \begin{cases} 2\alpha\sqrt{\alpha}\, xe^{-\alpha x} & x \geq 0 \\ 0 & x<0 \end{cases} \longrightarrow \rho = \psi\psi^* = \begin{cases} 4\alpha^3x^2e^{-2\alpha x} & x\geq 0 \\ 0 & x<0 \end{cases}$$





ب) جایی که چگالی احتمال بالاترین است

$$\rho(x) = \psi(x)\psi^*(x) = \begin{cases} 4\alpha^3 x^2 e^{-2\alpha x} & x>0 \\ 0 & x<0 \end{cases}$$

این بخش صفر است

$$\frac{d\rho}{dx} = 0 \longrightarrow \frac{d}{dx}\left(4\alpha^3 x^2 e^{-2\alpha x}\right) = 0 \longrightarrow \frac{d}{dx}\left(x^2 e^{-2\alpha x}\right) = 0$$

$$2x e^{-2\alpha x} - 2\alpha x^2 e^{-2\alpha x} = 0$$

$$2x e^{-2\alpha x}(1-\alpha x) = 0 \Rightarrow \begin{cases} x=0 & \times \\ x=\infty & \times \\ x = 1/\alpha & \checkmark \end{cases}$$

چگالی احتمال در این نقطه چقدر است؟

$$\rho(x=1/\alpha) = 4\alpha^3 (1/\alpha)^2 e^{-2\alpha(1/\alpha)} = 4\alpha e^{-2}$$

ج) مقدار انتظاری $\langle \hat{x} \rangle$ ← مطابق با شکل $\rho(x)$ انتظار داریم در حوالی ... باشد

در فضای تکانه هم می‌توان حساب کرد

$$\langle \hat{x} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\, \hat{x}\, \psi(x)\, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\, x\, \psi(x)\, dx =$$

نمایش عملگر

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

★ این دو را با هم برابر ... در فضای تکانه حل کنید

$$= \int_0^\infty 2\alpha\sqrt{\alpha}\, x e^{-\alpha x}\, x\, 2\alpha\sqrt{\alpha}\, x e^{-\alpha x}\, dx = 4\alpha^3 \underbrace{\int_0^\infty x^3 e^{-2\alpha x}\, dx}_{\frac{3}{8\alpha^4}} = \frac{3}{2\alpha} = \frac{3}{2}\frac{1}{\alpha}$$

$$\langle \hat{x}^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\, \hat{x}^2\, \psi(x)\, dx = \int_0 2\alpha\sqrt{\alpha}\, x e^{-\alpha x}\, x^2\, 2\alpha\sqrt{\alpha}\, x e^{-\alpha x}\, dx = \frac{3}{\alpha^2}$$

$$\Delta x = \sqrt{\langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2} = \sqrt{\frac{3}{\alpha^2} - \frac{9}{4\alpha^2}} = \frac{\sqrt{3}}{2\alpha}$$

سر حل $\quad \frac{12}{4\alpha^2} - \frac{9}{4\alpha^2}$

عدم قطعیت در اندازه‌گیری مکان x ذره

Δx کوچکتر

α بزرگتر ⇐ اندازه‌گیری مکان x ذره دقیق‌تر

← خطا در اندازه‌گیری p_x بیشتر خواهد بود

د) احتمال حضور ذره در $x \in [0\ \ 1/\alpha]$ ← ناحیه هاشور زده شکل بالا

$$P\left(x\in[0\ \ 1/\alpha]\right) = \int_{x=0}^{1/\alpha} \rho(x)\, dx = \int_0^{1/\alpha} 4\alpha^3 x^2 e^{-2\alpha x}\, dx = 0.32$$

ه) تابع موج در فضای تکانه ← اگر هامیلتونی را داشتیم: از حل معادله شرودینگر در نمایش تکانه، توابع موج ها مستقیماً در فضای تکانه حساب می‌شوند و $\Phi(p_x)$ ترکیب خطی از آن توابع خواهد بود

← اگر $\psi_\alpha(x)$ را داشته باشیم تبدیل فوریه می‌گیریم تا $\Phi_\alpha(p_x)$ حساب شود

$$\Phi_\alpha(p_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_\alpha(x)\, e^{-ip_x x}\, dx \longleftrightarrow \psi_\alpha(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_\alpha(p_x)\, e^{ip_x x}\, dx$$

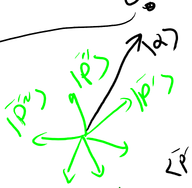
$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x)|^2 dx = 1 \Longleftrightarrow \int_{-\infty}^{+\infty}|\Phi(p_x)|^2 dp_x = 1$ در حالیکه ψ(x) نرمالیزه بود

نکته مهم: $\Phi(p_x)$ نرمالیزه شده است

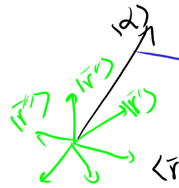
$$\Phi(p_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_0^{\infty} 2\alpha\sqrt{\alpha}\, x e^{-2\alpha x} e^{-ip_x x} dx = -\sqrt{\frac{4\alpha^3}{2\pi\hbar}}\frac{1}{(\alpha + i\frac{p_x}{\hbar})^2}$$

$-\infty < p_x < +\infty$ تابع مختلط

$x<0$ برای $\psi = 0$



$\langle p'|\alpha\rangle = \Phi(p')$



$\langle r'|\alpha\rangle = \psi(r')$

تکانه: $\hat{p}_x \to p_x$, $\hat{x} \to -\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dp_x}$, $\hat{L}_x = -\frac{\hbar}{i}\left(p_z\frac{\partial}{\partial p_y} - p_y\frac{\partial}{\partial p_z}\right)$

مبنا

مختصات: $\hat{x} \to x$, $\hat{p}_x \to \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$, $\hat{L}_x = yp_z - zp_y = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$

مسئله: در دو نمایش $\hat{p}_x$ حساب کنید.

$$\langle \hat{p}_x\rangle = \begin{cases} \text{مختصات} \to \int_{x=-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)\psi(x)dx \\ \text{تکانه} \to \int_{p_x=-\infty}^{+\infty}\Phi^*(p_x)\, p_x\, \Phi(p_x)dp_x \end{cases}$$

$x<0$ برای $\psi = 0$

$$= \int_0^{+\infty} 2\alpha\sqrt{\alpha}\, x e^{-\alpha x}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)2\alpha\sqrt{\alpha}\, x e^{-\alpha x} dx$$

$$4\alpha^3\frac{\hbar}{i}\int_0^{\infty} x e^{-\alpha x}(1-\alpha x)e^{-\alpha x}dx$$

$$= 4\alpha^3\frac{\hbar}{i}\int_0^{\infty} x(1-\alpha x)e^{-2\alpha x}dx$$

$= 0$ جواب

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\left(-\sqrt{\frac{4\alpha^3}{2\pi\hbar}}\right)\frac{1}{(\alpha - i\frac{p_x}{\hbar})^2}\, p_x \left(-\sqrt{\frac{4\alpha^3}{2\pi\hbar}}\right)\frac{1}{(\alpha + i\frac{p_x}{\hbar})^2}dp_x$$

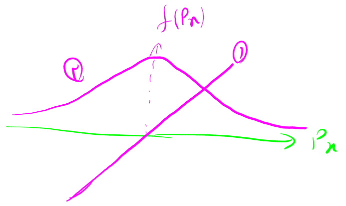
$$= \frac{4\alpha^3}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} p_x \frac{1}{(\alpha^2 + \frac{p_x^2}{\hbar^2})^2}dp_x = \int_{-\infty}^{+\infty} \text{تابع فرد}\; dp_x = 0$$

محدوده متقارن در کل فضا داریم

فرد

زوج

فرد



انتظار مورد نظر را حساب کنید

مسئله: در دو نمایش $\langle \hat{p}^2\rangle$ حساب کنید

$$\langle \hat{p}_x^2\rangle = \begin{cases} \text{مختصات} \to \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\psi(x)dx = \int_0^{\infty}2\alpha\sqrt{\alpha}\, x e^{-\alpha x}\left(-\hbar^2\frac{d^2}{dx^2}\right)2\alpha\sqrt{\alpha}\, x e^{-\alpha x}dx \\ \text{تکانه} \to \int_{-\infty}^{+\infty}\Phi^*(p_x)\, p_x^2\, \Phi(p_x)dp_x \end{cases}$$

$$= -4\alpha^3\hbar^2\int x e^{-\alpha x}\frac{d}{dx}(1-\alpha x)e^{-\alpha x}dx$$

$$= -4\alpha^3\hbar^2\int x e^{-\alpha x}[-\alpha - \alpha(1-\alpha x)]e^{-\alpha x}dx$$

$$= -4\alpha^3\hbar^2\int_0^{\infty} x e^{-2\alpha x}[-2\alpha + \alpha^2 x]dx = \boxed{\hbar^2\alpha^2}$$

جواب از جنس $(\text{تکانه})^2$ است

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{4\alpha^3}{2\pi\hbar}\frac{p_x^2}{(\alpha^2 + \frac{p_x^2}{\hbar^2})^2}dp_x = \hbar^2\alpha^2$$

زوج

زوج

زوج

اصل عدم قطعیت هایزنبرگ $\Delta x\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$

هر برهم‌کنش که جابجا نشوند داریم $[\hat{x}, \hat{p}_x] \neq 0$

مثال: $\langle \hat{T}\rangle = \left\langle \frac{\hat{p}_x^2}{2m}\right\rangle = \frac{1}{2m}\langle \hat{p}_x^2\rangle = \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}$

مثال: $\Delta p_x = \sqrt{\langle \hat{p}_x^2\rangle - \langle \hat{p}_x\rangle^2} = \sqrt{\hbar^2\alpha^2 - 0} = \hbar\alpha$

$\Delta x\Delta p_x = \frac{\sqrt{3}}{2\alpha}\hbar\alpha = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar = \sqrt{3}\frac{\hbar}{2}$

$$\psi(x) = \begin{cases} 2\alpha\sqrt{\alpha}\, x e^{-\alpha x} & x \geq 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$$

۵- چگالی جریان

$\langle p \rangle = 0$

$J = 0$

حقیقی $\longrightarrow J(x) = 0$ but $J(x) = \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x}\right) = 0$

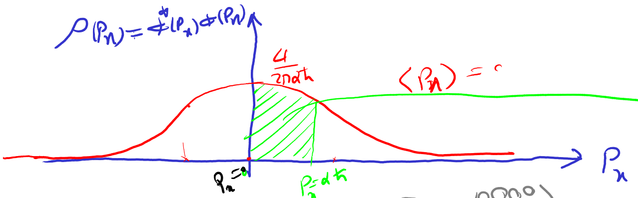
آ- احتمال اینکه $0 < P_x < \alpha\hbar$?

$$dP = \int_{P_x=0}^{\alpha\hbar} \underbrace{\phi^*(p_x)\phi(p_x)}_{\text{چگالی احتمال در فضای تکانه}} dp_x = \frac{4\alpha^3}{2\pi\hbar}\int_0^{\alpha\hbar} \frac{1}{\left(\alpha^2 + \frac{p_x^2}{\hbar^2}\right)^2} dp_x$$

* در صورتی که احتمال راجع به تکانه باشد ← نمایش تکانه

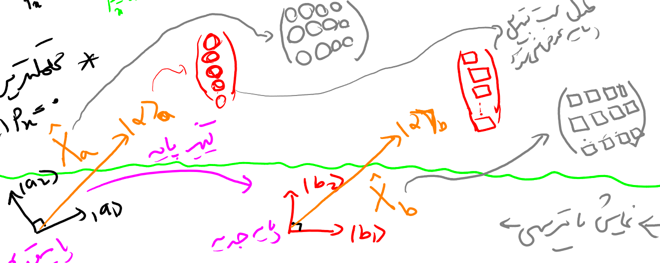
* وقتی احتمال راجع به موقعیت مکانی است ← نمایش مختصاتی

$$\int \rho(x)\, dx$$



حالا بگید

* محتمل‌ترین تکانه برای این ذره $P_x = 0$ است



مثال ۲ بعدی

تعمیم به N بعدی

تبدیل پایه ← نمایش ماتریسی

فقط

تبدیل دستگاه مختصات

نمایش مختصاتی ↔ نمایش تکانه‌ای

$\psi \longrightarrow \phi$

$\phi = U^\dagger \psi$

مثال / پایه قدیم: $\left\{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\right\} \longrightarrow$ پایه جدید $\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}\right\}$

$$\begin{cases} \hat{U}|a_1\rangle = |b_1\rangle \\ \hat{U}|a_2\rangle = |b_2\rangle \end{cases}$$

سؤال: ① نگاشت یا تبدیلی که پایه قدیم را به جدید تبدیل می‌کند چیست ← عملگر تبدیل ← یونیتری (حافظ طول و زاویه)

② ارتباط بین یک حالت در پایه قدیم و جدید چیست؟

③ عناصر ماتریس در پایه قدیم و جدید چه ارتباطی با هم دارند.

① جواب

$$\hat{U} = |b_1\rangle\langle a_1| + |b_2\rangle\langle a_2|$$

برای فضای N بعدی: $\hat{U} = |b_1\rangle\langle a_1| + |b_2\rangle\langle a_2| + \dots + |b_N\rangle\langle a_N| \equiv \sum_{i=1}^{N} |b_i\rangle\langle a_i|$

← یکانی است ← تبدیل N بعدی است

$|a_1\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$, $|a_2\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ (قدیم) $\longrightarrow$ $|b_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$, $|b_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$ (جدید)

نمایش ماتریسی که پایه قدیم را به جدید تبدیل کند باید.

$$\hat{U} = |b_1\rangle\langle a_1| + |b_2\rangle\langle a_2| = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}(1\ \ 0) + \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}(0\ \ 1)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 0\\1 & 0\end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & 1\\0 & -1\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & -1\end{pmatrix}$$

یونیتری: $\hat{U}\hat{U}^\dagger = 1$

تست: $|a_1\rangle \rightarrow |b_1\rangle$?

$$\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & -1\end{pmatrix}}_{\hat{U}}\underbrace{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}}_{|a_1\rangle} = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}}_{|b_1\rangle}$$

جواب تمرین : $|a_1\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$, $|a_2\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ $\longrightarrow$ $|b_1\rangle = \frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$, $|b_2\rangle = \frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$

$$\hat U = |b_1\rangle\langle a_1| + |b_2\rangle\langle a_2| = \frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}(1\ \ 0) + \frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}(0\ \ 1)$$

$$= \frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ -1 & 0\end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 0 & 1\end{pmatrix} = \boxed{\frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}1 & 1\\ -1 & 1\end{pmatrix}}$$

راه حل دوم ⟵ نمایش ماتریسی عملگر تبدیل :

$$\hat U = \begin{pmatrix}U_{11} & U_{12}\\ U_{21} & U_{22}\end{pmatrix}$$

$U_{11} = \langle a_1|\hat U|a_1\rangle = \langle a_1|\big(|b_1\rangle\langle a_1| + |b_2\rangle\langle a_2|\big)|a_1\rangle = \langle a_1|b_1\rangle$

$U_{12} = \langle a_1|b_2\rangle$

$U_{21} = \langle a_2|b_1\rangle$

$U_{22} = \langle a_2|b_2\rangle$

$$\hat U = \begin{pmatrix}\langle a_1|b_1\rangle & \langle a_1|b_2\rangle\\ \langle a_2|b_1\rangle & \langle a_2|b_2\rangle\end{pmatrix} \qquad \langle \text{قدیم} | \text{جدید}\rangle$$

مثال / $|a_1\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$, $|a_2\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ $\longrightarrow$ $|b_1\rangle = \frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$, $|b_2\rangle = \frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$ $\longrightarrow$

$\langle a_1|b_1\rangle = (1\ \ 0)\frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt2} \to U_{11}$

$\langle a_1|b_2\rangle = (1\ \ 0)\frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt2} \to U_{12}$

$\langle a_2|b_1\rangle = (0\ \ 1)\frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt2} \to U_{21}$

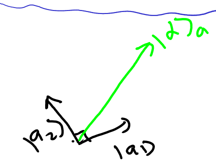
$\langle a_2|b_2\rangle = (0\ \ 1)\frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix} = -\frac{1}{\sqrt2} \to U_{22}$

$$\hat U = \frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}$$

تمرین : تمرین تا سه‌شنبه شب

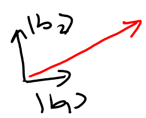
الف) عملگر تبدیل پایه از $\left\{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\right\}$ به $\left\{\frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}1\\i\end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}1\\-i\end{pmatrix}\right\}$ را بدست آورید

پاسخ به سوال ② : فرض نمایش یک حالت در پایه a را داریم



$|\alpha\rangle_a$: a-representation of $|\alpha\rangle$

نمایش یک حالت در پایه b چگونه است؟ $|\alpha\rangle_b$: b-representation of $|\alpha\rangle$



جواب :

$$|\alpha\rangle_b = \hat U^\dagger |\alpha\rangle_a$$

$\hat U$ همان عملگر تبدیل پایه است

در زبان تابعی ⟵ $\Phi_\alpha(p_x) = \hat U^\dagger \psi_\alpha(x)$

مثال / فرض کنید یک حالت سامانه‌ای در پایه $\left\{|a_1\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, |a_2\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\right\}$ به صورت زیر باشد ،

$$|\alpha\rangle_a = \begin{pmatrix}3/5\\ -4i/5\end{pmatrix}$$

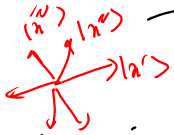
$\hat U = \frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix} \rightsquigarrow \hat U^\dagger = \frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}1 & +1\\ 1 & -1\end{pmatrix}$

در پایه جدید $\left\{|b_1\rangle = \frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}, |b_2\rangle = \frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}\right\}$ چه شکلی است؟

$$|\alpha\rangle_b = \hat U^\dagger |\alpha\rangle_a = \frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}^\dagger \begin{pmatrix}3/5\\ -4i/5\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}3/5\\ -4i/5\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}\frac{3-4i}{5}\\ \frac{3+4i}{5}\end{pmatrix} \equiv |\alpha\rangle_b$$

تبدیل حالت دینامیکی (معیاری ← قبل از آن تبدیل پایه از مختصاتی به تکانه‌ای

قدیم $\qquad \hat{U} \qquad$ جدید



نمایش مختصاتی

نمایش تکانه‌ای

ماتریس تبدیل $\langle$جدید$|$قدیم$\rangle$ $\longrightarrow$ $\langle x|p_x\rangle$??

