ادامه مسأله ذره در جعبه

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x<0 \\ 0 & 0<x<a \\ \infty & a<x \end{cases} \longrightarrow$$ در ناحیه $x<0$ و $x>a$ باید

احتمال حضور ذره صفر باشد.

در نتیجه در این نواحی $u(x)=0$ جواب می باشد. اما در ناحیه $0<x<a$ ، با معادله موج

شرودینگر مستقل از زمان برای $V=0$ حل شده است و به طور خلاصه می توان

جوابها را اینچنین بازنویسی کرد:

$$u(x) = \begin{cases} x<0 \;, & u(x)=0 \\ 0<x<a \;, & u(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a} \;,\; E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \;,\; n=1,2,3,\ldots \\ a<x \;, & u(x)=0 \end{cases}$$

ویژگی های جواب ذره در جعبه

الف) شرط راست هنجاری (تعامد) برقرار است: $\int dx\, u_n^*(x)\, u_m(x) = \delta_{mn}$

ب) کمترین مقدار n برابر با یک است. در نتیجه کمترین مقدار انرژی برابر است با

$$n=1 \longrightarrow E_1 = E_{\text{پایه}} = \frac{1\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \neq 0$$ نتیجه کوانتومی

دیده می شود که انرژی حالت پایه غیر صفر است . غیر صفر بودن انرژی پایه نتیجه مکانیک کوانتومی است. در دیدگاه کلاسیکی، کمترین انرژی مربوط به ذره ساکن است ، در نتیجه

$E_{\text{پایه کلاسیکی}} = \frac{p^2}{2m} + V = 0+0=0$ می شود.

ج) $\langle p\rangle = 0$: در مسأله ذره در جعبه

$$\langle p\rangle = \int dx\, u_n^*(x)\, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\, u_n(x) \Longrightarrow \langle p\rangle = \int dx\, u_n(x)\, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\, u_n(x)$$

در رابطه اخیر از حقیقی بودن $u_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}$ و $u_n^*(x)=u_n(x)$ استفاده شده است.

$$\langle p\rangle = \int dx\, \frac{\hbar}{i}\, \frac{1}{2}\, \frac{\partial}{\partial x}\left[u^2(x)\right] = \frac{\hbar}{2i}\int dx\, \frac{d}{dx}\left[u(x)\right]^2 =$$

$$= \frac{\hbar}{2i}\left[u^2(x)\right]_0^a = \frac{\hbar}{2i}\left(u^2(a) - u^2(0)\right) = 0$$

د) $\langle p^2\rangle = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{a^2}$: در مسأله ذره در جعبه

$$\langle p^2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, u_n^*(x)\, p^2\, u_n(x) = \int_0^a dx \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}$$

$$= -\hbar^2\frac{2}{a}\int_0^a dx\, \sin\frac{n\pi x}{a}\, \frac{\partial^2}{\partial x^2}\sin\frac{n\pi x}{a} =$$

$$= -\frac{2\hbar^2}{a}\int_0^a dx\, \sin\frac{n\pi x}{a}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2\left(-\sin\frac{n\pi x}{a}\right) = \frac{2\hbar^2 n^2\pi^2}{a^3}\int_0^a dx\, \sin^2\frac{n\pi x}{a} =$$

$$= \frac{2n^2\pi^2\hbar^2}{2a^3}\int dx\left[1-\cos\frac{2n\pi x}{a}\right] = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{a^3}\left[x - \frac{a}{2n\pi}\sin\frac{2n\pi x}{a}\right]_0^a$$

$$\langle p^2\rangle = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{a^2} = 2mE_n$$

با توجه به آنکه داخل جعبه $V=0$ است، مقدار انرژی $E=\frac{p^2}{2m}$ می‌شود. با توجه به $E=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ واضح است به $p^2=2mE$ داده می‌شود.

