وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
مرکز نشر دانشگاهی

مکانیک کوانتومی

جلد اول

کلود کوهن ـ تانوجی
برنارد دیو
فرانک لالوئه

ترجمهٔ
محمدفرهاد رحیمی
محسن سربیشه‌ای

مکانیك کوانتومی

جلد اول

کلود کوهن ـ تانوجی
برنارد دیو
فرانک لالوئه

ترجمهٔ

محمدفرهاد رحیمی محسن سربیشه‌ای

مرکز نشر دانشگاهی

فهرست

عنوان	صفحه
رهنمودهای کاربرد	۱
مقدمه	۳
پیشگفتار	۷
فصل اول: امواج و ذرات. درآمدی برایده‌های اساسی مکانیک کوانتومی	۹
رئوس مطالب فصل اول	۱۰
A . امواج الکترومغناطیسی و فوتونها	۱۳
B . ذرات مادی و امواج ماده	۲۴
C . توصیف کوانتومی یک ذره .	۲۹
D . ذره در یک پتانسیل نرداری مستقل از زمان	۴۲
مکملهای فصل اول	
راهنمای خواننده	۵۵
A_I : مرتبه بزرگی طول موجهای وابسته به‌ذرات	۵۷
B_I : قیدهای تحمیل‌شده توسط روابط عدم قطعیت	۶۱
C_I : روابط عدم قطعیت و فراسنجهای اتمی	۶۴
D_I : یک نمایش تجربی از رابطه عدم قطعیت	۶۸
E_I : یک بررسی ساده از بسته موج دوبعدی	۷۱
F_I : ارتباط بین مسائل یک بعدی و سه‌بعدی	۷۶
G_I : بسته موج گوسی یکبعدی. گستردگی بسته موج	۸۲
H_I : حالتهای مانای یک ذره در پتانسیلهای مربعی یک بعدی	۹۰

عنوان	صفحه
J_I : رفتار یک بسته‌موج در یک پله پتانسیل	۱۰۷
K_I : تمرینات	۱۱۷
فصل دوم : ابزارهای ریاضی مکانیک کوانتومی	۱۲۳
رئوس مطالب فصل دوم	۱۲۴
A : فضای توابع موج یک‌ذره	۱۲۹
B : فضای حالتها ، نمادگذاری دیراک	۱۴۸
C : نمایش‌ها در فضای حالتها	۱۶۸
D : معادلات ویژه مقداری، مشاهده‌پذیرها	۱۸۱
E : دومثال مهم از نمایشها و مشاهده‌پذیرها	۲۰۰
F : حاصلضرب تانسوری فضاهای حالت	۲۱۱
مکملهای فصل دوم	
راهنمای خواننده	۲۲۷
A_{II} : نامساوی شوارتز	۲۲۸
B_{II} : مروری بر بعضی خواص مفید عملگرهای خطی	۲۳۰
C_{II} : عملگرهای یکانی	۲۴۴
D_{II} : مطالعه مفصل‌تر نمایشهای $\{\|\mathbf{r}\rangle\}$ و $\{\|\mathbf{p}\rangle\}$	۲۵۳
E_{II} : چندخاصیت‌عمومی دومشاهده‌پذیر Q و P ،که‌جابجاگرآنهابرابربا $i\hbar$ است .	
F_{II} : عملگر پاریته	۲۶۶
G_{II} : کاربرد خواص حاصلضرب تانسوری، چاه نامحدود دوبعدی	۲۷۶
H_{II} : تمرینات	۲۸۱
فصل سوم : اصول موضوع مکانیک کوانتومی	۲۹۱
رئوس مطالب فصل سوم	۲۹۲
A : مقدمه	۲۹۴
B : بیان اصول موضوع	۲۹۶
C : تعبیر فیزیکی اصول موضوع مربوط به‌مشاهده‌پذیرها و اندازه‌گیری آنها	۳۱۲
D : مفاهیم فیزیکی معادله شرودینگر	۳۲۶
E : اصل برهم‌نهش و پیش‌بینی‌های فیزیکی	۳۴۹

عنوان	صفحه
مکملهای فصل سوم	
راهنمای خواننده	۳۷۰
A_{III} : ذره در یک چاه پتانسیل مربعی	۳۷۳
B_{III} : مطالعه جریان احتمال در چند مورد خاص	۳۸۶
C_{III} : انحرافهای ریشه‌های میانگین مربعی دومشاهده پذیر همیوغ	۳۹۳
D_{III} : اندازه‌گیریهایی‌که فقط روی یک قسمت از دستگاه فیزیکی انجام می‌شود	۳۹۷
E_{III} : عملگر چگالی	۴۰۴
F_{III} : عملگر تحول	۴۲۲
G_{III} : دیدگاههای شرودینگر و هایزنبرگ	۴۲۷
H_{III} : تغییرناپذیری پیمانه‌ای	۴۳۱
J_{III} : انتشاردهنده معادله شرودینگر	۴۵۰
K_{III} : حالتهای ناپایدار طول عمر	۴۶۱
L_{III} : تمرینات	۴۶۶
M_{III} : حالتهای مقید یک ذره در یک "چاه پتانسیل" باشکل دلخواه	۴۷۸
N_{III} : حالتهای نامقید یک‌ذره درحضور یک‌چاه یاسدپتانسیل با شکل‌دلخواه	۴۸۸
O_{III} : خواص کوانتومی یک ذره در یک ساختار تناوبی یک بعدی	۴۹۸
فهرست راهنما	۵۲۳

رهنمودهای کاربرد

این کتاب از چندین فصل و مکملهای مربوط به‌آنها تشکیل شده است :

فصلها شامل مفاهیم اساسی هستند . به‌جز تغییرات و اضافاتی‌چند،فصلها مترادف بادرسی هستند که معمولا " در سال آخر برنامهٔ دورهٔ کارشناسی (لیسانس) فیزیک ارائه می‌شود .

این چهارده فصل **به‌نوبهٔ خود کامل‌اند** و می‌توان آنها را مستقل از مکملهایشان مطالعه کرد .

مکملها به‌دنبال هرفصل می‌آیند ، و به‌صورت " **راهنمای خواننده** " ، نکات مشکل و مهم هرفصل را مورد بحث قرار می‌دهند . هرفصل توسط یک " حرف " که با یک شاخص پایین همراه است و شمارهٔ فصل مربوطه را بیان می‌کند ، برچسب می‌خورد (مثلا " مکملهای فصل پنجم به‌ترتیب عبارتند از A_V ، B_V ، C_V . . . .) . مکملها را می‌توان بلافاصله با نماد ● که در بالای هریک از صفحات آنها ظاهر می‌شود ، بازشناخت .

مکملها متفاوت‌اند . برخی ، به‌منظور گسترش بررسی فصل مربوطه یا بحث مفصلتر پیرامون بعضی نکات هستند ؛ بقیه ، مثالهای بارزی را توصیف می‌کنند یا مفاهیم فیزیکی گوناگونی را معرفی می‌نمایند .

میزان مشکلی مکملها نیز متفاوت است . برخی ازآنها مثالهای خیلی‌ساده یاادامهٔ فصل می‌باشند ، در حالیکه بقیه مشکلترانند و بعضی از آنها در سطح دورهٔ کارشناسی ارشد (فوق‌لیسانس) می‌باشند ؛ به‌هرحال ،خواننده باید پیش از استفاده از مکملها ، مطالب هرفصل را خوانده باشد .

دانشجو نباید سعی کند که تمام مکملهای یک فصل را در یک نوبت بخواند . بلکه باید بنا به‌هدف و علاقه‌ای که دارد ، تعداد کمی ازآنها (مثلا " ، دو یا سه‌تا) را ، به‌اضافهٔ چندتمرین انتخاب کند ، سایر مکملها را می‌توان برای مطالعات بعدی گذاشت .

بعضی از قسمت‌های کتاب با حروف ریز چاپ شده‌اند و می‌توان آنهارا درمطالعات اولیه حذف کرد .

مقدمه

ساختار وسطح کتاب

تأکید براهمیت مکانیک کوانتومی در فیزیک و شیمی نوین چندان ضروری به‌نظر نمی‌رسد. برنامه‌های جاری دانشگاهها طبیعتاً" این اهمیت را منعکس می‌سازند. مثلاً" در دانشگاههای فرانسه، درسال دوم، مقدمه‌ای نسبتاً" کیفی براید‌ه‌های اساسی مکانیک کوانتومی ارائه می‌شود. درسال آخر برنامهٔ دورهٔ کارشناسی، مکانیک کوانتومی مقدماتی و مهمترین کاربردهای آن مفصلاً" مورد مطالعه قرار می‌گیرد.

کتاب حاضر نتیجهٔ مستقیم چندین سال تدریس مکانیک کوانتومی در سال آخر برنامهٔ دورهٔ کارشناسی است، که نخست به‌صورت دو درس به‌موازات هم دردانشکدهٔ علوم پاریس و سپس در دانشگاه پاریس تدریس گردید. ما این نکته را مهم یافتیم که در ساختار این کتاب بین دوجنبهٔ متفاوت ولی مکمل یکدیگر (جلسات تدریس و پرسش و پاسخ) تمایز مشخصی قائل شویم. به‌این دلیل است که کتاب را به‌دوقسمت متمایز تقسیم کرده‌ایم (رک "رهنمودهای کاربرد" در ابتدای کتاب). از یک‌سو، فصلها مبتنی بر جلسات تدریس در دو درس فوق‌الذکر هستند، که ما پیش‌از نوشتن متن نهایی آنها را باهم مقایسه کرده و گسترش داده‌ایم. از سوی دیگر، "مکملها" از دل پرسش و پاسخها، تمرینها ومسائل داده شده به‌دانشجویان، و گزارشهایی که برخی از آنها تهیه کردند بیرون آمده‌است، ایده‌هایی نیز از درسهای دیگری که تحت شرایط یا سطوح دیگری [مخصوصاً" در برنامه‌های کارشناسی ارشد (فوق‌لیسانس)] داده شده‌اند، سرچشمه گرفته است. همان‌طورکه در "رهنمودهای کاربرد" اشاره‌کردیم، فصلها به‌صورت یک کل، کم و بیش، درسی را تشکیل می‌دهند که منظور ما تدریس‌آن به‌دانشجویان سال چهارم دانشگاه یا کسانی است که سطح دانش‌آنها هم‌ارز با آن است. بااین همه، منظور از مکملها آن نیست که در یک سال بررسی شوند.

خواننده، استاد یا دانشجو باید از میان آنها طبق علاقه، سلیقه یا هدفهایش قسمتهایی را انتخاب کند.

درسرتاسر این‌کتاب، مخاطب ما دانشجویان رشتهٔ فیزیک هستند، یعنی همانهایی که آموزششان را در چندسال گذشته به‌عهده داشته‌ایم. به‌جز در تعداد محدودی از مکملها، ما از این‌حد تجاوز نکرده‌ایم. علاوه براین، سعی کرده‌ایم که مشکلات دانشجویان را در ادراک و جذب مکانیک کوانتومی، و نیز سئوالات آنانرا در نظر بگیریم. البته، امیدواریم که این کتاب برای سایر خوانندگان، نظیر دانشجویان دورهٔ کارشناسی ارشد، محققین تازه‌کار و دبیران دبیرستانها نیز قابل استفاده باشد.

خواننده لزومی ندارد که با فیزیک کوانتومی آشنا باشد: تعداد معدودی از دانشجویان ما آشنا بودند. بااین همه، ما معتقدیم‌که درس مکانیک کوانتومی پیشنهادی ما (رک "روش کلی" در زیر) باید توسط درس توصیفی‌تری که شامل جنبه‌های عملی‌تری‌است، نظیر فیزیک اتمی، تکمیل شود.

روش کلی

احساس ما براین است‌که بهترین راه آشنایی با مکانیک کوانتومی، حل بعضی مسائل خاص است. بنابراین ما اصول موضوع مکانیک‌کوانتومی را خیلی زود معرفی می‌کنیم (درفصل سوم)، تا بتوانیم آنها را در قسمتهای بعدی کتاب به‌کار ببریم. تجربهٔ تدریس ما نشان داده است که بهتر است تمام اصول موضوع را یکباره باهم در ابتدا معرفی کنیم تا درچندین مرحله. همچنین، فضاهای حالت و نمادگذاری دیراک را از ابتدا به‌کاربرده‌ایم. این‌کار ما‌را از تکرار بیهوده‌ای که از ارائه صورتبندی کلی‌تر براکت فقط پس‌از توسعهٔ مکانیک موجی منحصرا" برحسب توابع موج ناشی می‌شود، برحذر می‌دارد. علاوه براین، یک تغییر دیرهنگام در نمادگذاری ممکن است دانشجو را گیج کند، وشکهایی‌را درمفاهیمی که او تازه باآنها آشنا شده و هنوز کاملا" جذب نکرده است، به‌وجود آورد.

پس‌از یک فصل دربارهٔ معرفی کیفی ایده‌های مکانیک کوانتومی، که مانستگی‌های اپتیکی را برای‌آشنا ساختن خواننده بااین مفاهیم جدیدبه‌کارمی‌برد، بایک‌روش سیستماتیک ابزار ریاضی (فصل دوم)، و اصول موضوع مکانیک‌کوانتومی را همراه با بحثی پیرامون محتوای فیزیکی آنها ارائه می‌کنیم (فصل سوم). این‌کار، خواننده را از ابتدا قادر می‌سازد که یک دید کلی از پیامدهای فیزیکی اصول موضوع جدید داشته باشد. از مکملهای فصل سوم به‌بعد، به‌بحث پیرامون کاربردها خواهیم پرداخت، شروع از ساده‌ترین آنها

(سیستم‌های دو-ترازی، نوسانگر هماهنگ، و غیره) و رفته رفته پرداختن به‌موضوعهای پیچیده‌تر (اتم هیدروژن، روشهای تقریبی، و غیره). هدف ما این است که نمایشهایی از مکانیک کوانتومی را باارائه مثالهای زیادی از زمینه‌های متفاوت مانند فیزیک اتمی، فیزیک مولکولی وفیزیک حالت جامد به‌دست دهیم. دراین مثالها ما توجهمان را به‌جنبهٔ مکانیک کوانتومی پدیده‌ها متمرکز خواهیم کرد، و غالباً" از جزئیات خاصی‌که درکتابهای‌تخصصی‌تر مورد بررسی قرار می‌گیرند، چشم‌پوشی خواهیم نمود. هرگاه ممکن باشد، نتایج مکانیک را با نتایج کلاسیک مقایسه می‌کنیم تا خواننده بتواند ادراک خود را پیرامون آثار مکانیک کوانتومی توسعه دهد.

این نظرگاه اساساً" قیاسی باعث شده است که ما از تکیه‌کردن بر معرفی تاریخی ایده‌های مکانیک کوانتومی، یعنی، ارائه و بحث واقعیت‌های تجربی که مارا به رد ایده‌های کلاسیک وا می‌دارد، خودداری کنیم. بنابراین ما مجبور بوده‌ایم که از روش استقرایی صرف‌نظر کنیم، و حال آنکه در توصیف صحیح فیزیک به‌عنوان علمی‌که به‌خاطر مواجههٔ دائم با واقعیتهای تجربی دائماً" در حال تکامل است، استفاده از این روش ضروری است. چنین روشی به‌نظر می‌رسدکه برای یک کتاب درسی فیزیک اتمی یا یک درس مقدماتی‌فیزیک کوانتومی‌در سطحی پایین‌تر، مناسبتر باشد.

همچنین، ما تعمداً" از هرگونه اشارهٔ فلسفی پیرامون مکانیک و تعبیرهای دیگری که پیشنهاد شده‌اند خودداری کرده‌ایم. اینگونه‌بحثها، در حالی که خیلی جالب هستند (رک بخش ۵ از کتابشناسی)، به‌نظر ما به‌سطح دیگری تعلق دارند. ما احساس می‌کنیم‌که این سئوالها می‌توانند فقط پس‌از احاطه برنظریهٔ "رسمی" کوانتومی، که موفقیت موٴثر آن درتمام زمینه‌های فیزیک و شیمی پذیرش‌آنرا تحمیل کرده است، درنظر گرفته شوند.

قدرشناسی

تجربیات آموزشی که این کتاب ثمرهٔآن است،کارهایی گروهی بوده است که در طول چندین سال انجام شده است. ما از تمام اعضاءگروههای مختلف و مخصوصاً" از **ژاک دوپون-رُک و سرژه هاروش**، برای همکاری دوستانه‌شان، و بحثهای مفیدی که در گردهمایی‌های هفتگی‌مان داشته‌ایم و ایده‌هایی که برای مسایل و تمرینها پیشنهاد کرده‌اند سپاسگزاری می‌کنیم. بدون کمک باارزش و صمیمانهٔ آنها، ما هرگز نمی‌توانستیم تألیف‌این کتاب را به‌انجام برسانیم.

همچنین ما نمی‌توانیم دین خود را به‌فیزیکدانانی که مارا با تحقیق آشنا کردند،

یعنی **آلفردکاستلر** و **جین بروسل** در مورد دوتای ما و **موریس لوی** در مورد سومین نفر، فراموش کنیم. در آزمایشگاههای آنها بود که ما زیبایی و توان مکانیک کوانتومی را کشف کردیم. همچنین ما اهمیت آموزش فیزیک نوین توسط **آلبرت مسیاه**، **کلود بلاخ** و **آناتول آبراگام** در C.E.A را، هنگامی که مطالعات فوق لیسانس هنوز در برنامه‌های دانشگاهی فرانسه یکپارچه نشده بود، فراموش نکرده‌ایم.

از بانوان **اوشه**، **بودری**، **بوی**، **برادشی**، **امو**، **هی‌وائر**، **لمیر**، و **توزو** به‌خاطر آماده‌کردن متن اولیهٔ کتاب سپاسگزاری می‌کنیم.

پیشگفتار

این کتاب (متن انگلیسی) اساساً ترجمه‌ای است از ویرایش فرانسهٔ آن‌که در پایان سال ۱۹۷۳ به‌بازار آمد.

کتاب حاضر دستخوش بعضی تغییرات شده است. مهمترین آنها اضافی‌شدن یک **کتابشناسی** مفصل، با پیشنهادهایی پیرامون کاربرد آن است که در پایان هرفصل یا مکملها آمده است.

این کتاب در اصل برای دانشجویان فرانسوی که تحصیلات دورهٔ کارشناسی خود را به‌پایان می‌رسانند. یا کار تحقیقاتی خودرا آغاز می‌کنند تدوین شده است. بااین همه، به‌نظر ما ساختار این‌کتاب (جداکردن کتاب به‌فصلها و مکملها ـ رک"رهنمودهای کاربرد") باید آنرا برای سایرگروهها نیز مناسب ساخته باشد. به‌عنوان مثال، برای یک درس مکانیک کوانتومی مقدماتی، ما استفاده از مهمترین فصلها را همراه باساده‌ترین مکملهای‌آنها توصیه می‌کنیم. برای یک درس پیشرفته‌تر، می‌توان فصلهای باقیمانده ومکملهای‌مشکلتر را به‌کاربرد. بالاخره، امید است که بعضی از مکملهای پیشرفته‌تر دانشجویانی را که از یک درس مکانیک کوانتومی عادی به‌موضوعات تحقیقاتی جاری در زمینه‌های مختلف فیزیک می‌روند، یاری دهد.

فرصت را مغتنم شمرده از **نیکلول** و **دن اوستروفسکی**، و همچنین از **سوزان هملی** به‌خاطر دقت و صمیمیتی که در این ترجمه (انگلیسی) به‌کاربرده‌اند تشکر می‌کنیم. تذکرات آنان غالباً باعث بهبود کتاب اصلی شده است. علاوه براین، از خانم **اودوئن** و خانم **ماثیو** از بابت کمکشان در سازمان دادن کتابشناسی، سپاسگزاریم.

س. کوهن ـ تانوجی

ب. دیو

ف. لالوئه

فصل اول

امواج و ذرات

درآمدی بر ایده‌های اساسی مکانیک کوانتومی

رئوس مطالب فصل اول

A ــ امواج الکترومغناطیسی و فوتونها	۱ــ کوانتومهای نور و روابط پلانک ــ اینشتین ۲ ــ دوگانگی موجی ــ ذره‌ای a ــ تحلیل آزمایش دوشکاف یانگ b ــ یکی‌سازی کوانتومی دوجنبهٔ نور ۳ ــ اصل تجزیهٔ طیفی
B ــ ذرات مادی و امواج ماده	۱ ــ روابط دوبروی ۲ ــ توابع موج ، معادلهٔ شرودینگر
C ــ توصیف کوانتومی یک ذره: بسته‌های موج	۱ ــ ذرهٔ آزاد ۲ــ شکل بستهٔ موج دریک زمان معین ۳ ــ رابطهٔ عدم قطعیت هایزنبرگ ۴ ــ تحول زمانی یک بستهٔ موج آزاد
D ــ ذره دریک پتانسیل نرداری مستقل از زمان	۱ ــ جداکردن متغیرها . حالتهای مانا a ــ وجود حالتهای مانا b ــ برهم‌نهش حالتهای مانا ۲ ــ پتانسیلهای "مربعی "یک‌بعدی. بررسی کیفی a ــ معنی فیزیکی یک پتانسیل مربعی b ــ تشابه اپتیکی c ــ مثالها

در وضعیت کنونی دانش علمی ، مکانیک کوانتومی نقشی اساسی در توصیف‌وفهم پدیده‌های طبیعی ایفا می‌کند . درحقیقت ، پدیده‌هایی که درمقیاس بسیار کوچک (اتمی یا زیر اتمی) به وقوع می‌پیوندند نمی‌توانند درخارج از چارچوب فیزیک کوانتومی توضیح داده شوند . بعنوان مثال، وجود و خواص اتمها ، پیوند شیمیایی و انتشار یک الکترون در یک بلور نمی‌توانند به‌کمک مکانیک کلاسیک فهمیده شوند . حتی وقتی فقط بااجسام‌فیزیکی ماکروسکوپیکی (یعنی ، اجسامی که ابعادشان در حدود ابعاد اجسامی که در زندگی روزمره با آنها مواجهیم هستند) سروکار داریم ، برای رسیدن به یک توصیف کامل علمی ، اصولا" لازم است که از مطالعهٔ رفتار اتمها ، یونها والکترونهای مختلف تشکیل دهندهٔ آنها شروع کنیم . پدیده‌های بسیاری وجود دارند که ، در مقیاس ماکروسکوپیکی ،رفتارکوانتومی طبیعت را بروز می‌دهند . ازین نظر است که می‌توان گفت مکانیک‌کوانتومی‌پایهٔ درک‌کنونی ما از تمام‌پدیده‌های طبیعی ،از جمله آنهایی‌است که به طور مرسوم‌در شیمی ،زیست‌شناسی و غیره بررسی می‌شوند .

از دیدگاه تاریخی ، ایده‌های کوانتومی با بررسی ذرات مادی و تابش بر یک‌پایه مشترک ، در وحدت چشمگیر مفاهیم اساسی فیزیک مشارکت کرده‌است . در آخرقرن‌نوزدهم بین دو موجود در پدیده‌های فیزیکی تمایز قائل می‌شدند : ماده و تابش ، که قوانین‌کاملا" متفاوتی برای هرکدام به‌کار می‌رفت . برای پیش بینی حرکت اجسام مادی قوانین مکانیک نیوتنی (رک پیوست III) مورد استفاده قرار می‌گرفت . موفقیت آنها ، اگرچه به‌طول انجامید ، مع‌ذلک موثر بود . راجع به تابش، نظریهٔ‌الکترومغناطیس، با واردکردن معادلات ماکسول ،تعبیر متحدی ازیک دسته پدیده هایی که قبلا" متعلق به محدوده های متفاوت : الکتریسته ، مغناطیس و نور ، درنظر گرفته می‌شدند ، ایجاد کرده بود . بخصوص، نظریهٔ الکترومغناطیسی تابش با کشف امواج هرتز ،بطور چشمگیری از نظرتجربی‌تأیید شده بود . بالاخره ، برهم کنش های بین تابش وماده به خوبی توسط نیروی لورنتزتشریح شده بود . این دسته قوانین ، از نظر داده‌های تجربی در آن زمان ، فیزیک را به‌نقطه‌ای‌رسانده بود که می‌توانست رضایت بخش در نظر گرفته شود .

لیکن سرنوشت فیزیک در اوائل قرن بیستم ، با تغییر ناگهانی و عمیقی که منجر به واردشدن مکانیک نسبیتی و مکانیک کوانتومی شد ، رقم زده شد . "انقلاب "نسبیتی و "انقلاب" کوانتومی ، تاحد زیادی مستقل از یکدیگر بودند . زیرا با فیزیک کلاسیک از جهات متفاوتی درگیر می‌شدند . قوانین کلاسیک برای‌اجسام مادی‌ای که باسرعتهای بسیار زیاد ، در حدود سرعت نور(محدودهٔ نسبیتی) ، حرکت می‌کنند اعتبار خود را از دست می‌دهند . بعلاوه ، هم‌چنین معلوم شد که این قوانین در مقیاس اتمی یازیراتمی (محدودهٔ

کوانتومی) نیز فاقداعتبار هستند . مع‌ذلک ، توجه به‌این نکته حائز اهمیت است که فیزیک کلاسیک ،می‌تواند ، در هردومورد ، به‌عنوان تقریبی از نظریه‌های جدید درنظرگرفته شود . تقریبی که برای اغلب پدیده‌هایی که در مقیاس روزمره اتفاق می‌افتند معتبر است به‌عنوان مثال ، مکانیک نیوتنی به ما امکان می‌دهد تا حرکت یک جسم جامد را به طور صحیح پیش بینی کنیم ، مشروط برآنکه غیرنسبیتی (سرعتهای بسیار کوچکتر از سرعت نور) وماکروسکوپیکی (ابعاد بسیار بزرگتراز ابعاداتمی) باشد . باوجوداین ،از یک دیدگاه اساسی ، نظریهٔ کوانتومی همیشه ضروری است . این تنها نظریه‌ای است که ما را قادر به درک وجود خود یک‌جسم جامد و مقادیر فراسنج‌های ماکروسکوپیکی (چگالی ، گرمای ویژه ، کشسانی وغیره) وابسته به‌آن می‌کند . در حال حاضر ، هنوز نظریهٔ کاملا" رضایت بخشی که مکانیک کوانتومی و مکانیک نسبیتی را یکجا در برگیرد در اختیارنداریم زیرا مشکلاتی دراین محدوده رخ داده‌است . مع‌ذالک ، اغلب پدیده‌های اتمی و مولکولی بخوبی توسط مکانیک کوانتومی غیر نسبیتی ، که قصد داریم دراینجا آنرا مورد بررسی قرار دهیم تشریح می‌شوند .

این فصل درآمدی است بر ایده‌ها و " واژگان " کوانتومی . در اینجا هیچ قصد نداریم که مطالب را دقیق یا کامل ارائه دهیم . هدف اساسی این است که حس کنجکاوی خواننده را برانگیزیم . پدیده‌هایی تشریح خواهند شد که ایده‌های کاملا" جا افتاده در بینش ما ، مانندمفهوم یک مسیر ، را دگرگون خواهندکرد . می‌خواهیم با نشان‌دادن این مطلب به طور ساده و کیفی ،که چگونه نظریهٔ کوانتومی ما را قادر به حل مسائلی که در مقیاس اتمی با آن مواجهیم می‌کند ، آنرا برای خواننده قابل توجیه گردانیم . بعدا" به ایده‌های مختلفی که‌دراین فصل وارد شده‌اند برخواهیم گشت و وارد جزئیات بیشتری از آنها خواهیم شد ، چه در زمینهٔ فرمول بندی ریاضی(فصل‌دوم)وچه درزمینهٔ فیزیکی (فصل سوم) .

در بخش اول (A) ، ایده‌های اساسی کوانتومی (دوگانگی موجی ــ ذره‌ای ،فرایند، اندازه‌گیری) را ، که بر تجربیات معروف اپتیکی متکی هستند ، وارد می‌کنیم ، سپس نشان می‌دهیم (بخش B) که چگونه این ایده‌ها می‌توانند به درات مادی تعمیم داده شوند (تابع موج ،معادلهٔ شرودینگر) . بعدا" ، مشخصات .بسته موج" وابسته به یک ذره را به طور دقیق‌تر مطالعه کرده ،و روابط عدم قطعیت هایزنبرگ را وارد میکنیم (بخش C). بالاخره ، چند مورد ساده از آثارکوانتومی نمونه‌ای را مورد بحث قرار می‌دهیم (بخش D).

A . امواج الکترومغناطیسی و فوتونها

۱ ـ کوانتومهای نور و روابط پلانک ـ اینشتین

نیوتن نور را به عنوان باریکه‌ای از ذرات که می‌توانند ، به‌عنوان مثال ، در اثر بازتاب از یک آینه به عقب برگردند ، در نظرگرفت. در خلال نیمهٔ اول قرن نوزدهم ، طبیعت موج مانندی نور (تداخل ، تفرق) ثابت شد . این امر توانست اپتیک را به نظریهٔ الکترومغناطیسی ضمیمه کند . دراین چارچوب ، سرعت نور ، c ، به ثابت های الکتریکی و مغناطیسی مربوط شده و پدیده‌های قطبش نور می‌توانند به عنوان تجلی‌هایی ازویژگی برداری میدان الکتریکی تعبیر شوند .

ولی ، مطالعهٔ تابش جسم سیاه ، که نظریهٔ الکترومغناطیسی نمی‌توانست آنرا تشریح کند ، پلانک را به پیشنهاد فرضیهٔ کوانتش انرژی (۱۹۰۰) رهنمون شد : برای یک موج الکترومغناطیسی با فرکانس ν ،تنها انرژیهای ممکن ، مضارب صحیحی از کوانتم $h\nu$ هستند ، که h یک ثابت اساسی جدیداست . اینشتین با تعمیم‌دادن این فرضیه ،بازگشت به نظریهٔ ذره‌ای راپیشنهاد کرد (۱۹۰۵) : نور از یک باریکه از فوتونهایی تشکیل شده است که هرکدام دارای انرژی $h\nu$ است . اینشتین نشان داد که‌چگونه‌ورود فوتونها،به‌طور بسیار ساده‌ای ، درک بعضی از مشخصه‌های اثر فوتوالکتریک را که تاآن زمان روشن نشده بود ، ممکن می‌سازد . بیست سال سپری شد تا ، توسط اثر کمپتون (۱۹۲۴) ، نشان داده شود که واقعا " فوتون به صورت یک موجود مجزا وجود دارد .

این نتایج به نتیجه‌گیری زیر منتهی شدند : برهم کنش یک موج الکترومغناطیسی با ماده توسط فرایندهای تقسیم ناپذیر بنیادی اتفاق می‌افتدکه درآنها تابش به صورت ترکیبی از ذرات ، فوتونها ، ظاهر می‌شود فراسنج‌های ذره‌ای (انرژی E وتکانه $\mathbf{p}$ فوتون) و فراسنج های موجی (فرکانس زاویه‌ای $\omega = 2\pi\nu$ وبردار موج $\mathbf{k}$ ،که درآن $|\mathbf{k}| = 2\pi/\lambda$ ، ν فرکانس و λ طول موج هستند) توسط روابط اساسی :

$$\boxed{\begin{aligned} E &= h\nu = \hbar\omega \\ \mathbf{p} &= \hbar\mathbf{k} \end{aligned}} \qquad \text{(A-1)}$$

(روابط پلانک ـ اینشتین)

به یکدیگر مربوط می‌شوند ، که درآن $\hbar = h\ 2\pi$ ، برحسب ثابت پلانک h تعریف شده است :

$$h \simeq ۶/۶۲ \times ۱۰^{-۳۴} \quad \text{ژول} \times \text{ثانیه} \qquad (A-۲)$$

درحین هر فرایند بنیادی ، انرژی و تکانه کل باید پایسته باشند .

۳ ــ دوگانگی موجی ــ ذره‌ای

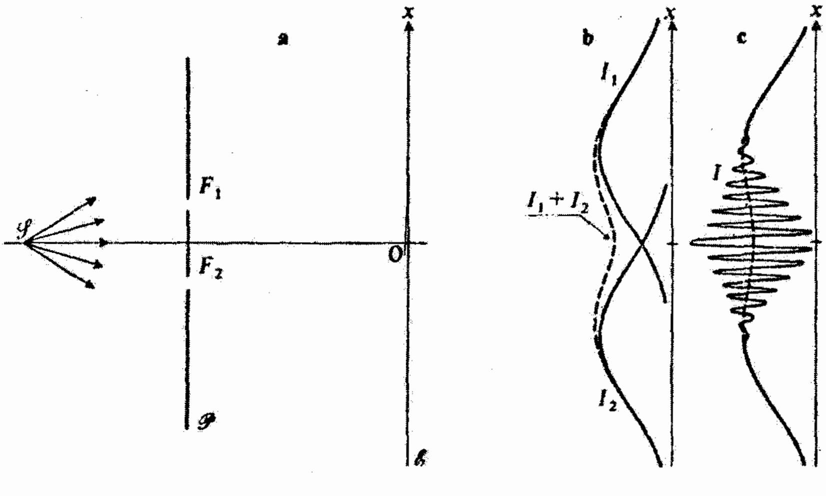
به این ترتیب به مفهوم ذره‌ای نور باز گشته‌ایم . آیا این بدان معنی است که باید نظریهٔ موجی را رها کنیم؟ مسلما" نه . خواهیم دید که پدیده‌های نوعا "موجی ، نظیر تداخل و تفرق نمی‌توانند دریک چارچوب صرفا" ذره‌ای تشریح شوند . تحلیل آزمایش مشهور دوشکاف یانگ ما را به نتیجه‌گیری زیر هدایت خواهدکرد : تعبیر کامل پدیده‌ها می‌تواند فقط با حفظ هردو جنبهٔ موجی و ذره‌ای نور به دست آید (اگر چه از پیش آشتی ناپذیر به نظر می‌رسند) . سپس نشان خواهیم داد که چگونه با وارد کردن مفاهیم اساسی کوانتومی می‌توان این پارادوکس را برطرف ساخت .

a ــ تحلیل آزمایش دوشکاف یانگ

دستگاه به کار رفته دراین آزمایش به طور طرح وار درشکل نشان داده‌شده‌است . نور تکرنگ گسیل شده توسط چشمهٔ $\mathscr{S}$ روی یک پردهٔ مات که دوشکاف باریک F_1 و F_2 درآن تعبیه شده است می‌تابد و پرده مشاهدهٔ $\mathscr{E}$ (به عنوان مثال ، یک صفحهٔ عکاسی) را روشن می‌کند . اگر F_2 را مسدود کنیم روی $\mathscr{E}$ یک توزیع شدت نور $I_1(x)$ به دست می‌آوریم که الگوی تفرقی F_1 است . به همین طریق ، وقتی F_1 مسدود شود ، الگوی تفرقی F_2 توسط $I_2(x)$ تشریح می‌شود . وقتی دو شکاف F_1 و F_2 به طور همزمان باز باشند ، یک دستگاه فریزهای تداخلی روی پرده مشاهده می‌کنیم . بخصوص ، ملاحظه می‌کنیم که شدت $I(x)$ متناظر برابر با مجموع شدت‌های تولید شده توسط F_1 و F_2 به طور جداگانه نیست :

$$I(x) \neq I_1(x) + I_2(x) \qquad (A-۳)$$

چگونه می‌توان نتایج تجربی‌ای‌را که دربالا بیان شد برحسب نظریهٔ ذره‌ای (که ضرورت آنرا در بخش گذشته دیدیم) تشریح کرد؟ وجود الگوی تفرقی وقتی که فقط یکی از دوشکاف باز است می‌توانست ، به‌عنوان مثال ، به عنوان نتیجهٔ برخوردهای فوتونی با لبه‌های شکاف تشریح شود . البته ، یک چنین تعبیری باید دقیق تر پرورانده شود و مطالعهٔ دقیق‌تر نشان خواهد داد که‌این تعبیر ناکافی است . بنابراین ، بهتر است که توجه خود را به پدیدهٔ‌تداخل معطوف کنیم . می‌توانیم سعی کنیم این پدیده را توسط برهم کنش بین فوتونهایی که‌از شکاف F_1 و فوتونهایی که‌از شکاف F_2 عبور می‌کنند تشریح کنیم . یک چنین تعبیری به پیش بینی زیر منجر خواهد شد : اگر شدت چشمه $\mathscr{S}$ (تعداد فوتونهای گسیل شده در یک ثانیه) کاهش یابد تااینکه فوتونها عملا" یکی یکی به پرده برخورد کنند ، برهم کنش بین فوتونها باید کاهش یابد و ، مآلا" ، صفر شود . لذا فریزهای تداخلی باید محو شوند .



شکل ۱.

نمودارآزمایش‌تداخل‌نوری دوشکاف یانگ (شکل a) . هرکدام‌ازشکافهای ، F_1 و F_2 روی پردهٔ $\mathscr{E}$ یک الگوی‌پراشی‌ایجادمی‌کنند . شدتهای‌مربوطه $I_1(x)$ و $I_2(x)$ هستند (خطوط پر درشکل b) . وقتی دوشکاف F_1 و F_2 به‌طورهمزمان بازباشند ، شدت $I(x)$ مشاهده شده روی‌پرده برابر باجمع $I_1(x) + I_2(x)$ (خط چین‌ها درشکلهای b و c)نیست ، بلکه نوساناتی‌رانشان می‌دهد که از تداخل بین‌میدانهای الکتریکی تابیده‌شده توسط F_1 و F_2 ناشی شده‌است ، (خط پر درشکل c) .

قبل از اشاره به جوابی که توسط آزمایش داده‌شده است ، یادآور می‌شویم که نظریهٔ موجی یک تعبیر کاملا" طبیعی از فریزها فراهم می‌آورد . شدت نور دریک نقطه روی پردهٔ $\mathscr{E}$ متناسب است با مجذور دامنهٔ میدان الکتریکی درآن نقطه . اگر $E_1(x)$ و $E_2(x)$ در نمادگذاری مختلط ، به ترتیب معرف میدانهای الکتریکی ایجاد شده توسط شکافهای F_1 و F_2 ، در x باشند (دوشکاف مانند چشمه‌های‌ثانوی رفتار کنند) ، میدان برایند کل دراین نقطه ، وقتی F_1 و F_2 هردو بازباشند ، برابراست با* :

$$E(x) = E_1(x) + E_2(x) \qquad (A-۴)$$

دراین صورت ، با به کاربردن نمادگذاری مختلط ، داریم :

$$I(x) \propto |E(x)|^2 = |E_1(x) + E_2(x)|^2 \qquad (A-۵)$$

چون (شدتهای $I_1(x)$ و $I_2(x)$ به‌ترتیب‌متناسب با $|E_1(x)|^2$ و $|E_2(x)|^2$ هستند ،فرمول (A-۵)نشان می‌دهدکه $I(x)$ با $I_1(x) + I_2(x)$ به‌اندازهٔ یک‌جملهٔ تداخلی ،که‌بهاختلاف فاز بین E_1 و E_2 و بستگی‌دارد وحضورآن فریزها را تشریح میکند ، تفاوت دارد .بنابراین نظریهٔ موجی پیش بینی می‌کند که‌کاهش شدت چشمهٔ $\mathscr{S}$ فقط باعث می‌شود که فریزها از نظر شدت کاهش پیدا کنند ولی محو نمی‌شوند .

وقتی $\mathscr{S}$ عملا" فوتونها را یکی یکی گسیل می‌دارد واقعا" چه اتفاق می‌افتد ؟ نه‌پیش بینی‌های نظریه موجی محقق می‌شوند و نه پیش بینی‌های نظریهٔ ذره‌ای . در واقع :

(i) اگر پردهٔ $\mathscr{E}$ را با یک صفحهٔ عکاسی بپوشانیم و زمان نوردهی را افزایش دهیم روی هرعکس تعداد بسیار زیادی فوتون گیر بیندازیم ، وقتی عکس ها را ظاهر می‌کنیم مشاهده می‌شود که فریزها محو نشده‌اند . ازین رو تعبیر ذره‌ای صرف ،که‌بنابرآن فریزها از برهم کنش بین فوتونها ناشی می‌شوند ، باید رد شود .

(ii) از طرف‌دیگر ، می‌توانیم صفحهٔ عکاسی را در مدت زمانی آنقدر کوتاه در معرض نور قرار دهیم ، که بتواند فقط چند فوتون دریافت کند . دراین صورت مشاهده می‌کنیم که هرفوتون در روی $\mathscr{E}$ یک برخورد جایگزیده ایجاد می‌کند نه یک‌الگوی‌تداخلی بسیار ضعیف . بنابراین ، تعبیر صرفا" موجی نیز باید رد شود .

در حقیقت ، به تدریج که فوتونهای بیشتر و بیشتری به صفحهٔ عکاسی برخورد

---

* چون آزمایش مطالعه شده دراینجا با نور ناقطبیده انجام گرفته است ، صفت برداری میدان الکتریکی نقش اساسی ندارد . برای سهولت ، دراین پاراگراف ازآن صرفنظرمی‌کنیم .

می‌کنند ، پدیدهٔ زیر اتفاق می‌افتد . توزیع برخوردهای انفرادی آنها کتره‌ای به نظر می‌رسد ، تنها وقتی که تعداد زیادی از آنها به $\mathscr{E}$ می‌رسند توزیع برخوردها جنبهٔ پیوسته ای پیدا می‌کند . چگالی برخوردها در هرنقطه از $\mathscr{E}$ متناظر است با فریزهای تداخلی : روی فریز روشن ماگزیمم و روی فریز تاریک صفراست . ازاین رو می‌توان گفت‌که فوتونها ، وقتی به صفحه میرسند ، الگوی تداخلی می‌سازند .

بنابراین ، نتیجهٔ این آزمایش ، ظاهرا" به یک پارادوکس منجرمی شود . به‌عنوان مثال ، درچارچوب نظریهٔ ذره‌ای می‌تواند به طریق زیر بیان شود . چون برهم‌کنشهای فوتون ــ فوتون نادیده‌گرفته شده‌اند ، هرفوتون باید به طور جداگانه درنظر گرفته شود . اما دراین صورت روشن نیست که چرا بسته به اینکه فقط یک شکاف باز باشد یا هردو پدیده‌ها باید به طور موءثری تفاوت داشته باشند . چرا برای فوتونی که از یکی ازشکافها عبور می‌کند . این واقعیت که شکاف دیگر باز یا بسته است باید چنین اهمیت قاطعی داشته باشد ؟

قبل از بحث در بارهٔ این مسئله ، توجه کنید که در آزمایش قبل به دنبال تعیین اینکه هرفوتون قبل از رسیدن به پرده از داخل کدام شکاف عبور کرده‌است نبودیم . برای به‌دست‌آوردن این اطلاعات ، می‌توانیم تصور کنیم که آشکار سازهایی (تکثیرکننده های فوتون) پشت F_1 و F_2 قرار داده‌ایم . دراین صورت مشاهده خواهد شد که ، اگر فوتونها یکی یکی برسند ، هرکدام از داخل یک شکاف کاملا" معین عبور می‌کنند (یک علامت یا توسط آشکار ساز واقع در پشت F_1 ثبت خواهد شد یا توسط آشکارسازی که F_2 را پوشانده است ، نه توسط هردو باهم) . اما ،مسلما" ، فوتونهایی که به‌این طریق آشکار شده‌اند جذب شده و به پرده نمی‌رسند . تکثیر کنندهٔ فوتونی راکه ، به عنوان مثال ، F_1 را مسدود می‌کند ، بردارید . تکثیرکنندهٔ فوتونی که پشت F_2 باقی می‌ماند به ما می‌گوید که در حدود نصف فوتونها از F_2 عبور می‌کنند . نتیجه می‌گیریم که سایر فوتونها (که می‌توانند تا محل پرده ادامه داشته باشند) از F_1 عبور کرده‌اند . اما الگویی که این فوتونها به تدریج روی پرده می‌سازند یک الگوی تداخلی نیست ، زیرا F_2 مسدود است . این الگو فقط الگوی پراشی F_1 است .

b ــ یکی سازی کوانتومی دوجنبهٔ نور

تحلیل قبلی نشان می‌دهد که اگر فقط یکی از دوجنبهٔ نور ، موجی یا ذره‌ای ،در نظرگرفته شود غیرممکن است بتوانیم تمام پدیده‌های مشاهده شده را تشریح کنیم . حال

بنظر می‌رسد که این دو جنبه مانعه‌الجمع هستند. بنابراین، برای فائق آمدن براین اشکال، لازم می‌شود که مفاهیم فیزیک کلاسیک را به طریقی انتقادی مورد تجدیدنظرقرار دهیم. باید امکان این را بپذیریم که این مفاهیم، هرچند تجربه روزمره ما را به این نکته هدایت می‌کند که آنها را کاملاً" پابرجا درنظربگیریم، ممکن است در محدودهٔ جدیدی ("میکروسکوپیکی") که وارد آن می‌شویم معتبر نباشند. به عنوان مثال، یک مشخصهٔ اصلی این محدودهٔ جدید، وقتی ظاهر شد که شمارنده‌هایی در پشت شکافهای یانگ قرار دادیم: وقتی یک اندازه‌گیری روی یک سیستم میکروسکوپیکی انجام می‌دهیم، آنرا به‌طور اساسی پریشیده می‌کنیم. این یک خاصیت جدید است زیرا، در محدودهٔ ماکروسکوپیکی، همواره امکان تصور وسایل اندازه‌گیری‌ای‌که تاءثیر آنها برسیستم، عملاً" تا هرحدی که بخواهیم ضعیف باشد، وجود دارد. این تجدید نظر انتقادی در فیزیک کلاسیک توسط‌آزمایش تحمیل شده است و مسلما" باید توسط‌آزمایش رهبری شود.

حال بیائید "پارادوکس" بیان شده در بالا، راجع به فوتونی را که ازیک‌شکاف عبور می‌کند اما بسته به اینکه شکاف دیگر باز یا بسته باشد رفتار متفاوتی دارد، مورد تجدید نظر قرار دهیم. دیدیم که‌اگر سعی کنیم فوتونها را وقتی از شکافهاگذشتندآشکار کنیم، مانع رسیدن آنها به پرده می‌شویم. به طور عمومی‌تر، یک تحلیل مفصل تجربی نشان می‌دهد که غیرممکن است دریک زمان هم بتوانیم الگوی تداخلی را مشاهده کنیم و هم بدانیم که هرفوتون از کدام شکاف عبور کرده است (رک. مکمل D_1). بنابراین، برای رفع این‌پارادوکس لازم است که ازاین عقیده که یک فوتون حتما" از یک شکاف بخصوص عبور می‌کند دست بکشیم. دراین صورت، به این مطلب هدایت‌می‌شویم که مفهوم مسیر یک ذره را، که یک مفهوم اساسی فیزیک کلاسیک است، مورد سئوال قرار دهیم.

بعلاوه، همچنان که فوتونها یکی یکی به پرده می‌رسند اصابت آنها روی پرده به تدریج الگوی تداخلی را می‌سازد. این مطلب می‌رساندکه، برای یک فوتون بخصوص، از پیش مطمئن نیستم که به کجای پرده برخوردخواهد کرد. این فوتونها همگی تحت‌یک شرایط‌گسیل شده‌اند. بنابراین عقیده دیگر کلاسیک، که می‌گوید: شرایط‌اولیه به طور کامل حرکت بعدی یک ذره را تعیین می‌کنند، باطل شده است. تنها می‌توانیم بگوئیم که، وقتی یک فوتون گسیل می‌شود، احتمال برخورد آن به پرده در x متناسب است با شدت $I(x)$ که با استفاده از نظریهٔ موجی محاسبه شده است، یعنی، با $|E(x)|^2$

پس از تلاشهای آزمایشی فراوانی که دراینجا تشریح نخواهیم کرد، مفهوم دوگانگی موجی ــ ذره‌ای فرمول‌بندی شد. می‌توانیم آنرا به‌طور طرحوار به‌صورت زیر

خلاصه کنیم*:

(i) جنبه‌های ذره‌ای و موجی نور جدائی ناپذیر ازیکدیگرند . نور به‌طور همزمان مانند یک موج و مانند یک شار از ذرات رفتار می‌کند ، و موج مارا به‌محاسبه احتمال تجلی یک ذره قادر می‌سازد .

(ii) پیش‌بینی‌ها در باره رفتار یک فوتون می‌تواند فقط احتمالاتی باشد .

(iii) اطلاعات در بارهٔ یک‌فوتون در زمان t توسط موج $E(\mathbf{r}, t)$ ، که یک جواب ازمعادلات ماکسول است ، داده می‌شود . می‌گوئیم کهاین موج حالت فوتونها رادر زمان t مشخص می‌کند . $E(\mathbf{r}, t)$ به‌عنوان دامنهٔ احتمال اینکه یک فوتون درزمان t ، در نقطهٔ $\mathbf{r}$ ظاهر شود ، تعبیر می‌شود . معنی این مطلب این است که احتمال مربوطه متناسب است با $|E(\mathbf{r}, t)|^2$.

گوشزدها :

(i) چون معادلات ماکسول خطی و همگن هستند ، می‌توانیم یک اصل برهم‌نهش بکار بریم :
اگر E_1 و E_2 دوجواب ازاین معادلات باشند ، $E = \lambda_1 E_1 + \lambda_2 E_2$ ، که درآن λ_1 و λ_2 اعداد ثابتی هستند ، نیز یک جواب است . همین اصل برهم‌نهش‌است‌که پدیده‌های موجی در اپتیک کلاسیک (تداخل ، تفرق)راتشریح می‌کند . ازاین رو ، در فیزیک کوانتومی ، تعبیر $E(\mathbf{r}, t)$ به‌عنوان یک دامنهٔ احتمال ، برای ثبات این پدیده‌ها ضروری است .

(ii) این نظریه صرفا" به‌ما اجازه می‌دهد که احتمال وقوع یک حادثهٔ معین‌رامحاسبه کنیم .بنابراین ،تحقیق‌های تجربی باید برتکرارتعداد زیادی ازآزمایشهای‌یکسان متکی باشند . درآزمایش بالا ، تعداد زیادی از فوتونها ، که همگی به‌یک طریق تولید شده‌اند ، متوالیا" گسیل شده والگوی تداخلی‌را ،که تجلی‌احتمالات‌محاسبه شده‌است ، می‌سازند .

(iii) ما دراینجا در بارهٔ "حالت فوتون" صحبت می‌کنیم تابتوانیم دربخش B تشابهی بین $E(\mathbf{r}, t)$ و تابع موج $\psi(\mathbf{r}, t)$ که حالت کوانتومی یک ذرهٔ مادی رامشخص‌می‌کند ، ارائه دهیم . این "تشابه اپتیکی" بسیار سودمند است . بخصوص ، همانطور که در بخش D خواهیم دید ، این‌کار به‌ما اجازه خواهد داد تا به‌سادگی و بدون

* لازم به‌تذکراست که‌این تعبیر فیزیکی از پدیده‌ها ،که عموما" درحال حاضر "صحیح" درنظر گرفته می‌شود ، هنوز مورد اعتراض بعضی از فیزیکدانهااست .

توسل به‌محاسبه، خواص مختلف کوانتومی ذرات مادی را بفهمیم.
اما، نباید خیلی فراتر ازاین رفته و اجازه‌دهیم درما این باور را ایجاد کند که در نظر گرفتن $E(\mathbf{r}, t)$ به‌عنوان مشخص‌کنندهٔ حالت کوانتومی یک فوتون امرکاملا" صحیحی است.
بعلاوه، خواهیم دید که این واقعیت که $\psi(\mathbf{r}, t)$ مختلط است درمکانیک‌کوانتومی ضروری است، حال آنکه نمادگذاری مختلط $E(\mathbf{r}, t)$ دراپتیک صرفا" برای‌سهولت به‌کاربرده می‌شود (فقط قسمت حقیقی آن دارای معنای فیزیکی است). تعریف دقیق حالت کوانتومی (مختلط) تابش تنها می‌تواند درچارچوب الکترودینامیک کوانتومی، نظریه‌ای که هم مکانیک کوانتومی و هم نسبیتی است، داده شود. این مسائل را دراینجا در نظر نخواهیم گرفت (در مکمل K_V یک بررسی اجمالی از آنها را ارائه خواهیم داد).

۳ـ اصل تجزیهٔ طیفی :

با مجهز شدن به ایده‌های معرفی شده در بخش ۲، اینک می‌خواهیم یک‌آزمایش اپتیکی ساده دیگر را، که موضوع آن قطبش نور است، مورد بحث قرار دهیم. این کار به ما اجازه خواهد داد تا مفاهیم اساسی مربوط به اندازه‌گیری کمیتهای فیزیکی را معرفی کنیم.

این آزمایش عبارتست از ارسال یک موج نوری تکرنگ تحت و قطبی شده به‌سمت یک تجزیه‌گر A. محور Oz جهت انتشار این موج را مشخص می‌کند و $\mathbf{e}_p$ بردار یکه‌ای است که قطبش‌آن را تشریح می‌کند (ر ک شکل ۲). تجزیه‌گر A نوری را که موازی Ox قطبی شده‌است عبور می‌دهد ونوری را که موازی با Oy قطبی شده‌است جذب می‌کند.

توصیف کلاسیکی این آزمایش (توصیفی که برای باریکهٔ نوری که به حد کافی شدید باشد معتبراست) به شرح زیراست. موج تحت قطبی‌شده توسط یک میدان الکتریکی به شکل :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = E_0 \mathbf{e}_p \, e^{i(kz - \omega t)} \qquad (A-6)$$

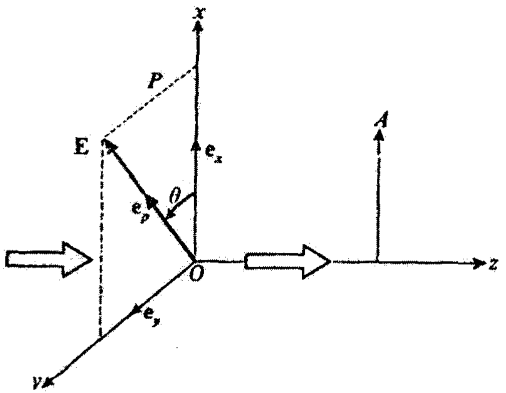
که درآن E_0 یک ثابت است، مشخص می‌شود. شدت نور I متناسب است با $|E_0|^2$.
موج تخت پس‌از عبور از داخل تجزیه‌گر A، در امتداد Ox قطبی می‌شود:

$$\mathbf{E}'(\mathbf{r}, t) = E'_0 \, \mathbf{e}_x \, e^{i(kz - \omega t)} \qquad (A-7)$$

و شدت آن ، I' ، که با $|E_0'|^2$ متناسب است توسط قانون مالوس داده می‌شود :

$$I' = I\cos^2\theta \qquad (A-8)$$

[e_x بردار یکهٔ محور Ox و θ زاویهٔ بین e_x و e_p است] .



شکل ۲ .

یک آزمایش سادهٔ اندازه‌گیری درمورد قطبش یک موج نوری . یک باریکهٔ نور درامتداد Oz انتشار می‌یابد و به‌ترتیب از قطبی‌کنندهٔ P و تجزیه‌گر A عبور می‌کند . θ زاویهٔ بین Ox و میدان الکتریکی موج عبور کرده از P می‌باشد . ارتعاشات عبور کرده از A موازی Ox هستند .

در سطح کوانتومی ، یعنی ، وقتی که I آن قدر ضعیف باشد که فوتونها یکی یکی به تجزیه‌گر برسند ، چه اتفاقی خواهد افتاد ؟ (دراین صورت یک آشکارساز فوتونی پشت تجزیه‌گر قرار می‌دهیم .) قبل از همه ، آشکار ساز به هیچ وجه " کسری از یک فوتون " را ثبت نمی‌کند . یا فوتون از تجزیه‌گر می‌گذرد یا کاملا" توسط آن جذب می‌شود . بنابراین (بجز در موارد خاصی که الان بررسی خواهیم‌کرد) ، نمی‌توانیم باقطعیت پیش بینی کنیم که آیا یک فوتون فرودی معین عبور خواهد کرد یا جذب خواهد شد . فقط می‌توانیم احتمالات مربوطه را بدانیم . بالاخره ، اگر تعداد زیاد N فوتون را یکی پس از دیگری ارسال داریم ، نتیجه با قانون کلاسیکی مطابقت خواهد داشت ، به این معنی که بعد از تجزیه‌گر در حدود $N\cos^2\theta$ فوتون آشکار خواهد شد .

از این توصیف ، ایده‌های زیر را به‌خاطر خواهیم سپرد :

(i) وسیلهٔ اندازه‌گیری (دراینجا ، تجزیه‌گر) می‌تواند فقط بعضی ازنتایج ممتاز را بدهد ، که ماآنها را نتایج ویژه خواهیم نامید *. درآزمایش فوق فقط دو نتیجه ، ممکن وجود دارد : فوتون یا از تجزیه‌گر عبور می‌کند یا متوقف می‌شود . می‌گوئیم که ،درمقابله با مورد کلاسیکی [رک فرمول (A−۸)] که شدت عبور کردهٔ I' ، برحسب مقدار θ می‌تواند به‌طور پیوسته بین 0 و I تغییرکند ، نتیجهٔ اندازه‌گیری کوانتیده‌ماست .

(ii) به‌هریک ازاین‌نتایج ویژه یک ویژه حالت مربوط می‌شود . دراینجا ،این‌دوویژه حالت توسط :

$$\mathbf{e}_p = \mathbf{e}_x \qquad \text{(A−۹)}$$
یا
$$\mathbf{e}_p = \mathbf{e}_y$$

مشخص می‌شوند ($\mathbf{e}_y$ برداریکه محور Oy است) . اگر $\mathbf{e}_p = \mathbf{e}_x$ باشد ،باقطعیت‌می‌دانیم که فوتون از تجزیه‌گر خواهدگذشت ، اگر برعکس $\mathbf{e}_p = \mathbf{e}_y$ باشد ، فوتون یقینا" متوقف خواهد شد .

بنابراین ، ارتباط بین نتایج‌ویژه و ویژه حالتها به‌شرح زیراست . اگر ذره ، قبل از اندازه‌گیری ، دریکی از ویژه حالتها باشد ، نتیجهٔ این اندازه‌گیری قطعی است ؛ نتیجه نمی‌تواند چیزی جزء نتیجهٔ ویژهٔ وابسته باشد .

(iii) وقتی حالت قبل از اندازه‌گیری دلخواه باشد ، فقط احتمالهای یافتن نتایج ویژهٔ مختلف می‌تواند پیش بینی‌شود . برای یافتن این‌احتمالات ، حالت ذرات رابه‌صورت یک ترکیب خطی ازویژه حالتهای مختلف تجزیه می‌کنیم . دراینجا ، برای یک $\mathbf{e}_p$ دلخواه می‌نویسیم :

$$\mathbf{e}_p = \mathbf{e}_x \cos\theta + \mathbf{e}_y \sin\theta \qquad \text{(A−۱۰)}$$

احتمال به‌دست آوردن یک نتیجه ویژهٔ معین متناسب است بامربع قدر مطلق ضریب ویژه حالت متناظر . ضریب تناسب توسط این شرط تعیین می‌شود که مجموع تمام این احتمالات باید برابر با یک باشد . بنابراین ، از(A−۱۰) نتیجه می‌گیریم که هر فوتون دارای احتمال$\cos^2\theta$است برای اینکه از تجزیه‌گر بگذرد و دارای احتمال$\sin^2\theta$ برای اینکه توسط‌آن جذب شود (می‌دانیم‌که $\cos^2\theta + \sin^2\theta = 1$) . این ، در واقع همان چیزی‌است که در بالا بیان شد . این قاعده در مکانیک کوانتومی اصل تجزیهٔ طیفی

---

* دلیل این نام‌گذاری در فصل سوم خواهد آمد .

نامیده می‌شود . توجه‌کنیدکه این تجزیه به‌نوع وسیلهٔ اندازه‌گیری مورد نظر بستگی دارد ، زیرا باید از ویژه حالتهایی استفاده شود که مربوط به‌آن است : در فرمول (۱۰ — A) ، انتخاب محورهای Ox و Oy توسط تجزیه گر تعیین می‌شود .

(iv) نــور ، پس‌از عبور از داخل تجزیه‌گر ، کاملا" در امتداد $\mathbf{e}_x$ قطبی شده است . اگــر بعد از تجزیه‌گر اول A ، یک تجزیه‌گر دوم A' را که دارای همان محوراســت قرار دهیم ، تمام فوتونهایی که از A گذشته‌اند از A' نیز خواهند گذشت . بنابراآنچه در نکتهٔ (ii) دیــدیم ، این مطلب بدان معنی است که حالت فوتونها ، پس‌از اینکــه از A گذشتند ، ویژه حالتی است کــه توسط $\mathbf{e}_x$ مشخص می‌شود . لذا ، یک تغییر ناگهــانی در حالت ذرات وجود داشته است . قبل از اندازه‌گیری ، این حالت توسط یک بردار $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ که با $\mathbf{e}_p$ همــخط بود تعریف شده بود . پس‌از اندازه‌گیری ، مقــداری اطلاعات تکمیلــی داریم (فوتون عبور کرده‌است) که با تشریح حالت توسط بردار متفاوتی ، که اکنــون بــا $\mathbf{e}_x$ همخط‌است ، وارد شده است . این مطلب واقعیتی را بیان می‌کندکه قبلا" دربخش ۲ —A ذکر کردیم و آن این‌است‌که اندازه‌گیری دستگاه میکروسکوپیکی (دراینجا ،فوتون) را به شکل اساسی پریشیده می‌کند .

گوشزد :

پیش‌بینی مطمئن نتیجه ، وقتی $\mathbf{e}_p = \mathbf{e}_x$ یا $\mathbf{e}_p = \mathbf{e}_y$ باشد ، فقط یــک مــورد خاص‌است . دراین صورت احتمال یکی از حوادث ممکن یقینا" بــرابــر واحد است . امابرای اینکه درستی این پیش بینی را تحقیق کنیم باید تعــداد زیادی آزمایش‌انجام دهیــم . باید مطمئن بود که تمام فوتونها عبور می‌کنند (یامتوقف شده‌اند) ، زیرا این واقعیت که یک فوتون بخصوص از تجزیه‌گر عبــور کند (یا جذب شده باشد) مشخصهٔ $\mathbf{e}_p = \mathbf{e}_x$ (یا $\mathbf{e}_p = \mathbf{e}_y$)نیست .

B . ذرات مادی وامواج ماده

۱ ــ روابط دو بروی :

به‌موازات کشف فوتونها ، مطالعهٔ طیفهای گسیلی و جذبی اتمی یک‌واقعیت‌اساسی را نمایان ساخت ، که فیزیک کلاسیک در تشریح آن ناتوان بود :

این طیفها از خطوط باریکی تشکیل یافته‌اند . به عبارت دیگر ، یک اتم معین فقط فوتونهایی را که فرکانشهای (یعنی ، انرژیهای) کاملا" معینی دارند گسیل یا جذب می‌کند . اگر بپذیریم که انرژی اتم کوانتیده است ، یعنی ، می‌تواند فقط مقادیر گسستهٔ معین $E_i(i = 1, 2, ..., n, ...)$ را بگیرد . این واقعیت می‌تواند به‌طوربسیارساده‌ای‌تعبیرشود : دراین صورت گسیل یا جذب یک فوتون همراهست با یک "پرش" در انرژی اتم از یک مقدار مجاز E_i به مقدار دیگر E_j . پایستگی انرژی ایجاب می‌کند که فوتون دارای فرکانس ν_{ij} باشد به طوری که :

$$h\nu_{ij} = |E_i - E_j| \qquad (B-1)$$

بنا براین فقط فرکانسهایی که از (B ــ ۱) تبعیت می‌کنند می‌توانند توسط اتم گسیل یا جذب شوند .

وجود چنین ترازهای انرژی گسسته‌ای ، مستقلا" توسط آزمایش فرانک ــ هرتز تاٴیید شد . بوهر این مطلب را به کمک مدارهای الکترونی ممتاز تعبیر کرد و همراه با سامرفلد ، یک قاعدهٔ تجربی بیان کرد که محاسبهٔ این مدارها را برای مورد اتم‌هیدرژن ممکن می‌ساخت . ولی منشاٴ اساسی این قواعد کوانتش مجهول باقی ماند .

لیکن ، در سال ۱۹۲۳ ، دوبروی فرضیهٔ زیر را پیشنهاد کرد :

ذرات مادی ، درست مانند فوتونها ، می‌توانند یک‌جنبهٔ موج مانند داشته باشند .

وی سپس قواعد کوانتش بوهر ــ سامرفلد را به صورت نتیجه‌ای ازاین فرضیه به‌دست آورد ، ترازهای انرژی مجاز مختلف مشابه با مدهای ویژه یک تار مرتعش هستند . آزمایشهای پراش الکترون (داویسون و جرمر ، ۱۹۲۷) ، با نشان دادن اینکه الگو های تداخلی می‌توانند با ذرات مادی نظیر الکترونها به دست آیند ، به طور برجسته‌ای وجود جنبه موج مانندی ماده را تاٴیید کرد .

بنابراین به یک ذره مادی با انرژی E و تکانهٔ $\mathbf{p}$ ، موجی منتسب می کنیم که

فرکانس زاویه‌ای $\omega = 2\pi\nu$ وبردار موجی $\mathbf{k}$ ی آن باهمان روابطی که برای فوتونها برقرار است (رک بخش ۱ـ A) داده شود :

$$\begin{cases} E = h\nu = \hbar\omega \\ \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \end{cases} \qquad (\mathrm{B}-2)$$

به‌عبارت دیگر، طول موج متناظر برابر است با :

$$\lambda = \frac{2\pi}{|\mathbf{k}|} = \frac{h}{|\mathbf{p}|} \quad \text{(رابطهٔ دوبروی)} \qquad (\mathrm{B}-3)$$

گوشـزد :

کوچکی ثابت پلانک h توضیح می‌دهد که چرا بسیار مشکل است که بتوان ماهیت موج مانندی ماده را در مقیاس ماکروسکوپیکی نشان داد. مکمل A_1 این فصل، مرتبه‌های بزرگی طول موجهای دوبروی وابسته به ذرات مادی مختلف را مورد بحث قرار می‌دهد.

۲ ـ توابع موج ، معادلهٔ شرودینگر

بر طبق فرضیهٔ دوبروی ایده‌هـای معرفی شده در بخش A برای مورد فوتـون را به تمام ذرات مادی اعمال خواهیم کـرد. بایادآوری نتایج این بخش، به‌فرمول‌بندی زیر هدایت می‌شویم :

(i) به جای مفهـوم کلاسیکـی یک مسیر، باید مفهـوم یک حالت متغـیر نسبت به‌زمان را جایگزین کنیم. حالت کوانتومی یک ذره نظیر الکترون * توسط یک تابـع مـوج $\psi(\mathbf{r}, t)$ مشخص می‌شود، که تمام اطلاعاتی را که ممکن است در بارهٔ ذره به‌دست آورد، در بر دارد.

(ii) $\psi(\mathbf{r}, t)$ به‌عنوان دامنهٔ احتمال حضور ذره تعبیر می‌شود. چون مکانهای ممکن ذره یک پیوستار تشکیل می‌دهند، احتمال $d\mathscr{P}(\mathbf{r}, t)$ برای اینکه ذره در زمـان t در عنصر حجمی $d^3r = dx\,dy\,dz$ ، واقع در نقطهٔ $\mathbf{r}$ باشد باید با d^3r متناسـب باشد و ازاین رو بینهایت کوچک است. بنابراین $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ به عنوان چگـالـی احتمـال

---

* دراینجا وجود اسپین الکترون را به‌حساب نخواهیم آورد. (رک فصل ۱۰)

مربوطه، با :

$$d\mathscr{P}(\mathbf{r}, t) = C\,|\psi(\mathbf{r}, t)|^2\, d^3r \qquad (\text{B}-۴)$$

که در آن C ثابت بهنجارش است، تعبیرمی‌شود[ر ک گوشزد (i) درآخر بخش۲ ـ B].

(iii) اصل تجزیهٔ طیفی به اندازه‌گیری یک کمیت فیزیکی دلخواه اعمال می‌شود:

ـ نتیجهٔ به‌دست آمده باید به یک مجموعه از نتایج ویژهٔ $\{a\}$ تعلق داشته باشد.

ـ به‌هرویژه مقدار a یک ویژه حالت، یعنی، یک ویژه تابع $\psi_a(\mathbf{r})$ وابسته است. این تابع طوری است که، اگر $\psi(\mathbf{r}, t_0) = \psi_a(\mathbf{r})$ (t_0 زمانی‌است‌که‌اندازه‌گیری در آن انجام شده است) باشد، اندازه‌گیری همواره به a منجر خواهد شد.

ـ برای هر $\psi(\mathbf{r}, t)$، احتمال $\mathscr{P}_a$ ی یافتن ویژه مقدار a در یک اندازه‌گیری در زمان t_0، با تجزیه $\psi(\mathbf{r}, t_0)$ برحسب توابع $\psi_a(\mathbf{r})$ پیدا می‌شود:

$$\psi(\mathbf{r}, t_0) = \sum_a c_a\, \psi_a(\mathbf{r}) \qquad (\text{B}-۵)$$

دراین صورت :

$$\mathscr{P}_a = \frac{|c_a|^2}{\sum_a |c_a|^2} \qquad (\text{B}-۶)$$

(حضور مخرج مارا مطمئن می‌سازد که احتمال کل برابر است با : $\sum_a \mathscr{P}_a = 1$)

ـ اگر اندازه‌گیری یقینا" a را به دست دهد، تابع موج ذره بلافاصله پس از اندازه‌گیری عبارت است از :

$$\psi(\mathbf{r}, t_0) = \psi_a(\mathbf{r}) \qquad (\text{B}-۷)$$

(iv) می‌ماند معادله‌ای که تحول تابع $\psi(\mathbf{r}, t)$ را توصیف می‌کند، و باید نوشته شود. می‌توان آنرا، با استفاده از روابط پلانک و دوبروی، به روشی بسیار طبیعی به دست آورد. مع‌الوصف، قصد اثبات این معادلهٔ اساسی را، که معادلهٔ شرودینگر نامیده می‌شود، نداریم. فقط‌آنرا خواهیم پذیرفت. بعدا"، بعضی از پی آمدهای آنرا (که تحقیق تجربی آنها اعتبار معادله را ثابت خواهد کرد) مورد بحث قرار خواهیم داد. بعلاوه، این معادله را به طور بسیار مفصل تری در فصل ۳ بررسی خواهیم کرد.

وقتی یک ذره (به جرم m) تحت تاءثیر یک پتانسیل* $V(\mathbf{r}, t)$ قرار دارد ، معادلهٔ شرودینگر شکل :

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t)} \qquad (\mathrm{B-8})$$

را می‌گیرد که در آن Δ عملگر لاپلاسی $\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$ است . فوراً متوجه می‌شویم‌که این معادله نسبت به ψ خطی و همگن است . در نتیجه ، برای ذرات مادی ، یک‌اصل برهم نهشی وجود دارد که ، همراه با تعبیر ψ به عنوان دامنهٔ‌احتمال، منبع آثار موجی است . بعلاوه ، توجه کنید که معادلهٔ دیفرانسیل (B — ۸) نسبت به مرتبه اول است . اگر بناباشد حالت ذره در زمان t_0 ، که توسط $\psi(\mathbf{r}, t_0)$ مشخص شده است ، حالت بعدی آنرا تعیین کند ، این شرط ضروری است .

بنابراین یک تشابه اساسی بین ماده و تابش وجود دارد : در هردو مورد ،توصیف صحیح پدیده‌ها مستلزم واردکردن مفاهیم کوانتومی ، و بخصوص ، ایدهٔ دوگانگی موجی ذره‌ای است .

گوشزدها :

(i) برای یک دستگاه متشکل ازفقط یک ذره ، احتمال‌کل یافتن ذره‌درزمان t درجائی از فضا برابراست با ۱ :

$$\int d\mathscr{P}(\mathbf{r}, t) = 1 \qquad (\mathrm{B-9})$$

چون $d\mathscr{P}(\mathbf{r}, t)$ توسط فرمول (B — ۴) داده شده است ، نتیجه می‌گیریم که تابع موج $\psi(\mathbf{r}, t)$ باید مجذوراً " انتگرال پذیر باشد :

$$\int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \, d^3r \qquad (\mathrm{B-10})$$

محدوداست . بنابراین ثابت بهنجارش C که در (B — ۴) ظاهر می‌شود توسط رابطهٔ زیر داده میشود :

---

* $V(\mathbf{r}, t)$ دراینجا معرف انرژی پتانسیل است . به‌عنوان مثال ، می‌تواند حاصلضرب پتانسیل الکتریکی دربارذره باشد . درمکانیک‌کوانتومی $V(\mathbf{r}, t)$ معمولاً "پتانسیل" نامیده‌می‌شود .

$$\frac{1}{C} = \int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \, d^3r \qquad (B-11)$$

(بعدا " خواهیم دیدکه شکل معادله شرودینگر می‌رساندکه C مستقل اززمان‌است) . غالبا "ازتوابع موجی بهنجارشده استفاده می‌شود به طوری که :

$$\int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \, d^3r = 1 \qquad (B-12)$$

در این صورت ثابت C برابراست با ۱ .

(*ii*) به اختلاف مهم بین مفاهیم حالتهای کلاسیکی وحالتهای کوانتومی توجه‌کنید . حالت کلاسیکی یک ذره در زمان t با تصریح شش فراسنج x ، y ، z ، v_x ، v_y و v_z که مکان و سرعت آنرا در این زمان مشخص می‌کنند تعیین می‌شود . حالت کوانتومی یک ذره توسط تعداد بینهایت فراسنج ، مقادیر تابع موج $\psi(\mathbf{r}, t)$ وابسته به آن در نقاط مختلف فضا ، تعیین می‌شود . به جای‌ایدهٔ کلاسیکی یک مسیر (توالی حالتهای مختلف ذره کلاسیکی نسبت نرمان) ، بایدایدهٔ‌انتشارموج وابسته به ذره را جایگزین کنیم . به عنوان مثال ،آزمایش دوشکاف یانگ را که ، قبلا " برای مورد فوتونها تشریح کردیم ،ولی‌دراصل‌می‌تواند باذرات مادی نظیر الکترونها نیز انجام شود ، درنظر بگیرید . وقتی الگوی تداخلی مشاهده شد ، معنی ندارد که بپرسیم هرذره از داخل کدام‌شکاف‌عبورکرده‌است ، زیرا موج وابسته به‌آن از داخل هر دوگذشته است .

(*iii*) شایان توجه است که ، برخلاف فوتونها ، که می‌توانند در خلال یک آزمایش گسیل یا جذب شوند ، ذرات مادی نه می‌توانند خلق شوند و نه‌منهدم . به‌عنوان مثال ، الکترونهائی که از یک رشتهٔ‌گرم گسیل می‌شوند از قبل در آن رشته وجود داشته‌اند . به همین طریق الکترونی که توسط یک شمارشگر جذب شده است ناپدید نمی‌شود : بلکه جزءیک اتم یا یک مولکول‌یایک‌جریان‌الکتریکی می‌شود . در واقع ، نظریهٔ نسبیت نشان می‌دهد که امکان دارد ذرات مادی را خلق یا نابود کرد : به عنوان مثال ، فوتونی که به حد کافی انرژی دارد ، وقتی از نزدیکی یک اتم می‌گذرد ، می‌تواند به یک زوج الکترون ــ پوزیترون تبدیل شود . بالعکس، پوزیترون ، وقتی به یک الکترون برخورد کند ، با آن نابود شده و فوتونهایی گسیل می‌دارد . لیکن ، در ابتدای این فصل خاطرنشان ساختیم که دراینجا خود را به محدودهٔ‌کوانتومی غیرنسبیتی محدود خواهیم کرد ، و درواقع مختصات مکانی و زمانی را به طور غیر متقارن در نظر گرفته‌ایم . در

چارچوب مکانیک کوانتومی غیر نسبیتی ، ذرات مادی نه می‌توانند خلق شوند و نه نابود . این قانون پایستگی ، همان طور که خواهیم دید ، دارای نقشی با اهمیت اساسی است .
لزوم رها کردن آن یکی از مهمترین مشکلاتی است که در موقع ساختن مکانیک کوانتومی نسبیتی با آن مواجه می‌شویم .

C . توصیف کوانتومی یك ذره
بسته موجها

در بخش گذشته مفاهیم اساسی ای را که برای توصیف کوانتومی یک ذره لازمند معرفی کردیم . در این بخش می‌خواهیم خود را با این مفاهیم آشنا کرده و از آنها چندین خاصیت بسیار مهم استنتاج کنیم . ابتدا با مطالعهٔ یک مورد خاص بسیار ساده ، مورد یک ذرهٔ آزاد ، شروع می‌کنیم .

۱ ـ ذرهٔ آزاد

ذره‌ای را در نظر بگیرید که انرژی پتانسیل آن در هر نقطه از فضا صفر (یا یک مقدار ثابت) باشد . بدین ترتیب ذره تحت تاثیر هیچ نیروئی نبوده ، و گفته می‌شود که آزاد است .

وقتی $V(\mathbf{r}, t) = 0$ معادلهٔ شرودینگر به‌صورت زیر در می‌آید :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi(\mathbf{r}, t) \qquad (C-۱)$$

این معادله ، بوضوح توسط جوابهایی به صورت :

$$\psi(\mathbf{r}, t) = A\, e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} \qquad (C-۲)$$

(که در آن A یک ثابت است) ارضاء می‌شود ، مشروط برآنکه $\mathbf{k}$ و ω در رابطهٔ زیر صدق کنند :

$$\omega = \frac{\hbar \mathbf{k}^2}{2m} \qquad (C-۳)$$

مشاهده می‌کنیم که ، برطبق روابط دوبروی [ر ک (B-۲)] ، شرط (C-۳) بیانگر

این واقعیت است که انرژی E و تکانهٔ $\mathbf{p}$ ی یک ذرهٔ آزاد در معادله‌ای صدق می‌کنند که در مکانیک کلاسیک مشهور است :

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \qquad (C-۴)$$

بعداً (در بخش ۳ــ C) به تعبیر فیزیکی حالتی به شکل (C ــ ۲) باز خواهیم‌گشت . ملاحظه می‌کنیم که چون داریم :

$$|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |A|^2 \qquad (C-۵)$$

یک موج تخت ازین نوع ، معرف ذره‌ای است که احتمال حضور آن درتمام فضا یکنواخت است (گوشزد زیر را به ببینید) .

اصل برهم نهش می‌گوید که هر ترکیب‌خطی از امواج تختی که در رابطهٔ (C ــ۳) صدق کنند نیز جوابی از معادلهٔ (C ــ ۱)خواهد بود . یک چنین برهم نهشی می‌تواند به صورت زیر نوشته شود :

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(\mathbf{k})\, e^{i[\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega(k)t]}\, d^3k \qquad (C-۶)$$

(d^3k ، بنابه تعریف ، معرف عنصر حجمی بینهایت کوچک فضای $\mathbf{k}$ است : $dk_x\, dk_y\, dk_z$) . $g(\mathbf{k})$ ، کـه می‌تواند مختلط باشد ، بایـد به حد کـافی منظـم باشد تا مشتق گیری در داخل انتگرال را امکان پذیر سازد . بعلاوه ، می‌توان نشان داد کـه ، هر جوابی که مجذوراً انتگرال پذیر باشد می‌تواند به صورت (C ــ ۶)نوشته‌شود .

یک تابع موج نظیـر (C ــ ۶) ، برهم نهشی از امواج تخت ، یک "بسته موج" سه بعدی نامیده می‌شود . برای سهولت ، غالباً به مطالعهٔ مورد یک‌بسته موج یک‌بعدی* ، کـه ازبر هم نهش امواج تختی که همگی به موازات Ox منتشر می‌شوند ، هدایت خواهیم شد . دراین صورت تابع موج فقط به x و t بستگی دارد :

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k)\, e^{i[kx - \omega(k)t]}\, dk \qquad (\quad -۷)$$

---

* یک مدل‌ساده ازبسته موج دوبعدی درمکمل E_1 ارائه شده‌است ، بعضی از خواص عمومی بسته موج‌های سه‌بعدی درمکمل F_1 مطالعه شده‌اند ، این‌مکمل‌همچنین‌نشان‌می‌دهدکه چگونه دربعضی موارد ، یک مساله‌ٔسه‌بعدی‌می‌تواند به‌چندین‌مسا‌ئله‌ٔیک‌بعدی‌تقلیل یابد .

در بخش آینده، شکل بسته موج در یک لحظه معین مورد توجه ما خواهد بود. اگر این لحظه را به عنوان مبداء زمان انتخاب کنیم، تابع موج بصورت زیر نوشته می‌شود:

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k)\, e^{ikx}\, dk \qquad (C-۸)$$

می‌بینیم که $g(k)$ همان تبدیل فوریهٔ (رک پیوست ۱) تابع $\psi(x, 0)$ است:

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \psi(x, 0)\, e^{-ikx}\, dx \qquad (C-۹)$$

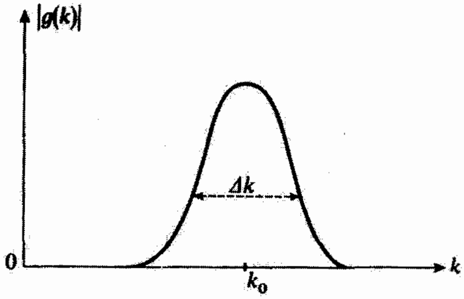
در نتیجه، اعتبار فرمول (۸ــ C) به مورد ذرهٔ آزاد محدود نمی‌شود: پتانسیل هرچه باشد، $\psi(x, 0)$ همواره می‌تواند به‌این صورت نوشته شود. بنابراین، نتایجی راکه از این مطلب در بخشهای ۲ و ۳ در زیر استنتاج خواهیم کرد کاملا" عمومی هستند. در بخش ۴ به‌طور صریح به‌ذرهٔ آزاد خواهیم پرداخت.

گوشزد:

یک موج تخت از نوع (۲ــ C)، که قدر مطلق آن در تمام فضا ثابت است [رک (۵ــ C)]، مجذورا" انتگرال‌پذیر نیست. لذا، این موج‌نمی‌تواند به طور دقیق، معرف یک حالت فیزیکی ذره باشد (به‌همان‌طریقی‌که، در اپتیک، یک موج تخت تکرنگ از نظر فیزیکی تحقق پذیر نیست). ازطرف دیگر، یک برهم نهش از امواج تخت، مانند (۷ــ C)، می‌تواند مجذورا" انتگرال‌پذیر باشد.

۲ــ شکل بسته موج در یک زمان معین

شکل بستهٔ موج توسط قسمت وابسته به x تابع $\psi(x, 0)$، که با معادلهٔ (۸ــ C) تعریف می‌شود، داده می‌شود. تصور کنید که منحنی $|g(k)|$ به‌صورتی که در شکل ۳ ترسیم شده است باشد. یعنی، دارای یک قلهٔ بارز واقع در $k = k_0$ و پهنای Δk (که به عنوان مثال، در نصف مقدار ماگزیممش تعریف می‌شود) می‌باشد.



شکل ۳.
شکل تابع $|g(k)|$ [مدول تبدیل فوریهٔ $\psi(x,0)$]: فرض می‌کنیم که در $k = k_0$ ، جایی‌که ماگزیمم می‌شود ، متمرکزبوده ودارای‌پهنای Δk باشد.

ابتدا سعی می‌کنیم از طریق ، مطالعهٔ یک مورد خاص بسیار ساده ، رفتار $\psi(x,0)$ را به طور کیفی بفهمیم . فرض کنید که $\psi(x,0)$ به جـای اینکه مانند فرمول (۸ — C) بـر هم نهش تعداد بی‌نهایت موج تخت e^{ikx} باشد مجموع فقط سه موج تخت باشد. بردارهای موجی این امواج تخت عبارتند از k_0 ، $k_0 - \frac{\Delta k}{2}, k_0 + \frac{\Delta k}{2}$ ، ودامنه‌هایشان به ترتیـب متناسبند با ۱ ، $\frac{1}{2}$ و $\frac{1}{2}$. دراین صورت داریم :

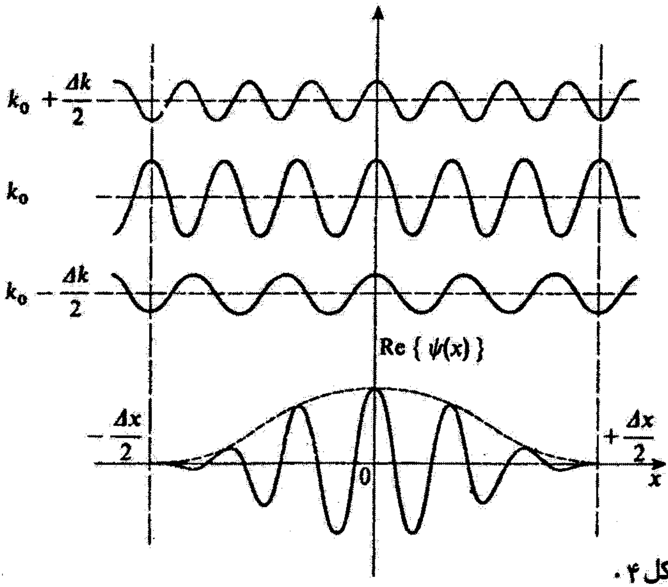
$$\psi(x) = \frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}}\left[e^{ik_0x} + \frac{1}{2}e^{i\left(k_0 - \frac{\Delta k}{2}\right)x} + \frac{1}{2}e^{i\left(k_0 + \frac{\Delta k}{2}\right)x}\right] \qquad (C-10)$$
$$= \frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}}\, e^{ik_0x}\left[1 + \cos\left(\frac{\Delta k}{2}x\right)\right]$$

ملاحظه می‌کنیم که وقتی $x = 0$ باشد ، $|\psi(x)|$ ماگزیمم است . این نتیجـه‌ناشی ازین حقیقت است که ، وقتی x این مقدار را بگیرد ، سه موج هم فاز بوده و ، همانطوری‌که در شکل ۴ نشان داده شده است ، به طور سازنده تداخل می‌کنند . هرچه از مقدار $x = 0$ دورتر می‌شویم ، امواج بیشتر و بیشتر از همفازی خارج شده و $|\psi(x)|$ کاهش می‌یابـد . وقتی اختلاف فاز بین e^{ik_0x} و $e^{i(k_0 \pm \Delta k/2)x}$ برابر $\pm\pi$ شود تداخل کاملا" ویرانگر می‌شود . وقتی $x = \pm\frac{\Delta x}{2}$ شود ، که Δx توسط ،

$$\Delta x \,.\, \Delta k = 4\pi \qquad (C-11)$$

داده می‌شود ، $\psi(x)$ بسمت صفر میل می‌کند. این فرمول نشان می‌دهد که هرچه‌پهنای Δk ی تابع $|g(k)|$ کوچکتر باشد ، پهنای Δx تابع $|\psi(x)|$ (فاصلهٔ بین دوصفر $|\psi(x)|$) بزرگتـر

خواهد شد .



شکل ۴ .

قسمت‌های حقیقی سه موج که مجموع‌آنها تابع $\psi(x)$ (۱۰ـ C) را به دست‌می‌دهد . در $x = 0$ ، سه‌موج هم‌فازبوده وبطورسازنده‌تداخل می‌کنند . وقتی از $x = 0$ دور می‌شویم از همفازی خارج می‌شوند وبه ازاء $x = \pm \Delta x/2$ به‌طور ویرانگری تداخل می‌کنند .

در قسمت پائین شکل ، قسمت حقیقی $\{\psi(x)\}$ نشان داده شده است . منحنی خط‌چین مربوط‌است به‌تابع $\left[1+\cos\left(\frac{\Delta k}{2}x\right)\right]$ ، که بنابر (۱۰ ـ C) ، $|\psi(x)|$ (وازاین رو ، شکل بسته موج) را می‌دهد .

گوشزد :

فرمول (۱۰ ـ C) نشان می‌دهد که $\psi(x)$ نسبت به x تناوبی است و بنابراین دارای یک رشته ماگزیمم‌ها ومی‌نیممها ست . این امرازاین‌حقیقت ناشی می‌شود که $|\psi(x)|$ برهم نهش تعداد محدودی موج (دراینجا ، سه موج) است . برای یک برهم نهش پیوسته‌ازتعداد بی‌نهایت موج ، نظیر فرمول (۸ ـ C) ، چنین پدیده‌ای اتفاق نمی‌افتد ، و $|\psi(x, 0)|$ می‌تواند فقط یک ماگزیمم داشته باشد .

حال به‌بسته موج عمومی فرمول (C — ۸) بر می‌گردیم . شکل آن نیز از یک‌پدیده تداخل حاصل می‌شود : $|\psi(x, 0)|$ هنگامی ماگزیمم است که امـواج تخت مختلف بـه‌طـور سازنده تداخل کنند .

فرض کنیدکه $\alpha(k)$ شناسهٔ تابع $g(k)$ باشد :

$$g(k) = |g(k)|\, e^{i\alpha(k)} \qquad (C-۱۲)$$

هم چنین فرض کنید که در داخـل بازهٔ $\left[k_0 - \frac{\Delta k}{2}, k_0 + \frac{\Delta k}{2}\right]$ که درآن $|g(k)|$ مقدار قابل ملاحظه‌ای دارد ، $\alpha(k)$ به حد کافی آرام تغییرکند ، دراین صورت وقتی به‌قدرکافی‌کوچک باشد ، می‌توان $\alpha(k)$ را در مجاورت $k = k_0$ بسط داد :

$$\alpha(k) \simeq \alpha(k_0) + (k - k_0)\left[\frac{d\alpha}{dk}\right]_{k=k_0} \qquad (C-۱۳)$$

که مارا قادر می‌سازد تا (C — ۸) را به صورت زیر بازنویسی کنیم :

$$\psi(x, 0) \simeq \frac{e^{i[k_0 x + \alpha(k_0)]}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} |g(k)|\, e^{i(k-k_0)(x-x_0)}\, dk \qquad (C-۱۴)$$

که درآن

$$x_0 = -\left[\frac{d\alpha}{dk}\right]_{k=k_0} \qquad (C-۱۵)$$

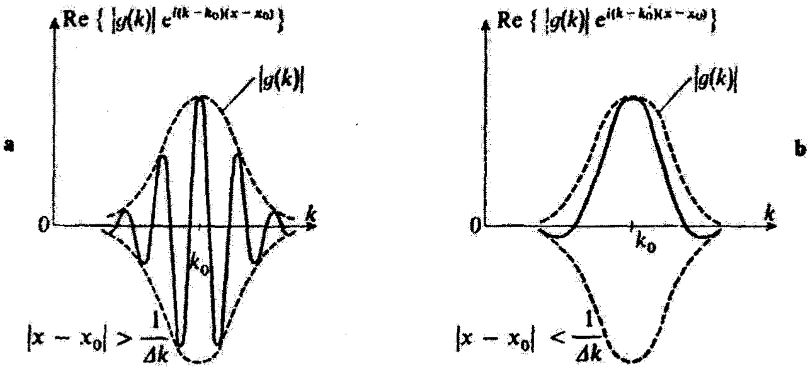
شکل (C — ۱۴) برای مطالعهٔ تغییرات $|\psi(x, 0)|$ برحسب x مفید است . وقتی $|x - x_0|$ بزرگ باشد ، تابع k که باید ازآن انتگرال گرفته شود ، تعداد بسیار زیـادی نوسان در داخل بازهٔ Δk انجام می‌دهد . سپس ملاحظه می‌کنیم (ر ک شکل a — ۵ کـه قسمت حقیقی این تابع درآن رسم شده است) که نوسانـات پی‌درپی اثر یکدیگر را خنثی می‌کنند ، و انتگرال روی k قابل اغماض می‌شود . به‌عبارت دیگر ، وقتی x دور از x_0 درنظر گرفته شود ، فازهای امواج مختلفی کـه $\psi(x, 0)$ را می‌سازند در محدودهٔ Δk بسیـار سریع تغییر می‌کنند ، واین امواج بـا تداخل یکدیگر را منهدم‌می‌کنند . از طرف دیگر، اگر $x \simeq x_0$ باشد ، تابعی که باید ازآن روی k انتگرال‌گیری شود به ندرت نوسان می‌کنـد (ر ک شکل b — ۵) ، و $|\psi(x, 0)|$ ماگزیمم است .

بنابراین ، مکان مرکز بسته موج ، $x_M(0)$ ، عبارت است از :

$$x_M(0) = x_0 = -\left[\frac{d\alpha}{dk}\right]_{k=k_0} \qquad (C-۱۶)$$

این مکان را با تصریح اینکه فازهای امواج مختلفی که $\psi(x, 0)$ را می‌سازند در محدودهٔ

Δk تغییرات بسیار ناچیزی دارند ، به‌دست آورده‌ایم (شرط "فاز مانا ") .



شکل ۵ .

تغییرات تابعی که باید ، برای به‌دست‌آوردن $\psi(x,0)$ ، روی k ازآن انتگرال گرفت ، نسبت به k . درشکل (a) ، مقدار x چنـــان انتخاب شده‌است که $|x-x_0| > 1/\Delta k$ ، وتابعی کـه باید ازآن‌انتگرال گرفته شود چندین‌بار در بازهٔ Δk نوسان می‌کند . درشکل (b) . مقــدار x طوری انتخاب شده‌است که $|x-x_0| < 1/\Delta k$ و تابعی‌که باید از آن انتگرال‌گیری شود بسختی نوسان می‌کند ، به‌طوری که انتگرال آن‌روی k یک مقدار نسبتا" بزرگی می‌شود . درنتیجه ، مرکز بسته موج [نقطــه‌ای که $|\psi(x,0)|$ ماگزیمم است] در $x = x_0$ واقع شده است .

وقتی x از مقدار x_0 دور شود ، $|\psi(x,0)|$ کاهش می‌یابد . اگر وقتی که k محدودهٔ Δk را طی می‌کند $e^{i(k-k_0)(x-x_0)}$ تقریبا" یک بار نوسان کند ، یعنی ، اگرداشته باشیم :

$$\Delta k \,.\, (x - x_0) \simeq 1 \qquad (C-۱۷)$$

این‌کاهش قابل ملاحظه می‌شود . بنابراین اگر Δx پهنای تقریبی بسته موج باشد ، داریم :

$$\Delta k \,.\, \Delta x \gtrsim 1 \qquad (C-۱۸)$$

بدین ترتیب به یک رابطهٔ کلاسیکی بین پهناهــای دوتابع که تبدیــلات فوریــهٔ یکدیگرند ، برگشته‌ایم . واقعیت مهم این است کـه حاصلضرب $\Delta x \,.\, \Delta k$ دارای یک حــد

پائینی است ، مقدار دقیق این حد ، به‌وضوح به‌تعریف دقیق پهناهای Δx و Δk بستگی دارد .

بنابراین ، یک بسته موج نظیر (۷ ـ C) معرف حالت ذره‌ای است که احتمال حضورآن ، درزمان $t = 0$ ، عملاً " درخارج بازه‌ای که پهنای تقریبی ان Δx بوده و در مقدار x_0 متمرکز است ، صفر است .

گوشزد :

استدلال قبل می‌تواند مارا به این اعتقاد هدایت کند که حاصلضرب $\Delta x . \Delta k$ همواره از مرتبه ۱ است [ر ک (۱۷ ـ C)] . روی این واقعیت تاءکید می‌کنیم‌که این یک حد پائینی است . با وجودی که غیرممکن است بتوان بسته موجهایی ساخت که برای انها حاصلضرب $\Delta x . \Delta k$ درمقابل ۱ قابل اغماض باشد ، ولی کاملاً " ممکن است بسته هایی بسازیم که برای انها این حاصلضرب تا هرحد دلخواهی بزرگ باشد [ر ک ، به عنوان مثال ، به‌مکمل G_1 بخصوص تذکر (*ii*) از بخش C ـ ۳] ، به این دلیل است که (۱۸ ـ C)به‌صورت یک نامساوی نوشته شده است .

۳ ـ رابطهٔ عدم قطعیت هایزنبرگ

در مکانیک‌کوانتومی ، نامساوی (۱۸ـ C) نتایج فیزیکی‌فوق العاده مهمی به‌همراه دارد . اینک قصد داریم که آنها را مورد بحث قرار دهیم (برای سهولت ، در چار چوب یک مدل یک بعدی خواهیم ماند) .

دیدیم که یک موج تخت $e^{i(k_0x-\omega_0t)}$ متناظر است با یک چگالی احتمال ثابت برای حضور ذره در طول محور Ox ، برای تمام مقادیر t . این نتیجه می‌تواندتقریباً " این طور بیان شود که بگوئیم مقدار Δx متناظر بینهایت است . از طرف دیگر ، فقط یک فرکانس زاویه‌ای ω_0 و یک بردار موجی k_0 وارد می‌شود . بنابر روابط دوبروی ، این مطلب بدان معنی است که انرژی و تکانه ذره کاملاً " معین هستند : $E = \hbar\omega_0$ و $p = \hbar k_0$ بعلاوه ، یک‌چنین موج تختی می‌تواند مورد خاصی از (۷ ـ C) ، که برای‌آن $g(k)$ یک "تابع دلتا" (پیوست ۲)است .

$$g(k) = \delta(k - k_0) \qquad (C-۱۹)$$

در نظر گرفته شود. دراین صورت مقدار Δk ی متناظر صفر است.

اما این ویژگی می‌تواند، با استفاده از اصل تجزیهٔ طیفی (ر ک بخش‌های ۳ـA و ۲ ـ B)، به روش زیر نیز تعبیر شود. وقتی می‌گوئیم ذره‌ای، که در زمان $t = 0$ توسط تابع موج $\psi(x, 0) = A\,e^{ikx}$ تشریح شده است، یک تکانه کاملاً" معین دارد، مانند این است که بگوئیم اندازه‌گیری تکانه دراین زمان یقیناً" مقدار $p = \hbar k$ راخواهد داد. ازین مطلب نتیجه می‌گیریم که e^{ikx} ویژه حالت متناظر با $p = \hbar k$ را مشخص می‌کند. چون برای هرمقدار حقیقی k یک موج تخت وجود دارد، ویژه مقدارهایی را که‌در یک اندازه‌گیری تکانهٔ یک حالت دلخواه می‌توان انتظار به دست آوردن آنها را داشت تمام مقادیر حقیقی را شامل می‌شوند. دراین مورد، کوانتشی برای نتایج ممکنه وجود ندارد: نظیر مکانیک کلاسیک، تمام مقادیر تکانه مجازند.

حال فرمول (C ـ ۸) را در نظر بگیرید. در این فرمول $\psi(x, 0)$ به صورت برهم‌نهشی خطی از ویژه تابعهایی تکانه است که درآن ضریب e^{ikx} عبارت‌است‌از $g(k)$، بدین ترتیب به این امر سوق داده می‌شویم که اگر در $t = 0$، تکانه ذره‌ای که حالت آن توسط $\psi(x, t)$ توصیف می‌شود اندازه‌گیری شود، $|g(k)|^2$ را (باتقریب یک ضریب ثابت) به عنوان احتمال یافتن $p = \hbar k$ تعبیر کنیم. در واقع، مقادیر ممکن p، مانند مقادیر x، یک مجموعهٔ پیوسته تشکیل می‌دهند، و $|g(k)|^2$ متناسب است با یک چگالی احتمال: احتمال $\overline{d\mathscr{P}}(k)$ برای یافتن مقداری بین $\hbar k$ و $\hbar(k+dk)$ باتقریب یک ضریب ثابت، برابر است با $|g(k)|^2\,dk$. به طور دقیق‌تر، اگر فرمول (C ـ ۸) را به‌صورت:

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \bar{\psi}(p)\, e^{ipx/\hbar}\, dp \qquad (C-۲۰)$$

بازنویسی کنیم، می‌دانیم‌که $\bar{\psi}(p)$ و $\psi(x, 0)$ دررابطهٔ بسل ـ پارسوال (پیوست ۱):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, 0)|^2\, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\bar{\psi}(p)|^2\, dp \qquad (C-۲۱)$$

صدق می‌کنند. اگر مقدار مشترک این انتگرالها C باشد، $d\mathscr{P}(x) = \frac{1}{C}|\psi(x, 0)|^2\, dx$ عبارت است از احتمال اینکه ذره، در $t = 0$، بین x و $x + dx$ باشد. به‌همین‌طریق:

$$\overline{d\mathscr{P}}(p) = \frac{1}{C} |\bar{\psi}(p)|^2\, dp \qquad (C-۲۲)$$

عبارت است از احتمال اینکه اندازه‌گیری تکانه نتیجه‌ای بین p و $p + dp$ به‌دست دهد [سپس رابطهٔ (C — ۲۱) تضمین می‌کند که احتمال کل یافتن یک‌مقدار غیر مشخص ، در واقع ، برابر است با ۱] .

حال به نامساوی (C — ۱۸) بر می‌گردیم . می‌توانیم آنرا به صورت زیر بنویسیم :

$$\Delta x \cdot \Delta p \gtrsim \hbar \qquad (C-۲۳)$$

($\Delta p = \hbar \Delta k$ پهنای منحنی $|\overline{\psi}(p)|$ است) . ذره‌ای را در نظر بگیرید که حالت آن توسط بسته موج (C — ۲۰) تعریف شده باشد . می‌دانیم که احتمال مکانی آن در $t = 0$ ، فقط در داخل ناحیه‌ای به پهنای Δx حول x_0 دارای مقدار قابل ملاحظه‌ای است ؛ مکان آن با عدم قطعیت Δx معلوم است . اگر در همان زمان تکانهٔ این ذره اندازه‌گیری شود ، مقداری بین $p_0 + \frac{\Delta p}{2}$ و $p_0 - \frac{\Delta p}{2}$ به دست خواهد آمد ، زیرا $|\overline{\psi}(p)|^2$ عملاً" در خارج این بازه صفر است .

بنابراین عدم قطعیت در اندازه حرکت Δp است . لذا تعبیر رابطهٔ (C—۲۳) به شرح زیر است ؛ غیر ممکن است که در یک زمان معین هم مکان ذره و هم تکانهٔ آن ، هردو ، با درجهٔ دقت دلخواهی تعیین شوند . وقتی به‌حد پائینی که توسط (C — ۲۳) تحمیل می‌شود رسیدیم ، افزایش دقت در مکان (کاهش Δx) می‌رساند که دقت در تکانه کم می‌شود (Δp افزایش می‌یابد) ، و بالعکس. این رابطه ، رابطهٔ عدم قطعیت هایزنبرگ نامیده می‌شود .

ما چیزی ازین نوع در مکانیک کلاسیک نمی‌شناسیم . محدودیتی که توسط (C—۲۳) بیان شده‌است ازین حقیقت ناشی می‌شود که h صفر نیست . همین‌کوچکی مقدار h در مقیاس ماکروسکوپیکی است که این محدودیت را به طور کامل در مکانیک کلاسیک قابل اغماض می‌کند (در مکمل B_I یک مثال به طور مفصل مورد بحث قرار گرفته است) .

گوشزد :

نامساوی (C — ۱۸) که با آن شروع کردیم ، ذاتاً" یک اصل مکانیک کوانتومی نیست ، بلکه صرفاً" بیانگر یک خاصیت عمومی از تبدیلات فوریه است ، که کاربردهای متعدد آن را می‌توان در فیزیک کلاسیک یافت . به‌عنوان مثال ، ازنظریهٔ الکترومغناطیس می‌دانیم‌که هیچ قطاری از امواج الکترومغناطیسی

وجود نداردکه بتوان برای آن دریک زمان ، مکان و طول موج را بادقت نامحدودی تعریف‌کرد . مکانیک کوانتومی وقتی وارد می‌شودکه به‌هرذره مادی‌یک‌موج وابسته کرده و بخواهیم طول موج و تکانهٔ آن در رابطهٔ دوبروی صدق کنند .

۴ ـ تحول زمانی یک بسته موج آزاد

تاکنون ، فقط به شکل یک بسته موج در یک لحظهٔ معین پرداخته‌ایم ، در این بخش می‌خواهیم تحول زمانی انرا مطالعه کنیم . لذا ، به مورد یک ذرهٔ آزاد که‌حالت‌آن توسط بسته موج یک بعدی (C ـ ۷) توصیف شده است ، برمی‌گردیم .

یک موج تخت معین $e^{i(kx-\omega t)}$ با سرعت :

$$V_\varphi(k)=\frac{\omega}{k} \qquad (C-24)$$

در امتداد محور Ox انتشار می‌یابد زیرا تنها از طریق $\left(x-\frac{\omega}{k}t\right)$ به x و t بستگی‌دارد ، $V_\varphi(k)$ سرعت فاز موج تخت نامیده می‌شود .

می‌دانیم که برای یک موج الکترومغناطیسی که در خلاء انتشار می‌یابد ، V_φ مستقل از k بوده و برابر است با سرعت نور c . تمام امواجی که بسته موج را می‌سازند باهمان سرعت حرکت می‌کنند به طوری که بسته نیز یکجا با همان سرعت حرکت می‌کند ، بدون اینکه تغییرشکل یابد . از طرف دیگر ، می‌دانیم که در یک محیط پاشنده ، که سرعت فاز توسط رابطهٔ :

$$V_\varphi(k)=\frac{c}{n(k)} \qquad (C-25)$$

داده می‌شود ، این مطلب درست نیست : که $n(k)$ شاخص محیط است‌که باطول‌موج تغییر می‌کند .

موردی را که دراینجا بررسی می‌کنیم مربوط به یک محیط پاشنده است ، زیرا سرعت فاز برابر است با [رک معادلهٔ (C ـ ۳)] :

$$V_\varphi(k)=\frac{\hbar k}{2m} \qquad (C-26)$$

خواهیم دید که وقتی امواج مختلف سرعتهای فاز نا برابر داشته باشند ، سرعت نقطه x_M ، ماگزیمم بسته موج ، برخلاف آنچه ممکن است انتظار رود ، برابر با سرعت فاز میانگین $\frac{\omega_0}{k_0}=\frac{\hbar k_0}{2m}$ نیست .

مانند گذشته، ابتدا سعی خواهیم کرد، قبل از انتخاب یک دیگاه عمومی‌تر، به طور کیفی بفهمیم چه اتفاق می‌افتد. بنا براین، به برهم نهش سه موج بررسی شده در بخش ۲ـC بر می‌گردیم. برای یک مقدار دلخواه t، $\psi(x, t)$ توسط رابطهٔ زیر داده می‌شود:

$$\psi(x, t) = \frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}}\left\{ e^{i[k_0 x - \omega_0 t]} + \frac{1}{2} e^{i\left[\left(k_0 - \frac{\Delta k}{2}\right)x - \left(\omega_0 - \frac{\Delta\omega}{2}\right)t\right]} + \frac{1}{2} e^{i\left[\left(k_0 + \frac{\Delta k}{2}\right)x - \left(\omega_0 + \frac{\Delta\omega}{2}\right)t\right]}\right\}$$

$$= \frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}} e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}\left[1 + \cos\left(\frac{\Delta k}{2}x - \frac{\Delta\omega}{2}t\right)\right] \qquad (\text{C}-۲۷)$$

بنابراین، می‌بینیم که ماگزیمم $|\psi(x, t)|$، که در زمان $t = 0$ در $x = 0$ بود، اکنون در نقطهٔ:

$$x_M(t) = \frac{\Delta\omega}{\Delta k}t \qquad (\text{C}-۲۸)$$

است نه در نقطهٔ $x = \frac{\omega_0}{k_0}t$. منشاء فیزیکی این نتیجه در شکل ۶ ظاهر می‌شود. قسمت (a) ی این شکل مکان سه ماگزیمم مجاور (۱)، (۲)، (۳) را در زمان $t = 0$، برای قسمتهای حقیقی هریک از سه موج، نشان می‌دهد. چون ماگزیمم‌های نشان داده شده با شاخص (۲) درنقطه $x = 0$ برهم منطبقند، دراین نقطه تداخل سازنده وجود دارد، که از نیرو متناظراست با مکان ماگزیمم $|\psi(x, 0)|$. چون سرعت‌فاز با k افزایش می‌یابد [فرمول (C ـ ۲۶)]، ماگزیمم (۳)ی موج $\left(k_0 + \frac{\Delta k}{2}\right)$ به‌تدریج به‌ماگزیمم موج (k_0) خواهد رسید، که این موج به‌نوبهٔ خود به‌ماگزیمم موج $\left(k_0 - \frac{\Delta k}{2}\right)$ خواهد رسید بدین ترتیب پس از مدت معینی وضعیتی را خواهیم داشت که در شکل (b ـ ۶) نشان داده شده است: ماگزیمم‌های (۳) خواهند بود که برهم منطبق شده و در نتیجه مکان ماگزیمم $|\psi(x, t)|$ یعنی $x_M(t)$ را تعیین می‌کند. از شکل بوضوح دیده می‌شود که $x_M(t)$ برابر با $\frac{\omega_0}{k_0}t$ نیست، و یک محاسبه ساده بار دیگر (C ـ ۲۸) را به دست می‌دهد.

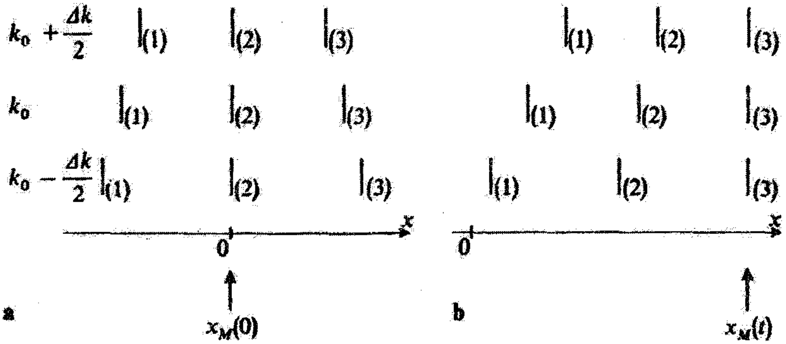
تغییر مکان مرکز بسته موج (C ـ ۷) می‌تواند، بااعمال روش "فاز مانا" به‌طریق مشابهی پیدا شود. از شکل (C ـ ۷) برای بسته موج آزاد می‌توان دیدکه، برای اینکه از $\psi(x, 0)$ به $\psi(x, t)$ برویم، کافی است $g(k)$ را به $g(k)\, e^{-i\omega(k)t}$ تبدیل کنیم. بنابراین استدلال بخش ۲ ـ C معتبر باقی می‌ماند، به شرط اینکه شناسهٔ $\alpha(k)$ ی $g(k)$

را با :

$$\alpha(k) - \omega(k)t \qquad (C-۲۹)$$

جایگزین کنیم . دراین صورت شرط (۱۶ــ C) می‌دهد :

$$x_M(t) = \left[\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right]_{k=k_0} t - \left[\frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}k}\right]_{k=k_0} \qquad (C-۳۰)$$



شکل ۶ .

مکانهای ماگزیمم های سه موج شکل ۴ درزمان $t = 0$ (شکل a) و درزمان بعدی t (شکل b) . در زمان $t = 0$ ، ماگزیمم‌های (۲) ، واقع در $x = 0$ ، هستند که تداخل سازنده دارند ؛ مکان مرکز بسته موج در $x_M(0) = 0$ قرار دارد ، در زمان t ، سه موج با سرعت فازهای مختلف v_φ جلو می‌روند ، دراین صورت ماگزیممهای (۳) هستند ، که تداخل سازنده دارند ومرکز بسته موج در $x = x_M(t)$ قرار دارد . بنابراین ملاحظه می‌کنیم که سرعت مرکز بسته موج (سرعت گروه) با سرعت فازهای سه موج فرق دارد .

بدین ترتیب به نتیجه (۲۸ ــ C) می‌رسیم : سرعت نقطه ماگزیمم بسته موج عبارت است از :

$$V_G(k_0) = \left[\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right]_{k=k_0} \qquad (C-۳۱)$$

$V_G(k_0)$ سرعت گروه بسته موج نامیده می‌شود . با توجه به رابطهٔ پاشیدگی داده شده

در (C-۳) ،خواهیم داشت :

$$V_G(k_0) = \frac{\hbar k_0}{m} = 2V_\varphi(k_0) \qquad (C-۳۲)$$

این نتیجه مهم است زیرا ، به ما امکان می‌دهد تا مجددا " توصیف کلاسیکی ذرهٔ آزاد را ، برای مواردی که این توصیف معتبراست ، به‌دست آوریم . به عنوان مثال ، وقتی با یک ذرهٔ ماکروسکوپیکی سروکار داریم (و مثال ذرهٔ غباری که درمکمل B_I بحث می‌شود نشان می‌دهد که تاچه حد می‌تواند کوچک باشد) ، رابطهٔ عدم قطعیت در دقتی که با ان مکان و تکانه ذره‌را می‌دانیم محدودیت قابل مشاهده‌ای مطرح نمی‌کند . این‌مطلب بدان معنی است که ، برای تشریح چنین ذره‌ای به‌روش مکانیک کوانتومی ، می‌توانیم بسته موجی بسازیم که پهناهای مشخصهٔ Δx و Δp ی آن قابل اغماض باشد . در این صورت ، از مکان $x_M(t)$ و تکانه p_0 ذره به زبان کلاسیک صحبت خواهیم کرد . اما در این حال سرعت ذره باید $v = \frac{p_0}{m}$ باشد ، این مطلب در واقع همان چیزی است که از فرمول (C-۳۲)که در توصیف کوانتومی به دست آمده‌است ، استنباط می‌شود : در مواردی که Δx و Δp هردو بتوانندقابل اغماض باشند ، ماگزیمم بسته موج مانند ذره‌ای حرکت خواهد کرد که از قوانین مکانیک کلاسیک پیروی می‌کند .

گوشزد :

ما دراینجا حرکت مرکز بسته موج آزاد را مورد تاکید قرار داده‌ایم . هم‌چنین امکان دارد طریقهٔ تحول شکل آن نسبت به زمان را مورد مطالعه قرار دهیم ، در این صورت به آسانی می‌توان نشان داد که ، اگر پهنای Δp یک‌ثابت‌حرکت باشد ، Δx با زمان تغییر می‌کند ، و برای زمانهای به حدکافی طولانی ، به طور نامحدود افزایش می‌یابد (گسترش بسته موج) ،بحث دربارهٔ این پدیده در مکمل G_I ، که مورد خاص یک بسته موج گاوسی بررسی می‌شود ، آمده است .

D . ذره دریک پتانسیل نرده‌ای مستقل از زمان

در بخش C دیدیم که چگونه ، وقتی بتوان ثابت پلانک h را قابل اغماض‌تلقی کرد ، توصیف مکانیک کوانتومی یک ذره به توصیف کلاسیکی تقلیل می‌یابد . در تقریب کلاسیک ، جنبهٔ موجی ظاهر نمی‌شود زیرا طول موج $\lambda = \frac{h}{p}$ وابسته به ذرهٔ از طولهای

مشخصهٔ حرکت آن بسیار کوچکتر است . این وضعیت مشابه وضعیتی است‌که دراپتیک با آن مواجه می‌شویم . اپتیک هندسی ، که ازخواص موجی نورصرفنظر می‌کند ، وقتی بتوان ازطول موج مربوطه درمقابل طولهائی‌که با آنها مواجهیم صرفنظر کنیم تقریب خوبی است . بنابر این مکانیک کلاسیک نسبت به‌مکانیک کوانتومی همان نقشی را ایفا می‌کند که اپتیک هندسی در مقابل اپتیک موجی .

دراین بخش می‌خواهیم به ذره‌ای که دریک پتانسیل مستقل از زمان قرار دارد بپردازیم . آنچه در بالا گفته شد می‌رساند که آثار نوعا "کوانتومی (یعنی آنهائی که منشاء موجی دارند) وقتی باید بروزکنندکه پتانسیل در فواصل‌کوتاهتر از طول موج به‌طور قابل ملاحظه‌ای تغییرکند ، که دراین صورت نمی‌توان ازآن صرفنظر کرد . به این دلیل است که می‌خواهیم رفتار یک‌ذرهٔ‌کوانتومی واقع در "پتانسیلهای مربعی "مختلف ، یعنی "پتانسیلهای پله‌ای" ، نظیر آنچه درشکل a ــ۷ نشان داده شده است ، را مطالعه کنیم . یک چنین پتانسیلی ، که ناپیوسته است ، به‌وضوح در فواصلی ازمرتبهٔ طول موج ، هرقدر هم کوچک باشد ، به‌طور قابل ملاحظه‌ای تغییر می‌کند ؛ ازاین رو آثارکوانتومی همواره بایدظاهرشوند . قبل از پرداختن به‌این بررسی ، بعضی از خواص مهم معادلهٔ شرودینگر را وقتی‌که پتانسیل وابسته به‌زمان نباشد مورد بحث قرار می‌دهیم .

۱ ــ جداکردن متغیرها . حالتهای مانا

تابع موج ذره‌ای که انرژی پتانسیل $V(\mathbf{r})$ آن وابسته به‌زمان نباشد بایددرمعادله شرودینگر زیر صدق کند :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\, \psi(\mathbf{r}, t) \qquad (\mathrm{D}-1)$$

a ـ وجود حالتهای مانا :

به‌بینیم آیا برای این معادله جوابهایی به‌صورت زیر وجود دارد :

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r})\, \chi(t) \qquad (\mathrm{D}-2)$$

با قرار دادن (D ــ ۲) در (D ــ ۱) خواهیم داشت :

$$i\hbar\, \varphi(\mathbf{r}) \frac{\mathrm{d}\chi(t)}{\mathrm{d}t} = \chi(t)\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\varphi(\mathbf{r})\right] + \chi(t)\, V(\mathbf{r})\, \varphi(\mathbf{r}) \qquad (\mathrm{D}-3)$$

اگر طرفین این رابطه را بر حاصلضرب $\varphi(\mathbf{r})\chi(t)$ تقسیم کنیم داریم :

$$\frac{i\hbar}{\chi(t)}\frac{\mathrm{d}\chi(t)}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\varphi(\mathbf{r})}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(\mathbf{r})\right]+V(\mathbf{r}) \qquad (\mathrm{D}-۴)$$

این معادله یک تابع را که فقط به t بستگی دارد (طرف چپ) با تابع دیگری که فقط به $\mathbf{r}$ بستگی دارد (طرف راست) باهم برابر قرار می‌دهد . این برابری تنها وقتی ممکن است که هرکدام ازین توابع در واقع یک مقدار ثابت باشد ، ما این مقدار ثابت را برابر با $\hbar\omega$ ، که درآن ω دارای دیمانسیون فرکانس زاویه‌ای است ، قرار می‌دهیم .

بامساوی قراردادن طرف چپ با $\hbar\omega$ ، یک معادلهٔ دیفرانسیل برای $\chi(t)$ به‌دست می‌آید که به‌سادگی قابل انتگرال‌گیری بوده و نتیجه می‌دهد :

$$\chi(t)=A\,\mathrm{e}^{-i\omega t} \qquad (\mathrm{D}-۵)$$

به همین طریق ، $\varphi(\mathbf{r})$ باید در معادلهٔ زیر صدق کند :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(\mathbf{r})+V(\mathbf{r})\,\varphi(\mathbf{r})=\hbar\omega\,\varphi(\mathbf{r}) \qquad (\mathrm{D}-۶)$$

اگر در معادلهٔ (D ـ ۵) قراردهیم $A=1$ [که ، به‌عنوان‌مثال ، وقتی‌امکان‌پذیراست‌که ثابت A را در $\varphi(\mathbf{r})$ منظور داریم] ، نتیجهٔ زیر حاصل می‌شود : تابع

$$\psi(\mathbf{r},t)=\varphi(\mathbf{r})\,\mathrm{e}^{-i\omega t} \qquad (\mathrm{D}-۷)$$

به‌این شرط جواب معادلهٔ شرودینگراست که $\varphi(\mathbf{r})$ جواب معادلهٔ (D ـ ۶) باشد . به‌این ترتیب می‌گوئیم که متغیرهای زمانی و فضایی جدا شده‌اند .

یک تابع موج از نوع (D ـ ۷) یک جواب مانای معادلهٔ شرودینگر نامیده می‌شود : این جواب به یک چگالی احتمال مستقل از زمان $|\psi(\mathbf{r},t)|^2=|\varphi(\mathbf{r})|^2$ منجر می‌شود . دریک تابع مانافقط یک فرکانس زاویه‌ای ω ظاهر می‌شود ، بنابرروابط پلانک ـ اینشتن ، یک حالت مانا حالتی‌است بایک انرژی کاملا" معین $E=\hbar\omega$ (ویژه حالت‌انرژی) . درمکانیک کلاسیک ، وقتی انرژی پتانسیل مستقل از زمان باشد ، انرژی‌کل یک پایای‌حرکت است ، در کوانتومی ، حالت‌های با انرژی کاملا" معینی وجود دارد .

بنابراین معادلهٔ (D ـ ۶) می‌تواند به‌صورت :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V(\mathbf{r})\right]\varphi(\mathbf{r})=E\,\varphi(\mathbf{r}) \qquad (\mathrm{D}-۸)$$

یا :

$$\boxed{H\,\varphi(\mathbf{r}) = E\,\varphi(\mathbf{r})} \qquad (\mathrm{D}-۹)$$

نوشته شود که H عملگرد دیفرانسیلی زیر است :

$$\boxed{H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r})} \qquad (\mathrm{D}-۱۰)$$

H یک عملگر خطی است زیرا ، اگر λ_1 و λ_2 مقادیر ثابتی باشند ، داریم :

$$H[\lambda_1\varphi_1(\mathbf{r}) + \lambda_2\varphi_2(\mathbf{r})] = \lambda_1 H\,\varphi_1(\mathbf{r}) + \lambda_2 H\,\varphi_2(\mathbf{r}) \qquad (\mathrm{D}-۱۱)$$

بدین ترتیب معادلهٔ (D — ۹) معادلهٔ ویژه مقدار عملگر خطی H است : اعمال H به " ویژه تابع " $\varphi(\mathbf{r})$ ، منجر به حاصلضرب همان تابع در " ویژه مقدار " E می‌شود بنابراین انرژیهای مجاز همان ویژه مقدارهای عملگر H هستند . بعدا " خواهیم دید که معادلهٔ (D — ۹) . فقط برای مقادیر معینی از E دارای جوابهای $\varphi(\mathbf{r})$ است که مجذورا " انتگرال‌پذیر باشند (ر ک بخشهای c—۲—D و ج — ۲ ازمکمل H_1 : این مطلب منشاء کوانتش انرژی است .

گوشزد :

معادلهٔ (D — ۸) یا (D — ۹) گاهی در مقابل "معادله شرودینگر وابسته به‌زمان" (D — ۱) ، "معادلهٔ شرودینگر مستقل از زمان "نامیده می‌شود . تفاوت اساسی آنها را مورد تاکید قرار دهیم : معادلهٔ (D — ۱) یک معادلهٔ عمومی است که حالت ذره هرچه باشد ، تحول تابع موج را می‌دهد ، ازطرف‌دیگر معادلهٔ ویژه مقداری (D — ۹) به‌ما امکان می‌دهد تا ، ازمیان تمام حالتهای ممکن ذره ، آنهایی را که مانا هستند پیدا کنیم .

b — برهم نهش حالتهای مانا

برای اینکه مقادیر ممکن مختلف انرژی E (و ویژه توابع $\varphi(\mathbf{r})$ متناظر) را متمایز سازیم ، آنها را بایک شاخص n مشخص می‌کنیم . لذا داریم :

$$H\varphi_n(\mathbf{r}) = E_n\varphi_n(\mathbf{r}) \qquad (\mathrm{D}-۱۲)$$

و حالتهای مانای ذره، دارای توابع موج زیر هستند :

$$\psi_n(\mathbf{r}, t) = \varphi_n(\mathbf{r})\, e^{-iE_n t/\hbar} \qquad (D-13)$$

$\psi_n(\mathbf{r}, t)$ جواب معادلهٔ شرودینگر (D ـ ۱) است . از آنجاکه این معادله خطی‌است ، دارای یک دسته جوابهای دیگری به‌صورت :

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n \varphi_n(\mathbf{r})\, e^{-iE_n t/\hbar} \qquad (D-14)$$

است ، که درآن ضرائب c_n ثابت‌های مختلط دلخواه هستند . بخصوص، داریم :

$$\psi(\mathbf{r}, 0) = \sum_n c_n \varphi_n(\mathbf{r}) \qquad (D-15)$$

برعکس، فرض‌کنیدکه $\psi(\mathbf{r}, 0)$ ، یعنی حالت ذره در زمان $t = 0$ ،رامی‌دانیم . بعداً خواهیم‌دیدکه هرتابع $\psi(\mathbf{r}, 0)$ همواره می‌تواند برحسب ویژه تابعهای H ، مانند رابطه (D ـ ۱۵) ، تجزیه شود . ازینرو ضرائب c_n توسط $\psi(\mathbf{r}, 0)$ تعیین می‌شوند .بنابر این‌جواب معادلهٔ شرودینگر $\psi(\mathbf{r}, t)$ ، توسط (D ـ ۱۴) داده می‌شود . آنچه‌که باید برای به‌دست آوردن آن انجام دهیم این است که هرجمله از (D ـ ۱۵) را درضریب $e^{-iE_n t/\hbar}$ ، که E_n ویژه مقدار وابسته به $\varphi_n(\mathbf{r})$ است ، ضرب کنیم . تأکید می‌کنیم‌که این ضرائب فاز از یک جمله به‌جملهٔ دیگر فرق می‌کنند . فقط در مورد حالتهای مانااست‌که بستگی‌آن به‌زمان فقط بایک تابع نمایی مشخص می‌شود [فرمول (D ـ ۱۳)] .

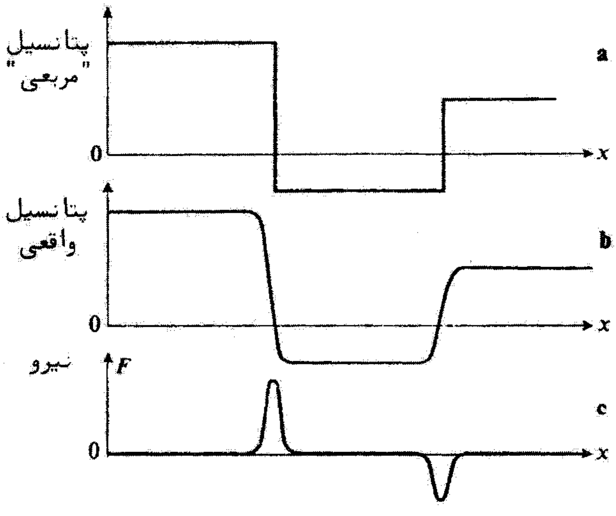
۲ـ پتانسیلهای " مربع " یک بعدی :

مطالعهٔ کیفی

در ابتدای بخش D گفتیم که برای آشکارساختن آثار کوانتومی ، پتانسیلهائی را بررسی می‌کنیم که در فواصل کوتاه بطور قابل ملاحظه‌ای تغییر کنند . دراینجا ، برای متمرکزشدن روی ایده‌های فیزیکی ساده، خود را به‌مطالعهٔ کیفی محدود خواهیم ساخت . مطالعهٔ دقیقتر درمکمل‌های این فصل (مکمل H_1) ارائه شده‌است . جهت‌ساده‌کردن‌مسئله یک مدل یک بعدی را ، که درآن انرژی پتانسیل فقط به x بستگی داشته باشد ، در نظر خواهیم گرفت (توجیه یک‌چنین مدلی در مکمل F_1 آمده‌است) .

a ــ معنی فیزیکی یک پتانسیل مربعی :

یک مسئله یک بعدی با پتانسیلی که درشکل a ــ ۷ نشان داده شده است در نظر بگیریم . محور Ox بهچند ناحیهٔ پتانسیل ثابت تقسیم شدهاست . پتانسیل در مرزدوناحیه مجاور ، یک پرش ناگهانی وناپیوستگی)انجام میدهد . درواقع ، یکچنین تابعی نمیتواند حقیقتا" یک پتانسیل فیزیکی را ، که باید پیوسته باشد ، نشان دهد . ما ازآن برای نشان دادن طرحواریکانرژیپتانسیل $V(x)$ که درواقعدارای شکل b ــ ۷ است استفاده خواهیم کرد : درشکل b ــ ۷ ناپیوستگی وجود ندارد اما $V(x)$ در نزدیکی بعضی از مقادیر x خیلی سریع تغییر میکند . وقتی فواصلی که درآن این تغییرات رخ میدهد خیلیکوچکتر از سایرفواصل دخیل در مسئله (بخصوص ، طولموج وابسته بهذره) باشد ، میتوانیمپتاسیل واقعی را توسط پتانسیل مربعی شکل a ــ ۷ جایگزین کنیم . اینتقریب برای ، بعنوان مثال ، ذرهای با انرژی بسیار بالا ، که طول موج آن بسیار کوتاه خواهد بود ، از اعتبار میافتد .



شکل ۷.

پتانسیل مربعی (شکل a)که بهطورطرح وار یکپتانسیلواقعی (شکل b) را که نیروی متناظر با آن دارای شکل c است ، نشان میدهد .

پیش بینی‌های مکانیک کلاسیک راجع به‌رفتار یک ذره در پتانسیلی نظیر پتانسیل شکل۷ را به‌آسانی می‌توان تعیین کرد . به‌عنوان مثال ، تصورکنیدکه $V(x)$ انرژی پتانسیل گرانشی باشد . دراین‌صورت شکل b – ۷ برش واقعی ناحیه‌ای را که ذره درآن‌حرکت می‌کند نشان می‌دهد : ناپیوستگی‌ها مربوط به پیبهای تندی هستند ، که توسط سطوح افقی جدا شده‌اند . توجه کنیدکه اگر انرژی کل E ی ذره را ثابت بگیریم ، محدوده‌هایی از محور Ox که برای آن‌ها $V > E$ باشد برای ذره ممنوع است (انرژی جنبشی $E_k = E - V$ باید مثبت باشد) .

گوشزد :

نیروی وارد بر ذره عبارت است از $F(x) = -\dfrac{dV(x)}{dx}$. در شکل (c – ۷) این نیرو ، که ازپتانسیل $V(x)$ درشکل b – ۷ به‌دست آمده‌است ، رسم شده‌است . می‌توان دیدکه این ذره ، در تمام نواحی‌ای که پتانسیل ثابت است ، تحت تاءثیر هیچ نیروئی قرار ندارد . دراین صورت سرعت آن ثابت است . فقط در نواحی مرزی بین این سطوح افقی است که نیرویی بر ذره وارد می‌شود و بسته به‌وضعیت مورد نظر ، به‌ذره شتاب داده یا حرکت آن را کند می‌کند .

b – *تشابه اپتیکی* :

می‌خواهیم حالتهای مانای (بخش۱ – D) یک ذره دریک پتانسیل " مربعی " یک بعدی را بررسی کنیم .

در ناحیه‌ای که پتانسیل دارای مقدارثابت V است ، معادلهٔ ویژه مقداری (۹ – D) به‌صورت :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V\right]\varphi(x) = E\varphi(x) \qquad (D-16)$$

یا :

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\right]\varphi(x) = 0 \qquad (D-17)$$

نوشته می‌شود .

دراپتیک معادلهٔ کاملا" مشابهی وجود دارد . یک محیط شفاف درنظر بگیریدکه

شاخص n آن نه به $\mathbf{r}$ بستگی‌داشته باشد ونه به‌زمان . دراین محیط امواج‌الکترومغناطیسی‌ای می‌توانند وجود داشته باشند که‌میدان الکتریکی $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ ی آنها مستقل از y ، z بود . و دارای شکل زیر باشند :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{e}E(x)\,\mathrm{e}^{-i\Omega t} \qquad (\mathrm{D}-۱۸)$$

که درآن $\mathbf{e}$ یک برداریکهٔ عمود بر Ox است . دراین صورت $E(x)$ باید درمعادلهٔ زیرصدق کند :

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{n^2\Omega^2}{c^2}\right]E(x) = 0 \qquad (\mathrm{D}-۱۹)$$

ملاحظه می‌کنیم که اگر قرار دهیم :

$$\frac{2m}{\hbar^2}(E - V) = \frac{n^2\Omega^2}{c^2} \qquad (\mathrm{D}-۲۰)$$

معادلات (D –۱۷) و (D –۱۹) یکسان می‌شوند .

بعلاوه، در نقطه‌ای مانند x که انرژی پتانسیل V [و درنتیجه، شاخص n که توسط (D –۲۰) داده شده‌است] ناپیوسته‌است ، شرایط مرزی برای $\varphi(x)$ و برای $E(x)$ یکی هستند : این دوتابع و همین‌طور مشتقهای اول آنها باید پیوسته بمانند (ر ک مکمل H_1 ، بخش b – ۱) . بدین ترتیب تشابه ساختاری بین دومعادلهٔ (D –۱۷) و (D –۱۹) به‌ما امکان می‌دهد تا به‌یک مسئله مکانیک کوانتومی ، مربوط به پتانسیل شکل a – ۷ ، یک مسئله اپتیکی ،یعنی ، انتشار یک موج الکترومغناطیسی بافرکانس زاویه‌ای Ω در محیطی که شاخص n آن ، دارای همان نوع ناپیوستگی‌ها است ، منتسب کنیم . برطبق (D –۲۰) ، رابطهٔ بین فراسنجهای اپتیکی و مکانیکی عبارت است از :

$$n(\Omega) = \frac{1}{\hbar\Omega}\sqrt{2mc^2(E - V)} \qquad (\mathrm{D}-۲۱)$$

برای موج نوری ، ناحیه‌ای که درآن $E > V$ است مربوط است به یک محیط شفاف که شاخص‌آن حقیقی است . دراین صورت موج به‌صورت e^{ikx} است .

وقتی $V > E$ باشد چه اتفاق می‌افتد؟ فرمول (D –۲۰) یک شاخص موهومی خالص به‌دست می‌دهد . در (D –۱۹) ، n^2 منفی بوده و جواب به‌صورت $\mathrm{e}^{-\rho x}$ است : مشابه یک "موج میرا" است . بعضی از جنبه‌های‌این‌وضعیت ، انتشاریک موج‌الکترومغناطیسی دریک محیط فلزی را به‌یاد می‌آورد . *

---

* نباید دراین تشابه بیش‌ازحد پافشاری کرد زیرا شاخص n یک محیط فلزی‌هم دارای قسمت حقیقی و هم دارای قسمت موهومی است (دریک فلز ، یک موج اپتیکی‌درحالی که میراست به نوسان خود ادامه می‌دهد).

بنابراین می‌توانیم نتایج کاملا" شناخته شده اپتیک موجی را به‌مسایلی‌که‌دراینجا مطالعه می‌کنیم منتقل کنیم . لیکن باید بدانیم که این صرفا" یک تشابه‌است : تعبیری‌که ما بدتابع موج می‌دهیم به‌طور بنیادی باآنچه که اپتیک موجی کلاسیک به‌موج الکترومغناطیسی نسبت می‌دهد تفاوت دارد .

c . مثالها

α . پله و سد پتانسیل :

ذره‌ای با انرژی E درنظر بگیریدکه مطابق شکل ۸ از ناحیه x های منفی به سمت "پله" پتانسیل به‌ارتفاع V_0 می‌رود .

اگر $E > V_0$ باشد ، (موردی که درآن ذره کلاسیک از پله عبورکرده وبایک‌سرعت‌کمتر حرکتش را به‌سمت راست ادامه می‌دهد) ، مشابه اپتیکی آن به‌شرح زیراست :

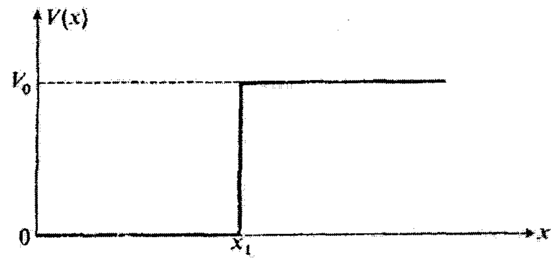
یک موج نوری از چپ به‌راست در محیطی به‌شاخص n_1 :

$$n_1 = \frac{c}{\hbar\Omega}\sqrt{2mE} \qquad (D-۲۲)$$

انتشار می‌یابد ، در $x = x_1$ یک ناپیوستگی وجود دارد و شاخص برای $x > x_1$ ، برابر است با :

$$n_2 = \frac{c}{\hbar\Omega}\sqrt{2m(E - V_0)} \qquad (D-۲۳)$$

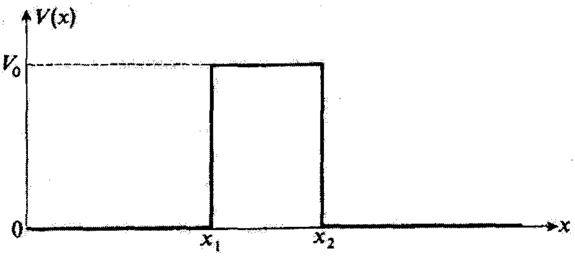
می‌دانیم که موج فرودی که ازچپ می‌آید به‌یک موج باز تابیده و یک موج عبور کرده تجزیه می‌شود . حال این نتیجه را به‌مکانیک کوانتومی منتقل می‌کنیم : ذره بایک احتمال معین $\mathscr{P}$ باز تابیده شده و فقط با احتمال $1 - \mathscr{P}$ حرکتش را به‌سمت‌راست‌ادامه می‌دهد . این نتیجه باآنچه که توسط مکانیک کلاسیک پیش بینی میشود تناقض دارد .



شکل ۸ .
پلهٔ پتانسیل

وقتی $E < V_0$ باشد ، شاخص n_2 ، که به ناحیهٔ $x > x_1$ مربوط می‌شود ، موهومی خالص‌شده و نورفرودی ، کلاً " باز تابیده ، می‌شود . لذا دراینجا پیش بینی کوانتومی با پیش بینی مکانیک کلاسیک انطباق دارد . مع‌ذالک ، وجود یک موج میرا برای $x > x_1$ نشان می‌دهد که احتمال یافتن ذره کوانتومی دربین ناحیه غیرصفراست .

نقش این موج میرا در مورد یک سد پتانسیل (شکل ۹) برجسته‌تر است . برای $E < V_0$ ، یک ذرهٔ کلاسیک همواره برخواهد گشت . اما ، در مسئله‌اپتیکی متناظر ، یک لایه باضخامت محدود و باشاخص موهومی خواهیم داشت که توسط یک محیط شفاف احاطه شده است . اگراین ضخامت خیلی بزرگتر از برد $1/\rho$ موج میرا باشد ، بخشی ازموج‌فرودی به‌داخل ناحیهٔ $x > x_2$ وارد می‌شود . از این رو ، حتی برای $E < V_0$ ، برای عبورذره از سد یک احتمال غیرصفر پیدا می‌کنیم .

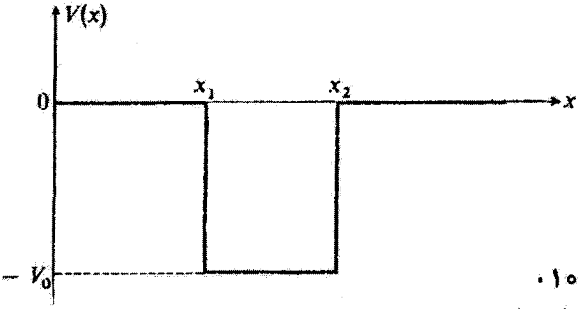


شکل ۹ .
سد پتانسیل

β . چاه پتانسیل

در اینجا تابع $V(x)$ به‌صورتی است که درشکل ۱۰ نشان داده شده‌است . پیش بینی‌های مکانیک کلاسیک به‌شرح زیراست : وقتی ذره‌دارای یک انرژی منفی E (ولی‌بزرگتر از $-V_0$) باشد ،می‌تواند فقط بین x_1 و x_2 ، با انرژی جنبشی $E_k = E + V_0$ ، نوسان کند . وقتی ذره دارای انرژی مثبت باشد و از سمت چپ به‌چاه‌پتانسیل برسد ، در x_1 یک شتاب ناگهانی ، و سپس در x_2 یک شتاب منفی باهمان قدرمطلق می‌گیرد وسپس به‌حرکتش به‌سمت راست ادامه می‌دهد .

در مشابه اپتیکی مورد $-V_0 < E < 0$ ، شاخص‌های n_1 و n_3 ، که‌به‌نواحی $x < x_1$ و $x > x_2$ مربوط می‌شوند ، موهومی‌هستند ، درحالی که شاخص n_2 ، که فاصلهٔ $[x_1, x_2]$ را مشخص می‌کند ، حقیقی‌است . بدین ترتیب معادلی ازیک لایهٔ هوا داریم



شکل ۱۰.
چاه پتانسیل

که به‌عنوان مثال، بین دومحیط باز تابنده قرار دارد. امواج مختلفی که متوالیا " در x_1 و x_2 با تابیده می‌شوند، از طریق تداخل‌یکدیگر راتخریب‌می‌کنندمگربرای‌بعضی‌فرکانسهای کاملا " معین ("مددهای بهنجار") که امواج مانای پایداری را برقرار می‌سازند. از دیدگاه کوانتومی، این امر می‌رساند که انرژیهای منفی کوانتیده هستند*، درحالی که از نظر کلاسیک، تمام مقادیر بین $-V_0$ و 0 امکان پذیر هستند.

بەازاء $E > 0$، شاخص‌های n_1، n_2 و n_3 حقیقی‌اند:

$$n_1 = n_3 = \frac{c}{\Omega}\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE} \qquad (\text{D}-۲۴)$$

$$n_2 = \frac{c}{\Omega}\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E + V_0)} \qquad (\text{D}-۲۵)$$

چون n_2 از n_1 و n_3 بزرگتراست، این وضعیت مشابه وضعیت یک تیغه شیشه‌ای درهواست.

برای به‌دست آوردن موج بازتابیده در ناحیهٔ $x < x_1$، یاموج عبورکرده‌درناحیهٔ $x > x_2$، لازم است تعداد بی‌نهایت موج راکه از بازتابهای پی‌درپی در x_1 و x_2 ایجاد می‌شوند ترکیب کنیم. (تداخل‌سنج چندموجی مشابه با تداخل‌سنج فابری ــ پرو). دراین صورت در می‌یابیم که برای فرکانسهای فرودی معینی، موج کاملا " عبورکرده است. ازینرو از دیدگاه کوانتومی، ذره، عموما "، بایک احتمال معینی بازتابیده می‌شود. مع‌ذالک،

---

* مقادیر انرژیهای مجاز توسط شرط مشهور: $x_2 - x_1 = k\lambda_2/2$ داده‌نمی‌شود زیرا لازم است وجود امواج میرایی را که در اثر بازتاب در $x = x_1$ و $x = x_2$ یک انتقال فاز وارد می‌کنند. به‌حساب آوریم (رک مکمل H_1، بخش c ــ ۲).

مقادیری از انرژی ، که انرژیهای تشدیدی نامیده می‌شوند ، وجود داردکه‌برای‌آنهااحتمال عبور ۱ بوده و درنتیجه ، احتمال بازتاب صفراست .

این چند مثال نشان می‌دهدکه تاچه‌اندازه پیش بینی‌های مکانیک کوانتومی می‌توانند با پیش بینی‌های مکانیک‌کلاسیک تفاوت داشته باشند . این‌مثالها هم‌چنین به‌طور آشکاری نقش اصلی ناپیوستگی‌های پتانسیل را (که ، به‌طور طرح‌وار ، معرف تغییرات مربع است) مورد تاءکید قرار می‌دهند .

نتیجه :

دراین فصل ، بعضی ایده‌های اساسی مکانیک کوانتومی را معرفی کرده و به طریقه کیفی وحسی موردبحث قرار دادیم . بعدا" (در فصل۳) به‌این ایده‌ها باز خواهیم گشت تا آنها را به‌روشی دقیق‌تر و اصولی‌تر ارائه دهیم . مع‌ذالک ، آشکاراست‌که توصیف‌کوانتومی دستگاه‌های فیزیکی به‌طور ریشه‌ای باتوصیفهایی که توسط مکانیک کلاسیک داده می‌شود تفاوت دارد (هرچند توصیفهای مکانیک کلاسیک ، درمواردبی‌شماری ، تقریبی‌عالی‌هستند) .

ما دراین فصل خود را به‌مورد دستگاههای فیزیکی متشکل از فقط یک ذره محدود کرده‌ایم . توصیف این دستگاهها‌دریک زمان معین ، در مکانیک کلاسیک ، برمشخص‌کردن‌شش فراسنج ، که موءلفه‌های مکان $\mathbf{r}(t)$ وسرعت $\mathbf{v}(t)$ ی ذره هستند ، بناشده است . تمام متغیرهای دینامیکی (انرژی ، تکانه‌خطی ، تکانه‌زاویه‌ای) بامشخص‌شدن $\mathbf{r}(t)$ و $\mathbf{v}(t)$ تعیین می‌شوند . قوانین نیوتن به‌ما امکان می‌دهند تا $\mathbf{r}(t)$ را از طریق حل معادلات دیفرانسیل مرتبهٔ دوم نسبت به‌زمان ، محاسبه‌کنیم . درنتیجه ، وقتی $\mathbf{r}(t)$ و $\mathbf{v}(t)$ در زمان اولیه معلوم باشند این معادلات مقادیر $\mathbf{r}(t)$ و $\mathbf{v}(t)$ را در هرزمان دیگر t مشخص می‌کنند .

مکانیک کوانتومی توصیف پیچیده‌تری از پدیده‌ها به‌کار می‌برد . حالت دینامیکی یک‌ذره ، دریک زمان معین ، توسط یک تابع موج مشخص می‌شود . این تابع دیگر فقط به شش فراسنج ، بلکه به‌تعداد بی‌نهایت فراسنج [مقادیر $\psi(\mathbf{r}, t)$ درتمام نقاط $\mathbf{r}$ فضا]بستگی‌دارد . بعلاوه ، پیش بینی‌های نتایج اندازه‌گیری اینک فقط احتمالاتی هستند (فقط احتمال به‌دست آوردن یک نتیجهٔ معین ، در اندازه‌گیری یک متغیر دینامیکی ، را به‌دست می‌دهند) . تابع موج جوابی است از معادلهٔ شرودینگر ، که مارا قادر به‌محاسبهٔ $\psi(\mathbf{r}, t)$ از روی $\psi(\mathbf{r}, 0)$ می‌سازد . این معادله متضمن یک اصل برهم نهش است که منجر به‌آثار موجی می‌شود .

این تغییر بزرگ در تصور ما از مکانیک توسط‌آزمایش تحمیل شد . ساختار و رفتار ماده درسطح اتمی در چارچوب مکانیک کلاسیک توضیح ناپذیر هستند . ازاین جهت این

نظریه بعضی از سادگیهای خود را از دست داد ، لیکن تاحد زیادی وحدت کسب کرد ، زیرا ماده وتابش براساس یک طرح عام (دوگانگی‌موجی ــ ذره‌ای) تشریح می‌شوند . مااین حقیقت راتاءکید می‌کنیم‌که گرچه این طرح عام با ایده‌ها و عادتهای ما کــه از مطالعــهٔ محــدوده ماکروسکوپیکی نشاءت می‌گیرد مغایرت دارد ، ولی‌کاملا" دارای ارتباطی‌منطقی است. هرگز کسی موفق نشده‌است آزمایشی را تصور کند که بتواند اصل عدم قطعیت را نقض کند (ر ک مکمل D_I دراین فصل) . به‌طورکلی ، هیچ مشاهده‌ای ، تاکنون ، با اصول اســاسی مکــانیک کوانتومی تناقض نداشته‌است . باوجود این ، در حال حاضر هیچ نظریــهٔ جامعــی بــرای پدیده‌های نسبیتی و کوانتومی وجود ندارد و ، مسلما" ، هیچ چیزمانع‌امکان یک تغییربزرگ جدید نمی‌شود .

مراجع و پیشنهادات برای مطالعهٔ بیشتر :

توصیف پدیده‌های فیزیکی‌ای که لزوم واردکردن مفاهیم مکانیک کوانتومی رانشان می‌دهند : به‌زیربخش "Introductory work – quantum physics" از بخش ۱ کتاب شناسی بخصوص Wichmann (1.1) and Feynman III (1.2), chaps. 1 and 2. رجوع کنید .

تاریخچه توسعه مفاهیم مکانیک‌کوانتومی : مراجع بخش ۴کتاب شناسی ، بخصوص Jammer (4.8) و همچنین مرجعهای (5.11) و (5.12) ، را که شامل مراجع متعددی بــرای مقاله‌های اصلی هستند .

آزمایشهای بنیادی : مراجع مربوط به مقاله‌های‌اصلی را می‌توانید در بخــش ۳ از کتاب‌شناسی پیداکنید . مسئله تعبیر در مکانیک کوانتومی : بخش ۵ کتاب‌شناسی ، بخصوص "Resource Letter" (5.11) ، که شامل مرجعهای متعدد طبقه بندی شده‌ای است .

تشابهات و اختلافات امواج مادی و امواج الکترومغناطیسی : Bohm (5.1), chap. 4 بخصوص ، جدول "Summary on Probabilities" درآخر فصل .

هم‌چنین به مقالاتی‌که توسط : شرودینگر (۲۵ــ ۱) ، گائو (۲۶ــ ۱) ، لورن وبیم (۲۸ــ ۱) ، اسکالی و سارجنت (۳۰ ــ ۱) نوشته شده‌اند مراجعه کنید .

مکمل‌های فصل اول

A_1 : مرتبه بزرگی طول موجهای وابسته به‌ذرات مادی B_1 : قیدهای تحمیل‌شده توسط روابط عدم قطعیت . C_1 :روابط عدم قطعیت وفراسنجهای اتمی	A_1 و B_1 و C_1 : بسیار ساده‌اند ولی مرتبه بزرگی فراسنجهای کوانتومی را به‌صورتی اساسی منعکس می‌سازند .
D_1 :یک‌نمایش تجربی ازرابطه‌عدم قطعیت	D_1 : بحث درباره یک‌آزمایش فکری‌ساده که سعی می‌کند مکمل‌بودن جنبه‌های ذره‌ای وموجی نور را از اعتبار بیندازد (آسان است ، ولی می‌تواند برای مطالعه بعدی گذاشته شود) .
E_1 :یک بررسی ساده ازبسته‌موج‌دوبعدی F_1 :رابطه بین‌مسائل یک‌بعدی وسه‌بعدی G_1 :بسته موج‌گوسی یک‌بعدی : گستردگی بسته موج .	E_1 و F_1 و G_1 : مکملهائی در باره بسته موج‌ها (بخش C از فصل اول) E_1 : با یک روش ساده و کیفی رابطه‌ای را که بین‌گستردگی جانبی یک بسته موج دوبعدی وپاشیدگی زاویه‌ای‌بردارهای‌موج وجود دارد نشان می‌دهد (آسان) . F_1 : تعمیم نتایج بخش C از فصل اول‌به سه بعد ، که‌نشان می‌دهد چگونه مطالعه یک ذره درفضای سه‌بعدی می‌تواند در بعضی موارد ، به‌مسائل یک‌بعدی تقلیل یابد (کمی‌مشکلتر) . G_1 : بررسی دقیق یک مورد خاص از بسته‌های موج که خواص و تحول‌آنها را دقیقا" می‌توان محاسبه‌کرد (مشکلاتی در محاسبه‌وجود دارداماازنظرفهم آسان‌است).

H_1 : حالتهای مانای یک ذره در پتانسیلهای مربعی یک بعدی	H_1 : به‌طریقی کمی‌تر ، ایده‌های بخش ۲ــD از فصل اول می‌پردازد . قویا "توصیه می‌شود ، زیرا پتانسیلهای مربعی اغلب برای نشان‌دادن مفاهیم مکانیک کوانتومی ، به‌طور ساده ، به‌کار می‌روند (مکمل‌های متعدد و تمریناتی که بعدا "در این کتاب ارائه می‌شوند برنتایج H_1 متکی هستند) .
J_1 : رفتار یک بسته موج در یک پله پتانسیل	J_1 : مطالعه دقیق‌تر رفتار کوانتومی یک ذره در یک پتانسیل مربعی برای یک مورد خاص چون ذره بحدکافی در فضا جایگزیده شده است (بسته‌موج) ، می‌توان حرکت" آن‌را تعقیب کرد (قدری مشگل است ، وبرای تعبیر نتایج فیزیکی اهمیت دارد) .
K_1 : تمرینات	

مکمل A_I

مرتبهٔ بزرگی طول موجهای وابسته به ذرات مادی

رابطه دوبروی :

$$\lambda = \frac{h}{p} \qquad (1)$$

نشان می‌دهد که برای ذره‌ای به جرم m وسرعت v ، هرچه m و v کوچکتر باشند ، طول موج متناظر بزرگتر خواهد بود .

برای نشان دادن اینکه آشکارساختن خواص موجی ذره درمحدوده ماکروسکوپیکی غیرممکن است ، به‌عنوان مثال ، یک‌ذره غبار به‌قطر $1\,\mu$ وجرم $m \simeq 10^{-15}$ kg را در نظر بگیرید . حتی برای یک چنین جرم کوچک و سرعت $v \simeq 1$ mm/s ، فرمول (۱) می‌دهد :

$$\lambda \simeq \frac{6.6 \times 10^{-34}}{10^{-15} \times 10^{-3}}\ \text{meter} = 6.6 \times 10^{-16}\ \text{meter} = 6.6 \times 10^{-6}\ \text{Å} \qquad (2)$$

یک چنین طول موجی در مقیاس ذره غبار کاملا" قابل اغماض است .

ازطرف‌دیگر ، یک‌نوترون‌حرارتی ، یعنی ، یک‌نوترون $(m_n \simeq 1.67 \times 10^{-27}$ kg$)$ باسرعت v ی متناظر با انرژی حرارتی میانگین در درجه حرارت (مطلق) T ، درنظربگیرید v با رابطه زیر داده می‌شود :

$$\frac{1}{2} m_n v^2 = \frac{p^2}{2m_n} \simeq \frac{3}{2} kT \qquad (3)$$

که k ثابت بولتزمن است $(k \simeq 1.38 \times 10^{-23}$ joule/degree$)$. طول‌موجی‌که‌به‌چنین سرعتی مربوط می‌شود برابراست با :

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{3m_n kT}} \qquad (4)$$

به‌ازای $T \simeq 300\ {}^\circ\text{K}$ ، داریم :

$$\lambda \simeq 1.4 \text{ Å} \tag{۵}$$

یعنی ، طول موجی که ازمرتبه فاصله بین اتمها دریک شبکه بلوری است . بنابراین ، یک باریکه ازنوترونهای حرارتی‌که به‌یک بلور برخورد می‌کنند ، باعث ایجادپدیده‌های پراش ، مشابه با آنچه که با اشعه X مشاهده شد ، می‌شوند .

حال مرتبه‌بزرگی‌طول‌موجهای‌دوبروی‌وابسته‌به‌الکترونها ($m_e \simeq 0.9 \times 10^{-30}$ kg) رابررسی‌کنیم . اگریک‌باریکه‌الکترون را ازطریق اختلاف‌پتانسیل V (بیان‌شده‌برحسب‌ولت) شتابدار کنیم انرژی جنبشی زیر را به‌الکترون داده‌ایم :

$$E = qV = 1.6 \times 10^{-19}\, V \text{ joule} \tag{۶}$$

($q = 1.6 \times 10^{-19}$ c ، بارالکترون است) . چون $E = \dfrac{p^2}{2m_e}$ ، طول‌موج‌متناظربرابر است با :

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_e E}} \tag{۷}$$

یعنی ، به‌صورت عددی ، برابر است با :

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{6.6 \times 10^{-34}}{\sqrt{2 \times 0.9 \times 10^{-30} \times 1.6 \times 10^{-19}\, V}} \text{ meter} \\ &\simeq \frac{12.3}{\sqrt{V}} \text{ Å} \end{aligned} \tag{۸}$$

بااختلاف پتانسیلهای چند صد ولت ، باردیگر طول موجهائی درحدودطول موج اشعه X به‌دست خواهیم آورد ، و پدیده‌های پراشی الکترون می‌توانند بابلورها یا پودرهای بلوری مشاهده شوند .

شتابدهنده‌های بزرگی که درحال حاضرموجود هستندقادرندانرژی قابل‌ملاحظه‌ای به‌ذرات بدهند . این امر مارا ازگستره غیرنسبیتی که تابحال خود را به‌آن محدود کرده‌ایم خارج می‌سازد . به‌عنوان مثال ، به‌سادگی می‌توان باریکه‌هائی ازالکترون که انرژی آنها از $1\ \text{GeV}^{\star} = 10^9$ eV (1 eV = 1 electron-volt = 1.6×10^{-19} joule) تجاوز کند در حالی که جرم در حال سکون الکترون برابر است با $m_e c^2 \simeq 0.5 \times 10^6$ eV معنی این انرژی این است که سرعت متناظر خیلی به‌سرعت‌نور ، c ، نزدیک‌است. درنتیجه مکانیک کوانتومی غیرنسبیتی که در اینجا مطالعه می‌کنیم کاربردی ندارد .

لیکن، روابط :

$$E = h\nu \qquad (۹— a)$$

$$\lambda = \frac{h}{p} \qquad (۹— b)$$

در گستره نسبیتی معتبر باقی می‌مانند. ازطرف دیگر، رابطه(۷) باید اصلاح شودزیرا، از نظر نسبیتی، انرژی E ی ذره‌ای به‌جرم درحال سکون m_0 دیگر $p^2/2m_0$ نیست، بلکه برابر است با :

$$E = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4} \qquad (۱۰)$$

در مثال بالا (الکترونی با انرژی 1 GeV) m_ec^2 درمقابل E قابل اغماض است، و خواهیم داشت :

$$\lambda \simeq \frac{hc}{E} = \frac{6.6 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^8}{1.6 \times 10^{-10}}\,\mathrm{m} = 1.2 \times 10^{-15}\,\mathrm{m} = 1.2\,\mathrm{fermi} \qquad (۱۱)$$

($1\ \mathrm{fermi} = 10^{-15}\ \mathrm{m}$). با الکترونهائی‌که به‌این طریق شتابدارشده‌اند، می‌توان ساختار هسته‌های اتمی، و بخصوص، ساختار پروتون را کشف کرد با ابعاد هسته‌ای از مرتبه فرمی هستند.

گوشـزدها :

(i) می‌خواهیم خطای معمول در محاسبه طول موج یک ذره مادی به‌جرم $m_0 \neq 0$ ، را که انرژی E ی آن معلوم است خاطرنشان سازیم. این خطا عبارت است ازمحاسبه فرکانس ν با استفاده از (a — ۹)، و سپس، باتشابه باامواج الکترومغناطیسی، در نظر گرفتن c/ν برای طول موج دوبروی. مسلما " استدلال صحیح این‌است‌که‌برای یافتن λ اندازه حرکت p ی وابسته به‌انرژی E ، را به‌عنوان مثـال، از (۱۰) (یا ، درگستره غیرنسبیتی، از رابطه $E = \dfrac{p^2}{2m}$) محاسبه کرده و سپس رابطـه (b — ۹) را به‌کار بریم.

---

* در ایالات متحده‌ء آمریکا، این واحد گاهی به‌صورت BeV نوشته می‌شود.

(ii) برطبق (a ــ ۹) ، فرکانس ν به‌مبدأ انتخاب شده برای انرژی‌بستگی‌دارد . همین مطلب برای سرعت فاز $V_\varphi = \dfrac{\omega}{k} = \nu\lambda.$ نیز صادق است . ازطرف دیگر توجه‌کنید که سرعت گروه $V_G = \dfrac{d\omega}{dk} = 2\pi \dfrac{d\nu}{dk}$ به‌انتخاب مبدأ انرژی بستگی ندارد . این مطلب در تعبیر فیزیکی V_G حائز اهمیت است .

مراجع و پیشنهادات برای مطالعه بیشتر :

Wichmann (1.1), chap. 5; Eisberg and Resnick (1.3), § 3.1.

مکمل B_1

قیدهای تحمیل‌شده توسط روابط عدم قطعیت

۱ ـــ دستگاه ماکروسکوپیکی
۲ ـــ دستگاه میکروسکوپیکی

دربخش ۳ـــC ازفصل اول دیدیم که مکان و تکانه یک ذره نمی‌توانند به‌طورهمزمان بادقت دلخواه تعیین شوند: عدم قطعیتهای Δx و Δp ی مربوطه باید در رابطه عدم قطعیت زیر صدق کنند:

$$\Delta x \,.\, \Delta p \gtrsim \hbar \qquad (۱)$$

دراینجامی‌خواهیم اهمیت این قید را به‌طور عددی برآوردکنیم. نشان خواهیم داد که این قید در محدوده ماکروسکوپیکی بکلی قابل اغماض بوده و، برعکس، درسطح میکروسکوپیکی قاطع می‌شود.

۱ ـــ دستگاه ماکروسکوپیکی

بار دیگر مثال ذره غبار (رک مکمل A_1)را که قطرآن ازمرتبه $1\,\mu$ و جرم آن $m \simeq 10^{-15}$ kg بوده و دارای سرعت $v = 10^{-3}$ m/sec است در نظر می‌گیریم. دراین صورت تکانهٔ آن برابراست با:

$$p = mv \simeq 10^{-18} \text{ joule sec/m} \qquad (۲)$$

اگر مکان این ذره با تقریب، مثلاً $0.01\,\mu$ اندازه‌گیری شده باشد،عدم قطعیت Δp در تکانه‌آن باید در رابطه زیر صدق کند:

$$\Delta p \simeq \frac{\hbar}{\Delta x} \simeq \frac{10^{-34}}{10^{-8}} = 10^{-26} \text{ joule sec/m} \qquad (۳)$$

بنابراین رابطه عدم قطعیت عملاً محدودیتی دراین مورد ایجاد نمی‌کند زیرا، درعمل، وسیله اندازه‌گیری تکانه از رسیدن به‌دقت نسبی مورد نیاز 10^{-8} ناتوان است.

در اصطلاح کوانتومی، ذره غبار توسط یک بسته موج که سرعت گروه آن $v = 10^{-3}$ m/sec و تکانه میانگین آن $p = 10^{-18}$ joule sec/m است تشریح می‌شود. اما دراین حالت می‌توان چنان‌گستردگی فضائی Δx و پاشیدگی تکانه Δp ی‌کوچکی انتخاب کرد که هردو بکلی قابل اغماض باشند. دراین صورت ماگزیمم بسته موج معرف‌مکان ذره غبار بوده وحرکت آن باحرکت ذره کلاسیکی یکسان است.

۳ ـ دستگاه ماکروسکوپیکی

حال یک الکترون اتمی درنظر بگیرید. مدل بوهر آن را مانند یک ذره کلاسیک توصیف می‌کند. مدارهای مجاز توسط قواعد کوانتش، که ازپیش درنظر گرفته شده‌اند تعیین می‌شوند: به‌عنوان مثال، شعاع r یک مدار دایره‌ای و تکانه $p = mv$ ی الکترونی که‌روی آن حرکت می‌کند باید در رابطه:

$$pr = n\hbar \qquad (۴)$$

که درآن n یک عدد صحیح است، صدق کنند.

برای اینکه به‌این طریق بتوان به‌زبان کلاسیکی‌از مسیر یک الکترون صحبت کرد، باید عدم قطعیتهای مکان و تکانه الکترون، به‌ترتیب در مقابل r و p قابل اغماض باشند:

$$\Delta x \ll r \qquad (۵-a)$$

$$\Delta p \ll p \qquad (۵-b)$$

که معنی آنها خواهد بود:

$$\frac{\Delta x}{r}\cdot\frac{\Delta p}{p} \ll 1 \qquad (۶)$$

اما رابطه عدم قطعیت رابطه زیر را تحمیل می‌کند:

$$\frac{\Delta x}{r}\cdot\frac{\Delta p}{p} \gtrsim \frac{\hbar}{rp} \qquad (۷)$$

اگر با استفاده از فرمول (۴) ، در طرف راست نامساوی فوق rp را با $n\hbar$ جایگزین کنیم ، این نامساوی می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود:

$$\frac{\Delta x}{r} \cdot \frac{\Delta p}{p} \gtrsim \frac{1}{n} \qquad (۸)$$

ملاحظه می‌کنیم که (۸) با (۶) ناسازگار است ، مگر اینکه $n \gg 1$.
بنابراین رابطه عدم قطعیت ما را وادار می‌سازد تا تصویر نیمه کلاسیکی مدارهای بوهررا رد کنیم (رک بخش ۲ــC از فصل هفتم) .

مراجع و پیشنهادات برای مطالعه بیشتر:

Bohm (5.1), chap. 5, § 14.

مکمل C_I

روابط عدم قطعیت وفراسنجهای اتمی

روابط عدم قطعیت مفهوم مدار بوهر را از هرنوع حقیقت فیزیکی تهی می‌سازند (رک مکمل B_I) . بعدا " (فصل هفتم) ، نظریه کوانتومی اتم‌هیدرژن رامطالعه خواهیم‌کرد . با این وجود ، می‌خواهیم مستقیما " نشان دهیم که چگونه روابط عدم قطعیت ما را قادر به‌درک پایداری اتمها و حتی به‌دست آوردن مرتبه بزرگی ابعاد و انرژی اتم هیدرژن در حالت پایه آن می‌سازد .

برای این کار یک الکترون را در میدان کولنی یک پروتون ، که‌فرض می‌کنیم درمبدأ دستگاه مختصات ساکن است ، درنظر بگیرید . وقتی دو ذره در فاصله r ازیکدیگرقرارداشته باشند ، انرژی پتانسیل اکلترون برابراست با :

$$V(r) = -\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r} \tag{1}$$

که q بارالکترون (دقیقا " مخالف بار پروتون) است . قرار می‌دهیم :

$$\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0} = e^2 \tag{2}$$

فرض کنید که حالت الکترون توسط یک تابع موج با تقارن کروی‌که گستردگی فضائی آن توسط r_0 مشخص شده است توصیف شود (معنی این مطلب این است که احتمال حضور الکترون فراتر از r_0 ۲ یا r_0 ۳ عملا " صفراست) ، دراین صورت انرژی پتانسیل مربوط به‌این حالت از مرتبه زیراست :

$$\bar{V} \simeq -\frac{e^2}{r_0} \tag{3}$$

برای اینکه این مقدار تاحد ممکن پائین باشد ، لازم است که r_0 را هرچه ممکن است‌کوچکتر انتخاب کرد . یعنی ، تابع موج باید تا آنجا که ممکن است حول پروتون متمرکز باشد .

اما لازم است که انرژی جنبشی را نیز به‌حساب آوریم . در اینجاست که اصل عدم قطعیت وارد می‌شود : اگر الکترون در داخل حجمی به‌بعد خطی r_0 محبوس باشد . عدم

قطعیت Δp در تکانه‌آن حداقل از مرتبه $\hbar/r_0$ است . به‌عبارت دیگـر ، حتی اگـر تکانه میانگین آن صفر باشد ، انرژی جنبشی T وابسته به‌حالت مورد نظر صفر نیست :

$$\overline{T} \gtrsim \overline{T}_{\min} = \frac{1}{2m}(\Delta p)^2 \simeq \frac{\hbar^2}{2mr_0^2} \tag{۴}$$

اگر برای کاهش دادن انرژی پتانسیل ، r_0 را کوچکتر درنظر بگیریم ، انرژی جنبشی‌می‌نیمم (۴) افزایش می‌یابد .

بنابراین پائین‌ترین انرژی کل که با رابطه عدم قطعیت سازگار است عبـارت‌است از می‌نیمم تابع :

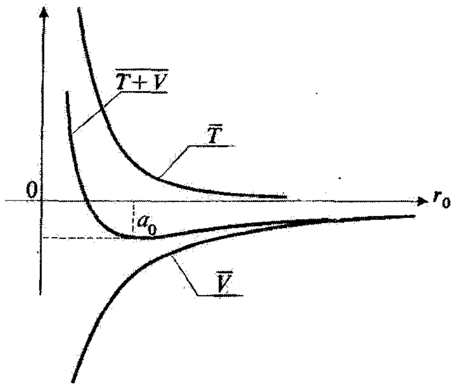
$$E_{\min} = \overline{T}_{\min} + \overline{V} = \frac{\hbar^2}{2mr_0^2} - \frac{e^2}{r_0} \tag{۵}$$

این می‌نیمم به‌ازاء :

$$r_0 = a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \tag{۶}$$

به‌دست می‌آید و برابراست با :

$$E_0 = -\frac{me^4}{2\hbar^2}$$



شکل ۱ .
تغییرات انرژی پتانسیل $\overline{V}$ ، انرژی جنبشی $\overline{T}$ ، و انرژی‌کل $\overline{V} + \overline{T}$ در اتم هیدرژن نسبت به r_0 (گستردگی تابع موج) . توابع $\overline{T}$ و $\overline{V}$ عکس یکدیگـر تغییر می‌کنند ، بطوری که انرژی کل به‌ازاء مقداری از $\overline{T}$ و $\overline{V}$ از یک مقـدار می‌نیمم می‌گذرد . مقدار a_0 مربوط به r_0 مرتبه بزرگی اندازه اتم‌هیدرژن را به‌دست می‌دهد .

عبارت (۶) عبارتی است که در مدل بوهر برای شعاع اولین مدار پیدا شد، و (۷) دقیقا " انرژی حالت پایه اتم هیدرژن را به‌دست می‌دهد (رک فصل هفتم: تابع‌موج حالت پایه در واقع e^{-r/a_0} است). چنین توافق کمی‌ای فقط می‌تواند تصادفی باشد، زیرا ما روی مرتبه‌های بزرگی استدلال کرده‌ایم. به‌هرحال، محاسبه اخیر یک ایده فیزیکی‌مهمی را آشکار می‌سازد: به‌علت رابطه عدم قطعیت، هرچه گستردگی تابع موج‌کمتر باشد، انرژی جنبشی الکترون بزرگتر است. دراین صورت حالت پایه اتم از مصالحه‌ای بین انرژی‌جنبشی و انرژی پتانسیل نتیجه می‌شود.

