فصل ۴ -

ویژه توابع و ویژه مقادیر

معادله شرودینگر وابسته به زمان را به یاد دارید:

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

این معادله برحسب دو متغیر x و t نوشته شده است. برای ساده‌تر شدن حل، این معادله دیفرانسیلی دو متغیره را به دو معادله دیفرانسیلی یک متغیره تبدیل می‌کنیم.

برای این کار تعریف می‌کنیم:

$$\psi(x,t) = T(t)\,u(x) \qquad \text{II}$$

با قرار دادن II در I به دست می‌آید

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\left[T(t)\,u(x)\right] = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[T(t)\,u(x)\right] + V(x)\,T(t)\,u(x)$$

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

طرفین را تقسیم بر $T(t)\,u(x)$ می‌کنیم

$\Longleftarrow$

$$i\hbar \frac{1}{T(t)} \frac{\partial T(t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{u(x)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x) + V(x)$$

توجه کنید: در معادله بالا طرف چپ تنها برحسب t و طرف راست تنها برحسب x نوشته شده است. این معادله تنها درصورتی درست است طرفین معادله برابر با یک مقدار ثابت باشند.

درنتیجه طرفین رابطه فوق را با مقدار ثابت E مساوی قرار می‌دهیم.

$$i\hbar \frac{1}{T(t)} \frac{\partial T(t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{u(x)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x) + V(x) = \underset{\text{مقدار ثابت}}{\underset{\uparrow}{E}}$$

حال دو معادله به دست می‌آوریم

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{u(x)} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} + V(x) = E \Longrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} + V(x)u(x) = Eu(x) \qquad (1)$$

$$i\hbar \frac{1}{T(t)} \frac{\partial T(t)}{\partial t} = E \Longrightarrow \frac{\partial T(t)}{T(t)\,\partial t} = \frac{1}{i\hbar} E \qquad (2)$$

معادلات (1) و (2) باید حل شوند.

$$① : \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} + V(x)\,u(x) = E\,u(x)$$

معادله شرودینگر مستقل از زمان است.

برای حل این معادله و یافتن $u(x)$ و E، باید در معادله تابع پتانسیل $V(x)$ معلوم باشد. پس در هر سیستم با توجه به آنکه پتانسیل حاکم چه باشد، به حل معادله شرودینگر مستقل از زمان می‌پردازیم و $u(x)$ و E را به دست می‌آوریم.

$$② : \quad i\hbar\frac{\partial T(t)}{\partial t} = E\,\partial t \longrightarrow i\hbar\frac{dT(t)}{dt} = ET(t)$$

$$\longrightarrow \frac{dT(t)}{T(t)} = -\frac{i\,dt\,E}{\hbar} \xrightarrow{\text{حل}} \ln T(t) = \frac{-iEt}{\hbar} + \text{مقدار ثابت}$$

$$\boxed{T(t) = C\,e^{\frac{-iEt}{\hbar}}}$$

C یک ثابت است.

در اینجا، بخش زمانی ← تابع موج کل به دست آمده است.

$$\Psi(x,t) = C\,\underbrace{u(x)}_{\downarrow}\,e^{-iEt/\hbar}$$

از معادله موج شرودینگر مستقل از زمان به دست می‌آید.

از این به بعد، ما در هر مسأله‌ای به دنبال حل معادله شرودینگر مستقل از زمان و یافتن $u(x)$ و E می‌باشیم.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} + V(x)\,u(x) = E\,u(x)$$

معادله فوق را معادله ویژه مقداری گویند.

مقدمه‌ای برای آشنایی با معادلات ویژه مقداری:

عملگر (operator)

عملگر موجودی است که روی یک تابع اثر می‌کند و اثراتی را ایجاد می‌کند.

$$O_1 f(x) = f(x) + x^2$$

$$O_2 f(x) = \left[\frac{df(x)}{dx}\right]^2$$

$$O_3 f(x) = \left[f(x)\right]^2$$

$$O_4 f(x) = \frac{d}{dx} f(x) + 2f(x)$$

$$O_5 f(x) = \lambda f(x)$$

اثر عملگرهای O_i روی تابع $f(x)$ در مثال‌های مختلفی نشان داده شده است. در این مثال‌ها عملگر روی تابع $f(x)$ اثر می‌کند و آن را تغییر می‌دهد.

مثال: if $f(x) = x \implies O_1 f(x) = O_1(x) = x + x^2$

عملگر O_1، x را می‌گیرد و $x + x^2$ می‌دهد.

از بین عملگرهای کلی و عمومی O ، دسته‌ای از عملگرها هستند که به آنها عملگر خطی گویند. عملگر خطی را با L نشان می‌دهیم.

