تعبیر احتمالاتی

می‌خواهیم تعبیری برای $\psi(x,t)$ بیابیم.

- $\psi(x,t)$ یک تابع مختلط است

- $|\psi(x,t)|$ درجایی که باید ذره باشد بزرگ و در جاهای دیگر کوچک است.

- تابع $\psi(x,t)$ ویژگی پهن شدگی دارد که در فصل قبل نشان داده شده است.

البته ما می‌دانیم که خود ذره نباید پهن شود زیرا ما هرگز الکترون پهن شده یا کش آمده نداریم.

در سال ۱۹۲۵، ماکس بورن پراکندگی باریکه الکترونی را در برخورد با هدف مطالعه نمود و به تعبیر تابع موج پرداخت. بنابر نتایج ماکس بورن کمیت

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

احتمال آن است که ذره‌ای که با تابع موج $\psi(x,t)$ توصیف می‌شود در زمان t در بازه مکانی dx حول x یافت شود.

- $P(x,t) = |\psi(x,t)|^2$ حقیقی است.

- درجایی که باید ذره وجود داشته باشد، $P(x,t) = |\psi(x,t)|^2$ بزرگ است.

- $P(x,t)$ دارای ویژگی پهن شدگی است. ولی پهن شدگی آن به معنای پهن شدن ذره نیست بلکه بیانگر این موضوع است که با گذشت زمان احتمال یافتن ذره در جایی که در $t=0$ قرار داشته است کمتر می‌شود.

اگر بنا باشد $P(x,t)=|\psi(x,t)|^2$ بیانگری چگالی احتمال باشد و یا $P(x,t)\,dx$ بیانگر احتمال باشد، با توجه به مفاهیم مربوط به احتمال باید:

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

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

عبارت فوق به این معناست که مجموع احتمال حضور ذره در xهای مختلف از $-\infty$ تا $+\infty$ باید برابر با ٪۱۰۰ یا یک شود. زیرا به هر حال ذره در یک جایی بین $-\infty$ تا $+\infty$ باید قرار داشته باشد.

توجه: به یاد دارید که گفتیم معادله دیفرانسیلی شرودینگر یک معادله خطی است. اگر ψ_1 و ψ_2 جواب های معادله شرودینگر باشند، ترکیب خطی جوابها نیز جواب محسوب می شود. یعنی $\alpha\psi_1$ و $\beta\psi_2$ و $\alpha\psi_1+\beta\psi_2$ نیز جواب خواهند بود.

شرط انتگرال پذیر مجذوری بودن برای توابع موج لازم است:

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

این شرط تضمین می کند که برای هر $\psi(x,t)$ به دست آمده، بتوان آن را با یک ضریب مناسب به گونه ای ضرب کرد که همچنان جواب معادله شرودینگر باشد و همچنین مجموع احتمالات را برابر با یک به دست دهد.

اهمیت فازها

تا اینجا می دانیم که $|\psi|^2$ دارای معنی فیزیکی است و احتمال حضور ذره در زمان t در مکان x را نشان می دهد.

سؤال: می دانیم که ψ یک تابع مختلط می تواند باشد مثل $\psi = Re^{i\theta}$.

بدیهی است که $|\psi|^2 = RR^* e^{i\theta} e^{-i\theta} = |R|^2$ می باشد. یعنی اثری از فاز θ در $|\psi|^2$ دیده نمی شود. آیا فاز θ بی اهمیت است؟

جواب: دو تابع موج $\psi_1 = R_1 e^{i\theta_1}$ و $\psi_2 = R_2 e^{i\theta_2}$ را درنظر بگیرید.

بدیهی است که ترکیب خطی $\psi = \psi_1 + \psi_2$ نیز جواب می باشد.

$$\psi = R_1 e^{i\theta_1} + R_2 e^{i\theta_2}$$

$$|\psi|^2 = \left(R_1 e^{i\theta_1} + R_2 e^{i\theta_2}\right)\left(R_1^* e^{-i\theta_1} + R_2^* e^{-i\theta_2}\right) =$$

$$= R_1 R_1^* + R_1 R_2^* e^{i(\theta_1-\theta_2)} + R_2 R_1^* e^{i(\theta_2-\theta_1)} + R_2 R_2^*$$

R_1 و R_2 را حقیقی درنظر می گیریم و مختلط بودن ψ_1 و ψ_2 به عوامل نمایی $e^{i\theta_1}$ و $e^{i\theta_2}$ نسبت داده شده است. $R_1^* = R_1$ و $R_2^* = R_2$

$$|\psi|^2 = R_1^2 + R_2^2 + R_1 R_2 \left[e^{i(\theta_1-\theta_2)} + e^{-i(\theta_1-\theta_2)} \right] =$$

$$= R_1^2 + R_2^2 + R_1 R_2 \left[\cos(\theta_1-\theta_2) + i\sin(\theta_1-\theta_2) + \cos(\theta_1-\theta_2) - i\sin(\theta_1-\theta_2) \right]$$

$$= R_1^2 + R_2^2 + 2R_1R_2\cos(\theta_1-\theta_2) \implies$$

$$|\psi|^2 = \underbrace{|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2}_{\text{پیش بینی کلاسیک}} + \underbrace{2R_1R_2\cos(\theta_1-\theta_2)}_{\text{جمله فاز نسبی}}$$

که ایجاد کننده تداخل است

و به دلیل خطی بودن معادله شرودینگر اتفاق می‌افتد.