بر اساس:

$$\langle x|\hat{p}_x|p_x\rangle = p_x\langle x|p_x\rangle$$

در نمایش مختصاتی $\longrightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\langle x|p_x\rangle$

$$\longrightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{d\langle x|p_x\rangle}{dx} = p_x\langle x|p_x\rangle \longrightarrow \frac{d\langle x|p_x\rangle}{\langle x|p_x\rangle} = \frac{i}{\hbar}p_x\,dx$$

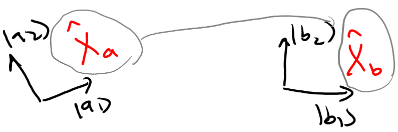
$$\int\frac{d\langle x|p_x\rangle}{\langle x|p_x\rangle} = \frac{i}{\hbar}p_x\int dx \longrightarrow \langle x|p_x\rangle = A\,e^{\frac{ip_x x}{\hbar}}$$

نرمالیزاسیون $= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$

$$\langle x|p_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{ip_x x}{\hbar}} \quad \hat{U} \longrightarrow \langle p_x|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{ip_x x}{\hbar}} \quad \hat{U}^{+}$$

$$\underset{\text{جدید}}{\Phi_\alpha(p_x)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{ip_x x}{\hbar}}\underset{\text{قدیم}}{\psi_\alpha(x)}\,dx$$

سوال بعدی: ارتباط بین عملگرها در پایه قدیم با پایه جدید



مثال/ پایه‌های جدید و قدیم را از مثال قبلی داریم. چنانچه عملگر $\hat{B}$ در پایه قدیم به صورت زیر باشد

$$\hat{X}_b = \hat{U}^{+}\hat{X}_a\hat{U}$$

$$\hat{B}_a = \begin{pmatrix}0 & \hbar/2\\ \hbar/2 & 0\end{pmatrix}$$

نمایش این عملگر در پایه جدید را بیابید

$$\hat{B}_b = \hat{U}^{+}\hat{B}_a\hat{U} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & \hbar/2\\ \hbar/2 & 0\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{\hbar}{2} & -\frac{\hbar}{2}\\ \frac{\hbar}{2} & \frac{\hbar}{2}\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}\hbar & 0\\ 0 & -\hbar\end{pmatrix}$$

$$\hat{B}_b = \begin{pmatrix}\hbar/2 & 0\\ 0 & -\hbar/2\end{pmatrix}$$

الف) یک حالت در پایه قدیم $|\alpha\rangle = \begin{pmatrix}\frac{3}{5}\\ \frac{4i}{5}\end{pmatrix}$ است. آن را در پایه جدید بیابید.

ب) عملگر $\hat{B} = \begin{pmatrix}0 & \hbar/2\\ \hbar/2 & 0\end{pmatrix}$ در پایه قدیم را به پایه جدید ببرید.

ج) $\langle\alpha|\hat{B}|\alpha\rangle$ هم در پایه جدید و هم در پایه قدیم حساب کنید.

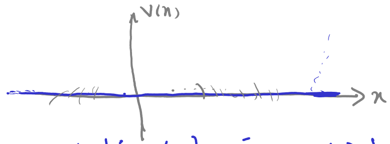
از تمرین تیپی

پتانسیل صفر

$-\infty \qquad +\infty \quad x$

سیم کاملاً رسانا

$V(x)=0$



ذره آزاد یک بعدی: تابع موج این ذره را بیابید.

* این پتانسیل نه زوج و نه فرد. (هم زوج هم فرد هم ایرادی ندارد)

* این پتانسیل از راست و از سمت چپ مرزی ندارد. ← طیف ویژه مقادیر هامیلتونی (انرژی‌ها) پیوسته خواهد بود.

E انرژی‌ها هر عددی

$$\hat H = \hat T + \hat V = \hat T = \frac{\hat P^2}{2m}$$

$\psi(x) = \langle x|\alpha\rangle$

انرژی جنبشی $\quad \hat H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$

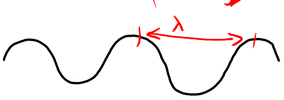
$\psi(x)$

معادله شرودینگر $\quad \hat H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\,\psi(x) \rightsquigarrow \text{eigen function}$$

$\hookrightarrow$ eigen value

$K=\frac{2\pi}{\lambda}$



$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi \longrightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} + \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{K^2}\psi = 0 \qquad K=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$E=\frac{\hbar^2K^2}{2m}$ ← بستگی به انرژی ذره

E ⩾ 0 تعاریف ← طیف ویژه مقادیر پیوسته است

انرژی

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + K^2\psi(x) = 0$$

از حل معادله ۲ جواب به دست می‌آید

جنس K عدد موج است

بعد $[K] = \frac{1}{\text{طول}}$

$(ik)^2e^{ikx} + k^2e^{ikx} = 0$

هامیلتونی 2 ویژه بردار (ویژه تابع) دارد

$(-ik)^2e^{-ikx} + k^2e^{-ikx} = 0$

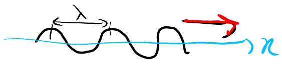
$$\begin{cases}\psi^+(x) = e^{ikx} \rightsquigarrow \boxed{E^+ = \frac{\hbar^2k^2}{2m}}\\ \psi^-(x) = e^{-ikx} \rightsquigarrow \boxed{E^- = \frac{\hbar^2k^2}{2m}}\end{cases}$$

* هامیلتونی ذره آزاد تبهگنی دارد

$$\hat H\psi^+ = E^+\psi^+ \rightsquigarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}e^{ikx} = -\frac{\hbar^2}{2m}(ik)^2e^{ikx} = \frac{\hbar^2k^2}{2m}e^{ikx} = \frac{\hbar^2k^2}{2m}\psi^+$$

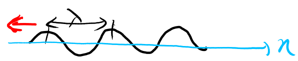
$$\hat H\psi^- = E^-\psi^- \rightsquigarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}e^{-ikx} = -\frac{\hbar^2}{2m}(-ik)^2e^{-ikx} = \frac{\hbar^2k^2}{2m}e^{-ikx} = \frac{\hbar^2k^2}{2m}\psi^-$$

$\psi^+(x) = e^{ikx}$

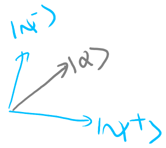


موج تخت رونده به سمت $+x$ با عدد موج K ویژه مقدار $\rightsquigarrow \frac{\hbar^2k^2}{2m}$

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



موج تخت رونده به سمت $-x$ با عدد موج K $\rightsquigarrow \frac{\hbar^2k^2}{2m}$



$$\hat H : \begin{cases}|\psi^+\rangle \rightsquigarrow E^+ = \frac{\hbar^2k^2}{2m} = E\\ |\psi^-\rangle \rightsquigarrow E^- = \frac{\hbar^2k^2}{2m} = E\end{cases} \qquad E : \left\{\frac{\hbar^2k^2}{2m}, \frac{\hbar^2k^2}{2m}\right\}$$

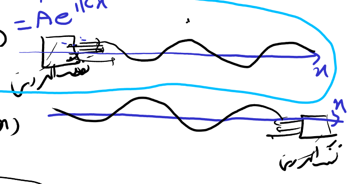
تابع موج الکترونی که در اینجا هامیلتونی است ترکیب خطی از ویژه تابع‌های هامیلتونی است

تابع موج الکترون $\quad \psi(x) = A\psi^+(x) + B\psi^-(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

شدت : $|A|^2$ نشان دهنده

if $B=0 \longrightarrow \psi(x) = A\psi^+(x) = Ae^{ikx}$

if $A=0 \longrightarrow \psi(x) = B\psi^-(x)$



نرمالیزاسیون تابع موج

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)\psi(x)dx = 1 \rightsquigarrow \int_{-\infty}^{+\infty}(A^*e^{-ikx})(Ae^{ikx})dx = |A|^2\int_{-\infty}^{+\infty}dx = 1$$

$\psi = A\psi^+ + B\psi^-$

مسئله ذره آزاد است یعنی بینهایت $V(x)=0 : -\infty < x \leq +\infty$

جعبه با طول $2L$ نیز برای یک الکترون مناسب است

$-L$ L

L با بینهایت به طول جعبه که به الکترون نسبت دادیم برمی‌گردیم

$$|A|^2 \int_{-L}^{L} dx = 1 \longrightarrow |A^2|\, 2L = 1 \longrightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2L}}$$

ساده‌ترین انتخاب

لذا $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2L}} e^{ikx} \longrightarrow$ یک موج الکترونی به سمت راست حرکت می‌کند

if $A=1 \rightarrow \psi(x) = \psi^+ = e^{ikx} \longrightarrow$ تعبیر: یک الکترون به سمت راست حرکت می‌کند

تبهگنی این هامیلتونی را چطور رفع کنیم $\Leftarrow$ دنبال عملگری هستیم که این دو ویژه تابع، ویژه تابع آن باشد

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_x^2}{2m}$$

$$[\hat{P}_x, \hat{H}] = 0 \longrightarrow$$ ویژه بردارهای تکانه بر ویژه بردارهای هامیلتونی منطبق

$|\psi^-\rangle$ $|\psi^+\rangle$ P_x $|P_x^-\rangle$ $|P_x^+\rangle$

$|\psi^+\rangle$ ویژه بردار $\hat{P}_x$ با ویژه مقدار $+\hbar k$

$$\hat{P}_x|\psi^+\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} e^{ikx} = \frac{\hbar}{i} ik e^{ikx} = \hbar k|\psi^+\rangle \rightarrow \hat{P}_x|\psi^+\rangle = \hbar k|\psi^+\rangle$$

$|\psi^+\rangle$ تکانه خطی $+\hbar k$ دارد

$$\hat{P}_x|\psi^-\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} e^{-ikx} = \frac{\hbar}{i}(-ik) e^{-ikx} = -\hbar k|\psi^-\rangle \rightarrow \hat{P}_x|\psi^-\rangle = -\hbar k|\psi^-\rangle$$

$|\psi^-\rangle$ ویژه بردار تکانه خطی با ویژه مقدار $-\hbar k$ است

$$\begin{cases} \hat{H}|\psi^+\rangle = E|\psi^+\rangle \\ \hat{H}|\psi^-\rangle = E|\psi^-\rangle \end{cases}$$ $\Rightarrow$ هامیلتونی تبهگن است پس این دو ویژه تابع را تفکیک نمی‌کند

حل این مسئله در نمایش تکانه‌ای چگونه است

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_x^2}{2m} \xrightarrow{\text{در نمایش تکانه}} \hat{H} = \frac{P_x^2}{2m}$$

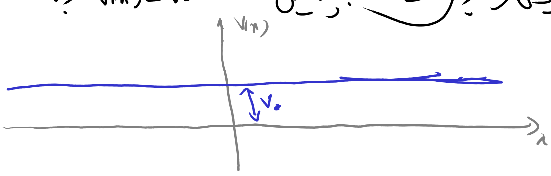
حل معادله شرودینگر ذره آزاد در نمایش تکانه‌ای

معادله شرودینگر : $\frac{P_x^2}{2m}\Phi(P_x) = E\,\Phi(P_x) \longrightarrow \boxed{E = \frac{P_x^2}{2m}}$ $\quad \Phi(P_x) = cte = C$

تمرین

ویژه تابع‌ها و ویژه مقادیر هامیلتونی را برای سامانه با پتانسیل $V(x)=V_0$ بدست آورید.

$E > V_0$

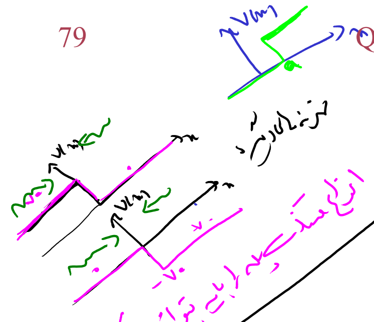


$$\hat{H} \rightarrow \psi^+ = e^{iqx}, \quad \psi^- = e^{-iqx}$$

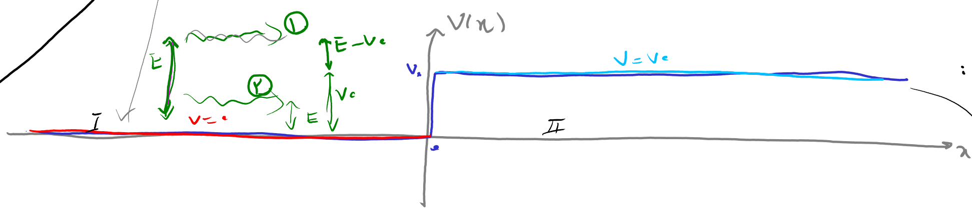
$$q = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}} \qquad E = \frac{\hbar^2 q^2}{2m}$$

موج رونده به سمت $+x$ با عدد موج q

$-x$



پله پتانسیل:



$$V(x) = \begin{cases} 0 & x<0 \quad I \\ V_0 & x\geq 0 \quad II \end{cases}$$

V(x) به زمان وابسته نیست

سیستم به دو بخش متفاوت که به ترتیب انرژی در هر ناحیه پتانسیل ثابت لحاظ می‌کند $V=0$ ، $V=V_0$

$V(x)=0$ ، $x<0$ — $V(x)=V_0$

دو وضعیت متفاوت را داریم:

① (انرژی ذره) $E>V_0$

② (انرژی ذره) $E<V_0$

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

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

① $E>V_0$

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

جواب عمومی e^{ikx} , e^{-ikx} , $k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

$k=\frac{2\pi}{\lambda_I}$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V_0\right)\psi_{II}(x) = E\,\psi_{II}(x)$$

جواب عمومی e^{iqx} , e^{-iqx} , $q=\sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$

$q=\frac{2\pi}{\lambda_{II}}$

موج تخت — عدد موج در دو ناحیه متفاوت

نکته: $k>q$ → $\lambda_I<\lambda_{II}$ ؛ $\frac{2\pi}{\lambda_I}>\frac{2\pi}{\lambda_{II}} \rightarrow \lambda_{II}>\lambda_I$

تمرین

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x<0 \\ Ce^{iqx} + \cancel{D}e^{-iqx} & x\geq 0 \end{cases}$$

الکترون‌ها (شار ذرات) تابیده به سمت راست ⇉ Ae^{ikx}

بازتاب از سطح مرزی ⇇ Be^{-ikx}

سهم عبوری ⇉ Ce^{iqx}

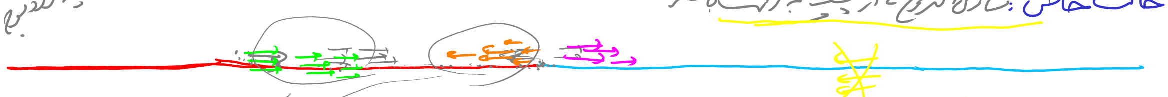
حالت خاص: شار ذرات الکترون‌ها از چپ به راست باشد

چون $x\geq 0$ برای $V(x)=V_0$

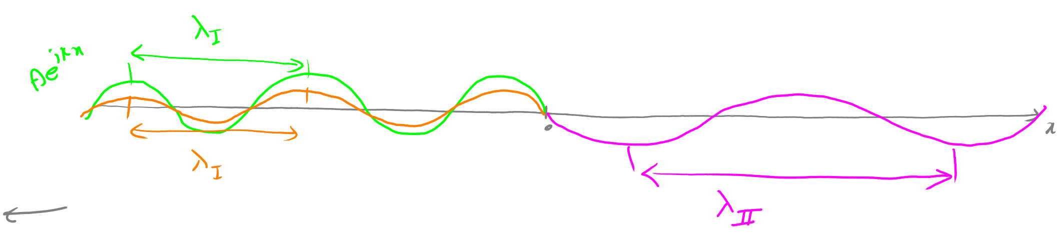
موج ≡ ذرات

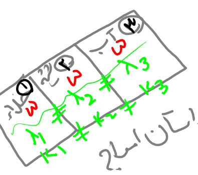
در برخورد موج به سطح مرزی ← بازتاب / عبور