این واقعیت را مورد تاءکید قرار می‌دهیم که این مصالحه، که برپایه رابطه عدم قطعیت استوار است، بکلی با آنچه که در مکانیک کلاسیک انتظار می‌رود تفاوت دارد. اگر الکترون دریک مدار دایره‌ای‌کلاسیکی به‌شعاع r_0 حرکت می‌کرد، انرژی پتانسیل‌آن‌برابربا:

$$V_{cl} = -\frac{e^2}{r_0} \tag{۸}$$

می‌بود. انرژی جنبشی متناظر از مساوی قراردادن نیروی الکتروستاتیک و نیروی جاذب به‌مرکز* به‌دست می‌آید:

$$\frac{e^2}{r_0^2} = m\frac{v^2}{r_0} \tag{۹}$$

که می‌دهد:

$$T_{cl} = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}\frac{e^2}{r_0} \tag{۱۰}$$

دراین صورت انرژی کل برابر خواهد بود با:

$$E_{cl} = T_{cl} + V_{cl} = -\frac{1}{2}\frac{e^2}{r_0} \tag{۱۱}$$

---

* در واقع، قوانین الکترومغناطیس کلاسیک نشان می‌دهندکه یک الکترون شتابدار تابش می‌کند، که این امر وجود مدارهای پایدار را ممنوع می‌سازد.

مطلوب‌ترین وضعیت از نظر انرژی در $r_0 = 0$ ، که انــرژی پیوندی بینهایتی به‌دست می‌دهد ، اتفاق می‌افتد . بنابراین درحقیقت می‌توانیم بگوئیم‌که‌این رابطه عــدم قطعیت است که ما را به‌درک وجود اتمها ، آن‌طور که هستند ، قادر می‌کند .

مراجع و پیشنهادات برای مطالعه بیشتر :

Feynman III (1.2), § 2-4.

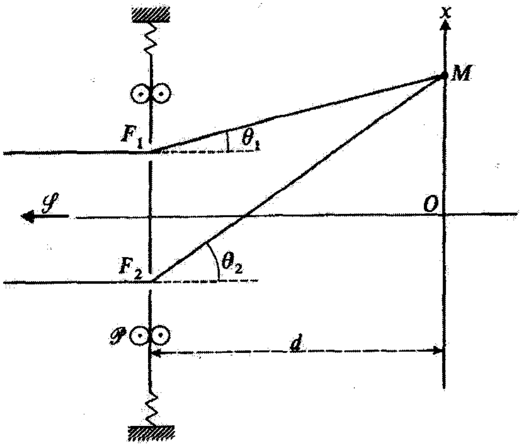
همین نوع استدلال برای ملکولها در : (1.13), first section of § 49. به‌کار رفته‌است .

مکمل D_I

یك نمایش تجربی از رابطه عدم قطعیت

آزمایش دوشکاف یانگ، که دربخش ۲ــ A از فصل اول مورد تحلیل قرار گرفت، مارا به استنتاج‌های زیر رهنمون شد: جنبه‌های موجی و ذره‌ای نور هردو برای تشریح پدیده‌های مشاهده شده لازم‌اند، اما به‌نظر می‌رسد که، یکدیگر را طرد می‌کنند، به‌این معنی که غیر ممکن است تعیین کنیم هرفوتون از داخل کدام شکاف عبور کرده است بدون اینکه، باخود این عمل، الگوی تداخلی را از بین ببریم. جنبه‌های موجی و ذره‌ای بعضی مواقع مکمل یکدیگر گفته می‌شوند.

باردیگر آزمایش دوشکاف یانگ را، به‌منظور نشان‌دادن اینکه "مکملیت" و "روابط عدم قطعیت" چه ارتباط نزدیکی بایکدیگر دارند بررسی می‌کنیم. برای به‌زیرسئوال‌کشیدن درستی رابطهٔ عدم قطعیت می‌توان وسایل دقیقتری ازآنچه درفصل اول بیان شد، که‌در آن تکثیر کننده‌های فوتونی در پشت شکافها قرار داشت، تصور کرد. اینک به‌تحلیل یکی از این وسایل می‌پردازیم.



شکل ۱.

طرح وسیله‌ای که با استفاده ازیک لوحه متحرک $\mathscr{P}$ که‌تکانه آن قبل وبعد از عبور فوتون‌اندازه‌گیری می‌شود، برای تعیین اینکه آیا فوتون، قبل‌از رسیدن به‌نقطه M درروی پرده، از F_1 عبور کرده‌است یااز F_2، به‌کار می‌رود.

فرض کنید لوحه $\mathscr{P}$ ، که شکافها درآن تعبیه شده‌است ، طوری سوار شده است‌که بتواند درهمان صفحه به‌طور عمودی حرکت کند . بدین ترتیب می‌توان تکانه عمودی منتقل شده به‌آنرا اندازه‌گیری کرد . فوتونی را که در نقطه M به‌پرده مشاهده $\mathscr{E}$ برخورد می‌کند درنظر بگیرید (برای سهولت یک چشمه $\mathscr{S}$ در بینهایت انتخاب می‌کنیم) . تکانه این‌فوتون وقتی از $\mathscr{P}$ می‌گذرد تغییر می‌کند . پایستگی تکانه ایجاب می‌کند که لوحه $\mathscr{P}$ این اختلاف تکانه را جذب کند . اما تکانه‌ای که به‌این ترتیب به $\mathscr{P}$ منتقل می‌شود به‌مسیر فوتون بستگی دارد ، فوتون ، بسته به‌اینکه از F_1 گذشته است یا از F_2 ، دارای تکانه :

$$p_1 = -\frac{h\nu}{c}\sin\theta_1 \tag{۱}$$

یا :

$$p_2 = -\frac{h\nu}{c}\sin\theta_2 \tag{۲}$$

است ($\frac{h\nu}{c}$ تکانه‌فوتون و θ_1 و θ_2 زوایائی‌هستندکه F_1M و F_2M باراستای‌ورودی‌می‌سازند) .

سپس اجازه می‌دهیم که فوتونها یکی‌یکی وارد شده و بتدریج الگوی تداخلی‌راروی پرده $\mathscr{E}$ بسازند . برای هرکدام ، بااندازه‌گیری تکانه کسب شده توسط لوحه $\mathscr{P}$ ، تعیین می‌کنیم که‌از کدام شکاف عبور کرده‌است . ازاین‌رو به‌نظر می‌رسد که با وجودی که می‌دانیم هرفوتون از کدام شکاف گذشته است بازهم پدیده‌های تداخلی می‌توانند روی $\mathscr{E}$ مشاهده شوند .

در واقع ، خواهیم دید که‌بااین دستگاه فریزهای تداخلی قابل رویت نیستند . خطای استدلال قبلی دراین است که فرض کرده‌ایم فقط‌فوتونها دارای مشخصه کوانتومی هستند . درحقیقت ، نباید فراموش شودکه مکانیک‌کوانتومی به‌لوحه $\mathscr{P}$ (اجسام‌ماکروسکوپیکی نیز اعمال می‌شود . اگر بخواهیم بدانیم که یک فوتون از داخل کدام سوراخ گذشته است ، عدم قطعیت Δp در تکانه عمودی $\mathscr{P}$ باید به‌قدری کوچک باشد که بتوانیم اختلاف‌بین p_1 و p_2 را اندازه‌گیری کنیم :

$$\Delta p \ll |p_2 - p_1| \tag{۳}$$

اما دراین صورت، رابطه عدم قطعیت دلالت براین داردکه مکان $\mathscr{P}$ فقط باتقریب Δx ، با

$$\Delta x \gtrsim \frac{h}{|p_2 - p_1|} \qquad (۴)$$

معلوم است . اگر فاصله دوشکاف را به a و فاصله بین لوحه $\mathscr{P}$ و پرده $\mathscr{E}$ را به d نشان دهیم و اگر فرض کنیم‌که θ_1 و θ_2 کوچک باشند $(d/a \gg 1)$ ، خواهیم داشت (شکل ۱) :

$$\sin\theta_1 \simeq \theta_1 \simeq \frac{x - a/2}{d}$$
$$\sin\theta_2 \simeq \theta_2 \simeq \frac{x + a/2}{d} \qquad (۵)$$

(x معرف مکان نقطه برخورد M روی $\mathscr{E}$ است) ، در این صورت فرمولهای (۱)و(۲) می‌دهند :

$$|p_2 - p_1| \simeq \frac{h\nu}{c}|\theta_2 - \theta_1| \simeq \frac{h}{\lambda}\frac{a}{d} \qquad (۶)$$

که $\lambda = \frac{c}{\nu}$ طول موج نور است . باقراردادن این مقدار درفرمول (۴) نتیجه می‌شود :

$$\Delta x \gtrsim \frac{\lambda d}{a} \qquad (۷)$$

اما $\frac{\lambda d}{a}$ دقیقا " فاصله‌ای است که انتظار داریم بین فریزها روی $\mathscr{E}$ پیدا کنیم . اگر مکان عمودی شکافهای F_1 و F_2 فقط با عدم قطعیتی بزرگتر ازفاصله بین فریزها تعیین شده‌باشد، غیرممکن است که الگوی تداخلی مشاهده شود .

بحث اخیربه‌وضوح نشان می‌دهد که غیرممکن است یک نظریه‌کوانتومی بناکنیم که ، بدون برخورد به‌تناقضات جدی ، برای نور معتبر بوده و برای دستگاههای مادی اعتبار نداشته باشد . بنابراین ، در مثال فوق ، اگر می‌توانستیم لوحه $\mathscr{P}$ را به‌عنوان یک دستگاه مادی کلاسیکی درنظر بگیریم ، می‌توانستیم مکملیت دوجنبه نور ، و در نتیجه ، نظریه کوانتومی تابش را از اعتبار بیندازیم . برعکس ، یک نظریه کوانتومی ماده تنها ، بامشکلات مشابهی مواجه خواهد شد . برای به‌دست آوردن یک مجموعه هماهنگ ، باید ایده‌های کوانتومی را به‌تمام دستگاههای فیزیکی اعمال کنیم .

مراجع و پیشنهادات برای مطالعه بیشتر :

Bohm (5.1), chaps. 5 and 6; Messiah (1.17), chap. IV § III; Schiff (1.18), § 4; Jammer (5.12), chaps. 4 and 5; also see reference (5.7).

مکمل E_I

بررسی ساده‌ای ازیك بسته موج دوبعدی

۱ ــ مقدمه
۲ ــ پاشیدگی زاویه‌ای و ابعاد جانبی
۳ ــ بحث

۱ ــ مقدمه

دربخش ۲ــC ازفصل اول ، شکل بسته موجهای یک بعدی را ، که ازبرهمنهش امواج تختی که همه در یک جهت انتشار می‌یافتند بــه‌دست آمده بودند ، مطالعــه کــردیم [فرمول (۷ــ C)] . اگر این جهت ، جهت محور Ox باشد، تابع حاصله مستقل از y و z است . این بسته موج در راستای Ox دارای گستردگی محدودی بوده ، ولی در راستاهــای عمود برآن محدود نیست : مقدار آن در تمام نقاط یک صفحه موازی با yOz یکسان است .

در اینجا می‌خواهیم یک نوع ساده دیگری از بسته‌های موج رابررسی‌کنیم : موجهای تختی را که می‌خواهیم باهم ترکیب کنیم دارای بردارهای موجی هم صفحه‌ای هستند ،کهاز نظر بزرگی (تقریبا ") مساوی بوده ولی از نظر جهت کمی اختلاف دارند . هدف این است که نشان دهیم چگونه پاشیدگی زاویه‌ای به‌محدودیت بسته موج در جهتهای عمود بر بردار موجی میانگین منجر می‌شود .

دربخش ۲ــC ازفصل اول دیدیم‌که چگونه‌می‌توان ، بامطالعه برهمنهش سه‌مــوج مشخص از بسته یک بعدی ، مهمترین جنبه‌های پدیده‌ها را فهمید . بخصوص، می‌توان‌رابطه اساسی (۱۸ــ C) ی این فصل را پیداکرد . ما دراینجا خود را به مدل ساده‌ای ازاین نــوع محدود خواهیم‌کرد . تعمیم نتایجی راکه پیدا خواهیم کرد می‌توان به‌همان روش فصل اول انجام داد (مکمل F_I را نیز به‌ببینید) .

۲ ــ پاشیدگی زاویه‌ای و ابعاد جانبی

سه موج تخت را که بردارهای موجی $\mathbf{k}_1$ ، $\mathbf{k}_2$ و $\mathbf{k}_3$ ی آنها درشکل ۱ نشان داده شده است ، درنظر بگیرید . این بردارها هرسه در صفحه xOy واقعند ، $\mathbf{k}_1$ در امتداد Ox ،

$\mathbf{k}_2$ و $\mathbf{k}_3$ نسبت به $\mathbf{k}_1$ قرینه بوده و زاویه هرکدام ازآنها با $\mathbf{k}_1$ ، که فرض می‌کنیم کوچک باشد ، $\Delta\theta$. است . بالاخره تصویرهای $\mathbf{k}_1$ ، $\mathbf{k}_2$ و $\mathbf{k}_3$ روی Ox برابرند :

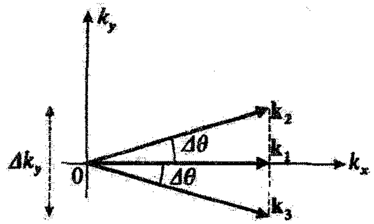
$$k_{1x} \simeq k_{2x} = k_{3x} \simeq |\mathbf{k}_1| = k \qquad (۱)$$

بزرگی این سه‌بردار فقط به‌وسیله جملاتی که نسبت به $\Delta\theta$. از مرتبه دوم هستند و ما از آنها صرفنظر خواهیم کرد ، باهم اختلاف دارند : مؤلفه‌های این‌بردارها روی محور Oy عبارتند از :

$$\begin{cases} k_{1y} = 0 \\ k_{2y} = -k_{3y} \simeq k\,\Delta\theta \end{cases} \qquad (۲)$$

مانندبخش۲ـ C ازفصل‌اول ، دامنه‌های $g(\mathbf{k})$ ی حقیقی‌ای انتخاب‌خواهیم‌کردکه‌درروابط زیر صدق کنند :

$$g(\mathbf{k}_2) = g(\mathbf{k}_3) = \frac{1}{2}\,g(\mathbf{k}_1) \qquad (۳)$$



شکل ۱ .
ترتیب بردارهای موجی $\mathbf{k}_1$ ، $\mathbf{k}_2$ و $\mathbf{k}_3$ وابسته به سه موج تختی که با یکدیگر ترکیب شده و یک بسته موج دوبعدی تشکیل می‌دهند .

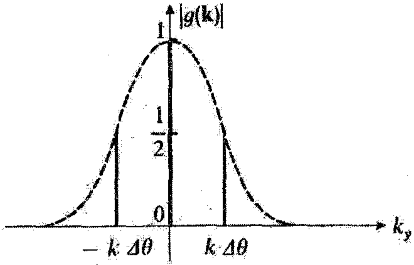
این مدل به‌طور طرح‌وار یک وضعیت پیچیده‌تری را نشان می‌دهد ، که درآن ، مانند معادله (۶ـ C)ازفصل اول ، یک بسته موج حقیقی بامشخصات زیر خواهیم داشت : تمام بردارهای موجی بر Oz عمود بوده و دارای تصاویر یکسانی روی Ox هستند (تنها مؤلفهٔ روی Oy تغییر می‌کند) ، تابع $|g(\mathbf{k})|$ ، نسبت به‌این تنها متغیر k_y ، به‌صورتی است که درشکل۲ نشان داده شده است ، پهنای Δk_y آن به‌طور بسیار ساده‌ای به‌پاشیدگی زاویه‌ای $2\Delta\theta$ مربوط می‌شود :

$$\Delta k_y = 2k\Delta\theta \tag{۴}$$

از برهمنهش سه موجی که در بالا تعریف شدند نتیجه می‌شود:

$$\psi(x, y) = \sum_{i=1}^{3} g(\mathbf{k}_i)\, e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}} \tag{۵}$$
$$= g(\mathbf{k}_1)\left[e^{ikx} + \frac{1}{2}e^{i(kx+k\Delta\theta y)} + \frac{1}{2}e^{i(kx-k\Delta\theta y)}\right]$$
$$= g(\mathbf{k}_1)\, e^{ikx}[1 + \cos(k\Delta\theta y)]$$

(بستگی به z وجود ندارد و به‌همین دلیل است که بسته موج دوبعدی نامیده می‌شود).



شکل ۲.
سه مقدار انتخاب شده برای k_y، به‌طور بسیار طرح وار، یک تابع قله‌دار $|g(\mathbf{k})|$ (خط چین) را نشان می‌دهند.

برای اینکه بفهمیم چه اتفاقی می‌افتد، می‌توانیم از شکل۳، که در آن برای هریک از سه مؤلفه، جبهه‌های موج متوالی مربوط به‌اختلاف فازهای 2π را نشان‌داده‌ایم، استفاده کنیم. تابع $|\psi(x, y)|$ در $y = 0$ دارای یک ماکزیمم است: سه‌موج به‌طور سازنده روی محور Ox تداخل می‌کنند. وقتی ازاین محور دور می‌شویم، $|\psi(x, y)|$ کاهش می‌یابد (اختلاف فاز بین مؤلفه‌ها کاهش می‌یابد) و در $y = \pm\frac{\Delta y}{2}$، که درآن Δy توسط رابطه

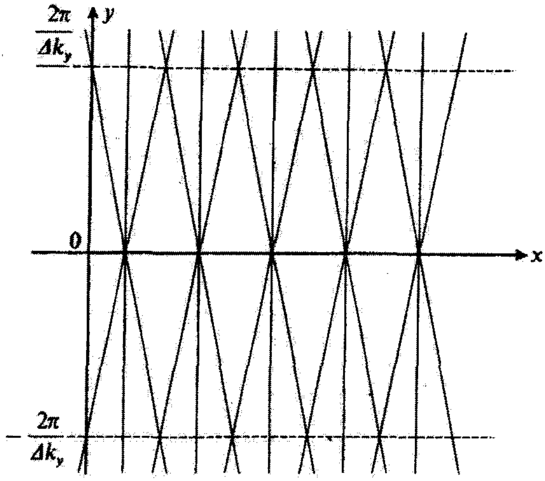
$$\cos\left(k\Delta\theta\frac{\Delta y}{2}\right) = -1 \tag{۶}$$

داده می‌شود، یعنی برای:

$$k\Delta\theta\,\Delta y = 2\pi \tag{۷}$$

به‌سمت صفر میل می‌کند. بنابراین فازهای امواج $\mathbf{k}_2$ و $\mathbf{k}_3$ با فاز موج $\mathbf{k}_1$ در تقابلند (شکل۳). با استفاده از (۴)، می‌توانیم (۷) را به‌صورتی بازنویسی‌کنیم که مشابه با رابطه (۱۱ــ C) ازفصل اول باشد.

$$\Delta y \cdot \Delta k_y = 4\pi \tag{۸}$$



شکل۳.
سطوح همفاز سه‌موج وابسته به سه‌بردار $\mathbf{k}$ ی شکل۱:
این امواج در $y = 0$ هم‌فاز بوده، ولی در $y = \pm 2\pi/\Delta k_y$ به‌طور ویرانگری تداخل می‌کنند.

بنابراین پاشیدگی زاویه‌ای بردارهای موجی، ابعادجانبی بسته موجها را محدود می‌سازد. از نظر کمی، این محدودیت به‌شکل یک رابطه عدم قطعیت است [فرمول‌های (۷) و (۸)].

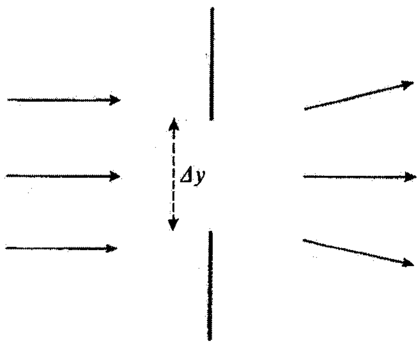
۳ ــ بحث

یک موج تخت بابردار موجی $\mathbf{k}$ راکه درامتداد Ox انتشار می‌یابد درنظربگیرید. هرتلاشی برای محدودساختن گستردگی آن درامتداد عمود بر Ox باعث بروز یک پاشیدگی زاویه می‌شود، یعنی، به‌یک بسته موج مشابه با بسته موجی که در اینجا بررسی می‌کنیم تبدیل می‌شود.

فرض کنید که، به‌عنوان مثال، درمسیر موج تخت یک پرده‌که شکافی با پهنای Δy درآن تعبیرشده است قرار داده‌ایم. این امر منجر به‌یک موج پراشی می‌شود (رک شکل ۴). می‌دانیم که پهنای زاویه‌ای الگوی پراشی توسط رابطه زیر داده می‌شود:

$$2\Delta\theta \simeq 2\frac{\lambda}{\Delta y} \tag{۹}$$

که در آن $\lambda = \frac{2\pi}{|\mathbf{k}|}$ طول موج فرودی است. این در واقع همان وضعیت‌بالاست: فرمولهای (۷) و (۹) یکسانند.



شکل ۴.
وقتی عدم قطعیت Δy کاهش یابد، پراش موج توسط دیافراگم عدم قطعیت Δk_y را افزایش می‌دهد.

مکمل F_I

ارتباط بین مسائل یک‌بعدی وسه‌بعدی

۱ ـ بسته موج سه بعدی
a ـ مورد ساده
b ـ مورد عمومی
۲ ـ توجیه مدلهای یک بعدی

مسلما" فضائی که یک ذره کلاسیکی یا کوانتومی درآن حرکت می‌کند سه بعدی‌است به‌این دلیل بود که معادله شرودینگر (D ـ ۱) درفصل اول را برای تابع موج $\psi(\mathbf{r})$ که به سه مؤلفهٔ بردار، یعنی x ، y و z بستگی دارد، نوشتیم. باوجود این، کرارا" در این فصل از یک مدل یک بعدی ، که درآن فقط متغیر x را درنظر گرفته‌ایم ، استفاده کرده‌ایم ، بدون اینکه این مدل را دقیقا" توجیه کرده باشیم. لذا این مکمل دوهدف رادنبال‌می‌ند: اول (بخش ۱) تعمیم نتایج داده شده در بخش C از فصل اول به‌سه بعد ، سپس (بخش۲) نشان دادن اینکه چگونه می‌توان ، در بعضی موارد ، دقیقا" مدل یک‌بعدی را توجیه کرد .

۱ ـ بسته موج سه بعدی

a ـ مورد ساده

مورد بسیار ساده‌ای را در نظر می‌گیریم که برای آن دو فرضیه زیر برقرار باشد :
ـ بسته موج آزاد است $[V(\mathbf{r}) \equiv 0]$ و لذا می‌تواند مانند معادله (C ـ ۶) ازفصل اول نوشته شود :

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(\mathbf{k})\, e^{i[\mathbf{k}.\mathbf{r} - \omega(\mathbf{k})t]}\, d^3k \tag{۱}$$

ـ علاوه براین، $g(\mathbf{k})$ به‌صورت زیراست :

$$g(\mathbf{k}) = g_1(k_x) \times g_2(k_y) \times g_3(k_z) \tag{۲}$$

یاد آوری کنیم که عبارت $\omega(\mathbf{k})$ برحسب $\mathbf{k}$ به‌صورت :

$$\omega(\mathbf{k}) = \frac{\hbar \mathbf{k}^2}{2m} = \frac{\hbar}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \tag{۳}$$

بود . (۲)و(۳) را در (۱) قرار دهید ، می‌توان سه انتگرال‌گیری‌نسبت به k_x ، k_y و k_z را جداکرد و نتیجه گرفت :

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_1(x, t) \times \psi_2(y, t) \times \psi_3(z, t) \tag{۴}$$

با :

$$\begin{cases} \psi_1(x, t) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}} \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} g_1(k_x)\, e^{i[k_x \cdot x - \omega(k_x)t]}\, dk_x \\ \omega(k_x) = \dfrac{\hbar k_x^2}{2m} \end{cases} \tag{۵}$$

و روابط مشابهی برای $\psi_2(y, t)$ و $\psi_3(z, t)$.

$\psi_1(x, t)$ در واقع دارای شکل یک بسته موج یک‌بعدی است . بنابراین ، دراین‌مورد بخصوص، $\psi(\mathbf{r}, t)$ از حاصلضرب (۴) سه بسته موج یک بعدی ، که هرکدام به‌طریقی کاملا" مستقل تحول می‌یابند ، به‌دست می‌آید .

b ــ مورد عمومی

در مورد عمومی ، که پتانسیل $V(\mathbf{r})$ دلخواه است ، فرمول (۱) معتبرنیست . دراین صورت مفید است که $g(\mathbf{k}, t)$ ، تبدیل فوریه سه‌بعدی تابع $\psi(\mathbf{r}, t)$ را ، بانوشتن :

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(\mathbf{k}, t)\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\, d^3k \tag{۶}$$

وارد کنیم . بستگی $g(\mathbf{k}, t)$ به t ، که $V(\mathbf{r})$ وارد می‌کند ، ازپیش دلخواه است ، به‌علاوه عموما" هیچ دلیلی وجود ندارد که بتوانیم $g(\mathbf{k}, t)$ را ، مانند (۲) ،به‌صورت یک‌حاصلضرب بنویسیم . برای اینکه نتایج بخش۲ــC ازفصل اول را تعمیم‌دهیم ، فرضیه زیرا را در باره وابستگی آن به $\mathbf{k}$ می‌پذیریم : $|g(\mathbf{k}, t)|$ (در هرزمان معین t) تابعی است که برای مقادیری از $\mathbf{k}$ نزدیک به $\mathbf{k}_0$ دارای یک قله بسیار برجسته است و وقتی نوک $\mathbf{k}$ از محدوده D_k به‌مرکز $\mathbf{k}_0$ و ابعاد Δk_x ، Δk_y ، Δk_z خارج می‌شود دارای مقدار قابل اغماضی‌است .

مانند بالا ، قرار می‌دهیم :

$$g(\mathbf{k}, t) = |g(\mathbf{k}, t)|\, e^{i\alpha(\mathbf{k}, t)} \tag{۷}$$

به‌طوری که فاز موجی که توسط بردار $\mathbf{k}$ تعیین می شود می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود :

$$\xi(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) = \alpha(\mathbf{k}, t) + k_x \,.\, x + k_y \,.\, y + k_z \,.\, z \tag{۸}$$

می‌توانیم به‌استدلالی شبیه استدلال بخش۲ـ C ازفصل اول به‌پردازیم . قبل‌ازهرچیز بسته موج وقتی به‌ماگزیمم می‌رسد که تمام امواجی که ، برای آنها نوک بردار $\mathbf{k}$ در D_k واقـع‌است عملا " همفاز باشند ، یعنی ، که ξ در محدوده D_k تغییرات بسیارکوچکی داشته‌باشد . به‌طور کلی ، می‌توان $\xi(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$ را حول $\mathbf{k}_0$ بسط داد . تغییرات آن بین $\mathbf{k}_0$ و $\mathbf{k}$ ، تا مرتبـه اول نسبت به $\delta\mathbf{k} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$ ، برابراست با :

$$\begin{aligned}\delta\xi(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) \simeq \delta k_x\left[\frac{\partial}{\partial k_x}\,\xi(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)\right]_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} &+ \delta k_y\left[\frac{\partial}{\partial k_y}\,\xi(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)\right]_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} \\ &+ \delta k_z\left[\frac{\partial}{\partial k_z}\,\xi(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)\right]_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0}\end{aligned} \tag{۹}$$

یا به‌طور مختصرتر* ، با استفاده از (۸) :

$$\begin{aligned}\delta\xi(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) &\simeq \delta\mathbf{k} \,.\, [\nabla_{\mathbf{k}}\xi(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)]_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} \\ &\simeq \delta\mathbf{k} \,.\, [\mathbf{r} + [\nabla_{\mathbf{k}}\alpha(\mathbf{k}, t)]_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0}]\end{aligned} \tag{۱۰}$$

از رابطه (۱۰) ملاحظه می‌کنیم که تغییرات $\xi(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$ در داخل D_k برای :

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_M(t) = -\,[\nabla_{\mathbf{k}}\alpha(\mathbf{k}, t)]_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} \tag{۱۱}$$

می‌نیمم خواهد بود . دیدیم‌که ، تحت این‌شرایط، $|\psi(\mathbf{r}, t)|$ ماگزیمم است . لذا رابطه (۱۱) مکان $\mathbf{r}_M(t)$ ی مرکز بسته موج را تعیین کرده و تعمیمی است ازمعادلهٔ (۱۵ـ C) ازفصل‌اول به‌سه بعد .

---

* علامت ∇ معرف "گرادیان" است : بنابه‌تعریف $\nabla f(x, y, z)$ برداری‌است که مؤلفه‌های آن عبارتند از $\partial f/\partial x, \partial f/\partial y, \partial f/\partial z$. شاخص $\mathbf{k}$ در $\nabla_{\mathbf{k}}$ بدین معنی است که ، مانند (۹) ، مشتق‌گیری باید نسبت به متغیرهای k_x ، k_y و k_z انجام شود .

حال ، به‌بینیم درجه محدوده D_r بسته موج (۶) ، بسته موج (۶) به‌مرکز $\mathbf{r}_M$ و Δx ، Δy ، Δz مقادیر غیرقابل اغماضی دارد . وقتی امواج با $\mathbf{k}$ های مختلف یکدیگر را با تداخل تخریب کنند ، یعنی ، وقتی تغییرات $\xi(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$ در داخل محدوده D_k از مرتبه 2π (یا دقیق‌تر ، از مرتبه ۱ رادیان) باشد ، $|\psi(\mathbf{r}, t)|$ خیلی کوچکتر از $|\psi(\mathbf{r}_M, t)|$ خواهد شد . قرار دهید $\delta\mathbf{r} = \mathbf{r} - \mathbf{r}_M$ ، اگر (۱۱) را به‌حساب آوریم ، رابطه (۱۰) می‌تواند به‌صورت زیرنوشته شود :

$$\delta\xi(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) \simeq \delta\mathbf{k} \,.\, \delta\mathbf{r} \qquad (۱۲)$$

شرط $\delta\xi(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) \gtrsim 1$ بلافاصله روابط موجود بین ابعاد D_r و ابعاد D_k را به‌ما می‌دهد :

$$\begin{cases} \Delta x \,.\, \Delta k_x \gtrsim 1 \\ \Delta y \,.\, \Delta k_y \gtrsim 1 \\ \Delta z \,.\, \Delta k_z \gtrsim 1 \end{cases} \qquad (۱۳)$$

سپس روابط عدم قطعیت هایزنبرگ مستقیماً از رابطه $\mathbf{p} = \hbar\,\mathbf{k}$ حاصل می‌شود :

$$\begin{aligned} \Delta x \,.\, \Delta p_x &\gtrsim \hbar \\ \Delta y \,.\, \Delta p_y &\gtrsim \hbar \\ \Delta z \,.\, \Delta p_z &\gtrsim \hbar \end{aligned} \qquad (۱۴)$$

این نامساوی‌ها تعمیم (۲۳ــ C) از فصل اول به‌سه بعد هستند .

بالاخره ، توجه کنید که سرعت گروه $\mathbf{V}_G$ ی بسته موج می‌تواند با مشتق‌گیری از (۱۱) نسبت به t به‌دست آید :

$$\mathbf{V}_G = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\nabla_{\mathbf{k}}\alpha(\mathbf{k}, t)\right]_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} \qquad (۱۵)$$

در مورد خاص بسته موج آزادی که لزوماً در (۲) صدق نمی‌کند داریم :

$$\alpha(\mathbf{k}, t) = \alpha(\mathbf{k}, 0) - \omega(\mathbf{k})\,t \qquad (۱۶)$$

که $\omega(\mathbf{k})$ توسط (۳) داده می‌شود . دراین صورت فرمول (۱۵) می‌دهد :

$$\mathbf{V}_G = \left[\nabla_{\mathbf{k}}\omega(\mathbf{k})\right]_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} = \frac{\hbar\mathbf{k}_0}{m} \qquad (۱۷)$$

که تعمیم معادله (۳۱ــ C) از فصل اول است.

۳ ــ توجیه مدلهای یک بعدی

دربخش ۱ــD ازفصل‌اول دیدیم‌که، وقتی پتانسیل مستقل اززمان‌باشد، می‌توان متغیرهای زمانی ومکانی رادرمعادله شرودینگرجداکرد. این امر منجر به معادله ویژه‌مقداری (۸ــ D) می‌شود.
دراینجا می‌خواهیم نشان دهیم که چگونه، دربعضی موارد، می‌توان این روش را ادامه داد و متغیرهای x ، y ، z در (۸ــ D) را نیز جدا ساخت.

فرض کنید انرژی پتانسیل $V(\mathbf{r})$ بتواند به‌صورت زیر نوشته شود:

$$V(\mathbf{r}) = V(x, y, z) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z) \tag{۱۸}$$

حال به‌ببینم آیا جوابهائی به شکل:

$$\varphi(x, y, z) = \varphi_1(x) \times \varphi_2(y) \times \varphi_3(z) \tag{۱۹}$$

برای معادله ویژه مقداری‌وجود دارد یا خیر؟ استدلالی شبیه به‌استدلال فصل‌اول (بخش a ــ۱ــ D) نشان می‌دهد که این امر در صورتی امکان پذیر است که داشته باشیم:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V_1(x)\right]\varphi_1(x) = E_1\,\varphi_1(x) \tag{۲۰}$$

و هم‌چنین دومعادله مشابه دیگر که درآن x توسط y (یا z)، V_1 توسط V_2 (یا V_3) و E_1 توسط E_2 (یا E_3) جایگزین شده باشد. علاوه براین، لازم است که رابطه زیر نیز برقرار باشد:

$$E = E_1 + E_2 + E_3 \tag{۲۱}$$

معادله (۲۰) از همان نوع (۸ــ D) است، ولی دریک بعد، متغیرهای x ، y و z جدا شده‌اند*.

* می‌توان نشان داد (رک فصل دوم، بخش F-۴ -a-β) که، وقتی $V(\mathbf{r})$ به‌شکل (۱۸) باشد تمام جوابهای معادله ویژه مقداری (۸ ــ D) ترکیبات خطی جوابهائی هستندکه‌دراینجا پیدا کرده‌ایم.

حال اگر، به‌عنوان مثال، انرژی پتانسیل $V(\mathbf{r})$ یک ذره فقط به x بستگی داشته باشد چه اتفاق می‌افتد؟ دراین مورد $V(\mathbf{r})$ را می‌توان به‌صورت (۱۸) نوشت، که در آن $V_1 = V$ و $V_2 = V_3 = 0$. معادلات (۲۰) برای y و z به‌مورد ذره آزاد دریک بعدمربوط می‌شوند، که قبلاً، دربخش ۱ــ C ازفصل اول، مطالعه‌کردیم، جوابهای آنها امواج تخت $e^{ik_y \cdot y}$ و $e^{ik_z \cdot z}$ هستند. آنچه می‌ماند این است که معادله (۲۰) را، که مسأله‌ای است‌فقط دریک بعد، حل کنیم، معذلک، انرژی کل ذره در سه‌بعد برابراست با:

$$E = E_1 + \frac{\hbar^2}{2m}[k_y^2 + k_z^2] \tag{۲۲}$$

بنابراین مدلهای یک بعدی‌ای‌که درفصل اول بررسی‌شدند درواقع‌مربوطند به‌ذره‌ای در سه بعد که در یک پتانسیل $V(\mathbf{r})$ که فقط به x بستگی دارد، حرکت می‌کند. دراین‌صورت جوابهای $\varphi_2(y)$ و $\varphi_3(z)$ بسیار ساده بوده و به ذراتی مربوط می‌شوند که یا در "امتداد Oy آزادند" یا در امتداد Oz. بدین جهت است که تمام توجه خود را به‌مطالعهٔ معادله مربوط به x معطوف داشته‌ایم.

مکمل G_1

بسته موج گوسی یک‌بعدی :

گسترش بسته موج

۱ ــ تعریف یک بسته موج گوسی
۲ ــ محاسبه Δx و Δp ، رابطه عدم قطعیت
۳ ــ تحول بسته موج
a ــ محاسبه $\psi(x, t)$
b ــ سرعت بسته موج
c ــ گسترش بسته موج

درین مکمل می‌خواهیم یک بسته موج آزاد بخصوص (یک بعدی) را ، که برای آن تابع $g(k)$ گوسی است ، بررسی کنیم . دلیل جالب بودن این مثال دراین واقعیت نهفته است‌که محاسبات می‌تواند تاآخر به‌طوردقیق‌انجام شوند . بدین‌ترتیب ، ابتدامی‌توانیم در این موردخاص، خواص مختلف بسته موجها راکه دربخش‌C‌ازفصل اول به‌آنها اشاره کردیم ، ثابت کنیم . سپس ازاین‌خواص برای مطالعه ، تغییرات پهنای بسته موج نسبت به‌زمان‌وآشکار کردن پدیده گسترش بسته موج با زمان استفاده خواهیم کرد .

۱ ــ تعریف یک بسته موج گوسی

در یک مدل یک بعدی ، یک ذره آزاد $[V(x) \equiv 0]$ درنظر بگیرید که تابع موج آن در زمان $t = 0$ به‌صورت زیر باشد :

$$\psi(x, 0) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2} \, e^{ikx} \, dk \qquad (1)$$

این بسته موج از ترکیب امواج تخت e^{ikx} باضرائب ؛

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} g(k, 0) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} \; e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2} \qquad (2)$$

که متناظرند با یک تابع گوسی به مرکز $k=k_0$ ضرب در یک ضریب عددی که تابع موج را بهنجار می‌کند)، به‌دست آمده است. به‌این دلیل است که بسته موج (۱) گوسی نامیده می‌شود.

در محاسباتی که درزیر می‌آید، کراراً با انتگرالهائی از نوع زیر مواجه خواهیم شد:

$$I(\alpha, \beta) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2(\xi+\beta)^2}\, d\xi \qquad (۳)$$

که درآن α و β اعداد ی هستند مختلط [برای اینکه انتگرال (۳) همگرا باشد، بایدداشته باشیم $\text{Re}\,\alpha^2 > 0$]. روش مانده‌ها به‌ما امکان می‌دهد تانشان دهیم که این انتگرال به β بستگی ندارد:

$$I(\alpha, \beta) = I(\alpha, 0) \qquad (۴)$$

و اینکه، وقتی شرط $-\pi/4 < \text{Arg}\,\alpha < +\pi/4$ برقرار باشد (که اگر $\text{Re}\,\alpha^2 > 0$ باشد، همواره برقرار است). $I(\alpha, 0)$ عبارت است از:

$$I(\alpha, 0) = \frac{1}{\alpha} I(1, 0) \qquad (۵)$$

حال آنچه می‌ماند محاسبه $I(1, 0)$ است، که می‌تواند به‌طور کلاسیک، از طریق یک انتگرال‌گیری دوگانه در صفحه xOy و درمختصات قطبی انجام شود:

$$I(1, 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2}\, d\xi = \sqrt{\pi} \qquad (۶)$$

بنابراین داریم:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2(\xi+\beta)^2}\, d\xi = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} \qquad (۷)$$

با:

$$-\pi/4 < \text{Arg}\,\alpha < +\pi/4$$

اکنون $\psi(x, 0)$ را محاسبه کنیم. برای انجام این کار، جملات وابسته به k در نماهای (۱) را، بانوشتن آنها به‌صورت:

$$-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2 + ikx = -\frac{a^2}{4}\left[k - k_0 - \frac{2ix}{a^2}\right]^2 + ik_0x - \frac{x^2}{a^2} \qquad (۸)$$

در یک مربع کامل جمع می‌کنیم . سپس، با استفاده از (۷) ، خواهیم داشت :

$$\psi(x,0) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{ik_0x}\, e^{-x^2/a^2} \qquad (۹)$$

ملاحظه می‌کنیم که ، همان‌طور که می‌توان انتظار داشت ، تبدیل فوریه یک تابع گوسی نیز یک تابع گوسی است (رک پیوست ۱) .

بنابراین ، درزمان $t = 0$ ، چگالی احتمال ذره عبارت است :

$$|\psi(x,0)|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}}\, e^{-2x^2/a^2} \qquad (۱۰)$$

منحنی نمایش $|\psi(x,0)|^2$ همان منحنی زنگی‌شکل معمولی است . مرکز بسته موج [ماگزیمم $|\psi(x,0)|^2$] در نقطه $x = 0$ واقع است . این در واقع همان چیزی است که‌اگر فرمول عمومی (C —۱۶) از فصل اول را اعمال کرده بودیم ، به‌دست می‌آوردیم زیرا دراین مورد بخصوص تابع $g(k)$ حقیقی است .

۳ ــ محاسبه Δx و Δp با رابطه عدم قطعیت

وقتی که تابع گوسی $f(x) = e^{-x^2/b^2}$ را مطالعه می‌کنیم ، مناسب است که پهنای Δx آنرا دقیقا" به‌صورت زیر تعریف کنیم :

$$\Delta x = \frac{b}{\sqrt{2}} \qquad (۱۱)$$

وقتی x از صفر تا $\pm\,\Delta x$ تغییر می‌کند ، $f(x)$ به نسبت $1/\sqrt{e}$. کاهش می‌یابد . این تعریف ، که البته اختیاری است ، این امتیاز را دارد که با تعریف " ریشه میانگین مربعی انحراف " متغیر x منطبق است (رک فصل سوم ، بخش C — ۵) .

بااین قرارداد ، می‌توانیم پهنای Δx بسته موج (۱۰) را محاسبه کنیم ، که برابر می‌شود با :

$$\Delta x = \frac{a}{2} \tag{۱۲}$$

می‌توان به‌همین طریق پهنای Δk را محاسبه کرد ، زیرا $|g(k,0)|^2$ نیز یک تابع گوسی است . نتیجه این محاسبه خواهد شد :

$$\Delta k = \frac{1}{a} \tag{۱۳-a}$$

یا :

$$\Delta p = \frac{\hbar}{a} \tag{۱۳-b}$$

بنابراین داریم :

$$\Delta x \,.\, \Delta p = \frac{\hbar}{2} \tag{۱۴}$$

نتیجه‌ای که کاملاً " با رابطه عدم قطعیت هایزنبرگ سازگار است .

۳ ـ تحول بسته موج

a ـ محاسبه $\psi(x,t)$

برای محاسبه تابع موج $\psi(x,t)$ در زمان t ، کافی است فرمول عمومی (C-۶) از فصل اول را ، که تابع موج یک ذره‌آزاد را به‌دست می‌دهد ، مورداستفاده قرار دهیم ، نتیجه خواهیم گرفت :

$$\psi(x,t) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2}\, e^{i[kx-\omega(k)t]}\, dk \tag{۱۵}$$

که درآن $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$ (رابطه پاشیدگی برای یک ذره‌آزاد) . خواهیم دید که در زمان t نیز ، بسته موج گوسی باقی می‌ماند . عبارت (۱۵) می‌تواند ، مانند فوق ، با جمع‌کردن تمام جملاتی‌که در نماها به k بستگی دارند در مربع‌کامل ، تبدیل‌شود . ازاین‌رو می‌توانیم

با استفاده از (۷) به‌دست آوریم :

$$\psi(x, t) = \left(\frac{2a^2}{\pi}\right)^{1/4} \frac{e^{i\varphi}}{\left(a^4 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2}\right)^{1/4}} e^{ik_0 x} \exp\left\{-\frac{\left[x - \frac{\hbar k_0}{m} t\right]^2}{a^2 + \frac{2i\hbar t}{m}}\right\} \quad (16\text{—a})$$

که φ حقیقی و مستقل از x است :

$$\varphi = -\theta - \frac{\hbar k_0^2}{2m} t \qquad \text{با} \qquad \tan 2\theta = \frac{2\hbar t}{ma^2} \quad (16\text{—b})$$

حال چگالی احتمال $|\psi(x, t)|^2$ ی ذره در زمان t را محاسبه کنیم . خواهیم داشت :

$$|\psi(x, t)|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}}} \exp\left\{-\frac{2a^2\left(x - \frac{\hbar k_0}{m} t\right)^2}{a^4 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2}}\right\} \quad (17)$$

اکنون نشان دهیم‌که هنجار بسته موج ، $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 \, dx$ ، به‌زمان وابسته نیست (درفصل سوم خواهیم دیدکه این خاصیت ازاین حقیقت نتیجه می‌شودکه هامیلتونی H ذره هرمیتی است) . برای این‌کار می‌توانیم ، از (۷) استفاده کنیم و از رابطه (۱۷) بین $-\infty$ تا $+\infty$ انتگرال‌گیری‌کنیم . سریعترخواهد بودکه ازرابطه (۱۵) به‌ببینیم تبدیل فوریهٔ $\psi(x, t)$ توسط رابطه زیر داده می‌شود :

$$g(k, t) = e^{-i\omega(k)t} g(k, 0) \quad (18)$$

لذا $g(k, t)$ آشکارا دارای همان هنجار $g(k, 0)$ است . معادله بسل ــ پارسوال به‌ما می‌گوید که $\psi(x, t)$ و $g(k, t)$ دارای یک هنجار هستند ، همین‌طور $\psi(x, 0)$ و $g(k, 0)$. ازین‌مطلب نتیجه می‌گیریم که $\psi(x, t)$ دارای همان هنجار $\psi(x, 0)$ است .

b ــ سرعت بسته موج

در (۱۷) دیدیم که چگالی احتمال $|\psi(x, t)|^2$ یک تابع گوسی به‌مرکز $x = V_0 t$ است که سرعت V_0 به‌صورت زیر تعریف می‌شود :

$$V_0 = \frac{\hbar k_0}{m} \qquad (۱۹)$$

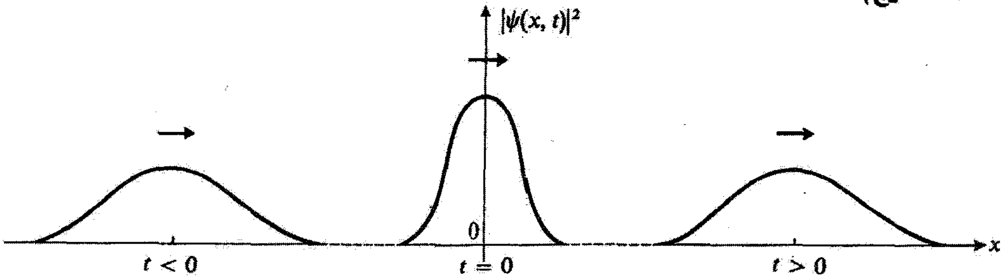
این نتیجه را می‌توانستیم ، با توجه به‌رابطه عمومی (۳۲ـ C) ازفصل اول ، که سرعت گروه V_G را می‌دهد ، انتظار داشته باشیم .

c ـ گسترش بسته موج

باردیگر فرمول (۱۷) را در نظر بگیریم . بنابه تعریف (۱۱) ، پهنای $\Delta x(t)$ ی بسته موج در زمان t برابراست با :

$$\Delta x(t) = \frac{a}{2}\sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}} \qquad (۲۰)$$

مشاهده می‌کنیم که (رک شکل ۱) تحول بسته موج به‌یک تغییرمکان ساده با سرعت V_0 محدود نمی‌شود . بسته موج دستخوش تغییرشکل نیز می‌شود . وقتی t از $-\infty$ تا صفر افزایش می‌یابد ، پهنای بسته موج کاهش یافته و در $t = 0$ به‌یک می‌نیمم می‌رسد . سپس همانطوری که t به‌افزایش خود ادامه می‌دهد ، $\Delta x(t)$ بدون حدگسترش می‌یابد (گسترش بسته موج) .



شکل۱ .
برای t های منفی ، پهنای بسته موج گوسی درحین انتشار کاهش می‌یابد و درزمان $t = 0$ ، " می‌نیمم " است : حاصلضرب $\Delta x \;\; \Delta p$ برابراست‌با $\hbar/2$ سپس برای $t > 0$ ، بسته موج باردیگر در حین انتشار گسترش می‌یابد .

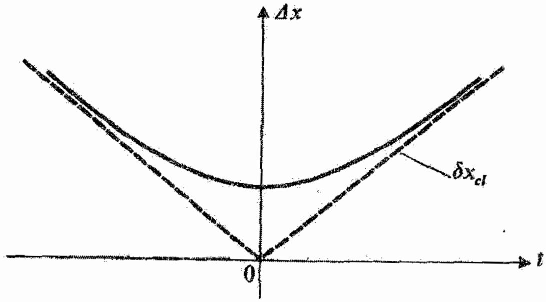
می‌توان در رابطه (۱۷) دید که ارتفاع بسته موج نیز تغییر می‌کند ، ولی در جهت خلاف پهنا ، به‌طوری که هنجار $\psi(x, t)$ ثابت می‌ماند .

خواص تابع $g(k, t)$ کاملا" متفاوت‌اند . در واقع [رک فرمول (۱۸)] :

$$|g(k,t)| = |g(k,0)| \tag{۲۱}$$

بنابراین ، تکانه متوسط بسته موج $(\hbar k_0)$ و پاشیدگی تکانه آن $(\hbar\Delta k)$ نسبت به‌زمان تغییر نمی‌کنند . بعدا" خواهیم‌دید (فصل‌سوم) که این امرناشی ازاین واقعیت است که برای یک ذره آزاد ، تکانه یک پایای حرکت است . از نظر فیزیکی واضح است که چون ذره آزادباهیچ مانعی برخورد نمی‌کند ، توزیع تکانه آن نمی‌تواند تغییرکند .

وجود پاشیدگی تکانه $\Delta p = \hbar\Delta k = \hbar/a$ بدین‌معنی‌است‌که سرعت‌ذره فقط باتقریب $\Delta v = \frac{\Delta p}{m} = \frac{\hbar}{ma}$ معلوم‌است . یک‌دسته‌ذرات‌کلاسیکی رادرنظربگیریدکه در زمان $t = 0$ ازنقطه $x = 0$ ، باپاشیدگی‌سرعتی‌برابربا Δv شروع به‌حرکت‌کنند . درزمان t پاشیدگی مکانهای آنها برابر با $\delta x_{cl} = \Delta v\,|t| = \frac{\hbar|t|}{ma}$ خواهدبود ، این پاشیدگی همان‌طور که درشکل ۲ نشان داده شده‌است ، با t بطور خطی افزایش می‌یابد . حال‌روی همان نمودار ، منحنی‌ای که تحول $\Delta x(t)$ نسبت بزمان را می‌دهد ، رسم می‌کنیم ، وقتی t بی‌نهایت می‌شود ، $\Delta x(t)$ عملا" بر δx_{cl} منطبق است[شاخه هذلولی‌ای که $\Delta x(t)$ را نشان می‌دهد دارای مجانبهائی به‌صورت خط راست می‌باشد که همان δx_{cl} است] . بنابر این ، می‌توانیم بگوئیم که ، وقتی t بسیار بزرگ باشد ، یک تعبیر شبه‌کلاسیکی برای‌پهنای Δx وجود دارد . از طرف دیگر ، وقتی t به‌سمت صفر میل‌کند ، $\Delta x(t)$ مقادیری می‌گیرد که بیشتر و بیشتر با δx_{cl} اختلاف دارند . مسلما" ذره کوانتومی باید پیوسته دررابطه عدم قطعیت هایزنبرگ ، $\Delta x \,.\, \Delta p \geqslant \hbar/2$ ، صدق‌کند و چون Δp ثابت است ، این‌رابطه‌یک حد پائین به Δx تحمیل می‌کند . این حد همان چیزی است که می‌توان در شکل ۲ دید .



شکل ۲ .

تغییرات پهنای Δx بسته موج شکل ۱ نسبت به زمان . برای t های بزرگ ، Δx به‌سمت δx_{cl} ، پاشیدگی مکانهای دسته ذرات کلاسیکی‌ای که‌درزمان $t = 0$ با پاشیدگی سرعت $\Delta p/m$ نقطه $x = 0$ راترک‌کرده‌اند ، میل‌می‌کند .

گوشـزدها :

(i) گسترش بسته موجهای آزاد یک پدیده عمومی است که به‌مورد خاصی که در اینجا مطالعه کردیم ، محدود نمی‌شود . می‌توان نشان داد که ، تغییرات پهنای یک‌بسته موج آزاد دلخواه ، به‌صورتی است که در شکل ۲ نشان داده شده است (رک تمرین ۴ از مکمل L_{III}) .

(ii) درفصل اول استدلال ساده‌ای در (۱۷ـ C) ما را به $\Delta x.\Delta k \simeq 1$ رهنمون شد ، بدون اینکه فرضیه خاصی در باره $g(k)$ ، بجز بیان این مطلب کـه $g(k)$ دارای قلـه‌ای به‌پهنای Δk است وشکل آن به‌صورتی است که درشکل ۳ ازفصل اول نشان‌داده‌شده است ، به‌کار برده باشیم (که در واقع دراین مکمل نیز چنین است) . دراین‌صورت چگونه رابطه $\Delta x \,.\, \Delta k \gg 1$ را (به‌عنوان مثال ، برای یک بسته موج گوسی وقتی که t بزرگ است) به‌دست می‌آوریم .

البته این فقط یک تناقض ظاهری است . در فصل اول ، برای‌یافتن $\Delta x \,.\, \Delta k \simeq 1$ ، در (۱۳ـ C) فرض‌کردیم که شناسه $\alpha(k)$ ی $g(k)$ بتواند در محدوده Δk تقریبا" یک تـابع خطی باشد . لذا به‌طور ضمنی یک فرضیه تکمیلی در نظر گرفتیم : وآن اینکه جملات غیرخطی مشارکت‌قابل‌اغماضی‌درشکل $g(k)$ درمحدوده Δk دارند . بـه‌عنوان مثال ، بـرای جملاتی که نسبت به $(k - k_0)$ ازمرتبه دوم‌انـد ، لازم است داشته باشیم :

$$\Delta k^2\left[\frac{d^2\alpha}{dk^2}\right]_{k=k_0} \ll 2\pi. \qquad (۲۲)$$

اگر ، برعکس ، فاز $\alpha(k)$ نتواند در محدوده Δk و با خطائی خیلی کوچکتر از π ۲ ، توسط یک‌تابع خطی‌نمایانده شود ، وقتی‌به‌استدلال‌فصل‌اول برگردیم ، درمی‌یابیـم که بسته موج ازآنچـه که توسط (۱۷ـ C) پیش‌بینی شده بـود ، بـزرگتر است .

در مورد بسته موج گوسی‌ای که دراین مکمل مطالعه کردیم ، داریم $\Delta k \simeq \frac{1}{a}$ و $\alpha(k) = -\frac{\hbar k^2}{2m}t$ در نتیجه ، شرط (۲۲) می‌تواند به‌صورت $\left(\frac{1}{a}\right)^2\frac{\hbar t}{m} \ll 2\pi$ نوشته‌شود . در واقع ، می‌توانیم به‌کمک (۲۰) تحقیق کنیم که ، تاوقتی این شرط برقرارباشد ، حاصلضرب $\Delta x \,.\, \Delta k$ تقریبا" برابر است با ۱ .

مکمل H_1

حالتهای مانای یك ذره درپتانسیلهای مربعی یك‌بعدی

۱ ــ رفتار یک تابع موج مانای $\varphi(x)$

a ــ نواحی با انرژی پتانسیل ثابت
b ــ رفتار $\varphi(x)$ در نقطه‌ناپیوستگی انرژی پتانسیل
c ــ اصول محاسبه

۲ ــ مطالعه بعضی موارد ساده

a ــ پله‌های پتانسیل
b ــ سدهای پتانسیل
c ــ حالتهای مقید ، چاههای پتانسیل مربعی

درفصل اول (بخش۲ــ D) ، نفع مطالعهٔ حرکت یک ذره دریک "پتانسیل مربعی" را که تغییر فضائی سریع آن برای بعضی از مقادیر x آثار صرفا "کوانتومی ایجاد می‌کرد ، دیدیم . شکل توابع موج وابسته به‌حالتهای مانای ذره با درنظر گرفتن یک مشابه‌اپتیکی‌که ما را قادر ساخت تا به‌طور بسیار ساده‌ای بفهمیم چگونه این آثارفیزیکی جدیدظاهرمی‌شوند پیش بینی شد .

در این مکمل ، محاسبه کمی حالتهای مانای ذره را به‌طور مختصر شرح می‌دهیم . نتایج این محاسبه را برای چند مورد ساده ارائه خواهیم کرد و مفاهیم فیزیکی آنها را مورد بحث قرار خواهیم داد . دراینجا خود را به‌مدلهای یک بعدی محدود خواهیم ساخت (رک مکمل F_1) .

۱ ــ رفتار یک تابع موج مانای

a . نواحی با انرژی پتانسیل ثابت

در مورد یک پتانسیل مربعی ،$V(x)$ در بعضی از نواحی فضا یک تابع ثابت

$V(x) = V$ است . در چنین ناحیه‌ای ، معادله (D‌ـ۸)ازفصل اول‌می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود :

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi_\varepsilon(x) + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V_\varepsilon(x)]\varphi_\varepsilon(x) = 0 \qquad (۱)$$

چند مورد را از هم متمایز خواهیم ساخت :

$E > V$ (i)

ثابت مثبت k را که توسط :

$$E - V = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad (۲)$$

تعریف می‌شود وارد می‌کنیم . دراین صورت حل معادله (۱) می‌تواند به‌صورت :

$$\varphi(x) = A\,e^{ikx} + A'\,e^{-ikx} \qquad (۳)$$

نوشته شود که A و A' ثابتهای مختلطی هستند .

$E < V$ (ii)

این‌شرط به‌ناحیه‌هایی ازفضا مربوط می‌شود که طبق قوانین مکانیک کلاسیک برای ذره ممنوع است . دراین مورد ، ثابت مثبت ρ را که توسط :

$$V - E = \frac{\hbar^2 \rho^2}{2m} \qquad (۴)$$

تعریف می‌شود وارد می‌کنیم و جواب (۱) می‌تواند به‌صورت :

$$\varphi(x) = B\,e^{\rho x} + B'\,e^{-\rho x} \qquad (۵)$$

نوشته شود که درآن B و B' ثابتهای مختلطی هستند .

$E = V$ (iii)

دراین مورد بخصوص، $\varphi(x)$ یک تابع خطی از x خواهد بود .

b ـ رفتار $\varphi(x)$ در نقطه ناپیوستگی انرژی پتانسیل

رفتار تابع موج در نقطه $x = x_1$ که درآن پتانسیل $V(x)$ ناپیوسته است ، چگونه

است؟ ممکن است تصور شود که دراین نقطه تابع موج $\varphi(x)$ بطور عجیبی رفتار خواهد کرد، به‌عنوان مثال، ناپیوسته خواهد شد. هدف این بخش این است که‌نشان دهیم این طور نیست: $\varphi(x)$ و $d\varphi/dx$ پیوسته هستند و فقط مشتق دوم $d^2\varphi/dx^2$ است که در $x = x_1$ ناپیوسته خواهد بود.

سعی کنیم، بدون ارائه اثبات دقیقی این‌خاصیت را بفهمیم. برای این منظور یادآور می‌شویم‌که یک‌پتانسیل مربعی باید به‌عنوان حدیک پتانسیل $V_\varepsilon(x)$ درنظر گرفته شودکه وقتی $\varepsilon \longrightarrow 0$، در خارج از بازه $[x_1 - \varepsilon, x_1 + \varepsilon]$ برابر $V(x)$ است، و در داخل این بازه به‌طور پیوسته تغییر می‌کند.

سپس معادله زیر را در نظر بگیرید:

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\,\varphi(x) = 0 \tag{۶}$$

که فرض می‌شود $V_\varepsilon(x)$، مستقل از ε، در داخل بازه $[x_1 - \varepsilon, x_1 + \varepsilon]$ محدود است. یک جواب $\varphi_\varepsilon(x)$ طوری انتخاب‌کنیدکه، برای $x < x_1 - \varepsilon$، بریک‌جواب معین (۱) منطبق باشد. مساءله عبارت از این است که نشان دهیم، وقتی $\varepsilon \longrightarrow 0$، $\varphi_\varepsilon(x)$ به سمت یک تابع $\varphi(x)$ که در $x = x_1$ پیوسته و مشتق‌پذیر است میل می‌کند. بپذیریم که، برای هرمقدار ε، $V_\varepsilon(x)$ در نزدیکی $x = x_1$ محدود است*. از نظر فیزیکی، این مطلب بدان معنی است‌که چگالی احتمال محدود باقی می‌ماند. سپس از (۶) بین $x_1 - \eta$ و $x_1 + \eta$ انتگرال می‌گیریم، خواهیم داشت:

$$\frac{d\varphi_\varepsilon}{dx}(x_1 + \eta) - \frac{d\varphi_\varepsilon}{dx}(x_1 - \eta) = \frac{2m}{\hbar^2}\int_{x_1-\eta}^{x_1+\eta}[V_\varepsilon(x) - E]\varphi_\varepsilon(x)\,dx \tag{۷}$$

درحد، وقتی $\varepsilon \longrightarrow 0$، تابع طرف راست این رابطه که بایدازآن انتگرال گرفته شود، به‌خاطر فرض قبلی‌مان، کراندار می‌ماند. در نتیجه، اگر η به‌سمت صفر میل کند، انتگرال نیز به‌سمت صفر میل خواهد کرد، و:

$$\frac{d\varphi}{dx}(x_1 + \eta) - \frac{d\varphi}{dx}(x_1 - \eta) \xrightarrow[\eta\to 0]{} 0 \tag{۸}$$

بنابراین، دراین حد، $d\varphi/dx$ و هم‌چنین $\varphi(x)$ در $x = x_1$ پیوسته‌اند (دلیل پیوستگی

---

* این نکته می‌تواند از خواص معادله دیفرانسیل (۱) به‌طور ریاضی اثبات شود.

$\varphi(x)$ این است که انتگرال یک تابع پیوسته است) . از طرف دیگر ، $d^2\varphi/dx^2$ ناپیوسته است و همان‌طور که می‌توان مستقیما" از (۱) دید ، در $x = x_1$ پرشی برابـــر با $\frac{2m}{\hbar^2}\varphi(x_1)\sigma_V$ انجام می‌دهد [σ_V معرف تغییر $V(x)$ در $x = x_1$ است] .

گوشـزد :

در استدلال فوق ، ضروری است که $V_\varepsilon(x)$ کراندار بماند . در چند تمرین از مکمـل K_I ، به‌عنوان مثال ، موردی‌رادرنظرخواهیم‌گرفت‌که برای‌آن $V(x) = \alpha\delta(x)$ تابع بی‌کرانی انتگرال آن محدود می‌ماند ، باشد . در این مـورد ، $\varphi(x)$ پیوسته می‌ماند ، ولی $d\varphi/dx$ چنین نیست .

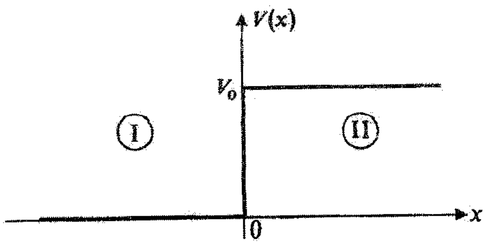
c ـ اصول محاسبه

بنابراین ، روش تعیین حالتهای مانا دریک " پتانسیل مربعی " به‌شرح زیراست : در تمام ناحیه‌هائی که $V(x)$ ثابت است ، $\varphi(x)$ را به هرکدام از دوشکل (۴) یا (۵) که مناسب است بنویسید ، سپس این توابع را ، باشرط پیوستگی $\varphi(x)$ و $d\varphi/dx$ در نقاطی کـه $V(x)$ ناپیوسته است ، " به‌یکدیگر متصل کنید " .

۲ ـ بررسی چند مورد ساده

حال به‌محاسبه کمی حالتهای مانا برای تمام شکلهای $V(x)$ که در بخش D—۲—c ازفصل اول درنظرگرفتیم ، برطبق روشی‌که دربالاتوصیف شد ، بپردازیم . بدین‌ترتیب‌ثابت خواهیم‌کردکه شکل‌جوابها درواقع همانهائی است‌که‌توسط مشابه‌اپتیکی پیش‌بینی شده بود .

a ـ پله‌های پتانسیل



شکل ۱ .
پله پتانسیل

α . موردی که $E > V_0$ است ، انعکاس جزئی
قرار دهید :

$$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = k_1 \tag{۹}$$

$$\sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} = k_2 \tag{۱۰}$$

جوابهای (۱) در دو ناحیه I $(x < 0)$ و II $(x > 0)$ بهشکل (۳) هستند :

$$\varphi_I(x) = A_1\, e^{ik_1x} + A_1'\, e^{-ik_1x} \tag{۱۱}$$

$$\varphi_{II}(x) = A_2\, e^{ik_2x} + A_2'\, e^{-ik_2x} \tag{۱۲}$$

چون معادله (۱) همگن است ، روش محاسبهٔ مذکور در بخش c ـ ۱ می‌تواند فقط ما را به‌تعیین نسبتهای A_1'/A_1 ، A_2/A_1 و A_2'/A_1 قادرسازد . درواقع ، دوشرط اتصال در $x = 0$ برای تعیین این سه‌نسبت کافی نیست . به‌این جهت A_2' را مساوی صفرانتخاب خواهیم کرد ، $A_2' = 0$ ، که معادل این است که خود را به‌موردی محدود کنیم‌که ذره فرودی از $x = -\infty$ می‌آید . دراین صورت از شرایط اتصال خواهیم داشت :

$$\frac{A_1'}{A_1} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \tag{۱۳}$$

$$\frac{A_2}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \tag{۱۴}$$

$\varphi_I(x)$ ترکیبی است از دو موج . موج اول (جملهٔ برحسب A_1) مربوط است به‌یک ذره فرودی ، با تکانه $p = \hbar k_1$ ، که ازچپ به‌راست منتشرمی‌شود . موج دوم (جملهٔ برحسب A_1') مربوط است به‌یک ذره بازتابیده ، با تکانه $-\hbar k_1$ ، که درجهت مخالف انتشارمی‌یابد . چون A_2' را مساوی با صفر انتخاب کرده‌ایم ، $A_2' = 0$ فقط از یک موج ، وابسته به‌ذره عبور کرده ، تشکیل‌شده‌است . درفصل سوم (بخش β ـ c ـ ۱ ـ D) خواهیم‌دیدکه چگونه‌می‌توان ، با به‌کار بردن مفهوم یک جریان احتمال ، ضریب عبور T و ضریب بازتاب R را برای یک‌پله پتانسیل تعریف کرد (رک هم‌چنین به‌بخش ۲ از مکمل B_{III}) . این ضرائب ، احتمال عبور از پله پتانسیل یا بازگشت از آنرا در نقطه $x = 0$ بـرای ذره‌ای کـه از $x = -\infty$ می‌آیـد به‌دست می‌دهند . بدین ترتیب خواهیم داشت :

$$R = \left|\frac{A_1'}{A_1}\right|^2 \tag{۱۵}$$

و، برای T *، :

$$T = \frac{k_2}{k_1}\left|\frac{A_2}{A_1}\right|^2 \tag{۱۶}$$

سپس ، با در نظرگرفتن (۱۳) و(۱۴) ، داریم :

$$R = 1 - \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2} \tag{۱۷}$$

$$T = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2} \tag{۱۸}$$

به‌آسانی می‌توان نشان داد که $R + T = 1$: مسلم است‌که ذره یا عبورمی‌کند یا بازتابیده می‌شود . برخلاف پیش بینی‌های مکانیک کلاسیک ، احتمال برگشتن ذره فرودی‌غیرصفراست . این نکته درفصل اول ، با استفاده ازمشابه اپتیکی و بررسی بازتاب یک موج نوری از یک سطح مشترک تخت (با $n_1 > n_2$) ، تشریح شد . بعلاوه ، می‌دانیم که در اپتیک ، هیچ‌تاءخیر فازی توسط یک چنین انعکاسی ایجاد نمی‌شود ، معادلات (۱۳)و(۱۴) درواقع‌نشان‌می‌دهند که نسبتهای A_1'/A_1 و A_2/A_1 حقیقی است . بنابراین ، ذره‌کوانتومی دراثر بازتاب یا عبور کند نمی‌شود (رک مکمل J_I ، بخش ۲) . بالاخره، به‌سادگی می‌توان با استفاده از (۹) ، (۱۰)و(۱۱) نشان دادکه اگر $E \gg V_0$ باشد ، $T \simeq 1$: وقتی انرژی ذره در مقابل ارتفاع پله پتانسیل به‌حدکافی بزرگ باشد ، ذره طوری ازاین پله می‌گذرد ، که‌گوئی اصلا "پله وجود نداشته است .

β . موردی که $E < V_0$ باشد ، بازتاب کلی

روابط (۱۰) و(۱۲) را توسط روابط زیر جایگزین می‌کنیم :

$$\sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} = \rho_2 \tag{۱۹}$$

---

* منشاء فیزیکی فاکتور k_2/k_1 که در T ظاهر می‌شود دربخش ۲ ازمکمل J_I بحث‌شده‌است .

$$\varphi_{II}(x) = B_2\, e^{\rho_2 x} + B'_2\, e^{-\rho_2 x} \qquad (۲۰)$$

برای اینکه این جواب وقتی $x \longrightarrow +\infty$ کراندار بماند، لازم است که داشته باشیم:

$$B_2 = 0 \qquad (۲۱)$$

شرایط اتصال در $x = 0$ برای این مورد می‌دهند:

$$\frac{A'_1}{A_1} = \frac{k_1 - i\rho_2}{k_1 + i\rho_2} \qquad (۲۲)$$

$$\frac{B'_2}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + i\rho_2} \qquad (۲۳)$$

دراین صورت ضریب بازتاب R برابراست با:

$$R = \left|\frac{A'_1}{A_1}\right|^2 = \left|\frac{k_1 - i\rho_2}{k_1 + i\rho_2}\right|^2 = 1 \qquad (۲۴)$$

مانند مکانیک کلاسیک، ذره همواره بازتابیده می‌شود (بازتاب‌کلی). با وجود این، یک اختلاف مهم وجوددارد، که قبلاً" درفصل اول به‌آن اشاره‌کردیم: بخاطر وجود موج میرای $e^{-\rho_2 x}$، احتمال حضور ذره در ناحیه‌ای از فضا که ازنظرکلاسیکی برای‌آن ممنوع می‌باشد، غیر صفراست. این احتمال به‌طور نمائی با x کاهش یافته و وقتی x بزرگتراز"گستره" $1/\rho_2$ موج میرا باشد، قابل اغماض می‌شود. هم‌چنین توجه‌کنیدکه‌ضریب A'_1/A_1 مختلط‌است. دراثر بازتاب، انتقال فازی‌ظاهر می‌شودکه، ازنظرفیزیکی، ناشی از این واقعیت است که ذره وقتی به‌ناحیه $x > 0$ نفوذ می‌کند دچار تاءخیر می‌شود (رک مکمل J_I، بخش ۱و هم‌چنین B_{III} بخش۳). این انتقال فاز مشابه انتقال فازی است که در هنگام بازتاب نور از یک ماده فلزی ظاهر می‌شود، ولی در مکانیک کلاسیک هیچ مشابهی برای‌آن وجود ندارد.

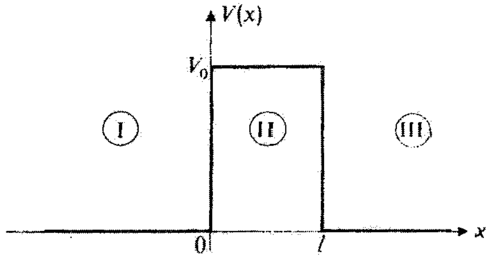
گوشـزد:

وقتی $V_0 \longrightarrow +\infty$، $\rho_2 \longrightarrow +\infty$، به‌طوری که (۲۲)و(۲۳) میدهند:

$$\begin{cases} A'_1 \longrightarrow -A_1 \\ B'_2 \longrightarrow 0 \end{cases} \qquad (۲۵)$$

درناحیه $x < 0$ ، موج ، که‌گستره آن بدون حدکاهش می‌یابد ، به‌سمت صفر میل می‌کند . چون $(A_1 + A'_1) \longrightarrow 0$ ، تابع موج $\varphi(x)$ در $x = 0$ به‌سمت‌صفر می‌رود ، به‌طوری که‌دراین نقطه پیوسته می‌ماند . ازطرف‌دیگر ، مشتق‌آن ، که به‌طور ناگهانی از مقدار $2ikA_1$ به‌صفر می‌رسد ، دیگرپیوسته نیست . این امرناشی ازایـــن واقعیت است که چون پرش پتانسیل در $x = 0$ بینهایت است ، انتگرال (۷) ،وقتی η به‌سمت صفر میل می‌کند . دیگر به‌سمت صفر میل نخواهد کرد .

b ـــ سدهای پتانسیل



شکل ۲ .
سد پتانسیل مربعی

α ـــ موردی که $E > V_0$ باشد*، تشدید

با به‌کـار بردن نمادگـذاری‌های (۹) و(۱۰) ، در سه ناحیه I $(x < 0)$ ، II $(0 < x < l)$ و III $(x > l)$ ، خواهیم داشت :

$$\varphi_{\rm I}(x) = A_1\, e^{ik_1x} + A'_1\, e^{-ik_1x} \qquad (۲۶\text{—a})$$

$$\varphi_{\rm II}(x) = A_2\, e^{ik_2x} + A'_2\, e^{-ik_2x} \qquad (۲۶\text{—b})$$

$$\varphi_{\rm III}(x) = A_3\, e^{ik_1x} + A'_3\, e^{-ik_1x} \qquad (۲۶\text{—c})$$

حال ، مانند فوق A'_3 رامساوی باصفرانتخاب می‌کنیم (ذره فرودی‌از $x = -\infty$ ، می‌آید) .شرایط‌اتصال در $x = l$ ضرایب A_2 و A'_2 را برحسب A_3 به‌دست می‌دهد واین شرایط‌اتصال در $x = 0$ ضرائب A_1 و A'_1 را برحسب A_2 و A'_2 (ودرنتیجه برحسب A_3) خواهند داد . بدین ترتیب نتیجه می‌گیریم :

---

* V_0 می‌تواند یا مثبت باشد (مورد یک سد پتانسیل نظیر آنچه‌که درشکل ۲ نشان داده شده است) یا منفی (مورد یک چاه پتانسیل) .

$$A_1 = \left[\cos k_2 l - i\frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1k_2}\sin k_2 l\right] e^{ik_1 l} A_3$$
$$A_1' = i\frac{k_2^2 - k_1^2}{2k_1k_2}\sin k_2 l\, e^{ik_1 l} A_3 \qquad (۲۷)$$

می‌توانیم از روی A_1'/A_1 و A_3/A_1 ضریب بازتاب R وضریب عبور T ی سد را محاسبه‌کنیم که دراینجا برابرند با :

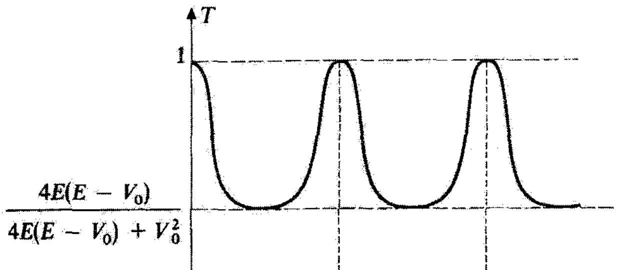
$$R = \left|\frac{A_1'}{A_1}\right|^2 = \frac{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 l}{4k_1^2k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 l} \qquad (۲۸- a)$$

$$T = \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 = \frac{4k_1^2k_2^2}{4k_1^2k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 l} \qquad (۲۸- b)$$

سپس به‌آسانی می‌توان نشان داد که $R + T = 1$. با درنظرگرفتن (۹)و(۱۰) داریم :

$$T = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2 [\sqrt{2m(E - V_0)}\, l/\hbar]} \qquad (۲۹)$$

تغییرات ضریب عبور T نسبت به l (با E و V_0 ثابت) درشکل ۳ نشان داده شده‌است : T بین مقدار می‌نیمم خود ، $\left[1 + \frac{V_0^2}{4E(E - V_0)}\right]^{-1}$ ، و مقدار ماگزیمم خود که برابر ۱ است ، به‌طور تناوبی نوسان‌می‌کند . این تابع مشابه تابعی است که عبور از



شکل ۳.

تغییرات ضریب‌عبور T ی سدنسبت به‌پهنای آن (ارتفاع‌سد ، V_0 ، انرژی E ی ذره ثابتند) . تشدیدها وقتی ظاهرمی‌شوند ، که l مضرب صحیحی از نصف طول موج π/k_2 در ناحیه II باشد .

انترفرومترفابری ــ پرورا تشریح‌می‌کند ، مانندا پتیک ، تشدیدها (که‌به‌ازاء $T = 1$ ، یعنی‌وقتی که $k_2 l = n\pi$ باشد ، به‌دست‌می‌آیند) مربوط به‌مقادیری از l هستندکه مضارب صحیحی از نصف طول موج ذره در ناحیه II باشند . وقتی $E > V_0$ باشد ، بازتاب ذره در هریک از ناپیوستگی‌های پتانسیل ، بدون‌انتقال فازدرتابع موج صورت‌می‌گیرد (رک بخش α ــ a ــ ۲) . بدین‌جهت ، شرط تشدید $k_2 l = n\pi$ مربوط به‌مقادیری از l است‌که برای‌آن یک دسته امواج ساکن بتواند درناحیه II وجود داشته باشد . ازطرف دیگر ، دورازتشدیدها ، امواج مختلفی که در $x = 0$ و $x = l$ بازتابیده‌شده‌اندباتداخل یکدیگراتخریب‌می‌کنند ، به‌طوری‌که‌مقادیر تابع موج‌کوچک می‌شوند . مطالعه انتشاریک بسته موج (مشابه‌باآنچه که در مکمل J_1 آمد) نشان خواهدداد‌که ، اگر شرط تشدید برقرار باشد ، بسته‌موج زمان نسبتا"طولانی‌ای در ناحیه II صرف‌خواهد کرد . درمکانیک‌کوانتومی این‌پدیده پراکندگی تشدیدی نامیده می‌شود .

β . موردی که $E < V_0$ باشد ، اثر تونل

دراین مورد باید (b ــ۲۶) را توسط(۲۰) جایگزین کنیم ، درحالی که ρ_2 هنوز هم توسط(۱۹) داده می‌شود . شرایط‌اتصال در $x = 0$ و $x = l$ ما را قادر می‌سازند که ضریب عبور از سد را محاسبه کنیم . درواقع انجام مجدد محاسبات غیرضروری است : آنچه باید انجام دهیم این است‌که در معادلات به‌دست آمده در بخش α ، k_2 را توسط $-i\rho_2$ جانشین کنیم . دراین صورت داریم :

$$T = \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2\left[\sqrt{2m(V_0 - E)}\,l/\hbar\right]} \qquad (۳۰)$$

و ، البته ، $R = 1 - T$. وقتی $\rho_2 l \gg 1$ ، داریم :

$$T \simeq \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2}\,e^{-2\rho_2 l} \qquad (۳۱)$$

قبلا ، درفصل‌اول ، دیدیم‌که چرا ، برخلاف پیش‌بینی‌های‌کلاسیک ، ذره دارای یک احتمال غیرصفر برای عبور از سد پتانسیل است . تابع موج در ناحیه II صفر نیست ، اما رفتار یک " موج میرا " با برد $1/\rho_2$ را دارد . وقتی $l \lesssim 1/\rho_2$ ، ذره دارای احتمال قابل ملاحظه‌ای برای عبور از سد ، توسط" اثر تونل " ، است . این اثر دارای کاربردهای فیزیکی‌متعددی است : معکوس‌کردن مولکول آمونیاک (رک مکمل G_{IV}) ، دیودتونل ، اثر ژوزف‌سان ، استحاله α ی بعضی از هسته‌ها و غیره .

برد موج میرا برای یک الکترون برابراست با :

$$\left(\frac{1}{\rho_2}\right)_{el} \simeq \frac{1.96}{\sqrt{V_0 - E}}\,\text{Å} \qquad (۳۲)$$

که درآن E و V_0 برحسب الکترون ولت بیان شده‌اند (این فرمول می‌توانـد بلافاصلـه از فرمول (۸) مکمل A_I، با جایگزین‌کردن $\lambda = 2\pi/k$ توسط $2\pi/\rho_2$ به‌دست آیـد). حال یک الکترون باانرژی 1 eV را در نظر بگیرید که به‌سدی برخورد می‌کند که برای‌آن $V_0 = 2$ eV و $l = 1$ Å است. دراین صورت برد موج میرا Å ۱/۹۶، یعنی، از مرتبه l است: بنابرایـن الکترون باید دارای احتمال قابل ملاحظه‌ای برای عبوراز سد باشد. درواقع، فرمول (۳۰) دراین مورد می‌دهد:

$$T \simeq 0.78 \qquad (۳۳)$$

نتیجه کوانتومی بطور ریشه‌ای با نتیجه کلاسیکی تفاوت دارد: احتمال عبور الکترون از سد تقریبا" ۰/۸ است.

حال فرض کنیدکه ذره فرودی یک پرتون باشد (که جرم آن تقریبا" ۱۸۴۰ برابـر جرم الکترون است). دراین صورت برد $1/\rho_2$ برابر است با:

$$\left(\frac{1}{\rho_2}\right)_{pr} \simeq \frac{1.96}{\sqrt{1\,840(V_0 - E)}}\,\text{Å} \simeq \frac{4.6}{\sqrt{V_0 - E}}\,10^{-2}\,\text{Å} \qquad (۳۴)$$

با همـان مقادیـــر: $E = 1$ eV, $V_0 = 2$ eV, $l = 1$ Å، برد $1/\rho_2$ را خیلی کوچکتـــر از l به‌دست می‌آوریم. دراین‌صورت فرمول (۳۱) می‌دهد:

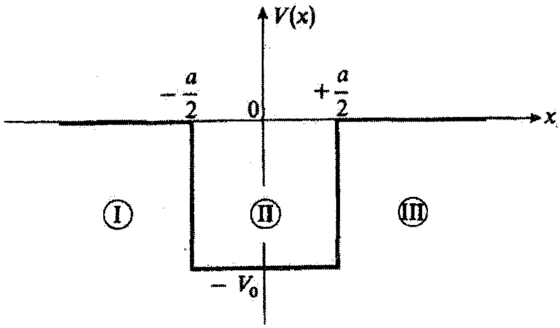
$$T \simeq 4\times10^{-19} \qquad (۳۵)$$

تحت این شرایط، احتمال عبور پروتون از سد پتانسیل قابل اغماض است. به‌طریق اولـی، اگر (۳۱) را به‌اجسام ماکروسکوپیکی اعمـال می‌کردیم، چنان احتمال ضعیفی به‌دسـت

c ــ حالتهای مقید، چاه پتانسیل مربعی

α. چاه با عمق محدود

دراینجا خود را به‌مطالعه مورد $-V_0 < E < 0$ محدودخواهیم ساخـت (مورد $E > 0$، در محاسبات بخش‌قبلی b-α گنجانده شده است).



شکل ۴.
چاه پتانسیل مربعی

در نواحی I $\left(x < -\frac{a}{2}\right)$ ، II $\left(-\frac{a}{2} \leqslant x \leqslant \frac{a}{2}\right)$ و III $\left(x > \frac{a}{2}\right)$ ، به‌ترتیب داریم:

$$\varphi_{I}(x) = B_1\, e^{\rho x} + B_1'\, e^{-\rho x} \qquad (۳۶-a)$$

$$\varphi_{II}(x) = A_2\, e^{ikx} + A_2'\, e^{-ikx} \qquad (۳۶-b)$$

$$\varphi_{III}(x) = B_3\, e^{\rho x} + B_3'\, e^{-\rho x} \qquad (۳۶-c)$$

که درآن:

$$\rho = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad (۳۷)$$

$$k = \sqrt{\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}} \qquad (۳۸)$$

چون $\varphi(x)$ باید در ناحیه I کراندار باشد، باید داشته باشیم:

$$B_1' = 0 \qquad (۳۹)$$

دراین‌صورت شرایط اتصال در $x = -\frac{a}{2}$ می‌دهند:

$$A_2 = e^{(-\rho+ik)a/2}\ \frac{\rho + ik}{2ik} B_1$$

$$A_2' = -\, e^{-(\rho+ik)a/2}\ \frac{\rho - ik}{2ik} B_1 \qquad (۴۰)$$

و همین شرایط در $x = a/2$ می‌دهند:

$$\frac{B_3}{B_1} = \frac{e^{-\rho a}}{4ik\rho}\left[(\rho + ik)^2 e^{ika} - (\rho - ik)^2 e^{-ika}\right]$$
$$\frac{B'_3}{B_1} = \frac{\rho^2 + k^2}{2k\rho}\sin ka \qquad (۴۱)$$

اما $\varphi(x)$ باید درناحیه III نیز کراندار باشد. از این‌رو لازم است که $B_3 = 0$ باشد، یعنی:

$$\left(\frac{\rho - ik}{\rho + ik}\right)^2 = e^{2ika} \qquad (۴۲)$$

چون ρ و k به E بستگی دارند، معادله (۴۲) فقط بەازاء مقادیر معینی از E می‌تواند برقرار باشد. بدین‌ترتیب، تحمیل یک کران به $\varphi(x)$ درتمام نواحی فضا، کوانتش انرژی را به‌دنبال خواهد آورد. بطور دقیق‌تر، دوحالت امکان‌پذیر هستند:

(۱) اگر:

$$\frac{\rho - ik}{\rho + ik} = -e^{ika} \qquad (۴۳)$$

داریم:

$$\frac{\rho}{k} = \tan\left(\frac{ka}{2}\right) \qquad (۴۴)$$

قرار دهیم:

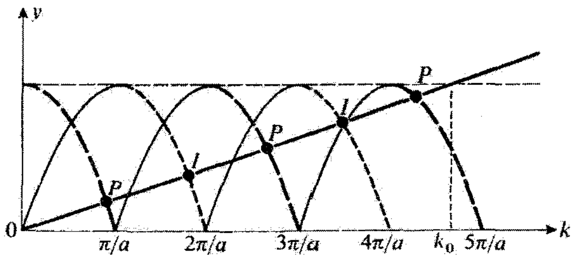
$$k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} = \sqrt{k^2 + \rho^2} \qquad (۴۵)$$

دراین صورت نتیجه خواهیم گرفت:

$$\frac{1}{\cos^2\left(\frac{ka}{2}\right)} = 1 + \tan^2\frac{ka}{2} = \frac{k^2 + \rho^2}{k^2} = \left(\frac{k_0}{k}\right)^2 \qquad (۴۶)$$

بنابراین معادله (۴۳) معادل با دستگاه معادلات زیر است:

$$\begin{cases} \left|\cos\left(\frac{ka}{2}\right)\right| = \frac{k}{k_0} & (۴۷\text{— a}) \\ \tan\left(\frac{ka}{2}\right) > 0 & (۴۷\text{— b}) \end{cases}$$



شکل ۵.

حل نموداری معادله (۴۲)، که انرژیهای حالتهای مقید یک ذره در چاه پتانسیل مربعی را می‌دهد. در موردی که در شکل نشان داده شده است، پنج حالت مقید وجود دارد، سه‌حالت زوج (وابسته به‌نقاط P ی شکل)، و دوحالت فرد (نقاط I).

ترازهای انرژی توسط نقاط تلاقی یک خط راست، که شیب آن $1/k_0$ است با کمانهای سینوسی (خط چین‌های بزرگ درشکل۵) تعیین می‌شوند. بهاین ترتیب، تعداد معینی تراز انرژی به‌دست می‌آوریم که توابع موجشان زوج است. اگر (۴۳) را در (۴۰) و (۴۱) قرار دهیم به‌آسانی می‌توان‌نشان‌دادکه $A_2 = A'_2$ و $B'_3 = B_1$، درنتیجه $\varphi(-x) = \varphi(x)$.

(۲) اگر:

$$\frac{\rho - ik}{\rho + ik} = e^{ika} \qquad (۴۸)$$

محاسبه‌ای از همان نوع به روابط زیر منجر می‌شود:

$$\begin{cases} \left|\sin\left(\frac{ka}{2}\right)\right| = \frac{k}{k_0} & (۴۹\text{— a}) \\ \tan\left(\frac{ka}{2}\right) < 0 & (۴۹\text{— b}) \end{cases}$$

دراین‌صورت ، ترازهای انرژی توسط نقاط تقاطع همان خط راست قبلی با کمانهای سینوسی دیگر (خط چین‌های کوتاه درشکل۵) تعیین می‌شوند . ترازهائی که به‌این ترتیب به‌دست می‌آیند بین ترازهای به‌دست آمده در (i) قرار می‌گیرند . به‌آسانی می‌توان نشان داد که توابع موج مربوطه فرد هستند .

گوشزد :

اگر $k_0 \leqslant \frac{\pi}{a}$ ، یعنی ، اگر :

$$V_0 \leqslant V_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \tag{۵۰}$$

شکل ۵ نشان می‌دهد که فقط یک حالت مقید برای ذره وجود دارد ، و این‌حالت دارای یک تابع موج زوج است . سپس ، اگر $V_1 \leqslant V_0 < 4V_1$ ، اولین تراز فرد ظاهر می‌شود ، و الی آخر : وقتی V_0 افزایش می‌یابد به‌طورمتناوب‌ترازهای‌زوج وفردظاهر می‌شوند . اگر $V_0 \gg V_1$ ، شیب $1/k_0$ خط راست شکل ۵ بسیار کوچک است : برای پائین‌ترین ترازهای انرژی ، عملاً داریم :

$$k = \frac{n\pi}{a} \tag{۵۱}$$

که در آن n یک عدد صحیح است ، و درنتیجه :

$$E = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} - V_0 \tag{۵۲}$$

β ــ چاه بینهایت عمیق

فرض کنید $V(x)$ برای $0 < x < a$ ، صفر ، و درجاهای دیگر بینهایت باشد . قرار می‌دهیم :

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{۵۳}$$

بنابر گوشزد داده شده در انتهای بخش β-a-۲ی این مکمل، $\varphi(x)$ باید در خارج از بـازه $[0, a]$ صفر، و در $x = 0$ و همین طور در $x = a$ پیوسته باشد. حال برای $0 \leqslant x \leqslant a$ داریم:

$$\varphi(x) = A\, \mathrm{e}^{ikx} + A'\, \mathrm{e}^{-ikx} \tag{۵۴}$$

چون $\varphi(a) = 0$ ، می‌توان نتیجه گرفت $A' = -A$ ، که منجر می‌شود به:

$$\varphi(x) = 2iA \sin kx \tag{۵۵}$$

بعلاوه، $\varphi(a) = 0$ ، بنابراین:

$$k = \frac{n\pi}{a} \tag{۵۶}$$

که در آن n یک عدد صحیح مثبت دلخواه است. اگر، با درنظر گرفتن (۵۶)، تابع (۵۵) را بهنجار کنیم توابع موج مانای:

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \tag{۵۷}$$

را با انرژیهای:

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \tag{۵۸}$$

به‌دست می‌آوریم. به‌این ترتیب کوانتش ترازهای انرژی، دراین مورد، بسیار ساده است.

گوشزدها:

(i) رابطه (۵۶) بیانگر این واقعیت است که حالتهای مانا بااین شرط تعیین می‌شوند که پهنای a ی چاه بایستی مضرب صحیحی از نصف طول موج، π/k ، باشد. وقتی عمق چاه محدود باشد اینطور نیست (رک بخش α)، اختلاف بین دومورداز انتقال فاز تابع موج، که در اثر بازتاب از یک پله پتانسیل اتفاق می‌افتد، ناشی می‌شود. (رک بخش β-a-۲).

(ii) به‌آسانی می‌توان از روی (۵۱) و (۵۲) ثابت کرد که، اگر عمق V_0 یک چاه محدود به‌سمت بی‌نهایت میل کند، ترازهای انرژی یک‌چاه بی‌نهایت به‌دست خواهد آمد.

مراجع و پیشنهادات برای مطالعه بیشتر:

Eisberg and Resnick (1.3), chap. 6; Ayant and Belorizky (1.10), chap. 4; Messiah (1.17), chap. III; Merzbacher (1.16), chap. 6; Valentin (16.1), annex V.

مکمل J_I

رفتار یك بسته موج دریك پله پتانسیل

۱ ـ بازتاب کلی : $E < V_0$
۲ ـ بازتاب جزئی : $E > V_0$

در مکمل H_I ، حالتهای مانای یک ذره در پتانسیلهای "مربعی" گوناگون را تعیین کردیم . برای بعضی موارد (به‌عنوان مثال ، یک پتانسیل پله‌ای) ، حالتهای‌مانائی‌که‌به‌این ترتیب به‌دست می‌آیند ، از امواج تخت نامقید (فرودی ، بازتابی وعبوری) تشکیل شده‌اند . البته ، چون چنین امواجی نمی‌توانند بهنجار شوند ، نمی‌توانند واقعا " معرف یـک حالت فیزیکی‌ذره باشند . لیکن ، می‌توان آنها را به‌طور خطی ترکیب‌کرد و بسته موجهائی به‌دست آورد که بهنجارپذیر باشند . بعلاوه ، چون یک چنین بسته موجی مستقیما " برحسب توابع موج مانا بسط داده شده‌است ، تعیین تحول زمانی آن بسیار ساده است . آنچه لازم است . انجام دهیم این است که هریک ازضرائب بسط را در یک تابع نمائی موهومی $e^{-iEt/\hbar}$ ، در یک فرکانس کاملا " معین $\frac{E}{h}$ ضرب کنیم (فصل اول ، بخش b ـ ۱ ـ D) .

دراین مکمل ، قصد داریم چنین بسته موجهائی ساخته و تحول زمانی آنها رابرای موردی که پتانسیل ، مانند شکل ۱ در مکمل H_I ، یک پله به‌ارتفاع V_0 دارد ، مطالعه کنیم . به‌این ترتیب ، قادر خواهیم بود رفتار کوانتومی ذره را به‌هنگام رسیدن به پله‌پتانسیل ، با تعیین حرکت و تغییرشکل بسته موج وابسته به‌آن ، دقیقا " تشریح کنیم . این امر هم‌چنین به‌ما امکان‌خواهد داد تا نتایج متعدد به‌دست آمده در H_I (ضرائب بازتاب و عبور ، کند شدن در اثر بازتاب و غیره . . .) را از طریق مطالعه فقط حالتهای مانا تأیید کنیم .

قرار می‌دهیم :

$$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = k \qquad (1)$$
$$\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} = K_0$$

و مانند مکمل H_I ، دومورد متناظر با k کوچکتر یا بزرگتر از K_0 را متمایز خواهیم ساخت.

۱ ــ بازتاب کلی: $E < V_0$

دراین مورد، توابع موج مانا توسط فرمولهای (۱۱) و (۱۲) ازمکمل $\mathrm{H_I}$ داده می‌شوند (در اینجا k_1 را k خواهیم نامید)، ضرائب A_1 ، A'_1 ، B_2 و B'_2 در این فرمولها توسط معادلات (۲۱)، (۲۲) و (۲۳) از مکمل $\mathrm{H_I}$ ، به‌هم مربوط می‌شوند.

می‌خواهیم، باترکیب‌کردن خطی این توابع موج مانا یک بسته موج بسازیم. فقط مقادیری از k راکه‌کوچکتر از K_0 باشند انتخاب خواهیم‌کرد تا امواجی که بسته را تشکیل می‌دهند بازتاب کلی پیدا کنند. برای این منظور، یک تابع $g(k)$ ای (که بسته موج را مشخص می‌کند) انتخاب می‌کنیم که برای $k > K_0$ صفر باشد. توجه خود را به‌ناحیه منفی محور x ها، طرف چپ سد پتانسیل، معطوف می‌کنیم. در مکمل $\mathrm{H_I}$ ، رابطه (۲۲) نشان می‌دهد که A_1 و A'_1 در رابطه (۱۱) برای یک موج مانا دراین ناحیه دارای مدولهای‌یکسانی هستند. از این رو می‌توان قرار داد:

$$\frac{A'_1(k)}{A_1(k)} = \mathrm{e}^{-2i\theta(k)} \tag{۲}$$

که در آن [رک فرمول (۹) از مکمل $\mathrm{H_I}$]:

$$\tan\theta(k) = \frac{\sqrt{K_0^2 - k^2}}{k} \tag{۳}$$

بالاخره، بسته موجی را که می‌خواهیم بررسی کنیم، در زمان $t = 0$ ، برای x های منفی می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود:

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_0^{K_0} \mathrm{d}k\, g(k)\left[\mathrm{e}^{ikx} + \mathrm{e}^{-2i\theta(k)}\,\mathrm{e}^{-ikx}\right] \tag{۴}$$

مانند بخش C ازفصل اول، فرض می‌کنیم‌که $|g(k)|$ حول مقدار $k = k_0 < K_0$ دارای‌قله برجسته‌ای به‌پهنای Δk باشد.

برای اینکه عبارتی برای تابع موج $\psi(x, t)$ در هرزمان t به‌دست آوریم، از رابطه کلی، (D‌ــ۱۴) از فصل اول استفاده می‌کنیم:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{K_0} \mathrm{d}k\, g(k)\, \mathrm{e}^{i[kx - \omega(k)t]} + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{K_0} \mathrm{d}k\, g(k)\, \mathrm{e}^{-i[kx + \omega(k)t + 2\theta(k)]} \qquad (۵)$$

که درآن $\omega(k) = \hbar k^2/2m$. این رابطه فقط برای x های منفی معتبراست . جملـه اول آن بسته موج فرودی ، و جمله دوم ، بسته بازتابیده را نشان می‌دهد . برای سهولت فـرض خواهیم کرد که $g(k)$ حقیقی باشد . دراین‌صورت شرط فازمانا (فصل اول بخش ۲ ــ C) ، محاسبه مکان x_i ی مرکز بسته موج فرودی را ممکن می‌سازد : اگر در $k = k_0$ ، مشتق‌شناسه اولین تابع نمائی‌نسبت به k رامساوی صفر قرار دهیم ، به‌دست می‌آید :

$$x_i = t\left[\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right]_{k=k_0} = \frac{\hbar k_0}{m} t \qquad (۶)$$

به‌همین طریق ، مکان x_r مرکز بسته بازتابیده با مشتق‌گیری از شناسه تابع نمائی‌دوم به‌دست می‌آید . با مشتق‌گرفتن از معادله (۳) ، خواهیم داشت :

$$[1 + \tan^2\theta]\, \mathrm{d}\theta = \left[1 + \frac{K_0^2 - k^2}{k^2}\right] \mathrm{d}\theta = -\frac{\mathrm{d}k}{k^2}\sqrt{K_0^2 - k^2} - \frac{\mathrm{d}k}{\sqrt{K_0^2 - k^2}} \qquad (۷)$$

یعنی :

$$\frac{K_0^2}{k^2}\, \mathrm{d}\theta = -\frac{K_0^2}{k^2} \frac{1}{\sqrt{K_0^2 - k^2}}\, \mathrm{d}k \qquad (۸)$$

بنابراین داریم :

$$x_r = -\left[t\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k} + 2\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}k}\right]_{k=k_0} = -\frac{\hbar k_0}{m} t + \frac{2}{\sqrt{K_0^2 - k_0^2}} \qquad (۹)$$

فرمولهای (۶) و (۹) به‌ما امکان می‌دهند تا حرکت ذره را ، که در ناحیه‌ای به‌پهنای کوچک

Δx و به‌مرکز x_i یا x_r واقع است، دقیق‌تر تشریح کنیم.

ابتدا به‌ببینیم برای t های منفی چه اتفاق می‌افتد. مرکز x_i ی بسته موج فرودی با سرعت ثابت $\hbar k_0/m$ از چپ به‌راست انتشار می‌یابد. از طرف دیگر، از فرمول (۹) ملاحظه‌می‌کنیم که x_r مثبت است، یعنی، در خارج از ناحیه $x < 0$، که درآن رابطه (۵) برای تابع موج معتبراست، قرار دارد. این مطلب بدان معنی است که، برای تمام مقادیر منفی x، امواج مختلف جمله دوم (۵) به‌طور ویرانگری تداخل می‌کنند: برای t های‌منفی بسته موج بازتابیده وجود ندارد، بلکه فقط یک بسته موج فرودی نظیرآنچه‌که دربخش C از فصل اول مطالعه شد، وجود دارد.

مرکز بسته موج فرودی در زمان $t = 0$ به‌سدمی‌رسد. دریک بازه‌ای اززمان‌درحوالی $t = 0$، بسته موج در ناحیه $x \simeq 0$ که سد قراردارد متمرکز می‌شود، و شکل آن نسبتاً "پیچیده است. اما وقتی t به‌حدکافی بزرگ باشد، از (۶) و (۹) ملاحظه می‌کنیم که، بسته موج فرودی است که ناپدید می‌شود، و فقط بسته موج بازتابیده باقی می‌ماند. اکنون x_i است که مثبت است، در حالی که x_r منفی می‌شود: امواج بستهٔ فرودی به‌ازاء تمام مقادیر منفی x به‌طورویرانگری تداخل‌می‌کنند، درحالی‌کهامواج بسته‌بازتابیده‌برای $x = x_r < 0$ به‌طور سازنده تداخل می‌کنند. بسته موج بازتابیده باسرعت $-\hbar k_0/m$ به‌سمت چپ، در خلاف جهت بسته ورودی، که تصویرآینه‌ای آنست، انتشار می‌یابد، و شکل آن تغییری نکرده‌است*. بعلاوه فرمول (۹) نشان می‌دهد که بازتاب یک تأخیر τ وارد می‌کند، که به‌صورت زیر داده می‌شود:

$$\tau = -2\left[\frac{\mathrm{d}\theta/\mathrm{d}k}{\mathrm{d}\omega/\mathrm{d}k}\right]_{k=k_0} = \frac{2m}{\hbar k_0\sqrt{K_0^2 - k_0^2}} \qquad (۱۰)$$

برخلاف آنچه که مکانیک کلاسیک پیش بینی می‌کند، ذره آنا" بازتابیده نمی‌شود. توجه کنید که تأخیر τ، برای یک مقدار معین k به‌انتقال فاز $2\theta(k)$ بین موج فرودی و موج بازتابیده مربوط‌است. با وجود این، باید توجه شود که تأخیر بسته موج بسادگی متناسب با $\theta(k_0)$ آن‌طور که برای یک موج تخت بیکران رخ می‌دهد نیست، بلکه متناسب با مشتق $\mathrm{d}\theta/\mathrm{d}k$ به‌ازاء $k = k_0$ است. از نظر فیزیکی، این تأخیر ناشی ازاین واقعیت است که، برای t نزدیک به‌صفر، احتمال حضور ذره در ناحیه $x > 0$، که‌ازنظرکلاسیکی‌ممنوع‌است،

---

* فرض می‌کنیم Δk آنقدر کوچک باشد که‌گسترش بسته موج در خلال بازهٔ زمانی مورد نظر قابل اغماض باشد.

صفر نیست [موج میـرا ، به‌گوشزد (i) درزیر رجوع کنید] . می‌توان ، بطور مجازی ، گفت که ذره قبل از برگشتن مدت زمانی در حدود τ درین ناحیه صرف می‌کند . فرمـول (۱۰) نشان می‌دهد که هرچه انرژی میانگین $\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}$ بسته موج به ارتفاع V_0 سد نزدیکتر باشـد ، تاءخیر τ طولانی‌تر است .

گوشـزدها :

(i) در اینجا روی مطالعه بسته موج برای $x < 0$ تأکید کردیم ، ولی نی‌توان آنچه را که برای $x > 0$ رخ می‌دهد نیز مطالعه کرد . بسته موج ، در ایـن ناحیـه می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود :

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{K_0} \mathrm{d}k\, g(k)\, B_2'(k)\, \mathrm{e}^{-\rho(k)x}\, \mathrm{e}^{-i\omega(k)t} \qquad (۱۱)$$

که در آن :

$$\rho(k) = \sqrt{K_0^2 - k^2} \qquad (۱۲)$$

$B_2'(k)$ توسط معادله (۲۳) از مکمل H_1 ، با جایگزینی A_1 توسط ۱ ، k_1 توسط k و ρ_2 توسط ρ به‌دست ، می‌آید ، دراین صورت استدلالی مشابه با استدلال بخـش ۲ــ C ازفصل اول نشان می‌دهد که مدول $|\psi(x, t)|$ ی عبارت (۱۱) وقتی ماگزیمم است که فاز تابعی کـه باید از آن روی k انتگرال گرفته شود مانا باشد ، حال‌بنابر روابط(۲۲) و (۲۳) از مکمل H_1 ، شناسه B_2' ، نصف شناسه A_1' که بنابر (۲) ، برابر $2\theta(k)$ ــ است ، می‌باشد . در نتیجه ، اگر $\omega(k)$ و $\theta(k)$ رادرحوالی $k = k_0$ بسط دهیم ، برای فاز تابعی که باید در (۱۱) ازآن روی k انتگرال‌گیـری‌شود، خواهیم داشت :

$$\left\{ -\left[\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}k}\right]_{k=k_0} - \left[\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right]_{k=k_0} t \right\}(k - k_0) = -\frac{\hbar k_0}{m}(k - k_0)\left(t - \frac{\tau}{2}\right) \qquad (۱۳)$$

[از رابطه (۱۰) واین واقعیت که $g(k)$ حقیقی فرض شده‌است ، استفاده‌کرده‌ایم] ، از این مطلب می‌توان نتیجه گرفت که $|\psi(x, t)|$ در ناحیه $x > 0$ به‌ازاء $t = \frac{\tau}{2}$

ماگزیمم است*. بنابراین، زمانی که درآن بسته برمی‌گردد $\tau/2$ است، که همان تأخیر τ در بازتاب را که دربالا به‌دست آوردیم، می‌دهد. هم‌چنین از رابطه (۱۳) ملاحظه می‌کنیم که، به‌محض اینکه $\left| t - \frac{\tau}{2} \right|$ از زمان Δt که توسط:

$$\frac{\hbar k_0}{m} \Delta k \, \Delta t \simeq 1 \qquad (۱۴)$$

تعریف می‌شود، که درآن Δk پهنای $g(k)$، تجاوز کند، امواج از همفازی‌خارج شده ورابطه (۱۱) برای $|\psi(x, t)|$ قابل اغماض می‌شود. به‌این ترتیب، بسته موج در مدت بازه زمانی Δt از مرتبه:

$$\Delta t = \frac{1/\Delta k}{\hbar k_0/m} \qquad (۱۵)$$

که تقریبا" متناظر با زمانی است‌که، در ناحیه $x < 0$، برای طی مسافتی‌درحدود پهنای $1/\Delta k$ خود صرف می‌کند، کلا" در ناحیه $x < 0$ باقی می‌ماند.

(ii) چون فرض شده است که Δk بسیار کوچکتر از k_0 و K_0 باشد، مقایسه (۱۰)و(۱۵) نشان می‌دهد که:

$$\Delta t \gg \tau \qquad (۱۶)$$

از این رو تأخیر در بازتاب، برای بسته موج بازتابیده، تغییر مکانی‌را واردمی‌کند که خیلی از پهنای آن کوچکتر است.

۲ـ بازتاب جزئی: $E > V_0$

این‌بار، یک تابع $g(k)$ به‌پهنای Δk که حول مقدار $k = k_0 > K_0$ متمرکز است و برای $k < K_0$ صفر است در نظر می‌گیریم. بسته موج دراین مورد از ترکیب توابع موج مانائی که توسط فرمولهای (۱۱)و (۱۲) از مکمل H_1 داده شده‌اند، باضرائب $g(k)$، تشکیل می‌شود. برای اینکه ذره مورد نظر از ناحیه منفی محور x ها به‌سد برسد، A_2' را مساوی با

---

* توجه کنید که، برخلاف آنچه‌که درفصل اول برای یک بسته موج آزادپیدا کردیم فاز (۱۳) به x بستگی ندارد. نتیجه می‌شود که $|\psi(x, t)|$، در ناحیه $x > 0$، دارای قله برجسته‌ای که نسبت به‌زمان حرکت کند، نیست.

صفر انتخاب می‌کنیم، و هم‌چنین قرار می‌دهیم $A_1 = 1$. ضرائب $A'_1(k)$ و $A_2(k)$ از فرمولهای (۱۳) و (۱۴) در مکمل H_1 (که درآن A_1 توسط ۱، k_1 توسط k و k_2 توسط $\sqrt{k^2 - K_0^2}$ جایگزین شده است) به‌دست می‌آیند. برای اینکه بسته موج را توسط یک رابطه تنها، که برای تمام مقادیر معتبر باشد، تشریح کنیم، از "تابع پله‌ای" هیویساید $\theta(x)$ که به‌صورت زیر تعریف می‌شود استفاده می‌کنیم:

$$\begin{aligned} \theta(x) &= 0 \qquad x < 0 \\ \theta(x) &= 1 \qquad x > 0 \end{aligned} \tag{۱۷}$$

دراین صورت بسته موج مورد نظر می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) = {} & \theta(-x)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{K_0}^{+\infty} \mathrm{d}k\, g(k)\, \mathrm{e}^{i[kx - \omega(k)t]} \\ & + \theta(-x)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{K_0}^{+\infty} \mathrm{d}k\, g(k)\, A'_1(k)\, \mathrm{e}^{-i[kx + \omega(k)t]} \\ & + \theta(x)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{K_0}^{+\infty} \mathrm{d}k\, g(k)\, A_2(k)\, \mathrm{e}^{i[\sqrt{k^2 - K_0^2}\,x - \omega(k)t]} \end{aligned} \tag{۱۸}$$

این بار، سه بسته موج به‌دست می‌آوریم: فرودی، بازتابی، عبوری. مانندبخش ۱ فوق، شرط فاز مانا مکان مراکز x_i و x_r و x_t ی آنها را به‌دست می‌دهد. چون $A'_1(k)$ و $A_2(k)$ حقیقی‌اند، نتیجه خواهیم گرفت:

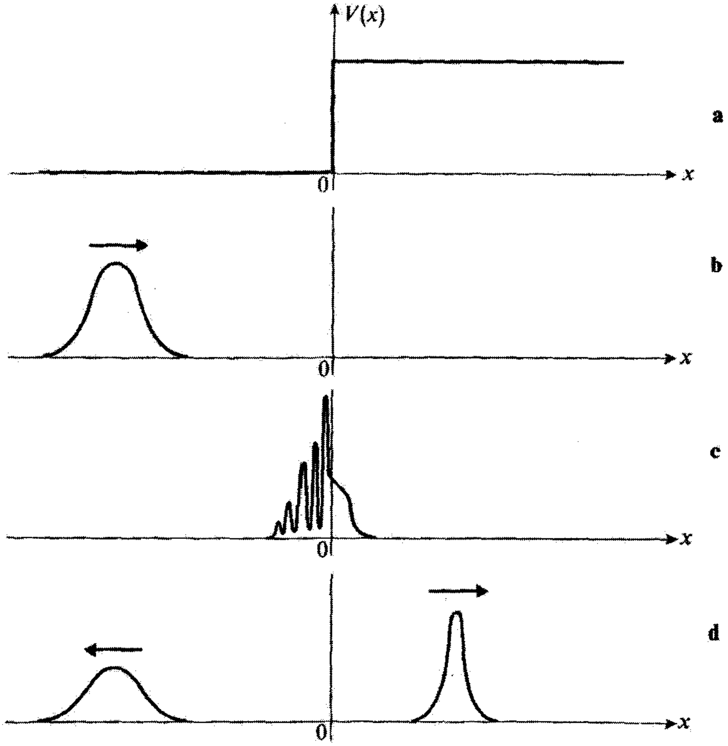
$$x_i = \frac{\hbar k_0}{m} t \tag{۱۹-a}$$

$$x_r = -\frac{\hbar k_0}{m} t \tag{۱۹-b}$$

$$x_t = \frac{\hbar\sqrt{k_0^2 - K_0^2}}{m} t \tag{۱۹-c}$$

بحثی مشابه به بحث (۶) و (۹) به‌نتایج زیر منجر می‌شود: برای t های منفی، فقط بسته موج فرودی وجود دارد، برای t های مثبت و به‌قدر کافی بزرگ فقط بسته موجهای بازتابی و عبوری وجود دارند (شکل ۱). توجه کنید که هیچ تأخیری، نه در بازتاب ونه درعبور وجود ندارد [این امر ناشی از این واقعیت است که ضرائب $A'_1(k)$ و $A_2(k)$ حقیقی هستند]. بسته موجهای فرودی و بازتابی به‌ترتیب با سرعتهای $\hbar k_0/m$ و $-\hbar k_0/m$ انتشار

می‌یابند . حال ، فرض کنید Δk آن قدر کوچک باشد که ، بتوانیم در بازه $\left[k_0 - \frac{\Delta k}{2}, k_0 + \frac{\Delta k}{2}\right]$ از تغییرات $A_1'(k)$ در مقابل تغییرات $g(k)$ صرفنظر کنیم .



شکل ۱.

رفتار یک بسته موج در یک پتانسیل پله‌ای ، در مورد $E > V_0$. پتانسیل درشکل a نشان داده شده است . درشکل b ، بسته موج به‌سمت پله درحرکت است . شکل c بسته موج را در دوره کوتاهی که درآن بسته موج به‌دوقسمت تقسیم می‌شود ، نشان می‌دهد . تداخل‌بین‌امواج‌فرودی وبازتابی مسئول نوسانات بسته موج درناحیه $x < 0$ است . پس‌ازمدتی (شکل d) دوبسته موج خواهیم داشت . بسته موج اول (بسته موج بازتابی) به‌سمت چپ برمی‌گردد ، دامنه آن از دامنه بسته موج فرودی کوچکتر و پهنای آن به‌همان اندازه پهنای موج فرودی است . بسته موج دوم (بسته موج عبوری) به‌سمت راست است انتشارمی‌یابد ، دامنه آن قدری از دامنه بسته موج فرودی بزرگتر بوده ، ولی باریکتر است .

دراین صورت می‌توانیم درجمله دوم (۱۸) ، $A_1'(k)$ راتوسط $A_1'(k_0)$ جانشین کرده و آنرا از انتگرال خارج کنیم . سپس به‌سادگی می‌توان دید که بسته موج بازتابی همان شکل بسته موج فرودی ، تصویر آینه‌ای آن ، را دارد . ولی دامنه‌اش کوچکتراست زیرا ، برطبق فرمول (۱۳) از مکمل H_I ، $A_1'(k_0)$ کوچکتر از ۱ است . ضریب بازتاب R ، بنا به‌تعریف ، عبارت است از نسبت بین احتمالهای یافتن ذره در بسته موج بازتابی و در بسته موج فرودی . از این رو ، داریم : $R = |A_1'(k_0)|^2$ ، که در واقع بامعادله (۱۵) از مکمل H_I متناظر است [یادآوری می‌کنیم که $A_1(k_0)$ را مساوی با ۱ انتخاب کرده‌ایم ، $A_1'(k_0) = 1$] .

وضعیت برای بسته موج عبوری فرق می‌کند . هنوز می‌توانیم برای ساده‌کردن عبارت آن ، ازاین واقعیت که Δk بسیار کوچک است استفاده کنیم : مـی‌توانیـم $A_2(k)$ را به‌وسیله $A_2(k_0)$ و $\sqrt{k^2 - K_0^2}$ را به‌وسیله تقریب زیر جایگزین کنیم :

$$\sqrt{k^2 - K_0^2} \simeq \sqrt{k_0^2 - K_0^2} + (k - k_0)\left[\frac{\mathrm{d}\sqrt{k^2 - K_0^2}}{\mathrm{d}k}\right]_{k = k_0} \qquad (۲۰)$$

$$\simeq q_0 + (k - k_0)\frac{k_0}{q_0}$$

که در آن :

$$q_0 = \sqrt{k_0^2 - K_0^2} \qquad (۲۱)$$

در این صورت بسته موج عبوری می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود :

$$\psi_t(x, t) \simeq A_2(k_0)\, \mathrm{e}^{iq_0x} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{K_0}^{+\infty} \mathrm{d}k\, g(k)\, \mathrm{e}^{i\left[(k-k_0)\frac{k_0}{q_0}x - \omega(k)t\right]} \qquad (۲۲)$$

حال این عبارت را با عبارت بسته موج فرودی :

$$\psi_i(x, t) = \mathrm{e}^{ik_0x} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{K_0}^{+\infty} \mathrm{d}k\, g(k)\, \mathrm{e}^{i[(k-k_0)x - \omega(k)t]} \qquad (۲۳)$$

مقایسه کنیم . ملاحظه می‌کنیم که :

$$|\psi_t(x, t)| \simeq A_2(k_0) \left| \psi_i\left(\frac{k_0}{q_0}x, t\right) \right| \qquad (۲۴)$$

بنابراین ، بسته موج عبوری دارای دامنه‌ای است که کمی از دامنه بسته فرودی بزرگتراست : برطبق فرمول (۱۴) از مکمل H_I ، $A_2(k_0)$ بزرگتر از ۱ است . لیکن پهنای آن کوچکتراست ، زیرا اگر پهنای $|\psi_i(x,t)|$ برابر Δx باشد ، فرمول (۲۴) نشان‌می‌دهدکه‌پهنای $|\psi_t(x,t)|$ برابر است با :

$$(\Delta x)_t = \frac{q_0}{k_0}\Delta x \qquad (۲۵)$$

می‌بینیم‌که ضریب عبور (نسبت بین احتمالهای یافتن ذره دربسته‌عبوری ودر بسته‌فرودی) حاصلضرب دو عامل است :

$$T = \frac{q_0}{k_0}|A_2(k_0)|^2 \qquad (۲۶)$$

این فرمول ، در واقع ، متناظر با فرمول (۱۶)ازمکمل H_I است ،زیرا $A_1(k_0) = 1$. بالاخره ، توجه کنید که با درنظرگرفتن انقباض بسته‌موج عبوری درامتداد محور Ox ، می‌توانیم سرعت آنرا بدست آوریم :

$$V_t = \frac{\hbar k_0}{m} \times \frac{q_0}{k_0} = \frac{\hbar q_0}{m} \qquad (۲۷)$$

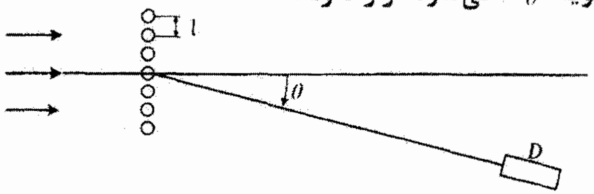
مراجع و پیشنهادات برای مطالعه بیشتر :

Schiff (1.18), chap. 5, figs 16, 17, 18, 19; Eisberg and Resnick (1.3), § 6-3, fig. 6-8; also see reference (1.32).

مکمل K_1

تمرینات

۱ــ یک باریکه از نوترونها ، که جرم آنها M_n $(M_n \simeq 1.67 \times 10^{-27}\ \mathrm{kg})$ و انرژی آنها E می‌باشد باسرعت ثابت به‌یک زنجیره خطی‌ازهسته‌های اتمی‌که به‌طورمنظمی ، مانند شکل زیر ، مرتب شده‌اند برخورد می‌کند (این هسته‌ها می‌توانند ، به‌عنوان مثال ، هسته‌های یک مولکول خطی طویل‌باشند) . فاصله بین دوهسته متوالی‌را l واندازه هرهسته را d می‌نامیم $(d \ll l)$. یک آشکارساز نوترونی D در فاصله دور و در جهتی که با جهت نوترونهای فرودی زاویه θ . می‌سازد قرار دارد .



a) پدیده مشاهده شده در D را وقتی انرژی E ی نوترونهای فرودی تغییر کند به‌طور کیفی تشریح کنید .

b) آهنگ شمارش، برحسب E ، یک تشدید در $E = E_1$ نشان‌می‌دهد .بادانستن اینکه هیچ تشدید دیگری برای $E < E_1$ وجود ندارد ، نشان دهید که می‌توان l را تعیین کرد . l را برای $\theta = 30^\circ$ و $E_1 = 1.3 \times 10^{-20}$ joule محاسبه‌کنید .

c) ازحدودچه مقداری از E به‌بعدباید اندازه محدودهسته‌ها درنظر گرفته‌شوند .

۲ــ حالت مقید یک ذره در یک "چاه به‌صورت تابع دلتا"

ذره‌ای را در نظر بگیرید که هامیلتونی H [عملگر تعریف شده توسط فرمول ۱۰ــ D) از فصل اول آن به‌صورت زیر است :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - \alpha\,\delta(x)$$

α . یک ثابت مثبت است که ابعاد آن را پیدا خواهید کرد .

a) از معادله ویژه مقداری H بین $-\varepsilon$ و $+\varepsilon$ انتگرال بگیرید . بامیل‌دادن

ε به‌سمت صفر نشان دهید که مشتق ویژه تابع $\varphi(x)$ در $x = 0$ دارای یک ناپیوستگی است و سپس آنرا برحسب α، m و $\varphi(0)$ به‌دست آورید.

b) فرض کنید انرژی E ی ذره منفی است (حالت مقید) . دراین صورت $\varphi(x)$ می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود:

$$x < 0 \qquad \varphi(x) = A_1\, e^{\rho x} + A_1'\, e^{-\rho x}$$
$$x > 0 \qquad \varphi(x) = A_2\, e^{\rho x} + A_2'\, e^{-\rho x}$$

ثابت ρ را برحسب E و m بنویسید. بااستفاده ازنتایج سئوال قبلی، ماتریس M را که به‌صورت:

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ A_2' \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_1 \\ A_1' \end{pmatrix}$$

تعریف می‌شود محاسبه کنید. سپس با استفاده ازاین شرط که $\varphi(x)$ بایدمجذوراً انتگرال‌پذیر باشد، مقادیر ممکن انرژی را پیدا کنید. توابع موج بهنجار شده متناظر را محاسبه کنید.

c) این توابع موج را رسم کنید. مرتبه بزرگی پهنای Δx آنها را بدهید.

d) احتمال $\overline{d\mathscr{P}(p)}$ برای اینکه یک اندازه‌گیری تکانه ذره در یکی از حالتهای مانای بهنجار شده‌ای که در بالا محاسبه شد نتیجه‌ای بین p و $p + dp$ بدهد چقدراست؟ بهازاء چه مقداری از p این احتمال ماگزیمم است؟ درچه محدوده‌ای، با بعد Δp، مقدار قابل اغماضی دارد؟ مرتبه بزرگی حاصلضرب $\Delta x . \Delta p$ چقدر است؟

۳ ــ عبور از یک سد پتانسیل " به‌صورت تابع دلتا "

ذره‌ای در نظر بگیرید که در همان پتانسیل تمرین قبل قرار دارد. این‌بار، ذره با انرژی مثبت E، در طول محور Ox از چپ بهراست انتشار می‌یابد.

a) نشان دهید که یک حالت مانای ذره می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود:

$$\begin{cases} \varphi(x) = e^{ikx} + A\, e^{-ikx} & \text{اگر } x < 0 \\ \varphi(x) = B\, e^{ikx} & \text{اگر } x > 0 \end{cases}$$

که درآن k، A و B ثابتهائی هستند که باید برحسب انرژی E، m و α محاسبه شوند (به ناپیوستگی $\frac{d\varphi}{dx}$ در $x = 0$ توجه کنید).

b) قرار دهید : $-E_L = -m\alpha^2/2\hbar^2$ (انرژی حالت مقید ذره) . ضریب بازتاب R و ضریب عبور T ی سد را برحسب فراسنج بدون بعد E/E_L محاسبه‌کنید . تغییرات آنها را برحسب E بررسی کنید ، وقتی $E \longrightarrow \infty$ ، چه اتفاق می‌افتد؟ این مطلب را چگونه می‌توان تعبیرکرد؟ نشان دهیدکه ، اگر عبارت T را به مقادیر منفی E گسترش‌دهیم ، وقتی $E \longrightarrow -E_L$ ، واگرا می‌شود ، و این نتیجه را مورد بحث قرار دهید .

۴ ــ به‌تمرین ۲ برگردید ، و این‌بار ، از تبدیل فوریه استفاده کنید .

a) معادله ویژه مقداری H و تبدیل فوریهٔ این معادله را بنویسد . ازاین معادله مستقیما "عبارت $\overline{\varphi}(p)$ ، تبدیل‌فوریه $\varphi(x)$ ، را برحسب p ، E ، α و $\varphi(0)$ نتیجه‌گیری‌کنید . سپس نشان دهید که برای E فقط یک مقدار ، یک مقدار منفی ، امکان‌پذیراست . بااین روش فقط حالت مقید ذره ، و نه‌حالتهائی که در آنها ذره انتشار می‌یابد ، به‌دست می‌آید ،چرا؟ سپس $\varphi(x)$ را محاسبه کنید و نشان دهید که به‌اینطریق می‌توان تمام نتایج تمرین ۲ را به‌دست آورد .

b) . انرژی جنبشی متوسط ذره‌می‌تواند به‌صورت زیرنوشته‌شود (رک فصل‌سوم) :

$$E_k = \frac{1}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty} p^2 \, |\overline{\varphi}(p)|^2 \, \mathrm{d}p$$

نشان دهید که ، وقتی $\overline{\varphi}(p)$ یک تابع " به‌حدکافی منظم " باشد ، هم‌چنین داریم :

$$E_k = -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x) \;\; \frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}x^2} \, \mathrm{d}x$$

این فرمولها به‌ما امکان می‌دهند تا انرژی E_k برای یک ذره درحالت مقیدی راکه‌در (a) محاسبه شده است ، به دوروش مختلف ، به‌دست آوریم . چه نتیجه‌ای به‌دست می‌آید؟توجه کنید که دراین مورد ، $\varphi(x)$ در $x = 0$ ، نقطه‌ای که مشتق آن ناپیوسته است ، " منظم " نیست . دراین صورت لازم است که از $\varphi(x)$ به‌مفهوم " توزیعها " مشتق‌گیری کرد ، این نوع مشتق‌گیری نقطه $x = 0$ را درمقدار متوسط مورد نظرشرکت می‌دهد . این مشارکت را ازنظر فیزیکی تعبیرکنید : یک چاه مربعی در نظر بگیرید که مرکزآن در $x = 0$ است و پهنای a ی آن به‌سمت صفر و عمق V_0 آن به‌سمت بینهایت میل کند (بطوری که $aV_0 = \alpha$) ، رفتار تابع موج دراین چاه را مطالعه کنید .

۵ ــ چاه متشکل از دوتابع دلتا

یک ذره به جرم m در نظر بگیرید که انرژی پتانسیل آن برابر است با :

$$V(x) = -\alpha\delta(x) - \alpha\delta(x-l) \qquad \alpha > 0$$

که درآن l یک طول ثابت است .

a) با قرار دادن $E = -\dfrac{\hbar^2\rho^2}{2m}$ ، حالتهای مقید ذره را محاسبه کنید . نشان دهید که انرژیهای ممکن توسط رابطه

$$e^{-\rho l} = \pm\left(1 - \frac{2\rho}{\mu}\right)$$

داده می‌شوند که‌درآن μ به‌وسیله $\mu = \dfrac{2m\alpha}{\hbar^2}$ تعریف می‌شود . یک حل نموداری ازاین معادله ارائه دهید .

(i) حالت پایه . نشان دهیدکه این‌حالت زوج است (نسبت به‌تقارن حول‌نقطه $x = l/2$ تغییرناپذیر است) و انرژی E_Sآن ازانرژی E_L ــ که در مسئله ۳ وارد شد کمتر است . این نتیجه را به‌طور فیزیکی تعبیر کنید . نمودار تابع موج مربوطه را رسم کنید .

(ii) حالت برانگیخته . نشان دهید که ، وقتی l بزرگترازمقداری‌که مشخص‌خواهید کردباشد ، یک حالت برانگیخته فرد ، با انرژی E_A که بزرگتر از E_L ــ است ، وجود دارد . تابع موج متناظر را پیدا کنید .

(iii) تشریح کنید که چگونه محاسبات اخیر ما را قادر می‌سازد تا مدلی بسازیم‌که معرف یک مولکول دواتمی یونیده (به‌عنوان مثال H_2^+) باشد که هسته‌های آن به‌فاصله l از هم قراردارند . انرژیهای این‌دو تراز چگونه با l تغییر می‌کنند ؟ در حد $l \longrightarrow 0$ و درحد $l \longrightarrow \infty$ چه اتفاق می‌افتد ؟ اگر دافعه دوهسته را به‌حساب آوریم ، انرژی کل سیستم چقدراست ؟ نشان‌دهیدکه منحنی تغییرات انرژیهائی‌که این‌چنین به‌دست‌آمده‌است نسبت به l ما را قادر می‌سازد تا در بعضی موارد وجود حالتهای مقید H_2^+ را پیش بینی کرده و مقدار l در تعادل را تعیین کنیم . به‌این طریق یک مدل بسیار مقدماتی ازپیوند شیمیائی به‌دست می‌آوریم .

b) ضرائب بازتاب و عبور مجموعه دوسد به‌صورت تابع دلتا را محاسبه کنید . تغییرآنها را نسبت به l مطالعه کنید . آیا تشدیدهائی که به‌این ترتیب به‌دست آمده‌اند ، وقتی l مضرب صحیحی ازطول موج دوبروی ذره باشد ، اتفاق می‌افتند ؟ چرا ؟

۶ـ یک‌چاه پتانسیل مربعی به‌پهنای a وعمق V_0 درنظربگیرید (دراین‌تمرین از قراردادبخش α-c- ۲ درمکمل H_1 استفاده خواهیم‌کرد) . می‌خواهیم‌خواص حالت‌مقیدیک‌ذره دراین چاه را وقتی پهنای a ی آن به‌سمت صفر میل کند مطالعه کنیم .

a) نشان دهید که در حقیقت فقط یک حالت مقید وجود دارد و انرژی ی آنرا محاسبه کنید (پیدا می‌کنیم $E \simeq -\dfrac{mV_0^2a^2}{2\hbar^2}$ ، یعنی انرژی‌ای کـه با مجـذور مساحت aV_0 چاه تغییر می‌کند) .

b) نشان دهید که $\rho \longrightarrow 0$ و $A'_2 = A_2 \simeq B_1/2$ از ایـن مطلب نتیجه‌گیری کنید که، در حالت مقید، احتمال یافتن ذره در خارج از چاه به‌سمت ۱ میـل می‌کند .

c) چگونه بررسی‌های اخیر می‌توانند به ذره‌ای که، مانند تمرین ۲، در پتانسیل $V(x) = -\alpha\delta(x)$ قرار دارد اعمال شود؟

۷ـ ذره‌ای را در نظر بگیرید که در پتانسیل :

$$\begin{array}{ll} V(x) = 0 & x \geqslant a \\ V(x) = -V_0 & 0 \leqslant x < a, \end{array}$$

و $V(x)$ برای x های منفی بینهایت است قرار دارد . فرض کنید $\varphi(x)$ یک تابع موج وابسته به‌حالت مانای ذره باشد . نشان دهید که $\varphi(x)$ می‌تواند . ادامه داده شود و یک تابع موج فرد که مربوط به‌یک حالت مانا برای یک چاه مربعی به‌پهنای a ۲ و عمق V_0 است بـه‌دست دهد (رک مکمل H_1 ، بخش α-c- ۲) . در تعداد حالتهای مقید ذره برحسب a و V_0 بحث کنید . آیا ، مانند چاه مربعی متقارن ، همواره لااقل یک چنین حالتی وجود دارد؟

۸ـ در یک مسأله دوبعدی، بازتاب مایل یک ذره ازیک‌پله‌پتانسیل‌راکه به‌صورت:

$$\begin{array}{ll} V(x, y) = 0 & x < 0 \\ V(x, y) = V_0 & x > 0 \end{array}$$

تعریف شده است درنظربگیریدحرکت مرکزبسته موج رامطالعه‌کنید . در مورد بازتاب کلـی ، اختلافهای بین مسیر این مرکز و مسیر کلاسیکی (جابجائی جانبی در اثر بازتاب)را به‌طور فیزیکی تعبیر کنید . نشان دهید که وقتی $V_0 \longrightarrow +\infty$ ،مسیرکوانتومی بامسیر کلاسیک مجانب می‌شود .

فصل دوم

ابزارهای ریاضی مکانیک کوانتومی

رئوس مطالب فصل دوم

A ــ فضای توابع موج یک ذره

۱ ــ ساختار فضای توابع موج $\mathscr{F}$
a ــ $\mathscr{F}$ یک فضای برداری است
b ــ حاصلضرب نرداری
c ــ عملگرهای خطی
۲ ــ پایه‌های راست هنجار گسسته در $\mathscr{F}$ $\{u_i(\mathbf{r})\}$
a ــ تعریف
b ــ مؤلفه‌های یک تابع موج در پایه $\{u_i(\mathbf{r})\}$
c ــ عبارتی برای حاصلضرب نرداری برحسب مؤلفه‌ها .
d ــ رابطهٔ بستاری
۳ ــ واردکردن " پایه‌هائی " که به $\mathscr{F}$ تعلق ندارند .
a ــ امواج تخت
b ــ " توابع دلتا "
c ــ تعمیم : پایه‌های "راست هنجار پیوسته

B ــ فضای حالت
نمادگذاری دیراک

۱ ــ مقدمه
۲ ــ بردارهای "کت" و بردارهای "برا"
a ــ عناصر $\mathscr{E}$: کتها
b ــ عناصر فضای همزاد $\mathscr{E}^*$ وابسته به $\mathscr{E}$
c ــ تناظر بین کتها و براها
۳ ــ عملگرهای خطی
a ــ تعاریف
b ــ مثالهائی ازعملگرهای خطی . تصویرکنندها

۴ ــ همیوغ هرمیتی

a ــ عمل یک عملگر خطی روی یک برا

b ــ عملگر الحاقی $A^\dagger$ وابسته به‌یک عملگر خطی A

c ــ تناظر بین یک عملگر و الحاقی آن

d ــ همیوغ هرمیتی در نمادگذاری دیراک

e ــ عملگرهای هرمیتی

---

c ــ نمایش ها درفضای حالتها

۱ ــ مقدمه

a ــ تعریف یک نمایش

b ــ هدف بخش c

۲ ــ روابط مشخصه یک پایه راست هنجار

a ــ رابطه راست هنجاری

b ــ رابطه بستاری

۳ ــ نمایش کتها و براها

a ــ نمایش کتها

b ــ نمایش براها

۴ ــ نمایش عملگرها

a ــ نمایش A توسط یک ماتریس " مربعی "

b ــ نمایش ماتریسی کت $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$

c ــ عبارتی برای عدد $\langle\varphi|A|\psi\rangle$

d ــ نمایش ماتریسی $A^\dagger$ ، الحاقی A

۵ ــ تغییر نمایشها

a ــ بیان مسأله

b ــ تبدیل مؤلفه‌های یک کت

c ــ تبدیل مؤلفه‌های یک برا

d ــ تبدیل عناصر ماتریس یک عملگر

D ــ معادلات ویژه مقداری مشاهده پذیرها

۱ ــ ویژه مقدارها و ویژه بردارهای یک عملگر
a ــ تعاریف
b ــ یافتن ویژه مقدارها و ویژه بردارهای یک عملگر
۲ ــ مشاهده‌پذیرها
a ــ خواص ویژه مقدارها و ویژه بردارهای یک عملگر هرمیتی.
b ــ تعریف یک مشاهده پذیر
c ــ مثال : تصویر کننده P_ψ
۳ ــ مجموعه‌های مشاهده پذیرهای جابجائی پذیر
a ــ قضیه‌های مهم
b ــ مجموعه‌های کامل مشاهده پذیرهای جابجائی پذیر (م.ک.م.ج)

E ــ دومثال مهم ازنمایشها و مشاهده‌پذیرها

۱ ــ نمایشهای $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ و $\{|\mathbf{p}\rangle\}$
a ــ تعریف
b ــ روابط راست هنجاری و بستاری
c ــ مؤلفه‌های یک کت
d ــ حاصلضرب برداری دوبردار
e ــ عبور از نمایش $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ به‌نمایش $\{|\mathbf{p}\rangle\}$
۲ ــ عملگرهای $\mathbf{R}$ و $\mathbf{P}$
a ــ تعریف
b ــ $\mathbf{R}$ و $\mathbf{P}$ هرمیتی هستند
c ــ ویژه بردارهای $\mathbf{R}$ و $\mathbf{P}$
d ــ $\mathbf{R}$ و $\mathbf{P}$ مشاهده پذیرند.

---

۴ ـ حاصلضرب تانسوری فضاهای حالت

۱ ـ مقدمه
۲ ـ تعریف و خواص حاصلضرب تانسوری
a ـ فضای حاصلضرب تانسوری $\mathscr{E}$
b ـ حاصلضرب تانسوری عملگرها
c ـ نمادگذاری
۳ ـ معادلات ویژه‌مقداری درفضای حاصلضرب
a ـ ویژه‌مقدارها وویژه بردارهای عملگرهای گسترش یافته
b ـ مجموعه‌های کامل مشاهده‌پذیرهای جابجائی پذیر در $\mathscr{E}$
۴ ـ کاربردها
a ـ حالتهای ذره دریک و سه بعد
b ـ حالتهای یک سیستم دو ذره‌ای

این فصل به‌یک بررسی عام از ابزار ریاضی پایه که در مکانیک کوانتومی به‌کار می‌رود اختصاص یافته است . مطالب را به‌طور فشرده و به‌این منظورکه‌مطالعه فصلهای‌بعدی را برای خواننده‌هائی که بااین ابزار آشنا نیستند ، تسهیل کند ، ارائه خواهیم‌کرد . هیچ سعی نمی‌شود تا از نظر ریاضی کامل و دقیق باشیم . احساس می‌کنیم بهتر است ، با متحد کردن مفاهیم مختلفی که در مکانیک کوانتومی مفیدند ، در یک فصل ، و بخصوص، باتاکید بر روی راحتی نمادگذاری دیراک برای محاسبات مختلفی که باید انجام دهیم ، خود را به‌یک دیدگاه عملی محدود کنیم .

ازین جهت ، سعی خواهیم کرد تا جائی که ممکن است بحث را ساده‌کنم .دراینجا نه تعاریف عام و نه استدلالهای دقیقی راکه برای یک ریاضی‌دادن لازم است ، نخواهید یافت . به‌عنوان مثال ، گاهی از فضاهای باابعاد نامحدود صحبت خواهیم کرد ولی طوری استدلال می‌کنیم که گوئی تعداد ابعادشان محدود بوده است . بعلاوه ، اصطلاحات بسیاری (توابع مجذورا " انتگرال‌پذیر ، پایه و غیره) را با معنائی به‌کار خواهیم گرفت ، که هرچند معمولا " در فیزیک به‌کار می‌رود ، ولی دقیقا " آن چیزی که در ریاضی محض به‌کار می‌رود ، نیست .

بخش A را با مطالعه توابع موجی که در فصل اول معرفی شدند شروع می‌کنیم . نشان می‌دهیم که این توابع موج به‌یک فضای برداری انتزاعی ، که آنرا " فضای تابع موج $\mathscr{F}$ " می‌نامیم ، تعلق دارند . این مطالعه را دقیقا " انجام خواهیم داد زیرا بعضی از مفاهیم اساسی صورتبندی ریاضی مکانیک کوانتومی : حاصلضرب نرداری ، عملگرهای خطی پایه ، و غیره ، را وارد می‌کند . باشروع بخش B ، صورتبندی‌عام‌تری را توسعه خواهیم‌داد که حالت یک سیستم را توسط یک " بردار حالت " متعلق به‌یک فضای برداری : " فضای حالت $\mathscr{E}$ " ، مشخص می‌کند . دراین صورتبندی نمادگذاری دیراک واردمی‌شودکه‌محاسبات را بسیار ساده می‌کند . بخش C به‌مطالعه ایدهٔ یک نمایش اختصاص یافته است . مطالعه ، بخش D مخصوصا " به‌خواننده‌ای توصیه می‌شود که با قطری کردن یک عملگر ناآشناست : این عمل ، همواره در آنچه بدنبال می‌آید ، برای ما مفیدخواهد بود . دربخش E به‌بررسی دومثال مهم از نمایشها می‌پردازیم . مخصوصا " ، نشان می‌دهیم‌که‌چگونه توابع موج مطالعه شده در بخش A ، " مؤلفه‌های " بردارهای حالت دریک نمایش بخصوص هستند .بالاخره در بخش F ، مفهوم ضرب تانسوری را وارد می‌کنیم . این مفهوم توسط یک مثال ساده‌در مکمل D_{IV} به‌طور ملموس‌تری نشان داده خواهد شد .

A ・ فضای توابع موج یك ذره

تعبیر احتمالاتی تابع موج $\psi(\mathbf{r}, t)$ ی یک ذره در فصل گذشته ارائه شد :
$|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r$ معرف احتمال یافتن ذره در زمان t ، در حجم $d^3r = \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z$ حول نقطه $\mathbf{r}$ ، است .
احتمال کل یافتن ذره در تمام فضا برابر ۱ است ، از این رو باید داشته باشیم :

$$\int d^3r\,|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = 1 \qquad (\mathrm{A}-۱)$$

که در آن انتگرال‌گیری روی تمام فضا انجام می‌شود .

به این ترتیب ، به‌مطالعه مجموعه توابع مجذورا " انتگرال‌پذیر ، یعنی ، توابعی که برای آنها انتگرال (۱ــ A)همگرا باشد ، هدایت می‌شویم . این مجموعه توسط ریاضی‌دانان L^2 نامیده می‌شود و ساختار یک فضای هیلبرت را دارد .

از دیدگاه فیزیکی ، واضح است که مجموعه L^2 بسیار وسیع است : با توجه به‌مفهوم $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ ، تابع موجی که عملا " مورد استفاده قرارگرفته است دارای نوعی نظم است . می‌توانیم فقط توابع $\psi(\mathbf{r}, t)$ ای را نگهداریم که در همه‌جا معین ، پیوسته و مشتق پذیر باشند (به‌عنوان مثال ، بیان این مطلب که‌یک تابع در یک نقطه از فضا واقعا " ناپیوسته است هیچ معنی فیزیکی ندارد زیرا ، هیچ آزمایشی مارا قادر نمی‌سازدتابه‌پدیده‌های واقعی در مقیاس بسیار کوچک ، مثلا " ، 10^{-30} m دسترسی داشته باشیم) . هم‌چنین می‌توانیم خود را به‌توابع موجی محدود سازیم که دارای قلمروکرانداری باشند (که ما را مطمئن می‌سازد که‌ذره می‌تواند دریک ناحیه محدودی از فضا ، مثلا " ، در داخل آزمایشگاه ، یافت شود) . دراینجا به‌ارائه یک لیست کلی ودقیق ازاین شرایط تکمیلی مبادرت نخواهیم‌کرد : مجموعه توابع موجی راکه ازتوابع بقدرکافی منظم L^2 تشکیل یافته‌اند ، $\mathscr{F}$ خواهیم‌نامید .

۱ ــ ساختار فضای توابع موج $\mathscr{F}$

a ・ $\mathscr{F}$ یک فضای برداری است .

می‌توان به‌سادگی نشان داد که $\mathscr{F}$ تمام‌معیارهای یک فضای برداری را ارضا می‌کند .

به‌عنوان یک مثال، نشان می‌دهیم که اگر $\psi_1(\mathbf{r})$ و $\psi_2(\mathbf{r}) \in \mathscr{F}$ *، در این صورت داریم:

$$\psi(\mathbf{r}) = \lambda_1\psi_1(\mathbf{r}) + \lambda_2\psi_2(\mathbf{r}) \in \mathscr{F} \qquad (A-۲)$$

که در آن λ_1 و λ_2 دوعدد مختلط دلخواه‌اند.

برای اینکه نشان دهیم $\psi(\mathbf{r})$ مجذورا" انتگرال‌پذیر است، $|\psi(\mathbf{r})|^2$ را بسط می‌دهیم:

$$|\psi(\mathbf{r})|^2 = |\lambda_1|^2\,|\psi_1(\mathbf{r})|^2 + |\lambda_2|^2\,|\psi_2(\mathbf{r})|^2 + \lambda_1^*\lambda_2\psi_1^*(\mathbf{r})\psi_2(\mathbf{r}) + \lambda_1\lambda_2^*\psi_1(\mathbf{r})\psi_2^*(\mathbf{r}) \qquad (A-۳)$$

دو جمله آخر (۳ ـ A) دارای مدولهای یکسانی هستند، که حد بالائی آنها عبارت است از:

$$|\lambda_1|\,|\lambda_2|\,\left[|\psi_1(\mathbf{r})|^2 + |\psi_2(\mathbf{r})|^2\right]$$

بنابراین $|\psi(\mathbf{r})|^2$ از تابعی که انتگرال آن همگراست کوچکتر است، زیرا ψ_1 و ψ_2 مجذورا" انتگرال‌پذیر هستند.

b ـ حاصلضرب نرداری

α ـ تعریف

به‌هر زوج عنصر $\varphi(\mathbf{r})$ و $\psi(\mathbf{r})$ از $\mathscr{F}$، که به‌این ترتیب در نظر گرفته شده باشند، یک عدد مختلط وابسته می‌کنیم که به‌صورت (φ, ψ) نشان داده می‌شود و بنا به تعریف برابراست با:

$$\boxed{(\varphi, \psi) = \int d^3r\;\; \varphi^*(\mathbf{r})\;\; \psi(\mathbf{r})} \qquad (A-۴)$$

$\varphi(\mathbf{r})$ حاصلضرب نرداری $\psi(\mathbf{r})$ و $\varphi(\mathbf{r})$ است [اگر φ و ψ به $\mathscr{F}$ تعلق داشته باشند، این انتگرال همیشه همگراست].

* نشانه $\in$ به‌معنی "تعلق دارد به" می‌باشد.

β ــ خواص

از تعریف (A ــ ۴)، نتیجه می‌شود:

$$(\varphi, \psi) = (\psi, \varphi)^* \quad (A-5)$$

$$(\varphi, \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1(\varphi, \psi_1) + \lambda_2(\varphi, \psi_2) \quad (A-6)$$

$$(\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2, \psi) = \lambda_1^*(\varphi_1, \psi) + \lambda_2^*(\varphi_2, \psi) \quad (A-7)$$

حاصلضرب نرداری نسبت به‌تابع دوم خطی، و نسبت به تابع اول ضد خطی است. اگر $(\varphi, \psi) = 0$ باشد، $\varphi(\mathbf{r})$ و $\psi(\mathbf{r})$ را متعامد گوئیم. مقدار:

$$(\psi, \psi) = \int d^3r\, |\psi(\mathbf{r})|^2 \quad (A-8)$$

عددی است حقیقی و مثبت و در صورتی صفر است که فقط و فقط $\psi(\mathbf{r}) \equiv 0$ باشد.

$\sqrt{(\psi, \psi)}$ هنجار $\psi(\mathbf{r})$ نامیده می‌شود [به‌سادگی می‌توان نشان داد که این عدد تمام خواص یک هنجار را داراست]. بنابراین، حاصلضرب نرداری انتخاب شده در بالا، تعریف یک هنجار در $\mathscr{F}$ را ممکن می‌سازد.

درآخر، نامساوی شوارتز را ذکر می‌کنیم (رک مکمل A_{II}):

$$|(\psi_1, \psi_2)| \leqslant \sqrt{(\psi_1, \psi_1)}\ \sqrt{(\psi_2, \psi_2)} \quad (A-9)$$

این نامساوی در صورتی به‌یک تساوی تبدیل می‌شود که فقط و فقط دوتابع ψ_1 و ψ_2 متناسب با یکدیگر باشند.

c ــ عملگرهای خطی

α ــ تعریف

یک عملگر خطی A بنا به‌تعریف، یک موجود ریاضی است که به‌هرتابع $\psi(\mathbf{r}) \in \mathscr{F}$ یک تابع دیگر $\psi'(\mathbf{r})$ به‌طریقی وابسته می‌کند، و این وابستگی خطی است:

$$\boxed{\begin{aligned} &\psi'(\mathbf{r}) = A\psi(\mathbf{r}) \quad &(A-10-a)\\ &A[\lambda_1\psi_1(\mathbf{r}) + \lambda_2\psi_2(\mathbf{r})] = \lambda_1 A\psi_1(\mathbf{r}) + \lambda_2 A\psi_2(\mathbf{r}) \quad &(A-10-b)\end{aligned}}$$

حال چند مثال از عملگرهای خطی ذکر می‌کنیم: عملگر پاریته Π ، که تعریف آن به‌صورت زیراست:

$$\Pi\psi(x, y, z) = \psi(-x, -y, -z) \tag{A-11}$$

عملگر ضرب در x ، که ما آنرا با X نمایش می‌دهیم و به‌صورت زیرتعریف‌می‌شود:

$$X\psi(x, y, z) = x\psi(x, y, z) \tag{A-12}$$

بالاخره، عملگر مشتق‌گیری نسبت به x ، کـه آنرا D_x می‌نامیـم و تعـریف آن به‌صورت زیراست:

$$D_x\psi(x, y, z) = \frac{\partial\psi(x, y, z)}{\partial x} \tag{A-13}$$

[دو عملگر X و D_x وقتی روی یک تابع $\psi(\mathbf{r}) \in \mathscr{F}$ عمل کنند، می‌توانندآنرا به‌تابعی‌تبدیل کنند که ممکن است دیگر مجذورا "انتگرال‌پذیر نباشد].

β ــ ضرب عملگرها

فرض کنید A و B دو عملگر خطی‌باشند. حاصلضرب AB ی آنها به‌صورت‌زیرتعریف می‌شود:

$$\boxed{(AB)\psi(\mathbf{r}) = A[B\psi(\mathbf{r})]} \tag{A-14}$$

ابتدا B روی $\psi(\mathbf{r})$ عمل می‌کند ومی‌دهد $\varphi(\mathbf{r}) = B\psi(\mathbf{r})$ ، سپس A روی‌تابع‌جدید $\psi(\mathbf{r})$ عمل می‌کند.

عموما $AB \neq BA$. جابجاگر A و B عملگری است که به‌صورت $[A, B]$ نوشته شده و به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\boxed{[A, B] = AB - BA} \tag{A-15}$$

برای مثال، جابجاگر $[X, D_x]$ را محاسبه می‌کنیم. برای این منظـور یک تابع

دلخواه $\varphi(\mathbf{r})$ انتخاب می‌کنیم:

$$\begin{aligned}[X, D_x]\ \psi(\mathbf{r}) &= \left(x\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}x\right)\psi(\mathbf{r}) \\ &= x\frac{\partial}{\partial x}\psi(\mathbf{r}) - \frac{\partial}{\partial x}[x\psi(\mathbf{r})] \\ &= x\frac{\partial}{\partial x}\psi(\mathbf{r}) - \psi(\mathbf{r}) - x\frac{\partial}{\partial x}\psi(\mathbf{r}) = -\psi(\mathbf{r})\end{aligned} \qquad (A-۱۶)$$

چون این رابطه برای تمام $\psi(\mathbf{r})$ ها درست است، می‌توان نتیجه گرفت که:

$$[X, D_x] = -1 \qquad (A-۱۷)$$

۲ ـ پایه‌های راست هنجار گسسته در $\mathscr{F}$: $\{u_i(\mathbf{r})\}$

a ـ تعریف

یک مجموعه شمارش پذیر از توابع $\mathscr{F}$ را، که با شاخص گسسته $(i = 1, 2, ..., n, ...)$ مشخص شده‌اند در نظر بگیرید:

$$u_1(\mathbf{r}) \in \mathscr{F}, \quad u_2(\mathbf{r}) \in \mathscr{F}, \quad ..., \quad u_i(\mathbf{r}) \in \mathscr{F}, \quad ...$$

مجموعه $\{u_i(\mathbf{r})\}$ درصورتی راست هنجار است که داشته باشیم:

$$(u_i, u_j) = \int d^3r\ u_i^*(\mathbf{r})\ u_j(\mathbf{r}) = \delta_{ij} \qquad (A-۱۸)$$

که درآن δ_{ij} تابع دلتای کرونکر است که برای $i = j$ برابر با یک و برای $i \neq j$ برابر با صفر است.

ـ این مجموعه در صورتی یک پایه *تشکیل می‌دهد که هرتابع $\psi(\mathbf{r}) \in \mathscr{F}$ بتواند به‌یک طریق و فقط به‌یک طریق برحسب $u_i(\mathbf{r})$ نوشته شود:

$$\boxed{\psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i\, u_i(\mathbf{r})} \qquad (A-۱۹)$$

---

* وقتی که مجموعه $\{u_i(\mathbf{r})\}$ تشکیل یک پایه بدهند، گاهی‌گفته می‌شود که مجموعه کاملی از توابع است. باید توجه کردکه کلمه کامل با معنائی مخالف آنچه که معمولا "درریاضی به‌کار می‌رود، به‌کار رفته است.

b ــ موٴلفه‌های یک تابع موج در پایه

طرفین (A–۱۹) را در $u_j^*(\mathbf{r})$ ضرب‌کرده و روی تمام‌فضا ازآن‌انتگرال‌می‌گیریم . از (A–۶) و (A–۱۸) داریم*:

$$
\begin{aligned}
(u_j, \psi) &= \left(u_j, \sum_i c_i\, u_i\right) = \sum_i c_i (u_j, u_i) \\
&= \sum_i c_i\, \delta_{ij} = c_j
\end{aligned}
\qquad (A–۲۰)
$$

یعنی :

$$
\boxed{c_i = (u_i, \psi) = \int d^3r\ \ u_i^*(\mathbf{r})\ \ \psi(\mathbf{r})}
\qquad (A–۲۱)
$$

بنابراین ، موٴلفه ی c_i $\psi(\mathbf{r})$ روی $u_i(\mathbf{r})$ برابراست با حاصلضرب نرداری $\psi(\mathbf{r})$ در $u_i(\mathbf{r})$. انتخاب پایه $\{ u_i(\mathbf{r}) \}$ ، معادل با این است که $\psi(\mathbf{r})$ یامجموعه موٴلفه‌های ی c_i آن نسبت به‌توابع پایه، مشخص شده باشد . می‌گوئیم که مجموعه اعداد c_i ، تابع $\psi(\mathbf{r})$ را در پایه $\{ u_i(\mathbf{r}) \}$ نمایش می‌دهند .

گوشـزدها :

(*i*) به‌مشابهت با یک پایه راست هنجار $\{ \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3 \}$ ازفضای‌سه‌بعدی‌معمولی R^3 ، توجه کنید .

این حقیقت که $\mathbf{e}_1$ ، $\mathbf{e}_2$ و $\mathbf{e}_3$ متعامد ویکانی هستند ، می‌تواند در واقـــع به‌صورت زیر بیان شود :

$$
\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{ij} \qquad (i, j = 1, 2, 3) \qquad (A–۲۲)
$$

هر بردار $\mathbf{V}$ از R^3 می‌تواند دراین پایه بسط داده شود :

$$
\mathbf{V} = \sum_{i=1}^{3} v_i\ \ \mathbf{e}_i \qquad (A–۲۳)
$$

---

* برای اینکه کاملا" دقیق باشیم ، باید مطمئن شویم که می‌توانیم $\sum_i$ و $\int d^3r$ را تعویض کنیم . منظما" از این مسأله صرفنظر خواهیم کرد .

که در آن :

$$v_i = \mathbf{e}_i \,.\, \mathbf{V} \qquad (A-24)$$

بنابراین فرمولهای (A –۱۸) ، (A –۱۹) و (A –۲۱) ، به‌نوعی فرمولهای مشهور (A –۲۲) ، (A –۲۳) و (A –۲۴) را تعمیم می‌دهند ، لیکن باید توجه شود که v_i اعدادی حقیقی هستند ، حال آنکه c_i اعدادی مختلط .

(ii) مسلماً " یک تابع $\psi(\mathbf{r})$ در دوپایه مختلف ، مؤلفه‌های متفاوتی خواهد داشت . مسأله تغییر پایه را بعداً " مطالعه خواهیم کرد .

(iii) هم‌چنین می‌توانیم ، در پایه $\{ u_i(\mathbf{r}) \}$ ، یک عملگر خطی A را توسط یک مجموعه اعدادکه می‌توانند بصورت یک ماتریس مرتب شوند ، نمایش دهیم . بار دیگر در بخش C ، پس ازاینکه نمادگذاری دیراک را معرفی کردیم ، به‌این‌سئوال‌بازخواهیم گشت .

c ــ عبارت حاصلضرب نرداری برحسب مؤلفه‌ها

فرض کنید $\varphi(\mathbf{r})$ و $\psi(\mathbf{r})$ دوتابع موج باشند که بتوانند به‌صورت زیر بسط داده‌شوند :

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{r}) &= \sum_i b_i\, u_i(\mathbf{r}) \\ \psi(\mathbf{r}) &= \sum_j c_j\, u_j(\mathbf{r}) \end{aligned} \qquad (A-25)$$

حاصلضرب نرداری آنها می‌تواند با استفاده از (A –۶) ، (A –۷) و (A –۱۸) محاسبه شود :

$$\begin{aligned} (\varphi, \psi) &= \left(\sum_i b_i u_i , \sum_j c_j u_j \right) = \sum_{i,j} b_i^* c_j\, (u_i, u_j) \\ &= \sum_{i,j} b_i^* c_j\, \delta_{ij} \end{aligned}$$

یعنی :

$$\boxed{(\varphi, \psi) = \sum_i b_i^* c_i} \qquad (A-26)$$

بخصوص :

$$\boxed{(\psi, \psi) = \sum_i |c_i|^2} \qquad (A-۲۷)$$

بنابراین ، حاصلضرب برداری دو تابع موج (یا مجذور هنجار یک تابع موج) می‌تواند به‌طور بسیار ساده‌ای برحسب مؤلفه‌های این توابع در پایه $\{ u_i(\mathbf{r}) \}$ بیان شود .

گوشزد :

فرض کنید $\mathbf{V}$ و $\mathbf{W}$ دوبردار از R^3 ، با مؤلفه‌های v_i و w_i باشند . عبارت تحلیلی حاصلضرب برداری آنها کاملاً شناخته شده است .

$$\mathbf{V} . \mathbf{W} = \sum_{i=1}^{3} v_i \, w_i \qquad (A-۲۸)$$

از این رو می‌توان فرمول (۲۶— A) را به‌عنوان تعمیم (۲۸ — A) تلقی کرد .

d — رابطه بستاری

رابطه (۱۸— A) ، که رابطه راست هنجاری نامیده می‌شود ، این واقعیت را بیان می‌کند که توابع مجموعه $\{ u_i(\mathbf{r}) \}$ به ۱ بهنجار شده و نسبت به‌یکدیگر متعامدند اکنون می‌خواهیم رابطه دیگری ، که رابطه بستاری نامیده شده و بیان‌کننده این واقعیت است که این مجموعه تشکیل یک پایه میدهند ، برقرار سازیم .

اگر $\{ u_i(\mathbf{r}) \}$ یک پایه از $\mathscr{F}$ باشد ، برای هرتابع $\psi(\mathbf{r}) \in \mathscr{F}$ بسطی مانند (۱۹— A) وجود دارد . عبارت (۲۱— A) برای مؤلفه‌های مختلف c_i را در (۱۹— A) قرار دهید [اسم متغیر انتگرال‌گیری باید عوض شود ، زیرا $\mathbf{r}$ قبلاً در (۱۹— A) ظاهر شده است] :

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \sum_i c_i \, u_i(\mathbf{r}) = \sum_i (u_i, \psi) \, u_i(\mathbf{r}) \\ &= \sum_i \left[\int d^3r' \; u_i^*(\mathbf{r}') \;\; \psi(\mathbf{r}') \right] \; u_i(\mathbf{r}) \end{aligned} \qquad (A-۲۹)$$

با معاوضه $\sum_i$ و $\int d^3r'$ ، خواهیم داشت :

$$\psi(\mathbf{r}) = \int d^3r' \ \psi(\mathbf{r}')\left[\sum_i u_i(\mathbf{r}) \ u_i^*(\mathbf{r}')\right] \qquad (A-۳۰)$$

بنابراین $\sum_i u_i(\mathbf{r})u_i^*(\mathbf{r}')$ تابعی است به‌صورت $F(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ از $\mathbf{r}$ و $\mathbf{r}'$ ، به‌طوری که‌برای هر تابع $\psi(\mathbf{r})$ داریم :

$$\psi(\mathbf{r}) = \int d^3r' \ \psi(\mathbf{r}') \ F(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \qquad (A-۳۱)$$

معادلهٔ (A ـ۳۱) مشخصه یک تابع $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ است (رک پیوست ۲) .ازاینجامیتوان نتیجه گرفت :

$$\boxed{\sum_i u_i(\mathbf{r}) \ u_i^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \qquad (A-۳۲)$$

متقابلاً ، اگر یک مجموعه راست هنجار $\{u_i(\mathbf{r})\}$ در رابطه بستاری (A-۳۲) صدق کند ، تشکیل یک پایه می‌دهد . در واقع ، هرتابع $\psi(\mathbf{r})$ می‌تواند به‌صورت زیرنوشته شود :

$$\psi(\mathbf{r}) = \int d^3r' \ \psi(\mathbf{r}') \ \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \qquad (A-۳۳)$$

با قراردادن عبارت (A ـ۳۲) برای $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ دراین رابطه، فرمول (A ـ۳۰) به‌دست می‌آید . برای رسیدن به (A ـ۲۹) آنچه که باید انجام دهیم‌این‌استکه‌باردیگرجمع‌بندی و انتگرال‌گیری را معاوضه کنیم . لذا این معادله این واقعیت را بیان می‌کندکه $\psi(\mathbf{r})$ همواره می‌تواند برحسب $u_i(\mathbf{r})$ بسط داده شود و ضرائب این بسط را بدهد .

گوشـزد :

باردیگر در بخش C ، با استفاده ازنمادگذاری دیراک ، به‌بررسی رابطه بستاری خواهیم پرداخت و خواهیم دید که‌می‌توان یک تعبیر هندسی‌ساده‌ازآن‌ارائه داد .

۳ ــ معرفی "پایه‌هائی" که به $\mathscr{F}$ تعلق ندارند .

پایه‌های $\{ u_i(\mathbf{r}) \}$ که دربالا مطالعه شدند از توابع مجذورا " انتگرال‌پذیر تشکیل شده‌اند . هم‌چنین ممکن است مناسب باشد " پایه‌هائی " وارد کنیم که از توابعی تشکیل شده باشند که نه به $\mathscr{F}$ تعلق داشته باشند و نه به L^2 ، ولی مع‌الوصف هر تابع موج $\psi(\mathbf{r})$ بتواند برحسب آنها بسط داده شود . می‌خواهیم مثالهائی از چنین پایه‌هائی ارائه داده و نشان دهیم‌که چگونه می‌توان فرمولهای مهمی را که در بخش گذشته برقرار ساختیم به‌آنها گسترش داد .

a ــ امواج تخت

برای سهولت ، موردیک بعدی رابررسی‌می‌کنیم . ازاین‌روتوابع مجذورا "انتگرال‌پذیر $\psi(x)$ راکه فقط به متغیر x بستگی دارند مطالعه خواهیم کرد . درفصل اول مزیت استفاده از تبدیل فوریه $\bar{\psi}(p)$ ی $\psi(x)$ را دیدیم :

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}p \;\; \bar{\psi}(p)\, \mathrm{e}^{ipx/\hbar} \qquad (\mathrm{A}-۳۴-\mathrm{a})$$

$$\bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \;\; \psi(x)\, \mathrm{e}^{-ipx/\hbar} \qquad (\mathrm{A}-۳۴-\mathrm{b})$$

تابع $v_p(x)$ را که به‌صورت

$$\boxed{v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \mathrm{e}^{ipx/\hbar}} \qquad (\mathrm{A}-۳۵)$$

تعریف شده است در نظر بگیرید . $v_p(x)$ یک موج تخت با بردار موجی $p/\hbar$ است . انتگرال $|v_p(x)|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}$ روی تمام محور x ها واگرا می‌شود . لذا $v_p(x) \notin \mathscr{F}_x$. مجموعه تمام امواج تخت ، یعنی ، کلیه توابع $v_p(x)$ مربوط به مقادیرمختلف p رابه $\{ v_p(x) \}$ نمایش می‌دهیم . عدد p را ، که به‌طور پیوسته بین $-\infty$ تا $+\infty$ تغییر می‌کند ، به‌عنوان یک شاخص پیوسته در نظر خواهیم گرفت که به‌ما اجازه خواهد داد تا توابع مختلف مجموعه $\{ v_p(x) \}$ را مشخص کنیم [یادآور می‌شویم که شاخص که برای مجموعه $\{ u_i(\mathbf{r}) \}$ در بالا به‌کار رفته بود ، گسسته بود] .

فرمول‌های (۳۴ـ A) را می‌توان بااستفاده از (۳۵ـ A) به‌صورت زیربازنویسی‌کرد :

$$\boxed{\begin{aligned} \psi(x) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}p \ \ \bar{\psi}(p) \ \ v_p(x) \\ \bar{\psi}(p) &= (v_p, \psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \ \ v_p^*(x) \ \ \psi(x) \end{aligned}}$$

(A ـ۳۶)

(A ـ۳۷)

این دو فرمول می‌تواند با (۱۹ـ A) و (۲۱ـ A) مقایسه شوند . رابطه (۳۶ـ A) این ایده را بیان می‌کند که هر تابع $\psi(x) \in \mathscr{F}_x$ می‌تواند فقط و فقط به‌یک طریق برحسب $v_p(x)$ ، یعنی امواج تخت ، بسط داده شود . چون شاخص p به‌طور پیوسته تغییر می‌کند و نه به‌طورگسسته ، جمع‌بندی $\sum_i$ در (۱۹ـ A) باید بایکانتگرال‌گیری روی p جایگزین‌شود . رابطه (۳۷ـ A) مانند (۲۱ـ A) ، مؤلفه $\bar{\psi}(p)$ ی $\psi(x)$ را روی $v_p(x)$ به‌صورت حاصلضرب نرداری (v_p, ψ) به‌دست می‌دهد *. مجموعهٔ این مؤلفه‌ها ، که متناظر با مقادیر مختلف ممکن p هستند ، تابعی از p ، مثل $\bar{\psi}(p)$ تشکیل می‌دهند ، که تبدیل فوریه $\psi(x)$ است .

بنابراین ، $\bar{\psi}(p)$ مشابه با c_i است . این دوعدد مختلط که یا به p یا به i بستگی دارند ، معرف مؤلفه‌های همان تابع $\psi(x)$ در دوپایه مختلف : $\{ v_p(x) \}$ و $\{ u_i(x) \}$ هستند این نکته هم‌چنین وقتی که مجذور هنجار $\psi(x)$ را محاسبه کنیم ، به‌طورآشکار ظاهر می‌شود . بنابر رابطه پارسوال [پیوست ۱ ، فرمول (۴۵)] داریم :

$$\boxed{(\psi, \psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}p \, |\bar{\psi}(p)|^2} \qquad (\text{A} - ۳۸)$$

فرمولی که شبیه (۲۷ ـ A) است به‌شرطی که c_i با $\bar{\psi}(p)$ و $\sum_i$ با $\int \mathrm{d}p$ جایگزین شود .

حال نشان دهیم که $v_p(x)$ در یک رابطه بستاری صدق می‌کند . با استفاده‌ازفرمول زیر [رک به‌پیوست ۲ ، معادله (۳۴)] :

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}k \ e^{iku} = \delta(u) \qquad (\text{A} - ۳۹)$$

* فقط حاصلضرب نرداری دوتابع مجذورا " انتگرال‌پذیر را تعریف‌کرده‌ایم ، امااین‌تعریف می‌تواند به‌سادگی به‌مواردی نظیر این موردگسترش یابد ، بشرط اینکه انتگرال مربوطه همگرا باشد .

خواهیم داشت :

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} dp\ v_p(x)\ v_p^*(x') = \frac{1}{2\pi}\int \frac{dp}{\hbar}\, e^{i\frac{p}{\hbar}(x-x')} = \delta(x-x')} \qquad (A-40)$$

این فرمول مشابه (A ـ۳۲) است، که در آن $\sum_i$ توسط $\int dp$ جایگزین شده است.

بالاخره، برای اینکه ببینیم آیا معادلی برای رابطه راست هنجاری وجود دارد یا خیر، حاصلضرب نرداری $(v_p, v_{p'})$ را محاسبه می‌کنیم: باردیگر با استفاده از (A ـ۳۹) نتیجه می‌گیریم:

$$(v_p, v_{p'}) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ v_p^*(x)\ v_{p'}(x)$$

یعنی :

$$\boxed{(v_p, v_{p'}) = \frac{1}{2\pi}\int \frac{dx}{\hbar}\, e^{i\frac{x}{\hbar}(p'-p)} = \delta(p-p')} \qquad (A-41)$$

(A ـ۴۱) و (A ـ۱۸) را باهم مقایسه کنیم. دراینجا به‌جای دوشاخص گسسته i و j و یک دلتای کرونکر δ_{ij}، دوشاخص پیوسته p و p' و یک تابع دلتا تفاضل بین دو شاخص، $\delta(p-p')$، داریم. توجه کنید که اگر قرار دهیم $p = p'$ " حاصلضرب نرداری (v_p, v_p) واگرا می‌شود، باز هم می‌بینیم که $v_p(x) \notin \mathscr{F}_x$. ما (A ـ۴۱) رایک رابطه "راست‌هنجاری" خواهیم نامید، هرچند که این لغت را به‌طور صحیح به‌کار نبرده‌ایم. بعضی اوقات گفته می‌شود که $v_p(x)$ ها" به مفهوم دیراک، راست هنجار هستند"

تعمیم به‌سه بعد هیچ اشکالی بوجود نمی‌آورد. امواج تخت زیر رادرنظر می‌گیریم:

$$v_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} e^{i\mathbf{p}.\mathbf{r}/\hbar} \qquad (A-42)$$

توابع پایه $\{ v_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \}$ اکنون به‌سه شاخص پیوسته p_x ، p_y ، p_z که آنها رادرنماد $\mathbf{p}$ خلاصه می‌کنیم، بستگی‌دارند. دراین صورت به‌سادگی می‌توان نشان دادکه فرمولهای زیرمعتبرند:

$$\psi(\mathbf{r}) = \int d^3p\ \bar{\psi}(\mathbf{p})\ v_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \qquad (A-43)$$

$$\bar{\psi}(\mathbf{p}) = (v_{\mathbf{p}}, \psi) = \int d^3r \; v_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) \; \psi(\mathbf{r}) \tag{A-44}$$

$$(\varphi, \psi) = \int d^3p \; \bar{\varphi}^*(\mathbf{p}) \; \bar{\psi}(\mathbf{p}) \tag{A-45}$$

$$\int d^3p \; v_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \; v_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \tag{A-46}$$

$$(v_{\mathbf{p}}, v_{\mathbf{p}'}) = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \tag{A-47}$$

این فرمولها تعمیمهای (A-۳۶) ، (A-۳۷) ، (A-۳۸) ، (A-۴۰) و (A-۴۱) هستند .