هـ)

مقدار چشمداشتی انرژی جنبشی $= \langle K \rangle = \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \frac{1}{2m}\langle p^2 \rangle =$

$$= \frac{-\hbar^2}{2m}\int dx\, u_n^*(x) \frac{d^2}{dx^2} u_n(x) =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\int dx \left[\frac{\partial}{\partial x}\left(u^* \frac{\partial u}{\partial x}\right) - \frac{du^*}{dx}\frac{du}{dx} \right]$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{ \int dx \frac{d}{dx}\left(u^* \frac{\partial u}{\partial x}\right) - \int dx \frac{du^*}{dx}\frac{du}{dx} \right\}$$

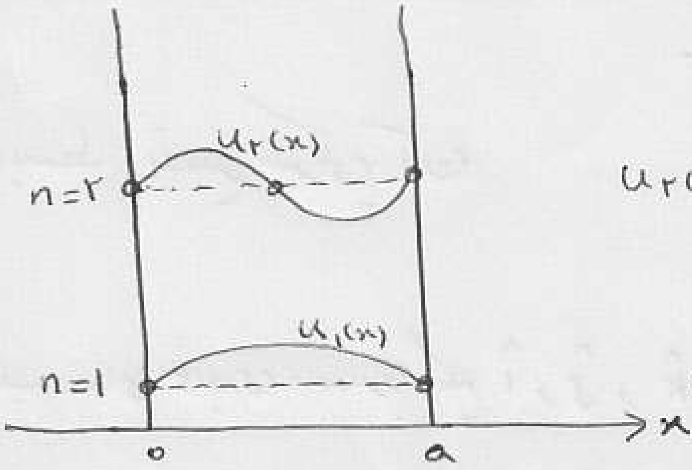
$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left[u^* \frac{du}{dx}\right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dx \left|\frac{du}{dx}\right|^2 \right] =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\underbrace{\left(u^* \frac{du}{dx}\right)_0^a}_{u^*(a) = u^*(0) = 0} - \int dx \left|\frac{du}{dx}\right|^2 \right]$$

$$\langle K \rangle = \frac{\hbar^2}{2m}\int dx \left|\frac{du}{dx}\right|^2$$

اگر $u(x)$ زیاد تغییر کند، $\frac{du}{dx}$ بزرگ می‌شود و در نتیجه $\langle K \rangle$ بزرگ می‌شود.

شکل صفحه بعد را ملاحظه کنید



$$u_2(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\, \sin \frac{2\pi x}{a} \quad , \quad E_2 = \frac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

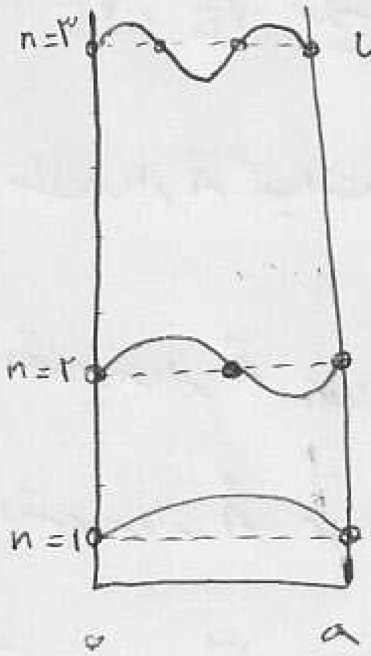
$$u_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\, \sin \frac{\pi x}{a} \quad , \quad E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

با افزایش n ، مقادیر انرژی E_n زیادتر می‌شود.

با افزایش n ، تعداد گره ها در جوابهای $u_n(x)$ بیشتر می‌شود. خمیدگی جوابها

تغییرات $u(x)$ زیادتر می‌شود. $\frac{du}{dx}$ بیشتر و $\int dx \left|\frac{du}{dx}\right|^2$ بزرگتر

می‌شود و درنتیجه انرژی جنبشی بزرگ می‌شود.



$$u_3(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\, \sin \frac{3\pi x}{a} \quad , \quad E_3 = \frac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

اصل بسط و تعبیر فیزیکی آن

در یک فضای ۳ بعدی سه بردار یکه $\hat{i}$ و $\hat{j}$ و $\hat{k}$ وجود دارد که هر سه دو به دو بر هم عمودند.