الکترون‌ها در سمت چپ طول موج یکسان دارند



نتیجه: اگر شار ذرات از راست به چپ برود $A=0$ ، $B\neq 0$ ، $D\neq 0$ ، $C\neq 0$





مشابه داستان امواج

حل مسئله: یافتن A ، B ، C ← دقت کنیم مسئله مرز دارد

- تابع موج روی مرز پیوسته است ← چون احتمال نمی‌تواند گسسته باشد
- شیب تابع موج هم باید پیوسته باشد ← چون جریان باید پیوسته باشد

← حالت‌های خاص مانند پتانسیل دلتا دیراک استثنا است — بعداً

$$\psi_I\big|_{x=0} = \psi_{II}\big|_{x=0} \rightarrow Ae^{ik(0)} + Be^{-ik(0)} = Ce^{iq(0)}$$

$$\psi'_I\big|_{x=0} = \psi'_{II}\big|_{x=0} \rightarrow Aike^{ik(0)} - Bike^{-ik(0)} = Ciqe^{iq(0)}$$

$$\begin{cases} 1) \; A + B = C \\ 2) \; A - B = C\dfrac{q}{k} \end{cases} \longrightarrow$$

2 معادله، 3 مجهول
A, B, C

← می‌توان A را یک فرض کرد ← B و C مجهول

← B و C را برحسب A حساب کنیم ← این مسیر را می‌رویم

$$1+2 \Rightarrow 2A = C\left(1+\frac{q}{k}\right) = C\left(\frac{k+q}{k}\right) \longrightarrow \boxed{C = \frac{2k}{k+q}A}$$

بی‌بعد

$$C \text{ و } 1 \longrightarrow \boxed{B = \frac{k-q}{k+q}A}$$

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + \left(\dfrac{k-q}{k+q}\right)Ae^{-ikx} & x<0 \\ \dfrac{2k}{k+q}Ae^{iqx} & x\geq 0 \end{cases}$$

حسابات دو حالت ویژه

$k>q$

نکات:

حالت خاص) if $E \gg V_0 \rightsquigarrow q \simeq \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \Rightarrow q \simeq k \longrightarrow B=0$ بازتاب نداریم

$\searrow C = A$ عبور کامل

حالت خاص) if $E \simeq V_0 \rightsquigarrow q \simeq 0 \rightsquigarrow B = A$ بازتاب کامل

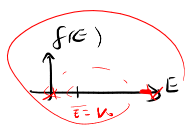
$\rightsquigarrow C = 2A \rightsquigarrow$ عبور صفر

B و C بازتاب و عبور را نشان نمی‌دهند

بازتاب و عبور در ابعاد چگالی جریان تعریف می‌شود ← .بازتاب و عبور درباره ذرات است

$$J = -\frac{i\hbar}{2m}\left[\psi^*\frac{d\psi}{dx} - \psi\frac{d\psi^*}{dx}\right] \equiv \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^*\psi' - \psi\psi^{*\prime}\right]$$

$$J(x) = \begin{cases} J_I = \dfrac{\hbar k}{m}|A|^2 - \dfrac{\hbar k}{m}|B|^2 \equiv \underbrace{J_{inc}}_{\text{ورودی}} - \underbrace{J_{refl}}_{\text{بازتاب}} & x<0 \\ J_{II} = \dfrac{\hbar q}{m}|C|^2 \equiv \underbrace{J_{trans}}_{\text{عبوری}} & x\geq 0 \end{cases}$$



$m=1, \hbar=1, V_0=1$

$$\text{ضریب بازتاب} = \frac{\text{جریان بازتابی}}{\text{جریان ورودی}} = R \equiv (rr^*) = \frac{\frac{\hbar k}{m}|B|^2}{\frac{\hbar k}{m}|A|^2} = \left(\frac{k-q}{k+q}\right)^2 = \frac{(k-q)^2}{(k+q)^2} = \frac{\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} - \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}\right)^2}{(\quad + \quad)^2} = f(E)$$

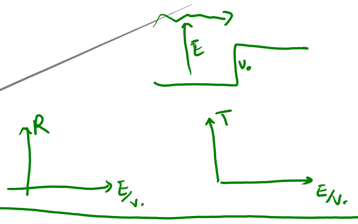
$$\text{ضریب عبور} = \frac{\text{جریان عبوری}}{\text{جریان ورودی}} = T \equiv (tt^*) = \frac{\frac{\hbar q}{m}|C|^2}{\frac{\hbar k}{m}|A|^2} = \frac{q}{k}\left(\frac{2k}{k+q}\right)^2 = \frac{4kq}{(k+q)^2}$$

حالت خاص
$$\begin{cases} E \gg V_0 \longrightarrow k \sim q \longrightarrow R=0, T=1 \\ E \simeq V_0 \longrightarrow q \sim 0 \longrightarrow R=1, T=0 \end{cases}$$

نتیجه: $R + T = 1$

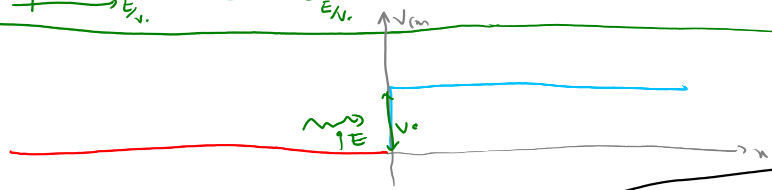
ناشی از پیوستگی جریان است $J_I(x=0) = J_{II}(x=0)$

تمرین: از روی کتاب یا دیگر سایت‌ها پ ... مسئله در مورد پتانسیل پله را باید گسترده‌تر و دقیق‌تر وارد کنال

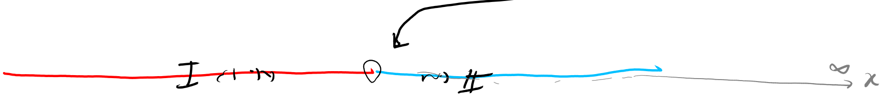


تمرین: E چند برابر V_0 باشد که ضریب عبور دو برابر ضریب بازتاب باشد.

تمرین: نمودار تغییرات ضریب بازتاب و ضریب عبور را برحسب انرژی رسم کنید.



$E < V_0$ ②



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_I}{dx^2} = E\psi_I \qquad\qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + V_0\psi_{II} = E\psi_{II}$$

$$\boxed{\frac{d^2\psi_I}{dx^2} + k^2\psi_I = 0} \quad , k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad\qquad \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} - \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)}_{q^2}\psi_{II} = 0 \qquad q=\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$$

$$\boxed{\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} - q^2\psi_{II} = 0}$$

جواب عمومی $\psi_I \to e^{ikx},\ e^{-ikx}$ ترابع‌ها موج‌اند

جواب عمومی $\psi_{II} \to e^{qx},\ e^{-qx}$ توابع نمایی

تست: e^{qx} : $\cancel{q^2 e^{qx} - q^2 e^{qx}} = 0$

e^{-qx} ; $\cancel{(-q)^2 e^{-qx} - q^2 e^{-qx}} = 0$

موج رونده

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x<0 \\ Ce^{qx} + De^{-qx} & x\geq 0 \end{cases}$$

توابع نمایی

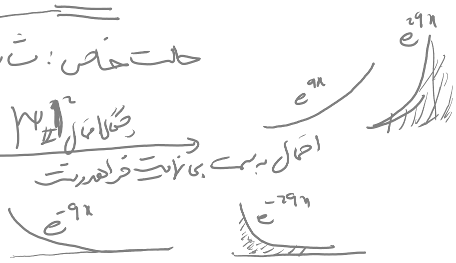
حالت خاص: تابش از چپ به راست $A\neq 0$, $B\neq 0$

$x\in[0, \infty)$

$\lim_{x\to\infty} e^{qx} \to \infty \longrightarrow$ تابع فیزیکی نیست / خوش‌رفتار نیست $\quad |\psi_{II}|^2$ احتمال یافتن ذره در بی‌نهایت خیلی زیاد می‌شود / احتمال به سمت بی‌نهایت فراهم است

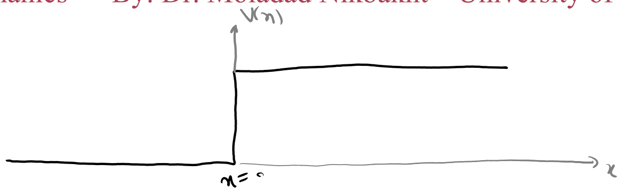
$\lim_{x\to\infty} e^{-qx} \to 0 \longrightarrow$ ایرادی ندارد / خوش‌رفتار

تابع میرا



$C=0$, $D\neq 0$

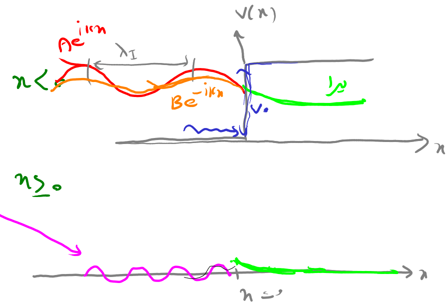
$$\psi = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x<0 \\ De^{-qx} & x\geq 0 \end{cases}$$



شرایط مرزی
$$\begin{cases} \psi_I\big|_{x=0} = \psi_{II}\big|_{x=0} & \text{پیوستگی تابع موج} \\ \frac{d\psi_I}{dx}\Big|_{x=0} = \frac{d\psi_{II}}{dx}\Big|_{x=0} & \text{پیوستگی مشتق تابع موج} \end{cases}$$

$$\begin{cases} A+B=D \\ ikA-ikB=-qD \end{cases} \longrightarrow \quad B=\frac{k-iq}{k+iq}A, \quad D=\frac{2k}{k+iq}A$$

$$\psi(x)=\begin{cases} Ae^{ikx}+\left(\frac{k-iq}{k+iq}\right)Ae^{-ikx} & x<0 \\ \frac{2k}{k+iq}Ae^{-qx} & x\geq 0 \end{cases}$$



چگالی جریان برای این ناحیه

$$J=\begin{cases} \underbrace{\frac{\hbar k}{m}|A|^2}_{J_{inc}} - \underbrace{\frac{\hbar k}{m}\left|\frac{k-iq}{k+iq}A\right|^2}_{J_{refl}} & x\leq 0 \\ 0 & x\geq 0 \end{cases}$$

* چون در ناحیه II نداریم

* احتمال حضور صفر نیست

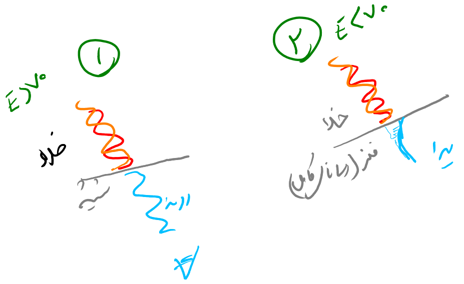
احتمال حضور ذره در ناحیه دو حساب کنید:

$$\int_0^\infty \psi^*\psi\,dx = \underbrace{\int_0^\infty \left(\frac{2k}{k+iq}A^* e^{-qx}\right)\left(\frac{2k}{k-iq}Ae^{-qx}\right)dx}_{\int \psi_{II}^*\psi_{II}\,dx} = \int_0^\infty \frac{4k^2}{k^2+q^2}|A|^2 e^{-2qx}\,dx$$

$$\frac{4k^2}{k^2+q^2}|A|^2\int_0^\infty e^{-2qx}\,dx$$

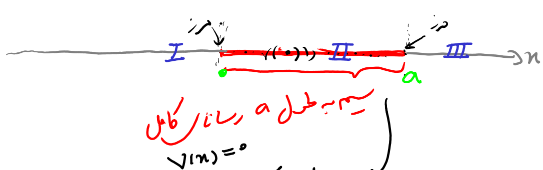
$$\frac{4k^2}{k^2+q^2}|A|^2\left(\frac{1}{-2q}\right)e^{-2qx}\Big]_0^\infty$$

احتمال حضور ذره در ناحیه دوم $= \frac{2k^2/q}{k^2+q^2}|A|^2$



تمرین: احتمال حضور ذره را در حد ($V_0\to\infty$) یا ($E\ll V_0$) حساب کنید.

مسئله ذره در جعبه یک بعدی (چاه پتانسیل یک بعدی)



چه اتفاقی داخل این سامانه افتاده است چه شکلی است

پتانسیل نفوذ ناپذیر

$$V(x)=\begin{cases} \infty & x<0 & I \\ 0 & 0\leq x\leq a & II \\ \infty & x>a & III \end{cases} \quad \to \text{نفوذ ناپذیر}$$

نکته: چاه پتانسیل نامتقارن $-\frac{a}{2}$ $\frac{a}{2}$

$K = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$

I : ذره حضور ندارد $\psi_I = 0$

II : $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} = E\psi_{II} \longrightarrow e^{ikx},\ e^{-ikx}$

III : ذره حضور ندارد $\psi_{III} = 0$

$$\psi = \begin{cases} 0 & x<0 \\ Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & 0 \leq x \leq a \\ 0 & x>a \end{cases}$$

دو تا مرز داریم $\xrightarrow[\text{بررسی شود}]{\text{شرایط مرزی}}$ پیوستگی تابع موج

~~پیوستگی مشتق تابع موج~~

چون پتانسیل نامتناهی است

$$\begin{cases} \text{مرز ①} & \psi_I\big|_{x=0} = \psi_{II}\big|_{x=0} \\ \text{مرز ②} & \psi_{II}\big|_{x=a} = \psi_{III}\big|_{x=a} \end{cases}$$

$$\begin{cases} 0 = A + B \longrightarrow B = -A \\ Ae^{ika} + Be^{-ika} = 0 \end{cases} \longrightarrow Ae^{ika} - Ae^{-ika} = 0 \longrightarrow A(e^{ika} - e^{-ika}) = 0$$

نمی‌تواند صفر باشد

if $A=0 \longrightarrow B=0 \Longrightarrow \psi_{II}=0 \longrightarrow \psi=0$: تناقض

چون اگر ذره را داریم ← موج نمی‌شود

این باید صفر باشد

$$e^{ika} - e^{-ika} = 0$$

$(\cos ka + i\sin ka) - (\cos ka - i\sin ka) = 0 \longrightarrow 2i\sin ka = 0 \longrightarrow ka = n\pi$

$K = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$: E در دل K است

ka باید مضربی صحیح از $n\pi$ باشد تا $\sin ka$ صفر شود

$K = n\frac{\pi}{a} \rightsquigarrow K_n = n\frac{\pi}{a}$

نکته: تابع موج در ناحیه II شبیه امواج ایستا است (تار)

عدد موج این موج ایستا باید مضربی صحیح از $\frac{\pi}{a}$ باشد

★ عدد موج هر چیزی نمی‌تواند باشد ← هندسه تعیین کننده میزان K است

★★ چون K و E به هم ربط دارند ← انرژی هم هر مقداری نمی‌تواند داشته باشد

طیف انرژی گسسته $\xrightarrow[\text{انرژی}]{\text{مقادیر مجاز}}$

$$\begin{cases} K = n\frac{\pi}{a} \\ K = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \end{cases}$$

$$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = n\frac{\pi}{a}$$

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{n^2\pi^2}{a^2} \longrightarrow E = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m(\text{عرض چاه})^2}$$

$n = 1, 2, 3, 4, \ldots$

$$\boxed{\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle}$$

طیف انرژی گسسته

$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \longrightarrow |\psi_1\rangle$

$E_2 = \frac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \rightsquigarrow |\psi_2\rangle$

$\vdots$

نکته: n از ۱ شروع می‌شود

if $n=0 \longrightarrow k=0 \longrightarrow \begin{matrix} e^{ikx}=1 \\ e^{-ikx}=1 \end{matrix} \longrightarrow \psi_{II} = Ae^{ikx} - Ae^{-ikx} = 0$

تناقض

صرفه جویی در نوشتار $\psi = \psi_{II} = \psi_n(x) = Ae^{ik_n x} - Ae^{-ik_n x}$ $\quad 0 \leq x \leq a$

نرمالیزاسیون تابع موج

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi \psi^* dx = \int_0^a \psi_n \psi_n^* dx = 1$$

$$\psi_n = A(e^{ik_n x} - e^{-ik_n x}) = 2iA\sin k_n x$$

$$\int_0^a 4|A|^2 \sin^2 k_n x \, dx = 1 \longrightarrow 4|A|^2 \int_0^a \sin^2(\tfrac{n\pi}{a}x) dx = 1$$

$$4|A|^2 \int_0^a \left(\frac{1-\cos\frac{2n\pi}{a}x}{2}\right) dx = 1 \rightarrow 4|A|^2 \frac{a}{2} = 1$$

$$|A|^2 = \frac{1}{2a}$$

$A = \frac{1}{\sqrt{2a}}$

$A = \frac{-1}{\sqrt{2a}}$

$A = \frac{i}{\sqrt{2a}}$

$A = \frac{-i}{\sqrt{2a}}$

$A = \frac{e^{i\theta}}{\sqrt{2a}}$

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

$n \quad \psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x, \quad E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$

خلاصه :