بنابراین می‌توان $v_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ هارا به‌عنوان تشکیل‌دهنده‌های یک " پایه پیوسته" درنظر گرفت . کلیه فرمولهائی را که در بالا برای پایه گسسته $\{ u_i(\mathbf{r}) \}$ برقرار شده بودندمی‌توان ، با استفاده از قواعد تناظر که در جدول (۱-۲) خلاصه شده‌است ، به‌پایه پیوسته گسترش داد .

$$\boxed{\begin{array}{c} i \longleftrightarrow \mathbf{p} \\ \sum_i \longleftrightarrow \int d^3p \\ \delta_{ij} \longleftrightarrow \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \end{array}}$$

جدول (۱-۲)

b ــ "توابع دلتا"

حال ، به‌همین روش یک مجموعه توابعی از $\mathbf{r}$ ، $\{ \xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) \}$ ، را که توسط شاخص پیوسته $\mathbf{r}_0$ (نمادگذاری فشرده برای x_0 ، y_0 ، z_0) مشخص شده و به‌صورت زیر تعریف می‌شوند ، وارد می‌کنیم :

$$\boxed{\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)} \tag{A-48}$$

$\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})$ معرف مجموعه توابع دلتائی است که در نقاط مختلف $\mathbf{r}_0$ فضا متمرکزند ، واضحاست که $\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})$ مجذورا " انتگرال‌پذیر نیست : $\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) \notin \mathscr{F}$.

سپس روابط زیر را که برای هرتابع $\psi(\mathbf{r})$ متعلق به $\mathscr{F}$ معتبراست در نظر بگیرید :

$$\psi(\mathbf{r}) = \int d^3r_0 \; \psi(\mathbf{r}_0) \; \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \tag{A-49}$$

$$\psi(\mathbf{r}_0) = \int d^3r \;\delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r})\; \psi(\mathbf{r}) \qquad (A\text{–}50)$$

این روابط را می‌توان، با استفاده از (A –۴۸) به‌صورت زیر بازنویسی کرد:

$$\boxed{\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \int d^3r_0 \;\psi(\mathbf{r}_0)\; \xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) && (A\text{–}51) \\ \psi(\mathbf{r}_0) &= (\xi_{\mathbf{r}_0}, \psi) = \int d^3r \;\xi^*_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})\; \psi(\mathbf{r}) && (A\text{–}52) \end{aligned}}$$

(A –۵۱) بیانگر این واقعیت است که هر تابع $\psi(\mathbf{r}) \in \mathscr{F}$ می‌تواند به‌یک‌طریق و فقط به‌یک‌طریق برحسب $\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})$ بسط داده‌شود. (A –۵۲) نشان می‌دهد که مؤلفه $\psi(\mathbf{r})$ روی تابع $\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})$ (در اینجا با توابع پایه حقیقی سروکار داریم) دقیقاً" برابر است با مقدار $\psi(\mathbf{r})$ در نقطه $\mathbf{r}_0$، یعنی $\psi(\mathbf{r}_0)$. (A –۵۱) و (A –۵۲) مشابه با (A –۱۹) و (A –۲۱) هستند: کافی است شاخص گسسته i را با شاخص پیوسته $\mathbf{r}_0$ و $\sum_i$ را با $\int d^3r_0$ جایگزین کنیم.

بنابراین $\psi(\mathbf{r}_0)$ هم‌ارز c_i است: این دو عدد مختلط، که یکی به $\mathbf{r}_0$ و دیگری به i بستگی دارند، معرف مختصات یک تابع $\psi(\mathbf{r})$ در دو پایهٔ مختلف: $\{\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})\}$ و $\{u_i(\mathbf{r})\}$ هستند.

در اینجا فرمول (A –۲۶) به‌صورت زیر در می‌آید:

$$\boxed{(\varphi, \psi) = \int d^3r_0 \;\varphi^*(\mathbf{r}_0)\; \psi(\mathbf{r}_0)} \qquad (A\text{–}53)$$

می‌بینیم که اعمال (A –۲۶) به‌مورد پایه پیوسته $\{\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})\}$ منجر به‌تعریف (A –۴) از ضرب نرداری می‌شود.

بالاخره توجه کنید که $\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})$ در همان روابط " راست هنجاری" و بستاری‌برای $v_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$، صدق می‌کند. به‌این ترتیب داریم [فرمول (۲۸) در پیوست ۲]:

$$\boxed{\begin{aligned} \int d^3r_0 \;\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})\; \xi^*_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}') &= \int d^3r_0 \;\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)\; \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_0) \\ &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \end{aligned}} \qquad (A\text{–}54)$$

و :

$$\boxed{\begin{aligned}(\xi_{\mathbf{r}_0}, \xi_{\mathbf{r}'_0}) &= \int d^3r \;\; \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \;\; \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_0) \\ &= \delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}'_0)\end{aligned}} \qquad (\mathrm{A}-۵۵)$$

به‌این‌ترتیب ، تمام‌فرمولهائی‌راکه‌برای‌پایه‌گسسته $\{ u_i(\mathbf{r}) \}$ برقرارساختیم‌می‌توانند با به‌کاربردن قواعدتناظر ، که درجدول (۲ــ۲) خلاصه‌شده‌اند ، به‌پایه پیوسته $\{ \xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) \}$ تعمیم یابند .

$$\boxed{\begin{aligned} i &\longleftrightarrow \mathbf{r}_0 \\ \sum_i &\longleftrightarrow \int d^3r_0 \\ \delta_{ij} &\longleftrightarrow \delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}'_0) \end{aligned}}$$

جدول (۲ــ۲)

گوشزد مهم :

سودمندی پایه‌های پیوسته‌ای که دربالا معرفی‌کردیم درآنچه که به‌دنبال می‌آید روشن‌تر می‌شود . مع ذالک نباید نکته زیر از نظر ما مخفی بماند : **یک حالت فیزیکی باید همواره متناظر با یک تابع موج مجذورا" انتگرال پذیرباشد .** در هیچ موردی $v_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ یا $\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})$ نمی‌توانند معرف حالت یک ذره باشند . این توابع فقط واسطه‌های محاسباتی بسیارآسانی برای اعمالی هستند که روی توابع موج $\psi(\mathbf{r})$ که قادرند یک حالت فیزیکی را توصیف کنند ، انجام می‌گیرند .

در اپتیک کلاسیک با وضعیت مشابهی مواجه می‌شویم ، وآن اینکه موج تکرنگ‌تخت از نظر ریاضی بسیار سودمند است ، اما از نظر فیزیکی یک ایده‌آل سازی تحقق ناپذیر است ، حتی دقیق‌ترین صافیها همیشه عبور یک نوارفرکانسی $\Delta\nu$ را ، که ممکن است بسیار کوچک باشد ولی هرگز دقیقا" صفرنیست از خود عبور می‌دهند . همین مطلب برای توابع $\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})$ صحت دارد . می‌توانیم یک تابع موج مجذورا" انتگرال‌پذیر ، بسیار جایگزیده حول $\mathbf{r}_0$ در نظر بگیریم ، به‌عنوان مثال :

$$\xi^{(\varepsilon)}_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) = \delta^{(\varepsilon)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = \delta^{(\varepsilon)}(x - x_0)\delta^{(\varepsilon)}(y - y_0)\delta^{(\varepsilon)}(z - z_0)$$

که در آن $\delta^{(\varepsilon)}$ ها توابعی هستند که دارای قله‌ای به‌پهنای ε و ارتفاع $\frac{1}{\varepsilon}$ بوده و در x_0 ، y_0 یا z_0 متمرکز هستند ، به‌طوری‌که $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta^{(\varepsilon)}(x - x_0)\, dx = 1$ (برای‌مثالهائی‌از اینگونه توابع به‌بخش b ــ ۱ از پیوست ۲ مراجعه کنید) . وقتی $\varepsilon \longrightarrow 0$ ، داریم

$\xi_{\mathbf{r}_0}^{(\varepsilon)}(\mathbf{r}) \longrightarrow \xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})$ ، که دیگر مجذوراً انتگرال‌پذیر نیست . اما ، در واقع ، غیرممکن است که یک حالت فیزیکی متناظر با این حد داشته باشیم ؛ حالت فیزیکی یک ذره هر اندازه جایگزیده باشد ، ε هرگز دقیقاً صفر نیست .

c ــ تعمیم : پایه‌های " راست هنجار " پیوسته

α ــ تعریف

برای تعمیم نتایج به‌دست آمده در دو بخش قبلی ، یک مجموعه توابعی از r ، $\{ w_\alpha(\mathbf{r}) \}$ را که با یک شاخص پیوسته α مشخص شده‌اند و در دو رابطه :

$$\boxed{\begin{aligned} (w_\alpha, w_{\alpha'}) &= \int d^3r \; w_\alpha^*(\mathbf{r}) \; w_{\alpha'}(\mathbf{r}) = \delta(\alpha - \alpha') \\ \int d\alpha \; w_\alpha(\mathbf{r}) \; w_\alpha^*(\mathbf{r}') &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \end{aligned}} \qquad \begin{aligned} &(\text{A}-56) \\ &(\text{A}-57) \end{aligned}$$

که روابط راست هنجاری و بستاری نامیده می‌شوند ، صدق کنند ، یک پایه راست‌هنجار پیوسته می‌نامیم .

گوشزدها :

(i) اگر $\alpha = \alpha'$ باشد ، (w_α, w_α) واگرا می‌شود . از این رو $w_\alpha(\mathbf{r}) \notin \mathscr{F}$.

(ii) α می‌تواند معرف چندین شاخص باشد ، همچنانکه برای $\mathbf{r}_0$ و $\mathbf{p}$ در مثالهای بالا این چنین است .

(iii) می‌توان پایه‌ای را تصور کرد که هم شامل توابع $u_i(\mathbf{r})$ ، که توسط یک شاخص‌گسسته مشخص شده‌اند ، باشد و هم شامل توابع $w_\alpha(\mathbf{r})$ ، که توسط یک شاخص پیوسته مشخص شده‌اند . دراین مورد ، مجموعه $u_i(\mathbf{r})$ تشکیل یک پایه نمی‌دهد ، مجموعه $w_\alpha(\mathbf{r})$ باید به‌آن افزوده شود .

حال مثالی ازین وضعیت ارائه دهیم . مورد چاه مربعی مطالعه شده در بخش c-۲-D از فصل اول را در نظر بگیرید (مکمل H_1 را نیز به‌ببینید) . همان‌طور که بعداً " خواهیم دید ، مجموعه حالتهای مانای یک ذره در یک‌پتانسیل مستقل از زمان تشکیل یک پایه می‌دهند . برای $E < 0$ ، لایه‌های انرژی گسسته‌ای

داریم ، که به توابع موج مجذورا" انتگرال‌پذیری که با یک شاخص گسسته مشخص شده‌اند ، مربوط می‌شوند . ولی اینها تنها حالتهای مانای ممکن نیستند . معادله (D –۲۷) از فصل اول ، هم‌چنین ، برای $E > 0$ ، دارای جوابهائی هستند که کراندار بوده ولی‌در‌تمام فضاگسترده شده‌اند ، واز این‌جهت مجذورا" انتگرال‌پذیر نیستند .

در مورد یک پایه " مخلوط " ، گسسته و پیوسته ، $\{ u_i(\mathbf{r}), w_\alpha(\mathbf{r}) \}$ روابط راست هنجاری عبارتند از :

$$\begin{aligned} (u_i, u_j) &= \delta_{ij} \\ (w_\alpha, w_{\alpha'}) &= \delta(\alpha - \alpha') \\ (u_i, w_\alpha) &= 0 \end{aligned} \tag{A –۵۸}$$

و رابطه بستاری به‌صورت زیر در می‌آید :

$$\sum_i u_i(\mathbf{r})\ u_i^*(\mathbf{r}') + \int d\alpha\ w_\alpha(\mathbf{r})\ w_\alpha^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \tag{A –۵۹}$$

β . مؤلفه‌های یک تابع موج

همیشه می‌توانیم بنویسیم :

$$\psi(\mathbf{r}) = \int d^3r'\ \psi(\mathbf{r}')\ \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \tag{A –۶۰}$$

بااستفاده از رابطه‌ای که توسط(A –۵۷) برای $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ داده شده است ، و با این فرض که می‌توانیم ترتیب $\int d^3r'$ و $\int d\alpha$ را عوض کنیم ، خواهیم یافت :

$$\psi(\mathbf{r}) = \int d\alpha \left[\int d^3r'\ w_\alpha^*(\mathbf{r}')\ \psi(\mathbf{r}') \right] w_\alpha(\mathbf{r})$$

یعنی :

$$\boxed{\psi(\mathbf{r}) = \int d\alpha\ c(\alpha)\ w_\alpha(\mathbf{r})} \tag{A –۶۱}$$

$$\boxed{c(\alpha) = (w_\alpha, \psi) = \int d^3r'\ w_\alpha^*(\mathbf{r}')\ \psi(\mathbf{r}')} \tag{A –۶۲}$$

(A –۶۱) بیان‌گر این‌واقعیت است که هرتابع موج $\psi(\mathbf{r})$ دارای یک بسط یکتا برحسب $w_\alpha(\mathbf{r})$ می‌باشد . مؤلفه $c(\alpha)$ ی $\psi(\mathbf{r})$ روی $w_\alpha(\mathbf{r})$ ، بنابر (A –۶۲) ،برابراست باحاصلضرب

برداری (w_α, ψ) .

۷ . عبارت حاصلضرب برداری و هنجار برحسب مؤلفه‌ها

فرض کنید $\varphi(\mathbf{r})$ و $\psi(\mathbf{r})$ دو تابع مجذورا "انتگرال‌پذیر باشند که مؤلفه‌های آنها برحسب $w_\alpha(\mathbf{r})$ معلوم باشند :

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int d\alpha \; b(\alpha) \; w_\alpha(\mathbf{r}) \tag{A-۶۳}$$

$$\psi(\mathbf{r}) = \int d\alpha' \; c(\alpha') \; w_{\alpha'}(\mathbf{r}) \tag{A-۶۴}$$

حاصلضرب برداری آنها را محاسبه کنید :

$$\begin{aligned}(\varphi, \psi) &= \int d^3r \;\; \varphi^*(\mathbf{r}) \;\; \psi(\mathbf{r}) \\ &= \int d\alpha \int d\alpha' \; b^*(\alpha) \;\; c(\alpha') \int d^3r \;\; w^*_\alpha(\mathbf{r}) \;\; w_{\alpha'}(\mathbf{r})\end{aligned} \tag{A-۶۵}$$

آخرین انتگرال توسط (A -۵۶) داده می‌شود ، لذا :

$$(\varphi, \psi) = \int d\alpha \int d\alpha' \; b^*(\alpha) \;\; c(\alpha') \;\; \delta(\alpha - \alpha')$$

یعنی :

$$\boxed{(\varphi, \psi) = \int d\alpha \;\; b^*(\alpha) \;\; c(\alpha)} \tag{A-۶۶}$$

بخصوص:

$$\boxed{(\psi, \psi) = \int d\alpha \; |c(\alpha)|^2} \tag{A-۶۷}$$

بهاین ترتیب تمام فرمولهای بخش A-۲ می‌توانند ، با استفاده از قواعد تناظر جدول (۳-۲) ، تعمیم داده شوند .

$i \longleftrightarrow \alpha$
$\sum_i \longleftrightarrow \int d\alpha$
$\delta_{ij} \longleftrightarrow \delta(\alpha - \alpha')$

جدول (۳ـ۲)

مهمترین فرمولهای این بخش درجدول (۴ـ۲) گرد آورده شده‌اند. درواقع، لازم نیست که آنها را به‌این صورت به‌خاطر سپرد: خواهیم دید که واردشدن نمادگذاری دیراک ما را قادر خواهد ساخت تا آنها را به‌طور بسیار ساده‌ای به‌دست آوریم.

	پایه گسسته $\{ u_i(\mathbf{r}) \}$	پایه پیوسته $\{ w_\alpha(\mathbf{r}) \}$
رابطه راست‌هنجاری	$(u_i, u_j) = \delta_{ij}$	$(w_\alpha, w_{\alpha'}) = \delta(\alpha - \alpha')$
رابطه بستاری	$\sum_i u_i(\mathbf{r})\ u_i^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$	$\int d\alpha\ \ w_\alpha(\mathbf{r})\ w_\alpha^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$
بسط یک تابع موج $\psi(\mathbf{r})$	$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i\ u_i(\mathbf{r})$	$\psi(\mathbf{r}) = \int d\alpha\ \ c(\alpha)\ w_\alpha(\mathbf{r})$
عبارت مؤلفه‌های $\psi(\mathbf{r})$	$c_i = (u_i, \psi) = \int d^3r\ \ u_i^*(\mathbf{r})\ \psi(\mathbf{r})$	$c(\alpha) = (w_\alpha, \psi) = \int d^3r\ \ w_\alpha^*(\mathbf{r})\ \psi(\mathbf{r})$
حاصلضرب نرداری	$(\varphi, \psi) = \sum_i b_i^* c_i$	$(\varphi, \psi) = \int d\alpha\ \ b^*(\alpha)\ c(\alpha)$
مجذور هنجار	$(\psi, \psi) = \sum_i \|c_i\|^2$	$(\psi, \psi) = \int d\alpha\ \|c(\alpha)\|^2$

جدول (۴ـ۲)

B . فضای حالتها . نماد گذاری دیراك

۱ ــ مقدمه

در فصل اول ، اصل موضوع زیر را بیان کردیم : حالت کوانتومی یک ذره ، دریک زمان معین ، توسط تابع موج $\psi(\mathbf{r})$ داده می‌شود . تعبیر احتمالاتی این تابع موج ایجاب می‌کندکه مجذورا " انتگرال‌پذیرباشد ، واین نکته مارا به‌مطالعه فضای $\mathscr{F}$ (بخش A)رهنمون شد . سپس بخصوص، دریافتیم که یک تابع $\psi(\mathbf{r})$ می‌تواند توسط چندین مجموعه متمایزاز موءلفه‌هاکه هرکدام به‌انتخاب یک‌پایه مربوطند ، نمایش داده‌شود[جدول (۵ــ۲)] . این نتیجه‌می‌تواند به‌طریق زیر تعبیر شود: $\{ c_i \}$ ، $\bar{\psi}(\mathbf{p})$ یا $c(\alpha)$ حالت ذره و هم‌چنین تابع‌موج $\psi(\mathbf{r})$ را [اگر پایه مورد استفاده قبلا" مشخص شده باشد] مشخص‌می‌کند . بعلاوه خود $\psi(\mathbf{r})$ ، در جدول (۵ــ۲) ، در همان ردیف $\{ c_i \}$ ، $\bar{\psi}(\mathbf{p})$ و $c(\alpha)$ ظاهرمی‌شود :مقدار $\psi(\mathbf{r}_0)$ که تابع‌موج دریک نقطه $\mathbf{r}_0$ از فضا می‌گیرد ، می‌تواند به‌عنوان موءلفهٔ آن "روی"یک تابع مشخص $\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})$ از یک پایه بخصوص (پایهٔ تابع δ) در نظر گرفته شود.

Basis	موءلفه‌های $\psi(\mathbf{r})$
$u_i(\mathbf{r})$	$c_i,\ i = 1, 2, \ldots, n, \ldots$
$v_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$	$\psi(\mathbf{p})$
$\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})$	$\psi(\mathbf{r}_0)$
$w_\alpha(\mathbf{r})$	$c(\alpha)$

جدول (۵ــ۲) .

بدین‌ترتیب خودرا دروضعیتی می‌یابیم که‌مشابه است باوضعیتی‌که درفضای معمولی R^3 به‌آن برخورد می‌کنیم : مکان یک نقطه در فضا می‌تواند توسط مجموعه‌ای ازسه‌عدد ، که مختصات آن نسبت به‌دستگاه محورهائی که از پیش تعیین‌شده‌اند ، مشخص شود .اگرمحورها را عوض‌کنیم ، مجموعه مختصات دیگری به‌همان نقطه مربوط می‌شوند . اما مفهوم بردار هندسی و محاسبه برداری به‌ما امکان می‌دهد تا از مراجعه به‌یک دستگاه محورها احترازکنیم این امر هم فرمولها و هم استدلال را تا حد قابل ملاحظه‌ای تسهیل می‌کند .

در اینجا می‌خواهیم روش مشابهی را به‌کار بریم : هرحالت‌کوانتومی یک‌ذره توسط یک بردارحالت متعلق به‌یک فضای انتزاعی ، $\mathscr{E}_{\mathbf{r}}$ که فضای حالت یک ذره نامیده می‌شود ،

مشخص خواهد شد . این واقعیت که فضای $\mathscr{F}$ زیر فضائی از L^2 است بدین معنی است که $\mathscr{E}_r$ زیرفضائی از فضای هیلبرت است . اکنون نمادگذاری و قواعد محاسبه برداری در $\mathscr{E}_r$ را تعریف می‌کنیم .

در واقع ، آنچه که بردارهای حالت و فضای حالتها انجام می‌دهند بیشتر از تسهیل صورتبندی است . تعمیم صورت‌بندی را نیز امکان‌پذیر می‌سازند . مسلما " سیستمهای فیزیکی‌ای وجود دارند که تشریح کوانتومی آنها نمی‌توانند توسط یک تابع موج داده شوند : در فصلهای چهارم و نهم خواهیم دید که یکی از این موارد وقتی است که ، حتی برای یک ذره تنها ، درجات آزادی اسپین را به‌حساب آوریم . در نتیجه ، اولین اصل موضوعی که در فصل سوم بیان خواهیم کرد ، اصل موضوع زیرخواهدبود : حالت کوانتومی هرسیستم فیزیکی توسط یک بردار حالت مشخص می‌شود ، که به یک فضای $\mathscr{E}$ که همان فضای حالت سیستم است ، تعلق دارد .

از این رو ، در بقیه این فصل ، محاسبات برداری در $\mathscr{E}$ را گسترش خواهیم داد . مفاهیمی که وارد خواهیم کرد و نتایجی که به‌دست خواهیم آورد برای هرسیستم فیزیکی‌ای که در نظر بگیریم ، معتبرند . مع‌ذالک برای نشان دادن این مفاهیم و نتایج ،آنهارابه‌مورد ساده یک ذره (بدون اسپین) اعمال خواهیم کرد ، زیرا این موردی است که قبلا " بررسی کرده‌ایم .

دراین بخش ابتدا ، نمادگذاری دیراک را که درعمل بسیارمفید می‌باشدمعرفی می‌کنیم .

۲ ــ بردارهای "کت" و بردارهای "برا"

a ــ عناصر $\mathscr{E}$: کتها

α ــ نمادگذاری

هرعنصر ، یا بردار ، فضای $\mathscr{E}$ یک بردارکت ، یا ، بطور ساده‌تر ، یک کت ، نامیده می‌شود . آنرا توسط نماد $\rangle\,|$ نشان می‌دهیم و در داخل آن یک علامت مشخص‌کننده قرار می‌دهیم که مارا قادر می‌سازد تا کت مربوطه را از سایر کتها تمیز دهیم ، مثلا " : $|\psi\rangle$.

بخصوص ، اکنون که با مفهوم یک تابع موج آشنا شده‌ایم ، فضای $\mathscr{E}_r$ حالتهای یک ذره را با وابسته‌کردن یک بردار کت $|\psi\rangle$ از $\mathscr{E}_r$ به هرتابع مجذورا " انتگرال‌پذیر $\psi(\mathbf{r})$ ، تعریف خواهیم کرد :

$$\psi(\mathbf{r}) \in \mathscr{F} \iff |\psi\rangle \in \mathscr{E}_r \qquad (B-1)$$

سپس، اعمال مختلفی را که برای $\mathscr{F}$ تعریف کردیم به $\mathscr{E}_r$ منتقل خواهیم کرد. هرچند $\mathscr{F}$ و $\mathscr{E}_r$ " همریخت " هستند، برای جلوگیری از اشتباه کاری و حفظ امکان تعمیم فوق‌الذکر، در بخش ۱ـ B، با دقت بین آنها تمایز قائل خواهیم شد. این واقعیت را تاکید می‌کنیم که در $\langle\psi|$ دیگر وابستگی به $\mathbf{r}$ ظاهر نمی‌شود، بلکه فقط حرف ψ ظاهر می‌شود تا یادآوری کند که به‌چه تابعی وابسته است. $\psi(\mathbf{r})$ (بخش E) به‌عنوان مجموعه‌ای از مؤلفه‌های کت $\langle\psi|$، در یک پایه بخصوص تعبیر خواهد شد، و $\mathbf{r}$ نقش یک شاخص را بازی می‌کند [ر ک بخش b ـ ۳ـA و جدول (۵ـ ۲)]. در نتیجه، رویه‌ای را که در اینجا می‌پذیریم این است که ابتدا یک بردار را توسط مؤلفه‌هایش در یک دستگاه مختصات مرجح، که بعداً آنرا در ردیف دستگاههای مختصات دیگر قرار خواهیم داد، مشخص می‌کنیم.

فضای حالت یک ذره (بدون اسپین) را فقط در یک بعد با $\mathscr{E}_x$، یعنی فضای مجردی نظیر (۱ـ B)، اما با استفاده از تابع موجهائی که فقط به‌متغیر x بستگی دارند، مشخص خواهیم کرد.

β ـ ضرب نرداری

به هرجفت کت $\langle\varphi|$ و $\langle\psi|$، که به‌این ترتیب در نظرگرفته می‌شوند، یک عدد مختلط وابسته می‌کنیم که حاصلضرب نرداری $(\langle\varphi|, \langle\psi|)$ آنهاست، و خواص مختلف تشریح شده توسط معادلات (۵ـ A)، (۶ـ A) و (۷ـ A) را ارضا می‌کند. بعداً " پس از واردکردن مفهوم یک " برا "، این فرمولها را از نمادگذاری دیراک باز نویسی خواهیم کرد.

در $\mathscr{E}_r$، حاصلضرب نرداری دو کت با حاصلضرب نرداری‌که در بالا برای توابع موج وابسته تعریف شده است منطبق خواهد بود.

b ـ عناصر فضای $\mathscr{E}^*$، همزاد $\mathscr{E}$: براها

α ـ تعریف فضای همزاد $\mathscr{E}$

قبل از هرچیز، یادآور شویم که، منظور از یک تابعک خطی که روی کتهای $\langle\psi|$ ی $\mathscr{E}$ تعریف شده‌اند چیست. یک تابعک خطی x یک عمل خطی است که به هرکت $\langle\psi|$ یک عدد مختلط وابسته می‌کند:

$$
\begin{aligned}
&|\psi\rangle \in \mathscr{E} \xrightarrow{\chi} \text{number } \chi(|\psi\rangle) \\
&\chi(\lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle) = \lambda_1\chi(|\psi_1\rangle) + \lambda_2\chi(|\psi_2\rangle)
\end{aligned}
\qquad (\text{B}-۲)
$$

تابعک خطی و عملگر خطی نباید با هم اشتباه شوند. در هردومورد با اعمال خطی سروکارداریم، ولی اولی به هرکت یک عدد مختلط وابسته می‌کند، درحالی که دومی یک

کت دیگر به‌آن وابسته می‌کند .

می‌توان نشان داد که مجموعه تابعکهای خطی کـه روی کتهای $|\psi\rangle \in \mathscr{E}$ تعریف شده‌اند یک فضای برداری تشکیل می‌دهند ، که فضای همزاد $\mathscr{E}$ نامیده شده و توسط $\mathscr{E}^*$ نمایش داده می‌شود .

β ــ نماد برا برای بردارهای فضای $\mathscr{E}^*$

هر عنصر، یا بردار، فضای $\mathscr{E}^*$ یک بردار برا ، یا به‌طور ساده‌تر، یک برانامیده می‌شود . آنرا توسط $\langle\ |$ نمایش می‌دهیم . به‌عنوان مثال، برای $\langle\chi|$ تابعک χ را نشان می‌دهد و از این پس نمادگذاری $\langle\chi|\psi\rangle$ را برای نشان دادن عددی‌که ازعمل تابعک خطی $\langle\chi| \in \mathscr{E}^*$ روی کت $|\psi\rangle \in \mathscr{E}$ به‌دست آمده است به‌کار خواهیم برد :

$$\boxed{\chi(|\psi\rangle) = \langle\chi|\psi\rangle} \qquad (\text{B}-۳)$$

اصل این اصطلاح کلمه " براکت" *که برای نشانه $\langle|\rangle$ بکار رفته است ، گرفتـه‌شده است . از این‌رو اسم " برا " برای طرف چپ و اسم " کت" برای طرف راست ایـــن نشانـــه انتخاب شده است .

c ــ ارتباط بین کتها و براها

α ــ به‌هرکت یک برا مربوط می‌شود .

وجود یک ضرب نرداری اکنون مارا قادر خواهد ساخت تا نشان دهیم که‌می‌توانیم به‌هرکت $|\varphi\rangle \in \mathscr{E}$ ، یک عنصر از $\mathscr{E}^*$ ، یعنی ، یک برا ، کـه به‌صورت $\langle\varphi|$ نشان داده می‌شود ، وابسته کنیم .

در واقع کت $|\varphi\rangle$ به‌ما امکان می‌دهد تا یک تابعک خطی تعریف کنیـم : وآ ن تابعکی است که به هر کت $|\psi\rangle \in \mathscr{E}$ ، یک عدد مختلط وابسته کند کـه بـرابـر اسـت بـا حاصلضرب نرداری $|\psi\rangle$ در $|\varphi\rangle$ ، $(|\varphi\rangle, |\psi\rangle)$. فـرض کنید $\langle\varphi|$ ، ایـن تابعک خطی باشد ، بنابراین توسط رابطه زیر تعریف می‌شود :

---

* به‌معنی پرانتز . م

$$\boxed{\langle \varphi \mid \psi \rangle = (\mid \varphi \rangle, \mid \psi \rangle)} \qquad (B-۴)$$

β . این ارتباط ضد خطی است

در فضای $\mathscr{E}$ ، حاصلضرب برداری، نسبت به‌بردار اولی، ضد خطی است. این مطلب در نمادگذاری (۴ــ B) توسط رابطه زیر بیان می‌شود:

$$\begin{aligned}(\lambda_1 \mid \varphi_1 \rangle + \lambda_2 \mid \varphi_2 \rangle, \mid \psi \rangle) &= \lambda_1^*(\mid \varphi_1 \rangle, \mid \psi \rangle) + \lambda_2^*(\mid \varphi_2 \rangle, \mid \psi \rangle) \\ &= \lambda_1^* \langle \varphi_1 \mid \psi \rangle + \lambda_2^* \langle \varphi_2 \mid \psi \rangle \\ &= (\lambda_1^* \langle \varphi_1 \mid + \lambda_2^* \langle \varphi_2 \mid) \mid \psi \rangle\end{aligned} \qquad (B-۵)$$

ازفرمول (۵ــB) مشاهده می‌کنیم که‌برای‌وابسته به‌کت $\lambda_1 \mid \varphi_1 \rangle + \lambda_2 \mid \varphi_2 \rangle$ عبارت است از برای $\lambda_1^* \langle \varphi_1 \mid + \lambda_2^* \langle \varphi_2 \mid$:

$$\boxed{\lambda_1 \mid \varphi_1 \rangle + \lambda_2 \mid \varphi_2 \rangle \Longrightarrow \lambda_1^* \langle \varphi_1 \mid + \lambda_2^* \langle \varphi_2 \mid} \qquad (B-۶)$$

بنابراین ارتباط برا $\Leftarrow$ کت ضد خطی است.

گوشزد:

اگر λ یک عدد مختلط و $\mid \psi \rangle$ یک کت باشد، $\lambda \mid \psi \rangle$ یک کت است ($\mathscr{E}$ یک فضای برداری است). گاهی آنرا به‌صورت $\mid \lambda\psi \rangle$ می‌نویسیم:

$$\mid \lambda \psi \rangle = \lambda \mid \psi \rangle \qquad (B-۷)$$

دراین صورت باید دقت داشته باشیم که $\langle \lambda\psi \mid$ **معرف برای وابسته به‌کت** $\mid \lambda\psi \rangle$ است. چون ارتباط بین یک برا و یک کت ضد خطی است، داریم:

$$\langle \lambda \psi \mid = \lambda^* \langle \psi \mid \qquad (B-۸)$$

γ . نماد گذاری دیراک برای حاصلضرب برداری

حالا دو نمادگذاری متمایز برای نشان دادن حاصلضرب برداری $\mid \psi \rangle$ در $\mid \varphi \rangle$

در اختیار داریم : $(\langle\varphi|, |\psi\rangle)$ یا $\langle\varphi|\psi\rangle$ ، که در آن $\langle\varphi|\psi\rangle$ عبارت است از برای وابسته به کت $|\varphi\rangle$. از این به‌بعد فقط نمادگذاری (دیراک) ، یعنی ، $\langle\varphi|\psi\rangle$ را به‌کار خواهیم برد . جدول (۶ــ ۲) خواص حاصلضرب نرداری ، را که قبلاً" در بخش ۱ــ۱ ــ A داده شد ، در نمادگذاری دیراک خلاصه می‌کند .

$\langle\varphi\|\psi\rangle = \langle\psi\|\varphi\rangle^*$	(B ــ ۹)
$\langle\varphi\|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle = \lambda_1\langle\varphi\|\psi_1\rangle + \lambda_2\langle\varphi\|\psi_2\rangle$	(B ــ ۱۰)
$\langle\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2\|\psi\rangle = \lambda_1^*\langle\varphi_1\|\psi\rangle + \lambda_2^*\langle\varphi_2\|\psi\rangle$	(B ــ ۱۱)
$\langle\psi\|\psi\rangle$ حقیقی و مثبت است و فقط زمانی صفر است که $\|\psi\rangle = 0$	(B ــ ۱۲)

δ . آیا به هر برا یک کت مربوط می‌شود ؟

هر چند با هر کت یک برا متناظر است ، ولی در دو مثال انتخاب‌شده در $\mathscr{F}$ خواهیم دید که ، امکان دارد براهائی پیدا کنیم که دارای کتهای متناظر نباشند . بعداً" خواهیم دید که چرا این اشکال در مکانیک کوانتومی دست و پاگیر نیست .

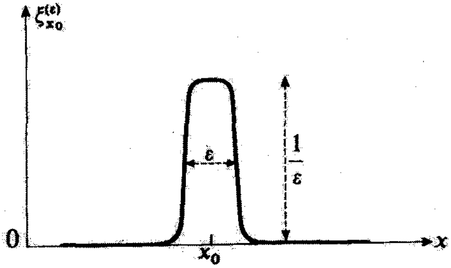
۱ــ مثالهای خلف انتخاب شده در $\mathscr{F}$.

برای سهولت در یک بعد استدلال خواهیم کرد .

فرض کنید $\xi_{x_0}^{(\varepsilon)}(x)$ یک تابع حقیقی و به‌قدر کافی منظم باشد به طوری که $\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \xi_{x_0}^{(\varepsilon)}(x) = 1$ ، دارای شکل یک قله به‌پهنای ε و دامنه $1/\varepsilon$ ، متمرکز در $x = x_0$ باشد [شکل ۱ را به‌بینید ، $\xi_{x_0}^{(\varepsilon)}(x)$ به‌عنوان مثال ، یکی از توابعی است که در بخش b ــ ۱ از پیوست ۲ در نظر گرفته شد]. اگر $\varepsilon \neq 0$ باشد ، $\xi_{x_0}^{(\varepsilon)}(x) \in \mathscr{F}_x$ (مجذور هنجار آن از مرتبه $1/\varepsilon$ است) . کت مربوطه را با $|\xi_{x_0}^{(\varepsilon)}\rangle$ نمایش دهیم :

$$\xi_{x_0}^{(\varepsilon)}(x) \Longleftrightarrow |\xi_{x_0}^{(\varepsilon)}\rangle \qquad \text{(B ــ ۱۳)}$$

اگر $\varepsilon \neq 0$ ، $|\xi_{x_0}^{(\varepsilon)}\rangle \in \mathscr{E}_x$ ، فرض کنید $\langle\xi_{x_0}^{(\varepsilon)}|$ برای وابسته به این کت باشد ، برای هر $|\psi\rangle \in \mathscr{E}_x$ داریم :



شکل ۱.
$\xi^{(\varepsilon)}_{x_0}(x)$ تابعی است که در $x = x_0$ دارای یک قله (به‌پهنای ε و دامنه $1/\varepsilon$) بوده و انتگرال آن بین $-\infty$ و $+\infty$ برابر ۱ است.

$$\langle \xi^{(\varepsilon)}_{x_0} | \psi \rangle = (\xi^{(\varepsilon)}_{x_0}, \psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \;\; \xi^{(\varepsilon)}_{x_0}(x) \;\; \psi(x) \qquad (B-۱۴)$$

حال ε را بسمت صفر میل دهید. از یک طرف:

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \xi^{(\varepsilon)}_{x_0}(x) = \xi_{x_0}(x) \notin \mathcal{F}_x \qquad (B-۱۵)$$

[مجذور هنجار $\xi^{(\varepsilon)}_{x_0}(x)$ ، که ازمرتبه $1/\varepsilon$ است ، وقتی $\varepsilon \longrightarrow 0$ ، واگرامی‌شود] ، ازاین رو :

$$\lim_{\varepsilon \to 0} | \xi^{(\varepsilon)}_{x_0} \rangle \notin \mathscr{E}_x \qquad (B-۱۶)$$

از طرف دیگر ، وقتی $\varepsilon \longrightarrow 0$ ، انتگرال (B -۱۴) به‌سمت یک حد کاملا "معین ، $\psi(x_0)$ ، میل می‌کند [زیرا ، برای مقادیر خیلی کوچک ε ، $\psi(x)$ در (B -۱۴) می‌تواندتوسط $\psi(x_0)$ جایگزین شده و از انتگرال خارج شود] . درنتیجه ، $\langle \xi^{(\varepsilon)}_{x_0} |$ به‌سمت یک برا ، که آنرا با $\langle \xi_{x_0} |$ نشان خواهیم داد میل می‌کند . $\langle \xi_{x_0} |$ تابعک خطی‌ای است که برهرکت $| \psi \rangle$ از $\mathscr{E}_x$ ، مقدار $\psi(x_0)$ را که عبارت از مقدارتابع موج وابسته درنقطه x_0 است ، وابسته‌می‌کند:

$$\begin{aligned} &\lim_{\varepsilon \to 0} \langle \xi^{(\varepsilon)}_{x_0} | = \langle \xi_{x_0} | \in \mathscr{E}^*_x \\ &\langle \xi_{x_0} | \psi \rangle = \psi(x_0) \quad \text{، } | \psi \rangle \in \mathscr{E}_x \;\; \text{اگر} \end{aligned} \qquad (B-۱۷)$$

به‌این‌ترتیب ملاحظه می‌کنیم که برای $\langle \xi_{x_0} |$ وجوددارد ، ولی هیچ‌کتی متناظرآن‌نیست .

به‌همین طریق ، موج تختی را درنظر بگیریدکه در خارج ازبازه‌ای به‌پهنای L قطع شده باشد :

$$v_{p_0}^{(L)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip_0x/\hbar} \qquad -\frac{L}{2} \leqslant x \leqslant +\frac{L}{2} \tag{B-۱۸}$$

که درآن تابع $v_{p_0}^{(L)}(x)$ درخارج این بازه به‌سرعت به‌سمت صفر میل می‌کند (درعین‌حالی که پیوسته و مشتق‌پذیر باقی می‌ماند) . کت وابسته به$v_{p_0}^{(L)}(x)$را به $| v_{p_0}^{(L)} \rangle$ نمایش خواهیم داد :

$$v_{p_0}^{(L)}(x) \in \mathscr{F}_x \iff | v_{p_0}^{(L)} \rangle \in \mathscr{E}_x \tag{B-۱۹}$$

مجذور هنجار $v_{p_0}^{(L)}$، که عملا" برابر $L/2\pi\hbar$ است ، اگر$L \longrightarrow \infty$ ، واگرامی‌شود . از این رو

$$\lim_{L \to \infty} | v_p^{(L)} \rangle \notin \mathscr{E}_x \tag{B-۲۰}$$

حال برای $| v_{p_0}^{(L)} \rangle$ وابسته به $\langle v_{p_0}^{(L)} |$ را درنظرمی‌گیریم . برای هر $| \psi \rangle \in \mathscr{E}_x$ داریم :

$$\langle v_{p_0}^{(L)} | \psi \rangle = (v_{p_0}^{(L)}, \psi) \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-L/2}^{L/2} dx\, e^{-ip_0x/\hbar} \psi(x) \tag{B-۲۱}$$

وقتی $L \longrightarrow \infty$ ، $\langle v_{p_0}^{(L)} | \psi \rangle$ دارای حدی است ، که عبارت است از مقــدار $\bar{\psi}(p_0)$ ، تبدیل فوریهٔ $\bar{\psi}(p)$ ی $\psi(x)$ به‌ازاء $p = p_0$. ازینرو ، وقتی $L \longrightarrow \infty$ ، $\langle v_{p_0}^{(L)} |$ به‌سمت یک برای کاملا" معین $\langle v_{p_0} |$ میل می‌کند :

$$\begin{aligned} &\lim_{L \to \infty} \langle v_{p_0}^{(L)} | = \langle v_{p_0} | \in \mathscr{E}_x^* \\ &\text{If } | \psi \rangle \in \mathscr{E}_x, \langle v_{p_0} | \psi \rangle = \bar{\psi}(p_0) \quad \text{اگر} \end{aligned} \tag{B-۲۲}$$

در اینجا نیز ، هیچ کتی متناظر برای $\langle v_{p_0} |$ نیست .

۲ــ حل فیزیکی مشکلات فوق

این عدم تقارن ارتباط بین کتها و براها ، همان‌طوری که مثالهای قبلــی نــشان می‌دهند ، به‌وجود "پایه‌های پیوسته" برای $\mathscr{F}_x$ مربوط است . چون توابعی که این " پایه‌ها راتشکیل میدهند به $\mathscr{F}_x$ تعلق‌ندارند ، نمی‌توانیم یک کت از $\mathscr{E}_x$ به‌آنهاوابسته‌کنیم . لیکــن حاصلضرب آنها دریک تابع دلخواه از $\mathscr{F}_x$ تعریف شده‌است ، و این امر به‌ما اجازه می‌دهد تا یک تابعک خطی در $\mathscr{E}_x$ ، یعنی ، یک برای متعلق به $\mathscr{E}_x^*$ ، به‌آنها وابسته کنیم . دلیل

استفاده از چنین " پایه‌های پیوسته‌ای " در مفید بودنشان ، در بعضی از محاسبات عملی نهفته است . همین دلیل (که درآنچه که در زیر می‌آید روشن‌تر خواهد شد) ما را در اینجا به‌این امر رهنمون می‌شود که با وارد کردن "کتهای تعمیم یافته" ، که با استفاده از توابعی که مجذورا " انتگرال‌پذیر نبوده ولی حاصلضرب نرداری آنها با هر تابعی از $\mathscr{F}_x$ وجوددارد ، تعریف شده‌اند ، تقارن بین کتها و براها را دوباره برقرار کنیم . در آنچه که‌به‌دنبال‌می‌آید با "کتهائی " نظیر $\langle \xi_{x_0}|$ یا $\langle v_{p_0}|$ ، که به $\xi_{x_0}(x)$ یا $v_{p_0}(x)$ وابسته‌اند ، کار خواهیم کرد . برای اینکه دقیق باشیم نباید فراموش کنیم که این " کتهای" تعمیم یافته نمی‌توانند معرف حالتهای فیزیکی باشند . این کتها صرفا " واسطه‌های آسانی‌هستند ، که‌درمحاسبات عملیاتی که بایستی روی کتهای واقعی فضای $\mathscr{E}_x$ ، که عملا "حالتهای‌کوانتومی تحقق‌پذیر را مشخص می‌کنند ، انجام دهیم ، به‌کار می‌روند .

این روش چند مشکل ریاضی مطرح می‌کند ، که می‌توان با پذیرفتن دیدگاه فیزیکی زیر از آنها احتراز کرد : $\langle \xi_{x_0}|$ (یا $\langle v_{p_0}|$) در واقع نمایانگر $\langle \xi^{(\varepsilon)}_{x_0}|$ (یا $\langle v^{(L)}_{p_0}|$) است هنگامی که ε در مقایسه با تمام طولهای دیگر مسأله مورد نظر بسیار کوچک (یا L بسیار بزرگ باشد . درتمام محاسبات واسطی که $\langle \xi^{(\varepsilon)}_{x_0}|$ (یا $\langle v^{(L)}_{p_0}|$)ظاهرمی‌شود ، هرگز به‌حد $\varepsilon = 0$ (یا $L \longrightarrow \infty$) نمی‌رسیم ، به‌طوری که همواره در $\mathscr{E}_x$ کار می‌کنیم .نتیجه فیزیکی به‌دست آمده درآخر محاسبه ، تا آنجا که ε نسبت به‌سایرطولها به‌قدر کافی کوچک باشد ، بستگی بسیار ناچیزی به‌مقدار ε دارد : در این صورت می‌توان درنتیجهٔ نهائی از ε صرفنظر کرد ، یعنی قرار داد $\varepsilon = 0$ (رویه‌ای که باید‌برای L به‌کار رود مشابه است) .

ممکن است ایراد گرفته شود که $\{\xi^{(\varepsilon)}_{x_0}(x)\}$ و $\{v^{(L)}_{p_0}(x)\}$ برخلاف $\{\xi_{x_0}(x)\}$ و $\{v_{p_0}(x)\}$ ، پایه‌های متعامدی نیستند ، زیرا دقیقا " در رابطه بستاری صدق نمی‌کنند در واقع ، به‌طور تقریبی درآن صدق می‌کنند . به‌عنوان مثال ، عبارت $\int dx_0\, \xi^{(\varepsilon)}_{x_0}(x)\xi^{(\varepsilon)}_{x_0}(x')$ تابعی است از $(x - x')$ که می‌تواند به‌عنوان یک تقریب عالی‌برای $\delta(x - x')$ به‌کاررود . نمایش ترسیمی آن عملا " مثلثی است به‌قاعده 2ε و ارتفاع $\frac{1}{\varepsilon}$ ، متمرکزدر $x - x' = 0$ (پیوست ۲ بخش ۱ـ c ـ iv) . اگر ε در مقایسه باسایر طولهای مسأله قابل اغماض باشد ، اختلاف بین این عبارت و $\delta(x - x')$ ، از نظر فیزیکی غیر قابل ملاحظه است .

عموما " ، فضای همزاد $\mathscr{E}^*$ و فضای حالت $\mathscr{E}$ همریخت نیستند ، البته ،بجز وقتی

که $\mathscr{E}$ ابعاد محدودی داشته باشد*: گرچه به‌هر کت $\langle \psi |$ در $\mathscr{E}$ یک برا ی $| \psi \rangle$ در $\mathscr{E}^*$ مربوط می‌شود ، عکس آن صحت ندارد . با وجود این ، توافق خواهیم کرد که علاوه بر بردارهای متعلق به $\mathscr{E}$ (که هنجارشان محدود است) ، کتهای تعمیم یافته‌ای که هنجارشان نامحدود بوده ولی حاصلضرب نرداری آنها با هر کت متعلق به $\mathscr{E}$ محدود باشد ، به‌کار بریم . به‌این ترتیب به هر برا ی $| \varphi \rangle$ از $\mathscr{E}^*$ یک کت متناظر وجود خواهد داشت . اماکتهای تعمیم یافته معرف حالتهای فیزیکی سیستم نیستند .

۳ ــ عملگرهای خطی

a ــ تعاریف

اینها همان عملگرهای بخش c ــ۱ ــA هستند .

یک عملگر خطی A به هر کت $\langle \psi | \in \mathscr{E}$ یک کت دیگر $\langle \psi' | \in \mathscr{E}$ وابسته می‌کند که ارتباط آنها خطی است :

$$| \psi' \rangle = A | \psi \rangle \tag{B ‐۲۳}$$

$$A(\lambda_1 | \psi_1 \rangle + \lambda_2 | \psi_2 \rangle) = \lambda_1 A | \psi_1 \rangle + \lambda_2 A | \psi_2 \rangle \tag{B ‐۲۴}$$

حاصلضرب دو عملگر خطی A و B ، که به‌صورت AB نوشته می‌شود ، به‌روش زیر تعریف می‌شود :

$$(AB) | \psi \rangle = A(B | \psi \rangle) \tag{B ‐۲۵}$$

ابتدا B روی $\langle \psi |$ عمل کرده کت $\langle B | \psi$ را می‌دهد ، سپس A روی کت $\langle B | \psi$ عمل می‌کند . عموما" $AB \neq BA$. جابجاگر $[A, B]$ ی عملگرهای A ، B ، بنا به‌تعریف عبارت است از :

$$[A, B] = AB - BA \tag{B ‐۲۶}$$

---

* درست است که فضای هیلبرت L^2 و فضای همزاد آن همریخت هستند ، ولی برای فضای تابع موج $\mathscr{F}$ یک زیر فضا از L^2 در نظر گرفته‌ایم ، که تشریح می‌کند چرا $\mathscr{F}^*$ از $\mathscr{F}$ " بزرگتر " است .

فرض کنید $\langle \varphi |$ و $| \psi \rangle$ دو کت باشند. حاصلضرب نرده‌ای:

$$\langle \varphi | (A | \psi \rangle) \tag{B-۲۷}$$

را عنصر ماتریسی A بین $\langle \varphi |$ و $| \psi \rangle$ می‌نامیم. در نتیجه این عنصر، یک عدد است که به‌طور خطی به $| \psi \rangle$ و به‌طور ضد خطی به $\langle \varphi |$ بستگی دارد.

b . *مثالهائی از عملگرهای خطی تصویرگرها*

α . گوشزد مهم در باره نمادگذاری دیراک.

در مطالب گذشته، کم‌کم به‌سهولت و راحتی نمادگذاری دیراک پی بردیم. به‌عنوان مثال $\langle \varphi |$ معرف یک تابعک خطی (یک‌برا)، و $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$، معرف حاصلضرب نرداری دو کت $| \psi_1 \rangle$ و $| \psi_2 \rangle$ است. دراین صورت عددی که توسط تابعک خطی $\langle \varphi |$ به‌کت دلخواه $| \psi \rangle$ وابسته می‌شود با پهلوی هم قراردادن نمادهای $\langle \varphi |$ و $| \psi \rangle$، یعنی، $\langle \varphi | \psi \rangle$ نوشته می‌شود. این عدد حاصلضرب نرداری $| \psi \rangle$ در کت $| \varphi \rangle$ی متناظر با $\langle \varphi |$ است (که به‌همین جهت است که وجود یک تناظر یک به‌یک بین کتها و براها مفید است).

حال فرض کنید که $\langle \varphi |$ و $| \psi \rangle$ را به‌ترتیب عکس بنویسیم:

$$| \psi \rangle \langle \varphi | \tag{B-۲۸}$$

خواهیم دید که اگر بر قاعده پهلوی هم‌گذاشتن نمادها استوار بمانیم، این عبارت معرف یک عملگر است. یک کت دلخواه $| \chi \rangle$ انتخاب کرده و عبارت زیر را در نظر بگیرید:

$$| \psi \rangle \langle \varphi | \chi \rangle \tag{B-۲۹}$$

می‌دانیم که $\langle \varphi | \chi \rangle$ یک عدد مختلط است، در نتیجه، (B ـ ۲۹) کتی است، که از ضرب کردن $| \psi \rangle$ در عدد $\langle \varphi | \chi \rangle$، به‌دست آمده است. اگر $| \psi \rangle \langle \varphi |$، به‌یک کت دلخواه اعمال شود، یک کت دیگر می‌دهد. بنابراین یک عملگر است.

به‌این ترتیب می‌بینیم که ترتیب نمادها از اهمیت تعیین کننده‌ای برخوردار است به‌خاطر خطی‌بودن فضای $\mathscr{E}$ و عملگرهائی که به‌کار خواهیم برد، فقط اعداد مختلط را می‌توان بدون اشکال جابجا کرد. در واقع، اگر λ یک عدد باشد، داریم:

$$\begin{cases} |\psi\rangle\lambda = \lambda|\psi\rangle \\ \langle\psi|\lambda = \lambda\langle\psi| \\ A\lambda|\psi\rangle = \lambda A|\psi\rangle \quad (\text{یک عملگر خطی است } A) \\ \langle\varphi|\lambda|\psi\rangle = \lambda\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle\lambda \end{cases} \qquad (B-۳۰)$$

اما، برای کتها، براها و عملگرها، در موقع نوشتن فرمولها، باید ترتیب همواره به‌دقت رعایت شود: این امر، بهائی است که باید درقبال‌سادگی صورتبندی، دیراک، پرداخت.

β . تصویر گر P_ψ روی یک کت $|\psi\rangle$

فرض کنید $|\psi\rangle$ کتی باشد که به‌یک بهنجار شده است:

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \qquad (B-۳۱)$$

عملگر P_ψ را که به‌صورت:

$$P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi| \qquad (B-۳۲)$$

تعریف شده است در نظر بگیرید و آنرا به‌یک کت دلخواه $|\varphi\rangle$ اعمال کنید:

$$P_\psi|\varphi\rangle = |\psi\rangle\langle\psi|\varphi\rangle \qquad (B-۳۳)$$

P_ψ ، وقتی روی یک کت دلخواه $|\varphi\rangle$ عمل‌کند، یک‌کت متناسب با $|\psi\rangle$ می‌دهد. ضریب تناسب $\langle\psi|\varphi\rangle$، حاصلضرب نرداری $|\varphi\rangle$ در $|\psi\rangle$ است.

بنابراین، مفهوم "هندسی" P_ψ روشن است: عبارت است از عملگر "تصویر قائم" روی کت $|\psi\rangle$.

این تعبیر توسط این واقعیت تأیید می‌شود که $P_\psi^2 = P_\psi$ (دوبار تصویر کردن متوالی روی یک بردار معین معادل است با یک بار تصویر کردن) . برای دیدن این مطلب می‌نویسیم:

$$P_\psi^2 = P_\psi P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| \qquad (B-۳۴)$$

در این رابطه، $\langle\psi|\psi\rangle$ عددی است برابر با ۱[فرمول (B −۳۱)] . از این رو

$$P_\psi^2 = |\psi\rangle\langle\psi| = P_\psi \qquad (B-۳۵)$$

۲ . تصویرگر روی یک زیر فضا

فرض کنید $|\varphi_1\rangle$ ، $|\varphi_2\rangle$ ، ... ، $|\varphi_q\rangle$ ، q بردار بهنجار شده وعمود بریکدیگر باشند:

$$\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij} \quad ; \quad i, j = 1, 2, \ldots, q \qquad (B-۳۶)$$

زیر فضائی از $\mathscr{E}$ را که توسط این q بردار پدید می‌آید به $\mathscr{E}_q$ نمایش می‌دهیم.

فرض کنید P_q عملگر خطی‌ای باشد که توسط رابطه زیر تعریف شده است:

$$P_q = \sum_{i=1}^{q} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| \qquad (B-۳۷)$$

P_q^2 را محاسبه کنیم.

$$P_q^2 = \sum_{i=1}^{q}\sum_{j=1}^{q} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle\langle\varphi_j| \qquad (B-۳۸)$$

با استفاده از (B ـ ۳۶) ، خواهیم داشت:

$$P_q^2 = \sum_{i=1}^{q}\sum_{j=1}^{q} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_j|\delta_{ij} = \sum_{i=1}^{q} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| = P_q \qquad (B-۳۹)$$

بنابراین، P_q یک تصویرگر است. به‌آسانی می‌توان دید که P_q ، روی زیر فضای $\mathscr{E}_q$ تصویر می‌کند، زیرا برای هر $|\psi\rangle \in \mathscr{E}$ داریم:

$$P_q|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{q} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\psi\rangle \qquad (B-۴۰)$$

وقتی P_q روی $|\psi\rangle$ عمل کند، بر همنهش‌خطی تصاویر $|\psi\rangle$ روی $|\varphi_i\rangle$ های مختلف یعنی، تصویر $|\psi\rangle$ روی زیر فضا $\mathscr{E}_q$ را به‌دست می‌دهد.

۴ ـ همیوغ کردن هرمیتی

a ـ عمل یک عملگر خطی روی یک برا

تا کنون، فقط عمل یک عملگر خطی A روی کتها را تعریف‌کرده‌ایم. اکنون‌خواهیم دید که می‌توان عمل A روی براها را نیز تعریف کرد.

فرض کنید که $|\varphi\rangle$، یک برای کاملا" معین باشد، و مجموعه تمام کتهای $\langle\psi|$ را در نظر بگیرید. به‌هریک از این کتها، می‌توان عدد مختلط $(\langle\varphi|A)|\psi\rangle$ را، که قبلا" به‌عنوان عنصر ماتریسی A بین $|\varphi\rangle$ و $\langle\psi|$ تعریف شده بود، وابسته کرد. چون A خطی است و حاصلضرب نرداری به‌طور خطی به‌کت بستگی دارد، عدد $(\langle\varphi|A)|\psi\rangle$ به‌طور خطی به $\langle\psi|$ بستگی خواهد داشت. به‌این ترتیب، برای $\langle\varphi|$ و A ی ثابت، می‌توانیم به‌هرکت $\langle\psi|$ یک عدد وابسته کنیم‌که به‌طورخطی به $\langle\psi|$ بستگی داشته باشد. بنابراین مشخص کردن $|\varphi\rangle$ و A، تابعک خطی جدیدی روی کتهای $\mathscr{E}$، یعنی، یک برای جدید متعلق به $\mathscr{E}^*$، تعریف می‌کند. این برای جدید را با $A|\varphi\rangle$ نمایش خواهیم داد از این رو رابطه‌ای که $A|\varphi\rangle$ را تعریف می‌کند، می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود:

$$\boxed{(\langle\varphi|A)|\psi\rangle = \langle\varphi|(A|\psi\rangle)} \qquad (B-۴۱)$$

عملگر A به هر برای $|\varphi\rangle$ یک برای جدید $|\varphi\rangle$ وابسته می‌کند. حال نشان می‌دهیم‌که ارتباط خطی‌است. برای این‌منظور، یک ترکیب‌خطی ازبراهای $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$ در نظر بگیرید:

$$\langle\chi| = \lambda_1\langle\varphi_1| + \lambda_2\langle\varphi_2| \qquad (B-۴۲)$$

(که معنی آن عبارت است از: $(\langle\chi|\psi\rangle = \lambda_1\langle\varphi_1|\psi\rangle + \lambda_2\langle\varphi_2|\psi\rangle)$). از (B-۴۱)، داریم:

$$\begin{aligned}(\langle\chi|A)|\psi\rangle &= \langle\chi|(A|\psi\rangle)\\ &= \lambda_1\langle\varphi_1|(A|\psi\rangle) + \lambda_2\langle\varphi_2|(A|\psi\rangle)\\ &= \lambda_1(\langle\varphi_1|A)|\psi\rangle + \lambda_2(\langle\varphi_2|A)|\psi\rangle\end{aligned} \qquad (B-۴۳)$$

چون $\langle\psi|$ دلخواه است، نتیجه می‌شود:

$$\begin{aligned}\langle\chi|A &= (\lambda_1\langle\varphi_1| + \lambda_2\langle\varphi_2|)A\\ &= \lambda_1\langle\varphi_1|A + \lambda_2\langle\varphi_2|A\end{aligned} \qquad (B-۴۴)$$

بنابراین، معادله (B-۴۱)، یک عمل خطی روی براها تعریف می‌کند. برای $A|\varphi\rangle$ برائی است که از عمل عملگر خطی A روی برای $|\varphi\rangle$ حاصل شده است.

گوشـزدها :

(i) از تعریف (B-۴۱) برای $\langle \varphi | A$ ، ملاحظه می‌کنیم که محل پرانتزها درنمادی که عنصر ماتریسی A بین $\langle \varphi |$ و $| \psi \rangle$ را تعریف می‌کند اهمیتی نـدارد . لذا ، از این به‌بعد این عنصر ماتریسی را توسط نماد $\langle \varphi | A | \psi \rangle$ نمایش خواهیم داد :

$$\langle \varphi | A | \psi \rangle = (\langle \varphi | A) | \psi \rangle = \langle \varphi | (A | \psi \rangle) \qquad (B-۴۵)$$

(ii) ترتیب نسبی $\langle \varphi |$ و A ، در نماد $\langle \varphi | A$ بسیار اهمیـت دارد (رک بخش α-b-۳ در بالا) ، باید بنویسیم $\langle \varphi | A$ و نه $A \langle \varphi |$: اگـر $\langle \varphi | A$ روی یک کت $| \psi \rangle$ عمل کند عدد $\langle \varphi | A | \psi \rangle$ را می‌دهد ، بنابراین ، $\langle \varphi | A$ ، در واقع یک برا است . از طرف دیگر ، اگر $A \langle \varphi |$ بریک کت $| \psi \rangle$ عمل کند $A \langle \varphi | \psi \rangle$ را ، یعنی یک عملگر (عملگر A ضربدر عدد $\langle \varphi | \psi \rangle$) خواهدداد . ما تا کنـون هیچ شیئ ریاضی ازاین‌نمونه‌تعریف‌نکرده‌ایم ؛ لذا $A \langle \varphi |$ دارای هیچ‌معنائی‌نیست .

b ــ عملگر الحاقی $A^\dagger$ ، وابسته به یک عملگر خطی A .

اکنـون خواهیم دید کـه ارتباط بین کتها و براها ، که در بخش c ــ۲ــB مطالعـه کـردیم ، ما را قادر می‌سازد تا به هر عملگر خطی A یک عملگر خطی دیگر $A^\dagger$ ، که عملگر الحاقی (یا همیوغ هرمیتی) A نامیده می‌شود ، وابسته کنیم .

فرض کنید ، $| \psi \rangle$ یک کت دلخواه از $\mathscr{E}$ باشد . عملگر A یک کت‌دیگر $| \psi' \rangle = A | \psi \rangle$ از $\mathscr{E}$ به‌آن وابسته می‌کند (شکل۲) .

$$\begin{tikzcd}
| \psi \rangle \arrow[r, Rightarrow, "A"] \arrow[d, leftrightsquigarrow] \arrow[dr, phantom, "\updownarrow"] & | \psi' \rangle = A | \psi \rangle \arrow[d, leftrightsquigarrow] \\
\langle \psi | \arrow[r, Rightarrow, "A^\dagger"'] & \langle \psi' | = \langle \psi | A^\dagger
\end{tikzcd}$$

شکل۲ .

تعریف عملگرالحاقی $A^\dagger$ وابسته‌به‌یک عملگر A با استفاده از تناظـر بین کتهاوبراها

با کت $| \psi \rangle$ ، یک‌برای $\langle \psi |$ متناظراست ، بهمین طریق با کت $| \psi' \rangle$

متناظر است. به‌این ترتیب این ارتباط بین کتها و براها، به‌ما اجازه می‌دهد تا عمل عملگر $A^\dagger$ روی براها را تعریف کنیم: عملگر $A^\dagger$، به‌برای $|\psi\rangle$ ی متناظر با کت $\langle\psi|$، برای $|\psi'\rangle$ متناظر با کت $\langle\psi'| = A|\psi\rangle$ را وابسته می‌کند. می‌نویسیم: $\langle\psi'| = \langle\psi|A^\dagger$

حال نشان می‌دهیم که رابطه $\langle\psi'| = \langle\psi|A^\dagger$ خطی است. می‌دانیم که، برای $\lambda_1\langle\psi_1| + \lambda_2\langle\psi_2|$ متناظر است با کت $\lambda_1^*|\psi_1\rangle + \lambda_2^*|\psi_2\rangle$ (ارتباط بین یک برا و یک کت، ضد خطی است). عملگر A، کت $\lambda_1^*|\psi_1\rangle + \lambda_2^*|\psi_2\rangle$ را به کت $\lambda_1^*A|\psi_1\rangle + \lambda_2^*A|\psi_2\rangle = \lambda_1^*|\psi_1'\rangle + \lambda_2^*|\psi_2'\rangle$ تبدیل می‌کند. بالاخره با این کت، برای زیر متناظر است:

$$\lambda_1\langle\psi_1'| + \lambda_2\langle\psi_2'| = \lambda_1\langle\psi_1|A^\dagger + \lambda_2\langle\psi_2|A^\dagger$$

از این مطلب، نتیجه می‌گیریم که:

$$(\lambda_1\langle\psi_1| + \lambda_2\langle\psi_2|)A^\dagger = \lambda_1\langle\psi_1|A^\dagger + \lambda_2\langle\psi_2|A^\dagger \qquad (\mathrm{B}-۴۶)$$

بنابراین، $A^\dagger$ یک عملگر خطی است، که توسط فرمول زیر تعریف می‌شود:

$$\boxed{|\psi'\rangle = A|\psi\rangle \Longleftrightarrow \langle\psi'| = \langle\psi|A^\dagger} \qquad (\mathrm{B}-۴۷)$$

به‌سادگی، از (B – ۴۷) رابطه مهم دیگری که توسط عملگر $A^\dagger$ ارضاء می‌شود، نتیجه میشود. با استفاده از خواص حاصلضرب نرداری، همواره می‌توان نوشت:

$$\langle\psi'|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi'\rangle^* \qquad (\mathrm{B}-۴۸)$$

که در آن $|\varphi\rangle$ یک کت دلخواه از $\mathscr{E}$ است. با استفاده از عبارتهای (B – ۴۷) برای $\langle\psi'|$ و $|\psi'\rangle$، نتیجه می‌گیریم:

$$\boxed{\langle\psi|A^\dagger|\varphi\rangle = \langle\varphi|A|\psi\rangle^*} \qquad (\mathrm{B}-۴۹)$$

رابطه‌ای که برای تمام $|\varphi\rangle$ ها و $|\psi\rangle$ ها معتبر است.

گوشزد در باره نمادگذاری‌ها

در بالا نمادگذاری‌ای را ذکر کردیم که می‌تواند به‌اشتباه بینجامد،

اینها عبارتند از $\langle \lambda\psi|$ و $|\lambda\psi\rangle$ ، که در آن λ یک‌عدداست فرمولهای (B-۷) و (B-۸) . همین مشکل، با عبارتهای $\langle A\psi|$ و $|A\psi\rangle$ ، که درآنها A یک عملگر خطی است ، پیش می‌آید ، $|A\psi\rangle$ طریقه دیگری برای نشان دادن کت $A|\psi\rangle$ است :

$$|A\psi\rangle = A|\psi\rangle \tag{B-۵۰}$$

$\langle A\psi|$ عبارت است از برای وابسته‌به‌کت $|A\psi\rangle$. بااستفاده از (B-۵۰) و (B-۴۷) ، ملاحظه می‌کنیم که :

$$\langle A\psi| = \langle\psi|A^\dagger \tag{B-۵۱}$$

وقتی یک عملگر خطی A را ازداخل نماد برا خارج می‌کنیم . باید آنرا با الحاقی آن ، $A^\dagger$ ، جایگزین کنیم (و در سمت راست برا قرار دهیم) .

c ــ ارتباط بین یک عملگر و الحاقی آن

با استفاده از (B-۴۷) یا (B-۴۹) ، به‌سادگی می‌توان نشان داد که :

$$(A^\dagger)^\dagger = A \tag{B-۵۲}$$

$$(\lambda A)^\dagger = \lambda^* A^\dagger \quad (\lambda \text{ یک عدد است}) \tag{B-۵۳}$$

$$(A+B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger \tag{B-۵۴}$$

حال $(AB)^\dagger$ را محاسبه کنیم . برای این منظور، کت $|\varphi\rangle = AB|\psi\rangle$ را در نظر می‌گیریم . با قراردادن $|\chi\rangle = B|\psi\rangle$ ، آنرا به‌صورت $|\varphi\rangle = A|\chi\rangle$ می‌نویسیم . در این صورت داریم :

$$\langle\varphi| = \langle\psi|(AB)^\dagger = \langle\chi|A^\dagger = \langle\psi|B^\dagger A^\dagger$$

زیرا $\langle\chi| = \langle\psi|B^\dagger$. از اینجا نتیجه می‌شود :

$$\boxed{(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger} \tag{B-۵۵}$$

توجه کنید که وقتی الحاقی حاصلضرب عملگرها را می‌گیریم ، ترتیب آنها عوض می‌شود .

گوشـزد :

چون $A = (A^\dagger)^\dagger$ ، می‌توان ، بااستفاده از (۵۱ ــ B) ، نوشت :

$$\langle A^\dagger\varphi \,| = \langle \varphi \,| (A^\dagger)^\dagger = \langle \varphi \,| A$$

بنابراین طرف چپ (۴۱ ــ B) می‌تواند به‌صورت $\langle A^\dagger\varphi \,|\, \psi \rangle$ بازنویسی شود . به‌همین طریق ، طرف راست همین معادله می‌تواند ، با نمادگذاری (۵۰ ــ B) ، به‌صورت $\langle \varphi \,|\, A\,\psi \rangle$ نوشته شود . ازین مطلب معادله زیرنتیجه می‌شودکه بعضی اوقات برای تعریف عملگر الحاقی A ، یعنی $A^\dagger$ ، به‌کار می‌رود :

$$\langle A^\dagger\varphi \,|\, \psi \rangle = \langle \varphi \,|\, A\,\psi \rangle \qquad (\text{B} - ۵۶)$$

d ــ همیوغ هرمیتی کردن در نمادگذاری دیراک

در بخش گذشته ، بااستفاده از ارتباط بین کتها و براها ، مفهوم عملگرالحاقی‌را وارد کردیم . یک کت $\langle \psi|$ و برای $|\,\psi\,\rangle$ ی متناظر با آنرا ، "همیوغهای هرمیتی" یکدیگر گوئیم . عمل همیوغ هرمیتی کردن ، درشکل ۲ توسط پیکانهای موج‌دار نشان‌داده شده است ، ملاحظه می‌کنیم که این عمل $A^\dagger$ را به A وابسته می‌سازد . به‌این دلیل است که A نیزهمیوغ هرمیتی عملگر $A^\dagger$ نامیده می‌شود .

عمل همیوغ هرمیتی کردن ترتیب موجودهائی را که به‌آنها اعمال می‌شود ، عوض می‌کند . لذا درشکل ۲ می‌بینم که $A\,|\,\psi\,\rangle$ به $\langle \psi\,|\,A^\dagger$ تبدیل می‌شود . کت $\langle \psi|$ به $|\,\psi\,\rangle$ ، و A به $A^\dagger$ تبدیل شده‌است . علاوه براین ، ترتیب‌وارونه می‌شود . به‌همین طـریق ، در (۵۵ ــ B) ، دیدیم‌که همیوغ هرمیتی حاصلضرب‌دوعملگربرابرست باحاصلضرب همیوغهای هرمیتی آنها که به‌ترتیب عکس قرار گرفته باشند . بالاخره ، نشان می‌دهیم که :

$$(|\,u\,\rangle\langle\, v\,|)^\dagger = |\,v\,\rangle\langle\, u\,| \qquad (\text{B} - ۵۷)$$

($\langle u|$ با $|\,u\,\rangle$ ، و $|\,v\,\rangle$ با $\langle v|$ جایگزین شده و ترتیب آنها عوض شده است) . با اعمال رابطه (۴۹ ــ B) به عملگر $|\,u\rangle\langle v\,|$ ، داریم :

$$\langle\psi\,|(|\,u\rangle\langle v\,|)^\dagger\,|\,\varphi\rangle = [\langle\varphi\,|(|\,u\rangle\langle v\,|)\,|\,\psi\rangle]^* \qquad (\text{B} - ۵۸)$$

حال ، اگر از خاصیت (۹ ــ B) ی حاصلضرب نرداری استفاده کنیم ، داریم :

$$[\langle\varphi|(|u\rangle\langle v|)|\psi\rangle]^* = \langle\varphi|u\rangle^*\langle v|\psi\rangle^* = \langle\psi|v\rangle\langle u|\varphi\rangle = \langle\psi|(|v\rangle\langle u|)|\varphi\rangle \qquad (B-۵۹)$$

از مقایسه (B – ۵۸) و (B – ۵۹) ، رابطه (B – ۵۷) به‌دست می‌آید.

می‌ماند نتیجه عمل همیوغ هرمیتی کردن روی یک ثابت ، که باید پیدا کنیم . از (B – ۶) و (B – ۵۳) ملاحظه می‌کنیم که این عمل λ را به λ^* تبدیل می‌کند (همیوغ مختلط) . این امر با این واقعیت که $\langle\varphi|\psi\rangle^* = \langle\psi|\varphi\rangle$ ، مطابقت دارد .

بنابراین ، همیوغ هرمیتی یک کت ، یک برا است و بالعکس، همیوغ هرمیتی یک عملگر ، الحاقی آن ، و همیوغ هرمیتی یک عدد ، همیوغ مختلط‌آن است . در نمادگذاری دیراک ، عمل همیوغ هرمیتی کردن ، بسیارساده است ، کافی‌است قاعده زیر را به‌کاربندیم :

> قاعده
>
> برای به‌دست آوردن همیوغ هرمیتی (یاالحاقی) هرعبارت ،شامل‌ثابتها ، کتها ، براها و عملگرها ، باید :
>
> ثابتها را با همیوغ های مختلطشان
> کتها را با براهای وابسته به آنها
> براها را باکتهای وابسته به آنها
> عملگرها را با الحاقیهایشان
>
> جایگزین کنیم
>
> ترتیب فاکتورها رامعکوس کنیم (باوجود این ، محل ثابتها هیچ اهمیتی‌ندارد) .

مثالها :

$\lambda\langle u|A|v\rangle|w\rangle\langle\psi|$ ، یک‌عملگراست (λ و $\langle u|A|v\rangle$ عددهستند) .

الحاقی این عملگر بااستفاده از قاعده فوق به‌صورت: $|\psi\rangle\langle w|\langle v|A^\dagger|u\rangle\lambda^*$ به‌دست می‌آید که می‌تواند با تغییردادن محل λ^* و $\langle v|A^\dagger|u\rangle$ ، به‌صورت $\lambda^*\langle v|A^\dagger|u\rangle|\psi\rangle\langle w|$ نیز نوشته شود .

به‌همین طریق ، $\lambda|u\rangle\langle v|w\rangle$ یک‌کت است (λ و $\langle v|w\rangle$ ثابتند) . برای همیوغ عبارت است از $\langle w|v\rangle\langle u|\lambda^*$ ، کهمی‌تواندبه‌صورت $\lambda^*\langle w|v\rangle\langle u|$ نیز نوشته شود .

ه ـ عملگرهای هرمیتی

یک عملگر A را هرمیتی گوئیم اگر باالحاقی‌اش برابر باشد ، یعنی ، اگر:

$$A = A^{\dagger} \qquad (B-۶۰)$$

با ترکیب (B ـ ۶۰) و (B ـ ۴۹) ، می‌بینیم که یک عملگر هرمیتی در رابطه زیر صدق می‌کند:

$$\langle \psi | A | \varphi \rangle = \langle \varphi | A | \psi \rangle^* \qquad (B-۶۱)$$

که برای تمام $\langle \varphi|$ ها و $\langle \psi|$ ها معتبر است .

بالاخره ، برای یک عملگر هرمیتی ، (B ـ ۵۶) به‌صورت زیر در می‌آید:

$$\langle A\varphi | \psi \rangle = \langle \varphi | A\psi \rangle \qquad (B-۶۲)$$

بعدا" ، وقتی به‌مسأله ویژه مقدارها و ویژه بردارها بپردازیم ، عملگرهای هرمیتی را دقیقتر بررسی خواهیم کرد . بعلاوه ، در فصل سوم ، خواهیم دید که عملگرهای هرمیتی نقشی اساسی در مکانیک کوانتومی بازی می‌کنند .

اگر فرمول (B ـ ۵۷) به‌موردی که درآن $|u\rangle = |v\rangle = |\psi\rangle$ ، اعمال شود ، مشاهده می‌کنیم که تصویرگر $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ هرمیتی است:

$$P_\psi^{\dagger} = |\psi\rangle\langle\psi| = P_\psi \qquad (B-۶۳)$$

گوشزد:

حاصلضرب دوعملگر هرمیتی A و B فقط زمانی هرمیتی است که $[A, B] = 0$. در واقع ، اگر $A = A^{\dagger}$ و $B = B^{\dagger}$ باشد ، می‌توان بااستفاده از (B ـ ۵۵) نشان داد که $(AB)^{\dagger} = B^{\dagger}A^{\dagger} = BA$ ، که تنها وقتی با AB برابر است که $[A, B] = 0$.

C – نمایشها در فضای حالتها

۱ – مقدمه

a – تعریف یک نمایش

انتخاب یک نمایش به‌معنای انتخاب یک پایه راست هنجار، چه‌گسسته و چه‌پیوسته، درفضای حالتهای $\mathscr{E}$ است. دراین صورت، بردارها و عملگرها، دراین پایه، توسط اعداد نمایش داده می‌شوند: مؤلفه‌ها برای بردارها، عناصر ماتریسی برای عملگرها. محاسبه برداری معرفی شده در بخش B، به‌محاسبه ماتریسی روی این اعداد تبدیل می‌شود. انتخاب یک نمایش، علی‌الاصول، دلخواه است. درواقع، آشکارا به‌مسأله خاص مورد مطالعه بستگی دارد: در هرمورد، نمایشی را انتخاب می‌کنیم که به‌ساده‌ترین محاسبات منجر شود.

b – هدف بخش C

می‌خواهیم، بااستفاده از نمادگذاری دیراک، و برای هرفضای دلخواه $\mathscr{E}$، بار دیگر کلیه مفاهیم معرفی شده در بخشهای ۲ –A و ۳ –A برای پایه‌های گسسته و پیوسته $\mathscr{F}$، را مورد بررسی قرار دهیم.

دو رابطهٔ مشخصهٔ یک پایه را در نمادگذاری دیراک خواهیم نوشت: روابط راست هنجاری و بستاری. سپس نشان خواهیم داد که چگونه می‌توان بااستفاده ازین دورابطه، تمام مسائل مربوط به‌یک نمایش و تبدیل از یک نمایش به‌نمایش دیگر را حل کرد.

۲ – روابط مشخصهٔ یک پایه راست هنجار

a – رابطه راست هنجاری

یک مجموعه از کتها، گسسته $(\{|u_i\rangle\})$ یا پیوسته $(\{|w_\alpha\rangle\})$، راراست‌هنجار گویند اگر کتهای این مجموعه در رابطه راست هنجاری زیر صدق کنند:

$$\boxed{\langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij}} \qquad (C-1)$$

یا:

$$\boxed{\langle w_\alpha | w_{\alpha'} \rangle = \delta(\alpha - \alpha')} \tag{C-۲}$$

می‌توان دید که، برای یک مجموعه پیوسته، $\langle w_\alpha | w_{\alpha'} \rangle$ وجودندارد: $|w_\alpha\rangle$ دارای هنجار بینهایت است و ازاین‌رو متعلق به $\mathscr{E}$ نیست. مع‌ذالک، بردارهای $\mathscr{E}$ می‌توانند برحسب $|w_\alpha\rangle$ بسط داده شوند. در نتیجه، مفید است که $|w_\alpha\rangle$ ها را به‌عنوان‌کتهای‌تعمیم یافته قبول کنیم (رک بحث‌های بخشهای ۳ـA و c ـ۲ـ B).

b ـ رابطه بستاری

یک مجموعه گسسته $\{|u_i\rangle\}$، یا پیوسته، $\{|w_\alpha\rangle\}$، تشکیل یک پایه می‌دهند اگر هر کت $|\psi\rangle$ ی متعلق به $\mathscr{E}$ دارای یک بسط منحصر بفرد روی $|u_i\rangle$ یا $|w_\alpha\rangle$ باشد.

$$\boxed{|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle} \tag{C-۳}$$

$$\boxed{|\psi\rangle = \int d\alpha \ c(\alpha) |w_\alpha\rangle} \tag{C-۴}$$

علاوه براین، فرض می‌کنیم که پایه راست هنجار باشد. لذا هردوطرف (C ـ ۳) را در $\langle u_j|$، و هردوطرف (C ـ ۴) را در $\langle w_{\alpha'}|$ ضرب نرداری می‌کنیم. بااستفاده از (C ـ ۱) یا (C ـ ۲)، عباراتی برای مؤلفه‌های c_j یا $c(\alpha')$ به‌صورت زیر به‌دست می‌آوریم:

$$\langle u_j | \psi \rangle = c_j \tag{C-۵}$$

$$\langle w_{\alpha'} | \psi \rangle = c(\alpha') \tag{C-۶}$$

سپس در (C ـ ۳)، c_i را با $\langle u_i|\psi\rangle$، و در (C ـ ۴)، $c(\alpha)$ را با $\langle w_\alpha|\psi\rangle$ جایگزین می‌کنیم:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_i c_i |u_i\rangle = \sum_i \langle u_i|\psi\rangle |u_i\rangle \\ &= \sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle = \Big(\sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\Big)|\psi\rangle \end{aligned} \tag{C-۷}$$

$$
\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \int d\alpha\ c(\alpha)|w_\alpha\rangle = \int d\alpha \langle w_\alpha|\psi\rangle|w_\alpha\rangle \\
&= \int d\alpha |w_\alpha\rangle\langle w_\alpha|\psi\rangle = \left(\int d\alpha|w_\alpha\rangle\langle w_\alpha|\right)|\psi\rangle
\end{aligned} \qquad (C-8)
$$

[چون ، در (C ـ ۷) ، می‌توانیم عدد $\langle u_i|\psi\rangle$ را بعداز کت $|u_i\rangle$ قراردهیم ، به‌همین طریق می‌توانیم ، در (C ـ ۸) ، عدد $\langle w_\alpha|\psi\rangle$ را بعداز کت $|w_\alpha\rangle$ قراردهیم].

بدین ترتیب، می‌بینیم که دو عملگر ظاهر می‌شوند : $\sum_i|u_i\rangle\langle u_i|$ و $\int d\alpha|w_\alpha\rangle\langle w_\alpha|$ این عملگرها اگر روی هر کت $|\psi\rangle$ ی متعلق به $\mathscr{E}$ عمل کنند ، همان کت $|\psi\rangle$ را می‌دهند . چون $|\psi\rangle$ دلخواه است ، نتیجه می‌شود :

$$\boxed{P_{\{u_i\}} = \sum_i|u_i\rangle\langle u_i| = \mathbb{1}} \qquad (C-9)$$

$$\boxed{P_{\{w_\alpha\}} = \int d\alpha|w_\alpha\rangle\langle w_\alpha| = \mathbb{1}} \qquad (C-10)$$

که در آن ، $\mathbb{1}$ ، معرف عملگر همانندی در $\mathscr{E}$ است . رابطهٔ (C ـ ۹) ، یا (C ـ ۱۰) ، رابطهٔ بستاری نامیده می‌شود . متقابلاً ، نشان می‌دهیم که روابط (C ـ ۹) و (C ـ ۱۰) بیان می‌دارند که هرکدام از مجموعه‌های $\{|u_i\rangle\}$ و $\{|w_\alpha\rangle\}$ یک پایه تشکیل می‌دهند . برای هر $|\psi\rangle$ ی متعلق به $\mathscr{E}$ ، می‌توانیم بنویسیم :

$$
\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \mathbb{1}|\psi\rangle = P_{\{u_i\}}|\psi\rangle = \sum_i|u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle \\
&= \sum_i c_i|u_i\rangle
\end{aligned} \qquad (C-11)
$$

با :

$$c_i = \langle u_i|\psi\rangle \qquad (C-12)$$

به‌همین طریق :

$$
\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \mathbb{1}|\psi\rangle = P_{\{w_\alpha\}}|\psi\rangle = \int d\alpha|w_\alpha\rangle\langle w_\alpha|\psi\rangle \\
&= \int d\alpha\ c(\alpha)|w_\alpha\rangle
\end{aligned} \qquad (C-13)
$$

با :

$$c(\alpha) = \langle w_\alpha|\psi\rangle \qquad (C-14)$$

بنابراین، هرکت $\langle \psi |$ دارای یک بسط منحصر بفرد روی $\langle u_i |$ یا روی $\langle w_\alpha |$ است لذا هریک از این دومجموعه یک پایه تشکیل می‌دهند، یک پایه گسسته یا یک پایه پیوسته. هم‌چنین می‌بینیم که رابطه (۹ — C)، یا (۱۰ — C)، به‌ما اجازه می‌دهد که عبارات (۱۲ — C) و (۱۴ — C) برای مؤلفه‌های c_i و $c(\alpha)$ را، به‌سادگی، فوراً به‌دست آوریم.

گوشزدها:

(i) بعداً (در بخش E) خواهیم دید که، در مورد فضای $\mathscr{F}$، روابط (۳۲ — A) و (۵۷ — A) می‌توانند به‌سادگی از (۹ — C) و (۱۰ — C) استنتاج گردند.

(ii) تعبیر هندسی رابطه بستاری

از بحث بخش b —۳— B، ملاحظه می‌کنیم که $\sum_i | u_i \rangle \langle u_i |$ یک تصویرگر است: تصویرگر روی زیر فضای $\mathscr{E}'$ که توسط $\langle u_1 |$، $\langle u_2 |$، ...، $\langle u_i |$ ... پدید آمده‌است. اگر $\langle u_i |$ ها یک پایه تشکیل بدهند، هر کت از $\mathscr{E}$ می‌تواند روی $\langle u_i |$ ها بسط داده شود، دراین صورت زیر فضای $\mathscr{E}'$ با خود فضای $\mathscr{E}$ یکسان است. درنتیجه، عادی است که $\sum_i | u_i \rangle \langle u_i |$ برابر با عملگر همانندی باشد؛ تصویر کردن یک کت‌متعلق به $\mathscr{E}$ روی $\mathscr{E}$ آن کت را تغییر نمی‌دهد. همین استدلال می‌تواند به $\int d\alpha \, | w_\alpha \rangle \langle w_\alpha |$ اعمال شود.

اکنون می‌توانیم هم‌ارز رابطه بستاری را برای فضای سه‌بعدی هندسه معمولی، R^3، پیدا کنیم، اگر e_1، e_2 و e_3 سه‌بردار راست هنجار این فضاو P_1، P_2 و P_3 تصویرگرهای روی این سه‌بردار باشند، این واقعیت‌که $\{ e_1, e_2, e_3 \}$ تشکیل یک پایه در R^3 می‌دهند، توسط رابطه زیر بیان می‌شود:

$$P_1 + P_2 + P_3 = \mathbb{1} \qquad (C-۱۵)$$

از طرف دیگر $\{ e_1, e_2 \}$ یک مجموعه راست هنجار تشکیل می‌دهند ولی یک پایه R^3 نیستند. این مطلب توسط این واقعیت بیان می‌شود که تصویرگر $P_1 + P_2$ (که روی صفحه e_1 و e_2، تصویر می‌کند) برابر $\mathbb{1}$ نیست، به‌عنوان مثال $(P_1 + P_2) e_3 = 0$.

جدول (۷ـ۲) تنها فرمولهای اساسی لازم برای هر محاسبه‌ای راکه‌باید درنمایش $\{|u_i\rangle\}$ یا $\{|w_\alpha\rangle\}$ انجام شود ، خلاصه می‌کند .

نمایش $\{\|w_\alpha\rangle\}$	نمایش $\{\|u_i\rangle\}$
$\langle w_\alpha \| w_{\alpha'}\rangle = \delta(\alpha - \alpha')$ $P_{\{w_\alpha\}} = \int d\alpha\, \|w_\alpha\rangle\langle w_\alpha\| = \mathbb{1}$	$\langle u_i \| u_j\rangle = \delta_{ij}$ $P_{\{u_i\}} = \sum_i \|u_i\rangle\langle u_i\| = \mathbb{1}$

۳ ـ نمایش کتها و براها

a ـ نمایش کتها

در پایه $\{|u_i\rangle\}$ ، کت $|\psi\rangle$ توسط مؤلفه‌هایش، یعنی ، توسط مجموعه اعداد $c_i = \langle u_i|\psi\rangle$ ، نمایش داده می‌شود . این اعداد را به‌طور عمودی مرتب می‌کنند تا یک ماتریس یک ستونی (و عموما بینهایت سطر) تشکیل دهند .

$$\begin{pmatrix} \langle u_1|\psi\rangle \\ \langle u_2|\psi\rangle \\ \vdots \\ \langle u_i|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \qquad (C-16)$$

در پایهٔ پیوستهٔ $\{|w_\alpha\rangle\}$ ، کت $|\psi\rangle$ توسط بینهایت عدد پیوسته ، $c(\alpha) = \langle w_\alpha|\psi\rangle$ ، یعنی ، توسط یک تابع از α ، نمایش داده می‌شود . دراین صورت می‌توان یک محور عمودی رسم کرد ، و در طول آن مقادیر مختلف ممکن α را قرار داد . با هریک از این مقادیر ، یک عدد ، $\langle w_\alpha|\psi\rangle$ ، متناظر است .

$$\alpha \downarrow \begin{pmatrix} \vdots \\ \langle w_\alpha|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \qquad (C-17)$$

b ــ نمایش براها

فرض کنید $\langle \varphi |$ ، یک برای دلخواه‌باشد . در پایه $\{ \langle u_i | \}$ ، می‌توان نوشت :

$$\langle \varphi | = \langle \varphi | \mathbb{1} = \langle \varphi | P_{\{u_i\}} = \sum_i \langle \varphi | u_i \rangle \langle u_i | \qquad (C-18)$$

$\langle \varphi |$ دارای یک بسط منحصر بفرد روی براهای $\langle u_i |$ است ، موءلفه‌های $\langle \varphi |$ ، یعنی $\langle \varphi | u_i \rangle$ همیوغ‌های مختلط موءلفه‌های کت $| \varphi \rangle$ ی وابسته به $\langle \varphi |$ ، یعنی $b_i = \langle u_i | \varphi \rangle$ می‌باشند .

به‌همین طریق ، در پایه $\{ \langle w_\alpha | \}$ ، خواهیم داشت :

$$\langle \varphi | = \langle \varphi | \mathbb{1} = \langle \varphi | P_{\{w_\alpha\}} = \int d\alpha \, \langle \varphi | w_\alpha \rangle \langle w_\alpha | \qquad (C-19)$$

موءلفه‌های $\langle \varphi |$ ، یعنی $\langle \varphi | w_\alpha \rangle$ ، همیوغ‌های مختلط موءلفه‌های کت $| \varphi \rangle$ ی وابسته به $\langle \varphi |$ ، یعنی $b(\alpha) = \langle w_\alpha | \varphi \rangle$ ، می‌باشند .

توافق کرده‌ایم که موءلفه‌های یک کت را به‌طور عمودی مرتب کنیم . قبل از تشریح اینکه چگونه موءلفه‌های یک برا را مرتب کنیم ، نشان می‌دهیم که چگونه رابطه بستاری ما را قادر می‌سازد تا به‌سادگی حاصلضرب نرداری دوکت را برحسب موءلفه‌هایشان به‌دست‌آوریم . می‌دانیم که همیشه می‌توان در عبارت حاصلضرب نرداری ، $\mathbb{1}$ را بین $\langle \varphi |$ و $| \psi \rangle$ قرارداد :

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \psi \rangle &= \langle \varphi | \mathbb{1} | \psi \rangle = \langle \varphi | P_{\{u_i\}} | \psi \rangle \\ &= \sum_i \langle \varphi | u_i \rangle \langle u_i | \psi \rangle = \sum_i b_i^* c_i \end{aligned} \qquad (C-20)$$

به‌همین طریق :

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \psi \rangle &= \langle \varphi | \mathbb{1} | \psi \rangle = \langle \varphi | P_{\{w_\alpha\}} | \psi \rangle \\ &= \int d\alpha \, \langle \varphi | w_\alpha \rangle \langle w_\alpha | \psi \rangle = \int d\alpha \; b^*(\alpha) \; c(\alpha) \end{aligned} \qquad (C-21)$$

اکنون موءلفه‌های $\langle \varphi | u_i \rangle$ ی برای $\langle \varphi |$ را به‌طور افقی مرتب کنیم تا یک ماتریس سطری (ماتریسی که یک سطر و بی‌نهایت ستون دارد) به‌دست آید :

$$(\langle \varphi | u_1 \rangle \quad \langle \varphi | u_2 \rangle \ldots\ldots \langle \varphi | u_i \rangle \ldots\ldots) \qquad (C-22)$$

به‌کاربردن این قرارداد ، $\langle \varphi | \psi \rangle$ عبارت است از حاصلضرب ماتریسی یک ماتریس ستونی که نشان دهنده $| \psi \rangle$ است ، در یک ماتریس سطری که معرف $\langle \varphi |$ است . نتیجه عبارت از

ماتریسی است که دارای یک سطر و یک ستون ، یعنی ، یک عدد ، است .

در پایه $\{|w_\alpha\rangle\}$ ، برای $|\varphi\rangle$ دارای بینهایت موءلفه پیوسته $\langle w_\alpha|\varphi\rangle$ است . مقادیر مختلف α در طول یک محور افقی قرار داده می‌شوند . بههریک ازین مقادیر ، یک موءلفه $\langle w_\alpha|\varphi\rangle$ از $|\varphi\rangle$ وابسته است ؛

$$\underset{\alpha}{\xrightarrow{(\ldots\ldots\ldots\ldots\ \langle w_\alpha|\varphi\rangle\ \ldots\ldots\ldots\ldots)}} \qquad (C-۲۳)$$

گوشزد :

در یک نمایش معین ، ماتریسهائی که معرف یک کت $|\psi\rangle$ و برای $\langle\psi|$ ی وابسته به‌آن می‌باشند همیوغ‌های هرمیتی یکدیگرند (به‌مفهوم ماتریسی) : برای اینکه از یک ماتریس به‌ماتریس دیگر برسیم باید جای سطرها و ستونها را عوض کرده و هرعنصررا همیوغ مختلط کنیم .

۴ ــ نمایش عملگرها

a ــ نمایش A توسط یک ماتریس "مربعی"

یک‌عملگرخطی A داده‌شده‌است ، می‌توانیم ، درپایهٔ $\{|u_i\rangle\}$ یا $\{|w_\alpha\rangle\}$ مجموعه‌ای از اعداد که به‌صورت :

$$\boxed{A_{ij} = \langle u_i|A|u_j\rangle} \qquad (C-۲۴)$$

یا

$$\boxed{A(\alpha,\alpha') = \langle w_\alpha|A|w_{\alpha'}\rangle} \qquad (C-۲۵)$$

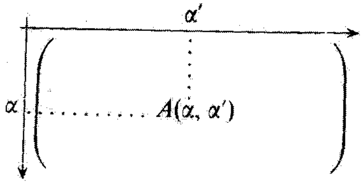
تعریف شده‌اند به‌آن وابسته کنیم .

این اعداد به‌دوشاخص بستگی دارند و ازاین‌رو می‌توانند به‌صورت یک ماتریس "مربعی" که بینهایت سطر و ستون شمارش پذیر ناپیوسته دارد مرتب شوند . قراردادمتداول این است که شاخص اول ، سطرها و شاخص دوم ستونها را تعیین کند . بنابراین ، درپایه $\{|u_i\rangle\}$ ، عملگر A توسط ماتریس زیر نمایش داده می‌شود :

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \cdots & A_{1j} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} \cdots & A_{2j} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \\ A_{i1} & A_{i2} \cdots & A_{ij} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \end{pmatrix} \qquad (C-۲۶)$$

می‌بینیم که ستون j ام از موءلفه‌های تبدیل $A|u_j\rangle$ ی کت پایه $|u_j\rangle$ درپایه $\{\,|u_i\rangle\,\}$ تشکیل شده است .

برای یک پایه پیوسته ، دومحور عمود برهم رسم می‌کنیم . با نقطه‌ای‌که دارای طول α' و عـــرض α است ، عدد $A(\alpha, \alpha')$ متناظر است :



(C ‑۲۷)

حال برای محاسبه ماتریسی که معرف عملگر AB ، در پایه $\{\,|u_i\rangle\,\}$ است از رابطــه بستاری استفاده می‌کنیم :

$$\begin{aligned} \langle u_i \,|\, AB \,|\, u_j \rangle &= \langle u_i \,|\, A \mathbb{1} B \,|\, u_j \rangle \\ &= \langle u_i \,|\, A P_{\{u_k\}} B \,|\, u_j \rangle \\ &= \sum_k \langle u_i \,|\, A \,|\, u_k \rangle \langle u_k \,|\, B \,|\, u_j \rangle \end{aligned} \qquad (C-۲۸)$$

قراردادی که برای ترتیب عناصر A_{ij} [یا $A(\alpha, \alpha')$] انتخاب شده است با قرارداد مربوط به‌حاصلضرب دوماتریس، سازگار است : رابطه (C ‑۲۸) بیانگر این واقعیت است‌که‌ماتریس معرف AB عبارت است از حاصلضرب ماتریسهای وابسته به A و B .

b ــ نمایش ماتریسی کت $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$

مسأ له به‌صورت زیر است : اگر موءلفه‌های $|\psi\rangle$ و عناصر ماتریسی A دریک نمایـش معین رابدانیم ، چگونه می‌توانیم موءلفه‌های $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$ رادرهمان‌نمایش‌محاسبه‌کنیم ؟

در پایه $\{\,|u_i\rangle\,\}$ ، مختصات c_i ی $|\psi'\rangle$ توسط رابطه زیر داده می‌شوند :

$$c'_i = \langle u_i | \psi' \rangle = \langle u_i | A | \psi \rangle \qquad (C-29)$$

اگر رابطه بستاری را بین A و $\langle \psi|$ قرار دهیم ، خواهیم داشت :

$$\begin{aligned} c'_i &= \langle u_i | A \mathbb{1} | \psi \rangle = \langle u_i | A P_{\{u_j\}} | \psi \rangle \\ &= \sum_j \langle u_i | A | u_j \rangle \langle u_j | \psi \rangle \qquad (C-30) \\ &= \sum_j A_{ij}\, c_j \end{aligned}$$

به همین طریق ، برای پایه $\{ \langle w_\alpha | \}$ ، به‌دست می‌آوریم :

$$\begin{aligned} c'(\alpha) &= \langle w_\alpha | \psi' \rangle = \langle w_\alpha | A | \psi \rangle \\ &= \int d\alpha' \langle w_\alpha | A | w_{\alpha'} \rangle \langle w_{\alpha'} | \psi \rangle \qquad (C-31) \\ &= \int d\alpha' A(\alpha, \alpha')\, c(\alpha') \end{aligned}$$

بنابراین ، رابطه ماتریسی‌برای $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$ ، بسیارساده‌است . به‌عنوان مثال ، از ($C-30$) مشاهده می‌کنیم که ، ماتریس ستونی معرف $\langle \psi'|$ برابراست‌باحاصلضرب ماتریس ستونی معرف $\langle \psi|$ در ماتریس مربعی معرف A :

$$\begin{pmatrix} c'_1 \\ c'_2 \\ \vdots \\ c'_i \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1j} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2j} & \dots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ A_{i1} & A_{i2} & \dots & A_{ij} & \dots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ c_j \\ \vdots \end{pmatrix} \qquad (C-32)$$

c ــ عبارت عدد $\langle \varphi | A | \psi \rangle$

با قراردادن رابطه بستاری بین $|\varphi\rangle$ و A و مجددا" بین A و $\langle \psi|$ خواهیم یافت :

ــ برای پایه $\{ \langle u_i | \}$:

$$\begin{aligned}\langle\varphi|A|\psi\rangle &= \langle\varphi|P_{\{u_i\}}AP_{\{u_j\}}|\psi\rangle\\ &= \sum_{i,j}\langle\varphi|u_i\rangle\langle u_i|A|u_j\rangle\langle u_j|\psi\rangle\\ &= \sum_{i,j} b_i^*\ A_{ij}\ c_j\end{aligned} \tag{C ـ۳۳}$$

ــ برای پایه $\{|w_\alpha\rangle\}$:

$$\begin{aligned}\langle\varphi|A|\psi\rangle &= \langle\varphi|P_{\{w_\alpha\}}AP_{\{w_{\alpha'}\}}|\psi\rangle\\ &= \iint d\alpha\, d\alpha'\,\langle\varphi|w_\alpha\rangle\langle w_\alpha|A|w_{\alpha'}\rangle\langle w_{\alpha'}|\psi\rangle\\ &= \iint d\alpha\, d\alpha'\ b^*(\alpha)\ A(\alpha,\alpha')\ c(\alpha')\end{aligned} \tag{C ـ۳۴}$$

تعبیر این فرمولها در صورتبندی ماتریسی به‌صورت زیر است :

$\langle\varphi|A|\psi\rangle$ یک عدد است ، یعنی ، یک ماتریس با یک سطرویک‌ستون ، که ازضرب‌کردن ماتریس ستونی معرف $|\psi\rangle$ ابتدا در ماتریس مربعی معرف A و سپس در ماتریس سطری معرف $\langle\varphi|$ ، به‌دست آمده است . به‌عنوان مثال ، در پایه $\{|u_i\rangle\}$:

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle = (b_1^*\ b_2^* \dots b_i^* \dots)\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1j} & \dots\\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2j} & \dots\\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ \vdots & & & & \\ A_{i1} & A_{i2} & \dots & A_{ij} & \dots\\ \vdots & \vdots & & & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1\\ c_2\\ \vdots\\ c_j\\ \vdots\end{pmatrix} \tag{C ـ۳۵}$$

گوشزدها :

(i) به‌همین طریق می‌توان نشان‌داد که برای $\langle\varphi|A$ توسط یک ماتریس سطری ، حاصلضرب ماتریس مربعی معرف A درماتریس سطری معرف $\langle\varphi|$ [دو ماتریس اول در طرف راست (C ـ۳۵)] ، نشان داده می‌شود . باردیگر ، اهمیت ترتیب نمادها را می‌بینیم : عبارت $A\langle\varphi|$ به‌یک عمل ماریسی منجر خواهدشدکه تعریف شده نیست (ضرب یک ماتریس سطری در یک ماتریس مربعی) .

(ii) از دیدگاه ماتریسی ، معادله (B ـ۴۱) که $\langle\varphi|A$ را تعریف می‌کند ، صرفا " بیانگر

انجمنی بودن حاصلضرب سه ماتریسی است که در (C−۳۵) ظاهر شده‌اند.

(iii) با استفاده از قراردادهای اخیر، $|\psi\rangle\langle\psi|$ را توسط یک ماتریس مربعی بیان می‌کنیم:

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_i \\ \vdots \end{pmatrix} (c_1^* \ c_2^* \ldots \ c_j^* \ldots) = \begin{pmatrix} c_1 c_1^* & c_1 c_2^* & \ldots & c_1 c_j^* & \ldots \\ c_2 c_1^* & c_2 c_2^* & \ldots & c_2 c_j^* & \ldots \\ \vdots & & & & \\ c_i c_1^* & c_i c_2^* & \ldots & c_i c_j^* & \ldots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \end{pmatrix} \qquad (C-۳۶)$$

این، در واقع یک عملگر است، حال آنکه $\langle\psi|\psi\rangle$، حاصلضرب یک ماتریس ستونی در یک ماتریس سطری، یک عدد است.

d ــ نمایش ماتریسی $A^\dagger$، الحاقی A.

با استفاده از (B−۴۹)، به‌سادگی نتیجه می‌گیریم:

$$(A^\dagger)_{ij} = \langle u_i | A^\dagger | u_j \rangle = \langle u_j | A | u_i \rangle^* = A_{ji}^* \qquad (C-۳۷)$$

یا:

$$A^\dagger(\alpha, \alpha') = \langle w_\alpha | A^\dagger | w_{\alpha'} \rangle = \langle w_{\alpha'} | A | w_\alpha \rangle^* = A^*(\alpha', \alpha) \qquad (C-۳۸)$$

لذا، ماتریسهای معرف A و $A^\dagger$ در یک نمایش معین، به‌مفهوم ماتریسی، همیوغ‌های هرمیتی یکدیگر هستند: برای رسیدن از یکی به‌دیگری، جای سطرها و ستونها را عوض کرده سپس همیوغ مختلط آنرا می‌گیریم.

اگر A هرمیتی باشد، $A^\dagger = A$، می‌توان در (C−۳۷) $(A^\dagger)_{ij}$ را توسط A_{ij} و در (C−۳۸) $A^\dagger(\alpha, \alpha')$ را توسط $A(\alpha, \alpha')$ جایگزین کرد:

$$A_{ij} = A_{ji}^* \qquad (C-۳۹)$$

$$A(\alpha, \alpha') = A^*(\alpha', \alpha) \qquad (C-۴۰)$$

بنابراین، یک عملگر هرمیتی توسط یک ماتریس هرمیتی، یعنی، ماتریسی که درآن هردو عنصری که نسبت به قطر اصلی متقارن باشند، همیوغ مختلط یکدیگرند، **نشان‌داده‌می‌شود.** **بخصوص، برای $i = j$ یا $\alpha = \alpha'$، روابط (C−۳۹) و (C−۴۰) به‌صورت زیر در می‌آیند:**

$$A_{ii} = A_{ii}^* \qquad (C-۴۱)$$

$$A(\alpha, \alpha) = A^*(\alpha, \alpha) \qquad (C-۴۲)$$

بنابراین ، عناصر قطری یک ماتریس هرمیتی همیشه اعدادی حقیقی هستند .

۵ ــ تغییر نمایشها

a ــ موضع مسأله

در یک نمایش معین ، هرکت (یا یک برا ، یا یک عملگر) توسط یک ماتریس نشان داده می‌شود . اگر نمایشها ، یعنی ، پایه‌ها ، را عوض کنیم ، همان کت (یا برا ، یا عملگر ، توسط یک ماتریس متفاوت نمایش داده خواهد شد . این دوماتریس چگونه به‌هم مربوط می‌شوند ؟

برای سهولت ، دراینجا فرض خواهیم کرد که از یک پایه راست هنجار گسسته $\{|u_i\rangle\}$ به‌پایه راست هنجارگسسته دیگر $\{|t_k\rangle\}$ می‌رویم . دربخش E ، مثالی از تغییر از یک پایه پیوسته به‌پایه پیوسته دیگر را مطالعه خواهیم کرد .

تغییر پایه ، با مخشص کردن موءلفه‌های $\langle u_i | t_k \rangle$ ی هریک از کتهای پایه جدید برحسب هریک از کتهای پایه قدیم ، تعریف می‌شود . قرار خواهیم داد :

$$S_{ik} = \langle u_i \mid t_k \rangle \qquad (C-۴۳)$$

S ماتریس تغییر پایه (ماتریس تبدیل) است , اگر $S^\dagger$ معرف همیوغ هرمیتی‌آن‌باشد ،داریم:

$$(S^\dagger)_{ki} = (S_{ik})^* = \langle t_k \mid u_i \rangle \qquad (C-۴۴)$$

محاسباتی که در زیر می‌آیند می‌توانند بااستفاده از دو رابطه بستاری :

$$P_{\{u_i\}} = \sum_i | u_i \rangle \langle u_i | = \mathbb{1} \qquad (C-۴۵)$$

$$P_{\{t_k\}} = \sum_k | t_k \rangle \langle t_k | = \mathbb{1} \qquad (C-۴۶)$$

و دو رابطه راست هنجاری :

$$\langle u_i \mid u_j \rangle = \delta_{ij} \qquad (C-۴۷)$$

$$\langle t_k \mid t_l \rangle = \delta_{kl} \qquad (C-۴۸)$$

به‌سادگی و بدون استمداد از حافظه صورت گیرند .

گوشــزد :

ماتریس تبدیل، S ، یکانی است (مکمل C_{II})، یعنی در رابطه زیر صدق می‌کند :

$$S^{\dagger}S = SS^{\dagger} = I \qquad (C-49)$$

که در آن I ماتریس یکه است . در واقع ، ملاحظه می‌کنیم که :

$$\begin{aligned}(S^{\dagger}S)_{kl} &= \sum_i S^{\dagger}_{ki}S_{il} = \sum_i \langle t_k | u_i \rangle \langle u_i | t_l \rangle \\ &= \langle t_k | t_l \rangle = \delta_{kl}\end{aligned} \qquad (C-50)$$

به‌همین طریق :

$$\begin{aligned}(SS^{\dagger})_{ij} &= \sum_k S_{ik}S^{\dagger}_{kj} = \sum_k \langle u_i | t_k \rangle \langle t_k | u_j \rangle \\ &= \langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij}\end{aligned} \qquad (C-51)$$

b ــ تبدیل موءلفه‌های یک کت

برای اینکه موءلفه‌های $\langle t_k | \psi \rangle$ ی یک کت $| \psi \rangle$ در پایه جدید را از موءلفه‌های $\langle u_i | \psi \rangle$ ی‌آن در پایه قدیم به‌دست آوریم کافی است (C ــ۴۵) را بین $\langle t_k |$ و $| \psi \rangle$ قرار دهیم :

$$\begin{aligned}\langle t_k | \psi \rangle &= \langle t_k | \mathbb{1} | \psi \rangle = \langle t_k | P_{\{u_i\}} | \psi \rangle \\ &= \sum_i \langle t_k | u_i \rangle \langle u_i | \psi \rangle \\ &= \sum_i S^{\dagger}_{ki} \langle u_i | \psi \rangle\end{aligned} \qquad (C-52)$$

روابط معکوس می‌توانند به‌همین طریق ، بااستفاده از (C ــ۴۶) به‌دست آیند :

$$\begin{aligned}\langle u_i | \psi \rangle &= \langle u_i | \mathbb{1} | \psi \rangle = \langle u_i | P_{\{t_k\}} | \psi \rangle \\ &= \sum_k \langle u_i | t_k \rangle \langle t_k | \psi \rangle \\ &= \sum_k S_{ik} \langle t_k | \psi \rangle\end{aligned} \qquad (C-53)$$

c ــ تبدیل موءلفه‌های یک برا

اساس محاسبه دقیقا" همان است . به‌عنوان مثال :

$$\begin{aligned}\langle \psi | t_k \rangle &= \langle \psi | 1 | t_k \rangle = \langle \psi | P_{\{u_i\}} | t_k \rangle \\ &= \sum_i \langle \psi | u_i \rangle \langle u_i | t_k \rangle \\ &= \sum_i \langle \psi | u_i \rangle S_{ik}\end{aligned} \tag{C –۵۴}$$

d ــ تبدیل عناصر ماتریس یک عملگر

اگر، در $\langle t_k | A | t_l \rangle$ ، (C –۴۵) را هم بین $\langle t_k |$ و A ، هم بین A و $| t_l \rangle$ قرار دهیم ، نتیجه می‌گیریم :

$$\begin{aligned}\langle t_k | A | t_l \rangle &= \langle t_k | P_{\{u_i\}} A \; P_{\{u_j\}} | t_l \rangle \\ &= \sum_{i,j} \langle t_k | u_i \rangle \langle u_i | A | u_j \rangle \langle u_j | t_l \rangle\end{aligned} \tag{C –۵۵}$$

یعنی :

$$A_{kl} = \sum_{i,j} S^{\dagger}_{ki} \; A_{ij} \; S_{jl} \tag{C –۵۶}$$

به‌همین طریق :

$$\begin{aligned}A_{ij} = \langle u_i | A | u_j \rangle &= \langle u_i | P_{\{t_k\}} A \; P_{\{t_l\}} | u_j \rangle \\ &= \sum_{k,l} \langle u_i | t_k \rangle \langle t_k | A | t_l \rangle \langle t_l | u_j \rangle \\ &= \sum_{k,l} S_{ik} \; A_{kl} \; S^{\dagger}_{lj}\end{aligned} \tag{C –۵۷}$$

D ــ معادلات ویژه مقداری مشاهده‌پذیرها

۱ ــ ویژه مقدارها و ویژه بردارهای یک عملگر

a ــ تعاریف

$| \psi \rangle$ یک ویژه‌بردار (یا ویژه کت) عملگر خطی A نامیده‌می‌شوداگرداشته‌باشیم :

$$\boxed{A | \psi \rangle = \lambda | \psi \rangle} \tag{D –۱}$$

که درآن λ یک عدد مختلط‌است . اکنون به‌مطالعه تعـدادی از خـواص معادله (D – ۱) معادله ویژه مقداری عملگر خطی A ، می‌پردازیم . عموماً ، این معادله وقتی دارای جواب

است که λ فقط مقادیر معینی را بگیرد این مقادیر λ را ویژه مقدارهای A می‌نامیم . مجموعه این ویژه مقدارها ، طیف A نامیده می‌شود .

توجه کنید که ، اگر $|\psi\rangle$ یک ویژه بردار A با ویژه مقدار λ باشد ، $\alpha|\psi\rangle$ (که در آن α یک عدد مختلط دلخواه است) نیز یک ویژه بردار A با همان ویژه مقدار است :

$$A(\alpha\,|\,\psi\,\rangle) = \alpha A\,|\,\psi\,\rangle = \alpha\lambda\,|\,\psi\,\rangle = \lambda(\alpha\,|\,\psi\,\rangle) \qquad \text{(D–۲)}$$

برای اینکه خود را ازین ابهام برهانیم ، می‌توانیم ویژه بردارها را نسبت به‌عدد یک بهنجار کنیم :

$$\langle\,\psi\,|\,\psi\,\rangle = 1 \qquad \text{(D–۳)}$$

اما این کار ، ابهام را کاملا" برطرف نمی‌کند ، زیرا $e^{i\theta}|\psi\rangle$ ، که درآن θ یک عدد حقیقی دلخواهی است ، دارای همان هنجار $|\psi\rangle$ است . در زیر خواهیم دید که ، در مکانیک کوانتومی ، پیش بینی‌های فیزیکی که از $|\psi\rangle$ یا $e^{i\theta}|\psi\rangle$ به‌دست می‌آیند ، یکسانند .

ویژه مقدار λ ناتبهگن (یا ساده) نامیده می‌شود اگر ویژه بردار مربوطهٔ آن ، با تقریب یک ضریب ثابت ، یکتا باشد ، یعنی ، اگر تمام ویژه‌کتهای وابسته‌به‌آن‌هم خط باشند . از طرف دیگر ، اگر حداقل دوکت مستقل خطی وجود داشته باشند که ویژه بردارهای A با یک ویژه مقدار باشند ، این ویژه مقدار تبهگن نامیده می‌شود . در این صورت درجه (یا مرتبه) تبهگنی آن برابر است با تعداد ویژه بردارهای مستقل خطی‌ای که به‌آن وابسته‌اند (درجه تبهگنی یک ویژه مقدار می‌تواند محدود یا نامحدود باشد) . به‌عنوان مثال ، اگر λ ، g مرتبه تبهگن باشد ، g کت مستقل $|\psi^i\rangle$ $(i = 1, 2, \ldots g)$ ی متناظر با آن به‌گونه‌ای وجود دارد که:

$$A\,|\,\psi^i\,\rangle = \lambda\,|\,\psi^i\,\rangle \qquad \text{(D–۴)}$$

اما ، دراین صورت هرکت $|\psi\rangle$ به‌شکل :

$$|\,\psi\,\rangle = \sum_{i=1}^{g} c_i\,|\,\psi^i\,\rangle \qquad \text{(D–۵)}$$

برای هرمقدار از ضرایب c_i ، یک ویژه بردار A با ویژه مقدار λ خواهد بود ، زیرا :

$$A\,|\,\psi\,\rangle = \sum_{i=1}^{g} c_i\,A\,|\,\psi^i\,\rangle = \lambda\sum_{i=1}^{g} c_i\,|\,\psi^i\,\rangle = \lambda\,|\,\psi\,\rangle \qquad \text{(D–۶)}$$

در نتیجه ، مجموعه ویژه کتهای A وابسته به λ ، یک فضای برداری g بعدی (که می‌تواند

بی‌نهایت بعدی باشد) تشکیل می‌دهد، که "ویژه زیر فضای" ویژه مقدار λ نامیده می‌شود. بخصوص، گفتن اینکه λ ناتبهگن است معادل است با اینکه گفته شود درجه تبهگنی آن $g = 1$ است.

برای روشن کردن این تعریفها، مثال یک تصویرگر، $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ (با $\langle\psi|\psi\rangle = 1$) را انتخاب می‌کنیم (بخش b ـ۳ـ B). معادله ویژه مقداری آن به‌صورت زیر نوشته می‌شود:

$$P_\psi |\varphi\rangle = \lambda |\varphi\rangle$$

یعنی:

$$|\psi\rangle\langle\psi|\varphi\rangle = \lambda|\varphi\rangle \qquad (\text{D}-۷)$$

کت طرف چپ یا همیشه با $|\psi\rangle$ همخط است یا صفر. در نتیجه ویژه‌بردارهای P_ψ عبارتند از: از یکطرف، خود $|\psi\rangle$، با ویژه مقدار $\lambda = 1$، از طرف دیگر، تمام کتهای $|\varphi\rangle$ که با $|\psi\rangle$، متعامدهستند و برای آنها ویژه مقدار وابسته عبارت است از $\lambda = 0$. از این رو، طیف P_ψ شامل فقط دو مقدار: ۱ و ۰ است. اولی ساده، و دومی بی‌نهایت تبهگن است (اگر فضای حالت مورد نظر بی‌نهایت بعدی باشد). ویژه زیرفضای وابسته به $\lambda = 0$ مکمل* $|\psi\rangle$ است (رک بخش c ـ۲ـ D).

---

* در یک فضای برداری $\mathscr{E}$، دوزیر فضای $\mathscr{E}_1$ و $\mathscr{E}_2$ را مکمل گویند اگر تمام کتهای $|\psi\rangle$ متعلق به $\mathscr{E}$ بتوانند به‌صورت $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle$ نوشته شوند، که در آن $|\psi_1\rangle$ و $|\psi_2\rangle$ به‌ترتیب متعلق به $\mathscr{E}_1$ و $\mathscr{E}_2$ هستند، و اگر $\mathscr{E}_1$ و $\mathscr{E}_2$ مجزا باشند (کت مشترک غیر صفر نداشته باشند، در نتیجه عبارت $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle$ یکتا است). درواقع، برای یک زیر فضای معین $\mathscr{E}_1$، بی‌نهایت زیر فضای $\mathscr{E}_2$ وجود دارد. $\mathscr{E}_2$ را می‌توان با اعمال این شرط که بر $\mathscr{E}_1$ متعامد باشد، تعیین کرد. این عمل در خلال این کتاب انجام خواهد شد، حتی اگر کلمه "متعامد" صریحاً قبل از مکمل ذکر نشده باشد.

مثال: در فضای سه‌بعدی معمولی، اگر $\mathscr{E}_1$ یک صفحه P باشد، $\mathscr{E}_2$ می‌تواند هرخط راست دلخواهی که در P واقع نیست، باشد. مکمل متعامد $\mathscr{E}_1$، خط راستی است که از مبداء گذشته و بر P عمود است.

گوشزدها :

(*i*) اگر دوطرف معادله (۱ـ D) را همیوغ هرمیتی کنیم ، خواهیم داشت :

$$\langle \psi | A^\dagger = \lambda^* \langle \psi | \qquad (D\text{-}۸)$$

بنابراین ، اگر $|\psi\rangle$ یک ویژه کت A با ویژه مقدار λ باشد ، می‌توان گفت که $\langle\psi|$ یک ویژه برای $A^\dagger$ با ویژه مقدار λ^* است . مع ذالک ، روی این واقعیت تأکید می‌کنیم که ، بجز در موردی که A هرمیتی باشد (بخش a ـ۲ـ D) ، هیچ‌چیزی نمی‌توان ، از پیش، در باره $\langle\psi|A$ گفت .

(*ii*) برای اینکه کاملا "دقیق باشیم ، باید معادله ویژه مقداری (۱ـ D) در فضای $\mathscr{E}$ را حل کنیم . یعنی ، باید فقط‌آن ویژه بردارهای $|\psi\rangle$ را که دارای هنجار محدودی هستند در نظر بگیریم . درواقع ، مجبور خواهیم شد عملگرهائی را به‌کار بریم ، که ویژه کتهای آنها دراین شرط صدق نکنند (بخش E) . از این‌رو ، فرض خواهیم کرد بردارهائی که جوابهای (۱ـ D) هستند می‌توانند " کتهای تعیین یافته " باشند .

b ـ یافتن ویژه مقدارها و ویژه بردارهای یک عملگر

یک عملگر خطی A داده شده است . چگونه می‌توان تمام ویژه مقدارها و ویژه بردارهای مربوط به‌آن را پیداکرد؟ با این مسئله فقط از دیدگاه صرفا عملی برخوردخواهیم کرد . موردی را در نظر خواهیم گرفت که فضای حالتها دارای ابعاد محدود N باشد ، وفرض خواهیم کرد که نتایج بتوانند به‌یک فضای حالتهای بینهایت بعدی تعمیم یابند .

حال ، یک نمایش، به‌عنوان مثال ، $\{|u_i\rangle\}$ ، انتخاب می‌کنیم و معادله برداری (۱ـ D) را روی بردارهای راست هنجار مختلف $|u_i\rangle$ ی پایه تصویر می‌کنیم :

$$\langle u_i | A | \psi \rangle = \lambda \langle u_i | \psi \rangle \qquad (D\text{-}۹)$$

باقراردادن رابطه بستاری بین A و $|\psi\rangle$ ، نتیجه خواهیم گرفت :

$$\sum_j \langle u_i | A | u_j \rangle \langle u_j | \psi \rangle = \lambda \langle u_i | \psi \rangle \qquad (D\text{-}۱۰)$$

با نمادگذاری معمول :

$$\langle u_i | \psi \rangle = c_i \qquad (D-11)$$

$$\langle u_i | A | u_j \rangle = A_{ij}$$

معادلات (D-۱۰) ، می‌توانند به‌صورت زیر نوشته شوند .

$$\sum_j A_{ij} \; c_j = \lambda c_i \qquad (D-12)$$

یا ;

$$\sum_j [A_{ij} - \lambda \delta_{ij}] c_j = 0 \qquad (D-13)$$

(D-۱۳) می‌تواند به‌عنوان یک دستگاه معادلات درنظر گرفته شود که مجهولات آن c_j ها یعنی مؤلفه‌های ویژه بردار در نمایش انتخاب شده هستند . این دستگاه خطی وهمگن‌است .

α ـ معادله سرشتی

دستگاه (D-۱۳) از N معادله $(i = 1, 2, ..., N)$ با N مجهول c_j $(j = 1, 2, ..., N)$ تشکیل شده است . چون این دستگاه خطی و همگن است ، درصورتی دارای یک جواب غیر بدیهی است که فقط و فقط دترمینان ضرائب صفرباشد (جواب‌بدیهی جوابی است که درآن تمام c_j ها صفر باشند) . شرط فوق به‌صورت زیر نوشته می‌شود :

$$\boxed{\text{Det}\, [\mathscr{A} - \lambda I] = 0} \qquad (D-14)$$

که درآن $\mathscr{A}$ ماتریس $N \times N$ از عناصر A_{ij} و I ، ماتریس یکه است .

معادله (D-۱۴) ، که معادله سرشتی (یا سکولار) نامیده می‌شود ، مارا قادر می‌سازد تا تمام ویژه مقدارهای عملگر A ، یعنی ، طیف آنرا ، تعیین کنیم . (D-۱۴)را می‌توان‌صریحا" به‌صورت زیر نوشت :

$$\begin{vmatrix} A_{11} - \lambda & A_{12} & A_{13} \dots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22} - \lambda & A_{23} \dots & A_{2N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{N1} & A_{N2} & A_{N3} \dots & A_{NN} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \qquad (D-15)$$

این یک معادله درجه N ام از λ است ، در نتیجه دارای N ریشه[۶] ، حقیقی یا موهومی ،

مختلف یا یکسان است . به‌سادگی می‌توان ، باانجام یک تغییر پایه دلخواه ، نشان داد که معادله سرشتی مستقل از نمایش انتخابی است . از این‌رو ، ویژه مقدارهای یک عملگر ، ریشه‌های معادله سرشتی آن هستند .

β ــ تعیین ویژه بردارها

حال ، یک ویژه مقدار λ_0 ، یک جواب معادله سرشتی (D–۱۴) ، را انتخاب می‌کنیم و به‌جستجوی ویژه بردارهای مربوط به‌آن می‌پردازیم . دو مورد را متمایز می‌کنیم :

(۱) اول ، فرض کنید که λ_0 یک ریشه ساده معادله سرشتی باشد . در این صورت می‌توان نشان داد که ، وقتی $\lambda = \lambda_0$ باشد ، دستگاه (D–۱۳) شامل $(N-1)$ معادله‌مستقل است ، معادله N ام از معادلات قبلی نتیجه شده است و لذا زائداست . اما N مجهول‌داریم بنابراین بینهایت جواب وجود دارد ، ولی می‌توان تمام c_j ها را به‌طور یکتائی برحسب یکی از آنها ، مثلاً c_1 ، تعیین کرد . اگر c_1 راثابت‌بگیریم ، برای‌سایر c_j ها ، که‌تعدادشان $(N-1)$ است ، یک دستگاه $(N-1)$ معادله خطی ناهمگن ("طرف راست" هر معادله ، جمله‌ای برحسب c_1 است) . با دترمینان غیر صفر به‌دست می‌آوریم [این $(N-1)$ معادله مستقل‌اند] . جواب این معادله به‌صورت زیر است :

$$c_j = \alpha_j^0 \; c_1 \tag{D–۱۶}$$

زیرا دستگاه اولیه ، (D–۱۳) ، خطی و همگن است . البته ، α_1^0 بنا به‌تعریف برابر ۱ است ، و $(N-1)$ ضریب α_j^0 برای $j \neq 1$ توسط عناصر ماتریسی A_{ij} و λ_0 تعیین می‌شوند . ویژه بردارهای وابسته به λ_0 فقط در مقدار انتخاب شده برای c_1 بایکدیگر اختلاف دارند . از این‌رو همگی آنها توسط رابطه :

$$|\psi_0(c_1)\rangle = \sum_j \alpha_j^0 \; c_1 |u_j\rangle = c_1 |\psi_0\rangle \tag{D–۱۷}$$

با :

$$|\psi_0\rangle = \sum_j \alpha_j^0 |u_j\rangle \tag{D–۱۸}$$

داده می‌شوند . بنابراین ، وقتی λ_0 یک ریشه سادهٔ معادله سرشتی باشد ، فقط یک ویژه بردار با آن متناظر است (با تقریب یک ضریب ثابت) : λ_0 یک ویژه مقدار ناتبهگن‌است .

(۲) وقتی λ_0 یک جواب چندگانهٔ معادله سرشتی با مرتبه $q > 1$ باشد ، دو امکان وجود دارد :

ــ عموما" ، وقتی $\lambda = \lambda_0$ است ، معادله (D ــ۱۳) هنوزهم از $(N - 1)$ معادله مستقل تشکیل می‌شود . دراین صورت فقط یک ویژه بردار با ویژه مقدار λ_0 متناظر است . در این مورد عملگر A نمی‌تواند قطری شود : ویژه بردارهای A آن‌قدر زیاد نیستند که بتوان باآنها به‌تنهائی یک پایهٔ فضای حالت تشکیل داد .

ــ با وجود این ، وقتی $\lambda = \lambda_0$ است ، ممکن است اتفاق بیفتد که دستگاه (D ــ۱۳) فقط $(N - p)$ معادله مستقل داشته باشد (که درآن p بزرگتر از ۱ است ولی بزرگتر از q نیست) . دراین صورت با ویژه مقدار λ_0 یک ویژه زیر فضای p بعدی متناظر است ، و λ_0 یک ویژه مقدار p مرتبه تبهگن است . حال ، به‌عنوان مثال ، فرض کنیم که ، برای $\lambda = \lambda_0$ (D ــ۱۳) از $(N - 2)$ معادله مستقل خطی تشکیل شده است . این معادلات ما را قادر می‌سازند تا ضرائب c_j را برحسب هر گروه دوتائی از آنها ، مثلا" c_1 و c_2 ، محاسبه کنیم :

$$c_j = \beta_j^0 c_1 + \gamma_j^0 c_2 \tag{D ــ۱۹}$$

(واضح است که: $\beta_1^0 = \gamma_2^0 = 1$ ؛ $\gamma_1^0 = \beta_2^0 = 0$) . دراین صورت تمام ویژه‌بردارهای وابسته به λ_0 به‌صورت :

$$| \psi_0(c_1, c_2) \rangle = c_1 | \psi_0^1 \rangle + c_2 | \psi_0^2 \rangle \tag{D ــ۲۰}$$

با :

$$| \psi_0^1 \rangle = \sum_j \beta_j^0 | u_j \rangle$$

$$| \psi_0^2 \rangle = \sum_j \gamma_j^0 | u_j \rangle \tag{D ــ۲۱}$$

هستند در واقع بردارهای $\langle \psi_0(c_1, c_2) |$ ، یک فضای برداری دوبعدی تشکیل می‌دهند ، این امر مشخصه ویژه مقداری است که دوبار تبهگن است .

وقتی یک عملگر هرمیتی باشد ، می‌توان نشان داد که درجه تبهگنی p ی یک ویژه مقدار λ همیشه برابر است با چندگانگی q ی ریشه معادله سرشتی . چون در اغلب موارد ، فقط عملگرهای هرمیتی را مطالعه خواهیم کرد ، فقط احتیاج خواهیم داشت که چندگانگی هریک از ریشه‌های (D ــ۱۴) را بدانیم تا بتوانیم بلافاصله بعد ویژه زیر فضای متناظر را به‌دست آوریم . بنابراین ، دریک فضا با ابعاد محدود N ، یک عملگر هرمیتی همواره N ویژه بردار مستقل خطی دارد (بعدا" خواهیم دید که آنها را می‌توان طوری انتخاب کرد که راست هنجار باشند) ؛ لذا ، این عملگر می‌تواند قطری شود (بخش b ــ۲ــ D) .

۳ ــ مشاهده پذیرها

a ــ خواص ویژه مقدارها و ویژه بردارهای یک عملگر هرمیتی

حال مورد بسیار مهمی راکه درآن عملگر A هرمیتی است در نظر می‌گیریم :

$$A^{\dagger} = A \tag{D-۲۲}$$

(۱) ویژه مقدارهای یک عملگر هرمیتی حقیقی‌اند

از حاصلضرب نرده‌ای معادله ویژه مقداری (D-۱) در $\langle\psi|$ ، خواهیم داشت :

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \lambda\langle\psi|\psi\rangle \tag{D-۲۳}$$

ولی ، همانطوری که از رابطه زیر می‌بینم ، اگر A هرمیتی باشد ، $\langle\psi|A|\psi\rangle$ یک‌عددحقیقی است :

$$\langle\psi|A|\psi\rangle^{*} = \langle\psi|A^{\dagger}|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle \tag{D-۲۴}$$

که درآن ، معادله آخر از فرضیه (D-۲۲) نتیجه مـی‌شود . چـون $\langle\psi|A|\psi\rangle$ و $\langle\psi|\psi\rangle$ حقیقی‌اند ، معادله (D-۲۳) می‌رساند که λ نیز باید حقیقی باشد .

اگر A هرمیتی باشد ، می‌توانیم ، در (D-۸) ، A را توسط $A^{\dagger}$ و λ را توسـط λ^{*} جایگزین کنیم ، زیرا هم‌اکنون نشان دادیم که λ حقیقی است . بدیـن ترتیب بـه‌دسـت می‌آوریم :

$$\langle\psi|A = \lambda\langle\psi| \tag{D-۲۵}$$

که نشان می‌دهد $|\varphi\rangle$ نیز یک ویژه برای A با ویژه مقدار حقیقی λ است . بنابر این ، کـت $|\varphi\rangle$ هرچه باشد داریم :

$$\langle\psi|A|\varphi\rangle = \lambda\langle\psi|\varphi\rangle \tag{D-۲۶}$$

می‌گوئیم که عملگر هرمیتی A ، در (D-۲۶) ، از طرف چپ عمل کرده است .

(۲) دو ویژه بردار یک عملگر هرمیتی متناظر با دو ویژه مقدار متفاوت متعامدند

دو ویژه بردار $|\psi\rangle$ و $|\varphi\rangle$ ی عملگر هرمیتی A را در نظر بگیرید :

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \tag{D-۲۷-a}$$

$$A|\varphi\rangle = \mu|\varphi\rangle \qquad (D-۲۷-b)$$

چون A هرمیتی است ، (D-۲۷-b) می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود :

$$\langle\varphi|A = \mu\langle\varphi| \qquad (D-۲۸)$$

سپس اگر (D-۲۷-a) را از چپ در $\langle\varphi|$ و (D-۲۸) را از راست در $|\psi\rangle$ ضرب کنیم نتیجه می‌شود :

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle = \lambda\langle\varphi|\psi\rangle \qquad (D-۲۹-a)$$

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle = \mu\langle\varphi|\psi\rangle \qquad (D-۲۹-b)$$

با کم کردن (D-۲۹-b) از (D-۲۹-a) ، نتیجه می‌گیریم :

$$(\lambda - \mu)\langle\varphi|\psi\rangle = 0 \qquad (D-۳۰)$$

در نتیجه اگر $(\lambda - \mu) \neq 0$ باشد ، $\langle\varphi|$ و $|\psi\rangle$ متعامدند .

b ـ تعریف یک مشاهده پذیر

اگر $\mathscr{E}$ دارای ابعاد معدودی باشد ، دیدیم‌که (بخش D-۱-b) ، همواره می‌توان با ویژه بردارهای یک عملگر هرمیتی ، یک پایه تشکیل داد . وقتی که $\mathscr{E}$ بینهایت بعدی باشد ، دیگر لزوما" این چنین نیست . به‌این دلیل است که وارد کردن یک مفهوم جدید ، مفهوم یک مشاهده پذیر ، مفید است .

یک عملگر هرمیتی A را در نظر بگیرید . برای سهولت ، فرض خواهیم‌کردکه‌مجموعه ویژه مقدارهای آن یک طیف گسسته تشکیل می‌دهند $\{ a_n ; n = 1, 2, ... \}$ ، و بعدا" اصلاحاتی را که باید ، وقتی تمام یا قسمتی از این طیف پیوسته است ، انجام دهیم ، ذکر خواهیم کرد ، درجه تبهگنی ویژه مقدار a_n را با g_n نشان خواهیم داد (اگر $g_n = 1$ باشد ، a_n نا تبهگن است) . g_n بردار مستقل خطی انتخاب شده در ویژه زیر فضای $\mathscr{E}_n$ وابسته به a_n را با $|\psi_n^i\rangle$ $(i = 1, 2, ..., g_n)$ نمایش خواهیم داد :

$$A|\psi_n^i\rangle = a_n|\psi_n^i\rangle; \quad i = 1, 2, ..., g_n \qquad (D-۳۱)$$

در بالا نشان دادیم که هربردار متعلق به $\mathscr{E}_n$ ، بر هربردار از زیرفضای‌دیگر $\mathscr{E}_{n'}$ وابسته به $a_{n'} \neq a_n$ ، عمود است ، لذا :

$$\langle \psi_n^i | \psi_{n'}^j \rangle = 0 \qquad (j \text{ ، } i \text{ ، } n \neq n') \text{ اختیاری} \tag{D -۳۲}$$

در داخل هر زیر فضای $\mathscr{E}_n$ ، کتهای $\langle \psi_n^i |$ همواره می‌توانند راست هنجار انتخاب شوند ، یعنی ، به‌گونه‌ای که :

$$\langle \psi_n^i | \psi_n^j \rangle = \delta_{ij} \tag{D -۳۳}$$

اگر یک چنین انتخابی انجام گیرد ، نتیجه عبارت است ازیک دستگاه‌راست‌هنجار از ویژه بردارهای A : $\langle \psi_n^i |$ ها در روابط :

$$\boxed{\langle \psi_n^i | \psi_{n'}^{i'} \rangle = \delta_{nn'} \delta_{ii'}} \tag{D -۳۴}$$

که از اجتماع (D ـ۳۲) و (D ـ۳۳) به‌دست آمده‌اند ، صدق می‌کنند .

بنا به‌تعریف ، عملگر هرمیتی A یک مشاهده‌پذیر است هرگاه این دستگاه‌بردارهای راست هنجارتشکیل یک پایه درفضای حالتها بدهند . این مطلب می‌تواند توسط رابطه بستاری زیر بیان شود :

$$\boxed{\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{i=1}^{g_n} | \psi_n^i \rangle \langle \psi_n^i | = \mathbb{1}} \tag{D -۳۵}$$

گوشزدها :

(i) چون g_n بردار $| \psi_n^i \rangle$ $(i = 1, 2, ..., g_n)$ ، که ویژه زیر فضای $\mathscr{E}_n$ ، وابسته به a_n را به‌وجود می‌آورند راست هنجارند ، تصویرگر P_n روی این زیرفضای $\mathscr{E}_n$ ، می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود (ر ک بخش ۲ ـ b ـ۳ ـ B) :

$$P_n = \sum_{i=1}^{g_n} | \psi_n^i \rangle \langle \psi_n^i | \tag{D -۳۶- a}$$

در این صورت مشاهده‌پذیر A توسط رابطه زیر داده می‌شود :

$$A = \sum_n a_n \ P_n \tag{D -۳۶- b}$$

(به‌سادگی می‌توان ثابت کرد که عمل هردوطرف این معادله روی همه $\langle \psi_n^i |$ ها نتیجه یکسانی خواهد داد) .

(ii) رابطه (D –۳۵) را می‌توان، با به‌کاربردن نتایج داده شده در جدول (۳–۲) تعمیم داد تا مواردی را که طیف ویژه مقدارها پیوسته است در برگیرد. به‌عنوان مثال، یک عملگر هرمیتی را در نظر بگیرید که طیف آن از یک قسمت گسسته $\{a_n\}$ (درجه تبهگنی g_n) و یک قسمت پیوسته $a(\nu)$ (فرض می‌شود ناتبهگن است) تشکیل شده باشد:

$$A\,|\,\psi_n^i\rangle = a_n\,|\,\psi_n^i\rangle;\quad n = 1, 2, \ldots \quad i = 1, 2, \ldots g_n \qquad (D-37-a)$$

$$A\,|\,\psi_\nu\rangle = a(\nu)\,|\,\psi_\nu\rangle;\quad \nu_1 < \nu < \nu_2 \qquad (D-37-b)$$

این بردارها می‌توانند طوری انتخاب شوند که تشکیل یک دستگاه "راست هنجار" بدهند:

$$\begin{aligned} \langle\,\psi_n^i\,|\,\psi_{n'}^{i'}\rangle &= \delta_{nn'}\delta_{ii'} \\ \langle\,\psi_\nu\,|\,\psi_{\nu'}\rangle &= \delta(\nu-\nu') \\ \langle\,\psi_n^i\,|\,\psi_\nu\rangle &= 0 \end{aligned} \qquad (D-38)$$

هنگامی A یک مشاهده‌پذیر گفته می‌شود که این دستگاه یک پایه تشکیل دهد، یعنی، وقتی که داشته باشیم:

$$\sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |\,\psi_n^i\rangle\langle\,\psi_n^i\,| + \int_{\nu_1}^{\nu_2} d\nu\,|\,\psi_\nu\rangle\langle\,\psi_\nu\,| = \mathbb{1} \qquad (D-39)$$

c ـ مثال: تصویرگر P_ψ

حال نشان می‌دهیم که $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ (با $\langle\psi|\psi\rangle = 1$) یک مشاهده‌پذیر است. قبلاً (بخش e ـ۴ـ B) خاطرنشان ساختیم که این عملگر هرمیتی است، و اینکه ویژه مقدارهایش یک وصفر هستند (بخش a ـ۱ـ D)، ویژه مقدار اول ساده (ویژه بردار وابسته: $|\psi\rangle$)، و دومی بینهایت تبهگن است (ویژه بردارهای وابسته: تمام کتهای متعامد بر $|\psi\rangle$).

یک کت دلخواه $|\varphi\rangle$ در فضای حالتها را در نظر بگیریم. این‌کت همواره می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود:

$$|\varphi\rangle = P_\psi\,|\varphi\rangle + (\mathbb{1} - P_\psi)\,|\varphi\rangle \qquad (D-40)$$

$P_\psi\,|\varphi\rangle$ عبارت است از ویژه کت P_ψ با ویژه مقدار ۱. حال، چون $P_\psi^2 = P_\psi$:

$$P_\psi(P_\psi\,|\varphi\rangle) = P_\psi^2\,|\varphi\rangle = P_\psi\,|\varphi\rangle \qquad (D-41)$$

همانطـوری که از رابطه زیر دیده می‌شود، $(\mathbb{1} - P_\psi)|\varphi\rangle$ نیز یک ویژه کت P_ψ است، ولی با ویژه مقدار صفر:

$$P_\psi(\mathbb{1} - P_\psi)|\varphi\rangle = (P_\psi - P_\psi^2)|\varphi\rangle = 0 \qquad (\text{D}-۴۲)$$

بدین ترتیب هرکت $|\varphi\rangle$ می‌تواند برحسب این ویژه کتهای P_ψ بسط داده شود، لذا P_ψ یک مشاهده‌پذیر است.

در بخش ۲ــ E، دومثال مهم دیگر از مشاهده‌پذیرها را خواهیم دید.

۳ ــ مجموعه‌های مشاهده‌پذیرهای جابجائی‌پذیر

a ــ قضایای مهم

α ــ قضیه

اگر عملگرهای A و B جابجائی پذیر باشند، و اگر $|\psi\rangle$ یک ویژه بردار A باشد، $B|\psi\rangle$ نیز یک ویژه بردار A، با همان ویژه مقدار خواهد بود.

می‌دانیم که اگر، $|\psi\rangle$ یک ویژه بردار A باشد، داریم:

$$A|\psi\rangle = a|\psi\rangle \qquad (\text{D}-۴۳)$$

با اعمال B به دوطرف این معادله، خواهیم داشت:

$$BA|\psi\rangle = aB|\psi\rangle \qquad (\text{D}-۴۴)$$

چون فرض کرده‌ایم که A و B جابجائی‌پذیر باشند، با جایگزین‌کردن BA درطرف‌چپ توسط AB، داریم:

$$A(B|\psi\rangle) = a(B|\psi\rangle) \qquad (\text{D}-۴۵)$$

این معادله بیانگر این واقعیت است که $B|\psi\rangle$ یک ویژه بردار A، با ویژه مقدار a است. به‌این ترتیب قضیه اثبات شده است.

بنابراین، دومورد ممکن است پیش‌آید:

(۱) اگر a یک ویژه مقدار نا تبهگن باشد، تمام ویژه بردارهای وابسته به‌آن، بنا به‌تعریف همخط هستند، و $B|\psi\rangle$ لزوماً" با $|\psi\rangle$ متناسب است. از این‌رو $|\psi\rangle$ یک ویژه بردار B نیز هست.

(۲) اگر a یک ویژه مقدار تبهگن باشد، فقط می‌توان گفت که $B|\psi\rangle$ به‌ویژه زیر فضای $\mathscr{E}_a$ی A، متناظر با ویژه مقدار a، تعلق دارد. در نتیجه، برای هر $|\psi\rangle \in \mathscr{E}_a$، داریم:

$$B|\psi\rangle \in \mathscr{E}_a \tag{D-۴۶}$$

می‌گوئیم که $\mathscr{E}_a$، تحت عمل B، کلا" تغییر ناپذیر (یاپایدار) است. بنابراین، قضیه ۱ می‌تواند به‌صورت دیگری بیان شود:

قضیه ۱ : **اگردو اپراتور A و B جابجائی‌پذیر باشند، هر ویژه زیرفضای A، تحت عمل B، کلا" تغییرناپذیر است.**

β . قضیه ۲ :

اگر دومشاهده‌پذیر A و B جابجائی‌پذیر باشند، و اگر $|\psi_1\rangle$ و $|\psi_2\rangle$ دوویژه بردار A با ویژه مقدارهای متفاوت باشند، عنصر ماتریسی $\langle\psi_1|B|\psi_2\rangle$ صفر است.

اگر $|\psi_1\rangle$ و $|\psi_2\rangle$ ویژه بردارهای A باشند، می‌توانیم بنویسیم:

$$\begin{aligned} A|\psi_1\rangle &= a_1|\psi_1\rangle \\ A|\psi_2\rangle &= a_2|\psi_2\rangle \end{aligned} \tag{D-۴۷}$$

بنابرقضیه ۱، این واقعیت که A و B جابجائی پذیرند بدین معنی‌است که $B|\psi_2\rangle$ یک‌ویژه بردار A، با ویژه مقدار a_2، است. بنابراین (رک بخش a ـ۲ـ D) $B|\psi_2\rangle$ بـــر $|\psi_1\rangle$ (ویژه برداروِیژه مقدار a_1، $a_1 \neq a_2$) متعامداست، که می‌تواند به‌صورت‌زیرنوشته شود:

$$\langle\psi_1|B|\psi_2\rangle = 0 \tag{D-۴۸}$$

بنابراین قضیه ثابت شده است. یک اثبات دیگر، که به‌قضیـــه ۱ ارتباط پیدا نمـی‌کنـد، می‌توان ارائه داد: چون عملگر صفر است، داریم:

$$\langle\psi_1|(AB - BA)|\psi_2\rangle = 0 \tag{D-۴۹}$$

با استفاده از (۴۷ـ D) و هرمیتی بودن A [معادله (۲۵ـ D) را بـه بینید]، خواهیـم داشت:

$$\langle \psi_1 | AB | \psi_2 \rangle = a_1 \langle \psi_1 | B | \psi_2 \rangle$$
$$\langle \psi_1 | BA | \psi_2 \rangle = a_2 \langle \psi_1 | B | \psi_2 \rangle \qquad (D-۵۰)$$

و (D-۴۹) می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود .

$$(a_1 - a_2)\langle \psi_1 | B | \psi_2 \rangle = 0 \qquad (D-۵۱)$$

چون بنا به‌فرض $(a_1 - a_2)$ غیر صفر است ، می‌توانیم (D-۴۸) را ازآن نتیجه بگیریم .

۷ . قضیه۳ (اساسی)

اگر دومشاهده‌پذیر A و B جابجائی‌پذیرباشند ، می‌توان با ویژه بردارهای مشترک A و B یک پایه راست هنجار فضای حالتها ساخت .

دومشاهده‌پذیر جابجائی‌پذیر A و B را درنظر بگیرید . برای اینکه نمادگذاری راساده‌کنیم ، فرض خواهیم‌کردکه طیفهای آنها کلا "گسسته باشند . چون A یک مشاهده‌پذیر است ، حداقل یک دستگاه راست هنجار ازویژه بردارهای A وجود دارد که یک پایه‌درفضای حالتهای $\mathscr{E}$ تشکیل می‌دهند . این بردارها را با $|u_n^i\rangle$ نشان خواهیم داد :

$$A|u_n^i\rangle = a_n |u_n^i\rangle; \quad n = 1, 2, \ldots \quad i = 1, 2, \ldots, g_n \qquad (D-۵۲)$$

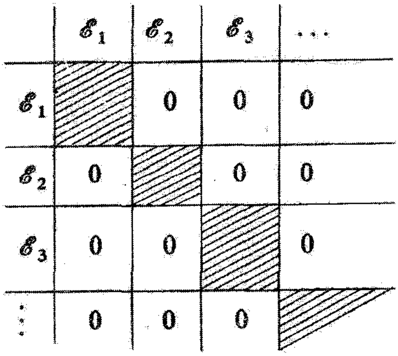
g_n ، درجه تبهگنی ویژه مقدار a_n ، یعنی ، بعد ویژه زیرفضای $\mathscr{E}_n$ مربوطه است . داریم :

$$\langle u_n^i | u_{n'}^{i'} \rangle = \delta_{nn'}\delta_{ii'} \qquad (D-۵۳)$$

ماتریسی که معرف B در پایه $\{|u_n^i\rangle\}$ است چه شکلی دارد؟ می‌دانیم کـه (ر ک قضیه ۲) عناصر ماتریسی $\langle u_n^i | B | u_{n'}^{i'} \rangle$ ، وقتی $n \neq n'$ باشد ، صفر است (از طرف دیگر ، نمی‌توانیم در بارهٔ اینکه وقتی $n = n'$ و $i \neq i'$ باشد چه اتفاق می‌افتد ، از پیش چیـزی بـه‌گوئیـم) . بردارهای پایهٔ $|u_n^i\rangle$ را به‌ترتیب زیر مرتب کنیم :

$$|u_1^1\rangle, |u_1^2\rangle, \ldots, |u_1^{g_1}\rangle \quad ; \quad |u_2^1\rangle, \ldots, |u_2^{g_2}\rangle \quad ; \quad |u_3^1\rangle, \ldots$$

دراین‌صورت برای B یک ماتریس "قطری قطعه‌ای" ، یعنی ، به‌صورت زیر ، به‌دست‌می‌آوریم :



(D –۵۴)

(فقط قسمتهای ها شور زده شده شامل عناصر ماتریسی غیر صفراند) . این حقیقت که ویژه زیر فضاهای $\mathscr{E}_n$ ، تحت عمل B کلا" تغییرناپذیر است (رک بخش α) ازشکل این ماتریس آشکار است .

لذا دو مورد پیش می‌آید :

(۱) وقتی a_n یک ویژه مقدار ناتبهگن A باشد ، فقط یک ویژه بردار $|u_n\rangle$ ، با ویژه مقدار a_n ، برای A وجود دارد (دراین صورت شاخص i در $|u_n\rangle$ بی‌فایده است) : بعد $\mathscr{E}_n$ ، یعنی g_n ، برابر است با ۱ . بنابراین در ماتریس(D –۵۴) ، " قطعه" متناظر ، به‌یک ماتریس 1×1 ، یعنی ، به‌یک عدد ساده ، تقلیل می‌یابد . در ستون وابسته به $|u_n\rangle$ کلیه عناصرماتریسی دیگرصفرند . این مطلب بیانگراین واقعیت است‌که(رک بخش i — α) $|u_n\rangle$ یک ویژه بردار مشترک A و B است .

(۲) وقتی a_n ، یک ویژه مقدار تبهگن A باشد $(g_n > 1)$ ، " قطعه"ای‌که‌معرف B در $\mathscr{E}_n$ است ، عموما" ، قطری نیست : $|u_n^i\rangle$ ها ، عموما" ، ویژه بردارهای B نیستند .

با وجود این ، می‌توان دید که ، چون عمل A روی هریک از g_n بردار $|u_n^i\rangle$ به‌یک ضرب ساده در a_n کاهش می‌یابد ، ماتریس معرف تحدید A به $\mathscr{E}_n$ برابر است با $a_n I$ (که درآن I یک ماتریس یکه $g_n \times g_n$ است) . این مطلب بیان‌گر این واقعیت است که یک کت دلخواه از $\mathscr{E}_n$ ، یک ویژه بردار A با ویژه مقدار a_n است . بنابراین انتخاب یک پایه نظیر $\{|u_n^i\rangle ; i = 1, 2, ..., g_n\}$ ، در $\mathscr{E}_n$ ، اختیاری است . این پایه هرچه باشد ، ماتریس معرف A در $\mathscr{E}_n$ همواره قطری بوده و برابر است با $a_n I$ ، ازاین‌خاصیت برای‌به‌دست آوردن یک پایهٔ $\mathscr{E}_n$ از بردارهائی که ویژه بردارهای B نیز هستند ، استفاده خواهیم کرد .

وقتی پایه انتخابی $\{|u_n^i\rangle ; i = 1, 2, ..., g_n\}$ باشد ، ماتریس معرف B در $\mathscr{E}_n$ دارای عناصر زیر خواهد بود :

$$\beta_{ij}^{(n)} = \langle u_n^i | B | u_n^j \rangle \tag{D-۵۵}$$

این ماتریس هرمیتی است $(\beta_{ji}^{(n)*} = \beta_{ij}^{(n)})$ ، زیرا B یک عملگر هرمیتی است ، در نتیجه قطری‌پذیر است ، یعنی ، می‌توان در $\mathscr{E}_n$ یک پایه جدید $\{ | v_n^i \rangle ; i = 1, 2, ..., g_n \}$ پیدا کرد که در آن B توسط یک ماتریس قطری نمایش داده شود .

$$\langle v_n^i | B | v_n^j \rangle = \beta_i^{(n)} \delta_{ij} \tag{D-۵۶}$$

این بدان معنا است که بردارهای پایه جدید در $\mathscr{E}_n$ ، ویژه بردارهای B هستند :

$$B | v_n^i \rangle = \beta_i^{(n)} | v_n^i \rangle \tag{D-۵۷}$$

همانطوری که در بالا دیدیم ، این بردارها خود بخود ویژه بردارهای A با ویژه مقدار a_n هستند ، زیرا به $\mathscr{E}_n$ تعلق دارند . این حقیقت را مورد تأکیدقرار می‌دهیم که ویژه بردارهای A وابسته به‌ویژه مقدارهای تبهگن لزوما" ویژه بردارهای B نیستند. آنچه اثبات کردیم این است که، همواره می‌توان ، در هر ویژه زیر فضای A ، یک پایه از ویژه بردارهای مشترک A و B انتخاب کرد .

اگر این عمل را در تمام زیر فضاهای $\mathscr{E}_n$ انجام دهیم ، پایه‌ای از $\mathscr{E}$ به‌دست می‌آوریم که توسط ویژه بردارهای مشترک A و B تشکیل یافته است . لذا قضیه ثابت شده است .

گوشزدها :

(i) از این به‌بعد ، ویژه بردارهای مشترک A و B را با $| u_{n,p}^i \rangle$ نشان خواهیم داد .

$$\begin{aligned} A | u_{n,p}^i \rangle &= a_n | u_{n,p}^i \rangle \\ B | u_{n,p}^i \rangle &= b_p | u_{n,p}^i \rangle \end{aligned} \tag{D-۵۸}$$

نمادهای n و p که در $| u_{n,p}^i \rangle$ ظاهر می‌شوند ما را قادر می‌سازند تا ویژه مقدارهای a_n و b_p ی عملگرهای A و B را مشخص سازیم . شاخص اضافی i مآلا" برای تمیز دادن بردارهای مختلف پایه ، که متناظر باهمان ویژه بردارهای a_n و b_p می‌باشند به‌کار می‌رود . (ر ک بخش b ی زیر) .

(ii) عکس قضیه ۳ به‌آسانی اثبات می‌شود: اگر یک پایهٔ از ویژه بردارهای مشترک A و B وجود داشته باشد، این دو مشاهده‌پذیر جابجائی پذیرند.
به‌سادگی می‌توان از (D ـ۵۸) نتیجه‌گیری کرد که:

$$\begin{aligned} AB\,|u^i_{n,p}\rangle &= b_p\,A\,|u^i_{n,p}\rangle = b_p\,a_n\,|u^i_{n,p}\rangle \\ BA\,|u^i_{n,p}\rangle &= a_n\,B\,|u^i_{n,p}\rangle = a_n\,b_p\,|u^i_{n,p}\rangle \end{aligned} \qquad (\text{D} - ۵۹)$$

و از کم کردن این دو معادله از یکدیگر داریم:

$$[A, B]\,|u^i_{n,p}\rangle = 0 \qquad (\text{D} - ۶۰)$$

این رابطه برای‌تمام i ها، n ها و p ها معتبراست. چون بنا به‌فرض، بردارهای $|u^i_{n,p}\rangle$ یک پایه تشکیل می‌دهند، (D ـ۶۰) ایجاب می‌کند که $[A, B] = 0$ باشد.

(iii) به‌مناسبتهائی، بعداً، مجبورخواهیم بودکه معادله ویژه مقداری یک‌مشاهده‌پذیر C به‌صورت:

$$C = A + B \quad \text{و} \quad [A, B] = 0 \qquad (\text{D} - ۶۱)$$

را، که در آن A و B نیز مشاهده پذیرند، حل کنیم.
وقتی یک‌پایه $\{|u^i_{n,p}\rangle\}$ ازویژه بردارهای مشترک A و B پیدا شد، مسأله حل‌شده است، زیرا بلافاصله می‌بینیم که $|u^i_{n,p}\rangle$ یک ویژه بردار C، با ویژه مقدار $a_n + b_p$، نیز هست. این واقعیت که $\{|u^i_{n,p}\rangle\}$ یک پایه تشکیل می‌دهدآشکارا ضروری است: این مطلب به‌ما اجازه می‌دهدتا، به‌عنوان مثال، نشان دهیم که تمام ویژه مقدارهای C به‌شکل $a_n + b_p$ هستند.

b ـ مجموعه‌های کامل* مشاهده‌پذیرهای جابجائی‌پذیر (م.ک.م.ج)**

یک مشاهده پذیر A و یک پایهٔ از $\mathscr{E}$ را که از ویژه بردارهای $|u^i_n\rangle$ ی A تشکیل

---

* کلمه "کامل" در اینجا به مفهومی به‌کار رفته است که کاملاً با آنهائی که در پاورقی بخش a ـ۲ـ A صفحه ۱۳۲ آمده است بی‌ارتباط است. این استفاده ازکلمه "کامل" در مکانیک کوانتومی متداول است.

** برای اینکه فهم خوبی از مفاهیم مهم وارد شده دراین بخش حاصل شود، خواننده باید آنها را به‌یک مثال واقعی نظیر مثال بحث شده در مکمل H_{II} (تمرینات حل شدهٔ ۱۱ و ۱۲) اعمال کند.

یافته است ، در نظر بگیرید . اگر هیچیک از ویژه مقدارهای A تبهگن نباشند ، بردارهای پایه مختلف $\mathscr{E}$ می‌توانند توسط ویژه مقدار a_n مشخص شوند شاخص i در $\langle u_n^i|$ ، در این مورد ، بی‌فایده است) . دراین صورت ویژه زیر فضاهای $\mathscr{E}_n$ یک بعدی هستند . بنابراین ، با مشخص شدن ویژه مقدار ، ویژه بردار متناظر به‌طریق یکتائی (باتقریب یک‌ضریب‌ثابت) تعیین می‌شود . به‌عبارت دیگر ، فقط یک پایه از $\mathscr{E}$ وجود دارد که توسط ویژه بردارهای A تشکیل می‌یابد (دراینجا ، دو پایه را که بردارهای نشان متناسب بایکدیگرباشند ، به‌عنوان دو پایه متمایز تلقی نخواهیم کرد) . لذا گفته می‌شود که مشاهده‌پذیر A ، به‌تنهائی‌یک م .ک.م .ج. تشکیل می‌دهد .

اگر ، از طرف دیگر ، یک یا چند ویژه مقدار A تبهگن باشند ، وضعیت فرق می‌کند . مشخص کردن a_n ، دیگر برای مشخص کردن یک بردار پایه همیشه کافی نخواهد بود ، زیرا با ویژه مقدارهای تبهگن چند بردار مستقل متناظر خواهند بود . واضح است‌که دراین‌مورد ، پایهٔ ویژه بردارهای A یکتا نیست . می‌توان هرپایه‌ای در داخل هریک از ویژه زیر فضاهای $\mathscr{E}_n$ با بعد بزرگتر از ۱ ، را انتخاب کرد .

سپس ، یک مشاهده پذیر دیگر B که با A جابجائی‌پذیر است انخاب می‌کنیم ، و از ویژه بردارهای مشترک A و B یک پایه راست هنجار می‌سازیم . اگر این پایه (باتقریب یک ضریب فاز برای هریک از بردارهای پایه) یکتا باشد ، یعنی ، اگر به هریک از زوجهای ممکن از ویژه مقدارهای $\{ a_n, b_p \}$ ، فقط یک بردار پایه متناظر باشد ، A و B ، بنابه‌تعریف یک م .ک.م .ج. تشکیل می‌دهند .

گوشزد :

در بخش a ، با حل معادله ویژه مقداری B در داخل هر ویژه زیر فضای $\mathscr{E}_n$ ، یک پایه از ویژه بردارهای مشترک A و B ساختیم . برای اینکه A و B یک م .ک.م .ج. تشکیل دهند ، لازم و کافی است که ، درداخل هریک از این زیر فضاها ، تمام g_n ویژه مقدار B متمایز باشند . چون تمام بردارهای $\mathscr{E}_n$ با یک ویژه مقدار a_n ، مربوط به A ، متناظرند ، دراین صورت g_n بردار $\langle v_n^i|$ می‌توانند توسط ویژه مقدار B که به‌آنها وابسته‌اند از هم متمایز شوند . توجه کنید که لازم نیست که تمام ویژه مقدارهای B ناتبهگن‌باشند . بردارهای $\langle v_n^i|$ ی متعلق به‌دوزیرفضای متمایز $\mathscr{E}_n$ می‌توانند دارای ویژه مقدارهای یکسانی برای B باشند . بعلاوه ، اگر تمام ویژه مقدارهای B ناتبهگن می‌بودند ، B به‌تنهائی یک م .ک.م .ج. تشکیل می‌داد .

اگر، برای حداقل یکی اززوجهای ممکن $\{a_n, b_p\}$ ، چند بردارمستقل‌وجود داشته باشد که ویژه بردارهای A و B ، بااین ویژه مقدارها باشند ، مجموعه $\{A, B\}$ کامل‌نیست. حال بیائید ، یک مشاهده‌پذیرسوم C را که‌هم با A و هم با B جابجائی‌پذیر است به‌آن بیفزائیم. دراین صورت می‌توانیم همان استدلال بخش a ی فوق را بـه‌کار بریـم و آن را به‌طریق زیر تعمیم دهیم. وقتی با زوج $\{a_n, b_p\}$ ، فقط یک بردار متناظر باشد ، این بردار لزوما" یک ویژه بردار C خواهد بود. اگر چند بردار وجود داشته باشد ، این بردارها یک ویژه زیر فضای $\mathscr{E}_{n,p}$ تشکیل می‌دهند که در آن می‌توان پایه‌ای انتخاب کرد که ازبردارهائی که ویژه بردارهای C نیز هستند تشکیل شده باشد. به‌این ترتیب می‌توان ، درفضای حالت ، یک پایه راست هنجار ، که از ویژه بردارهای A ، B و C تشکیل شده باشد. ساخت. A ، B و C وقتی یک م.ک.م.ج. تشکیل می‌دهند که این پایه (با تقریب ضریب‌هائی) یکتا باشد. دراین صورت ، معلوم بودن یک مجموعه‌ٔ ممکن از ویژه مقدارهای $\{a_n, b_p, c_r\}$ مربوطه بـه A, B, C فقط یکی از بردارهای این پایه را مشخص می‌کند. اگرچنین‌نباشد ،به A ، B ، C یک مشاهده‌پذیر دیگر D که با هریک ازیـن سه اپراتـور جابجائی‌پـذیر باشدافزوده‌خواهد شد ، و الی‌آخر. به‌این ترتیب ، به‌طور کلی ، به‌بیان زیر هدایت می‌شویم:

بنا به‌تعریف ، یک مجموعه از مشاهده‌پذیرهای A ، B ، C . . . یک مجموعه‌کامل مشاهده‌پذیرهای جابجائی‌پذیر نامیده می‌شود اگر:

(۱) تمام مشاهده‌پذیرهای A ، B ، C ... دو به‌دو جابجائی‌پذیر باشند ،

(۲) مشخص‌کردن ویژه مقدارهای تمام اپراتورهای A ، B ، C .. برای تعیین یـک ویژه بردار مشترک یکتا (با تقریب یک ضریب ضربی) کافی است.

بیان معادل دیگر به‌صورت زیر است:

یک مجموعه از مشاهده‌پذیرهای A ، B ، C ... ، وقتی یک مجمـوعـه کـامـل مشاهـده‌پذیرهای جابجائی‌پذیر است که یک پایه راست هنجار یکتائی از ویژه‌بـردارهـای مشترک آنـها (باتقریب ضرائب فاز) وجودداشته باشد.

م.ک.م.ج. ها نقش مهمی در مکانیک کوانتومی ایفا می‌کنند. مثالهای بیشماری ازآنها را خواهیم دید (رک ، بخصوص به ، بخش d ــ۲ــ E).

گوشـزدها:

(i) اگر $\{A, B\}$ یک م.ک.م.ج. بـاشد ، با افزودن هرمشاهده‌پذیـر C بـه‌آن یک م.ک.م.ج. دیگر می‌تواند به‌دست آید ، البته ، به‌شرط اینکه ، این مشاهده‌پذیر

با A و B جابجائی‌پذیر باشد. لیکن، عموما"، مناسب است که خود را به مجموعه‌های " می‌نیمم " یعنی، به‌آنهائی که وقتی هریک از مشاهده‌پذیرها را حذف کنیم دیگر کامل نیستند، محدود کنیم.

(ii) فرض کنید $\{A, B, C\}$ یک مجموعه کامل مشاهده‌پذیرهای جابجائی‌پذیر باشند. چون مشخص کردن ویژه مقدارهای $a_n, b_p, c_r \cdots$ یک کت ازپایه مربوطه را (باتقریب یک ضریب ثابت) تعیین می‌کنند، این کت را گاهی با $|a_n, b_p, c_r, \dots\rangle$ نمایش می‌دهیم.

(iii) برای یک سیستم فیزیکی معین، چند مجموعه کامل مشاهده‌پذیرهای جابجائی‌پذیر وجود دارد. یک مثال بخصوصی از آنرا در بخش E–۲–d خواهیم دید.

E · دومثال مهم ازنمایشها ومشاهده‌پذیرها

در این بخش، به‌فضای $\mathcal{F}$ توابع موج یک ذره، یا به‌عبارت دقیقتری، به‌فضای حالتهای $\mathscr{E}_r$ ای که به‌آن وابسته است و ما آنرا به‌طریق زیرتعریف خواهیم‌کرد، بازمی‌گردیم فرض کنید به هرتابع موج $\psi(\mathbf{r})$، یک کت $|\psi\rangle$ متعلق به $\mathscr{E}_r$ مربوط باشد، این ارتباط خطی است. بعلاوه، حاصلضرب نرداری دو کت بر حاصلضرب نرداری توابعی‌که به‌آنهاوابسته‌اند منطبق است:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int d^3r \;\; \varphi^*(\mathbf{r}) \;\; \psi(\mathbf{r}) \qquad (\text{E–۱})$$

بنابراین، $\mathscr{E}_r$ عبارت است از فضای حالت یک ذره (بدون اسپین).

می‌خواهیم، دراین فضا، دونمایش و دوعملگر را که از اهمیت خاصی برخوردارند تعریف و مطالعه کنیم. در فصل سوم، آنها را به‌مکان و تکانهٔ ذره مورد بررسی، وابسته خواهیم کرد. بعلاوه، آنها مارا قادر خواهند ساخت تا مفاهیمی را که در بخشهای‌گذشته وارد کردیم به‌کار برده و آنها را روشن کنیم.

۱ ــ نمایشهای $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ و $\{|\mathbf{p}\rangle\}$

a ــ تعریف

در بخشهای A–۳–a و A–۳–b، "دوپایه" بخصوص از $\mathcal{F}$ را معرفی کردیم: $\{\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})\}$ و $\{v_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{r})\}$. این پایه‌ها از توابع متعلق به $\mathcal{F}$ تشکیل نشده‌اند:

$$\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \quad (E-۲-a)$$

$$v_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2}\, e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_0\cdot\mathbf{r}} \quad (E-۲-b)$$

لیکن ، هر تابع مجذورا" انتگرال‌پذیر و به حد کافی منظم ، می‌تواند برحسب یکی از این "پایه‌ها" بسط داده شود .

به‌این جهت نشانه‌ٔ "   " را حذف کرده و به‌هر تابع ازین پایه‌ها ، یک کت وابسته خواهیم کرد (رک بخش c ــ۲ــ B) . کت وابسته به $\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})$ را با $|\,\mathbf{r}_0\rangle$ و کت وابسته به $v_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{r})$ را با $|\,\mathbf{p}_0\rangle$ نمایش خواهیم داد :

$$\boxed{\begin{aligned}\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) &\Longleftrightarrow |\,\mathbf{r}_0\rangle \quad (E-۳-a)\\ v_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{r}) &\Longleftrightarrow |\,\mathbf{p}_0\rangle \quad (E-۳-b)\end{aligned}}$$

بنابراین ، بااستفاده از پایه‌های $\{\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})\}$ و $\{v_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{r})\}$ متعلق به $\mathscr{F}$ ، دو نمایش در $\mathscr{E}_r$ تعریف می‌کنیم : نمایش $\{|\,\mathbf{r}_0\rangle\}$ و نمایش $\{|\,\mathbf{p}_0\rangle\}$. یک بردار پایهٔ اولی‌توسط به " شاخص پیوسته" x_0 ، y_0 و z_0 ، که مختصات یک نقطه در فضای سه بعدی هستند ،مشخص می‌شود ، برای نمایش دوم نیز ، سه‌شاخص موٴلفه‌های یک بردار معمولی هستند .

b ــ روابط راست هنجاری و بستاری

حال $\langle\,\mathbf{r}_0\,|\,\mathbf{r}'_0\,\rangle$ را محاسبه‌می‌کنیم . بااستفاده ازتعریف حاصلضرب‌برداری در $\mathscr{E}_r$ داریم :

$$\langle\,\mathbf{r}_0\,|\,\mathbf{r}'_0\,\rangle = \int d^3r\;\xi^*_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})\;\xi_{\mathbf{r}'_0}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}'_0) \quad (E-۴-a)$$

که در آن ، از رابطه (۵۵ــ A) استفاده شده است . به‌همین طریق ، بااستفاده از (۴۷ــ A) داریم :

$$\langle\,\mathbf{p}_0\,|\,\mathbf{p}'_0\,\rangle = \int d^3r\;v^*_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{r})\;v_{\mathbf{p}'_0}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}'_0) \quad (E-۴-b)$$

بنابراین ، پایه‌هائی که تعریف کردیم ، به‌مفهوم گسترده ، راست هنجارند .

