معادله شرودینگر وابسته به زمان را به یاد دارید:

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

معادله فوق یک معادله خطی است. اگر چند جواب ψ_1 و ψ_2 و ... برای معادله فوق به دست آید، ترکیب خطی جوابها خود یک جواب خواهد بود.

$$\psi(x,t) = T(t)\,u(x) \quad \begin{cases} T(t) = A e^{-iEt/\hbar} \\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2 u_E(x)}{\partial x^2} + V(x)\,u_E(x) = E\,u_E(x) \xrightarrow{\text{حل}} u_E(x) \end{cases}$$

اگر معادله شرودینگر تعدادی جواب گسسته و جواب پیوسته داشته باشد، کلی ترین جواب به صورت زیر نوشته می‌شود:

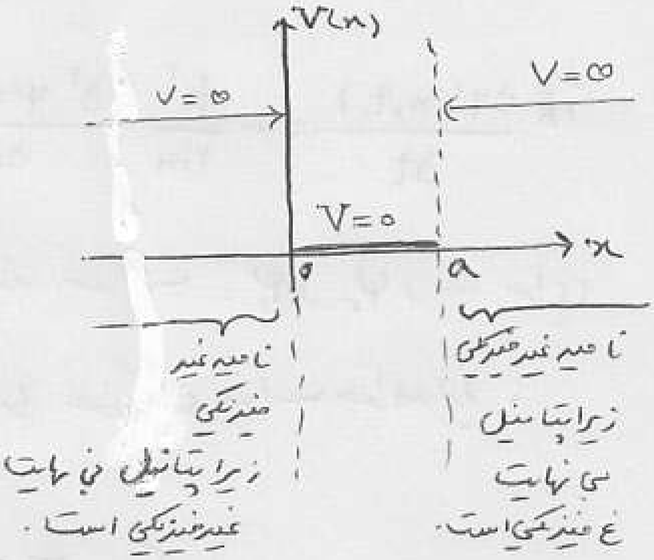
$$\underbrace{\underbrace{\psi(x,t) = \sum_n C_n\, u_n(x)\, e^{\frac{-iE_n t}{\hbar}}}_{\text{ترکیب خطی از جوابهای گسسته}} + \underbrace{\int dE\, C(E)\, u_E(x)\, e^{\frac{-iEt}{\hbar}}}_{\text{ترکیب خطی از جوابهای پیوسته}}}_{\text{ترکیب خطی از همه جوابهای گسسته و پیوسته}}$$

$u_n(x)$، ویژه‌توابع مربوط به ویژه مقادیر گسسته E_n می‌باشد.

$u_E(x)$، ویژه‌توابع مربوط به ویژه مقادیر پیوسته E می‌باشد.

مسأله ویژه‌مقداری برای ذره در جعبه

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x<0 \\ 0 & 0<x<a \\ \infty & a<x \end{cases}$$



از آنجا که ذره نمی‌تواند در نواحی غیرفیزیکی با پتانسیل بی نهایت باشد، به این پتانسیل عنوان جعبه اطلاق می‌شود.

یعنی ذره فقط در ناحیه $0<x<a$ می‌تواند وجود داشته باشد. یعنی یک جعبه به طول a وجود دارد که ذره می‌تواند در آن حضور داشته باشد و در بیرون آن نمی‌تواند باشد.

نکته: احتمال حضور ذره در $x<0$ و $x>a$ باید صفر باشد. با توجه به

$$P(x) = |u(x)|^2$$

می‌توانیم نتیجه بگیریم که تابع موج در $x<0$ و $x>a$ باید صفر باشد.

for $x<0 \Longrightarrow u(x)=0$

for $x>a \Longrightarrow u(x)=0$

اما برای ناحیه $0<x<a$، باید به دنبال یافتن تابع موج باشیم.

$0<x<a \longrightarrow V=0 \longrightarrow$ معادله شرودینگر : $\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}u(x)+0=E\,u(x)$

حالت $E>0$ را در نظر می‌گیریم.

از آنجا که جداسازی متغیرها انجام شده و تابع u فقط به x وابسته است. می‌توانیم مشتق جزئی را به صورت مشتق کامل بنویسیم. پس از مرتب سازی می‌نویسیم:

$$\Longrightarrow \frac{d^2u(x)}{dx^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}u(x)=0$$

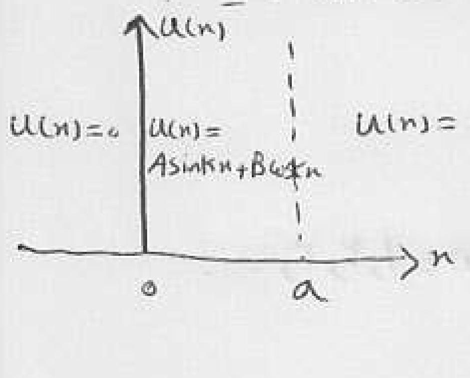
از آنجا که $m>0$ ، $E>0$ و $\hbar^2>0$ $\Longleftarrow$ تعریف می‌کنیم $K^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$

$$\Longrightarrow \frac{d^2u(x)}{dx^2}+K^2u(x)=0 \longrightarrow$$ جواب‌های ممکن $\{\sin kx \text{ و } \cos kx\}$

از آنجا که معادله شرودینگر خطی است، ترکیب خطی جواب‌های ممکن نیز جواب خواهد بود.

$$u(x)=A\sin kx+B\cos kx$$

انتظار داریم که تابع موج به عنوان دامنه احتمال پیوسته باشد. زیرا احتمال حضور ذره نمی‌تواند گم بشود. احتمال حضور ذره می‌تواند صفر باشد ولی نباید گم شود.