$\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$

ارتوگونال

تراز

تبه

حالتهای مجاز

ψ_3

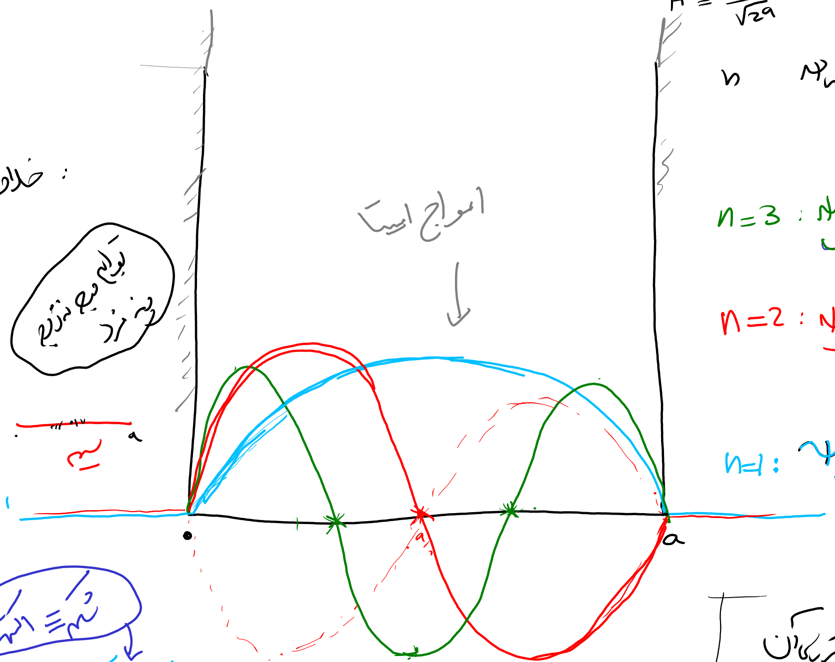
ψ_2

ψ_1

بوزنهای مجاز تولید نمی شود

امواج ایستا

سیم



$n=3: \psi_3(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{3\pi}{a}x), \quad E_3 = \frac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$

دومین حالت برانگیخته

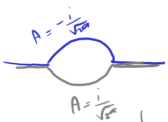
$n=2: \psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{2\pi}{a}x) \quad E_2 = \frac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$

اولین حالت برانگیخته

$n=1: \psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi}{a}x \quad E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$

حالت پایه

کمترین مقدار انرژی



$A = \frac{-1}{\sqrt{2a}}$

$A = \frac{1}{\sqrt{2a}}$

فرقی با هم ندارند

اگر دید کوانتمی این حالات

اسم کوچک ندارند

تنها اختلاف فاز دارند

با هم

فیزیک مهم است

$|\psi\psi^*|$

شکم = الکترون

حالت پایه یک شکم و صفر گره $|\psi_1\rangle$

اولین حالت برانگیخته دو شکم و یک گره $|\psi_2\rangle$

دومین حالت برانگیخته سه شکم و دو گره $|\psi_3\rangle$

n شکم و $(n-1)$ گره $|\psi_n\rangle$

* هر چه به تراز بالاتر برویم اختلاف انرژی این

با انرژی تراز قبلی بیشتر می شود

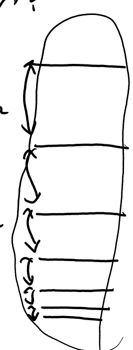
$|\psi_3\rangle$ — E_3 دومین حالت برانگیخته

$\Delta E = E_3 - E_2 \quad \Delta_{23} = 5\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$

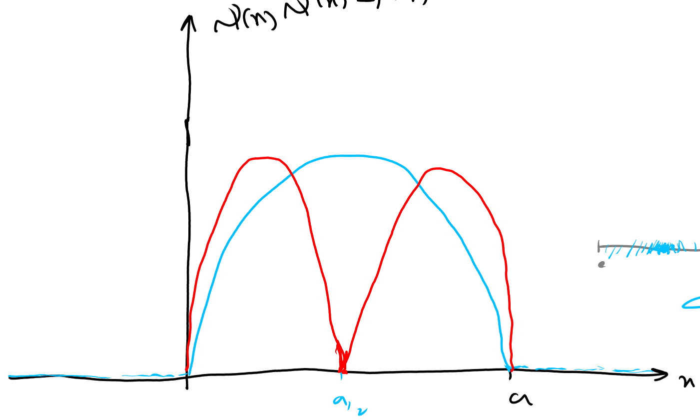
$|\psi_2\rangle$ — E_2 اولین حالت برانگیخته

$\Delta E = E_2 - E_1 \quad \Delta_{12} = \frac{2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$

$|\psi_1\rangle$ — E_1 حالت پایه



$\langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{mn}$ توابع موج بر هم عمودند $\Leftarrow$ توابع موج متعامد $\Leftarrow$ وها میلتونی هرمیتی $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$ $\longleftarrow$ تبهگنی نداریم $E_1 \neq E_2 \neq E_3 \neq \cdots$ $\longleftarrow$ طیف انرژی $E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$, $n = 1, 2, 3, 4$



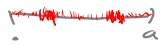
رسم چگالی احتمال این سامانه

$\rho_1(x)=\frac{2}{a}\sin^2\frac{\pi}{a}x \longrightarrow$ چگالی احتمال در وسط بیشینه است

احتمال حضور ذره در حالت پایه در $a/2$ از همه جا بیشتر است

$\rho_2(x)=\frac{2}{a}\sin^2\frac{2\pi}{a}x$

نکته: احتمال حضور ذره در اولین حالت برانگیخته در $\frac{a}{2}$ برابر صفر است



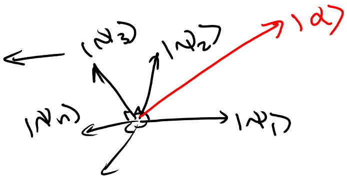
تمرین: $\rho_3(x) = \dots$ رسم کنید و در مورد نتایج را بررسی کنید.

تعامد ویژه توابع هامیلتونی ذره در جعبه

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

تمرین: $\langle\psi_1|\psi_2\rangle=0 \rightsquigarrow \int_0^a\psi_1^*(x)\,\psi_2(x)\,dx=\int_0^a\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi}{a}x\right)\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{2\pi}{a}x\,dx=0$ ok /

نتیجه این تمرین: $\langle\psi_i|\psi_j\rangle=\delta_{ij} \Leftarrow \{|\psi_n\rangle\}$ تشکیل پایه می‌دهند $\Leftarrow$ حالت سامانه را می‌توان بر حسب آنها بسط داد



در فضای بردارهای هامیلتونی

مثال‌هایی از حالت‌ها:

$|\alpha\rangle=|\psi_1\rangle \rightsquigarrow \psi_\alpha(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi}{a}x$

حالت انرژی ≡ حالت پایه

حالت انرژی مانا است: (طبق نظریه بررسی از ویژه بردارهای هامیلتونی)

انرژی $\langle\hat H\rangle=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$

$\langle\hat p^2\rangle=\langle 2m\hat H\rangle=\frac{\pi^2\hbar^2}{a^2}$

$|\alpha\rangle=|\psi_2\rangle \rightsquigarrow \psi_\alpha(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{2\pi}{a}x$

حالت انرژی ≡ اولین حالت برانگیخته

حالت سامانه مانا است

$\langle\hat H\rangle=\frac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$

$|\alpha\rangle=\frac{3}{5}|\psi_1\rangle+\frac{4i}{5}|\psi_2\rangle$ ok ⟵ حالت غیر مانا:

$\psi_\alpha(x)=\frac{3}{5}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi}{a}x+\frac{4i}{5}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{2\pi}{a}x$

انرژی متوسط $=\langle\hat H\rangle=\langle\alpha|\hat H|\alpha\rangle=$

$\left(\frac{3}{5}\langle\psi_1|-\frac{4i}{5}\langle\psi_2|\right)\hat H\left(\frac{3}{5}|\psi_1\rangle+\frac{4i}{5}|\psi_2\rangle\right)$

$=\frac{9}{25}\underbrace{\langle\psi_1|\hat H|\psi_1\rangle}_{E_1}+\frac{12i}{25}\langle\psi_1|\hat H|\psi_2\rangle-\frac{12i}{25}\langle\psi_2|\hat H|\psi_1\rangle+\frac{16}{25}\underbrace{\langle\psi_2|\hat H|\psi_2\rangle}_{E_2}$

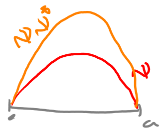
$E_2\langle\psi_1|\psi_2\rangle$

$\langle\psi_1|E_2|\psi_2\rangle \rightsquigarrow E_2\langle\psi_1|\psi_2\rangle=0$

$=\frac{9}{25}E_1+\frac{16}{25}E_2$

$\langle\psi_1|E_1|\psi_1\rangle \rightsquigarrow E_1\langle\psi_1|\psi_1\rangle=E_1$

$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\frac{\pi}{a}x$



مثال: ذره ای محبوس در جعبه $[0 - a]$ است. چنانچه سامانه در حالت پایه باشد:

الف: $\langle \hat{x} \rangle$

$$\langle \hat{x} \rangle = \int_0^a \psi^* x \psi \, dx = \int_0^a \frac{2}{a} x \sin^2\frac{\pi}{a}x \, dx = ?$$

ب: $\langle \hat{p}_x \rangle$

$$\langle \hat{p}_x \rangle = \int_0^a \psi^* \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} \psi \, dx = \frac{\hbar}{i}\int_0^a \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \frac{\pi}{a}\cos\frac{\pi}{a}x \, dx = ?$$

ج: $\langle \hat{x}^2 \rangle$

$$\langle \hat{x}^2 \rangle = \int_0^a \frac{2}{a} x^2 \sin^2\frac{\pi}{a}x \, dx = ?$$

د) $\langle \hat{p}^2 \rangle$

$$\langle \hat{p}_x^2 \rangle = \int_0^a \psi^* \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}\right) \psi \, dx = +\hbar^2 \frac{2}{a}\frac{\pi^2}{a^2} \int_0^a \sin^2\frac{\pi}{a}x \, dx = ?$$

و) $\langle \hat{T} \rangle$

$$\langle \hat{T} \rangle = \left\langle \frac{\hat{p}^2}{2m} \right\rangle = \frac{1}{2m}\langle \hat{p}^2 \rangle = \frac{1}{2m}\left(\quad \right)$$

هـ) نمایش تکانه ای تابع موج

$$\Phi(p_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^a \psi(x) \, e^{-ip_x x} \, dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\frac{\pi}{a}x \, e^{-ip_x x} \, dx$$

$$\Phi(p_x) = \frac{e^{-p_x a/2\hbar} \; 2\pi/a}{\sqrt{\pi\hbar a}} \; \frac{\cos(p_x a/2\hbar)}{\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 - \left(\frac{p_x}{\hbar}\right)^2} \qquad -\infty \leq p_x \leq +\infty$$

ب):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^*(p_x) \, p_x \, \Phi(p_x) \, dp_x$$

د)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^*(p_x) \, p_x^2 \, \Phi(p_x) \, dp_x$$

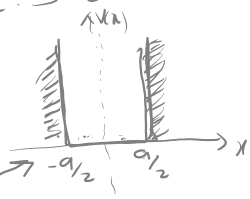
تمرین: تمرین برای هفته آینده: ۳ مسئله راجع به چاه یک بعدی رو بنویسید و ارسال کنید.

حل کامل: تمرین سری ...

تمرین: یافتن دوباره ترازهای انرژی برای هامیلتونی با پتانسیل زیر

کمک: سه ترتیب آینه ★★★★

$$V(x)=\begin{cases}\infty & x<-a/2\\ 0 & -a/2\leq x\leq a/2\\ \infty & x>a/2\end{cases}$$



حل با استفاده از تغییر دستگاه مختصات از مسئله قبلی: پتانسیل متقارن (زوج است) $V(x)=V(-x)$. این امر عواقبی به دنبال دارد

$-a/2 \quad 0 \quad a/2$

ارجاع قبلی $x \to x-\frac{a}{2}$ $\Rightarrow$ $\sin(\frac{n\pi}{a}x) \to \sin(\frac{n\pi}{a}x-\frac{n\pi}{2}) = \sin(\frac{n\pi}{a}x)\cos(\frac{n\pi}{2})-\cos(\frac{n\pi}{a}x)\sin(\frac{n\pi}{2})$

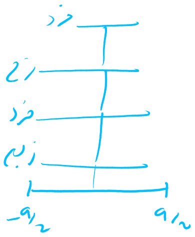
برای n های زوج و فرد داستان متفاوت رخ می‌دهد.

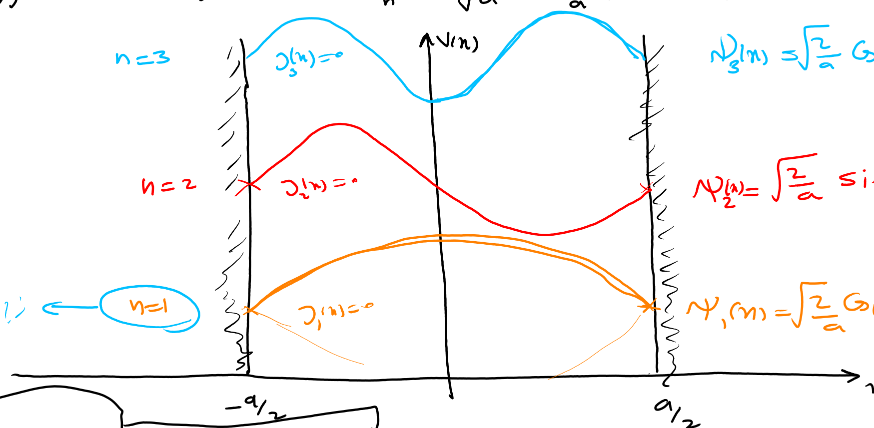
انرژی‌ها همان‌هایی است $E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$

ترازهای فرد $n=1,3,5,\dots$ $\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\cos\frac{n\pi}{a}x \longrightarrow$ زوج متقارن

ترازهای زوج $n=2,4,6,\dots$ $\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x \longrightarrow$ فرد

★ ترازها یک در میان زوج و فرد هستند
★ حالت پایه همیشه زوج است





$\psi_3(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\cos(\frac{3\pi}{a}x)$

$\psi_2(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{2\pi}{a}x) \rightsquigarrow \psi_2(-x)=-\psi_2(x)$

$\psi_1(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\cos(\frac{\pi}{a}x) \rightsquigarrow \psi_1(x)=\psi_1(-x)$

★ نکته مهم ← تابع موج ذره در چاه پتانسیل به صورت امواج ایستا باشد (انرژی‌ها گسسته است) و چگالی جریان نیز صفر می‌باشد ← حساب کنید

عملگر پاریته ⟵ $\hat{\pi}$ or $\hat{P}$ ← با تکانه خطی اشتباه نگیرید

$\hat{P}=\hat{P}_x+\hat{P}_y+\hat{P}_z$

عملگر تکانه برداری را با $\vec{\hat{P}}$ نمایش می‌دهیم

← تابع دینامیکی نیست
← عملگر ریاضی است
← عملگر هرمیتی است $\hat{P}=\hat{P}^\dagger$ (هر چند هم پذیر نیست)
← عملگر یونیتاری است $\hat{P}\hat{P}^\dagger=\hat{1}$ دارای مقادیر حقیقی
نُرم یک ارگ طول را تغییر نمی‌دهد

← کار این عملگر چیست؟ در زیر بردارها و مقادیر این عملگر چیست؟ چنانچه عملگر مکان فرد باشد پس از عبور پاریته علامت منفی بر جای می‌گذارد

تمرین ⟵ $\hat{P}\hat{x}=-\hat{x}\hat{P} \rightsquigarrow \hat{P}\hat{x}+\hat{x}\hat{P}=0 \rightsquigarrow [\hat{P},\hat{x}]_+=0$ پاد جابجایی $\quad \hat{P}\hat{y}=-\hat{y}\hat{P} \rightsquigarrow [\hat{P},\hat{y}]_+=0 \quad \hat{P}\hat{z}=-\hat{z}\hat{P} \rightsquigarrow [\hat{P},\hat{z}]_+=0$

$\hat{P}\hat{x}^2=+\hat{x}^2\hat{P} \rightsquigarrow \hat{P}\hat{x}^2-\hat{x}^2\hat{P}=0 \rightsquigarrow [\hat{P},\hat{x}^2]=0 \quad \hat{P}\hat{y}^2=+\hat{y}^2\hat{P} \rightsquigarrow [\hat{P},\hat{y}^2]=0 \quad \hat{P}\hat{z}^2=+\hat{z}^2\hat{P} \rightsquigarrow [\hat{P},\hat{z}^2]=0$

نتیجه ↓ جابجا

$\hat{P}\hat{r}=-\hat{r}\hat{P} \longrightarrow \hat{P}\hat{r}+\hat{r}\hat{P}=0 \Rightarrow [\hat{P},\hat{r}]_+=0$

$\hat{P}\hat{r}^2=+\hat{r}^2\hat{P} \longrightarrow \hat{P}\hat{r}^2-\hat{r}^2\hat{P}=0 \longrightarrow [\hat{P},\hat{r}^2]=0$