شرط تعامد یا راست هنجاری برای بردارهای یکه $\hat{i}$ و $\hat{j}$ و $\hat{k}$ برقرار است.

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

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

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

هر بردار دلخواه $\vec{A}$ و $\vec{B}$ و $\vec{C}$ و ... در این فضای سه بعدی را می‌توان برحسب $\hat{i}$ و $\hat{j}$ و $\hat{k}$ بسط داد مثلاً

$$\vec{A}=\frac{1}{\sqrt{5}}\hat{i}+\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{5}}\hat{j} - \sqrt{\frac{3}{5}}\hat{k}$$

($\sqrt{\frac{1}{5}}$ و $\sqrt{\frac{2}{5}}$ و $\sqrt{\frac{3}{5}}$ - ضرایب بسط‌اند)

$$\vec{A}\cdot\vec{A}=\frac{1}{5}+\frac{2}{5}+\frac{3}{5}=\frac{5}{5}=1 \rightarrow$$

طول بردار $\vec{A}$ یک است.

تصویر بردار $\vec{A}$ بر روی محور x عبارت است از

$$A_x=\hat{i}\cdot\vec{A}=\frac{1}{\sqrt{5}}$$

تصویر بردار $\vec{A}$ بر روی محور y عبارت است از

$$A_y=\hat{j}\cdot\vec{A}=\sqrt{\frac{2}{5}}$$

تصویر بردار $\vec{A}$ بر روی محور z عبارت است از

$$A_z=\hat{k}\cdot\vec{A}=-\sqrt{\frac{3}{5}}$$

از همین روش در مکانیک کوانتومی نیز استفاده می‌شود.

ویژه توابع $u_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}$ راست هنجارند (متعامدند)

بنابراین همانند ویژه بردارهای $\hat{i}$ ، $\hat{j}$ و $\hat{k}$ قابل تصورند.

بنا بر قضیه فوریه، هر تابع $\psi(x)$ با شرایط مرزی $\psi(0)=\psi(a)=0$ را

می‌توان به صورت زیر نوشت.

$$\psi(x)=\sum C_n \sin\frac{n\pi x}{a} = C_1\sin\frac{\pi x}{a}+C_2\sin\frac{2\pi x}{a}+\cdots\cdots$$

ضریب بسط

ضریب بسط

مثل ویژه بردار $\hat{i}$

مثل ویژه بردار $\hat{j}$

اما در سیستم کوانتومی، تعداد ابعاد فضای برداری لزوماً ۳ نیست بلکه به تعداد حالت‌های ممکن (مثلاً در مسأله ذره در جعبه بی‌نهایت جواب وجود دارد) می‌باشد.

می‌توانیم رابطه فوق را بازنویسی کنیم:

$$\psi(x)=\sum_n A_n\, u_n(x)$$

$$\rightarrow \psi(x) = A_1 u_1(x) + A_2 u_2(x) + A_3 u_3(x) + \cdots$$

A_i ها همانند ضرایب بسط اند

$u_i(x)$ ها همانند ویژه بردارهای یکه متعامدند

$$\psi(x) = \sum A_n u_n(x)$$

طرفین رابطه فوق را در $u_m^*(x)$ ضرب می‌کنیم و سپس برحسب x انتگرال‌گیری می‌کنیم

$$\int u_m^*(x)\,\psi(x)\,dx = \int u_m^*(x) \sum A_n u_n(x)\,dx$$

$$\int u_m^*(x)\,\psi(x)\,dx = \sum A_n \underbrace{\int u_m^*(x)\,u_n(x)\,dx}_{\delta_{mn}}$$

$$\int u_m^*(x)\,\psi(x)\,dx = \sum_n A_n \delta_{mn}$$

$$\Longrightarrow \quad A_m = \int dx\, u_m^*(x)\,\psi(x)$$

یا $\boxed{A_n = \int dx\, u_n^*(x)\,\psi(x)}$