مثال - ذره‌ای را در نظر بگیرید که تابع موج آن $\psi(x) = A e^{-\alpha \frac{x^2}{2}}$ است.

الف) آیا تابع موج بهنجار است؟

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |A|^2 e^{-\alpha x^2} dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

می‌دانیم که باید: $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1$: مجموع احتمالات برابر با یک است.

در نتیجه باید داشته باشیم: $|A|^2 \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = 1$

$$A = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \Longrightarrow \psi(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{\frac{-\alpha x^2}{2}}$$ بهنجار شده است

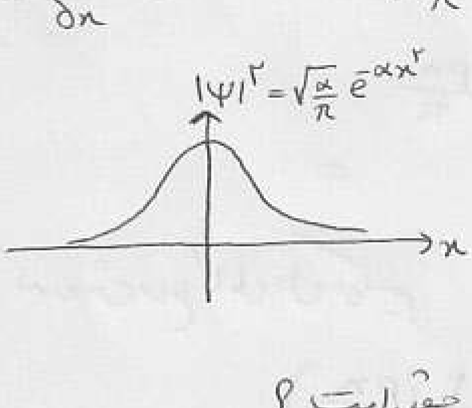
یعنی احتمال حضور ذره از $x = -\infty$ تا $x = +\infty$ برابر با یک شده است.

ب) چگالی احتمال حضور ذره در چه مکانی بیشینه است؟

$$P(x) = |\psi(x)|^2 = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} e^{-\alpha x^2}$$

$$\frac{\partial P(x)}{\partial x} = 0 \longrightarrow \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} (-2\alpha x) e^{-\alpha x^2} = 0 \Longrightarrow x = 0$$

در نقطه $x=0$ ، چگالی احتمال بیشینه است.



ج) احتمال حضور ذره از $x=0$ تا $x=\infty$ چقدر است؟

$$P = \int_{x=0}^{\infty} |\psi|^2 dx = \int_{x=0}^{\infty} \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = \frac{1}{2}$$

د) $\langle x\rangle$ را بیابید

$$\langle x\rangle = \int \psi^* x \psi \, dx = \int \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} x \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} dx$$

$$= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\alpha x^2} = 0$$

زیرا حدود انتگرال زوج و انتگرالده فرد است.

ه) $\langle p\rangle$ را بیابید

$$\langle p\rangle = \int \psi^* \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi \, dx = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} dx =$$

$$= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \frac{\hbar}{i} \int e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} \frac{-2\alpha x}{2} e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} dx = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \frac{\hbar}{i}(-\alpha) \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\alpha x^2} dx = 0$$

زیرا انتگرالده فرد و حدود انتگرال زوج است.

و) تابع موج $\phi(p)$ را بیابید

$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \, \psi(x) \, e^{-\frac{ipx}{\hbar}}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} e^{-\frac{ipx}{\hbar}} =$$

به روش مربع کامل حل می‌کنیم

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\alpha}{2}\left(x^2 + \frac{2}{\alpha}\frac{ipx}{\hbar}\right)}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \int e^{-\frac{\alpha}{2}\left[x^2 + 2x\frac{ip}{\alpha\hbar} + \left(\frac{ip}{\alpha\hbar}\right)^2 - \left(\frac{ip}{\alpha\hbar}\right)^2\right]} dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \int e^{-\frac{\alpha}{2}\left[x^2 + 2x\frac{ip}{\alpha\hbar} + \left(\frac{ip}{\alpha\hbar}\right)^2\right]} e^{+\frac{\alpha}{2}\left(\frac{ip}{\alpha\hbar}\right)^2} dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{p^2}{2\alpha\hbar^2}} \int e^{-\frac{\alpha}{2}\left(x + \frac{ip}{\alpha\hbar}\right)^2} dx =$$

تغییر متغیر:

$$x + \frac{ip}{\alpha\hbar} = x'$$
$$dx = dx'$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{\frac{-p^2}{2\alpha\hbar^2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\alpha x'^2}{2}} dx' =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{\frac{-p^2}{2\alpha\hbar^2}} \sqrt{\frac{2\pi}{\alpha}} = \left(\frac{1}{\pi\alpha\hbar^2}\right)^{\frac{1}{4}} e^{\frac{-p^2}{2\alpha\hbar^2}}$$

$$\phi(p) = \left(\frac{1}{\pi\alpha\hbar^2}\right)^{\frac{1}{4}} e^{\frac{-p^2}{2\alpha\hbar^2}}$$

ه) آیا تابع موج به دست آمده در فضای تکانه بهنجار است؟

$$\int dp\, \phi(p)\, \phi^*(p) = \left(\frac{1}{\pi\alpha\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dp\, e^{-\frac{p^2}{\alpha\hbar^2}} = \frac{1}{\sqrt{\pi\alpha\hbar^2}} \sqrt{\pi\alpha\hbar^2} = 1$$

$$\Longrightarrow \int dp\, |\phi(p)|^2 = 1 \Longrightarrow$$ بله تابع موج در فضای تکانه نیز بهنجار است. (قضیه پارسوال)