چنانچه $f(\hat{r})$ تابعی فرد از $\hat{r}$ باشد $\to \hat{P}f(\hat{r})=f(-\hat{r})\hat{P}=-f(\hat{r})\hat{P} \rightsquigarrow [\hat{P},f(\hat{r})]_+=0$ ← فرد

چنانچه $f(\hat{r})$ تابعی زوج از $\hat{r}$ باشد $\to \hat{P}f(\hat{r})=f(-\hat{r})\hat{P}=+f(\hat{r})\hat{P} \rightsquigarrow [\hat{P},f(\hat{r})]=0$ ← زوج ★ $\xrightarrow{\text{نتیجه}}$ ویژه بردارهای $f(\hat{r})$ ویژه بردار پاریته خواهد بود

مثال $f(\hat{r})=\frac{1}{2}k\hat{r}^2$, $f(\hat{r})=\frac{1}{\hat{r}}=\hat{r}^{-1}$, $f(\hat{r})=\frac{1}{\hat{r}^2}=\hat{r}^{-2}$

قواعد مشابهی برای رابطه جابجایی یا پادجابجایی عملگر پاریته با عملگرهای تکانه خطی داریم

تمرین $\hat{P}\hat{P}_x=-\hat{P}_x\hat{P}$, $\hat{P}\hat{P}_y=-\hat{P}_y\hat{P}$, $\hat{P}\hat{P}_z=-\hat{P}_z\hat{P} \longrightarrow [\hat{P},\hat{P}_x]_+=[\hat{P},\hat{P}_y]_+=[\hat{P},\hat{P}_z]_+=0$

$\hat{P}\hat{P}_x^2=+\hat{P}_x^2\hat{P}$, $\hat{P}\hat{P}_y^2=+\hat{P}_y^2\hat{P}$, $\hat{P}\hat{P}_z^2=+\hat{P}_z^2\hat{P} \longrightarrow [\hat{P},\hat{P}_x^2]=[\hat{P},\hat{P}_y^2]=[\hat{P},\hat{P}_z^2]=0$

$\hat{p}^2=\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2$

نتیجه

$$\hat{P}\hat{p} = -\hat{p}\hat{P} \rightsquigarrow [\hat{P},\hat{p}]_+ = 0$$

$$\hat{P}\hat{p}^2 = +\hat{p}^2\hat{P} \rightsquigarrow [\hat{P},\hat{p}^2] = 0$$

چنانچه $f(\hat p)$ تابع فرد از $\hat p$ باشد: $\hat P f(\hat p) = f(-\hat p)\hat P = -f(\hat p)\hat P \rightsquigarrow [\hat P, f(\hat p)]_+ = 0$

چنانچه $f(\hat p)$ تابع زوج از $\hat p$ باشد: $\hat P f(\hat p) = f(-\hat p)\hat P = +f(\hat p)\hat P \rightsquigarrow [\hat P, f(\hat p)] = 0$ → نتیجه مهم: ویژه بردارهای $f(\hat p)$ زوج، ویژه بردارهای پاریته خواهند بود

مثال: $f(\hat p) = \hat p/m$

مثال: $f(\hat p) = \frac{\hat p^2}{2m}$

جمع‌بندی

* چنانچه $f(\hat r,\hat p)$ تابعی زوج از $\hat r$ و $\hat p$ باشد یعنی $f(-\hat r,-\hat p)=+f(\hat r,\hat p)$ آنگاه

$$\hat P f(\hat r,\hat p) = +f(\hat r,\hat p)\hat P \rightsquigarrow [\hat P, f(\hat r,\hat p)] = 0$$

مهم → ویژه بردارهای $f(\hat r,\hat p)$ زوج، ویژه بردارهای پاریته هم هست

* چنانچه $f(\hat r,\hat p)$ تابعی فرد از $\hat r$, $\hat p$ باشد یعنی $f(-\hat r,-\hat p)=-f(\hat r,\hat p)$ آنگاه

$$\hat P f(\hat r,\hat p) = -f(\hat r,\hat p)\hat P \rightsquigarrow [\hat P, f(\hat r,\hat p)]_+ = 0$$

* چنانچه $f(\hat r,\hat p)$ نه زوج باشد نه فرد ← نمی‌توان رابطه‌ای با پاریته برای آن نوشت

مثال: پاریته و تکانه زاویه‌ای: $L_z = \hat x\hat p_y - \hat y\hat p_x$، $\hat x\to-\hat x$، $\hat p\to-\hat p$ ← $L_z \to L_z$ ، $\hat P L_z = +L_z\hat P$ ، $[\hat P, L_z]=0$

کاربرد ؟؟

اثر پاریته بر هامیلتونی

$$\hat H(\hat r,\hat p) = \hat T + \hat V = \frac{\hat p^2}{2m} + V(\hat r)$$

انرژی جنبشی تابع زوج از $\hat p$ است

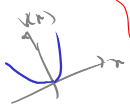
تعیین کننده است

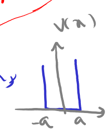
* اگر $V(\hat r)$ تابع زوج از $\hat r$ باشد ← مثلا:

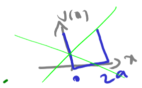
$V(\vec r) = \frac{1}{r^2}$

$V(x,y) = \frac12 Kx^2 + \frac12 Ky^2$

$V(x) = \frac12 Kx^2$







هامیلتونی تابعی زوج از $\hat r$ و $\hat p$ خواهد بود → $\hat H(-\hat r,-\hat p) = +\hat H(\hat r,\hat p)$

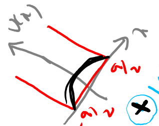
هامیلتونی با پاریته جابجا خواهد شد

$$\hat P\hat H = +\hat H\hat P \rightsquigarrow [\hat P,\hat H] = 0$$

ویژه بردارهای هامیلتونی، ویژه بردارهای پاریته خواهند بود

$$\hat H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \longrightarrow \hat P|\psi\rangle = P|\psi\rangle$$

ویژه مقدار پاریته برای ویژه بردار $|\psi\rangle$



مثال: $\hat P|\psi\rangle = (+1)|\psi\rangle$ ، $\hat P|\psi\rangle = (-1)|\psi\rangle$ ، $\hat P|\psi\rangle = (?)|\psi\rangle$

در غیر این صورت سخنی نمی‌توان زد

* اگر نسبت به یکی از مختصه‌ها (مثلاً x) زوج باشد می‌توان مسئله را در راستای آن جدا کرد و در راستای آن از پاریته برای حل مسئله استفاده کرد

مثال: $V(x,y) = \frac12 Kx^2 + \frac12 Ky^3$

$$\hat H = \underbrace{\frac{p_x^2}{2m} + \frac12 Kx^2}_{\hat H_x} + \underbrace{\frac{p_y^2}{2m} + \frac12 Ky^3}_{\hat H_y}$$

زوج

زوج نیست ← نه زوج

این بخش از هامیلتونی زوج است

* موضوع خارج از بحث ماست

سوال: ویژه مقادیر پاریته چیست؟ ← از اثر پاریته روی $|\vec r\rangle$ شروع می‌کنیم

تمرین: عملگر پاریته یک عملگر یکانی است ! کنید

$$\hat P|\vec r\rangle = |-\vec r\rangle \longrightarrow \hat P\hat P|\vec r\rangle = \hat P|-\vec r\rangle \rightsquigarrow \hat P^2|\vec r\rangle = +1|\vec r\rangle$$

$$\hat P|\vec p\rangle = |-\vec p\rangle$$

$|\vec r\rangle$ ویژه بردار $\hat P^2$ است با ویژه مقدار $+1$ ⇐ ویژه مقادیر عملگر $\hat P$ برابر ±1 هستند ← به عنوان تمرین اثبات کنید

بنابراین حقیقی‌اند + هرمیتی است ⇐ ویژه بردارهای این عملگر متعامدند

نکته: $\hat B^2|\beta\rangle = +1|\beta\rangle$ ← ویژه مقادیر عملگر $\hat B$ برابر ±1 هستند

مقابله:

تشبیهی:

★ اگر کت حالت ویژه بردار پاریته با ویژه مقدار +۱ باشد

$$\left(\hat{P}|\psi\rangle = +|\psi\rangle\right) \Longrightarrow$$ کت حالت را زوج گویند

تابع موج، تابعی زوج از مکان است

$$\langle \bar{r}|\hat{P}|\psi\rangle = +\langle \bar{r}|\psi\rangle \longrightarrow \langle -\bar{r}|\psi\rangle = \langle \bar{r}|\psi\rangle$$

$$\psi(-\bar{r}) = \psi(\bar{r})$$

$\psi(-x,-y,-z) = \psi(x,y,z)$ ⟸ تابع موج زوج (متقارن) است

★ اگر کت حالت ویژه بردار پاریته با ویژه مقدار -۱ باشد

$$\left(\hat{P}|\psi\rangle = -|\psi\rangle\right) \Longrightarrow$$ کت حالت را فرد گویند

تابع موج، تابعی فرد از مکان است

$$\langle \bar{r}|\hat{P}|\psi\rangle = -\langle \bar{r}|\psi\rangle \rightsquigarrow \langle -\bar{r}|\psi\rangle = -\langle \bar{r}|\psi\rangle$$

$$\psi(-\bar{r}) = -\psi(\bar{r})$$

$\psi(-x,-y,-z) = -\psi(x,y,z)$ ⟸ تابع موج فرد است

داستان مال ما، برای تابع موج در فضای مکان (دوم) هم پاریته داریم

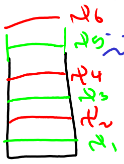
★ ویژه ویژه مقادیر پاریته بیان می‌کنند که تابع موج

نکته: {هر تابع زوجی نسبت به مکان، ویژه تابع پاریته با ویژه مقدار +۱ است
هر تابع فردی نسبت به مکان، ویژه تابع پاریته با ویژه مقدار -۱ است}

نکته: حالت‌ها {با n فرد در چاه پتانسیل متقارن $(\psi_1, \psi_3, \psi_5, \ldots)$ $\boxed{\text{زوج هستند}}$ ⟸ ویژه تابع پاریته با ویژه مقدار +۱ هستند

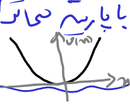
حالت‌ها {با n زوج در چاه پتانسیل متقارن $(\psi_2, \psi_4, \psi_6, \ldots)$ فرد هستند ⟸ ویژه تابع پاریته با ویژه مقدار -۱ هستند

چاه بی‌نهایت متقارن



★ چنانچه چاه پتانسیل متقارن نباشد ⟵ $V(x)$ زوج نیست ⟵ هر چه در ارتباط با پاریته نمی‌توان به میان آورد

★ حالت‌های پایه زوج ★ ⟵ داستان کلی است و ربطی به چاه ندارد ⟵ مثال

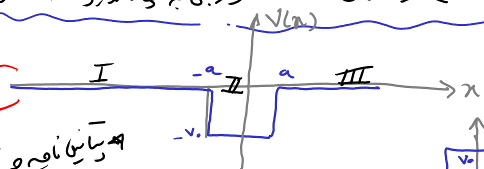


سد پتانسیل در چاه پتانسیل

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < -a \\ -V_0 & -a \leq x \leq a \\ 0 & x > a \end{cases}$$

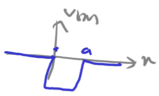
⟵ نمونه غیر متقارن هم دارد

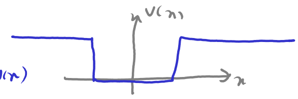
⟵ پتانسیل جاذب

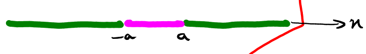


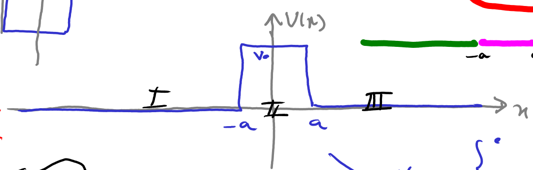
★ پتانسیل ناحیه محدود تولید شده از طرفین

مثال







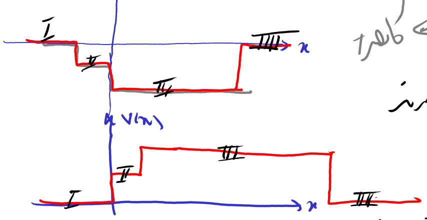


⟵ نمونه غیر متقارن هم دارد

⟵ پتانسیل دافع

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x \leq a \\ V_0 & -a \leq x \leq a \\ 0 & x > a \end{cases}$$

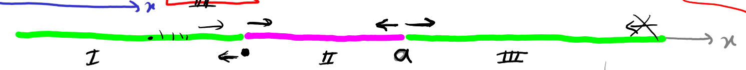
★ پتانسیل ناحیه محدود با انرژی ثابت



کاربرد

حل سد پتانسیل: بازتاب و عبور برای یک باریکه از الکترون‌ها که از سمت چپ به راست در مسیر یک پتانسیل زیر وجود دارد

برای دو حالت الف) $E > V_0$ ب) $E < V_0$ حساب کنید



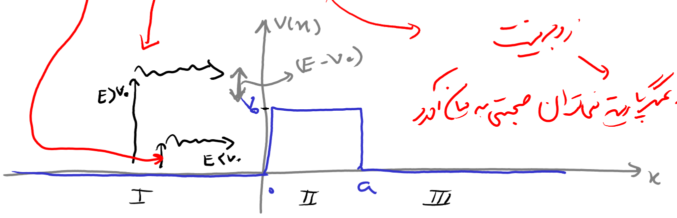
مثال - بالای پتانسیل: بازتاب دارد

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & 0 \leq x \leq a \\ 0 & x > a \end{cases}$$

نامتقارن

زوجیت

از هم‌گیر پاریته نمی‌توان صحبتی به میان آورد



الف) $E > V_0$

نکته: طیف انرژی پیوسته است

$\psi_I:\ e^{ikx}\ ,\ e^{-ikx}$ $\qquad$ $\psi_{II}:\ e^{iqx}\ ,\ e^{-iqx}$ $\qquad$ $\psi_{III}:\ e^{ikx}\ \ \cancel{e^{-ikx}}$

$k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ $\qquad$ $q=\sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$ $\qquad$ $k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

* توابع موج در هر سه ناحیه امواج تخت (رونده) هستند
* چون پتانسیل (هامیلتونی) در ناحیه I و III برابر است عدد موج در این دو ناحیه یکسان است
* چون موج از سمت چپ تابیده است، در نواحی I و II ترم بازتابی خواهیم داشت اما در ناحیه III ترم بازتابی نداریم
* از آنجا که عدد موج در ناحیه میانی کوچکتر است: $q<k$ $\Rightarrow$ طول موج ذره در ناحیه میانی بزرگتر خواهد بود $\lambda_{II} > (\lambda_I=\lambda_{III})$

$\frac{2\pi}{\lambda_{II}} < \frac{2\pi}{\lambda_{I,III}} \to \lambda_{I,III} < \lambda_{II}$

* در ناحیه میانی تکانه ذره $\hbar q$ است
در طرفین $\hbar k$ است
تکانه در ناحیه میانی کمتر از طرفین است

حل:

$$\begin{cases}\psi_I(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}\\ \psi_{II}(x)=Ce^{iqx}+De^{-iqx}\\ \psi_{III}(x)=Ee^{ikx}\end{cases}$$

هدف: محاسبه B، C، D و E برحسب A

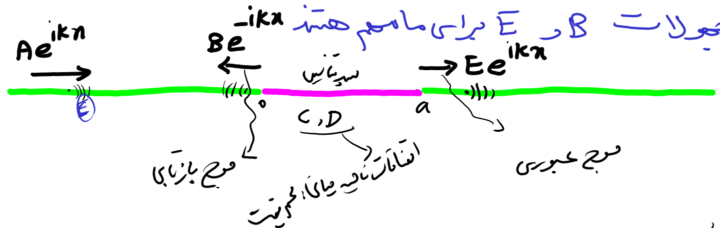
و پس محاسبه بازتاب و عبور

نکته

* به چهار معادله نیاز داریم ← شرایط مرزی ← پیوستگی تابع موج $\psi(x)$ و مشتق آن $\psi'(x)$ در مرزها $\to$ $x=0$ ، $x=a$

* تنها مجهولات B و E برای ما مهم هستند

از روی آنها بازتاب و عبور محاسبه می‌شود



$J_I = J_{II} = J_{III}$, J_{inc}, J_{reflec}, $J_I - J_{re}$, J_{trans}

شرایط مرزی:

پیوستگی تابع موج
$$\begin{cases}A+B=C+D & (1)\\ Ce^{iqa}+De^{-iqa}=Ee^{ika} & (3)\end{cases}$$

پیوستگی مشتق تابع موج
$$\begin{cases}ik(A-B)=iq(C-D) & (2)\\ iq(Ce^{iqa}-De^{-iqa})=ikEe^{ika} & (4)\end{cases}$$

$E=?\ ,\ B=?$

پس

$$\begin{cases}B-C-D+0E=-A\\ 0B+e^{iqa}C+e^{-iqa}D-e^{ika}E=0\\ -ikB-iqC+iqD+0E=-ikA\\ 0B+iqe^{iqa}C-iqe^{-iqa}D-ike^{ika}E=0\end{cases}$$

$$\begin{bmatrix}1&-1&-1&0\\ 0&e^{iqa}&e^{-iqa}&-e^{ika}\\ -ik&-iq&iq&0\\ 0&iqe^{iqa}&-iqe^{-iqa}&-ike^{ika}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}B\\C\\D\\E\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-A\\0\\-ikA\\0\end{bmatrix}$$