این واقعیت که مجوعه $\langle\,\mathbf{r}_0\,|$ با مجموعه $\langle\,\mathbf{p}_0\,|$ یک پایه در $\mathscr{E}_r$ تشکیل می‌دهند توسط یک رابطه بستاری در $\mathscr{E}_r$ بیان می‌شود . این رابطه به‌طریقی مشابه با (۱۰ــ C)نوشته می‌شود ، به‌شرطی که در اینجا به‌جای یک شاخص روی سه شاخص انتگرال‌گیری شود .

بنابراین روابط اساسی زیر را داریم:

$\langle \mathbf{p}_0 \mid \mathbf{p}'_0 \rangle = \delta(\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}'_0)$ (c)	$\langle \mathbf{r}_0 \mid \mathbf{r}'_0 \rangle = \delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}'_0)$ (a)
$\int d^3p_0 \mid \mathbf{p}_0 \rangle \langle \mathbf{p}_0 \mid = \mathbb{1}$ (d)	$\int d^3r_0 \mid \mathbf{r}_0 \rangle \langle \mathbf{r}_0 \mid = \mathbb{1}$ (b)

(E–۵)

c ـ موءلفه‌های یک کت

یک‌کت دلخواه $\langle \psi \mid$ ، متناظر باتابع‌موج $\psi(\mathbf{r})$ ، را در نظربگیرید . روابط بستاری فوق‌الذکر مارا قادر می‌سازند تا آن را به‌یکی از دوشکل زیر بنویسیم :

$$| \psi \rangle = \int d^3r_0 \mid \mathbf{r}_0 \rangle \langle \mathbf{r}_0 \mid \psi \rangle \qquad (E\text{–۶–}a)$$

$$| \psi \rangle = \int d^3p_0 \mid \mathbf{p}_0 \rangle \langle \mathbf{p}_0 \mid \psi \rangle \qquad (E\text{–۶–}b)$$

ضرائب $\langle \mathbf{r}_0 \mid \psi \rangle$ و $\langle \mathbf{p}_0 \mid \psi \rangle$ می‌توانند بااستفاده از فرمولهای زیر محاسبه شوند :

$$\langle \mathbf{r}_0 \mid \psi \rangle = \int d^3r \;\; \xi^*_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) \;\; \psi(\mathbf{r}) \qquad (E\text{–۷–}a)$$

$$\langle \mathbf{p}_0 \mid \psi \rangle = \int d^3r \;\; v^*_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{r}) \;\; \psi(\mathbf{r}) \qquad (E\text{–۷–}b)$$

لذا نتیجه می‌گیریم :

$$\boxed{\begin{aligned} \langle \mathbf{r}_0 \mid \psi \rangle &= \psi(\mathbf{r}_0) \\ \langle \mathbf{p}_0 \mid \psi \rangle &= \bar{\psi}(\mathbf{p}_0) \end{aligned}} \qquad \begin{aligned} &(E\text{–۸–}a) \\ &(E\text{–۸–}b) \end{aligned}$$

که در آن $\bar{\psi}(\mathbf{p})$ تبدیل فوریه $\psi(\mathbf{r})$ است .

بدین ترتیب نشان دادیم که‌مقدار تابع موج در نقطه $\mathbf{r}_0$ ، یعنی $\psi(\mathbf{r}_0)$ ، همان موءلفه کت $\langle \psi \mid$ روی بردار پایه $\langle \mathbf{r}_0 \mid$ نمایش $\{ \langle \mathbf{r}_0 \mid \}$ است . " تابع موج در فضای تکانه " $\bar{\psi}(\mathbf{p})$ ، می‌تواند به‌طریق مشابهی تعبیر شود . بنابراین ، امکان مشخص کردن $\langle \psi \mid$ توسط $\psi(\mathbf{r})$ ، به‌طور ساده، مورد خاصی از نتایج بخش a ـ۳ـC است .

به‌عنوان مثال ، برای $\langle \psi \mid = \langle \mathbf{p}_0 \mid$ فرمول (E ـ۸ـ a) می‌دهد که:

$$\langle \mathbf{r}_0 \mid \mathbf{p}_0 \rangle = v_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{r}_0) = (2\pi\hbar)^{-3/2}\, e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_0\cdot\mathbf{r}_0} \qquad (E-۹)$$

برای $\langle \mathbf{r}'_0 | = \langle \psi |$ ، این نتیجه ، در واقع ، بارابطه راست‌هنجاری (E ــ۵ــ a) موافقت دارد:

$$\langle \mathbf{r}_0 \mid \mathbf{r}'_0 \rangle = \xi_{\mathbf{r}'_0}(\mathbf{r}_0) = \delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}'_0) \qquad (E-۱۰)$$

حال که از تابع موج $\psi(\mathbf{r})$ و تبدیل فوریهٔ آن $\bar{\psi}(\mathbf{p})$ تعبیرمجددی‌کردیم ،بردارهای پایه دو نمایشی را که در اینجا مطالعه می‌کنیم ، به‌جای $\langle \mathbf{r}_0 |$ و $\langle \mathbf{p}_0 |$ ، با $\langle \mathbf{r} |$ و $\langle \mathbf{p} |$ ، نشان خواهیم داد . در این صورت فرمول‌های (E ــ۸) می‌توانند به‌صورت زیر نوشته‌شوند :

$$\langle \mathbf{r} \mid \psi \rangle = \psi(\mathbf{r}) \qquad (E-۸-a)$$

$$\langle \mathbf{p} \mid \psi \rangle = \bar{\psi}(\mathbf{p}) \qquad (E-۸-b)$$

و روابط راست هنجارش و بستاری (E ــ۵) خواهند شد :

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (a) \qquad \langle \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \quad (c)$$

$$\int d^3r\, | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | = \mathbb{1} \quad (b) \qquad \int d^3p\, | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | = \mathbb{1} \quad (d) \qquad (E-۵)$$

البته $\mathbf{r}$ و $\mathbf{p}$ به‌عنوان معرف دومجموعه از شاخص‌های پیوسته ، $\{x, y, z\}$ و $\{p_x, p_y, p_z\}$ که به‌ترتیب کتهای پایهٔ نمایشهای $\{\langle \mathbf{r} |\}$ و $\{\langle \mathbf{p} |\}$ را مشخص می‌کنند ، نیزدر نظرگرفته می‌شوند .

حال فرض کنید $\{u_i(\mathbf{r})\}$ ، یک پایه راست هنجار از $\mathscr{F}$ باشد . به‌هر $u_i(\mathbf{r})$ یک کت $\langle u_i |$ از $\mathscr{E}_r$ وابسته است . مجموعه $\{ |u_i\rangle \}$ ، یک پایه راست هنجاردر $\mathscr{E}_r$ تشکیل می‌دهد ، بنابراین در رابطه بستاری زیر صدق می‌کند :

$$\sum_i | u_i \rangle \langle u_i | = \mathbb{1} \qquad (E-۱۱)$$

عنصر ماتریسی دوطرف (E ــ۱۱) ، بین $\langle \mathbf{r} |$ و $| \mathbf{r}' \rangle$ ، را برآورد می‌کنیم :

$$\sum_i \langle \mathbf{r} | u_i \rangle \langle u_i | \mathbf{r}' \rangle = \langle \mathbf{r} | \mathbb{1} | \mathbf{r}' \rangle = \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle \qquad (E-۱۲)$$

این رابطه ، بنابر (E ــ۸ــ a)و (E ــ۵ــ a) ، می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود :

$$\sum_i u_i(r)\ u_i^*(r') = \delta(r - r') \qquad (E-13)$$

بنابراین، رابطه بستاری در $\{u_i(\mathbf{r})\}$ [فرمول (A‑۳۲)]، بیان همان رابطه بستاری برداری (E‑۱۱) در نمایش $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ است.

d ــ حاصلضرب نرداری دوبردار

حاصلضرب نرداری دوکت از $\mathscr{E}_r$ را به‌این صورت تعریف کردیم که برابر است با حاصلضرب نرداری توابع موج وابسته به‌آنها در $\mathscr{F}$ [معادله (E‑۱)]. در پرتو بحث بخش c، این تعریف، به‌عنوان یک مورد خاص از فرمول (C‑۲۱) ظاهر می‌شود. در واقع (E‑۱) می‌تواند با قراردادن رابطه بستاری (E‑۵‑b) بین $|\psi\rangle$ و $\langle\varphi|$:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int d^3r \langle \varphi | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \psi \rangle \qquad (E-14)$$

و با تعبیر مؤلفه‌های $\langle \mathbf{r}|\psi\rangle$ و $\langle \mathbf{r}|\varphi\rangle$ به‌صورت (E‑۸‑a) به‌دست آید.

اگر خود را در نمایش $\{|\mathbf{p}\rangle\}$ قرار دهیم، یک خاصیت مشهور تبدیل فوریه ثابت می‌شود (پیوست I، بخش c‑۲).

$$\begin{aligned}\langle \varphi | \psi \rangle &= \int d^3p \langle \varphi | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \psi \rangle \\ &= \int d^3p\ \bar{\varphi}^*(\mathbf{p})\ \bar{\psi}(\mathbf{p})\end{aligned} \qquad (E-15)$$

e ــ تغییر از نمایش $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ به‌نمایش $\{|\mathbf{p}\rangle\}$.

این عمل با به‌کاربردن روش مذکور در بخش C‑۵ انجام می‌شود، تنها اختلاف از این واقعیت ناشی می‌شود که در اینجا با دوپایه پیوسته سروکارداریم. تغییر از یک پایه به‌پایه دیگر، اعداد زیر را وارد می‌کند:

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle^* = (2\pi\hbar)^{-3/2}\, e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \qquad (E-16)$$

یک کت معین $\psi(\mathbf{r})$، در نمایش $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ با $\langle \mathbf{r}|\psi\rangle = \psi(\mathbf{r})$ و در نمایش $\{|\mathbf{p}\rangle\}$ با $\langle \mathbf{p}|\psi\rangle = \bar{\psi}(\mathbf{p})$ نشان داده می‌شود. می‌دانیم که [فرمول (E‑۷‑b)] $\langle\psi|$ و $\bar{\psi}(\mathbf{p})$ توسط یک تبدیل فوریه به‌هم مربوطند. این، در واقع همان چیزی است که

فرمولهای تغییر نمایش به‌دست می‌دهند :

$$\langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \int d^3p \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \psi \rangle$$

یعنی :

$$\psi(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d^3p \ e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}.\mathbf{r}} \ \bar{\psi}(\mathbf{p}) \tag{E-۱۷}$$

به‌طور معکوس :

$$\langle \mathbf{p} | \psi \rangle = \int d^3r \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \psi \rangle$$

یعنی :

$$\bar{\psi}(\mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d^3r \ e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}.\mathbf{r}} \ \psi(\mathbf{r}) \tag{E-۱۸}$$

با استفاده از فرمول عمومی (C-۵۶) ، می‌توان به‌آسانی از عناصر ماتریسی یک عملگر A در نمایش $\{ | \mathbf{r} \rangle \}$ ، یعنی ، از $\langle \mathbf{r}' | A | \mathbf{r} \rangle = A(\mathbf{r}', \mathbf{r})$ ، به‌عناصرماتریسی همان عملگر در نمایش $\{ | \mathbf{p} \rangle \}$ ، یعنی ، به $\langle \mathbf{p}' | A | \mathbf{p} \rangle = A(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ ، رفت :

$$A(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^{-3} \int d^3r \int d^3r' \ e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}.\mathbf{r} - \mathbf{p}'.\mathbf{r}')} \ A(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \tag{E-۱۹}$$

فرمول مشابهی ما را قادر می‌سازد تا $A(\mathbf{r}', \mathbf{r})$ را از روی $A(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ محاسبه کنیم .

۳ ـ عملگرهای R و P

a ـ تعریف .

فرض کنید $| \psi \rangle$ یک کت‌دلخواه از $\mathscr{E}_\mathbf{r}$ بوده و $\langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \psi(\mathbf{r}) \equiv \psi(x, y, z)$ تابع موج مربوطه باشد . بااستفاده از تعریف عملگر X ، کت :

$$| \psi' \rangle = X | \psi \rangle \tag{E-۲۰}$$

در پایه $\{ | \mathbf{r} \rangle \}$ ، توسط تابع $\langle \mathbf{r} | \psi' \rangle = \psi'(\mathbf{r}) \equiv \psi'(x, y, z)$ نمایش داده می‌شود به‌طوری که :

$$\psi'(x, y, z) = x \ \psi(x, y, z) \tag{E-۲۱}$$

از این رو، در نمایش $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ ، عملگر X با عملگری که در x ضرب می‌کند منطبق است. X ، اگر چه با طریقی که توابع موج را تبدیل می‌کند مشخص می‌شود، عملگری است که در فضای حالتهای $\mathscr{E}_{\mathbf{r}}$ عمل می‌کند. می‌توانیم به‌همین ترتیب، دو عملگر دیگر، Y و Z را وارد کنیم. بنابراین، X ، Y و Z را توسط فرمولهای زیر تعریف می‌کنیم:

$$\boxed{\begin{aligned}\langle \mathbf{r} | X | \psi \rangle &= x \langle \mathbf{r} | \psi \rangle \\ \langle \mathbf{r} | Y | \psi \rangle &= y \langle \mathbf{r} | \psi \rangle \\ \langle \mathbf{r} | Z | \psi \rangle &= z \langle \mathbf{r} | \psi \rangle\end{aligned}} \qquad \begin{aligned}&(E-۲۲-a)\\&(E-۲۲-b)\\&(E-۲۲-c)\end{aligned}$$

که در آنها، اعداد x ، y ، z دقیقاً" همان سه‌شاخصی هستند که کت $|\mathbf{r}\rangle$ را مشخص می‌کنند. X ، Y و Z را به‌عنوان" مؤلفه‌های" یک" عملگر برداری" $\mathbf{R}$ در نظر خواهیم گرفت: در حال حاضر، منظور، فقط به‌کار بردن یک نمادگذاری فشرده است، که توسط این واقعیت که x ، y و z مولفه‌های بردار معمولی $\mathbf{r}$ هستند پیشنهاد می‌شود.

کار با عملگرهای X ، Y ، Z در نمایش $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ خیلی آسان است. به‌عنوان‌مثال برای محاسبه عنصر ماتریسی $\langle \varphi | X | \psi \rangle$ ، کافی است رابطه بستاری (E ـ۵ـ a) رابین $\langle \varphi |$ و X قرار داده و از تعریف (E ـ۲۲) استفاده کنیم:

$$\begin{aligned}\langle \varphi | X | \psi \rangle &= \int d^3r \, \langle \varphi | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | X | \psi \rangle \\ &= \int d^3r \; \varphi^*(\mathbf{r}) \; x \; \psi(\mathbf{r})\end{aligned} \qquad (E-۲۳)$$

به‌طورمشابه، عملگر برداری $\mathbf{P}$ را توسط مؤلفه‌های p_x ، p_y ، p_z آن تعریف می‌کنیم، که عمل آن‌ها، درنمایش $\{|\mathbf{p}\rangle\}$ ، توسط روابط زیر داده می‌شود:

$$\boxed{\begin{aligned}\langle \mathbf{p} | P_x | \psi \rangle &= p_x \langle \mathbf{p} | \psi \rangle \\ \langle \mathbf{p} | P_y | \psi \rangle &= p_y \langle \mathbf{p} | \psi \rangle \\ \langle \mathbf{p} | P_z | \psi \rangle &= p_z \langle \mathbf{p} | \psi \rangle\end{aligned}} \qquad \begin{aligned}&(E-۲۴-a)\\&(E-۲۴-b)\\&(E-۲۴-c)\end{aligned}$$

که در آنها، p_x ، p_y ، p_z سه‌شاخصی هستند که در کت $|\mathbf{p}\rangle$ ظاهر می‌شوند.

حال معین کنیم که عملگر $\mathbf{P}$ در نمایش $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ چگونه عمل می‌کند. برای این منظور (رک بخش C ـ۵ـ d) ، از رابطه بستاری (E ـ۵ـ d) و ماتریس تبدیل (E ـ۱۶) استفاده می‌کنیم و نتیجه می‌گیریم:

$$\langle \mathbf{r} | P_x | \psi \rangle = \int d^3p \, \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | P_x | \psi \rangle$$
$$= (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d^3p \; e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \; p_x \; \bar{\psi}(\mathbf{p}) \qquad (E-۲۵)$$

در (E ـ۲۵)، تبدیل فوریه $p_x\bar{\psi}(\mathbf{p})$ ، یعنی، $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(\mathbf{r})$ را می‌شناسیم [رک پیوست ، رابطه (a ـ۳۸)] . از این رو:

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{P} | \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \nabla \langle \mathbf{r} | \psi \rangle \qquad (E-۲۶)$$

در نمایش $\{ \langle \mathbf{r} | \}$ ، عملگر $\mathbf{P}$ بر عملگر دیفرانسیلی $\frac{\hbar}{i}\nabla$ که بر توابع موج اعمال می‌شود، منطبق است. بنابر این محاسبه یک عنصر ماتریسی نظیر $\langle \varphi | P_x | \psi \rangle$ ، در نمایش $\{ | \mathbf{r} \rangle \}$ به‌روش زیر انجام می‌شود:

$$\langle \varphi | P_x | \psi \rangle = \int d^3r \, \langle \varphi | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | P_x | \psi \rangle$$
$$= \int d^3r \;\; \varphi^*(\mathbf{r}) \left[\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right] \psi(\mathbf{r}) \qquad (E-۲۷)$$

با قرار گرفتن در نمایش $\{ \langle \mathbf{r} | \}$ ، می‌توانیم جابجاگرهای بین عملگرهای X ، Y ، Z ، P_x ، P_y ، P_z را نیز محاسبه کنیم، به‌عنوان مثال :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | [X, P_x] | \psi \rangle &= \langle \mathbf{r} | (XP_x - P_xX) | \psi \rangle \\ &= x \langle \mathbf{r} | P_x | \psi \rangle - \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \langle \mathbf{r} | X | \psi \rangle \\ &= \frac{\hbar}{i} x \frac{\partial}{\partial x} \langle \mathbf{r} | \psi \rangle - \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} x \langle \mathbf{r} | \psi \rangle \\ &= i\hbar \langle \mathbf{r} | \psi \rangle \end{aligned} \qquad (E-۲۸)$$

این محاسبه برای تمام $|\psi\rangle$ ها و برای هرکت ازپایه $\langle \mathbf{r} |$ معتبراست . بدین‌ترتیب خواهیم داشت *:

---

* جابجاگر $[X, P_x]$ یک عملگر است، و در واقع، باید به‌صورت $[X, P_x] = i\hbar \mathbb{1}$ نوشته شود. ولی، غالبا" عملگر همانندی $\mathbb{1}$ را توسط عدد ۱ جایگزین خواهیم کرد، مگر وقتی که متمایز ساختن آن مهم باشد.

$$[X, P_x] = i\hbar \qquad (E-۲۹)$$

تمام جابجاگرهای دیگر بین مؤلفه‌های $\mathbf{R}$ و مؤلفه‌های $\mathbf{P}$ را با همین روش به‌دست‌می‌آوریم. نتیجه، می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود:

$$\boxed{\left.\begin{array}{l} [R_i, R_j] = 0 \\ [P_i, P_j] = 0 \\ [R_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij} \end{array}\right\} i, j = 1, 2, 3} \qquad (E-۳۰)$$

که در آنها، R_1 ، R_2 ، R_3 و P_1 ، P_2 ، P_3 به‌ترتیب X ، Y ، Z و P_x ، P_y ، P_z رامشخص‌می‌کنند. فرمولهای (E ـ۳۰) روابط جابجائی‌پذیری بندادی نامیده می‌شوند.

b ـ R و P هرمیتی‌اند

برای اینکه نشان دهیم که، به‌عنوان مثال، X یک عملگرهرمیتی است، می‌توانیم از فرمول (E ـ۲۳) استفاده کنیم:

$$\begin{aligned} \langle \varphi | X | \psi \rangle &= \int d^3r \ \varphi^*(\mathbf{r}) \ x \ \psi(\mathbf{r}) \\ &= \left[\int d^3r \ \psi^*(\mathbf{r}) \ x \ \varphi(\mathbf{r}) \right]^* \\ &= \langle \psi | X | \varphi \rangle^* \end{aligned} \qquad (E-۳۱)$$

از بخش e ـ۴ـ B ، می‌دانیم که معادله (E ـ۳۱) مشخصه یک عملگر هرمیتی است.

استدلالهای مشابه نشان می‌دهند که Y و Z نیز هرمیتی هستند. برای P_x ، P_y و P_z ، می‌توان‌ازنمایش $\{ |\mathbf{p}\rangle \}$ استفاده‌کرد، ودراین‌صورت‌محاسبات‌مشابه‌محاسبات‌فوق‌است.

جالب توجه است که با استفاده از معادله (E ـ۲۶) ، که‌عمل $\mathbf{P}$ در نمایش $\{ |\mathbf{r}\rangle \}$ را به‌دست می‌دهد، نشان دهیم‌که $\mathbf{P}$ هرمیتی‌است به‌عنوان‌مثال، فرمول (E‌ـ۲۷) را در نظر گرفته و از آن به‌روش جزء بجزء انتگرال می‌گیریم:

$$\begin{aligned} \langle \varphi | P_x | \psi \rangle &= \frac{\hbar}{i} \int dy \ dz \int_{-\infty}^{+\infty} dx \ \varphi^*(\mathbf{r}) \ \frac{\partial}{\partial x} \ \psi(\mathbf{r}) \\ &= \frac{\hbar}{i} \int dy \ dz \left\{ \Big[\varphi^*(\mathbf{r}) \ \psi(\mathbf{r}) \Big]_{x=-\infty}^{x=+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} dx \ \psi(\mathbf{r}) \ \frac{\partial}{\partial x} \varphi^*(\mathbf{r}) \right\} \end{aligned} \qquad (E-۳۲)$$

چون انتگرالی‌که حاصلضرب نرداری $\langle \psi | \varphi \rangle$ را به‌دست می‌دهد، همگرا است، وقتی $x \longrightarrow \pm\infty$ ، $\varphi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$ به‌سمت صفر میل می‌کند. بنابراین، اولین جمله طرف راست (E –۳۲) برابر صفر است، و:

$$\begin{aligned} \langle \varphi | P_x | \psi \rangle &= -\frac{\hbar}{i}\int d^3r \;\; \psi(\mathbf{r}) \; \frac{\partial}{\partial x}\varphi^*(\mathbf{r}) \\ &= \left[\frac{\hbar}{i}\int d^3r \;\; \psi^*(\mathbf{r}) \; \frac{\partial}{\partial x}\varphi(\mathbf{r})\right]^* \\ &= \langle \psi | P_x | \varphi \rangle^* \end{aligned} \qquad \text{(E –۳۳)}$$

می‌توان دیدکه حضورعددموهومی i ضروری‌است. بعلت‌تغییرعلامتی‌که‌توسط‌انتگرال‌گیری جزء به‌جزء وارد می‌شود، عملگر دیفرانسیلی $\frac{\partial}{\partial x}$ ، که روی توابع متعلق به $\mathscr{F}$ عمل می‌کند، هرمیتی نیست. ولی $i\frac{\partial}{\partial x}$ و $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ هرمیتی هستند.

c – ویژه بردارهای R و P

عمل عملگر X روی کت $\langle \mathbf{r}_0 |$ را در نظر بگیرید، برطبق (E –۲۲– a)، داریم:

$$\langle \mathbf{r} | X | \mathbf{r}_0 \rangle = x\langle \mathbf{r} | \mathbf{r}_0 \rangle = x\;\;\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0) = x_0\;\;\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0) = x_0\langle \mathbf{r} | \mathbf{r}_0 \rangle \qquad \text{(E –۳۴)}$$

این معادله بیان‌گر این واقعیت است که، در نمایش $\{\langle \mathbf{r} |\}$ ، مختصات کت $\langle \mathbf{r}_0 | X$ برابر است با مختصات کت $\langle \mathbf{r}_0 |$ ضربدر x_0 . بنابراین، داریم:

$$X | \mathbf{r}_0 \rangle = x_0 | \mathbf{r}_0 \rangle \qquad \text{(E –۳۵)}$$

استدلال مشابهی نشان می‌دهد که کتهای $\langle \mathbf{r}_0 |$ ، ویژه بردارهای عملگرهای Y و Z نیز هستند. با حذف شاخص صفر، که در این صورت غیر لازم است، می‌توانیم بنویسیم:

$$\boxed{\begin{aligned} X | \mathbf{r} \rangle &= x | \mathbf{r} \rangle \\ Y | \mathbf{r} \rangle &= y | \mathbf{r} \rangle \\ Z | \mathbf{r} \rangle &= z | \mathbf{r} \rangle \end{aligned}} \qquad \text{(E –۳۶)}$$

بنابراین کتهای $\langle \mathbf{r} |$ ، ویژه کتهای مشترک X ، Y و Z هستند، و بدین ترتیب نمادگذاری $\langle \mathbf{r} |$ که در بالا انتخاب کردیم، توجیه می‌شود؛ هر ویژه بردار توسط یک بردار $\mathbf{r}$ ، که مختصات x ، y ، z آن معرف سه‌شاخص پیوسته متناظر باویژه مقدارهای X ، Y و Z هستند، مشخص می‌شود.

با قرار گرفتن در نمایش $\{|\mathbf{p}\rangle\}$ استدلالهای مشابهی می‌توانند برای عملگر $\mathbf{P}$ ارائه شوند . در این صورت خواهیم داشت .

$$\boxed{\begin{aligned} P_x\,|\,\mathbf{p}\,\rangle &= p_x\,|\,\mathbf{p}\,\rangle \\ P_y\,|\,\mathbf{p}\,\rangle &= p_y\,|\,\mathbf{p}\,\rangle \\ P_z\,|\,\mathbf{p}\,\rangle &= p_z\,|\,\mathbf{p}\,\rangle \end{aligned}} \qquad (\text{E}-۳۷)$$

گوشزد :

این نتیجه می‌تواند از معادله (E –۲۶) ، که عمل $\mathbf{P}$ در نمایش $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ را می‌دهد نیز به‌دست ، آید . با استفاده از (E –۹) ، نتیجه می‌گیریم :

$$\begin{aligned} \langle\,\mathbf{r}\,|\,P_x\,|\,\mathbf{p}\,\rangle &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\langle\,\mathbf{r}\,|\,\mathbf{p}\,\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\;(2\pi\hbar)^{-3/2}\,e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \\ &= p_x\;(2\pi\hbar)^{-3/2}\,e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} = p_x\,\langle\,\mathbf{r}\,|\,\mathbf{p}\,\rangle \end{aligned} \qquad (\text{E}-۳۸)$$

تمام مؤلفه‌های کت $P_x|\mathbf{p}\rangle$ در نمایش $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ ، می‌توانند از ضرب کردن مؤلفه‌های کت $|\mathbf{p}\rangle$ در ثابت p_x به‌دست آیند ؛ $|\mathbf{p}\rangle$ یک ویژه کت P_x است با ویژه مقدار p_x .

d — R و P مشاهده‌پذیرند

روابط (E –۵– b) و (E –۵– d) بیانگر این واقعیتند که بردارهای $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ و بردارهای $\{|\mathbf{p}\rangle\}$ پایه‌هائی در $\mathscr{E}_\mathbf{r}$ تشکیل می‌دهند . در نتیجه ، R و P مشاهده‌پذیرند . بعلاوه ، ویژه مقدارهای x_0 ، y_0 ، z_0 متعلق به X ، Y ، Z ویژه بردار $|\mathbf{r}_0\rangle$ مربوطه را به‌طور یکتائی ، تعیین می‌کنند ؛ در نمایش $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ ، مختصات آن عبارتند از : $\delta(x-x_0)\delta(y-y_0)\delta(z-z_0)$. بنابراین ، مجموعه سه‌عملگر X ، Y ، Z یک م.ک.م.ج. در $\mathscr{E}_\mathbf{r}$ تشکیل می‌دهند .

به‌همین طریق می‌توان نشان داد که سه مؤلفه P ، یعنی ، P_x ، P_y ، P_z نیز یک م.ک.م.ج. در $\mathscr{E}_\mathbf{r}$ تشکیل می‌دهند .

توجه کنید که ، در $\mathscr{E}_\mathbf{r}$ ، X به‌تنهائی یک م.ک.م.ج. تشکیل نمی‌دهد . برای یک مقدار از شاخص x_0 ، شاخصهای y_0 و z_0 می‌توانند هر مقدار حقیقی‌ای بگیرند . بنابراین ،

هرویژه مقدار x_0 بینهایت تبهگن است . ازطرف دیگر درفضای حالت $\mathscr{E}_x$ وابسته‌به‌یک‌مسأله یک‌بعدی ، X یک م .ک.م .ج تشکیل می‌دهد : ویژه‌مقدار x_0 بطوریکتائی‌ویژه‌کت $|x_0\rangle$ متناظر راتعیین می‌کند ، مختصات آن ، درنمایش $\{|x\rangle\}$ عبارت‌است‌از $\delta(x-x_0)$.

گوشـزد :

تااینجا دو م .ک .م .ج در $\mathscr{E}_r$ پیدا کرده‌ایم ، $\{X, Y, Z\}$ و $\{P_x, P_y, P_z\}$. بعدا" با نمونه‌های دیگری مواجه خواهیم شد . به‌عنوان مثال ، مجموعه $\{X, P_y, P_z\}$ را در نظر بگیرید :

این سه مشاهده‌پذیر جابجائی‌پذیرند [معادلات (E–۳۰)] ، بعلاوه ، اگرسه‌ویژه مقدار x_0 ، p_{0y} و p_{0z} مشخص شوند ، فقط یک کت باآنها متناظراست ، که‌تابع موج وابسته به‌آن به‌صورت زیر نوشته می‌شود :

$$\psi_{x_0,p_{0y},p_{0z}}(x,y,z)=\delta(x-x_0)\ \frac{1}{2\pi\hbar}\,e^{\frac{i}{\hbar}(p_{0y}y+p_{0z}z)} \qquad (E-۳۹)$$

F . ضرب تانسوری فضاهای حالت*

۱ ــ مقدمــه

فضای حالتهای یک سیستم فیزیکی را ، در بالا ، بااستفاده از مفهوم تابع موج تک ذره‌ای معرفی کردیم . لیکن ، استدلال ما گاهی توابع موج یک بعدی و گاهی توابع موج سه‌بعدی را در بر می‌گرفت واضح است که فضای توابع مجذورا" انتگرال‌پذیر ، برای توابع‌یک متغیری $\psi(x)$ و برای توابع سه متغیری $\psi(\mathbf{r})$ یکی نیست : بنابراین ، $\mathscr{E}_r$ و $\mathscr{E}_x$ فضاهای متفاوتی هستند . مع‌ذالک ، به‌نظر می‌رسدکه $\mathscr{E}_r$ دراصل تعمیم $\mathscr{E}_x$ باشد . آیارابطه‌دقیقتری بین این دو فضا وجود دارد ؟

درین بخش، عمل ضرب تانسوری فضاهای برداری را تعریف و مطالعه کرده و آن را در مورد فضاهای حالتها به‌کار خواهیم برد . این امر ، بخصوص، سئوالی را که الان مطرح کردیم ، پاسخ خواهد داد : $\mathscr{E}_r$ می‌تواند از $\mathscr{E}_x$ ، و دوفضای دیگر $\mathscr{E}_y$ و $\mathscr{E}_z$ که نسبت**

---

* این بخش برای فهم فصل سوم ضروری نیست ، می‌توان آنرا بعدا" ، وقتی که بکاربردن ضرب تانسوری لازم شد (مکمل D_{IV} یا فصل نهم) ، موردمطالعه قرار داد .

** این عمل گاهی " ضرب کرونکری " نامیده می‌شود .

به‌آن همریخت هستند ، ساخته شود (بخش a ــ۴ــ F در زیر) .
به‌همین طریق ، بعداً (فصلهای ۴ و ۹) ، برای بعضی از ذرات ، باوجودیک تکانهٔ زاویه‌ای ذاتی یا اسپین سروکار پیدا خواهیم کرد . علاوه بر درجات آزادی خارجی (مکان ، تکانه) ، که بااستفاده از مشاهده‌پذیرهای R و P ی تعریف شده در $\mathscr{E}_r$ ، بررسی می‌شوند ، لازم خواهد بود که درجات آزادی داخلی را به‌حساب آوریم و مشاهده‌پذیرهای اسپینی را که‌در یک فضای حالتهای اسپین $\mathscr{E}_s$ عمل می‌کنند ، وارد کنیم . دراین صورت خواهیم دید که فضای حالتهای $\mathscr{E}$ ی یک ذرهٔ با اسپین عبارت است از حاصلضرب تانسوری $\mathscr{E}_r$ و $\mathscr{E}_s$.

بالاخره ، مفهوم ضرب تانسوری فضاهای حالتها به‌ما امکان خواهد داد تا مسألهٔ زیر را حل کنیم . فرض کنید (S_1) و (S_2) دوسیستم فیزیکی منزوی باشند (این دو سیستم ، به‌عنوان مثال ، آن‌قدر از هم دورند که برهم کنشهای آنها کاملاً قابل اغماض است) . فضاهای حالت متناظر با (S_1) و (S_2) ، به‌ترتیب ، عبارتند از $\mathscr{E}_1$ و $\mathscr{E}_2$. حال فرض کنیم که مجموعهٔ این دوسیستم یک سیستم فیزیکی (S) تشکیل دهند (که ، وقتی که این دوسیستم آن قدر به‌هم نزدیک باشند که برهم کنش کنند ، این امر گریز ناپذیر است) . دراین‌صورت فضای حالتهای $\mathscr{E}$ ی سیستم کل (S) چیست؟

ازین مثالها می‌توان دید که تعاریف و نتایج این بخش چه‌قدر در مکانیک‌کوانتومی مفیدند .

۲ ــ تعریف خواص ضرب تانسوری

فرض کنید $\mathscr{E}_1$ و $\mathscr{E}_2$ دوفضا * باشند که ابعادشان به‌ترتیب عبارتند از N_1 و N_2 (N_1 و N_2 می‌توانند محدود یا بینهایت باشند) . به‌بردارها و عملگرهای این فضاها ، بسته به‌اینکه متعلق به $\mathscr{E}_1$ یا $\mathscr{E}_2$ باشند یک شاخص (۱) یا (۲) نسبت خواهیم داد .

a ــ فضای حاصلضرب تانسوری $\mathscr{E}$

α ــ تعریف

بنا به‌تعریف ، فضای‌برداری $\mathscr{E}$ هنگامی حاصلضرب‌تانسوری $\mathscr{E}_1$ و $\mathscr{E}_2$ نامیده‌می‌شود:

---

* تعریفهای زیر می‌توانند به‌سادگی به‌ضرب تانسوری تعداد محدودی از فضاها تعمیم داده شود .

$$\mathscr{E} = \mathscr{E}_1 \otimes \mathscr{E}_2 \qquad \text{(F-1)}$$

که به هر زوج بردار، $|\varphi(1)\rangle$ متعلق به $\mathscr{E}_1$ و $|\chi(2)\rangle$ متعلق به $\mathscr{E}_2$، یک بردار از $\mathscr{E}$ که به‌صورت *:

$$|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle \qquad \text{(F-2)}$$

نشان داده می‌شود و حاصلضرب تانسوری $|\varphi(1)\rangle$ و $|\chi(2)\rangle$ نامیده می‌شود، وابسته‌باشد. این ارتباط شرایط زیر را تأمین می‌کند:

(۱) نسبت به ضرب در اعداد مختلط خطی است:

$$\begin{aligned} [\lambda\,|\varphi(1)\rangle] \otimes |\chi(2)\rangle &= \lambda[\,|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle] \\ |\varphi(1)\rangle \otimes [\mu\,|\chi(2)\rangle] &= \mu[\,|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle] \end{aligned} \qquad \text{(F-3)}$$

(۲) نسبت به‌جمع برداری توزیعی است:

$$\begin{aligned} |\varphi(1)\rangle \otimes [\,|\chi_1(2)\rangle + |\chi_2(2)\rangle] &= |\varphi(1)\rangle \otimes |\chi_1(2)\rangle + |\varphi(1)\rangle \otimes |\chi_2(2)\rangle \\ [\,|\varphi_1(1)\rangle + |\varphi_2(1)\rangle] \otimes |\chi(2)\rangle & \\ = |\varphi_1(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle &+ |\varphi_2(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle \end{aligned} \qquad \text{(F-4)}$$

(۳) وقتی در هریک از فضاهای $\mathscr{E}_1$ و $\mathscr{E}_2$ یک پایه انتخاب شد، $\{|u_i(1)\rangle\}$ برای $\mathscr{E}_1$ و $\{|v_l(2)\rangle\}$ برای $\mathscr{E}_2$، مجموعه بردارهای $|u_i(1)\rangle \otimes |v_l(2)\rangle$ یک‌پایه‌در $\mathscr{E}$ تشکیل می‌دهند. اگر N_1 و N_2 محدود باشند، در نتیجه، بعد $\mathscr{E}$ برابراست با N_1N_2.

β ـ بردارهای $\mathscr{E}$

(۱) ابتدا یک بردار حاصلضرب تانسوری $|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle$ را در نظر بگیریم. $|\varphi(1)\rangle$ و $|\chi(2)\rangle$ هرچه باشند، می‌توانند به‌ترتیب در پایه‌های $\{|u_i(1)\rangle\}$ و $\{|v_l(2)\rangle\}$ بسط داده شوند:

$$\begin{aligned} |\varphi(1)\rangle &= \sum_i a_i\,|u_i(1)\rangle \\ |\chi(2)\rangle &= \sum_l b_l\,|v_l(2)\rangle \end{aligned} \qquad \text{(F-5)}$$

بااستفاده از خواص تشریح شده در بخش α، بسط بردار $|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle$ در پایه

---

* این بردار می‌تواند یا به‌صورت $|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle$ یا به‌صورت $|\chi(2)\rangle \otimes |\varphi(1)\rangle$ نوشته شود: ترتیب دو بردار هیچ اهمیتی ندارد.

$\{ |u_i(1)\rangle \otimes |v_l(2)\rangle \}$ ، می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود:

$$|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle = \sum_{i,l} a_i b_l \, |u_i(1)\rangle \otimes |v_l(2)\rangle \qquad (\text{F}-۶)$$

بنابراین، مؤلفه‌های یک‌بردار حاصلضرب‌تانسوری دوبردار عبارتند از حاصلضرب‌های مؤلفه‌های آن دوبردار.

(۲) بردارهائی در $\mathscr{E}$ وجود دارند که حاصلضرب تانسوری یک بردار از $\mathscr{E}_1$ در یک بردار از $\mathscr{E}_2$ نیستند. چون $\{ |u_i(1)\rangle \otimes |v_l(2)\rangle \}$ بنا به‌فرض یک پایه در $\mathscr{E}$ تشکیل می‌دهد، عمومی‌ترین بردار $\mathscr{E}$ توسط رابطه زیر بیان می‌شود:

$$|\psi\rangle = \sum_{i,l} c_{i,l} \, |u_i(1)\rangle \otimes |v_l(2)\rangle \qquad (\text{F}-۷)$$

اگر $N_1 N_2$ عدد مختلط داده شده باشد، همیشه نمی‌توان آنها را به‌صورت حاصلضربهای، $a_i b_l$ ، از N_1 عدد a_i و N_2 عدد b_l قرار داد. ازاین رو، عموماً، بردارهای $|\varphi(1)\rangle$ و $|\chi(2)\rangle$ ، که $|\psi\rangle$ حاصلضرب تانسوری آنها باشد وجود ندارند. ولی، یک بردار دلخواه از $\mathscr{E}$ همواره می‌تواند به‌یک ترکیب خطی از بردارهای حاصلضرب تانسوری، به‌صورتی که توسط فرمول (F –۷) نشان داده شده است، تجزیه شود.

γ . حاصلضرب نرداری در $\mathscr{E}$

وجود حاصلضربهای نرداری در $\mathscr{E}_1$ و $\mathscr{E}_2$ به‌ما اجازه می‌دهد تا در $\mathscr{E}$ نیز یک حاصل ضرب نرداری تعریف کنیم. ابتدا حاصلضرب نرداری $|\varphi(1)\chi(2)\rangle = |\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle$ در $|\varphi'(1)\chi'(2)\rangle = |\varphi'(1)\rangle \otimes |\chi'(2)\rangle$ را به‌صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$\langle \varphi'(1)\ \chi'(2) | \varphi(1)\ \chi(2)\rangle = \langle \varphi'(1) | \varphi(1)\rangle \langle \chi'(2) | \chi(2)\rangle \qquad (\text{F}-۸)$$

برای دوبردار دلخواه از $\mathscr{E}$ ، کافی است از خواص اساسی حاصلضرب نرداری [معادلات (B –۹) ، (B –۱۰) و (B –۱۱)] استفاده کنیم، زیرا هریک ازین بردارها یک ترکیب خطی از بردارهای حاصلضرب تانسوری است.

بخصوص توجه کنید که، پایه $\{ |u_i(1)\, v_l(2)\rangle = |u_i(1)\rangle \otimes |v_l(2)\rangle \}$ وقتی راست هنجار است که هریک از پایه‌های $\{ |u_i(1)\rangle \}$ و $\{ |v_l(2)\rangle \}$ راست هنجار باشند:

$$\begin{aligned}\langle u_{i'}(1)\ v_{l'}(2) | u_i(1)\ v_l(2)\rangle &= \langle u_{i'}(1) | u_i(1)\rangle \langle v_{l'}(2) | v_l(2)\rangle \\ &= \delta_{ii'}\delta_{ll'}\end{aligned} \qquad (\text{F}-۹)$$

b ــ حاصلضرب تانسوری عملگرها

(۱) ابتدا، یک عملگر خطی $A(1)$ را که در $\mathscr{E}_1$ تعریف شده است، در نظربگیرید به‌این عملگر، یک عملگر خطی $\tilde{A}(1)$ وابسته می‌کنیم که در فضای $\mathscr{E}$ عمل‌کند، وآنراگسترش $A(1)$ در $\mathscr{E}$ می‌نامیم، و به‌طریق زیر مشخص می‌شود: وقتی $\tilde{A}(1)$ به‌یک بردار حاصلضرب تانسوری $|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle$ اعمال شود، بنابه تعریف، داریم:

$$\tilde{A}(1)[|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle] = [A(1)|\varphi(1)\rangle] \otimes |\chi(2)\rangle \qquad (\text{F}-۱۰)$$

بنابراین، فرض خطی بودن $\tilde{A}(1)$ برای تعیین کامل آن، کافی است. یک بردار دلخواه $|\psi\rangle$ از $\mathscr{E}$ می‌تواند به‌صورت (F ـ۷) نوشته شود، سپس تعریف (F ـ۱۰) عمل $\tilde{A}(1)$ روی $|\psi\rangle$ را به‌دست می‌دهد:

$$\tilde{A}(1)|\psi\rangle = \sum_{i,l} c_{i,l}[A(1)|u_i(1)\rangle] \otimes |v_l(2)\rangle \qquad (\text{F}-۱۱)$$

به‌روش مشابهی، گسترش $\tilde{B}(2)$ ی یک عملگر $B(2)$ را که از ابتدا در $\mathscr{E}_2$ تعریف‌شده است، به‌دست می‌آوریم.

(۲) حال، فرض کنید $A(1)$ و $B(2)$ دوعملگرخطی باشند که به‌ترتیب در $\mathscr{E}_1$ و $\mathscr{E}_2$ عمل می‌کنند. حاصلضرب تانسوری آنها، $A(1) \otimes B(2)$، یک عملگر خطی در $\mathscr{E}$ است که توسط رابطه زیر، که عمل آن را روی بردارهای حاصلضرب تانسوری توصیف می‌کند، تعریف می‌شود:

$$[A(1) \otimes B(2)][|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle] = [A(1)|\varphi(1)\rangle] \otimes [B(2)|\chi(2)\rangle] \quad (\text{F}-۱۲)$$

در اینجا نیز، این تعریف برای مشخص کردن $A(1) \otimes B(2)$ کافی است.

گوشزدها:

(i) گسترشهای عملگرها موارد خاصی از حاصلضربهای تانسوری هستند: اگر $\mathbb{1}(1)$ و $\mathbb{1}(2)$ به‌ترتیب عملگرهای همانندی در $\mathscr{E}_1$ و $\mathscr{E}_2$ باشند، $\tilde{A}(1)$ و $\tilde{B}(2)$ می‌توانند به‌صورت زیر نوشته شوند:

$$\begin{aligned}\tilde{A}(1) &= A(1) \otimes \mathbb{1}(2) \\ \tilde{B}(2) &= \mathbb{1}(1) \otimes B(2)\end{aligned} \qquad (\text{F}-۱۳)$$

بر عکس، حاصلضرب تانسوری $A(1) \otimes B(2)$ برحاصلضرب معمولی دوعملگر $\tilde{A}(1)$ و $\tilde{B}(2)$ از $\mathscr{E}$ منطبق است:

$$A(1) \otimes B(2) = \tilde{A}(1)\tilde{B}(2) \qquad (\text{F}-۱۴)$$

(ii) به‌آسانی می‌توان‌نشان دادکه دواپراتورنظیر $\tilde{A}(1)$ و $\tilde{B}(2)$ در $\mathscr{E}$ جابجائی‌پذیرند:

$$[\tilde{A}(1), \tilde{B}(2)] = 0 \qquad (\text{F}-۱۵)$$

باید ثابت کنیم که $\tilde{A}(1)\tilde{B}(2)$ و $\tilde{B}(2)\tilde{A}(1)$ وقتی روی یک بردار دلخواه از پایـــه $\{ | u_i(1) \rangle \otimes | v_l(2) \rangle \}$ عمل کنند نتیجه یکسانی حاصل می‌شود:

$$\begin{aligned} \tilde{A}(1)\tilde{B}(2) | u_i(1) \rangle \otimes | v_l(2) \rangle &= \tilde{A}(1) \; | u_i(1) \rangle \otimes [B(2) | v_l(2) \rangle] \\ &= [A(1) | u_i(1) \rangle] \otimes [B(2) | v_l(2) \rangle] \qquad (\text{F}-۱۶) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{B}(2)\tilde{A}(1) | u_i(1) \rangle \otimes | v_l(2) \rangle &= \tilde{B}(2) \; [A(1) | u_i(1) \rangle] \otimes | v_l(2) \rangle \\ &= [A(1) | u_i(1) \rangle] \otimes [B(2) | v_l(2) \rangle] \qquad (\text{F}-۱۷) \end{aligned}$$

(iii) تصویرگر روی بردار حاصلضرب تانسوری $| \varphi(1)\chi(2) \rangle = | \varphi(1) \rangle \otimes | \chi(2) \rangle$ که عملگری‌است‌که در $\mathscr{E}$ عمل می‌کند، باضرب تانسوری‌تصویرگرهای روی $| \varphi(1) \rangle$ و $| \chi(2) \rangle$ به‌دست می‌آید:

$$| \varphi(1)\chi(2) \rangle \langle \varphi(1)\chi(2) | = | \varphi(1) \rangle \langle \varphi(1) | \otimes | \chi(2) \rangle \langle \chi(2) | \qquad (\text{F}-۱۸)$$

این رابطه بلافاصله از تعریف ضرب نرداری در $\mathscr{E}$ نتیجه می‌شود.

(iv) درست نظیر بردارها، عملگرهائی در $\mathscr{E}$ وجود دارند که حاصلضربهای تانسوری یک عملگر از $\mathscr{E}_1$ و یک عملگر از $\mathscr{E}_2$ نیستند.

c ـ نمادگذاری

در مکانیک کوانتومی، نمادگذاری‌ای که عموما" به‌کار می‌رود، شکل ساده شده‌ای است ازآنچه که در اینجا تعریف کرده‌ایم. این همان چیزی است‌که خواهیم پذیرفت،ولی اهمیت دارد که‌آنرا در پرتو بحث قبلی، به‌طور صحیحی تعبیر کنیم.

قبل از همه، نماد $\otimes$ که نمایش دهنده حاصلضرب تانسوری است حذف شده، و بردارها و عملگرهائی که باید به‌طور تانسوری درهم ضرب شوند کنارهم گذاشته خواهنـــد شد:

$$|\varphi(1)\rangle|\chi(2)\rangle \quad \text{بەمعنای} \quad |\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle \ \text{است} \qquad (\text{F}-۱۹)$$

$$A(1)B(2) \quad \text{بەمعنای} \quad A(1) \otimes B(2) \ \text{است} \qquad (\text{F}-۲۰)$$

بعلاوه گسترش ، یک عملگر از $\mathscr{E}_1$ یا $\mathscr{E}_2$ در $\mathscr{E}$ بەهمان طریقی که خود این عملگر نوشته می‌شود ، نوشته خواهد شد :

$$A(1) \quad \text{بەمعنای} \quad \tilde{A}(1) \quad \text{یا} \quad A(1) \ \text{است} \qquad (\text{F}-۲۱)$$

در مورد (۱۹ــ F) هیچ اشتباهی پیش نخواهد آمد : تا بەحال ، هرگز دو کت را ، مانند اینجا ، یکی پس از دیگری ننوشته‌ایم ، مخصوصا " توجه کنید که عبارت $\langle\varphi|\langle\psi|$ ، که در آن $\langle\psi|$ و $\langle\varphi|$ بەیک فضای $\mathscr{E}$ تعلق دارند ، درین فضا تعریف نشده است : این عبارت نشان دهنده یک بردار از فضائی است که حاصلضرب تانسوری $\mathscr{E}$ در خودش می‌باشد .

از طرف دیگر ، نمادگذاری در (۲۰ــ F) و (۲۱ــ F) قدری مبهم است ، بخصوص در (۲۱ــ F) ، که در آن دوعملگر مختلف توسط یک نماد ، نمایش داده شده‌اند . لیکن ، ممکن خواهد بود که آنها را در عمل ، توسط برداری که این نماد برآن اعمال می‌شود ، از یکدیگر تمیزدهیم : بەمفهوم دقیق ، بسته بەاینکه این بردار از $\mathscr{E}$ یا از $\mathscr{E}_1$ باشد ، با $\tilde{A}(1)$ یا $A(1)$ سروکارخواهیم‌داشت . امافرمول (۲۰ــ F) ، وقتی $\mathscr{E}_1$ و $\mathscr{E}_2$ متفاوت باشند ، هیچ مشکلی مطرح نمی‌سازد ، زیرا ، تاکنون ، حاصلضربهای عملگرهائی را تعریف کرده‌ایم کەدر یک‌فضا عمل‌می‌کنند . بعلاوه ، اگر $A(1)$ و $B(2)$ ، درواقع ، بەعنوان‌معرفهای $\tilde{A}(1)$ و $\tilde{B}(2)$ تعبیرشوند ، $A(1)\,B(2)$ را می‌توان یک حاصلضرب معمولی از عملگرهای $\mathscr{E}$ درنظر گرفت [معادله (۱۴ــ F)] .

۳ ــ معادلات ویژه مقداری در فضای حاصلضرب

بردارهائی از $\mathscr{E}$ که حاصلضربهای تانسوری یک بردار از $\mathscr{E}_1$ و یک بردار از $\mathscr{E}_2$ می‌باشند ، در بحث فوق نقش مهمی ایفا می‌کنند . خواهیم دید که برای گسترشهای عملگرهای $\mathscr{E}_1$ و $\mathscr{E}_2$ نیز این چنین است .

a ــ ویژه مقدارها و ویژه بردارهای عملگرهای گسترش یافته

α ــ معادله ویژه مقداری $A(1)$

یک عملگر $A(1)$ درنظربگیرید، که برای آن، در $\mathscr{E}_1$، تمام ویژه حالتها و ویژه مقدارها را می‌دانیم. فرض خواهیم کرد که، به‌عنوان مثال، طیف $A(1)$ تماماً "گسسته‌باشد:

$$A(1)|\varphi_n^i(1)\rangle = a_n|\varphi_n^i(1)\rangle \quad ; \quad i = 1, 2, ..., g_n \qquad (\text{F}-۲۲)$$

می‌خواهیم معادله ویژه مقداری گسترش $A(1)$ در $\mathscr{E}$ را حل کنیم:

$$A(1)|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle; \quad |\psi\rangle \in \mathscr{E} \qquad (\text{F}-۲۳)$$

می‌توان بلافاصله از (F ــ ۱۰) دید که، $\langle \chi(2)|$ هرچه باشد، هربرداری به‌صورت $\langle \chi(2)| \langle \varphi_n^i(1)|$ یک ویژه بردار $A(1)$ با ویژه مقدار a_n است، زیرا:

$$\begin{aligned} A(1)|\varphi_n^i(1)\rangle|\chi(2)\rangle &= [A(1)|\varphi_n^i(1)\rangle]|\chi(2)\rangle \\ &= a_n|\varphi_n^i(1)\rangle|\chi(2)\rangle \end{aligned} \qquad (\text{F}-۲۴)$$

حال نشان دهیم‌که وقتی $A(1)$ یک‌مشاهده‌پذیردر $A(1)$ باشد، تمام‌جوابهای (F ــ ۲۳) می‌توانند به‌این طریق به‌دست آیند. دراین صورت مجموعه$\langle \varphi_n^i(1)|$یک پایه‌در $\mathscr{E}_1$ تشکیل می‌دهد. در نتیجه، دستگاه بردارهای راست هنجار $\langle \psi_n^{i,l}|$، به‌طوری که

$$|\psi_n^{i,l}\rangle = |\varphi_n^i(1)\rangle|v_l(2)\rangle \qquad (\text{F}-۲۵)$$

که درآن$\{ \langle v_l(2)| \}$ یک پایه از $\mathscr{E}_2$ است، نیز یک پایه در $\mathscr{E}$ تشکیل می‌دهد. بنابراین یک پایه راست هنجار متشکل از ویژه بردارهای $A(1)$ در $\mathscr{E}$، $\{ \langle \psi_n^{i,l}| \}$، داریم که بدین معنا است که معادله (F ــ ۲۳) حل شده است.

نتایج زیر را می‌توان ازآن استخراج کرد:

ــ اگر $A(1)$ یک مشاهده‌پذیردر $\mathscr{E}_1$ باشد، یک مشاهده‌پذیر در $\mathscr{E}$ نیز خواهد بود. این مطلب از این واقعیت که گسترش $A(1)$ هرمیتی است و اینکه $\{ \langle \psi_n^{i,l}| \}$ یک پایه در $\mathscr{E}$ تشکیل می‌دهد، حاصل می‌شود.

ــ طیف $A(1)$ در $\mathscr{E}$ و در $\mathscr{E}_1$ یکی‌است: همان ویژه‌مقدارهای a_n که‌در (F ــ ۲۲) ظاهر می‌شوند در (F ــ ۲۴) نیز ظاهر می‌شوند.

ــ مع‌ذالک ، یک ویژه مقدار a_n که‌در $\mathscr{E}_1$ ، g_n بار تبهگن است ، در $\mathscr{E}$ ، دارای درجه تبهگنی $N_2 \times g_n$ است . می‌دانیم‌که ویژه زیر فضای وابسته به a_n در $\mathscr{E}$ توسط کتهای $|\psi_n^{i,l}\rangle = |\varphi_n^i(1)\rangle |v_l(2)\rangle$ پــدیــد می‌آیــد ، کــه در آن n ثابت و $i = 1, 2, ..., g_n$ و $l = 1, 2, ..., N_2$ است . بنابراین ، حتی اگر a_n در $\mathscr{E}_1$ ساده باشد ، در $\mathscr{E}$ ، N_2 بار تبهگن است .

تصویرگر روی ویژه زیر فضای متناظر با یک ویژه مقدار a_n ، در $\mathscr{E}$ ، به‌صورت زیــر نوشته می‌شود [رک (F ــ۱۸)]:

$$\sum_{i,l} |\psi_n^{i,l}\rangle\langle\psi_n^{i,l}| = \sum_{i,l} |\varphi_n^i(1)\rangle\langle\varphi_n^i(1)| \otimes |v_l(2)\rangle\langle v_l(2)| = \sum_i |\varphi_n^i(1)\rangle\langle\varphi_n^i(1)| \otimes \mathbb{1}(2) \qquad \text{(F ــ۲۶)}$$

که در آن از رابطه بستاری نسبت به‌پایه $\{|v_l(2)\rangle\}$ در $\mathscr{E}_2$ استفاده کرده‌ایم . ازاین رو این تصویرگر گسترش تصویرگر $P_n(1) = \sum_i |\varphi_n^i(1)\rangle\langle\varphi_n^i(1)|$ است که وابسته به a_n در $\mathscr{E}_1$ می‌باشد .

β . معادله ویژه مقداری $A(1) + B(2)$

غالبا" احتیاج داریم که ، در یک فضای حاصلضرب تانسوری نظیر $\mathscr{E}$ ، معــادلات ویژه مقداری را برای عملگرهائی به‌شکل زیر حل کنیم :

$$C = A(1) + B(2) \qquad \text{(F ــ۲۷)}$$

که در آن $A(1)$ و $B(2)$ مشاهده‌پذیرهائی هستند که ویژه مقدارهــا و ویژه بــردارهایشان را به‌ترتیب در $\mathscr{E}_1$ و $\mathscr{E}_2$ می‌دانیم :

$$\begin{aligned} A(1)|\varphi_n(1)\rangle &= a_n|\varphi_n(1)\rangle \\ B(2)|\chi_p(2)\rangle &= b_p|\chi_p(2)\rangle \end{aligned} \qquad \text{(F ــ۲۸)}$$

[برای ساده‌کردن نمادگذاری ، فرض می‌کنیم‌که طیفهای $A(1)$ و $B(2)$ ، در $\mathscr{E}_1$ و $\mathscr{E}_2$ گسسته و ناتبهگن هستند].

$A(1)$ و $B(2)$ جابجائی‌پذیرند [فرمولهای (F ــ۱۶) و (F ــ۱۷)] ، $|\varphi_n(1)\rangle|\chi_p(2)\rangle$ که در $\mathscr{E}$ یک پایه تشکیل می‌دهند ، ویژه بردارهای مشترک $A(1)$ و $B(2)$ می‌باشند :

$$A(1)|\varphi_n(1)\rangle|\chi_p(2)\rangle = a_n|\varphi_n(1)\rangle|\chi_p(2)\rangle$$
$$B(2)|\varphi_n(1)\rangle|\chi_p(2)\rangle = b_p|\varphi_n(1)\rangle|\chi_p(2)\rangle \quad (\text{F}-۲۹)$$

این بردارها، ویژه بردارهای C نیز هستند:

$$C|\varphi_n(1)\rangle|\chi_p(2)\rangle = (a_n + b_p)|\varphi_n(1)\rangle|\chi_p(2)\rangle \quad (\text{F}-۳۰)$$

این رابطه مستقیما" جواب معادله ویژه مقداری C را بهما می‌دهند.

بنابراین: ویژه‌مقدارهای $C = A(1) + B(2)$ مجموع یک‌ویژه مقدار $A(1)$ ویک ویژه‌مقدار $B(2)$ است. می‌توان یک‌پایه از ویژه بردارهای C پیدا کرد که حاصلضربهای تانسوری یک ویژه بردار $A(1)$ و یک ویژه بردار $B(2)$ باشند.

گوشزد:

معادله (F –۳۰) نشان می‌دهدکه‌ویژه‌مقدارهای C همگی‌به‌صورت $c_{np} = a_n + b_p$ می‌باشند. اگر دو زوج متفاوت از مقادیر n و p که برای c_{np} یک مقدار مساوی بدهند وجود نداشته باشد، c_{np} غیر تبهگن است (به‌خاطرآوریدکه فرض‌کرده‌ایم a_n و b_p به‌ترتیب در $\mathscr{E}_1$ و $\mathscr{E}_2$ نا تبهگن هستند). در این مورد ویژه بردار C لزوما" عبارت است از حاصلضرب تانسوری $|\varphi_n(1)\rangle|\chi_p(2)\rangle$. اگر، از طرف دیگر ویژه مقدار c_{np}، به‌عنوان مثال، دوبارتبهگن‌باشد (یک m و یک q وجودداشته باشد به‌طوری که $c_{mq} = c_{np}$)، آنچه می‌توان ادعاکرد این‌است‌که هر ویژه بردار C متناظر با این ویژه مقدار، به‌صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\lambda|\varphi_n(1)\rangle|\chi_p(2)\rangle + \mu|\varphi_m(1)\rangle|\chi_q(2)\rangle \quad (\text{F}-۳۱)$$

که درآن λ و μ اعداد مختلط دلخواهی هستند. بنابر این، دراین موردویژه بردارهائی از C وجود دارند که حاصلضربهای تانسوری نیستند.

b – مجموعه‌های کامل مشاهده‌پذیرهای جابجائی پذیر در $\mathscr{E}$.

بالاخره می‌خواهیم نشان دهیم که اگر در هردو فضای $\mathscr{E}_1$ و $\mathscr{E}_2$ یک م.ک.م.ج. انتخاب شده باشد، به‌دست‌آوردن یک م.ک.م.ج در $\mathscr{E}$ ساده و فوری است.

به‌عنوان یک مثال، موردی رادرنظربگیریدکه $A(1)$ به‌تنهائی یک م.ک.م.ج در $\mathscr{E}_1$ تشکیل دهد، و م.ک.م.ج در $\mathscr{E}_2$ ازدومشاهده‌پذیر $B(2)$ و $C(2)$ تشکیل‌شده‌باشد. این‌مطلب بدان‌معناست که (رک به‌بخش d ـ۳ـ D) تمام ویژه‌مقدارهای $A(1)$، a_n، در $\mathscr{E}_1$ ناتبهگن‌اند:

$$A(1) \mid \varphi_n(1) \rangle = a_n \mid \varphi_n(1) \rangle \tag{F ـ۳۲}$$

که درآن کت $\langle (1)\varphi_n |$، باتقریب یک ضریب ثابت، یکتا است. از طرف دیگر، در $\mathscr{E}_2$، بعضی‌ازویژه‌مقدارهای $B(2)$، یعنی b_p، و همینطور بعضی از ویژه‌مقدارهای $C(2)$، یعنی c_r تبهگن‌هستند. باوجود این، پایهٔ ویژه بردارهای‌مشترک $B(2)$ و $C(2)$، در $\mathscr{E}_2$ یکتا است، زیرا تنها یک‌کت (باتقریب یک ضریب ثابت) وجود داردکه ویژه بردار $B(2)$ و $C(2)$ باویژه مقدارهای تعیین شده b_p و c_r، باشد:

$$\left\{\begin{array}{l} B(2) \mid \chi_{pr}(2) \rangle = b_p \mid \chi_{pr}(2) \rangle \\ C(2) \mid \chi_{pr}(2) \rangle = c_r \mid \chi_{pr}(2) \rangle \\ \mid \chi_{pr}(2) \rangle \quad \text{با تقریب یک ضریب ثابت یکتا است} \end{array}\right. \tag{F ـ۳۳}$$

در $\mathscr{E}$، هریک ازویژه‌مقدارهای a_n، N_2 بارتبهگن‌هستند (رک بخش a ـ۲ـ F). بنابراین $A(1)$ دیگر به‌تنهائی یک م.ک.م.ج تشکیل می‌دهد. همینطور، N_1 کت مستقل خطی وجوددارندکه ویژه بردارهای $B(2)$ و $C(2)$ با ویژه‌مقدارهای به‌ترتیب b_p و c_r هستند و مجموعه $\{B(2), C(2)\}$ نیزکامل‌نیست. امادربخش a ـ۳ـF دیدیم‌کوویژه‌بردارهائی‌که‌بین سه مشاهده پذیر $A(1)$، $B(2)$ و $C(2)$ مشترکند عبارتنداز $\langle (2)\chi_{pr} | \langle (1)\varphi_n | = \langle (2)\chi_{pr}(1)\varphi_n |$:

$$\begin{array}{l} A(1) \mid \varphi_n(1) \ \chi_{pr}(2) \rangle = a_n \mid \varphi_n(1) \ \chi_{pr}(2) \rangle \\ B(2) \mid \varphi_n(1) \ \chi_{pr}(2) \rangle = b_p \mid \varphi_n(1) \ \chi_{pr}(2) \rangle \\ C(2) \mid \varphi_n(1) \ \chi_{pr}(2) \rangle = c_r \mid \varphi_n(1) \ \chi_{pr}(2) \rangle \end{array} \tag{F ـ۳۴}$$

دستگاه $\{ \langle (2)\chi_{pr}(1)\varphi_n | \}$ یک‌پایه‌در $\mathscr{E}$ تشکیل‌می‌دهد، زیرا $\{ \langle (1)\varphi_n | \}$ و $\{ \langle (2)\chi_{pr} | \}$ به‌ترتیب در $\mathscr{E}_1$ و $\mathscr{E}_2$ یک پایه تشکیل می‌دهند. بعلاوه، اگر یک مجموعه از سه‌ویژه مقدار $\{a_n, b_p, c_r\}$ انتخاب شود، فقط یک بردار $\langle (2)\chi_{pr}(1)\varphi_n |$ باآن متناظر است. از این رو $A(1)$، $B(2)$ و $C(2)$ یک م.ک.م.ج. در $\mathscr{E}$ تشکیل می‌دهند.

استدلال قبلی‌می‌تواند بدون هیچ مشکلی تعمیم داده شود: با ملحق کردن دو مجموعه از مشاهده‌پذیرهای جابجائی پذیری که به‌ترتیب در $\mathscr{E}_1$ و $\mathscr{E}_2$ کامل هستند، می‌توان

یک مجموعه کامل از مشاهده‌پذیرهای جابجائی‌پذیر در $\mathscr{E}$ به‌دست آورد.

۴ ـ کاربردها

a ـ حالتهای ذره در یک و سه بعد

α ـ فضاهای حالت

باردیگر، باتوجه به‌بحث قبلی، سئوال مطرح شده در مقدمه (بخش F ـ ۱) را در نظر بگیرید: $\mathscr{E}_x$ و $\mathscr{E}_r$ چگونه به‌یکدیگر مربوط می‌شوند؟

$\mathscr{E}_x$ عبارت است از فضای حالتهای یک ذره در یک بعد، یعنی، فضای حالتهای وابسته به‌توابع موج $\varphi(x)$. در $\mathscr{E}_x$، مشاهده‌پذیر X که در بخش E ـ ۲ مطالعه شد، به‌تنهائی یک م.ک.م.ج. تشکیل می‌دهد (بخش d ـ ۲ ـ E)، ویژه‌بردارهای آن کتهای پایه نمایش $\{|x\rangle\}$ هستند. یک بردار $|\varphi\rangle$ از $\mathscr{E}$، دراین نمایش، توسط تابع موج $\varphi(x) = \langle x|\varphi\rangle$ مشخص‌می‌شود، بخصوص‌کت‌پایه $|x_0\rangle$ متناظراست با $\xi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$

به‌همین‌طریق، می‌توان فضاهای $\mathscr{E}_y$ و $\mathscr{E}_z$ وابسته به‌توابع‌موج $\chi(y)$ و $\omega(z)$ را وارد کرد. مشاهده‌پذیر Y یک م.ک.م.ج. در $\mathscr{E}_y$ تشکیل می‌دهد، همینطور Z در $\mathscr{E}_y$. ویژه بردارهای متناظربه‌ترتیب عبارتند ازکتهای پایهٔ نمایشهای $\{|y\rangle\}$ و $\{|z\rangle\}$ در $\mathscr{E}_y$ و $\mathscr{E}_z$. یک بردار $|\chi\rangle$ از $\mathscr{E}_y$ (یا $|\omega\rangle$ از $\mathscr{E}_z$) درنمایش $\{|y\rangle\}$ (یا $\{|z\rangle\}$) توسط تابع $\chi(y) = \langle y|\chi\rangle$ (یا $\omega(z) = \langle z|\omega\rangle$) مشخص می‌شود. تابعی‌که به‌کت $|y_0\rangle$ (یا $|z_0\rangle$) مربوط می‌شود عبارت است از $\delta(y - y_0)$ (یا $\delta(z - z_0)$).

اکنون ضرب تانسوری زیر را تشکیل دهیم:

$$\mathscr{E}_{xyz} = \mathscr{E}_x \otimes \mathscr{E}_y \otimes \mathscr{E}_z \qquad \text{(F ـ ۳۵)}$$

از ضرب تانسوری پایه‌های $\{|x\rangle\}$، $\{|y\rangle\}$ و $\{|z\rangle\}$، یک پایه در $\mathscr{E}_{xyz}$ به‌دست می‌آید. این پایه را توسط $\{|x, y, z\rangle\}$ نمایش خواهیم داد که درآن:

$$|x, y, z\rangle = |x\rangle|y\rangle|z\rangle \qquad \text{(F ـ ۳۶)}$$

کتهای پایه عبارتند از ویژه بردارهای مشترک عملگرهای X، Y و Z که به $\mathscr{E}_{xyz}$ گسترش داده شده باشند:

$$\begin{aligned} X\,|\,x, y, z\,\rangle &= x\,|\,x, y, z\,\rangle \\ Y\,|\,x, y, z\,\rangle &= y\,|\,x, y, z\,\rangle \\ Z\,|\,x, y, z\,\rangle &= z\,|\,x, y, z\,\rangle \end{aligned} \qquad (\text{F}-۳۷)$$

از این‌رو، $\mathscr{E}_{xyz}$ به $\mathscr{E}_{\mathbf{r}}$، فضای حالتهای یک ذرهٔ سه‌بعدی، و $|\,x, y, z\,\rangle$ بر $|\,\mathbf{r}\,\rangle$ منطبق است:

$$|\,x, y, z\,\rangle \equiv |\,\mathbf{r}\,\rangle = |\,x\,\rangle\,|\,y\,\rangle\,|\,z\,\rangle \qquad (\text{F}-۳۸)$$

که در آن x ، y ، z دقیقاً" همان مختصات دکارتی $\mathbf{r}$ هستند.

در $\mathscr{E}_{\mathbf{r}}$ ، کتهائی مانند $|\,\varphi\,\chi\,\omega\,\rangle = |\,\varphi\,\rangle\,|\,\chi\,\rangle\,|\,\omega\,\rangle$ وجود دارند که حاصلضرب تانسوری سه‌کت، یکی از $\mathscr{E}_x$ ، دیگری از $\mathscr{E}_y$ و سومی از $\mathscr{E}_z$ ، می‌باشند. دراین صورت مؤلفه‌های آنها در نمایش $\{\,|\,\mathbf{r}\,\rangle\,\}$ عبارتند از[رک فرمول (F –۸)]:

$$\langle\,\mathbf{r}\,|\,\varphi\,\chi\,\omega\,\rangle = \langle\,x\,|\,\varphi\,\rangle\,\langle\,y\,|\,\chi\,\rangle\,\langle\,z\,|\,\omega\,\rangle \qquad (\text{F}-۳۹)$$

بنابراین، توابع موج وابسته، به‌صورت حاصلضرب $\varphi(x)\,\chi(y)\,\omega(z)$ نوشته‌می‌شوند. برای خود بردارهای پایه نیز این چنین است:

$$\langle\,\mathbf{r}\,|\,\mathbf{r}_0\,\rangle = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0) = \delta(x-x_0)\;\delta(y-y_0)\;\delta(z-z_0) \qquad (\text{F}-۴۰)$$

توجه‌کنیدکه‌عمومی‌ترین حالت $\mathscr{E}_{\mathbf{r}}$ به‌این‌شکل نیست بلکه به‌صورت زیرنوشته‌می‌شود:

$$|\,\psi\,\rangle = \int \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z\;\;\psi(x, y, z)\,|\,x, y, z\,\rangle \qquad (\text{F}-۴۱)$$

در $\psi(x, y, z) = \langle\,x, y, z\,|\,\psi\,\rangle$ ، بستگی‌های به x ، y و z نمی‌توانند، عموماً" ، به‌صورت حاصل ضرب توابع یک متغیری نوشته شوند: هریک ازتوابع‌موج وابسته به‌کتهای $\mathscr{E}_{\mathbf{r}}$ ، یک تابع موج با سه‌متغیر است.

بدین ترتیب، نتایج بخش ۳–F مارا قادرمی‌سازدتا بفهمیم‌چرا X، که‌به‌تنهائی در $\mathscr{E}_x$ یک م.ک.م.ج تشکیل می‌دهد، دیگر این خاصیت را در $\mathscr{E}_{\mathbf{r}}$ ندارد (رک بخش d –۲–E) : ویژه مقدارهای گسترش آن در $\mathscr{E}_{\mathbf{r}}$ با ویژه مقدارهای آن در $\mathscr{E}_x$ یکی هستند، ولی بینهایت تبهگن می‌شوند زیرا $\mathscr{E}_y$ و $\mathscr{E}_z$ بینهایت بعدی هستند.

باشروع از یک م.ک.م.ج در $\mathscr{E}_x$ ، $\mathscr{E}_y$ و $\mathscr{E}_z$ ، یک م.ک.م.ج، برای $\mathscr{E}_{\mathbf{r}}$ می‌سازیم: برای مثال $\{\,X, Y, Z\,\}$ ، اما همچنین $\{\,P_x, Y, Z\,\}$ ، چون P_x تشکیل یک م.ک.م.ج. در $\mathscr{E}_x$ می‌دهد، یا $\{\,P_x, P_y, Z\,\}$ و غیره.

β ــ یک کاربرد مهم

حال سعی کنیم در $\mathscr{E}_r$ معادله ویژه مقداری یک عملگر H : به‌صورت

$$H = H_x + H_y + H_z \qquad (\text{F}-۴۲)$$

را حل‌کنیم ، که درآن H_x ، H_y و H_z گسترشهای مشاهده‌پذیرهائی‌هستندکه به‌ترتیب در $\mathscr{E}_x$ ، $\mathscr{E}_y$ و $\mathscr{E}_z$ عمل می‌کنند . درعمل ، تشخیص می‌دهیم که به‌عنوان‌مثال ، H_x گسترش یک مشاهده‌پذیر از $\mathscr{E}_x$ است زیرافقط بااستفاده ازعملگرهای X و P_x ساخته شده است . بااستفاده از استدلال بخش β ــ a ــ۳ــ F ، ابتدا ویژه مقدارها و ویژه بردارهای H_x در $\mathscr{E}_x$ ، H_y در $\mathscr{E}_y$ و H_z در $\mathscr{E}_z$ را جستجو می‌کنیم :

$$\begin{aligned} H_x \,|\, \varphi_n \rangle &= E_x^n \,|\, \varphi_n \rangle \\ H_y \,|\, \chi_p \rangle &= E_y^p \,|\, \chi_p \rangle \\ H_z \,|\, \omega_r \rangle &= E_z^r \,|\, \omega_r \rangle \end{aligned} \qquad (\text{F}-۴۳)$$

بنابر این ، ویژه مقدارهای H همگی به‌صورت :

$$E^{n,p,r} = E_x^n + E_y^p + E_z^r \qquad (\text{F}-۴۴)$$

هستند و یک ویژه بردار متناظر با $E^{n,p,r}$ عبارت است از حاصلضرب تانسوری $|\, \varphi_n \rangle \,|\, \chi_p \rangle \,|\, \omega_r \rangle$ ، تابع موج وابسته به‌این بردار برابر است با حاصلضرب :

$$\varphi_n(x)\, \chi_p(y)\, \omega_r(z) = \langle\, x \,|\, \varphi_n \rangle \langle\, y \,|\, \chi_p \rangle \langle\, z \,|\, \omega_r \rangle$$

این از نوع وضعیتی است که در مکمل F_1 (بخش ۲) برای توجیه بررسی‌مدلهای یک بعدی در نظر گرفته شد . درآنجا ، با عملگرهای دیفرانسیلی‌ای سروکارداشتیم که روی توابع موج عمل می‌کردند :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}) \qquad (\text{F}-۴۵)$$

در مورد خاصی که پتانسیل بتواند به‌صورت :

$$V(\mathbf{r}) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z) \qquad (\text{F}-۴۶)$$

نوشته شود ، این معادله می‌تواند مانند (۴۲ــ F) تجزیه شود .

b ــ حالتهای یک سیستم دو ذره‌ای

یک سیستم فیزیکی در نظر بگیرید که از دوذره (بدون اسپین) تشکیل شده‌باشد . با شماره‌گذاری آنها بصورت (۱) و (۲) ، آنها را از یکدیگر متمایز خواهیم ساخت . برای تشریح سیستم ازنظر مکانیک کوانتومی ، می‌توانیم مفهوم یک تابع موج را که برای مورد یک ذره واردشد ، تعمیم دهیم . حالت سیستم می‌تواند ، دریک زمان معین ، توسط یک تابع از شش متغیر فضائی ، $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi(x_1, y_1, z_1 ; x_2, y_2, z_2)$ ، مشخص شود . تعبیر احتمالاتی یک چنین تابع موج دو ذره‌ای به‌این شرح است : احتمال $d\mathscr{P}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)$ ، برای یافتن ذره (۱) درحجم $d^3r_1 = dx_1\, dy_1\, dz_1$ واقع در نقطه $\mathbf{r}_1$ ، و ذره (۲) در حجم $d^3r_2 = dx_2\, dy_2\, dz_2$ در حوالی $\mathbf{r}_2$ ، در یک زمان معین ، برابراست با :

$$d\mathscr{P}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = C\, |\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 \; d^3r_1 \; d^3r_2 \qquad (\text{F}-۴۷)$$

ثابت بهنجارش C با اعمال این شرط که احتمال کل باید برابر یک باشد (بقاء تعدادذرات، رک بخش ۲ــB از فصل اول) ، به‌دست می‌آید :

$$\frac{1}{C} = \int d^3r_1 \; d^3r_2\, |\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 \qquad (\text{F}-۴۸)$$

و مشاهده‌پذیرهای X_1 ، Y_1 ، Z_1 می‌توانند در $\mathscr{E}_{\mathbf{r}_1}$ تعریف شوند . به‌طور مشابه ، درفضای حالتهای $\mathscr{E}_{\mathbf{r}_2}$ ی ذره (۲) ، نمایش $\{|\mathbf{r}_2\rangle\}$ و مشاهده‌پذیرهای X_2 ، Y_2 ، Z_2 راواردمی‌کنیم حاصلضرب تانسوری :

$$\mathscr{E}_{\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2} = \mathscr{E}_{\mathbf{r}_1} \otimes \mathscr{E}_{\mathbf{r}_2} \qquad (\text{F}-۴۹)$$

را در نظر بگیرید . مجموعه بردارهای :

$$|\, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \rangle = |\, \mathbf{r}_1 \rangle \, |\, \mathbf{r}_2 \rangle \qquad (\text{F}-۵۰)$$

یک پایه در $\mathscr{E}_{\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2}$ تشکیل می‌دهند . درنتیجه ، هرکت $|\psi\rangle$ ازین‌فضا می‌تواندبه‌صورت زیر نوشته شود :

$$|\, \psi \rangle = \int d^3r_1\, d^3r_2 \;\; \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) |\; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \rangle \qquad (\text{F}-۵۱)$$

که در آن :

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle\, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \,|\, \psi \,\rangle \qquad (\text{F}-۵۲)$$

بعلاوه، مجذور هنجار $\langle \psi |$ برابراست با :

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int d^3r_1 \ d^3r_2 \ | \ \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 \qquad (\text{F}-۵۳)$$

برای اینکه این مقدار محدود باشد، باید $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ مجذورا" انتگرال‌پذیر باشد. بنابراین به‌هرکت از $\mathscr{E}_{\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2}$. یک تابع موج $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ وابسته است: فضای حالتهای یک سیستم دوذره‌ای عبارت است از حاصلضرب تانسوری فضاهای متناظر با هریک از ذرات. یک م.ک م.ج. در $\mathscr{E}_{\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2}$، به‌عنوان مثال، از به‌هم پیوستن X_1 ، Y_1 ، Z_1 و X_2 ، Y_2 ، Z_2 به‌دست می‌آید.

فرض کنید که حالت سیستم توسط یک کت حاصلضرب تانسوری :

$$| \psi \rangle = | \psi_1 \rangle | \psi_2 \rangle \qquad (\text{F}-۵۴)$$

توصیف شده باشد، دراین‌صورت تابع موج متناظر می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \psi \rangle = \langle \mathbf{r}_1 | \psi_1 \rangle \langle \mathbf{r}_2 | \psi_2 \rangle = \psi_1(\mathbf{r}_1) \ \ \psi_2(\mathbf{r}_2) \qquad (\text{F}-۵۵)$$

دراین مورد، می‌گوئیم که بین دو ذره همبستگی وجود ندارد. بعدا" (در مکمل D_{III}) پی‌آمدهای فیزیکی یک چنین وضعیتی را تجزیه و تحلیل خواهیم کرد.

مطلب فوق می‌تواند تعمیم داده شود: وقتی یک سیستم فیزیکی از مجتمع دو یا چندسیستم ساده‌ترتشکیل شده‌باشد، فضای‌حالتهای آن عبارت است ازحاصلضرب تانسوری فضاهای متناظر با هریک ازسیستم‌های تشکیل‌دهنده.

مراجع و پیشنهادات برای مطالعه بیشتر:

بخش ۱۰ کتابشناسی شامل تعدادی متون ریاضی‌است که برحسب موضوع دسته‌بندی شده‌اند. زیر هر سرفصل، تا حد امکان این موضوعها به‌ترتیب درجهٔ مشکلی فهرست‌بندی شده‌اند. همچنین متون مکانیک کوانتومی (بخشهای ۱ و۲ ی کتابشناسی را که به‌مسائل‌ریاضی در سطوح مختلف پرداخته‌است، ملاحظه کنید. این متون شامل مراجع دیگری نیز هستند.

برای دسترسی آسان به‌مفاهیم اساسی ریاضی مورد نیاز در فهم فصل دوم (فضاهای برداری، عملگرها، قطری‌کردن ماتریسها وغیره)، خواننده می‌تواند، به‌عنوان‌مثال، به‌کتابهای زیر مراجعه کند: Arfken (10.4), chap. 4; Bak and Lichtenberg (10.3), chap. I; Bass (10.1), vol. I, chap. II to V. کاربرد صریح‌تری در مکانیک کوانتومی را می‌توان در Jackson (10.5) (see, in particular, chap. 5), Butkov (10.8), chap. 10 (finite-dimensional linear spaces) and chap. 11 (infinite-dimensional vector spaces, spaces of functions). پیدا کرد. همچنین Meijer and Bauer (2.18), chap. 1 به‌ویژه جدول انتهای این‌فصل‌را ببینید.

مکملهای فصل دوم

A_{II} : نامساوی شوارتز B_{II} : مروری بر بعضی از خواص مفید عملگرهای خطی C_{II} : عملگرهای یکانی	A_{II} ، B_{II} ، C_{II} : مروری برچندتعریف‌ونتایج ریاضی مفید (درسطح مقدماتی) که برای خوانندگانی که بااین‌مفاهیم آشنانیستندآمده است، بعداً" به‌عنوان‌یک‌مرجع (مخصوصاً" B_{II}) مورداستفاده قرارخواهند گرفت.
D_{II} : بررسی مفصل‌تر نمایشهای $\{\|r\rangle\}$ و $\{\|p\rangle\}$. E_{II} : چند خاصیت عمومی دومشاهده‌پذیر Q و P، که جابجاگرآنها برابراست با $i\hbar$.	D_{II} ، E_{II} : بخش E ازفصل‌دوم‌راکامل‌می‌کنند. D_{II} : درهمان‌سطح فصل‌دوم بوده و می‌تواند بلافاصله بعدازآن خوانده شود. E_{II} : یک دیدگاه عام‌تر و کمی رسمی تر را می‌پذیرد. مخصوصاً"، عملگرانتقال را وارد می‌کند. می‌توان‌آن‌رابرای‌مطالعه‌بعدی‌گذاشت.
F_{II} : عملگر پاریتی	F_{II} : عملگر پاریتی‌راکه درمکانیک‌کوانتومی از اهمیت خاصی برخورداراست‌مورد بحث قرار می‌دهد، به‌طورساده‌ای مفاهیم فصل دوم را روشن می‌کند، به‌این دلیل توصیه می‌شود.
G_{II} : کاربردی از خواص حاصلضرب تانسوری : چاه دوبعدی نامحدود	G_{II} : یک کاربردساده‌ای ازحاصلضرب‌تانسوری (بخش F ازفصل‌دوم) است، می‌تواندبه‌عنوان یک تمرین حل‌شده تلقی شود.
H_{II} : تمرینات	H_{II} : حل‌تمرینهای ۱۱ و۱۲داده‌شده است، هدف آن این‌است که خواننده را با خواص مشاهده‌پذیرهای جابجائی‌پذیر ومفهوم م.ک.م.ج، دریک موردخاص‌بسیارساده، آشنا سازد. توصیه می‌شودکه این‌تمرینات درخلال خواندن بخش۳ــD ازفصل‌دوم، حل شوند.

مکمل $\mathbf{A_{II}}$

نامساوی شوارتز

برای هرکت $|\psi\rangle$ متعلق به‌فضای حالتهای $\mathscr{E}$ ، داریم:

$$\langle \psi | \psi \rangle \ \text{حقیقی} \geqslant 0 \qquad (۱)$$

$\langle \psi | \psi \rangle$ وقتی برابر صفر است که $|\psi\rangle$ بردار صفر باشد [رک معادله (۱۲ــ B) از فصل دوم] . بااستفاده از نامساوی (۱) ، نامساوی شوارتز را به‌دست خواهیم آورد ، که بیان می‌کند ، اگر $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$ بردارهای دلخواهی از $\mathscr{E}$ باشند ، داریم :

$$\boxed{|\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle|^2 \leqslant \langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle \langle \varphi_2 | \varphi_2 \rangle} \qquad (۲)$$

تساوی وقتی حاصل می‌شود که اگر و فقط اگر $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$ متناسب بایکدیگر باشند .

کت $|\psi\rangle$ را به‌صورت :

$$|\psi\rangle = |\varphi_1\rangle + \lambda |\varphi_2\rangle \qquad (۳)$$

که درآن $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$ دوکت دلخواه و λ یک فراسنج اختیاری است ، درنظر بگیرید . λ هرچه باشد داریم :

$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle + \lambda \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle + \lambda^* \langle \varphi_2 | \varphi_1 \rangle + \lambda\lambda^* \langle \varphi_2 | \varphi_2 \rangle \geqslant 0 \qquad (۴)$$

حال ، برای λ مقدار زیر را انتخاب کنیم :

$$\lambda = -\frac{\langle \varphi_2 | \varphi_1 \rangle}{\langle \varphi_2 | \varphi_2 \rangle} \qquad (۵)$$

دراین صورت ، در طرف راست ، جملات دوم و سوم با یکدیگر برابر بوده و با جمله چهارم مساوی و مختلف العلامتند ، بنابراین (۴) به‌صورت زیر در می‌آید :

$$\langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle - \frac{\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle \langle \varphi_2 | \varphi_1 \rangle}{\langle \varphi_2 | \varphi_2 \rangle} \geqslant 0 \qquad (۶)$$

چون $\langle \varphi_2 \mid \varphi_2 \rangle$ مثبت است ، می‌توانیم طرفین نامساوی بالا را در $\langle \varphi_2 \mid \varphi_2 \rangle$ ضرب‌کنیم ، و نتیجه بگیریم :

$$\langle \varphi_1 \mid \varphi_1 \rangle \langle \varphi_2 \mid \varphi_2 \rangle \geqslant \langle \varphi_1 \mid \varphi_2 \rangle \langle \varphi_2 \mid \varphi_1 \rangle \tag{۷}$$

که دقیقا" همان (۲) است . در (۷) ، تساوی فقط وقتی حاصل می‌شود که $\langle \psi \mid \psi \rangle = 0$ باشد ، یعنی ، برطبق (۳) ، $\mid \varphi_1 \rangle = -\lambda \mid \varphi_2 \rangle$ باشد . دراین صورت کتهای $\mid \varphi_1 \rangle$ و $\mid \varphi_2 \rangle$ بایکدیگر متناسبند .

مراجع :

Bass I (10.1), § 5-3; Arfken (10.4), § 9-4.

مکمل B_{II}

مروری بربعضی ازخواص مفید عملگرهای خطی

۱ ــ رد یک عملگر

a ــ تعریف

b ــ رد تغییر ناپذیر است

c ــ خواص مهم

۲ ــ جبر جابجاگرها

a ــ تعریف

b ــ خواص

۳ ــ تحدید یک عملگر به یک زیر فضا

۴ ــ توابع عملگرها

a ــ تعریف، خواص ساده

b ــ یک مثال مهم : عملگر پتانسیل

c ــ جابجاگرهائی که شامل توابعی از عملگرها هستند .

۵ ــ مشتق گیری از عملگرها

a ــ تعریف

b ــ قواعد مشتق‌گیری

c ــ مثالها

d ــ یک کاربرد : یک فرمول مفید

هدف این مکمل عبارت است ازمروری برتعدادی ازتعاریف وخواص مفید عملگرهای خطی .

۱ ــ رد یک عملگر

a ــ تعریف

رد یک عملگر A ، که بصورت $\mathrm{Tr}\,A$ نوشته می‌شود ، برابر است با حاصل جمع عناصر قطر اصلی ماتریس وابسته به‌آن .

وقتی یک پایه راست هنجارگسسته ، $\{|u_i\rangle\}$ ، برای فضای $\mathscr{E}$ انتخاب شود ، بنا

به‌تعریف ، داریم :

$$\mathrm{Tr}\, A = \sum_i \langle u_i | A | u_i \rangle \qquad (۱)$$

برای مورد یک پایه راست هنجار پیوسته $\{ | w_\alpha \rangle \}$ ، داریم :

$$\mathrm{Tr}\, A = \int \mathrm{d}\alpha \, \langle w_\alpha | A | w_\alpha \rangle \qquad (۲)$$

وقتی $\mathscr{E}$ یک فضای بینهایت بعدی باشد ، رد عملگر A فقط وقتی تعریف می‌شود که عبارات (۱) و (۲) همگرا باشند .

ب ــ رد تغییر ناپذیر است

مجموع عناصرقطری ماتریسی که معرف عملگر A دریک پایه دلخواه است به‌آن پایه بستگی ندارد . حال ، این خاصیت را برای مورد تغییر از یک پایه راست هنجارگسسته $\{ | u_i \rangle \}$ به‌یک پایه راست هنجارگسستهٔ دیگر $\{ | t_k \rangle \}$ به‌دست می‌آوریم . داریم :

$$\sum_i \langle u_i | A | u_i \rangle = \sum_i \langle u_i | \left[\sum_k | t_k \rangle \langle t_k | \right] A | u_i \rangle \qquad (۳)$$

(که درآن از رابطه بستاری برای حالتهای $| t_k \rangle$ استفاده کرده‌ایم) . طرف راست (۳) برابر است با :

$$\sum_{i,k} \langle u_i | t_k \rangle \langle t_k | A | u_i \rangle = \sum_{i,k} \langle t_k | A | u_i \rangle \langle u_i | t_k \rangle \qquad (۴)$$

(زیرا می‌توان ترتیب دوعدد را در یک حاصلضرب عوض کرد) . سپس می‌توانیم ، در (۴) ، $\sum_i | u_i \rangle \langle u_i |$ را توسط $\mathbb{1}$ جایگزین کنیم (رابطه بستاری برای‌حالتهای $| u_i \rangle$) ، و بالاخره به‌دست می‌آوریم :

$$\sum_i \langle u_i | A | u_i \rangle = \sum_k \langle t_k | A | t_k \rangle \qquad (۵)$$

این برابری به‌خوبی خاصیت مورد نظر را ، در مورد ویژه انتخاب شده ، بیان می‌کند .

گوشـــزد :

بنابراین اگر عملگر A یک مشاهده‌پذیر باشد ، $\text{Tr}\, A$ می‌تواند در یک پایه از ویـــژه بردارهای A محاسبه شود . دراین صورت عناصر قطری ، ماتـــریس همـــاون‌ویـــژه مقدارهای A ، یعنی a_n ، (درجه تبهگنی g_n) هستند و رد می‌تواندبـــه‌صورت زیر نوشته شود :

$$\text{Tr}\, A = \sum_n g_n\, a_n \qquad (6)$$

c ــ خواص مهم

$$\text{Tr}\, AB = \text{Tr}\, BA \qquad (\text{7-a})$$
$$\text{Tr}\, ABC = \text{Tr}\, BCA = \text{Tr}\, CAB \qquad (\text{7-b})$$

عموماً ، ردحاصلضرب‌هرتعدادی از عملگرها ، وقتی یک جایگشت دوره‌ای روی آن عملگرها انجام شود ، تغییر ناپذیر است .

به‌عنوان مثال ، رابطه (a ــ ۷) را ثابت کنیم :

$$\begin{aligned}\text{Tr}\, AB &= \sum_i \langle u_i | AB | u_i \rangle = \sum_{i,j} \langle u_i | A | u_j \rangle \langle u_j | B | u_i \rangle \\ &= \sum_{i,j} \langle u_j | B | u_i \rangle \langle u_i | A | u_j \rangle = \sum_j \langle u_j | BA | u_j \rangle = \text{Tr}\, BA\end{aligned} \qquad (8)$$

(با دوبار استفاده از رابطه بستاری روی پایه $\{ | u_i \rangle \}$) . بدین ترتیب رابطه (a ــ ۷) ثابت شد ، اثبات تعمیم آن ، (b ــ ۷) ، هیچ اشکالی ایجاد نمی‌کند .

۳ ــ جبر جابجاگرها

a ــ تعریف

جابجاگر $[A, B]$ ی دوعملگر ، بنا به‌تعریف ، عبارت است از :

$$[A, B] = AB - BA \qquad (9)$$

b ــ خــواص

$$[A, B] = -[B, A] \tag{۱۰}$$
$$[A, (B + C)] = [A, B] + [A, C] \tag{۱۱}$$
$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C] \tag{۱۲}$$
$$\left[A, [B, C]\right] + \left[B, [C, A]\right] + \left[C, [A, B]\right] = 0 \tag{۱۳}$$
$$[A, B]^{\dagger} = [B^{\dagger}, A^{\dagger}] \tag{۱۴}$$

استخراج این خواص، ساده است : کافی است پس‌از اینکه دوطرف هرمعادله را به‌طورصریح نوشتیم ، آنها را باهم مقایسه کنیم .

۳ ــ تحدید یک عملگر به‌یک زیر فضا

فرض کنید P_q تصویرگر روی زیرفضای q بعدی $\mathscr{E}_q$ باشد که توسط q بردار راست هنجار$\rangle \varphi_i |$ به‌وجود آمده است :

$$P_q \doteq \sum_{i=1}^{q} | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | \tag{۱۵}$$

بنا به‌تعریف ، تحدید $\hat{A}_q$ ی عملگر A به‌زیر فضای $\mathscr{E}_q$ عبارت است از :

$$\hat{A}_q = P_q A P_q \tag{۱۶}$$

اگر$\rangle \psi |$ یک کت دلخواه باشد . ازین تعریف نتیجه می‌شود که :

$$\hat{A}_q | \psi \rangle = P_q A | \hat{\psi}_q \rangle \tag{۱۷}$$

که در آن :

$$| \hat{\psi}_q \rangle = P_q | \psi \rangle \tag{۱۸}$$

عبارت است از تصویر عمودی$\rangle \psi |$ روی $\mathscr{E}_q$. در نتیجه ، برای اینکه $\hat{A}_q$ را روی یک کت دلخواه$\rangle \psi |$ عمل دهیم ، باید ابتدا این کت را روی $\mathscr{E}_q$ تصویر کنیم ، سپس عملگر A را روی این تصویر اعمال کنیم ، در حالیکه فقط تصویر کت حاصله در $\mathscr{E}$ را نگه می‌داریم . بنابر این ، عملگر $\hat{A}_q$ ، که هرکت از $\mathscr{E}_q$ را به‌یک کت دیگر متعلق به‌همین زیرفضا،تبدیل می‌کند عملگری است که عمل آن به $\mathscr{E}_q$ محدود شده است .

در باره ماتریسی که معرف $\hat{A}_q$ است ، چه می‌توان گفت؟ یک پایه$\{\rangle u_k |\}$ انتخاب کنیم که q بردار اول آن به $\mathscr{E}_q$ (به‌عنوان مثال ، آنها را به$\rangle \varphi_i |$ نشان می‌دهیم) ، و

بقیه به‌زیر فضای مکمل تعلق داشته باشند . داریم :

$$\langle u_i \mid \hat{A}_q \mid u_j \rangle = \langle u_i \mid P_q A P_q \mid u_j \rangle \qquad (۱۹)$$

یعنی :

$$\langle u_i \mid \hat{A}_q \mid u_j \rangle = \begin{cases} \langle u_i \mid A \mid u_j \rangle & i, j \leqslant q \\ 0 & \text{اگر یکی از دوشاخص } i \text{ یا } j \text{ بزرگتراز } q \text{ باشد} \end{cases} \qquad (۲۰)$$

بنابراین ، مانند این است که ماتریس معرف $\hat{A}_q$ به‌گونه‌ای از ماتریس معرف A ، " بیرون آورده شده باشد" . فقط آن عناصر ماتریسی A را که به‌بردارهای پایه‌ی $\langle u_i |$ و $| u_j \rangle$ ، که هردو متعلق به $\mathscr{E}_q$ هستند ، وابسته‌اند حفظ کرده و به‌جای بقیه عناصر ماتریسی صفر قرار می‌دهیم .

۴ ــ توابع عملگرها

a ــ تعریف ، خواص ساده

یک عملگر خطی دلخواه A در نظر بگیرید . تعریف عملگر A^n مشکل نیست : عملگری است که متناظر است با اعمال n مرتبه متوالی عملگر A . تعریف عملگر A^{-1} ، معکوس A ، نیز کاملا" شناخته شده است : A^{-1} عملگری است که (اگر وجود داشته باشد) در روابط زیر صدق کند :

$$A^{-1}A = AA^{-1} = \mathbb{1} \qquad (۲۱)$$

حال ، چگونه می‌توانیم ، به‌گونه‌ای عام‌تر ، یک تابع دلخواه از یک عملگر را تعریف کنیم ؟ برای این منظور ، یک تابع F از متغیر z را در نظر بگیرید . فرض کنید که ، در یک ناحیه معینی ، F بتواند به‌صورت یک سری از توانهای z بسط داده شود :

$$F(z) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n z^n \qquad (۲۲)$$

بنابه‌تعریف ، تابع متناظر از عملگر A عملگری است مانند $F(A)$ که توسط یک سری که دارای همان ضرائب f_n است تعریف شده باشد :

$$F(A) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n A^n \qquad (۲۳)$$

به‌عنوان مثال ، عملگر e^A به‌صورت زیر تعریف می‌شود :

$$e^A = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^n}{n!} = \mathbb{1} + A + A^2/2! + ... + A^n/n! + ... \qquad (۲۴)$$

مسائل مربوط به همگرائی سری (۲۳) را، که به‌ویژه‌مقدارهای A و به‌شعاع همگرائی‌سری (۲۲) بستگی دارند، در نظر نخواهیم گرفت.

توجه کنید که اگر $F(z)$ یک تابع حقیقی باشد، ضرائب f_n حقیقی هستند. بعلاوه، اگر A هرمیتی باشد، از (۲۳) ملاحظه می‌کنیم که $F(A)$ هرمیتی است.

فرض کنید $\rangle \varphi_a |$ یک ویژه بردار A با ویژه مقدار a باشد:

$$A | \varphi_a \rangle = a | \varphi_a \rangle \qquad (۲۵)$$

با اعمال n مرتبه متوالی این عملگر، خواهیم یافت:

$$A^n | \varphi_a \rangle = a^n | \varphi_a \rangle \qquad (۲۶)$$

حال، سری (۲۳) را به $\rangle \varphi_a |$ اعمال کنیم، نتیجه می‌شود:

$$F(A) | \varphi_a \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} f_n a^n | \varphi_a \rangle = F(a) | \varphi_a \rangle \qquad (۲۷)$$

این امر، به‌قانون زیر منجر می‌شود: وقتی $\rangle \varphi_a |$ یک ویژه بردار A با ویژه مقدار a باشد، ویژه بردار $F(A)$ با ویژه مقدار $F(a)$ نیز خواهد بود.

این خاصیت به‌یک تعریف دومی از تابع یک عملگر منتهی می‌شود.

یک عملگر قطری‌پذیر A در نظر بگیرید (اگر A یک مشاهده‌پذیر باشد، همیشه این چنین خواهد بود) و پایه‌ای انتخاب کنید که در آن ماتریس وابسته به A، درواقع، قطری باشد (دراین‌صورت عناصرآن ویژه مقدارهای a_i ی‌عملگر A هستند). $F(A)$، بنا به‌تعریف عملگری است که، در همین پایه، توسط یک ماتریس قطری‌که‌عناصرش $F(a_i)$ هستند، نمایش داده می‌شود.

به‌عنوان مثال، اگر σ_z ماتریس:

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad (۲۸)$$

باشد، مستقیما" نتیجه می‌شود:

$$e^{\sigma_z} = \begin{pmatrix} e & 0 \\ 0 & 1/e \end{pmatrix} \qquad (۲۹)$$

گوشزد :

وقتی توابع عملگرها مورد استفاده قرار می‌گیرند، باید نسبت به‌ترتیب عملگرها دقت بعمل آید، به‌عنوان مثال، وقتی A و B عدد نبوده و عملگر باشند، عملگرهای $e^A e^B$ ، $e^B e^A$ و e^{A+B} ، در حالت کلی، برابر نیستند. عملگرهای زیر را در نظر بگیرید:

$$e^A e^B = \sum_p \frac{A^p}{p!} \sum_q \frac{B^q}{q!} = \sum_{p,q} \frac{A^p \; B^q}{p! \; q!} \qquad (۳۰)$$

$$e^B e^A = \sum_q \frac{B^q}{q!} \sum_p \frac{A^p}{p!} = \sum_{p,q} \frac{B^q A^p}{p! \; q!} \qquad (۳۱)$$

$$e^{A+B} = \sum_p \frac{(A+B)^p}{p!} \qquad (۳۲)$$

وقتی A و B دلخواه باشند، دلیلی ندارد که طرفهای راست (۳۰)، (۳۱) و (۳۲) برابر باشند (رک تمرین ۷ از مکمل $\mathrm{H_{II}}$). ولی، **وقتی A و B جابجائی‌پذیر باشند**، داریم:

$$[A, B] = 0 \Longrightarrow e^A e^B = e^B e^A = e^{A+B} \qquad (۳۳)$$

(رابطه‌ای که، اگر ماتریسهای قطری معرف e^A و e^B در پایه‌ای از ویژه‌بردارهای مشترک A و B درنظر گرفته شوند، آشکار است).

b ــ یک مثال مهم: عملگر پتانسیلی

در مسائل یک بعدی، اغلب مجبوریم که عملگرهای "پتانسیلی" $V(X)$ (که به‌علت اینکه با انرژی پتانسیل کلاسیکی $V(x)$ یک ذره در یک میدان نیرو متناظرند، بـه‌این نـام موسومند) را درنظربگیریم، که درآن $V(X)$ تابعی از عملگر مکانی X است.

از مطالب بخش گذشته نتیجه می‌شود که ویژه بردارهای $V(X)$، همان‌ویژه‌بردارهای X ، یعنی $| x \rangle$ ، هستند، و داریم:

$$V(X) \, | \, x \rangle = V(x) \, | \, x \rangle \qquad (۳۴)$$

بنابراین، عناصر ماتریسی $V(X)$ در نمایش $\{ | x \rangle \}$ عبارتند از:

$$\langle \, x \, | \, V(X) \, | \, x' \, \rangle = V(x) \delta(x - x') \qquad (۳۵)$$

بابکاربردن (۳۴) و استفاده ازین واقعیت که $V(X)$ هرمیتی‌است (تابع $V(x)$ حقیقی است) ، نتیجه می‌گیریم :

$$\langle x \mid V(X) \mid \psi \rangle = V(x) \langle x \mid \psi \rangle = V(x)\psi(x) \tag{۳۶}$$

این معادله نشان می‌دهد که در نمایش $\{ \langle x \mid \}$ ، عمل عملگر $V(X)$ عبارت است از ضرب‌در $V(x)$.

تعمیم (۳۴) ، (۳۵) و (۳۶) به‌مسائل سه‌بعدی می‌تواند بدون هیچ اشکالی انجام شود ، دراین مورد ، خواهیم داشت :

$$V(\mathbf{R}) \mid \mathbf{r} \rangle = V(\mathbf{r}) \mid \mathbf{r} \rangle \tag{۳۷}$$

$$\langle \mathbf{r} \mid V(\mathbf{R}) \mid \mathbf{r}' \rangle = V(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \tag{۳۸}$$

$$\langle \mathbf{r} \mid V(\mathbf{R}) \mid \psi \rangle = V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \tag{۳۹}$$

c ــ *جابجاگرهائی که شامل توابعی ازعملگرها هستند* .

تعریف (۲۳) نشان می‌دهد که A با هر تابعی از A جابجائی‌پذیر است :

$$[A, F(A)] = 0 \tag{۴۰}$$

به‌طور مشابه ، اگر A و B جابجائی‌پذیر باشند ، $F(A)$ و B نیز جابجائی‌پذیر خواهند بود :

$$[B, A] = 0 \Longrightarrow [B, F(A)] = 0 \tag{۴۱}$$

جابجاگر یک عملگر با تابعی از یک عملگر دیگرکه باآن جابجائی‌پذیر نیست‌چگونه خواهد بود؟ در اینجا خود را به‌مورد عملگرهای X و P ، که جابجاگر آنها برابر :

$$[X, P] = i\hbar \tag{۴۲}$$

است ، محدود خواهیم کرد .

با استفاده از رابطه (۱۲) ، می‌توانیم محاسبه زیر را انجام دهیم :

$$[X, P^2] = [X, PP] = [X, P]P + P[X, P] = 2i\hbar\, P \tag{۴۳}$$

به‌طور کلی‌تر ، نشان دهیم که :

$$[X, P^n] = i\hbar n P^{n-1} \tag{۴۴}$$

اگر این معادله را ثابت شده فرض کنیم ، خواهیم یافت :

$$[X, P^{n+1}] = [X, PP^n] = [X, P]P^n + P[X, P^n] \\ = i\hbar P^n + i\hbar n PP^{n-1} = i\hbar(n+1)P^n \tag{۴۵}$$

بدین ترتیب ، رابطه (۴۴) به‌طریق استقراء ثابت می‌شود .

حال ، جابجاگر $[X, F(P)]$ را محاسبه کنیم :

$$[X, F(P)] = \sum_n [X, f_n P^n] = \sum_n i\hbar n f_n P^{n-1} \tag{۴۶}$$

اگر $F'(z)$ نشان دهنده مشتق تابع $F(z)$ باشد ، در (۴۶) تعریف عملگر $F'(P)$ را می‌یابیم . بنابراین :

$$\boxed{[X, F(P)] = i\hbar F'(P)} \tag{۴۷}$$

استدلال مشابهی ، ما را قادر خواهد ساخت تا رابطه متقارن زیر را به‌دست آوریم :

$$\boxed{[P, G(X)] = -i\hbar G'(X)} \tag{۴۸}$$

گوشزدها :

(i) استدلال قبل بر این واقعیت استوار است که $F(P)$ (یا $G(X)$) فقط به P (یا به X) بستگی‌دارد . محاسبه جابجاگری نظیر $[X, \Phi(X, P)]$ ، که درآن $\Phi(X, P)$ عملگری است که هم به X و هم به P بستگی دارد ، مشکل‌تر است : مشکلات از اینجا ناشی می‌شوند که X و P جابجائی پذیر نیستند .

(ii) معادلات (۴۷) و (۴۸) می‌توانند به‌مورد دوعملگر A و B که هردو با جابجاگرشان جابجائی‌پذیرند تعمیم داده شود . استدلالی براساس استدلال‌قبلی نشان می‌دهد که اگر داشته باشیم :

$$[A, C] = [B, C] = 0 \tag{۴۹}$$

با :

$$C = [A, B] \tag{۵۰}$$

خواهیم داشت :

$$[A, F(B)] = [A, B]F'(B) \tag{۵۱}$$

۵ ـ مشتق گیری از یک عملگر

a ـ تعریف

فرض کنید $A(t)$ عملگری باشد که به‌یک متغیر دلخواه t بستگی داشته باشد. بنا به‌تعریف، مشتق $A(t)$ نسبت به t، یعنی $\frac{dA}{dt}$ (اگروجود داشته باشد) توسط حدزیرداده می‌شود:

$$\frac{dA}{dt} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{A(t + \Delta t) - A(t)}{\Delta t} \tag{۵۲}$$

عناصر ماتریسی $A(t)$ دریک پایه دلخواه از بردارهای $|u_i\rangle$، مستقل‌از t، توابعی از t هستند:

$$\langle u_i | A | u_j \rangle = A_{ij}(t) \tag{۵۳}$$

$\left(\frac{dA}{dt}\right)_{ij} = \langle u_i \left| \frac{dA}{dt} \right| u_j \rangle$ را عناصر ماتریسی $\frac{dA}{dt}$ می‌نامیم. به‌آسانی می‌توان تحقیق کرد که:

$$\left(\frac{dA}{dt}\right)_{ij} = \frac{d}{dt} A_{ij} \tag{۵۴}$$

به‌این ترتیب، یک قاعده بسیارساده به‌دست می‌آوریم: برای‌به‌دست‌آوردن عناصرماتریسی معرف $\frac{dA}{dt}$، کافی است ماتریس معرف A را در نظر گرفته و از هریک از عناصر آن مشتق مشتق بگیریم (بدون اینکه جای آنهارا تغییر دهیم).

b ـ قواعد مشتق گیری

این قواعد مشابه قواعد مشتق گیری از توابع معمولی هستند:

$$\frac{d}{dt}(F + G) = \frac{dF}{dt} + \frac{dG}{dt} \tag{۵۵}$$

$$\frac{d}{dt}(FG) = \frac{dF}{dt} G + F \frac{dG}{dt} \tag{۵۶}$$

مع‌ذالک باید دقت شود که ترتیب عملگرها در فرمول (۵۶) تغییر داده نشود.

بیائید، برای مثال، معادله دوم را ثابت کنیم. عناصر ماتریسی FG عبارتند از:

$$\langle u_i | FG | u_j \rangle = \sum_k \langle u_i | F | u_k \rangle \langle u_k | G | u_j \rangle \tag{۵۷}$$

قبلاً دیدیم که عناصر ماتریسی $\mathrm{d}(FG)/\mathrm{d}t$ مشتقهای عناصر ماتریسی (FG) نسبت به t هستند. بنابراین، با مشتق‌گیری از طرف راست (۵۷)، داریم:

$$\begin{aligned} \langle u_i | \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(FG) | u_j \rangle &= \sum_k \Big[\langle u_i | \frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} | u_k \rangle \langle u_k | G | u_j \rangle + \\ &\quad + \langle u_i | F | u_k \rangle \langle u_k | \frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}t} | u_j \rangle \Big] \\ &= \langle u_i | \frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} G + F \frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}t} | u_j \rangle \end{aligned} \tag{۵۸}$$

این معادله برای هر i و هر j معتبر است. بدین ترتیب فرمول (۵۶) ثابت می‌شود.

c ــ *مثالها*

حال، مشتق عملگر e^{At} را محاسبه کنیم. بنا به‌تعریف، داریم:

$$e^{At} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(At)^n}{n!} \tag{۵۹}$$

با مشتق‌گیری از جمله به جملهٔ این سری، داریم:

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} e^{At} &= \sum_{n=0}^{\infty} n \frac{t^{n-1} A^n}{n!} \\ &= A \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(At)^{n-1}}{(n-1)!} \\ &= \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(At)^{n-1}}{(n-1)!} \right] A \end{aligned} \tag{۶۰}$$

مشخص است که سری داخل کروشه (با قرار دادن $p = n - 1$ به‌عنوان شاخص جمع بندی) برابر است با e^{At}. بنابراین نتیجه عبارت است از:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} e^{At} = A e^{At} = e^{At} A \tag{۶۱}$$

دراین مورد ساده که فقط شامل یک عملگر است، لازم نیست که به‌ترتیب عوامل توجه شود: e^{At} و A جابجائی‌پذیرند .

اگر بخواهیم از عملگری نظیر $e^{At}e^{Bt}$ مشتق بگیریم این طور نیست .

بابه‌کاربردن (۵۶)و (۶۱) ، به‌دست می‌آوریم :

$$\frac{d}{dt}(e^{At}e^{Bt}) = Ae^{At}e^{Bt} + e^{At}Be^{Bt} \qquad (۶۲)$$

طرف راست‌این معادله می‌تواند ، به‌عنوان مثال ، به $e^{At}Ae^{Bt} + e^{At}Be^{Bt}$ یا به $e^{At}Ae^{Bt} + e^{At}e^{Bt}B$ تبدیل شود . ولی هرگز نمی‌توانیم (البته ، مگر اینکه A ، B جابجائی پذیر باشند) عبارتی نظیر $(A + B)e^{At}e^{Bt}$ به‌دست آوریم . لذا ، درین مورد ترتیب عملگرها مهم است .

گوشزد :

حتی اگر تابع شامل فقط یک عملگر باشد ، مشتق‌گیری همیشه نمی‌تواند برطبق قواعدی که برای توابع معمولی معتبر است ، انجام شود . به‌عنوان مثال ، وقتی $A(t)$ بستگی زمانی دلخواهی داشته باشد ، مشتق $\frac{d}{dt}e^{A(t)}$ عموماً " برابر با $e^{A(t)}\frac{dA}{dt}$ نیست . با بسط $e^{A(t)}$ برحسب توانهای $A(t)$ می‌توان دید که برای اینکه این برابری برقرار باشد باید $A(t)$ و $\frac{dA}{dt}$ جابجائی پذیر باشند .

d ــ یک کاربرد : یک فرمول مفید

دوعملگر A و B در نظر بگیریدکه ، بنا به‌فرض ، هردو باجابجاگرشان‌جابجائی‌پذیر باشند . دراین مورد ، رابطه زیر را به‌دست خواهیم آورد :

$$e^{A}e^{B} = e^{A+B}e^{\frac{1}{2}[A,B]} \qquad (۶۳)$$

فرمول گلابر) .

عملگر $F(t)$ ، تابعی از متغیر حقیقی t ، را توسط‌رابطه :

$$F(t) = e^{At}e^{Bt} \qquad (۶۴)$$

تعریف می‌کنیم ، داریم :

$$\frac{dF}{dt} = Ae^{At}e^{Bt} + e^{At}Be^{Bt} = \left(A + e^{At}Be^{-At}\right)F(t) \qquad (۶۵)$$

چون A و B با جابجاگرشان جابجائی‌پذیرند ، فرمول (۵۱) می‌تواند برای محاسبه :

$$\left[e^{At}, B\right] = t\left[A, B\right]e^{At} \qquad (۶۶)$$

به‌کار رود . بنابراین :

$$e^{At}\ B = B e^{At} + t\left[A, B\right]e^{At} \qquad (۶۷)$$

دوطرف این معادله را از طرف راست در e^{-At} ضرب کنید . باجایگزین کردن رابطه به‌دست آمده در (۶۵) ، خواهم یافت :

$$\frac{dF}{dt} = \left(A + B + t[A, B]\right)F(t) \qquad (۶۸)$$

عملگرهای $A + B$ و $[A, B]$ ، بنا به‌فرض، جابجائی‌پذیرند . بنابراین می‌توانیم از معادله دیفرانسیل (۶۸) طوری انتگرال‌گیری کنیم . که گوئی $A + B$ و $[A, B]$ عدد هستند . نتیجه می‌شود :

$$F(t) = e^{(A+B)t + \frac{1}{2}[A, B]t^2} \qquad (۶۹)$$

با قرار دادن $t = 0$ ، ملاحظه می‌کنیم که $F(0) = \mathbb{1}$ ، و :

$$F(t) = F(0)\, e^{(A+B)t + \frac{1}{2}[A, B]t^2} \qquad (۷۰)$$

سپس با قراردادن $t = 1$ معادله (۶۳) را به‌دست می‌آوریم ، که به‌این ترتیب ثابت می‌شود .

گـوشزد :

وقتی عملگرهای A و B دلخواه باشند ، معادله (۶۳) در حالت کلی معتبر نیست : لازم است که هم A و هم B هردو با $[A, B]$ جابجائی‌پذیر باشند . این شرط ممکن است خیلی محدودکننده به‌نظر برسد ، در واقع ، در مکانیک کوانتومی غالبا " بـا

عملگرهائی مواجهیم که جابجاگرشان یک عدد است : به‌عنوان مثال، X و P ، یا عملگرهای a و $a^{\dagger}$ در نوسان کننده هارمونیک (رک فصل پنجم) .

مراجع :

زیر بخش‌های " کتابهای عمومی " و " جبر خطی ــ فضاهای هیلبرت " از بخش ده کتاب شناسی را به‌ببینید .

مکمل C_{II}

عملگرهای یکانی

۱ ــ خواص عمومی عملگرهای یکانی
a ــ تعریف ، خواص ساده
b ــ عملگرهای یکانی و تغییر پایه‌ها
c ــ ماتریسهای یکانی
d ــ ویژه مقدارها و ویژه بردارهای یک عملگر یکانی
۲ ــ تبدیلات یکانی عملگرها
۳ ــ عملگر یکانی بی‌نهایت کوچک

۱ ــ خواص عمومی عملگرهای یکانی

a ــ تعریف ، خواص ساده

بنا به‌تعریف ، یک عملگر U یکانی است اگر معکوس‌آن ، U^{-1} ، با الحاقی آن ، $U^\dagger$ ، برابر باشد :

$$U^\dagger U = UU^\dagger = \mathbb{1} \tag{۱}$$

دو بردار دلخواه $|\psi_1\rangle$ و $|\psi_2\rangle$ از $\mathscr{E}$ ، و تبدیلات $|\tilde{\psi}_1\rangle$ و $|\tilde{\psi}_2\rangle$ ی آن تحت عمل U را در نظر بگیرید :

$$\begin{aligned} |\tilde{\psi}_1\rangle &= U|\psi_1\rangle \\ |\tilde{\psi}_2\rangle &= U|\psi_2\rangle \end{aligned} \tag{۲}$$

اکنون ، حاصلضرب نرداری $\langle\tilde{\psi}_1|\tilde{\psi}_2\rangle$ را محاسبه کنیم ، خواهیم یافت :

$$\langle\tilde{\psi}_1|\tilde{\psi}_2\rangle = \langle\psi_1|U^\dagger U|\psi_2\rangle = \langle\psi_1|\psi_2\rangle \tag{۳}$$

بنابراین ، تبدیل یکانی وابسته به‌عملگر U ، حاصلضرب نرداری (و در نتیجه ، هنجار) را در $\mathscr{E}$ تغییر نمی‌دهد . بعلاوه ، اگر بعد $\mathscr{E}$ محدود باشد ، این خاصیت مشخصه یک عملگر یکانی است .

گــوشــزدها :

(i) اگر A یک عملگر هرمیتی باشد ، عملگر $T = e^{iA}$ یکانی است ، زیرا :

$$T^\dagger = e^{-iA^\dagger} = e^{-iA} \qquad (۴)$$

و بنابراین

$$\begin{aligned} T^\dagger T &= e^{-iA}e^{iA} = \mathbb{1} \\ TT^\dagger &= e^{iA}e^{-iA} = \mathbb{1} \end{aligned} \qquad (۵)$$

(بوضوح ، iA - با iA جابجائی پذیر است) .

(ii) حاصلضرب دو عملگر یکانی نیز یکانی است . اگر U و V یکانی باشند ، داریم :

$$\begin{aligned} U^\dagger U &= UU^\dagger = \mathbb{1} \\ V^\dagger V &= VV^\dagger = \mathbb{1} \end{aligned} \qquad (۶)$$

حال محاسبات زیر را انجام دهیم :

$$\begin{aligned} (UV)^\dagger(UV) &= V^\dagger U^\dagger UV = V^\dagger V = \mathbb{1} \\ (UV)(UV)^\dagger &= UVV^\dagger U^\dagger = UU^\dagger = \mathbb{1} \end{aligned} \qquad (۷)\ .$$

این معادلات در واقع نشان می‌دهند که عملگر حاصلضرب UV یکانی است . به‌علاوه ، این خاصیت قابل پیش بینی بود : وقتی دو تبدیل ، حاصلضرب نرداری را ثابت نگه دارند ، اعمال متوالی این دو تبدیل نیز همین کار را خواهد کرد .

(iii) در فضای سه‌بعدی معمولی بردارهای حقیقی ، با عملگرهائی‌که هنجار و حاصلضرب را ثابت نگه می‌دارند آشنا هستیم : دورانها ، تقارن‌ها نسبت به‌یک نقطه ، یک صفحه و غیره . دراین مورد که فضا حقیقی است ، گفته می‌شود که این عملگرها متعامدند . عملگرهای یکانی ، تعمیم عملگرهای متعامدبه‌فضاهای‌مختلط(با تعداد دلخواهی بعد) هستند .

b ــ عملگرهای یکانی و تغییر پایه‌ها

α . فرض کنید $\{ | v_i \rangle \}$ یک پایه راست‌هنجار از فضای حالت $\mathscr{E}$ باشد ، که فرض

می‌شود گسسته‌است . تبدیل بردار $| v_i \rangle$ تحت عمل اپراتور U را با $| \tilde{v}_i \rangle$ نمایش می‌دهیم :

$$| \tilde{v}_i \rangle = U | v_i \rangle \tag{۸}$$

چون اپراتور U یکانی است ، داریم :

$$\langle \tilde{v}_i | \tilde{v}_j \rangle = \langle v_i | v_j \rangle = \delta_{ij} \tag{۹}$$

در نتیجه ، بردارهای $| \tilde{v}_i \rangle$ راست هنجارند ، حال ، نشان دهیم که این بردارها یک پایه در $\mathscr{E}$ تشکیل می‌دهند . برای این منظور ، یک بردار دلخواه $| \psi \rangle$ از $\mathscr{E}$ را در نظر بگیرید . چون مجموعه $\{ | v_i \rangle \}$ تشکیل یک پایه می‌دهند ، بردار $U^\dagger | \psi \rangle$ می‌تواند روی $| v_i \rangle$ بسط داده شود :

$$U^\dagger | \psi \rangle = \sum_i c_i | v_i \rangle \tag{۱۰}$$

بااعمال عملگر U به‌این معادله ، خواهم یافت :

$$U U^\dagger | \psi \rangle = \sum_i c_i U | v_i \rangle \tag{۱۱}$$

یا :

$$| \psi \rangle = \sum_i c_i | \tilde{v}_i \rangle \tag{۱۲}$$

این معادله ، بیانگر این واقعیت است که هربردار $| \psi \rangle$ می‌تواند روی بردارهای $| \tilde{v}_i \rangle$ بسط داده شود ، و در نتیجه $| \tilde{v}_i \rangle$ ها یک پایه تشکیل می‌دهند . بدین ترتیب می‌توانیم نتیجه زیر را بیان کنیم : یک شرط لازم برای اینکه عملگر U یکانی باشد این‌است که‌وقتی‌بردارهای یک پایه راست هنجار از $\mathscr{E}$ توسط U تبدیل شوند ، یک پایه راست‌هنجار دیگرتشکیل دهند.

β ــ از طرف دیگر ، نشان دهیم که این شرط کافی است ، بنا به‌فرض داریم :

$$\begin{aligned} | \tilde{v}_i \rangle &= U | v_i \rangle \\ \langle \tilde{v}_i | \tilde{v}_j \rangle &= \delta_{ij} \\ \sum_i | \tilde{v}_i \rangle \langle \tilde{v}_i | &= \mathbb{1} \end{aligned} \tag{۱۳}$$

و از این رو :

$$\langle v_j | U^\dagger = \langle \tilde{v}_j | \tag{۱۴}$$

محاسبه زیر را انجام دهیم :

$$U^\dagger U \,|\, v_i \rangle = U^\dagger |\, \tilde{v}_i \rangle = \sum_j |\, v_j \rangle \langle v_j \,|\, U^\dagger |\, \tilde{v}_i \rangle$$
$$= \sum_j |\, v_j \rangle \langle \tilde{v}_j \,|\, \tilde{v}_i \rangle = \sum_j |\, v_j \rangle\, \delta_{ij} \qquad (۱۵)$$
$$= |\, v_i \rangle$$

رابطه(۱۵)، که برای تمام i ها معتبر است، این واقعیت را بیان می‌کند که عملگر $U^\dagger U$ ، عملگر همانندی است . حال، به‌همین طریق نشان دهیم که $UU^\dagger = \mathbb{1}$. برای این منظور ، عمل $U^\dagger$ روی یک بردار $\langle v_i \,|$ را در نظر بگیرید .

$$U^\dagger |\, v_i \rangle = \sum_j |\, v_j \rangle \langle v_j \,|\, U^\dagger |\, v_i \rangle \qquad (۱۶)$$
$$= \sum_j |\, v_j \rangle \langle \tilde{v}_j \,|\, v_i \rangle$$

سپس، داریم :

$$UU^\dagger |\, v_i \rangle = \sum_j U \,|\, v_j \rangle \langle \tilde{v}_j \,|\, v_i \rangle$$
$$= \sum_j |\, \tilde{v}_j \rangle \langle \tilde{v}_j \,|\, v_i \rangle \qquad (۱۷)$$
$$= |\, v_i \rangle$$

از این رابطه نتیجه می‌گیریم که $UU^\dagger = \mathbb{1}$: بنابراین عملگر U یکانی است .

c ـ ماتریسهای یکانی

فرض کنید :

$$U_{ij} = \langle v_i \,|\, U \,|\, v_j \rangle \qquad (۱۸)$$

عناصر ماتریسی U باشند . چگونه می‌توان از روی ماتریس معرف U دید که آیا این عملگر یکانی است یا خیر؟

رابطه(۱) می‌دهد :

$$\langle v_i \,|\, U^\dagger U \,|\, v_j \rangle = \sum_k \langle v_i \,|\, U^\dagger |\, v_k \rangle \langle v_k \,|\, U \,|\, v_j \rangle \qquad (۱۹)$$

یعنی :

$$\sum_k U^*_{ki}\, U_{kj} = \delta_{ij} \qquad (۲۰)$$

وقتی یک ماتریس یکانی است ، مجموع حاصلضربهای عناصریک ستون در مزدوجهای مختلط عناصر ستون دیگر :

ــ صفر است اگر دوستون مختلف باشند .

ــ برابر است با ۱ اگر مختلف نباشند .

حال چند مثال ارائه دهیم که در آنها این قاعده می‌تواند بسادگی نشان داده شود .

مثالها :

(۱) ماتریسی معرف یک دوران θ حول Oz ، درفضای سه‌بعدی معمولی عبارت است از :

$$R(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{۲۱}$$

(۲) ماتریس دوران یک ذره بااسپین $\frac{1}{2}$ در فضای حالتها (فصل نهم را ببینید) عبارت است از :

$$R^{(1/2)}(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{2}(\alpha+\gamma)} \cos\frac{\beta}{2} & -e^{\frac{i}{2}(\gamma-\alpha)} \sin\frac{\beta}{2} \\ e^{\frac{i}{2}(\alpha-\gamma)} \sin\frac{\beta}{2} & e^{\frac{i}{2}(\alpha+\gamma)} \cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \tag{۲۲}$$

d ــ ویژه مقدارها و ویژه بردارهای یک عملگریکانی

فرض کنید $|\psi_u\rangle$ یک ویژه بردار بهنجار شدهٔ عملگر یکانی U با ویژه مقدار u ، باشد :

$$U|\psi_u\rangle = u|\psi_u\rangle \tag{۲۳}$$

مجذور هنجار بردار $U|\psi_u\rangle$ برابراست با :

$$\langle\psi_u|U^\dagger U|\psi_u\rangle = u^*u\langle\psi_u|\psi_u\rangle = u^*u \tag{۲۴}$$

چون عملگر یکانی هنجار را پایسته نگه می‌دارد، لزوماً"، داریم $u^*u = 1$. بنابر این ویژه مقدارهای یک عملگر یکانی باید اعداد مختلط با قدر مطلق ۱ باشند:

$$u = e^{i\varphi_u} \quad \text{که } \varphi_u \text{ حقیقی است} \tag{۲۵}$$

دو ویژه بردار U، $\langle \psi_u |$ و $\langle \psi_{u'} |$، را در نظر بگیرید، دراین صورت داریم:

$$\begin{aligned} \langle \psi_u | \psi_{u'} \rangle &= \langle \psi_u | U^\dagger U | \psi_{u'} \rangle = u^* u' \langle \psi_u | \psi_{u'} \rangle \\ &= e^{i(\varphi_{u'} - \varphi_u)} \langle \psi_u | \psi_{u'} \rangle \end{aligned} \tag{۲۶}$$

از (۲۶) ملاحظه می‌کنیم که، وقتی ویژه مقدارهای u و u' متفاوت باشند، حاصلضرب نرداری $\langle \psi_u | \psi_{u'} \rangle$ صفر است: دو ویژه بردار یک عملگر یکانی که متناظر با دو ویژه مقدار مختلف هستند متعامدند.

۳ ــ تبدیلات یکانی روی عملگرها

در بخش b ــ ۱ دیدیم که عملگر یکانی U امکان می‌دهد تا، با شروع از یک پایه راست هنجار $\{ | v_i \rangle \}$ از $\mathscr{E}$، یک پایه دیگر، $\{ | \tilde{v}_i \rangle \}$، بسازیم. دراین بخش تبدیلی را تعریف خواهیم کرد که، نه روی بردارها، بلکه روی عملگرها عمل می‌کند.

بنا به‌تعریف، تبدیل $\tilde{A}$ ی عملگر A عملگری است که در پایه $\{ | \tilde{v}_i \rangle \}$، دارای همان عناصر ماتریسی عملگر A در پایه $\{ | v_i \rangle \}$ است:

$$\langle \tilde{v}_i | \tilde{A} | \tilde{v}_j \rangle = \langle v_i | A | v_j \rangle \tag{۲۷}$$

با قرار دادن (۸) دراین معادله، خواهیم یافت:

$$\langle v_i | U^\dagger \tilde{A} U | v_j \rangle = \langle v_i | A | v_j \rangle \tag{۲۸}$$

چون i و j دلخواه هستند، داریم:

$$U^\dagger \tilde{A} U = A \tag{۲۹}$$

یا، با ضرب کردن این معادله از طرف چپ در U و از طرف راست در $U^\dagger$:

$$\tilde{A} = U A U^\dagger \tag{۳۰}$$

معادله (۳۰) را می‌توان به‌عنوان تعریف تبدیل $\tilde{A}$ ی عملگر A توسط تبدیل یکانی U در نظر گرفت. در مکانیک کوانتومی، چنین تبدیلاتی غالبا " به‌کار برده می‌شود: اولین مثال در مکمل F همین فصل (بخش a ـ ۲) داده شده است.

حال به‌بینیم ویژه بردارهای $\tilde{A}$ را چگونه می‌توان از ویژه بردارهای A به‌دست آورد. یک ویژه بردار $|\varphi_a\rangle$ از A با ویژه مقدار a را در نظر بگیرید:

$$A|\varphi_a\rangle = a|\varphi_a\rangle \tag{۳۱}$$

فرض کنید $|\tilde{\varphi}_a\rangle$ تبدیل $|\varphi_a\rangle$، به‌وسیله عملگر U، باشد: $|\tilde{\varphi}_a\rangle = U|\varphi_a\rangle$. دراین صورت داریم:

$$\begin{aligned}\tilde{A}|\tilde{\varphi}_a\rangle &= (UAU^\dagger)U|\varphi_a\rangle = UA(U^\dagger U)|\varphi_a\rangle \\ &= UA|\varphi_a\rangle = aU|\varphi_a\rangle \\ &= a|\tilde{\varphi}_a\rangle\end{aligned} \tag{۳۲}$$

بنابراین، $|\tilde{\varphi}_a\rangle$ یک ویژه بردار $\tilde{A}$، با ویژه مقدار a، است. این‌مطلب می‌تواند به‌قاعده زیر تعمیم داده شود: ویژه بردارهای تبدیل $\tilde{A}$ ی‌عملگر A، عبارتند از تبدیلهای $|\tilde{\varphi}_a\rangle$ ی ویژه بردارهای $|\varphi_a\rangle$ ی A؛ ویژه مقدارها بدون تغییر می‌مانند.

گـوشـزدها:

(i) الحاقی تبدیل $\tilde{A}$ ی عملگر A، توسط U، برابر است با تبدیل $A^\dagger$ به‌وسیله U:

$$(\tilde{A})^\dagger = (UAU^\dagger)^\dagger = UA^\dagger U^\dagger = \widetilde{A^\dagger} \tag{۳۳}$$

بخصوص، ازین معادله نتیجه می‌شود که، اگر A هرمیتی باشد، $\tilde{A}$ نیز هرمیتی است.

(ii) به‌طور مشابه داریم:

$$(\tilde{A})^2 = UAU^\dagger UAU^\dagger = UAAU^\dagger = \widetilde{A^2}$$

و به‌طور کلی:

$$(\tilde{A})^n = \widetilde{A^n} \tag{۳۴}$$

با استفاده از تعریف (۲۳) از مکمل B_{II}، به‌سادگی می‌توانیم نشان دهیم:

$$\tilde{F}(A) = F(\tilde{A}) \qquad (۳۵)$$

که در آن $F(A)$ تابعی از عملگر A است.

۳ ـ اپراتور یکانی بینهایت کوچک

فرض کنید $U(\varepsilon)$ یک اپراتور یکانی باشد که فقط به‌یک کمیت حقیقی بینهایت‌کوچک ε بستگی داشته باشد، بنا به‌فرض، وقتی ε به‌سمت صفر میل کند، $U(\varepsilon) \longrightarrow \mathbb{1}$، $U(\varepsilon)$ را برحسب توانهای ε بسط دهیم:

$$U(\varepsilon) = \mathbb{1} + \varepsilon G + ... \qquad (۳۶)$$

بنابراین داریم:

$$U^{\dagger}(\varepsilon) = \mathbb{1} + \varepsilon G^{\dagger} + ... \qquad (۳۷)$$

و:

$$U(\varepsilon) U^{\dagger}(\varepsilon) = U^{\dagger}(\varepsilon) U(\varepsilon) = \mathbb{1} + \varepsilon(G + G^{\dagger}) + ... \qquad (۳۸)$$

چون $U(\varepsilon)$ یکانی است، جملات مرتبه اول نسبت به ε، در طرف راست (۳۸) صفرند، بنابراین داریم:

$$G + G^{\dagger} = 0 \qquad (۳۹)$$

این معادله بیان می‌کند که G پاد هرمیتی است. بهتر است قرار دهیم:

$$F = iG \qquad (۴۰)$$

تا معادله:

$$F - F^{\dagger} = 0 \qquad (۴۱)$$

را بدست آوریم، که بیان می‌کند F هرمیتی‌است. بنابراین، یک عملگر یکانی بینهایت کوچک می‌تواند به‌صورت:

$$U(\varepsilon) = \mathbb{1} - i\varepsilon F \qquad (۴۲)$$

نوشته شود ، که درآن F یک عملگر هرمیتی است .

با قراردادن (۴۲) در (۳۰) نتیجه می‌شود :

$$\tilde{A} = (\mathbb{1} - i\varepsilon F)A(\mathbb{1} + i\varepsilon F^{\dagger}) = (\mathbb{1} - i\varepsilon F)A(\mathbb{1} + i\varepsilon F) \qquad (۴۳)$$

و ، لذا :

$$\tilde{A} - A = - i\varepsilon[F, A] \qquad (۴۴)$$

تغییرات عملگر A تحت تبدیل U ، تا مرتبه اول نسبت به ε ، متناسب است با جابجاگر $[F, A]$.

مکمل D_{II}

مطالعه مفصل‌تر نمایشهای $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ و $\{|\mathbf{p}\rangle\}$

۱ ــ نمایش $\{|\mathbf{r}\rangle\}$
a ــ عملگر $\mathbf{R}$ و توابع $\mathbf{R}$
b ــ عملگر $\mathbf{P}$ و توابع $\mathbf{P}$
c ــ معادله شرودینگر در نمایش $\{|\mathbf{r}\rangle\}$
۲ ــ نمایش $\{|\mathbf{p}\rangle\}$
a ــ عملگر $\mathbf{P}$ و توابع $\mathbf{P}$
b ــ عملگر $\mathbf{R}$ و توابع $\mathbf{R}$
c ــ معادله شرودینگر در نمایش $\{|\mathbf{p}\rangle\}$

۱ ــ نمایش $\{|\mathbf{r}\rangle\}$

a ــ عملگر $\mathbf{R}$ و توابع $\mathbf{R}$

عناصر ماتریسی عملگرهای X، Y، Z در نمایش $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ را محاسبه کنیم . با استفاده از فرمول (E ــ ۳۶) از فصل دوم و روابط تعامد کتهای $|\mathbf{r}\rangle$ ، بلافاصله به‌دست می‌آوریم :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | X | \mathbf{r}' \rangle &= x\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ \langle \mathbf{r} | Y | \mathbf{r}' \rangle &= y\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ \langle \mathbf{r} | Z | \mathbf{r}' \rangle &= z\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \end{aligned} \quad (۱)$$

این سه‌معادله می‌توانند در یک معادله گنجانده شوند :

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{R} | \mathbf{r}' \rangle = \mathbf{r}\,\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (۲)$$

عناصر ماتریسی یک تابع $F(\mathbf{R})$ ، در نمایش $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ ، نیزبسیار ساده است [رک معادله (۲۷) از مکمل B_{II}] :

$$\langle \mathbf{r} | F(\mathbf{R}) | \mathbf{r}' \rangle = F(\mathbf{r})\,\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (۳)$$

b ــ عملگر P و توابع P

عنصر ماتریسی $\langle \mathbf{r} \mid P_x \mid \mathbf{r}' \rangle$ را محاسبه کنیم:

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{r} \mid P_x \mid \mathbf{r}' \rangle &= \int d^3p \, \langle \mathbf{r} \mid P_x \mid \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} \mid \mathbf{r}' \rangle \\ &= \int d^3p \, p_x \langle \mathbf{r} \mid \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} \mid \mathbf{r}' \rangle \\ &= (2\pi\hbar)^{-3} \int d^3p \, p_x \, e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}.(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \\ &= \left[\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dp_x \, p_x e^{\frac{i}{\hbar}p_x(x-x')}\right] \times \\ &\times \left[\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dp_y \, e^{\frac{i}{\hbar}p_y(y-y')}\right] \times \\ &\times \left[\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dp_z \, e^{\frac{i}{\hbar}p_z(z-z')}\right]\end{aligned} \qquad (۴)$$

ازاین رابطه، بااستفاده از شکل انتگرالی " تابع دلتا " و مشتق آن [رک پیوست II ، معادلات (۳۴) و (۵۳)] ، نتیجه می‌شود:

$$\langle \mathbf{r} \mid P_x \mid \mathbf{r}' \rangle = \frac{\hbar}{i}\delta'(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z') \qquad (۵)$$

عناصر ماتریسی سایر مؤلفه‌های P می‌توانند به‌روش مشابهی به‌دست آیند.

حال، ثابت کنیم که عمل P_x در نمایش $\{\langle \mathbf{r} \mid\}$، در واقع می‌تواندازفرمول (۵) نتیجه شود. برای این منظور انتگرال زیر را محاسبه کنیم:

$$\langle \mathbf{r} \mid P_x \mid \psi \rangle = \int d^3r' \, \langle \mathbf{r} \mid P_x \mid \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' \mid \psi \rangle \qquad (۶)$$

از (۵) داریم:

$$\langle \mathbf{r} \mid P_x \mid \psi \rangle = \frac{\hbar}{i}\int \delta'(x-x')\,dx' \int \delta(y-y')\,dy' \int \delta(z-z')\psi(x',y',z')\,dz' \qquad (۷)$$

با استفاده از رابطه:

$$\int \delta'(-u)f(u)\,du = -\int \delta'(u)f(u)\,du = f'(0) \qquad (۸)$$

و قرار دادن $u = x' - x$ ، خواهیم داشت:

$$\langle \mathbf{r} | P_x | \psi \rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x, y, z) \tag{۹}$$

که در واقع همان معادله (۲۶ ــ E)از فصل دوم است.

مقدار عنصر ماتریسی $\langle \mathbf{r} | G(\mathbf{P}) | \mathbf{r}' \rangle$ وابسته به‌یک تابع $G(\mathbf{P})$ از عملگر $\mathbf{P}$ چقدر است؟ محاسبه مشابهی به‌ما می‌دهد:

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{r} | G(\mathbf{P}) | \mathbf{r}' \rangle &= \int d^3p \langle \mathbf{r} | G(\mathbf{P}) | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \mathbf{r}' \rangle \\ &= (2\pi\hbar)^{-3} \int d^3p\, G(\mathbf{p})\, e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}.(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \\ &= (2\pi\hbar)^{-3/2}\, \tilde{G}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\end{aligned} \tag{۱۰}$$

که درآن $\tilde{G}(\mathbf{r})$ تبدیل فوریه معکوس تابع $G(\mathbf{p})$ است:

$$\tilde{G}(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d^3p\, e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}.\mathbf{r}}\, G(\mathbf{p}) \tag{۱۱}$$

c ــ معادلهٔ شرودینگر در نمایش $\{ | \mathbf{r} \rangle \}$

در فصل سوم، معادله شرودینگر را، که در مکانیک کوانتومی از اهمیتی اساسی برخوردار است، وارد خواهیم کرد:

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} | \psi(t) \rangle = H | \psi(t) \rangle \tag{۱۲}$$

که درآن، H عملگر هامیلتونی است، که آنرا در همانجا تعریف خواهیم‌کرد. برای‌یک ذره (بدون اسپین) در پتانسیل نرداری $V(\mathbf{r})$ [رک معادله (۴۲ ــ B) از فصل سوم] داریم:

$$H = \frac{1}{2m}\mathbf{P}^2 + V(\mathbf{R}) \tag{۱۳}$$

اکنون به‌ببینیم کهاین معادله را چگونه در نمایش $\{ | \mathbf{r} \rangle \}$، یعنی، بااستفاده‌ازتابع موج $\psi(\mathbf{r}, t)$، که به‌صورت:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r} | \psi(t) \rangle \tag{۱۴}$$

تعریف شده‌است، می‌نویسیم. با تصویرکردن (۲)روی $\langle \mathbf{r} |$، در موردی که H توسط فرمول (۱۳) داده شده‌است، به‌دست می‌آوریم:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle \mathbf{r} \mid \psi(t)\rangle = \frac{1}{2m}\langle \mathbf{r} \mid \mathbf{P}^2 \mid \psi(t)\rangle + \langle \mathbf{r} \mid V(\mathbf{R}) \mid \psi(t)\rangle \qquad (۱۵)$$

کمیتهای وارد دراین معادله می‌توانند برحسب $\psi(\mathbf{r}, t)$ بیان شوند ، در واقع داریم :

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle \mathbf{r} \mid \psi(t)\rangle = \frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r}, t) \qquad (۱۶)$$

$$\langle \mathbf{r} \mid V(\mathbf{R}) \mid \psi(t)\rangle = V(\mathbf{r})\ \psi(\mathbf{r}, t) \qquad (۱۷)$$

عنصر ماتریسی $\langle \mathbf{r} \mid \mathbf{P}^2 \mid \psi \rangle$ را می‌توان بااستفاده ازاین واقعیت که $\mathbf{P}$ در نمایش $\{ \mid \mathbf{r} \rangle \}$ ، مانند $\frac{\hbar}{i}\nabla$ عمل می‌کند ، محاسبه کرد :

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{r} \mid \mathbf{P}^2 \mid \psi(t)\rangle &= \langle \mathbf{r} \mid (P_x^2 + P_y^2 + P_z^2) \mid \psi(t)\rangle \\ &= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x, y, z, t) \\ &= -\hbar^2 \Delta\psi(\mathbf{r}, t)\end{aligned} \qquad (۱۸)$$

دراین صورت معادله شرودینگر به‌صورت زیر در می‌آید :

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r}, t)} \qquad (۱۹)$$

این ، در واقع ، همان معادله معرفی شده در فصل اول (بخش۲ ــ B)است .

۳ ــ نمایش $\{ \mid \mathbf{p} \rangle \}$

a ــ عملگر P و توابع P

بدون هیچ اشکالی فرمولهائی مشابه با (۲)و(۳) به‌دست می‌آوریم :

$$\langle \mathbf{p} \mid \mathbf{P} \mid \mathbf{p}'\rangle = \mathbf{p}\,\delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \qquad (۲۰)$$

$$\langle \mathbf{p} \mid G(\mathbf{P}) \mid \mathbf{p}'\rangle = G(\mathbf{p})\,\delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \qquad (۲۱)$$

b ــ عملگر R و توابع R

استدلالهائی مشابه با استدلالهای بخش ۱ فرمولهائی متناظر با (۵) و(۱۰) به‌ما می‌دهند :

$$\langle \mathbf{p} \,|\, X \,|\, \mathbf{p}' \rangle = i\hbar\, \delta'(p_x - p'_x)\delta(p_y - p'_y)\delta(p_z - p'_z) \qquad (۲۲)$$

و :

$$\langle \mathbf{p} \,|\, F(\mathbf{R}) \,|\, \mathbf{p}' \rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2}\, \overline{F}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \qquad (۲۳)$$

با :

$$\overline{F}(\mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d^3r\; e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}\, F(\mathbf{r}) \qquad (۲۴)$$

c ـ معادله شرودینگر در نمایش $\{\,|\,\mathbf{p}\,\rangle\,\}$

حال ، " تابع موج در نمایش$\{\,|\,\mathbf{p}\,\rangle\,\}$" را به‌صورت زیر وارد کنیم :

$$\overline{\psi}(\mathbf{p}, t) = \langle \mathbf{p} \,|\, \psi(t) \rangle \qquad (۲۵)$$

و بااستفاده از (۱۲) ، معادله‌ای پیدا کنیم که تحول زمانی $\overline{\psi}(\mathbf{p}, t)$ را به‌ما بدهد . باتصویر کردن (۱۲) روی کت $\langle\, \mathbf{p} \,|$ ، خواهم یافت :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{p} \,|\, \psi(t) \rangle = \frac{1}{2m} \langle \mathbf{p} \,|\, \mathbf{P}^2 \,|\, \psi(t) \rangle + \langle \mathbf{p} \,|\, V(\mathbf{R}) \,|\, \psi(t) \rangle \qquad (۲۶)$$

اکنون داریم :

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{p} \,|\, \psi(t) \rangle = \frac{\partial}{\partial t} \overline{\psi}(\mathbf{p}, t) \qquad (۲۷)$$

$$\langle \mathbf{p} \,|\, \mathbf{P}^2 \,|\, \psi(t) \rangle = \mathbf{p}^2\, \overline{\psi}(\mathbf{p}, t) \qquad (۲۸)$$

کمیتی که باید محاسبه کنیم عبارت است از :

$$\langle \mathbf{p} \,|\, V(\mathbf{R}) \,|\, \psi(t) \rangle = \int d^3p'\, \langle \mathbf{p} \,|\, V(\mathbf{R}) \,|\, \mathbf{p}' \rangle \langle \mathbf{p}' \,|\, \psi(t) \rangle \qquad (۲۹)$$

بااستفاده از (۲۳) ، نتیجه می‌گیریم :

$$\langle \mathbf{p} \,|\, V(\mathbf{R}) \,|\, \psi(t) \rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d^3p'\, \overline{V}(\mathbf{p} - \mathbf{p}')\overline{\psi}(\mathbf{p}', t) \qquad (۳۰)$$

که در آن $\overline{V}(\mathbf{p})$ تبدیل فوریه $V(\mathbf{r})$ است :

$$\overline{V}(\mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d^3r \, e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}.\mathbf{r}} \, V(\mathbf{r}) \qquad (۳۱)$$

بنابراین، معادله شرودینگر در نمایش $\{|\mathbf{p}\rangle\}$ به‌صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\overline{\psi}(\mathbf{p}, t) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}\overline{\psi}(\mathbf{p}, t) + (2\pi\hbar)^{-3/2}\int d^3p' \, \overline{V}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\overline{\psi}(\mathbf{p}', t)} \qquad (۳۲)$$

گوشزد :

چون $\overline{\psi}(\mathbf{p}, t)$ تبدیل فوریه $\psi(\mathbf{r}, t)$ است[رک فرمول (۱۸ــ E) از فصل دوم] ، می‌توانستیم ، معادله (۳۲) را باگرفتن تبدیلات فوریهٔ دوطرف معادله (۱۹) به‌دست آوریم .

مکمــل E_{II}

چند خاصیت عمومی دومشاهده‌پذیر Q و P، که جابجاگر آنها برابر با $i\hbar$ است .

۱ ــ عملگر $S(\lambda)$: تعریف ، خواص

۲ ــ ویژه مقدارها و ویژه بردارهای Q

a ــ طیف Q

b ــ درجه تبهگنی

c ــ ویژه بردارها

۳ ــ نمایش $\{|q\rangle\}$

a ــ عمل Q در نمایش $\{|q\rangle\}$

b ــ عمل $S(\lambda)$ در نمایش $\{|q\rangle\}$ ، عملگر انتقال

c ــ عمل P در نمایش $\{|q\rangle\}$

۴ ــ نمایش $\{|p\rangle\}$ تقارن بین مشاهده‌پذیرهای P و Q

در مکانیک کوانتومی ، غالبا" به‌عملگرهائی برخورد می‌کنیم که جابجاگر آنهابرابر $i\hbar$ است . یک مورد وقتی است که به‌عنوان مثال ، این دوعملگر متناظر با دوکمیت‌کلاسیکی همیوغ q_i و p_i (مختصه q_i در یک دستگــاه محورهــای راست هنجــار ، و تکانه همیوغ $p_i = \dfrac{\partial \mathscr{L}}{\partial q_i}$) باشند . در مکانیک کوانتومی ، به q_i و p_i عملگرهای Q_i و P_i راکه دررابطه

$$[Q_i, P_i] = i\hbar \qquad (۱)$$

صدق می‌کنند وابسته می‌کنیم .

در بخش E از فصل دوم ، باچنین عملگرهائی مواجه شده‌ایم : X و P_x . در این مکمل ، یک‌دیدگاه عام‌تری را انتخاب خواهیم کرد و نشان خواهیم داد که می‌توان مجموعه کاملی‌ازخواص‌مهم مربوط‌به‌دومشاهده‌پذیر P و Q ، را که جابجاگرشان بــرابــر $i\hbar$ است ، برقرار ساخت . تمام این خواص، نتایج رابطه جابجائی (۱) هستند .

۱ ــ عملگر $S(\lambda)$: تعریف ، خواص

دو مشاهده‌پذیر P و Q درنظر خواهیم گرفت که دررابطه زیر صدق کنند :

$$[Q, P] = i\hbar \qquad (۲)$$

و عملگر $S(\lambda)$ را ، که به فراسنج حقیقی λ بستگی دارد ، توسط رابطه زیر تعریف می‌کنیم :

$$S(\lambda) = e^{-i\lambda P/\hbar} \tag{۳}$$

این عملگر یکانی است ، به‌سادگی می‌توان روابط زیر را ثابت کرد :

$$S^{\dagger}(\lambda) = S^{-1}(\lambda) = S(-\lambda) \tag{۴}$$

حال ، جابجاگر $[Q, S(\lambda)]$ را محاسبه کنیم . می‌توانیم فرمول (۵۱) از مکمل B_{II} را به‌کار بریم ، زیرا $[Q, P] = i\hbar$ با Q و P جابجائی‌پذیر است :

$$[Q, S(\lambda)] = i\hbar\left(-\frac{i\lambda}{\hbar}\right)e^{-i\lambda P/\hbar} = \lambda S(\lambda) \tag{۵}$$

این رابطه به‌صورت زیر نیز می‌تواند نوشته شود :

$$Q S(\lambda) = S(\lambda)[Q + \lambda] \tag{۶}$$

بالاخره توجه کنید که :

$$S(\lambda) S(\mu) = S(\lambda + \mu) \tag{۷}$$

۳ ـ ویژه مقدارها و ویژه بردارهای Q

a ـ طیف Q

فرض کنید که Q یک ویژه بردار غیر صفر $|q\rangle$ ، با ویژه مقدار q ، داشته باشد :

$$Q|q\rangle = q|q\rangle \tag{۸}$$

معادله (۶) را به‌بردار $|q\rangle$ اعمال کنید ، نتیجه می‌شود :

$$\begin{aligned} Q\, S(\lambda)|q\rangle &= S(\lambda)(Q + \lambda)|q\rangle \\ &= S(\lambda)(q + \lambda)|q\rangle = (q + \lambda) S(\lambda)|q\rangle \end{aligned} \tag{۹}$$

این معادله بیان می‌کند که $S(\lambda)|q\rangle$ یک ویژه بردار غیر صفر دیگر Q ، با یک ویژه مقدار $(q + \lambda)$ است ($S(\lambda)|q\rangle$ غیرصفر است زیرا $S(\lambda)$ یکانی است) .

بدین ترتیب، باشروع از یک ویژه بردار Q، می‌توان، بااعمال $S(\lambda)$، یک ویژه‌برداردیگر Q باهرویژه‌مقدارحقیقی، را ساخت (درحقیقت λ می‌تواند هرمقدار حقیقی‌ای را بگیرد). بنابراین، طیف Q طیف پیوسته‌ای است، که از تمام مقادیر ممکن روی محور حقیقی تشکیل یافته است.*

b ــ درجه تبهگنی

ازین به‌بعد، برای سهولت، فرض خواهیم کرد که‌ویژه مقدار q ی عملگر Q ناتبهگن است (نتایجی که به‌دست خواهیم آورد می‌توانند به‌موردی که q تبهگن است تعمیم داده شوند). اکنون نشان دهیم که اگر q ناتبهگن باشد، تمام ویژه مقدارهای دیگر Q نیز ناتبهگن‌اند. به‌عنوان مثال، فرض می‌کنیم که ویژه مقدار $q + \lambda$ دوبارتبهگن‌است، و نشان خواهیم‌داد که به‌یک تناقض می‌رسیم. دراین‌صورت دوویژه‌بردارمتعامد $|q + \lambda, \alpha\rangle$ و $|q + \lambda, \beta\rangle$، متناظر با ویژه مقدار $q + \lambda$ وجود خواهد داشت:

$$\langle q + \lambda, \beta | q + \lambda, \alpha\rangle = 0 \qquad (۱۰)$$

دوبردار $S(-\lambda)|q + \lambda, \alpha\rangle$ و $S(-\lambda)|q + \lambda, \beta\rangle$ را درنظر بگیرید. این‌دوبردار برطبق (۹)، دوویژه بردار Q. بایک ویژه مقدار $q = q + \lambda - \lambda$ هستند. این‌دوبردار همخط نیستند، زیرا متعامدند، باتوجه به‌این واقعیت که $S(\lambda)$ یکانی است، حاصلضرب برداری آنها می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود:

$$\langle q + \lambda, \beta | S^{\dagger}(-\lambda)S(-\lambda)| q + \lambda, \alpha\rangle = \langle q + \lambda, \beta | q + \lambda, \alpha\rangle = 0 \qquad (۱۱)$$

---

* این‌مطلب نشان می‌دهدکه دریک فضای $\mathscr{E}$ بابعدمحدود N، مشاهده‌پذیرهای Q و P ای که جابجاگرشان برابر $i\hbar$ باشد وجود ندارند. تعدادویژه‌مقدارهای Q نمی‌توانند، به‌طورهمزمان هم‌کوچکتر یامساوی با N بوده و هم بی‌نهایت باشد.

بعلاوه، این نتیجه می‌تواند مستقیماً "با گرفتن رد رابطه (۲)،یعنی، $\text{Tr}\, QP - \text{Tr}\, PQ = \text{Tr}\, i\hbar$ اثبات شود. وقتی N محدودباشد، ردهای‌طرف چپ این‌معادله وجود دارند: اعدادی محدود و مساوی هستند [رک مکمل B_{II}، فرمول (a ــ۷)]. بنابراین معادله می‌شود: $0 = \text{Tr}\, i\hbar = Ni\hbar$ که غیر ممکن است.

به‌این نتیجه می‌رسیم‌که q لااقل دوبار تبهگن است ، که با فرض اولیه تناقض دارد . درنتیجه تمام ویژه مقدارهای Q باید دارای درجه تبهگنی یکسانی باشند .

c ــ ویژه بردارها

فازهای نسبی ویژه بردارهای مختلف Q نسبت به‌ویژه بردار $|0\rangle$ ، باویژه‌مقدار صفر ، را با قراردادن :

$$|q\rangle = S(q)|0\rangle \tag{۱۲}$$

مشخص می‌کنیم .

بااعمال $S(\lambda)$ به‌هردوطرف (۱۲)و بکاربردن (۷) ، نتیجه می‌گیریم :

$$S(\lambda)|q\rangle = S(\lambda)S(q)|0\rangle = S(\lambda + q)|0\rangle = |q + \lambda\rangle \tag{۱۳}$$

عبارت الحاقی (۱۳) به‌صورت :

$$\langle q|S^{\dagger}(\lambda) = \langle q + \lambda| \tag{۱۴}$$

یا ، بااستفاده از (۴) وجایگزین کردن λ توسط $\lambda-$ ، به‌صورت :

$$\langle q|S(\lambda) = \langle q - \lambda| \tag{۱۵}$$

نوشته می‌شود .

۳ ــ نمایش $\{|q\rangle\}$

چون Q یک مشاهده‌پذیراست ، مجموعهٔ ویژه بردارهای آن ، $\{|q\rangle\}$ ، یک‌پایه در $\mathscr{E}$ تشکیل‌می‌دهند . می‌توان هرکت راتوسط "تابع موج آن درنمایش $\{|q\rangle\}$ مشخص‌کرد" :

$$\psi(q) = \langle q|\psi\rangle \tag{۱۶}$$

a ــ عمل Q در نمایش $\{|q\rangle\}$

حال ، تابع موج وابسته به‌کت $Q|\psi\rangle$ را درنمایش $\{|q\rangle\}$ [بااستفاده از (۸) و

این واقعیت که Q هرمیتی است] محاسبه می‌کنیم:

$$\langle q|Q|\psi\rangle = q\langle q|\psi\rangle = q\psi(q) \qquad (۱۷)$$

بنابراین عمل Q در نمایش $\{\langle q|\}$ فقط یک ضرب در p است.

b ــ عمل $S(\lambda)$ درنمایش $\{\langle q|\}$، عملگر انتقال

تابع موج وابسته به‌کت $\langle\psi|S(\lambda)$ درنمایش $\{\langle q|\}$ به‌صورت زیر نوشته می‌شود [فرمول (۱۵)]:

$$\langle q|S(\lambda)|\psi\rangle = \langle q-\lambda|\psi\rangle = \psi(q-\lambda) \qquad (۱۸)$$

بنابراین، عمل عملگر $S(\lambda)$ درنمایش $\{\langle q|\}$ عبارت است ازیک انتقال تابع موج به‌اندازه λ به‌موازات محور q ها*. به‌این دلیل، $S(\lambda)$ عملگر انتقال نامیده می‌شود.

c ــ عمل P در نمایش $\{\langle q|\}$

وقتی ε کمیت بینهایت کوچکی باشد، داریم:

$$S(-\varepsilon) = e^{i\varepsilon P/\hbar} = \mathbb{1} + i\frac{\varepsilon}{\hbar}P + O(\varepsilon^2) \qquad (۱۹)$$

در نتیجه:

$$\langle q|S(-\varepsilon)|\psi\rangle = \psi(q) + i\frac{\varepsilon}{\hbar}\langle q|P|\psi\rangle + O(\varepsilon^2) \qquad (۲۰)$$

از طرف دیگر، معادله (۱۸) می‌دهد:

$$\langle q|S(-\varepsilon)|\psi\rangle = \psi(q+\varepsilon) \qquad (۲۱)$$

مقایسه (۲۰) و (۲۱) نشان می‌دهد:

$$\psi(q+\varepsilon) = \psi(q) + i\frac{\varepsilon}{\hbar}\langle q|P|\psi\rangle + O(\varepsilon^2) \qquad (۲۲)$$

---

* تابع $f(x-a)$ تابعی است که در نقطه $x = x_0 + a$، مقدار $f(x_0)$ را می‌گیرد. بنابراین، تابعی است که از $f(x)$ توسط یک انتقال $+a$ به‌دست آمده است.

لذا نتیجه می‌شود :

$$\langle q \,|\, P \,|\, \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\psi(q + \varepsilon) - \psi(q)}{\varepsilon}$$
$$= \frac{\hbar}{i} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q} \psi(q) \qquad (۲۳)$$

بنابراین ، عمل P در نمایش $\{\,|q\rangle\,\}$ همان عمل $\frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}$ است . بدین ترتیب ،معادله (۲۶ـــ E) از فصل دوم را تعمیم می‌دهیم .

۴ ــ نمایش $\{\,|p\rangle\,\}$.

تقارن بین مشاهده‌پذیرهای P و Q

رابطه (۲۳) ما را قادر می‌سازد تا ، در نمایش $\{\,|q\rangle\,\}$ ، به‌سادگی تابع موج $v_p(q)$ ی وابسته به‌ویژه‌بردار $|p\rangle$ ی عملگر P با ویژه مقدار p را به‌دست آوریم :

$$v_p(q) = \langle q \,|\, p \rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2}\, \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}pq} \qquad (۲۴)$$

در نتیجه می‌توان نوشت :

$$|\, p \rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}q\, \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}pq}\, |\, q \rangle \qquad (۲۵)$$

یک کت $|\psi\rangle$ می‌تواند توسط" تابع موجش در نمایش $\{\,|p\rangle\,\}$ " تعریف شود :

$$\overline{\psi}(p) = \langle p \,|\, \psi \rangle \qquad (۲۶)$$

بااستفاده از الحاقی رابطه (۲۵) ، خواهیم داشت :

$$\overline{\psi}(p) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}q\, \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}pq}\, \psi(q) \qquad (۲۷)$$

بنابراین ، $\overline{\psi}(p)$ تبدیل فوریه $\psi(q)$ است .

عمل عملگر P در نمایش $\{\,|p\rangle\,\}$ متناظر است باضرب در p ، عمل عملگر Q ، همانطوری که می‌تواند بااستفاده از (۲۷) نشان داده شود ، متناظر است با عمل $i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}$.

بدین ترتیب در نمایشهای $\{|q\rangle\}$ و $\{|p\rangle\}$ نتایج متقارنی به‌دست می‌آوریم . این امر عجیب نیست : در فرضهایمان ، می‌توان P و Q را تعویض کرد به‌شرطی که علامت جابجاگر (۲) را عوض کنیم . بنابراین به‌جای عملگر $S(\lambda)$ ، می‌توانستیم $T(\lambda')$ را که به‌صورت :

$$T(\lambda') = e^{i\lambda' Q/\hbar} \qquad (۲۸)$$

تعریف شده است درنظر بگیریم ، و با جایگزین‌کردن P توسط Q و i توسط $-i$ در همه‌جا همان استدلالها را بنمائیم .

مراجع :

Messiah (1.17), Vol. I, §VIII-6; Dirac (1.13), §25; Merzbacher (1.16), chap. 14, §7.

مکمل F_{II}

عملگر پاریته

۱ ــ عملگر پاریته
a ــ تعریف
b ــ خواص ساده Π
c ــ ویژه زیرفضاهای Π
۲ ــ عملگرهای زوج و فرد
a ــ تعاریف
b ــ قواعد گزینش
c ــ مثالها
d ــ توابع عملگرها
۳ ــ ویژه حالتهای یک مشاهده‌پذیر زوج B_+
۴ ــ کاربرد در یک مورد خاص مهم

۱ ــ عملگر پاریته

a ــ تعریف

یک سیستم فیزیکی که فضای حالت آن $\mathscr{E}_r$ است در نظر بگیرید. عملگر پاریته Π توسط عمل آن روی بردارهای $|\mathbf{r}\rangle$، بردارهای پایه $\mathscr{E}_r$ تعریف می‌شود *:

$$\Pi\,|\,\mathbf{r}\,\rangle = |\,-\,\mathbf{r}\,\rangle \tag{۱}$$

بنابراین، عناصر ماتریسی Π در نمایش $\{\,|\,\mathbf{r}\,\rangle\,\}$ عبارتند از:

$$\langle\,\mathbf{r}\,|\,\Pi\,|\,\mathbf{r}'\,\rangle = \langle\,\mathbf{r}\,|\,-\,\mathbf{r}'\,\rangle = \delta(\mathbf{r}+\mathbf{r}') \tag{۲}$$

---

* باید دقت شود که $|-\mathbf{r}_0\rangle$ با $-|\mathbf{r}_0\rangle$ اشتباه نشود. اولی یک ویژه بردار $\mathbf{R}$ با ویژه مقدار $-\mathbf{r}_0$ و تابع موج $\xi_{-\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}+\mathbf{r}_0)$، و دومی یک ویژه بردار $\mathbf{R}$ با ویژه‌مقدار $\mathbf{r}_0$ و تابع موج $-\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) = -\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)$ است.

یک بردار دلخواه $|\psi\rangle$ از $\mathscr{E}_r$ در نظر بگیرید :

$$|\psi\rangle = \int d^3r\ \psi(\mathbf{r})\,|\mathbf{r}\rangle \tag{۳}$$

اگر تغییر متغیر $\mathbf{r}' = -\mathbf{r}$ انجام شود ، $|\psi\rangle$ می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود :

$$|\psi\rangle = \int d^3r'\ \psi(-\mathbf{r}')\,|-\mathbf{r}'\rangle \tag{۴}$$

حال ، $\Pi|\psi\rangle$ را محاسبه کنیم ، به‌دست می‌آوریم :

$$\Pi|\psi\rangle = \int d^3r'\ \psi(-\mathbf{r}')\,|\mathbf{r}'\rangle \tag{۵}$$

مقایسه (۳) و (۵) نشان می‌دهد که عمل Π در نمایش $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ عبارت است از تبدیل $\mathbf{r}$ به $-\mathbf{r}$:

$$\langle\mathbf{r}|\Pi|\psi\rangle = \psi(-\mathbf{r}) \tag{۶}$$

حال یک سیستم فیزیکی $\mathscr{S}$ در نظر بگیرید که بردار حالت آن $|\psi\rangle$ باشد ، $\Pi|\psi\rangle$ سیستم فیزیکی‌ای را تشریح می‌کند که از $\mathscr{S}$ توسط انعکاس نسبت به‌مبدأ محورها به‌دست‌آمده باشد .

b ــ خواص ساده Π

عملگر Π^2 ، اپراتورهمانندی است . از (۱) داریم :

$$\Pi^2|\mathbf{r}\rangle = \Pi(\Pi|\mathbf{r}\rangle) = \Pi|-\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r}\rangle \tag{۷}$$

یعنی ، چون کتهای $|\mathbf{r}\rangle$ یک پایه در $\mathscr{E}_r$ تشکیل می‌دهند :

$$\Pi^2 = \mathbb{1} \tag{۸ — a}$$

یا :

$$\Pi = \Pi^{-1} \tag{۸ — b}$$

به‌آسانی می‌توان توسط استقراء نشان داد که عملگر Π^n برابر است با :
— $\mathbb{1}$ وقتی n زوج باشد
— Π وقتی n فرد باشد
می‌توانیم (۶) را به‌صورت زیر بنویسیم :

$$\langle \mathbf{r} | \Pi | \psi \rangle = \langle -\mathbf{r} | \psi \rangle \tag{۹}$$

چون این معادله برای تمام $\langle \psi |$ ها معتبر است ، می‌توان نتیجه گرفت :

$$\langle \mathbf{r} | \Pi = \langle -\mathbf{r} | \tag{۱۰}$$

بعلاوه ، همیوغ هرمیتی (۱) به‌صورت زیر نوشته می‌شود :

$$\langle \mathbf{r} | \Pi^\dagger = \langle -\mathbf{r} | \tag{۱۱}$$

چون کتهای $\langle \mathbf{r} |$ یک پایه تشکیل می‌دهند ، از (۱۰) و (۱۱) نتیجه می‌شود که Π هرمیتی است :

$$\Pi^\dagger = \Pi \tag{۱۲}$$

از ترکیب این معادله با (b — ۸) ، به‌دست می‌آوریم :

$$\Pi^{-1} = \Pi^\dagger \tag{۱۳}$$

بنابراین Π یکانی نیز هست .

c — ویژه زیر فضاهای Π

فرض‌کنید $\langle \varphi_\pi |$ یک ویژه بردار Π ، باویژه مقدار p_π ، باشد . بااعمال (a — ۸) خواهیم داشت :

$$| \varphi_\pi \rangle = \Pi^2 | \varphi_\pi \rangle = p^2 | \varphi_\pi \rangle \tag{۱۴}$$

لذا داریم $p_\pi^2 = 1$: ویژه مقدارهای Π نمی‌توانند بجز ۱ و ۱ــ باشند . چون فضای $\mathscr{E}_\mathbf{r}$ بی‌نهایت بعدی است ، بلافاصله ملاحظه می‌کنیم که این ویژه مقدارها تبهگن‌اند . یک ویژه بردار Π با ویژه‌مقدار ۱+ را زوج و یک ویژه بردار با ویژه مقدار ۱ــ را فرد گوئیم .
دو عملگر P_+ و P_- را که به‌صورت :

$$P_+ = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \Pi) \qquad\qquad (۱۵)$$
$$P_- = \frac{1}{2}(\mathbb{1} - \Pi)$$

تعریف شده‌اند در نظر بگیرید. این عملگرها هرمیتی‌اند، بااستفاده از (a ـ ۸)، به‌سادگی می‌توان نشان داد که:

$$P_+^2 = P_+ \qquad\qquad (۱۶)$$
$$P_-^2 = P_-$$

بنابراین P_+ و P_- عبارتند از تصویرگرهای روی دو زیرفضای $\mathscr{E}_r$، که آنها را $\mathscr{E}_+$ و $\mathscr{E}_-$ خواهیم نامید. حال حاصلضربهای P_-P_+ و P_+P_- را محاسبه کنیم، به‌دست می‌آوریم:

$$P_+P_- = \frac{1}{4}(\mathbb{1} + \Pi - \Pi - \Pi^2) = 0 \qquad\qquad (۱۷)$$
$$P_-P_+ = \frac{1}{4}(\mathbb{1} - \Pi + \Pi - \Pi^2) = 0$$

بنابراین، دوزیرفضای $\mathscr{E}_+$ و $\mathscr{E}_-$ متعامدند. حال نشان دهیم که مکمل نیز هستند. ازتعریف (۱۵) بلافاصله مشاهده می‌کنیم که:

$$P_+ + P_- = \mathbb{1} \qquad\qquad (۱۸)$$

لذا برای هر $|\psi\rangle \in \mathscr{E}$ داریم:

$$|\psi\rangle = (P_+ + P_-)|\psi\rangle = |\psi_+\rangle + |\psi_-\rangle \qquad\qquad (۱۹)$$

با:

$$|\psi_+\rangle = P_+|\psi\rangle \qquad\qquad (۲۰)$$
$$|\psi_-\rangle = P_-|\psi\rangle$$

اکنون حاصلضربهای ΠP_+ و ΠP_- را محاسبه کنیم، خواهیم داشت:

$$\Pi P_+ = \frac{1}{2}\Pi(\mathbb{1} + \Pi) = \frac{1}{2}(\Pi + \mathbb{1}) = P_+ \qquad\qquad (۲۱)$$
$$\Pi P_- = \frac{1}{2}\Pi(\mathbb{1} - \Pi) = \frac{1}{2}(\Pi - \mathbb{1}) = -P_-$$

این معادلات ما را قادر می‌سازند تا نشان دهیم که بردارهای $|\psi_+\rangle$ و $|\psi_-\rangle$ که در (۲۰) آمده‌اند به‌ترتیب زوج و فرد هستند:

$$\begin{aligned} \Pi|\psi_+\rangle &= \Pi P_+|\psi\rangle = P_+|\psi\rangle = |\psi_+\rangle \\ \Pi|\psi_-\rangle &= \Pi P_-|\psi\rangle = -P_-|\psi\rangle = -|\psi_-\rangle \end{aligned} \tag{۲۲}$$

بنابراین، فضاهای $\mathscr{E}_+$ و $\mathscr{E}_-$ عبارتند از ویژه زیرفضاهای Π، با ویژه مقدارهای ۱+ و ۱−. معادلات (۲۲)، در نمایش $\{|\mathbf{r}\rangle\}$، می‌توانند به‌صورت زیر نوشته شوند:

$$\begin{aligned} \langle\mathbf{r}|\psi_+\rangle &= \psi_+(\mathbf{r}) = \langle\mathbf{r}|\Pi|\psi_+\rangle = \psi_+(-\mathbf{r}) \\ \langle\mathbf{r}|\psi_-\rangle &= \psi_-(\mathbf{r}) = -\langle\mathbf{r}|\Pi|\psi_-\rangle = -\psi_-(-\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{۲۳}$$

توابع موج $\psi_+(\mathbf{r})$ و $|\psi_-\rangle$ به‌ترتیب زوج و فرد هستند.