O : operator

L : Linear operator

عملگرهای خطی دو ویژگی مهم دارند:

۱- $L[f_1(x)+f_2(x)] = Lf_1(x) + Lf_2(x)$

۲- $L[c f(x)] = c Lf(x)$

دو شرط فوق را می‌توان یکجا هم نشان داد:

$$L[c_1 f_1(x) + c_2 f_2(x)] = c_1 L f_1(x) + c_2 L_2 f(x)$$

از بین عملگرهای O_1 ، O_2 ، O_3 ، O_4 ، O_5 ، عملگرهای O_4 و O_5 خطی هستند.

$$O_4[\alpha f_1(x)+\beta f_2(x)] = L_4[\alpha f_1(x)+\beta f_2(x)] =$$

$$= \frac{d}{dx}[\alpha f_1(x)+\beta f_2(x)] + 2[\alpha f_1(x)+\beta f_2(x)] =$$

$$= \alpha\left[\frac{d}{dx}f_1(x) + 2f_1(x)\right] + \beta\left[\frac{d}{dx}f_2(x) + 2f_2(x)\right] =$$

$$= \alpha L_4 f_1(x) + \beta L_4 f_2(x)$$. O_4 خطی است.

$$O_5\left[\alpha f_1(x)+\beta f_2(x)\right]=L_5\left[\alpha f_1(x)+\beta f_2(x)\right]=$$

$$=\lambda\left[\alpha f_1(x)+\beta f_2(x)\right]=\alpha\lambda f_1(x)+\beta\lambda f_2(x)=$$

$$=\alpha L_5 f_1(x)+\beta L_5 f_2(x)$$

O_5 یا L_5 خطی است.

توجه: اگر یک عملگر روی یک تابع اثر کند و نتیجه این اثر، همان تابع اولیه ضرب در یک ضریب ثابت باشد، آن معادله عملگری را معادله ویژه مقداری گویند.

$$\boxed{Lf(x)=\lambda f(x)}$$ معادله ویژه مقداری

λ ضریب ثابت

مثال: عملگر خطی L را در معادله ویژه مقداری قرار دهید و حل کنید.

$$Lf(x)=\frac{\hbar}{i}\frac{df(x)}{dx}-\beta x f(x)\quad,\quad f(a)=f(-a)$$

معادله ویژه مقداری: $Lf(x)=\underset{\text{ویژه مقدار}}{\lambda} f(x)\longrightarrow\frac{\hbar}{i}\frac{df(x)}{dx}-\beta x f(x)=\lambda f(x)$

$$\frac{\hbar}{i}\frac{df(x)}{dx}=(\beta x+\lambda)f(x)$$

$$\frac{df(x)}{f(x)}=\frac{i}{\hbar}(\beta x+\lambda)dx$$

$$\ln f=\frac{i}{\hbar}\left[\beta\frac{x^2}{2}+\lambda x+c\right]$$

$$f(x)=c' e^{\frac{i}{\hbar}\left(\beta\frac{x^2}{2}+\lambda x\right)}\quad\Longrightarrow$$

$$f(a) = f(-a) \qquad C' e^{\frac{i}{\hbar}(\beta \frac{a^2}{2} + \lambda a)} = C' e^{\frac{i}{\hbar}(\beta \frac{a^2}{2} - \lambda a)}$$

$$e^{\frac{i\lambda a}{\hbar}} = e^{-\frac{i\lambda a}{\hbar}}$$

$$e^{\frac{2i\lambda a}{\hbar}} = 1$$

$$e^{\frac{2i\lambda a}{\hbar}} = e^{2n\pi i} \longrightarrow \frac{2\lambda a}{\hbar} = 2n\pi$$

$$\lambda = \frac{n\pi\hbar}{a}$$

ویژه‌مقدار بدست آمده است.

مقدمه مربوط به معادلات ویژه‌مقداری گفته شد.

اما آنچه برای ما اهمیت دارد حل معادله شرودینگر مستقل از زمان است

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} + V(x)\, u(x) = E\, u(x)$$

$$\underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]}_{\text{عملگر خطی}} u(x) = E\, u(x)$$

عبارت اخیر یک معادله ویژه‌مقداری است. همانطور که مشاهده می‌شود یک عملگر خطی بر روی یک تابع به نام $u(x)$ اثر می‌کند و نتیجه آن حاصلضرب یک ضریب ثابت در همان تابع اولیه است.

$\Longleftarrow$ مهم: معادله شرودینگر مستقل از زمان یک معادله ویژه‌مقداری است.