$\hat M$ ماتریس ضرایب ، $\bar X$ مجهول‌ها ، $\bar Y$ ثابت‌ها

$$\hat M\bar X=\bar Y$$
$$\hat M^{-1}\hat M\bar X=\hat M^{-1}\bar Y$$
$$\boxed{\bar X=\hat M^{-1}\bar Y}$$

$B=\checkmark$
$C=\checkmark$
$D=\checkmark$
$E=\checkmark$

$$E=4kqAe^{-ika}\left[(k+q)^2e^{-iqa}-(k-q)^2e^{iqa}\right]^{-1}$$

$|E|^2=EE^*$

$$\boxed{e^{\pm ika}=\cos ka\pm i\sin ka\ ,\quad e^{\pm iqa}=\cos qa\pm i\sin qa}$$

$$E=4kqAe^{-ika}\left[4kq\cos qa-2i(k^2+q^2)\sin qa\right]^{-1}$$

$J_{inc}=\frac{\hbar k}{m}|A|^2$ ← جریان فرودی , $J_{trans}=\frac{\hbar k}{m}|E|^2$ ← جریان عبوری $\xrightarrow{tt^*}$ $T=\frac{J_{trans}}{J_{inc}}=\left[1+\frac{1}{4}\left(\frac{k^2-q^2}{kq}\right)^2\sin^2 qa\right]^{-1}$ ← ضریب عبور

$k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\ ,\ q=\sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$

$E>V_0$ برای E ها $\quad$ (1) $\quad T=\left(1+\frac{\sin^2 qa}{4\frac{E}{V_0}\left(\frac{E}{V_0}-1\right)}\right)^{-1}$ $\quad T=T(E)$

$E\to V_0$ $\quad \sin^2 qa\sim(qa)^2=2m\frac{(E-V_0)}{\hbar^2}a^2$

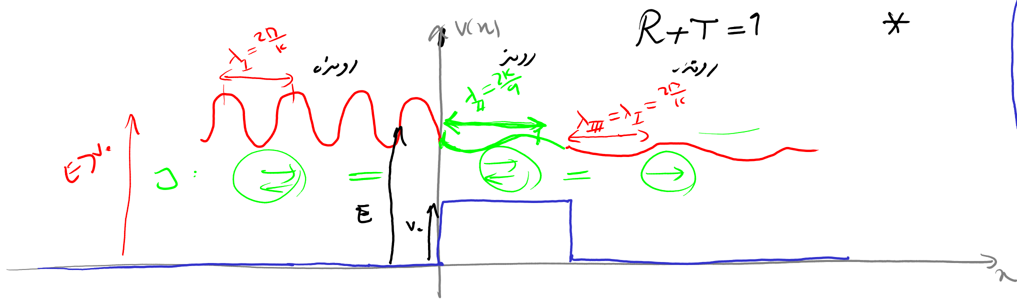
$T=\frac{1}{\left(1+\frac{\sin^2 qa}{4\frac{E}{V_0}\left(\frac{E}{V_0}-1\right)}\right)}$

$J_{inc}=\frac{\hbar k}{m}|A|^2$ $\quad$ $J_{refl}=\frac{\hbar k}{m}|B|^2$ $\quad \rightsquigarrow \quad R=rr^*=\frac{\cancel{\hbar k}|B|^2}{\cancel{\hbar k}|A|^2}=\frac{\sin^2 qa}{4\frac{E}{V_0}\left(\frac{E}{V_0}-1\right)}\left[1+\frac{\sin^2 qa}{4\frac{E}{V_0}\left(\frac{E}{V_0}-1\right)}\right]^{-1}$

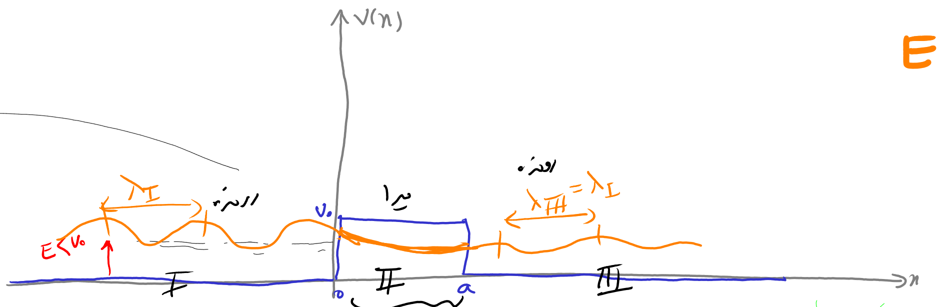
محاسبه شود

ضریب بازتاب

$$R+T=1 \qquad *$$



ب) $E<V_0$



e^{iqx} e^{-iqx} ولی

$q=\sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$

$q=i\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$

(I) e^{ikx} e^{-ikx}

(II) e^{qx} e^{-qx} هر دو را نگه داریم

(III) e^{ikx} $\cancel{e^{-ikx}}$ ترکیب بازتابی به سمت چپ نداریم

ناحیه ممنوع کلاسیکی

$q=\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$ برای $x\in[0\ a]$

$$\begin{cases} \psi_I = Ae^{ikx}+Be^{-ikx} \\ \psi_{II} = Ce^{qx}+De^{-qx} \\ \psi_{III} = Ee^{ikx} \end{cases}$$

$J_I = J_{II} = J_{III}$ * پیوستگی جریان داریم

* در ناحیه I و III امواج تخت (رونده) هستند

* در ناحیه II امواج میرا هستند

بازتاب و عبور مهم است ← نمی‌خواهیم حل کنیم.

اگر قسمت الف را با جواب تحت برابر بدست می‌آوریم

$q \to iq$

$(E-V_0) \to (V_0-E)$ or $\left(\frac{E}{V_0}-1\right) \to \left(1-\frac{E}{V_0}\right)$

$\sin qx \to \sinh qx$

$\frac{e^{iqx}-e^{-iqx}}{2i}$

ضریب بازتاب $R = \frac{\sinh^2 qa}{\frac{4E}{V_0}\left(1-\frac{E}{V_0}\right)}\left[1+\frac{\sinh^2 qa}{\frac{4E}{V_0}\left(1-\frac{E}{V_0}\right)}\right]^{-1}$ $R+T=1$

(2) ضریب عبور $T = \left[1+\frac{\sinh^2 qa}{\frac{4E}{V_0}\left(1-\frac{E}{V_0}\right)}\right]^{-1} \to T=T(E)$, $E<V_0$

$T(E)=\begin{cases} (1) & E>V_0 \\ (2) & E<V_0 \end{cases}$

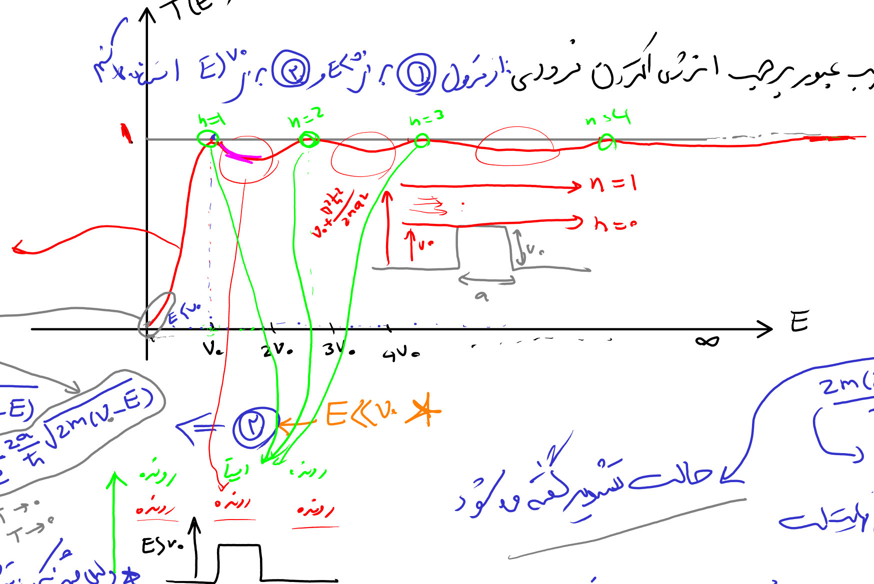
* تونل زنی کوانتومی ← کتاب گاسیوروویچ مطالعه نمایید.

اگر الکترون از داخل سد تونل زنی می‌کند و به ناحیه III می‌رود

* در حد کلاسیک $\hbar \to 0$ به حد کلاسیک نمی‌رسیم $R \to 1$ و $T \to 0$ می‌رسیم.

چگالی جریان در ناحیه وسط ??

ضریب عبور بر حسب انرژی الکترون فرودی از فرمول (1) برای $E>V_0$ و از (2) برای $E<V_0$ استفاده می‌کنیم



(2) $E \to \infty \Rightarrow T \to 1$

(1) or (2) $E \to V_0 \Rightarrow T \to 1$

(1) $\sin qa \to 0 \to \boxed{T \to 1}$

$qa = n\pi \to \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}\,a = n\pi$

$\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}a^2 = n^2\pi^2$

$\boxed{E = V_0 + \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}}$ $n=0$, $n=1,2,3,4,\dots$

حالت تشدید گفته می‌شود

جمع نوسانات انرژی‌ها در حالت جایی بی‌نهایت

دارای انرژی‌ها (هر چند E به اندازه بسیار بزرگ هم باشد) ضریب عبور برابر 1 و بازتاب نداریم

$E \ll V_0$ *

$qa = \sqrt{\frac{2ma^2}{\hbar^2}(V_0-E)}$

* $T \to e^{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)}}$ اثبات کنید

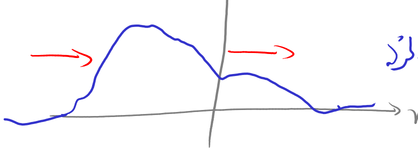
a بزرگ ← $T \to 0$

V_0 بزرگ ← $T \to 0$

* دلیل میرایی: شیب ارتفاع بسیار زیاد ... حالت‌ها

$E \ll V_0$

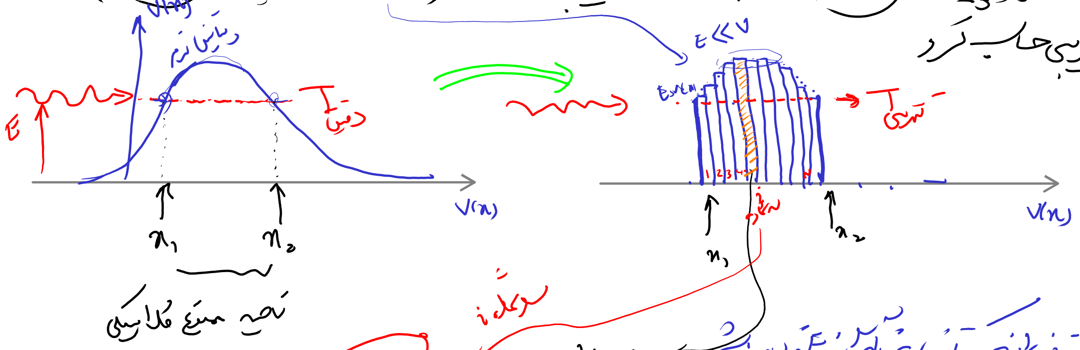
$\frac{e^{x}-e^{-x}}{2}$ sinh

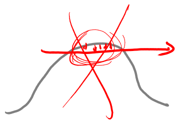


محاسبه T از پتانسیل دلخواه

اثر تونل زنی و تقریب WKB ونتزل - کرامرز - بریلوئن

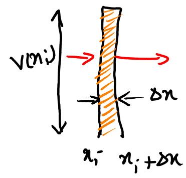
حل معادله با پتانسیل شکل پیچیده، ترابرد است بسیار سخت، با استفاده از تقریب WKB (استفاده از پتانسیل های ساده تر) میتوان تقریب زد و بازتاب و عبور را تقریبی حساب کرد

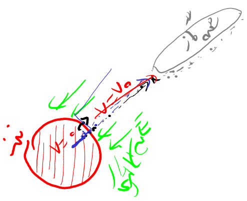




سد نازک

$(\Delta x, V(x_i))$





با فرض اینکه پتانسیل بزرگتر از E در نظر بگیریم

جزء ۱ام

$$T_i \sim e^{-\frac{2\Delta x}{\hbar}\sqrt{2m(V(x_i)-E)}}$$

← احتمال عبور از یکی از این سدها کوچک

← در بازه x_1 تا x_2 تعداد N تا از این سدها داریم $N=\frac{x_2-x_1}{\Delta x}$

← طبق قاعده ضرب احتمالات

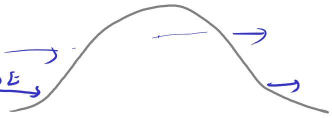
$$T = T_1 \times T_2 \times \cdots \times T_N = \lim_{N\to\infty}\prod_{i=1}^{N} e^{-\frac{2\Delta x_i}{\hbar}\sqrt{2m(V(x_i)-E)}} = e^{\sum_{i=1}^{N}-\frac{2\Delta x}{\hbar}\sqrt{\cdots}}$$

شناختیم

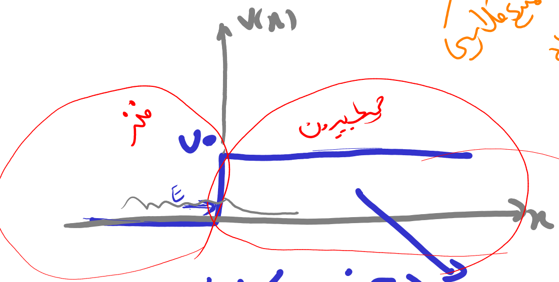
$$T \sim e^{-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m(V(x)-E)}\,dx}$$

ترابرد از ناحیه ممنوع کلاسیکی پتانسیل دلخواه

دقیق E



* پتانسیل $V(x)$ باید هموار و تغییرات آن نسبت به مکان محدود باشد تا این تقریب مناسب باشد. ← خطا در لحظات x_1 و x_2 زیاد است

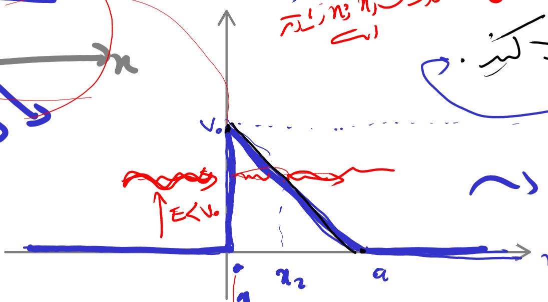


در حضور میدان الکتریکی خارجی

مثال: احتمال گذار از سد زیر را حساب کنید.