ی) $\langle x \rangle$ را با استفاده از $\phi(p)$ بیابید.

$$\langle x \rangle = \int dp\, \phi^*(p) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p}\right) \phi(p) =$$

$$= \int dp \left(\frac{1}{\pi\hbar^2\alpha}\right)^{\frac{1}{4}} e^{\frac{-p^2}{2\alpha\hbar^2}}\, i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \left(\frac{1}{\pi\hbar^2\alpha}\right)^{\frac{1}{4}} e^{\frac{-p^2}{2\alpha\hbar^2}}$$

$$= \left(\frac{1}{\pi\hbar^2\alpha}\right)^{\frac{1}{2}} \int dp\, e^{\frac{-p^2}{2\alpha\hbar^2}}\, i\hbar\, \frac{-2p}{2\alpha\hbar^2}\, e^{\frac{-p^2}{2\alpha\hbar^2}}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar^2\alpha}}\, i\hbar\, \frac{-2}{2\alpha\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dp\, p\, e^{\frac{-p^2}{\alpha\hbar^2}} = 0$$

زیرا انتگرالده فرد و حدود انتگرال زوج است.

ب) $\langle p \rangle$ را با استفاده از $\phi(p)$ بیابید.

$$\langle p \rangle = \int dp\, \phi^*(p)\, p\, \phi(p)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar^2\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} p\, e^{\frac{-p^2}{\alpha\hbar^2}} = 0$$

توجه کنید: برای به دست آوردن مقادیر چشمداشتی عملگرها، فرقی نمی‌کند که از تابع موج $\psi(x)$ و یا تابع موج $\phi(p)$ استفاده کنیم.

معادله شرودینگر برای ذره

معادله شرودینگر برای ذره آزاد

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} \xrightarrow[\text{تعریف عملگر تکانه}]{\text{با استفاده از}}$$

$$P = P_{op} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$$

می توان نوشت:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \frac{P_{op}^2}{2m}\psi(x,t)$$

معادله شرودینگر برای ذره تحت پتانسیل $V(x)$

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

با استفاده از تعریف عملگر تکانه

$$P_{op} = P = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$$

می توان نوشت

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

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \underbrace{\left[\frac{P_{op}^2}{2m} + V(x)\right]}_{\text{هامیلتونی}}\psi(x,t)$$

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = H\,\psi(x,t)}$$

H : عملگر هامیلتونی
یا
عملگر انرژی

سؤال: آیا x و P جابه‌جا می‌شوند؟ به عبارت دیگر آیا Px با xP برابر است؟

تعریف $[A,B] = AB - BA$

می‌توانیم برای دو عملگر مکان و تکانه بنویسیم

$$[P,x] = Px - xP$$

$$[P,x]\psi = (Px - xP)\psi = Px\psi - xP\psi =$$

$$= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) - x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi =$$

$$= \frac{\hbar}{i}\psi + \cancel{\frac{\hbar}{i}x\frac{\partial\psi}{\partial x}} - \cancel{\frac{\hbar}{i}x\frac{\partial}{\partial x}\psi} =$$

$$[P,x]\psi = \frac{\hbar}{i}\psi \Longrightarrow \begin{cases} [P,x] = \frac{\hbar}{i} \\ Px - xP = \frac{\hbar}{i} \neq 0 \\ Px \neq xP \end{cases}$$

مهم

از عبارات فوق واضح است که Px با xP متفاوت است.

به عبارت دیگر می‌گوییم عملگر مکان x و عملگر تکانه P با یکدیگر جابه‌جا نمی‌شوند. رابطه جابه‌جایی x و P غیر صفر است.

سؤال: عملگر تکانه p وظیفه اندازه‌گیری تکانه سیستم یا ذره را دارد.

با توجه به آنکه $p = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ است، آیا $\langle p \rangle$ حقیقی است؟

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

$$= \frac{\hbar}{i}\int dx \left[\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right] =$$

$$= \frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \frac{\partial}{\partial x}(\psi^* \psi)$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left(\psi^*\psi\right)\Big|_{-\infty}^{\infty} \underset{\uparrow}{=} 0 \longrightarrow \langle p \rangle = \langle p \rangle^*$$

توابع موج در بی‌نهایت‌ها صفر هستند.

مقدار چشمداشتی تکانه حقیقی است.

در اینجا، تابع موج در بی‌نهایت صفر در نظر گرفته می‌شود. زیرا شرط انتگرال‌پذیر مجذوری بودن در مکانیک کوانتومی را محترم می‌شماریم.

به عبارت دیگر باید مجموع احتمالات را در پدیده‌های فیزیکی برابر با یک بدست آوریم.