بنابراین، رابطه (۱۹) این واقعیت را بیان می‌کند که هرکت $|\psi\rangle$ از $\mathscr{E}_\mathbf{r}$ می‌تواند به‌مجموعی از دو ویژه‌بردار Π، $|\psi_+\rangle$ و $|\psi_-\rangle$، که به‌ترتیب به زیرفضای زوج $\mathscr{E}_+$ و زیر فضای فرد $\mathscr{E}_-$ تعلق دارند، تجزیه شود. لذا، Π یک مشاهده‌پذیر است.

۲ ـ عملگرهای زوج و فرد

a ـ تعاریف

در بخش ۲ از مکمل $\mathrm{C_{II}}$، مفهوم تبدیل یکانی عملگرها را تعریف کردیم. درمورد Π [که در واقع یکانی است، رک (۱۳)]، عملگر تبدیل یافته یک عملگردلخواه B بصورت:

$$\tilde{B} = \Pi B \Pi \tag{۲۴}$$

نوشته می‌شود و در رابطه:

$$\langle\mathbf{r}|\tilde{B}|\mathbf{r}'\rangle = \langle-\mathbf{r}|B|-\mathbf{r}'\rangle \tag{۲۵}$$

صدق می‌کند [رک معادله (۲۷) ازمکمل $\mathrm{C_{II}}$]. عملگر $\tilde{B}$ تبدیل‌پاریته‌ای B نامیده‌می‌شود.

بخصوص، اگر: $\tilde{B} = +B$ باشد، عملگر B زوج نامیده می‌شود.

اگر: $\tilde{B} = -B$ باشد، عملگر B فرد نامیده می‌شود. بنابراین، یک عملگرزوج

B_+ در رابطه زیر صدق می‌کند:

$$B_+ = \Pi B_+ \Pi \tag{۲۶}$$

یا، باضرب کردن این معادله از چپ در Π و استفاده از (a ــ ۸):

$$\Pi B_+ = B_+ \Pi \tag{۲۷}$$
$$[\Pi, B_+] = 0 \tag{۲۸}$$

بنابراین، یک عملگر زوج عملگری است که با Π جابجائی‌پذیر است. به‌طورمشابه، می‌توان دید که یک عملگر فرد B_- عملگری است که با Π پاد جابجائی‌پذیر است:

$$\Pi B_- + B_- \Pi = 0 \tag{۲۹}$$

b ــ قواعد گزینش

فرض کنید B_+ یک عملگر زوج باشد. حال عنصرماتریسی $\langle \varphi | B_+ | \psi \rangle$ را محاسبه کنیم، بنا به‌فرض داریم:

$$\langle \varphi | B_+ | \psi \rangle = \langle \varphi | \Pi B_+ \Pi | \psi \rangle = \langle \varphi' | B_+ | \psi' \rangle \tag{۳۰}$$

که در آن:

$$|\varphi'\rangle = \Pi |\varphi\rangle$$
$$|\psi'\rangle = \Pi |\psi\rangle \tag{۳۱}$$

اگریکی ازدوکت $\langle \varphi|$ و $\langle \psi|$ زوج ودیگری فردباشد ($|\varphi'\rangle = \pm |\varphi\rangle$ ، $|\psi'\rangle = \mp |\psi\rangle$) رابطه (۳۰) می‌دهد:

$$\langle \varphi | B_+ | \psi \rangle = - \langle \varphi | B_+ | \psi \rangle = 0 \tag{۳۲}$$

لذا به‌قاعده زیر می‌رسیم: عناصر ماتریسی یک عملگر زوج بین بردارهائی با پاریته مخالف صفرند.

حال اگر B_- فرد باشد، رابطه (۳۰) می‌شود:

$$\langle \varphi | B_- | \psi \rangle = - \langle \varphi' | B_- | \psi' \rangle \tag{۳۳}$$

که اگر $\langle \varphi |$ و $\langle \psi |$ هردو یا زوج یا فرد باشند، صفر است. بنابراین قاعده زیر را داریم: عناصر ماتریسی یک عملگر فرد بین بردارهائی با پاریته یکسان صفرند. بخصوص، عناصر ماتریسی قطری $\langle \psi | B_- | \psi \rangle$ (مقدار متوسط B_- در حالت $\langle \psi |$، رک فصل سوم، بخش ۴ ـ C) صفرند اگر $\langle \psi |$ دارای یک پاریته معین باشد.

c ـ مثالها

α ـ عملگرهای X، Y، Z

در این مورد داریم:

$$\Pi X|\mathbf{r}\rangle = \Pi X|x, y, z\rangle = x\Pi|x, y, z\rangle = x|-x, -y, -z\rangle = x|-\mathbf{r}\rangle \tag{۳۴}$$

و:

$$X\Pi|\mathbf{r}\rangle = X|-\mathbf{r}\rangle = X|-x, -y, -z\rangle = -x|-x, -y, -z\rangle = -x|-\mathbf{r}\rangle \tag{۳۵}$$

با جمع کردن این دومعادله، بدست می‌آوریم:

$$(\Pi X + X\Pi)|\mathbf{r}\rangle = 0 \tag{۳۶}$$

یا، چون بردارهای $\langle \mathbf{r}|$ یک پایه تشکیل می‌دهند:

$$\Pi X + X\Pi = 0 \tag{۳۷}$$

لذا X فرد است.

استدلالهای مربوط به Y و Z با استدلال فوق یکسان هستند، لذا $\mathbf{R}$ یک عملگر فرد است.

β ـ عملگرهای P_x، P_y و P_z.

حال کت $\Pi|\mathbf{p}\rangle$ را محاسبه کنیم، خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} \Pi \mid \mathbf{p} \rangle &= (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d^3r \, e^{i\mathbf{p}.\mathbf{r}/\hbar} \, \Pi \mid \mathbf{r} \rangle \\ &= (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d^3r \, e^{i\mathbf{p}.\mathbf{r}/\hbar} \mid -\mathbf{r} \rangle \\ &= (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d^3r' \, e^{-i\mathbf{p}.\mathbf{r}'/\hbar} \mid \mathbf{r}' \rangle \\ &= \mid -\mathbf{p} \rangle \end{aligned} \tag{۳۸}$$

سپس، با بکاربردن استدلالی مشابه با استدلال بخش α ، داریم :

$$\begin{aligned} \Pi P_x \mid \mathbf{p} \rangle &= p_x \mid -\mathbf{p} \rangle \\ P_x \Pi \mid \mathbf{p} \rangle &= -p_x \mid -\mathbf{p} \rangle \end{aligned} \tag{۳۹}$$

و

$$\Pi P_x + P_x \Pi = 0 \tag{۴۰}$$

عملگر $\mathbf{P}$ فرد است .

γ . عملگر پاریته

بوضوح Π با خودش جابجائی‌پذیر است ، بنابراین یک عملگر زوج است .

d ــ توابع عملگرها

فرض کنید B_+ یک عملگر زوج باشد . بااستفاده ازرابطه (a ــ ۸) ،خواهیم داشت :

$$\Pi B_+^n \Pi = \underbrace{(\Pi B_+ \Pi)(\Pi B_+ \Pi) \dots (\Pi B_+ \Pi)}_{n \text{ عامل}} = B_+^n \tag{۴۱}$$

یک عملگرفردی که به‌توان n ام برسد درصورتی زوج‌است که n زوج باشد . هرعملگر $F(B_+)$ را که زوج باشد در نظر می‌گیریم .

فرض‌کنید B_- یک عملگر فرد باشد . حال عملگر $\Pi B_-^n \Pi$ را محاسبه می‌کنیم :

$$\Pi B_-^n \Pi = \underbrace{(\Pi B_- \Pi)(\Pi B_- \Pi) \dots (\Pi B_- \Pi)}_{n \text{ عامل}} = (-1)^n (B_-)^n \tag{۴۲}$$

یک عملگر فردی که به‌توان n ام برسد درصورتی زوج است که n زوج باشد ، و فرد است‌اگر n فرد باشد . هرعملگر $F(B_-)$ را درنظر می‌گیریم ،این عملگر زوج است در صورتی کـه تابع متناظر $F(z)$ زوج باشد ، وفرداست اگرفردباشد ، عموماً" ، $F(B_-)$ دارای‌پاریته‌مشخصی‌نیست .

۳ ــ ویژه حالتهای یک مشاهده‌پذیر زوج B_+

حال ، یک مشاهده‌پذیر زوج دلخواه B_+ و یک ویژه‌بردار $|\varphi_b\rangle$ از B_+ با ویژه مقدار b را درنظر بگیرید . چون B_+ زوج است ، با Π جابجائی‌پذیراست . با به‌کاربردن قضایای بخش a ــ۳ــD از فصل دوم ، نتایج زیر را به‌دست می‌آوریم :

α ــ اگر b یک ویژه مقدارنا تبهگن باشد ، $|\varphi_b\rangle$ لزوما" یک ویژه بردار Π است ، بنابراین ، یا یک بردار زوج است یا یک بردار فرد . لذا ، مقدار متوسط $\langle \varphi_b | B_- | \varphi_b \rangle$ هر مشاهده‌پذیر فرد B_- ، نظیر $\mathbf{R}$ ، $\mathbf{P}$ و غیره ، صفر است .

β ــ اگر b یک ویژه مقدار تبهگن متناظر با ویژه زیر فضای $\mathscr{E}_b$ باشد ، بردارهای $\mathscr{E}_b$ لزوما" همگی دارای یک پاریته مشخص نیستند . $\Pi|\varphi_b\rangle$ ممکن است برداری باشد که با $|\varphi_b\rangle$ غیر هم‌خط است ، مع‌ذالک برداری است که دارای همان ویژه مقدار b است . بعلاوه می‌توان در هر زیرفضای $\mathscr{E}_b$ ، یک پایه از ویژه بردارهای مشترک Π و B_+ پیدا کرد .

۴ ــ کاربرد در یک مورد خاص مهم

اغلب احتیاج داریم که ویژه حالتهای یک عملگر هامیلتونی H را که به‌صورت :

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{R}) \qquad (۴۳)$$

است و در $\mathscr{E}_\mathbf{r}$ عمل می‌کند ، پیدا کنیم .

چون عملگر $\mathbf{P}$ فرداست ، عملگر $\mathbf{P}^2$ زوج است . اگر ، علاوه براین ، تابع $V(\mathbf{r})$ زوج باشد ($V(\mathbf{r}) = V(-\mathbf{r})$) ، عملگر H زوج است . برطبق آنچه که دربالا دیدیم ، می‌توان ویژه حالتهای H را بین حالتهای زوج یا فرد جستجو کرد . این امر ، غالبا" محاسبه را به‌طور قابل ملاحظه‌ای ساده می‌کند .

قبلا" به‌چند مورد که درآنها هامیلتونی H زوج است ، نظیر: چاه مربعی ، چاه نامحدود (رک مکمل $\mathrm{H_I}$) برخورد کرده‌ایم . موارد دیگررا ، نظیر : نوسان‌کننده هارمونیک ، اتم هیدروژن و غیره ، مورد مطالعه قرار خواهیم داد . به‌آسانی می‌توان در تمام این موارد خاص خواصی را که به‌دست آورده‌ایم تحقیق کرد .

گوشزد :

اگر H زوج باشد ، و اگر یکی از ویژه حالتهای $\langle\varphi_h|$ آن که دارای پاریته مشخصی نیست ($\Pi|\varphi_h\rangle$ غیر همخط با $\langle\varphi_h|$) پیدا شده باشد ، می‌توان ادعا کرد که ویژه مقدارمتناظرتبهگن است : چون Π با H جابجائی‌پذیر است ، $\Pi|\varphi_h\rangle$ ویژه‌برداری از H است که ویژه مقدار مربوط به‌آن ویژه مقدار مربوط به $\langle\varphi_h|$ است .

مراجع و پیشنهادات برای مطالعه بیشتر :

Schiff (1.18), §29; Roman (2.3), §5-3 d; Feynman I (6.3), chap. 52; Sakurai (2.7), chap. 3; articles by Morrison (2.28), Feinberg and Goldhaber (2.29), Wigner (2.30).

مکمل G_{II}

کاربرد خواص حاصلضرب تانسوری :

چاه نامحدود دوبعدی

۱ ــ تعریف ، ویژه حالتها
۲ ــ مطالعه ترازهای انرژی
a ــ حالت پایه
b ــ اولین حالتهای برانگیخته
c ــ تبهگنی‌های منظم و تصادفی

قبلا " درمکمل H_I (بخش c ــ ۲) ، دریک مساله یک بعدی ، حالتهای مانای ذره‌ای را که دریک چاه پتانسیل نامحدود قراردارد مطالعه کردیم . بااستفاده ازمفهوم حاصلضرب تانسوری (رک فصل دوم ، بخش F ، قادر خواهیم بود تا این بحث را به‌مورد چاه نامحدود دوبعدی تعمیم دهیم (واردکردن یک بعد سوم هیچگونه مشکل نظری اضافی‌ای را ایجاد نخواهد کرد) .

۱ ــ تعریف ، ویژه حالتها

ذره‌ای به‌جرم m درنظربگیرید که‌درصفحه xOy ، درداخل یک "جعبه‌مربعی" به‌ضلع a محدود شده باشد : انرژی پتانسیل $V(x, y)$ آن ، وقتی یکی از مختصات x یا y از بازه $[0, a]$ خارج شود ، بینهایت می‌شود :

$$V(x, y) = V_\infty(x) + V_\infty(y) \tag{۱}$$

که درآن :

$$\begin{aligned} V_\infty(u) &= 0 \qquad \text{اگر} \quad 0 \leqslant u \leqslant a \\ &= +\infty \quad \text{اگر} \quad u < 0 \quad \text{یا} \quad u > a \end{aligned} \tag{۲}$$

دراین صورت هامیلتونی ذره کوانتومی عبارت است از (فصل سوم ، بخش ۵ ــ B) :

$$H = \frac{1}{2m}(P_x^2 + P_y^2) + V_\infty(X) + V_\infty(Y) \tag{۳}$$

که می‌توان آنرا به‌صورت :

$$H = H_x + H_y \tag{۴}$$

نوشت که در آن :

$$H_x = \frac{1}{2m} P_x^2 + V_\infty(X)$$
$$H_y = \frac{1}{2m} P_y^2 + V_\infty(Y) \tag{۵}$$

بدین ترتیب در مورد خاص مهمی که در فصل دوم (بخش β ــ ۴ a ــ F) ذکر کردیم قرار داریم ، و می‌توانیم ویژه حالتهای H را به‌صورت :

$$| \Phi \rangle = | \varphi \rangle_x | \varphi \rangle_y \tag{۶}$$

با :

$$H_x | \varphi \rangle_x = E_x | \varphi \rangle_x \; ; \; | \varphi \rangle_x \in \mathscr{E}_x$$
$$H_y | \varphi \rangle_y = E_y | \varphi \rangle_y \; ; \; | \varphi \rangle_y \in \mathscr{E}_y$$

در نظر بگیریم . لذا :

در نظر بگیریم . لذا :

$$H | \Phi \rangle = E | \Phi \rangle \tag{۷}$$

با :

$$E = E_x + E_y \tag{۸}$$

بنابراین مسأله دو بعدی را به‌یک مساله یک بعدی که ، بعلاوه ، آنرا قبلاً " حل کرده‌ایم (رک مکمل H_I) کاهش داده‌ایم . در نتیجه با به‌کار بردن نتایج این مکمل ، و فرمولهای (۷) و (۸) ملاحظه می‌کنیم که :

ــ ویژه مقدارهای H به‌صورت :

$$E_{n,p} = \frac{1}{2ma^2} (n^2 + p^2) \pi^2 \hbar^2 \tag{۹}$$

هستندکه در آن n و p اعداد صحیح مثبتی می‌باشند .

ــ به‌این انرژیها ، ویژه حالتهای $| \Phi_{n,p} \rangle$ مربوط می‌شوند ، که می‌توانند به صورت حاصلضربهای تانسوری :

$$| \Phi_{n,p} \rangle = | \varphi_n \rangle_x | \varphi_p \rangle_y \tag{۱۰}$$

نوشته شوند ، که تابع موج بهنجار شده آنها عبارت است از :

$$\Phi_{n,p}(x, y) = \varphi_n(x)\,\varphi_p(y) = \frac{2}{a}\sin\frac{n\pi x}{a}\sin\frac{p\pi y}{a} \qquad (۱۱)$$

به‌سادگی می‌توان نشان داد که‌این توابع موج در لبه‌های "جعبه‌مربعی" (x یا y برابر صفر یا a) ، جائی که انرژی پتانسیل بینهایت می‌شود ، صفر است .

۳ ــ مطالعه ترازهای انرژی

a ــ *حالت پایه*

n و p اعدادی هستند صریحا" صحیح و مثبت *. بنابراین حالت پایه به‌ازاء $n = 1$ ، $p = 1$ به‌دست می‌آید . انرژی آن برابر است با :

$$E_{1,1} = \frac{\pi^2\hbar^2}{ma^2} \qquad (۱۲)$$

این مقدار فقط برای $n = p = 1$ به‌دست می‌آید . لذا حالت پایه غیر تبهگن است .

b ــ *اولین حالتهای برانگیخته*

اولین حالت برانگیخته یا به‌ازاء $n = 1$ و $p = 2$ ، یا به‌ازاء $n = 2$ و $p = 1$ به‌دست می‌آید . انرژی آن براب‌راست با :

$$E_{1,2} = E_{2,1} = \frac{5}{2}\frac{\pi^2\hbar^2}{ma^2} \qquad (۱۳)$$

این حالت دوبار تبهگن است ، زیرا $\langle \Phi_{1,2} |$ و $\langle \Phi_{2,1} |$ مستقل از یکدیگرند .

دومین حالت برانگیخته متناظر است با $n = p = 2$ ، این حالت تبهگن نیست و انرژی آن برابر است با :

$$E_{2,2} = 4\frac{\pi^2\hbar^2}{ma^2} \qquad (۱۴)$$

---

* مقادیر $n = 0$ یا $p = 0$ که برای آنها تابع موج متحد باصفر است (بنابراین غیر ممکن است که بهنجار شوند) طرد می‌شوند .

سومین‌حالت برانگیخته متناظراست با $n = 1$ ، $p = 3$ و $n = 3$ ، $p = 1$ وغیره .

c ــ تبهگنی‌های منظم و تصادفی

به‌طورکلی می‌توان ملاحظه کرد که تمام ترازهائی که برای آنها $p \neq n$ است تبهگن هستند ، زیرا :

$$E_{n,p} = E_{p,n} \qquad (۱۵)$$

این تبهگنی به‌یک تقارن‌مسأله مربوط می‌شود . چاه مربعی مورد نظر مانسبت بـه نیمسازاول صفحه xOy متقارن است . این مطلب توسط این واقعیـت بیـان می‌شود کـه هامیلتونی H تحت تعویض :

$$\begin{aligned} X &\longleftrightarrow Y \\ P_x &\longleftrightarrow P_y \end{aligned} \qquad (۱۶)$$

تغییر ناپذیر است (درفضای حالت ، می‌توان عملگری تعریف کرد که متناظر با یک انعکاس نسبت به‌نیمساز اول باشد . دراین صورت می‌توان نشان داد که، دراین مورد ، این عملگر با H جابجائی پذیر است) . اگر یک ویژه حالت H که تابع موج آن $\Phi(x, y)$ است معلــوم باشد ، حالت متناظر با $\Phi'(x, y) = \Phi(y, x)$ نیز یک ویژه حالت H ، باهمان ویژه‌مقدار است . درنتیجه ، اگر تابع $\Phi(x, y)$ نسبت به x و y متقارن نباشد ، ویژه مقدار وابسته به‌آن لزوما" تبهگن است . این مطلب ، منشأ تبهگنی (۱۵) است : برای $n \neq p$ ، تابع $\Phi_{n,p}(x, y)$ نسبت به x و y متقارن نیست [فرمول (۱۱)] . این تعبیر توسط این واقعیت تأیید‌می‌شود که اگر باانتخاب چاهی که پهنای آن در امتداد Ox با پهنای آن در امتـداد Oy متفاوت باشد(به‌ترتیب آنهارا برابر a و b بگیریم) ، تقارن‌را برهم زنیم ، تبهگنی مربوطه برطرف می‌شود ، و دراین صورت فرمول (۹) می‌شود :

$$E_{n,p} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n^2}{a^2} + \frac{p^2}{b^2}\right) \qquad (۱۷)$$

که می‌رساند :

$$E_{p,n} \neq E_{n,p} \qquad (۱۸)$$

یک چنین تبهگنی‌هائی‌که منشأ آنها دریک تقارنی از مسأله قرار دارد، تبهگنی‌های منظم نامیده می‌شوند.

گوشزد :

سایرتقارنهای چاه مربعی دوبعدی تبهگنی‌های منظم ایجادنمی‌کنند زیرا تمام‌ویژه حالتهای H نسبت به‌آنها تغییرناپذیرند. به‌عنوان مثال، برای n و p ی دلخواه اگر x توسط $(a-x)$ و y توسط $(a-y)$ جایگزین شوند (تقارن نسبت به‌مرکزچاه)، $\Phi_{n,p}(x, y)$ فقط در یک ضریب فاز ضرب می‌شود.

ممکن است تبهگنی‌هائی نیز بروز کنند که مستقیما "به‌تقارن مسأله مربوط نیستند. این تبهگنی‌ها، تبهگنی‌های تصادفی نامیده می‌شوند. به‌عنوان مثال، درموردی که بحث کردیم، داریم: $E_{7,1} = E_{5,5}$ و $E_{8,1} = E_{7,4}$.

مکمل H_{II}

تمرینات

نمادگذاری دیراک. جابجاگرها . ویژه بردارها و ویژه مقدارها

۱ ــ $\langle \varphi_n |$ ها ویژه حالتهای یک عملگر هرمیتی H هستند (H ، به‌عنوان مثال ، هامیلتونی یک سیستم فیزیکی دلخواه است) . فرض کنید $\langle \varphi_n |$ ها یک پایه راست هنجار گسسته تشکیل دهند . عملگر $U(m, n)$ بصورت زیر تعریف می‌شود :

$$U(m, n) = | \varphi_m \rangle \langle \varphi_n |$$

a ــ $U^\dagger(m, n)$ الحاقی $U(m, n)$ ، را محاسبه کنید .
b ــ جابجاگر $[H, U(m, n)]$ را محاسبه کنید .
c ــ رابطه زیر را ثابت کنید :

$$U(m, n)U^\dagger(p, q) = \delta_{nq}U(m, p)$$

d ــ رد عملگر $U(m, n)$ ، یعنی $\mathrm{Tr}\ \{ U(m, n) \}$ ، را محاسبه کنید .
e ــ فرض‌کنید A یک عملگر با عناصر ماتریسی $A_{mn} = \langle \varphi_m | A | \varphi_n \rangle$ باشد . رابطه زیر را ثابت کنید :

$$A = \sum_{m,n} A_{mn}\, U(m, n)$$

f ــ نشان دهید که $A_{pq} = \mathrm{Tr}\ \{ AU^\dagger(p, q) \}$

۲ ــ در یک فضای برداری‌دوبعدی، عملگری را در نظر بگیرید که ماتریس‌آن، در یک پایـــه راست هنجار $\{ | 1 \rangle, | 2 \rangle \}$ ، به‌صورت زیر نوشته شده است :

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

a ــ آیا σ_y هرمیتی است ؟ ویژه مقدارها و ویژه بردارهای آنرا (با دادن بسط بهنجار شدهٔ آنها برحسب پایه $\{ | 1 \rangle, | 2 \rangle \}$ محاسبه کنید .
b ــ ماتریسهائی را که معرف تصویرگرها روی این ویژه بردارها هستند ، محاسبه

کنید . سپس ثابت کنید که در روابط تعامد و بستاری صدق می‌کنند .

c ــ به‌همین سئوالات در مورد ماتریسهای :

$$M = \begin{pmatrix} 2 & i\sqrt{2} \\ -i\sqrt{2} & 3 \end{pmatrix}$$

و ، دریک فضای سه بعدی :

$$L_y = \frac{\hbar}{2i} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

پاسخ دهید .

۳ ــ فضای حالت یک سیستم فیزیکی معین ، سه‌بعدی است فرض کنید $\{ |u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle \}$ یک پایه راست هنجار این فضا باشد . کتهای $|\psi_0\rangle$ و $|\psi_1\rangle$ به‌صورت زیر تعریف شده‌اند :

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u_1\rangle + \frac{i}{2}|u_2\rangle + \frac{1}{2}|u_3\rangle$$

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|u_1\rangle + \frac{i}{\sqrt{3}}|u_3\rangle$$

a ــ آیا این کتها بهنجار شده‌اند ؟

b ــ ماتریسهای ρ_0 و ρ_1 را که ، در پایه $\{ |u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle \}$ ، معرف عملگرهای تصویرگر روی حالت $|\psi_0\rangle$ و روی حالت $|\psi_1\rangle$ هستند ، محاسبه کنید . نشان دهید که این ماتریسها هرمیتی‌اند .

۴ ــ فرض کنید K عملگری باشد که به‌صورت $K = |\varphi\rangle\langle\psi|$ تعریف شده است . که درآن $|\varphi\rangle$ و $|\psi\rangle$ دوکت از فضای حالت هستند .

a ــ تحت چه شرایطی K هرمیتی است ؟

b ــ K^2 را محاسبه کنید . تحت چه شرایطی K یک تصویرگر است ؟

c ــ نشان دهید که K می‌تواند همواره به‌صورت $K = \lambda P_1 P_2$ نوشته شود که درآن λ یک ثابت است که باید محاسبه کنید و P_1 و P_2 تصویرگر هستند .

۵ ــ فرض کنید P_1 تصویرگر قائم روی زیر فضای $\mathscr{E}_1$ و P_2 تصویرگر قائم روی زیر فضای $\mathscr{E}_2$ باشند . نشان دهید که برای اینکه حاصلضرب $P_1 P_2$ نیز یک تصویرگر قائم باشد

لازم و کافی است که P_1 و P_2 جابجائی‌پذیر باشند. دراین مورد، زیرفضائی که P_1P_2 روی آن تصویر می‌کند، کدام است؟

۶ــ ماتریس σ_x به‌صورت زیر تعریف شده است:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

رابطه:

$$e^{i\alpha\sigma_x} = I\cos\alpha + i\sigma_x \sin\alpha$$

را که درآن I ماتریس یکه ۲×۲ است، ثابت کنید.

۷ــ برای ماتریس σ_y که در تمرین۲ داده شده است، رابطه مشابهی باآنچه در تمرین قبلی برای σ_x ثابت شد، برقرار سازید. این مطلب را برای تمام ماتریسهای ازنوع:

$$\sigma_u = \lambda\sigma_x + \mu\sigma_y$$

با شرط:

$$\lambda^2 + \mu^2 = 1$$

تعمیم دهید.

ماتریسهای معرف $e^{2i\sigma_x}$، $(e^{i\sigma_x})^2$ و $e^{i(\sigma_x+\sigma_y)}$ را محاسبه‌کنید. آیا $e^{2i\sigma_x}$ با $(e^{i\sigma_x})^2$ و $e^{i(\sigma_x+\sigma_y)}$ با $e^{i\sigma_x}e^{i\sigma_y}$ برابرند؟

۸ــ هامیلتونی H یک ذره در یک مسأله یک بعدی را که به‌صورت:

$$H = \frac{1}{2m}P^2 + V(X)$$

تعریف شده‌است در نظر بگیرید. X و P عملگرهائی هستند که در بخش E ازفصل‌دوم‌تعریف شدند و در رابطه $[X, P] = i\hbar$ صدق می‌کنند. ویژه بردارهای H توسط $|\varphi_n\rangle$ نشان داده می‌شوند: $H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$، که درآن n یک شاخص گسسته است.

a ــ نشان دهید که:

$$\langle \varphi_n | P | \varphi_{n'} \rangle = \alpha \langle \varphi_n | X | \varphi_{n'} \rangle$$

که در آن α ضریبی است که به‌اختلاف بین E_n و $E_{n'}$ بستگی دارد. α را محاسبه کنید (راهنمائی: جابجاگر $[X, H]$ را در نظر بگیرید).

b ــ از آنجا، بااستفاده از رابطه بستاری، معادله زیر را نتیجه گیری کنید:

$$\sum_{n'} (E_n - E_{n'})^2 \left| \langle \varphi_n | X | \varphi_{n'} \rangle \right|^2 = \frac{\hbar^2}{m^2} \langle \varphi_n | P^2 | \varphi_n \rangle$$

۹ ــ فرض کنید H عملگر هامیلتونی یک سیستم فیزیکی باشد. ویژه بردارهای H، با ویژه مقدارهای E_n، را به $| \varphi_n \rangle$ نمایش می‌دهیم.

$$H | \varphi_n \rangle = E_n | \varphi_n \rangle$$

a ــ برای یک عملگر دلخواه A، رابطه زیر را ثابت کنید:

$$\langle \varphi_n | [A, H] | \varphi_n \rangle = 0$$

b ــ یک مسأله یک بعدی در نظر بگیرید، که در آن سیستم عبارت است از ذره‌ای به‌جرم m و انرژی پتانسیل $V(X)$. دراین مورد، H به‌صورت زیرنوشته می‌شود:

$$H = \frac{1}{2m} P^2 + V(X)$$

α ــ جابجاگرهای $[H, P]$، $[H, X]$ و $[H, XP]$ را برحسب P، X و $V(X)$ بیابید.

β ــ نشان دهیدکه عنصر ماتریسی $\langle \varphi_n | P | \varphi_n \rangle$ (که درفصل سوم آنرابه‌عنوان مقدار متوسط تکانه در حالت $| \varphi_n \rangle$ تعبیر خواهیم کرد) صفر است.

γ ــ رابطه‌ای بین $E_k = \langle \varphi_n | \frac{P^2}{2m} | \varphi_n \rangle$ (مقدارمتوسط انرژی جنبشی درحالت $| \varphi_n \rangle$) و $\langle \varphi_n | X \frac{dV}{dX} | \varphi_n \rangle$ برقرارسازید. چون‌مقدارمتوسط انرژی پتانسیل درحالت $| \varphi_n \rangle$ برابر با $\langle \varphi_n | V(x) | \varphi_n \rangle$ است، این مقدار، وقتی داشته باشیم:

$$V(X) = V_0 X^\lambda$$

$(\lambda = 2, 4, 6 \ldots; V_0 > 0)$، چگونه به‌مقدار متوسط انرژی جنبشی مربوط می‌شود؟

۱۰ ــ بااستفاده از رابطه $\langle x | p \rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{ipx/\hbar}$، عبارتهای $\langle x | XP | \psi \rangle$

و$\langle \psi \mid PX \mid \psi \rangle$ و $\langle x \mid$ را برحسب $\psi(x)$ بدست آورید . آیا این نتایج می‌توانند مستقیما "با استفاده از این واقعیت که درنمایش $\{\mid x \rangle\}$، P مانند $\frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}$ عمل می‌کنند ، به‌دست آیند ؟

مجموعه‌های مشاهده‌پذیرهای جابجائی‌پذیر و م.ک.م.ج. ها

۱۱ ــ یک سیستم فیزیکی درنظر بگیرید که فضای حالت سه‌بعدی آن به‌وسیله پایه راست هنجاری‌که از سه‌کت $\mid u_1 \rangle$ ، $\mid u_2 \rangle$ ، $\mid u_3 \rangle$ تشکیل شده است ، به‌وجود آمده‌باشد . دراین پایه ، که بردارهای آن به‌همین‌ترتیب درنظرگرفته‌شده‌اند ، دوعملگر H و B به‌صورت:

$$H = \hbar\omega_0\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix} \qquad B = b\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}$$

تعریف می‌شوند که درآن ω_0 و b ثابتهائی حقیقی‌اند .

a ــ آیا H و B هرمیتی‌اند ؟

b ــ نشان دهید که H و B جابجائی‌پذیرند . یک پایه از ویژه بردارهای مشترک H و B را تعیین کنید .

c ــ کدام یک از مجموعه‌های عملگرهای: $\{ H \}$ ، $\{ B \}$ ، $\{ H, B \}$ ، $\{ H^2, B \}$ یک م.ک.م.ج. تشکیل می‌دهند ؟

۱۲ ــ در همان فضای حالتهای تمرین‌قبل ، دوعملگر L_z و S که به‌صورت‌زیرتعریف شده‌اند ، درنظر بگیرید :

$$\begin{array}{lll} L_z \mid u_1 \rangle = \mid u_1 \rangle & L_z \mid u_2 \rangle = 0 & L_z \mid u_3 \rangle = -\mid u_3 \rangle \\ S \mid u_1 \rangle = \mid u_3 \rangle & S \mid u_2 \rangle = \mid u_2 \rangle & S \mid u_3 \rangle = \mid u_1 \rangle \end{array}$$

a ــ ماتریسهای معرف عملگرهای L_z ، L_z^2 ، S ، S^2 را در پایه $\{ \mid u_1 \rangle, \mid u_2 \rangle, \mid u_3 \rangle \}$ بنویسید . آیا این عملگرها مشاهده‌پذیرند ؟

b ــ شکل‌عمومی‌ترین‌ماتریس‌معرف عملگری راکه با L_z جابجائی‌پذیراست ، بنویسید به‌همین سئوال درمورد L_z^2 و سپس درمورد S^2 پاسخ دهید .

c ــ آیا L_z^2 و S یک م.ک.م.ج. تشکیل می‌دهند ؟ یک پایه از ویژه بردارهای مشترک را تعیین کنید .

حل تمرین ۱۱

a ــ H و B هرمیتی‌اند زیرا ماتریسهائی که باآنها متناظرند متقارن و حقیقی‌اند .
b ــ $|u_1\rangle$ یک ویژه‌بردار مشترک H و B است . بنابراین ، به‌طور آشکار، داریم $HB|u_1\rangle = BH|u_1\rangle$. دراین صورت ملاحظه می‌کنیم که برای اینکه H و B جابجائی‌پذیر باشند ، کافی است که تحدیدهای این عملگرها به زیرفضای $\mathscr{E}_2$ ، که توسط $|u_2\rangle$ و $|u_3\rangle$ به‌وجود آمده است ، جابجائی‌پذیرباشند . دراین زیرفضا ، ماتریس معرف H برابراست‌با$-\hbar\omega_0 I$ (که I ماتریس یکه ۲×۲ است) ، که باتمام‌ماتریسهای ۲×۲ جابجائی‌پذیر می‌باشد . بنابراین H و B جابجائی‌پذیرند (البته ، این نتیجه می‌توانست مستقیماً " با محاسبه ماتریسهای HB و BH به‌دست آید) . تحدید B به $\mathscr{E}_2$ به‌صورت زیر نوشته می‌شود :

$$P_{\mathscr{E}_2} B P_{\mathscr{E}_2} = b\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

ویژه‌بردارهای بهنجارشده این ماتریس۲×۲ به‌آسانی به‌دست می‌آیند ، وعبارتند از :

$$|p_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|u_2\rangle + |u_3\rangle] \qquad (\text{ویژه مقدار } +b)$$

$$|p_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|u_2\rangle - |u_3\rangle] \qquad (\text{ویژه مقدار } -b)$$

این بردارها خود بخود ویژه بردارهای H هستند ، زیرا $\mathscr{E}_2$ ویژه زیرفضای H متناظر با ویژه مقدار$-\hbar\omega_0$ است ، به‌طور خلاصه، ویژه بردارهای مشترک H و B به‌صورت زیرداده می‌شوند .

	ویژه مقدار H	ویژه مقدار B
$\|p_1\rangle = \|u_1\rangle$	$\hbar\omega_0$	b
$\|p_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[\|u_2\rangle + \|u_3\rangle]$	$-\hbar\omega_0$	b
$\|p_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[\|u_2\rangle - \|u_3\rangle]$	$-\hbar\omega_0$	$-b$

این بردارها (البته با تقریب یک ضریب فاز) تنها ویژه بردارهای مشترک H و B هستند .
c ــ می‌توان ازجدول دید که H یک ویژه مقدار دوبارتبهگن دارد ، بنابراین یک م.ک.م.ج. نیست : همین طور، B نیز دارای یک ویژه مقدار دوبار تبهگن است ولذایک م.ک.م.ج. نیست : به‌عنوان مثال، یک ویژه بردار B با ویژه مقدار b می‌تواند $|p_1\rangle$ یا

$|p_2\rangle$، یا $\frac{1}{\sqrt{3}}|u_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|u_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|u_3\rangle$ باشد. از طرف دیگر، مجموعه دو عملگر H و B یک م.ک.م.ج. تشکیل می‌دهند. از جدول بالا مشاهده می‌کنیم که هیچ دوبردار $|p_j\rangle$ ای وجود ندارند که برای H و B یک ویژه مقدار داشته باشند. به این دلیل است که، همان طوری که قبلاً اشاره شد، دستگاه ویژه بردارهای بهنجار شده مشترک H و B. (با تقریب ضرائب فاز) یکتا است. توجه کنید که درمحدوده ویژه زیر فضای $\mathcal{E}_2$ ی H وابسته به ویژه مقدار $-\hbar\omega_0$، ویژه مقدارهای B متمایزند (b و $-b$). به‌طور مشابه، درویژه زیرفضای B که توسط $|p_1\rangle$ و $|p_2\rangle$ به‌وجود آمده‌است، ویژه مقدارهای H متمایزند ($\hbar\omega_0$ و $-\hbar\omega_0$).

ویژه‌بردارهای H^2، باویژه‌مقدار $\hbar^2\omega_0^2$، عبارتند از $|p_1\rangle$، $|p_2\rangle$ و $|p_3\rangle$. به سادگی می‌توان دید که H^2 و B یک م.ک.م.ج. تشکیل نمی‌دهند، زیرا به‌زوج ویژه مقدارهای $\{\hbar^2\omega_0^2, b\}$، دو ویژه بردار مستقل خطی $|p_1\rangle$ و $|p_2\rangle$ مربوط می‌شوند.

حل تمرین ۱۲

a ــ ازقاعده ساختن ماتریس یک عملگر استفاده‌کنیم: "درستون n ام ماتریس، مؤلفه‌های تبدیل بردار پایه n ام را بنویسیم". به‌آسانی نتیجه می‌گیریم:

$$L_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad S = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$L_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad S^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

این ماتریس‌ها متقارن و حقیقی، و لذا هرمیتی هستند. چون فضا دارای بعد محدودی است می‌توانند قطری شده و در نتیجه معرف مشاهده‌پذیرهائی باشند.

b ــ فرض کنید M عملگری باشد که با L_z جابجائی‌پذیر باشد. M نمی‌تواند (رک فصل دوم، بخش a ــ ۳ ــ D) هیچ عنصرماتریسی‌ای بین $|u_1\rangle$ و $|u_2\rangle$، یا بین $|u_2\rangle$ و $|u_3\rangle$ یا بین $|u_1\rangle$ و $|u_2\rangle$ (ویژه‌بردارهای L_z باویژه‌مقدارهای متفاوت) داشته باشد. بنابراین ماتریس معرف M، لزوماً قطری است، یعنی، به‌صورت زیر است:

$$[M, L_z] = 0 \qquad \Longleftrightarrow \qquad M = \begin{pmatrix} m_{11} & 0 & 0 \\ 0 & m_{22} & 0 \\ 0 & 0 & m_{33} \end{pmatrix}$$

فرض کنید N عملگری باشد که با L_z^2 جابجائی‌پذیراست . ماتریس معرف N می‌تواند بین $\langle u_1 |$ و $| u_3 \rangle$ (ویژه بردارهای L_z^2 با ویژه‌مقدار یکسان) عناصری داشته باشد ، ولی بین $\langle u_2 |$ و $\langle u_1 |$ یا $\langle u_3 |$ نمی‌تواند . بنابراین ، N به‌صورت زیر نوشته می‌شود :

$$[N, L_z^2] = 0 \qquad \Longleftrightarrow \qquad N = \begin{pmatrix} n_{11} & 0 & n_{13} \\ 0 & n_{22} & 0 \\ n_{31} & 0 & n_{33} \end{pmatrix}$$

بنابراین ، تحمیل این شرط که یک عملگر با L_z^2 جابجائی‌پذیر است ، محدودیت کمتری ایجاد می‌کند تا با L_z ، N لزوما " یک ماتریس قطری نیست . تنها می‌توان گفت که N بردارهای زیر فضای $\mathscr{F}_2$ ، را که توسط $\langle u_1 |$ و $\langle u_3 |$ به‌وجودآمده است ، با بردارهای زیر فضای یک بعدی که توسط $\langle u_2 |$ ، به‌وجود آمده است ، درهم نمی‌آمیزد . بعلاوه ، اگر ماتریس N' را که معرف عملگر N است در پایه $\{ | u_1 \rangle, | u_3 \rangle, | u_2 \rangle \}$ (با تغییر دادن بردارهای پایه) بنویسیم ، این خاصیت به‌طور بسیار واضحی ظاهر می‌شود :

$$N' = \begin{pmatrix} n_{11} & n_{13} & 0 \\ n_{31} & n_{33} & 0 \\ 0 & 0 & n_{22} \end{pmatrix}$$

بالاخره ، چون S^2 عملگر همانندی است ، هر ماتریس ۳×۳ با S^2 جابجائی‌پذیر است و عمومی‌ترین شکل آن عبارت است از :

$$[P, S^2] = 0 \qquad \Longleftrightarrow \qquad P = \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} \\ p_{31} & p_{32} & p_{33} \end{pmatrix}$$

c ــ $\langle u_2 |$ یک ویژه بردارمشترک L_z^2 و S است . درزیرفضای $\mathscr{F}_2$ ی به‌وجود آمده توسط $\langle u_1 |$ و $\langle u_3 |$ ، L_z^2 و S به‌صورت زیرنوشته می‌شوند :

$$P_{\mathscr{F}_2} L_z^2 P_{\mathscr{F}_2} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$P_{\mathscr{F}_2} S P_{\mathscr{F}_2} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

ویژه بردارهای ماتریس اخیر عبارتند از :

$$|q_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|u_1\rangle + |u_3\rangle]$$

$$|q_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|u_1\rangle - |u_3\rangle]$$

و پایهٔ ویژه بردارهای مشترک L_z^2 و S عبارت است از :

ویژه‌مقدار S	ویژه مقدار L_z^2	بردار
1	0	$\|q_1\rangle = \|u_2\rangle$
1	1	$\|q_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[\|u_1\rangle + \|u_3\rangle]$
-1	1	$\|q_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[\|u_1\rangle - \|u_3\rangle]$

در جدول ویژه مقدارهای L_z^2 و S هیچ دوسطری یکسان نیستند : بنابراین این دوعملگر یک م.ک.م.ج. تشکیل می‌دهند (ولی ، برای هریک از آنها به‌تنهائی این طور نیست) .

فصل سوم

اصول موضوع مکانیک کوانتومی

خلاصه مطالب فصل سوم

A . مقـدمه

B ــ بیان اصول موضوع

۱ ــ توصیف حالت یک سیستم
۲ ــ توصیف کمیتهای فیزیکی
۳ ــ اندازه‌گیری کمیتهای فیزیکی
a ــ نتایج ممکن
b ــ اصل تجزیه طیفی
c ــ تقلیل بسته موج
۴ ــ تحول زمانی سیستم
۵ ــ قواعد کوانتش
a ــ گزاره
b ــ مثالهای مهم

C ــ تعبیر فیزیکی اصول موضوع مربوط به‌مشاهده‌پذیرها و اندازه‌گیری آنها

۱ ــ قواعد کوانتش باتعبیر احتمالاتی تابع موج سازگارند .
۲ ــ کوانتش بعضی از کمیتهای فیزیکی
۳ ــ فرایند اندازه‌گیری
۴ ــ مقدار میانگین یک مشاهده‌پذیر در یک حالت داده شده .
۵ ــ انحراف ریشه میانگین مربعی .
۶ ــ سازگاربودن مشاهده‌پذیرها
a ــ سازگاربودن و قواعد جابجائی
b ــ فراهم آوردن یک حالت

D ــ مفاهیم فیزیکی معادله‌شرودینگر

۱ ــ خواص عمومی معادله شرودینگر
a ــ قطعیت درتحول دستگاههای فیزیکی
b ــ اصل برهم نهش
c ــ پایستگی احتمال

	d ــ تحول مقدار متوسط یک مشاهده‌پذیر؛ رابطه با مکانیک کلاسیک.
	۲ ــ مورد دستگاههای پایستار
	a ــ حل معادله شرودینگر
	b ــ حالتهای مانا
	c ــ پایاهای حرکت
	d ــ فرکانسهای بوهر یک دستگاه قواعد گزینش
	e ــ رابطه عدم قطعیت زمان ــ انرژی
E ــ اصل برهم نهش و پیش بینی‌های فیزیکی	۱ ــ دامنه‌های احتمال و آثار تداخلی
	a ــ معنای فیزیکی برهم نهش خطی حالتها
	b ــ جمع بندی روی حالتهای واسط
	c ــ نتیجه: اهمیت مفهوم دامنه حتمال
	۲ ــ موردی‌که درآن چندین حالت می‌توانند به‌یک نتیجه اندازه‌گیری وابسته باشند.
	a ــ ویژه مقدارهای تبهگن
	b ــ وسائل اندازه‌گیری باگزینندگی ناکافی
	c ــ خلاصه: آیا بایددامنه‌ها راجمع کرد یا احتمالها را؟
	d ــ کاربرد در بررسی طیفهای پیوسته.

A ۰ مقدمه

درمکانیک کلاسیک ، اگر مکان $\mathbf{r}(x, y, z)$ و سرعت $\mathbf{v}(\dot{x}, \dot{y}, \dot{z})$ هریک ازنقاط یک دستگاه را به‌صورت تابعی از زمان بدانیم ، حرکت آن تعیین شده‌است . به‌طورکلی (پیوست ۳) ، برای توصیف چنین دستگاهی ، مختصات تعمیم یافته $q_i(t)$ $(i = 1, 2, ..., N)$ را وارد می‌کنیم . که مشتق آنها نسبت به‌زمان ، $\dot{q}_i(t)$ ، همان سرعتهای تعمیم یافته‌اند ، مشخص کردن $q_i(t)$ و $\dot{q}_i(t)$ ما را قادر می‌سازد تا ، در هرلحظه معین ، مکان و سرعت هرنقطه از دستگاه را محاسبه‌کنیم . بااستفاده از لاگرانژی $\mathscr{L}(q_i, \dot{q}_i, t)$ ، تکانه همیوغ p_i ی هریک از مختصات تعمیم یافته q_i را تعریف می‌کنیم :

$$p_i = \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{q}_i} \qquad (A-1)$$

$q_i(t)$ و $p_i(t)$ $(i = 1, 2, ..., N)$ متغیرهای‌دینامیکی بنیادی‌نامیده‌می‌شوند . تمام‌کمیتهای فیزیکی‌وابسته به‌دستگاه (انرژی ، تکانه زاویه‌ای وغیره) می‌توانند بر حسب متغیرهای دینامیکی بنیادی بیان شوند . به‌عنوان مثال ، انرژی کل دستگاه توسط هامیلتونی کلاسیکی $\mathscr{H}(q_i, p_i, t)$ داده می‌شود . حرکت دستگاه می‌تواند یا بااستفاده از معادلات لاگرانژ یا با استفاده از معادلات بندادی هامیلتون ـ ژاکوبی که به‌صورت :

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial p_i} \qquad (A-2-a)$$

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial q_i} \qquad (A-2-b)$$

نوشته می‌شوند مطالعه شوند .

در مورد خاص دستگاهی که از یک نقطه فیزیکی تنها به‌جرم m تشکیل شده‌است ، q_i ها همان سه مختصه این نقطه، و $\dot{q}_i$ ها مؤلفه‌های سرعت $\mathbf{v}$ ی آن‌هستند . اگرنیروهای وارد براین ذره بتوانند از یک پتانسیل نرده‌ای $V(\mathbf{r}, t)$ مشتق شوند ، سه تکانه همیوغ مکان $\mathbf{r}$ آن (یعنی ، مؤلفه‌های تکانه خطی $\mathbf{p}$ ی آن) برابرند با مؤلفه‌های تکانه مکانیکی $m\mathbf{v}$ ی ذره . دراین صورت انرژی کل به‌صورت زیر نوشته می‌شود :

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}, t) \qquad (A-3)$$

و تکانه زاویه‌ای نسبت به‌مبداء عبارت است از :

$$\mathscr{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \tag{A-۴}$$

چون داریم $\mathscr{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \dfrac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}, t)$ ، معادلات هامیلتون ــ ژاکوبی (۲ ــ A) در اینجا شکل شناخته شده زیر را می‌گیرند:

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{r}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathbf{p}}{m} \tag{A-۵-a}$$

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{p}}{\mathrm{d}t} = -\nabla V \tag{A-۵-b}$$

بنابراین توصیف کلاسیکی یک دستگاه فیزیکی می‌تواند به‌صورت زیر خلاصه شود:

(۱) حالت دستگاه در یک زمان مشخص t_0 با مشخص کردن N مختصه تعمیم‌یافته $q_i(t_0)$ و N تکانه همیوغ $p_i(t_0)$ آنها تعیین می‌شود.

(۲) وقتی حالت دستگاه در یک زمان معین، معلوم باشد، مقدار کمیتهای فیزیکی مختلف، درآن زمان، کاملا" معلوم خواهند بود: با دانستن حالت دستگاه، می‌توان‌با قطعیت نتیجه هراندازه‌گیری در زمان t_0 را، پیش بینی کرد.

(۳) تحول زمانی حالت‌دستگاه‌توسط معادلات هامیلتون ــ ژاکوبی داده می‌شود. چون این معادلات، معادلات دیفرانسیل مرتبه اول هستند، اگرمقدارجوابهای این‌معادلات درزمان معین t_0، $\{ q_i(t_0), p_i(t_0) \}$ مشخص باشد، جواب $\{ q_i(t), p_i(t) \}$ ی آنهایکتا خواهد بود. اگرحالت اولیه دستگاه معلوم باشد، حالت آن برای تمام زمانها معلوم است.

در این فصل اصول موضوعی را که توصیف کوانتومی دستگاههای فیزیکی برآنهابنا شده است، مطالعه خواهیم کرد. قبلا" آنها را در فصل اول به‌طور کیفی و جزئی معرفی کرده‌ایم. در اینجا، آنها را در چارچوب فرمول‌بندی ارائه شده درفصل دوم، به‌طورصریح مورد بحث قرار خواهیم داد. این اصول موضوع پاسخ سؤالات زیر را (که متناظرند با سه نکته‌ای که در بالا برای توصیف کلاسیکی برشمردیم) فراهم می‌آورند:

(۱) حالت یک‌دستگاه‌کوانتومی دریک زمان معین چگونه بطورریاضی‌تشریح‌می‌شود؟

(۲) باداشتن این‌حالت، چگونه می‌توانیم نتایج اندازه‌گیری کمتیهای فیزیکی مختلف را پیش بینی کنیم؟

(۳) وقتی که حالت دستگاه در زمان t_0 معلوم باشد، چگونه می‌توان حالت آنرا درزمان دلخواه t پیدا کرد؟

ابتدا (دربخش B) اصول موضوع مکانیک کوانتومی را بیان خواهیم کرد. سپس (دربخشهای E، D، C) محتوای فیزیکی آنها را تجزیه و تحلیل کرده و پیامدهای آنها

را مورد بحث قرار خواهیم داد .

B . بیان اصول موضوع

۱ ــ توصیف حالت یک دستگاه

در فصل اول ، مفهوم حالت کوانتومی یک ذره را معرفی کردیم . ابتدا ، این‌حالت را در زمان معین t توسط یک تابع موج مجذورا " انتگرال‌پذیر مشخص کردیم . سپس ، در فصل دوم ، به هرتابع موج یک کت از فضای حالت $\mathscr{E}_r$ وابسته کردیم : انتخاب $|\psi\rangle$ ی متعلق به $\mathscr{E}_r$ معادل است با انتخاب تابع موج متناظر $\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle$. بنابراین ، حالت کوانتومی یک ذره در یک زمان مشخص توسط یک کت از فضای $\mathscr{E}_r$ مشخص می‌شود . در این شکل ، مفهوم حالت می‌تواند به‌هر دستگاه فیزیکی تعمیم داده شود .

> اصل‌موضوع‌اول : دریک زمان مشخص t_0 ، حالت یک‌دستگاه فیزیکی با مشخص‌کردن یک‌کت $|\psi(t_0)\rangle$ متعلق به‌فضای حالت $\mathscr{E}$ تعیین می‌شود .

توجه به‌این مطلب حائز اهمیت است ، که چون $\mathscr{E}$ یک فضای برداری است ، این اصل موضوع اول دلالت بریک اصل برهم‌نهش دارد : یک ترکیب خطی از بردارهای‌حالت ، یک بردار حالت است . این نکته اساسی و رابطه آن با سایر اصول موضوع را در بخش E مورد بحث قرار خواهیم داد .

۲ ــ توصیف کمیتهای فیزیکی

قبلا" ، در بخش ۱ ــD ازفصل اول ، یک عملگر دیفرانسیلی H به‌کار بردیم که به‌انرژی کل یک ذره در یک پتانسیل نرداری ، مربوط می‌شد . این مطلب یک مورد خاص از اصل موضوع دوم است .

> اصل موضوع دوم : هرکمیت فیزیکی‌قابل‌اندازه‌گیری $\mathscr{A}$ توسط یک عملگر که در $\mathscr{E}$ عمل می‌کند توصیف می‌شود ، این عملگریک مشاهده‌پذیراست .

گوشزدها :

(*i*) دربخش ۳ی زیرخواهیم دید که این واقعیت که A یک مشاهده‌پذیر است (رک. به‌فصل دوم ، بخش ۲ ــ D) ضروری است .

(*ii*) مکانیک کوانتومی حالت یک دستگاه و کمیتهای فیزیکی وابسته به‌آن را به روشی اساسا" متفاوت با مکانیک کلاسیک (ر ک بخش A) تشریح می‌کند : یک حالت توسط یک بردار و یک کمیت فیزیکی توسط یک عملگر نمایش داده می‌شود .

۳ ـ اندازه‌گیری کمیتهای فیزیکی

a ــ نتایج ممکن

ارتباط بین عملگر H و انرژی کل ذره در بخش ۱ ــ D از فصل اول به‌صورت زیر تجلی کرد : تنها انرژیهای ممکن ، ویژه مقدارهای عملگر H هستند . در اینجا هم ، این ارتباط می‌تواند به‌تمام کمیتهای فیزیکی تعمیم داده شود .

> اصل موضوع سوم : **تنها نتیجهٔ ممکن اندازه‌گیری یک کمیت فیزیکی $\mathcal{A}$ یکی از ویژه مقدارهای مشاهده‌پذیر A ی متناظر است .**

گوشزدها :

(*i*) یک اندازه‌گیری $\mathcal{A}$ همواره یک مقدار حقیقی به‌دست‌می‌دهد ، زیرا A بنابه‌تعریف هرمیتی است .

(*ii*) اگر طیف A گسسته باشد ، نتایجی که می‌توانندبااندازه‌گیری $\mathcal{A}$ به‌دست آیند کوانتومی هستند (بخش ۲ ــ C) .

b ـ اصل تجزیه طیفی

می‌خواهیم نتایج بخش ۳ ـ A از فصل اول را که از تجزیه و تحلیل آزمایش ساده‌ای بر روی فوتونهای قطبی شده به‌دست آمدند تعمیم داده و مفصل‌تر مورد بحث قرار دهیم . دستگاهی را در نظر بگیرید که حالت آن در یک زمان معین ، توسط کت $|\psi\rangle$ ، که فرض می‌شود بهنجارشده به‌واحد است ، مشخص شده باشد :

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 \tag{B-۱}$$

می‌خواهیم نتیجه اندازه‌گیری کمیت فیزیکی $\mathscr{A}$ ی وابسته به‌مشاهده‌پذیر A ، در این زمان را پیش‌بینی کنیم . این پیش‌بینی ، همانطوری‌که ازقبل می‌دانیم ، از نوع احتمالاتی است . اکنون می‌خواهیم قواعدی را بدهیم که به‌ما امکان دهد احتمال به‌دست‌آوردن هرویژه‌مقدار معین A را محاسبه کنیم .

α . مورد یک طیف گسسته

ابتدا ، فرض کنیم که طیف A کلا" گسسته است . اگرتمام‌ویژه مقدارهای A ،یعنی همه a_n ها ناتبهگن باشند ، به‌هرکدام از آنها یک ویژه بردار یکتای $|u_n\rangle$ (باتقریب یک ضریب ثابت) وابسته است :

$$A|u_n\rangle = a_n|u_n\rangle \tag{B-۲}$$

چون A یک مشاهده‌پذیر است ، مجموعه $|u_n\rangle$ ، که ما آنها را بهنجار شده در نظر خواهیم گرفت ، یک پایه در $\mathscr{E}$ تشکیل می‌دهند ، و بردار حالت $|\psi\rangle$ می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود :

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |u_n\rangle \tag{B-۳}$$

به‌عنوان اصل موضوع می‌پذیریم که احتمال $\mathscr{P}(a_n)$ برای یافتن a_n وقتی که $\mathscr{A}$ اندازه‌گیری می‌شود برابر است با :

$$\mathscr{P}(a_n) = |c_n|^2 = |\langle u_n | \psi \rangle|^2 \tag{B-۴}$$

اصل موضوع چهارم (مورد یک طیف گسسته نا تبهگن) : **وقتی کمیت فیزیکی $\mathscr{A}$ ی دستگاهی که درحالت بهنجارشده $\langle \psi |$ قراردارد ، اندازه‌گیری می شود احتمال $\mathscr{P}(a_n)$ برای به‌دست‌آوردن ویژه‌مقدارناتبهگن a_n مشاهده‌پذیر A ی متناظر برابر است با :**

$$\mathscr{P}(a_n) = |\langle u_n | \psi \rangle|^2$$

که درآن $\langle u_n |$ عبارت است از ویژه بردار بهنجار شده A وابسته به‌ویژه مقدار a_n .

حال ، اگر بعضی از ویژه مقدارهای a_n تبهگن باشد ، چند ویژه‌بردار راست هنجار $\langle u_n^i |$ با آن متناظر است :

$$A | u_n^i \rangle = a_n | u_n^i \rangle ; \quad i = 1, 2, \dots g_n \qquad (B-5)$$

$\langle \psi |$ باز هم می‌تواند در پایه راست هنجار $\{\langle u_n^i |\}$ بسط داده شود :

$$| \psi \rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i | u_n^i \rangle \qquad (B-6)$$

در این مورد ، احتمال $\mathscr{P}(a_n)$ به‌صورت زیر خواهد بود :

$$\mathscr{P}(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2 = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2 \qquad (B-7)$$

ملاحظه می‌شود که (B — ۴) مورد خاصی از (B — ۷) ، که می‌توانیم آنرا به‌عنوان فرمول عمومی در نظر بگیریم ، می‌باشد .

اصل موضوع چهارم (مورد یک طیف گسسته) : **وقتی کمیت فیزیکی $\mathscr{A}$ ی دستگاهی که در حالت بهنجار شده $|\psi\rangle$ قرار دارد . اندازه‌گیری‌می‌شود ، احتمال $\mathscr{P}(a_n)$ برای به‌دست‌آوردن ویژه‌مقدار a_n مشاهده‌پذیری A ی متناظر برابر است با :**

$$\mathscr{P}(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2$$

که در آن g_n درجه تبهگنی a_n و $\{ |u_n^i\rangle \}$ $(i = 1, 2, ..., g_n)$ مجموعه بردارهای راست هنجاری هستند که در ویژه زیر فضای $\mathscr{E}_n$ وابسته به‌ویژه مقدار a_n عملگر A ، تشکیل یک پایه می‌دهند .

برای اینکه این اصل موضوع معنی داشته باشد ، مسلماً لازم است که ، اگر ویژه مقدار a_n تبهگن باشد ، احتمال $\mathscr{P}(a_n)$ مستقل از انتخاب پایهٔ $\{ |u_n^i\rangle \}$ در $\mathscr{E}_n$ باشد. برای اثبات این مطلب ، بردار زیر را در نظر بگیرید :

$$|\psi_n\rangle = \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle \tag{B-8}$$

ضرائب c_n^i همان ضرائبی هستند که در بسط (B ـ ۶) بردار $|\psi\rangle$ ظاهر شده‌اند :

$$c_n^i = \langle u_n^i | \psi \rangle \tag{B-9}$$

$|\psi_n\rangle$ قسمتی از $|\psi\rangle$ است که متعلق به $\mathscr{E}_n$ است ، یعنی عبارت است از تصویر $|\psi\rangle$ روی $\mathscr{E}_n$ بعلاوه ، این همان چیزی است که وقتی (B ـ ۹) را در (B ـ ۸) جایگزین کنیم به‌دست می‌آید :

$$\begin{aligned} |\psi_n\rangle &= \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle \langle u_n^i | \psi \rangle \\ &= P_n |\psi\rangle \end{aligned} \tag{B-10}$$

که در آن :

$$P_n = \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle \langle u_n^i| \tag{B-11}$$

تصویرگر روی $\mathscr{E}_n$ است (بخش b ـ ۳ ـ B از فصل دوم) . حال مجذور هنجار $|\psi_n\rangle$ را محاسبه کنیم . از (B ـ ۸) داریم :

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle = \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2 \qquad (B-۱۲)$$

بنابراین، $\mathscr{P}(a_n)$ عبارت است از مجذور هنجار $|\psi_n\rangle = P_n|\psi\rangle$ ، تصویر $|\psi\rangle$ روی $\mathscr{E}_n$. ازین مطلب روشن می‌شود که تغییر پایه در $\mathscr{E}_n$ تأثیری بر $\mathscr{P}(a_n)$ ندارد. این احتمال به‌صورت :

$$\mathscr{P}(a_n) = \langle \psi | P_n^\dagger P_n | \psi \rangle \qquad (B-۱۳)$$

یا، بااستفاده ازین واقعیت‌که P_n هرمیتی ($P_n^\dagger = P_n$)و یک تصویرگراست ($P_n^2 = P_n$) ، به‌صورت :

$$\mathscr{P}(a_n) = \langle \psi | P_n | \psi \rangle \qquad (B-۱۴)$$

نوشته می‌شود.

β ــ مورد یک طیف پیوسته

حال فرض کنید که طیف A پیوسته و، برای سهولت، ناتبهگن باشد. دستگاه‌ویژه بردارهای $|v_\alpha\rangle$ ی متعلق به‌عملگر A :

$$A|v_\alpha\rangle = \alpha|v_\alpha\rangle \qquad (B-۱۵)$$

که به‌مفهوم وسیع‌تر راست هنجار هستند، درفضای $\mathscr{E}$ تشکیل یک پایهٔ پیوسته می‌دهند و $|\psi\rangle$ می‌تواند برحسب آنها بسط داده شود :

$$|\psi\rangle = \int d\alpha\, c(\alpha)\, |v_\alpha\rangle \qquad (B-۱۶)$$

چون نتایج ممکن یک اندازه‌گیری $\mathscr{A}$ یک مجموعه پیوسته تشکیل می‌دهند، باید درست همان‌طوری‌که برای تعبیرتابع موج یک ذره، یک چگالی احتمال تعریف‌کردیم (بخش ۲ ــ B از فصل اول) دراینجا نیز یک چگالی احتمال تعریف کنیم. احتمال $d\mathscr{P}(\alpha)$ برای یافتن مقداری بین α و $\alpha + d\alpha$ توسط رابطه :

$$d\mathscr{P}(\alpha) = \rho(\alpha)\, d\alpha$$

داده می‌شود که در آن :

$$\rho(\alpha) = |c(\alpha)|^2 = |\langle v_\alpha | \psi \rangle|^2 \qquad (\text{B}-۱۷)$$

اصل موضوع چهارم (مورد یک طیف پیوستهٔ ناتبهگن) : **وقتی کمیت فیزیکی $\mathscr{A}$ ی دستگاهی که درحالت بهنجارشده $|\psi\rangle$ قرار دارد ، اندازه‌گیری می‌شود احتمال $d\mathscr{P}(\alpha)$ برای یافتن نتیجه‌ای بین α و $\alpha + d\alpha$ برابراست با :**

$$d\mathscr{P}(\alpha) = |\langle v_\alpha | \psi \rangle|^2 \, d\alpha$$

که در آن $|v_\alpha\rangle$ عبارت است از ویژه‌بردار متناظر با ویژه مقدار α ی متعلق به مشاهده پذیر A ی وابسته به $\mathscr{A}$.

گوشزدها :

(*i*) می‌توان در هریک از موارد فوق ، صریحا" نشان دادکه احتمال کل برابر است با ۱ ، به‌عنوان مثال ، با شروع از فرمول (B – ۷) ، خواهیم داشت :

$$\sum_n \mathscr{P}(a_n) = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2 = \langle \psi | \psi \rangle = 1 \qquad (\text{B}-۱۸)$$

زیرا $|\psi\rangle$ بهنجارشده است . بنابراین برای اینکه بیانهائی که ارائه کردیم هماهنگ باشند بشرط آخر لازم است . مع ذالک ، این شرط ضروری نیست : اگربرآورده نشود کافی است که (B – ۷) و (B – ۱۷) را به‌ترتیب توسط :

$$\mathscr{P}(a_n) = \frac{1}{\langle \psi | \psi \rangle} \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2 \qquad (\text{B}-۱۹)$$

$$\rho(\alpha) = \frac{1}{\langle \psi | \psi \rangle} |c(\alpha)|^2 \qquad (\text{B}-۲۰)$$

جایگزین کنیم .

(*ii*) برای اینکه اصل موضوع چهارم منسجم باشد ، لازم است که عملگر A ی وابسته به هرکمیت فیزیکی یک مشاهده‌پذیر باشد : باید بتوان هرحالت راروی ویژه‌بردارهای

A بسط داد .

(iii) اصل موضوع چهارم را به‌کلی‌ترین شکلش ارائه نداده‌ایم . با شروع از بحث در مواردی که بررسی کردیم ، به‌آسانی می‌توان اصل تجزیه طیفی را به‌هر وضعیتی (طیف پیوسته تبهگن ، طیفی که بخشی ازآن پیوسته و بخشی‌گسسته است و غیره) بسط داد .

در بخش E و بعدا "در فصل چهارم ، این اصل موضوع چهارم را در مورد چند نمونه به‌کار خواهیم بست ، و چند پی‌آمد اصل برهم نهش مذکور در بخش ۱ — B را اثبات خواهیم کرد .

γ — یک نتیجه مهم

دوکت $|\psi\rangle$ و $|\psi'\rangle$ که رابطهٔ آنها به‌صورت :

$$|\psi'\rangle = e^{i\theta}|\psi\rangle \qquad (B-۲۱)$$

و درآن θ یک عدد حقیقی است در نظر بگیرید . اگر $|\psi\rangle$ بهنجارشده باشد ، $|\psi'\rangle$ نیز بهنجارشده خواهد بود :

$$\langle\psi'|\psi'\rangle = \langle\psi|e^{-i\theta}\,e^{i\theta}|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle \qquad (B-۲۲)$$

احتمالهای پیش بینی شده برای یک اندازه‌گیری‌معین ، برای $|\psi\rangle$ و $|\psi'\rangle$ یکسان‌است زیرا ، برای هر $|u_n^i\rangle$ داریم :

$$|\langle u_n^i|\psi'\rangle|^2 = |e^{i\theta}\langle u_n^i|\psi\rangle|^2 = |\langle u_n^i|\psi\rangle|^2 \qquad (B-۲۳)$$

همینطور ، می‌توانیم $|\psi\rangle$ را توسط :

$$|\psi''\rangle = \alpha\, e^{i\theta}|\psi\rangle \qquad (B-۲۴)$$

جایگزین کنیم بدون اینکه هیچ یک از نتایج فیزیکی تغییر کند : هم درصورت وهم درمخرج (B—۱۹) و (B—۲۰) سازه‌های $|\alpha|^2$ ظاهرمی‌شودکه یکدیگر را حذف می‌کنند بنابراین ، دو بردار حالت که با یکدیگر متناسب باشند نشان دهنده یک حالت فیزیکی‌اند .

باید دقت به‌عمل آید که این نتیجه به‌طور صحیحی تعبیر شود . به‌عنوان مثال ، فرض کنید :

$$|\psi\rangle = \lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle \qquad (B-۲۵)$$

که درآن λ_1 و λ_2 اعداد مختلطی هستند . درست است که $e^{i\theta_2}|\psi_2\rangle$ برای تمام θ_1 های حقیقی ، همان حالت $|\psi_1\rangle$ ، و $e^{i\theta_1}|\psi_1\rangle$ همان حالت $|\psi_2\rangle$ را نشان می‌دهد ، اما عموما" :

$$|\varphi\rangle = \lambda_1 e^{i\theta_2}|\psi_1\rangle + \lambda_2 e^{i\theta_2}|\psi_2\rangle \qquad (B-۲۶)$$

همان حالت وابسته به $|\psi\rangle$ را توصیف نمی‌کند (دربخش ۱ ــ E خواهیم دید که فازهای نسبی ضرائب بسط بردار حالت نقش مهمی ایفا می‌کنند) . این امر برای مورد خاصی که در آن $\theta_1 = \theta_2 + 2n\pi$ باشد ، یعنی برای :

$$|\varphi\rangle = e^{i\theta_1}[\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle] = e^{i\theta_1}|\psi\rangle \qquad (B-۲۷)$$

صادق نیست .

بعبارت دیگر : یک عامل فاز کلی تأثیری در پیش بینی‌های فیزیکی نمی‌گذارد ، امافازهای نسبی ضرائب یک بسط دارای معنا هستند .

c ــ تقلیل بسته موج

این مفهوم را قبلا" ، وقتی که از اندازه‌گیری قطبش فوتونها درآزمایشی که در بخش ۳ ــ A از فصل اول توصیف شد ، صحبت نمودیم ، معرفی کردیم . در اینجا می‌خواهیم با وجود اینکه خود را به‌مورد یک طیف‌گسسته محدود می‌سازیم (دربخش E به‌مورد یک‌طیف پیوسته خواهیم پرداخت) این مفهوم را تعمیم دهیم .

فرض کنید می‌خواهیم در یک زمان معین ، کمیت فیزیکی $\mathscr{A}$ را اندازه‌گیری کنیم اگر کت $|\psi\rangle$ ، که معرف حالت دستگاه بلافاصله قبل از اندازه‌گیری است ، معلوم باشد ، اصل موضوع چهارم به‌ما امکان می‌دهد تااحتمالهای یافتن نتایج ممکن مختلف را پیش‌بینی کنیم . اما وقتی اندازه‌گیری عملا" انجام شد ، واضح است که فقط یکی ازین نتایج ممکن به‌دست آمده است . بلافاصله بعد از این اندازه‌گیری ، نمی‌توانیم از اینکه با چه احتمالی این یا آن مقدار را به‌دست آورده‌ایم صحبت کنیم : می‌دانیم که در واقع کدام یک به‌دست آمده‌است . بنابراین اطلاعات زیادتری داریم ، و قابل فهم است که حالت دستگاه بعد از اندازه‌گیری ، که بایستی این اطلاعات اضافی را بما بدهد ، باید با $|\psi\rangle$ متفاوت باشد .

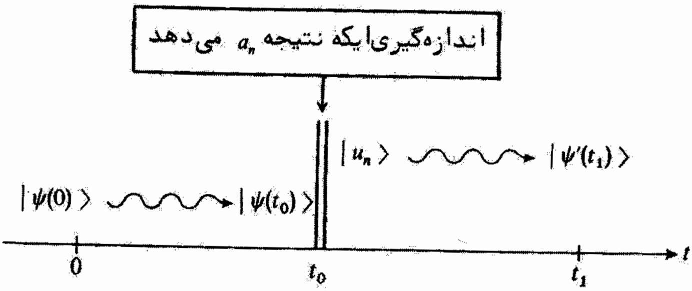
ابتدا موردی را در نظر بگیریم که درآن ، اندازه‌گیری کمیت فیزیکی $\mathscr{A}$ منجر به‌یک ویژه مقدار ساده a_n وابسته به‌مشاهده‌پذیر A شود . در این صورت بعنوان اصل موضوع می‌پذیریم که حالت دستگاه بلافاصله بعدازاین اندازه‌گیری عبارت است ازویژه‌بردار $|u_n\rangle$

وابسته به a_n :

$$|\psi\rangle \xrightarrow{(a_n)} |u_n\rangle \qquad (\text{B}-۲۸)$$

گوشزدها :

(i) تا اینجا در باره حالتهای "بلافاصله قبل" از اندازه‌گیری ($|\psi\rangle$) و حالتهای "بلافاصله بعد" از اندازه‌گیری ($|u_n\rangle$) صحبت کرده‌ایم. مفهوم دقیق این عبارت بشرح زیر است: فرض کنید که اندازه‌گیری در زمان $t_0 > 0$ انجام شود، و حالت $|\psi(0)\rangle$ دستگاه در زمان $t = 0$ را می‌دانیم. اصل موضوع ششم (رک بخش ۴) تحول دستگاه با زمان را توصیف می‌کند، یعنی، ما را قادر می‌سازد تا از $|\psi(0)\rangle$، حالت "بلافاصله قبل" از اندازه‌گیری، $|\psi(t_0)\rangle$ را محاسبه کنیم. اگر اندازه‌گیری به ویژه مقدار ناتبهگن a_n منجر شود، حالت $|\psi'(t_1)\rangle$ در زمان $t_1 > t_0$ باید از $|\psi'(t_0)\rangle = |u_n\rangle$، حالت "بلافاصله بعد" از اندازه‌گیری، با استفاده از اصل موضوع ششم برای تعیین تحول بردار حالت بین زمانهای t_0 و t_1 (شکل ۱)، محاسبه شود.



شکل ۱.
وقتی اندازه‌گیری مشاهده‌پذیر A در زمان t_0 نتیجه a_n را بدهد، بردار حالت دستگاه یک تغییر ناگهانی پیدا می‌کند و به $|u_n\rangle$ تبدیل می‌شود. سپس این حالت اولیه جدید تحول می‌یابد.

(ii) اگر بلافاصله پس از اندازه‌گیری اول (یعنی، قبل از آن که دستگاه مجال تحول پیدا کند) . یک اندازه‌گیری دیگر از $\mathscr{A}$ انجام دهیم، همواره همان نتیجه a_n را به‌دست خواهیم آورد، زیرا حالت دستگاه بلافاصله قبل از اندازه‌گیری دوم، دیگر

$|\psi\rangle$ نیست بلکه $|u_n\rangle$ است .

وقتی ویژه مقدار a_n که توسط اندازه‌گیری به‌دست می‌آید تبهگن باشد ، اصل موضوع (B ـ۲۸) می‌تواند به‌صورت زیر تعمیم داده شود . اگر بسط حالت $|\psi\rangle$ بلافاصله قبل از اندازه‌گیری ، باهمان نمادگذاری بخش b به‌صورت :

$$|\psi\rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i \, |u_n^i\rangle \qquad \text{(B ـ۲۹)}$$

نوشته شده باشد ، تغییر بردار حالت ناشی از اندازه‌گیری به‌صورت زیر نوشته می‌شود :

$$|\psi\rangle \xRightarrow{(a_n)} \frac{1}{\sqrt{\sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2}} \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i \, |u_n^i\rangle \qquad \text{(B ـ۳۰)}$$

$\sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle$ همان بردار $|\psi_n\rangle$ است که در بالا [فرمول (B ـ۸)] تعریف شد ، یعنی ، تصویر $|\psi\rangle$ روی ویژه زیر فضای وابسته به a_n . در (B ـ۳۰) ،این‌بردار را بهنجارکرده‌ایم زیرا همیشه مناسب‌تر است که از بردارهای حالت با هنجار ۱ استفاده کنیم[گوشزد (i) از بخش b بالا]. بنابراین ، با نمادگذاری(B ـ۱۰) و(B ـ۱۱) می‌توانیم (B ـ۳۰) را به‌صورت زیر بنویسیم :

$$|\psi\rangle \xRightarrow{(a_n)} \frac{P_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}} \qquad \text{(B ـ۳۱)}$$

> اصل موضوع پنجم : اگر اندازه‌گیری کمیت فیزیکی $\mathscr{A}$ روی دستگاهی که در حالت $|\psi\rangle$ است نتیجه a_n را بدهد ، حالت دستگاه بلافاصله بعد از اندازه‌گیری عبارت است از $\dfrac{P_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}}$ ، یعنی ،تصویربهنجار شده $|\psi\rangle$ روی ویژه زیر فضای وابسته به a_n .

بنابراین ، حالت دستگاه بلافاصله بعد از اندازه‌گیری همواره یک ویژه بردار A با ویژه مقدار a_n است . مع‌ذالک این واقعیت را مورد تاکید قرار می‌دهیم‌که این حالت یک کت دلخواه از زیر فضای $\mathscr{E}_n$ نیست ، بلکه قسمتی از $|\psi\rangle$ است که به $\mathscr{E}_n$ تعلق‌دارد (که برای راحتی بطور مناسبی بهنجارشده است) . در پرتو بخش ۷ ـ b ـ۳ ی فوق ،ملاحظه

می‌شود که معادله (۲۸ ــ B) یک مورد خاص از (۳۰ــ B) است . وقتی $g_n = 1$ باشد ، جمع‌بندی روی i از (۳۰ــ B) برداشته می‌شود ، که دراین صورت خواهد شد :

$$\frac{1}{|c_n|} c_n \,|\, u_n \rangle = e^{i\,\mathrm{Arg}\,c_n} \,|\, u_n \rangle \qquad \text{(B ــ۳۲)}$$

این کت مسلما" همان حالت فیزیکی $|u_n\rangle$ را توصیف می‌کند .

۴ ــ تحول زمانی دستگاهها

قبلا" دربخش ۲ــB از فصل اول ، معادله شرودینگر برای یک ذره راارائه دادیم ، در اینجا ، این معادله را در مورد عام می‌نویسیم .

> اصل موضوع ششم : تحول زمانی بردار حالت $|\psi(t)\rangle$ ازمعادله‌شرودینگر :
>
> $$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle$$
>
> پیروی می‌کند ، که در آن $H(t)$ مشاهده‌پذیر وابسته به‌انرژی‌کل‌دستگاه است .

$H(t)$ عملگر هامیلتونی دستگاه نامیده می‌شود ، زیرا از هامیلتونی‌کلاسیکی‌به‌دست آمده است (پیوست ۳ و بخش ۵ زیر) .

۵ ــ قواعد کوانتش

بالاخره ، می‌خواهیم دراین‌مورد بحث‌کنیم‌که چگونه ، برای یک‌کمیت‌فیزیکی $\mathscr{A}$ که از ، قبل درمکانیک کلاسیک تعریف شده است ، عملگر A را که توصیف کننده آن کمیت‌در مکانیک کوانتومی است ، بسازیم .

a ــ گزاره

ابتدا یک دستگاه مرکب از یک ذره بدون اسپین را که تحت تأثیر یک پتانسیل نرداری است در نظر بگیرید . دراین مورد :

به‌مکان $\mathbf{r}(x, y, z)$ ذره مشاهده‌پذیر $\mathbf{R}(X, Y, Z)$ و به‌اندازه حرکت $\mathbf{p}(p_x, p_y, p_z)$ ی آن مشاهده‌پذیر $\mathbf{P}(P_x, P_y, P_z)$ وابسته است.

یادآور می‌شویم که‌مؤلفه‌های $\mathbf{R}$ و $\mathbf{P}$ در روابط جابجائی‌پذیری زیرصدق می‌کنند [فصل‌دوم، معادلات (E – ۳۰)]:

$$\begin{aligned}[R_i, R_j] &= [P_i, P_j] = 0 \\ [R_i, P_j] &= i\hbar\delta_{ij}\end{aligned} \qquad (\text{B} - ۳۳)$$

هرکمیت فیزیکی $\mathscr{A}$ ی مربوط به‌این‌ذره برحسب متغیرهای دینامیکی بنیادی $\mathbf{r}$ و $\mathbf{p}$ بیان می‌شود: $\mathscr{A}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$. برای به‌دست آوردن مشاهده‌پذیر متناظر A ، کافی است درعبارت مربوط به $\mathscr{A}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ ، متغیرهای $\mathbf{r}$ و $\mathbf{p}$ را توسط مشاهده پذیرهای $\mathbf{R}$ و $\mathbf{P}$ جایگزین کنیم *:

$$A(t) = \mathscr{A}(\mathbf{R}, \mathbf{P}, t) \qquad (\text{B} - ۳۴)$$

لیکن، این روش عمل، معمولاً"، مبهم است. به عنوان مثال فرض کنید که در $\mathscr{A}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ جمله‌ای به‌صورت زیر وجود داشته باشد:

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} = xp_x + yp_y + zp_z \qquad (\text{B} - ۳۵)$$

در مکانیک کلاسیک حاصلضرب نرداری $\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}$ جابجائی‌پذیر است، به‌صورت:

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} = p_x x + p_y y + p_z z \qquad (\text{B} - ۳۶)$$

نیز می‌تواندنوشته شود. اما وقتی $\mathbf{r}$ و $\mathbf{p}$ را توسط مشاهده‌پذیرهای $\mathbf{R}$ و $\mathbf{P}$ ی مربوط جایگزین کنیم، عملگرهائی که از (B –۳۵) و (B –۳۶) به‌دست می‌آیند یکسان نیستند [رک روابط (B –۳۳)]:

$$\mathbf{R} \cdot \mathbf{P} \neq \mathbf{P} \cdot \mathbf{R} \qquad (\text{B} - ۳۷)$$

بعلاوه $\mathbf{R} \cdot \mathbf{P}$ و $\mathbf{P} \cdot \mathbf{R}$ هیچکدام هرمیتی نیستند:

---

* رک تعریف تابعی از یک عملگر، در مکمل $\mathrm{B_{II}}$

$$(\mathbf{R}\,.\,\mathbf{P})^\dagger = (XP_x + YP_y + ZP_z)^\dagger = \mathbf{P}\,.\,\mathbf{R} \qquad (\text{B}-۳۸)$$

از این رو، باید به اصول موضوع قبل یک قاعده متقارن سازی افزوده شود. به‌عنوان مثال، مشاهده پذیر وابسته به $\mathbf{r}\,.\,\mathbf{p}$ خواهد بود:

$$\frac{1}{2}(\mathbf{R}\,.\,\mathbf{P} + \mathbf{P}\,.\,\mathbf{R}) \qquad (\text{B}-۳۹)$$

که درواقع، هرمیتی است. برای مشاهده‌پذیری که از $\mathbf{R}\,.\,\mathbf{P}$ پیچیده‌تر است متقارن سازی مشابهی باید انجام شود.

> مشاهده‌پذیر A ی وابسته به‌یک کمیت فیزیکی $\mathscr{A}$ که از نظر کلاسیکی تعریف شده است، با جایگزین کردن $\mathbf{r}$ و $\mathbf{p}$، در عبارتی که به‌طور مناسبی برای $\mathscr{A}$ شده است، به‌ترتیب توسط مشاهده‌پذیرهای $\mathbf{R}$ و $\mathbf{P}$ به‌دست می‌آید.

ولی خواهیم دید که کمیتهای فیزیکی کوانتومی‌ای وجود دارند که هیچ معادل کلاسیکی ندارند و ازینرو مستقیماً توسط مشاهده‌پذیرهای مربوطه‌شان تعریف می‌شوند [به‌عنوان مثال، اسپین ذره یکی ازین موارد است].

گوشـــزد:

قواعد اخیر، و بخصوص قواعد جابجائی‌پذیری (B–۳۳)، فقط درمختصات دکارتی معتبرند. می‌توان آنها را به‌سایر دستگاههای مختصات تعمیم داد، اما، دیگر آن شکل ساده فوق را ندارند.

b ــ مثالهای مهم

α ــ هامیلتونی یک ذره در یک پتانسیل نرده‌ای

یک ذره (بدون اسپین) با بار q و جرم m را که دریک میدان‌الکتریکی مشتق ازیک پتانسیل نرده‌ای $U(\mathbf{r})$ قراردارد، درنظر بگیرید. بنابر این انرژی پتانسیل ذره برابر $V(\mathbf{r}) = qU(\mathbf{r})$ است، و هامیلتونی کلاسیکی مربوط به‌صورت:

$$\mathscr{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \tag{B-۴۰}$$

با :

$$\mathbf{p} = m\frac{\mathrm{d}\mathbf{r}}{\mathrm{d}t} = m\mathbf{v} \tag{B-۴۱}$$

نوشته می‌شود که درآن $\mathbf{v}$ سرعت ذره است [پیوست ۳، فرمول (۲۹)] .

درساختن عملگرکوانتومی H متناظر با $\mathscr{H}$ هیچ اشکالی پیش نمی‌آید . به‌هیچگونه متقارن‌سازی‌ای احتیاج نیست ، زیرا هیچ یک از عملگرهای $\mathbf{P}^2 = P_x^2 + P_y^2 + P_z^2$ و $V(\mathbf{R})$ شامل حاصلضربهائی از عملگرهای جابجائی‌ناپذیر نیستند . بنابراین داریم :

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{R}) \tag{B-۴۲}$$

$V(\mathbf{R})$ عملگری است که از جایگزین کردن $\mathbf{r}$ توسط $\mathbf{R}$ در $V(\mathbf{r})$ به‌دست آمده است (رک مکمل $\mathrm{B_{II}}$ ، بخش ۴) .

دراین‌مورد بخصوص، معادله شرودینگر ، که دراصل موضوع ششم داده شده است ، به‌صورت زیر در می‌آید :

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\,\psi(t)\,\rangle = \left[\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{R})\right]|\,\psi(t)\,\rangle \tag{B-۴۳}$$

β ــ هامیلتونی یک ذره در یک پتانسیل برداری

حال اگر ذره را در یک میدان الکترومغناطیسی دلخواه قرار دهیم ، هامیلتونی کلاسیکی به‌صورت زیر در می‌آید [پیوست ۳، رابطه (۶۶)] :

$$\mathscr{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2m}[\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)]^2 + qU(\mathbf{r}, t) \tag{B-۴۴}$$

که درآن $U(\mathbf{r}, t)$ و $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ پتانسیلهای نرداری وبرداری‌ای هستندکه‌میدان‌الکترومغناطیسی را توصیف می‌کنند و $\mathbf{p}$ با رابطهٔ زیر داده می‌شود :

$$\mathbf{p} = m\frac{\mathrm{d}\mathbf{r}}{\mathrm{d}t} + q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = m\mathbf{v} + q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \tag{B-۴۵}$$

در اینجا نیز ، چون $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ فقط به $\mathbf{r}$ و فراسنج t (و نه به $\mathbf{p}$) بستگی دارد ،

ساختن عملگر کوانتومی متناظر با $\mathbf{A}(\mathbf{R}, t)$ مشکلی ایجاد نمی‌کند، در این صورت عملگر هامیلتونی H به‌صورت زیر داده می‌شود:

$$H(t) = \frac{1}{2m}[\mathbf{P} - q\mathbf{A}(\mathbf{R}, t)]^2 + V(\mathbf{R}, t) \qquad (\text{B}-۴۶)$$

که در آن:

$$V(\mathbf{R}, t) = q\, U(\mathbf{R}, t) \qquad (\text{B}-۴۷)$$

و معادله شرودینگر به‌صورت زیر نوشته می‌شود:

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = \left\{\frac{1}{2m}[\mathbf{P} - q\mathbf{A}(\mathbf{R}, t)]^2 + V(\mathbf{R}, t)\right\}|\psi(t)\rangle \qquad (\text{B}-۴۸)$$

گوشزد:

باید دقت شود تا $\mathbf{P}$ (تکانه ذره، که تکانه همیوغ $\mathbf{r}$ نیز نامیده می‌شود) با $m\mathbf{v}$ (تکانه مکانیکی ذره) اشتباه نشود: تفاوت بین این دوکمیت بوضوح در (B ـ۴۵) ظاهر می‌شود. البته، در مکانیک کوانتومی برای سرعت ذره عملگری وجود دارد که دراینجا به‌صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\mathscr{V} = \frac{1}{m}(\mathbf{P} - q\mathbf{A}) \qquad (\text{B}-۴۹)$$

در این صورت H توسط رابطه زیر داده می‌شود:

$$H(t) = \frac{1}{2}m\mathscr{V}^2 + V(\mathbf{R}, t) \qquad (\text{B}-۵۰)$$

H برابر با مجموع دوجمله است، یکی مربوط به‌انرژی جنبشی ذره و دیگری مربوط به‌انرژی پتانسیل آن.

لیکن، این تکانه همیوغ $\mathbf{P}$ است و نه تکانه مکانیکی $m\mathbf{v}$ که در مکانیک کوانتومی به‌عملگر $\mathbf{P}$ که در روابط جابجائی‌پذیری بندادی (B ـ۳۳) صدق می‌کند، تبدیل می‌شود.

C . تعبیر فیزیکی اصول موضوع مربوط به‌مشاهده‌پذیرها واندازه‌گیری آنها

۱ ــ قواعد کوانتش با تعبیر احتمالاتی تابع موج سازگار است .

طبیعی است که مشاهده‌پذیرهای R و P را ، که عمل آنها در بخش E از فصل دوم تعریف شد ، به‌مکان و تکانه یک ذره وابسته کنیم . قبل ازهرچیز ، هریک ازمشاهده‌پذیرهای X ، Y ، Z و P_x ، P_y ، P_z دارای یک طیف پیوسته‌اند ، ودرواقع ، تجربه نشان‌می‌دهد که برای شش متغیر مکان و تکانه تمام مقادیر حقیقی امکان‌پذیر هستند . علاوه براین ، خواهیم دیدکه اعمال اصل موضوع چهارم به‌مورد این متغیرها ما را قادر می‌سازد تا تعبیراحتمالاتی تابع موج و هم‌چنین تعبیر احتمالاتی تبدیل فوریه آن را ازنو به‌دست‌آوریم (رک بخشهای ۳ــC و ۲ــB از فصل اول) .

برای سهولت ، مسأله یک بعدی را در نظر بگیریم . اگر ذره در حالت بهنجارشده $|\psi\rangle$ باشد ، احتمال اینکه یک اندازه‌گیری از مکان آن نتیجه‌ای بین x و $x + dx$ بدهد برابر است با [فرمول (B ــ۱۷)] :

$$d\mathscr{P}(x) = |\langle x|\psi\rangle|^2 dx \qquad (C-1)$$

که درآن $|x\rangle$ عبارت است از ویژه کت X با ویژه مقدار x . باردیگر ملاحظه می‌کنیم که قدر مطلق تابع موج $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$ عبارت است از چگالی‌احتمال مکان‌ذره. حال ،با ویژه بردار $|p\rangle$ ی مشاهده پذیر p موج تخت :

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}} \qquad (C-2)$$

متناظر است و قبلا" (دربخش ۳ــ C از فصل اول) دیدیم‌که روابط دوبروی بهاین موج یک تکانه‌کاملا "معین‌که دقیقا" برابر p است ،وابسته می‌کنند . بعلاوه ، برای یک ذره در حالت $|\psi\rangle$ ، احتمال یافتن تکانه‌ای بین p و $p + dp$ برابر است با :

$$d\mathscr{P}(p) = |\langle p|\psi\rangle|^2 dp = |\bar{\psi}(p)|^2 dp \qquad (C-3)$$

این ، در واقع همان چیزی است که در بخش ۳ــC از فصل اول به‌دست آوردیم .

۲ــ کوانتش بعضی از کمیتهای فیزیکی

همان‌طوری که قبلا" خاطرنشان کردیم ، اصل موضوع سوم ما را قادر می‌سازد تا کوانتش مشاهده‌شده برای بعضی از کمیتها ، نظیر انرژی اتمها ، را تشریح کنیم . اما این مطلب بدان معنی نیست که تمام کمیتها کوانتومی هستند ، زیرا مشاهده پذیرهائی وجود دارند که طیف آنها پیوسته است . بنابراین ، پیش بینی‌های فیزیکی ای که براساس اصل موضوع سوم بنا شده‌اند ، هرگز از پیش مسلم نیستند . به‌عنوان مثال ، وقتی اتم هیدرژن را مطالعه می‌کنیم (فصل هفتم) ، از انرژی کل الکترون در پتانسیل کولمبی پروتون ، که از آن عملگرهامیلتونی را استنتاج می‌کنیم ، شروع خواهیم کرد . با حل معادله ویژه مقداری آن ، خواهیم دید که حالتهای مقید دستگاه فقط می‌توانند متناظر با چند انرژی گسسته ، که بعدا" محاسبه خواهیم کرد ، باشند . به‌این ترتیب نه‌تنها کوانتش ترازهای اتم هیدرژن را تشریح خواهیم کرد ، بلکه مقادیر ممکن انرژی را که می‌توان به‌طور تجربی اندازه‌گیری‌کرد نیز پیش بینی خواهیم کرد . این مطلب را مورد تاکید قرار می‌دهیم که این‌نتایج بااستفاده از همان قانون بنیادی برهم‌کنش که در مکانیک کلاسیک درگستره ماکروسکوپیی به‌کارمی‌رود به‌دست خواهند آمد .

۳ ــ فرآیند اندازه‌گیری

اصول موضوع چهارم و پنجم چند مساله اساسی مطرح می‌کند که ما آنها را دراینجا بررسی نخواهیم کرد . ازآن جمله است ، مساله اغتشاش " بنیادی " که در مشاهده یک دستگاه کوانتومی (ر ک فصل اول ، بخشهای ۲ــA و۳ــ A) وارد می‌شود . منشاءاین‌مسائل در این واقعیت نهفته است که دستگاه مورد بررسی مستقل از وسیله اندازه‌گیری درنظرگرفته می‌شود ، حال آنکه بر هم کنش این وسایل در فرایند مشاهده مهم است . در واقع باید دستگاه و وسیله اندازه‌گیری را با هم یکجا در نظر بگیریم . این امر ، مسائل حساسی را در رابطه با جزئیات فرایند اندازه‌گیری پیش می‌آورد .

به‌اثبات این مطلب‌که فرمول بندی غیرجبری اصول‌موضوع چهارم وپنجم به‌مسائلی که در بالا مطرح کردیم ، مربوط می‌شود ، بسنده می‌کنیم . به‌عنوان مثال ، تغییر ناگهانی از یک بردار حالت به‌بردار حالت دیگر که از اندازه‌گیری ناشی می‌شود ، متناظر است بااغتشاش بنیادی‌ای که در باره‌اش صحبت کردیم . اما غیر ممکن است پیش‌بینی کنیم که این‌اغتشاش چه خواهد بود ، زیرا به‌نتیجه اندازه‌گیری بستگی دارد و ما آنرا از

قبل با قطعیت نمی‌دانیم*.

در اینجا فقط اندازه‌گیریهای ایده‌آل را در نظر خواهیم گرفت. برای درک این مفهوم، به‌عنوان مثال، به‌تجربهٔ بخش ۳ـA از فصل اول در باره فوتونهای قطبی شده برمی‌گردیم. واضح است که وقتی می‌پذیریم که تمام فوتونهائی که در یک جهت معین قطبی شده‌اند ازتجزیه‌گر عبورمی‌کنند، تجزیه‌گر راکامل فرض می‌کنیم. درعمل‌مسلما"، این‌تجزیه‌گر بعضی از فوتونهائی را که باید از خود عبور دهد نیز جذب می‌کند. ازاین رو، در موردعام فرض‌خواهیم کرد که وسائل اندازه‌گیری به‌کار رفته کامل هستند: این بدان معنی است که فرض کنیم که اغتشاشی که ایجاد می‌کنند فقط ناشی ازجنبه‌های مکانیک‌کوانتومی اندازه‌گیری است. البته، وسائلی که عملا" می‌توان ساخت همیشه نواقصی دارند که در اندازه‌گیری و دردستگاه تأثیر می‌گذارند، اما می‌توان، اصولا"، آنها را متوالیا" اصلاح کرد و به‌این ترتیب به حد ایده‌آل تعریف شده توسط اصول موضوعی که بیان کردیم رسید.

۴ ـ مقدار متوسط یک مشاهده‌پذیر در یک حالت معین

پیش بینی‌های حاصل از اصل موضوع چهارم برحسب احتمالات بیان شده‌اند. برای اثبات آنها، لازم‌است که آزمایشهای زیادی در شرایط یکسان انجام دهیم. یعنی، باید یک کمیت را در تعداد زیادی از دستگاههائی که همگی در یک حالت کوانتومی قرار دارند اندازه‌گیری کنیم. اگر این پیش بینی‌ها درست باشد، بایستی درصدی از N آزمایش یکسانی که به‌یک نتیجه معین منجر می‌شوند، وقتی $N \longrightarrow \infty$، به‌سمت احتمال $\mathscr{P}$ ی این نتیجه که توسط تئوری پیش بینی شده‌است، میل کند. یک چنین تحقیقی فقط می‌تواند در حدی که $N \longrightarrow \infty$ انجام شود، مسلما" در عمل N محدود است، و باید برای تعبیرنتایج از روشهای آماری استفاده کرد.

مقدارمتوسط مشاهده‌پذیر** A را در حالت $|\psi\rangle$، که‌آنرا با $\langle A\rangle_\psi$، یا به طور ساده‌تر، با $\langle A\rangle$، نشان خواهیم داد، به‌صورت میانگین نتایج به‌دست‌آمده، وقتی که تعداد زیادی اندازه‌گیری از این مشاهده پذیر روی دستگاههائی که همگی در حالت $|\psi\rangle$

---

* مسلما"، بجز درموردی که مطمئن هستیم چه نتیجه‌ای به‌دست خواهد آمد (احتمال برابر ۱: اندازه‌گیری حالت سیستم را تغییر نمی‌دهد).

** ازین به‌بعد کلمه "مشاهده‌پذیر" را هم برای کمیت فیزیکی و هم برای عملگر وابسته به‌آن به‌کار خواهیم برد.

قرار دارند انجام شود ، تعریف می‌کنیم . وقتی $\langle\psi|$ معلوم باشد ، احتمالهای یافتن همه نتایج ممکن معلوم است . بنابراین مقدار متوسط $\langle A\rangle_\psi$ می‌تواند پیش بینی شود . نشان خواهیم داد که اگر $\langle\psi|$ بهنجار شده باشد ، $\langle A\rangle_\psi$ توسط فرمول زیر داده می‌شود :

$$\boxed{\langle A\rangle_\psi = \langle\psi|A|\psi\rangle} \qquad (C-۴)$$

ابتدا موردی را در نظر بگیرید که در آن تمام طیف A گسسته باشد . از میان N اندازه‌گیری A (در هراندازه‌گیری ، دستگاه در حالت $\langle\psi|$ است) ، $\mathcal{N}(a_n)$ مرتبه ویژه‌مقدار a_n به‌دست می‌آید ، به‌طوری که :

$$\frac{\mathcal{N}(a_n)}{N} \xrightarrow[N\to\infty]{} \mathscr{P}(a_n) \qquad (C-۵)$$

و

$$\sum_n \mathcal{N}(a_n) = N \qquad (C-۶)$$

مقدار متوسط نتایج این N آزمایش برابر است با جمع مقادیر پیدا شده تقسیم بر N (وقتی $\mathcal{N}$ آزمایش یک نتیجه را بدهند ، مسلما" این نتیجه $\mathcal{N}$ بار در جمع ظاهرمی‌شود) .وبنابراین برابر است با :

$$\frac{1}{N}\sum_n a_n\,\mathcal{N}(a_n) \qquad (C-۷)$$

بااستفاده از (۵ـ C) ، ملاحظه می‌کنیم که وقتی $N \longrightarrow \infty$ ، این مقدار متوسط به‌سمت مقدار زیر میل می‌کند .

$$\langle A\rangle_\psi = \sum_n a_n\,\mathscr{P}(a_n) \qquad (C-۸)$$

حال،به‌جای $\mathscr{P}(a_n)$ عبارت (۷ـ B) را قرار دهیم :

$$\langle A\rangle_\psi = \sum_n a_n \sum_{i=1}^{g_n} \langle\psi|u_n^i\rangle\langle u_n^i|\psi\rangle \qquad (C-۹)$$

چون داریم :

$$A|u_n^i\rangle = a_n|u_n^i\rangle \qquad (C-۱۰)$$

رابطه (۹ـ C) را می‌توان به‌صورت زیر نوشت :

$$\langle A \rangle_\psi = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} \langle \psi | A | u_n^i \rangle \langle u_n^i | \psi \rangle$$
$$= \langle \psi | A \left[\sum_n \sum_{i=1}^{g_n} | u_n^i \rangle \langle u_n^i | \right] | \psi \rangle \qquad (C-11)$$

چون $\{ | u_n^i \rangle \}$ در فضای $\mathscr{E}$ یک پایه راست هنجار تشکیل می‌دهند، عبارت داخل کروشه برابر است با عملگر همانندی (رابطه بستاری)، و بدین ترتیب فرمول (C-۴) به دست می‌آید.

برای موردی که طیف A پیوسته باشد (برای سهولت، باز هم فرض می‌کنیم که ناتبهگن باشد) استدلال کاملاً مشابه است. N آزمایش یکسان در نظر بگیرید، و تعداد آزمایشهایی راکه نتیجه‌ای بین α و $\alpha + d\alpha$ می‌دهند، $d\mathscr{N}(\alpha)$ بنامید. بطورمشابه، داریم:

$$\frac{d\mathscr{N}(\alpha)}{N} \xrightarrow[N \to \infty]{} d\mathscr{P}(\alpha) \qquad (C-12)$$

مقدار متوسط نتایج به‌دست آمده برابر است با $\frac{1}{N}\int \alpha \, d\mathscr{N}(\alpha)$، که وقتی $N \longrightarrow \infty$، به سمت مقدار زیر میل می‌کند.

$$\langle A \rangle_\psi = \int \alpha \, d\mathscr{P}(\alpha) \qquad (C-13)$$

در (C-۱۳) به‌جای $d\mathscr{P}(\alpha)$ مقدار آن را از (B-۱۷) می‌گذاریم:

$$\langle A \rangle_\psi = \int \alpha \langle \psi | v_\alpha \rangle \langle v_\alpha | \psi \rangle \, d\alpha \qquad (C-14)$$

می‌توانیم از معادله

$$A | v_\alpha \rangle = \alpha | v_\alpha \rangle \qquad (C-15)$$

استفاده کنیم و (C-۱۴) را به‌صورت زیر بنویسیم:

$$\langle A \rangle_\psi = \int \langle \psi | A | v_\alpha \rangle \langle v_\alpha | \psi \rangle \, d\alpha$$
$$= \langle \psi | A \left[\int d\alpha \, | v_\alpha \rangle \langle v_\alpha | \right] | \psi \rangle \qquad (C-16)$$

با استفاده از رابطه بستاری که برای حالت $\{ | v_\alpha \rangle \}$ برقرار است، باردیگر فرمول (C-۴) به‌دست می‌آید.

گوشزدها :

(*i*) $\langle A \rangle$، میانگین روی یک دسته آزمایشات یکسان، نبایستی با میانگین‌های زمانی که گاهی، وقتی با پدیده‌های وابسته به‌زمان سروکار داریم، گرفته می‌شود، اشتباه شود.

(*ii*) اگر کت $\langle \psi |$ که معرف حالت دستگاه است بهنجار شده نباشد، فرمول (C –۴) به‌صورت زیر نوشته می‌شود [رک گوشزد (*i*) از بخش b –۳– B]:

$$\langle A \rangle_\psi = \frac{\langle \psi | A | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \qquad (C\text{–}17)$$

(*iii*) در عمل، برای محاسبه صریح $\langle A \rangle_\psi$، غالباً از یک نمایش بخصوص استفاده می‌کنیم به‌عنوان مثال، بااستفاده از تعریف عملگر X [رک فصل دوم، روابط (E –۲۲)] داریم:

$$\begin{aligned}\langle X \rangle_\psi &= \langle \psi | X | \psi \rangle \\ &= \int d^3r \, \langle \psi | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | X | \psi \rangle \\ &= \int d^3r \, \psi^*(\mathbf{r}) \, x \, \psi(\mathbf{r})\end{aligned} \qquad (C\text{–}18)$$

همین طور:

$$\begin{aligned}\langle P_x \rangle_\psi &= \langle \psi | P_x | \psi \rangle \\ &= \int d^3p \, \bar{\psi}^*(\mathbf{p}) \, p_x \, \bar{\psi}(\mathbf{p})\end{aligned} \qquad (C\text{–}19)$$

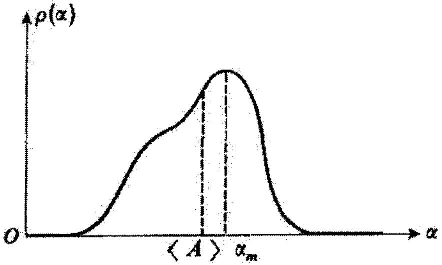
یا، با بکاربردن نمایش $\{ | \mathbf{r} \rangle \}$:

$$\begin{aligned}\langle P_x \rangle_\psi &= \int d^3r \, \langle \psi | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | P_x | \psi \rangle \\ &= \int d^3r \, \psi^*(\mathbf{r}) \left[\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(\mathbf{r}) \right]\end{aligned} \qquad (C\text{–}20)$$

زیرا دراین صورت $\mathbf{P}$ توسط $\frac{\hbar}{i} \nabla$ نمایش داده می‌شود [فرمول (E –۲۶) از فصل دوم].

۵ ـ ریشه میانگین مربعی انحراف

$\langle A \rangle$ مرتبه بزرگی مقادیر مشاهده پذیر A را وقتی دستگاه در حالت $\langle \psi |$ باشد، نشان می‌دهد. اما، این مقدارمتوسط هیچ ایده‌ای از پاشیدگی‌ای‌که در اندازه‌گیری A انتظار داریم به‌ما نمی‌دهد. به‌عنوان مثال، فرض کنید که طیف A پیوسته باشد و برای یک حالت معین $\langle \psi |$، منحنی نمایش تغییرات چگالی احتمال $\rho(\alpha) = |\langle v_\alpha | \psi \rangle|^2$ نسبت به α، به‌صورت شکل ۲ باشد. برای یک دستگاه در حالت $\langle \psi |$، تقریبا" تمام‌مقادیری‌که‌می‌توانند در اندازه‌گیری A به‌دست آیند در بازه‌ای به‌پهنای δA که شامل $\langle A \rangle$ است قرار دارند، که کمیت δA پهنای منحنی را مشخص می‌کند: هرچه δA کوچکتر باشد، نتایج اندازه‌گیری بیشتر حول $\langle A \rangle$ متمرکز خواهند بود.



شکل ۲.
تغییرات چگالی احتمال $\rho(\alpha)$ نسبت به α. مقدار متوسط $\langle A \rangle$ عبارت‌است از طول گرانیگاه سطح زیر منحنی (که لزوما" برطول α_m ماگزیمم تابع منطبق نیست).

چگونه می‌توانیم، به‌طریقی‌عام، کمیتی تعریف کنیم‌که پاشیدگی نتایج اندازه‌گیری را حول $\langle A \rangle$ مشخص‌کند؟ ممکن است روش زیر را مورد بررسی قراردهیم: برای‌هراندازه‌گیری اختلاف بین مقدار به‌دست آمده و $\langle A \rangle$ را محاسبه می‌کنیم، سپس با جمع‌کردن این مقادیر و تقسیم‌آنها بر N، میانگین این انحرافات را محاسبه کنیم. اما، به‌آسانی می‌توان‌دید که نتیجه به‌دست آمده صفر خواهد بود، آشکارا داریم:

$$\langle A - \langle A \rangle \rangle = \langle A \rangle - \langle A \rangle = 0 \qquad (\text{C}-۲۱)$$

بنا به‌تعریف $\langle A \rangle$، میانگین انحرافات منفی‌دقیقا" بامیانگین انحرافات‌مثبت برابری‌می‌کند.

برای اجتناب از این برابری، کافی است ΔA را طوری تعریف کنیم که $(\Delta A)^2$ متوسط مربع انحرافات باشد:

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle \tag{C-۲۲}$$

بنابراین، ریشه میانگین مربعی انحراف ΔA را بصورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$\boxed{\Delta A = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle}} \tag{C-۲۳}$$

در این صورت، بااستفاده از مقدار متوسط داده شده در (C-۴)، داریم:

$$\Delta A = \sqrt{\langle \psi | (A - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle} \tag{C-۲۴}$$

این رابطه می‌تواند با اندک تفاوتی به‌صورت دیگری نیز نوشته شود:

$$\begin{aligned} \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle &= \langle (A^2 - 2\langle A \rangle A + \langle A \rangle^2) \rangle \\ &= \langle A^2 \rangle - 2\langle A \rangle^2 + \langle A \rangle^2 \\ &= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \end{aligned} \tag{C-۲۵}$$

به‌این ترتیب ریشه میانگین مربعی انحراف توسط رابطه زیر نیز داده می‌شود:

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2} \tag{C-۲۶}$$

به‌عنوان مثال، در مورد طیف پیوسته مشاهده پذیر A که در بالا در نظر گرفتیم، ΔA به‌صورت زیر داده می‌شود.

$$\begin{aligned} (\Delta A)^2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} [\alpha - \langle A \rangle]^2 \rho(\alpha)\, d\alpha \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \alpha^2 \rho(\alpha)\, d\alpha - \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \alpha\, \rho(\alpha)\, d\alpha \right]^2 \end{aligned} \tag{C-۲۷}$$

اگر تعریف (C-۲۳) به‌مشاهده‌پذیرهای $\mathbf{R}$ و $\mathbf{P}$ اعمال شود، می‌توان بااستفاده از روابط جابجائی آنها، نشان داد (مکمل C_{III}) که برای هر حالت $|\psi\rangle$، داریم:

$$\begin{cases} \Delta X \,.\, \Delta P_x \geqslant \hbar/2 \\ \Delta Y \,.\, \Delta P_y \geqslant \hbar/2 \\ \Delta Z \,.\, \Delta P_z \geqslant \hbar/2 \end{cases} \tag{C-۲۸}$$

به‌عبارت دیگر، مجدداً "روابط عدم قطعیت هایزنبرگ را به‌دست می‌آوریم، اما با حدپائین دقیق، که از تعریف دقیق عدم قطعیتها ناشی می‌شود.

۶ ـ سازگاری مشاهده‌پذیرها

a ـ سازگاری و قواعد جابجائی‌پذیری

دو مشاهده‌پذیر جابجائی‌پذیر A و B در نظر بگیرید :

$$[A, B] = 0 \tag{C-۲۹}$$

برای سهولت فرض خواهیم کرد که طیفهای هردوگسسته باشند . برطبق قضیه‌ای که دربخش a ـ۳ـD ازفصل دوم ثابت کردیم ، پایه‌ای از فضای حالت وجود دارد که از ویژه کتهای مشترک A و B تشکیل شده است ، و ما آنرا با $|a_n, b_p, i\rangle$ نمایش خواهیم داد :

$$\begin{aligned} A\,|a_n, b_p, i\rangle &= a_n\,|a_n, b_p, i\rangle \\ B\,|a_n, b_p, i\rangle &= b_p\,|a_n, b_p, i\rangle \end{aligned} \tag{C-۳۰}$$

(نماد i به‌ما امکان‌می‌دهد تا ، درصورت لزوم ، بردارهای مختلف متناظر با یک زوج ویژه مقدار را از یکدیگر متمایز سازیم) . بنابراین ، برای هر a_n و b_p (که به‌ترتیب در طیفهای A و B انتخاب شده‌اند) ، حداقل یک حالت $|a_n, b_p, i\rangle$ وجود دارد ، که درآن اندازه‌گیری A همواره a_n و اندازه‌گیری B همواره b_p را به‌دست می‌دهد . یک چنین دو مشاهده‌پذیر A و B را که می‌توانند به‌طور همزمان تعیین شوند ، سازگار می‌گوئیم .

از طرف دیگر ، اگر A و B جابجائی‌پذیر نباشند ، یک حالت عموما" نمی‌تواند * یک ویژه بردار همزمان این دومشاهده‌پذیر باشد . این دومشاهده‌پذیر را ناسازگار می‌گوئیم .

اکنون اندازه‌گیری دو مشاهده‌پذیر سازگار را روی دستگاهی که ابتدا در یک حالت دلخواه (بهنجارشده) $|\psi\rangle$ قرار دارد ، دقیق‌تر بررسی کنیم . این حالت همواره می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود :

$$|\psi\rangle = \sum_{n,p,i} c_{n,p,i}\,|a_n, b_p, i\rangle \tag{C-۳۱}$$

فرض کنید که اول A را اندازه بگیریم و سپس بلافاصله B را (قبل از اینکه دستگاه مجال تحول داشته باشد) . حال احتمال $\mathscr{P}(a_n, b_p)$ ی یافتن a_n در اندازه‌گیری اول و b_p

---

* ممکن است بعضی ازکتها به‌طورهمزمان ویژه بردارهای A و B باشند ، اماتعدادآنهاآنقدر نخواهدبودکه ، مثل موردی که A و B جابجائی‌پذیر هستند ، یک پایه تشکیل دهند .

دراندازه‌گیری دوم را محاسبه‌کنیم . ابتدا A را درحالت $\langle \psi |$ اندازه‌گیری‌می‌کنیم ، بنابراین احتمال یافتن a_n برابر است با :

$$\mathscr{P}(a_n) = \sum_{p,i} |c_{n,p,i}|^2 \tag{C-۳۲}$$

وقتی پس‌ازآن B را اندازه‌گیری کنیم ، دستگاه دیگر در حالت $\langle \psi |$ نیست بلکه ، اگرنتیجه a_n را به‌دست آورده باشیم ، درحالت $\langle \psi'_n |$ خواهد بود :

$$| \psi'_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{\sum_{p,i} |c_{n,p,i}|^2}} \sum_{p,i} c_{n,p,i} \, | a_n, b_p, i \rangle \tag{C-۳۳}$$

ازاین رو احتمال یافتن b_p ، وقتی بدانیم که اندازه‌گیری اول a_n را داده است ، برابر است با :

$$\mathscr{P}_{a_n}(b_p) = \frac{1}{\sum_{p,i} |c_{n,p,i}|^2} \sum_{i} |c_{n,p,i}|^2 \tag{C-۳۴}$$

احتمال $\mathscr{P}(a_n, b_p)$ متناظر است بایک" واقعه مرکب" : برای اینکه در موردمساعدی قرار داشته باشیم ، باید ابتدا a_n را به‌دسست‌آوریم و سپس، با ارضاء‌کردن این‌شرط اول ، b_p را پیداکنیم . در نتیجه :

$$\mathscr{P}(a_n, b_p) = \mathscr{P}(a_n) \times \mathscr{P}_{a_n}(b_p) \tag{C-۳۵}$$

با قرار دادن عبارتهای (C – ۳۲) و(C – ۳۴) در این رابطه ، خواهیم یافت :

$$\mathscr{P}(a_n, b_p) = \sum_{i} |c_{n,p,i}|^2 \tag{C-۳۶}$$

بعلاوه ، حالت دستگاه ، بلافاصله پس‌از اندازه‌گیری دوم ، به‌شکل زیر درمی‌آید :

$$| \psi''_{n,p} \rangle = \frac{1}{\sqrt{\sum_{i} |c_{n,p,i}|^2}} \sum c_{n,p,i} \, | a_n, b_p, i \rangle \tag{C-۳۷}$$

بنابراین اگر بخواهیم مجددا" A یا B را اندازه‌گیری کنیم نتیجه اندازه‌گیری برای(a_n یا b_p) ما مسلم است : $\langle \psi''_{n,p} |$ یک ویژه بردار مشترک A و B با ویژه مقدارهای a_n و b_p است .

حال به‌دستگاه درحالت $\langle \psi |$ برگردیـم ، و این دومشاهده‌پذیر را به‌ترتیب عکس

اندازه‌گیری کنیم (ابتدا B و سپس A) . احتمال $\mathscr{P}(b_p, a_n)$ برای یافتن همان نتایج قبلی چقدر است؟ استدلال یکسان است . در اینجا داریم :

$$\mathscr{P}(b_p, a_n) = \mathscr{P}(b_p) \times \mathscr{P}_{b_p}(a_n) \qquad (C-38)$$

از (C-۳۱) مشاهده می‌کنیم که :

$$\mathscr{P}(b_p) = \sum_{n,i} |c_{n,p,i}|^2 \qquad (C-39)$$

و بعد از یک اندازه‌گیری B که b_p را می‌دهد ، حالت دستگاه می‌شود :

$$|\varphi'_p\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sum_{n,i} |c_{n,p,i}|^2}} \sum_{n,i} c_{n,p,i} \, |a_n, b_p, i\rangle \qquad (C-40)$$

بنابراین :

$$\mathscr{P}_{b_p}(a_n) = \frac{1}{\sum_{n,i} |c_{n,p,i}|^2} \sum_i |c_{n,p,i}|^2 \qquad (C-41)$$

و بالاخره :

$$\mathscr{P}(b_p, a_n) = \sum_i |c_{n,p,i}|^2 \qquad (C-42)$$

اگر در واقع اول b_p و سپس a_n را به‌دست آورده باشیم ، دستگاه به‌حالت زیر رفته است :

$$|\varphi''_{p,n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sum_i |c_{n,p,i}|^2}} \sum_i c_{n,p,i} \, |a_n, b_p, i\rangle \qquad (C-43)$$

وقتی دو مشاهده‌پذیر سازگار باشند ، پیش بینی‌های فیزیکی به‌ترتیب انجام این دواندازه‌گیری بستگی ندارند (به‌شرط اینکه فاصله زمانی بین آن دو به‌قدرکافی کوچک‌باشد) . احتمال‌های یافتن نخست a_n وسپس b_p یا نخست b_p و سپس a_n یکسان است :

$$\mathscr{P}(a_n, b_p) = \mathscr{P}(b_p, a_n) = \sum_i |c_{n,p,i}|^2 = \sum_i |\langle a_n, b_p, i \,|\, \psi \rangle|^2 \qquad (C-44)$$

بعلاوه ، حالت دستگاه بلافاصله بعد از این دواندازه‌گیری (اگر نتایج برای A و B به‌ترتیب a_n و b_p باشند) در هردومورد عبارت است از :

$$|\psi''_{n,p}\rangle = |\varphi''_{n,p}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sum_i |c_{n,p,i}|^2}} \sum_i c_{n,p,i} |a_n, b_p, i\rangle \qquad (C-۴۵)$$

اندازه‌گیری‌های جدید A یا B باز هم، بدون چون و چرا، به‌همان‌مقادیرمنجرخواهند شد.

به‌این ترتیب، بحث قبلی به‌نتیجه زیر منجر می‌شود: وقتی دومشاهده پذیر A و B سازگار باشند، اندازه‌گیری B باعث کم‌شدن اطلاعاتی‌که قبلا" می‌توانست ازاندازه‌گیری A به‌دست آید (و برعکس) نمی‌شود بلکه، برعکس، به‌آن می‌افزاید. بنابر این، ترتیب اندازه‌گیری این دومشاهده‌پذیر A و B اهمیتی ندارد. نکته اخیر، بعلاوه، ما را قادر می‌سازد تا به‌اندازه‌گیری همزمان A و B بپردازیم. همان طورکه می‌توان از فرمولهای (C ـ ۴۴) و (C ـ ۴۵) دید، اصول موضوع چهارم و پنجم را می‌توان به‌مورد یک چنین اندازه‌گیری‌همزمانی تعمیم‌داد. با نتیجهٔ $\{a_n, b_p\}$، ویژه‌بردارهای راست هنجار $|a_n, b_p, i\rangle$ متناظرند. ازاین مطلب ملاحظه می‌شود که (C ـ ۴۴) و (C ـ ۴۵) کاربردهائی از اصول موضوع (B ـ ۷) و (B ـ ۲۰) هستند.

از طرف دیگر، اگر A و B جابجائی‌پذیر نباشند، استدلالهای قبلی دیگر معتبر نیستند. برای فهم این مطلب به روشی ساده، تصور کنید که فضای حالت $\mathscr{E}$ توسط فضای دوبعدی بردارهای حقیقی جایگزین شده باشد. در شکل ۳، بردارهای $|u_1\rangle$ و $|u_2\rangle$ ویژه بردارهای A با ویژه مقدارهای a_1 و a_2، $|v_1\rangle$ و $|v_2\rangle$ ویژه‌بردارهای B باویژه‌مقدارهای b_1 و b_2 هستند. هرکدام از دو مجموعه $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle\}$ و $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle\}$ یک پایه راست هنجار در $\mathscr{E}$ تشکیل می‌دهند. ازین رو، آنها را درشکل ۳ بوسیله دوزوج برداریکه‌متعامد نشان می‌دهیم. این واقعیت که A و B جابجائی‌پذیر نیستند، می‌رساند که این دو زوج بریکدیگر منطبق نیستند. دستگاه فیزیکی موردنظر ابتدا در حالت بهنجار شدهٔ $|\psi\rangle$، که درشکل توسط یک برداریکه دلخواه نشان داده شده است، قرار دارد. A را اندازه گیری می‌کنیم و، به‌عنوان مثال، a_1 به‌دست می‌آید، دستگاه به‌حالت $|u_1\rangle$ می‌رود. سپس B را اندازه‌گیری می‌کنیم و، مثلا"، b_2 به‌دست می‌آید، حالت دستگاه $|v_2\rangle$ می‌شود:

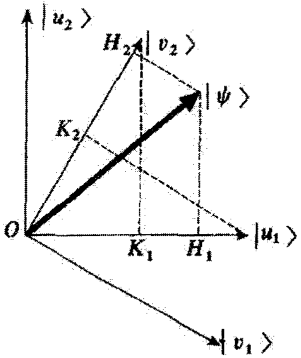
$$|\psi\rangle \xrightarrow{(a_1)} |u_1\rangle \xrightarrow{(b_2)} |v_2\rangle \qquad (C-۴۶)$$

اگر، از طرف دیگر، اندازه‌گیرها را به‌ترتیب عکس‌انجام دهیم، و همان نتایج به‌دست آید:

$$|\psi\rangle \xrightarrow{(b_2)} |v_2\rangle \xrightarrow{(a_1)} |u_1\rangle \qquad (C-۴۷)$$

حالت نهایی دستگاه در هردو مورد یکسان نیست . همچنین از شکل ۳ می‌بینیم که :

$$\mathscr{P}(a_1, b_2) = |OH_1|^2 \times |OK_2|^2$$
$$\mathscr{P}(b_2, a_1) = |OH_2|^2 \times |OK_1|^2 \qquad (\text{C}-۴۸)$$



شکل ۳

نمودار وابسته به‌اندازه‌گیری‌های متوالی دومشاهده‌پذیر ناسازگار A و B بردارحالت سیستم $|\psi\rangle$ است ، ویژه‌بردارهای A عبارتند از $|u_1\rangle$ و $|u_2\rangle$ (باویژه مقدارهای a_1 و a_2) که باویژه بردارهای B ، $|v_1\rangle$ و $|v_2\rangle$ (باویژه مقدارهای b_1 و b_2) متفاوتند .

هرچند $|OK_1| = |OK_2|$ ، ولی عموماً" $|OH_1| \neq |OH_2|$ و :

$$\mathscr{P}(b_2, a_1) \neq \mathscr{P}(a_1, b_2) \qquad (\text{C}-۴۹)$$

بنابراین : دومشاهده‌پذیر ناسازگار نمی‌توانند به‌طورهمزمان اندازه‌گیری‌شوند . از (C–۴۶) و (C–۴۷) می‌توان دید که اندازه‌گیری دوم باعث می‌شود که اطلاعات فراهم آمده توسط اندازه‌گیری اول از بین برود . اگر ، بعنوان مثال ، براساس دنباله نشان داده شده در (C–۴۶) ، A را مجدداً" اندازه‌گیری کنیم ، دیگر نمی‌توانیم از نتیجه اندازه‌گیری مطمئن باشیم زیرا $|v_2\rangle$ ویژه بردار A نیست ، بدین‌ترتیب تمام آنچه که توسط اولین اندازه‌گیری A به‌دست آمده بود از بین می‌رود .

ه — فراهم آوردن یک حالت :

یک دستگاه فیزیکی درحالت $|\psi\rangle$ در نظر بگیریم و مشاهده‌پذیر A را (که فرض

می‌کنیم طیف آن گسسته باشد) اندازه‌گیری کنیم .

اگر این اندازه‌گیری یک ویژه مقدار ناتبهگن a_n را بدهد ، حالت دستگاه‌بلافاصله بعد ازاین اندازه‌گیری ویژه بردارمتناظر $|u_n\rangle$ خواهد بود . دراین مورد ، کافی است نتیجه این اندازه‌گیری را بدانیم تا بتوانیم بدون ابهام حالت دستگاه را بعدازاین اندازه‌گیری تعیین کنیم ، زیرا این حالت به‌کت اولیه بستگی ندارد . همان طور که قبلاً ، درآخربخش c ــ ۳ــ B ، تذکر دادیم ، این امر ناشی از این حقیقت است که $\frac{c_n}{|c_n|}|u_n\rangle$ و خود $|u_n\rangle$ معرف یک حالت فیزیکی هستند .

اگر ویژه مقدار a_n که در اندازه‌گیری به‌دست می‌آید تبهگن باشد ، این چنین نیست . در کت :

$$|\psi'_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sum_i |c_n^i|^2}} \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i\, |u_n^i\rangle \qquad (C-۵۰)$$

قدر مطلق های ضرائب c_n^i و فازهای نسبی آنها با معنا هستند (بخش γ ــ b ــ۳ــ B) .

وقتی حالت اولیه $|\psi\rangle$ مشخص باشد ضرائب c_n^i معلوم هستند ، بنابراین حالت $|\psi'_n\rangle$ بعد از اندازه‌گیری به $|\psi\rangle$ بستگی دارد .

اما ، در بخش a دیدیم که دومشاهده پذیر سازگار A و B می‌توانندبه‌طورهمزمان اندازه‌گیری شوند . اگر نتیجهٔ (a_n, b_p) این اندازه‌گیری مرکب فقط با یک ویژه بردار $|a_n, b_p\rangle$ ی مشترک بین A و B متناظر باشد ، در فرمول (C ــ ۳۷) جمع‌بندی‌روی i وجود ندارد و به‌صورت زیر در می‌آید :

$$|\psi''_{n,p}\rangle = \frac{c_{n,p}}{|c_{n,p}|}\, |a_n, b_p\rangle \qquad (C-۵۱)$$

این حالت از نظر فیزیکی معادل با $|a_n, b_p\rangle$ است . در اینجا نیز ، مشخص کردن نتیجهٔ اندازه‌گیری به‌طور یکتائی حالت نهایی دستگاه را تعیین می‌کند ،که بنابر این ، مستقل از کت اولیهٔ $|\psi\rangle$ است .

اگر به (a_n, b_p) چندین ویژه بردار $|a_n, b_p, i\rangle$ از A و B وابسته باشد ، می‌توانیم ، با همان استدلال ، در همان زمانی که A و B را اندازه‌گیری می‌کنیم ، یک مشاهده پذیر سوم C که با هردوی آنها سازگار است اندازه‌گیری کنیم . بنابراین به‌نتیجهٔ زیر می‌رسیم : برای اینکه حالت دستگاه بعداز یک اندازه‌گیری به‌طور یکتائی توسط نتیجهٔ به‌دست آمده کاملاً مشخص شود ، این اندازه‌گیری باید روی یک مجموعهٔ کامل ازمشاهده‌پذیرهای جابجائی‌پذیر

انجام گیرد (بخش b ــ ۳ ــ D از فصل دوم) . این خاصیتی است که وارد کردن مفهوم یک م.ک.م.ج. را به‌طور فیزیکی توجیه می‌کند .

روشهائی که می‌توان برای فراهم آوردن یک دستگاه در یک حالت کوانتومی کاملاً معین به‌کار برد ، در اصل ، مشابه روشهائی است که برای به‌دست آوردن نور قطبی شده به‌کار می‌روند . وقتی یک قطبی کننده را در سر راه یک باریکهٔ نور قرار دهیم ، نور خروجی در راستایی که مشخصه قطبی کننده است قطبی می‌شود و بنابراین مستقل از حالت قطبش نور ورودی است . همین طور می‌توانیم ، به‌منظور فراهم آوردن یک دستگاه کوانتومی ، وسائلی بسازیم که فقط عبور یک حالت ، متناظر با یک ویژه مقدار بخصوص هریک از مشاهده پذیرهای مجموعه کامل انتخاب شده ، را اجازه دهد . در فصل چهارم (بخش ۱ــ B) مثال محسوسی از فراهم آوردن یک دستگاه کوانتومی را بررسی خواهیم کرد .

گوشزد :

اندازه‌گیری یک م.ک.م.ج ما راقادرمی‌سازد تا فقط یکی ازحالتهای‌پایهٔ‌وابسته به‌این م.ک.م.ج را فراهم سازیم . لیکن واضح‌است‌که‌تغییرمجموعه‌مشاهده‌پذیرها به‌ما امکان می‌دهد تا سایرحالتهای دستگاه را به‌دست آوریم . دریک‌مثال‌محسوس دربخش ۱ ــ B ازفصل چهارم ، خواهیم دید که می‌توان بدین طریق هرحالت از فضای $\mathscr{E}$ را فراهم ساخت .

D ـ مفاهیم فیزیکی معادله شرودینگر

معادله شرودینگر یک نقش اساسی در مکانیک کوانتومی ایفا می‌کند زیرا این معادله طبق اصل موضوع ششم بیان شده دربالا ، معادله‌ای است که حاکم برتحول زمانی دستگاه فیزیکی است . در این بخش مهمترین خواص این معادله را به‌طور مفصل مطالعه خواهیم کرد .

۱ ــ خواص عمومی معادله شرودینگر

a ــ قطعیت در تحول دستگاههای فیزیکی

معادله شرودینگر :

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} | \psi(t) \rangle = H(t) | \psi(t) \rangle \qquad (\mathrm{D}-۱)$$

یک معادله مرتبه اول نسبت به‌زمان است . از اینجا نتیجه می‌شود که ، اگر حالت اولیه $| \psi(t_0) \rangle$ معلوم باشد ، حالت $| \psi(t) \rangle$ در هرلحظه بعدی t تعیین می‌شود . هیچ عدم قطعیتی در تحول زمانی یک دستگاه کوانتومی وجود ندارد . عدم قطعیت فقط وقتی ظاهر می‌شود که یک کمیت فیزیکی اندازه‌گیری می‌شود ، دراین صورت در بردار حالت یک تغییر غیر قابل پیش بینی ایجاد می‌شود (ر ک اصل موضوع پنجم) . اما ، بین دواندازه‌گیری ، بردار حالت به‌طریقی کاملا" قطعی ، طبق معادله (D ــ ۱) تحول پیدا می‌کند .

b ــ اصل برهم نهش

معادلهٔ (D ــ ۱) خطی و همگن است . نتیجه می‌شود که جوابهای آن به‌طورخطی برهمنهش پذیر هستند .

فرض‌کنید $|\psi_1(t)\rangle$ و $|\psi_2(t)\rangle$ دوجواب (D ــ ۱) باشند . اگرحالت اولیهٔ دستگاه $|\psi(t_0)\rangle = \lambda_1 |\psi_1(t_0)\rangle + \lambda_2 |\psi_2(t_0)\rangle$ باشد (که درآن λ_1 و λ_2 دو ثابت مختلط هستند) ، حالت‌متناظربا‌آن‌درزمان t عبارتست‌از $|\psi(t)\rangle = \lambda_1 |\psi_1(t)\rangle + \lambda_2 |\psi_2(t)\rangle$ بنابراین ارتباط بین $|\psi(t_0)\rangle$ و $|\psi(t)\rangle$ خطی است . بعدا" (در مکمل $\mathrm{F_{III}}$) خواص‌عملگر خطی $U(t, t_0)$ که $|\psi(t_0)\rangle$ را به $|\psi(t)\rangle$ تبدیل می‌کند :

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \qquad (\mathrm{D}-۲)$$

مطالعه خواهیم کرد .

ه ــ پایستگی احتمال

α . هنجار بردار حالت ثابت می‌ماند

چون عملگر هامیلتونی $H(t)$ که در (۱ ــ D) آمده است هرمیتی است ، مجذور هنجار بردار حالت ، $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle$ ، همانطور که در زیر نشان می‌دهیم ، به t بستگی ندارد :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle \psi(t) | \right] | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} | \psi(t) \rangle \right] \quad (\mathrm{D}-۳)$$

بنابر (۱ــ D) می‌توانیم بنویسیم :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} | \psi(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} H(t) | \psi(t) \rangle \quad (\mathrm{D}-۴)$$

هر دوطرف (۴ــ D) را همیوغ هرمیتی می‌کنیم ، خواهیم یافت :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle \psi(t) | = -\frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | H^{\dagger}(t) = -\frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | H(t) \quad (\mathrm{D}-۵)$$

زیرا $H(t)$ هرمیتی است (یک مشاهده‌پذیر است) . با جایگزینی (۴ ــ D) و (۵ ــ D) در (۳ــ D) ، به‌دست می‌آید :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = -\frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | H(t) | \psi(t) \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | H(t) | \psi(t) \rangle \quad (\mathrm{D}-۶)$$
$$= 0$$

خاصیت پایستگی هنجار در مکانیک کوانتومی بسیار مفید است . برای مثال ، وقتی مجذور قدر مطلق $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ ی تابع موج یک ذرهٔ بدون اسپین را به‌عنوان چگالی احتمال مکان تعبیر می‌کنیم ، ضروری می‌شود . بهنجاربودن حالت $\langle \psi(t_0) |$ ذره درزمان t_0 توسط رابطه :

$$\langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle = \int d^3r \, |\psi(\mathbf{r}, t_0)|^2 = 1 \quad (\mathrm{D}-۷)$$

بیان می‌شود که درآن $\psi(\mathbf{r}, t_0) = \langle \mathbf{r} | \psi(t_0) \rangle$ تابع موج وابسته به $| \psi(t_0) \rangle$ است . معنی معادله (۷ــ D) این است که احتمال کل یافتن ذره در تمام فضا برابر ۱ است . خاصیت پایستگی هنجار که در بالا ثابت شد توسط معادله زیر بیان می‌شود :

$$\langle \psi(t) \mid \psi(t) \rangle = \int d^3r\, |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \langle \psi(t_0) \mid \psi(t_0) \rangle = 1 \qquad (\text{D}-۸)$$

که درآن $\langle \psi(t) |$ عبارت است از جواب (D — ۱) که متناظر است با حالت اولیه $\langle \psi(t_0) |$. به‌عبارت دیگر، تحول زمانی در احتمال کل یافتن ذره در تمام فضا، که همواره برابر ۱ است تغییری نمی‌دهد . بنابراین $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ می‌تواند به‌عنوان چگالی احتمال تعبیر شود .

β . پایستگی موضعی احتمال . چگالی‌های احتمال و جریان‌های احتمال

دراین بخش، خود را به‌مورد یک دستگاه فیزیکی که فقط از یک ذره (بدون اسپین) تشکیل شده‌است محدود خواهیم کرد .

دراین مورد، اگر $\psi(\mathbf{r}, t)$ بهنجار شده باشد،

$$\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \qquad (\text{D}-۹)$$

یک چگالی احتمال است: احتمال $d\mathscr{P}(\mathbf{r}, t)$ برای یافتن ذره، در زمان t ، در حجم بی‌نهایت کوچک d^3r حول نقطه $\mathbf{r}$ برابراست با:

$$d\mathscr{P}(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) d^3r \qquad (\text{D}-۱۰)$$

اخیرا" نشان دادیم که انتگرال $\rho(\mathbf{r}, t)$ روی تمام فضا برای تمام زمانها مقدار ثابتی است (واگر ψ بهنجار شده باشد برابر است با ۱) . این بدان معنی نیست که $\rho(\mathbf{r}, t)$ بایددر هر نقطهٔ $\mathbf{r}$ مستقل از t باشد . این وضعیت مشابه وضعیتی‌است که در الکترومغناطیس باآن مواجه می‌شویم . اگر، در یک دستگاه فیزیکی منزوی، باری با چگالی حجمی $\rho(\mathbf{r}, t)$ درفضا توزیع شده‌باشد، بارکل [انتگرال $\rho(\mathbf{r}, t)$ روی تمام فضا] نسبت به‌زمان پایسته است . لیکن، در داخل دستگاه، توزیع‌فضایی این بار ممکن است تغییر کند، و منجر به‌جریان‌های الکتریکی شود .

در واقع، این تشابه می‌تواند فراتر رود . پایستگی کلی بارالکتریکی برپایستگی موضعی آن استوار است . اگر بار Q ی موجود در داخل یک حجم‌ثابت V بازمان تغییر کند، باید ازسطح بستهٔ S که V را احاطه‌کرده‌است یک‌جریان الکتریکی عبورکرده باشد . به‌عبارت دقیق‌تر، تغییر dQ ی بار موجود در V ، در مدت dt برابر است با $-I\,dt$ ، که درآن I شدت جریانی است که از S عبورکرده است، یعنی، شار بردار چگالی جریان $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ است‌که از S عبور می‌کند . بااستفاده ازآنالیز برداری کلاسیکی، می‌توانیم

پایستگی موضعی بار الکتریکی را به‌صورت زیر بیان کنیم :

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{r}, t) + \operatorname{div}\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = 0 \qquad (D-۱۱)$$

در اینجا می‌خواهیم نشان دهیم که می‌توان یک بردار $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ ، یک چگالی جریان ، یافت که در معادله‌ای همانند (D –۱۱) صدق کند : لذا پایستگی موضعی احتمال وجـود دارد . بنابراین ، مانند این است که با یک "سیال احتمال" که چگالی و حرکت آن توسط $\rho(\mathbf{r}, t)$ و $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ تشریح شده است ، سروکار داشته باشیم . اگر احتمال یافتن ذره درحجـم (ثابت) d^3r حول $\mathbf{r}$ بازمان تغییرکند ، بدین معنی است که شار جریان احتمال از سطحی کـه این عنصر حجم را محدود می‌سازد ، غیر صفر است .

ابتدا ، فرض کنید که ذرهٔ مورد نظر تحت تأثیر یک پتانسیل نرداری $V(\mathbf{r}, t)$ قرار دارد . دراین صورت هامیلتونی آن عبارت است از :

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{R}, t) \qquad (D-۱۲)$$

و معادله شرودینگر در نمایش $\{ |\mathbf{r}\rangle \}$ (رک مکمل D_{II}) ، به‌صورت زیر نوشته می‌شود :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}, t)\,\psi(\mathbf{r}, t) \qquad (D-۱۳)$$

برای اینکه H هرمیتی باشد باید $V(\mathbf{r}, t)$ حقیقی باشد . بنابراین همیوغ هرمیتی معادلـهٔ (D –۱۳) عبارت است از :

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi^*(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}, t)\,\psi^*(\mathbf{r}, t) \qquad (D-۱۴)$$

دو طرف (D –۱۳) را در $\psi^*(\mathbf{r}, t)$ و دوطرف (D –۱۴) را در $\psi(\mathbf{r}, t)$ – ضرب کنیـد و دو معادلهٔ به‌دست آمده را باهم جمع کنید . نتیجه می‌شود :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left[\psi^*(\mathbf{r}, t)\,\psi(\mathbf{r}, t)\right] = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi^*\Delta\psi - \psi\,\Delta\psi^*\right] \qquad (D-۱۵)$$

یعنی :

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{r}, t) + \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^*(\mathbf{r}, t)\,\Delta\psi(\mathbf{r}, t) - \psi(\mathbf{r}, t)\,\Delta\psi^*(\mathbf{r}, t)\right] = 0 \qquad (D-۱۶)$$

اگر قرار دهیم :

$$\begin{aligned}\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) &= \frac{\hbar}{2mi}[\psi^* \nabla\psi - \psi \nabla \psi^*] \\ &= \frac{1}{m}\mathrm{Re}\left[\psi^*\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\psi\right)\right]\end{aligned} \qquad (D-۱۷)$$

معادلهٔ (D –۱۶) می‌تواند به‌شکل (D –۱۱) نوشته شود زیرا :

$$\begin{aligned}\mathrm{div}\,\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) &= \nabla . \mathbf{J} \\ &= \frac{\hbar}{2mi}[(\nabla\psi^*).(\nabla\psi) + \psi^*(\nabla^2\psi) - (\nabla\psi).(\nabla\psi^*) - \psi(\nabla^2\psi^*)] \\ &= \frac{\hbar}{2mi}[\psi^* \Delta\psi - \psi \Delta\psi^*]\end{aligned} \qquad (D-۱۸)$$

بدین ترتیب معادله پایستگی موضعی احتمال را ثابت کرده و عبارتی برای جریان احتمال برحسب تابع موج بهنجار شدهٔ $\psi(\mathbf{r}, t)$ به‌دست آورده‌ایم .

گوشزد :

شکل جریان احتمال (D –۱۷) می‌تواند به‌صورت زیر تعبیرشود . $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ به‌عنوان مقدار متوسط یک عملگر $\mathbf{K}(\mathbf{r})$ به‌صورت :

$$\mathbf{K}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2m}[|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\mathbf{P} + \mathbf{P}|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|] \qquad (D-۱۹)$$

درحالت$\langle\psi(t)|$ ، ظاهر می‌شود . اما مقدار متوسط عملگر $|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|$ عبارت است از $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ ، یعنی ، چگالی احتمال $\rho(\mathbf{r}, t)$ ، و $\frac{\mathbf{P}}{m}$ عبارت است از سرعت $\mathscr{V}$. بنابراین ، $\mathbf{K}$ عبارتست ازعملگرکوانتومی‌ای ،که بایک متقارن‌سازی مناسب از حاصلضرب چگالی احتمال وسرعت ذره ساخته‌شده‌است .این عملگردرواقع متناظر است بابردارچگالی جریان‌یک سیال‌کلاسیکی (به‌عنوان‌مثال ، می‌دانیم‌که چگالی جریان الکتریکی وابسته به‌یک سیال از ذرات باردار برابر است باحاصلضرب‌چگالی حجمی بار درسرعت ذرات) .

اگر ذره در یک میدان الکترومغناطیسی که توسط پتانسیل‌های $U(\mathbf{r}, t)$ و $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ مشخص می‌شود قرار گیرد . می‌توانیم ، باشروع از هامیلتونی (B –۴۶) ، استدلال قبل را به‌کار بریم . لذا ، دراین مورد داریم :

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{m}\,\mathrm{Re}\left\{\psi^*\left[\frac{\hbar}{i}\nabla - q\mathbf{A}\right]\psi\right\} \qquad (D-20)$$

ملاحظه می‌کنیم که این عبارت می‌تواند ، بااستفاده از همان قواعدی که برای هامیلتونی بکار بردیم ، یعنی با جایگزین کردن $\mathbf{P}$ توسط $\mathbf{P} - q\mathbf{A}$ ، از (D ـ۱۷) به‌دست آید .

مثال یک موج تخت . یک تابع موج به‌صورت زیر در نظر بگیرید :

$$\psi(\mathbf{r}, t) = A\, e^{i(\mathbf{k}.\mathbf{r} - \omega t)} \qquad (D-21)$$

که درآن : $\hbar\omega = \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m}$ چگالی احتمال متناظر :

$$\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |A|^2 \qquad (D-22)$$

در تمام فضا یکنواخت است و به‌زمان بستگی ندارد . محاسبه $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ از (D ـ۱۷) مشکل نیست و به‌مقدار زیر منجر می‌شود :

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = |A|^2\frac{\hbar k}{m} = \rho(\mathbf{r}, t)\ \mathbf{v}_G \qquad (D-23)$$

که درآن $\mathbf{v}_G = \frac{\hbar\mathbf{k}}{m}$ سرعت گروه وابسته به‌اندازه حرکت $\hbar\mathbf{k}$ است (فصل اول بخش ۴ـ C) .

ملاحظه می‌کنیم که جریان احتمال در واقع برابر است با حاصلضرب چگالی احتمال در سرعت گروه ذره . دراین مورد ρ و $\mathbf{J}$ مستقل از زمانند : جریان احتمال وابسته به‌یک‌موج تخت در یک موقعیت حالت پایدار قرار دارد (چون ρ و $\mathbf{J}$ به $\mathbf{r}$ نیز بستگی ندارند ، این حالت همگن و یکنواخت نیز هست) .

d ـ تحول مقدار متوسط یک مشاهده پذیر ؛ ارتباط با مکانیک کلاسیک

فرض کنید A یک مشاهده‌پذیر باشد . اگر حالت $|\psi(t)\rangle$ ی دستگاه بهنجار شده باشد (و اخیراً دیدیم که این بهنجارش برای تمام t ها پایسته است) . مقدارمتوسط مشاهده‌پذیر A در لحظه t برابراست با *:

$$\langle A\rangle(t) = \langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle \qquad (D-24)$$

* معنی نماد $\langle A\rangle(t)$ این است که مقدار متوسط A ، یعنی $\langle A\rangle$ ، عددی است که به t بستگی دارد .

می‌بینیم که $\langle A \rangle(t)$ از طریق $\langle \psi(t) |$ [و $| \psi(t) \rangle$] ، که برطبق معادله شرودینگر (۴ـD) [و (۵ـD)] با زمان تحول می‌یابند ، به t بستگی دارد . علاوه بر این ، ممکن است مشاهده‌پذیر A صریحا "به‌زمان بستگی داشته باشد ، که موجب دیگری برای تغییر $\langle A \rangle(t)$ نسبت به t وارد می‌کند .

می‌خواهیم ، دراین بخش، تحول $\langle A \rangle(t)$ را مطالعه کنیم و نشان دهیم که چگونه این امر ما را قادر می‌سازد تا مکانیک کلاسیک را به‌مکانیک کوانتومی مربوط سازیم .

α . فرمول عام

با مشتق گیری از (۲۴ـD) نسبت به t ، خواهیم داشت :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \psi(t) | A(t) | \psi(t) \rangle = \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \psi(t) |\right] A(t) | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | A(t) \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} | \psi(t) \rangle\right] + \langle \psi(t) | \frac{\partial A}{\partial t} | \psi(t) \rangle \tag{D-25}$$

با بکاربردن (۴ـD) و (۵ـD) برای $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle$ و $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi(t)|$ ، به‌دست می‌آوریم :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \psi(t) | A(t) | \psi(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle \psi(t) | [A(t)\,H(t) - H(t)\,A(t)] | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \frac{\partial A}{\partial t} | \psi(t) \rangle \tag{D-26}$$

یعنی :

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [A, H(t)] \rangle + \langle \frac{\partial A}{\partial t} \rangle} \tag{D-27}$$

گوشـزد :

مقدار متوسط $\langle A \rangle$ عددی است که فقط به t بستگی‌دارد . فهم این مطلب که این بستگی چگونه ایجاد می‌شود مهم است . به‌عنوان مثال ، موردیک‌ذره‌ٔ بدون‌اسپین را درنظر بگیرید . فرض‌کنید $\mathscr{A}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ یک کمیت کلاسیکی باشد . در مکانیک کلاسیک ، $\mathbf{r}$ و $\mathbf{p}$ به‌زمان بستگی دارند (برطبق معادلات هامیلتون تحول‌می‌یابند) بنابراین $\mathscr{A}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ بطورصریح ، و ازطریق $\mathbf{r}$ و $\mathbf{p}$ به‌طور ضمنی ، به‌زمان بستگی دارد . باکمیت‌کلاسیکی $\mathscr{A}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ عملگرهرمیتی $A = \mathscr{A}(\mathbf{R}, \mathbf{P}, t)$ متناظراست‌که

از جایگزین کردن $\mathbf{r}$ و $\mathbf{p}$ ، در $\mathscr{A}$ ، به‌وسیله عملگرهای $\mathbf{R}$ و $\mathbf{P}$ به‌دست آمده است (ر ک قواعد کوانتش، بخش ۵ ـ B) . ویژه حالت‌ها و ویژه مقدارهای $\mathbf{R}$ و $\mathbf{P}$ و، در نتیجه، خود این مشاهده‌پذیرها ، دیگر به t بستگی ندارند . **بستگی زمانی** $\mathbf{r}$ و $\mathbf{p}$ ، که مشخص‌کننده‌ٔ تحول زمانی حالت کلاسیکی است ، دیگر در $\mathbf{R}$ و $\mathbf{P}$ ظاهر نمی‌شود ، بلکه در بردار حالت کوانتومی $|\psi(t)\rangle$ ، وابسته به‌تابع موج $\psi(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r} | \psi(t) \rangle$ در نمایش $\{ |\mathbf{r}\rangle \}$ ، ظاهر می‌شود . در این نمایش‌مقدار متوسط A به‌صورت زیر نوشته می‌شود :

$$\langle A \rangle = \int d^3r\, \psi^*(\mathbf{r}, t)\, \mathscr{A}\left(\mathbf{r}, \frac{\hbar}{i}\nabla, t\right) \psi(\mathbf{r}, t) \qquad (\text{D}-۲۸)$$

واضح است که انتگرال‌گیری روی $\mathbf{r}$ منجر به‌عددی می‌شود که فقط به t بستگی‌دارد . در مکانیک کلاسیک ، این عدد است $\left[\text{و نه عملگر}\ \mathscr{A}(\mathbf{r}, \frac{\hbar}{i}\nabla, t) \right]$ که باید با مقداری که کمیت کلاسیکی $\mathscr{A}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ درزمان t می‌گیرد مقایسه شود (رک بخش ۷ ی زیر) .

β ــ اعمال به مشاهده‌پذیرهای $\mathbf{R}$ و $\mathbf{P}$ (قضیه اهرنفست)

اکنون فرمول عمومی (۲۷ــ D) را به‌مشاهده‌پذیرهای $\mathbf{R}$ و $\mathbf{P}$ اعمال کنیم . برای سهولت ، مورد یک ذره‌ٔ بدون اسپین‌در یک پتانسیل نرداری مانای $V(\mathbf{r})$ را درنظرمی‌گیریم . دراین صورت داریم :

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{R}) \qquad (\text{D}-۲۹)$$

بنابراین می‌توانیم بنویسیم :

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{R} \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [\mathbf{R}, H] \rangle = \frac{1}{i\hbar}\left\langle \left[\mathbf{R}, \frac{\mathbf{P}^2}{2m}\right] \right\rangle \qquad (\text{D}-۳۰)$$

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{P} \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [\mathbf{P}, H] \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [\mathbf{P}, V(\mathbf{R})] \rangle \qquad (\text{D}-۳۱)$$

جابجاگری که در (۳۰ــ D) ظاهر می‌شود می‌تواند بسادگی ازروابط جابجائی‌بندادی‌محاسبه شود ، داریم :

$$\left[\mathbf{R}, \frac{\mathbf{P}^2}{2m}\right] = \frac{i\hbar}{m}\mathbf{P} \qquad (\text{D}-۳۲)$$

برای جابجاگر فرمول (۳۱ـ D) ، تعمیم زیر از فرمول (۳۲ـ B) باید به‌کار برده شود [رک مکمل B_{II} ، فرمول (۴۸)] :

$$[\mathbf{P}, V(\mathbf{R})] = -i\hbar \nabla V(\mathbf{R}) \qquad \text{(D-۳۳)}$$

که درآن $\nabla V(\mathbf{R})$ معرف مجموعهٔ سه‌عملگری است که از جایگزین کردن $\mathbf{r}$ توسط $\mathbf{R}$ در سه موءلفهٔ گرادیان تابع $V(\mathbf{R})$ به‌دست آمده است . از این رو :

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle \mathbf{R} \rangle &= \frac{1}{m}\langle \mathbf{P} \rangle \qquad \text{(D-۳۴)} \\ \frac{d}{dt}\langle \mathbf{P} \rangle &= -\langle \nabla V(\mathbf{R}) \rangle \qquad \text{(D-۳۵)} \end{aligned}}$$

این دومعادله قضیهٔ اهرنفست را بیان می‌کنند . شکل آنها معادلات هامیلتون ـ ژاکوبی کلاسیکی برای یک ذره را به‌خاطر می‌آورد (پیوست ۳ ، بخش ۳) :

$$\frac{d}{dt}\mathbf{r} = \frac{1}{m}\mathbf{p} \qquad \text{(D-۳۶-a)}$$

$$\frac{d}{dt}\mathbf{p} = -\nabla V(\mathbf{r}) \qquad \text{(D-۳۶-b)}$$

که ، دراین مورد ساده ، به‌معادله مشهورنیوتن :

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = m\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = -\nabla V(\mathbf{r}) \qquad \text{(D-۳۷)}$$

تقلیل می‌یابد .

۲ . بحث در بارهٔ قضیهٔ اهرنفست ، حد کلاسیکی

اکنون معنای فیزیکی قضیهٔ اهرنفست ، یعنی ، معادلات (۳۴ـ D) و (۳۵ـ D) را تحلیل‌کنیم . فرض می‌کنیم که تابع موج $\psi(\mathbf{r}, t)$ که حالت ذره را توصیف می‌کندبستهٔ موجی است نظیر بسته موج‌هایی که درفصل اول بررسی کردیم . دراین صورت $\langle \mathbf{R} \rangle$ معرف مجموعه سه‌عدد مستقل از زمان $\{ \langle X \rangle, \langle Y \rangle, \langle Z \rangle \}$ است . نقطه $\langle \mathbf{R} \rangle(t)$ را مرکز بسته‌موج *

* عموما" ، مرکز و ماگزیمم یک بسته موج از یکدیگر متمایزند . ولی اگر بسته‌موج شکل متقارنی داشته باشد این دو بریکدیگر منطبق‌اند (بخش ۵ ـ C شکل ۲) .

درلحظه t خواهیم نامید . مجموعهٔ نقاط متناظر بامقادیر مختلف t مسیر طی شده توسط مرکز بستهٔ موج را تشکیل می‌دهند .

لیکن یادآور می‌شویم که هرگز نمی‌توان دقیقا" از مسیر خود ذره ، که حالت آن توسط تمام بسته موج ، که لزوما" دارای گستردگی فضائی معینی است ، تشریح می‌شود ، صحبت‌کرد . مع ذالک می‌بینیم که اگرگستردگی آن خیلی کوچکترازسایرفواصل دخیل‌درمسأله باشد ، می‌توانیم بسته موج را به‌طورتقریب با مرکزآن یکی بگیریم . در این مورد حدی ، اختلاف قابل ملاحظه‌ای بین توصیفهای کوانتومی و کلاسیکی ذره وجود ندارد .

بنابر این مهم است که پاسخ سئوال زیر را بدانیم : آیا حرکت مرکز بسته موج از قوانین مکانیک کلاسیک تبعیت می‌کنند؟ این جواب توسط قضیه اهرنفست فراهم می‌آید . معادله (D ـ ۳۴) این واقعیت را بیان می‌کند که سرعت مرکز بسته موج برابراست بامیانگین اندازه حرکت این بسته موج تقسیم بر m . درنتیجه ، طرف‌چپ (D ـ ۳۵) می‌تواندبه‌صورت $m\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\langle \mathbf{R}\rangle$ نوشته شود ، بنابراین جواب سئوال قبلی وقتی مثبت است که طرف راست (D ـ ۳۵) برابر نیروی کلاسیکی $\mathbf{F}_{cl}$ درنقطه‌ای که مرکز بسته موج واقع است ، باشد :

$$\mathbf{F}_{cl} = [-\nabla V(\mathbf{r})]_{\mathbf{r}=\langle \mathbf{R}\rangle} \qquad \text{(D ـ ۳۸)}$$

در واقع طرف راست (D ـ ۳۵) برابر است بامیانگین نیرو روی تمام بسته موج ، وبه‌طورکلی :

$$\langle \nabla V(\mathbf{R}) \rangle \neq [\nabla V(\mathbf{r})]_{\mathbf{r}=\langle \mathbf{R}\rangle} \qquad \text{(D ـ ۳۹)}$$

(به‌عبارت دیگر ، مقدار متوسط یک تابع با مقدار آن به‌ازاء مقدارمتوسط متغیربرابرنیست) . از این رو اگر دقیق باشیم ، پاسخ سئوالی که مطرح کردیم منفی است .

گوشزد :

به‌آسانی می‌توانیم با بررسی یک مثال واقعی خود را در باره (D ـ ۳۹) متقاعد سازیم . برای سهولت یک مدل یک بعدی انتخاب می‌کنیم ، وفرض می‌کنیم :

$$V(x) = \lambda x^n \qquad \text{(D ـ ۴۰)}$$

که در آن λ یک ثابت حقیقی و n ، یک عدد صحیح مثبت است . از این عبارت عملگر وابسته به $V(x)$ را به‌صورت زیر می‌نویسیم :

$$V(X) = \lambda X^n \qquad (D-۴۱)$$

طرف چپ (D —۳۹) را می‌توان (باجایگزین کردن Δ توسط $\frac{d}{dx}$) به‌صورت $\lambda n \langle X^{n-1} \rangle$ نوشت. اما طرف راست برابر است با:

$$\left[\frac{dV}{dx}\right]_{x=\langle X\rangle} = [\lambda n\ x^{n-1}]_{x=\langle X\rangle} = \lambda n \langle X \rangle^{n-1} \qquad (D-۴۲)$$

حال، می‌دانیم که عموماً " $\langle X^{n-1} \rangle \neq \langle X \rangle^{n-1}$ ، به عنوان مثال، برای $n = 3$ داریم $\langle X^2 \rangle \neq \langle X \rangle^2$ (زیرا اختلاف بین این دوکمیت در محاسبه ریشه میانگین مربعی انحراف ΔX وارد می‌شود).

توجه کنید که برای $n = 1$ یا $n = 2$ داریم: $\langle X^{n-1} \rangle = \langle X \rangle^{n-1}$.
دراین صورت دوطرف (D —۳۹) با یکدیگر برابرند. بعلاوه، همین مطلب، برای $n = 0$ صادق است، که دراین مورد هر دوطرف برابر صفر هستند. بنابراین، برای یک ذرهٔ آزاد $(n = 0)$، یا یک ذرهٔ واقع دریک میدان نیروی یکنواخت $(n = 1)$ یا چاه پتانسیل سهمی شکل ($n = 2$ ، مورد یک نوسان‌کنندهٔ هارمونیک)، حرکت مرکز بسته موج دقیقاً " از قوانین مکانیک کلاسیک تبعیت می‌کند. از این گذشته، این نتیجه را قبلاً " برای ذرهٔ آزاد $(n = 0)$ اثبات کردیم (رک فصل اول، بخش C-۴).

با وجودی که دوطرف (D —۳۹) عموماً " برابر نیستند، وضعیت‌هائی (که نیمه کلاسیکی نامیده می‌شوند) وجود دارد که در آنها اختلاف بین این دوکمیت قابل اغماض است: از آن جمله است وقتی که بسته موج به‌حدکافی جایگزیده باشد. برای مشاهدهٔ این مطلب، طرف چپ این معادله را، در نمایش $\{ \langle \mathbf{r} | \}$، به‌طور صریح می‌نویسیم:

$$\begin{aligned}\langle \nabla V(\mathbf{R}) \rangle &= \int d^3r\, \psi^*(\mathbf{r}, t)\, [\nabla V(\mathbf{r})]\, \psi(\mathbf{r}, t) \\ &= \int d^3r\, |\psi(\mathbf{r}, t)|^2\, \nabla V(\mathbf{r})\end{aligned} \qquad (D-۴۳)$$

فرض کنید بسته موج شدید " جایگزیده باشد: به‌عبارت دقیق‌تر، $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ فقط در داخل محدوده‌ای که ابعاد آن از فواصلی که $V(\mathbf{r})$ روی آنها به‌طور قابل ملاحظه‌ای تغییر می‌کند، مقادیر غیر قابل اغماضی داشته باشد. دراین صورت، در داخل این محدوده، متمرکز در حول $\langle \mathbf{R} \rangle$، $\nabla V(\mathbf{r})$ عملاً " ثابت است. لذا، می‌توان در (D —۴۳)، $\nabla V(\mathbf{r})$ را توسط مقدار آن بازاء $\mathbf{r} = \langle \mathbf{R} \rangle$ جایگزین کرد و از انتگرال خارج نمود، دراین صورت مقدار

انتگرال برابر است با ۱ ، زیرا $\psi(\mathbf{r},t)$ بهنجار شده است . بدین ترتیب برای بسته‌موج‌های به‌حد کافی جایگزیده ، خواهیم داشت :

$$\langle \nabla V(\mathbf{R}) \rangle \simeq [\nabla V(\mathbf{r})]_{\mathbf{r}=\langle \mathbf{R} \rangle} \qquad (D-۴۴)$$

در حد ماکروسکوپیکی (که طول موج‌های دوبروی از فواصلی‌که روی آنها پتانسیل تغییرمی‌کند ، خیلی کوچکترند *) ، می‌توان بسته موج‌ها را آنقدر کوچک کرد تا در (D-۴۴) صدق کنند و در درعین حال ، درجه خوبی برای تعیین اندازه حرکت حفظ شود . دراین‌صورت‌حرکت بسته موج عملا " همان حرکت یک ذره کلاسیکی به‌جرم m واقع در پتانسیل $V(\mathbf{r})$ است . نتیجه‌ای که به‌این ترتیب به‌دست آوردیم بسیار مهم است زیرا ما را قادر می‌سازد تا نشان دهیم که معادلات مکانیک کلاسیک در شرایط حدی معینی ، که بخصوص توسط اغلب دستگاههای ماکروسکوپیکی ، ارضاء می‌شوند از معادله شرودینگر حاصل می‌شوند .

۳ ــ مورد دستگاههای پایستار

وقتی هامیلتونی یک دستگاه فیزیکی به‌طور صریح به‌زمان بستگی نداشته باشد ، دستگاه را پایستار می‌نامیم . در مکانیک کلاسیک ، مهمترین نتیجهٔ یک‌چنین‌وضعیتی‌عبارت است از پایستگی انرژی درطول زمان . هم‌چنین می‌توان گفت که‌انرژی‌کل دستگاه یک پایای حرکت است . دراین بخش خواهیم دید که در مکانیک کوانتومی نیز ، دستگاههای پایستار ، علاوه برخواص عمومی بخش گذشته ، دارای خواص ویژه مهمی هستند .

a . حل معادله شرودینگر

ابتدا ، معادله ویژه مقداری H را در نظر بگیرید .

$$H\,|\,\varphi_{n,\tau}\rangle = E_n\,|\,\varphi_{n,\tau}\rangle \qquad (D-۴۵)$$

برای سهولت فرض می‌کنیم که طیف H گسسته باشد . τ معرف مجموعه شاخصهائی غیر از n است که برای مشخص کردن یک بردار یکتای $\langle\varphi_{n,\tau}|$ لازمند (عموما " ، این شاخص‌ها ویژه مقدارهای عملگرهائی را مشخص می‌کنندکه با H یک م.ک.م.ج تشکیل ، می‌دهند). چون‌بنا

---

* رک مرتبه بزرگی طول موج‌های وابسته به‌یک دستگاه ماکروسکوپیکی در مکمل A_1 .

بەفرض، H صریحا" بەزمان بستگی ندارد، نه ویژه مقدار E_n به t بستگی دارد و نه ویژه کت $|\varphi_{n,\tau}\rangle$.

ابتدا نشان خواهیم داد که با داشتن E_n و $|\varphi_{n,\tau}\rangle$ حل معادلهٔ شرودینگر، یعنی، تعیین تحول زمانی هرحالت بسیار ساده است. چون $|\varphi_{n,\tau}\rangle$ ها یک پایه تشکیل می‌دهند (H یک مشاهده‌پذیر است)، همواره می‌توان، برای هرمقدار t، هرحالت $|\psi(t)\rangle$ ی دستگاه را برحسب $|\varphi_{n,\tau}\rangle$ بسط داد:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n,\tau} c_{n,\tau}(t)\,|\varphi_{n,\tau}\rangle \qquad (\text{D}-۴۶)$$

که در آن:

$$c_{n,\tau}(t) = \langle \varphi_{n,\tau}|\psi(t)\rangle \qquad (\text{D}-۴۷)$$

چون $|\varphi_{n,\tau}\rangle$ بەزمان بستگی ندارد، تمام وابستگی زمانی $|\psi(t)\rangle$ در $c_{n,\tau}(t)$ نهفته است. برای محاسبهٔ $c_{n,\tau}(t)$، معادله شرودینگر را روی هریک از حالت‌های $|\varphi_{n,\tau}\rangle$ تصویر می‌کنیم. خواهیم داشت *:

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \varphi_{n,\tau}|\psi(t)\rangle = \langle \varphi_{n,\tau}|H|\psi(t)\rangle \qquad (\text{D}-۴۸)$$

چون H هرمیتی است، می‌توان از (D ـ۴۵) نتیجه گرفت:

$$\langle \varphi_{n,\tau}|H = E_n\langle \varphi_{n,\tau}| \qquad (\text{D}-۴۹)$$

بنابراین (D ـ۴۸) می‌تواند بەصورت زیر نوشته شود:

---

* در (D ـ۴۸)، می‌توان $|\varphi_{n,\tau}\rangle$ را در سمت راست $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}$ قرار داد، زیرا $|\varphi_{n,\tau}\rangle$ به زمان بستگی ندارد.