یعنی ما انتظار داریم که تابع موج پیوسته باشد.

برای پیوسته بودن تابع موج در $x=0$

مرز $x=0 \longrightarrow \underbrace{0}_{\text{تابع موج در سمت چپ مرز } x=0} = \underbrace{A\sin k(0)+B\cos(k0)}_{\text{تابع موج در سمت راست مرز } x=0} \Longrightarrow$

$$\Rightarrow \quad 0 = 0 + B \quad \Longrightarrow \quad B \overset{\text{باید}}{=} 0$$

$$\Longrightarrow u(x) = A\sin Kx + 0$$

$$u(x) = A\sin Kx$$

همچنین در مرز $x=a$ نیز باید پیوستگی تابع موج را ایجاد کنیم.

$$\underbrace{0}_{\substack{\text{تابع موج در سمت راست} \\ \text{مرز } x=a}} = \underbrace{A\sin Ka}_{\substack{\text{تابع موج در سمت چپ} \\ \text{مرز } x=a}} \Longrightarrow \sin Ka \overset{\text{باید}}{=} 0$$

در مرز $x=a \longrightarrow$

$$0 = \sin(n\pi) = \sin Ka \Longrightarrow K = \frac{n\pi}{a}$$

$$n = 1, 2, 3, \ldots$$

به یاد داریم $K^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2} \longrightarrow E = \dfrac{\hbar^2 K^2}{2m} = \dfrac{\hbar^2}{2m}\left(\dfrac{n\pi}{a}\right)^2$

$$E = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

ویژه مقادیر انرژی به دست آمد. $E_n = \dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \quad , \quad n = 1, 2, 3, \ldots$

حال باید ضریب A را به دست آوریم. می دانیم که مجموع احتمال حضور ذره در فاصله $x=-\infty$ تا $x=+\infty$ باید برابر با یک باشد.

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} |u(x)|^2 \overset{\text{باید}}{=} 1$$ (مجموع احتمالات یک است)

$$\int_{-\infty}^{0} \underbrace{|u(x)|^2}_{0} dx + \int_{0}^{a} |u(x)|^2 dx + \int_{a}^{\infty} \underbrace{|u(x)|^2}_{0} dx \overset{\text{باید}}{=} 1$$

$$0 + \int_{0}^{a} |A|^2 \sin^2 kx \, dx + 0 \overset{\text{باید}}{=} 1$$

$$|A|^2 \int_{0}^{a} \frac{1}{2}\left[1 - \cos 2kx\right] dx \overset{\text{باید}}{=} 1$$

$$|A|^2 \frac{1}{2} \left[x - \frac{1}{2k} \sin 2kx\right]_{0}^{a} \overset{\text{باید}}{=} 1$$

$$|A|^2 \frac{1}{2}\left[(a-0) - \frac{1}{2k}\left(\underbrace{\sin \frac{2n\pi}{a} a}_{0} - \underbrace{\sin \frac{2n\pi}{a}(0)}_{0}\right)\right] = 1$$

$$|A|^2 \frac{a}{2} = 1 \longrightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$ ضریب A بهنجارش است

$$\Longrightarrow \boxed{u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \quad , \quad E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad , \quad n = 1, 2, 3, \dots}$$

ویژه مقادیر انرژی

ویژه توابع انرژی

برای ذره در جعبه، با داشتن پتانسیل، توانستیم ویژه توابع و ویژه مقادیر مربوط به ذره را بیابیم.

حال باید ویژگی های جواب را بیشتر مطالعه کنیم.

سوال: آیا ویژه توابع ذره در جعبه متعامدند؟

بی‌نهایت جواب برای ذره در جعبه ممکن است. به ازای هر n معین، یک ویژه تابع $u_n(x)$ وجود دارد.

$$n=1 \longrightarrow u_1(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}$$

$$n=2 \longrightarrow u_2(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{2\pi x}{a}$$

$$\vdots$$

$$u_n(x) \longrightarrow u_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}$$

$$\int dx\, u_n^*(x)\, u_m(x) = \int dx\, \frac{2}{a}\sin\frac{n\pi x}{a}\sin\frac{m\pi x}{a} =$$

$$= \frac{2}{a}\int dx\, \frac{1}{2}\left[\cos\frac{(n-m)\pi x}{a} - \cos\frac{(n+m)\pi x}{a}\right] =$$

در خط آخر از رابطه $\sin\alpha\sin\beta = \frac{1}{2}\left[\cos(\alpha-\beta)-\cos(\alpha+\beta)\right]$ استفاده شده است.

for $n\neq m$

$$= \frac{1}{a}\left[\frac{a}{(n-m)\pi}\sin\frac{(n-m)\pi x}{a} - \frac{a}{(n+m)\pi}\sin\frac{(n+m)\pi x}{a}\right]_0^a$$

$$=0$$

for $n=m$: $\cos(0)=1$

$$= \frac{1}{a}\int_0^a dx\left[1-\cos\frac{2n\pi x}{a}\right] = \frac{1}{a}\left[x - \underbrace{\frac{a}{2n\pi}\sin\frac{2n\pi x}{a}}_{0}\right]_0^a$$

$$=1=\delta_{mn}$$

$$\Longrightarrow \int u_m^*(x)\, u_n(x)\, dx = \begin{cases} 0 & (m \neq n) \\ 1 & (m = n) \end{cases}$$

$$\boxed{\int u_m^*(x)\, u_n(x)\, dx = \delta_{mn}}$$

رابطه تعامد بین ویژه توابع ذره آزاد