$E=\frac{1}{10}V_0$

$V(x) = -Eex$



$V(x)=E$ حل

$V_0 = Eea$

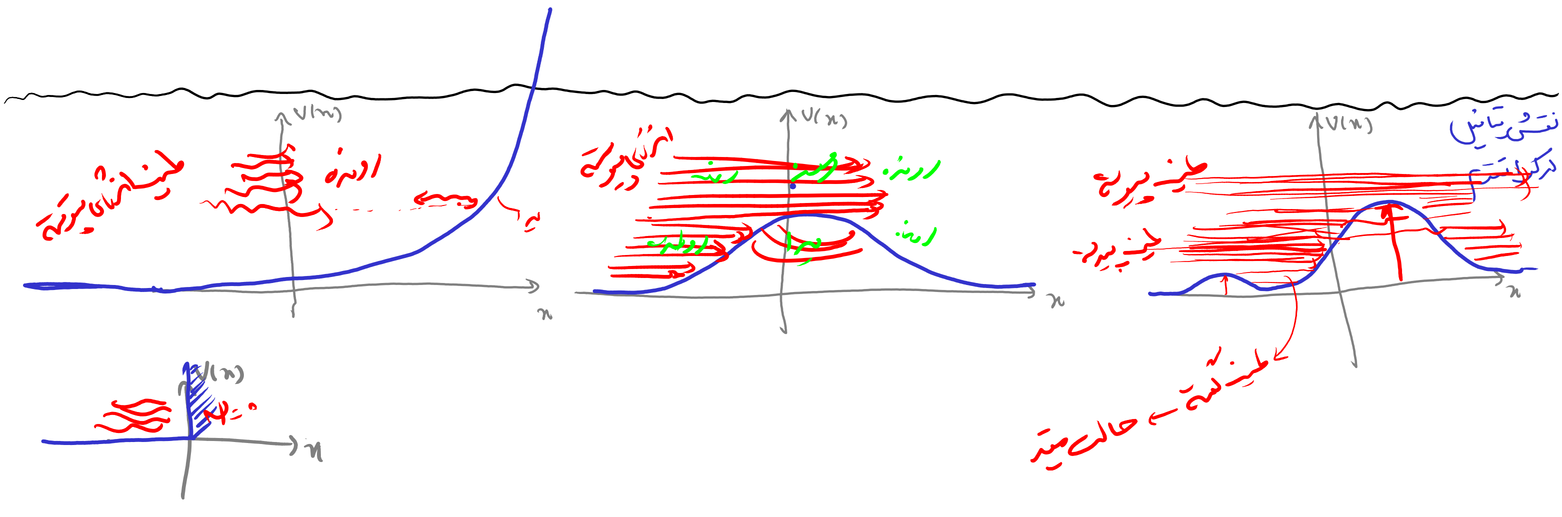
تابع کار فلز

در رفتن

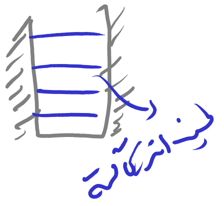
$F=-eE$

پتانسیل $=\int F dx = -eEx$

$$V(x)=\begin{cases} V_0 - Eex & 0<x<a \\ 0 & \text{else} \end{cases}$$



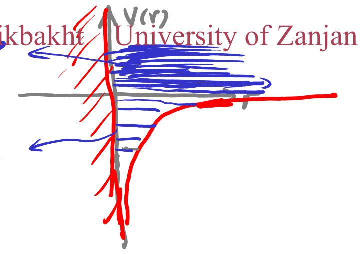
اتم هیدروژن



$V(r) = -\frac{1}{r}$

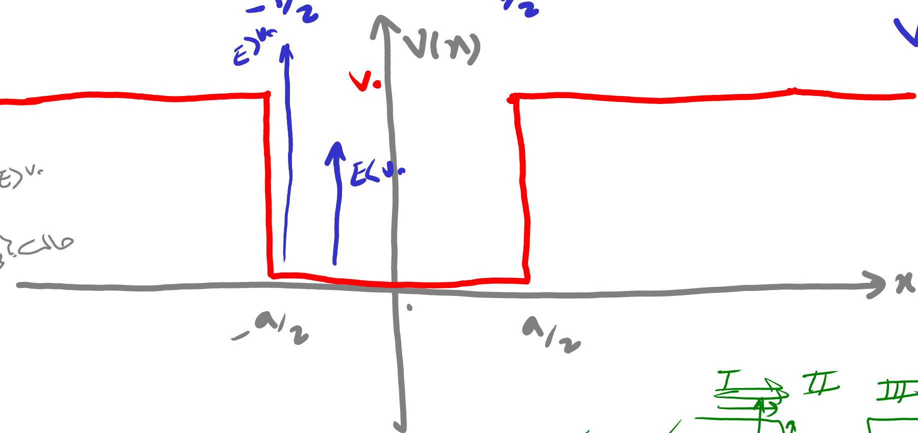
طیف انرژی پیوسته

طیف گسسته انرژی

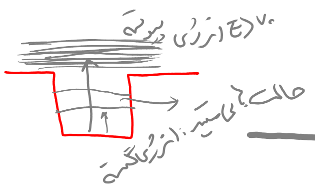


چاه پتانسیل (محدود) ← **متقارن** ≡ $V(-x)=V(x)$ → هامیلتونی با پاریته جابجا می‌شود

تئوری متقارن: ۲



$$V(x)=\begin{cases} V_0 & x<-a/2 \\ 0 & -a/2<x<a/2 \\ V_0 & x>a/2 \end{cases}$$



① $E>V_0$

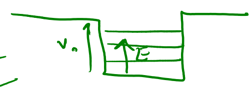
* تراگسیل محاسبه T و R

داشتن تراگسیل (مثل ازبحث قبل راست)
طیف پیوسته است
امواج رونده در سه ناحیه

تمرین محاسبه T و R از این چاه

جلسه بعد آماده داشته باشید
حل را به اشتراک خواهیم گذاشت

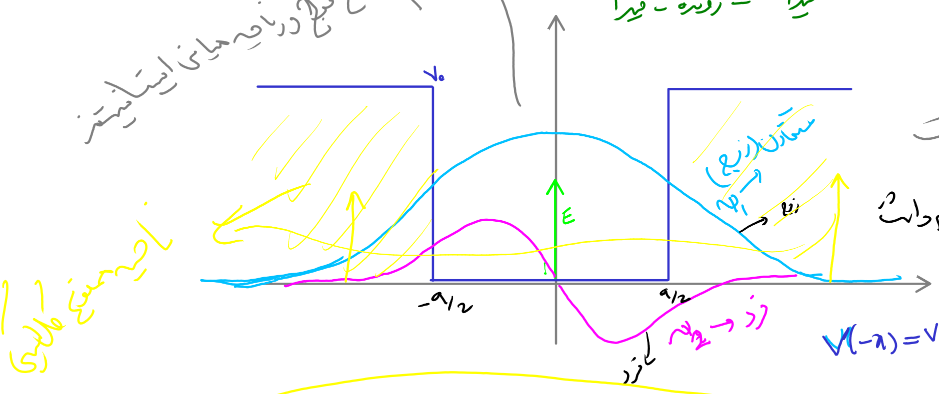
② $E<V_0$



ذره در چاه محدود
طیف انرژی گسسته
میرا – رونده – میرا

حالت مقید ⇐ انرژی گسسته
↓ یافتن توابع موج
و انرژی‌ها مهم است

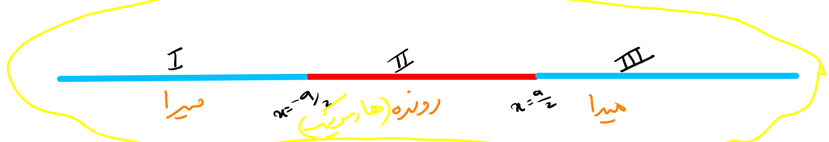
توابع موج در ناحیه‌های ایستا نیستند



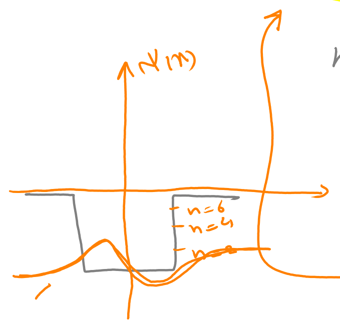
* چنانچه انرژی کمتر از V_0 باشد ← حالت مقید خواهیم داشت
↳ انرژی گسسته خواهد بود

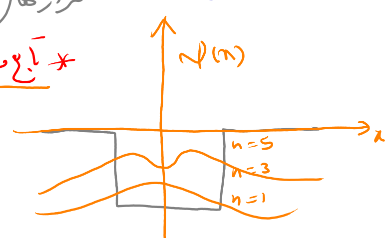
* از آنجا که پتانسیل متقارن انتخاب شده است $V(-x)=V(x)$
→ هامیلتونی با پاریته جابجا می‌شود $[\hat{H},\hat{P}]=0$
→ ترازها یک در میان زوج - فرد هستند
→ حالت پایه زوج است

متقارن



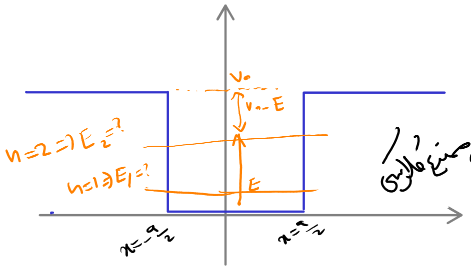
ترازهای زوج $n=2,4,6,\ldots$	ترازهای فرد $n=1,3,5,\ldots$
* تابع موج فرد است $\psi(-x)=-\psi(x)$	* تابع موج متقارن (زوج) است: $\psi(-x)=\psi(x)$





$\lim_{x \to -\infty} \psi(x) = 0$

$\lim_{x \to +\infty} \psi(x) = 0$



جواب های معادله شرودینگر در سه ناحیه

ناحیه ممنوع کلاسیکی

$$I:\ \psi_I(x) = Ae^{qx} + Be^{-qx}$$

$$II:\ \psi_{II}(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx}$$

$$III:\ \psi_{III}(x) = Ee^{qx} + Fe^{-qx}$$

$$q = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

$$K = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$ عدد موج

نکات: در تراز چاه جواب تابع موج ها مرتب باشد آن را به صورت زیر هم نوشت

$$C(\cos kx + i\sin kx) + D(\cos kx - i\sin kx)$$
$$= (C+D)\cos kx + i(C-D)\sin kx$$
$$= M\cos kx + N\sin kx$$

متغیر جدید

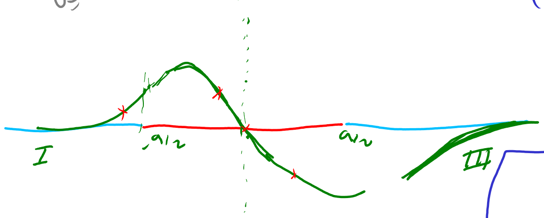
* برای ذره در جعبه یک سیر از این روش و حل نیز به عنوان تمرین

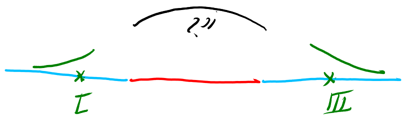
$$\boxed{\psi_{II} = C\cos kx + D\sin kx}$$

← در ناحیه I اگر e^{-qx} در $x \to -\infty$ واگرا شود لذا : $B = 0$

← در ناحیه III اگر e^{qx} در $x \to +\infty$ واگرا شود لذا $E = 0$

$$\psi = \begin{cases} \psi_I(x) = Ae^{qx} \\ \psi_{II}(x) = C\cos kx + D\sin kx \\ \psi_{III}(x) = Fe^{-qx} \end{cases}$$





تراز های فرد

$n = 1, 3, 5, \ldots$

تابع موج بایستی زوج باشد $\psi(-x) = \psi(x)$ ←

$\boxed{F = A}$

در ناحیه میانی فقط $\cos kx$ که زوج است را نگه می داریم $\Leftarrow$ $D = 0$

$$\begin{cases} \psi_I(x) = Ae^{qx} \\ \psi_{II}(x) = C\cos kx \\ \psi_{III}(x) = Ae^{-qx} \end{cases}$$

* 2 مجهول C, A

* مقدار انرژی را هم بایستی بیابیم. $E_1, E_3, E_5, \ldots$

با اعمال این شرایط مرزی خواهیم کرد

از شرایط مرزی پیدا می کنیم

تراز های زوج

$n = 2, 4, 6, \ldots$

تابع موج فرد است $\psi(-x) = -\psi(x)$ ⟶ $F = -A$

در ناحیه میانی فقط $\sin kx$ که فرد است را نگه می داریم $\Longrightarrow C = 0$

$$\psi = \begin{cases} \psi_I(x) = Ae^{qx} \\ \psi_{II}(x) = D\sin kx \\ \psi_{III}(x) = -Ae^{-qx} \end{cases}$$

* 2 مجهول D, A و

* مقدار انرژی را بیابیم $E_2, E_4, E_6, \ldots$

با اعمال این شرایط ←

از شرایط مرزی پیدا می کنیم

تراز های فرد

$$\frac{\psi_I(a/2)}{\psi'_I(a/2)} = \frac{\psi_{II}(-a/2)}{\psi'_{II}(-a/2)}$$

در مرز

$x = -a/2$

$x = a/2$

ما ← تقسیم بر هم ← و معادلات را ساده تر کنیم

اعمال شرایط مرزی:

$n = 2, 4, 6, \ldots$ تراز های زوج

$$\psi_I(-a/2) = \psi_{II}(a/2) \rightsquigarrow Ae^{\frac{qa}{2}} = D\sin(-\tfrac{ka}{2}) \Rightarrow \boxed{Ae^{-\frac{qa}{2}} = -D\sin\tfrac{ka}{2}}\ ①$$

$$\psi_{III}(a/2) = \psi_{II}(a/2) \rightsquigarrow -Ae^{-qa/2} = D\sin\tfrac{ka}{2}$$

معادله جدیدی نیست

$n = 1, 3, 5, \ldots$ تراز های فرد

مرز چپ
$$\psi_I(-\tfrac{a}{2}) = \psi_{II}(-\tfrac{a}{2}) \longrightarrow Ae^{-\frac{qa}{2}} = C\cos(-\tfrac{ka}{2}) \Rightarrow \boxed{Ae^{-\frac{qa}{2}} = C\cos\tfrac{ka}{2}}\ ①$$

مرز راست
$$\psi_{III}(a/2) = \psi_{II}(a/2) \longrightarrow Ae^{-\frac{qa}{2}} = C\cos\tfrac{ka}{2}$$

معادله جدیدی نیست

$\psi_I'(-a/2) = \psi_{II}'(-a/2) \to A q e^{-qa/2} = DK\cos\frac{ka}{2}$ (4)

$\psi_{III}'(a/2) = \psi_{II}'(a/2) \to A q e^{-qa/2} = DK\cos\frac{ka}{2}$

معادله تکراری است

$A = -De^{qa/2}\sin\frac{ka}{2} \leftarrow (1)$

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = -De^{qa/2}\sin\frac{ka}{2}\, e^{qx} \\ \psi_{II}(x) = D\sin kx \\ \psi_{III}(x) = De^{qa/2}\sin\frac{ka}{2}\, e^{-qx} \end{cases}$$

فرد

D را از شرط بهنجارش تابع موج حساب کرد

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n\psi_n^* dx = 1 \to \int_{-\infty}^{-a/2}\psi_I\psi_I^* dx + \int_{-a/2}^{a/2}\psi_{II}\psi_{II}^* dx + \int_{a/2}^{\infty}\psi_{III}\psi_{III}^* dx = 1$$

تمرین: ادامه داده و D را حساب کنید

$\psi_I'(-a/2) = \psi_{II}'(-a/2) \to A q e^{-qa/2} = CK\sin\frac{ka}{2}$ (2)

$\psi_{III}'(a/2) = \psi_{II}'(a/2) \to -A q e^{-qa/2} = -CK\sin\frac{ka}{2}$

معادله جدیدی نیست

$(1) \sim A = Ce^{qa/2}\cos\frac{ka}{2}$

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \psi_I = Ce^{qa/2}\cos\frac{ka}{2}\, e^{qx} \\ \psi_{II} = C\cos kx \\ \psi_{III} = Ce^{qa/2}\cos\frac{ka}{2}\, e^{-qx} \end{cases}$$

زوج

C را نیز می‌توان از شرط بهنجارش تابع موج حساب کرد

تمرین: ادامه داده و C را حساب کنید

$\frac{(2)}{(1)} \to q = -K\cot\frac{ka}{2}$ $\xrightarrow{\times a/2}$ $\frac{qa}{2} = -\frac{ka}{2}\cot\frac{ka}{2}$

مشابه حالت‌های زوج (ترازهای فرد)

$$\sqrt{R^2-\xi^2} = -\xi\cot\xi$$

E را از نقطه تقاطع بدست می‌آوریم ξ های مجاز را با این معادله ... $\xi_2, \xi_4, \xi_6, \ldots ??$

سوال: انرژی‌ها چه می‌شوند؟ $E_1 = ?$ $E_3 = ?$???

$\frac{(2)}{(1)} \to q = K\tan\frac{ka}{2}$ (استفاده از معادلات بالا و تقسیم) $\xrightarrow{\times a/2}$ $\frac{qa}{2} = \frac{ka}{2}\tan\frac{ka}{2}$

$$\begin{cases} \frac{ka}{2} = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\,\frac{a}{2} = \sqrt{\frac{mEa^2}{2\hbar^2}} = \xi \\ \frac{qa}{2} = \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}\,\frac{a}{2} = \sqrt{\frac{m(V_0-E)a^2}{2\hbar^2}} = \sqrt{\frac{mV_0a^2}{2\hbar^2} - \frac{mEa^2}{2\hbar^2}} = \sqrt{R^2-\xi^2} \end{cases}$$

q و k وابسته به E است. با مشخص بودن V_0, a تنها مجهول E است که از این معادله بدست می‌آید.