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_{n,\tau}(t) = E_n c_{n,\tau}(t) \qquad (D-50)$$

این معادله می‌تواند فوراً" حل شود ، حاصل برابر است با :

$$c_{n,\tau}(t) = c_{n,\tau}(t_0)\ e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} \qquad (D-51)$$

اگر H صریحاً به‌زمان بستگی نداشته باشد ، برای یافتن $|\psi(t)\rangle$ ، وقتی $|\psi(t_0)\rangle$ معلوم باشد ، به‌طریق زیر عمل می‌کنیم :

(۱) $|\psi(t_0)\rangle$ را برحسب یک پایه از ویژه حالت‌های H بسط می‌دهیم :

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_n \sum_\tau c_{n,\tau}(t_0) |\varphi_{n,\tau}\rangle \qquad (D-52)$$

توسط فرمول زیر داده می‌شود :

$$c_{n,\tau}(t_0) = \langle \varphi_{n,\tau} | \psi(t_0) \rangle \qquad (D-53)$$

(۲) حال ، برای به‌دست آوردن $|\psi(t)\rangle$ به‌ازاء t ی دلخواه هر ضریب $c_{n,\tau}(t_0)$ از بسط (D ـ۵۲) را در $e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}$ ضرب می‌کنیم که E_n ویژه مقدار H وابسته به‌حالت $|\varphi_{n,\tau}\rangle$ است :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \sum_\tau c_{n,\tau}(t_0)\, e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} |\varphi_{n,\tau}\rangle \qquad (D-54)$$

استدلال فوق می‌تواند به‌آسانی به‌موردی که طیف H پیوسته است تعمیم داده‌شود ، دراین صورت فرمول (D ـ۵۴) ، با نمادگذاری معمول ، می‌شود :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_\tau \int dE\, c_\tau(E, t_0)\, e^{-iE(t-t_0)/\hbar} |\varphi_{E,\tau}\rangle \qquad (D-55)$$

b ــ حالت‌های مانا

یک مورد خاص مهم موردی است که در آن خود $|\psi(t_0)\rangle$ یک ویژه حالت H باشد . دراین صورت بسط (D - ۵۲) ی $|\psi(t_0)\rangle$ فقط ویژه حالت‌های H متناظر با یک ویژه مقدار (به‌عنوان مثال ، E_n) را در بر می‌گیرد :

$$| \psi(t_0) \rangle = \sum_{\tau} c_{n,\tau}(t_0) \, | \varphi_{n,\tau} \rangle \tag{D-۵۶}$$

در فرمول (D ـ۵۶) ، جمع‌بندی روی n وجود ندارد ، و عبور از $|\psi(t_0)\rangle$ به $|\psi(t)\rangle$ فقط یک عامل $e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}$ را وارد می‌کند ، که می‌تواند از زیر علامت جمع بندی روی τ بیرون آورده شود :

$$\begin{aligned} | \psi(t) \rangle &= \sum_{\tau} c_{n,\tau}(t_0) \, e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} \, | \varphi_{n,\tau} \rangle \\ &= e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} \sum_{\tau} c_{n,\tau}(t_0) \, | \varphi_{n,\tau} \rangle \\ &= e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} \, | \psi(t_0) \rangle \end{aligned} \tag{D-۵۷}$$

بنابراین $|\psi(t)\rangle$ و $|\psi(t_0)\rangle$ فقط در عامل فاز کلی $e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}$ با یکدیگر اختلاف دارند . این دوحالت از نظر فیزیکی تمیز ناپذیرند (رک بحث آمده در بخش γ ـ b ـ۳ـ B) . از اینجا نتیجه می‌گیریم که هیچیک از خواص فیزیکی دستگاهی که در یک ویژه حالت H قرار دارد ، با زمان تغییر نمی‌کند ، به‌این دلیل ، ویژه حالت‌های H ، حالت‌های مانا نامیده می‌شوند .

هم‌چنین جالب توجه است که به‌بینیم پایستگی انرژی در یک دستگاه پایستار به‌چه صورت در مکانیک کوانتومی ظاهر می‌شود . فرض کنید که، در زمان t_0 ، انرژی یک چنین دستگاهی را اندازه‌گیری کنیم و مثلاً" نتیجهٔ E_k را به‌دست آوریم . بلافاصله پس از اندازه‌گیری ، دستگاه در یک ویژه حالت H ، با یک ویژه مقدار E_k ، قراردارد (اصل‌موضوع تقلیل بسته موج) . الان دیدیم که ویژه حالت‌های H مانا هستند . لذا ، حالت دستگاه پس از اولین اندازه‌گیری دیگر تحول نخواهد یافت و همواره یک ویژه حالت H با ویژه‌مقدار E_k باقی خواهد ماند . نتیجه می‌شود که اندازه‌گیری دوم انرژی دستگاه، در هرزمان بعدی t ، همواره همان نتیجه E_k ی اولین اندازه‌گیری را به‌دست خواهد داد .

گوشـزد :

می‌توان با ضرب‌کردن هر ضریب $c_{n,\tau}(t_0)$ از (D ـ۵۲) در $e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}$ از (D ـ۵۲) به (D ـ۵۴) رسید . این واقعیت که $e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}$ یک عامل فازی‌است نباید ما را به‌این باور رهنمون شود که $|\psi(t_0)\rangle$ و $|\psi(t)\rangle$ همواره از نظرفیزیکی‌تمیز ناپذیرند . در واقع ، بسط (D ـ۵۲) ، عموماً" ، شامل چندین ویژه حالت H با ویژه مقدارهای متفاوت است . به‌این مقادیر مختلف ممکن E_n عامل فازهای

مختلفی مربوط می‌شوند . این امر، فازهای نسبی ضرائب بسط بردارحالت‌راتغییر می‌دهد و در نتیجه، به‌یک حالت $|\psi(t)\rangle$ که از نظر فیزیکی از $|\psi(t_0)\rangle$ متمایز است منتهی می‌شود .
فقط در موردی که تنها یک مقدار از n وارد (D‒۵۲) می‌شود[موردی‌که $|\psi(t_0)\rangle$ ویژه حالت H است] تحول زمانی تشریح شده توسط یک عامل فاز، که‌دراین‌صورت یک عامل فاز کلی است، هیچ اهمیت فیزیکی ندارد . به‌عبارت دیگر، فقط وقتی تحول فیزیکی نسبت به‌زمان وجود دارد که انرژی حالت اولیه با قطعیت معلوم نباشد، بعدا" به‌رابطهٔ بین تحول زمانی و عدم قطعیت انرژی برخواهیم گشت (رک بخش e ‒۲‒ D) .

c ــ پایاهای حرکت

بنا به‌تعریف، یک پایای حرکت مشاهده‌پذیری مانند A است که صریحا به زمان بستگی نداشته و با H جابجائی‌پذیر باشد:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial A}{\partial t} = 0 \\ [A, H] = 0 \end{cases} \tag{D‒۵۸}$$

بدین ترتیب، برای یک دستگاه پایستار، خود H یک پایای حرکت است .
پایاهای حرکت دارای‌خواص مهمی‌هستندکه اینک می‌خواهیم‌آنها را به‌دست آوریم.
(۱) اگر (D‒۵۸) را در فرمول عمومی (D‒۲۷) جایگزین کنیم‌خواهیم داشت:

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \frac{d}{dt}\langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = 0 \tag{D‒۵۹}$$

حالت $|\psi(t)\rangle$ ی دستگاه فیزیکی هرچه باشد، مقدار متوسط A دراین حالت بازمان تغییر نمی‌کند (بدین جهت عبارت " پایای حرکت " را به‌کار می‌بریم) .
(۲) چون A و H دومشاهده‌پذیرندکه بایکدیگرجابجائی‌پذیر هستند همواره می‌توانیم برای آنها یک دستگاه ویژه بردارهای مشترک، که آنها را با $\{|\varphi_{n,p,\tau}\rangle\}$ نمایش خواهیم داد، پیدا کنیم:

$$\begin{aligned} H\,|\varphi_{n,p,\tau}\rangle &= E_n\,|\varphi_{n,p,\tau}\rangle \\ A\,|\varphi_{n,p,\tau}\rangle &= a_p\,|\varphi_{n,p,\tau}\rangle \end{aligned} \tag{D‒۶۰}$$

برای سهولت فرض خواهیم کرد که طیف‌های H و A گسسته باشند. شاخص τ ویژه‌مقدارهای مشاهده‌پذیرهایی را مشخص می‌کند که با H و A تشکیل یک م.ک.م.ج می‌دهند. چون حالت‌های $\langle \varphi_{n,p,\tau} |$ ویژه حالت‌های H هستند، مانا هستند. ازاین‌رو اگردستگاه در لحظهٔ اولیه درحالت $\langle \varphi_{n,p,\tau} |$ باشد، همیشه درهمان حالت (با تقریب یک عامل فاز کلی خواهد ماند. اما حالت $\langle \varphi_{n,p,\tau} |$ ویژه حالت A نیز هست. لذا، وقتی A یک پایای حرکت باشد، حالت‌های مانائی از دستگاه فیزیکی وجوددارند (حالت‌های $\langle \varphi_{n,p,\tau} |$) که همواره، بازاء تمام t ها، ویژه‌حالت A باهمان ویژه‌مقدار (a_p) باقی می‌مانند. به‌این‌دلیل ویژه‌مقدارهای A، اعداد کوانتومی خوب، نامیده می‌شوند.

(۳) بالاخره، نشان دهیم که برای یک حالت دلخواه $\langle \psi(t) |$، احتمال‌یافتن ویژه مقدار a_p، وقتی پایای حرکت A اندازه‌گیری می‌شود، به‌زمان وابسته‌نیست. $\langle \psi(t_0) |$ همیشه می‌تواند برحسب پایهٔ $\{ \langle \varphi_{n,p,\tau} | \}$ که دربالا معرفی شد، بسط داده شود:

$$| \psi(t_0) \rangle = \sum_n \sum_p \sum_\tau c_{n,p,\tau}(t_0) \, | \varphi_{n,p,\tau} \rangle \qquad (D-61)$$

از اینجا مستقیما" نتیجه می‌گیریم:

$$| \psi(t) \rangle = \sum_n \sum_p \sum_\tau c_{n,p,\tau}(t) \, | \varphi_{n,p,\tau} \rangle \qquad (D-62)$$

که درآن:

$$c_{n,p,\tau}(t) = c_{n,p,\tau}(t_0) \, e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} \qquad (D-63)$$

بر طبق اصل موضوع تجزیه طیفی، احتمال $\mathscr{P}(a_p, t_0)$ برای یافتن a_p وقتی A در زمان t_0، که دستگاه درحالت $\langle \psi(t_0) |$ است، اندازه‌گیری می‌شود برابر است با:

$$\mathscr{P}(a_p, t_o) = \sum_n \sum_\tau |c_{n,p,\tau}(t_0)|^2 \qquad (D-64)$$

همین طور:

$$\mathscr{P}(a_p, t) = \sum_n \sum_\tau |c_{n,p,\tau}(t)|^2 \qquad (D-65)$$

از (D-۶۳) ملاحظه می‌کنیم که $c_{n,p,\tau}(t)$ و $c_{n,p,\tau}(t_0)$ دارای یک مدول هستند. لذا $\mathscr{P}(a_p, t) = \mathscr{P}(a_p, t_0)$، که خاصیت ذکر شده در بالا را اثبات می‌کند.

گوشـزد :

اگر همه احتمالات $\mathscr{P}(a_p, t_0)$ بجز یکی از آنها صفر باشنـد [بـه‌عنـوان مثال ، $\mathscr{P}(a_k, t_0)$ را غیر صفر و ، علاوه براین ، لزوما" مساوی ۱ انتخاب کنید] ، دستگاه فیزیکی در زمان t_0 در یک ویژه حالت A با ویژه مقدار a_k قـرار دارد . چـون $\mathscr{P}(a_p, t)$ به t بستگی ندارد ، حالت دستگاه در زمان t یک ویژه حالت A باویژه مقدار a_k باقی می‌ماند .

d ـ فرکانس‌های بوهر یک دستگاه . قواعد گزینش

فرض کنید B یک مشاهده‌پذیر دلخواه (الزاما با H جابحائی‌پذیر نیست)ازدستگاه مورد نظر باشد . فرمول (D‑۲۷) ما را قادر می‌سازد تامشتق مقدارمتوسط B ، $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle B\rangle$ ، را محاسبه کنیم :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle B\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [B, H]\rangle + \langle \frac{\partial B}{\partial t}\rangle \qquad (\text{D‑۶۶})$$

برای یک دستگاه پاتسیار ، شکل عمومی $|\psi(t)\rangle$ ، (D‑۵۴) ، را می‌دانیم . بنابـر ایـن می‌توانیم ، دربن مورد $\langle\psi(t)|B|\psi(t)\rangle$ (و نه صرفا $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle B\rangle$) را محاسبه کنیم .

همیوغ هرمیتی عبارت (D‑۵۴) (با عوض‌کردن شاخصهای جمع‌بندی)به‌صورت زیر نوشته می‌شود :

$$\langle\psi(t)| = \sum_{n'}\sum_{\tau'} c^*_{n',\tau'}(t_0)\ \mathrm{e}^{iE_{n'}(t-t_0)/\hbar}\langle\varphi_{n',\tau'}| \qquad (\text{D‑۶۷})$$

سپس می‌توانیم در $\langle\psi(t)|B|\psi(t)\rangle$ ، $\langle\psi(t)|$ و $|\psi(t)\rangle$ را به‌ترتیب توسط بسط های (D‑۵۴) و (D‑۶۷) جایگزین کنیم . بدین ترتیب خواهیم داشت :

$$\begin{aligned}\langle\psi(t)|B|\psi(t)\rangle &= \langle B\rangle(t)\\ &= \sum_{n}\sum_{\tau}\sum_{n'}\sum_{\tau'} c^*_{n',\tau'}(t_0)\ c_{n,\tau}(t_0)\langle\varphi_{n',\tau'}|B|\varphi_{n,\tau}\rangle\,\mathrm{e}^{i(E_{n'}-E_n)(t-t_0)/\hbar}\end{aligned} \qquad (\text{D‑۶۸})$$

از این به‌بعد ، فرض خواهیم کرد که B صریحا" به‌زمان بستگی نداشته باشد : بنابـر ایـن عناصر ماتریسی $\langle\varphi_{n',\tau'}|B|\varphi_{n,\tau}\rangle$ ثابت‌اند .دراینصورت‌فرمول (D‑۶۸)نشان‌می‌دهد که تحول $\langle B\rangle(t)$ توسط یک سری جملات نوسانـی تشریـح مـی‌شود فـرکـانس‌هـــای

$\nu_{n'n} = \left|\dfrac{E_{n'} - E_n}{h}\right| = \dfrac{1}{2\pi}\dfrac{|E_{n'} - E_n|}{\hbar}$ آنها مشخصه دستگاه موردنظربوده ومستقل از B و حالت اولیهٔ دستگاه هستند. فرکانسهای $\nu_{n'n}$ فرکانس‌های بوهر دستگاه نامیده می‌شوند. بنابراین، برای یک اتم، مقادیر متوسط تمام‌کمیت‌های اتمی (ممانهای دوقطبی الکتریکی و مغناطیسی و غیره) با فرکانس‌های بوهر مختلف اتم نوسان می‌کنند. معقول بنظر می‌رسد که تصور کنیم فقط این فرکانس‌ها می‌توانند توسط اتم گسیل یا جذب شوند. این مطلب به‌ما امکان می‌دهد تا به‌طور حسی رابطه بوهر بین فرکانس‌های طیفی گسیل شده یا جذب شده و فاصله‌های انرژی های اتمی را بفهمیم.

هم چنین می‌توان از (D–۶۸) ملاحظه کرد که، در عین حالی که فرکانس های دخیل در حرکت $\langle B\rangle(t)$ مستقل از B هستند، این مطلب برای وزن‌های این فرکانس‌ها در تغییرات $\langle B\rangle$ صادق نیست. اهمیت هر فرکانس $\nu_{n'n}$ به عنصر ماتریسی $\langle \varphi_{n',\tau'} \mid B \mid \varphi_{n,\tau}\rangle$ متناظر بستگی دارد. بخصوص، اگر این عناصر ماتریسی بهازاء مقادیر معینی از n و n' صفر باشند، حالت اولیه دستگاه هرچه باشد، فرکانسهای متناظر $\nu_{n'n}$ در بسط $\langle B\rangle(t)$ حضور ندارند. این در منشأ قواعدگزینش است‌که معین‌می‌کنند، تحت شرایط معین، کدام فرکانس ها می‌توانند گسیل یا جذب شوند. برای‌برقرارکردن این قواعد، باید عناصر ماتریسی غیر قطری $(n \neq n')$ عملگرهای مختلف اتمی‌نظیردوقطبی‌های الکتریکی و مغناطیسی و غیره را مطالعه کنیم.

بالاخره، وزنهای فرکانس های مختلف بوهر، از طریق $c^*_{n',\tau'}(t_0)c_{n,\tau}(t_0)$، به‌حالت اولیه نیز بستگی دارند. بخصوص، اگر حالت اولیه یک حالت مانا با انرژی E_k باشد، بسط $\langle \psi(t_0)|$ فقط شامل یک مقدار از n $(n = k)$ است و $c^*_{n',\tau'}(t_0)c_{n,\tau}(t_0)$ می‌تواند فقط بازاء $n = n' = k$ غیر صفر باشد. دراین مورد، $\langle B\rangle$ به‌زمان بستگی ندارد.

گوشزد :

می‌توان مستقیماً، با به‌کاربردن (D–۶۸)، تحقیق کرد که مقدار متوسط یک‌پایای حرکت همواره مستقل از زمان است. ملاحظه می‌کنیم که اگر B با H جابجائی پذیر باشد، عناصر ماتریسی B بین دو ویژه حالت H متناظر با ویژه مقدارهای متفاوت، صفرند (ر ک فصل دوم، بخش a –۳– D). نتیجه می‌شود که $\langle \varphi_{n',\tau'}|B|\varphi_{n,\tau}\rangle$ به‌ازاء $n' \neq n$ صفر است. بنابراین تنها جملات غیر صفر B ثابت هستند.

e ــ رابطه عدم قطعیت زمان ــ انرژی

اکنون خواهیم دید که برای یک دستگاه پایستار هرچه عدم قطعیت انرژی بزرگتر باشد ، زمان تحول سریعتر است . به‌عبارت دقیق‌تر ، اگر Δt بازه زمانی‌ای باشد که در پایان آن دستگاه به‌اندازه قابل ملاحظه‌ای تحول یافته است ، و اگر ΔE معرف عدم‌قطعیت انرژی باشد Δt و ΔE در رابطه زیر صدق می‌کنند :

$$\boxed{\Delta t \,.\, \Delta E \gtrsim \hbar} \qquad (D-۶۹)$$

ابتدا ، اگر دستگاه در یک ویژه حالت H باشد ، انرژی آن کاملا" معین است : $\Delta E = 0$. اما دیدیم که یک چنین حالتی مانا است ، یعنی ، تحول پیدا نمی‌کند ، می‌توان گفت که ، درین مورد ، زمان Δt ی تحول ، به‌یک معنا ، بی‌نهایت است [رابطهٔ (D ـ۶۹) نشان می‌دهد که وقتی $\Delta E = 0$ باشد ، Δt باید بی‌نهایت باشد] .

حال ، فرض کنید که $|\psi(t_0)\rangle$ یک برهم نهش خطی از دو ویژه حالت H ، $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$ ، با ویژه مقدارهای مختلف E_1 و E_2 باشد :

$$|\psi(t_0)\rangle = c_1|\varphi_1\rangle + c_2|\varphi_2\rangle \qquad (D-۷۰)$$

در این صورت :

$$|\psi(t)\rangle = c_1\, e^{-iE_1(t-t_0)/\hbar}|\varphi_1\rangle + c_2\, e^{-iE_2(t-t_0)/\hbar}|\varphi_2\rangle \qquad (D-۷۱)$$

اگر انرژی را اندازه‌گیری کنیم ، یا E_1 به‌دست می‌آید یا E_2 . بنابراین ، عدم قطعیت E از مرتبه :

$$\Delta E \simeq |E_2 - E_1| \qquad (D-۷۲)$$

است . حال یک مشاهده‌پذیر دلخواه B را که با H جابجائی‌پذیر نیست در نظر بگیرید . احتمال یافتن ویژه مقدار b_m وابسته به‌ویژه بردار $|u_m\rangle$ ، در یک اندازه‌گیری B درزمان t ، توسط رابطهٔ زیر داده می‌شود :

$$\begin{aligned}\mathscr{P}(b_m, t) = |\langle u_m|\psi(t)\rangle|^2 &= |c_1|^2\,|\langle u_m|\varphi_1\rangle|^2 + |c_2|^2\,|\langle u_m|\varphi_2\rangle|^2 \\ &+ 2\,\mathrm{Re}\,[c_2^* c_1\, e^{i(E_2-E_1)(t-t_0)/\hbar}\langle u_m|\varphi_2\rangle^* \langle u_m|\varphi_1\rangle]\end{aligned} \qquad (D-۷۳)$$

این معادله نشان می‌دهد که $\mathscr{P}(b_m, t)$ بین دو مقدار حدی ، با فرکانس بوهر

$\nu_{21} = \frac{|E_2 - E_1|}{h}$ نوسان می‌کند. بنابراین زمان مشخصهٔ تحول دستگاه عبارت است از:

$$\Delta t \simeq \frac{h}{|E_2 - E_1|} \qquad (D-۷۴)$$

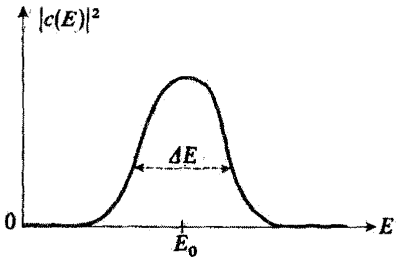
و مقایسهٔ این رابطه با (D -۷۲) نشان می‌دهد که: $\Delta E \cdot \Delta t \simeq h$

حال فرض کنید که طیف H پیوسته (و ناتبهگن) باشد، عمومی ترین حالت $|\psi(t_0)\rangle$ می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود:

$$|\psi(t_0)\rangle = \int dE \ c(E) |\varphi_E\rangle \qquad (D-۷۵)$$

که در آن $|\varphi_E\rangle$ عبارت است از ویژه حالت H با ویژه مقدار E. فرض کنید که $|c(E)|^2$ فقط در محدوده‌ای به‌پهنای ΔE حول E_0 مقادیر غیر قابل اغماضی داشته باشد (شکل ۴). در این صورت ΔE معرف عدم قطعیت انرژی دستگاه است. $|\psi(t)\rangle$ با استفاده از (D -۵۵) به‌صورت زیر به‌دست می‌آید:

$$|\psi(t)\rangle = \int dE \ c(E)\, e^{-iE(t-t_0)/\hbar} |\varphi_E\rangle \qquad (D-۷۶)$$



شکل ۴.
با برهم نهش حالتهای مانای $|\varphi_E\rangle$ با ضرائب $c(E)$، یک حالت $|\psi\rangle$ ی دستگاه به‌دست می‌آید که انرژی آن کاملاً معین نیست. عدم قطعیت ΔE ی متناظر توسط پهنای منحنی نمایش $|c(E)|^2$ داده می‌شود. برطبق چهارمین رابطه عدم قطعیت، تحول حالت $|\psi(t)\rangle$ بعد از یک زمان Δt، که در شرط $\Delta E \cdot \Delta t \gtrsim \hbar$ صدق کند، قابل ملاحظه است.

کمیت $\mathscr{P}(b_m, t)$ معرفی شده در بالا، که نمایانگر احتمال یافتن ویژه مقدار b_m، وقتی‌که B روی دستگاهی که در حالت $|\psi(t)\rangle$ است اندازه‌گیری می‌شود، در اینجا برابر است با:

$$\mathscr{P}(b_m, t) = |\langle u_m | \psi(t) \rangle|^2 = \left| \int \mathrm{d}E \;\; c(E) \mathrm{e}^{-iE(t-t_0)/\hbar} \langle u_m | \varphi_E \rangle \right|^2 \quad (\mathrm{D}-۷۷)$$

عموما" ، وقتی E در حوالی E_0 تغییر کند ، $\langle u_m | \varphi_E \rangle$ تغییر سریعی نسبت به E ندارد . اگر ΔE به‌حد کافی کوچک باشد ، می‌توان در انتگرال (D —۷۷) از تغییرات $\langle u_m | \varphi_E \rangle$ در مقابل تغییرات $c(E)$ صرفنظر کرد . در این صورت می‌توان $\langle u_m | \varphi_E \rangle$ را توسط $\langle u_m | \varphi_{E_0} \rangle$ جایگزین کرد و این کمیت را از انتگرال (D —۷۷) بیرون آورد :

$$\mathscr{P}(b_m, t) \simeq |\langle u_m | \varphi_{E_0} \rangle|^2 \left| \int \mathrm{d}E \cdot c(E) \, \mathrm{e}^{-iE(t-t_0)/\hbar} \right|^2 \quad (\mathrm{D}-۷۸)$$

بدین ترتیب ملاحظه می‌کنیم که اگر این تقریب معتبر باشد $\mathscr{P}(b_m, t)$ ، باتقریب یک‌ضریب عبارت است از مدول تبدیل فوریه $c(E)$. لذا برطبق خواص تبدیل فوریه (رک پیوست I ، بخش b —۲) ، پهنای منحنی $\mathscr{P}(b_m, t)$ نسبت به‌زمان ، یعنی Δt توسط رابطه (D —۶۹) به‌پهنای ΔE ی $|c(E)|^2$ مربوط می‌شود .

گوشزد :

(D —۶۹) می‌تواند مستقیما" برای یک بسته موج آزاد یک بعدی اثبات شود . می‌توان به‌عدم قطعیت Δp ی تکانه این بسته موج یک عدم قطعیت انرژی $\Delta E = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}p}\Delta p$ وابسته کرد . چون $E = \hbar\omega$ و $p = \hbar k$ ، داریم $\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}p} = \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k} = v_G$ ، که درآن v_G سرعت گروه بسته موج است (فصل اول ، بخش۴— C) . درنتیجه:

$$\Delta E = v_G \, \Delta p \quad (\mathrm{D}-۷۹)$$

اما زمان تحول مشخصه Δt عبارت از زمانی است که طول می‌کشد تااین‌بسته‌موج ، که با سرعت v_G حرکت می‌کند ، از یک نقطه از فضا" عبور" کند . لذا اگر Δx گستردگی فضایی بسته موج باشد ، داریم :

$$\Delta t \simeq \frac{\Delta x}{v_G} \quad (\mathrm{D}-۸۰)$$

از اینجا ، با ترکیب (D —۷۹) و (D —۸۰) ، داریم :

$$\Delta E \cdot \Delta t \simeq \Delta x \cdot \Delta p \gtrsim \hbar \quad (\mathrm{D}-۸۱)$$

رابطه (D-۶۹) غالبا " چهارمین رابطه عدم قطعیت هایزنبرگ نامیده می‌شود. لیکن، این رابطه آشکارا با سه رابطهٔ دیگر عدم قطعیت که به سه مؤلفه R و P مربوط است [فرمولهای (۱۴) از مکمل F_1] متفاوت است. در (D-۶۹)، فقط انرژی، مانند R و P، یک کمیت فیزیکی است، t، از طرف دیگر، یک فراسنج است که به آن هیچ عملگر مکانیک کوانتومی وابسته نیست.

E اصل برهم‌نهش و پیش‌بینی‌های فیزیکی

معنای فیزیکی اصل موضوع اول باید مورد رسیدگی قرار گیرد. برطبق این اصل موضوع، حالت‌های یک دستگاه فیزیکی به یک فضای برداری تعلق دارند و، درنتیجه، به‌طور خطی قابل برهم‌نهش هستند.

یکی از نتایج مهم اصل موضوع اول، وقتی با اصول موضوع دیگر ترکیب شود، ظهور آثار تداخلی نظیر آنهایی است که ما را به دوگانگی موجی- ذره‌ای رهنمون شد (فصل اول). درک ما از این پدیده‌ها بر مفهوم دامنه‌های احتمال استوار است، که دراینجا آنها را به‌کمک چند مثال ساده مورد بررسی قرار خواهیم داد.

۱- دامنه‌های احتمال و آثار تداخلی

a - معنای فیزیکی برهم‌نهش خطی حالت‌ها

α - اختلاف بین یک برهم‌نهش خطی و یک اختلاط آماری

فرض کنید $|\psi_1\rangle$ و $|\psi_2\rangle$ دوحالت بهنجارشده متعامد باشند:

$$\begin{aligned} \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle &= \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle = 1 \\ \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle &= 0 \end{aligned} \qquad (E-1)$$

($|\psi_1\rangle$ و $|\psi_2\rangle$ می‌توانند، به‌عنوان مثال، دو ویژه حالت یک مشاهده‌پذیر B، وابسته به‌دو ویژه مقدار متفاوت b_1 و b_2 باشند).

اگر دستگاه در حالت $|\psi_1\rangle$ باشد، می‌توانیم تمام احتمالهای مربوط به نتایج اندازه‌گیری یک مشاهده‌پذیر معین A را محاسبه کنیم. به‌عنوان مثال، اگر $|u_n\rangle$ یک ویژه بردار (بهنجارشدهٔ) A متناظر با ویژه مقدار a_n (که فرض می‌شود ناتبهگن است) باشد،

احتمال $\mathscr{P}_1(a_n)$ برای یافتن a_n ، در اندازه‌گیری A ، وقتی که دستگاه در حالت $|\psi_1\rangle$ است عبارت است از:

$$\mathscr{P}_1(a_n) = |\langle u_n | \psi_1 \rangle|^2 \qquad (\text{E} - ۲)$$

یک کمیت مشابه، $\mathscr{P}_2(a_n)$ ، برای حالت $|\psi_2\rangle$ می‌تواند تعریف شود:

$$\mathscr{P}_2(a_n) = |\langle u_n | \psi_2 \rangle|^2 \qquad (\text{E} - ۳)$$

اکنون یک حالت بهنجارشدهٔ $|\psi\rangle$ را که یک برهم‌نهش خطی از $|\psi_1\rangle$ و $|\psi_2\rangle$ است در نظر بگیرید:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle \\ |\lambda_1|^2 &+ |\lambda_2|^2 = 1 \end{aligned} \qquad (\text{E} - ۴)$$

غالبا" گفته می‌شود که، وقتی دستگاه در حالت $|\psi\rangle$ است، احتمال یافتن دستگاه‌در حالت $|\psi_1\rangle$ برابربا $|\lambda_1|^2$ و احتمال یافتن آن در حالت $|\psi_2\rangle$ برابر با $|\lambda_2|^2$ است. معنای دقیق این مطلب به‌صورت زیر است: اگر $|\psi_1\rangle$ و $|\psi_2\rangle$ دو ویژه‌بردار (که‌دراینجا بهنجار شده فرض می‌شوند) مشاهده پذیر B متناظر با ویژه مقدارهای متفاوت b_1 و b_2 باشند، احتمال اینکه وقتی B اندازه‌گیری می‌شود مقدار b_1 به‌دست آید برابر با $|\lambda_1|^2$ و احتمال اینکه b_2 به‌دست آید برابر با $|\lambda_2|^2$ است.

این مطلب می‌تواند ما را (همانطوری که خواهیم دید، به‌غلط) به‌این باوررهنمون شود که حالتی نظیر (۴ـ E) یک اختلاط آماری از حالت‌های $|\psi_1\rangle$ و $|\psi_2\rangle$ با وزن های $|\lambda_1|^2$ و $|\lambda_2|^2$ ، است. به‌عبارت دیگر، اگر تعداد زیادی N دستگاه یکسان که همگی در حالت (۴ـ E) قرار دارند، در نظر بگیریم، ممکن است تصور کنیم که این مجموعه N دستگاه در حالت $|\psi\rangle$ کاملا" معادل است با مجموعه دیگری که درآن $N|\lambda_1|^2$ دستگاه در حالت $|\psi_1\rangle$ و $N|\lambda_2|^2$ دستگاه در حالت $|\psi_2\rangle$ قرار دارند. چنین تعبیری از حالت $|\psi\rangle$ غلط است و همانطوری که خواهیم دید منجر به‌پیش بینی‌های فیزیکی ناصحیحی می‌شود.

فرض کنید می‌خواهیم در واقع احتمال $\mathscr{P}(a_n)$ برای یافتن‌ویژه مقدار a_n را در اندازه‌گیری مشاهده‌پذیر A ، وقتی که دستگاه در حالت $|\psi\rangle$ داده‌شده توسط (۴ـ E) باشد، محاسبه کنیم. اگر حالت $|\psi\rangle$ را به‌عنوان یک اختلاط آماری‌ازحالت‌های $|\psi_1\rangle$ و $|\psi_2\rangle$ با وزن‌های $|\lambda_1|^2$ و $|\lambda_2|^2$ تعبیرکنیم، می‌توانیم‌باجمع توزین‌شدهٔ احتمال‌های

$\mathscr{P}_1(a_n)$ و $\mathscr{P}_2(a_n)$ که در بالا محاسبه شد [فرمول‌های (۲ـ E) و (۳ـ E)] $\mathscr{P}(a_n)$ را به‌دست آوریم:

$$\mathscr{P}(a_n) \stackrel{?}{=} |\lambda_1|^2 \mathscr{P}_1(a_n) + |\lambda_2|^2 \mathscr{P}_2(a_n) \tag{E-۵}$$

در واقع، اصول موضوع مکانیک کوانتومی به‌طور واضح و بدون ابهام معین می‌کنند که‌چگونه $\mathscr{P}(a_n)$ را محاسبه کنیم. عبارت صحیح این احتمال عبارت است از:

$$\mathscr{P}(a_n) = |\langle u_n | \psi \rangle|^2 \tag{E-۶}$$

بنابراین $\mathscr{P}(a_n)$ عبارت است از مجذور مدول دامنهٔ احتمال $\langle u_n | \psi \rangle$. از (۴ـ E) می‌بینیم که این دامنه مجموع دوجمله است:

$$\langle u_n | \psi \rangle = \lambda_1 \langle u_n | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle u_n | \psi_2 \rangle \tag{E-۷}$$

بدین ترتیب خواهیم داشت:

$$\begin{aligned}\mathscr{P}(a_n) &= |\lambda_1 \langle u_n | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle u_n | \psi_2 \rangle|^2 \\ &= |\lambda_1|^2 |\langle u_n | \psi_1 \rangle|^2 + |\lambda_2|^2 |\langle u_n | \psi_2 \rangle|^2 \\ &+ 2\,\mathrm{Re}\,\{ \lambda_1 \lambda_2^* \langle u_n | \psi_1 \rangle \langle u_n | \psi_2 \rangle^* \}\end{aligned} \tag{E-۸}$$

لذا با در نظر گرفتن (۲ـ E) و (۳ـ E)، عبارت صحیح $\mathscr{P}(a_n)$ به‌صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\mathscr{P}(a_n) = |\lambda_1|^2 \mathscr{P}_1(a_n) + |\lambda_2|^2 \mathscr{P}_2(a_n) + 2\,\mathrm{Re}\,\{ \lambda_1 \lambda_2^* \langle u_n | \psi_1 \rangle \langle u_n | \psi_2 \rangle^* \} \tag{E-۹}$$

این نتیجه با فرمول (۵ـ E) متفاوت است.

بنابراین در نظر گرفتن $|\psi\rangle$ به‌عنوان یک اختلاط‌آماری حالت‌ها نادرست‌است. چنین تعبیری تمام آثار تداخلی موجود در ضرب دوتایی فرمول (۹ـ E) را حذف می‌کند. ملاحظه می‌کنیم‌که تنها مدول‌های λ_1 و λ_2 نیستند که دارای نقش هستند، فاز نسبی λ_1 و λ_2 به‌همان اندازه مهم است*، زیرا از طریق $\lambda_1\lambda_2^*$، صریحاً وارد پیش بینی‌های

---

* ضرب $|\psi\rangle$ دریک عامل فازی کلی $e^{i\theta}$ معادل است‌باتغییر λ_1 و λ_2 به $\lambda_1 e^{i\theta}$ و $\lambda_2 e^{i\theta}$ می‌توان از (۹ـ E) ثابت کرد که چنین عملی آن پیش بینی‌های فیزیکی را، که فقط به $|\lambda_1|^2$، $|\lambda_2|^2$ و $\lambda_1\lambda_2^*$ بستگی دارند، تغییر نمی‌دهد.

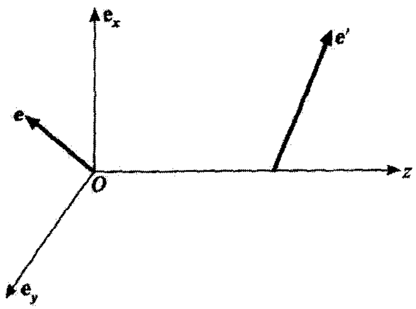
فیزیکی می‌شود .

β ــ یک مثال واقعی

فوتون‌هائی در نظر بگیرید که درامتداد Oz انتشار می‌یابند وحالت قطبش آنها توسط بردار یکهٔ زیر نشان داده شده است (شکل ۵) .

$$\mathbf{e} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y) \qquad (E-10)$$

این حالت برهم‌نهشی است خطی از دوحالت قطبی متعامد $\mathbf{e}_x$ و $\mathbf{e}_y$. ایـن حالت معرف نوری است که تحت زاویه °۴۵ نسبت به $\mathbf{e}_x$ و $\mathbf{e}_y$ به‌طور خطی قطبی شده است .



شکل ۵.
یک آزمایش ساده که اختلاف بین یک برهم‌نهش خطی ویک اختلاط آماری حالتها رانشان می‌دهد . اگر تمام فوتونهای فرودی در حالت قطبش:

$$\mathbf{e} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y)$$

باشند هیچکدام ازآنها از تجزیه‌گری‌که محور $\mathbf{e}'$ آن‌عمودبر $\mathbf{e}$ است‌نخواهند گذشت . اگر برعکس، یک اختلاط آماری ازفوتونهایی می‌داشتیم که‌در امتداد $\mathbf{e}_x$ یا $\mathbf{e}_y$ قطبی شده‌بودند (به‌نسبت مساوی، یعنی نورطبیعی) ، نیمی از آنها از تجزیه‌گری گذشتند .

فرض اینکه N فوتون در حالت $\mathbf{e}$ معادل‌است با $N \times \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{N}{2}$ فوتون درحالت $\mathbf{e}_x$ و $N \times \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{N}{2}$ فوتون در حالت $\mathbf{e}_y$ بی‌معنی است . می‌دانیم که‌اگردرمسیرباریکه

یک تجزیه‌گر طوری قرار دهیم که محور e' آن عمود بر e باشد، هیچکدام از N فوتونی که‌در حالت e قراردارند ازتجزیه‌گرعبور نخواهندکرد. اما برای اختلاط‌آماری $\left\{ \begin{matrix} \frac{N}{2} \text{ فوتون در حالت } e_x \text{ و} \\ \frac{N}{2} \text{ فوتون درحالت } e_y \end{matrix} \right\}$ ، نیمی از فوتونها از تجزیه‌گر عبور خواهند کرد.

در این مثال واقعی، واضح است که یک برهم‌نهش خطی نظیر (E–۱۰)، وابسته به‌نوری که تحت زاویه 45° نسبت به e_x و e_y قطبی شده است، از نظر فیزیکی با یک اختلاط‌آماری با نسبت‌های مساوی از حالت‌های e_x و e_y ، وابسته به‌نور طبیعی (یک‌باریکه غیر قطبی)، متفاوت است.

می‌توانیم هم‌چنین، با درنظرگرفتن چهار حالت:

$$e_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(e_x + e_y) \qquad (\text{E–۱۱})$$

$$e_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(e_x - e_y) \qquad (\text{E–۱۲})$$

$$e_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}(e_x + ie_y) \qquad (\text{E–۱۳})$$

$$e_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}(e_x - ie_y) \qquad (\text{E–۱۴})$$

که اختلافشان فقط در فازنسبی ضرائب‌است (این‌فاز، به‌ترتیب برابراست با 0، π، $+\frac{\pi}{2}$ و $-\frac{\pi}{2}$) به‌همیت فاز نسبی ضرائب بسط بردار حالت پی ببریم. این چهار حالت از نظر فیزیکی کاملا" متفاوتند: دوحالت اول معرف نوری هستند که به‌طورخطی در امتداد نمیسازهای (e_x, e_y) قطبی شده‌اند، و دوحالت دوم‌نشان دهنده نوری هستند که به‌طور دایره‌ای (به‌ترتیب راست و چپ) قطبی شده‌اند.

b – جمع بندی روی حالت‌های واسط

α . پیش بینی نتایج اندازه‌گیری در دوآزمایش ساده

(۱) آزمایش ۱ فرض کنید، دریک زمان معین، مشاهده‌پذیر A روی یک دستگاه فیزیکی اندازه‌گیری شده و ویژه مقدار ناتبهگن a به‌دست آمده باشد. اگر $|u_a\rangle$ ویژه‌بردار وابسته به a باشد، دستگاه فیزیکی، بلافاصله پس‌از اندازه‌گیری درحالت $|u_a\rangle$ است.

قبل از آنکه دستگاه وقت کافی برای تحول داشته باشد ، یک مشاهده‌پذیردیگر C را که با A جابجائی‌پذیر نیست اندازه‌گیری می‌کنیم . با بکاربردن نمادگذاری معرفی شده در بخش a ــ۶ــ C ، احتمال این را که این اندازه‌گیری دوم نتیجهٔ c را بدهد ، با $\mathscr{P}_a(c)$ نمایش می‌دهیم . بلافاصله قبل ازاندازه‌گیری C ، دستگاه درحالت $|u_a\rangle$ است . بنابراین اگر $|v_c\rangle$ ویژه‌بردار C وابسته به‌ویژه مقدار c (که فرض می‌کنیم نا تبهگن است) باشد ، اصول موضوع مکانیک کوانتومی منجر به‌مقدار زیر می‌شود :

$$\mathscr{P}_a(c) = |\langle v_c | u_a \rangle|^2 \tag{E ــ۱۵}$$

(۲) آزمایش ۲ . حال آزمایش دیگری تصور کنیم ، که در آن سه‌مشاهده پذیر A ، B ، C که بایکدیگر جابجائی‌پذیر نیستند ، پشت سرهم و خیلی سریع اندازه‌گیری می‌شوند (فاصله زمانی بین دو اندازه‌گیری آنقدر کوتاه است که دستگاه تحول پیدا نمی‌کند) . احتمال این را که اگر نتیجهٔ اولین اندازه‌گیری a باشد ونتایج دومین وسومین اندازه‌گیری بترتیب b و c باشند با $\mathscr{P}_a(b, c)$ نمایش می‌دهیم . $\mathscr{P}_a(b, c)$ برابر است با حاصلضرب $\mathscr{P}_a(b)$ (احتمال اینکه اندازه‌گیری A مقدار a و اندازه‌گیری B مقدار b رابدهد) و $\mathscr{P}_b(c)$ (احتمال اینکه اندازه‌گیری B مقدار b و اندازه‌گیری C مقدار c را بدهد) :

$$\mathscr{P}_a(b, c) = \mathscr{P}_a(b)\, \mathscr{P}_b(c) \tag{E ــ۱۶}$$

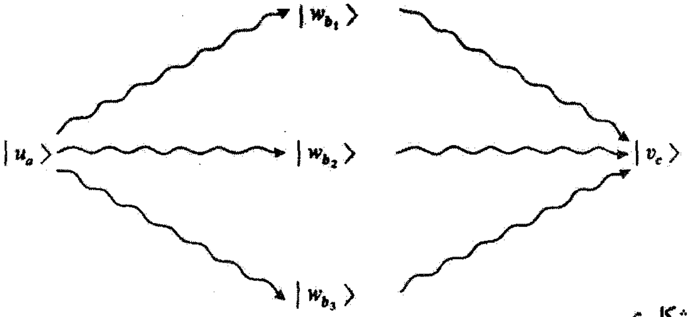
اگر تمام ویژه مقدارهای B نا تبهگن فرض شوند و اگر $|w_b\rangle$ معرف ویژه بردارهای متناظر باشند ، نتیجه می‌شود [با استفاده از فرمول‌های مشابه (E ــ۱۵) برای $\mathscr{P}_a(b)$ و $\mathscr{P}_b(c)$] :

$$\mathscr{P}_a(b, c) = |\langle v_c | w_b \rangle|^2\, |\langle w_b | u_a \rangle|^2 \tag{E ــ۱۷}$$

β . اختلاف اساسی این دوآزمایش

در هردوی‌این آزمایش‌ها ، حالت دستگاه بعد از اندازه‌گیری مشاهده پذیر A ، $|u_a\rangle$ است (نقش‌این اندازه‌گیری این است که این حالت اولیه را تعیین کند) . بعداز آخرین اندازه‌گیری ، یعنی اندازه‌گیری مشاهده‌پذیر C ، حالت آن $|v_c\rangle$ می‌شود (به‌همین دلیل $|v_c\rangle$ را " حالت نهائی " خواهیم نامید) . می‌توانیم در هر دومورد ، حالت دستگاه ، درست قبل از اندازه‌گیری C ، را برحسب ویژه بردارهای B ، $|w_b\rangle$ ، تجزیه کنیم ، و بگوئیم که دستگاه می‌تواند بین حالت $|u_a\rangle$ و حالت $|v_c\rangle$ از چندین " حالت میانی "

مختلف $\langle w_b |$ " عبور کند" هریک از این حالت‌های میانی، یک " مسیر" ممکن بین حالت اولیهٔ $\langle u_a |$ و حالت نهایی $\langle v_c |$ تعیین می‌کند (شکل۶).



شکل ۶.

"مسیرهای" ممکن مختلف بردار حالت دستگاه وقتی که به‌آن اجازه دهیم تا آزادانه (بدون انجام هیچ اندازه‌گیری) بین حالت اولیهٔ $\langle u_a |$ و حالت‌نهایی $\langle v_c |$ تحول پیداکند دراین‌مورد، باید دامنه‌های احتمال وابسته به‌این مسیرهای مختلف را به‌یکدیگر بیفزائیم، و نه احتمالات را.

اختلاف بین دو آزمایش تشریح شده در بالا به‌شرح زیر است: در آزمایش اول، مسیری که دستگاه بین حالت $\langle u_a |$ و حالت $\langle v_c |$ طی کرده است به‌طور تجربی تعیین نمی‌شود [فقط احتمال $\mathscr{P}_a(c)$ برای اینکه با شروع از $\langle u_a |$، به $\langle v_c |$ برسیم اندازه‌گیری می‌شود]. از طرف دیگر، در آزمایش دوم، این مسیر توسط اندازه‌گیری مشاهده‌پذیر B، تعیین‌می‌شود [لذا ما را قادر می‌سازد تا احتمال $\mathscr{P}_a(b, c)$ را برای اینکه دستگاه با شروع از $\langle u_a |$، از یک حالت میانی معین $\langle w_b |$ بگذرد و بالاخره به‌حالت $\langle v_c |$ برسد، به‌دست آوریم].

سپس ممکن‌است وسوسه‌شویم، تابرای ربط دادن $\mathscr{P}_a(c)$ به $\mathscr{P}_a(b, c)$، از استدلال زیر استفاده کنیم: در آزمایش ۱، دستگاه " آزاد است " که از تمام حالت‌های میانی $\langle w_b |$ " عبور کند ". بنابراین به‌نظر می‌رسد که احتمال کل $\mathscr{P}_a(c)$ باید برابر باشد با مجموع‌تمام احتمالهای $\mathscr{P}_a(b, c)$ ی وابسته به‌هر " مسیر" ممکن. در اینصورت آیا نمی‌توانیم بنویسیم:

$$\mathscr{P}_a(c) \stackrel{?}{=} \sum_b \mathscr{P}_a(b, c) \qquad (\text{E}-۱۸)$$

همانطوری که خواهیم دید، این فرمول غلط است. به‌فرمول دقیق (E —۱۵) برای $\mathscr{P}_a(c)$ برمی‌گردیم، این فرمول، دامنهٔ احتمال $\langle v_c | u_a \rangle$ را کمی‌توانیم، بااستفاده از

رابطهٔ بستاری برای حالت‌های $\langle w_b |$ ، به‌صورت زیر بنویسیم وارد می‌کند:

$$\langle v_c | u_a \rangle = \sum_b \langle v_c | w_b \rangle \langle w_b | u_a \rangle \tag{E-۱۹}$$

با جایگزین کردن این عبارت در (E -۱۵) خواهیم داشت:

$$\begin{aligned}\mathscr{P}_a(c) &= \left| \sum_b \langle v_c | w_b \rangle \langle w_b | u_a \rangle \right|^2 \\ &= \sum_b |\langle v_c | w_b \rangle|^2 |\langle w_b | u_a \rangle|^2 + \\ &+ \sum_b \sum_{b' \neq b} \langle v_c | w_b \rangle \langle w_b | u_a \rangle \langle v_c | w_{b'} \rangle^* \langle w_{b'} | u_a \rangle^*\end{aligned} \tag{E-۲۰}$$

لذا ، بااستفاده از (E -۱۷) ، داریم:

$$\mathscr{P}_a(c) = \sum_b \mathscr{P}_a(b, c) + \sum_b \sum_{b' \neq b} \langle v_c | w_b \rangle \langle w_b | u_a \rangle \langle v_c | w_{b'} \rangle^* \langle w_{b'} | u_a \rangle^* \tag{E-۲۱}$$

این معادله ما را قادر می‌سازد تا بفهمیم چرا فرمول (E -۱۸) غلط است: تمام "جملات ضربدری" که در مجذورمدول جمع (E -۱۹) ظاهر می‌شوند ، در (E -۱۸) حذف شده‌اند . بدین ترتیب تمام آثار تداخلی بین مسیرهای مختلف ممکن در (E -۱۸) حذف شده‌اند .

بنابراین ، ملاحظه می‌کنیم که اگر بخواهیم رابطه‌ای بین این دوآزمایش بر قرار سازیم لازم است که براساس دامنه‌های احتمال استدلال کنیم . وقتی حالت‌های میانی دستگاه به‌طور تجربی تعیین نشده‌اند ، دامنه‌های احتمال است که باید جمع شوند ، و احتمالها .

بعلاوه ، اگر اصل موضوع پنجم (تقلیل بسته‌موج) را به‌خاطر بیاوریم ، خطایی استدلالی که منجر به‌رابطه (E -۱۸) شد ، روشن می‌شود . در آزمایش دوم ، اندازه‌گیری مشاهده‌پذیر B باید ، در واقع ، اغتشاشی در دستگاه تحت بررسی وارد کند:

در حین اندازه‌گیری ، بردار حالت آن دچار تغییر سریعی می‌شود (روی یکی از حالتهای $\langle w_b |$ تصویر می‌شود) . همین اغتشاش غیر قابل اجتناب است که مسئول حذف آثار تداخلی است . از طرف دیگر ، در آزمایش اول ، ناصحیح است که گفته شود دستگاه فیزیکی "از یکی از حالت‌های $\langle w_b |$ می‌گذرد" ، درست‌تر این است که بگوئیم دستگاه از تمام حالت‌های $\langle w_b |$ می‌گذرد .

گوشزدها:

(i) بحث اخیر از هرنظر با بحث بخش a -۲-A از فصل اول در رابطه با آزمایش دوشکاف یانگ شباهت دارد . برای تعیین احتمال اینکه یک فوتون صادر شده از

چشمه به‌یک نقطهٔ معین M از پرده خواهد رسید، باید ابتدا میدان الکتریکی کل در M را محاسبه کنیم. دراین مسأله، میدان الکتریکی نقش یک دامنهٔ احتمال‌را بازی می‌کند. وقتی نمی‌خواهیم تعیین کنیم که فوتون از داخل کدام شکاف می‌گذرد، میدانهای الکتریکی تشعشع شده توسط دوشکاف است، و نه‌شدت‌های آنها، که باید با هم جمع شوند تا میدان کل در M را (که مجذور آن احتمال‌مورد نظر را می‌دهد) به‌دست دهد. به‌عبارت دیگر، میدان تابش شده توسط یکی از شکافها در نقطهٔ M نشان دهنده دامنه احتمال فوتونی است که پس‌از صدور از چشمه و قبل از رسیدن به M از این شکاف گذشته است.

(*ii*) لازم نیست این فرض‌را که اندازه‌گیری‌های A و C در آزمایش ۱ و A ، B ، C در آزمایش ۲ ازنظر زمانی خیلی نزدیک به‌یکدیگر انجام می‌شوند، نگه داریم. اگر دستگاه در بین دو تا از این اندازه‌گیری‌ها مجال تحول داشته باشد، می‌توانیم برای تعیین تغییرحالت دستگاه (ناشی از این تحول) از معادله شرودینگر استفاده کنیم [رک مکمل F_{III} ، گوشزد(*ii*) از بخش ۲].

c . نتیجه : *اهمیت مفهوم دامنه‌های احتمال*

دومثالی که در بخشهای a و b مطالعه شدند اهمیت مفهوم‌دامنه‌های احتمال را نشان می‌دهند. فرمول‌های (۵ـ E) و (۱۸ـ E) و همین‌طور استدلالهائی که منجر به‌آنها شد، نادرستند، زیرا نشان دهنده تلاشی هستند که برای محاسبهٔ مستقیم یک‌احتمال‌بدون اینکه ابتدا دامنهٔ‌احتمال مربوطه را در نظر بگیرند، انجام گرفته است. در هر دو مورد عبارت صحیح (۸ـ E) یا (۲۰ـ E) به‌صورت مجذور یک مجموع (به‌طور دقیقتر، مجذور مدول‌های این جمع) است، در حالی که فرمول‌های نادرست (۵ـ E) یا (۱۸ـ E) فقط شامل مجموع مجذورات هستند (تمام جملات ضربدری، که مسئول آثار تداخلی هستند، حذف شده‌اند).

بنابراین، از بحث اخیر، ایده‌های زیر را نگه می‌داریم:

(۱) پیش‌بینی‌های احتمالاتی نظریه کوانتومی همواره با مجذورکردن مدول یک دامنهٔ‌احتمال به‌دست می‌آیند.

(۲) وقتی، دریک آزمایش بخصوص، هیچ اندازه‌گیری‌ای در یک مرحله میانی انجام نمی‌شود، هرگز نباید برحسب احتمالهای نتایج مختلفی که ممکن بود در یک چنین اندازه‌گیری‌هائی به‌دست آید استدلال کرد، بلکه باید برحسب دامنه‌های احتمال آنها

استدلال شود .

(۳) این واقعیت که حالت‌های یک دستگاه فیزیکی به‌طور خطی قابل برهم نهش هستند می‌رساند که یک دامنهٔ احتمال غالبا" به‌صورت مجموعی از دامنه‌های جزئی ظاهر می‌شود . لذا احتمال مربوطه برابر با مجذور مدول مجموعی از جملات است ، و دامنه‌های جزئی مختلف با یکدیگر تداخل می‌کنند .

۴ ــ موردی که در آن چندین حالت می‌توانند وابسته به‌یک نتیجه اندازه‌گیری باشند

در بخش گذشته ، این واقعیت را مورد تأکید قرار دادیم و روشن ساختیم که ، در موارد معینی ، احتمال یک واقعه توسط اصول موضوع مکانیک کوانتومی به‌شکل مجذور یک مجموع از جملات (به‌عبارت دقیق‌تر ، مجذور مدول یک چنین مجموعی) داده می‌شود . اما بیان اصل موضوع چهارم [فرمول (۷ــ B)] ، مجموع مجذورات (مجموع مجذورات مدول‌ها) را وقتی که نتیجهٔ اندازه‌گیری‌ای که احتمال آن را جستجو می‌کنیم ، وابسته به‌یک ویژه مقدار تبهگن باشد ، وارد می‌کند . فهم این مطلب که این دو قاعده متناقض یکدیگر نیستند ، بلکه برعکس، مکمل یکدیگرند ، مهم است : هرجمله از مجموع مجذورات (۷ــ B) خود می‌تواند مجذوریک مجموع باشد . این اولین نکته‌ای است که در این بخش توجه خود را به‌آن معطوف خواهیم ساخت . بعلاوه ، این بحث ما را قادر خواهد ساخت تا بیان اصول موضوع را کامل سازیم : وسائل اندازه‌گیری‌ای را در نظر خواهیم گرفت که دقت آنها محدود باشد (آنچنانکه ، همیشه هست) و خواهیم دید که چگونه بطور نظری نتایج ممکنه را پیش بینی کنیم . بالاخره ، اصل موضوع پنجم در مورد تقلیل بسته موج را به‌مورد طیف‌های پیوسته تعمیم خواهیم داد .

a ــ ویژه مقدارهای تبهگن

هرمثال‌هائی که دربخش ۱ــ E بررسی کردیم ، همواره فرض شدکه نتایج اندازه‌گیری‌های مورد نظر ساده باشند ، مثلا" ، ویژه مقدارهای ناتبهگن مشاهده‌پذیرهای متناظر ، باشند . این فرض بدین منظور بود که این مثالها را ساده کند به‌طوری که منشاء آثار تداخلی تا حد ممکن واضح باشد .

حال ، یک ویژه مقدار تبهگن a_n از یک مشاهده‌پذیر A در نظر بگیرید . ویژه حالت‌های وابسته به a_n یک زیر فضای برداری با بعد g_n ، که درآن می‌توان یک‌پایه‌راست

هنجار $\{ |u_n^i\rangle ; i = 1, 2, ..., g_n \}$ انتخاب کرد ، تشکیل می‌دهند .

بحث بخش b ــ۶ــC نشان می‌دهد که دانستن اینکه یک اندازه‌گیری از A مقدار a_n را داده است برای تعیین حالت دستگاه بعد از این اندازه‌گیری کافی نیست . می‌گوئیم که چندین حالت نهایی می‌توانند به‌یک نتیجهٔ a_n وابسته باشند : اگر حالت اولیه (حالت قبل از اندازه‌گیری) معلوم باشد ، حالت نهایی دستگاه پس از اندازه‌گیری کاملا "معین است ، اما اگر حالت اولیه تغییر کند ، حالت نهایی ، (برای همان نتیجهٔ اندازه‌گیری a_n) . عموما " ، فرق می‌کند . تمام حالت‌های نهایی وابسته به a_n ترکیبات خطی g_n بردار راست‌هنجار $|u_n^i\rangle$ ، با $i = 1, 2, ... g_n$ ، هستند .

فرمول (۷ــ B) بدون ابهام نشان می‌دهد که به‌چه‌طریق احتمال $\mathscr{P}(a_n)$ را برای اینکه اندازه‌گیری A روی دستگاهی که در حالت $\langle \psi |$ است نتیجه a_n را بدهد ، پیداکنیم . یک پایهٔ راست هنجار ، به‌عنوان مثال $\{ |u_n^i\rangle ; i = 1, 2, ..., g_n \}$ ، در ویژه زیرفضای متناظر با a_n انتخاب می‌کنیم ، احتمال $|\langle u_n^i | \psi \rangle|^2$ برای یافتن دستگاه در هر یک از حالت‌های این پایه را محاسبه می‌کنیم ، دراین صورت $\mathscr{P}(a_n)$ مجموع این g_n احتمال است ، لیکن نباید فراموش شود که هراحتمال $|\langle u_n^i | \psi \rangle|^2$ می‌توان مجذور مدول یک مجموع از جملات باشد . به‌عنوان مثال ، مورد بررسی شده در بخش α ــ a ــ۱ــE را در نظر بگیرید و فرض کنید که ویژه مقدار a_n مشاهده‌پذیر A ، که احتمال $\mathscr{P}(a_n)$ آن باید محاسبه شود ، اکنون g_n بار تبهگن باشد . در این صورت فرمول (۶ــ E) توسط رابطهٔ زیر جایگزین می‌شود :

$$\mathscr{P}(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2 \qquad (E-۲۲)$$

که در آن :

$$\langle u_n^i | \psi \rangle = \lambda_1 \langle u_n^i | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle u_n^i | \psi_2 \rangle \qquad (E-۲۳)$$

بحث بخش α ــ a ــ۱ــ E برای هریک از جملات فرمول (۲۲ــ E) معتبر می‌ماند : $|\langle u_n^i | \psi \rangle|^2$ ، که از (۲۳ــ E) به‌دست آمده است ، مجذور یک مجموع است ، بنابراین $\mathscr{P}(a_n)$ مجموع این مجذورات است . به‌طریق مشابهی بخش b ــ۱ــE می‌تواند به‌موردی که ویژه مقدارهای مشاهده‌پذیرهای اندازه‌گیری شده تبهگن باشند تعمیم داده شود .

قبل از خلاصه کردن بحث‌های قبل ، می‌خواهیم یک وضعیت مهم دیگر را که در آن چندین حالت‌نهایی به‌یک نتیجهٔ اندازه‌گیری وابسته‌اند مطالعه کنیم .

b ــ وسائل اندازه‌گیری‌ای که به‌حدکافی حساس نیستند

α . تعریف

فرض کنید که، برای اندازه‌گیری مشاهده‌پذیر A در یک دستگاه فیزیکی معین، وسیله‌ای که در اختیار داریم به‌طریق زیر کار می‌کند:

(۱) این وسیله می‌تواند فقط دوجواب مختلف بدهد *، که برای سهولت آنها را با "آری" و "نه" مشخص می‌کنیم.

(۲) اگر دستگاه در یک ویژه حالت A که ویژه مقدار آن در داخل یک بازه معین Δ از محور حقیقی است قرار داشته باشد، جواب همواره "آری" است، وقتی حالت دستگاه هر ترکیب خطی از ویژه حالت‌های A وابسته به‌ویژه مقدارهائی که همگی در داخل بازه Δ هستند باشد، نیز جواب "آری" است.

(۳) اگر حالت دستگاه ویژه حالتی از A که ویژه مقدار آن در خارج Δ قرار گیرد، یا هرترکیب خطی از چنین ویژه حالت‌هایی، باشد جواب همواره "نه" است.

بنابراین، Δ قدرت تفکیک وسیله‌اندازه‌گیری مورد نظر را مشخص می‌کند. اگر در فاصله Δ فقط یک ویژه مقدار a_n متعلق به A وجودداشته باشد، قدرت تفکیک بینهایت است: وقتی دستگاه در یک حالت دلخواه باشد، احتمال $\mathscr{P}$(آری) برای یافتن جواب "آری" برابراست با احتمال یافتن a_n در یک اندازه‌گیری A، مسلما" احتمال $\mathscr{P}$(نه) برای یافتن " نه " برابر است با $1-\mathscr{P}$(آری). از طرف دیگر، اگر Δ شامل چندین‌ویژه مقدار A باشد، وسیله مزبور دارای قابلیت تفکیک کافی، برای تمیز این ویژه مقدارهای مختلف از یکدیگر، نیست: می‌گوئیم که این وسیله گزینشگر نیست. خواهیم دید که چگونه $\mathscr{P}$(آری) و $\mathscr{P}$(نه) را دراین مورد محاسبه می‌کنیم.

برای اینکه قادر باشیم اغتشاشی راکه یک‌چنین اندازه‌گیری درحالت‌دستگاه ایجاد می‌کند مطالعه کنیم. فرضیه زیر را اضافه می‌کنیم: وسیله اندازه‌گیری، ویژه حالت‌های A وابسته به‌ویژه مقدارهای واقع در فاصله Δ (و همین‌طور هرترکیب خطی این حالتها) را بدون اغتشاش منتقل می‌کند، در حالی که، " مانع " عبور ویژه حالت‌های A وابسته به‌ویژه مقدارهای خارج از Δ (و همین‌طور تمام ترکیبات خطی آنها) می‌شود. بدین ترتیب، این وسیله مانند یک صافی کامل برای تمام حالت‌های وابسته به Δ عمل می‌کند.

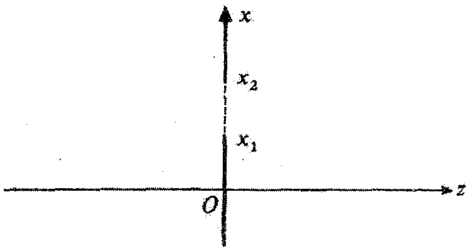
---

* استدلال‌های بعدی می‌توانند به‌آسانی به‌مواردی که در آنها وسیله می‌تواندچندین‌جواب مختلف با مشخصات مشابه با آنهائی که در (۲)و(۳) آمده‌اند، بدهد، تعمیم داده‌شوند

β ــ مثال

اغلب وسایل اندازه‌گیری که درعمل به‌کاربرده‌می‌شوند به‌حدکافی‌گزینش‌گرنیستند.

به‌عنوان مثال، برای اندازه‌گیری مختصه (طول) یک الکترون که‌به‌موازات‌محور Oz انتشار می‌یابد، می‌توانیم (شکل ۷) درصفحه xOy (Oy برصفحه شکل عمود است) صفحه‌ای با یک شکاف که محور آن با Oy موازی است قرار دهیم، طول‌های لبه‌های‌شکاف x_1 و x_2 هستند. دراین صورت می‌توان دید که هربسته موجی که کاملا" بین صفحات $x = x_1$ و $x = x_2$ قرار داشته باشد (یک‌برهم‌نهش از ویژه‌حالت‌های X که ویژه مقدارهای x آنهادر فاصله $[x_1, x_2]$ واقع است) وارد ناحیهٔ راست شکاف خواهد شد (جواب "آری")، در این مورد، بسته موج دچار هیچ تغییری نخواهد شد. از طرف دیگر، هربسته موج واقع در زیر صفحهٔ $x = x_1$ یا دربالای صفحه $x = x_2$ توسط صفحه سد خواهد شد و به‌سمت راست عبور نخواهد کرد (جواب "نه").



شکل ۷.
طرح وارهٔ یک وسیله برای اندازه‌گیری مختصهٔ طول یک ذره. چون فاصله $\{x_1, x_2\}$ لزوما" غیرصفر است، چنین وسیله‌ای همواره به‌حدکافی‌گزینش‌گر نیست.

γ . توصیف کوانتومی

برای یک وسیله که به‌حد کافی گزینش‌گر نیست، بعد از اندازه‌گیری‌ای که‌جواب‌آری را به‌دست دهد، چندین حالت نهایی، به‌عنوان مثال، ویژه‌حالت‌های مختلف A که باویژه مقدارهای بازه Δ متناظرند، امکان‌پذیر است.

مسألهٔ فیزیکی‌ای که در باره چنین وسایلی مطرح می‌شود، و ما می‌خواهیم اکنون بررسی‌کنیم، پیش بینی جوابی است که وقتی دستگاه در یک حالت دلخواه وارد وسیله‌شود،

به‌دست خواهد آمد . به‌عنوان مثال ، برای وسیله شکل ۷ ، وقتی با بسته موجی مواجه شویم که نه کلا" بین صفحات $x = x_1$ و $x = x_2$ واقع باشد (که در آن صورت جواب مسلما " آری است) و نه کلا" در خارج این ناحیه (که در آن صورت جواب مسلما " "نه" است) ، چه اتفاق می‌افتد؟ خواهیم دید که این وضعیت معادل است بااندازه‌گیری مشاهده‌پذیری که طیف آن تبهگن است .

زیر فضای $\mathscr{E}_\Delta$ را که توسط تمام ویژه حالت‌های A که ویژه مقدارهای a_n آنها در داخل بازه Δ است ، به وجود آمده است در نظر بگیرید . تصویرگر P_Δ روی این زیر فضا به‌صورت زیر نوشته می‌شود (رک بخش γ ــ b ــ ۳ــ B از فصل دوم) :

$$P_\Delta = \sum_{a_n \in \Delta} \sum_{i=1}^{g_n} | u_n^i \rangle \langle u_n^i | \qquad (E-24)$$

(شاخص اضافی i برای این است که ویژه مقدارهای a_n بازه Δ می‌توانند تبهگن باشند ، بردار $| u_n^i \rangle$ راست هنجار فرض می‌شود) . $\mathscr{E}_\Delta$ زیر فضایی است‌که‌توسط تمام حالت‌های ممکن دستگاه بعداز اندازه‌گیری‌ای که نتیجه آری داده است تشکیل شده است .

بامراجعه به‌تعریف وسیلهٔ اندازه‌گیری ، ملاحظه می‌کنیم که پاسخ برای هرحالت متعلق به $\mathscr{E}_\Delta$ ، یعنی ، برای هر ویژه حالت P_Δ با ویژه مقدار ۱+ ، محققا " آری است . برای هرحالت متعلق به‌مکمل $\mathscr{E}_\Delta$ ، یعنی ، برای هر ویژه‌حالت P_Δ با ویژه مقدار ٠ ، پاسخ‌محققا" نه است . بنابراین جوابهای آری و نه که توسط وسیله اندازه‌گیری حاصل می‌شوند متناظرند با ویژه مقدارهای ۱+ و ٠ برای مشاهده پذیر P_Δ : می‌توان گفت که وسیله ، درواقع ، بجای A مشاهده‌پذیر P_Δ را اندازه‌گیری می‌کند .

در پرتو این تعبیر ، مورد یک وسیلهٔ اندازه‌گیری که به‌حدکافی گزینش گر نباشند می‌تواند در چارچوب اصول موضوعی که بیان کرده‌ایم بررسی شود . احتمال (آری) $\mathscr{P}$ برای به‌دست آوردن جواب آری برابر است با احتمال یافتن ویژه مقدار (تبهگن) ۱+ برای P_Δ . حال ، یک پایهٔ راست‌هنجار در ویژه زیر فضای متناظر وجود دارد که توسط مجموعه حالت‌های $| u_n^i \rangle$ که ویژه حالت‌های A با ویژه مقدارهای واقع در بازه Δ هستند ، ساخته می‌شود . لذا ، با اعمال فرمول (۷ــ B) به‌ویژه مقدار ۱+ برای مشاهده‌پذیر P_Δ (برای یک دستگاه در حالت $| \psi \rangle$) خواهیم داشت :

$$\mathscr{P}(\text{آری}) = \sum_{a_n \in \Delta} \sum_{i=1}^{g_n} | \langle u_n^i | \psi \rangle |^2 \qquad (E-25)$$

چون فقط دوجواب ممکن وجود دارد ، داریم :

$$\mathscr{P}(\text{نه}) = 1 - \mathscr{P}(\text{آری}) \qquad (E-26)$$

تصویرگر روی ویژه زیر فضای وابسته به‌ویژه مقدار ۱+ مشاهده‌پذیر P_Δ ، خود P_Δ است ، بنابراین ، فرمول (۱۴ــ B) در اینجا می‌دهد :

$$\mathscr{P}\ (\text{آری}) = \langle \psi | P_\Delta | \psi \rangle \qquad (\text{E}-۲۷)$$

[این فرمول معادل (۲۵ــ E) است] .

به‌طور مشابه ، چون وسیله حالت‌های متعلق به $\mathscr{E}_\Delta$ را مغشوش نمی‌کند و حالتهای متعلق به‌مکمل $\mathscr{E}_\Delta$ را سد می‌کند ، در می‌یابیم که حالت دستگاه بعد از اندازه‌گیری‌ای‌که نتیجهٔ آری داده است‌عبارت است از :

$$| \psi' \rangle = \frac{1}{\sqrt{\sum_{a_n \in \Delta} \sum_{i=1}^{g_n} | \langle u_n^i | \psi \rangle |^2}} \sum_{a_n \in \Delta} \sum_{i=1}^{g_n} | u_n^i \rangle \langle u_n^i | \psi \rangle \qquad (\text{E}-۲۸)$$

یعنی :

$$| \psi' \rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle \psi | P_\Delta | \psi \rangle}} P_\Delta | \psi \rangle \qquad (\text{E}-۲۹)$$

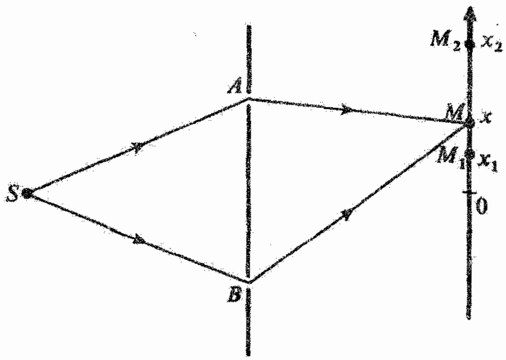
وقتی Δ فقط یک ویژه مقدار a_n را در برگیرد ، P_Δ به P_n کاهش می‌یابد : در این صورت ملاحظه می‌کنیم که فرمول‌های (۱۴ــ B) و (۳۱ــ B) موارد خاصی از فرمول‌های (۲۷ ــ E) و (۲۹ــ E) هستند .

c ــ *خلاصه : آیا باید دامنه‌ها را باهم جمع کنیم یا احتمالها را ؟*

بنابراین مواردی وجود دارد (بخش۱ــ E) که در آنها ، برای محاسبهٔ یک‌احتمال مجذور یک مجموع را می‌گیریم ، زیرا چندین دامنهٔ احتمال باید به‌هم افزوده شوند .در موارد دیگر (بخش۲ــ E) ، مجموع مجذورات را می‌گیریم ، زیرا چندین احتمال باید به‌هم افزوده شوند . مهم است که این دومورد متفاوت را با هم اشتباه نکنیم و بدانیم که، دریک وضعیت معین ، آیا دامنه‌های احتمال هستند که باید با هم جمع شوند یا خود احتمال‌ها .

آزمایش دوشکاف یانگ بازهم برای ما مثال فیزیکی بسیار مناسبی فراهم می‌آوردکه مارا قادر می‌سازد تا بحث‌های اخیر را روشن و خلاصه کنیم . فرض کنید می‌خواهیم احتمال این را که یک فوتون بخصوص بین دونقطه M_1 و M_2 به‌طولهای x_1 و x_2 به پرده برخوردکند محاسبه کنیم (شکل۸) . این احتمال متناسب است با شدت کل نور دریافت شده توسط این قسمت از صفحه، و در نتیجه، برابر است با یک" مجموع از مجذورات" ، به‌عبارت دقیق‌تر،

برابراست با انتگرال شدت $I(x)$ بین x_1 و x_2 . اما هر جملهٔ $I(x)$ از این مجموع با مجذورکردن میدان الکتریکی $\mathcal{E}(x)$ در x ، که برابر است با مجموع میدان‌های الکتریکی $\mathcal{E}_A(x)$ و $\mathcal{E}_B(x)$ در M که به‌وسیلهٔ شکافهای A و B تابیده شده‌اند به‌دست می‌آید . بنابراین ، $I(x)$ با $|\mathcal{E}_A(x) + \mathcal{E}_B(x)|^2$ ، یعنی ، بامجذوریک‌مجموع ، متناسب‌است . $\mathcal{E}_A(x)$ و $\mathcal{E}_B(x)$ عبارتند از دامنه‌های وابسته به دومسیر ممکن SAM و SBM که به‌یک نقطه M ختم‌می شوند ، برای به‌دست‌آوردن دامنه در M این‌دو را باهم جمع می‌کنیم زیرا نمی‌خواهیم تعیین کنیم که فوتون از داخل کدام شکاف می‌گذرد . بنابراین ، برای محاسبه‌شدت‌کل‌نوری که توسط بازه M_1M_2 دریافت می‌شود ، شدتهایی را که به‌نقاط مختلف این بازه می‌رسدباهم جمع می‌کنیم .



شکل ۸ .

آزمایش دوشکاف یانگ . برای محاسبهٔ چگالی احتمال‌آشکارسازی‌یک‌فوتون در نقطه M ، لازم‌است که میدان‌های الکتریکی تابش‌شده توسط شکاف‌های A و B را با هم جمع، و سپس میدانی را که به‌این ترتیب به‌دست آمده‌است مجذورکنیم (" مجذور مجموع ") . احتمال یافتن یک فوتون دربازه $[x_1, x_2]$ باجمع‌کردن این چگالی احتمال بین x_1 و x_2 به‌دست می‌آید ("مجموع مجذورات ") .

به‌طور خلاصه، ایده‌اساسی‌ای که باید از بحث‌های این بخش به‌خاطر بسپاریم می‌تواند به‌طور طرح‌وار به‌صورت زیر بیان شود :

نخست دامنه‌های متناظر بایک حالت نهائی را باهم جمع‌می‌کنیم ، سپس احتمالهای متناظر با حالتهای نهائی متعامد را .

d ــ کاربرد در بررسی طیف‌های پیوسته

وقتی مشاهده‌پذیری را که می‌خواهیم اندازه‌گیری‌کنیم دارای طیف پیوسته‌ای باشد فقط وسائلی که به‌حد کافی گزینش‌گر باشند می‌توانند مورد استفاده قرارگیرند: تصور یک وسیله فیزیکی که بتواند یک ویژه مقدار منفرد متعلق به‌یک مجموعهٔ پیوسته را جدا کند غیر ممکن است. دراینجا خواهیم دید که چگونه مطالعهٔ بخش b ــ۲ــE ما را قادر می‌سازدتا در بررسی مشاهده‌پذیرهای با طیف‌های پیوسته دقیقتر و کاملتر باشیم.

α ــ مثال: اندازه‌گیری مکان یک ذره

فرض کنید $\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle$ تابع موج یک ذره (بدون اسپین) باشد. احتمال‌یافتن مختصهٔ طول این ذره در داخل بازه $[x_1, x_2]$ از محور x ها، با به‌کارگرفتن، مثلاً"، یک وسیله اندازه‌گیری نظیر وسیله شکل۷، چقدر است؟

زیر فضای $\mathscr{E}_A$ وابسته به‌این نتیجهٔ اندازه‌گیری فضائی است که به‌وسیلهٔ کت‌های $|\mathbf{r}\rangle = |x, y, z\rangle$ که درآنها: $x_1 \leqslant x \leqslant x_2$ پدید آمده‌است. چون این کت‌ها، به‌مفهوم گسترده، راست‌هنجار هستند، اعمال قاعدهٔ بیان شده در بخش c ی بالا می‌دهد:

$$\begin{aligned}\mathscr{P}(x_1 \leqslant x \leqslant x_2) &= \int_{x_1}^{x_2} \mathrm{d}x \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}y \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}z \, |\langle x, y, z | \psi \rangle|^2 \\ &= \int_{x_1}^{x_2} \mathrm{d}x \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}y \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}z \, |\psi(\mathbf{r})|^2\end{aligned} \tag{E ــ۳۰}$$

فرمول (E ــ۲۷) آشکارا به‌همین نتیجه منتهی می‌شود، زیرا تصویرگر P_A دراینجا به‌صورت زیر نوشته می‌شود:

$$P_A = \int_{x_1}^{x_2} \mathrm{d}x \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}y \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}z \, | x, y, z \rangle \langle x, y, z | \tag{E ــ۳۱}$$

و بنابراین داریم:

$$\begin{aligned}\mathscr{P}(x_1 \leqslant x \leqslant x_2) &= \langle \psi | P_A | \psi \rangle \\ &= \int_{x_1}^{x_2} \mathrm{d}x \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}y \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}z \, \langle \psi | x, y, z \rangle \langle x, y, z | \psi \rangle\end{aligned} \tag{E ــ۳۲}$$

برای دانستن حالت $|\psi'\rangle$ ذره بعداز یک چنین اندازه‌گیری، که نتیجهٔ آری‌داده است، کافی است فرمول (E ــ۲۹) را به‌کار بریم:

$$|\psi'\rangle = \frac{1}{N} P_\Delta |\psi\rangle$$
$$= \frac{1}{N}\int_{x_1}^{x_2} dx' \int_{-\infty}^{+\infty} dy' \int_{-\infty}^{+\infty} dz' \,|x', y', z'\rangle\langle x', y', z'|\psi\rangle \qquad (E-۳۳)$$

که در آن عامل بهنجارش $N = \sqrt{\langle\psi|P|\psi\rangle}$ معلوم است [فرمول (E-۳۲)] . حال تابع $\psi'(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}|\psi'\rangle$ وابسته به‌کت $\langle\psi|$ را محاسبه کنیم :

$$\langle \mathbf{r}|\psi'\rangle = \frac{1}{N}\int_{x_1}^{x_2} dx' \int_{-\infty}^{+\infty} dy' \int_{-\infty}^{+\infty} dz' \,\langle \mathbf{r}|\mathbf{r}'\rangle\,\psi(\mathbf{r}') \qquad (E-۳۴)$$

اما $\langle \mathbf{r}|\mathbf{r}'\rangle = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \delta(x-x')\,\delta(y-y')\,\delta(z-z')$. لذا انتگرالهای روی y' و z' را می‌توان بلافاصله محاسبه‌کرد : این عمل با جایگزینی y' و z' توسط y و z در تابعی که باید از آن انتگرال‌گیری شود انجام می‌گیرد . بدین ترتیب معادلهٔ (E-۳۴) می‌شود :

$$\psi'(x, y, z) = \frac{1}{N}\int_{x_1}^{x_2} dx'\,\delta(x-x')\,\psi(x', y, z) \qquad (E-۳۵)$$

اگر نقطه $x = x'$ در داخل بازه انتگرال‌گیری $[x_1, x_2]$ واقع باشد ، نتیجه همانست که انتگرال‌گیری از $-\infty$ تا $+\infty$ به‌دست می‌داد :

$$\psi'(x, y, z) = \frac{1}{N}\psi(x, y, z) \qquad x_1 \leqslant x \leqslant x_2 \qquad (E-۳۶)$$

از طرف دیگر ، اگر $x = x'$ درخارج بازه انتگرال‌گیری قرارداشته باشد $\delta(x-x')$ به‌ازاء تمام مقادیر x' واقع دراین بازه صفر است ، و داریم :

$$\psi'(x, y, z) = 0 \qquad x > x_2 \quad \text{و} \quad x < x_1 \qquad (E-۳۷)$$

بنابراین ، قسمتی از $\psi(\mathbf{r})$ که متناظر با بازه قبول شده توسط وسیلهٔ اندازه‌گیری است ، بلافاصله بعد از اندازه‌گیری ، بدون تغییر باقی می‌ماند [عامل $1/N$ فقط بهنجار ماندن $\psi'(\mathbf{r})$ را تأمین می‌کند] ، بقیهٔ قسمت‌ها توسط اندازه‌گیری حذف می‌شوند . " سروته"بسته موج $\psi(\mathbf{r})$ که معرف حالت اولیهٔ ذره است به‌نوعی توسط لبه‌های شکاف"زده" شده است .

گوشزدها :

(i) این مثال ، بوضوح معنی واقعی " تقلیل بسته موج " را آشکار می‌سازد .

(ii) اگر تعداد زیادی از ذرات ، که همگی در یک حالت $\langle\psi|$ قرار دارند ، متوالیا " وارد وسیله‌شوند ، جواب‌گاهی‌آری وگاهی نه [باا حتمال‌های (آری) $\mathscr{P}$ و (نه) $\mathscr{P}$]

خواهد بود . اگر نتیجه آری باشد ، ذره ، با حالت " سروته‌زده " $\langle \psi' |$ ، به‌راهش ادامه خواهد داد ، اگر نه باشد ، ذره توسط پرده جذب خواهد شد .

درمثالی‌که دراینجا بررسی می‌کنیم ، هرچه $x_2 - x_1$ کوچک‌ترباشدوسیله‌اندازه‌گیری گزینش گرتر می‌شود . لیکن ، ملاحظه می‌کنیم‌که غیرممکن‌است بتوانیم‌آنرا کاملا " گزینش‌گر کنیم زیرا طیف X پیوسته است : شکاف هراندازه هم باریک باشد ، بازه $[x_1, x_2]$ ای را که تعیین می‌کند همیشه شامل بی‌نهایت ویژه مقدار است . با وجود این ، در مورد حدی یک شکاف با پهنای بی‌نهایت کوچک Δx ، معادل فرمول (۱۷ـ B) را ، که بیان ریاضی اصل موضوع چهارم در مورد یک طیف پیوسته بود به‌دست ، می‌آوریم . حال $x_1 = x_0 - \frac{\Delta x}{2}$ و $x_2 = x_0 + \frac{\Delta x}{2}$ (یک شکاف به‌به‌پهنای Δx بمرکز x_0) انتخاب کنید و فرض کنید که تابع $\psi(\mathbf{r})$ در بازه Δx خیلی‌کم تغییر کند . در این صورت ، می‌توانیم در (۳۰ـ E) تابع $|\psi(\mathbf{r})|^2$ را توسط $|\psi(x_0, y, z)|^2$ جایگزین ، و روی x انتگرال‌گیری کنیم :

$$\mathscr{P}\left(x_0 - \frac{\Delta x}{2} \leqslant x \leqslant x_0 + \frac{\Delta x}{2}\right) \simeq \Delta x \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}y \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}z \;\; |\psi(x_0, y, z)|^2 \qquad (\text{E}-۳۸)$$

در واقع احتمالی به‌دست می‌آوریم که برابرست با حاصلضرب Δx در یک کمیت مثبتی که نقش چگالی احتمال در نقطه x_0 را ایفا می‌کند . تفاوت این فرمول با فرمول (۱۷ـ B) در این واقعیت نهفته است که‌فرمول (۱۷ـ B) به‌مورد یک طیف پیوسته ولی ناتبهگن اعمال می‌شود ، در حالی که دراینجا ویژه مقدارهای X در $\mathscr{E}_{\mathbf{r}}$ بی‌نهایت تبهگن‌اند ، این منشاء انتگرالهای روی y و z است که در (۳۸ـ E) ظاهر می‌شود (جمع‌بندی روی شاخصهای وابسته به‌تبهگنی) .

β . اصل موضوع تقلیل بسته‌موج‌ها در مورد یک طیف پیوسته

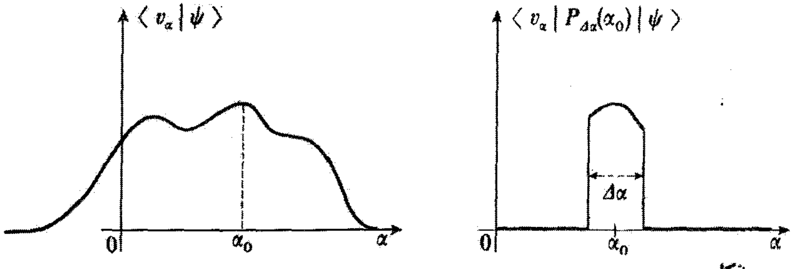
در بخش c ـ۳ـ B ، در بیان اصل موضوع پنجم ، خود را به‌مورد یک طیف‌گسسته محدودساختیم . فرمول (۳۳ـ E) و بحث همراه‌آن مارا قادرمی‌سازد تاشکلی راکه این اصل موضوع ، وقتی که یک طیف پیوسته را بررسی می‌کنیم اختیار می‌کند بفهمیم : کافی‌است‌نتایج بخش b ـ۲ـ E در رابطه با وسائلی را که به‌حدکافی گزینش گر نیستند به‌کاربریم .

فرض کنید A یک مشاهده‌پذیر با یک طیف پیوسته (که برای سهولت ، نا تبهگن فرض می‌شود) باشد ، نمادگذاری با نمادگذاری بخش β ـ b ـ۳ـ B یکسان است .

> اگر اندازه‌گیری A روی دستگاهی درحالت $\rangle\psi|$ منجربه‌نتیجه α_0 ،باتقریب $\Delta\alpha$ ، شده باشد ، حالت دستگاه بلافاصله پس‌از این اندازه‌گیری با کت زیر توصیف می‌شود :
>
> $$|\psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle\psi|P_{\Delta\alpha}(\alpha_0)|\psi\rangle}} P_{\Delta\alpha}(\alpha_0)|\psi\rangle \qquad (\text{E}-۳۹)$$
>
> که در آن
>
> $$P_{\Delta\alpha}(\alpha_0) = \int_{\alpha_0-\frac{\Delta\alpha}{2}}^{\alpha_0+\frac{\Delta\alpha}{2}} d\alpha\, |v_\alpha\rangle\langle v_\alpha| \qquad (\text{E}-۴۰)$$

شکل‌های a ــ۹ و b ــ ۹ این بیان را متجلی می‌کنند . اگر تابع $\langle v_\alpha|\psi\rangle$ که معرف $\rangle\psi|$ در پایه $\{|v_\alpha\rangle\}$ است ، به‌صورتی که درشکل a ــ۹ نشان داده شده است باشد ، حالت این دستگاه بلافاصله بعدازاندازه‌گیری ، باتقریب یک عامل بهنجارش، توسط تابع شکل b ــ۹ نشان داده می‌شود [محاسبه از هر لحاظ مشابه بامحاسبه‌ای است که (۳۶ــ E) و (۳۷ــ E) را از (۳۳ــ E) به‌دست می‌آورد] .

ملاحظه می‌کنیم که ، حتی اگر $\Delta\alpha$ بسیار کوچک باشد ، هرگز نمی‌توانیم واقعاً" دستگاه را درحالت $\rangle v_{\alpha_0}|$ که، درپایه $\{|v_\alpha\rangle\}$ ، توسط $\langle v_\alpha|v_{\alpha_0}\rangle = \delta(\alpha-\alpha_0)$ نشان‌داده می‌شود ، بیاوریم . فقط می‌توانیم یک تابع باریک که در α_0 متمرکز است به‌دست آوریم ، زیرا $\Delta\alpha$ هرگز صفر نمی‌شود .



شکل ۹.

نمایش اصل موضوع تقلیل بسته موج‌ها در مورد یک طیف پیوسته : مشاهده‌پذیر A ، باویژه‌بردارهای $\rangle v_\alpha|$ و ویژه مقدارهای α ، را اندازه‌گیری می‌کنیم . وسیله اندازه‌گیری دارای قدرت گزینش $\Delta\alpha$ است ، اگر مقدار به‌دست آمده ، باتقریب $\Delta\alpha$ ، برابر α_0 باشد .اثراندازه‌گیری روی تابع موج $\langle v_\alpha|\psi\rangle$ اینستکه سروته آنرا در حوالی مقدار α_0 . قطع کند (برای بهنجارکردن تابع موج جدید ، آشکارا لازم است که آنرا در ضریبی بزرگتر از ۱ ضرب کنیم) .

مراجع و پیشنهادات برای مطالعه بیشتر:

توسعهٔ مفاهیم مکانیک‌کوانتومی: مراجع بخش ۴ کتاب‌شناسی، بخصوص (4.8) Jammer.

بحث در باره تعبیر اصول موضوع: مراجع بخش ۵ کتاب‌شناسی،
Von Neumann (10.10), chaps. V and VI; Feynman III (1.2), §2.6, chap. 3 and §8.3

قواعد کوانتش با استفاده از کروشه‌های پواسن: Dirac (1.13), §21; Schiff (1.18), §24

احتمال و آمار: رک زیر بخش مربوطه از بخش ۱۰ کتاب‌شناسی.

مکملهای فصل سوم

A_{III} : ذره در یک‌چاه پتانسیل‌نامحدود B_{III} : مطالعه جریان احتمال در چند مورد خاص	A_{III} و B_{III} : کاربردهای مستقیم فصل سوم به‌موارد ساده. تأکید بربحث فیزیکی نتایج (در سطح مقدماتی) است.
C_{III} : انحرافهای ریشه‌های میانگین مربعی دومشاهده‌پذیر همیوغ	C_{III} : کمی صوری‌تر بااثبات‌عمومی‌روابط عدم قطعیت هایزنبرگ، درقرائت‌مرتبهٔ‌اول‌می‌توان از آن گذشت.
D_{III} : اندازه‌گیریهایی که فقط روی یک قسمت از دستگاه فیزیکی انجام می‌شود.	D_{III} : بحث اندازه‌گیریهای انجام شده فقط روی یک‌قسمت ازدستگاه، کاربرد نسبتاً آسان ولی تاحدی صوری فصل سوم، در قرائت اول می‌توان از آن گذشت.
E_{III} : عملگر چگالی F_{III} : عملگر تحول G_{III} : دیدگاههای شرودینگروهایزنبرگ H_{III} : تغییرناپذیری پیمانه‌ای J_{III} : انتشاردهندهٔ معادلهٔ شرودینگر	E_{III}، F_{III}، G_{III}، H_{III}، J_{III} : مکملهای مقدمه دوره‌های پیشرفته‌تر مکانیک کوانتومی بجز F_{III}، که ساده‌است، بقیه درسطحی بالاتر از سطح بقیه‌کتاب است، اما اگر فصل سوم قبلاً خوانده شده‌باشد، قابل فهم‌اند. برای مطالعه بعدی گذاشته شود. E_{III} : تعریف و خواص عملگر چگالی که در توصیف کوانتومی دستگاههائی که حالت آنها به‌طورناکامل‌معلوم‌است (آمیزهٔ‌آماری‌حالتها) به‌کار می‌رود، ابزاراساسی مکانیک آماری کوانتومی. F_{III} : معرفی عملگر تحول، که‌حالت کوانتومی یک دستگاه درلحظهٔ‌دلخواه t را برحسب حالت آن در لحظه t_0 به‌دست می‌دهد. G_{III} : توصیف تحول یک دستگاه کوانتومی

با دیدگاهی متفاوت ولی معادل با دیدگاه فصل سوم . در این دیدگاه بستگی زمانی در مشاهده‌پذیرها ظاهر می‌شود و نه در حالت دستگاه .

H_{III} : بحث صورتبندی کوانتومی در موردی که دستگاه تحت تأثیر یک میدان الکترومغناطیسی قرار دارد . با وجودی که توصیف دستگاه پتانسیلهای الکترومغناطیسی را وارد می‌کنند ، خواص فیزیکی فقط به مقادیر میدانهای الکتریکی و مغناطیسی بستگی دارد ،وقتی پتانسیلهای توصیف‌کنندهٔ میدان الکترومغناطیسی را تغییر دهیم ، تغییر ناپذیر باقی می‌مانند .

J_{III} : مقدمه‌ای برروش دیگر برای بررسی مکانیک‌کوانتومی که براصلی مشابه با اصل هویگنس دراپتیک‌موجی‌کلاسیکی بنا شده‌است.

K_{III} : حالتهای ناپایدار . طول عمر

K_{III} : بحث‌ساده‌مفاهیم‌فیزیکی مهم‌ناپایداری و طول‌عمر ، آسان‌است ولی برای مطالب‌بعدی ضروری نیست .

L_{III} : تمرینات

M_{III} : حالتهای مقید یک‌ذره در یک "چاه‌پتانسیل"باشکل دلخواه

N_{III} : حالتهای نا مقید یک ذره در حضور یک چاه یا سد پتانسیل با شکل دلخواه

O_{III} : خواص کوانتومی یک‌ذره دریک ساختار تناوبی یک بعدی

O_{III} ، N_{III} ، M_{III} : بازگشت به‌بررسی مسائل یک‌بعدی ،بادیدگاهی عمومی‌تر ازدیدگاههای فصل اول ومکملهای آن در این مورد .

M_{III} : تعمیم‌نتایج‌اصلی‌به‌دست‌آمده دربخش c ــ ۲ ازمکمل H_I به‌یک چاه پتانسیل‌دلخواه ، توصیه می‌شود ،زیرا هم‌آسان‌است و هم ازنظر فیزیکی مهم .

N_{III} : مطالعه حالتهای مانای نامقید در یک

پتانسیل دلخواه ،قدری صوری‌تر ، تعـاریف و نتایج این مکمل برای مطالعه مکمل O_{III} ضروری است .

O_{III} : وارد کردن مفهوم نوارهای انرژی (که برای فیزیک حالت جامد اساسی‌است) در یک پتانسیل ساختار تناوبی (ایـن‌مفهوم به‌طـور متفاوتی درمکمل F_{XI} بررسی خواهـــد شد) ، نسبتا" مشکل است و می‌توانـــد برای مطالعـه گذاشته شود .

مکمل A_{III}

ذره دریک چاه پتانسیل مربعی

۱ ــ توزیع مقادیر تکانه در یک حالت مانا

a ــ محاسبهٔ تابع $\overline{\varphi}_n(p)$ ، $\langle P \rangle$ و ΔP

b ــ بحث فیزیکی

۲ ــ تحول تابع موج ذره

a ــ تابع موج در لحظهٔ t

b ــ تحول شکل بسته موج

c ــ حرکت مرکز بسته موج

۳ ــ اغتشاش ایجاد شده توسط اندازه‌گیری مکان

در مکمل H_I (بخش β ــ c ــ ۲) حالتهای مانای یک ذره در یک چاه پتانسیل نامحدود یک‌بعدی را مورد مطالعه قراردادیم . دراینجا قصدداریم این‌مطالعه را بادیدگاه‌فیزیکی‌تری از سربگیریم . این‌امر به‌ما اجازه خواهد داد تابعضی ازاصول موضوع فصل‌سوم را به‌یک مورد واقعی اعمال کنیم . بویژه توجه خود را به‌نتایجی که اندازه‌گیری مکان یا تکانه ذره می‌تواند به‌دست دهد معطوف خواهیم داشت .

۱ ــ توزیع مقادیر تکانه در یک حالت مانا

a ــ محاسبهٔ تابع $\overline{\varphi}_n(p)$ ، $\langle P \rangle$ و ΔP

قبلاً" دیدیم که حالتهای مانای ذره با انرژیهای *:

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \tag{1}$$

و توابع موج:

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \tag{2}$$

---

* نمادگذاری‌ها همانهائی هستند که در مکمل H_I مورد استفاده قرار گرفته بودند .

(که در آن a پهنای چاه و n یک عدد درست مثبت دلخواه است) متناظرند .

یک ذره را در حالت $\langle \varphi_n |$ ، باانرژی E_n ، درنظر بگیرید . احتمال اینکه یک اندازه‌گیری تکانه P ی ذره نتیجه‌ای بین p و $p + \mathrm{d}p$ بدهد برابر است با :

$$\overline{\mathscr{P}}_n(p)\, \mathrm{d}p = |\overline{\varphi}_n(p)|^2\, \mathrm{d}p \tag{۳}$$

که در آن

$$\overline{\varphi}_n(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \mathrm{e}^{-ipx/\hbar}\, \mathrm{d}x \tag{۴}$$

این انتگرال را می‌توان بسادگی محاسبه کرد ، مقدار آن برابر است با :

$$\begin{aligned} \overline{\varphi}_n(p) &= \frac{1}{2i\sqrt{\pi\hbar a}} \int_0^a \left[\mathrm{e}^{i\left(\frac{n\pi}{a} - \frac{p}{\hbar}\right)x} - \mathrm{e}^{-i\left(\frac{n\pi}{a} + \frac{p}{\hbar}\right)x} \right] \mathrm{d}x \\ &= \frac{1}{2i\sqrt{\pi\hbar a}} \left[\frac{\mathrm{e}^{i\left(\frac{n\pi}{a} - \frac{p}{\hbar}\right)a} - 1}{i\left(\frac{n\pi}{a} - \frac{p}{\hbar}\right)} - \frac{\mathrm{e}^{-i\left(\frac{n\pi}{a} + \frac{p}{\hbar}\right)a} - 1}{-i\left(\frac{n\pi}{a} + \frac{p}{\hbar}\right)} \right] \end{aligned} \tag{۵}$$

یعنی :

$$\overline{\varphi}_n(p) = \frac{1}{2i}\sqrt{\frac{a}{\pi\hbar}}\, \mathrm{e}^{i\left(\frac{n\pi}{2} - \frac{pa}{2\hbar}\right)} \left[F\left(p - \frac{n\pi\hbar}{a}\right) + (-1)^{n+1} F\left(p + \frac{n\pi\hbar}{a}\right) \right] \tag{۶}$$

که دزآن :

$$F(p) = \frac{\sin(pa/2\hbar)}{pa/2\hbar} \tag{۷}$$

تابع $\overline{\varphi}_n(p)$ ، با تقریب یک ضریب تناسب ، مجموع (یاتفاضل) دو "تابع پراش" $F\left(p \pm \frac{n\pi\hbar}{a}\right)$ ، متمرکز در $p = \mp \frac{n\pi\hbar}{a}$ است . " پهنای " این توابع (فاصلهٔ بین‌دو صفر اول ، که نسبت به‌مقدارمرکزی متقارن‌اند) به n بستگی ندارد و برابر است با $\frac{4\pi\hbar}{a}$ " دامنهٔ " آنها نیز به n بستگی ندارد .

تابع داخل کروشه در رابطهٔ (۶) ، در صورتی که n فرد باشد ، زوج و در صورتی‌که n زوج باشد فرد است . از این رو ، چگالی احتمال $\overline{\mathscr{P}}_n(p)$ داده شده توسط (۳) در تمام موارد تابع زوجی از p است ، بنابراین :

$$\langle P \rangle_n = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\mathscr{P}}_n(p)\, p\, \mathrm{d}p = 0 \tag{۸}$$

یعنی ، مقدار متوسط تکانه ذره در حالت انرژی E_n صفر است .

هم‌چنین ، مقدار متوسط مجذور تکانه ، $\langle P^2 \rangle_n$ ، را محاسبه کنیم . با استفاده ازین واقعیت‌که در نمایش $\{ | x \rangle \}$ ، P مانند $\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$ عمل می‌کند ، و باانتگرال‌گیری‌به‌روش جزء بجزء ، به‌دست می‌آوریم*:

$$\langle P^2 \rangle_n = \hbar^2 \int_0^a \left| \frac{d\varphi_n}{dx} \right|^2 dx$$

$$= \hbar^2 \int_0^a \frac{2}{a}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \cos^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx \tag{۹}$$

$$= \left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2$$

از (۸) و (۹) خواهیم یافت :

$$\Delta P_n = \sqrt{\langle P^2 \rangle_n - \langle P \rangle_n^2} = \frac{n\pi\hbar}{a} \tag{۱۰}$$

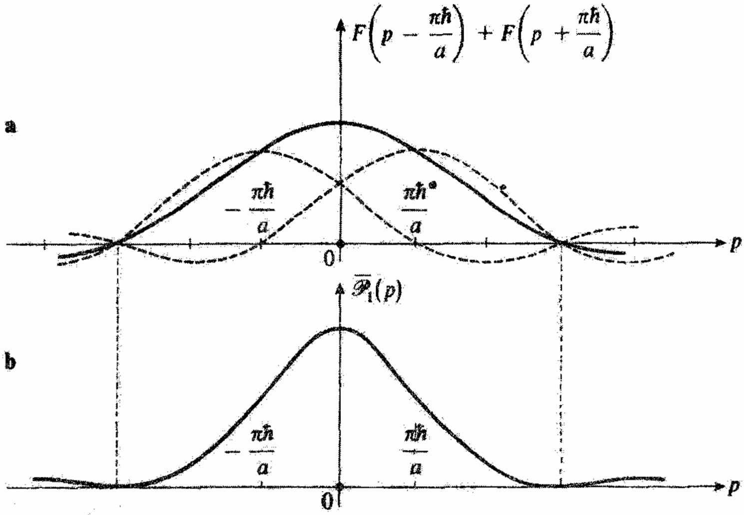
بنابراین ، ریشه میانگین مربعی انحراف بطور خطی با n افزایش می‌یابد .

b . بحث فیزیکی

منحنی‌هایی را که چگالی احتمال $\overline{\mathscr{P}}_n(p)$ را می‌دهند ، برای مقادیر مختلف n ، رسم کنیم . برای این کار ، ابتدا به‌مطالعهٔ تابع داخل کروشه در رابطهٔ (۶) بپردازیم . برای حالت پایه (n =۱) ، این تابع مجموع دوتابع F ، دوتابع پراشی که‌مراکزآنها به‌فاصله نصف پهنایشان از یکدیگر قرار دارند (شکل a ــ۱) ، می‌باشد . برای اولین تراز برانگیخته (n =۲) ، فاصلهٔ بین این مراکز دوبرابر زیادتر است ، و بعلاوه ، در این مورد ، باید اختلاف دوتابع F منظور شود (شکل a ــ۲) . بالاخره ، برای یک تراز برانگیخته متناظر با یک مقدار بزرگ n ، فاصلهٔ مراکز دومنحنی پراشی خیلی بیشتر از پهناهای آنهاست .

---

* نتیجهٔ (۹) را می‌توانستیم با محاسبه انتگرال $\langle P^2 \rangle_n = \int_{-\infty}^{+\infty} |\overline{\varphi}_n(p)|^2 p^2 dp$ از رابطه (۶) نیز بدست آوریم . مع ذالک این محاسبه ، که اشکال عمده‌ای پیش نمی‌آورد ، بسراستی محاسبه‌ای که در اینجا داده شده است ، نیست .



شکل ۱

تابع موج $\overline{\varphi}_1(p)$ ، وابسته به‌حالت پایهٔ یک‌ذره در یک چاه پتانسیل نامحدود در نمایش $\{|p\rangle\}$ ، از افزودن دوتابع پراشی F (منحنی‌های خط چین درشکل a) به‌دست می‌آید . چون مراکز این‌دوتابع F به‌فاصله نصف پهناهایشان از یکدیگر واقعند ، مجموع آنها دارای روندی است‌که توسط منحنی خط پر درشکل a نشان داده شده است . بامجذورکردن‌این مجموع ، چگالی احتمال $\overline{\mathscr{P}}_1(p)$ وابسته به‌یک‌اندازه‌گیری‌تکانه‌ذره‌به‌دست می‌آید (شکل b) .

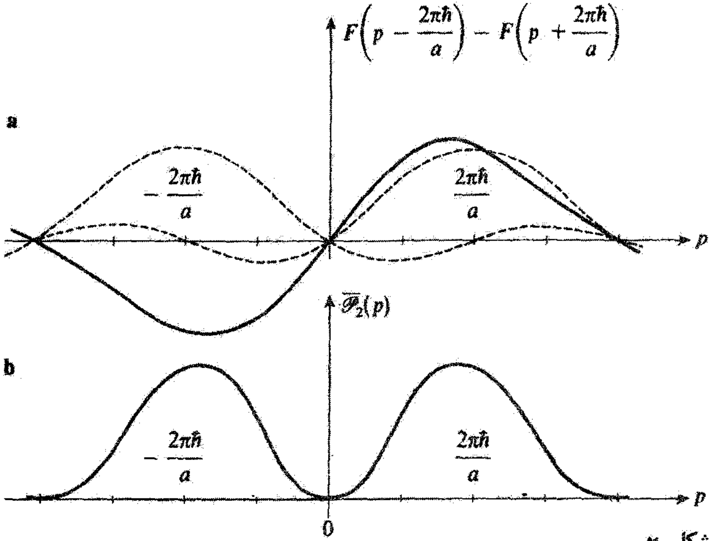
با مجذورکردن این توابع ، چگالی احتمال $\overline{\mathscr{P}}_n(p)$ به‌دست می‌آید (رک شکل b ـ ۱ و b ـ ۲) . توجه کنید که برای n های بزرگ جملهٔ تداخلی بین $F\left(p-\frac{n\pi\hbar}{a}\right)$ و $F\left(p+\frac{n\pi\hbar}{a}\right)$ قابل اغماض است (به‌خاطر جدایی مرکزهای دومنحنی) :

$$\overline{\mathscr{P}}_n(p)=\frac{a}{4\pi\hbar}\left[F\left(p-\frac{n\pi\hbar}{a}\right)+(-1)^{n+1}F\left(p+\frac{n\pi\hbar}{a}\right)\right]^2$$
$$\simeq\frac{a}{4\pi\hbar}\left[F^2\left(p-\frac{n\pi\hbar}{a}\right)+F^2\left(p+\frac{n\pi\hbar}{a}\right)\right] \qquad (۱۱)$$

دراین صورت تابع $\overline{\mathscr{P}}_n(p)$ به‌صورت نشان داده شده درشکل ۳ است .

ملاحظه می‌شود که وقتی n بزرگ باشد ، چگالی احتمال دارای دو قلهٔ متقارن ، به‌پهنای $\frac{4\pi\hbar}{a}$ و به‌مرکزهای $p=\pm\frac{n\pi\hbar}{a}$ است . دراین صورت می‌توان تقریبا " باقطعیت

کامل نتایج اندازه‌گیری تکانهٔ ذره در حالت $\langle \varphi_n |$ را پیش‌بینی کرد:



شکل ۲

برای اولین تراز برانگیخته، تابع $\overline{\varphi}_2(p)$ از تفاضل دوتابع F، با همان پهنای شکل a ـ۱ ولی بافاصله بیشتر از یکدیگر (منحنی خط چین درشکل a) به‌دست می‌آید. منحنی به‌دست‌آمده، با خط پر درشکل a نمایش داده شده است. دراین صورت چگالی احتمال $\overline{\mathscr{P}}_2(p)$ دارای دو ماگزیمم واقع در نزدیکی $p = \pm n\pi\hbar/a$ است (شکل b).

مقدار به‌دست آمده تقریبا" برابر $+\frac{n\pi\hbar}{a}$ یا $-\frac{n\pi\hbar}{a}$ خواهد بود، دقت نسبی* باافزایش n بیشتر می‌شود (دومقدار متقابل $\pm\frac{n\pi\hbar}{a}$ متساوی الاحتمالند). این امر به‌سادگی قابل فهم است. درواقع، برای n های بزرگ، تابع $\varphi_n(x)$ ،که به‌صورت سینوسی تغییر می‌کند، نوسانات بیشماری در داخل چاه انجام می‌دهد، دراین‌صورت‌می‌توان عملا" آنرا بصورت دوموج پیش رونده متناظر باتکانه‌های‌متقابل $p = \pm\frac{n\pi\hbar}{a}$ درنظرگرفت.

وقتی n کاهش می‌یابد، دقت نسبی‌که می‌توان باآن مقادیر ممکن تکانه راپیش‌بینی کرد کم می‌شود. به‌عنوان مثال، درشکل b ـ۲، می‌بینیم که وقتی $n=2$ است، تابع $\overline{\mathscr{P}}_n(p)$ دارای دوقله است که پهناهایشان در حدود فاصله آنها تا مبداء است. دراین مورد، تابع

---

* دقت مطلق مستقل از n است، زیرا پهنای منحنی‌ها همواره $\frac{4\pi\hbar}{a}$ می‌باشد.

موج فقط یک نوسان در داخل چاه انجام می‌دهد و غیر منتظره نیست که ،برای این تـابـع سینوسی که در $x=0$ و $x=a$ " قطع شده است" ، طول موج (و در نتیجه ، تکانه ذره) خوب معیـن نباشد . بالاخره ، برای حالت پایه ، تابع موج توسط نصف یک کمـان سینوسی نشان داده شده است : دراین صورت مقادیر نسبی طول موج و تکانهٔ ذره معیـن نیستنـد (شکل b — ۱) .

گـوشزدها :

(i) اکنون تکانهٔ یک ذرهٔ کلاسیکی با انرژی E_n را که توسط (۱) داده شـده اسـت محاسبه کنیم ، داریم :

$$\frac{p_{cl}^2}{2m}=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \tag{۱۲}$$

یعنی :

$$p_{cl}=\pm\frac{n\pi\hbar}{a} \tag{۱۳}$$

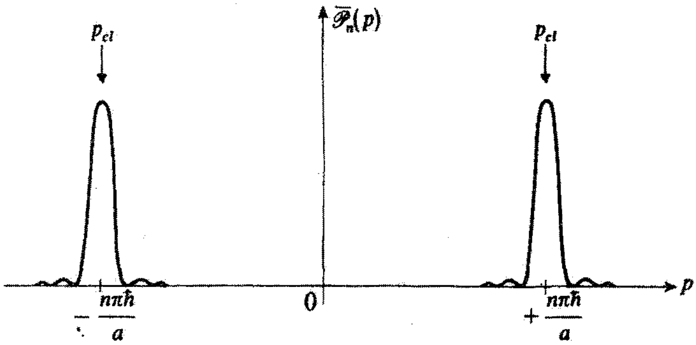
از این رو ، وقتی n بزرگ باشد ، دوقلهٔ $\overline{\mathscr{P}}_n(p)$ بخوبی با مقادیر کلاسیکی تکانـــه متناظرند .

(ii) ملاحظه می‌کنیم که ، برای n های بزرگ ، با وجودی که مقدار نسبی تکانه کـامـلا " معین است ، علامت آن چنین نیست . به‌این دلیل است که ΔP_n بزرگ اسـت : برای توزیعهای احتمال باد و ماگزیمم نظیر شکل ۳ ، ریشه میانگین مربعی انحراف منعکس‌کنندهٔ فاصلهٔ بین دوقله است و دیگر به‌پهناهایشان ارتباط ندارد .

۳ ــ تحول تابع موج ذره

حالتهای $|\varphi_n\rangle$ ، با تابع موج $\varphi_n(x)$ ، حالتهای مانائی هستند که به‌هیچگونـه تحول زمانی منجر نمی‌شوند . تحول زمانی تنها هنگامی ظاهر می‌شود که بردار حالت یـک ترکیب خطی از چندین کت $|\varphi_n\rangle$ باشد . در اینجامورد بسیار ساده‌ای را بررسی می‌کنیم‌که برای آن ، در زمان $t=0$ ، بردار حالت$|\psi(0)\rangle$ برابر است با :

$$|\psi(0)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\varphi_1\rangle+|\varphi_2\rangle\right] \tag{۱۴}$$



شکل ۳.
وقتی n بزرگ است (تراز بسیار برانگیخته) ، چگالی احتمال دارای دوقله بارز ، به‌مرکزهای $p = \pm\, n\pi\hbar/a$ است ، که تکانه‌های وابسته به حرکت کلاسیکی با همان انرژی هستند .

a ــ تابع موج در لحظهٔ t

با بکاربردن فرمول (D ــ ۵۴) از فصل سوم ، بلافاصله بدست می‌آوریم :

$$|\,\psi(t)\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\mathrm{e}^{-i\frac{\pi^2\hbar}{2ma^2}t}\,|\,\varphi_1\,\rangle + \mathrm{e}^{-2i\frac{\pi^2\hbar}{ma^2}t}\,|\,\varphi_2\,\rangle\right] \tag{۱۵}$$

یا ، با حذف یک ضریب فاز کلی از $\langle\,\psi(t)\,|$:

$$|\,\psi(t)\,\rangle \propto \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\,|\,\varphi_1\,\rangle + \mathrm{e}^{-i\omega_{21}t}\,|\,\varphi_2\,\rangle\right] \tag{۱۶}$$

که در آن :

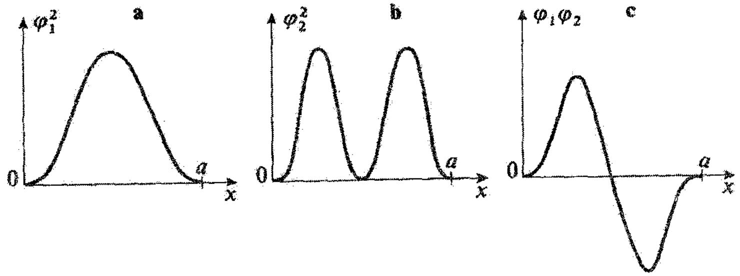
$$\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = \frac{3\pi^2\hbar}{2ma^2} \tag{۱۷}$$

b . تحول شکل بستهٔ موج

شکل بستهٔ موج توسط چگالی احتمال :

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{2}\varphi_1^2(x) + \frac{1}{2}\varphi_2^2(x) + \varphi_1(x)\,\varphi_2(x)\cos\omega_{21}t \tag{۱۸}$$

داده می‌شود . ملاحظه می‌کنیم که تغییرات زمانی چگالی احتمال از جمله تداخلی $\varphi_1\varphi_2$ ناشی می‌شود . فقط یک فرکانس بوهر $\nu_{21} = (E_2 - E_1)/h$ ظاهر می‌شود زیرا حالت اولیهٔ (۱۴) فقط از دوحالت $\langle \varphi_1 |$ و $\langle \varphi_2 |$ تشکیل شده است . منحنی‌های متناظر با تغییرات توابع φ_1^2 ، φ_2^2 و $\varphi_1\varphi_2$ درشکلهای a—۴ ، b—۴ و c—۴ رسم شده‌اند .



شکل ۴ .
نمایش نموداری توابع φ_1^2 (چگالی احتمال ذره درحالت پایه) ، φ_2^2 (چگالی احتمال ذره در اولین حالت برانگیخته) و $\varphi_1\varphi_2$ (جمله حاصلضربی مسئول تحول شکل بسته موج) .

به‌آسانی می‌توان به‌کمک این شکلها و رابطهٔ (۱۸) ، تغییر شکل بسته موج نسبت به‌زمان را بطور نموداری نشان داد (رک شکل ۵) : مشاهده می‌کنیم که بسته موج بین دو دیوارهٔ چاه نوسان می‌کند .

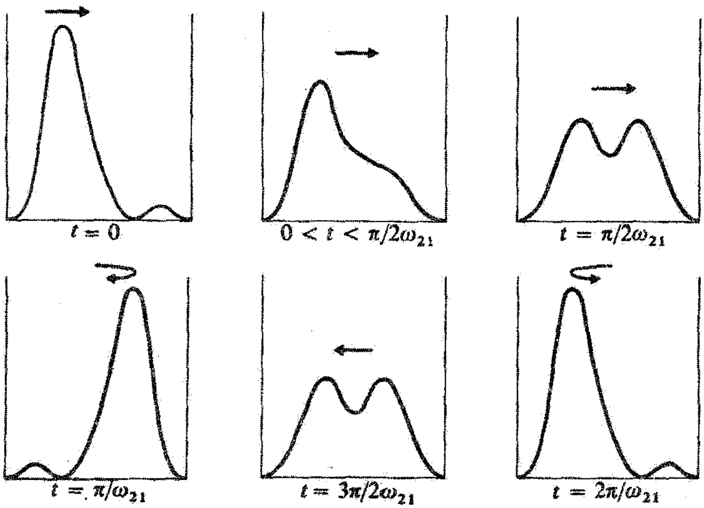
c — حرکت مرکز بسته موج :

حال مقدار متوسط $\langle X \rangle(t)$ ی مکان ذره در زمان t را محاسبه کنیم . برای این‌کار راحت‌تر است قرار دهیم :

$$X' = X - a/2 \tag{۱۹}$$

زیرا ، به‌دلیل تقارن ، عناصر قطر اصلی ماتریس X' صفرند :

$$\begin{aligned} \langle \varphi_1 | X' | \varphi_1 \rangle &\propto \int_0^a \left(x - \frac{a}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \mathrm{d}x = 0 \\ \langle \varphi_2 | X' | \varphi_2 \rangle &\propto \int_0^a \left(x - \frac{a}{2}\right) \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \mathrm{d}x = 0 \end{aligned} \tag{۲۰}$$



شکل ۵ .
حرکت دوره‌ای یک بسته موج که از برهم‌نهش حالت پایه و اولین حالت برانگیختهٔ یک ذره در یک چاه نامحدود به‌دست آمده است . فرکانس حرکت همان فرکانس بوهر $\omega_{21}/2\pi$ است .

در این صورت داریم :

$$\langle X' \rangle(t) = \text{Re}\,\{\, e^{-i\omega_{21}t} \langle \varphi_1 \,|\, X' \,|\, \varphi_2 \rangle \,\} \tag{۲۱}$$

که در آن :

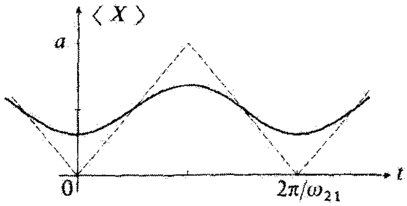
$$\begin{aligned} \langle \varphi_1 \,|\, X' \,|\, \varphi_2 \rangle &= \langle \varphi_1 \,|\, X \,|\, \varphi_2 \rangle - \frac{a}{2} \langle \varphi_1 \,|\, \varphi_2 \rangle \\ &= \frac{2}{a} \int_0^a x \sin\frac{\pi x}{a} \sin\frac{2\pi x}{a}\, dx \\ &= -\frac{16a}{9\pi^2} \end{aligned} \tag{۲۲}$$

بنابراین :

$$\langle X \rangle(t) = \frac{a}{2} - \frac{16a}{9\pi^2} \cos \omega_{21} t \tag{۲۳}$$

مکانیک کوانتومی پیش‌بینی می‌کند که مرکز بسته‌موج قبل از رسیدن به‌دیواره برگشت خواهد کرد . این امر به‌وسیله عمل پتانسیل روی " لبهٔ "بسته موج تشریح می‌شود .

تغییرات $\langle X \rangle(t)$ درشکل ۶ نشان داده شده است. منحنی‌های خط چین، تغییرات مکان یک ذرهٔ کلاسیکی، برای ذره‌ای که با فرکانس زاویه‌ای ω_{21} در چاه حرکت رفت و آمد انجام می‌دهد، نمایش می‌دهد (چون بجز در محل دیواره‌ها نیرویی به‌ذره وارد نمی‌شود، مکان ذره بین 0 و a در هرنیم دوره بطور خطی با t تغییر می‌کند).



شکل ۶

تغییرات زمانی مقدار متوسط $\langle X \rangle$ مربوط به‌بسته موج شکل ۵، خط چین‌ها مشخص‌کنندهٔ مکان یک ذره کلاسیکی هستند که باهمان زمان متناوب حرکت می‌کند.

بلافاصله متوجه یک تفاوت بسیارواضح بین این دونوع حرکت، کلاسیکی وکوانتومی می‌شویم. مرکز بسته موج کوانتومی، بجای اینکه از دیواره‌های چاه بازگشت کند، دامنه حرکت آن ضعیف‌تر شده و قبل از رسیدن به‌ناحیه‌هائی که پتانسیل آنها صفر نیست بازگشت می‌کند. دراینجا نتیجهٔ بخش ۲ـD از فصل اول را باز می‌یابیم: چون پتانسیل در $x = 0$ و $x = a$ بی‌نهایت سریع تغییر می‌کند، تغییرات آن درمحدوده‌ای از مرتبهٔ ابعاد بسته‌موج قابل اغماض نیست، و حرکت مرکز بسته‌موج از قوانین مکانیک کلاسیک تبعیت نمی‌کند (فصل سوم، بخش γ ـ d ـ ۱ ـ D را نیز به‌ببینید). توضیح فیزیکی این پدیده بشرح زیر است: قبل از اینکه مرکز بسته موج به‌دیواره برسد، عمل پتانسیل روی "لبه‌های" این بسته موج به‌آن اندازه هست که آن را به‌عقب برگرداند.

گوشزد:

مقدار متوسط انرژی ذره در حالت $|\psi(t)\rangle$ که در (۱۵) محاسبه شده است به‌آسانی به‌صورت زیر به‌دست می‌آید:

$$\langle H \rangle = \frac{1}{2}E_1 + \frac{1}{2}E_2 = \frac{5}{2}E_1 \qquad (۲۴)$$

هم‌چنین خواهیم یافت :

$$\langle H^2 \rangle = \frac{1}{2} E_1^2 + \frac{1}{2} E_2^2 = \frac{17}{2} E_1^2 \tag{۲۵}$$

که از آنها نتیجه می‌شود :

$$\Delta H = \frac{3}{2} E_1 \tag{۲۶}$$

مخصوصا " توجه کنید که $\langle H \rangle$ ، $\langle H^2 \rangle$ و ΔH وابسته به‌زمان نیستند ، این امر طبیعی است ، چون H یک ثابت حرکت است . بعلاوه ، از بحث قبل ملاحظه می‌کنیم که بسته‌موج در مدت زمانی از مرتبهٔ :

$$\Delta t \simeq \frac{1}{\omega_{21}} \tag{۲۷}$$

بطور قابل ملاحظه‌ای تحول می‌یابد .

با استفاده از (۲۶) و (۲۷) داریم :

$$\Delta H \,.\, \Delta t \simeq \frac{3}{2} E_1 \times \frac{\hbar}{3E_1} = \frac{\hbar}{2} \tag{۲۸}$$

در اینجا باردیگر رابطهٔ عدم قطعیت زمان ـ انرژی را می‌یابیم .

۳ ـ اغتشاش ایجاد شده توسط اندازه‌گیری مکان

ذره‌ای را در حالت $|\varphi_1\rangle$ در نظر بگیرید . فرض کنید مکان ذره در زمان $t = 0$ اندازه‌گیری شده باشد و نتیجهٔ $x = a/2$ به‌دست آمده باشد . احتمال نتایج مختلفی که می‌تواند در یک اندازه‌گیری انرژی ، که بلافاصله بعد از اولین‌اندازه‌گیری انجام شده است ، به‌دست آید چقدر است ؟

بایستی مواظب استدلال غلط زیر بود : بعد از اندازه‌گیری ، ذره در ویژه حالت X متناظر با نتیجه به‌دست آمده است ، و لذا تابع موج آن با $\delta(x - a/2)$ متناسب است‌اگر در این هنگام یک اندازه‌گیری انرژی انجام شود ، مقادیر مختلف E_n ، با احتمالهایی متناسب با :

$$\left| \int_0^a \mathrm{d}x\, \delta\!\left(x - \frac{a}{2}\right) \varphi_n^*(x) \right|^2 = \left| \varphi_n\!\left(\frac{a}{2}\right) \right|^2 = \begin{cases} 2/a & \text{اگر } n \text{ فرد باشد} \\ 0 & \text{اگر } n \text{ زوج باشد} \end{cases} \tag{۲۹}$$

می‌توانند به‌دست آیند . بااین استدلال نادرست ، احتمال یافتن تمام مقادیر E_n متناظر

با n های فرد باهم برابر می‌شوند ، که بی‌معنی است (زیرا در این صورت مجموع این احتمالات بی‌نهایت خواهد شد) .

این خطا از این واقعیت ناشی می‌شود که ما هنجار تابع‌موج‌را به‌حساب‌نیاورده‌ایم . برای اعمال صحیح اصل موضوع چهارم از فصل سوم ، لازم است که تابع‌موج‌بلافاصله بعد از اولین اندازه‌گیری را بهنجار شده بنویسیم . لیکن نمی‌توان تابع موج $\delta(x - a/2)$ رابهنجار کرد *. بنابراین ، مسأله مطرح شده در بالا باید دقیق بیان شود .

همانطوری که در بخش b ـ۲ـ E ازفصل سوم دیدیم آزمایشی که در آن اندازه‌گیری یک مشاهده‌پذیر با طیف پیوسته انجام شود هرگز نتیجه‌ای بادقت‌کامل‌نمی‌دهد . برای موردی که مورد نظر ماست ، فقط می‌توانیم بگوئیم که :

$$\frac{a}{2} - \frac{\varepsilon}{2} \leqslant x \leqslant \frac{a}{2} + \frac{\varepsilon}{2} \tag{۳۰}$$

که در آن ε بوسیلهٔ اندازه‌گیری بکاررفته بستگی دارد ولی هرگز صفر نیست .

اگر فرض کنیم که ε خیلی کوچکتر از گستردگی تابع موج قبل از اندازه‌گیری (در اینجا a) باشد ، تابع موج بعد از اندازه‌گیری عملا" $\sqrt{\varepsilon}\,\delta^{(\varepsilon)}\left(x - \frac{a}{2}\right)$ خواهدبود [$\delta^{(\varepsilon)}(x)$ در تمام جاها ، بجز در فاصلهٔ تعریف شده در (۳۰) ، که مقدار $1/\varepsilon$ رامی‌گیرد صفر است ، رک پیوست ۲ ، بخش a ـ۱] . این تابع موج محققا "بهنجارشده است ، زیرا :

$$\int \mathrm{d}x \left| \sqrt{\varepsilon}\, \delta^{(\varepsilon)}\left(x - \frac{a}{2}\right) \right|^2 = 1 \tag{۳۱}$$

حال اگر انرژی اندازه‌گیری شود چه‌اتفاق می‌افتد ؟ هرمقدار E_n می‌تواندبااحتمال :

$$\begin{aligned} \mathscr{P}(E_n) &= \left| \int \varphi_n^*(x) \sqrt{\varepsilon}\, \delta^{(\varepsilon)}\left(x - \frac{a}{2}\right) \mathrm{d}x \right|^2 \\ &= \begin{cases} \dfrac{8a}{\varepsilon}\left(\dfrac{1}{n\pi}\right)^2 \sin^2\left(\dfrac{n\pi\varepsilon}{2a}\right) & \text{اگر } n \text{ فرد باشد} \\ 0 & \text{اگر } n \text{ زوج باشد} \end{cases} \end{aligned} \tag{۳۲}$$

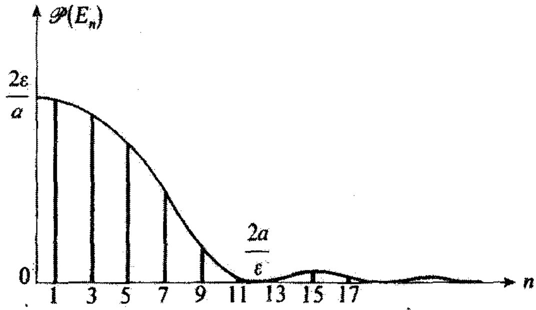
به‌دست آید .

تغییرات $\mathscr{P}(E_n)$ نسبت به n ، برای ε ثابت و n فرد ، درشکل ۷ نشان داده‌شده است . این شکل نشان می‌دهد که وقتی n خیلی بزرگتر از a/ε باشد احتمال $\mathscr{P}(E_n)$ قابل

---

* در این‌مثال عملا" ملاحظه می‌کنیم که تابع δ نمی‌تواند معرف یک حالت فیزیکی‌واقعی باشد .

اغماض می‌شود. لذا، هرقدر هم ε کوچک باشد، توزیع احتمالات $\mathscr{P}(E_n)$ "قویا" به ε بستگی دارد و به‌همین دلیل است که در استدلال اول که از ابتدا $\varepsilon = 0$ قرار دادیم، نتوانستیم نتیجه صحیح را به‌دست آوریم. هم‌چنین از شکل ملاحظه می‌کنیم که، هرچه ε کوچکتر باشد، منحنی بیشتر به‌سمت مقادیر بزرگ n کشیده‌می‌شود. تعبیر این نتیجه بصورت زیر است: بنابرروابط عدم قطعیت هایزنبرگ (رک فصل اول، بخش ۳ــ C)، اگر مکان ذره را با دقت زیادی اندازه‌گیری کنیم، تکانهٔ آنرا به‌شدت تغییر می‌دهیم. بنابر این یک انرژی جنبشی به‌ذره منتقل می‌کنیم، که هرچه ε کوچکتر باشد مقدار آن بیشتر است.



شکل ۷

تغییرات احتمال $\mathscr{P}(E_n)$ برای یافتن انرژی E_n بعد از یک اندازه‌گیری‌مکان ذره که مقدار $a/2$ را با دقت ε ($\varepsilon \ll a$) داده است، نسبت به n. هرچه ε کوچکتر باشد، احتمال یافتن مقادیر بالای انرژی بیشتر است.

مکمل B_{III}

مطالعهٔ جریان احتمال درچند مورد خاص

۱ ــ عبارت جریان در نواحی پتانسیل ثابت
۲ ــ کاربرد به‌مسائل سدهای پتانسیل
a) مورد $E > V_0$
b) مورد $E < V_0$
۳ ــ جریان احتمال امواج فرودی و میرا ، در مورد بازتاب از یک پله پتانسیل دوبعدی .

جریان احتمال وابسته به‌ذره‌ای باتابع $\psi(\mathbf{r}, t)$ ، درفصل‌سوم توسط رابطهٔ زیر تعریف شد :

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi}[\psi^*(\mathbf{r}, t)\nabla\psi(\mathbf{r}, t) - \text{c.c.}] \quad (۱)$$

(که درآن c.c. مخفف همیوغ مختلط‌است) . در این مکمل ، این جریان احتمال را در چند مورد خاص : پتانسیلهای " مربعی " یک و دوبعدی ، بطور دقیقتر مطالعه خواهیم کرد .

۱ ــ عبارت جریان در نواحی پتانسیل ثابت

در یک مسئلهٔ یک بعدی ، ذره‌ای را با انرژی E در نظر بگیریم که دریک‌پتانسیل ثابت V_0 قرار داده شده است . در مکمل H_1 ، چند مورد را از هم متمایز ساختیم .

(۱) وقتی $E > V_0$ باشد ، تابع موج به‌صورت زیر نوشته می‌شود :

$$\psi(x) = A\, e^{ikx} + A'\, e^{-ikx} \quad (۲)$$

که درآن :

$$E - V_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (۳)$$

با جایگزین کردن (۲) در (۱) ، خواهیم یافت :

$$J_x = \frac{\hbar k}{m}[\,|A|^2 - |A'|^2\,] \quad (۴)$$

تعبیر این نتیجه آسان است : تابع موج داده شده در (۲) متناظر است با دو موج تخت با تکانه‌های متقابل $p = \pm\,\hbar k$ و با چگالیهای احتمال $|A|^2$ و $|A'|^2$.

(۲) وقتی $E < V_0$ باشد، داریم:

$$\psi(x) = B\, e^{\rho x} + B'\, e^{-\rho x} \tag{۵}$$

که در آن:

$$V_0 - E = \frac{\hbar^2 \rho^2}{2m} \tag{۶}$$

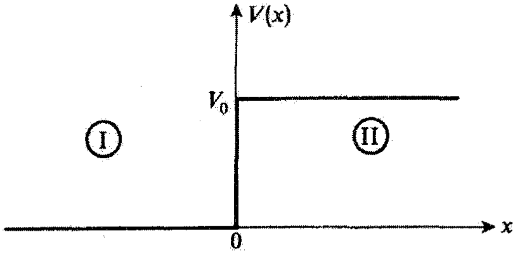
با جایگزین کردن (۵) در (۱) خواهیم یافت:

$$J_x = \frac{\hbar \rho}{m}\left[iB^* B' + \text{c.c.}\right] \tag{۷}$$

در این مورد ملاحظه می‌کنیم که برای اینکه جریان احتمال مخالف صفر باشد بایستی‌دوموج نمایی هردو لزوما" ضرائب غیر صفر داشته باشند.

۲ ــ کاربرد به‌مسائل سدهای پتانسیل

حال این نتایج را به‌مسائل سدهای پتانسیل که در مکملهای H_1 و J_1 بررسی شد اعمال کنیم. برای این کار ذره‌ای بجرم m و انرژی E را که در راستای Ox حرکت می‌کند و در $x = 0$ به‌یک پله پتانسیل به‌ارتفاع V_0 می‌رسد، در نظر می‌گیریم (شکل ۱).



شکل ۱
پله پتانسیل به ارتفاع V_0

a ــ مورد $E > V_0$

فرمول (۴) را به توابع موج (۱۱) و (۱۲) از مکمل H_1 اعمال کنیم و مانند آنجا قرار دهیم:

$$A_2' = 0 \tag{۸}$$

در ناحیه I ، جریان احتمال عبارت است از :

$$J_{\mathrm{I}} = \frac{\hbar k_1}{m}\left[|A_1|^2 - |A_1'|^2\right] \tag{۹}$$

و در ناحیه II :

$$J_{\mathrm{II}} = \frac{\hbar k_2}{m}|A_2|^2 \tag{۱۰}$$

J_{I} تفاضل دوجمله است ، جمله اول متناظر است با جریان فرودی و جمله دوم با جریان بازتابی . نسبت این دوجریان ضریب بازتاب R سد را به‌دست می‌دهد :

$$R = \left|\frac{A_1'}{A_1}\right|^2 \tag{۱۱}$$

که دقیقا" فرمول (۱۵) از مکمل $\mathrm{H_I}$ است .

همینطور ، ضریب عبور T ی سد نسبت جریان عبوری J_{II} به‌جریان فرودی است ، بنابراین‌داریم :

$$T = \frac{k_2}{k_1}\left|\frac{A_2}{A_1}\right|^2 \tag{۱۲}$$

و باز رابطهٔ (۱۶) از مکمل $\mathrm{H_I}$ را به‌دست آوردیم .

b — مورد $E < V_0$

چون تابع موج $\varphi_1(x)$ با همان رابطهٔ بخش a داده می‌شود ، رابطهٔ (۹) بازهم معتبر است برعکس، در ناحیهٔ II ، تابع موج عبارت است از :

$$\varphi_{\mathrm{II}}(x) = B_2' \, e^{-\rho_2 x} \tag{۱۳}$$

[زیرا ، در معادلهٔ (۲۰) از مکمل $\mathrm{H_I}$ ، $B_2 = 0$ است] . با به‌کاربردن (۷) ، خواهیم یافت :

$$J_{\mathrm{II}} = 0 \tag{۱۴}$$

شار عبوری صفر است ، که با رابطه (۲۴) از مکمل $\mathrm{H_I}$ متناظر است .

چگونه این واقعیت را که ، در ناحیهٔ II ، جریان احتمال صفراست حال‌آنکه احتمال یافتن ذره در این ناحیه غیر صفر می‌باشد ، تعبیر کنیم ؟ . برای این منظور به‌نتایج‌به‌دست آمده در بخش ۱ از مکمل J_{I} بازگردیم . درآنجا دیدیم‌که قسمتی از بستهٔ موج فرودی به‌ناحیهٔ II ، که از نظر کلاسیکی ممنوع است وارد می‌شود و سپس بازگشت کرده و به‌طرف

جهت منفی‌محور x ها عزیمت می‌کند (این‌نفوذ به‌ناحیه II مسئول تأخیر دربازتاب‌است) . بنابراین ، در حالت پایدار ، دوجریان احتمال در ناحیه II خواهیم داشت : یک جریان مثبت متناظر با ورود قسمتی از بسته‌موج فرودی به‌این ناحیه ، یک جریان منفی متناظر با برگشت این قسمت از بسته موج به‌سمت ناحیه I . این دوجریان دقیقاً " باهم برابرند، بنابراین نتیجهٔ کلی صفر است .

در مورد مسئلهٔ یک بعدی ساختار جریان احتمال موج میرا بوسیله این واقعیت‌که دوجریان متقابل یکدیگر را خنثی می‌کنند پوشانده می‌شود . بدین جهت است‌که‌می‌خواهیم یک مسئلهٔ دوبعدی ، درمورد بازتاب مایل ، را بررسی کنیم ، این امر به‌ما امکان می‌دهد تا یک جریان غیر صفر به‌دست آوریم و به‌تعبیر ساختار آن بپردازیم .

۳ ـ جریان احتمال امواج فرودی و میرا ، در مورد بازتاب از یک پتانسیل پله‌ای دوبعدی

مسئله دوبعدی زیر را در نظر بگیریم : ذره‌ای به‌جرم m ، که در صفحهٔ xOy حرکت می‌کند ، دارای یک انرژی پتانسیل $V(x, y)$ است که مستقل از y بوده وتوسط رابطهٔ زیر داده می‌شود :

$$\begin{aligned} V(x, y) &= 0 \qquad x < 0 \\ V(x, y) &= V_0 \qquad x > 0 \end{aligned} \tag{۱۵}$$

این مورد متناظر است با موردی که در بخش ۲ از مکمل F_1 بررسی شد : انرژی پتانسیل $V(x, y)$ برابر است با مجموع یک تابع $V_1(x)$ (انرژی پتانسیل یک پلهٔ یک بعدی) و یک تابع $V_2(y)$ ، که در اینجا صفر است . بنابراین ، می‌توانیم‌برای معادلهٔ ویژه مقداری هامیلتونی ، جوابی به‌صورت یک حاصل‌ضرب :

$$\varphi(x, y) = \varphi_1(x)\, \varphi_2(y) \tag{۱۶}$$

جستجو کنیم . توابع $\varphi_1(x)$ و $\varphi_2(y)$ در معادلات ویژه مقداری یک بعدی‌ای‌که به‌ترتیب با $V_1(x)$ و $V_2(y)$ و انرژیهای E_1 و E_2 متناظرند و در آن :

$$E_1 + E_2 = E \quad (\text{انرژی کل ذره}) \tag{۱۷}$$

صدق می‌کنند .

فرض می‌کنیم $E_1 < V_0$ باشد : بنابراین معادله‌ای $\varphi_1(x)$ را می‌دهد متناظر با یک بازتاب‌کلی درمسئلهٔ یک بعدی است ، ومی‌توانیم فرمولهای (۱۱) و (۲۰) از مکمل H_1 را

بکار بریم . اما راجع به تابع $\varphi_2(y)$ ، این تابع می‌تواند بلافاصله به‌دست آید ، زیرا متناظر است با مورد یک ذرهٔ آزاد $(V_2 = 0)$: این تابع یک موج تخت است . از این رو ، در ناحیه I $(x < 0)$ داریم :

$$\varphi_I(x, y) = A\, e^{i(k_x x + k_y y)} + A'\, e^{i(-k_x x + k_y y)} \tag{۱۸}$$

که در آن :

$$k_x = \sqrt{\frac{2mE_1}{\hbar^2}} \qquad k_y = \sqrt{\frac{2mE_2}{\hbar^2}} \tag{۱۹}$$

و در ناحیه II $(x > 0)$:

$$\varphi_{II}(x, y) = B\, e^{-\rho_x x}\, e^{ik_y y} \tag{۲۰}$$

که در آن :

$$\rho_x = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E_1)}{\hbar^2}} \tag{۲۱}$$

معادلات (۲۲) و (۲۳) از H_I ، نسبتهای A'/A و B/A را به‌دست می‌دهند . با وارد کردن فراسنج θ که به‌صورت :

$$\tan\theta = \frac{\rho_x}{k_x} = \sqrt{\frac{V_0 - E_1}{E_1}}\,; \qquad 0 \leqslant \theta \leqslant \frac{\pi}{2} \tag{۲۲}$$

تعریف می‌شود ، داریم :

$$\frac{A'}{A} = \frac{k_x - i\rho_x}{k_x + i\rho_x} = e^{-2i\theta} \tag{۲۳}$$

و :

$$\frac{B}{A} = \frac{2k_x}{k_x + i\rho_x} = 2\cos\theta\, e^{-i\theta} \tag{۲۴}$$

حال رابطه (۱) را ، که جریان احتمال را تعریف می‌کند بکار بندیم . در ناحیه I خواهیم یافت :

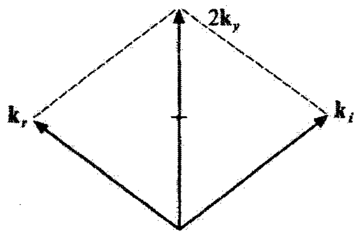
$$\mathbf{J}_I \begin{cases} (J_I)_x = \dfrac{\hbar k_x}{m}\left[\,|A|^2 - |A'|^2\right] = 0 \\[2ex] (J_I)_y = \dfrac{\hbar k_y}{m}\left|A\, e^{ik_x x} + A'\, e^{-ik_x x}\right|^2 \\[2ex] \qquad = \dfrac{\hbar k_y}{m}|A|^2\left[2 + 2\cos(2k_x x + 2\theta)\right] \end{cases} \tag{۲۵}$$

و در ناحیه II ، :

$$\mathbf{J}_{II}\begin{cases}(J_{II})_x = 0\\ (J_{II})_y = \dfrac{\hbar k_y}{m}|B|^2\ e^{-2\rho_x x} = \dfrac{\hbar k_y}{m}4\,|A|^2\cos^2\theta\ e^{-2\rho_x x}\end{cases} \qquad (۲۶)$$

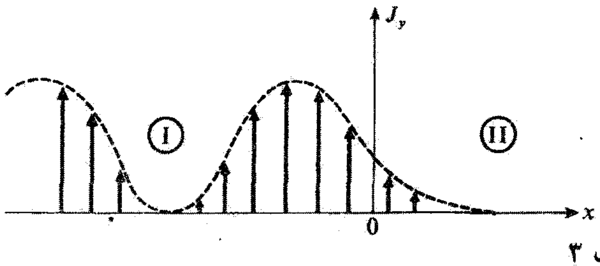
در ناحیه I ، فقط مؤلفهٔ $(J_I)_y$ جریان احتمال غیر صفراست ،این‌مؤلفه مجموع دو جمله است :

ــ جملهٔ متناسب با $2|A|^2$ که از مجموع جریانهای امواج فرودی و بازتابی ناشی می‌شود (رک شکل ۲) .



شکل ۲
مجموع جریانهای احتمال وابسته به‌امواج فرودی و بازتابی یک جریان احتمال موازی با Oy به‌دست می‌دهد .

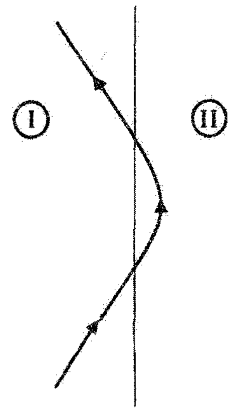
ــ جملهٔ شامل $\cos\ (2k_x x + 2\theta)$ ، که بیانگر یک اثر تداخلی بین دوموج است ، این جمله مسئول تغییرات نوسانی جریان احتمال نسبت به x است (رک شکل۳) .



شکل ۳
به‌خاطر تداخل بین امواج فرودی و بازتابی ، جریان احتمال درناحیه I یک تابع نوسانی از x است ، و در ناحیه II ، بطور نمائی کاهش‌می‌یابد (موج میرا)

در ناحیهٔ II ، جریان احتمال بازهم موازی با Oy است‌و بطورنمائی‌کاهش‌می‌یابد که باکاهش موج میراست . این جریان احتمال از ورود بسته‌های موج به‌ناحیهٔ دوم ناشی

می‌شوند (رک شکل ۴) کـه ، قبـل از برگشت ، برای مدت زمانی از مرتبـهٔ تاٌخیـر τ در بازتاب ، در جهت Oy حرکت می‌کننـد [رک مکمـل J_1 ، معادلهٔ (۸)] . این جریـان هم‌چنین به‌جابجائی عرضی بسته موج به‌هنگام بازتاب نیز مربوط است (رک شکل ۴) .



شکل ۴
امکان ورود ذره به‌ناحیه II به‌وسیله یک جابجائی عرضی به‌هنگام بازتاب بیان می‌شود .

مکمل C_{III}

انحرافهای ریشه‌های میانگین مربعی دومشاهده‌پذیر همیوغ

۱ ــ رابطهٔ عدم قطعیت برای P و Q
۲ ــ بسته موج " می‌نیمم "

دومشاهده‌پذیر هیموغ P و Q دومشاهده‌پذیری هستند که رابطهٔ جابجائی $[Q, P]$ ی آنها برابر $i\hbar$ باشد. در این مکمل نشان خواهیم داد که ریشه‌های میانگین مربعی (رک بخش ۵ ــ C از فصل سوم) ΔP و ΔQ، برای هر بردار حالت دستگاه مورد مطالعه، دررابطهٔ زیر صدق می‌کنند:

$$\Delta P \,.\, \Delta Q \geqslant \frac{\hbar}{2} \tag{۱}$$

سپس نشان خواهیم داد که، اگر دستگاه در حالتی باشد که برای آن حاصلضرب $\Delta P \,.\, \Delta Q$ دقیقاً" برابر $\hbar/2$ باشد، تابع موج وابسته به‌این حالت در نمایش $\{ | q \rangle \}$، یک بسته موج گوسی است (همین‌طور تابع موج در نمایش $\{ | p \rangle \}$).

۱ ــ رابطهٔ عدم قطعیت برای P و Q

کت:

$$| \varphi \rangle = (Q + i\lambda P) | \psi \rangle \tag{۲}$$

را که درآن λ یک فراسنج حقیقی دلخواه است در نظر بگیرید. مجذور هنجار $\langle \varphi | \varphi \rangle$، برای تمام مقادیر λ مثبت‌است، لذا داریم:

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \varphi \rangle &= \langle \psi | (Q - i\lambda P)(Q + i\lambda P) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | Q^2 | \psi \rangle + \langle \psi | (i\lambda QP - i\lambda PQ) | \psi \rangle + \langle \psi | \lambda^2 P^2 | \psi \rangle \\ &= \langle Q^2 \rangle + i\lambda \langle [Q, P] \rangle + \lambda^2 \langle P^2 \rangle \\ &= \langle Q^2 \rangle - \lambda\hbar + \lambda^2 \langle P^2 \rangle \geqslant 0 \end{aligned} \tag{۳}$$

بنابراین، مفسر این سه جمله‌ای برحسب λ، منفی یا صفر است

$$\hbar^2 - 4 \langle P^2 \rangle \langle Q^2 \rangle \leqslant 0 \tag{۴}$$

و داریم :

$$\langle P^2 \rangle \langle Q^2 \rangle \geqslant \frac{\hbar^2}{4} \tag{۵}$$

حال ، بافرض اینکه $\langle \psi |$ معلوم باشد ، دومشاهده‌پذیرجدید Q' و P' راکه‌بصورت :

$$\begin{aligned} P' &= P - \langle P \rangle = P - \langle \psi | P | \psi \rangle \\ Q' &= Q - \langle Q \rangle = Q - \langle \psi | Q | \psi \rangle \end{aligned} \tag{۶}$$

تعریف می‌شوند ، وارد می‌کنیم . P' و Q' مشاهده‌پذیرهای همیوغ نیز هستند ، زیراداریم :

$$[Q', P'] = [Q, P] = i\hbar \tag{۷}$$

ازاین‌رو ، نتیجهٔ (۵) ، که دربالابرای P و Q به‌دست آمد ، برای P' و Q' نیز معتبراست :

$$\langle P'^2 \rangle \langle Q'^2 \rangle \geqslant \frac{\hbar^2}{4} \tag{۸}$$

از طرف دیگر ، بامراجعه به‌تعریف (C—۲۳) ی(فصل سوم) برای ریشه میانگین مربعی ، و با بکاربردن (۶) ، ملاحظه می‌کنیم که :

$$\begin{aligned} \Delta P &= \sqrt{\langle P'^2 \rangle} \\ \Delta Q &= \sqrt{\langle Q'^2 \rangle} \end{aligned} \tag{۹}$$

لذا رابطهٔ (۸) می‌تواند به‌صورت زیر نیز نوشته شود :

$$\boxed{\Delta P \,.\, \Delta Q \geqslant \frac{\hbar}{2}} \tag{۱۰}$$

بدین ترتیب ، اگر دو مشاهده‌پذیر همیوغ باشند (مانند موردی که متناظر با یک مکان کلاسیکی x_i و تکانه همیوغ p_i ی آن باشند) ، یک حد پائین دقیقی برای حاصلضرب $\Delta P \,.\, \Delta Q$ ی آنها وجود دارد . بدین ترتیب رابطهٔ عدم قطعیت هایزنبرگ تعمیم داده می‌شود .

گوشزد :

این استدلال به‌آسانی به‌دومشاهده‌پذیر دلخواه A و B تعمیم داده می‌شود ، و خواهیم یافت :

$$\Delta A \,.\, \Delta B \geqslant \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle| \tag{۱۱}$$

۳ ــ بسته موج "می‌نیمم".

وقتی می‌نیمم مقدار حاصلضرب $\Delta P \cdot \Delta Q$ حاصل شد:

$$\Delta P \cdot \Delta Q = \frac{\hbar}{2} \tag{۱۲}$$

گوئیم که بردار حالت $|\psi\rangle$ متناظر است با یک بسته موج می‌نیمم برای مشاهده پذیرهای P و Q.

بنابر استدلال اخیر، رابطهٔ (۱۲) ایجاب می‌کند که مجذور هنجار کت:

$$|\varphi'\rangle = (Q' + i\lambda P')|\psi\rangle \tag{۱۳}$$

که یک چند جمله‌ای درجه دوم نسبت به λ است، دارای یک ریشهٔ مضاعف λ_0، باشد. از این رو، وقتی $\lambda = \lambda_0$ باشد، کت $|\varphi'\rangle$ صفر است:

$$(Q' + i\lambda_0 P')|\psi\rangle = [Q - \langle Q\rangle + i\lambda_0(P - \langle P\rangle)]|\psi\rangle = 0 \tag{۱۴}$$

برعکس، اگر $\Delta P . \Delta Q > \hbar/2$ باشد، چند جمله‌ای که $\langle\varphi'|\varphi'\rangle$ را به‌دست می‌دهد هرگز نمی‌تواند برابر صفر شود (برای تمام λ ها مثبت است).

از این رو، شرط لازم و کافی برای اینکه حاصلضرب $\Delta P . \Delta Q$ مقدار می‌نیمم خود یعنی $\hbar/2$، را داشته باشد این است که کتهای $(Q - \langle Q\rangle)|\psi\rangle$ و $(P - \langle P\rangle)|\psi\rangle$ با یکدیگر متناسب باشند. ضریب تناسب $-i\lambda_0$ بسادگی می‌تواند محاسبه شود. وقتی $\Delta Q . \Delta P = \hbar/2$، ریشهٔ مضاعف معادلهٔ:

$$\langle\varphi'|\varphi'\rangle = \lambda^2(\Delta P)^2 - \lambda\hbar + (\Delta Q)^2 = 0 \tag{۱۵}$$

برابر است با:

$$\lambda_0 = \frac{\hbar}{2(\Delta P)^2} = \frac{2(\Delta Q)^2}{\hbar} \tag{۱۶}$$

حال رابطه (۱۴) را در نمایش $\{|q\rangle\}$ بنویسیم (برای سهولت، فرض می‌کنیم که ویژه مقدارهای Q، یعنی q، ناتبهگن باشند). با استفاده از این واقعیت (رک مکمل E_{II}) که، در این نمایش، P مانند $\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dq}$ عمل می‌کند، خواهیم یافت:

$$\left[q + \hbar\lambda_0\frac{d}{dq} - \langle Q\rangle - i\lambda_0\langle P\rangle\right]\psi(q) = 0 \tag{۱۷}$$

که درآن :

$$\psi(q) = \langle q \mid \psi \rangle \tag{۱۸}$$

برای حل معادلهٔ (۱۷)، بهتر است تابع $\theta(q)$ را که توسط:

$$\psi(q) = e^{i\langle P\rangle q/\hbar}\,\theta(q - \langle Q\rangle) \tag{۱۹}$$

تعریف می‌شود، وارد کنیم. با جایگزین کردن (۱۹) در (۱۷)، معادلهٔ ساده‌تر:

$$\left[q + \lambda_0 \hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}\right]\theta(q) = 0 \tag{۲۰}$$

را به‌دست می‌آوریم که جواب آن عبارت است از:

$$\theta(q) = C\,e^{-q^2/2\lambda_0\hbar} \tag{۲۱}$$

(که درآن C یک ثابت مختلط دلخواه است)، باقراردادن (۱۶) و (۲۱) در (۱۹) خواهیم یافت:

$$\psi(q) = C\,e^{i\langle P\rangle q/\hbar}\,e^{-\left[\frac{q-\langle Q\rangle}{2\Delta Q}\right]^2} \tag{۲۲}$$

این تابع می‌تواند با قراردادن:

$$C = [2\pi(\Delta Q)^2]^{-1/4} \tag{۲۳}$$

بهنجار شود.

بدین ترتیب به‌نتیجهٔ زیر می‌رسیم: وقتی حاصلضرب $\Delta P \,.\, \Delta Q$ مقدارمی‌نیممش یعنی $\hbar/2$، را بگیرد، تابع موج درنمایش $\{\langle q \mid\}$ یک بسته‌موج‌گوسی است که بوسیلهٔ تبدیل (۱۹) از تابع‌گوسی $\theta(q)$ به‌دست آمده‌است (که معادل است با دو تغییر مبداء، یکی روی محور q ها و یکی روی محور p ها).

گوشزد:

استدلالی که در نمایش $\{\langle q \mid\}$ شد می‌تواند در نمایش $\{\langle p|\}$ تکرار شود. در این صورت که تابع موج $\overline{\psi}(p)$ که توسط رابطهٔ:

$$\overline{\psi}(p) = \langle p \mid \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}q\, e^{-ipq/\hbar}\, \psi(q) \tag{۲۴}$$

تعریف می‌شود نیز یک تابع گوسی است که به‌صورت زیر داده می‌شود:

$$\overline{\psi}(p) = \left[2\pi(\Delta P)^2\right]^{-1/4} e^{-i\langle Q\rangle p/\hbar}\, e^{-\left[\frac{p-\langle P\rangle}{2\Delta P}\right]^2} \tag{۲۵}$$

مکمل D_{III}

اندازه‌گیریهایی‌که فقط روی یك قسمت از دستگاه فیزیکی انجام می‌شود

۱ ــ محاسبهٔ پیش بینی‌های فیزیکی
۲ ــ مفهوم فیزیکی یک حالت حاصلضرب تانسوری
۳ ــ مفهوم فیزیکی حالتی که یک حاصلضرب تانسوری نیست

مفهوم یک حاصلضرب تانسوری ، که در بخش F از فصل دوم وارد شد ، ما را قادر می‌سازد تا به‌بینیم که چگونه ، با شروع از فضاهای حالتهای دو زیردستگاه ، فضای حالتهای دستگاه کلی‌ای را که ازآنها به‌دست می‌آید ، بسازیم . دراینجا قصد داریم ، بااستفاده از اصول موضوع فصل سوم ، این بررسی را دنبال کنیم ، تا به‌بینیم‌که ، وقتی حالت دستگاه کلی معلوم باشد ، چه نتایجی می‌توان از اندازه‌گیریهایی که فقط روی یک زیر دستگاه انجام می‌شود ، به‌دست آورد .

۱ ــ محاسبهٔ پیش بینی‌های فیزیکی

یک دستگاه فیزیکی را که از دوقسمت (۱) و (۲) تشکیل شده است (بعنوان مثال یک دستگاه دوالکترونی) در نظر بگیرید . اگر $\mathscr{E}(1)$ و $\mathscr{E}(2)$ فضاهای حالتهای قسمتهای (۱) و (۲) باشند ، فضای حالتهای دستگاه‌کلی (۲)+(۱) حاصلضرب‌تانسوری $\mathscr{E}(1) \otimes \mathscr{E}(2)$ خواهد بود . بعنوان مثال ، حالت یک دستگاه دوالکترونی توسط یک تابع موج شش متغیری $\psi(x_1, y_1, z_1 ; x_2, y_2, z_2)$ وابسته به یک کت ازفضای $\mathscr{E}_r(1) \otimes \mathscr{E}_r(2)$ تشریح می‌شود . (رک فصل دوم ، بخش b ــ۴ــ F) .

می‌توان اندازه‌گیریهایی را تصور کرد که فقط روی یکی از دوقسمت [مثلاً ، قسمت (۱)] دستگاه کلی‌انجام شود . مشاهده‌پذیرهای $\tilde{A}(1)$ متناظر با این اندازه‌گیریها در $\mathscr{E}(1) \otimes \mathscr{E}(2)$ با گسترش مشاهده پذیرهای $A(1)$ که فقط در $\mathscr{E}(1)$ * عمل می‌کنند تعریف می‌شوند (رک فصل دوم بخش b ــ۲ــ F) :

$$A(1) \Longrightarrow \tilde{A}(1) = A(1) \otimes \mathbb{1}(2) \qquad (1)$$

---

* برای روشن شدن مطلب ، دراین‌مکمل برای $A(1)$ و گسترش‌آن $\tilde{A}(1)$ ، نمادگذاریهای متفاوتی بکار خواهیم برد .

که در آن $\mathbb{1}(2)$ اپراتور همانندی در $\mathscr{E}(2)$ است.

طیف $\tilde{A}(1)$ در $\mathscr{E}(1) \otimes \mathscr{E}(2)$ همان طیف $A(1)$ در $\mathscr{E}(1)$ است. از طرف دیگر دیدیم که تمام ویژه مقدارهای $\tilde{A}(1)$ در $\mathscr{E}(1) \otimes \mathscr{E}(2)$ تبهگن‌اند، حتی اگر هیچکدام از ویژه مقدارهای $A(1)$ در $\mathscr{E}(1)$ تبهگن نباشند [البته، به‌شرط اینکه ابعاد $\mathscr{E}(2)$ از ۱ بیشتر باشد] . بنابراین، وقتی یک اندازه‌گیری روی تنها دستگاه (۱) انجام شد، نتیجه هرچه باشد، دستگاه کلی ممکن‌است بعد از اندازه‌گیری درچندین حالت متفاوت باشد (حالت‌بعد ازاندازه‌گیری نه‌تنها به‌نتیجه اندازه‌گیری بلکه به‌حالت قبل ازاندازه‌گیری نیز بستگی‌دارد) . از دیدگاه فیزیکی، این چند گانگی حالتها به‌درجات آزادی دستگاه (۲) مربوط می‌شود که در این اندازه‌گیری هیچ اطلاعاتی در بارهٔ آنها کسب نشده است.

فرض کنید $P_n(1)$ ، تصویرگر روی ویژه زیر فضای مربوط به‌ویژه مقدار a_n متعلق به $A(1)$ ، در فضای $\mathscr{E}(1)$ ، باشد:

$$P_n(1) = \sum_{i=1}^{g_n} | u_n^i(1) \rangle \langle u_n^i(1) | \tag{۲}$$

که در آن کتهای $|u_n^i(1)\rangle$ عبارتند از g_n ویژه بردار راست هنجار وابسته به a_n . فرض کنید $\tilde{P}_n(1)$ تصویرگر روی ویژه زیرفضای مربوط به‌همان ویژه مقدار a_n متعلق به $\tilde{A}(1)$ ، در فضای $\mathscr{E}(1) \otimes \mathscr{E}(2)$ ، باشد. $\tilde{P}_n(1)$ از گسترش $P_n(1)$ در $\mathscr{E}(1) \otimes \mathscr{E}(2)$ به‌دست می‌آید.

$$\tilde{P}_n(1) = P_n(1) \otimes \mathbb{1}(2) \tag{۳}$$

برای نوشتن عملگر همانندی $\mathbb{1}(2)$ ی فضای $\mathscr{E}(2)$ ، ازرابطهٔ بستاری برای یک پایه راست‌هنجار دلخواه $\{ |v_k(2)\rangle \}$ در $\mathscr{E}(2)$ استفاده می‌کنیم:

$$\mathbb{1}(2) = \sum_k |v_k(2) \rangle \langle v_k(2) | \tag{۴}$$

با جایگزین کردن (۴) در (۳) و استفاده از (۲) ، خواهیم یافت:

$$\tilde{P}_n(1) = \sum_{i=1}^{g_n} \sum_k | u_n^i(1)\, v_k(2) \rangle \langle u_n^i(1)\, v_k(2) | \tag{۵}$$

بنابراین، اگر حالت $|\psi\rangle$ ی دستگاه کلی را (که فرض می‌شود نسبت به ۱ هنجار شده است) بدانیم، می‌توانیم احتمال $\mathscr{P}^{(1)}(a_n)$ را برای اینکه در یک اندازه‌گیری $A(1)$ روی قسمت (۱) این دستگاه، نتیجه a_n به‌دست آید، محاسبه کنیم. بابه‌کاربردن‌فرمول عمومی (۱۴ـ B) از فصل سوم، که در اینجا به‌صورت :

$$\mathscr{P}^{(1)}(a_n) = \langle \psi | \tilde{P}_n(1) | \psi \rangle \tag{۶}$$

در می‌آید ، خواهیم یافت :

$$\mathscr{P}^{(1)}(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} \sum_k |\langle u_n^i(1)\, v_k(2) \mid \psi \rangle|^2 \tag{۷}$$

بطور مشابه ، می‌توان حالت $|\psi'\rangle$ دستگاه بعداز اندازه‌گیری را محاسبه کرد . این حالت برطبق فرمول (۳۱ــ B) از فصل سوم ، توسط رابطهٔ زیر داده می‌شود :

$$|\psi'\rangle = \frac{\widetilde{P}_n(1) \mid \psi \rangle}{\sqrt{\langle \psi \mid \widetilde{P}_n(1) \mid \psi \rangle}} \tag{۸}$$

یعنی ، با استفاده از (۵) ، :

$$|\psi'\rangle = \frac{\sum_{i=1}^{g_n} \sum_k \mid u_n^i(1)\, v_k(2) \rangle \langle u_n^i(1)\, v_k(2) \mid \psi \rangle}{\sqrt{\sum_{i=1}^{g_n} \sum_k |\langle u_n^i(1)\, v_k(2) \mid \psi \rangle|^2}} \tag{۹}$$

گوشزدها :

(*i*) انتخاب یک پایهٔ راست هنجار ، $\{ |v_k(2)\rangle \}$ ، در $\mathscr{E}(2)$ اختیاری است . ازروابط (۳) ، (۶)و (۸) مشاهده می‌کنیم که پیش بینی‌های مربوط به‌زیر دستگاه (۱)به‌این انتخاب بستگی ندارند . از نظر فیزیکی ، واضح است‌که اگر هیچ اندازه‌گیری‌ای‌روی دستگاه (۲) انجام نشود ، هیچ حالت یا دسته حالتی از این دستگاه نمی‌تواند نقش بارزی داشته باشد .

(*ii*) اگر حالت $|\psi\rangle$ قبل از اندازه‌گیری یک حاصلضرب تانسوری باشد :

$$|\psi\rangle = |\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle \tag{۱۰}$$

که در آن $|\varphi(1)\rangle$ و $|\chi(2)\rangle$ دوحالت بهنجار شده از $\mathscr{E}(1)$ و $\mathscr{E}(2)$ هستند ، به‌آسانی می‌توان ، بااستفاده از (۳)و (۸) ، دیدکه حالت $|\psi'\rangle$ نیز یک‌حاصلضرب تانسوری است :

$$|\psi'\rangle = |\varphi'(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle \tag{۱۱}$$

که در آن :

$$| \varphi'(1) \rangle = \frac{P_n(1) \,|\, \varphi(1) \rangle}{\sqrt{\langle \varphi(1) \,|\, P_n(1) \,|\, \varphi(1) \rangle}} \tag{۱۲}$$

بنابراین، حالت دستگاه (۱) تغییرکرده است، ولی حالت دستگاه (۲) خیر.

(iii) اگر ویژه مقدار a_n متعلق به $A(1)$ در $\mathscr{E}(1)$ ناتبهگن باشد ــ یا، بطور کلی‌تر، اگر $A(1)$ در واقع معرف یک مجموعهٔ کامل از مشاهده‌پذیرهای جابجائی پذیر $\mathscr{E}(1)$ باشد ــ شاخص i در فرمول (۲) و فرمولهایی که بعد از آن آمده‌اند دیگر ضروری نیست. حالت دستگاه بعداز اندازه‌گیری‌ای که نتیجهٔ a_n را داده است همواره می‌تواند به‌صورت حاصلضرب دوبردار نوشته شود. این مطلب را می‌توان با نوشتن رابطهٔ (۹) به‌صورت زیر، روشن کرد :

$$| \psi' \rangle = | u_n(1) \rangle \otimes | \chi'(2) \rangle \tag{۱۳}$$

که در آن بردار بهنجارشدهٔ $| \chi'(2) \rangle$ متعلق به $\mathscr{E}(2)$ توسط رابطهٔ زیر داده می‌شود :

$$| \chi'(2) \rangle = \frac{\sum_k | v_k(2) \rangle \langle u_n(1) v_k(2) \,|\, \psi \rangle}{\sqrt{\sum_k |\langle u_n(1)\, v_k(2) \,|\, \psi \rangle|^2}} \tag{۱۴}$$

بنابراین، حالت $| \psi \rangle$ ی دستگاه کلی قبل از اندازه‌گیری هرچه باشد، حالت دستگاه بعد از یک اندازه‌گیری که تنها روی قسمت (۱) انجام می‌شود همواره یک حاصلضرب تانسوری است به‌شرطی که این اندازه‌گیری نسبت به‌قسمت (۱) کامل باشد [اگر چه نسبت به‌دستگاه کلی (۱)+(۲) جزئی در نظر گرفته می‌شود] .

۳ ــ مفهوم فیزیکی حالت حاصلضرب تانسوری

برای اینکه به‌ببینیم یک حالت حاصلضربی از نظر فیزیکی معرف چیست، نتایج پاراگراف قبلی را به‌مورد خاصی که حالت اولیهٔ دستگاه کلی بصورت (۱۰) استاعمال‌کنیم. با بکاربردن (۶) و (۳)، بلافاصله به‌دست می‌آید :

$$\mathscr{P}^{(1)}(a_n) = \langle \varphi(1)\, \chi(2) \,|\, P_n(1) \otimes \mathbb{1}(2) \,|\, \varphi(1)\, \chi(2) \rangle \tag{۱۵}$$

سپس خود تعریف حاصلضرب تانسوری $P_n(1) \otimes \mathbb{1}(2)$ و این واقعیت که $|\chi(2)\rangle$ بهنجارشده است به‌ما امکان می‌دهد تا بنویسیم:

$$\begin{aligned} \mathscr{P}^{(1)}(a_n) &= \langle \varphi(1) \mid P_n(1) \mid \varphi(1) \rangle \langle \chi(2) \mid \mathbb{1}(2) \mid \chi(2) \rangle \\ &= \langle \varphi(1) \mid P_n(1) \mid \varphi(1) \rangle \end{aligned} \qquad (۱۶)$$

$\mathscr{P}^{(1)}(a_n)$ به $|\chi(2)\rangle$ بستگی ندارد و تنها به $|\varphi(1)\rangle$ بستگی دارد. بنابر این، وقتی حالت دستگاه‌کلی به‌شکل (۱۰) باشد، هر پیش‌بینی‌فیزیکی مربوط به فقط یکی ازدودستگاه به‌حالت دستگاه دیگر بستگی ندارد و، بسته به‌اینکه دستگاه (۱) به‌تنهایی [یا دستگاه (۲) به‌تنهایی] مورد مشاهده باشد، کلاً برحسب $|\varphi(1)\rangle$ [یا $|\chi(2)\rangle$] بیان می‌شود.

بنابراین، یک حالت‌حاصلضربی $|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle$ رامی‌توان بعنوان‌معرف دودستگاه مجاور در نظر گرفت که یکی در حالت $|\varphi(1)\rangle$ باشد و دیگری در حالت $|\chi(2)\rangle$. در یک چنین حالتی، دودستگاه را غیر همبسته می‌گوئیم (بطور دقیقتر، نتایج دو نوع اندازه‌گیری، که روی یکی ازدودستگاه انجام می‌شوند، متناظرند با متغیرهای‌کتره‌ای‌مستقل). یک چنین وضعیتی وقتی تحقق می‌یابد که دودستگاه بطور جداگانه درحالتهای $|\varphi(1)\rangle$ و $|\chi(2)\rangle$ آورده شده باشند و سپس بدون اینکه برهم‌کنش کنند آنها را یکی کرده باشند.

۳ ـ مفهوم فیزیکی حالتی که حاصلضرب تانسوری نیست

حال موردی را در نظر بگیریدکه در آن حالت دستگاه کلی یک‌حاصلضرب‌تانسوری نباشد، یعنی، موردی که درآن $|\psi\rangle$ را نتوان به‌صورت $|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle$ نوشت. دراین صورت، دیگرنمی‌توان پیش بینی‌های نتایج اندازه‌گیری انجام شده روی یکی از دو دستگاه را برحسب یک کت $|\varphi(1)\rangle$ [یا $|\chi(2)\rangle$] که دستگاه (۱) [یا (۲)] در آن یافت می‌شود، بیان کرد. دراین مورد، باید برای‌یافتن احتمالات نتایج مختلف ممکن‌فرمولهای عمومی (۶) و (۷) را بکار برد. در اینجا بدون اثبات می‌پذیریم که یک چنین وضعیتی عموماً منعکس‌کنندهٔ وجود همبستگی‌هایی بین دستگاههای (۱) و (۲) است [نتایج اندازه‌گیریهای انجام‌شده روی هرکدام ازدودستگاه (۱) یا (۲) متناظر با متغیرهای‌کتره‌ای‌یی هستند که مستقل از یکدیگر نیستند و لذا می‌توانند همبسته باشند]. می‌توان، بعنوان مثال، نشان داد که یک برهم‌کنش بین دودستگاه حالت اولیه‌ای را که یک حاصلضرب است به‌حالتی که دیگر یک حاصلضرب نیست تبدیل می‌کند: بنابراین، بطورکلی هر برهم‌کنشی بین دودستگاه همبستگی‌هایی بین آنها ایجاد می‌کند.