* در نتیجه فازها در الگوی طرح تداخلی اهمیت خود را نشان می‌دهند.

جریان احتمال

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

مختلط کردن

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

پتانسیل حقیقی در نظر گرفته می‌شود.

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x,t) = \frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 = \frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) = \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi + \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\left[\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\psi - V\psi^*\psi + \frac{-\hbar^2}{2m}\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\psi^*\psi\right]$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\left[\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\psi - \frac{\hbar^2}{2m}\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right]$$

$$= -\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi\right)\right]$$

حال تعریف زیر را در نظر می‌گیریم

جریان احتمال:
$$J(x,t) = \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^{*}\frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^{*}}{\partial x}\right]$$

$$\Rightarrow \quad \frac{\partial P(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} J(x,t) = 0$$

طرفین رابطه فوق را در dx ضرب می‌کنیم و انتگرال‌گیری را انجام می‌دهیم

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

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

حدود انتگرال‌گیری محدود

J از حاصلضرب های ψ و ψ^{*} تشکیل شده است. توابع موج انتگرال‌پذیر مجذوری اند

توابع در بی‌نهایت ها به سمت صفر میل می‌کنند در غیر اینصورت انتگرال‌پذیر مجذوری نمی‌شوند

طرف راست $= 0$.

$$\frac{\partial}{\partial t}\int dx\, P(x,t) = 0$$

$$\int dx\, P(x,t) = \text{مقدار ثابت} \quad (1)$$

می‌دانیم $P = \psi^{*}\psi$ ، می‌توانیم با ضرب کردن ψ در یک ضریب مناسب در رابطه فوق مقدار ثابت را یک به دست آوریم.

$$\int dx\, P(x,t) = \int dx\, |\psi(x,t)|^{2} = 1 \quad (2)$$

برای آنکه از رابطه ① به رابطه ② برسیم ، تابع موج Ψ را در یک عامل مناسب ضرب می‌کنیم . این عامل را عامل بهنجارش یا ضریب بهنجارش گویند .

قانون پایستگی
$$\frac{\partial}{\partial t}\underbrace{P(x,t)}_{\text{چگالی احتمال}}+\frac{\partial}{\partial x}\underbrace{J(x,t)}_{\text{شار (جریان احتمال)}}=0$$

هر تغییری در چگالی احتمال در ناحیه‌ای حول x با تغییرات شار خالص به درون این ناحیه جبران می‌شود .

* معادله فوق حتماً شما را به یاد معادله پایستگی در سیالات و یا الکترومغناطیس می‌اندازد

توضیح :

فرض کنید از حل معادله $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+V\Psi$ به جواب تابع موج Ψ دست یافته‌اید

به طوری که برای این Ψ به دست آمده
$$\int_{-\infty}^{\infty}P(x,t)\,dx\overset{!}{=}3$$
$$\int_{-\infty}^{\infty}P(x,t)\,dx=\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\Psi\,dx\overset{!}{=}3$$

اگر بخواهیم مجموع احتمالات را برابر با یک به دست آوریم ، یعنی ① $\int P(x,t)\,dx=1$ آنگاه :

می‌توان Ψ را در عامل $\sqrt{3}$ ضرب کرد :
$$\Psi\longrightarrow\Psi'=(\sqrt{3})^{-1}\Psi$$
$$\int P\,dx=\int_{-\infty}^{\infty}\Psi'\Psi\,dx=(\sqrt{3}\sqrt{3})^{-1}\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}\Psi\Psi\,dx}_{=3}=\frac{1}{3}\times3=1$$

$\Psi'=\frac{1}{\sqrt{3}}\Psi\longrightarrow$ عامل $\frac{1}{\sqrt{3}}$ را عامل بهنجارش گویند

حال می توانیم معادله شرودینگر را به ۳ بعد تعمیم دهیم

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

یا

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

قانون پایستگی در ۳ بعد : $\frac{\partial}{\partial t}P(\vec{r},t)+\nabla\cdot J(\vec{r},t)=0$

$$P(\vec{r},t)=|\psi(\vec{r},t)|^2=\psi^*(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)$$

جریان احتمال در ۳ بعد عبارت است از :

$$J(\vec{r},t)=\frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^*(\vec{r},t)\nabla\psi(\vec{r},t)-\nabla\psi^*(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)\right]$$

آشکار است که تمامی مباحث گفته شده قابل تعمیم به ۳ بعد است.

در مطالعه سیستم های فیزیکی ، همیشه با مسائل یک بعدی سروکار نداریم.

بنابراین نوشتن روابط کوانتومی در ۳ بعد ضروری و مهم می باشد.