لذا خواهیم داشت

$$\sqrt{R^2-\xi^2} = \xi\tan\xi$$

که $R = \sqrt{\frac{mV_0a^2}{2\hbar^2}}$ هندسه را دارد

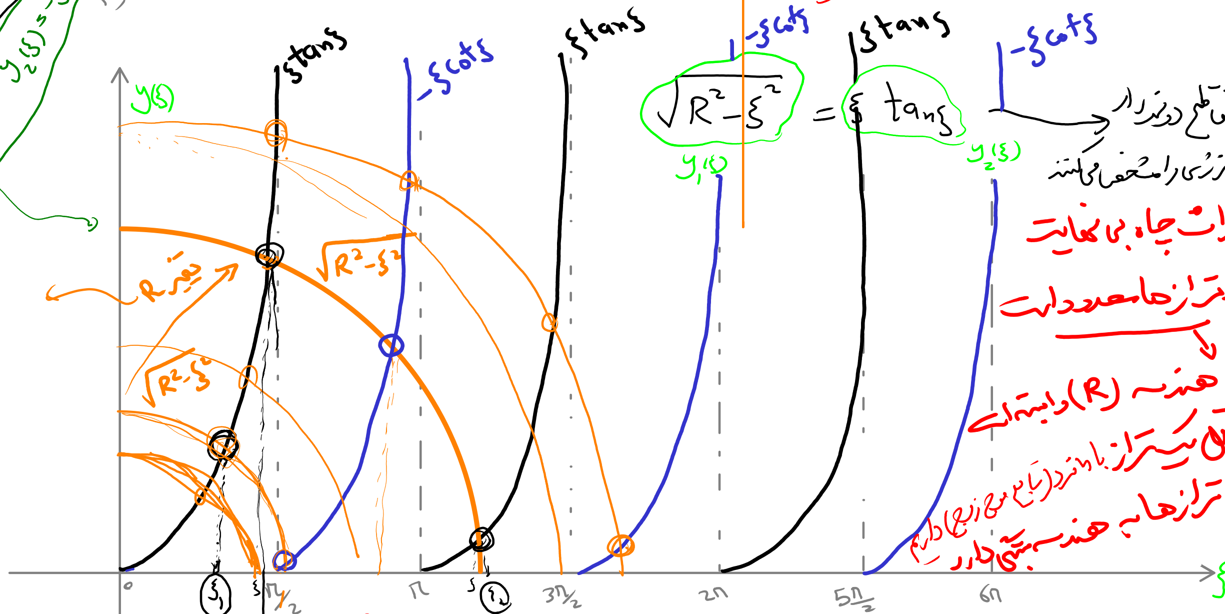
ترازهای انرژی $E_1, E_3, E_5, \ldots$

انرژی‌های مجاز را با استفاده از ξ های ... بدست می‌آوریم

* توجه داریم که R ثابت و انرژی در دل ξ نهفته است

* این رابطه بین انرژی‌ها قید می‌گذارد و مقادیر مجاز انرژی آن‌هایی هستند که در این رابطه صدق می‌کنند ← پاسخ حل تحلیلی برای پیدا کردن انرژی‌ها نیست

از رسم نمودار استفاده می‌کنیم



محل تقاطع دو نمودار ξ ها را که انرژی را مشخص می‌کنند

R به مشخصات هندسی چاه وابسته است

* عرض و عمق چاه $R = \sqrt{\frac{mV_0a^2}{2\hbar^2}}$

a زیاد ⇒ R زیاد

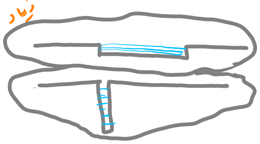
V_0 زیاد ⇒ R زیاد

* برخلاف چاه بی‌نهایت تعداد ترازها محدود است ← به هندسه (R) وابسته است

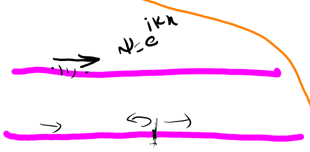
* حداقل یک تراز با انرژی (تابع موج زوج) داریم

* انرژی ترازها به هندسه بستگی دارد

* اگر $R \to 0$ ⇐ تنها یک حالت مقید خواهیم داشت ≡ V_0 خیلی کم یا a خیلی کم ≡



* مثال‌های هیچ تراز زوجی نداشته باشیم

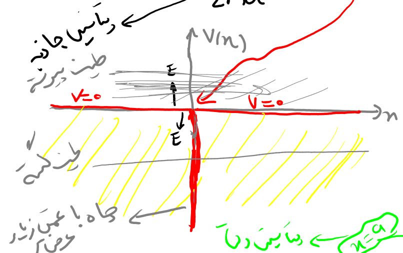


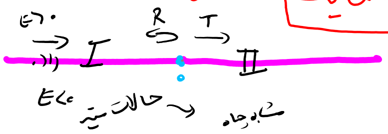
تمرین: برای چاه با عرض a و عمق V_0 کمترین انرژی مجاز چقدر است؟ $E = ?$

تمرین: رابطه‌ای برای a و V_0 پیدا کنید که چاه فقط دو حالت مقید داشته باشد؟

① قدرت پتانسیل

$$V(x) = -\frac{\hbar^2\lambda}{2ma}\delta(x)$$



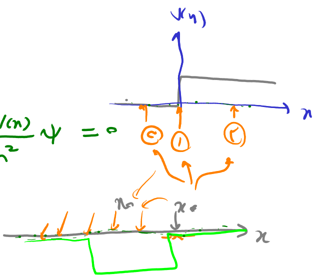


پتانسیل‌های حاوی تابع دلتای دیراک
پیوستگی تابع موج در محل تابع دلتای دیراک داریم
پیوستگی مشتق تابع موج صادق نیست در محل تابع دلتا
در پتانسیل‌های معمول شرط پیوستگی تابع موج و پیوستگی مشتق در مرزها
همه جا برقرار است به‌جز در مرز
پس چه رابطه‌ای استفاده کنیم؟؟
از دیگر:
معادله شرودینگر:

پتانسیل دلتا

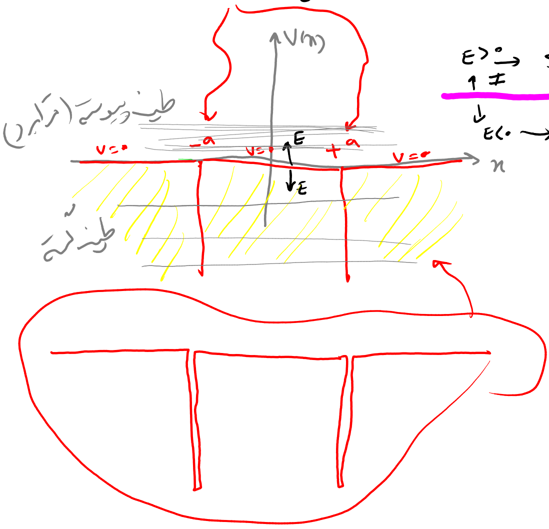
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi$$

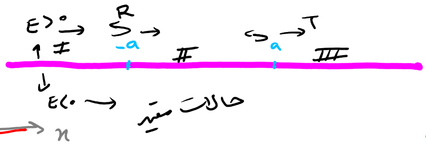
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi - \frac{2mV(x)}{\hbar^2}\psi = 0$$



② پتانسیل دو دلتا $x=a$ $x=-a$

$$V(x) = -\frac{\lambda\hbar^2}{2ma}\left[\delta(x-a) + \delta(x+a)\right]$$





انتگرال‌گیری حول x_0 در دو طرف

$$\int_{x_0^-}^{x_0^+}\frac{d^2\psi}{dx^2}dx + \frac{2mE}{\hbar^2}\int_{x_0^-}^{x_0^+}\psi\, dx - \frac{2m}{\hbar^2}\int_{x_0^-}^{x_0^+}V(x)\psi\, dx = 0$$

$$\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x=x_0^+} - \left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x=x_0^-} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\int_{x_0^-}^{x_0^+}\psi\, dx + \frac{2m}{\hbar^2}\int_{x_0^-}^{x_0^+}V(x)\psi\, dx$$

پیوستگی تابع موج

x_0 نقطه معمولی باشد

اگر $V(x)$ غیر تابع دلتای دیراک باشد این ترم صفر می‌شود

$$\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x=x_0^-} = \left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x=x_0^+}$$ پیوستگی مشتق تابع موج

اگر $V(x_0)$ تابع دلتای دیراک باشد این جمله صفر نمی‌شود ← مشتق تابع موج پیوسته نیست

$$\int_{x=x_0^-}^{x=x_0^+}\delta(x)f(x)dx = f(x_0)$$

$$\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x=x_0^+} - \left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x=x_0^-} = \frac{2m}{\hbar^2}\int_{x_0^-}^{x_0^+}V(x)\psi(x)dx$$

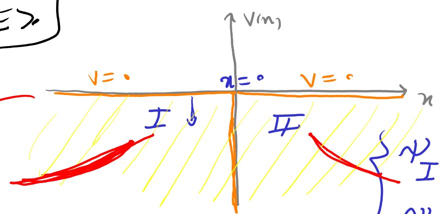
مثال | پتانسیل ساده‌ای به صورت زیر است

$$V(x) = -\frac{\hbar^2\lambda}{2ma^2}\delta(x)$$

برای $E<0$ مسئله را بررسی کنید.

حالات مقید

تمرین $E>0$



$$\begin{cases}\psi_I = Ae^{qx} + \cancel{e^{-qx}} & x<0 \\ \psi_{II} = Be^{-qx} + \cancel{e^{qx}} & x>0\end{cases}$$

تداعی مسئله کلاسیکی:

$$q = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$$

پتانسیل متقارن ← $[H, P] = 0$ جواب‌ها پاریته مشخص دارند زوج یا فرد

پیوستگی تابع موج روی مرز

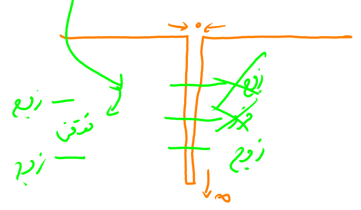
$$\left.\psi_I\right|_{x=0} = \left.\psi_{II}\right|_{x=0} \longrightarrow A = B \Rightarrow \psi(x) = \psi(-x)$$

حالت متقارن تابع موج زوج است

$$\psi = \begin{cases}\psi_I = Ae^{qx} & x<0 \\ \psi_{II} = Ae^{-qx} & x>0\end{cases}$$

تابع موج فرد نداریم

سامانه فقط یک حالت مقید دارد



از آنجاکه در مرز تابع دلتا در پتانسیل است مشتق تابع موج گسسته خواهد بود

$$\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x=0^+} - \left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x=0^-} = \frac{2m}{\hbar^2}\int_{x=0^-}^{x=0^+}\Big(\underbrace{-\frac{\hbar^2\lambda}{2ma^2}\delta(x)}_{V(x)}\Big)\psi(x)\,dx$$

مشتق ψ_I و ψ_{II} چون در $x=0$ پیوسته است

$$\left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=0} - \left.\frac{d\psi_I}{dx}\right|_{x=0} = -\frac{\lambda}{a^2}\int_{0^-}^{0^+}\delta(x)\,\psi(x)\,dx$$

$$-Aq - Aq = -\frac{\lambda}{a^2}\psi(0)$$

$$\cancel{-}2\cancel{A}q = \cancel{-}\frac{\lambda}{a^2}\cancel{A} \Rightarrow q = \frac{\lambda}{2a^2}$$

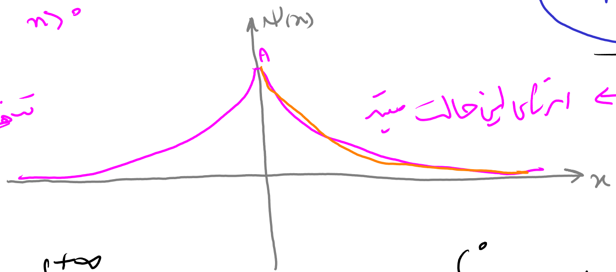
$$\sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} = \frac{\lambda}{2a^2}$$

$$|E| = \frac{\lambda^2\hbar^2}{8ma^4}$$

انرژی مجاز

انرژی این حالت مقید

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{qx} & x<0 \\ Ae^{-qx} & x>0 \end{cases}$$



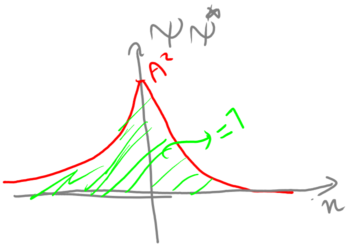
تنها حالت مقید در این سیستم

$$q = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$$

$$q = \frac{\lambda}{2a^2}$$

A از نرمالیزاسیون تابع موج

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi\psi^*\,dx = 1 \longrightarrow \int_{-\infty}^{0}\psi_I\psi_I^*\,dx + \int_{0}^{+\infty}\psi_{II}\psi_{II}^*\,dx = 1$$



$$\int_{-\infty}^{0}|A|^2 e^{2qx}\,dx + \int_{0}^{\infty}|A|^2 e^{-2qx}\,dx = 1$$

$$|A|^2\frac{1}{2q}e^{2qx}\Big]_{-\infty}^{0} + |A|^2\frac{1}{-2q}e^{-2qx}\Big]_{0}^{\infty} = 1$$

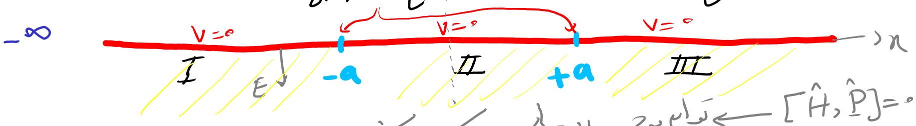
$$|A|^2\left(\frac{1}{2q} - 0 + 0 - \frac{1}{-2q}\right) = 1$$

$$\frac{|A|^2}{q} = 1 \longrightarrow |A|^2 = q \longrightarrow A = \sqrt{q}$$

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{q}\,e^{qx} & x<0 \\ \sqrt{q}\,e^{-qx} & x>0 \end{cases}$$

مثال:

$$V(x) = -\frac{\lambda\hbar^2}{2ma^2}\left[\delta(x-a)+\delta(x+a)\right]$$



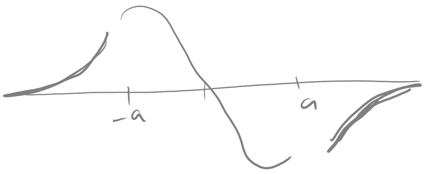
$E<0$ → پتانسیل متقارن ← $[\hat H,\hat P]=0$ ← توابع موج حالت‌های مقید یک ذره زوج و فرد خواهند بود

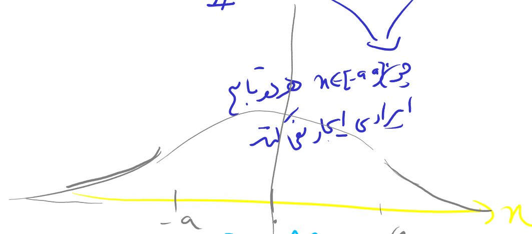
جواب معادله شرودینگر در هر ناحیه مجزا: e^{qx} e^{-qx}

$$q=\sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$$

$$\psi=\begin{cases}\psi_I = Ae^{qx}\\ \psi_{II} = C\cosh qx + D\sinh qx\\ \psi_{III} = Be^{-qx}\end{cases} \Longleftrightarrow \psi_{II} = Ce^{qx}+De^{-qx}$$

چون $x\in[-a,a]$ هر دو تابع ابزاری کارمان نیست





$[\hat H,\hat P]=0$ ← جواب‌ها زوج و فرد هستند

$$\cosh x = \frac{e^x+e^{-x}}{2}, \qquad \frac{e^x-e^{-x}}{2}=\sinh x$$

$B=-A$, $C=0$ ← ترازها زوج / جواب فرد

ترازها فرد / جواب زوج → $A=B$, $D=0$

$$\psi_n(x)=\begin{cases}Ae^{qx} & x<-a\\ D\sinh qx & -a<x<a\\ -Ae^{-qx} & x>a\end{cases}$$

n زوج $2,4,6,\dots$

$$\psi_n(x)=\begin{cases}Ae^{qx} & x<-a\\ C\cosh qx & -a<x<a\\ Ae^{-qx} & x>a\end{cases}$$

n فرد $=1,3,5,\dots$

شرایط مرزی

$$\psi_I(x=-a)=\psi_{II}(x=-a) \rightsquigarrow Ae^{-qa}=-D\sinh qa$$

$$\psi_{III}(x=a)=\psi_{II}(x=+a) \rightsquigarrow Ae^{-qa}=D\sinh qa$$

جبر ریت

شرایط مرزی

$$\psi_I(x=-a)=\psi_{II}(x=-a) \rightsquigarrow Ae^{-qa}=C\cosh qa$$

$$\psi_{II}(x=a)=\psi_{III}(x=a) \rightsquigarrow Ae^{-qa}=C\cosh qa$$

جبر ریت

$$\left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=-a}-\left.\frac{d\psi_I}{dx}\right|_{x=-a}=\frac{2m}{\hbar^2}\int_{x=-a^-}^{x=-a^+}\left(-\frac{\hbar^2\lambda}{2ma^2}\right)\left[\delta(x-a)+\delta(x+a)\right]\psi(x)\,dx$$

صفر

$$-cq\sinh qa - Aqe^{-qa}=-\frac{\lambda}{a^2}\psi(-a)$$

$$\Rightarrow cq\sinh qa - Aqe^{-qa}=-\frac{\lambda}{a^2}Ae^{-qa}$$

گسستگی مشتق تابع موج در $x=-a$

$$Dq\cosh qa - Aqe^{-qa}=-\frac{\lambda}{a^2}\psi(-a)$$

$$Dq\cosh qa - Aqe^{-qa}=-\frac{\lambda}{a^2}Ae^{-qa}$$

رابطه مشابه خواهیم داشت برای گسستگی در $x=+a$

$$\left.\frac{d\psi_{III}}{dx}\right|_{x=a}-\left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=a}=\frac{2m}{\hbar^2}\int_{x=a^-}^{x=a^+}\left(\frac{-\hbar^2\lambda}{2ma^2}\right)\left[\delta(x-a)+\delta(x+a)\right]\psi\,dx$$

$$-Aqe^{-qa}-cq\sinh qa=-\frac{\lambda}{a^2}\psi(a)$$

$$-Aqe^{-qa}-cq\sinh qa=-\frac{\lambda}{a^2}Ae^{-qa}$$

جبر ریت

q ← کمترین تراز است

+۰/۷۵