همچنین می‌توان از خود پرسید وقتی حالت دستگاه کلی یک حاصلضرب $|\chi(2)\rangle \otimes |\varphi(1)\rangle$ نباشد، چگونه می‌توان هردستگاه جزیی (۱) یا (۲) را مشخص کرد، زیرا دیگر نمی‌توان کت $|\varphi(1)\rangle$ [یا $|\chi(2)\rangle$] را به‌آن وابسته کرد؟ این سئوال بسیار مهم است زیرا، عموماً "، هردستگاه فیزیکی (حتی اگر در لحظه‌ای که مورد مطالعه قرار می‌گیرد منزوی باشد) درگذشته با سایر دستگاهها برهم‌کنش داشته است. بنابراین، حالت دستگاه کلی: { دستگاه (۱) + دستگاههای (۲) که درگذشته با آنها برهم‌کنش داشته است } عموماً " یک حالت حاصلضربی نیست و نمی‌توان یک بردار حالت $|\varphi(1)\rangle$ به‌تنهـا دستگاه (۱) وابسته کرد. برای برطرف کردن این اشکالات، باید دستگاه (۱) را نه‌توسط یک بردارحالت بلکه بوسیلهٔ یک عملگر، که عملگر چگالی نامیده می‌شود، توصیف کرد. مختصری از فرمولبندی مربوطه، که درمکانیک آماری‌کوانتومی اساسی‌است، در مکمل E_{III} (بخش b — ۵) آمده است.

لیکن، دستگاه (۱) را همواره می‌توان، وقتی که یک‌مجموعهٔ کامل اندازه‌گیری روی آن انجام شده باشد، توسط یک بردار حالت توصیف کرد. دیدیم که حالت دستگاه کلی (۲)+(۱) قبل از اندازه‌گیری هرچه باشد، یک اندازه‌گیری‌کامل روی دستگاه (۱) دستگاه کلی را در یک حالت حاصلضربی قرار می‌دهد [رک فرمولهای (۱۳) و (۱۴)]. بردار وابسته به (۱) ویژه بردار یکتای (باتقریب یک سازه ضربی) وابسته به‌نتایج مجموعه کامل اندازه‌گیری انجام‌شده روی آن می‌باشد. بنابراین، این‌اندازه‌گیریها تمام همبستگی‌های حاصل از برهم‌کنش‌های قبلی بین دودستگاه را از بین می‌برد. بدین ترتیب، اگر، درلحظه اندازه‌گیری، دستگاه (۲) دور باشد وبادستگاه (۱) برهم‌کنش نداشته باشد، می‌توان کاملاً آنرا نادیده گرفت.

گوشزد:

بسادگی می‌توان از (۱۴) استنتاج کرد که، وقتی حالت $|\psi\rangle$ قبل از اندازه‌گیری یک حالت حاصلضربی نباشد، بردار حالت $|\chi'(2)\rangle$ وابسته به‌دستگاه (۲) بعد ازاندازه‌گیری به‌نتیجهٔ مجموعهٔ‌کامل اندازه‌گیریهای انجام شده روی دستگاه (۱) بستگی دارد [یادآور می‌شویم که وقتی $|\psi\rangle$ یک حالت حاصلضربی باشد، این چنین نیست، رک گوشزد (*ii*) ازبخش ۱]. این‌نتیجه ممکن‌است‌ازبیش‌عجیب به‌نظر رسد: حالت دستگاه (۲) بعد از اینکه یک دسته اندازه‌گیری روی دستگاه (۱) انجام شد به‌نتیجهٔ این اندازه‌گیریها بستگی دارد، حتی اگر سیستم (۲)،

در لحظهٔ اندازه‌گیری، خیلی دور از دستگاه (۱) باشد و دیگر باآن برهم کنش نداشته باشد. با این "پارادوکس"، که مفصلا" توسط بعضی فیزیکدانها مطالعه شده است، نامهای اینشتین، پادولسکی ورزن همراه است.

مراجع و پیشنهادات برای مطالعه بیشتر

پارادوکس اینشتین ــ پادولسکی ــ رُزِن : زیر بخش" متغیرهای نهفته و پارادوکسها" ی بخش ۵ کتاب شناسی را به‌بینید، و :

Bohm (5.1), §§22.15 to 22.19; d'Espagnat (5.3), chap. 7.

فوتونهای تولید شده در استحالهٔ پوزیترونیوم :

Feynman III (1.2), § 18.3; Dicke and Wittke (1.14), chap. 7.

مکمل E_{III}

عملگر چگالی

۱ ــ خلاصهٔ مسئله
۲ ــ مفهوم آمیزه آماری حالتها
۳ ــ مورد خالص، واردشدن عملگر چگالی
a ــ توصیف به‌وسیلهٔ بردار حالت
b ــ توصیف به‌وسیلهٔ عملگر چگالی
c ــ خواص عملگر چگالی در مورد خالص
۴ ــ اختلاط آماری حالتها (مورد ناخالص)
a ــ تعریف عملگر چگالی
b ــ خواص عمومی عملگر چگالی
c ــ جمعیتها ، همدوسی‌ها
۵ ــ مثالهائی از کاربرد عملگر چگالی
a ــ دستگاه در تعادل ترمودینامیکی
b ــ توصیف جداگانه یک قسمت از دستگاه فیزیکی ، مفهوم " رد " جزئی

۱ ــ *خلاصه مسئله*

تا اینجا ،دستگاههائی را در نظر گرفتیم که حالت آنها کاملا" معلوم بود . نشان دادیم که چگونه می‌توانیم تحول زمانی آنها و نتایج اندازه‌گیریهای مختلفی را که‌روی آنها انجام می‌شود پیش بینی کنیم . برای تعیین حالت یک دستگاه در یک لحظهٔ معین ، کافی است یک مجموعه اندازه‌گیریهائی متناظر با یک م.ک.م.ج. روی آن انجام‌دهیم .به‌عنوان مثال ،درآزمایش مطالعه‌شده در بخش ۳ــA از فصل اول ، قطبش فوتونها ،وقتی باریکه نور از قطبی‌کننده گذشته باشد ،کاملا" معلوم است .

اما ،درعمل ، حالت دستگاه غالبا" کاملا" معین نیست . این امر ، به‌عنوان مثال ، در مورد قطبش فوتونهایی که از یک منبع نور طبیعی (غیر قطبی) صادر می‌شوند و هم‌چنین برای اتمهای باریکه‌ای که از یک کوره در دمای T صادر شده است و انرژی جنبشی آنها فقط به‌طور آماری معلوم‌است ، صادق است . مسألهٔ مطرح شده به‌وسیلهٔ توصیف کوانتومی یک

چنین دستگاههائی به‌این شرح است : چگونه اطلاعات ناکاملی را که در بارهٔ حالت دستگاه داریم وارد صورتبندی کنیم تا بتوانیم پیش بینی‌هائی که بیشترین اتکاء را به‌این‌اطلاعات جزیی دارند بکنیم ؟ برای این منظور، در اینجا یک وسیلهٔ ریاضی بسیار مفید ، عملگر چگالی ، وارد خواهیم کرد که کاربرد همزمان اصول موضوع مکانیک کوانتومی و نتایج محاسبات احتمالات را تسهیل می‌کند .

۲ ــ مفهوم آمیزه آماری حالتها

وقتی اطلاعات ناقصی در بارهٔ یک دستگاه داشته باشیم ، به‌مفهوم احتمال‌متوسل می‌شویم . به‌عنوان مثال ، می‌دانیم که فوتون صادرشده از یک منبع نور طبیعی می‌تواند هر قطبشی را بااحتمال مساوی داشته باشد . هم‌چنین ، یک دستگاه در حال تعادل ترمودینامیکی دردمای T ،بااحتمالی‌متناسب با $e^{-E_n/kT}$ درحالتی باانرژی E_n قراردارد.
به‌طور کلی‌تر ، اطلاعات ناکاملی که در بارهٔ دستگاه داریم ،معمولاً ، در مکانیک کوانتومی ، به‌صورت زیر خود را نشان می‌دهد : این دستگاه می‌تواند یا درحالت $|\psi_1\rangle$ با احتمال p_1 ، یا در حالت $|\psi_2\rangle$ بااحتمال p_2 ، و غیره باشد . مسلماً داریم :

$$p_1 + p_2 + \dots = \sum_k p_k = 1 \qquad (1)$$

در این‌صورت می‌گوئیم که بایک آمیزه‌آماری ازحالتهای $|\psi_1\rangle$ ، $|\psi_2\rangle$ ، . . . بااحتمالات p_1 ، p_2 ، . . . سروکارداریم .
حال به‌ببینیم برای پیش بینی‌های مربوط به‌نتایج اندازه‌گیریهای انجام شده روی این‌دستگاه چه اتفاق می‌افتد . اگر حالت دستگاه $|\psi_k\rangle$.می‌بود ، می‌توانستیم بااستفاده از اصول موضوع بیان شده در فصل سوم احتمال یافتن نتیجهٔ اندازه‌گیری را تعیین کنیم . چون یک‌چنین امکانی (حالت $|\psi\rangle$) دارای احتمال p_k است ، واضح است‌که‌نتایج به‌دست آمده باید ابتدا توسط p_k توزین شوند و سپس روی مقادیر مختلف k ،یعنی ، روی تمام حالتهای آمیزه‌آماری ، جمع‌بندی شوند .

گوشزدها :

(*i*) حالتهای مختلف $|\psi_1\rangle$ ، $|\psi_2\rangle$ ، . . . الزاماً متعامد نیستند . اما همواره می‌توانند بهنجارشده انتخاب شوند ، در این مکمل فرض خواهیم کرد که اینطور است .

(ii) باید توجه شود که در مورد حاضر، احتمالات دردوسطح متفاوت دخالت می‌کنند.
ـ ابتدا، در اطلاعات اولیه از دستگاه (تااینجا، احتمالات را تا این مرحله وارد نکرده‌ایم، بردار حالت را کاملا" معلوم در نظر گرفتیم، که دراین‌مورد تمام احتمالات p_k، بجز یکی که برابر ۱ است، صفراند).
ـ سپس، به‌هنگام اعمال اصول موضوع مربوط به‌اندازه‌گیری (که، حتی اگر حالت اولیهٔ دستگاه‌کاملا" معلوم‌باشد، منجر به‌پیش بینی‌های احتمالاتی‌می‌شود).
بنابراین، دودلیل کاملا" متفاوت وارد کردن احتمالات دراین دوسطح را ایجاب می‌کنند: طبیعت‌ناکامل اطلاعات اولیه دربارهٔ حالت دستگاه (باچنین‌وضعیتهایی درمکانیک آماری کلاسیک نیزمواجه می‌شویم)، وعدم قطعیت (مشخصا" کوانتومی) مربوط به‌فرایند اندازه‌گیری.

(iii) نباید دستگاهی را که توسط یک آمیزه آماری حالتها (بااحتمال p_k برای‌اینکه‌بردار حالت $|\psi_k\rangle$ باشد) توصیف می‌شود بادستگاهی که حالت $|\psi\rangle$ ی آن یک برهم‌نهش خطی از حالتهاست، یعنی:

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k |\psi_k\rangle \tag{۲}$$

اشتباه کرد. درمکانیک کوانتومی، وقتی بردار حالت کت $|\psi\rangle$ که توسط رابطهٔ (۲) داده می‌شود باشد، می‌گوئیم که "دستگاه بااحتمال $|c_k|^2$ درحالت $|\psi_k\rangle$ است". دقیقا" منظور این است که اگر اندازه‌گیریهائی متناظر با یک م.ک.م.ج. که $|\psi_k\rangle$ ویژه‌بردار آنها است انجام‌دهیم، احتمال یافتن مجموعه ویژه‌مقدارهای وابسته به $|\psi_k\rangle$ برابر با $|c_k|^2$ است. اما، دربخش E–۱ ازفصل‌سوم این واقعیت را مورد تاٴکید قرار دادیم که یک دستگاه در حالت $|\psi\rangle$ که توسط (۲) داده‌شده است **معادل** با دستگاهی که بااحتمال $|c_1|^2$ درحالت $|\psi_1\rangle$، و بااحتمال $|c_2|^2$ در حالت $|\psi_2\rangle$ .... باشد نیست. در واقع، برای یک ترکیب خطی $|\psi_k\rangle$ ها، عموما"، آثار تداخلی بین این حالتها (ناشی از جملات ضربدری از نوع $c_k c_{k'}^*$، که در مجذورکردن قدر مطلق دامنه‌های احتمال به‌دست می‌آیند) به‌وجود می‌آید که در مکانیک کوانتومی بسیار مهم‌اند.

به‌این ترتیب ملاحظه می‌کنیم که، عموما"، غیرممکن است بتوانیم یک آمیزه آماری را توسط یک "بردارحالت میانگین"، که برهم‌نهشی از حالتهای $|\psi_k\rangle$ باشد، توصیف‌کنیم. همان‌طوری که قبلا" اشاره کردیم، وقتی یک جمع توزین‌شدهٔ احتمالات انجام می‌دهیم، هرگز نمی‌توانیم بین حالتهای مختلف $|\psi_k\rangle$ ی یک آمیزه آماری جملات تداخلی به‌دست

آوریم .

۳ ـ مورد خالص ، واردکردن عملگر چگالی

برای مطالعهٔ رفتار آمیزه آماری حالتها ، یک‌روش را دربالا بررسی‌کردیم :محاسبهٔ پیش‌بینی‌های فیزیکی متناظر بایک حالت ممکن $|\psi_k\rangle$ ، توزین نتایج به‌دست‌آمده توسط احتمال p_k وابسته به‌این حالت ، وجمع‌بندی روی k . باوجودی که این روش از نظر اصولی صحیح است غالبا" منجر به‌محاسبات مشکلی می‌شود . سپس[در گوشزد(iii)]نشان دادیم که نمی‌توان دستگاه یک" بردار حالت میانگین" وابسته کرد . در واقع ، این یک عملگرمیانگین است و نه یک" بردار میانگین" که توصیف ساده آمیزه آماری حالتها را ممکن می‌کند ، وآن عملگر چگالی است .

قبل از مطالعهٔ این مورد عام ،ابتدا ، مورد ساده‌ای‌را که‌حالت دستگاه‌کاملا" معلوم است (تمام احتمالات p_k بجز یکی صفراند)مجددا" مورد بررسی قرار می‌دهیم . در این صورت گوئیم که دستگاه در یک حالت خالص است . نشان خواهیم داد که مشخص‌کردن دستگاه توسط بردار حالتش کاملا" معادل است با مشخص‌کردن آن توسط یک عملگر معین‌که در فضای حالت عمل می‌کند ،عملگر چگالی .سودمندی این عملگر در بخش ۴ روشن خواهد شد : در واقع نشان خواهیم داد که تقریبا" تمام فرمولهائی که در آنها این عملگر وارد می‌شود (و برای مورد خالص‌آنها را ثابت خواهیم کرد) برای توصیف یک‌آمیزه‌آماری حالتها معتبر خواهند ماند .

a ـ توصیف توسط یک بردار حالت

دستگاهی را در نظر بگیرید که بردار حالت آن در لحظه t :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)\,|u_n\rangle \tag{۳}$$

باشد ، که در آن $\{|u_n\rangle\}$ یک پایهٔ راست‌هنجار از فضای حالتها ، که فرض می‌شود گسسته باشد ، تشکیل می‌دهد (تعمیم به‌مورد یک پایهٔ پیوسته مشکلی ایجاد نمی‌کند). ضرائب $c_n(t)$ رابطهٔ :

$$\sum_n |c_n(t)|^2 = 1 \tag{۴}$$

را که بیان‌کننده این واقعیت است که $|\psi(t)\rangle$ بهنجارشده است ، برآورده می‌کنند . اگر A یک مشاهده‌پذیر ، باعناصر ماتریسی :

$$\langle u_n | A | u_p \rangle = A_{np} \tag{۵}$$

باشد . مقدار متوسط A در لحظهٔ t برابر است با :

$$\langle A \rangle(t) = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = \sum_{n,p} c_n^*(t)\, c_p(t)\, A_{np} \tag{۶}$$

بالاخره، تحول $|\psi\rangle$ توسط معادلهٔ شرودینگر :

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} | \psi(t) \rangle = H(t) | \psi(t) \rangle \tag{۷}$$

توصیف می‌شود ، که در آن $H(t)$ هامیلتونی دستگاه است .

b ــ توصیف توسط عملگر چگالی

رابطهٔ (۶) نشان می‌دهد که ضرائب $c_n(t)$ از طریق عبارتهای مربعی از نوع $c_n^*(t)c_p(t)$ واردمقادیر متوسط شده‌اند . این عبارتها همان عناصر ماتریسی عملگر $|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$ ، تصویرگر روی کت $|\psi(t)\rangle$ ، هستند (رک فصل دوم بخش b ـ۳ـ B) :

$$\langle u_p | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | u_n \rangle = c_n^*(t) c_p(t) \tag{۸}$$

بنابراین طبیعی است که عملگر چگالی $\rho(t)$ را به‌صورت زیر وارد کنیم :

$$\rho(t) = | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | \tag{۹}$$

عملگر چگالی در پایهٔ $\{ | u_n \rangle \}$ توسط یک ماتریس به‌نام ماتریس چگالی که عناصر آن عبارتند از :

$$\rho_{pn}(t) = \langle u_p | \rho(t) | u_n \rangle = c_n^*(t) c_p(t) \tag{۱۰}$$

نشان داده می‌شود .

می‌خواهیم نشان دهیم‌که معلوم بودن $\rho(t)$ برای مشخص نمودن حالت کوانتومی دستگاه کافی است ،یعنی ،این امر ما را قادر می‌سازد تاتمام پیش بینی‌های فیزیکی را که می‌توان از $|\psi(t)\rangle$ محاسبه کرد . به‌دست آوریم .برای این منظور ،فرمولهای (۴) ، (۶) و

(۷) را برحسب عملگر $\rho(t)$ می‌نویسیم. بنابر (۱۰)، رابطه (۴) نشان می‌دهد که مجموع عناصر قطری ماتریس چگالی برابر ۱ است:

$$\sum_n |c_n(t)|^2 = \sum_n \rho_{nn}(t) = \operatorname{Tr} \rho(t) = 1 \tag{۱۱}$$

بعلاوه، بااستفاده از (۵) و (۱۰)، فرمول (۶) به‌صورت زیر در می‌آید:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle(t) &= \sum_{n,p} \langle u_p | \rho(t) | u_n \rangle \langle u_n | A | u_p \rangle \\ &= \sum_p \langle u_p | \rho(t) A | u_p \rangle \\ &= \operatorname{Tr} \{ \rho(t) A \} \end{aligned} \tag{۱۲}$$

بالاخره تحول زمانی عملگر $\rho(t)$ می‌تواند از معادله شرودینگر (۷) استنتاج شود:

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \rho(t) &= \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} | \psi(t) \rangle \right) \langle \psi(t) | + | \psi(t) \rangle \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle \psi(t) | \right) \\ &= \frac{1}{i\hbar} H(t) | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | + \frac{1}{(-i\hbar)} | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | H(t) \\ &= \frac{1}{i\hbar} [H(t), \rho(t)] \end{aligned} \tag{۱۳}$$

بنابراین، بقاء احتمال، برحسب عملگر چگالی، به‌صورت زیر بیان می‌شود:

$$\operatorname{Tr} \rho(t) = 1 \tag{۱۴}$$

مقدار متوسط یک مشاهده‌پذیر A بااستفاده از فرمول:

$$\langle A \rangle (t) = \operatorname{Tr} \{ A\rho(t) \} = \operatorname{Tr} \{ \rho(t) A \} \tag{۱۵}$$

محاسبه می‌شود و تحول زمانی از معادلهٔ:

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \rho(t) = [H(t), \rho(t)] \tag{۱۶}$$

تبعیت می‌کند. برای کامل‌شدن مطلب، باید هم‌چنین نشان دهیم که چگونه از $\rho(t)$ احتمالهای $\mathscr{P}(a_n)$ برای نتایج مختلف a_n را که می‌توانند در اندازه‌گیری یک مشاهده‌پذیر A در زمان t به‌دست آیند، محاسبه کنیم. در واقع می‌توان برای این منظور از فرمول (۱۵) استفاده کرد. می‌دانیم که [معادله (B ــ ۱۴) از فصل سوم را به‌ببینید] $\mathscr{P}(a_n)$ می‌تواند به‌صورت یک مقدار متوسط، تصویرگر P_n روی ویژه زیرفضای وابسته به a_n، نوشته شود:

$$\mathscr{P}(a_n) = \langle \psi(t) \mid P_n \mid \psi(t) \rangle \tag{17}$$

بنابراین بااستفاده از (۱۵) به‌دست می‌آوریم :

$$\mathscr{P}(a_n) = \mathrm{Tr}\,\{ P_n\, \rho(t) \} \tag{18}$$

c ـ *خواص عملگر چگالی در یک مورد خالص*

دریک مورد خالص، یک دستگاه می‌تواند هم توسط یک بردار حالت توصیف شود و هم به‌وسیله یک عملگر چگالی .لیکن عملگر چگالی دارای چند مزیت‌است .

اولا" از (۹) ملاحظه می‌کنیم که دوبردار حالت $\mid\psi(t)\rangle$ و $e^{i\theta}\mid\psi(t)\rangle$ (که‌درآن θ یک عدد حقیقی است)که یک حالت فیزیکی را توصیف می‌کنند بایک عملگر چگالی متناظرند. لذااستفاده ازاین عملگر معایب مربوط به‌وجود یک ضریب فازکلی‌برای‌بردارحالت را برطرف می‌کند . بعلاوه، از (۱۴) ، (۱۵)و (۱۸) مشاهده می‌کنیم که فرمولهائی‌که درآنها ازعملگر چگالی استفاده شده است نسبت به‌آن خطی‌اند ، درحالی که روابط (۶) و (۱۷) نسبت به $\mid\psi(t)\rangle$ مربعی‌اند . این یک خاصیت مهمی است که بعدا " مفید واقع خواهد شد .

بالاخره، چندخاصیت $\rho(t)$ را که می‌توان فورا" از تعریف آن، رابطهٔ (۹) ، نتیجه‌گیری کرد ، ذکر می‌کنیم :

$$\rho^\dagger(t) = \rho(t) \tag{19}$$

(عملگر چگالی هرمیتی است)

$$\rho^2(t) = \rho(t) \tag{20}$$

$$\mathrm{Tr}\,\rho^2(t) = 1 \tag{21}$$

این دورابطهٔ آخر، که ازین واقعیت که $\rho(t)$ یک تصویرگراست ناشی شده‌اند، تنهادرمورد خالص برقرارند . بعدا " خواهیم دید که این روابط برای یک آمیزه آماری حالتها معتبر نیستند .

۴ ــ آمیزه آماری حالتها [مورد غیرخالص]

a ــ تعریف عملگر چگالی

حال به‌مورد عام تشریح شده دربخش ۱ برمی‌گردیم و دستگاهی را درنظرمی‌گیریم که (در یک‌زمان معین) برای آن احتمالهای مختلف p_1 ، p_2 ، ... ، p_k ، ... دلخواه‌اند، بااین‌شرط که در روابط زیر صدق کنند:

$$\begin{cases} 0 \leqslant p_1, p_2, ..., p_k, ... \leqslant 1 \\ \sum_k p_k = 1 \end{cases} \tag{۲۲}$$

تحت این شرایط، چگونه احتمال $\mathscr{P}(a_n)$ برای‌اینکه یک اندازه‌گیری مشاهده‌پذیر A نتیجهٔ a_n را بدهد محاسبه می‌شود؟

فرض کنید که:

$$\mathscr{P}_k(a_n) = \langle \psi_k \mid P_n \mid \psi_k \rangle \tag{۲۳}$$

احتمالی باشد که اگر بردار حالت $\langle \psi_k |$ می‌بود، نتیجه a_n به‌دست‌می‌آمد. برای به‌دست آوردن احتمال $\mathscr{P}(a_n)$ باید، همان‌گونه که قبلاً بیان کردیم، $\mathscr{P}_k(a_n)$ را توسط p_k توزین کنیم و سپس روی k جمع بندی کنیم:

$$\mathscr{P}(a_n) = \sum_k p_k \mathscr{P}_k(a_n) \tag{۲۴}$$

از (۱۸)، داریم:

$$\mathscr{P}_k(a_n) = \mathrm{Tr} \{ \rho_k P_n \} \tag{۲۵}$$

که در آن:

$$\rho_k = | \psi_k \rangle \langle \psi_k | \tag{۲۶}$$

عملگر چگالی متناظر باحالت $\langle \psi_k |$ است. با بردن (۲۵) در (۲۴)، داریم:

$$\begin{aligned} \mathscr{P}(a_n) &= \sum_k p_k \mathrm{Tr} \{ \rho_k P_n \} \\ &= \mathrm{Tr} \{ \sum_k p_k \rho_k P_n \} \quad = \mathrm{Tr} \{ \rho P_n \} \end{aligned} \tag{۲۷}$$

که در آن قرار داده‌ایم :

$$\rho = \sum_k p_k \, \rho_k \tag{۲۸}$$

بنابراین ملاحظه می‌کنیم که خطی‌بودن فرمولهایی که در آنها عملگر چگالی بکار رفته است مارا قادرمی‌سازد تاتمام پیش‌بینی‌های فیزیکی را برحسب ρ ، میانگین‌عملگرهای چگالی ρ_k ، بیان کنیم ، ρ بنا به‌تعریف عملگر چگالی دستگاه است .

b ـ خواص عمومی عملگر چگالی

چون ضرائب p_k حقیقی‌اند ، واضح است که ρ مانند هریک از ρ_k ها یک عملگر هرمیتی است .

رد ρ را محاسبه می‌کنیم ، برابر است با :

$$\mathrm{Tr}\, \rho = \sum_k p_k \, \mathrm{Tr}\, \rho_k \tag{۲۹}$$

اما ، همان‌طوری که در بخش b ـ۳ دیدیم ، رد ρ_k همواره برابر 1 است ، در نتیجه :

$$\mathrm{Tr}\, \rho = \sum_k p_k = 1 \tag{۳۰}$$

بنابراین رابطهٔ (۱۴) در مورد عمومی معتبر است .

قبلاً ، در (۲۷) ، رابطه‌ای دادیم که به‌ما امکان می‌دهد تا احتمال $\mathscr{P}(a_n)$ [۱] را برحسب ρ محاسبه کنیم . بااستفاده از این رابطه ، به‌آسانی می‌توانیم فرمول (۱۵) را به‌آمیزه‌های آماری تعمیم دهیم :

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_n a_n \mathscr{P}(a_n) = \mathrm{Tr}\, \{ \rho \sum_n a_n P_n \} \\ &= \mathrm{Tr}\, \{ \rho A \} \end{aligned} \tag{۳۱}$$

[از فرمول (b ـ۳۶ـ D) از فصل دوم استفاده کرده‌ایم] .

حال تحول زمانی عملگر چگالی را محاسبه کنیم . برای این منظور ، فرض خواهیم کرد که ، برخلاف حالت دستگاه ، هامیلتونی $H(t)$ ی آن کاملاً معلوم باشد . در این‌صورت می‌توان به‌آسانی نشان دادکه اگر دستگاه در زمان t_0 بااحتمال p_k درحالت $|\psi_k\rangle$ باشد ، درزمان بعدی t ، باهمان احتمال p_k در حالت $|\psi_k(t)\rangle$ است که توسط روابط زیر داده می‌شود :

$$\begin{cases} i\hbar \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \,|\, \psi_k(t) \rangle = H(t) \,|\, \psi_k(t) \rangle \\ |\, \psi_k(t_0) \rangle = |\, \psi_k \rangle \end{cases} \tag{۳۲}$$

در این صورت عملگر چگالی در لحظهٔ t برابر خواهد بود با:

$$\rho(t) = \sum_k p_k \, \rho_k(t) \tag{۳۳}$$

که در آن،

$$\rho_k(t) = |\, \psi_k(t) \rangle \langle \psi_k(t) \,| \tag{۳۴}$$

بر طبق (۱۶)، $\rho_k(t)$ از معادلهٔ تحول زیر تبعیت می‌کند:

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \rho_k(t) = [H(t), \rho_k(t)] \tag{۳۵}$$

از خطی بودن فرمولهای (۳۳) و (۳۵) نسبت به $\rho_k(t)$ نتیجه می‌شود.

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \rho(t) = [H(t), \rho(t)] \tag{۳۶}$$

از این‌رو می‌توانیم تمام‌معادلات بخش ۳ به‌استثنای معادلات (۲۰) و (۲۱) را به‌یک آمیزه آماری حالتها تعمیم دهیم. مشاهده می‌کنیم که چون ρ دیگر یک تصویرگیر نیست عموماً داریم*:

$$\rho^2 \neq \rho \tag{۳۷}$$

و در نتیجه:

$$\mathrm{Tr}\, \rho^2 \leqslant 1 \tag{۳۸}$$

بعلاوه، کافی است فقط یکی از معادلات (۲۰) یا (۲۱) برقرار باشد تا مطمئن شویم با یک

---

* فرض کنید، به‌عنوان مثال، حالتهای $\langle \psi_k |$ متعامد باشند. در یک پایهٔ راست هنجار شامل $\langle \psi_k |$ ، ρ قطری است و عناصر آن p_k هستند. برای به‌دست‌آوردن ρ^2 ،کافی است p_k^2 را جایگزین p_k کنیم. دراین‌صورت روابط (۳۷) و (۳۸) از این واقعیت نتیجه می‌شوند که p_k ها همواره کوچکتر از ۱ هستند (بجز در مورد خاصی که فقط یکی از آنها غیر صفر است: مورد خالص).

حالت خالص سروکار داریم .

بالاخره، از تعریف (۲۸) می‌بینم که برای هرکت $\langle u|$ داریم :

$$\begin{aligned} \langle u | \rho | u \rangle &= \sum_k p_k \langle u | \rho_k | u \rangle \\ &= \sum_k p_k |\langle u | \psi_k \rangle|^2 \end{aligned} \tag{۳۹}$$

و در نتیجه :

$$\langle u | \rho | u \rangle \geqslant 0 \tag{۴۰}$$

لذا ρ یک عملگر مثبت است .

c . *جمعیتها ، همدوسی‌ها* .

معنای فیزیکی عناصر ماتریسی ρ_{np} وابسته به ρ در پایهٔ $\{|u_n\rangle\}$ چیست؟ ابتدا عنصر قطری ρ_{nn} را در نظر می‌گیریم . بنابر (۲۸) داریم :

$$\rho_{nn} = \sum_k p_k [\rho_k]_{nn} \tag{۴۱}$$

یعنی ، بااستفاده از (۲۶) و وارد کردن مؤلفه‌های $\langle \psi_k|$ در پایه $\{|u_n\rangle\}$ ، یعنی:

$$c_n^{(k)} = \langle u_n | \psi_k \rangle \tag{۴۲}$$

داریم :

$$\rho_{nn} = \sum_k p_k |c_n^{(k)}|^2 \tag{۴۳}$$

$|c_n^{(k)}|^2$ یک عدد حقیقی مثبت است ،که تعبیر فیزیکی‌آن به‌شرح زیراست : اگرحالت‌دستگاه $\langle \psi_k|$ باشد ، این‌عدد عبارت است از احتمال یافتن دستگاه، در یک اندازه‌گیری ، در حالت $|u_n\rangle$. بنابر (۴۱) ، باتوجه به‌عدم قطعیت دستگاه قبل از اندازه‌گیری ، ρ_{nn} معرف احتمال میانگین یافتن دستگاه در حالت $\langle u_n|$ است . به‌این دلیل ، ρ_{nn} جمعیت حالت $\langle u_n|$ نامیده می‌شود : اگر تعداد بسیار زیاد N اندازه‌گیری با شرایط اولیه یکسان انجام شود ، $N\rho_{nn}$ دستگاه درحالت $\langle u_n|$ یافت خواهد شد . از (۴۳) واضح است‌که ρ_{nn} یک‌عدد حقیقی مثبت است ، که تنها زمانی برابر صفر است که تمام $|c_n^{(k)}|^2$ هاصفر باشند .

محاسبه‌ای مشابه با محاسبه قبل عبارت زیر را برای عنصر غیر قطری ρ_{np} به‌دست می‌دهد:

$$\rho_{np} = \sum_k p_k c_n^{(k)} c_p^{(k)*} \tag{۴۴}$$

$c_n^{(k)} c_p^{(k)*}$ یک جمله ضربدری از همان نوع مطالعه شده در بخش E-۱ از فصل سوم است. این جمله بیانگر آثار تداخلی بین حالتهای $|u_n\rangle$ و $|u_p\rangle$ است که وقتی حالت $|\psi_k\rangle$ یک بر هم‌نهش خطی همدوس از این حالتها باشد، ظاهر می‌شود. برطبق (۴۴)، ρ_{np} میانگین این جملات ضربدری است که روی تمام حالتهای ممکن آمیزه آماری گرفته شده است. برخلاف جمعیتها، ρ_{np} می‌تواند، حتی اگر هیچکدام از حاصلضربهای $c_n^{(k)} c_p^{(k)*}$ صفر نباشند، برابر صفر باشد: در حالی که ρ_{nn} مجموع اعداد صحیح مثبت (یا صفر) است، ρ_{np} مجموع اعداد مختلط است. وقتی ρ_{np} صفر است، بدین معنی است که میانگین (۴۴) هرگونه تداخل بین $|u_n\rangle$ و $|u_p\rangle$ را از بین برده است. برعکس، اگر ρ_{np} مخالف صفر باشد، نوعی همدوسی بین این حالتها برقرار است. به‌این دلیل است که عناصر غیرقطری ρ اغلب همدوسیها نامیده می‌شوند.

گوشزدها:

(i) تمایز بین جمعیتها و همدوسیها به‌طور آشکار به‌پایه‌ٔ $\{|u_n\rangle\}$ انتخاب شده در فضای حالتها بستگی دارد. چون ρ هرمیتی است، همواره می‌توان یک پایه‌ٔ راست‌هنجار $\{|\chi_l\rangle\}$ پیدا کرد که در آن ρ قطری باشد. در این‌صورت ρ می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

$$\rho = \sum_l \pi_l |\chi_l\rangle\langle\chi_l| \tag{۴۵}$$

چون ρ مثبت است و چون $\mathrm{Tr}\,\rho = 1$، داریم:

$$\begin{cases} 0 \leqslant \pi_l \leqslant 1 \\ \sum_l \pi_l = 1 \end{cases} \tag{۴۶}$$

بدین ترتیب می‌توان ρ را به‌عنوان توصیف‌کننده‌ٔ یک آمیزه آماری از حالتهای $|\chi_l\rangle$ با احتمالهای π_l درنظر گرفت (بین حالتهای $|\chi_l\rangle$ همدوسی وجود ندارد.

(ii) اگر کتهای $|u_n\rangle$ ویژه بردارهای هامیلتونی H، که مستقل از زمان فرض می‌شود، باشند:

$$H\,|\,u_n\rangle = E_n\,|\,u_n\rangle \tag{۴۷}$$

مستقیما" از (۳۶) به‌دست می‌آوریم :

$$\begin{cases} i\hbar \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\rho_{nn}(t) = 0 \\ i\hbar \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\rho_{np}(t) = (E_n - E_p)\rho_{np} \end{cases} \tag{۴۸}$$

یعنی :

$$\begin{cases} \rho_{nn}(t) = \text{constant} \\ \rho_{np}(t) = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(E_p - E_n)t}\rho_{np}(0) \end{cases} \tag{۴۹}$$

جمعیتها ثابت‌اند و همدوسیها با فرکانسهای بوهر دستگاه نوسان می‌کنند .

(*iii*) می‌توان ، بااستفاده از (۴۰) نامساوی زیر را ثابت کرد :

$$\rho_{nn}\,\rho_{pp} \geqslant |\rho_{np}|^2 \tag{۵۰}$$

از این نامساوی ، به‌عنوان مثال ، نتیجه می‌شود که ρ می‌تواند فقط بین حالتهایی که جمعیتهای آنها صفر است همدوسی‌هایی داشته باشد .

۵ ــ کاربردهای عملگر چگالی

a ــ دستگاه در تعادل ترمودینامیکی

اولین مثالی‌که بررسی می‌کنیم ازمکانیک آماری کوانتومی‌گرفته شده‌است . دستگاهی درنظر بگیریم که با یک چشمه گرمایی در دمای مطلق T درحال تعادل است . می‌توان‌نشان داد که در این‌صورت عملگر چگالی عبارت است از :

$$\rho = Z^{-1}\,\mathrm{e}^{-H/kT} \tag{۵۱}$$

که در آن H هامیلتونی دستگاه ، k ثابت بولتزمن و Z یک ضریب بهنجارش است که‌طوری انتخاب شده است که‌ رد ρ برابر ۱ شود :

$$Z = \mathrm{Tr}\,\{\,\mathrm{e}^{-H/kT}\,\} \tag{۵۲}$$

(Z " تابع‌افراز " نامیده می‌شود)

در پایهٔ $\{ |u_n\rangle \}$ ، متشکل از ویــژه‌بردارهــای H ، داریم (رک . مکمل B_{II} ، بخش a ــ۴) :

$$\begin{aligned} \rho_{nn} &= Z^{-1} \langle u_n | e^{-H/kT} | u_n \rangle \\ &= Z^{-1} e^{-E_n/kT} \end{aligned} \tag{۵۳}$$

و

$$\begin{aligned} \rho_{np} &= Z^{-1} \langle u_n | e^{-H/kT} | u_p \rangle \\ &= Z^{-1} e^{-E_p/kT} \langle u_n | u_p \rangle \\ &= 0 \end{aligned} \tag{۵۴}$$

در تعــادل ترمودینامیکی ، جمعیتهای حالتهای مانا توابعی نمایــی و نزولی از انرژی‌انــد (هرچه دمای T پائین‌تر باشد ، این نزول سریعتر است) ، و همدوسی‌ها بین حالتهای مانــا صفر است .

b ــ توصیف جداگانه یک قسمت از دستگاه فیزیکی . مفهوم رد جزئی .

اکنون به‌مسالهٔ ذکرشده در بخش ۳ از مکمل D_{III} برمی‌گردیم . دستگاه متفــاوت (۱)و(۲) و دستگاه کلی (۲)+(۱) ، را که فضای حالتهای آن حاصلضرب تانسوری :

$$\mathscr{E} = \mathscr{E}(1) \otimes \mathscr{E}(2) \tag{۵۵}$$

است ، درنظربگیریم . فرض کنیم $\{ |u_n(1)\rangle \}$ یک پایه $\mathscr{E}(1)$ و $\{ |v_p(2)\rangle \}$ یک پایه $\mathscr{E}(2)$ باشد ، کتهای $|u_n(1)\rangle |v_p(2)\rangle$ یک پایه $\mathscr{E}$ را تشکیل می‌دهند .

عملگر چگالی ρ ی دستگاه کلی عملگری است که در $\mathscr{E}$ عمل می‌کند . در فصل دوم (رک . بخش b ــ۲ــ F)دیدیم که چگونه می‌توان عملگری را که فقط در $\mathscr{E}(1)$ [یا $\mathscr{E}(2)$] عمل می‌کند به $\mathscr{E}$ گسترش داد . در اینجا می‌خواهیم نشان دهیم که چگونه عمل عــکس را انجام دهیم : از ρ یک عملگــر $\rho(1)$ [یا $\rho(2)$] بسازیم که فقط در $\mathscr{E}(1)$ [یا $\mathscr{E}(2)$] عمــل کند و تمام پیش‌بینی‌های فیزیکی در بارهٔ اندازه‌گیریهایی را که فقط روی دستگــاه (۱) [یا دستگاه (۲)] انجام می‌شود ممکن سازد . این عمل ، رد جزیی نسبت به (۲) [یا (۱)] نامیده می‌شود .

عملگر $\rho(1)$ را که عناصر ماتریسی آن :

$$\langle u_n(1) | \rho(1) | u_{n'}(1) \rangle = \sum_p (\langle u_n(1) | \langle v_p(2) |) \rho (| u_{n'}(1) \rangle | v_p(2) \rangle) \tag{۵۶}$$

هستند ، وارد می‌کنیم .

بنا به‌تعریف ، $\rho(1)$ از ρ توسط انجام یک رد جزیی روی (۲) به‌دست آمده است :

$$\rho(1) = \mathrm{Tr}_2\, \rho \tag{۵۷}$$

به‌طور مشابه ، عملگر :

$$\rho(2) = \mathrm{Tr}_1\, \rho \tag{۵۸}$$

دارای عناصر ماتریسی زیر است :

$$\langle v_p(2) \,|\, \rho(2) \,|\, v_{p'}(2) \rangle = \sum_n (\langle u_n(1) \,|\, \langle v_p(2) \,|)\, \rho\, (|\, u_n(1) \rangle \,|\, v_{p'}(2) \rangle) \tag{۵۹}$$

واضح است که چرا این عملها رد جزئی نامیده می‌شوند . می‌دانیم که رد (کل) ρ برابر است با :

$$\mathrm{Tr}\, \rho = \sum_n \sum_p (\langle u_n(1) \,|\, \langle v_p(2) \,|)\, \rho\, (|\, u_n(1) \rangle \,|\, v_p(2) \rangle) \tag{۶۰}$$

اختلاف بین (۶۰) و (۵۶) [یا (۵۹)] به‌صورت زیر است : برای ردهای جزیی ، لازم نیست که شاخصهای n و n' (یا p و p') برابر باشند و جمع‌بندی فقط روی p (یا n) انجام می‌شود ، بعلاوه داریم :

$$\mathrm{Tr}\, \rho = \mathrm{Tr}_1(\mathrm{Tr}_2\, \rho) = \mathrm{Tr}_2(\mathrm{Tr}_1\, \rho) \tag{۶۱}$$

بنابراین $\rho(1)$ و $\rho(2)$ مانند ρ ، عملگرهایی هستند که رد آنها برابر ۱ است . می‌توان از روی تعریف آنها ثابت کرد که هرمیتی می‌باشند و عموما" تمام خواص یک عملگر چگالی را دارا می‌باشند .

حال فرض کنید $A(1)$ یک عملگر باشد که در $\mathscr{E}(1)$ عمل می‌کند و $\tilde{A}(1) = A(1) \otimes \mathbb{1}(2)$ تعمیم آن در $\mathscr{E}$ ، بااستفاده از (۳۱) ، تعریف رد ، و رابطه‌ٔ بستاری روی پایه‌ٔ $\{ |u_n(1)\rangle |v_p(2)\rangle \}$ بدست می‌آوریم :

$$\begin{aligned}
\langle \tilde{A}(1) \rangle &= \mathrm{Tr}\, \{ \rho \tilde{A}(1) \} \\
&= \sum_{n,p} \sum_{n',p'} (\langle u_n(1) \,|\, \langle v_p(2) \,|)\, \rho\, (|\, u_{n'}(1) \rangle \,|\, v_{p'}(2) \rangle) \\
&\qquad \times (\langle u_{n'}(1) \,|\, \langle v_{p'}(2) \,|) A(1) \otimes \mathbb{1}(2) (|\, u_n(1) \rangle \,|\, v_p(2) \rangle) \\
&= \sum_{n,p,n',p'} (\langle u_n(1) \,|\, \langle v_p(2) \,|)\, \rho\, (|\, u_{n'}(1) \rangle \,|\, v_{p'}(2) \rangle) \\
&\qquad \times \langle u_{n'}(1) \,|\, A(1) \,|\, u_n(1) \rangle \langle v_{p'}(2) \,|\, v_p(2) \rangle
\end{aligned} \tag{۶۲}$$

حال :

$$\langle v_{p'}(2) \mid v_p(2) \rangle = \delta_{pp'} \quad (۶۳)$$

از اینرو می‌توان (۶۲) را بصورت زیر نوشت :

$$\langle \tilde{A}(1) \rangle = \sum_{n,n'} \left[\sum_p \langle u_n(1)\, v_p(2) \mid \rho \mid u_{n'}(1)\, v_p(2) \rangle \right] \langle u_{n'}(1) \mid A(1) \mid u_n(1) \rangle \quad (۶۴)$$

در داخل پرانتز در طرف راست همان عنصر ماتریسی $\rho(1)$ که در (۵۶) تعریف شد می‌باشد. بنابراین ، داریم :

$$\begin{aligned} \langle \tilde{A}(1) \rangle &= \sum_{n,n'} \langle u_n(1) \mid \rho(1) \mid u_{n'}(1) \rangle \langle u_{n'}(1) \mid A(1) \mid u_n(1) \rangle \\ &= \sum_n \langle u_n(1) \mid \rho(1)\, A(1) \mid u_n(1) \rangle \\ &= \mathrm{Tr}\ \{ \rho(1)\, A(1) \} \end{aligned} \quad (۶۵)$$

حال این نتیجه را با (۳۱) مقایسه کنیم . می‌بینیم که رد جزیی $\rho(1)$ ما را قـــادر می‌سازد تا تمام مقادیر متوسط $\langle \tilde{A}(1) \rangle$ را طوری محاسبه کنیم که گویی دستگاه (۱) منـزوی بوده و عملگر چگالی آن $\rho(1)$ بوده است . با یادآوری همان نکاتی که در مورد فرمول (۱۷) گوشزد کردیم ، ملاحظه می‌کنیم که $\rho(1)$ هم‌چنین مارا قادر می‌سازد تااحتمالهای‌تمام نتایج اندازه‌گیریهایی را که تنها روی دستگاه (۱) انجام می‌شوند به‌دست آوریم .

گـــوشزد‌ها

(*i*) در مکمل $\mathrm{D_{III}}$ دیدیم که وقتی حالت دستگاه کلی (۲)+(۱) یک حالت حاصلضربی نباشد غیرممکن است به‌دستگاه (۱) [یا (۲)] یک بردار حالت نسبت داد . اکنون می‌بینیم‌که عملگر چگالی ابزار بسیار ساده‌تری از بردار حالت است . درتمام‌موارد (چه دستگاه کلی در یک حالت حاصلضربی باشد و چه نباشد ، چـه با یک مـورد خالص متناظر باشد و چه بایک آمیزه آماری) همواره می‌توان ، بخاطرعمل‌ردجزئی یک عملگر چگالی به‌زیر دستگاه (۱) [یا (۲)] منتسب کرد . این امر به‌ما امکـــان می‌دهد تا تمام پیش بینی‌های فیزیکی در بارهٔ این زیر دستگاه را محاسبه کنیم .

(*ii*) حتی اگر ρ یک حالت خالص را توصیف کند $(\mathrm{Tr}\,\rho^2 = 1)$ ، عموما" برای‌عملگرهای چگالی $\rho(1)$ و $\rho(2)$ که به‌وسیله ردجزئی از ρ به‌دست‌آمده‌اند چنین نیست . می‌توان از (۵۶) [یا (۵۹)] نشان داد که $\mathrm{Tr}\ \{ \rho^2(1) \}$ [یا $\mathrm{Tr}\ \{ \rho^2(2) \}$] عموما" برابر ۱ نیست . بدین ترتیب به‌طریق دیگری در می‌یابیم که عموما" ممکن نیست‌یک بردار

حالت به (۱) [یا (۲)] منتسب کرد ، البته بجز وقتی که حالت دستگاه کلی یک حالت حاصلضربی است .

(*iii*) اگر دستگاه کلی در یک حالت حاصلضربی :

$$|\psi\rangle = |\varphi(1)\rangle\,|\chi(2)\rangle \tag{۶۶}$$

باشد ، می‌توانیم مستقیما" نشان دهیم که عملگر چگالی متناظر به‌صورت زیر نوشته می‌شود :

$$\rho = \sigma(1) \otimes \tau(2) \tag{۶۷}$$

با :

$$\begin{aligned} \sigma(1) &= |\varphi(1)\rangle\langle\varphi(1)| \\ \tau(2) &= |\chi(2)\rangle\langle\chi(2)| \end{aligned} \tag{۶۸}$$

بطورعمومی‌تر ، می‌توانیم حالتهایی از دستگاه کلی را در نظر بگیریم که‌برای‌آنها، عملگر چگالی ρ بتواند مانند (۶۷) به‌صورت حاصلضرب درآید [$\sigma(1)$ و $\tau(2)$ می‌توانند هم با آمیزه‌های آماری و هم با موردهای خالص متناظر باشند] .دراین صورت عمل رد جزیی می‌دهد :

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}_2\,\{\sigma(1)\otimes\tau(2)\} &= \sigma(1) \\ \mathrm{Tr}_1\,\{\sigma(1)\otimes\tau(2)\} &= \tau(2) \end{aligned} \tag{۶۹}$$

بنابراین ، عبارتی نظیر (۶۷) معرف پهلوی هم‌گذاری‌ساده یک دستگاه (۱) که‌توسط عملگر چگالی $\sigma(1)$ توصیف می‌شود و یک دستگاه (۲) ،که‌توسط عملگر چگالی $\tau(2)$ توصیف می‌شود ، می‌باشد .

(*iv*) حال ، با شروع از یک عملگر چگالی دلخواه ρ [که‌نمی‌تواند مانند (۶۷) به‌صورت حاصلضرب درآید] ، $\rho(1) = \mathrm{Tr}_2\,\rho$ و $\rho(2) = \mathrm{Tr}_1\,\rho$ را محاسبه‌کنیم و سپس‌حاصلضرب

$$\rho' = \rho(1) \otimes \rho(2) \tag{۷۰}$$

را تشکیل دهیم . برخلاف مورد بررسی شده در گوشزد (*iii*) ، ρ' عموما" با ρ متفاوت است . بنابراین وقتی عملگر چگالی نتواند مانند (۶۷) به‌صورت حاصلضرب‌درآید نوعی "همبستگی" بین دستگاههای (۱) و (۲) وجود داردکه دیگر در عملگر ρ' در فرمول (۷۰) وجود ندارد .

(*v*) اگر تحول دستگاه کلی توسط معادلهٔ (۳۶) توصیف شود ، عموما" غیر ممکن است بتوان یک عملگر هامیلتونی مربوط به‌تنها دستگاه (۱) یافت که ما را قادر سازد تا

معادلهٔ مشابهی برای $\rho(1)$ بنویسیم . با وجودی که ، در هرلحظــــه ، تعریف $\rho(1)$
برحسب ρ ساده است ، تشریح تحول $\rho(1)$ بسیار مشکلتر است .

مراجع و پیشنهادات برای مطالعهٔ بیشتر :

Articles by Fano (2.31) and Ter Haar (2.32). Using the density operator to study relaxation phenomena : Abragam (14.1), chap. VIII; Slichter (14.2), chap. 5; Sargent, Scully and Lamb (15.5), chap. VII.

مکمل F_{III}

عملگر تحول

۱ ــ خواص عمومی
۲ ــ مورد دستگاههای پایستار

در بخش b ــ ۱ ــD از فصل سوم دیدیم که تبدیل $|\psi(t_0)\rangle$ (بردار حالت در لحظهٔ اولیهٔ t_0) به $|\psi(t)\rangle$ (بردار حالت در یک لحظه دلخواه) خطی است. لذا یک عملگر خطی $U(t, t_0)$ وجود دارد بطوری که:

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)\,|\psi(t_0)\rangle \tag{۱}$$

در این مکمل می‌خواهیم خواص اصلی $U(t, t_0)$ را که بنا به‌تعریف عملگر تحول دستگاه است مورد مطالعه قرار دهیم.

۱ ــ خواص عمومی

چون کت $|\psi(t_0)\rangle$ دلخواه است، از رابطهٔ (۱) دیده می‌شود که:

$$U(t_0, t_0) = \mathbb{1} \tag{۲}$$

از طرف دیگر، با قراردادن (۱) در معادلهٔ شرودینگر، خواهیم یافت:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,U(t, t_0)\,|\psi(t_0)\rangle = H(t)\,U(t, t_0)\,|\psi(t_0)\rangle \tag{۳}$$

که از آن، به‌همان دلایل بالا، نتیجه خواهد شد.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,U(t, t_0) = H(t)\,U(t, t_0) \tag{۴}$$

که با در نظر گرفتن شرط اولیهٔ (۲)، معادله دیفرانسیل مرتبه‌اول (۴) عملگر $U(t, t_0)$ را بطور کامل تعیین می‌کند.
بعلاوه، توجه کنیم که می‌توان (۲) و (۴) را در یک معادلهٔ انتگرالی تک گنجانید:

$$U(t, t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H(t')\,U(t', t_0)\,\mathrm{d}t' \tag{۵}$$

حال فراسنج t_0 را که در $U(t, t_0)$ ظاهر می‌شود به‌عنوان یک متغیر t'، هم‌تراز با t، در نظر بگیریم. در این صورت (۱) را به‌صورت زیر می‌نویسیم:

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t')\,|\psi(t')\rangle \tag{۶}$$

اما $|\psi(t')\rangle$ خود می‌تواند از فرمولی از همان نوع به‌دست آید:

$$|\psi(t')\rangle = U(t', t'')\,|\psi(t'')\rangle \tag{۷}$$

(۷) را در (۶) قرار دهیم:

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t')\,U(t', t'')\,|\psi(t'')\rangle \tag{۸}$$

بعلاوه، چون $|\psi(t)\rangle = U(t, t'')|\psi(t'')\rangle$ است ($|\psi(t'')\rangle$ اختیاری است) نتیجه می‌گیریم:

$$U(t, t'') = U(t, t')U(t', t'') \tag{۹}$$

به‌آسانی می‌توان این روش را تعمیم داد و به‌دست آورد:

$$U(t_n, t_1) = U(t_n, t_{n-1}) \dots U(t_3, t_2)U(t_2, t_1) \tag{۱۰}$$

که در آن t_1 ، t_2 ، . . . ، t_n دلخواه‌اند. اگر فرض کنیم که $t_1 < t_2 < t_3 < \dots < t_n$ باشد، فرمول (۱۰) را به‌آسانی می‌توان تعبیر کرد: برای رفتن از t_1 به t_n، دستگاه نخست از t_1 به t_2 پیشرفت می‌کند، سپس از t_2 به t_3، . . . ، و بالاخره از t_{n-1} به t_n.

باقراردادن $t'' = t$ در (۹) و منظور نمودن (۲)، به‌دست می‌آوریم:

$$\mathbb{1} = U(t, t')U(t', t) \tag{۱۱}$$

یا، با عوض کردن نقشهای t و t':

$$\mathbb{1} = U(t', t)U(t, t') \tag{۱۲}$$

لذا داریم:

$$U(t', t) = U^{-1}(t, t') \tag{۱۳}$$

حال عملگر تحول بین دولحظه به‌فاصله dt را محاسبه کنیم. برای این منظور،

معادلهٔ شرودینگر را به‌صورت زیر می‌نویسیم :

$$\begin{aligned} \mathrm{d}\,|\,\psi(t)\,\rangle &= |\,\psi(t+\mathrm{d}t)\,\rangle - |\,\psi(t)\,\rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar}\,H(t)\,|\,\psi(t)\,\rangle\,\mathrm{d}t \end{aligned} \qquad (۱۴)$$

یعنی :

$$|\,\psi(t+\mathrm{d}t)\,\rangle = \left[\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\,H(t)\,\mathrm{d}t\right]|\,\psi(t)\,\rangle \qquad (۵)$$

بنابراین بااستفاده از تعریف $U(t+\mathrm{d}t, t)$ ، به‌دست می‌آوریم :

$$U(t+\mathrm{d}t, t) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\,H(t)\,\mathrm{d}t \qquad (۱۶)$$

$U(t+\mathrm{d}t, t)$ را عملگر تحول بی‌نهایت کوچک می‌نامیم .چون $H(t)$ هرمیتی است ، $U(t+\mathrm{d}t, t)$ یکانی است (رک مکمل $\mathrm{C_{II}}$ ،بخش۳) . نتیجه می‌شود که $U(t, t')$ نیزیکانی است زیرا بازهٔ $[t, t']$ می‌تواند به‌تعداد بسیار زیادی بازه‌های بی‌نهایت کوچک تقسیم شود . در این‌صورت فرمول (۱۰)نشان می‌دهد که $U(t, t')$ حاصلضربی از عملگرهای یکانی است ، و بنابراین خود یک عملگر یکانی است . در نتیجه می‌توان (۱۳)را به‌صورت زیرنوشت :

$$U^{\dagger}(t, t') = U^{-1}(t, t') = U(t', t) \qquad (۱۷)$$

یکانی بودن تبدیل $U(t, t')$ ،یعنی اینکه هنجار بردارهایی را که روی آنها عمل می‌کند پایا نگه میدارد ،عجیب نیست . درفصل سوم (رک بخش c ــ ۱ ــ D)دیدیم که هنجار بردار حالت با زمان تغییر نمی‌کند .

۳ ــ مورد دستگاههای پایستار

وقتی عملگر H به‌زمان بستگی نداشته باشد ، معادله (۴)به‌سادگی انتگرال‌گیری می‌شود ، با در نظرگرفتن شرط اولیهٔ (۲) ،خواهیم یافت :

$$U(t, t_0) = \mathrm{e}^{-iH(t-t_0)/\hbar} \qquad (۱۸)$$

می‌توان مستقیما" از این فرمول تمام خواص عملگر تحول را که در بخش ۱ ذکر شدثابت‌کرد .

با استفاده از فرمول۱۸ ، بطور بسیار ساده‌ای می‌توان از فرمول (۵۲ ــ D) به‌فرمول

(D ــ ۵۴)فصل سوم رسید ، کافی است عملگر $U(t, t_0)$ را ، با درنظر گرفتن اینکه $|\varphi_{n,\tau}\rangle$ یک ویژه بردار H با ویژه مقدار E_n است ، به‌دوطرف (D ــ ۵۲) اعمال کنیم :

$$U(t, t_0)\,|\,\varphi_{n,\tau}\rangle = e^{-iH(t-t_0)/\hbar}\,|\,\varphi_{n,\tau}\rangle = e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}\,|\,\varphi_{n,\tau}\rangle \qquad (۱۹)$$

گوشزدها :

(i) وقتی H وابسته‌به‌زمان باشد ، ممکن است ، با مشابهت با فرمول (۱۸) ،گمان‌کنیم که عملگر تحول با عملگر $V(t, t_0)$ که به‌صورت :

$$V(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H(t')dt'} \qquad (۲۰)$$

تعریف می‌شود ، برابراست . در واقع این‌طور نیست ، زیرا مشتق یک عملگر به‌شکل $e^{F(t)}$ عموما" برابر با $F'(t)\,e^{F(t)}$ نیست (رک . مکمل B_{II} ، بخش c ــ ۵) :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} V(t, t_0) \neq H(t)V(t, t_0) \qquad (۲۱)$$

(ii) بار دیگر آزمایشات تشریح‌شده در بخش b ــ ۱ ــ E از فصل‌سوم را درنظر بگیریم . همان‌طوری که قبلا" اشاره کردیم [گوشزد (ii) از بخش β ــ b ــ ۱ ــ E] ، لازم نیست فرض شود که اندازه‌گیریهای مشاهده‌پذیرهای مختلف A ، B و C ازنظر زمانی‌خیلی نزدیک به‌هم انجام شده‌اند . وقتی دستگاه بین دواندازه‌گیری متوالی فرصت تحول داشته باشد ، تغییرات بردار حالت می‌تواند به‌سادگی بااستفاده از عملگر تحول در نظر گرفته شود .

اگر t_0 ، t_1 و t_2 به‌ترتیب لحظه‌هایی باشند که اندازه‌گیریهای A ، B و C انجام شده‌اند ، فرمول :

$$\mathscr{P}_a(c) = |\langle v_c\,|\,U(t_2, t_0)\,|\,u_a\rangle|^2 \qquad (۲۲)$$

را جانشین (E ــ ۱۵) و فرمول :

$$\mathscr{P}_a(b, c) = |\langle v_c\,|\,U(t_2, t_1)\,|\,w_b\rangle|^2\,|\langle w_b\,|\,U(t_1, t_0)\,|\,u_a\rangle|^2 \qquad (۲۳)$$

را جانشین (E ــ ۱۷) می‌کنیم. در این صورت، با استفاده از (۹)، داریم:

$$\begin{aligned} \langle v_c \,|\, U(t_2,t_0) \,|\, u_a \rangle &= \langle v_c \,|\, U(t_2,t_1)U(t_1,t_0) \,|\, u_a \rangle \\ &= \sum_b \langle v_c \,|\, U(t_2,t_1) \,|\, w_b \rangle \langle w_b \,|\, U(t_1,t_0) \,|\, u_a \rangle \end{aligned} \quad (۲۴)$$

با بردن (۲۴) در (۲۲)، ملاحظه می‌کنیم که، مانند (E ــ ۲۱)، $\mathscr{P}_a(c)$ با $\sum_b \mathscr{P}_a(b,c)$ برابر نیست.

مراجع و پیشنهادات برای مطالعه بیشتر:

عملگرتحول در تئوری برخورد (مراجع فصل هشتم را به‌بینید) و تئوری اغتشاش وابسته به‌زمان (مراجع فصل سیزدهم را به‌بینید) دارای اهمیت اساسی است.

مکمل G_{III}

دیدگاههای شرودینگر وهایزنبرگ

در صورتبندی ارائه‌شده در فصل سوم ، عملگرهای متناظر با مشاهده پذیرهای دستگاه (رک فصل سوم ، بخش d ــ ۱ ــ D) ،بعنوان مثال ، عملگرهای مکان ، تکانه و انرژی جنبشی یک ذره به‌زمان بستگی ندارند . تحول دستگاه کاملا" در تحول بردار حالت $|\psi(t)\rangle$ [که به‌دلایلی که بعدا" می‌آید ، در اینجا به‌صورت $|\psi_S(t)\rangle$ نوشته می‌شود] نهفته است و این تحول از معادلهٔ شرودینگر به‌دست می‌آید . به‌این جهت این دیدگاه را دیدگاه شرودینگر می‌نامیم .

با وجود این ، می‌دانیم که تمام پیش بینی‌های مکانیک کوانتومی (احتمالات مقادیر متوسط)برحسب حاصلضربهای یک برا و یک کت یا عناصر ماتریسی عملگرها بیان می‌شود . همان‌طوری که در مکمل C_{II} دیدیم ، این کمیتها ، وقتی روی کتها و عملگرها یک تبدیل یکانی‌انجام شود ،تغییرناپذیر هستند . این تبدیل رامی‌توان طوری انتخاب کرد که تبدیل یافتهٔ کت $|\psi_S(t)\rangle$ یک کت مستقل از زمان بشود . مسلما" ، در این صورت تبدیل یافتهٔ مشاهده‌پذیرهای بالا بەزمان بستگی دارند . بااین ترتیب دیدگاه هایزنبرگ به‌دست می‌آید .

برای اجتناب از اشتباه ،دراین مکمل ،یک‌شاخص S به‌کتها و عملگرهای دیدگاه شرودینگر و یک شاخص H به‌کتها و عملگرهای دیدگاه هایزنبرگ نسبت خواهیم داد .چون دیدگاه اخیر (هایزنبرگ) فقط در این مکمل مورد استفاده قرار می‌گیرد ،شاخص S درسایر مکملها و فصول بطور تلویحی در نظر گرفته خواهد شد .

بردار حالت $|\psi_S(t)\rangle$ در لحظهٔ t برحسب $|\psi_S(t_0)\rangle$ توسط رابطهٔ :

$$|\psi_S(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi_S(t_0)\rangle \qquad (۱)$$

بیان می‌شود ، که درآن $U(t, t_0)$ عملگر تحول است (رک . مکمل F_{III}) .چون این‌عملگر یکانی است ، برای به‌دست آوردن بردار تبدیل یافتهٔ ثابت $|\psi_H\rangle$ کافی است تبدیل‌یکانی وابسته به‌عملگر $U^\dagger(t, t_0)$ را انجام دهیم :

$$\begin{aligned} |\psi_H\rangle = U^\dagger(t, t_0)|\psi_S(t)\rangle &= U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0)|\psi_S(t_0)\rangle \\ &= |\psi_S(t_0)\rangle \end{aligned} \qquad (۲)$$

بنابراین، بردارحالت دیدگاه هایزنبرگ، که ثابت است، برابراست با $|\psi_S(t)\rangle$ درزمان t_0 تبدیل یافتهٔ یک عملگر $A_S(t)$، یعنی $A_H(t)$ توسط رابطهٔ زیر داده می‌شود (رک مکمل C_{II} بخش ۲):

$$A_H(t) = U^\dagger(t, t_0) A_S(t) U(t, t_0) \tag{۳}$$

همانطوری که قبلاً دیده‌ایم، $A_H(t)$ عموماً به‌زمان بستگی دارد حتی اگر A_S به‌زمان بستگی نداشته باشد.

مع‌ذالک، یک مورد خاص جالب وجود دارد که در آن، اگر A_S مستقل از زمان باشد، A_H هم مستقل از زمان است: این موردی است که دستگاه پایستار (H_S به‌زمان بستگی نداشته باشد) و A_S با H_S جابجائی‌پذیر باشد (در این‌صورت A_S یک‌ثابت‌حرکت است، رک فصل سوم بخش c ــ ۲ ــ D). در این مورد داریم:

$$U(t, t_0) = e^{-iH_S(t-t_0)/\hbar} \tag{۴}$$

اگر عملگر A_S با H_S جابجائی‌پذیر باشد، با $U(t, t_0)$ نیز جابجائی‌پذیر است (رک مکمل B_{II}، بخش c ــ ۴)، بنابراین:

$$A_H(t) = U^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) A_S = A_S \tag{۵}$$

بنابراین عملگرهای A_S و A_H در این مورد بایکدیگر برابرند (بخصوص، $H_S = H_H$ ودرواقع شاخصهای S و H برای هامیلتونین غیرضروری است). چون این‌عملگرها مستقل از زمانند، در می‌یابیم که با یک ثابت حرکت متناظرند.

حال تحول‌عملگر $A_H(t)$ را، وقتی‌که $A_S(t)$ دلخواه‌است، محاسبه‌کنیم. بااستفاده از رابطهٔ (۴) از مکمل F_{III} و همیوغ آن، به‌دست می‌آوریم:

$$\frac{d}{dt} A_H(t) = -\frac{1}{i\hbar} U^\dagger(t, t_0) H_S(t) A_S(t) U(t, t_0) + U^\dagger(t, t_0) \frac{dA_S(t)}{dt} U(t, t_0) + \frac{1}{i\hbar} U^\dagger(t, t_0) A_S(t) H_S(t) U(t, t_0) \tag{۶}$$

در جملات اول و آخر این عبارت، بین A_S و H_S حاصلضرب $U(t, t_0)U^\dagger(t, t_0)$ را، که برابر با عملگر همانندی است، قرار می‌دهیم [فرمول (۱۷) از مکمل F_{III}]:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} A_H(t) = &-\frac{1}{i\hbar} U^\dagger(t, t_0) H_S(t) U(t, t_0) U^\dagger(t, t_0) A_S(t) U(t, t_0) \\ &+ U^\dagger(t, t_0) \frac{dA_S(t)}{dt} U(t, t_0) \\ &+ \frac{1}{i\hbar} U^\dagger(t, t_0) A_S(t) U(t, t_0) U^\dagger(t, t_0) H_S(t) U(t, t_0)\end{aligned} \tag{۷}$$

برطبق تعریف (۳)، سرانجام به‌دست می‌آوریم:

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} A_H(t) = [A_H(t), H_H(t)] + i\hbar\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} A_S(t)\right)_H \tag{۸}$$

گوشزدها

(*i*) از نظر تاریخی، دیدگاه اول توسط شرودینگر توسعه داده شد و وی را به‌معادله‌ای رهنمون شد که به‌نام خود وی اسم گذاری شد، و دیدگاه دوم، توسط هایزنبرگ [که تحول ماتریسهای معرف عملگرهای مختلف $A_H(t)$ را محاسبه کرد و از این رو به "مکانیک ماتریسی" مرسوم گردید توسعه یافت. هم‌ارزی این دودیدگاه بعدا" ثابت شد.

(*ii*) بااستفاده از (۸)، همان‌طوری که الان نشان می‌دهیم، معادله‌ٔ (D – ۲۷) ازفصل سوم فورا" به‌دست می‌آید. در دیدگاه هایزنبرگ، تحول مقدار متوسط:

$$\langle A \rangle(t) = \langle \psi_S(t) | A_S(t) | \psi_S(t) \rangle$$

را می‌توان محاسبه کرد، زیرا داریم:

$$\langle A \rangle(t) = \langle \psi_H | A_H(t) | \psi_H \rangle \tag{۹}$$

در طرف راست (۹)، تنها $A_H(t)$ به‌زمان بستگی دارد، بنابراین می‌توان‌مستقیما" بامشتق‌گیری (D – ۲۷) را به‌دست آورد. با وجود این، توجه کنید که معادلهٔ (۸) از (D – ۲۷) کلی‌تر است زیرا، بجای بیان تساوی دومقدار متوسط (یعنی، دوعنصر ماتریسی عملگرها)، تساوی دوعملگر را بیان می‌کند.

(*iii*) وقتی دستگاه مورد نظر ذره‌ای به‌جرم m باشد که تحت تاثیر یک پتانسیل قرار دارد، معادله (۸) بسیار آسان می‌شود. در این‌صورت داریم (خود را به‌یک بعد محدود ساخته‌ایم):

$$H_S(t) = \frac{P_S^{\,2}}{2m} + V(X_S, t) \tag{۱۰}$$

و لذا [رک فرمول (۳۵) از مکمل $\mathrm{C_{II}}$]:

$$H_H(t) = \frac{P_H^{\,2}}{2m} + V(X_H, t) \tag{۱۱}$$

با بردن (۱۱) در (۸) و استفاده از $[X_H, P_H] = [X_S, P_S] = i\hbar$ ، با استدلالی مشابه استدلال بخش d – ۱ – D از فصل سوم به‌دست می‌آوریم :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} X_H(t) &= \frac{1}{m} P_H(t) \\ \frac{d}{dt} P_H(t) &= -\frac{\partial V}{\partial X}(X_H, t) \end{aligned} \qquad (۱۲)$$

این معادلات قضیه اهرنفست [رک فصل سوم ، روابط (D –۳۴) و (D – ۳۵)] . را تعمیم می‌دهند . این معادلات مشابه معادلاتی هستند که تحول کمیتهای کلاسیکی x و p را به‌دست می‌دهند [رک فصل سوم ، روابط (D – ۳۶ – a) و (D – ۳۶ – b)] . لذا یک مزیت دیدگاه هایزنبرگ این است که منجر به‌معادلاتی می‌شود که از نظر ظاهری مشابه معادلات مکانیک کلاسیک است .

مراجع و پیشنهادات برای مطالعهٔ بیشتر :

دیدگاه برهم کنش :

Messiah (1.17), chap. VIII §14; Schiff (1.18), §24; Merzbacher (1.16), chap. 18, §7.

مکمل H_{III}

تغییرناپذیری پیمانه‌ای

۱ــ شرح‌مسأله : پتانسیلهای نرده‌ای و برداری وابسته به‌یک میدان الکترومغناطیسی با مفهوم پیمانه
۲ ــ تغییرناپذیری پیمانه‌ای در مکانیک کلاسیک
a ــ معادلات نیوتن
b ــ صورتبندی هامیلتونی
α ــ متغیرهای دینامیکی دستگاه و تحول آنها
β ــ "کمیتهای واقعا" فیزیکی" و "کمیتهای غیرفیزیکی"
۳ ــ تغییرناپذیری پیمانه‌ای در مکانیک کوانتومی
a ــ قواعد کوانتش
b ــ تبدیل یکانی بردار حالت ، تغییرناپذیری صوری معادلهٔ شرودینگر .
α ــ عملگر یکانی $T_\chi(t)$
β ــ تحول زمانی بردار حالت
c ــ تغییرناپذیری پیش‌بینی‌های فیزیکی در یک تبدیل پیمانه‌ای
α ــ رفتار مشاهده‌پذیرها
β ــ احتمالهای نتایج مختلف ممکن یک اندازه‌گیری از یک کمیت واقعا" فیزیکی
γ ــ چگالی و جریان احتمال

۱ ــ شرح مسأله : پتانسیلهای نرده‌ای و برداری وابسته به‌یک میدان الکترومغناطیسی با مفهوم پیمانه

یک میدان الکترومغناطیسی را ، که توسط مقادیر $\mathbf{E}(\mathbf{r};t)$ ی میدان الکتریکی و $\mathbf{B}(\mathbf{r};t)$ ی میدان مغناطیسی در هرلحظه از زمان و در تمام‌نقاط فضا مشخص شده است ، بگیریم: $\mathbf{E}(\mathbf{r};t)$ و $\mathbf{B}(\mathbf{r};t)$ مستقل از یکدیگر نیستند زیرا در معادلات ماکسول صدق می‌کنند . می‌توان بجای مشخص‌کردن این دومیدان برداری ، یک پتانسیل نرده‌ای $U(\mathbf{r};t)$ و یک پتانسیل برداری $\mathbf{A}(\mathbf{r};t)$ وارد کرد به‌طوری که:

$$\begin{cases} \mathbf{E}(\mathbf{r}\,;t) = -\nabla U(\mathbf{r}\,;t) - \dfrac{\partial}{\partial t}\mathbf{A}(\mathbf{r}\,;t) \\ \mathbf{B}(\mathbf{r}\,;t) = \quad \nabla\times\mathbf{A}(\mathbf{r}\,;t) \end{cases} \tag{1}$$

می‌توان ازمعادلات ماکسول نشان دادکه (رک پیوست III ، بخش α ــ b ــ ۴) همواره توابعی مانند $U(\mathbf{r}\,;t)$ و $\mathbf{A}(\mathbf{r}\,;t)$ وجود دارند که بتوان $\mathbf{E}(\mathbf{r}\,;t)$ و $\mathbf{B}(\mathbf{r}\,;t)$ را به‌صورت (۱) برحسب آنها بیان کرد. بنابراین تمام میدانهای الکترومغناطیسی را می‌توان توسط پتانسیلهای نرده‌ای و برداری توصیف‌کرد. لیکن، وقتی $\mathbf{E}(\mathbf{r}\,;t)$ و $\mathbf{B}(\mathbf{r}\,;t)$ معلوم باشند، $U(\mathbf{r}\,;t)$ و $\mathbf{A}(\mathbf{r}\,;t)$ به‌طور یکتا تعیین نمی‌شوند. می‌توان به‌سادگی ثابت کرد که اگر یک مجموعه از مقادیر ممکن برای $U(\mathbf{r}\,;t)$ و $\mathbf{A}(\mathbf{r}\,;t)$ داشته باشیم، با تبدیل:

$$\begin{aligned} U'(\mathbf{r}\,;t) &= U(\mathbf{r}\,;t) - \frac{\partial}{\partial t}\chi(\mathbf{r}\,;t) \\ \mathbf{A}'(\mathbf{r}\,;t) &= \mathbf{A}(\mathbf{r}\,;t) + \nabla\chi(\mathbf{r}\,;t) \end{aligned} \tag{2}$$

که درآن $\chi(\mathbf{r}\,;t)$ یک تابع دلخواهی از $\mathbf{r}$ و t است، پتانسیلهای دیگری مانند $U'(\mathbf{r}\,;t)$ و $\mathbf{A}'(\mathbf{r}\,;t)$ به‌دست می‌آوریم که همان میدان الکترومغناطیسی را توصیف‌می‌کنند. این‌مطلب را می‌توان باجایگزین‌کردن $U(\mathbf{r}\,;t)$ توسط $U'(\mathbf{r}\,;t)$ و $\mathbf{A}(\mathbf{r}\,;t)$ توسط $\mathbf{A}'(\mathbf{r}\,;t)$ در (۱) و نشان‌دادن اینکه $\mathbf{E}(\mathbf{r}\,;t)$ و $\mathbf{B}(\mathbf{r}\,;t)$ تغییر نمی‌کنند، ثابت‌کرد. بعلاوه، می‌توان‌نشان‌داد که روابط (۲) تمام پتانسیلهای نرده‌ای و برداری ممکن وابسته به‌یک میدان الکترومغناطیسی معین را به‌دست می‌دهند.

وقتی یک مجموعه خاص از پتانسیلها برای توصیف یک میدان الکترومغناطیسی انتخاب کرده باشیم، می‌گوئیم که یک پیمانه انتخاب کرده‌ایم. همانطوری که در بالا اشاره شد، می‌توان برای یک میدان معین، که توسط $\mathbf{E}(\mathbf{r}\,;t)$ و $\mathbf{B}(\mathbf{r}\,;t)$ مشخص شده است، تعداد بی‌نهایت پیمانهٔ مختلف به‌کار برد. وقتی از یک پیمانه به‌پیمانهٔ دیگر برویم، می‌گوئیم که یک تغییر پیمانه انجام داده‌ایم.

در فیزیک اغلب اتفاق می‌افتد که معادلات حرکت یک دستگاه بجای میدانهای $\mathbf{E}(\mathbf{r}\,;t)$ و $\mathbf{B}(\mathbf{r}\,;t)$ پتانسیلهای $U(\mathbf{r}\,;t)$ و $\mathbf{A}(\mathbf{r}\,;t)$ را وارد کرده باشند. مثالی ازین مورد را در بخش b ــ ۵ ــ B از فصل سوم، وقتی که معادله شرودینگر را برای ذره‌ای با بار q واقع دریک میدان الکترومغناطیسی می‌نوشتیم‌دیدیم [رک رابطهٔ (۴۸ــ B) ازآن‌فصل] . در این صورت می‌توان سئوال زیر را مطرح ساخت: آیا نتایج فیزیکی پیش بینی شده‌توسط تئوری فقط به‌مقادیر میدانهای $\mathbf{E}(\mathbf{r}\,;t)$ و $\mathbf{B}(\mathbf{r}\,;t)$ در تمام نقاط فضا بستگی‌دارند، یااینکه به‌پیمانه‌ای که برای نوشتن معادلات به‌کار رفته است نیز بستگی دارد؟ درمورد اخیر، برای

اینکه تئوری معنی داشته باشد ، آشکارا باید مشخص کنیم که معادلات در کدام پیمانه معتبرند .

هدف این مکمل پاسخ به‌این سئوال است . خواهیم دید که درمکانیک کلاسیک (بخش۲) ،همانند مکانیک‌کوانتومی (بخش۳) ،نتایج فیزیکی باتغییر پیمانه تغییر نمی‌کنند. لذا چنین به‌نظر می‌آید که پتانسیلهای نرده‌ای و برداری واسطه‌های محاسبه‌ای هستند ، درواقع آنچه موردنظر است مقادیر میدانهای الکتریکی و مغناطیسی در تمام نقاط فضااست. این نتیجه را بااین‌گفته‌که مکانیک‌کلاسیک و مکانیک کوانتومی دارای خاصیت تغییرناپذیری پیمانه‌ای هستند ،بیان می‌کنیم .

۲ ــ تغییرناپذیری پیمانه‌ای در مکانیک کلاسیک

a ــ معادلات نیوتن

در مکانیک کلاسیک، حرکت یک ذره* با بار q و جرم m در یک میدان الکترومغناطیسی را می‌توان از روی نیروی $\mathbf{f}$ وارد برآن محاسبه‌کرد . این نیروتوسط قانون لورنتس داده می‌شود :

$$\mathbf{f} = q[\mathbf{E}(\mathbf{r}\,;t) + \mathbf{v}\times\mathbf{B}(\mathbf{r}\,;t)] \tag{۳}$$

که درآن $\mathbf{v}$ سرعت ذره‌است . برای به‌دست آوردن معادلات حرکت ، که محاسبهٔ مکان $\mathbf{r}(t)$ ی ذره در هرلحظهٔ t را ممکن می‌سازد . این معادله را در معادله اساسی دینامیک (قانون نیوتن) :

$$m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\mathbf{r}(t) = \mathbf{f}$$

قرار می‌دهیم . دراین‌دیدگاه، فقط مقادیر میدانهای الکتریکی و مغناطیسی وارد محاسبات می‌شوند ، لذا مسألهٔ تغییرناپذیری پیمانه‌ای مطرح نمی‌شود .

---

* برای سهولت ، دراین مکمل فرض می‌کنیم که دستگاه موردنظر از یک ذرهٔ یکتا تشکیل شده است . تعمیم به‌دستگاههای پیچیده‌تر متشکل از چندین ذره واقع در یک میدان الکترومغناطیسی ، مشکلی ایجاد نمی‌کند .

b ـ صورتبندی هامیلتونی

می‌توان بجای دیدگاه بخش‌گذشته ، ازدیگرمعادلات‌حرکت ، معادلات هامیلتون ـ ژاکوبی ،استفاده کرد . به‌آسانی می‌توان نشان داد (رک پیوست III)که‌معادلات اخیرکاملا" هم‌ارز معادلات نیوتن هستند . اما ، چون در فصل سوم برای کوانتش یک دستگاه فیزیکی از صورتبندی هامیلتونی استفاده کردیم ، مفید خواهد بود که به‌بینیم در این صورتبندی تغییر پیمانه به‌چه‌صورت ظاهر می‌شود . باوجودی که پتانسیلهای نرده‌ای و برداری در معادلات نیوتن وارد نمی‌شوند ، برای نوشتن معادلات هامیلتون ضروری‌اند . بنابراین ، خاصیت تغییرناپذیری پیمانه‌ای در این دیدگاه دوم کمتر مشهود است .

α . متغیرهای دینامیکی دستگاه و تحول آنها

برای تعیین حرکت یک ذره تحت تأثیر نیروی لورنتس، که‌به‌صورت (۳) نوشته می‌شود ، می‌توان از لاگرانژی*:

$$\mathscr{L}(\mathbf{r}, \mathbf{v}; t) = \frac{1}{2} m\mathbf{v}^2 - q[U(\mathbf{r}; t) - \mathbf{v} . \mathbf{A}(\mathbf{r}; t)] \qquad (۵)$$

استفاده کرد . از این رابطه می‌توان تکانه $\mathbf{p}$ ، را که به‌صورت :

$$\mathbf{p} = \nabla_{\mathbf{v}} \mathscr{L}(\mathbf{r}, \mathbf{v}; t) = m\mathbf{v} + q\mathbf{A}(\mathbf{r}; t) \qquad (۶)$$

نوشته می‌شود ، محاسبه کرد . سپس می‌توان هامیلتونی کلاسیکی :

$$\mathscr{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = \frac{1}{2m} [\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}; t)]^2 + qU(\mathbf{r}; t) \qquad (۷)$$

را وارد کرد . حالت‌ذره در یک زمان معین ، در صورتبندی هامیلتونی ، دیگر مانند بخش a ی بالا (و دیدگاه لاگرانژ) توسط مکان و سرعت آن مشخص نمی‌شود ، بلکه توسط مکان $\mathbf{r}$ و تکانهٔ $\mathbf{p}$ ی آن ، که ما آنها را متغیرهای دینامیکی اساسی خواهیم نامید ، تعیین می‌شود .تکانهٔ $\mathbf{p}$ (همان هم‌یوغ مکان $\mathbf{r}$)نباید با تکانه π به‌صورت :

$$\pi = m\mathbf{v} \qquad (۸)$$

---

* چند نتیجه از مکانیک تحلیلی را که در پیوست III اثبات کرده‌ایم ، در اینجا بدون اثبات ذکر می‌کنیم .

اشتباه شود . این‌دو با یکدیگر متفاوتند ، زیرا برطبق (۶) :

$$\pi = \mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}\,;t) \qquad (۹)$$

این رابطه به‌ما امکان می‌دهد تاهرگاه مقادیر $\mathbf{r}$ و $\mathbf{p}$ را بدانیم ، تکانه مکانیکی (و ازآنجا سرعت) را محاسبه‌کنیم . همینطور ، تمام کمیتهای دیگر وابسته به‌ذره (انرژی جنبشی ،تکانه زاویه‌ای و غیره) درصورتبندی هامیلتونی به‌صورت توابعی ازمتغیرهای دینامیکی‌اساسی $\mathbf{r}$ و $\mathbf{p}$ (و درصورت لزوم، زمان) بیان می‌شوند .

تحول دستگاه توسط معادلات هامیلتون :

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathbf{r}(t) = \nabla_{\mathbf{p}}\mathscr{H}[\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t)\,; t] \\ \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathbf{p}(t) = -\nabla_{\mathbf{r}}\mathscr{H}[\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t)\,; t] \end{cases} \qquad (۱۰)$$

تعیین می‌شود ، که درآن $\mathscr{H}$ تابعی از $\mathbf{r}$ و $\mathbf{p}$ به‌صورت (۷) است . اگر مقادیرمتغیرهای دینامیکی اساسی در لحظهٔ اولیه معلوم باشد ، این معادلات مقادیر آنها در تمام زمانها را به‌دست می‌دهند .

برای نوشتن معادلات (۱۰) ، لازم است که یک پیمانه $\mathscr{J}$ ، یعنی یک زوج پتانسیل $\{U(\mathbf{r}\,;t), \mathbf{A}(\mathbf{r}\,;t)\}$ که میدان الکترومغناطیسی راتوصیف می‌کنند ، انتخاب کنیم . حال اگر بجای این پیمانه $\mathscr{J}$ ،پیمانهٔ دیگر $\mathscr{J}'$ را که با پتانسیلهای متفاوت $U'(\mathbf{r}\,;t)$ و $\mathbf{A}'(\mathbf{r}\,;t)$ مشخص می‌شود ، ولی همان میدانهای $\mathbf{E}(\mathbf{r}\,;t)$ و $\mathbf{B}(\mathbf{r}\,;t)$ را توصیف می‌کنند ، انتخاب کنیم چه اتفاق می‌افتد؟ مقادیر متغیرهای دینامیکی وابسته به‌حرکت ذره را وقتی که پیمانهٔ انتخاب شده $\mathscr{J}'$ باشد ، با پریم مشخص خواهیم کرد . همانطوری‌که دربخش a خاطرنشان ساختیم ،معادلات نیوتن نشان می‌دهند که مکان $\mathbf{r}$ و سرعت $\mathbf{v}$ در هرلحظه مقادیری می‌گیرند که مستقل از پیمانه است . در نتیجه داریم :

$$\begin{cases} \mathbf{r}'(t) = \mathbf{r}(t) & (۱۱-\mathrm{a}) \\ \pi'(t) = \pi(t) & (۱۱-\mathrm{b}) \end{cases}$$

حال از (۹) داریم :

$$\begin{aligned} \pi(t) &= \mathbf{p}(t) - q\mathbf{A}[\mathbf{r}(t)\,; t] \\ \pi'(t) &= \mathbf{p}'(t) - q\mathbf{A}'[\mathbf{r}'(t)\,; t] \end{aligned} \qquad (۱۲)$$

بنابراین، مقادیر $\mathbf{p}(t)$ و $\mathbf{p}'(t)$ ی تکانه درپیمانه‌های $\mathscr{J}$ و $\mathscr{J}'$ متفاوتند، و باید در رابطهٔ زیر صدق می‌کنند:

$$\mathbf{p}'(t) - q\mathbf{A}'[\mathbf{r}'(t);t] = \mathbf{p}(t) - q\mathbf{A}[\mathbf{r}(t);t] \qquad (۱۳)$$

اگر $\chi(\mathbf{r};t)$ همان تابعی باشد که در (۲) ظاهر شده است و تغییر پیمانه از $\mathscr{J}$ به $\mathscr{J}'$ را فراهم می‌آورد، مقادیر متغیرهای دینامیکی اساسی برطبق فرمولهای زیر تبدیل می‌شوند:

$$\begin{cases} \mathbf{r}'(t) = \mathbf{r}(t) & (۱۴-a) \\ \mathbf{p}'(t) = \mathbf{p}(t) + q\nabla\chi[\mathbf{r}(t):t] & (۱۴-b) \end{cases}$$

درصورتبندی هامیلتونی، مقدار لحظه‌ای متغیرهای دینامیکی که یک حرکت معین راتوصیف می‌کنند به‌پیمانهٔ انتخابی بستگی دارند. بعلاوه، یک چنین نتیجه‌ای عجیب نیست زیرا، در (۷) و (۱۰)، پتانسیلهای نرده‌ای و برداری به‌طورصریح در معادلات تحول مکان تکانه ظاهر می‌شوند.

β ــ "کمیتهای واقعا" فیزیکی" و "کمیتهای غیر فیزیکی"

(۱) تعاریف

دیدیم که، بعنوان مثال درروابط (۱۴)، می‌توان بین دونوع کمیت وابسته به‌ذره فرق قائل شد: آنهائی که مانند $\mathbf{r}$ و π درتمام زمانها دردوپیمانه مختلف مقادیریکسانی دارند وآنهائی که مانند $\mathbf{p}$، مقادیرشان به‌پیمانه انتخابی بستگی دارد. بدین ترتیب به‌تعریف عام زیر رهنمون می‌شویم:

ــ یک کمیت واقعا" فیزیکی وابسته به‌دستگاه مورد بررسی، کمیتی است که مقدارش در هرلحظه (برای یک حرکت معین دستگاه) به‌پیمانهٔ به‌کار رفته برای توصیف میدان الکترومغناطیسی بستگی نداشته باشد.

ــ یک کمیت غیرفیزیکی، برعکس، کمیتی است که مقدارش با تغییر پیمانه تغییر می‌کند، لذا این‌کمیت، مانند پتانسیلهای نرده‌ای و برداری، بیشتر یک واسطه محاسبه‌ای است تا یک کمیت مشاهده‌پذیر واقعی.

در این صورت سئوالی که مطرح می‌شود این است: درصورتبندی هامیلتونی، تمام کمیتهای وابسته به‌دستگاه به‌صورت توابعی از متغیرهای دینامیکی اساسی $\mathbf{r}$ و $\mathbf{p}$ ظاهر می‌شوند، چگونه می‌توانیم بفهمیم که آیا یک چنین تابعی متناظر است بایک کمیت واقعا" فیزیکی یا خیر؟

(۲) رابطهٔ مشخصه کمیتهای واقعا" فیزیکی

ابتدا فرض کنیم که یک کمیت وابسته به‌ذره، در پیمانهٔ $\mathscr{J}$ ، توسط یک تابع از $\mathbf{r}$ و $\mathbf{p}$ (احتمالا" وابسته به‌زمان) که آنرا به‌صورت $\mathscr{F}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t)$ نمایش می‌دهیم توصیف شده باشد . اگر ، در پیمانهٔ دیگر $\mathscr{J}'$ ،همان تابع $\mathscr{F}(\mathbf{r}', \mathbf{p}'; t)$ با این‌کمیت متناظرباشد ، مسلما" این یک کمیت واقعا" فیزیکی نیست [بجز در مورد خاصی که تابع $\mathscr{F}$ فقط بـه $\mathbf{r}$ بستگی داشته باشد و به $\mathbf{p}$ بستگی نداشته باشد ، معادلات (۱۴) را به‌ببینید] . چـون مقادیر تکانه در دوپیمانهٔ $\mathscr{J}$ و $\mathscr{J}'$ متفاوت است ،مسلما" برای مقادیر تابع $\mathscr{F}$ نیـز چنین است .

بنابراین برای به‌دست‌آوردن کمیتهای واقعا" فیزیکی وابسته به‌دستگاه باید توابع $\mathscr{G}_{\mathscr{J}}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t)$ ای را در نظر بگیریم که شکل آنها به‌پیمانهٔ انتخاب شده بستگی داشته باشد (به‌همین دلیل‌است که این توابع را بایک شاخص $\mathscr{J}$ مشخص می‌کنیم) . ماقبلا"نمونه‌ای از یک چنین تابعی را دیده‌ایم : تکانه مکانیکی π از طریق پتانسیل برداری $\mathbf{A}$ تابعـی‌از $\mathbf{r}$ و $\mathbf{p}$ است [رک (۹)] . در این مورد تابعی داریم‌که در دو پیمانهٔ $\mathscr{J}$ و $\mathscr{J}'$ متفاوت است ، یعنی ،به‌صورت $\pi_{\mathscr{J}}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t)$ است . بنابراین تعریف داده شده در (۱) می‌رساند که تابع $\mathscr{G}_{\mathscr{J}}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t)$ به‌شرطی یک کمیت واقعا" فیزیکی را توصیف می‌کند . که داشته باشیم :

$$\mathscr{G}_{\mathscr{J}}\left[\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t); t\right] = \mathscr{G}_{\mathscr{J}'}\left[\mathbf{r}'(t), \mathbf{p}'(t); t\right] \qquad (۱۵)$$

که در آن $\mathbf{r}(t)$ و $\mathbf{p}(t)$ مقادیری مکان و تکانه در پیمانهٔ $\mathscr{J}$ و $\mathbf{r}'(t)$ و $\mathbf{p}'(t)$ مقادیـر آنهادرپیمانهٔ $\mathscr{J}'$ هستند . اگر رابطهٔ (۱۴) را در (۱۵) جایگزین‌کنیم ، به‌دست‌می‌آوریم :

$$\mathscr{G}_{\mathscr{J}}\left[\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t); t\right] = \mathscr{G}_{\mathscr{J}'}\left[\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t) + q\nabla\chi(\mathbf{r}(t); t); t\right] \qquad (۱۶)$$

این رابطه باید در هرلحظهٔ t و برای تمام حرکتهای ممکن دستگاه برقرار باشد . چـون ، وقتی t ثابت باشد ،مقادیر مکان و تکانه می‌توانند مستقل از یکدیگر انتخـاب شـونـد ، هردوطرف (۱۶) باید در واقع یک تابع از $\mathbf{r}$ و $\mathbf{p}$ باشند ، که مـا آنـرا بصـورت زیـر می‌نویسیم :

$$\mathscr{G}_{\mathscr{J}}\left[\mathbf{r}, \mathbf{p}; t\right] = \mathscr{G}_{\mathscr{J}'}\left[\mathbf{r}, \mathbf{p} + q\nabla\chi(\mathbf{r}; t); t\right] \qquad (۱۷)$$

این رابطه مشخصهٔ توابع $\mathscr{G}_{\mathscr{J}}[\mathbf{r},\mathbf{p};t]$ وابسته به‌کمیتهای واقعا" فیـزیکـی است .

بنابراین ، اگر تابع $\mathscr{G}_{\mathscr{J}'}[\mathbf{r}, \mathbf{p}; t]$ را برای پیمانـهٔ $\mathscr{J}'$ در نظر بگیریـم ، و اگـر $\mathbf{p}$ را بـا $\mathbf{p} + q\nabla\chi(\mathbf{r}; t)$ جایگزین کنیم [که $\chi(\mathbf{r}; t)$ ، بنابر (۲) ، تغییر پیمانه از $\mathscr{J}$ به $\mathscr{J}'$ را تعریف می‌کند] ، یک تابع جدید از $\mathbf{r}$ و $\mathbf{p}$ بدست می‌آوریم که باید بـا $\mathscr{G}_{\mathscr{J}}[\mathbf{r}, \mathbf{p}; t]$

یکسان باشد . اگر این چنین نباشد ، تابع موردنظر متناظر با یک کمیت غیر فیزیکی است .

(۳) مثالها

حال چند مثال از توابع $\mathscr{G}_{\mathscr{J}}[\mathbf{r}, \mathbf{p}; t]$ که کمیتهای واقعا" فیزیکی را توصیف می‌کنند ذکر کنیم . قبلا" با دو نمونه از اینها مواجه شدیم : آنهایی که با مکان متناظرند و آنهایی که با تکانهٔ مکانیکی متناظر می‌باشند ، اولی برابر است با $\mathbf{r}$ و دومی با :

$$\pi_{\mathscr{J}}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = \mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}; t) \qquad (۱۸)$$

چون روابط (۱۱) مبین این واقعیتند که $\mathbf{r}$ و π کمیتهایی واقعا" فیزیکی‌اند ازقبل می‌دانیم که توابع متناظر در رابطه (۱۷) صدق می‌کنند .

اما برای اینکه باکاربرد این رابطه آشنا شویم این‌مطلب‌را مستقیما" اثبات‌می‌کنیم . تا آنجا که به $\mathbf{r}$ مربوط‌است ،با تابعی مواجهیم که تابع $\mathbf{p}$ نیست و شکل آن به‌پیمانه بستگی ندارد*، این امر بلافاصله به‌رابطه (۱۷) منجر می‌شود . در باره π ، رابطهٔ (۱۸) می‌دهد :

$$\pi_{\mathscr{J}'}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = \mathbf{p} - q\mathbf{A}'(\mathbf{r}; t) \qquad (۱۹)$$

در این تابع بجای $\mathbf{p}$ مقدار $\mathbf{p} + q\nabla\chi(\mathbf{r}; t)$ را قرار می‌دهیم ، به‌دست می‌آوریم :

$$\mathbf{p} + q\nabla\chi(\mathbf{r}; t) - q\mathbf{A}'(\mathbf{r}; t) = \mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}; t) \qquad (۲۰)$$

که چیزی جز $\pi_{\mathscr{J}}(\mathbf{r}; \mathbf{p}; t)$ نیست ، بنابراین رابطه (۱۷) برقرار است .

از دیگر کمیتهای واقعا" فیزیکی عبارتند از انرژی جنبشی :

$$\gamma_{\mathscr{J}}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = \frac{1}{2m}[\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}; t)]^2 \qquad (۲۱)$$

و گشتاور ، نسبت به‌مبداء ، تکانهٔ مکانیکی :

$$\lambda_{\mathscr{J}}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = \mathbf{r} \times [\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}; t)] \qquad (۲۲)$$

به‌طور کلی ملاحظه می‌کنیم که باساختن تابعی از $\mathbf{r}$ و $\mathbf{p}$ به‌شکل :

$$\mathscr{G}_{\mathscr{J}}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = F[\mathbf{r}, \mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}; t)] \qquad (۲۳)$$

(که در آن F تابعی‌است که شکل آن مستقل از پیمانه انتخاب شده $\mathscr{J}$ است) یک کمیت

---

* به‌سادگی می‌توان ثابت‌کردکه ، عموما" ، هرتابع $\mathscr{G}(\mathbf{r}, t)$ که فقط به $\mathbf{r}$ (واحتمالا" به‌زمان) بستگی دارد و شکل آن در هرپیمانه $\mathscr{J}$ یکسان است ، یک کمیت واقعا" فیزیکی‌راتوصیف می‌کند .

واقعاً" فیزیکی* به‌دست آورده‌ایم . این نتیجه از نظر فیزیکی منطقی است زیرا (۲۳) بیان کنندهٔ این واقعیت است که در واقع مقادیری که کمیت مورد نظر می‌گیرد ازمقادیر r و π که می‌دانیم مستقل از پیمانه‌اند ،به‌دست آمده‌اند .

حال چند مثال از توابعی که توصیف‌کننده‌کمیتهای غیر فیزیکی‌اند بیاوریم .علاوه برتکانهٔ p ،می‌توان تابع :

$$\mathscr{C}(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \tag{۲۴}$$

را ذکر کرد ، این تابع نباید با انرژی جنبشی نوشته شده در (۲۱) و به‌طورکلی ،باهرتابعی از فقط p (و احتمالاً" از زمان) اشتباه شود . همین‌طور ، تکانهٔ زاویه‌ای :

$$\mathscr{L}(\mathbf{r}, \mathbf{p})_{\backslash}= \mathbf{r} \times \mathbf{p} \tag{۲۵}$$

نمی‌تواند به‌عنوان یک کمیت واقعاً" فیزیکی در نظر گرفته شود . بالاخره ، هامیلتونی کلاسیکی را ذکر کنیم که بنابر (۷)مجموع انرژی جنبشی $\gamma_{\mathscr{J}}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t)$، که یک کمیت واقعاً" فیزیکی است ، و انرژی پتانسیل qU است . اما ،کمیت اخیر [که دقیقاً" باید به‌صورت یک تابع $U_{\mathscr{J}}(\mathbf{r}; t)$ وابسته به‌پیمانه نوشته شود] یک کمیت واقعاً" فیزیکی نیست زیرا ، در هرنقطه از فضا ،مقدارش با تغییر پیمانه تغییر می‌کند .

۳ ــ تغییرناپذیری پیمانه‌ای در مکانیک کوانتومی

درفصل سوم ، اصول موضوعهٔ مکانیک‌کوانتومی را با شروع ازصورتبندی هامیلتونی مکانیک کلاسیک وارد کردیم . بدین ترتیب به‌این سئوال رهنمون می‌شویم که آیا مسألهٔ تغییرناپذیری پیمانه‌ای ، که در مکانیک کلاسیک به‌خاطر وجود معادلات نیوتن به‌سادگی برطرف می‌شود ، در چارچوب مکانیک کوانتومی پیچیده‌تر است . سپس سئوال زیر مطرح می‌شود : آیا اصول موضوعهٔ بیان شده درفصل سوم برای هرپیمانهٔ اختیاری $\mathscr{J}$ معتبراند یا فقط برای یک پینمانهٔ بخصوص؟

درپاسخ به‌این سئوال ، از نتایج به‌دست‌آمده در پاراگراف قبلی‌کمک می‌گیریم . با

---

* می‌توان توابعی وابسته به‌کمیت‌های واقعاً"فیزیکی‌ای ساخت که درآن پتانسیلها به‌صورت پیچیده‌تری از (۲۳) درآن دخالت داشته باشد (به‌عنوان مثال حاصلضرب‌نرده‌ای‌سرعت ذره و میدان الکتریکی در محل ذره) .

ادامه همان نوع استدلال، خواهیم دید که تشابه نزدیکی بین نتایج یک تبدیل پیمانه‌ای درصورتبندی هامیلتونی کلاسیکی و صورتبندی مکانیک کوانتومی وجود دارد. بدین‌ترتیب تغییرناپذیری پیمانه‌ای در مکانیک کوانتومی را برقرار خواهیم کرد.

برای این منظور، ابتدا (بخش a) به‌بررسی نتایج به‌دست‌آمده وقتی که قواعد کوانتش را به‌طور یکسان دردوپیمانهٔ مختلف اعمال کنیم می‌پردازیم. سپس خواهیم دید (بخش b) که مانند مکانیک کلاسیک، که درآن مقادیر متغیرهای دینامیکی عموماً با تغییر پیمانه تغییر می‌کنند، یک دستگاه فیزیکی معین بایستی توسط یک بردار حالت ریاضی $\rangle \psi |$ که به‌پیمانه بستگی‌دارد، مشخص شود. انتقال ازیک‌بردارحالت متناظر باپیمانهٔ $\mathscr{J}$ به‌بردار حالت متناظر با پیمانهٔ $\mathscr{J}'$ توسط یک تبدیل یکانی انجام می‌شود. لیکن شکل معادلهٔ شرودینگر همواره یکی باقی می‌ماند (همانطوری که معادلات هامیلتون در مکانیک کلاسیک همواره یکسان می‌مانند). بالاخره، رفتار مشاهده‌پذیرهای وابسته به‌دستگاه دریک پیمانه را بررسی خواهیم کرد (بخش c). سپس خواهیم دید که تغییر همزمان بردار حالت و مشاهده‌پذیرها طوری است که محتوای فیزیکی مکانیک کوانتومی به‌پیمانهٔ انتخاب‌شده بستگی ندارد. این مطلب را، بعلاوه، بانشان دادن اینکه مقادیر چگالی و جریان احتمال تغییرناپذیر پیمانه‌ای هستندثابت خواهیم کرد.

a ــ قواعد کوانتش

فضای حالتهای یک ذرهٔ (بدون اسپین) همواره $\mathscr{E}_r$ است. ولی با توجه به‌نتایج بخش ۲ در بالا انتظار داریم که عملگر وابسته به‌یک کمیت معین ممکن است در دوپیمانهٔ مختلف، متفاوت باشد. از این‌رو این عملگرها را با یک شاخص $\mathscr{J}$ مشخص خواهیم کرد.

قواعد کوانتش به‌مکان $\mathbf{r}$ و تکانهٔ $\mathbf{p}$ ی ذره، عملگرهای $\mathbf{R}$ و $\mathbf{P}$ را که در $\mathscr{E}_r$ عمل می‌کند وابسته می‌کند به‌طوری که:

$$[X, P_x] = [Y, P_y] = [Z, P_z] = i\hbar \qquad (۲۶)$$

(سایر روابط جابجایی بین مؤلفه‌های $\mathbf{R}$ و $\mathbf{P}$ صفراند). در نمایش $\{ |\mathbf{r}\rangle \}$، عملگر $\mathbf{R}$ مانند ضرب کردن در $\mathbf{r}$ عمل می‌کند و $\mathbf{P}$ مانند عملگر دیفرانسیلی $\frac{\hbar}{i}\nabla$. این قواعد در تمام پیمانه‌ها یکسان است. ازین رو می‌توانیم بنویسیم.

$$\begin{cases} \mathbf{R}_{\mathscr{J}'} = \mathbf{R}_{\mathscr{J}} & (۲۷ - \text{a}) \\ \mathbf{P}_{\mathscr{J}'} = \mathbf{P}_{\mathscr{J}} & (۲۷ - \text{b}) \end{cases}$$

درواقع ، این معادلات مارا قادر می‌سازند تا شاخص $\mathscr{G}$ را برای مشاهده‌پذیرهای $\mathbf{R}$ و $\mathbf{P}$ حذف کنیم ، و از این به‌بعد ما همین کار را خواهیم کرد .

کوانتش سایر کمیتهای وابسته به‌ذره به‌صورت زیر به‌دست می‌آیند : در یک پیمانهٔ معین ، تابعی از $\mathbf{r}$ و $\mathbf{p}$ را که کمیت کلاسیکی را می‌دهد اختیار می‌کنیم و (اگر لازم باشد پس از متقارن‌سازی) بجای $\mathbf{r}$ عملگر $\mathbf{R}$ و بجای $\mathbf{p}$ عملگر $\mathbf{P}$ را قرار می‌دهیم . بدین‌ترتیب عملگری را به‌دست می‌آوریم که ، در پیمانهٔ انتخاب شده ، این کمیت را توصیف می‌کند . به‌چندمثال‌توجه کنید :

ـ عملگر تکانهٔ زاویه‌ای‌که از $\mathbf{r} \times \mathbf{p}$ به‌دست می‌آید ، درتمام پیمانه‌ها یکسان‌است .

$$\mathbf{L}_{\mathscr{G}'} = \mathbf{L}_{\mathscr{G}} \tag{۲۸}$$

ـ برعکس، عملگر وابسته به‌تکانهٔ مکانیکی ،به‌پیمانهٔ انتخاب شده بستگی دارد . این عملگر در پیمانهٔ $\mathscr{G}$ به‌صورت زیر داده می‌شود :

$$\mathbf{\Pi}_{\mathscr{G}} = \mathbf{P} - q\mathbf{A}(\mathbf{R}\,; t) \tag{۲۹}$$

اگر پیمانه تغییر کند ، به‌صورت :

$$\mathbf{\Pi}_{\mathscr{G}'} = \mathbf{P} - q\mathbf{A}'(\mathbf{R}\,; t) \tag{۳۰}$$

در می‌آید که عمل آن در $\mathscr{E}_{\mathbf{r}}$ با عمل $\mathbf{\Pi}_{\mathscr{G}}$ متفاوت است :

$$\mathbf{\Pi}_{\mathscr{G}'} = \mathbf{\Pi}_{\mathscr{G}} - q\nabla\chi(\mathbf{R}\,; t) \tag{۳۱}$$

ـ همین‌طور ، عملگر* :

$$\mathbf{\Lambda}_{\mathscr{G}} = \mathbf{R} \times \mathbf{\Pi}_{\mathscr{G}} = \mathbf{R} \times [\mathbf{P} - q\mathbf{A}(\mathbf{R}\,; t)] \tag{۳۲}$$

که گشتاور تکانهٔ مکانیکی‌را توصیف می‌کند ، صریحا" شامل پتانسیل برداری انتخاب شده است .

ـ بالاخره ، عملگر هامیلتونی که از فرمول (۷) به‌دست آمده است :

$$H_{\mathscr{G}} = \frac{1}{2m}[\mathbf{P} - q\mathbf{A}(\mathbf{R}\,; t)]^2 + qU(\mathbf{R}\,; t) \tag{۳۳}$$

---

* با استفاده از روابط جابجایی $\mathbf{R}$ و $\mathbf{\Pi}_{\mathscr{G}}$ می‌توان نشان داد که ضرورتی ندارد عبارت (۳۲) را متقارن سازیم .

واضح است که این عملگر در پیمانهٔ دیگر یک عملگر دیگری خواهد شد ، زیرا :

$$H_{\mathscr{I}'} = \frac{1}{2m}[\mathbf{P} - q\mathbf{A}'(\mathbf{R};t)]^2 + qU'(\mathbf{R};t) \neq H_{\mathscr{I}} \quad (۳۴)$$

b ــ تبدیل یکانی بردار حالت ، تغییرناپذیری صوری معادله شرودینگر

α . عملگر یکانی $T_\chi(t)$

درمکانیک کلاسیک مقادیر متغیرهای دینامیکی اساسی مشخص‌کننده حالت ذره در دوپیمانهٔ مختلف $\mathscr{I}$ و $\mathscr{I}'$ را با $\{\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t)\}$ و $\{\mathbf{r}'(t), \mathbf{p}'(t)\}$ نشان دادیم . ازاین‌رو درمکانیک‌کوانتومی بردارهای حالت نسبت به‌این دوپیمانه را با $|\psi(t)\rangle$ و $|\psi'(t)\rangle$ نشان خواهیم داد و بدین ترتیب مشابه روابط (۱۴) توسط روابط بین مقادیر متوسط داده خواهد شد :

$$\langle \psi'(t) | \mathbf{R}_{\mathscr{I}'} | \psi'(t) \rangle = \langle \psi(t) | \mathbf{R}_{\mathscr{I}} | \psi(t) \rangle \quad (۳۵-\mathrm{a})$$
$$\langle \psi'(t) | \mathbf{P}_{\mathscr{I}'} | \psi'(t) \rangle = \langle \psi(t) | \mathbf{P}_{\mathscr{I}} + q\nabla\chi(\mathbf{R};t) | \psi(t) \rangle \quad (۳۵-\mathrm{b})$$

بااستفاده از (۲۷) مشاهده می‌کنیم که این تنها وقتی ممکن است که $|\psi(t)\rangle$ و $|\psi'(t)\rangle$ دوکت متفاوت باشند . بنابراین یک تبدیل یکانی $T_\chi(t)$ جستجو می‌کنیم‌که به‌ما امکان دهد تا از $|\psi(t)\rangle$ به $|\psi'(t)\rangle$ برویم :

$$|\psi'(t)\rangle = T_\chi(t)\,|\psi(t)\rangle \quad (۳۶-\mathrm{a})$$
$$T_\chi^\dagger(t)\,T_\chi(t) = T_\chi(t)\,T_\chi^\dagger(t) = \mathbb{1} \quad (۳۶-\mathrm{b})$$

با در نظرگرفتن (۲۷) ، ملاحظه می‌کنیم که معادلات (۳۵) برای هر $|\psi(t)\rangle$ ای برقرارند به‌شرط‌آنکه داشته باشیم :

$$\begin{cases} T_\chi^\dagger(t)\,\mathbf{R}\,T_\chi(t) = \mathbf{R} & (۳۷-\mathrm{a}) \\ T_\chi^\dagger(t)\,\mathbf{P}\,T_\chi(t) = \mathbf{P} + q\nabla\chi(\mathbf{R};t) & (۳۷-\mathrm{b}) \end{cases}$$

رابطه (a ــ ۳۷) را از چپ در $T_\chi(t)$ ضرب‌کنیم ، به‌دست می‌آوریم :

$$\mathbf{R}\,T_\chi(t) = T_\chi(t)\,\mathbf{R} \quad (۳۸)$$

عملگر یکانی مورد جستجو با سه مؤلفهٔ $\mathbf{R}$ جابجائی‌پذیر است ، بنابراین می‌توان آن را

به‌صورت زیر نوشت:

$$T_\chi(t) = e^{iF(\mathbf{R};t)} \tag{۳۹}$$

که درآن $F(\mathbf{R};t)$ یک عملگر هرمیتی است. در این صورت رابطهٔ (۴۸) از مکمل B_{II} به‌ما امکان می‌دهد تا بنویسیم:

$$[\mathbf{P}, T_\chi(t)] = \hbar\nabla\{F(\mathbf{R};t)\}T_\chi(t) \tag{۴۰}$$

اگر این معادله را از چپ در $T_\chi^\dagger(t)$ ضرب کنیم وآن را در (b ــ ۳۷) قرار دهیم، به‌آسانی رابطه زیر به‌دست می‌آید:

$$\hbar\nabla\{F(\mathbf{R};t)\} = q\nabla\chi(\mathbf{R};t) \tag{۴۱}$$

که وقتی برقرار است که داشته باشیم:

$$F(\mathbf{R};t) = F_0(t) + \frac{q}{\hbar}\chi(\mathbf{R};t) \tag{۴۲}$$

با حذف ضریب $F_0(t)$ که، برای بردار حالت $|\psi(t)\rangle$، متناظر است با یک عامل فاز کلی که هیچ اهمیت فیزیکی ندارد، عملگر $T_\chi(t)$ به‌دست می‌آید:

$$T_\chi(t) = e^{i\frac{q}{\hbar}\chi(\mathbf{R};t)} \tag{۴۳}$$

اگر، در (a ــ ۳۶)، $T_\chi(t)$ همین عملگر باشد، روابط(۳۵) به‌خودی خود آورده می‌شود.

گوشزدها:

(i) روابط (a ــ ۳۶) و (۴۳)، درنمایش $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ می‌رسانند که توابع موج $\psi(\mathbf{r},t) = \langle\mathbf{r}|\psi(t)\rangle$ و $\psi'(\mathbf{r},t) = \langle\mathbf{r}|\psi'(t)\rangle$ توسط رابطهٔ زیر به‌هم مربوط می‌شوند.

$$\psi'(\mathbf{r},t) = e^{i\frac{q}{\hbar}\chi(\mathbf{r},t)}\psi(\mathbf{r},t) \tag{۴۴}$$

برای تابع موج، تغییر پیمانه متناظر است با یک تغییرفاز که از نقطه‌ای به‌نقطهٔ دیگر تغییر می‌کند، و از این‌رو متناظر با یک عامل فاز کلی نیست. بنابراین، تغییر ناپذیری پیمانه‌ای پیش بینی‌های فیزیکی به‌دست آمده از توابع موج ψ و ψ' از قبل روشن نیست.

اگر دستگاه مورد مطالعه ازچندین‌ذره با مکانهای $\mathbf{r}_1$ ، $\mathbf{r}_2$ ، . . . وبارهای q_1 ، q_2 ، . . . تشکیل شده باشد (۴۳) باید توسط رابطهٔ زیر جایگزین شود :

$$T_\chi(t) = T_\chi^{(1)}(t)\, T_\chi^{(2)}(t) \dots = e^{\frac{i}{\hbar}[q_1\chi(\mathbf{R}_1, t) + q_2\chi(\mathbf{R}_2, t) + \dots]} \qquad (۴۵)$$

β . تحول زمانی بردار حالت

حال نشان دهیم که اگر تحول کت $|\psi(t)\rangle$ ، در پیمانهٔ $\mathscr{J}$ ، از معادلهٔ شرودینگر :

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = H_{\mathscr{J}}(t)|\psi(t)\rangle \qquad (۴۶)$$

تبعیت کند ، بردار حالت $|\psi'(t)\rangle$ که توسط(۳۶)داده می‌شود درمعادله‌ای به‌همان‌شکل در پیمانهٔ $\mathscr{J}'$ صدق می‌کند :

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi'(t)\rangle = H_{\mathscr{J}'}(t)|\psi'(t)\rangle \qquad (۴۷)$$

که در آن $H_{\mathscr{J}'}(t)$ توسط (۳۴) داده می‌شود .

برای این منظور ، طرف چپ (۴۷) را محاسبه کنیم :

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi'(t)\rangle &= i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\{T_\chi(t)|\psi(t)\rangle\} \\ &= i\hbar\{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}T_\chi(t)\}|\psi(t)\rangle + i\hbar T_\chi(t)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle \end{aligned} \qquad (۴۸)$$

یعنی ، بنابر (۴۳) و (۴۶)* :

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi'(t)\rangle &= -q\{\frac{\partial}{\partial t}\chi(\mathbf{R};t)\}T_\chi(t)|\psi(t)\rangle + T_\chi(t)H_{\mathscr{J}}(t)|\psi(t)\rangle \\ &= \{-q\frac{\partial}{\partial t}\chi(\mathbf{R};t) + \tilde{H}_{\mathscr{J}}(t)\}|\psi'(t)\rangle \end{aligned} \qquad (۴۹)$$

---

* تابع χ به $\mathbf{R}$ بستگی دارد و مستقل از $\mathbf{P}$ است ، در نتیجه $\chi(\mathbf{R}, t)$ با $\frac{\partial}{\partial t}\chi(\mathbf{R};t)$ جابجائی‌پذیر است . به‌همین دلیل است که می‌توان طوری از $T_\chi(t)$ مشتق گرفت‌که‌گوئی $\chi(\mathbf{R}, t)$ یک تابع معمولی از زمان است و نه یک عملگر (رک مکمل $\mathrm{B_{II}}$ ، گوشزد c ــ ۵) .

که در آن $\tilde{H}_{\mathscr{G}}(t)$ نماینده‌ٔ تبدیل یافته‌ٔ $H_{\mathscr{G}}(t)$ توسط عملگر یکانی $T_\chi(t)$ است:

$$\tilde{H}_{\mathscr{G}}(t) = T_\chi(t)\, H_{\mathscr{G}}(t)\, T_\chi^\dagger(t) \tag{۵۰}$$

بنابراین معادله (۴۷) در صورتی برقرار است که داشته باشیم:

$$H_{\mathscr{G}'}(t) = \tilde{H}_{\mathscr{G}}(t) - q\frac{\partial}{\partial t}\chi(\mathbf{R}\,;t) \tag{۵۱}$$

$\tilde{H}_{\mathscr{G}}(t)$ توسط رابطه‌ٔ:

$$\tilde{H}_{\mathscr{G}}(t) = \frac{1}{2m}[\tilde{\mathbf{P}} - q\mathbf{A}(\tilde{\mathbf{R}}\,;t)]^2 + qU(\tilde{\mathbf{R}}\,;t) \tag{۵۲}$$

داده می‌شود که در آن $\tilde{\mathbf{R}}$ و $\tilde{\mathbf{P}}$ معرف تبدیل یافته‌های $\mathbf{R}$ و $\mathbf{P}$ توسط عملگر یکانی $T_\chi(t)$ هستند. بنابر (۳۷):

$$\begin{cases} \tilde{\mathbf{R}} = T_\chi(t)\,\mathbf{R}\,T_\chi^\dagger(t) = \mathbf{R} & (۵۳-\mathrm{a}) \\ \tilde{\mathbf{P}} = T_\chi(t)\,\mathbf{P}\,T_\chi^\dagger(t) = \mathbf{P} - q\nabla\chi(\mathbf{R}\,;t) & (۵۳-\mathrm{b}) \end{cases}$$

وقتی این روابط را در (۵۲) قرار دهیم، خواهیم یافت:

$$\tilde{H}_{\mathscr{G}}(t) = \frac{1}{2m}[\mathbf{P} - q\mathbf{A}(\mathbf{R}\,;t) - q\nabla\chi(\mathbf{R}\,;t)]^2 + qU(\mathbf{R}\,;t) \tag{۵۴}$$

سپس بااستفاده از روابط (۲) برای جایگزین‌کردن پتانسیلها نسبت به‌پیمانه‌ٔ $\mathscr{G}$ توسط پتانسیلها نسبت به‌پیمانه $\mathscr{G}'$، و با توجه به (۳۴) رابطه‌ٔ (۵۱) را به‌دست می‌آوریم. بنابراین معادله شرودینگر می‌تواند در همه‌ٔ پیمانه‌ها به‌یک شکل نوشته شود.

c ــ تغییر ناپذیری پیش بینی‌های فیزیکی در یک تبدیل پیمانه‌ای

α . رفتار مشاهده‌پذیرها .

هر مشاهده‌پذیر K ،تحت تأثیر تبدیل یکانی $T_\chi(t)$ ، تبدیل به:

$$\tilde{K} = T_\chi(t)\,K\,T_\chi^\dagger(t) \tag{۵۵}$$

می‌شود. قبلاً در (۵۳) دیدیم که هرچند $\tilde{\mathbf{R}}$ برابر با $\mathbf{R}$ است، $\tilde{\mathbf{P}}$ برابر با $\mathbf{P}$ نیست. همین‌طور، $\tilde{\mathbf{\Pi}}_{\mathscr{G}}$ با $\mathbf{\Pi}_{\mathscr{G}}$ متفاوت است زیرا:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{\Pi}}_{\mathscr{G}} &= \tilde{\mathbf{P}} - q\mathbf{A}(\tilde{\mathbf{R}}\,;t) \\ &= \mathbf{P} - q\nabla\chi(\mathbf{R}\,;t) - q\mathbf{A}(\mathbf{R}\,;t) \\ &= \mathbf{\Pi}_{\mathscr{G}} - q\nabla\chi(\mathbf{R}\,;t) \end{aligned} \tag{۵۶}$$

با درنظرگرفتن (a ــ۲۷) و (۳۱) ملاحظه می‌کنیم که روابط (a ــ۵۳) و (۵۶) ایجاب می‌کنند که مشاهده‌پذیرهای R و $\Pi_{\mathscr{J}}$ ، وابسته به‌کمیتهای واقعاً" فیزیکی مکان و تکانه مکانیکی ، طوری باشند که برای آنها داشته باشیم :

$$\begin{cases} \tilde{\mathbf{R}}_{\mathscr{J}} = \mathbf{R}_{\mathscr{J}'} \\ \tilde{\mathbf{\Pi}}_{\mathscr{J}} = \mathbf{\Pi}_{\mathscr{J}'} \end{cases} \tag{۵۷}$$

از طرف دیگر ،تکانهٔ P (که یک کمیت واقعاً" فیزیکی نیست) در رابطهٔ مشابهی صدق نمی‌کند ، زیرا از (b ــ ۲۷) و (b ــ ۵۳) داریم :

$$\tilde{\mathbf{P}}_{\mathscr{J}} \neq \mathbf{P}_{\mathscr{J}'} \tag{۵۸}$$

خواهیم دید که این نتیجهٔ یک نتیجهٔ عام است : در مکانیک کوانتومی ، برای هر کمیت واقعاً" فیزیکی یک عملگر $G_{\mathscr{J}}(t)$ وجود دارد که در رابطهٔ زیر صدق می‌کند :

$$\tilde{G}_{\mathscr{J}}(t) = G_{\mathscr{J}'}(t) \tag{۵۹}$$

این رابطه مشابه کوانتومی رابطهٔ کلاسیکی (۱۶) است . این رابطه نشان می‌دهد که بجز برای مورد خاص R یا تابعی که فقط به R بستگی دارد ، عملگر متناظر با یک کمیت واقعاً " فیزیکی به‌پیمانهٔ $\mathscr{J}$ بستگی دارد . قبلا" در (۲۹) و (۳۲) مثالهایی ازاین‌موردرادیده‌ایم .

برای اثبات (۵۹) کافی است قواعد کوانتش بیان شده در فصل سوم را به‌تابع $\mathscr{G}_{\mathscr{J}}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t)$ اعمال کنیم و رابطهٔ (۱۷) را ، که مشخصهٔ کمیتهای کلاسیکی واقعاً" فیزیکی است ، مورد استفاده قرار دهیم . بنابراین بجای $\mathbf{r}$ و $\mathbf{p}$ ، عملگرهای $\mathbf{R}$ و $\mathbf{P}$ را قرار می‌دهیم و (درصورت لزوم ،پس از متقارن‌سازی نسبت به‌این عملگرها) عملگر $G_{\mathscr{J}}(t)$ را به‌دست می‌آوریم . اگر شکل تابع $\mathscr{G}_{\mathscr{J}}$ به‌پیمانهٔ انتخاب شده بستگی داشته باشد ، عملگر $G_{\mathscr{J}}(t)$ نیز به $\mathscr{J}$ بستگی خواهد داشت . وقتی‌کمیت وابسته به $\mathscr{G}_{\mathscr{J}}$ یک کمیت واقعاً" فیزیکی باشد ، بنابر (۱۷) ،داریم :

$$\mathscr{G}_{\mathscr{J}}[\mathbf{R}, \mathbf{P}; t] = \mathscr{G}_{\mathscr{J}'}[\mathbf{R}, \mathbf{P} + q\nabla\chi(\mathbf{R}; t); t] \tag{۶۰}$$

با اعمال تبدیل یکانی $T_\chi(t)$ به‌این رابطه، به‌دست می‌آوریم :

$$\begin{aligned} \tilde{\mathscr{G}}_{\mathscr{J}}[\mathbf{R}, \mathbf{P}; t] &= \tilde{\mathscr{G}}_{\mathscr{J}'}[\mathbf{R}, \mathbf{P} + q\nabla\chi(\mathbf{R}; t); t] \\ &= \mathscr{G}_{\mathscr{J}'}[\tilde{\mathbf{R}}, \tilde{\mathbf{P}} + q\nabla\chi(\tilde{\mathbf{R}}; t); t] \end{aligned} \tag{۶۱}$$

یعنی ، با درنظر گرفتن (۵۳) :

$$\tilde{\mathscr{G}}_{\mathscr{I}}[\mathbf{R}, \mathbf{P}; t] = \mathscr{G}_{\mathscr{I}'}[\mathbf{R}, \mathbf{P}; t] \tag{۶۲}$$

پس از متقارن‌سازی هردوطرف این رابطه ، اگر ضروری باشد ، همان (۵۹) به‌دست می‌آید .

حال به‌ذکر چندمثال از مشاهده‌پذیرهای واقعا" فیزیکی می‌پردازیم . می‌توان ، علاوه بر R و $\Pi_{\mathscr{I}}$ ، از گشتاور $A_{\mathscr{I}}$ ی تکانهٔ مکانیکی [رک (۴۲)] یا انرژی جنبشی :

$$\Gamma_{\mathscr{I}} = \frac{\Pi_{\mathscr{I}}^2}{2m} = \frac{1}{2m}[\mathbf{P} - q\mathbf{A}(\mathbf{R}:t)]^2 \tag{۶۳}$$

نام برد . ازطرف دیگر P و L کمیتهای واقعا" فیزیکی نیستند ، هامیلتونی نیز یک کمیت واقعا" فیزیکی نیست ، زیرا رابطهٔ (۵۱) عموما" می‌رساند که :

$$\tilde{H}_{\mathscr{I}}(t) \neq H_{\mathscr{I}'}(t) \tag{۶۴}$$

گوشزد :

درمکانیک کلاسیک ، می‌دانیم‌که انرژی کل ذره‌ای‌که در یک میدان الکترومغناطیسی مستقل از زمان حرکت می‌کند یک ثابت حرکت است . مسلما" می‌توان دراین مورد خود را به‌پتانسیلهائی محدود کرد که آنها نیز مستقل از زمان باشند . از (۵۱) می‌بینیم که دراین صورت داریم :

$$\tilde{H}_{\mathscr{I}} = H_{\mathscr{I}'} \tag{۶۵}$$

دراین مورد بخصوص، $H_{\mathscr{I}}$ محققا" یک مشاهده‌پذیر واقعا" فیزیکی‌است‌که از این‌رو می‌توان آنرا به‌عنوان انرژی کل ذره تعبیر کرد .

β ــ احتمالهای نتایج ممکن مختلف اندازه‌گیری یک کمیت واقعا" فیزیکی .

فرض کنیم می‌خواهیم در زمان t یک کمیت واقعا" فیزیکی را اندازه‌گیری کنیم در پیمانهٔ $\mathscr{I}$ ،حالت دستگاه دراین لحظه توسط کت* $|\psi\rangle$ ، وکمیت فیزیکی توسط

---

* بستگی به‌زمان را ننوشته‌ایم زیرا تمام کمیتها باید در زمان t که اندازه‌گیری انجام می‌شود ، در نظر گرفته شوند .

مشاهده‌پذیر $G_{\mathscr{J}}$ توصیف می‌شوند. فرض کنید $|\varphi_n\rangle$ یک ویژه‌بردار $G_{\mathscr{J}}$ با ویژه مقدار g_n (که برای سهولت ناتبهگن فرض می‌شود) باشد:

$$G_{\mathscr{J}}\,|\,\varphi_n\rangle = g_n\,|\,\varphi_n\rangle \tag{۶۶}$$

احتمال به‌دست آوردن g_n در این اندازه‌گیری، برپایهٔ اصول موضوعهٔ مکانیک‌کوانتومی، در پیمانه $\mathscr{J}$ محاسبه شده است برابر است با:

$$\mathscr{P}_n = |\langle\,\varphi_n\,|\,\psi\,\rangle|^2 \tag{۶۷}$$

حال، اگر پیمانه را عوض کنیم چه برسر این پیش بینی می‌آید؟ برطبق (۵۹)، کت:

$$|\,\varphi'_n\,\rangle = T_\chi\,|\,\varphi_n\,\rangle \tag{۶۸}$$

می‌تواند یک ویژه بردار عملگر $G_{\mathscr{J}'}$ وابسته به‌کمیت مورد نظر، درپیمانهٔ $\mathscr{J}'$، باهمان‌ویژه مقدار g_n معادلهٔ (۶۶)، باشد. یعنی:

$$\begin{aligned} G_{\mathscr{J}'}\,|\,\varphi'_n\,\rangle &= T_\chi\, G_{\mathscr{J}}\, T_\chi^\dagger\, T_\chi\,|\,\varphi_n\,\rangle \\ &= T_\chi\, g_n\,|\,\varphi_n\,\rangle = g_n\,|\,\varphi'_n\,\rangle \end{aligned} \tag{۶۹}$$

بنابراین g_n، درپیمانهٔ $\mathscr{J}'$ هم به‌عنوان یک نتیجه ممکن اندازه‌گیری ظاهر می‌شود. بعلاوه، محاسبه احتمال مربوطه همان مقدار محاسبه‌شده درپیمانه $\mathscr{J}$ را به‌دست می‌دهد. زیرا برطبق (a ــ ۳۶) و (۶۸) داریم:

$$\langle\,\varphi'_n\,|\,\psi'\,\rangle = \langle\,\varphi_n\,|\,T_\chi^\dagger\,T_\chi\,|\,\psi\,\rangle = \langle\,\varphi_n\,|\,\psi\,\rangle \tag{۷۰}$$

بدین ترتیب ثابت می‌شود که اصول موضوعهٔ مکانیک کوانتومی به‌پیش‌بینی‌های فیزیکی مستقل از پیمانه منجر می‌شوند: نتایج ممکن هراندازه‌گیری و احتمالات وابسته به‌آن تحت‌تبدیل پیمانه‌ای تغییرناپذیرند.

۷ ــ چگالی و جریان احتمال

با استفاده از فرمولهای (۹ــ D) و (۲۵ــ D) از فصل سوم، چگالی احتمال $\rho(\mathbf{r}, t)$ و جریان احتمال $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ را در دوپیمانهٔ متفاوت $\mathscr{J}$ و $\mathscr{J}'$ محاسبه کنیم. برای پیمانهٔ اول داریم:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \tag{۷۱}$$

و :

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{m}\mathrm{Re}\left\{\psi^*(\mathbf{r}, t)\left[\frac{\hbar}{i}\nabla - q\mathbf{A}(\mathbf{r}; t)\right]\psi(\mathbf{r}, t)\right\} \qquad (۷۲)$$

از رابطه (۴۴) فوراً" نتیجه می‌شود :

$$\rho'(\mathbf{r}, t) = |\psi'(\mathbf{r}, t)|^2 = \rho(\mathbf{r}, t) \qquad (۷۳)$$

و هم‌چنین :

$$\begin{aligned}\mathbf{J}'(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{m}\mathrm{Re}\left\{e^{-i\frac{q}{\hbar}\chi(\mathbf{r};t)}\psi^*(\mathbf{r}, t)\left[\frac{\hbar}{i}\nabla - q\mathbf{A}'(\mathbf{r}; t)\right]e^{i\frac{q}{\hbar}\chi(\mathbf{r};t)}\psi(\mathbf{r}, t)\right\}\\ &= \frac{1}{m}\mathrm{Re}\left\{\psi^*(\mathbf{r}, t)\left[\frac{\hbar}{i}\nabla - q\mathbf{A}'(\mathbf{r}; t) + q\nabla\chi(\mathbf{r}; t)\right]\psi(\mathbf{r}, t)\right\}\end{aligned} \qquad (۷۴)$$

یعنی ، با درنظر گرفتن (۲) :

$$\mathbf{J}'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) \qquad (۷۵)$$

بنابراین ، چگالی و جریان احتمال در تغییرپیمانه تغییرناپذیراند . این نتیجه می‌توانست ازنتایج بخش β ی بالا پیش‌بینی‌شود ، زیرا [رک رابطه (۱۹ــ D) ازفصل‌سوم] $\rho(\mathbf{r}, t)$ و $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ را می‌توان به‌عنوان مقادیر متوسط عملگر $|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|$ و :

$$\mathbf{K}_{\mathscr{I}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2m}\{|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\mathbf{\Pi}_{\mathscr{I}} + \mathbf{\Pi}_{\mathscr{I}}|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\} \qquad (۷۶)$$

در نظر گرفت . به‌آسانی می‌توان نشان داد که این دوعملگر در رابطهٔ (۵۹) صدق می‌کنند از این‌رو این دوعملگر کمیتهای واقعاً" فیزیکی‌ای را توصیف می‌کنند که مقادیر متوسط آنها تغییرناپذیر پیمانه‌ای است .

مراجع و پیشنهادات برای مطالعهٔ بیشتر :

Messiah (1.17), chap. XXI, §§20 to 22; Sakurai (2.7), §8-1.

Gauge invariance, extended to other domains, has recently roused considerable interest in particle physics; see, for example, the article by Abers and Lee (16.35).

مکمل J_{III}

انتشاردهندهٔ معادله شرودینگر

۱ ـ مقدمه ، ایده فیزیکی

۲ ـ وجود و خواص یک انتشاردهنده $K(2, 1)$

a ـ وجود یک انتشاردهنده

b ـ تعبیر فیزیکی $K(2, 1)$

c ـ عبارت $K(2, 1)$ برحسب ویژه‌حالتهای H

d ـ معادله‌ای که $K(2, 1)$ درآن صدق می‌کند

۳ ـ فرمولبندی لاگرانژی مکانیک‌کوانتومی

a ـ مفهوم جاده فضا ـ زمان

b ـ تجزیه $K(2, 1)$ به‌یک مجموع از دامنه‌های جزئی

c ـ اصول موضوعه فاینمن

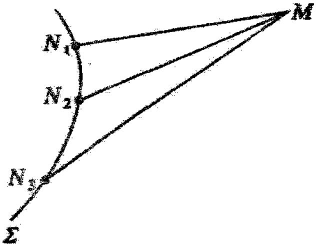
d ـ حد کلاسیکی : ارتباط با اصل هامیلتون

1 ـ مقدمه

ذره‌ای را که توسط تابع موج $\psi(\mathbf{r}, t)$ توصیف می‌شود در نظر بگیریم . از معادلهٔ شرودینگر می‌توان $\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r}, t)$ ، یعنی ، میزان تغییر $\psi(\mathbf{r}, t)$ نسبت بەزمان ، را محاسبهٔ کرد . بنابراین ، معادله مزبور تحول زمانی تابع موج $\psi(\mathbf{r}, t)$ را ، بااستفاده از دیدگاه دیفرانسیلی بەدست می‌دهد . می‌توان این سئوال را مطرح کرد که آیا ممکن‌است یک‌دیدگاه کلی‌تر (ولی معادل) انتخاب‌کرد که به‌کمک آن بتوان مستقیما" مقدار $\psi(\mathbf{r}_0, t)$ ی تابع موج در یک نقطه معین $\mathbf{r}_0$ و زمان معین t را با شناختن‌کل تابع موج $\psi(\mathbf{r}, t')$ درزمان قبلی t' (که لزوما" بی‌نهایت نزدیک به‌آن نیست) تعیین کرد .

برای پاسخ به‌این سئوال ، می‌توانیم از قلمرو دیگری ازفیزیک ، الکترومغناطیس، که درآن هردو دیدگاه امکان‌پذیراست الهام بگیریم . معادلات ماکسول (دیدگاه‌دیفرانسیلی) میزان‌تغییرات مؤلفه‌های مختلف میدانهای الکتریکی و مغناطیسی را بەدست می‌دهد . اصل هویگنس (دیدگاه‌کلی) محاسبه مستقیم میدان در هرنقطهٔ M را ، وقتی یک میدان

تکفام روی یک سطح Σ معلوم باشد ، ممکن می‌سازد : میدانهای تابش‌شده توسط چشمه‌های ثانوی فرضی N_1 ، N_2 ، N_3 ، . . . واقع برسطح Σ راکه دامنه وفازآنهاتوسط مقادیرمیدان در N_1 ، N_2 ، N_3 ، . . .تعیین می‌شود در محل نقطه M باهم جمع می‌کنیم (شکل۱) .

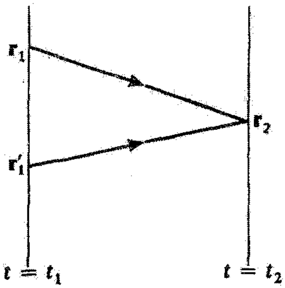


شکل ۱
درآزمایش تفرق ، می‌توان بااستفاده از اصل هویگنس میدان الکتریکی در نقطهٔ M را به‌عنوان مجموع میدانهای تابش‌شده توسط چشمه‌های ثانویه N_1 ، N_2 ، N_3 ، . . . واقع بر سطح Σ محاسبه کرد .

قصد داریم در این مکمل نشان دهیم که مشابه اصل هویگنس در مکانیک کوانتومی وجود دارد . بطور دقیقتر ، می‌توان به‌ازاء $t_2 > t_1$ ، نوشت :

$$\psi(\mathbf{r}_2, t_2) = \int d^3r_1\, K(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1)\, \psi(\mathbf{r}_1, t_1) \tag{1}$$

فرمولی که تعبیر فیزیکی آن به‌صورت زیر است : دامنهٔ احتمال یافتن ذره درلحظه t_2 در مکان $\mathbf{r}_2$ از جمع‌کردن تمام دامنه‌های "تابش‌شده" توسط "چشمه‌های ثانوی" $(\mathbf{r}_1, t)$ ، $(\mathbf{r}'_1, t_1)$ ، . . . که روی سطح فضا ــ زمانی $t = t_1$ قراردارند و هرکدام ازآنها به‌میزانی متناسب با $\psi(\mathbf{r}_1, t_1)$ ، $\psi(\mathbf{r}'_1, t_1)$ ، . . . مشارکت می‌کنند ، به‌دست می‌آید (شکل۲) . ما دراینجا فرمول اخیررا ثابت ، K را که انتشاردهندهٔ معادله شرودینگرنامیده‌می‌شودمحاسبه و خواص آنرا مطالعه خواهیم‌کرد . سپس به‌طور بسیارکیفی نشان خواهیم‌داد چگونه می‌توان تمام مکانیک‌کوانتومی را برحسب K ارائه‌داد (فرمولبندی لاگرانژی مکانیک کوانتومی ، دیدگاه فاینمن) .



شکل ۲

دامنه احتمال $\psi(\mathbf{r}_2, t_2)$ می‌تواند ازجمع کردن سهمهای دامنه‌های مختلف $\psi(\mathbf{r}_1, t_1)$ ، $\psi(\mathbf{r}'_1, t_1)$ وغیره متناظربالحظهٔقبلی t_1 به‌دست‌آید . به‌هریک ازپیکانهای شکل‌یک "انتشاردهنده" $K(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1)$ ، $K(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}'_1, t_1)$ وغیره وابسته است .

۲ ـ وجود و خواص یک انتشاردهندهٔ $K(2, 1)$

a ـ وجود یک انتشاردهنده

مسأله عبارت است از ارتباط دادن مستقیم حالتهای دستگاه در دوزمان مختلف . این امر با به‌کاربردن عملگر تحول که در مکمل $\mathrm{F_{III}}$ وارد شد ممکن می‌شود ، زیرا می‌توانیم بنویسیم :

$$|\psi(t_2)\rangle = U(t_2, t_1)\,|\psi(t_1)\rangle \tag{۲}$$

از تابع $|\psi(t_2)\rangle$ می‌توان به‌آسانی تابع موج $\psi(\mathbf{r}_2, t_2)$ را به‌دست آورد :

$$\psi(\mathbf{r}_2, t_2) = \langle \mathbf{r}_2 \,|\, \psi(t_2)\rangle \tag{۳}$$

با بردن (۲) در (۳) و گنجانیدن رابطهٔ بستاری:

$$\int d^3r_1\,|\mathbf{r}_1\rangle\langle\mathbf{r}_1| = \mathbb{1} \tag{۴}$$

بین $U(t_2, t_1)$ و $|\psi(t_1)\rangle$ ، به‌دست می‌آوریم :

$$\psi(\mathbf{r}_2, t_2) = \int d^3r_1\,\langle\mathbf{r}_2|\,U(t_2, t_1)\,|\mathbf{r}_1\rangle\langle\mathbf{r}_1\,|\,\psi(t_1)\rangle$$

$$= \int d^3r_1\,\langle\mathbf{r}_2\,|\,U(t_2, t_1)\,|\,\mathbf{r}_1\rangle\,\psi(\mathbf{r}_1, t_1) \tag{۵}$$

بدین ترتیب ، به‌شرط قراردادن :

$$\langle \mathbf{r}_2 \mid U(t_2, t_1) \mid \mathbf{r}_1 \rangle = K(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1)$$

نتیجه به‌فرمول (۱) می‌رسیم . درواقع ، چون می‌خواهیم فرمولهایی از نوع (۱) را فقط برای $t_2 > t_1$ به‌کار بریم ، می‌توان برای $t_2 < t_1$ قرار داد $K = 0$. لذا تعریف دقیق K عبارت است از :

$$K(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1) = \langle \mathbf{r}_2 \mid U(t_2, t_1) \mid \mathbf{r}_1 \rangle \, \theta(t_2 - t_1) \qquad (۶)$$

که در آن $\theta(t_2 - t_1)$ "تابع پله‌ای" است :

$$\begin{aligned} \theta(t_2 - t_1) &= 1 \qquad t_2 > t_1 \\ \theta(t_2 - t_1) &= 0 \qquad t_2 < t_1 \end{aligned} \qquad (۷)$$

واردشدن $\theta(t_2 - t_1)$ هم از نظر فیزیکی مفید است و هم از نظر ریاضی . از دیدگاه فیزیکی ، راه ساده‌ای است برای مجبورکردن چشمه‌های ثانوی واقع برسطح $t = t_1$ (شکل ۲) تا فقط به‌سمت آینده "تابش" کنند . به‌این‌دلیل $K(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1)$ که توسط (۶) تعریف شده است انتشاردهندهٔ پس افتاده نامیده می‌شود . از دیدگاه ریاضی ، بعداً خواهیم دید که $K(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1)$ ، به‌خاطر عامل $\theta(t_2 - t_1)$ ، در یک معادله بامشتقات جزئی که طرف راست آن یک تابع دلتا است ، یعنی در یک معادلهٔ تعریف یک تابع گرین ، صدق می‌کند .

گوشزدها :

(i) توجه کنید که معادله (۵) ، حتی اگر $t_2 < t_1$ باشد نیز معتبر است . بعلاوه ، همینطور می‌توان بطور ریاضی یک انتشاردهندهٔ "پیش افتاده" وارد کرد که فقط برای $t_2 < t_1$ مخالف صفر باشد و هم‌چنین در معادلهٔ تعریف یک‌تابع‌گرین‌صدق کند . چون مفهوم فیزیکی یک چنین انتشاردهنده "پیش افتاده‌ای در این‌مرحله روشن نیست آنرا دراینجا مورد مطالعه قرار نخواهیم داد .

(ii) وقتی هیچ‌گونه ابهامی پیش نیاید ، بجای $K(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1)$ خواهیم نوشت $K(2, 1)$.

b ــ تعبیر فیزیکی $K(2, 1)$

این تعبیر از تعریف (۶) نتیجه می‌شود: $K(2, 1)$ معرف دامنه احتمالی است‌که ذره، اگر در زمان t_1 در نقطه $\mathbf{r}_1$ باشد، در زمان بعدی t_2 به‌نقطهٔ $\mathbf{r}_2$ برسد. اگر حالت جایگزیده در نقطهٔ $\mathbf{r}_1$ رابه‌عنوان حالت اولیه در زمان t_1 در نظر بگیریم، یعنی:

$$|\psi(t_1)\rangle = |\mathbf{r}_1\rangle \tag{۸}$$

بردار حالت در زمان t_2 خواهد شد:

$$|\psi(t_2)\rangle = U(t_2, t_1)\,|\psi(t_1)\rangle = U(t_2, t_1)\,|\mathbf{r}_1\rangle \tag{۹}$$

در این صورت دامنهٔ احتمال یافتن ذره در این لحظه در نقطهٔ $\mathbf{r}_2$ برابر است با:

$$\langle \mathbf{r}_2 | \psi(t_2)\rangle = \langle \mathbf{r}_2 | U(t_2, t_1) | \mathbf{r}_1 \rangle \tag{۱۰}$$

c ــ عبارت $K(2,1)$ برحسب ویژه حالتهای H

فرض‌کنیم هامیلتونی H به‌طور صریح به‌زمان بستگی نداشته باشد، و ویژه حالتها و ویژه مقدارهای آن را به‌ترتیب $|\varphi_n\rangle$ و E_n بنامیم:

$$H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle \tag{۱۱}$$

برطبق فرمول (۱۸) از مکمل $\mathrm{F_{III}}$، داریم:

$$U(t_2, t_1) = e^{-iH(t_2 - t_1)/\hbar} \tag{۱۲}$$

با توجه به‌رابطهٔ بستاری:

$$\sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = \mathbb{1} \tag{۱۳}$$

می‌توان (۲) را به‌صورت زیر نوشت:

$$U(t_2, t_1) = e^{-iH(t_2 - t_1)/\hbar} \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| \tag{۱۴}$$

یعنی، با درنظرگرفتن (۱۱)، داریم:

$$U(t_2, t_1) = \sum_n e^{-iE_n(t_2-t_1)/\hbar} \left| \varphi_n \right\rangle \left\langle \varphi_n \right| \tag{۱۵}$$

لذا، برای محاسبهٔ $K(2, 1)$ کافی است عنصر ماتریسی دوطرف (۱۵) بین $\langle \mathbf{r}_2 |$ و $| \mathbf{r}_1 \rangle$ را بگیریم وآنرا در $\theta(t_2 - t_1)$ ضرب کنیم. چون داریم:

$$\langle \mathbf{r}_2 | \varphi_n \rangle = \varphi_n(\mathbf{r}_2) \tag{۱۶}$$

$$\langle \varphi_n | \mathbf{r}_1 \rangle = \varphi_n^*(\mathbf{r}_1) \tag{۱۷}$$

نتیجه می‌شود:

$$K(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1) = \theta(t_2 - t_1) \sum_n \varphi_n^*(\mathbf{r}_1) \varphi_n(\mathbf{r}_2) e^{-iE_n(t_2-t_1)/\hbar} \tag{۱۸}$$

a ــ معادله‌ای که $K(2, 1)$ در آن صدق می‌کند

تابع $\varphi_n(\mathbf{r}_2) e^{-iE_n t_2/\hbar}$ یک جواب معادلهٔ شرودینگر است. از آن نتیجه‌گیری می‌کنیم که، در نمایش $\{ | \mathbf{r} \rangle \}$ ، :

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} - H\left(\mathbf{r}_2, \frac{\hbar}{i} \nabla_2 \right) \right] \varphi_n(\mathbf{r}_2) e^{-iE_n t_2/\hbar} = 0 \tag{۱۹}$$

(که در آن ∇_2 نماد فشرده‌ای برای مشخص‌کردن سه‌عملگر $\frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial y_2}, \frac{\partial}{\partial z_2}$ است). حال به‌دوطرف معادله (۱۸) عملگر:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} - H\left(\mathbf{r}_2, \frac{\hbar}{i} \nabla_2 \right)$$

را که فقط روی متغیرهای $\mathbf{r}_2$ و t_2 عمل می‌کند، اعمال‌کنیم. می‌دانیم که [رک پیوست II ، رابطه (۴۴)]:

$$\frac{\partial}{\partial t_2} \theta(t_2 - t_1) = \delta(t_2 - t_1) \tag{۲۰}$$

در نتیجه، بااستفاده از (۱۹)، به‌دست می‌آوریم:

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} - H\left(\mathbf{r}_2, \frac{\hbar}{i} \nabla_2 \right) \right] K(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1) = i\hbar \delta(t_2 - t_1) \sum_n \varphi_n^*(\mathbf{r}_1) \varphi_n(\mathbf{r}_2) e^{-iE_n(t_2-t_1)/\hbar} \tag{۲۱}$$

به‌علت حضور $\delta(t_2 - t_1)$ می‌توانیم درجمع‌بندی طرف دوم (۲۱) که روی n انجام می‌شود بجای $t_2 - t_1$ صفر قراردهیم. دراین‌صورت اکسپوناسیل برابر ۱ می‌شود. بنابراین آنچه می‌ماند عبارت است از $\sum_n \varphi_n(\mathbf{r}_2)\varphi_n^*(\mathbf{r}_1)$ [که، بنابر (۱۳)، (۱۶) و (۱۷)، برابـر است با $\delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)$ کافی است عنصر ماتریسی (۱۴) بین $|\mathbf{r}_2\rangle$ و $\langle\mathbf{r}_1|$ را حساب کنیم]. بالاخره، K در معادلهٔ زیر صدق می‌کند:

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t_2} - H\left(\mathbf{r}_2, \frac{\hbar}{i}\nabla_2\right)\right]K(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1) = i\hbar\,\delta(t_2 - t_1)\delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \qquad (۲۲)$$

جوابهای معادلهٔ (۲۲)، که طرف راست آن با "تابع دلتا"ی چهاربعدی متناسب است، "توابع گرین" نامیده می‌شوند. می‌توان نشان‌داد که برای تعیین‌کامل $K(2, 1)$، کافی‌است به (۲۲) شرط مرزی زیر را تحمیل کنیم:

$$K(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1) = 0 \qquad t_2 < t_1 \qquad (۲۳)$$

معادلات (۲۲) و (۲۳) مفاهیم جالبی دارند، بخصوص دررابطه با تئوری اغتشاش که در فصل یازدهم مورد مطالعه قرار خواهیم داد.

۳ـ فرمولبندی لاگرانژی مکانیک کوانتومی

a ـ مفهوم جادهٔ فضا ـ زمان

دونقطهٔ $(\mathbf{r}_1, t_1)$ و $(\mathbf{r}_2, t_2)$ را در فضا ـ زمان در نظر بگیرید (رک شکل ۳، t روی محورطولها برده شده ومحور عرضها معرف مجموعهٔ سه‌محور فضایی است). N زمان واسط t_{α_i} $(i = 1, 2, ..., N)$ که در فواصل مساوی از یکدیگر بین t_1 و t_2 قرار داشته باشند:

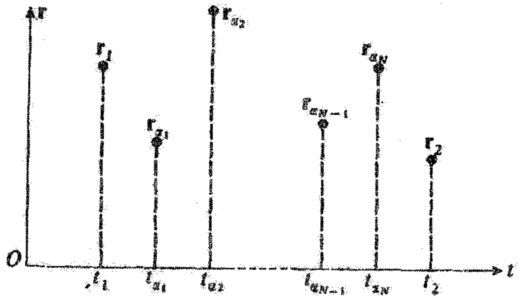
$$t_1 < t_{\alpha_1} < t_{\alpha_2} < ... < t_{\alpha_{N-1}} < t_{\alpha_N} < t_2 \qquad (۲۴)$$

و برای هرکدام از آنها یک مکان $\mathbf{r}_{\alpha_i}$ در فضا انتخاب کنید. بدین‌ترتیب می‌توان وقتی N به‌سمت بینهایت میل کند یک تابع $\mathbf{r}(t)$ (که فرض خواهیم کرد پیوسته است) ساخت به‌طوری که:

$$\mathbf{r}(t_1) = \mathbf{r}_1 \qquad (۲۵-a)$$

$$\mathbf{r}(t_2) = \mathbf{r}_2 \qquad (۲۵-b)$$

گوئیم که $\mathbf{r}(t)$ یک‌جاده فضا ــ زمان بین $(\mathbf{r}_1, t_1)$ و $(\mathbf{r}_2, t_2)$ تعریف می‌کند:
یک‌چنین‌جاده‌ای ممکن است مسیر یک نقطهٔ فیزیکی‌که در زمان t_1 ازنقطه $\mathbf{r}_1$ حرکت‌می‌کند و در زمان t_2 به‌نقطهٔ $\mathbf{r}_2$ می‌رسد باشد.



شکل ۳

نمودار وابسته به‌یک "جاده فضا ــ زمان": N زمان واسط t_{α_i} $(i = 1, 2, ..., N)$ که به‌فواصل مساوی بین t_1 و t_2 قرار دارند انتخاب می‌کنیم و به‌هرکدام یک مقدار $\mathbf{r}$ نسبت می‌دهیم.

b ــ تجزیه $K(2, 1)$ به‌یک مجموع از دامنه‌های جزئی

ابتدا به‌موردی برگردیم که در آن تعداد N زمان واسط محدود است. بااستفاده از فرمول (۱۰) از مکمل $\mathrm{F_{III}}$ می‌توان نوشت:

$$U(t_2, t_1) = U(t_2, t_{\alpha_N})\, U(t_{\alpha_N}, t_{\alpha_{N-1}}) \dots U(t_{\alpha_2}, t_{\alpha_1})\, U(t_{\alpha_1}, t_1) \qquad (۲۶)$$

عناصر ماتریسی دوطرف (۲۶) را بین $|\mathbf{r}_2\rangle$ و $\langle \mathbf{r}_1|$ می‌گیریم و برای هرزمان واسط t_{α_i} رابطهٔ بستاری در نمایش $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ را وارد کنیم. بدین ترتیب برطبق (۶) و (۲۴)، به‌دست می‌آید:

$$K(2, 1) = \int d^3r_{\alpha_N} \int d^3r_{\alpha_{N-1}} \dots \int d^3r_{\alpha_2} \int d^3r_{\alpha_1}\, K(2, \alpha_N)\, K(\alpha_N, \alpha_{N-1}) \dots \times$$
$$\times\; K(\alpha_2, \alpha_1)\, K(\alpha_1, 1) \qquad (۲۷)$$

حال، حاصلضرب:

$$K(2, \alpha_N)\, K(\alpha_N, \alpha_{N-1}) \dots K(\alpha_2, \alpha_1)\, K(\alpha_1, 1) \qquad (۲۸)$$

را درنظربگیریم. باتعمیم استدلال بخش b ــ ۲ می‌توان این‌جمله را به‌عنوان دامنه احتمال

اینکه ذره‌ای‌که نقطهٔ (r_1, t_1) 1 را برای رسیدن به‌نقطه (r_2, t_2) 2 ترک می‌کند متوالیا " از تمام نقاط $\alpha_i(r_{\alpha_i}, t_{\alpha_i})$ ی شکل ۳ بگذرد، تعبیر نمود. توجه‌کنید که درفرمول (۲۷)، در هرزمان t_{α_i} روی تمام مکانهای ممکن r_{α_i} جمع‌بندی صورت گرفته است.

حال N را به‌سمت بی‌نهایت میل دهیم*. دراین صورت مجموعهٔ نقاط α_i یک جادهٔ فضا ــ زمان بین ۱ و ۲ تعریف می‌کند، و حاصلضرب (۲۸) وابسته به‌آن به‌دامنهٔ احتمال برای اینکه ذره این جاده را طی کند تبدیل می‌شود. البته تعداد انتگرالها در فرمول (۲۷) بی‌نهایت می‌شوند. بااین‌وجود، درمی‌یابیم جمع‌بندی روی‌مجموعه‌مکانهای ممکن در هرلحظه به‌جمع‌بندی روی‌مجموعه‌جاده‌های ممکن تبدیل می‌شود. بدین ترتیب $K(2, 1)$ به‌صورت حاصل جمعی (در واقع انتگرالی) که متناظر با برهم‌نهش همدوس دامنه‌های وابسته به‌تمام جاده‌های فضا ــ زمان ممکن که از ۱ شروع و به ۲ ختم می‌شوند، در می‌آید.

c ــ اصول موضوع فاینمن

مفاهیم انتشاردهنده وجادهٔ فضا ــ زمان فرمولبندی جدیدی را برای اصل‌موضوع مربوط به‌تحول زمانی دستگاههای فیزیکی ممکن می‌سازد. ما در اینجا ایده‌های کلی یک‌چنین فرمولبندی را برای مورد یک ذرهٔ بدون اسپین ارائه می‌دهیم.

$K(2, 1)$ را مستقیما" به‌عنوان دامنهٔ احتمال برای اینکه ذره در زمان t_1 از r_1 شروع کند و در زمان t_2 به r_2 برسد، تعریف می‌کنیم. سپس به‌عنوان اصل موضوع می‌پذیریم که:

(۱) $K(2, 1)$ مجموع بی‌نهایت دامنه‌جزئی است که هریک ازآنها مربوط به‌یک جادهٔ فضا ــ زمان که (r_1, t_1) را به (r_2, t_2) مرتبط می‌سازد، می‌باشد.

(۲) دامنهٔ جزئی $K_\Gamma(2, 1)$ وابسته به‌یکی‌ازاین‌جاده‌ها (Γ) بطریق زیر تعیین می‌شود: فرض‌کنیم S_Γ کنش کلاسیکی محاسبه شده در طول Γ باشد، یعنی:

$$S_\Gamma = \int_{(\Gamma)} \mathscr{L}(r, p, t)\, dt \tag{۲۹}$$

که درآن $\mathscr{L}(r, p, t)$ لاگرانژی ذره است (رک پیوست III). دراین صورت $K_\Gamma(2, 1)$ برابر

* درین قسمت سعی نمی‌شود که از نظر ریاضی دقیق باشیم.

است با :

$$K_\Gamma(2, 1) = N\, e^{\frac{i}{\hbar} S_\Gamma} \qquad (۳۰)$$

که درآن N ثابت بهنجارش است (که می‌تواند صریحا" تعیین شود) .

می‌توان نشان‌داد که معادلهٔ شرودینگر به‌عنوان نتیجه‌ای از این دو اصل موضوع تجلی می‌کند . هم‌چنین ، می‌توان رابطهٔ جابجائی‌پذیری بندادی بین موٴلفه‌های‌مشاهده پذیرهای $\mathbf{R}$ و $\mathbf{P}$ را از آنها نتیجه گرفت . بنابراین ، دو اصل موضوع بالا یک فرمولبندی برای مکانیک کوانتومی ممکن می‌سازند که با فرمولبندی فصل سوم متفاوت ولی معادل با آن است .

d ــ حدکلاسیکی و اصل هامیلتون

فرمولبندی‌ای‌که مطرح ساختیم مخصوصا" برای بحث درارتباط بین مکانیک‌کوانتومی و مکانیک کلاسیک جالب است .

وضعیتی را در نظر بگیریم که درآن کنشهای S_Γ خیلی بزرگتر از $\hbar$ باشد . دراین مورد ، تغییر ΔS_Γ ی کنش بین دوجاده مختلف ، حتی اگر مقدار نسبی آن کوچک باشد ($\frac{\Delta S_\Gamma}{S_\Gamma} \ll 1$) ، معمولا" خیلی بزرگتر از $\hbar$ است . در نتیجه ، فاز $K_\Gamma(2, 1)$ به‌سرعت تغییر می‌کند ، و مشارکت اغلب جاده‌های Γ در دامنهٔ کلی $K(2, 1)$ به‌وسیلهٔ تداخل یکدیگر را حذف می‌کنند . لیکن ، فرض کنیم جاده‌ای مانند Γ_0 وجود داشته باشد که برای آن کنش مانا باشد (یعنی ، وقتی از Γ_0 به‌یک مسیر بی‌نهایت نزدیک به‌آن برویم ، تامرتبه اول ، تغییری حاصل نشود) . دراین‌صورت دامنهٔ $K_{\Gamma_0}(2, 1)$ با دامنه‌های جاده‌های مجاور Γ_0 به‌طورسازنده تداخل می‌کند ، زیرا ، این‌بار ، فازهایشان عملا" برابر می‌مانند . درنتیجه وقتی کنشهای S_Γ خیلی بزرگتر از $\hbar$ باشند ، در یک وضعیت " شبه‌کلاسیکی " قرارداریم : برای به‌دست آوردن $K(2, 1)$ می‌توان از تمام جاده‌ها بجز Γ_0 جاده‌های بینهایت نزدیک به‌آن صرفنظر کرد ، بنابراین می‌توان‌گفت که ذره ، بین نقاط ۱ و۲ جاده Γ_0 را طی می‌کند . اما این همان مسیر کلاسیکی است ، زیرا اصل هامیلتون این مسیر را به‌عنوان جاده‌ای که در امتدادآن‌کنش می‌نیمم است تعیین می‌کند . بنابراین ، اصول موضوع فاینمن ، درحدکلاسیکی اصل کمترین‌کنش هامیلتون را دربر می‌گیرد . بعلاوه ، این اصول موضوع به‌ما امکان می‌دهند تا یک توضیح مجازی برای آن ارائه دهیم : موج وابسته به‌ذره است که ، از بین مسیرهای

مختلف ممکن، مسیری را برمی‌گزیند که برای آن کنش کمترین مقدار را داشته باشد.

فرمولبندی لاگرانژی مکانیک کوانتومی مزیت‌های متعدد دیگری نیز دارد، که ما در اینجا وارد جزئیات آنها نخواهیم شد. به‌عنوان مثال، اشاره می‌کنیم که این فرمولبندی به‌آسانی به‌مورد نسبیتی تعمیم داده می‌شود زیرا استدلال مستقیماً" در فضا ـ زمان صورت گرفته است. علاوه براین، می‌تواند به‌هر دستگاه کلاسیکی (نه‌لزوماً" مکانیکی) که توسط یک اصل تغییری هدایت می‌شود (مانند، یک میدان) اعمال شود.

اما، از نظر ریاضی اشکالاتی دارد (جمع‌بندی روی تعداد بینهایت جاده، حد $N \longrightarrow \infty$ و غیره).

مراجع و پیشنهادات برای مطالعه بیشتر

Feynman's original article (2.38); Feynman and Hibbs (2.25); Bjorken and Drell (2.6), chaps. 6 and 7.

مکمل K_{III}

حالتهای ناپایدار . طول عمر

۱ ــ مقدمه
۲ ــ تعریف طول عمر
۳ ــ توصیف پدیده‌شناختی ناپایداری یک حالت

۱ ــ مقدمه

یک دستگاه پایستار (دستگاهی که هامیلتونی H آن مستقل از زمان است) درنظر بگیریم . فرض کنیم در زمان $t = 0$ حالت دستگاه یکی از ویژه‌حالتهای هامیلتونی ، یعنی $|\varphi_n\rangle$ ، باانرژی E_n باشد :

$$|\psi(0)\rangle = |\varphi_n\rangle \qquad (۱)$$

با :

$$H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle \qquad (۲)$$

در این مورد ، دستگاه همواره در همان حالت (یک‌حالت مانا ، بخش D‒۲‒b از فصل سوم) باقی خواهد ماند .

در فصل پنجم اتم هیدرژن را با حل معادله ویژه مقداری هامیلتونی آن ، که یک عملگر مستقل از زمان است ، مطالعه خواهیم کرد . ترازهائی (یعنی مقادیر ممکن انرژی) که بدین‌ترتیب برای اتم هیدرژن به‌دست خواهیم‌آورد باانرژیهایی‌که بطورتجربی‌اندازه‌گیری شده است بطور بسیار خوبی‌توافق دارد . لیکن می‌دانیم که ، اغلب این ترازها در واقع ناپایدارند : اگر در لحظهٔ $t = 0$ ، اتم در یک حالت برانگیخته ، یعنی ، در یک ویژه حالت $|\varphi_n\rangle$ متناظر باانرژی E_n که از انرژی حالت پایه ، که پائین حالت انرژی است) بزرگتر است باشد ، عموما" باگسیل یک یا چندفوتون به‌این حالت پایه "برمی‌گردد" . لذا حالت $|\varphi_n\rangle$ واقعا" ، دراین مورد ، یک حالت پایدار نیست .

این مسأله از این واقعیت ناشی می‌شود که در محاسبات از نوع بکاررفته در فصل هفتم ، دستگاه (اتم هیدرژن) طوری در نظر گرفته می‌شد که گویی کاملا" منزوی است ، درحالی‌که دربرهم‌کنش دائم با میدان الکترومغناطیسی است . با وجودی که تحول دستگاه

کلی " اتم + میدان الکترومغناطیسی " می‌تواند به‌طور کامل توسط یک هامیلتونی توصیف شود ، نمی‌توان به‌طور دقیق یک هامیلتونی برای اتم هیدرژن به‌تنهایی تعریف کرد [رک گوشزد (v) از بخش b ـ ۵ مکمل E_{III}] . اما ، چون جفتیدگی بین اتم و میدان ضعیف است (می‌توان نشان داد که "نیروی " آن توسط ثابت ساختار ریز $\alpha \simeq \frac{1}{137}$ ، که ما آن را در فصل هفتم وارد خواهیم کرد ، مشخص می‌شود) ، این تقریب که در آن کاملا" وجود میدان الکترومغناطیسی را نادیده می‌گیریم بسیار خوب است ، البته بجز وقتی‌که دقیقا" ناپایداری حالتها مورد نظر ما باشد .

گوشزدها :

(i) اگر یک دستگاه کاملا" منزوی و پایستار ، در لحظهٔ اولیه در حالتی که از ترکیب خطی چند حالت مانا تشکیل شده است ، باشد بازمان تحول خواهدیافت وهمواره در همان حالت باقی نخواهد ماند . ولی هامیلتونی آن یک ثابت حرکت است و در نتیجه (رک فصل سوم ، بخش c ــ ۲ــ D) احتمال یافتن این یا آن مقدار انرژی ، هم‌چنین متوسط انرژی ، مستقل از زمان است . برعکس، در مورد یک‌تراز ناپایدار ، عبور برگشت ناپذیر از یک حالت به‌حالت دیگر ، با اتلاف مقداری از انرژی دستگاه ، همراه است . این مقدار انرژی توسط فوتونهای گسیل‌شده از اتم خارج می‌شوند*

(ii) ناپایداری ترازهای برانگیخته یک اتم ازگسیل خود به‌خود فوتونها ناشی می‌شود . حالت پایه پایدار است زیرا تراز انرژی پائین‌تری وجود ندارد . مع ذالک ، یادآور شویم که اتمها می‌توانند انرژی نوری نیز جذب کنند و به‌تراز بالاتر انرژی بروند .

می‌خواهیم در اینجا نشان دهیم که چگونه می‌توان ناپایداری یک تراز را به‌طور پدیده‌شناختی به‌حساب آورد . چون دستگاه را بازهم طوری در نظر خواهیم گرفت که گویی منزوی است ، این توصیف دقیق نخواهد بود . سعی خواهیم کرد این ناپایداری را به‌طریق ساده‌ای وارد توصیف کوانتومی دستگاه نمائیم .

مکمل D_{XIII} ، با توجیه روش پدیده شناختی بکار رفته در اینجا ، بررسی‌دقیق‌تری ازین مسأله ارائه می‌دهد .

---

* که ، علاوه برآن ، ممکن است تکانهٔ خطی و زاویه‌ای نیز خارج کنند .

۲ ــ تعریف طول عمر

تجربه نشان می‌دهدکه ناپایداری یک ترازرا می‌توان اغلب توسط تنها یک فراسنج τ که دارای دیمانسیون زمان است و طول عمر تراز نامیده می‌شود، مشخص کرد. بطور دقیق‌تر، اگر دستگاه در زمان $t = 0$ در حالت ناپایدار $|\varphi_n\rangle$ برده شده باشد، مشاهده می‌کنیم که احتمال $\mathscr{P}(t)$ برای اینکه در یک زمان بعدی t بازهم در این حالت برانگیخته باشد برابر است با:

$$\mathscr{P}(t) = e^{-t/\tau} \tag{۳}$$

این نتیجه را می‌توان به‌طریق زیر نیز بیان کرد: $\mathscr{N}$ دستگاه مستقل یکسان ($\mathscr{N}$ عددبزرگی‌است) را که همگی‌درزمان $t = 0$ درحالت $|\varphi_n\rangle$ برده شده باشند درنظر بگیرید. در زمان t، تعداد $N(t) = \mathscr{N}\, e^{-t/\tau}$ از آنها دراین حالت باقی مانده‌اند. در فاصله زمانی بین t و $t + dt$ تعداد $dn(t)$ از دستگاهها از حالت ناپایدار خارج شده‌اند:

$$dn(t) = N(t) - N(t + dt) = -\frac{dN(t)}{dt}\,dt = N(t)\frac{dt}{\tau} \tag{۴}$$

بنابراین، برای هریک از $N(t)$ دستگاه که هنوز در زمان t در حالت $|\varphi_n\rangle$ قرار دارند، می‌توان یک احتمال:

$$d\varpi(t) = \frac{dn(t)}{N(t)} = \frac{dt}{\tau} \tag{۵}$$

برای اینکه در فاصله زمانی dt بعد از لحظهٔ t این حالت را ترک کنند، تعریف کرد. ملاحظه می‌کنیم‌که $d\varpi(t)$ مستقل از t است: می‌گوئیم‌که احتمال برواحد زمان دستگاه برای ترک حالت ناپایدار $\frac{1}{\tau}$ است.

گوشزدها:

(i) حال مقدار متوسط‌زمانی را که دستگاه درحالت ناپایدار می‌ماند محاسبه می‌کنیم. این مقدار برابر است با:

$$\int_0^\infty t\, e^{-t/\tau}\,\frac{dt}{\tau} = \tau \tag{۶}$$

بنابراین τ عبارت است اززمان متوسطی که دستگاه درحالت $\langle \varphi_n |$ به‌سر می‌برد ، به‌همین دلیل است که آنرا طول عمر این حالت می‌نامیم .

برای یک حالت پایدار ، $\mathscr{P}(t)$ همواره برابر ۱ است وطول‌عمر τ بی‌نهایت‌است .

(*ii*) یک‌خاصیت قابل توجه طول عمر τ اینستکه ، به‌روش به‌کاررفته برای بردن دستگاه به‌حالت ناپایدار ، یعنی ، به "تاریخچه" قبلی‌اش بستگی‌ندارد : طول‌عمرمشخصهٔ خود حالت ناپایدار است .

(*iii*) برطبق رابطه عدم قطعیت زمان ــ انرژی (بخش e ــ ۲ ــ D از فصل سوم) ، به‌زمان τ ی مشخصه تحول یک حالت ناپایدار یک عدم قطعیت ΔE در انرژی وابسته است که توسط رابطهٔ زیر داده می‌شود :

$$\Delta E \simeq \frac{\hbar}{\tau} \tag{۷}$$

درحقیقت به‌این نتیجه می‌رسیم که انرژی یک حالت ناپایدار نمی‌تواند باهردقت دلخواهی تعیین شود بلکه حداکثر با عدم قطعیتی از مرتبهٔ ΔE تعیین می‌شود . ΔE را **پهنای طبیعی** تراز مورد نظر می‌نامیم . در مورد اتم هیدرژن ، پهنای ترازهای مختلف در مقابل جدائی‌شان قابل اغماض است . این نکته تشریح می‌کند که چرا می‌توانیم آنهارا ، تا یک تقریب مرتبه اول ، مانند اینکه پایدارند ، درنظر بگیریم .

۳ ــ توصیف پدیده‌شناختی ناپایداری یک تراز

ابتدا یک دستگاه پایستار در نظر بگیریم که در زمان اولیه ، در ویژه‌حالت $\langle \varphi_n |$ متعلق به‌هامیلتونی H برده شده باشد . بنابر قاعده (۵۴ــ D) از فصل‌سوم ، بردارحالت در زمان t خواهد شد :

$$| \psi(t) \rangle = e^{-iE_n t/\hbar} | \varphi_n \rangle \tag{۸}$$

احتمال $\mathscr{P}_n(t)$ برای یافتن دستگاه ، در یک اندازه‌گیری در زمان t ، در ویژه حالت $\langle \varphi_n |$ برابر است با :

$$\mathscr{P}_n(t) = | e^{-iE_n t/\hbar} |^2 \tag{۹}$$

چون انرژی E_n حقیقی است (زیرا H یک مشاهده‌پذیر است) ، این احتمال ثابت وبرابر

۱ است : باردیگر می‌بینم که $\langle \varphi_n|$ یک حالت مانا است .

حال به‌بینیم اگر ، در (۹) ، بجای E_n عدد مختلط زیر را قرار دهیم :

$$E_n' = E_n - i\hbar\frac{\gamma_n}{2} \tag{۱۰}$$

چه اتفاق خواهد افتاد . در این صورت احتمال $\mathscr{P}_n(t)$ برابر است با :

$$\mathscr{P}_n'(t) = \left|e^{-i(E_n - i\hbar\frac{\gamma_n}{2})t/\hbar}\right|^2 = e^{-\gamma_n t} \tag{۱۱}$$

در این مورد ، احتمال یافتن دستگاه در حالت $\langle \varphi_n|$ به‌طور نمائی ، مانند فرمول (۳) ، با زمان کاهش می‌یابد . بنابراین ، برای اینکه ناپایداری یک حالت $\langle \varphi_n|$ را ، که طول‌عمرش τ_n است ، به‌طور پدیده شناختی منظور کنیم ، کافی است ، مانند (۱۰) ، با قراردادن :

$$\gamma_n = \frac{1}{\tau_n} \tag{۱۲}$$

یک قسمت موهومی به‌انرژی آن اضافه کنیم .

گوشزد :

وقتی E_n' را جایگزین E_n کنیم ، هنجار بردارحالت (۸) برابر $e^{-\gamma_n t/2}$ می‌شود و با زمان تغییر می‌کند . این‌نتیجه شگفت‌انگیز نیست . در بخش c ــ ۱ ــ D ازفصل سوم دیدیم که بقاء هنجار بردار حالت از طبیعت هرمیتی بودن عملگر هامیلتونی ناشی‌می‌شود ، اما ، عملگری‌که ویژه مقدارهایش مختلط است ، مانند E_n' ، نمی‌تواند هرمیتی باشد . البته همانطوری که در بخش ۱ اشاره کردیم این امر ازاین واقعیت ناشی می‌شود که دستگاه مورد نظر قسمتی از یک دستگاه بزرگ است (با میدان الکترومغناطیسی برهم کنش می‌کند) و تحول آن نمی‌تواند دقیقاً" توسط یک هامیلتونی توصیف شود . این که بتوانیم با وارد کردن " هامیلتونی "ای با ویژه مقدارهای مختلط فقط تحول آن را بررسی کنیم ، باز هم به‌حد کافی جالب است .

مکمل L_{III}

تمرینات

۱ ــ در یک مساله یک بعدی ، ذره‌ای در نظر بگیرید که تابع موج آن :

$$\psi(x) = N \frac{e^{ip_0 x/\hbar}}{\sqrt{x^2 + a^2}}$$

باشد ، که در آن a و p_0 ثابتهای حقیقی و N یک ضریب بهنجارش است .

a ــ N را طوری تعیین کنید که $\psi(x)$ بهنجارشده باشد .

b ــ اگرمکان ذره اندازه‌گیری شود ،احتمال‌یافتن نتیجه‌ای بین $-\frac{a}{\sqrt{3}}$ و $+\frac{a}{\sqrt{3}}$ چقدر است ؟

c ــ مقدار متوسط تکانهٔ ذره‌ای باتابع موج $\psi(x)$ را محاسبه کنید .

۲ ــ در یک مسأله یک‌بعدی ، ذره‌ای به‌جرم m را که تابع موج آن در زمان t برابر $\psi(x, t)$ باشد در نظر بگیرید .

a ــ در زمان t ، فاصلهٔ d ی این ذره از مبداء اندازه‌گیری می‌شود . احتمال $\mathscr{P}(d_0)$ برای یافتن نتیجه‌ای بزرگتر از یک طول معلوم d_0 را به‌صورت تابعی از $\psi(x, t)$ بنویسید . حدهای $\mathscr{P}(d_0)$ وقتی که $d_0 \longrightarrow 0$ و $d_0 \longrightarrow \infty$ چقدر است .

b ــ به‌جای اندازه‌گیری فاصله d در قسمت a ، سرعت v ی ذره در زمان t اندازه‌گیری می‌شود . احتمال یافتن نتیجه‌ای بزرگتر از مقدار معین v_0 را به‌صورت تابعی‌از $\psi(x, t)$ بیان کنید .

۳ ــ تابع موج یک ذرهٔ آزاد ، دریک مسأله یک بعدی ، درزمان $t = 0$ به‌صورت زیر داده شده است :

$$\psi(x, 0) = N \int_{-\infty}^{+\infty} dk \, e^{-|k|/k_0} e^{ikx}$$

که در آن k_0 و N ثابت‌اند .

a ــ احتمال $\mathscr{P}(p_1, 0)$ برای اینکه یک اندازه‌گیری تکانه‌که درزمان $t = 0$ انجام شده باشد ، نتیجه‌ای بین $-p_1$ و $+p_1$ بدهد ، چقدر است ؟ تابع $\mathscr{P}(p_1, 0)$ را رسم کنید .

b ــ اگر اندازه‌گیری در زمان t انجام شود این احتمال $\mathscr{P}(p_1, t)$ چقدر است ؟

نتیجه را تعبیر کنید.

c ــ شکل بسته موج در زمان $t = 0$ چگونه است؟ برای این زمان، حاصلضرب $\Delta X . \Delta P$ را محاسبه کنید، نتیجه‌گیری‌تان چیست؟ تحول بعدی بسته موج را به‌طورکیفی توصیف کنید.

۴ ــ گستردگی یک بسته موج آزاد

یک ذره آزاد در نظر بگیرید.

a ــ با به‌کاربردن قضیه اهرنفست، نشان دهید که $\langle X \rangle$ یک تابع خطی اززمان است، در حالی که مقدار متوسط $\langle P \rangle$ ثابت می‌ماند.

b ــ معادلات حرکت برای مقادیر متوسط $\langle X^2 \rangle$ و $\langle XP + PX \rangle$ را بنویسید. این معادلات را انتگرال‌گیری کنید.

c ــ باانتخاب یک مبداء زمانی مناسب، نشان دهید انحراف مربعی متوسط ΔX رابطهٔ زیر داده می‌شود:

$$(\Delta X)^2 = \frac{1}{m^2} (\Delta P)_0^2 \, t^2 + (\Delta X)_0^2$$

که درآن $(\Delta X)_0$ و $(\Delta P)_0$ عبارتند از انحرافات مربعی متوسط در زمان اولیه.

پهنای بسته موج چگونه بازمان تغییر می‌کند (رک بخش c ــ۳ از مکمل G_I)؟ یک تغییر فیزیکی ارائه دهید.

۵ ــ ذره تحت تاثیر یک نیروی ثابت

دریک مساله یک بعدی، ذره‌ای باانرژی پتانسیل $V(X) = - fX$ درنظربگیرید، که درآن f یک ثابت مثبت است [$V(X)$، به‌عنوان مثال، از یک میدان گرانشی یا یک میدان الکتریکی یکنواخت ناشی شده است].

a ــ قضیه اهرنفست را برای مقادیر متوسط مکان X و تکانهٔ P ی ذره بنویسید. از این معادلات انتگرال‌گیری کنید، باحرکت کلاسیکی مقایسه کنید.

b ــ نشان دهید که انحراف مربعی متوسط ΔP با زمان تغییر نمی‌کند.

c ــ معادلهٔ شرودینگر را درنمایش $\{ |p\rangle \}$ بنویسید. ازآن رابطه‌ای بین $\frac{\partial}{\partial p} |\langle p | \psi(t) \rangle|^2$ و $\frac{\partial}{\partial t} |\langle p | \psi(t) \rangle|^2$ به‌دست آورید. از معادله‌ای که بدین ترتیب به‌دست آورده‌اید انتگرال بگیرید، یک تعبیر فیزیکی ارائه دهید.

۶ ــ تابع موج سه‌بعدی:

$$\psi(x, y, z) = N\, e^{-\left[\frac{|x|}{2a}+\frac{|y|}{2b}+\frac{|z|}{2c}\right]}$$

را که در آن a ، b و c سه‌طول مثبت‌اند، در نظر بگیرید.

a ــ ثابت N را طوری محاسبه کنید که ψ بهنجارشده باشد.

b ــ احتمال اینکه یک اندازه‌گیری X نتیجه‌ای بین 0 و a بدهد چقدر است؟

c ــ احتمال این‌راکه اندازه‌گیریهای همزمان Y و Z نتایجی بدهند که به‌ترتیب بین $b -$ و $b +$ ، و $c -$ و $c +$ باشد، محاسبه کنید.

d ــ احتمال این را که یک اندازه‌گیری تکانه نتیجه‌ای واقع در عنصر $dp_x dp_y dp_z$ که در نقطه $p_x = p_y = 0$ و $p_z = \hbar/c$ متمرکز است بدهد محاسبه کنید.

۷ ــ فرض کنید $\psi(x, y, z) = \psi(\mathbf{r})$ یک تابع موج بهنجارشدهٔ یک‌ذره باشد. خواسته‌های زیر را برحسب $\psi(\mathbf{r})$ بیان کنید:

a ــ احتمال اینکه اندازه‌گیری طول X ، نتیجه‌ای بین x_1 و x_2 بدهد.

b ــ احتمال‌اینکه اندازه‌گیری مؤلفه P_x تکانه، نتیجه‌ای بین p_1 و p_2 بدهد.

c ــ احتمال اینکه اندازه‌گیریهای همزمان X و P_z نتیجه:

$$x_1 \leqslant x \leqslant x_2$$
$$p_z \geqslant 0$$

را بدهد.

d ــ احتمال اینکه اندازه‌گیریهای همزمان P_x ، P_y ، P_z ، نتیجهٔ:

$$p_1 \leqslant p_x \leqslant p_2$$
$$p_3 \leqslant p_y \leqslant p_4$$
$$p_5 \leqslant p_z \leqslant p_6$$

بدهد. نشان دهید که این احتمال، وقتی که p_3 و $p_5 \longrightarrow -\infty$ و $p_1, p_6 \longrightarrow +\infty$ با نتیجه قسمت b برابر است.

e ــ احتمال اینکه اندازه‌گیری مؤلفهٔ $U = \frac{1}{\sqrt{3}}(X + Y + Z)$ از مکان ذره، نتیجه‌ای بین u_1 و u_2 بدهد.

۸ ــ فرض کنید $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ جریان احتمال وابسته به‌یک تابع موج $\psi(\mathbf{r})$ ، که حالت ذره‌ای به‌جرم را توصیف می‌کند، باشد [فصل سوم، روابط(D ــ ۱۷)و(D ــ ۱۹)].

a ــ نشان دهید:

$$m \int d^3r \, \mathbf{J}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{P} \rangle$$

که در آن $\langle \mathbf{P} \rangle$ مقدار متوسط تکانه است.

b ــ عملگر $\mathbf{L}$ (تکانهٔ زاویه‌ای مداری) را که به‌صورت $\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$ تعریف می‌شود در نظر بگیرید. آیا سه‌مؤلفهٔ $\mathbf{L}$ عملگرهای هرمیتی هستند؟ رابطهٔ زیر را ثابت کنید:

$$m \int d^3r \, [\mathbf{r} \times \mathbf{J}(\mathbf{r})] = \langle \mathbf{L} \rangle$$

۹ ــ می‌خواهیم نشان دهیم که حالت فیزیکی یک ذره (بدون اسپین) بطورکامل، با مشخص‌کردن چگالی احتمال $\rho(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2$ و جریان‌احتمال $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ ، معین می‌شود.

a ــ فرض کنید تابع $\psi(\mathbf{r})$ معلوم باشد و شناسهٔ آن را $\xi(\mathbf{r})$ بگیرید:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sqrt{\rho(\mathbf{r})} \, e^{i\xi(\mathbf{r})}$$

نشان دهید که:

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{m} \rho(\mathbf{r}) \, \nabla \xi(\mathbf{r})$$

نتیجه بگیرید که دو تابع موج که به‌یک‌چگالی $\rho(\mathbf{r})$ وجریان $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ منجر می‌شوندمی‌توانند فقط در عامل فاز کلی باهم فرق داشته باشند.

b ــ توابع دلخواه $\rho(\mathbf{r})$ و $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ مفروض‌اند، نشان دهید که فقط وقتی می‌توان یک‌حالت کوانتومی $\psi(\mathbf{r})$ به‌آنهاوابسته‌کردکه $\nabla \times \mathbf{v}(\mathbf{r}) = 0$ باشد، که‌درآن $\mathbf{v}(\mathbf{r}) = \mathbf{J}(\mathbf{r})/\rho(\mathbf{r})$ سرعت وابسته به‌سیال احتمال است.

c ــ حال فرض کنید ذره وارد میدان مغناطیسی $\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r})$ شود [به‌فصل سوم، تعریف (۲۶ ــ D) از جریان احتمال دراین‌مورد، مراجعه‌کنید]. نشان‌دهید که:

$$\mathbf{J} = \frac{\rho(\mathbf{r})}{m} [\hbar \nabla \xi(\mathbf{r}) - q \mathbf{A}(\mathbf{r})]$$

و:

$$\nabla \times \mathbf{v}(\mathbf{r}) = -\frac{q}{m} \mathbf{B}(\mathbf{r})$$

۱۵ ــ قضیه ویریال

a ــ دریک مساله‌ٔ یک‌بعدی ، ذره‌ای درنظربگیریدکه هامیلتونی‌آن‌عبارت‌باشداز :

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(X)$$

که در آن :

$$V(X) = \lambda X^n$$

جابجاگر $[H, XP]$ را محاسبه کنید . اگر در پتانسیل V یک یا چند حالت مانای $|\varphi\rangle$ وجودداشته باشد ، نشان‌دهیدکه مقادیرمتوسط انرژیهای جنبشی $\langle T \rangle$ و انرژیهای‌پتانسیل $\langle V \rangle$ در این حالتها در رابطهٔ : $2\langle T \rangle = n\langle V \rangle$ صدق می‌کنند..

b ــ در مساله سه‌بعدی ، هامیلتونی به‌صورت زیر نوشته می‌شود :

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{R})$$

جابجاگر $[H, \mathbf{R} . \mathbf{P}]$ رامحاسبه‌کنید . فرض‌کنید $V(\mathbf{R})$ یک تابع همگن‌درجه n ازمتغیرهای X ، Y و Z باشد . لزوما "چه‌رابطه‌ای بین انرژی جنبشی متوسط وانرژی پتانسیل متوسط ذره در یک حالت مانا وجود دارد ؟

این رابطه را به‌ذره‌ای‌که درپتانسیل $V(r) = - e^2/r$ حرکت می‌کند (اتم‌هیدرژن) اعمال کنید .

متذکر می‌شویم که یک تابع همگن درجه n از متغیرهای x ، y و z ، تابعی است‌که بنا به‌تعریف در رابطهٔ :

$$V(\alpha x, \alpha y, \alpha z) = \alpha^n V(x, y, z)$$

و در اتحاد اولر :

$$x\frac{\partial V}{\partial x} + y\frac{\partial V}{\partial y} + z\frac{\partial V}{\partial z} = nV(x, y, z)$$

صدق کند .

c ــ یک‌دستگاه‌متشکل‌از N ذره بامکانهای $\mathbf{R}_i$ وتکانه‌های $\mathbf{P}_i$ $(i = 1, 2, \dots N)$ در نظر بگیرید . وقتی انرژی پتانسیل آنها یک تابع همگن (درجه n) از مؤلفه‌های X_i ، Y_i ، Z_i باشد ، آیا می‌توان نتایج بالا را به‌آن تعمیم داد ؟ به‌عنوان کاربرد ، می‌توان یک ملکول دلخواه را که از هسته‌هایی بابار $Z_i q$ ــ و الکترونهای بابار q تشکیل‌شده‌است مطالعه‌کرد . تمام این‌ذرات دوتا ، دوتا از طریق نیروهای کولنی بایکدیگر برهم‌کنش‌دارند . دریک حالت پایهٔ ملکول ، چه‌رابطه‌ای بین انرژی جنبشی دستگاه ذرات و انرژی برهم‌کنش

متقابل آنها برقرار است؟

۱۱ ــ تابع موج دو ذره‌ای

در یک مسأله یک بعدی، دستگاهی متشکل از دوذرهٔ (۱)و(۲) را درنظر بگیرید که تابع موج $\psi(x_1, x_2)$ به‌آن وابسته است.

a ــ احتمال اینکه، در اندازه‌گیری مکانهای X_1 و X_2 ی دوذره نتیجهٔ زیر به‌دست آید چقدر است:

$$x \leqslant x_1 \leqslant x + \mathrm{d}x$$
$$\alpha \leqslant x_2 \leqslant \beta$$

b ــ احتمال یافتن ذره (۱) بین x و $x + \mathrm{d}x$ [وقتی‌که هیچ مشاهده‌ای روی ذرهٔ (۲) انجام نشود] چقدر است؟

c ــ احتمال یافتن حداقل یکی از ذرات بین α و β چقدر است؟

d ــ احتمال یافتن یک و فقط یک‌ذره بین α و β چقدر است؟

e ــ احتمال یافتن تکانهٔ ذرهٔ (۱) بین p' و p'' و مکان ذرهٔ (۲) بین α و β چقدر است؟

f ــ تکانه‌های P_1 و P_2 ی دوذره اندازه‌گیری می‌شود. احتمال یافتن نتیجه: $p' \leqslant p_1 \leqslant p''$، $p''' \leqslant p_2 \leqslant p''''$ چقدر است؟

g ــ تنها کمیتی که اندازه‌گیری می‌شود تکانهٔ P_1 ذره اول است. ابتدا از نتایج e و سپس از نتایج f، احتمال این را که این تکانه بین p' و p'' باشد محاسبه کنید؟ دونتیجهٔ به‌دست‌آمده را بایکدیگر مقایسه کنید.

h ــ فاصلهٔ جبری $X_1 - X_2$ بین دوذره اندازه‌گیری می‌شود. احتمال یافتن نتیجه‌ای بین $-d$ و $+d$ چقدر است؟ مقدار متوسط این فاصله چقدر است؟

۱۲ــ چاه یک‌بعدی بی‌نهایت

ذره‌ای به‌جرم m را که در پتانسیل:

$$V(x) = 0 \qquad 0 \leqslant x \leqslant a.$$
$$V(x) = +\infty \qquad x < 0 \quad \text{or} \quad x > a$$

قرار دارد در نظر بگیرید. ویژه حالتهای هامیلتونی H دستگاه متناظر با ویژه‌مقدارهای $E_n = \dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ را با $|\varphi_n\rangle$ نمایش می‌دهیم (رک مکمل $\mathrm{H_I}$). حالت ذره در لحظهٔ $t = 0$

عبارت است از :

$$|\psi(0)\rangle = a_1|\varphi_1\rangle + a_2|\varphi_2\rangle + a_3|\varphi_3\rangle + a_4|\varphi_4\rangle$$

a ــ احتمال اینکه، اگر انرژی ذره در حالت $|\psi(0)\rangle$ اندازه‌گیری‌شود، مقداری کوچکتر از $\frac{3\pi^2\hbar^2}{ma^2}$ به‌دست آید چقدر است؟

b ــ مقدار متوسط و انحراف مربعی متوسط انرژی ذره درحالت $|\psi(0)\rangle$ چقدراست؟

c ــ بردار حالت $|\psi(t)\rangle$ در لحظهٔ t را محاسبه کنید. آیا نتایج به‌دست‌آمده در a و b درلحظهٔ $t=0$ درهرزمان دلخواه t معتبر می‌مانند؟

d ــ وقتی انرژی را اندازه‌گیری می‌کنیم، نتیجهٔ $\frac{8\pi^2\hbar^2}{ma^2}$ به‌دست می‌آید. حالت دستگاه بعد از این اندازه‌گیری چیست؟ اگر مجدداً انرژی اندازه‌گیری شود نتیجه چه خواهد بود؟

۱۳ ــ چاه دوبعدی بینهایت (رک مکمل G_{II})

در یک مسأله دوبعدی، ذره‌ای به‌جرم m را در نظر بگیرید که هامیلتونی H آن به‌صورت زیر است:

$$H = H_x + H_y$$

با:

$$H_x = \frac{P_x^2}{2m} + V(X) \qquad H_y = \frac{P_y^2}{2m} + V(Y)$$

مقدار انرژی پتانسیل $V(x)$ [یا $V(y)$] به‌ازاء x (یا y) در فاصلهٔ $[0, a]$ صفر و در جاهای دیگر بینهایت است.

a ــ کدام‌یک از مجموعه‌های عملگرهای زیر، تشکیل یک م.ک.م.ج می‌دهند؟

$$\{H\}, \{H_x\}, \{H_x, H_y\}, \{H, H_x\}$$

b ــ ذره‌ای را در نظر بگیرید که تابع موجش به‌صورت زیر باشد:

$$\psi(x, y) = N\cos\frac{\pi x}{a}\cos\frac{\pi y}{a}\sin\frac{2\pi x}{a}\sin\frac{2\pi y}{a} \qquad \begin{array}{l} 0 \leqslant x \leqslant a \\ 0 \leqslant y \leqslant a \end{array}$$

در جاهای دیگر (N یک‌مقدارثابت است).

α ــ مقدار متوسط $\langle H \rangle$ (انرژی ذره) چقدر است؟ اگر انرژی H اندازه‌گیری‌شود چه نتایجی، و با چه احتمالهایی، می‌تواند به‌دست آید؟

β ـ مشاهده‌پذیر H_x اندازه‌گیری می‌شود، چه‌نتایجی، و باچه‌احتمالاتی می‌توان به‌دست آورد؟ اگر این اندازه‌گیری نتیجهٔ $\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ را بدهد، نتایج اندازه‌گیری بعدی H_y، و احتمالهای آنها چقدر خواهد بود؟

γ ـ بجای اندازه‌گیریهای قبلی، یک اندازه‌گیری همزمان از H_x و P_y انجام می‌دهیم. احتمال یافتن:

$$E_x = \frac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

و:

$$p_0 \leqslant p_y \leqslant p_0 + \mathrm{d}p$$

چقدر است؟

۱۴ ـ یک دستگاه فیزیکی درنظر بگیرید که فضای حالتهای آن، که سه‌بعدی است، توسط پایهٔ راست هنجاری متشکل از سه کت $|u_1\rangle$، $|u_2\rangle$، $|u_3\rangle$ بوجود آمده باشد. در این پایه عملگر هامیلتونی H دستگاه و دومشاهده‌پذیر A و B به‌صورت زیر نوشته می‌شوند:

$$H = \hbar\omega_0\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 2 & 0\\ 0 & 0 & 2\end{pmatrix}\ ; \quad A = a\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}\ ; \quad B = b\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

که درآن ω_0، a و b ثابتهای حقیقی مثبت‌اند.

دستگاه فیزیکی در زمان $t = 0$ در حالت زیر قرار دارد:

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u_1\rangle + \frac{1}{2}|u_2\rangle + \frac{1}{2}|u_3\rangle$$

a ـ در زمان $t = 0$، انرژی دستگاه اندازه‌گیری می‌شود. چه مقادیری، و با چه احتمالهائی، می‌توانند به‌دست آیند؟ برای دستگاه وقتی درحالت $|\psi(0)\rangle$ قراردارد، مقدار متوسط $\langle H\rangle$ و انحراف مربعی متوسط ΔH را محاسبه کنید.

b ـ بجای اندازه‌گیری H در زمان $t = 0$، A را اندازه‌گیری می‌کنیم، چه نتایجی، و با چه احتمالهائی، می‌توانند به‌دست آیند؟ بردار حالت بلافاصله پس از اندازه‌گیری چیست؟

c ـ بردار حالت $|\psi(t)\rangle$ ی دستگاه در زمان t را محاسبه کنید.

d ـ مقادیر متوسط A و B در زمان t ($\langle A\rangle(t)$ و $\langle B\rangle(t)$) را محاسبه کنید. چه گوشزدی می‌توانید بکنید؟

e ــ اگرمشاهده‌پذیر A در زمان t اندازه‌گیری شود، چه نتایجی به‌دست خواهد آمد؟ به‌همین سئوال برای مشاهده‌پذیر B پاسخ دهید. نتایج حاصل را تعبیر کنید.

۱۵ ــ دیدگاه برهم‌کنش

(توصیه می‌شود قبل از پرداختن به‌این تمرین، مکمل F_{III} واحتمالا" مکمل G_{III} را بخوانید).

یک دستگاه فیزیکی دلخواه در نظر بگیرید. هامیلتونی آن را با $H_0(t)$ و عملگر تحول مربوط به‌آن را با $U_0(t, t')$ نشان دهید:

$$\begin{cases} i\hbar \dfrac{\partial}{\partial t} U_0(t, t_0) = H_0(t)\, U_0(t, t_0) \\ U_0(t_0, t_0) = \mathbb{1} \end{cases}$$

حال فرض کنید دستگاه طوری مغشوش شود که هامیلتونی آن بصورت زیر درآید:

$$H(t) = H_0(t) + W(t)$$

بردار حالت دستگاه در" دیدگاه برهم‌کنش"، $|\psi_I(t)\rangle$، از بردار حالت $|\psi_S(t)\rangle$ در دیدگاه شرودینگر توسط رابطهٔ زیر تعیین می‌شود:

$$|\psi_I(t)\rangle = U_0^\dagger(t, t_0)\,|\psi_S(t)\rangle$$

a ــ نشان دهید که تحول $|\psi_I(t)\rangle$ به‌صورت زیر است:

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi_I(t)\rangle = W_I(t)\,|\psi_I(t)\rangle$$

که درآن $W_I(t)$ تبدیل یافتهٔ عملگر $W(t)$ تحت تبدیل یکانی وابسته به $U_0^\dagger(t, t_0)$ است:

$$W_I(t) = U_0^\dagger(t, t_0)\, W(t)\, U_0(t, t_0)$$

بطور کیفی تشریح کنید که چرا، وقتی اغتشاش $W(t)$ خیلی‌کوچکتر از $H_0(t)$ باشد، تحول بردار $|\psi_I(t)\rangle$ خیلی کندتر از تحول $|\psi_S(t)\rangle$ است.

b ــ نشان دهید که معادله دیفرانسیلی قبلی بامعادله انتگرالی:

$$|\psi_I(t)\rangle = |\psi_I(t_0)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t'\, W_I(t')\,|\psi_I(t')\rangle$$

که درآن $|\psi_I(t_0)\rangle = |\psi_S(t_0)\rangle$، هم ارز است.

c ــ با حل این معادله انتگرالی به‌طریق ۵ زنجیره‌ای، نشان دهید که‌کت $|\psi_I(t)\rangle$ می‌تواند به‌صورت زیر برحسب توانهای W بسط داده شود:

$$|\psi_I(t)\rangle = \left\{ \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t' W_I(t') + \frac{1}{(i\hbar)^2}\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t' W_I(t') \int_{t_0}^{t'} \mathrm{d}t'' W_I(t'') + \dots \right\} |\psi_I(t_0)\rangle$$

۱۶ ــ همبستگی بین دو ذره

(توصیه می‌شود برای پاسخ‌دادن به‌سئوال e ی این تمرین مکمل E_{III} رابخوانید):

یک دستگـــاه فیزیکی متشکـل از دوذرهٔ (۱) و (۲) به‌جرمهای مساوی m و بدون برهم‌کنش که هردو در چاه پتانسیل بینهایت به‌پهنای a قرار دارند در نظـر بگیرید (رک مکمل H_I ، بخش c ــ ۲) . فرض کنید $H(1)$ و $H(2)$ هامیلتونیها و $|\varphi_n(1)\rangle$ و $|\varphi_q(2)\rangle$ ویژه حالتهای متناظر باذرات اول ودوم، با انرژیهای $\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ و $\frac{q^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ باشند. پایه انتخاب شده در فضای حالتهای دستگاه کلی، از حالتهای $|\varphi_n\varphi_q\rangle$ که توسط رابطهٔ زیـر تعریف شده‌اند، تشکیل یافته است:

$$|\varphi_n\varphi_q\rangle = |\varphi_n(1)\rangle \otimes |\varphi_q(2)\rangle$$

a ــ ویژه حالتها و و ویژه مقدارهای عملگر $H = H(1) + H(2)$ ، هامیلتونـی کل دستگاه، کدامند؟ درجه تبهگنی دوپائین‌ترین تراز انرژی را به‌دست‌آورید.

b ــ فرض کنید دستگاه در زمان $t = 0$ در حالت زیر باشد:

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}|\varphi_1\varphi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|\varphi_1\varphi_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|\varphi_2\varphi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|\varphi_2\varphi_2\rangle$$

α ــ حالت دستگاه در زمان t چیست؟

β ــ انرژی کل H اندازه‌گیری می‌شود. چه‌نتایجی و با چه احتمالهایی می‌توانند به‌دست آیند؟

γ ــ به‌همین سئوال، وقتی بجای H ، $H(1)$ اندازه‌گیری شود، پاسخ دهید.

c ــ α ــ نشان دهید که $|\psi(0)\rangle$ یک حالت حاصلضرب تانسوری است. وقتـــی دستگاه در این حالت قرار دارد، مقادیر متوسط $\langle H(1)\rangle$ ، $\langle H(2)\rangle$ و $\langle H(1)H(2)\rangle$ را محاسبه کنید. دومقدار $\langle H(1)\rangle\langle H(2)\rangle$ و $\langle H(1)H(2)\rangle$ را با یکدیگرمقایسـه کنید. این نتیجه را چگونه تشریح می‌کنید؟

β ــ نشان دهید که وقتی حالت دستگاه حالت $|\psi(t)\rangle$ به‌دست آمده در b باشد،

نتایج قبلی معتبر می‌مانند .

d ــ حال ، فرض کنید که حالت $|\psi(0)\rangle$ به‌صورت زیر باشد :

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}|\varphi_1\varphi_1\rangle + \sqrt{\frac{3}{5}}|\varphi_1\varphi_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{5}}|\varphi_2\varphi_1\rangle$$

نشان دهید که $|\psi(0)\rangle$ نمی‌تواند به‌صورت یک حاصلضرب تانسوری نوشته شود . برای این مورد ، به‌تمام سئوالات مطرح شده در c پاسخ دهید .

e ــ α ــ ماتریس‌معرف عملگرچگالی $\rho(0)$ متناظرباکت $|\psi(0)\rangle$ را که در b داده شده‌است ، درپایهٔ بردارهای $|\varphi_n\varphi_p\rangle$ بنویسید . ماتریس چگالی $\rho(t)$ در زمان t چیست؟ در زمان $t = 0$ ، ردهای جزئی :

$$\rho(1) = \mathrm{Tr}_2\rho \qquad \text{و} \qquad \rho(2) = \mathrm{Tr}_1\rho$$

را محاسبه کنید . آیا عملگرهای چگالی ρ ، $\rho(1)$ و $\rho(2)$ حالتهایی خالص را توصیف می‌کنند . ρ را با $\rho(1)\otimes\rho(2)$ مقایسه کنید ، چه تعبیری ارائه می‌دهید؟

β ــ به‌همان سئوالات مطرح شده در α ، ولی با انتخاب کت قسمت d برای $|\psi(0)\rangle$ ، پاسخ دهید .

موضوع تمرینات E_{III} عملگر چگالی است . بنابراین مفاهیم و نتایج مکمل مدی دانسته فرض می‌شدند .

۱۷ ــ فرض‌کنید ρ عملگرچگالی یک دستگاه دلخواه ، و $|\chi_l\rangle$ و π_l ویژه‌بردارهای وویژه مقدارهای آن باشند . ρ و ρ^2 را برحسب $|\chi_l\rangle$ و π_l بنویسید ، ماتریسهای معرف این‌دو عملگر در پایهٔ $\{|\chi_l\rangle\}$ اولا" در موردی که ρ یک حالت خالص باشد و ثانیا" در مورد آمیزه آماری چندحالت ، چگونه‌اند (ابتدا نشان دهید که ، در مورد خالص ، ρ فقط یک عنصر قطر اصلی مخالف صفر دارد که آن هم برابر ۱ است ، در حالیکه برای یک آمیزه ، آماری ، ρ دارای چند عنصر قطری بین ۰ تا ۱ است . نشان دهید که ρ فقط و فقط وقتی متناظر با یک مورد خالص است که رد ρ^2 برابر ۱ باشد .

۱۸ ــ دستگاهی درنظربگیریدکه عملگرچگالی‌آن $\rho(t)$ است ، وتحت تأثیر یک هامیلتونی $H(t)$ تحول می‌یابد . نشان دهید که رد ρ^2 با زمان تغییر نمی‌کند . نتیجه : آیادستگاه می‌تواند طوری تحول یابد که متوالیا" در یک حالت خالص ویک‌آمیزه آماری حالتها باشد؟

۱۹ ــ فرض کنید $(1) + (2)$ یک دستگاه کلی متشکل از دو زیردستگاه (۱)و(۲) باشد ، A و B معرف عملگرهائی هستند که در فضای حالت $\mathscr{E}(1)\otimes\mathscr{E}(2)$ عمل می‌کنند . نشان

دهید وقتی A (یا B) فقط در فضای $\mathscr{E}(1)$ عمل کند ، یعنی ، وقتی A (یا B) بتواند بصورت :

$$A = A(1) \otimes \mathbb{1}(2) \qquad [\text{or } B = B(1) \otimes \mathbb{1}(2)]$$

نوشته شود ، دو رد جزئی $\mathrm{Tr}_1 \{ AB \}$ و $\mathrm{Tr}_1 \{ BA \}$ بایکدیگر برابرند .
کاربرد : اگر عملگر H ، هامیلتونی دستگاه‌کلی ، مجموع دوعملگر باشد که به‌ترتیب فقط در $\mathscr{E}(1)$ و فقط در $\mathscr{E}(2)$ عمل کنند :

$$H = H(1) + H(2),$$

تغییرات عملگر چگالی کاهش یافته $\rho(1)$ نسبت به‌زمان ، $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho(1)$ ، را محاسبه کنید . نتیجهٔ به‌دست آمده را از نظر فیزیکی تعبیر کنید .

تمرین ۵

مراجع : Flügge (1.24), §§40 and 41; Landau and Lifshitz (1.19), §22.

تمرین ۱۰

مراجع : Levine (12.3), chap. 14; Eyring et al (12.5), §18 b

تمرین ۱۵

مراجع : مراجع مکمل $\mathrm{G_{III}}$ را به‌بینید .

بازگشت به‌مسائل یک‌بعدی

اکنون که با صورتبندی ریاضی و با محتوای فیزیکی مکانیک کوانتومی بیشتر آشنا شده‌ایم ، می‌توانیم نتایج به‌دست آمده در فصل اول را دقیق‌تر و کاملتر کنیم . در سه مکمل بعدی ، به‌طریقی عام ، خواص کوانتومی یک ذره را که تحت تأثیر یک پتانسیل نرده‌ای* با شکل دلخواه قراردارد ، مطالعه خواهیم‌کرد . برای سهولت مطالعه خودرا به‌مسائل یک‌بعدی محدود خواهیم ساخت . ابتدا حالتهای مانای مقید یک ذره را که انرژیهای آن یک‌طیف گسسته تشکیل می‌دهند (مکمل M_{III}) بررسی خواهیم کرد ، و سپس حالتهای نامقید متناظر با یک پیوستار انرژی را مورد مطالعه قرار خواهیم داد (مکمل N_{III}) . علاوه براین ، یک‌مورد خاص را که بخاطرکاربردهایش، مخصوصا" درفیزیک حالت جامد ، بسیار اهمیت‌دارد بررسی خواهیم کرد ، وآن عبارت است از یک پتانسیل تناوبی (مکمل O_{III}) .

مکمل M_{III}

حالتهای مقید یک ذره دریک «چاه پتانسیل» با شکل دلخواه

۱ ــ کوانتش انرژیهای حالت مقید
۲ ــ مقدار می‌نیمم انرژی حالت پایه

در مکمل H_I ، برای یک مورد خاص (چاه" مربعی" محدود یا نامحدود)، حالتهای مقید یک‌ذره در یک چاه پتانسیل را مطالعه کردیم . چند خاصیت ازاین‌حالتهای مقید را به‌دست آوردیم : مانند طیف انرژی گسسته و انرژی حالت پایه که از انرژی می‌نیمم کلاسیکی بزرگتر است . دراین مکمل نشان خواهیم داد که این خواص، در واقع ، عمومی هستند ونتایج فیزیکی متعددی دارند .

وقتی انرژی پتانسیل یک ذره یک می‌نیمم داشته باشد (شکل a ــ۱ را به‌ببینید) ، می‌گوئیم‌که ذره دریک "چاه‌پتانسیل"** قراردارد . قبل‌از مطالعه کیفی حالتهای مانای یک

---

* آثار پتانسیل برداری **A** بعدا" ، بخصوص در مکمل E_{VI} ، بررسی خواهد شد .

** البته ، انرژی پتانسیل فقط با تقریب یک ثابت افزایشی تعیین می‌شود . بنابه قرارداد ، پتانسیل در بینهایت را صفر قرار می‌دهیم .

ذرهٔ کوانتومی در یک چنین چاهی ، حرکت متناظر یک ذره کلاسیکی را یادآوری می‌کنیم . وقتی انرژی E_{cl} آن می‌نیمم مقدار مجاز $E_{cl} = - V_0$ را (که درآن V_0 عمق‌چاه‌است) بگیرد، ذره درنقطهٔ M_0 که طول آن x_0 است بدون حرکت خواهد بود . درمورد $- V_0 < E_{cl} < 0$ ذره ، بادامنه‌ای‌که با E_{cl} افزایش می‌یابد ، در چاه نوسان خواهدکرد . بالاخره وقتی $E_{cl} > 0$ باشد ، ذره در چاه باقی نخواهد ماند ، بلکه به‌سمت بینهایت خواهد رفت . بنابراین "حالتهای مقید" ذره کلاسیکی متناظر است با تمام مقادیر منفی انرژی بین V_0 - و 0 .

برای یک ذره کوانتومی ، وضعیت بسیار متفاوت است . حالتهای انرژی کاملا "معین E ، حالتهای مانائی هستند که توابع موج $\varphi(x)$ آنها جوابهای معادلهٔ ویژه مقداری هامیلتونی H است :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\right]\varphi(x) = E\,\varphi(x) \tag{1}$$

یک‌چنین معادلهٔ دیفرانسیلی مرتبه دومی ، برای هرمقدار E ، دارای‌بینهایت جواب‌است : اگر به $\varphi(x)$ و مشتق آن در یک نقطهٔ معین مقادیر دلخواهی نسبت‌دهیم‌می‌توانیم φ را برای هرمقدار دیگر x به‌دست آوریم . بنابراین معادلهٔ (۱) به‌تنهائی‌نمی‌تواندمقادیر ممکن انرژی را محدود سازد . لیکن ، دراینجا نشان خواهیم دادکه اگر ، علاوه برآن، شرایط مرزی معینی روی $\varphi(x)$ تحمیل کنیم ، تنها مقادیر معینی از E ممکن خواهند بود (کوانتش ترازهای انرژی) .

ا ــ کوانتش انرژیهای حالت مقید

حالتهائی را " حالتهای مقیده ذره" خواهیم نامید که توابع موج $\varphi(x)$ آنها در معادلهٔ ویژه‌مقداری (۱) صدق کنند و مجذورا" انتگرال‌پذیر باشند [که برای اینکه $\varphi(x)$ بتواند واقعا" حالت فیزیکی یک ذره را توصیف‌کند ضروری است] . ازاین‌رو ، اینهاحالتهای پایداری هستند ، که برای آنها چگالی احتمال مکان $|\varphi(x)|^2$ فقط در ناحیه محدودی از فضا مقادیر غیر قابل اغماضی دارد [برای اینکه $\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\, |\varphi(x)|^2$ همگرا شود باید $|\varphi(x)|^2$ وقتی $x \longrightarrow \pm\infty$ به‌طور سریع به‌سمت صفر میل کند] . حالتهای مقید مارا به‌یاد حرکت کلاسیکی‌ای می‌اندازدکه ذره درداخل چاه نوسان می‌کند بدون اینکه هرگزبتواند ازآن‌خارج شود (انرژی E_{cl} منفی ولی بزرگتر از V_0 -) .

خواهیم دیدکه درمکانیک‌کوانتومی ، این‌واقیت‌که $\varphi(x)$ باید مجذورا" انتگرال‌پذیر باشد ، می‌رساند که انرژیهای ممکن یک مجموعهٔ گسسته از مقادیری را تشکیل می‌دهند که در

فاصله بین V_0 – و 0 قراردارند . برای فهم این‌مطلب ، به‌پتانسیل نشان‌داده‌شده درشکل a ـ۱ برمی‌گردیم . برای سهولت ، فرض‌خواهیم‌کردکه $V(x)$ درخارج بازهٔ $[x_1, x_2]$ دقیقاً" صفر است . اگر $x < x_1$ باشد (ناحیه I) ، $V(x) = 0$ و جواب معادله (۱) به‌صورت زیر نوشته می‌شود :

ـ اگر $E > 0$ باشد :

$$\varphi_I(x) = A\, e^{ikx} + A'\, e^{-ikx} \tag{۲}$$

با :

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{۳}$$

ـ اگر $E < 0$ باشد :

$$\varphi_I(x) = B\, e^{\rho x} + B'\, e^{-\rho x} \tag{۴}$$

با :

$$\rho = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{۵}$$

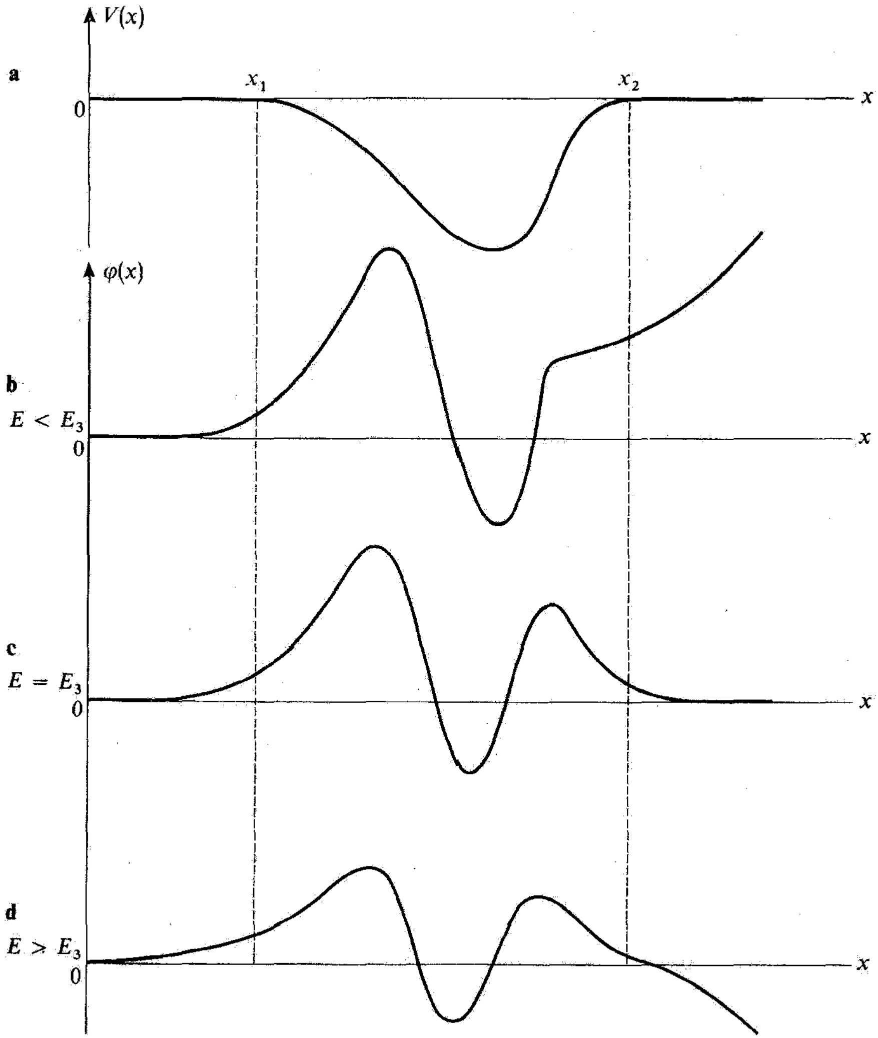
ما به‌دنبال یک جواب مجذوراً" انتگرال‌پذیر می‌گردیم ، بنابراین باید شکل (۲) را که درآن $\varphi_I(x)$ برهم نهشی از امواج تخت بامدولهای ثابت است که خود باعث : واگراشدن انتگرال :

$$\int_{-\infty}^{x_1} dx\, |\varphi_I(x)|^2 \tag{۶}$$

می‌شوند ، از بین ببریم . تنها امکان (۴) باقی می‌ماند و بدین ترتیب نتیجهٔ اول را به‌صورت زیر به‌دست می‌آوریم : حالتهای مقید ذره ، همگی دارای انرژی منفی هستند . در (۴) نمی‌توانیم جمله $e^{-\rho x}$ را ، که وقتی $x \longrightarrow -\infty$ میل می‌کند و اگرا می‌شود ، داشته باشیم . لذا داریم :

$$\varphi_I(x) = e^{\rho x} \qquad\qquad x < x_1 \tag{۷}$$

[ضریب تناسب B را حذف کرده‌ایم ، زیرا همگن‌بودن معادلهٔ (۱) به‌ما امکان می‌دهد تا $\varphi(x)$ را با تقریب یک ضریب ضربی تعیین کنیم] .



شکل ۱ .
چاه پتانسیل با عمق V_0 (شکل a) ، واقع بین نقاط $x = x_1$ و $x = x_2$. یک جواب $\varphi(x)$ برای معادله ویژه مقداری H طوری انتخاب می‌کنیم که ، برای $x < x_1$ ، وقتی $x \longrightarrow -\infty$ میل می‌کند ، به‌طور نمائی به‌سمت صفر میل‌کند . سپس این جواب را به‌کل محور x ها تعمیم می‌دهیم . برای یک مقدار دلخواه انرژی E تابع $\varphi(x)$ در $x \longrightarrow +\infty$ به‌صورت $\tilde{B}(E)\,e^{\rho x}$ و اگرا می‌شود. شکل b موردی را که $\tilde{B}(E) > 0$ ، و شکل d موردی را که $\tilde{B}(E) < 0$ است ، نشان می‌دهد . با این وجود ، اگر انرژی E طوری انتخاب شود که $\tilde{B}(E) = 0$ شود، $\varphi(x)$ ، وقتی $x \longrightarrow +\infty$ میل کند ، بطور نمائی به‌سمت صفر میل می‌کند (شکل c) و $\varphi(x)$ مجذورا" انتگرال‌پذیر است .

مقدار $\varphi(x)$ در بازهٔ $x_1 \leqslant x \leqslant x_2$ (ناحیه II) ازگسستن $\varphi_I(x)$ به‌دست‌می‌آید: باید جوابی برای معادلهٔ (۱) پیدا کنیم که در $x = x_1$ برابر با $e^{\rho x_1}$ و مشتق آن دررین‌نقطه مساوی $\rho\, e^{\rho x_1}$ شود. تابع $\varphi_{II}(x)$ که بدین‌ترتیب به‌دست می‌آید به ρ ، والبته، به‌عبارت دقیق $V(x)$ بستگی‌دارد. مع‌ذالک، چون (۱) یک معادله دیفرانسیل مرتبه دوم است $\varphi_{II}(x)$ توسط شرایط مرزی اخیر، به‌طور یکتا تعیین می‌شود، این تابع، علاوه براین حقیقی است (که مارا قادر می‌سازد تا منحنی‌هایی نظیر منحنی‌های شکلهای b ـ۱ ، c ـ۱ و d ـ۱ را رسم کنیم).

آنچه باقی می‌ماند این است که جواب معادله را بررسی $x > x_2$ (ناحیه III) بدست آوریم، این جواب می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود:

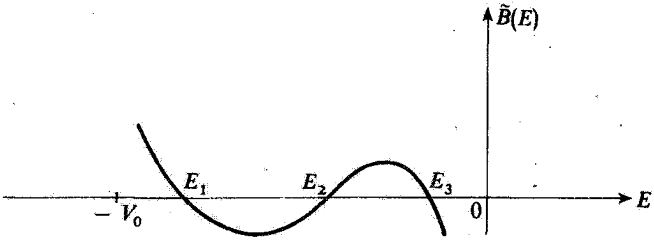
$$\varphi_{III}(x) = \tilde{B}\, e^{\rho x} + \tilde{B}'\, e^{-\rho x} \qquad (۸)$$

که درآن $\tilde{B}$ و $\tilde{B}'$ ثابتهایی حقیقی‌اند که توسط شرایط پیوستگی $\varphi(x)$ و $d\varphi/dx$ در نقطه $x = x_2$ ، تعیین می‌شوند. $\tilde{B}$ و $\tilde{B}'$ هم به ρ و هم به‌تابع $V(x)$ بستگی دارند.

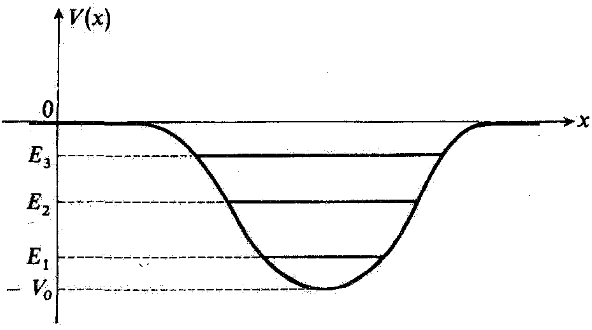
بنابراین جوابی برای معادلهٔ (۱) ،نظیر، به‌عنوان مثال، جوابی که در شکل b ـ۱ نشان داده شده‌است، به‌دست‌آورده‌ایم. آیا این جواب مجذورا" انتگرال‌پذیر است؟ از (۸) مشاهده می‌کنیم که عموما" این‌طور نیست مگر اینکه $\tilde{B}$ صفر باشد (این مورد خاص در شکل c ـ۱ نشان داده شده‌است). اما، برای یک تابع معین $V(x)$ ، $\tilde{B}$ از طریق ρ تابعی از E است. بنابراین، تنها مقادیری از E که برای آنها یک حالت مقید وجود دارد جوابهای معادله $\tilde{B}(E) = 0$ است. این جوابهای E_1 ، E_2 ، . . . (رک شکل۲) یک طیف گسسته تشکیل می‌دهند که، البته، به‌پتانسیل $V(x)$ انتخاب شده بستگی دارد (در بخش بعدی خواهیم دید که تمام انرژیهای E_i از $-V_0$ بزرگتراند).

بدین ترتیب به‌نتیجهٔ زیر می‌رسیم: مقادیر ممکن انرژی حالتهای مقید ذره‌ای که در یک چاه پتانسیل باشکل دلخواه قرار دارد، یک مجموعه گسسته تشکیل می‌دهند (اغلب گفته می‌شود که انرژیهای حالت مقید کوانتیده هستند). این نتیجه رامی‌توان با کوانتش مدهای الکترومغناطیسی در یک حفره متشابه دانست. هیچ مشابهی درمکانیک کلاسیک ،که در آن، همان‌طوری که دیدیم، تمام مقادیر انرژی بین $-V_0$ و 0 قابل قبول‌اند، وجود ندارد. در مکانیک کوانتومی، پائین‌ترین تراز انرژی E_1 را حالت پایه، تراز انرژی E_2 بلافاصله بالاتر ازآن را اولین حالت برانگیخته، تراز انرژی بعدی E_3 را دومین حالت برانگیخته و غیره می‌نامیم. غالبا" به‌هریک از این حالتها نمودار طرح وار زیر را وابسته کنند: در داخل چاه پتانسیل $V(x)$ ، یک پاره خط افقی که محل عمودی آن متناظرباانرژی

حالت باشد و طول آن ایده‌ای از گستردگی فضائی تابع موج را می‌دهد رسم می‌کننـد (این خط درواقع نقاطی از محور را دربر می‌گیرد که ذره کلاسیکی باهمان انرژی می‌توانست به‌آن نقاط برسد) . برای مجموعـه ترازهای انرژی طـرح‌واری از نوع نشان داده شده در شکل ۳ به‌دست میآوریم .



شکل ۲ .
نمایش تابع $\tilde{B}(E)$. صفرهای $\tilde{B}(E)$ مقادیری از E را نشان می‌دهندکه برای آنها $\varphi(x)$ مجذورا" انتگـرال‌پذیـر است (وضعیت شکـل c ــ۱) ، یعنی ، انرژیهای E_1 ، E_2 ، E_3 ، . . . حالتهای مقید ، تمام این انرژیها بین $-V_0$ و 0 واقعند .



شکل ۳ .
نمایش طرح‌واره‌ای حالتهای مقید یک‌ذره در یک چاه پتانسیل . برای هریک از این حالتهای مانا ، یک‌پاره‌خط افقی می‌کشیم که عرض‌آن برابر باانـرژی تراز مربوطه باشد . این پاره خط به‌نقاط تقاطع آن با منحنی نمایش انـرژی پتانسیل $V(x)$ یعنی ، به‌ناحیه حرکت کلاسیکی ذره باهمان انرژی محـدود می‌شود . پاره خط ایده‌ای از گستردگی بسط تابع موج به‌دست می‌دهد .

همان‌طوری که در فصل اول دیدیم ، پدیدهٔ کوانتش انرژی یکی ازعواملی بود که منجر به‌ورود مکانیک کوانتومی شد . این پدیده در دستگاههای فیزیکی بسیار زیادی ظاهر می‌شود : در ترازهای انرژی اتمها (رک فصل هفتم ، اتم هیدرژن) ، نوسانگر هارمونیک (رک فصل پنجم) ، هسته‌های اتمی و غیره .

۲ ـ مقدار می‌نیمم انرژی حالت پایه

در این بخش نشان خواهیم داد که انرژیهای E_1 ، E_2 . . . همگی از مقدار می‌نیمم V_0 – انرژی پتانسیل $V(x)$ بزرگتراند . سپس خواهیم دید که چگونه این نتیجه می‌تواند با استفاده از رابطهٔ عدم قطعیت هایزنبرگ به‌آسانی فهمیده شود .

اگر $\varphi(x)$ یک جواب معادلهٔ (۱) باشد ، با ضرب‌کردن این معادله در $\varphi^*(x)$ و انتگرال‌گیری از معادلهٔ به‌دست آمده ، خواهیم یافت :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\, \varphi^*(x)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\varphi(x) + \int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\, V(x)\,|\varphi(x)|^2 = E\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\,|\varphi(x)|^2 \qquad (۹)$$

برای یک حالت مقید ، می‌توان تابع $\varphi(x)$ را بهنجار کرد ، ودراین صورت‌معادلهٔ (۹) می‌تواند به‌شکل زیر نوشته شود :

$$E = \langle T \rangle + \langle V \rangle \qquad (۱۰)$$

با :

$$\langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\, \varphi^*(x)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\varphi(x) = \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\left|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\varphi(x)\right|^2 \qquad (۱۱)$$

[که در آن از انتگرال به‌روش جزء بجزء و از این واقعیت که وقتی $|x| \longrightarrow \infty$ میل کند $\varphi(x)$ به‌سمت صفر میل می‌کند ، و :

$$\langle V \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\, V(x)\,|\varphi(x)|^2 \qquad (۱۲)$$

استفاده کرده‌ایم]. رابطهٔ (۱۰) نشان می‌دهد که E مجموع مقدار متوسط انرژی جنبشی :

$$\langle T \rangle = \langle \varphi | \frac{P^2}{2m} | \varphi \rangle \tag{۱۳}$$

و انرژی پتانسیل :

$$\langle V \rangle = \langle \varphi | V(X) | \varphi \rangle \tag{۱۴}$$

است . از روابط (۱۱) و (۱۲) ، نتیجه می‌شود که :

$$\langle T \rangle > 0 \tag{۱۵}$$

$$\langle V \rangle \geqslant \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\, (-V_0)\, |\varphi(x)|^2 = -V_0 \tag{۱۶}$$

در نتیجه :

$$E = \langle T \rangle + \langle V \rangle > \langle V \rangle \geqslant -V_0 \tag{۱۷}$$

وانگهی ، همانطوری که در بخش ۱ نشان دادیم ، E منفی است ، ملاحظه می‌کنیم که مانند مکانیک کلاسیک ، انرژیهای حالت مقید همواره بین $-V_0$ و 0 قرار دارند .

معذالک یک اختلاف مهم بین وضعیتهای کلاسیکی و کوانتومی وجود دارد : باوجودی که ، در مکانیک کلاسیک ، ذره می‌تواند انرژی‌ای برابر $-V_0$ (مورد ذره در حال سکون در M_0) یا کمی بزرگتر از $-V_0$ (مورد نوسانات کوچک) داشته باشد ، در مکانیک کوانتومی چنین نیست : پائین‌ترین انرژی ممکن ، انرژی E_1 حالت پایه است که لزوما" از $-V_0$ بزرگتر است (رک شکل ۳) . همانطوری که در زیر نشان خواهیم داد ، روابط عدم قطعیت هایزنبرگ ما را قادر می‌سازند تا منشاء فیزیکی این نتیجه را بفهمیم .

اگر سعی کنیم حالتی از ذره را بسازیم که برای آن انرژی پتانسیل متوسط تا حد دلخواه کوچک باشد ، از (۱۲) ملاحظه می‌کنیم که باید تابع موجی انتخاب کنیم که عملا" در نقطه M_0 جایگزیده باشد . دراینصورت انحراف مربعی متوسط ΔX بسیار کوچک ، بنابراین ، ΔP لزوما" بسیار بزرگ است . چون :

$$\langle P^2 \rangle = (\Delta P)^2 + \langle P \rangle^2 \geqslant (\Delta P)^2 \tag{۱۸}$$

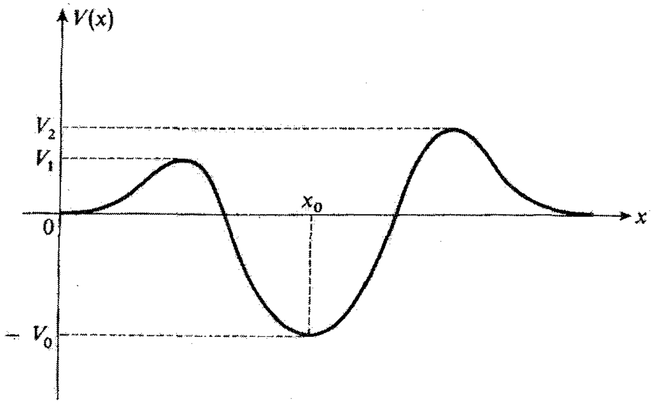
انرژی جنبشی $\langle T \rangle = \langle P^2 \rangle / 2m$ نیز بسیاربزرگ است . لذا ، اگر انرژی‌پتانسیل ذره به‌سمت می‌نیممش میل کند ، انرژی جنبشی‌آن بدون‌حد افزایش خواهد یافت . تابع موج حالت پایه متناظر با سازشی‌است که برای آن مجموع این‌دوانرژی می‌نیمم باشد . بنابراین،

حالت پایهٔ ذرهٔ کوانتومی توسط تابع موجی مشخص می‌شود که دارای مقداری گستردگی فضایی‌است (رک شکل۳) ، و انرژی آن لزوماً" بزرگتر از $-V_0$ است. برخلاف وضعیت‌مکانیک کلاسیک ، حالت باانرژی کاملاً"معینی در مکانیک کوانتومی وجود ندارد که در آن ، ذره در ته‌چاه پتانسیل" در حال سکون" باشد .

گوشزد :

چون انرژی حالتهای مقید بین $-V_0$ و 0 قرار دارد ، یک‌چنین حالتهایی فقط وقتی می‌توانند وجود داشته باشند که پتانسیل $V(x)$ در یک یاچند ناحیه ازمحور x ها منفی باشد . به‌همین دلیل است که دراین مکمل یک " چاه" پتانسیل نظیر آنچه که درشکل a ــ۱ نشان داده شده است انتخاب کرده‌ایم (در حالیکه‌درمکمل بعدی، خود را به‌مورد چاه پتانسیل محدود نخواهیم ساخت) .

بنابراین هیچ مانعی وجود ندارد که $V(x)$ برای بعضی از مقادیر x مثبت باشد ، به‌عنوان مثال، "چاه" می‌تواند توسط "سدهای" پتانسیل، مانند شکل۴، احاطه شود (همواره فرض خواهیم‌کردکه پتانسیل در بینهایت ، صفراست) . دراین مورد ، بعضی ازحرکتهای‌کلاسیکی باانرژی مثبت ، مقید خواهند ماند ، درصورتیکه در مکانیک کوانتومی ، همان استدلال بالا نشان‌می‌دهد که حالتهای مقید همواره دارای انرژی‌ای بین $-V_0$ و 0 هستند . از نظر فیزیکی ، این اختلاف از این واقعیت ناشی می‌شودکه یک سد پتانسیل باارتفاع محدود هرگز قادر نیست یک‌ذره کوانتومی را کاملاً" برگرداند : همواره یک احتمال غیرصفری وجود دارد که ذره توسط پدیده تونل از سد عبور کند .



شکل ۴.
چاه پتانسیل با عمق V_0 - که بین دوسد پتانسیل به‌ارتفاع V_1 و V_2 قرار دارد (فرض کنید، به‌عنوان مثال، $V_1 \leqslant V_2$). از نظر کلاسیکی، حرکتهایی برای ذره وجود دارد که انرژی آنها بین $-V_0$ و V_1 است و بین دوسد محبوس می‌مانند. در مکانیک کوانتومی، ذره‌ای که انرژی آن بین 0 و V_1 است می‌تواند توسط پدیده تونل از سد عبور کند، درنتیجه حالتهای مقید همواره انرژیهایی بین $-V_0$ و 0 دارند.

مراجع و پیشنهادات برای مطالعه بیشتر:

Feynman III (1.2), §16-6; Messiah (1.17), chap. III, §II; Ayant and Belorizky (1.10), chap. IV, §§1, 2, 3; Schiff (1.18), §8.

مکمل N_{III}

حالتهای نامقید یك ذره درحضور یك چاه یا سد پتانسیل با شکل دلخواه

۱ ــ ماتریس عبور $M(k)$

a ــ تعریف $M(k)$

b ــ خواص $M(k)$

۲ ــ ضرائب بازتاب و عبور

۳ ــ مثال

در مکمل M_{III} ،نشان دادیم که انرژی حالتهای مقید یک ذره واقع در پتانسیل $V(x)$ منفی است.* و فقط وقتی وجود دارند که $V(x)$ یک پتانسیل جاذبه باشد (یک چاه پتانسیل که حرکت مقید کلاسیکی را ممکن سازد) . در آنجا مجبورشدیم مقادیرمثبت انرژی را رد کنیم زیرا این مقادیر بهویژه تابعهای $\varphi_k(x)$ ای برای هامیلتونی H منجر میشوند که رفتارشان دربینهایت مانندبرهمنهشهای توابعنمائی $e^{\pm ikx}$ میشدکه مجذورا"انتگرالپذیر نیستند . با این وجود ، در فصل اول دیدیم که با ترکیب خطی یک چنین توابعی میتوان تابع موجهایی (بستهموجهایی) مانند $\psi(x)$ ساخت که مجذورا " انتگرالپذیر باشند ، و ازینرو بتوانند معرف حالت فیزیکی یک ذره باشند . واضح است که ، چون حالتهایی که بدین ترتیب بهدست آمدهاند شامل چندین مقدار k (یعنی ، چندین مقدار انرژی) هستند دیگر حالتهای مانایی نخواهند بود ، بنابراین تابع موج $\psi(x)$ بازمان تحول مییابد ، منتشر میشود و تغییرشکل پیدا میکند ، اما ، بادرنظرگرفتن اینکه $\psi(x)$ برحسب ویژهتابعهای $\varphi_k(x)$ بسط داده شده است ، میتوانیم این تحول را بهطور بسیار سادهای محاسبه کنیم [همانطوری که ، بهعنوان مثال ، در مکمل J_I انجام دادیم و از خواص $\varphi_k(x)$ برای محاسبهٔ ضرائب عبور و بازتاب یک سد پتانسیل ، تأخیردر اثر انعکاس و غیره استفاده کردیم] . بهاین دلیل ، علیرغم اینکه هریک از $\varphi_k(x)$ ها نمیتوانند بهتنهائی معرف یک حالت فیزیکی باشند، مفید استکهویژه تابعهای انرژیهای مثبت H را ، مانند مکمل H_I ، برای چند پتانسیل مربعی مورد مطالعه

* یادآوری میکنیم که مبداء انرژی را طوری انتخاب میکنیم که $V(x)$ دربینهایت صفر شود .

قرار دهیم*.

در این مکمل می‌خواهیم، به‌طریقی عام (درعین حالی‌که خودرا به‌مسائل یک‌بعدی محدود می‌کنیم)اثر یک‌پتانسیل $V(x)$ روی ویژه تابعهای $\varphi_k(x)$ متناظر باانرژیهای مثبت را بررسی کنیم. هیچ فرضی در باره شکل $V(x)$ ، که ممکن است شامل یک یا چندسد، چاه و غیره باشد، نخواهیم کرد، بجزاینکه درخارج یک‌بازهٔ محدود $[x_1, x_2]$ ازمحور x هاصفر شود. نشان خواهیم داد که در تمام موارد، اثر $V(x)$ روی توابع $\varphi_k(x)$ می‌تواند توسط یک ماتریس ۲×۲، $M(k)$ ، که دارای چند خاصیت عمومی است، توصیف شود. بدین ترتیب نتایج گوناگونی مستقل‌از شکل‌پتانسیل $V(x)$ به‌دست خواهیم‌آورد. به‌عنوان مثال، خواهیم دید که ضرائب عبور و بازتاب از یک سد (متقارن یا نامتقارن) برای ذره‌ای که از چپ می‌آید و برای ذره‌ای که با همان انرژی از راست می‌آید یکسان است. فایده دیگر این مکمل N_{III} استفاده از آن به‌عنوان سرآغازی برای محاسبات مکمل O_{III} است، که در آن خواص یک‌ذره در یک پتانسیل تناوبی $V(x)$ را مطالعه خواهیم کرد.

۱ ــ ماتریس عبور $M(k)$

a ــ تعریف $M(k)$

در یک مساله یک بعدی، یک پتانسیل $V(x)$ در نظر بگیرید که در خارج بازهٔ $[x_1, x_2]$ به‌طول l صفراست ولی درداخل این بازه به‌طور دلخواهی تغییر می‌کند (شکل ۱). مبداء x را دروسط بازهٔ $[x_1, x_2]$ انتخاب می‌کنیم تا $V(x)$ فقط به‌ازاء $|x| < l/2$ تغییرکند. معادله‌ای که هرتابع موج $\varphi(x)$ وابسته به‌یک حالت مانا باانرژی E درآن صدق می‌کند عبارت است از:

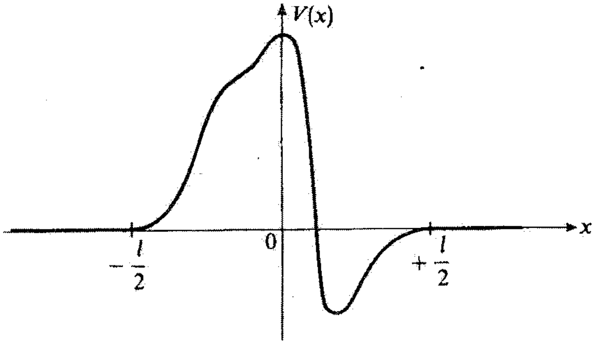
$$\left\{\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(x)\right]\right\}\varphi(x) = 0 \qquad (۱)$$

* هم‌چنین می‌توانستیم به‌فکر مطالعه ویژه تابعهایی از H که مجذورا" انتگرال‌پذیر نیستند وانرژی‌آنها منفی است (آنهایی که انرژی‌شان بـه‌طیف‌گسسته به‌دست آمده در مکمل M_{III} تعلق ندارد) بیفتیم. لیکن این توابع در بینهایت به‌سرعت (بطورنمائی) واگرا می‌شوند و نمی‌توان با برهم‌نهش خطی آنها تابع موجهایی به‌دست آورد کـه مجذورا" انتگرال‌پذیر باشند.

در بقیهٔ این مکمل، برای مشخص کردن انرژی، فراسنج k را به‌صورت:

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad (۲)$$

انتخاب خواهیم کرد.



شکل ۱.
پتانسیل $V(x)$ در داخل بازهٔ $-l/2 \leqslant x \leqslant l/2$ بطوردلخواهی تغییر می‌کند و در خارج این بازه صفر است.

درناحیهٔ $x < -\frac{l}{2}$ ، تابع e^{ikx} درمعادلهٔ (۱) صدق می‌کند، جواب این‌معادله را که بازاء $x < -\frac{l}{2}$ برابر e^{ikx} است به $v_k(x)$ نشان‌می‌دهیم. وقتی $x > +\frac{l}{2}$ باشد، $v_k(x)$ لزوما" یک ترکیب خطی ازدوجواب مستقل e^{ikx} و e^{-ikx} معادله (۱) است. بنابراین‌داریم:

$$\begin{cases} v_k(x) = e^{ikx} & : \ x < -\frac{l}{2} \quad \text{برای} \quad (۳\text{—a}) \\ v_k(x) = F(k)\, e^{ikx} + G(k)\, e^{-ikx} & : \ x > +\frac{l}{2} \quad \text{برای} \quad (۳\text{—b}) \end{cases}$$

که درآن $F(k)$ و $G(k)$ ضرائبی هستندکه هم به k و هم به‌شکل پتانسیل مورد نظر بستگی دارند. بطور مشابه می‌توانیم جوابی مانند $v'_k(x)$ وارد کنیم که برای $x < -l/2$ برابر با e^{-ikx} باشد:

$$\begin{cases} v'_k(x) = e^{-ikx} & : \ x < -\frac{l}{2} \quad \text{برای} \quad (۴\text{—a}) \\ v'_k(x) = F'(k)\, e^{ikx} + G'(k)\, e^{-ikx} & : \ x > +\frac{l}{2} \quad \text{برای} \quad (۴\text{—b}) \end{cases}$$

عمومی‌ترین جواب $\varphi_k(x)$ معادله‌ی(۱) (مرتبه دوم نسبت به x) برای یک مقدار معین E (یعنی یک، مقدار معین k)، ترکیبی خطی از v_k و v'_k است:

$$\varphi_k(x) = A\, v_k(x) + A' v'_k(x) \qquad (۵)$$

روابط(a ــ۳) و(a ــ۴) می‌رسانند که:

$$\varphi_k(x) = A\, e^{ikx} + A'\, e^{-ikx} \qquad \text{برای } x < -\frac{l}{2}: \qquad (۶ــ a)$$

در حالی که روابط (b ــ۳) و(b ــ۴) می‌دهند:

$$\varphi_k(x) = \tilde{A}\, e^{ikx} + \tilde{A}'\, e^{-ikx} \qquad \text{برای } x > +\frac{l}{2}: \qquad (۶ــ b)$$

که درآن:

$$\begin{aligned} \tilde{A} &= F(k)\, A + F'(k)\, A' \\ \tilde{A}' &= G(k)\, A + G'(k)\, A' \end{aligned} \qquad (۷)$$

بنا به‌تعریف، ماتریس $M(k)$ یک ماتریس ۲×۲ به‌صورت:

$$M(k) = \begin{pmatrix} F(k) & F'(k) \\ G(k) & G'(k) \end{pmatrix} \qquad (۸)$$

است که به‌کمک آن می‌توان روابط (۷) را به‌صورت ماتریسی:

$$\begin{pmatrix} \tilde{A} \\ \tilde{A}' \end{pmatrix} = M(k) \begin{pmatrix} A \\ A' \end{pmatrix} \qquad (۹)$$

نوشت. بنابراین $M(k)$ به‌ما امکان می‌دهد تا، با داشتن رفتار(a ــ۶) تابع موج درطرف چپ پتانسیل، رفتار(b ــ۶)ی آن در طرف راست پتانسیل، را تعیین کنیم. $M(k)$ را "ماتریس عبور" پتانسیل می‌نامیم.

گوشزد:

جریان وابسته به‌یک تابع موج $\varphi(x)$ عبارت است از:

$$J(x) = \frac{\hbar}{2mi}\left[\varphi^*(x)\frac{d\varphi}{dx} - \varphi(x)\frac{d\varphi^*}{dx}\right] \qquad (۱۰)$$

با مشتق‌گیری، داریم:

$$\frac{d}{dx}J(x) = \frac{\hbar}{2mi}\left[\varphi^*(x)\frac{d^2\varphi}{dx^2} - \varphi(x)\frac{d^2\varphi^*}{dx^2}\right] \qquad (11)$$

با در نظر گرفتن (۱)، به‌دست می‌آوریم:

$$\frac{d}{dx}J(x) = 0 \qquad (12)$$

بنابراین، جریان $J(x)$ وابسته به‌یک حالت مانا در تمام نقاط محور x ها یکسان است. توجه کنید که (۱۲) مشابه یک بعدی رابطهٔ:

$$\text{div}\,\mathbf{J}(\mathbf{r}) = 0 \qquad (13)$$

است، که برطبق رابطهٔ (D ـ۱۱) از فصل سوم، برای هر حالت مانای ذره‌ای‌که در فضای سه‌بعدی حرکت می‌کند، معتبراست. بنابراین، برطبق (۱۲)، جریان $J_k(x)$ وابسته به $\varphi_k(x)$ را می‌توان چه‌باانتخاب (a ـ۶) وچه باانتخاب (b ـ۶) برای $\varphi_k(x)$ برای هر x غیرمشخصی محاسبه کرد:

$$J_k(x) = \frac{\hbar k}{m}\left[\,|A|^2 - |A'|^2\,\right] = \frac{\hbar k}{m}\left[\,|\tilde{A}|^2 - |\tilde{A}'|^2\,\right] \qquad (14)$$

b ـ خواص

α. بااستفاده از این واقعیت که تابع $V(x)$ حقیقی است، به‌آسانی می‌توان نشان داد که اگر $\varphi(x)$ جواب معادلهٔ (۱) باشد، $\varphi^*(x)$ نیز جواب آن خواهد بود. حال تابع $v_k^*(x)$ را که جواب (۱) است در نظر بگیرید، مقایسهٔ (a ـ۳) و (a ـ۴) نشان می‌دهد که وقتی $x < -\frac{l}{2}$ باشد، این تابع با $v_k'(x)$ یکسان‌است. ازاین‌رو برای تمام x هاداریم:

$$v_k^*(x) = v_k'(x) \qquad (15)$$

با بردن تساویهای (b ـ۳) و (b ـ۴) در این رابطه، به‌دست می‌آوریم:

$$F^*(k) = G'(k) \qquad (16)$$
$$G^*(k) = F'(k) \qquad (17)$$

در نتیجه ماتریس $M(k)$ را می‌توان به‌شکل ساده شدهٔ زیر نوشت:

$$M(k) = \begin{pmatrix} F(k) & G^*(k) \\ G(k) & F^*(k) \end{pmatrix} \tag{۱۸}$$

β . در بالا دیدیم‌که [رک (۱۲)] جریان احتمال $J(x)$ برای یک حالت مانا به x بستگی ندارد. ازاین‌رو باید داشته باشیم [رک (۱۴)]:

$$|A|^2 - |A'|^2 = |\tilde{A}|^2 - |\tilde{A}'|^2 \tag{۱۹}$$

روابط(۹) و(۱۸) می‌دهند:

$$\begin{aligned} |\tilde{A}|^2 - |\tilde{A}'|^2 &= [F(k)A + G^*(k)A'][F^*(k)A^* + G(k)A'^*] \\ &\quad - [G(k)A + F^*(k)A'][G^*(k)A^* + F(k)A'^*] \\ &= [|F(k)|^2 - |G(k)|^2][|A|^2 - |A'|^2] \end{aligned} \tag{۲۰}$$

بنابراین شرط(۱۹) معادل است با:

$$|F(k)|^2 - |G(k)|^2 = \text{Det}\, M(k) = 1 \tag{۲۱}$$

گوشزدها:

(i) هیچ فرض خاصی در بارهٔ شکل پتانسیل نکرده‌ایم . اگر پتانسیل زوج ، یعنی ،اگر $V(x) = V(-x)$ باشد ، ماتریس $M(k)$ یک خاصیت دیگر نیز دارد: می‌توان نشان داد که $G(k)$ موهومی خاص است .

(ii) روابط(۶) نشان می‌دهند که A و $\tilde{A}'$ ضرائب امواج تخت "ورودی" ، یعنی ، امواج وابسته به‌ذراتی‌که به‌ترتیب از $x = -\infty$ و $x = +\infty$ به‌سمت منطقه نفوذپتانسیل حرکت‌می‌کنند (ذرات فرودی)هستند . ازطرف دیگر $\tilde{A}$ و A' ضرائب متناظربا امواج "خروجی" ، وابسته به‌ذراتی که ازپتانسیل دور می‌شوند (ذرات عبورکرده‌یامنعکس شده می‌باشند . مفید است که ماتریس S را ، که به‌ما امکان می‌دهد تا دامنهٔ امواج خروجی را برحسب دامنهٔ امواج ورودی محاسبه کنیم ، وارد کنیم .

$$\begin{pmatrix} \tilde{A} \\ A' \end{pmatrix} = S(k) \begin{pmatrix} A \\ \tilde{A}' \end{pmatrix} \tag{۲۲}$$

همانطوری‌که الان نشان می‌دهیم ، $S(k)$ می‌تواند به‌آسانی برحسب عناصرماتریس $M(k)$ بیان شود . از روابط:

$$\tilde{A} = F(k)\,A + G^*(k)\,A' \qquad (۲۳-\mathrm{a})$$
$$\tilde{A}' = G(k)\,A + F^*(k)\,A' \qquad (۲۳-\mathrm{b})$$

نتیجه می‌شود :

$$A' = \frac{1}{F^*(k)}\left[\tilde{A}' - G(k)A\right] \qquad (۲۴)$$

با جایگزین کردن این رابطه در (a ـ۲۳) ، به‌دست می‌آید :

$$\tilde{A} = \frac{1}{F^*(k)}\left[\left(F(k)F^*(k) - G(k)G^*(k)\right)A + G^*(k)\tilde{A}'\right] \qquad (۲۵)$$

سپس با در نظر گرفتن (۲۱) ، می‌توانیم ماتریس $S(k)$ را به‌صورت زیر بنویسیم :

$$S(k) = \frac{1}{F^*(k)}\begin{pmatrix} 1 & G^*(k) \\ -G(k) & 1 \end{pmatrix} \qquad (۲۶)$$

به‌آسانی می‌توان ، بااستفاده مجدد از (۲۱) ، ثابت کرد که :

$$S(k)\,S^\dagger(k) = S^\dagger(k)\,S(k) = 1 \qquad (۲۷)$$

بنابراین $S(k)$ یکانی‌است . این ماتریس درتئوری برخورد نقش مهمی‌ایفا می‌کند ، می‌توانستیم یکانی بودن آن را از یکانی‌بودن عملگر تحول (رک مکمل F_{III}) ، که بیانگر پایستگی احتمال کل یافتن ذره درجایی روی محور x ها نسبت به‌زمان‌است (هنجار تابع موج) ، ثابت کنیم .

۴ ــ ضرائب عبور و بازتاب

برای‌محاسبه‌ضرائب‌بازتاب وعبوربرای‌ذره‌ای‌که باپتانسیل $V(x)$ مواجه‌می‌شود، باید (مانند مکمل J_1) باهمان ویژه تابعهای H که دربالا مطالعه کردیم ، یک بسته موج ساخت . به‌عنوان مثال ، یک‌ذره فرودی باانرژی E_i که ازچپ می‌آید درنظر بگیرید . بسته‌موج متناظر از برهم‌نهش توابع $\varphi_k(x)$ ، که برای آنها قرارداده‌ایم $\tilde{A}' = 0$ ، باضرائبی‌که توسط یک تابع $g(k)$ که در نزدیکی $k = k_i = \sqrt{2mE_i/\hbar^2}$ دارای قلهٔ برجسته‌ای است ، داده می‌شوند ،

به‌دست می‌آید. در اینجا وارد جزئیات محاسبات نخواهیم شد، این محاسبات از هرنظر مشابه محاسبات مکمل J_I هستند. این محاسبات نشان می‌دهد که ضرائب بازتاب و عبور، به‌ترتیب برابرند با $|A'(k_i)/A(k_i)|^2$ و $|\tilde{A}(k_i)/A(k_i)|^2$.

چون $\tilde{A}' = 0$ است، روابط (۲۲) و (۲۶) می‌دهند:

$$\begin{aligned} \tilde{A}(k) &= \frac{1}{F^*(k)} A(k) \\ A'(k) &= -\frac{G(k)}{F^*(k)} A(k) \end{aligned} \tag{۲۸}$$

بنابراین، ضرائب بازتاب و عبور برابرند با:

$$R_1(k_i) = \left| \frac{A'(k_i)}{A(k_i)} \right|^2 = \left| \frac{G(k_i)}{F(k_i)} \right|^2 \tag{۲۹-a}$$

$$T_1(k_i) = \left| \frac{\tilde{A}(k_i)}{A(k_i)} \right|^2 = \frac{1}{|F(k_i)|^2} \tag{۲۹-b}$$

[به‌آسانی می‌توان ثابت کرد که شرط (۲۱) تضمین می‌کند که $R_1(k_i) + T_1(k_i) = 1$].

حال اگر ذره‌ای را در نظر بگیریم که از راست می‌آید، باید قرار دهیم $A = 0$، که در آن صورت خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} \tilde{A}(k) &= \frac{G^*(k)}{F^*(k)} \tilde{A}'(k) \\ A'(k) &= \frac{1}{F^*(k)} \tilde{A}'(k) \end{aligned} \tag{۳۰}$$

ضرائب عبور و بازتاب، این‌بار، برابرند با:

$$T_2(k) = \left| \frac{A'(k)}{\tilde{A}'(k)} \right|^2 = \frac{1}{|F(k)|^2} \tag{۳۱-a}$$

و:

$$R_2(k) = \left| \frac{\tilde{A}(k)}{\tilde{A}'(k)} \right|^2 = \left| \frac{G(k)}{F(k)} \right|^2 \tag{۳۱-b}$$

مقایسهٔ (۲۹) و (۳۱) نشان می‌دهد که $T_1(k) = T_2(k)$ و $R_1(k) = R_2(k)$: بنابراین شفافیت سد (متقارن یا نامتقارن) همواره برای ذراتی که از راست می‌آیند و برای آنهائی که از چپ می‌آیند یکسان است.

بعلاوه، از (۲۱) داریم:

$$|F(k)| \geqslant 1 \tag{۳۲}$$

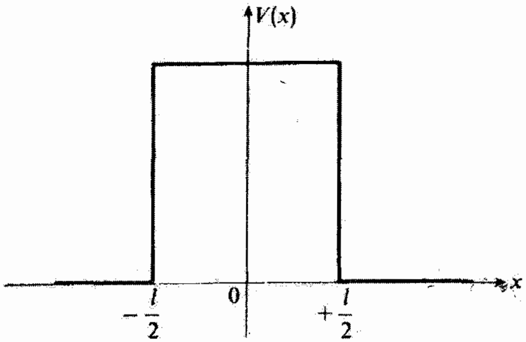
وقتی تساوی برقرارباشد ، ضریب بازتاب صفر وضریب عبور برابر ۱ است (تشدید) . ازطرف دیگر ، وضعیت معکوس ممکن نیست : چون (۲۱) تحمیل می‌کند که $|F(k)| > |G(k)|$ ، هرگز نمی‌توانیم داشته باشیم : $T = 0$ و $R = 1$ [مگر درمورد حدی که $|F(k)|$ و $|G(k)|$ بطور همزمان به‌سمت بی‌نهایت میل کنند] .

۳ ــ مثال

حال به‌پتانسیلهای مربعی بخش b ــ۲ از مکمل H_1 برمی‌گردیم : در ناحیهٔ $-\frac{l}{2} < x < \frac{l}{2}$ ، $V(x)$ برابر است با مقدار ثابت V_0 *(شکل۲ را ، که در آن V_0 مثبت انتخاب شده است ، به‌بینید) .

ابتدا فرض کنید E کوچکتر از V_0 است و قرار دهید :

$$\rho = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} \tag{۳۳}$$



شکل ۲ . سد پتانسیل مربعی

* در واقع در اینجا سدی را در نظر گرفته‌ایم که نسبت به‌سد مکمل H_1 جابجا شده است ، زیرا فرض می‌کنیم که این سد بجای اینکه بین $x = 0$ و $x = l$ باشد ، بین $x = -l/2$ و $x = +l/2$ قرار دارد .

یک محاسبه مقدماتی مشابه با محاسبات مکمل H_1 می‌دهد:

$$M(k) = \begin{pmatrix} \left[\cosh \rho l + i\dfrac{k^2 - \rho^2}{2k\rho} \sinh \rho l\right] e^{-ikl} & -i\dfrac{k_0^2}{2k\rho} \sinh \rho l \\ i\dfrac{k_0^2}{2k\rho} \sinh \rho l & \left[\cosh \rho l - i\dfrac{k^2 - \rho^2}{2k\rho} \sinh \rho l\right] e^{ikl} \end{pmatrix} \quad (۳۴)$$

با:

$$k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \quad (۳۵)$$

(دراینجا V_0 لزوماً" مثبت است، زیرا فرض کرده‌ایم $E < V_0$).

حال اگر فرض کنیم $E > V_0$، و قرار دهیم:

$$k' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)} \quad (۳۶)$$

و:

$$k_0 = \sqrt{\varepsilon \frac{2mV_0}{\hbar^2}} \quad (۳۷)$$

(که در آن $\varepsilon = +1$، اگر $V_0 > 0$ و $\varepsilon = -1$ اگر $V_0 < 0$. بنابراین به‌دست می‌آوریم:

$$M(k) = \begin{pmatrix} \left[\cos k'l + i\dfrac{k^2 + k'^2}{2kk'} \sin k'l\right] e^{-ikl} & -i\varepsilon\dfrac{{k_0}^2}{2kk'} \sin k'l \\ i\varepsilon\dfrac{{k_0}^2}{2kk'} \sin k'l & \left[\cos k'l - i\dfrac{k^2 + k'^2}{2kk'} \sin k'l\right] e^{ikl} \end{pmatrix} \quad (۳۸)$$

به‌سادگی می‌توان روابط (۱۶)، (۱۷) و (۲۱) را از ماتریسهای $M(k)$ که در (۳۴) و (۳۸) داده شده‌اند، ثابت کرد.

مراجع و پیشنهادات برای مطالعه بیشتر:

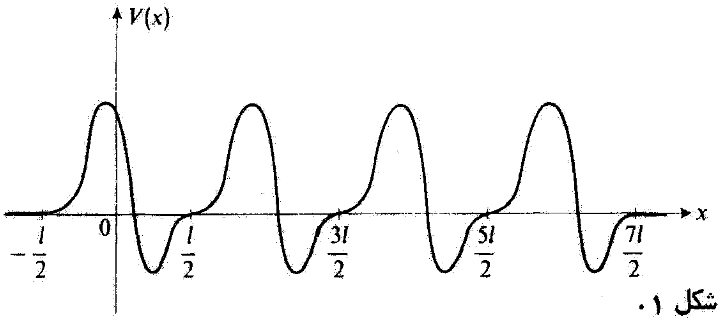
Merzbacher (1.16), chap. 6, §§5, 6 and 8; see also the references of complement M_{III}.

مکمل O_{III}

خواص کوانتومی یك ذره دریك ساختار تناوبی یك‌بعدی

۱ ــ عبور از چند سد پتانسیل یکسان متوالی
 a ــ نمادگذاری
 b ــ شرایط اتصال
 c ــ ماتریس تقریب زنجیره‌ای $Q(\alpha)$
 d ــ ویژه مقدارهای $Q(\alpha)$
۲ ــ بحث فیزیکی: مفهوم نوار انرژی مجاز یا ممنوع
 a ــ رفتار تابع موج $\varphi_\alpha(x)$
 b ــ بازتاب براگ، انرژیهای ممکن یک ذره در یک پتانسیل تناوبی
۳ ــ کوانتش ترازهای انرژی در یک پتانسیل تناوبی، اثر شرایط مرزی
 a ــ شرایط تحمیل شده به‌تابع موج
 b ــ نوارهای انرژی مجاز: حالتهای مانای ذره در داخل شبکه
 c ــ نوارهای ممنوع: حالتهای مانای جایگزیده روی لبه‌ها

دراین‌مکمل‌می‌خواهیم خواص‌کوانتومی ذره‌ای را که دریک‌پتانسیل $V(x)$ باساختار تناوبی قرار دارد، بررسی کنیم. توابع $V(x)$ ای‌که در نظر خواهیم گرفت لزوما" به‌معنی دقیقی کلمه تناوبی نیستند، کافی است که ناحیهٔ محدودی از محور x ها به‌شکل یک تابع تناوبی باشند (شکل ۱)، یعنی، یک‌شکل در یک بازه را به‌طور منظم N بار پهلوی هم‌قرار داده باشند [فقط در حد $N \longrightarrow \infty$ است که $V(x)$ واقعا" تناوبی است] .



شکل ۱.

پتانسیل $V(x)$ که دارای یک ساختار تناوبی‌است، از N بار پهلوی‌هم قراردادن یک شکل به‌دست آمده است (دراین‌شکل $N = ۴$ است).

به‌یک چنین ساختارهائی ، به‌عنوان مثال ، در بررسی یک ملکول خطی‌که از N اتم (یاگروه اتمهای) یکسان که به‌فواصل مساوی از یکدیگر قراردارند ، تشکیل شده‌است،برخورد می‌کنیم . هم‌چنین در فیزیک حالت جامد ، وقتی‌که برای فهم موقعیت ترازهای انرژی یک الکترون در یک‌بلور ، یک مدل یک‌بعدی انتخاب می‌کنیم با چنین پتانسیلهائی مواجه می‌شویم . اگر N بسیاربزرگ باشد (مورد یک‌ماکروملکول‌خطی یابلورماکروسکوپیکی)،پتانسیل $V(x)$ ، در ناحیهٔ وسیعی‌از فضا توسط یک تابع تناوبی داده می‌شود ، و می‌توان انتظار داشت‌که خواص ذره عملاً"طوری باشد که‌گوئی $V(x)$ واقعاً" تناوبی است . ولی ، از نقطه‌نظر فیزیکی ، حدی‌که N بینهایت باشد هرگز حاصل نمی‌شود ، ومادراینجا به‌موردی می‌پردازیم که درآن N دلخواه باشد .

برای مطالعهٔ اثر پتانسیل $V(x)$ روی یک ویژه تابع $\varphi(x)$ تعلق به‌هامیلتونی H باویژه مقدار E ، یک ماتریس ۲×۲ ، ماتریس تقریب زنجیره‌ای Q ، که به E بستگی دارد ، وارد خواهیم‌کرد . نشان خواهیم داد که رفتار $\varphi(x)$ ، بسته به‌اینکه ویژه‌مقدارهای‌ماتریس تقریب زنجیره‌ای حقیقی یا موهومی باشند ، کاملاً" فرق می‌کند . چون این ویژه‌مقدارها به‌انرژی انتخاب‌شدهٔ E بستگی دارند ، مفیداست‌که بین محدوده‌هائی ازانرژی‌که‌متناظرند با ویژه‌مقدارهای حقیقی و آنهائی که منجر به‌ویژه‌مقدارهای موهومی می‌شوند فرق بگذاریم . بدین ترتیب است که مفهوم نوار انرژی مجاز یا نوار انرژی ممنوع وارد خواهد شد .

گوشزدها :

(*i*) برای سهولت ، به‌نمونه‌ای که با N بار تکرار پتانسیل $V(x)$ را می‌دهد (شکل ۱) ، نام "سدپتانسیل"را خواهیم‌گذاشت . لیکن ، این‌نمونه می‌تواند یک"چاه‌پتانسیل" نیز باشد یا می‌تواند هرشکل دلخواه دیگری نیز داشته باشد .

(*ii*) برخلاف قراردادی که تاکنون داشتیم ، معمولاً" در فیزیک حالت جامد ، حرف k را برای تعیین فراسنجی که در عبارتهای تابع موجهای مانا وارد می‌شود و دیگر متناسب با ریشه دوم انرژی نیست ، به‌کار می‌برند . برای هماهنگی با این کاربرد، ازاین‌به‌بعد ازنمادگذاری‌ای که قدری بانمادگذاری مکمل N_{III} متفاوت است استفاده خواهیم کرد ، به‌جای k از α استفاده می‌کنیم :

$$\alpha = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad (1)$$

و تا بعد از حرف k استفاده نخواهیم کرد (خواهیم دید که k مستقیما" با ویژه مقدارهای ماتریس Q ، وقتی که مختلط اند ، مرتبط است) .

۱ ـ عبور از چند سد پتانسیل یکسان متوالی

یک پتانسیل $V(x)$ ، مانند شکل ۱ ، که از پهلوی‌هم قراردادن N سد تشکیل شده است در نظر بگیرید: اولین سد در اطراف $x = 0$ ، دومین در $x = l$ ، سومین‌در $x = 2l$ و بالاخره آخرین‌سد در اطراف $x = (N-1)l$ متمرکز شده‌اند .می‌خواهیم رفتار یک ویژه تابع $\varphi_\alpha(x)$ ، جواب معادلهٔ ویژه‌مقداری H :

$$\left\{\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\right\}\varphi_\alpha(x) = 0 \tag{۲}$$

را ، که در آن E و α توسط(۱) به‌هم مربوط می‌شوند ، در حین عبور از این مجموعه سدها بررسی کنیم .

a ـ نمادگذاری

در طرف چپ این N سد ، یعنی ، برای $x \leqslant -\frac{l}{2}$ ، $V(x)$ صفر است ، و جواب عمومی معادلهٔ (۲) عبارتست از:

$$\varphi_\alpha(x) = A_0\, e^{i\alpha x} + A'_0\, e^{-i\alpha x} \qquad : x \leqslant -\frac{l}{2} \text{ برای} \tag{۳ـ a}$$

مانند بخش a ـ۱ از مکمل N_{III} ، دو تابع $v_k(x)$ و $v'_k(x)$ را که در اینجا به‌صورت $v_\alpha(x)$ و $v'_\alpha(x)$ در می‌آیند ، درنظربگیرید . در ناحیه اولین سد ، که در $x = 0$ متمرکزاست، جواب عمومی معادلهٔ (۲) به‌صورت زیر نوشته می‌شود :

$$\varphi_\alpha(x) = A_1\, v_\alpha(x) + A'_1\, v'_\alpha(x) \qquad : -\frac{l}{2} \leqslant x \leqslant \frac{l}{2} \text{ برای} \tag{۳ـ b}$$

همین‌طور در ناحیهٔ سد دوم ، به‌مرکز $x = l$ ، داریم :

$$\varphi_\alpha(x) = A_2\, v_\alpha(x - l) + A'_2\, v'_\alpha(x - l) \;:\; \frac{l}{2} \leqslant x \leqslant \frac{3l}{2} \text{ برای} \tag{۳ـ c}$$

و به‌طور کلی در ناحیهٔ سد nام، به‌مرکز $x = (n-1)l$:

برای $(n-1)l - \frac{l}{2} \leqslant x \leqslant (n-1)l + \frac{l}{2}$:

$$\varphi_\alpha(x) = A_n v_\alpha[x-(n-1)l] + A'_n v'_\alpha[x-(n-1)l] \qquad (\text{۳}-\text{d})$$

بالاخره درسمت راست این N سد، یعنی، برای $x \geqslant (N-1)l + \frac{l}{2}$، مجدداً $V(x)$ برابر صفر می‌شود، و داریم:

$$\varphi_\alpha(x) = C_0\, e^{i\alpha[x-(N-1)l]} + C'_0\, e^{-i\alpha[x-(N-1)l]} \quad ; \; x \geqslant (N-1)l + \frac{l}{2} \text{ برای } \qquad (\text{۳}-\text{e})$$

اکنون باید این عبارتهای مختلف $\varphi_\alpha(x)$ را در $x = -\frac{l}{2}, +\frac{l}{2}$ و $(N-1)l + \frac{l}{2}$ به‌هم وصل کنیم. این کاری است که در بخش بعدی انجام خواهیم داد.

b ــ شرایط اتصال:

توابع v_α و v'_α به‌شکل پتانسیل انتخاب شده بستگی دارند. لیکن، نشان خواهیم داد که، محاسبهٔ آنها و همینطور مشتقهای آنها در دولبهٔ هرسد، با استفاده از نتایج مکمل N_{III}، کار آسانی است.

برای این‌منظور فرض‌کنید که همهٔ سدها بجز یکی، به‌عنوان مثال، سد n ام، بمرکز $x = (n-1)l$ برداشته شده باشند. در این صورت جواب (d ــ ۳)، که همواره در داخل این سد معتبر است، باید به‌وسیله برهم‌نهش امواج تختی که از جایگزین کردن x توسط $x-(n-1)l$ و k توسط α و باافزودن یک نمار n به A، A'، $\tilde{A}$، $\tilde{A}'$ در فرمولهای (a ــ ۶) و (b ــ ۶) از مکمل N_{III} به‌دست می‌آیند، به‌راست و به‌چپ گسترش داده شود. بدین‌ترتیب، اگر سد n ام تنها باقی مانده باشد، داریم:

$$A_n\, e^{i\alpha[x-(n-1)l]} + A'_n\, e^{-i\alpha[x-(n-1)l]} \quad ; \; x \leqslant (n-1)l - \frac{l}{2} \text{ برای } \qquad (\text{۴})$$

$$\tilde{A}_n\, e^{i\alpha[x-(n-1)l]} + \tilde{A}'_n\, e^{-i\alpha[x-(n-1)l]} \quad ; \; x \geqslant (n-1)l + \frac{l}{2} \text{ برای } \qquad (\text{۵})$$

با:

$$\begin{pmatrix} \tilde{A}_n \\ \tilde{A}'_n \end{pmatrix} = M(\alpha) \begin{pmatrix} A_n \\ A'_n \end{pmatrix} \qquad (\text{۶})$$

که، بادرنظرگرفتن تغییر در نمادگذاری، $M(\alpha)$ همان ماتریس $M(k)$ ی وارد شده در مکمل

N_{III} است . درنتیجه ، درلبه چپ سد n ام ، تابع $\varphi_\alpha(x)$ تعریف شده در (d ـ۳) ، دارای همان مقدار و همان مشتق برهم‌نهش امواج تخت (۴) است . همینطور ، درلبهٔ راست این سد ، دارای همان مقدار و همان مشتق (۵) است . به‌کمک این نتایج می‌توان به‌آسانی شرایط اتصال در ساختار تناوبی را نوشت .

بنابراین ، در لبهٔ چپ اولین سد (یعنی ، در $x = -l/2$) ، کافی‌است توجه‌کنیم که (a ـ۳) دارای همان مقدار وهمان مشتق $A_1\, e^{i\alpha x} + A_1'\, e^{-i\alpha x}$ است ، که از آن بلافاصله نتیجه می‌شود :

$$\begin{cases} A_0 = A_1 \\ A_0' = A_1' \end{cases} \tag{۷}$$

(نتیجه‌ای که از مکمل N_{III} معلوم بود) .

در لبهٔ راست اولین سد ، که همان لبهٔ چپ دومین سد است ، باید $\tilde{A}_1\, e^{i\alpha x} + \tilde{A}'\, e^{-i\alpha x}$ و $A_2\, e^{i\alpha(x-l)} + A_2'\, e^{-i\alpha(x-l)}$ دارای یک مقدار و یک مشتق باشند ، که از آنجا نتیجه می‌شود :

$$\begin{cases} A_2 = \tilde{A}_1\, e^{i\alpha l} \\ A_2' = \tilde{A}_1'\, e^{-i\alpha l} \end{cases} \tag{۸}$$

بطور مشابه ، در محل اتصال سدهای n ام و $(n+1)$ ام ، $\left(x = nl - \frac{l}{2}\right)$ بامساوی قراردادن مقدار و مشتق تابع (۵) با مقدار و مشتق عبارتی که از جایگزین‌کردن n توسط $n+1$ در (۴) به‌دست می‌آید ،داریم :

$$\begin{cases} A_{n+1} = \tilde{A}_n\, e^{i\alpha l} \\ A_{n+1}' = \tilde{A}_n'\, e^{-i\alpha l} \end{cases} \tag{۹}$$

بالاخره ، در لبهٔ راست آخرین سد $\left(x = (N-1)l + \frac{l}{2}\right)$ ، باید (e ـ ۳) و عبارتی که از جایگزین‌کردن n توسط N در (۵) به‌دست می‌آید ، دارای مقادیر ومشتقهای مساوی باشند که از آن نتیجه می‌شود .

$$\begin{cases} C_0 = \tilde{A}_N \\ C_0' = \tilde{A}_N' \end{cases} \tag{۱۰}$$

c ــ ماتریس تقریب زنجیره‌ای $Q(\alpha)$

ماتریس $D(\alpha)$ را که به‌صورت زیر تعریف می‌شود وارد کنیم:

$$D(\alpha) = \begin{pmatrix} e^{i\alpha l} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha l} \end{pmatrix} \tag{۱۱}$$

به‌کمک آن می‌توان شرط اتصال (۹) را به‌شکل:

$$\begin{pmatrix} A_{n+1} \\ A'_{n+1} \end{pmatrix} = D(\alpha) \begin{pmatrix} \tilde{A}_n \\ \tilde{A}'_n \end{pmatrix} \tag{۱۲}$$

یعنی، با توجه به (۶)، به‌شکل:

$$\begin{pmatrix} A_{n+1} \\ A'_{n+1} \end{pmatrix} = D(\alpha)\, M(\alpha) \begin{pmatrix} A_n \\ A'_n \end{pmatrix} \tag{۱۳}$$

نوشت، سپس با تکرار این معادله و بکاربردن (۷)، به‌دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ A_{n+1} \end{pmatrix} &= [D(\alpha)\, M(\alpha)]^n \begin{pmatrix} A_1 \\ A'_1 \end{pmatrix} \\ &= [D(\alpha)\, M(\alpha)]^n \begin{pmatrix} A_0 \\ A'_0 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{۱۴}$$

بالاخره شرط اتصال (۱۰) را می‌توان بااستفاده از (۶) و (۱۴) به‌صورت زیر تبدیل نمود:

$$\begin{pmatrix} C_0 \\ C'_0 \end{pmatrix} = M(\alpha) \begin{pmatrix} A_N \\ A'_N \end{pmatrix} = M(\alpha)[D(\alpha)\, M(\alpha)]^{N-1} \begin{pmatrix} A_0 \\ A'_0 \end{pmatrix} \tag{۱۵}$$

یعنی:

$$\begin{pmatrix} C_0 \\ C'_0 \end{pmatrix} = \underbrace{M(\alpha)D(\alpha)M(\alpha)D(\alpha) \dots D(\alpha)M(\alpha)}_{N \text{ ماتریس } M(\alpha)} \begin{pmatrix} A_0 \\ A'_0 \end{pmatrix} \tag{۱۶}$$

دراین‌فرمول، که به‌ما امکان می‌دهد تا از $\begin{pmatrix} A_0 \\ A'_0 \end{pmatrix}$ به $\begin{pmatrix} C_0 \\ C'_0 \end{pmatrix}$ برویم، یک‌ماتریس $M(\alpha)$ برسد، و یک ماتریس $D(\alpha)$ به‌هرفاصله بین دوسد متوالی وابسته است.

روابط (۱۳) و (۱۴) اهمیت نقش ایفاشده توسط ماتریس:

$$Q(\alpha) = D(\alpha)\, M(\alpha) \tag{۱۷}$$

را که وقتی از $\begin{pmatrix} A_1 \\ A'_1 \end{pmatrix}$ به $\begin{pmatrix} A_{n+1} \\ A'_{n+1} \end{pmatrix}$ می‌رویم ، یعنی ، وقتی انتقالی بادامنه nl درطول ساختار تناوبی انجام می‌دهیم باتوان n ام دارد می‌شود ، نشان می‌دهد . به‌این دلیل ، $Q(\alpha)$ را "ماتریس تقریبب زنجیره‌ای" می‌نامیم از فرمول (۱۸) از مکمل $\mathrm{N_{III}}$ و عبارت (۱۱) برای $D(\alpha)$ ، به‌دست می‌آید:

$$Q(\alpha) = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{i\alpha l} F(\alpha) & \mathrm{e}^{i\alpha l} G^*(\alpha) \\ \mathrm{e}^{-i\alpha l} G(\alpha) & \mathrm{e}^{-i\alpha l} F^*(\alpha) \end{pmatrix} \tag{۱۸}$$

اگر طوری تغییر پایه دهیم که $Q(\alpha)$ قطری شود ، محاسبه $[Q(\alpha)]^n$ ساده‌می‌شود ، به‌این دلیل ویژه مقدارهای $Q(\alpha)$ را مورد مطالعه قرارخواهیم داد .

d ــ ویژه مقدارهای $Q(\alpha)$

فرض کنید λ یک ویژه مقدار $Q(\alpha)$ باشد . معادلهٔ مشخصه ماتریس (۱۸) بـه‌صورت:

$$[\mathrm{e}^{i\alpha l} F(\alpha) - \lambda]\, [\mathrm{e}^{-i\alpha l} F^*(\alpha) - \lambda] - |G(\alpha)|^2 = 0 \tag{۱۹}$$

یعنی ، با در نظر گرفتن رابطهٔ (۲۱) از مکمل $\mathrm{N_{III}}$ ، :

$$\lambda^2 - 2\lambda\, X(\alpha) + 1 = 0 \tag{۲۰}$$

نوشته می‌شود که درآن $X(\alpha)$ عبارت است از قسمت حقیقی عدد مختلط $\mathrm{e}^{i\alpha l} F(\alpha)$:

$$X(\alpha) = \mathrm{Re}\,[\mathrm{e}^{i\alpha l} F(\alpha)] = \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}\; Q(\alpha) \tag{۲۱}$$

یادآور شویم [رک مکمل $\mathrm{N_{III}}$ ، رابطه (۲۱)] که مدول $F(\alpha)$ بزرگتر از ۱ است ، بنابراین همین مطلب در باره مدول $\mathrm{e}^{i\alpha l} F(\alpha)$ نیز صادق است .

مبین معادله درجه دوم (۲۰) عبارت است از:

$$\Delta' = [X(\alpha)]^2 - 1 \tag{۲۲}$$

در این صورت دوحالت ممکن است اتفاق بیفتد:

(۱) اگر انرژی E طوری باشد که:

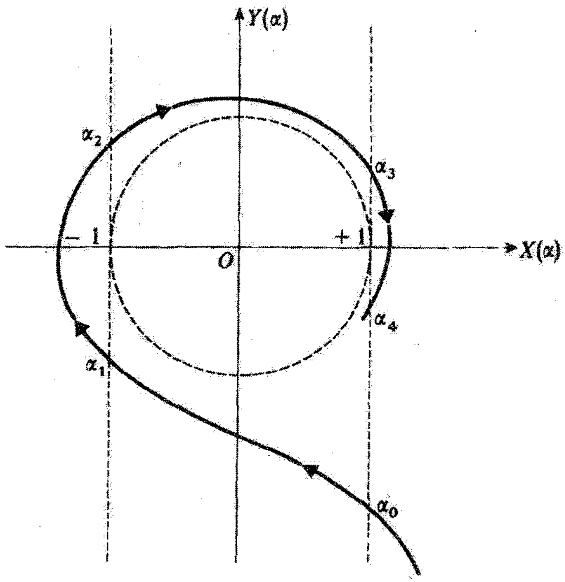
$$|X(\alpha)| \leqslant 1 \tag{۲۳}$$

(به‌عنوان مثال، اگر در شکل۲، α بین α_0 و α_1 باشد)، می‌توان قرارداد:

$$X(\alpha) = \cos\,[k(\alpha)l] \tag{۲۴}$$

با:

$$0 \leqslant k(\alpha) \leqslant \frac{\pi}{l} \tag{۲۵}$$



شکل۲.

تغییرات عدد مختلط $e^{i\alpha l}F(\alpha) = X(\alpha) + iY(\alpha)$ نسبت به α. چون $|F(\alpha)| > 1$، منحنی به‌دست آمده درصفحهٔ مختلط در خارج دایره‌ای به‌مرکز O و شعاع واحد قرار می‌گیرد. بحث بعدی نشان می‌دهد که اگر $|X(\alpha)|$ کوچکتر از ۱ باشد، یعنی اگر مقدار α ی انتخاب شده نقطه‌ای از منحنی واقع بین‌دو خطچین قائم در شکل را بدهد، انرژی متناظر باآن در یک "نوار مجاز" قرار می‌گیرد. درمورد مخالف با آن، در یک "نوار ممنوع" واقع می‌شود.

سپس یک محاسبه ساده نشان می‌دهدکه ویژه مقدارهای $Q(\alpha)$ توسط رابطهٔ زیرداده‌می‌شوند:

$$\lambda = e^{\pm ik(\alpha)l} \tag{۲۶}$$

بنابراین دو ویژه مقدار همیوغ مختلط با مدول ۱ وجود دارد.

(۲) از طرف دیگر، اگر انرژی E مقداری از α را بدهد که داشته باشیم:

$$|X(\alpha)| > 1 \tag{۲۷}$$

(به‌عنوان مثال، اگر در شکل ۲، α بین α_1 و α_2 باشد)، قرار می‌دهیم:

$$X(\alpha) = \varepsilon \cosh [\rho(\alpha)l] \tag{۲۸}$$

که در آن:

$$\rho(\alpha) \geqslant 0 \tag{۲۹}$$

$\varepsilon = +1$ اگر $X(\alpha)$ مثبت و $\varepsilon = -1$ اگر $X(\alpha)$ منفی باشد. در این صورت داریم:

$$\lambda = \varepsilon\, e^{\pm \rho(\alpha)l} \tag{۳۰}$$

در این مورد، هردو ویژه مقدار $Q(\alpha)$ حقیقی، و عکس یکدیگرند.

۳ ــ بحث فیزیکی: مفهوم نوار انرژی مجاز و نوار انرژی ممنوع

a ــ رفتار تابع موج $\varphi_\alpha(x)$

برای اعمال (۱۴)، ابتدا دوماتریس ستونی $\Lambda_1(\alpha)$ و $\Lambda_2(\alpha)$ وابسته به‌ویژه‌بردارهای $Q(\alpha)$ را که به‌ترتیب باویژه مقدارهای λ_1 و λ_2 متناظرند، محاسبه می‌کنیم. سپس ماتریس $\begin{pmatrix} A_1 \\ A_1' \end{pmatrix}$ را بصورت زیر می‌نویسیم:

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ A_1' \end{pmatrix} = c_1(\alpha)\Lambda_1(\alpha) + c_2(\alpha)\Lambda_2(\alpha) \tag{۳۱}$$

که از آن می‌توان بلافاصله به‌دست آورد:

$$\begin{pmatrix} A_n \\ A_n' \end{pmatrix} = \lambda_1^{n-1}c_1(\alpha)\Lambda_1(\alpha) + \lambda_2^{n-1}c_2(\alpha)\Lambda_2(\alpha) \tag{۳۲}$$

از این عبارت روشن است که رفتار تابع موج ، بسته به‌اینکه ، در قلمرو انرژی تابع موج ،$|X(\alpha)|$ کوچکتر یا بزرگتر از ۱ باشد ، بسیار متفاوت است . در مورد اول ، فرمول (۲۶) نشان می‌دهدکه اثرعبور ازسدهای متوالی توسط یک انتقال فاز درمؤلفه‌های ماتریس ستونی $\begin{pmatrix} A_n \\ A' \end{pmatrix}$ نسبت به $A_1(\alpha)$ و $A_2(\alpha)$ بیان می‌شود . رفتار $\varphi_\alpha(x)$ در اینجا یادآور رفتار یک برهم‌نهش ازتوابع نمایی موهومی است . برعکس، اگر انرژی‌طوری‌باشدکه $|X(\alpha)| > 1$ باشد ، فرمول (۳۰) نشان می‌دهد که فقط یکی ازویژه مقدارها (به‌عنوان مثال ، λ_1) مدولی بزرگتر از ۱ دارد . در نتیجه ، برای n بقدر کافی بزرگ ، داریم :

$$\begin{pmatrix} A_n \\ A'_n \end{pmatrix} \simeq \varepsilon^{n-1}\, e^{(n-1)\rho(\alpha)l}\, c_1(\alpha)\, A_1(\alpha) \tag{۳۳}$$

بنابراین ، A_n و A'_n به‌طور نمائی با n افزایش می‌یابند [بجز در مورد خاصی که $c_1(\alpha) = 0$ باشد] ، دراین صورت مدول تابع موج $\varphi_\alpha(x)$ با عبور ازسدهای متوالی‌افزایش می‌یابد ، و رفتارش یادآور رفتار برهم نهشی از توابع نمایی حقیقی است .

b ــ انعکاس براگ ، انرژیهای ممکن یک ذره در یک پتانسیل تناوبی

انتظار داریم که بسته به‌اینکه $\varphi_\alpha(x)$ مانند برهم نهشی از توابع نمائی حقیقی یا مانند برهم‌نهشی ازتوابع نمائی موهومی رفتارکند ، پدیده‌های حاصله بسیارمتفاوت باشند . به‌عنوان مثال ، ضریب عبور $T_N(\alpha)$ برای N سد یکسان را محاسبه کنیم . رابطهٔ (۱۵)نشان می‌دهد که ماتریس $[Q(\alpha)]^{N-1}$ $M(\alpha)$ برای این N سد ، نقش مشابهی با‌نقش $M(\alpha)$ برای‌یک‌سد تنها ایفا می‌کند . برطبق رابطهٔ (b ــ ۲۹) از مکمل $\mathrm{N_{III}}$ ، ضریب عبور $T(\alpha)$ برحسب‌عنصری از این ماتریس که در سطر اول و ستون‌اول قرار دارد بیان شده‌است [معکوس $T_N(\alpha)$ برابر است با مجذور مدول این عنصر] . حال ، اگر انرژی E ی ذره طوری انتخاب شده باشدکه ویژه مقدارهای $Q(\alpha)$ حقیقی باشند ، یعنی ، توسط(۳۰) داده شوند ، چه اتفاق می‌افتد؟ وقتی N بقدر کافی بزرگ‌شود ، ویژه مقدار $\lambda_1 = \varepsilon\, e^{\rho(\alpha)l}$ غالب‌می‌شود، و ماتریس $[Q(\alpha)]^{N-1}$ به‌طور نمائی با N افزایش می‌یابد [همانطوری که می‌توان از رابطه (۳۳) دید] . در نتیجه ضریب عبور به‌طور نمائی کاهش می‌یابد :

$$T_N(\alpha) \propto e^{-2N\rho(\alpha)l} \tag{۳۴}$$

دراین مورد، برای مقادیر بزرگ N ، مجموعهٔ N سد پتانسیل عملا "به‌طور قطع ذره را منعکس می‌کنند. این مطلب توسط این واقعیت تشریح می‌شود که امواج پراکنده شده توسط سدهای پتانسیل مختلف، برای موج عبوری به‌طور کاملا" کاهنده و برای موج بازتابی به‌طور کاملا" سازنده تداخل می‌کنند. ازاین‌رو می‌توان این‌پدیده را با انعکاس براگ تشبیه کرد. بعلاوه، توجه کنید که این تداخل کاهنده برای موج عبوری، می‌تواند حتی اگر انرژی E ازارتفاع سد بزرگتر باشد (موردی که، در مکانیک کلاسیک، ذره عبورمی‌کند) ایجادشود.

مع‌ذالک، اگر ضریب عبور یک سد منزوی، خیلی نزدیک به ۱ باشد، داریم $|F(\alpha)| \simeq 1$ [به‌عنوان مثال، درشکل۲، اگر α ، یعنی انرژی، به‌سمت بینهایت میل کند داریم $|F(\alpha)| \longrightarrow 1$] . دراین صورت نقطهٔ معرف عدد مختلط $e^{i\alpha l}F(\alpha)$ بسیار نزدیک به‌دایره‌ای به‌شعاع واحد و بمرکز O است. شکل۲ نشان می‌دهد که ناحیه‌هایی ازمحورانرژی که درآنها $|X(\alpha)| > 1$ است، یعنی، جائی که انعکاس کلی رخ می‌دهد، بسیار باریک‌اند و می‌توانند عملا" به‌عنوان مقادیر منزوی انرژی درنظر گرفته شوند. این‌مطلب‌ازنظرفیزیکی توسط این واقعیت توصیف می‌شود که اگر انرژی ی ذره فرودی خیلی بزرگتر از دامنهٔ تغییرات پتانسیل $V(x)$ باشد، تکانهٔ آن کاملا" معین‌است، چون طول موج وابسته به‌آن کاملا" معین است دراین صورت شرط براگ $l = n\frac{\lambda}{2}$ (که درآن n یک عدد درست است) مقادیر کاملا" معین انرژی را به‌دست می‌دهد.

برعکس، اگر انرژی E ی ذره در محدوده‌ای قرار گیرد که درآن ویژه مقدارها، مانند (۲۶)، دارای مدول ۱ باشند، عناصر ماتریس $[Q(\alpha)]^{N-1}$ دیگر وقتی N به‌سمت بینهایت میل می‌کند، به‌سمت بینهایت میل نخواهندکرد. تحت این‌شرایط، ضریب عبور $T_N(\alpha)$ باافزایش تعداد سدها، به‌سمت صفر میل نمی‌کند. این بار نیز با یک پدیدهٔ صرفا" کوانتومی‌مواجهیم، که به‌طبیعت موجی تابع موج مربوط می‌شود وباعث می‌شودکه تابع موج، بدون اینکه به‌طور نمائی کاهش پیدا کند، در ساختار پتانسیل تناوبی منظم انتشار یابد. مخصوصا" توجه کنیدکه ضریب عبور $T_N(\alpha)$ باحاصلضرب ضرائب عبور سدهای انفرادی بسیار متفاوت است (این حاصلضرب، وقتی $N \longrightarrow \infty$ ، به‌سمت صفر میل می‌کند زیراتمام ضریبها کوچکتر از ۱ هستند).

مسألهٔ جالب دیگری که مخصوصا" در فیزیک حالت جامد باآن مواجه می‌شویم، کوانتش ترازهای انرژی برای ذره‌ای است که در یک مجموعه چاههای پتانسیل یکسان و متساوی الفاصله، یعنی یک پتانسیل $V(x)$ بایک ساختار تناوبی، قرار دارد. این مسأله دقیقا" دربخش۳ مورد مطالعه قرار خواهد گرفت، لیکن، از همین حالا می‌توانیم شکل‌طیف انرژیهای ممکن را حدس بزنیم. اگر فرض کنیم‌انرژی ذره طوری باشد که $|X(\alpha)| > 1$ باشد،

معادله (۳۳) نشان میدهدکه وقتی $n \longrightarrow \infty$ ، ضرائب A_n و A'_n بینهایت می‌شوند . واضح است که این امکان باید مردود شمرده شود . زیرا درآن تابع موج کراندار نمی‌ماند .ازاین‌رو انرژیهای متناظر باآن‌ممنوعند ، به‌این‌دلیل ، به‌محدوده‌هائی از انرژی که برای آن $|X(\alpha)| > 1$ است نام نوارهای ممنوع داده شده است . از طرف دیگر ، اگر انرژی‌ذره طوری باشد که $|X(\alpha)| < 1$ باشد ، وقتی $n \longrightarrow \infty$ ، A_n و A'_n کراندار می‌مانند ، نواحی متناظر از محور انرژیها نوارهای مجاز نامیده می‌شدند . به‌طور خلاصه ، طیف انرژی تشکیل شده است از بازه‌های محدودی که تمام انرژیهای داخل آنها قابل قبولند ، و توسط نواحی‌ای که انرژیهای آنها ممنوع است از یکدیگر جدا شده‌اند .

۳ ــ کوانتش ترازهای انرژی در یک پتانسیل با ساختار تناوبی ،
اثر شرایط مرزی

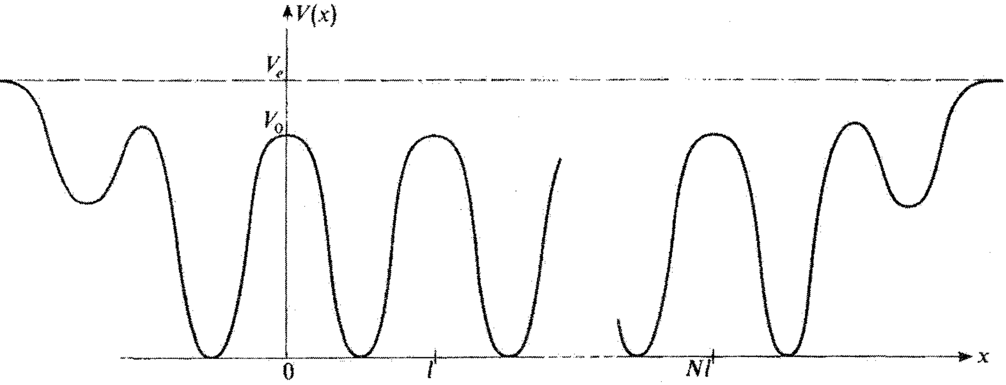
ذره‌ای به‌جرم m در نظر بگیرید که در پتانسیل $V(x)$ نشان داده شده در شکل ۳ قرار دارد . $V(x)$ ، در ناحیه $-\frac{l}{2} \leqslant x \leqslant Nl + \frac{l}{2}$ به‌شکل یک تابع تناوبی است ، که از $N + 1$ سد متوالی به‌ارتفاع V_0 و متمرکز در $x = 0, l, 2l, ..., Nl$ تشکیل شده است . در خارج این ناحیه ، $V(x)$ در فاصله‌ای در حدود l تغییرات دلخواهی پیدا می‌کند ، سپس برابر مقدار ثابت مثبت V_e می‌شود . در آنچه به‌دنبال می‌آید ، ناحیه $[0, Nl]$ "داخل شبکه" و نواحی حدی $x \simeq -\frac{l}{2}$ و $x \simeq Nl + \frac{l}{2}$ " دوانتها (یا لبه‌های) شبکه" نامیده خواهند شد .

از نظر فیزیکی ، یک چنین تابع $V(x)$. ای می‌تواند معرف پتانسیلی باشد که توسط یک الکترون دریک ملکول خطی یا در یک بلور (دریک مدل یک بعدی) دیده می‌شود .دراین صورت چاههای پتانسیل واقع در $x = \frac{l}{2}, \frac{3l}{2}, ...$ متناظرند با جذب الکترون توسط یونهای مختلف . دور از بلور (یا ملکول) ، الکترون دیگر تحت تاثیر هیچ نیروی جاذبه‌ای نیست ، به‌همین دلیل است که $V(x)$ در خارج ناحیهٔ $-\frac{l}{2} \leqslant x \leqslant Nl + \frac{l}{2}$ به‌سرعت مقدار ثابتی می‌شود .

پتانسیل $V(x)$ ای که انتخاب کرده‌ایم کاملا" در چارچوب مکمل M_{III} (بجز تغییری در مبداء انرژی) قرار می‌گیرد . بنابراین ، می‌دانیم که حالتهای مقید ذره طیف‌گسسته‌ای ازانرژی به‌دست می‌دهندکه همگی‌کوچکتر از V_e هستند . بااین‌وجود، پتانسیل $V(x)$ انتخاب شده دراینجا دارای این ویژگی برجسته نیز هست‌که دارای ساختار تناوبی از نوع بررسی‌شده دربخش ۱ دربالا است ، با تکیه برنتایج این بخش، نشان خواهیم داد که نتیجه‌گیریهای مکمل M_{III} شکل خاصی دراین‌مورد به‌خود می‌گیرند . به‌عنوان مثال ،درمکمل

M_{III} این واقعیت را مورد تاکید قرار دادیم که این شرایط مرزی [وقتی $x \longrightarrow \pm\infty$ ، $\varphi(x) \longrightarrow 0$] هستند که‌کوانتش ترازهای انرژی را وارد می‌کنند . بنابراین می‌توانیم انتظار داشته باشیم‌که شرایط مرزی مساله‌ای‌که دراینجا موردمطالعه قرار می‌دهیم ، یعنی ، تغییرات پتانسیل در لبه‌های شبکه ، نقشی اساسی در تعیین انرژیهای ممکن ایفا کنند . در واقع ، به‌هیچوجه این چنین نیست : خواهیم دید که این انرژیها ، عملا" فقط به‌مقادیر $V(x)$ در ناحیه‌ای‌که تناوبی‌است بستگی دارند و نه به‌آثار لبه‌ای (البته مشروط برآنکه تعدادچاههای پتانسیل بقدر کافی زیاد باشد) . بعلاوه ، با نشان‌دادن اینکه اغلب انرژیهای ممکن در نوارهای انرژی مجاز گرد می‌آیند ، نتیجه‌ای را که در بخش b ـ۲ به‌طور مکاشفه‌ای و بدون استدلال به‌دست‌آوردیم ، اثبات خواهیم‌کرد . تنها چند حالت مانا ، جایگزیده درنزدیکی لبه‌ها ، بطور جدی به‌تغییرات $V(x)$ در این ناحیه بستگی دارند و می‌توانند انرژی‌ای داشته باشند که در نوار ممنوع واقع شود .

بنابراین ، اساسا" مانند مکمل M_{III} عمل خواهیم‌کرد ، و ابتدا بطور دقیق شرایطی را که به‌تابع موج $\varphi_\alpha(x)$ یک حالت مانا تحمیل می‌شود بررسی خواهیم کرد .



شکل ۳.

تغییرات پتانسیل دیده شده توسط یک الکترون در" یک بلور یک بعدی" و روی لبه‌های آن نسبت به x در داخل بلور ، پتانسیل یک ساختارتناوبی دارد ، $V(x)$ بین یونها (سدهای واقع در $x = 0, l, 2l, ...$) دارای ماگزیمم و در محل یونها (چاههای واقع در $x = l/2, 3l/2, ...$) دارای می‌نیمم‌است . روی لبه‌های بلور ، $V(x)$ درمسافتی درحدود l بطور کم و بیش پیچیده‌ای تغییر می‌کند ، سپس سریعا" به‌مقدار ثابت V_e میل می‌کند .

a ــ شرایط تحمیل شده به‌تابع موج

درناحیه‌ای که $V(x)$ تناوبی است ، رابطهٔ (d ــ ۳) شکل تابع موج $\varphi_\alpha(x)$ را به‌دست می‌دهد ، ضرائب A_n و A'_n از (۳۲) تعیین می‌شوند . برای اینکه (۳۲) را صریحتر بنویسیم ، قرار دهیم :

$$c_1(\alpha)A_1(\alpha) = \begin{pmatrix} f_1(\alpha) \\ f'_1(\alpha) \end{pmatrix}$$
$$c_2(\alpha)A_2(\alpha) = \begin{pmatrix} f_2(\alpha) \\ f'_2(\alpha) \end{pmatrix} \quad (۳۵)$$

در این صورت به‌دست می‌آوریم :

$$\begin{aligned} A_n &= f_1(\alpha)\, \lambda_1^{n-1} + f_2(\alpha)\, \lambda_2^{n-1} \\ A'_n &= f'_1(\alpha)\, \lambda_1^{n-1} + f'_2(\alpha)\, \lambda_2^{n-1} \end{aligned} \quad (۳۶)$$

حال ، شرایط مرزی روی تابع موج $\varphi_\alpha(x)$ را بررسی کنیم . درطرف چپ ، دورازشبکه $V(x)$ برابر است با V_e و $\varphi_\alpha(x)$ به‌صورت زیر نوشته می‌شود :

$$\varphi_\alpha(x) = B\, e^{\mu(\alpha)x} \quad (۳۷\text{ــ a})$$

با :

$$\mu(\alpha) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_e - E)} \quad (۳۷\text{ــ b})$$

(جواب $e^{-\mu(\alpha)x}$ را که برای $x \longrightarrow -\infty$ واگرا می‌شود حذف کرده‌ایم) . جریان احتمال وابسته به‌تابع (۳۷) صفراست (رک مکمل B_{III} ، بخش ۱) . حال ، برای یک‌حالت مانا ،این جریان مستقل از x است [رک مکمل N_{III} ، رابطه (۱۲)] ، بنابراین برای تمام x ها ،حتی داخل شبکه ، صفر است . در نتیجه ، برطبق رابطهٔ (۱۴) از مکمل N_{III} ، ضرائب A_n و A'_n لزوماً دارای یک مدول هستند . بنابراین ، اگر بخواهیم شرایط مرزی در طرف چپ را به‌صورت روابطی بین ضرائب A_1 و A'_1 بیان کنیم [یعنی ، بنویسیم که عبارت $\varphi_\alpha(x)$ برای $-\frac{l}{2} \leqslant x \leqslant \frac{l}{2}$ گسترش تابع موج (۳۷) است] ، رابطه‌ای به‌صورت زیر پیدا می‌کنیم :

$$\frac{A_1}{A'_1} = e^{i\chi(\alpha)} \quad (۳۸\text{ــ a})$$

که $\chi(\alpha)$ یک تابع حقیقی از α (و بنابراین تابعی از انرژی E) است که به‌رفتار دقیق $V(x)$ در لبه طرف چپ شبکه بستگی دارد [در آنچه به‌دنبال می‌آید ، به‌عبارت دقیق این تابع $\chi(\alpha)$ نیازی نخواهیم داشت ، نکته اساسی این است که شرایط مرزی در طرف چپ به‌شکل (a ــ۳۸) باشند] .

همین نوع استدلال می‌تواند به‌طرف راست $(x \longrightarrow +\infty)$ اعمال می‌شود ، شرایط مرزی در این طرف به‌صورت زیر نوشته می‌شود :

$$\frac{A_{N+1}}{A'_{N+1}} = e^{i\chi'(\alpha)} \tag{۳۸ــb}$$

که در آن تابع حقیقی $\chi'(\alpha)$ به‌رفتار $V(x)$ در لبهٔ طرف راست شبکه بستگی دارد .

به‌طور خلاصه ، می‌توان گفت کــه کوانتش ترازهای انرژی می‌تواند به‌طریق زیر به‌دست آید :

ــ ابتدا ازدوضریب A_1 و A'_1 که در (a ــ۳۸) صدق می‌کنند شروع می‌کنیم ، این‌امر ما را مطمئن می‌سازد که تابع $\varphi_\alpha(x)$ ، وقتی $x \longrightarrow -\infty$ ، کراندار می‌ماند . چون $\varphi_\alpha(x)$ با تقریب یک ضریب ثابت تعریف می‌شود ، می‌توانیم ، به‌عنوان مثال ، ضرائب A_1 و A'_1 را به‌صورت زیر انتخاب کنیم :

$$\begin{aligned} A_1 &= e^{i\chi(\alpha)/2} \\ A'_1 &= e^{-i\chi(\alpha)/2} \end{aligned} \tag{۳۹}$$

ــ سپس ، بااستفاده از (۳۶) ، ضرائب A_n و A'_n را محاسبه‌می‌کنیم تاتابع موج‌انتخاب شده را به‌تمام بلور گسترش دهیم . توجه کنید که از شرط (۳۹) برمی‌آید که $\varphi_\alpha(x)$ حقیقی است (رک مکمل N_{III} ، بخش b ــ۱) ، بنابراین ، محاسبهٔ A_n و A'_n باید نتیجهٔ زیررا بدهد :

$$A'_n = A^*_n \tag{۴۰}$$

ــ بالاخره ، می‌نویسیم که ضرائب A_{N+1} و A'_{N+1} در (b ــ۳۸) ، رابطه‌ای کــه ما را مطمئن می‌سازد که $\varphi_\alpha(x)$ برای $x \longrightarrow +\infty$ کراندار می‌ماند ، صدق می‌کنند . در واقــع ، رابطهٔ (۴۰) نشان می‌دهد که نسبت A_{N+1}/A'_{N+1} خودبخود یک عدد مختلط با مدول واحد است ، بنابراین ، شرط (b ــ۳۸) به‌تساوی فازهای دوعددمختلط تقلیل‌می‌یابد . بدین‌ترتیب یک معادله حقیقی برای α به‌دست می‌آوریم‌که دارای تعدادی جواب حقیقی‌است‌که‌انرژیهای مجاز را می‌دهند .

این روش را به‌کارخواهیم بست ، و در عین حــال بین دومورد ، ویژه مقدارهــای

حقیقی $Q(\alpha)$ [موردی که در آن $|X(\alpha)| < 1$ است] و ویژه مقدارهای موهومی [موردی که در آن $|X(\alpha)| > 1$] ، تفاوت قائل می‌شویم .

b ــ نوارهای انرژی مجاز :

حالتهای مانای ذره در داخل شبکه

ابتدا فرض کنید انرژی E در ناحیه‌ای باشد که در آن $|X(\alpha)| < 1$.

α . شکل معادلهٔ کوانتش

با در نظر گرفتن (۲۶) ، روابط (۳۶) به‌صورت زیر در می‌آیند :

$$\begin{cases} A_n = f_1(\alpha)\, e^{i(n-1)k(\alpha)l} + f_2(\alpha)\, e^{-i(n-1)k(\alpha)l} \\ A'_n = f'_1(\alpha)\, e^{i(n-1)k(\alpha)l} + f'_2(\alpha)\, e^{-i(n-1)k(\alpha)l} \end{cases} \tag{۴۱}$$

هم‌چنین دیدیم که انتخاب (۳۹) برای A_1 و A'_1 دلالت براین دارد که برای تمام n ها $A'_n = A^*_n$. به‌آسانی می‌توان نشان داد که روابط (۴۱) فقط هنگامی دوعدد مختلط همیوغ می‌دهند که داشته باشیم :

$$\begin{aligned} f^*_1(\alpha) &= f'_2(\alpha) \\ f^*_2(\alpha) &= f'_1(\alpha) \end{aligned} \tag{۴۲}$$

در این صورت شرط (b ــ ۳۸) می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود :

$$\frac{f_1(\alpha)\, e^{2iNk(\alpha)l} + f_2(\alpha)}{f^*_2(\alpha)\, e^{2iNk(\alpha)l} + f^*_1(\alpha)} = e^{i\chi'(\alpha)} \tag{۴۳}$$

این معادله برای α معادله‌ای است که کوانتش ترازهای انرژی را می‌دهد . برای حل آن ، قرار دهیم :

$$\Theta(\alpha) = \mathrm{Arg}\left\{ \frac{f^*_1(\alpha)\, e^{i\chi'(\alpha)/2} - f_2(\alpha)\, e^{-i\chi'(\alpha)/2}}{f_1(\alpha)\, e^{-i\chi'(\alpha)/2} - f^*_2(\alpha)\, e^{i\chi'(\alpha)/2}} \right\} \tag{۴۴}$$

[$\Theta(\alpha)$ می‌تواند ، در اصل ، از $\chi(\alpha)$ ، $\chi'(\alpha)$ و ماتریس $Q(\alpha)$ محاسبه شود] . دراین صورت

معادلهٔ (۴۳) می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود:

$$e^{2iNk(\alpha)l} = e^{i\Theta(\alpha)} \qquad (۴۵)$$

بنابراین، ترازهای انرژی توسط رابطهٔ زیر داده می‌شوند:

$$k(\alpha) = \frac{\Theta(\alpha)}{2Nl} + p\frac{\pi}{Nl} \qquad (۴۶)$$

با:

$$p = 0, 1, 2, \ldots, (N-1) \qquad (۴۷)$$

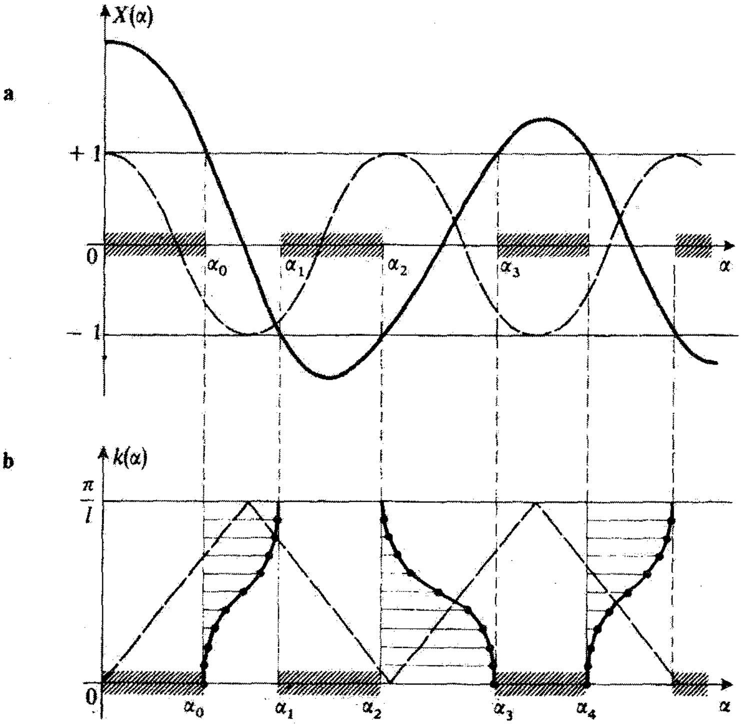
[سایر مقادیر p باید مستثنی شوند زیرا شرط (۲۵) در اینجا $k(\alpha)$ را وادار می‌کند که در داخل بازه‌ای به‌پهنای π/l تغییر کند] . از همین حالا می‌توانیم به‌بینیم که اگر N بسیار بزرگ باشد، می‌توانیم معادلهٔ (۴۶) را به‌شکل ساده شدهٔ زیر بنویسیم.

$$k(\alpha) \simeq p\frac{\pi}{Nl} \qquad (۴۸)$$

β ــ حل نموداری، تعیین ترازهای انرژی

اگر تعریف (۲۴) از $k(\alpha)$ را در (۴۶) قرار دهیم، معادله‌ای برحسب α به‌دست می‌آوریم که انرژیهای مجاز را به‌دست می‌دهد. برای حل نموداری این معادله، ابتدا منحنی نمایش تابع $X(\alpha) = \text{Re}\,[e^{i\alpha l}F(\alpha)]$ را رسم می‌کنیم. به‌علت تابع نمائی موهومی $e^{i\alpha l}$ ، انتظار داریم که این منحنی دارای رفتاری نوسانی، از نوع نشان داده شده درشکل a ــ۴ باشد. چون $|F(\alpha)|$ بزرگتر از ۱ است [رک مکمل N_{III} ، رابطهٔ (۳۲)] ، دامنه‌نوسانات بزرگتر از ۱ می‌باشد، بطوری که این منحنی دوخط راست $X(\alpha) = \pm 1$ را در مقادیر معین α_0 ، α_1 ، α_2 ، . . . از متغیر α قطع می‌کند. سپس تمام ناحیه‌هائی ازمحور α را که‌توسط این مقادیر محصور می‌شوند، و برای آنها شرط $|X(\alpha)| < 1$ برقرار نیست، حذف می‌کنیم. با توجه به‌مجموعه کمانهای منحنی‌هایی که به‌این ترتیب برای $X(\alpha)$ به‌دست‌آورده‌ایم، باید تابع زیر را نشان دهیم:

$$k(\alpha) = \frac{1}{l}\,\text{Arc}\cos X(\alpha) \qquad (۴۹)$$



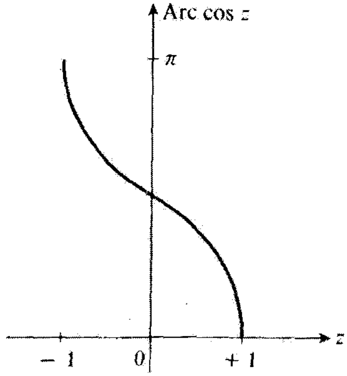
شکل ۴ .

تغییرات $k(\alpha) = \frac{1}{l}$ Arc cos $[X(\alpha)]$ و ($X(\alpha) = \mathrm{Re}[F(\alpha)\,e^{i\alpha l}]$ شکل ۲ را به‌بینید) نسبت به α . مقادیر α (یعنی، مقادیر انرژی E) وابسته به‌حالتهای مانا (اگر $N \gg 1$ باشد) عملاً" باقطع دادن منحنی نمایش $k(\alpha)$ با خطوط افقی به‌معادلات $y = p\pi/Nl(p = 0, 1, 2, \dots N - 1$ به‌دست می‌آید . بدین‌ترتیب نوارهای مجاز، هریک شامل N تراز خیلی نزدیک به‌یکدیگر (بازه‌های $\alpha_0 \leqslant \alpha \leqslant \alpha_1$ و غیره) . و نوارهای‌ممنوع (نواحی‌هاشورزده‌شده $\alpha_1 < \alpha < \alpha_2$ وغیره) ظاهر می‌شوند .

منحنی‌های خط‌چین متناظرند با مورد خاصی که $V(x) = 0$ باشد (یک‌ذره‌ٔ آزاد) .

با درنظر گرفتن شکل تابع آرک کسینوسی (رک شکل ۵) ، به‌منحنی‌ای می‌رسیم که رفتارآن در شکل ۴ــb نشان داده شده است . معادلهٔ (۴۶) می‌رساند که ترازهای انرژی متناظرند با محل تقاطع این‌منحنی بامنحنی‌های نمایانگر توابع $\frac{\Theta(\alpha)}{2Nl} + p\,\frac{\pi}{Nl}$ ، یعنی ، اگر $N \gg 1$ باشد، با خطوطی به‌معادلات $y = p\,\frac{\pi}{Nl}$ ($p = 0, 1, 2, \dots, N-1$) .

بدین ترتیب گروههایی از N تراز به‌دست می‌آوریم ، که به‌مقادیر متساوی الفاصله $k(\alpha)$ وابسته‌اند و در نوارهای مجازی که توسط $\alpha_0 \leqslant \alpha \leqslant \alpha_1$ ، $\alpha_2 \leqslant \alpha \leqslant \alpha_3$ و غیره تعریف می‌شوند واقع شده‌اند . بین این نوارهای مجاز ، نوارهای ممنوع قرار دارند (خواص آنها را در بخش c بررسی خواهیم کرد) .

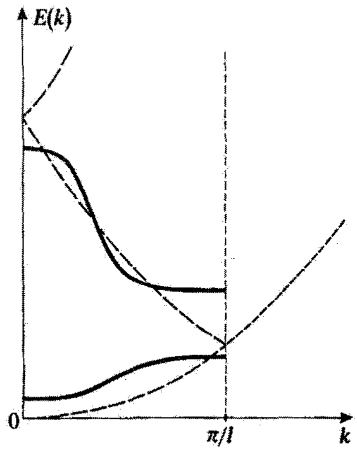


شکل ۵ .
تابع آرک کسینوسی .

اگر یک نوار مجاز بخصوص را در نظر بگیریم ، می‌توانیم محل هرتراز را از مقدار $k(\alpha)$ ی متناظر باآن پیداکنیم . این امر منجر به‌انتخاب k به‌عنوان متغیر و α و ، درنتیجه E به‌عنوان توابع $\alpha(k)$ و $E(k)$ از k می‌شود . تغییرات α نسبت به k مستقیما " توسط منحنی شکل b ـ ۴ داده می‌شود ، بنابراین برای به‌دست آوردن انرژی $E(k)$ کافی است تابع $\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}$ را محاسبه‌کنید . منحنی متناظر در شکل ۶ نشان داده شده است .

گوشزد :

شکل b ـ۴ به‌وضوح نشان می‌دهد که ، به‌یک مقدار معین k ، چندین مقدار α و در نتیجه چندین مقدار انرژی متناظر است ، به‌همین دلیل است که چندین مقدار انرژی متناظر است ، به‌همین دلیل است که چندین کمان در شکل ۶ ظاهر شده است . مع ذالک ، اگر درداخل یک نوار مجاز معین ، $X(\alpha)$ بطوریکنواخت از ۱ ــ تا ۱+ افزایش یابد (یا بطوریکنواخت از ۱+ تا ۱ــ کاهش یابد) ، تنها یک تراز انرژی به‌هرمقدار k برای این نوار متناظر است ، و **این نوار شامل N تراز انرژی است .**



شکل ۶.
تغییرات انرژی نسبت به‌فراسنج k . خطوط پرمتناظرند بااولین دونوار مجاز (مقادیر k که ترازهای انرژی را می‌دهند درداخل بازهٔ $0 \leqslant k \leqslant \pi/l$. متساوی‌الفاصله‌اند) . خط چین‌ها مربوط به‌مورد خاصی هستند که پتانسیل $V(x)$ صفر است (یک ذره آزاد) ، نوارهای مجاز هم مرزاند و هیچ نوار ممنوعی وجود ندارد .

γ . بحث

محاسبات اخیر نشان می‌دهد که چگونه ، وقتی از $N = 1$ به‌مقادیر بسیار بزرگ N می‌رویم ، به‌تدریج از یک دسته ترازهای انرژی گسسته به‌نوارهای مجاز می‌رسیم . در واقع ، این نوارها ازترازهای گسسته تشکیل شده‌اند ، ولی فاصله‌آنها برای یک شبکهٔ ماکروسکوپیکی آنقدر کوچک است کـه عملاً" یک پیوستار تشکیل می‌دهند . وقتی k به‌عنوان یک فراسنج درنظر گرفته شود ، چگالی حالتها (تعداد انرژیهای ممکن در واحد بازهٔ k) ثابت وبرابر Nl/π است . این خاصیت ، که بسیار مفید است ، تشریح می‌کند که چرا عموما" k را به‌عنوان متغیر انتخاب می‌کنیم .

در رفتن از (۴۶) به (۴۸) یک نکته مهم بروز می‌کند : وقتی N بزرگ‌است ، آثار لبه‌ای شبکه ، که تنها از طریق توابع $\chi(\alpha)$ ، $\chi'(\alpha)$ و در (۴۶) ، $\Theta(\alpha)$ وارد می‌شوند ، دیگر هیچ نقشی ندارند ، فقط شکل پتانسیل تناوبی در داخل شبکه است که در تعیین انرژیهای ممکن ، اهمیت دارد . دومورد حدی زیر جالب توجه است :

(۱) اگر $V(x) = 0$ (ذره آزاد) باشد ، داریم :

$$\begin{cases} F(\alpha) = 1 \\ X(\alpha) = \cos \alpha l \end{cases} \qquad (۵۰)$$

و به‌دست می‌آوریم :

اگر $0 \leqslant \alpha \leqslant \frac{\pi}{l}$: $k(\alpha) = \alpha$

اگر $\frac{\pi}{l} \leqslant \alpha \leqslant \frac{2\pi}{l}$: $k(\alpha) = \frac{2\pi}{l} - \alpha$

(۵۱) و غیره...

(خط شکسته متناظر درشکل b ــ۴ به‌صورت خط چین نمایش داده شده است). رابطهٔ (۵۰) نشان می‌دهد که شرط $|X(\alpha)| \leqslant 1$ همواره برقرار است : همان‌طور که می‌دانیم، برای یک ذرهٔ آزاد نوار ممنوع وجود ندارد.

بنابراین شکل ۶ به‌ما امکان می‌دهد تا اثر پتانسیل $V(x)$ روی منحنی $E(k)$ را به‌بینیم. وقتی نوارهای ممنوع ظاهر می‌شوند، منحنی‌های معرف انرژی طوری تغییرشکل می‌یابندکه برای $k = 0$ و $k = \pi/l$ (لبه‌های نوار) مماسهای افقی داشته باشند. برخلاف‌آنچه برای یک ذره‌آزاد رخ می‌دهد، هرجا انرژی بطور خطی با k تغییر کند، برای هونوار یک نقطهٔ عطف وجود دارد.

(۲) اگر ضریب عبور $T(\alpha)$ عملاً" صفر باشد، داریم [رک مکمل N_{III}، معادلات (۲۹) و(۲۱)] :

$$\begin{cases} |F(\alpha)| \gg 1 \\ |G(\alpha)| \gg 1 \end{cases} \qquad (۵۲)$$

درشکل۲، نقطهٔ معرف عدد مختلط $e^{i\alpha l}F(\alpha)$ خیلی از مبداء دوراست. بدین ترتیب در این شکل ملاحظه می‌کنیم که ناحیه‌هایی از محور α ها که برای آنها $|X(\alpha)| < 1$ است، فوق‌العاده باریکند. بنابراین، اگر ضریب عبور سدهای جزئی کاهش یابد، نوارهای مجاز منقبض می‌شوند، در حد عبور صفر، به‌ترازهای منفرد در یک چاه منزوی تبدیل می‌شوند. برعکس به‌مجرد اینکه اثر تونل عبور ذره از یک چاه به‌چاه بعدی‌را اجازه دهد، هریک از ترازهای گسستهٔ حله به‌یک نوار انرژی تبدیل می‌شود، که پهنای آن باافزایش ضریب عبور افزایش می‌یابد. در مکمل F_{XI} به‌این‌خاصیت برخواهیم گشت.

c ــ نوارهای ممنوع: حالتهای مانای جایگزیده روی لبه‌ها

α . شکل معادلات، ترازهای انرژی.

حال فرض کنیم که α به‌محدوده‌ای که در آن $|X(\alpha)| > 1$ است متعلق داشته باشد. دراین صورت، برطبق (۳۰)، رابطه (۳۶) می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود:

$$\begin{cases} A_n = \varepsilon^{n-1}[f_1(\alpha)\, e^{(n-1)\rho(\alpha)l} + f_2(\alpha)\, e^{-(n-1)\rho(\alpha)l}] \\ A'_n = \varepsilon^{n-1}[f'_1(\alpha)\, e^{(n-1)\rho(\alpha)l} + f'_2(\alpha)\, e^{-(n-1)\rho(\alpha)l}] \end{cases} \tag{۵۳}$$

این واقعیت که برای تمام n ها $A'_n = A^*_n$ است می‌رساندکه دراینجا باید داشته باشیم:

$$\begin{cases} f'_1(\alpha) = f^*_1(\alpha) \\ f'_2(\alpha) = f^*_2(\alpha) \end{cases} \tag{۵۴}$$

سپس شرط کوانتش (b ــ۳۸) به‌صورت زیر در می‌آید:

$$\frac{A_{N+1}}{A'_{N+1}} = \frac{f_1(\alpha) + f_2(\alpha)\, e^{-2N\rho(\alpha)l}}{f^*_1(\alpha) + f^*_2(\alpha)\, e^{-2N\rho(\alpha)l}} = e^{i\chi'(\alpha)} \tag{۵۵}$$

یعنی:

$$e^{-2N\rho(\alpha)l} = L(\alpha) \tag{۵۶}$$

که تابع حقیقی $L(\alpha)$ به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$L(\alpha) = -\frac{f^*_1(\alpha)\, e^{i\chi'(\alpha)/2} - f_1(\alpha)\, e^{-i\chi'(\alpha)/2}}{f^*_2(\alpha)\, e^{i\chi'(\alpha)/2} - f_2(\alpha)\, e^{-i\chi'(\alpha)/2}} \tag{۵۷}$$

موردی را کــه در آن $N \gg 1$ است در نظر بگیریم، در این صورت $e^{-2N\rho(\alpha)l} \simeq 0$ و معادله (۵۶) به‌صورت زیر در می‌آید:

$$L(\alpha) = 0 \tag{۵۸}$$

بنابراین، ترازهای انرژی واقع در نوارهای ممنوع توسط صفرهای تابع $L(\alpha)$ داده می‌شوند (رک شکل ۷). N نه در (۵۷) وارد می‌شود و نه در (۵۸)، بنابراین تعداد ایــن ترازها به N بستگی ندارد (برخلاف تعداد ترازهای واقع در یک نوار مجاز). در نتیجــه، وقتی $N \gg 1$ باشد، می‌توان گفت که عملا" تمام ترازها در نوارهای مجاز جمع شده‌اند.

β . بحث

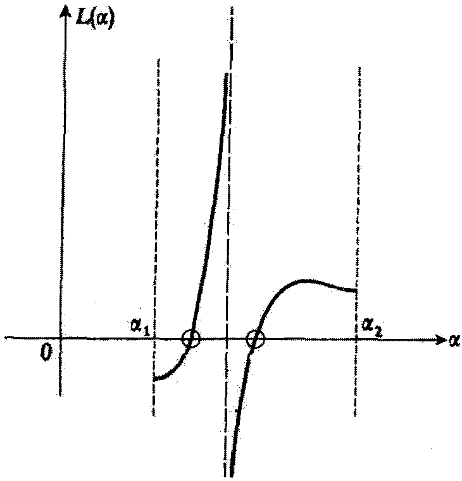
وضعیت اینجا به‌طور ریشه‌ای با وضعیت بخش b تفاوت دارد: تعداد N ، یعنی، طول شبکه هیچ نقشی ندارد (مشروط برآنکه بحد کافی بزرگ باشد) ، ازطرف دیگر، تعریف (۵۷) برای $L(\alpha)$ نشان می‌دهد که توابع $\chi(\alpha)$ و $\chi'(\alpha)$ نقشی اساسی درمساله ایفا می‌کنند. چون از قبل می‌دانیم که این توابع به‌رفتار $V(x)$ و در لبه‌های شبکه بستگی دارند، انتظار داریم حالتهائی را که در این نواحی جایگزیده‌اند به‌دست آوریم.

محققا" این چنین است. معادلات (۵۷) و(۵۸) دو امکان ارائه می‌دهند:

(۱) اگر $f_1(\alpha) = 0$ باشد، واقعیت $L(\alpha) = 0$ ایجاب می‌کند که:

$$\frac{f_1(\alpha)}{f_1^*(\alpha)} = \frac{f_1(\alpha)}{f'_1(\alpha)} = e^{i\chi'(\alpha)} \tag{۵۹}$$

حال به تعریف (۳۵) از $f_1(\alpha)$ و $f'_1(\alpha)$ برگردیم، رابطهٔ (۵۹) نشان می‌دهد که تابع موج ساخته شده از اولین ویژه بردار $Q(\alpha)$ در شرایط مرزی طرف راست صدق می‌کند. این را به‌سادگی می‌توان فهمید: اگر در $x = 0$ بایک تابع موج دلخواه که درشرایط مرزی طرف چپ صدق می‌کند، شروع کنیم، ماتریس $\begin{pmatrix} A_1 \\ A'_1 \end{pmatrix}$ روی دو ویژه بردار $Q(\alpha)$ دارای مؤلفه است، در این صورت ضرائب A_{N+1} و A'_{N+1} (اگر $N \gg 1$ باشد) توسط(۳۲) ، که برطبق آن ماتریس $\begin{pmatrix} A_{N+1} \\ A'_{N+1} \end{pmatrix}$ با ماتریس ستونی اولین ویژه بردار $Q(\alpha)$ متناسب است، داده می‌شود.



شکل ۷

تغییرات $L(\alpha)$ نسبت به α دریک نوار ممنوع. صفرهای $L(\alpha)$ حالتهای‌مانائی را که روی لبه‌های شبکه جایگزیده‌اند به‌دست می‌دهند.

توجه کنید که چون ویژه مقدار $\lambda_1(\alpha)$ بزرگتراز ۱ است، تابع موج بطور نمایی با x افزایش می‌یابد. بنابراین حالت مانائی که توسط اولین ویژه بردار $Q(\alpha)$ داده می‌شود در انتهای طرف راست شبکه جایگزیده است.

(۲) اگر $f_1(\alpha) = 0$ باشد، رابطهٔ (۵۴) می‌دهد $f_1'(\alpha) = 0$ وتعاریف (۳۵) ایجاب می‌کند که $e_1(\alpha) = 0$: حالت مانای متناظر به‌ویژه‌بردار دوم $Q(\alpha)$ وابسته است. صرفنظر از اینکه این حالت در انتهای طرف چپ شبکه جایگزیده است، نتایج به‌دست آمده در (۱) معتبر می‌ماند.

مراجع و پیشنهادات برای مطالعه بیشتر:

Merzbacher (1.16), chap. 6, §7; Flügge (1.24), §§28 and 29; Landau and Lifshitz (1.19), §104; see also solid state physics texts (section 13 of the bibliography).

فهرست راهنما

الف

اتم ئیدرژن

مدل بوهر ۶۲

نظریه کوانتومی ۶۴

اثر تونل، (۴۸۶،۹۹،۵۱)

احتمال

یک نتیجهٔ اندازه‌گیری (۲۹۸،۲،۲۶)

دامنه ۳۵۷،۳۴۹،۲۶

جریان وچگالی ۴۶۸،۴۴۸،۳۸۶،۳۳۰،۲۶

آزمایش دو شکاف یانگ ۱۴

نرده‌ای(ضرب)۲۲۸،۲۰۴،۱۵۰،۱۴۶،۱۳۵،۳۰

اصول موضوع فاینمن ۴۵۸

اصول موضوع (کلی) ۲۹۶

الحاقی (عملگر) ۱۶۲

الکترومغناطیس(میدانها و پتانسیل) ۴۳۱

امواج

تابع موج ۳۱۲،۲۰۲،۱۲۹،۲۵

میرا ۳۸۹،۱۱۰،۱۰۰،۹۶،۵۱

تخت ۱۳۸،۳۶،۳۰

آمیزه (اختلاط) آماری حالتها ۴۱۱،۴۰۶،۳۵۰

انتشار دهنده ۴۵۰

اندازه‌گیری

اصول موضوع کلی ۳۱۲،۲۹۶

حالت بعد از اندازه‌گیری ۳۱۳،۳۰۵

روی قسمتی از یک دستگاه فیزیکی ۳۹۷

انرژی (ر.ک. پایستگی، عدم قطعیت)

انرژی یونش (ر.ک. هیدروژن)

اینشتین

روابط پلانک-اینشتین ۱۳

پارادوکس اینشتین، پادولسکی،

روزن ۴۰۳

انعکاس براگ ۵۰۷

ب

برا ۱۷۳،۱۵۱

بسته‌موجها

کلی ۲۹

انتشار ۳۳۶،۸۵،۳۹

گسترش ۴۶۷،۸۷

می‌نیمم ۳۹۵

گوسی آزاد ۸۲

در یک پله پتانسیل ۱۰۷

در یک چاه پتانسیل ۲۷۸

دوبعدی ۷۳

سه‌بعدی ۷۶

تقلیل بستهٔ موج ۳۸۴،۲۶۷،۳۱۲،۳۰۴

بسته موجهای می‌نیمم ۲۹۵

بوهر

فرکانس ۳۴۵

مدل ۶۲

برهم‌نهش

اصل ۳۴۹،۳۲۷،۲۹۶،۱۹

همدوسی ۴۱۴

خطی ۶۰۴،۳۵۰
برهم نهش همدوس حالتها ۶۰۴،۳۹۴

پ

پاریته (عملگر) ۲۶۶
پایستگی
احتمال ۳۲۹،۳۲۸
انرژی ۳۴۱،۳۳۸
پایهٔ راست‌هنجار ۱۹۰،۱۶۹،۱۴۷،۱۴۴،۱۳۳
پایه‌ها (فضای حالت)
گسسته ۱۶۸،۱۳۳
پیوسته ۱۶۹،۱۴۴
مخلوط ۱۴۵
روابط سرشتی ۱۷۲،۱۴۷
پتانسیل
عملگر ۲۳۶
برده‌ای ۴۳۱،۳۱۰
تناوبی ۴۹۸
پتانسیلهای مربعی ۳۸۶،۲۷۳،۱۰۷،۹۰،۴۸
پراکندگی تشدیدی ۹۹
پلانک
رابطهٔ پلانک اینشتین ۲۵،۱۴
ثابت ۱۴
پله پتانسیل ۳۸۷،۱۰۷،۹۳،۵۰
پودولسکی
(پارادوکس اینشتین ــ پودولسکی ــ روزن) ۴۰۳
پهنای طبیعی ۴۶۴
پیمانه ۴۳۱

ت

تابع دلتا
استفاده در مکانیک کوانتومی ۳۸۴،۱۵۳،۳۴۱
چاهها و سدهای تابع دلتا ۱۲۰،۱۱۹،۱۱۸،۱۱۷
تابع (موج) ۳۱۲،۲۰۲،۱۲۹،۲۵
تبهگنی
ویژه مقدار ۳۶۶،۳۰۰،۱۸۳
منظم و تصادفی ۲۷۹
پاریته ۲۷۴
تبهگنی اساسی (یا منظم) ۲۷۹
تحول
بردار حالت ۳۰۷
مقادیر متوسط ۳۳۲
عملگر ۴۲۲
تداخل‌ها ۳۴۹،۶۸،۱۴
ترازها (انرژی) ۴۷۹،۱۰۳
تصویرگرها ۳۶۵،۲۳۳،۱۵۹،۱۵۳،۱۹۱،۱۵۸
تعادل ترمودینامیکی (کلیات) ۴۱۶
تغییرناپذیری (پیمانه‌ای) ۴۳۱
تقلیل بستهٔ موج ۳۸۴،۳۶۷،۳۱۲،۳۰۴
تکانه ۴۴۰،۴۳۴،۳۰۸،۲۹۴
همیوغ ۳۱۱،۲۹۴
تکانه زاویه‌ای ذاتی (ر.ک. اسپین)
تکانه مکانیکی ۴۴۱،۴۳۵،۳۱۱،۲۹۵

ث

ثابتهای حرکت ۴۲۸،۳۴۱

ج

جابجائی
روابط بندادی ۳۰۸،۲۰۸
سازگاری و جابجائی‌پذیری ۳۲۰
جابجاگرها ۲۴۱،۲۳۷،۲۳۲
جادهٔ (فضا ــ زمان) ۴۵۶
جامدات (نوار انرژی الکترونها) ۵۱۳،۵۰۶
جریان احتمال ۴۶۹،۴۴۸،۳۸۶،۳۲۹

ح

حالت
بردار ۳۲۵،۲۹۴،۱۴۸
حالت پایه ۴۸۴،۶۴
حالت خاص ۴۰۷
حالتهای مانا ۳۳۹،۹۰،۴۳
یک حالت ذره در یک پتانسیل دلخواه ۴۷۸

یک ذره در یک پتانسیل متناوب ۴۹۸
دامنه‌های احتمال ۳۵۷،۳۴۹
دستگاههای پایستار ۴۲۴
دوبروی
رابطه دوبروی ۵۷،۲۴
طول موج دوبروی ۵۷،۲۴
دوگانگی موج ــ ذره ۶۸،۵۷،۱۴
دیدگاه برهم‌کنش ۴۷۴
دیدگاه شرودینگر ۴۳۷
دیدگاه شرودینگر ــ هایزنبرگ ۴۲۷

ذ

ذره آزاد ۴۹
حالتهای مانا تکانهٔ کاملاً معین ۳۶
بسته‌های موج ۴۶۷،۸۲،۳۹

ر

رابطهٔ بستاری ۱۶۹،۱۳۶
رابطهٔ پارسوال ــ بسل ۳۷
رد
یک عملگر ۲۳۰
رد جزئی ۴۱۷
روابط جابجایی بندادی ۳۰۸،۲۰۸
روابط عدم قطعیت
هایزنبرگ ۲۹۴،۳۱۹،۷۹،۶۹،۶۴،۶۱،۳۸
زمان ــ انرژی ۳۴۶

ژ

ژاکوبی (ر.ک. هامیلتونی)

س

سد پتانسیل
مربعی ۴۹۶،۵۱،۵۰
سرعت
فاز ۶۰،۳۹
گروه ۸۷،۷۹،۶۰،۴۱
تعمیم یافته ۲۹۴
سرعت گروه
(ر.ک. سرعت)

ش

شرایط مرزی ۵۰۹،۴۷۹
شرط فاز مانا ۷۸،۲۵

ض

ضرب
نرده‌ای ۲۲۸،۲۰۴،۱۵۰،۱۴۶،۱۳۵،۱۳۰
عملگرها ۱۷۵،۱۳۲
ضرب تانسوری
تعریف و خواص ۲۱۱
کاربردها ۳۷۶
حالت ۴۲۰،۴۰۰

ط

طول عمر ۴۶۱
طول موج دوبروی ۵۷،۲۵
طیف پیوسته ۳۶۵،۳۰۱،۱۸۹
طیف یک مشاهده پذیر ۲۹۹،۱۸۲
پیوسته ۳۶۵،۳۰۲،۱۹۱

ع

عدد کوانتومی خوب ۳۴۳
عملگرها
تعریف ۱۵۷،۱۳۱
خواص عمومی ۲۳۰
معادلهٔ ویژه‌مقدار، قطری‌کردن ۲۱۹،۱۸۱
نمایش ۱۷۴
هرمیتی ۱۸۸،۱۶۷
یکانی ۴۲۴،۲۴۴
تابع یک عملگر ۲۳۴
چگالی ۴۱۷
تحول ۴۲۲
پاریته ۲۶۶
انتقال ۲۶۳

ف

فوتونها ۱۳

ق
قضیه اهرنفست ۴۳۰،۳۳۴
قضیه ویریال ۴۷۰
قطری‌کردن یک عملگر ۱۹۴
قواعد انتخاب برای یک عملگر زوج یا فرد ۲۷۰
ک
کنش ۴۵۸
کنش (ر.ک. حالت ۱۷۲،۱۴۹
کوانتش
قواعد ۳۱۲،۳۰۷
انرژی ۴۷۹،۱۰۴،۵۲،۲۴،۱۳
نتایج اندازه‌گیری ۳۱۲،۲۹۷،۲۱
گ
گسیل خود بخود ۴۶۲
گسترش بسته موج ۴۶۷،۸۷
ل
لاگرانژی یک ذره در یک میدان الکترومغناطیسی ۴۳۴
م
ماتریس، ماتریسها ۱۷۵،۱۷۲
الحاقی ۱۷۸
هرمیتی ۱۷۸
یکانی ۲۴۷
متقارن سازی مشاهده پذیرها ۳۰۹
مجموعهٔ کامل مشاهده‌پذیرهای جابجایی پذیر
(م.ک.م.ج) ۳۲۶،۲۸۵،۲۲۰،۱۹۷
مشاهده‌پذیر ۲۹۷،۱۹۲
اندازه‌گیری ۳۱۲،۲۹۷
کوانتش ۳۰۷
که جابجاگر آن برابر است با ۲۵۹،۲۹۴
مشاهده‌پذیرهای سازگار ۳۲۰
معادلهٔ سرشتی یک عملگر ۱۸۵
معادلهٔ شرودینگر ۴۰۹،۳۲۷،۳۰۷،۲۵
در نمایش مکانی و تکانه‌ای ۲۵۸،۲۵۵
جواب برای دستگاه پایسته ۳۳۹
معادلات لاگرانژ ۲۹۴
معادلات هامیلتون ــ ژاکوبی ۲۹۴
مقدار متوسط یک مشاهده‌پذیر ۳۳۲،۳۱۴
مکمل ۶۹
موج تخت ۱۳۸،۳۶،۳۰
موج میرا ۲۸۹،۱۱۰،۱۰۰،۹۶،۵۱
ن
ناپایداری ۳۶۲
نا مساوی شوارتز ۲۲۸
نسبت ژیرومغناطیسی الکترون (اسپین) ۵۲۱
نمادگذاری دیراک ۱۴۸
نمایش ۱۶۸
نمایش
کلیات
مکان و تکانه ۲۵۳،۲۰۰
نوارهای مجاز ۵۱۳،۵۰۶
نوارهای مجاز یا ممنوع ۵۱۹،۵۱۳،۵۰۶
هـ
هامیلتونی ۳۳۸،۳۱۷
یک ذره در یک پتانسیل نرده‌ای ۳۰۹
یک ذره در یک پتانسیل برداری ۴۴۰،۴۳۲،۳۱۰
هایزنبرگ
رابطه عدم قطعیت هایزنبرگ ۶۴،۴۱،۳۸،
۳۹۴،۲۱۹،۷۹،۶۹
H_2، یون ملوکولی ۱۲۰
هرمیتی
عملگر ۱۸۸،۱۷۸،۱۶۷
همیوغ ۱۶۰
همبستگی‌های بین دوسیستم ۴۰۲،۴۰۱
همدوسی‌ها (از ماتریسهای چگالی) ۴۱۴
همیوغ (هرمیتی) ۱۶۰
هنجار
تابع موج ۱۴۷،۱۳۱،۲۷
یک بردار حالت ۱۵۳
پایستگی ۳۲۸