به نام خداوند بخشنده مهربان

آمادگی آزمون دکتری

مکانیک کوانتومی پیشرفته

مجموعه:

فیزیک

مؤلفان:

دکتر قاسم نعیمی

(عضو هیأت علمی دانشگاه آزاد اسلامی واحد قزوین)

راضیه سرلک

عطیه فردوسی زاده

نعیمی، قاسم (۱۳٦۰)
مکانیک کوانتومی پیشرفته رشته فیزیک / دکتر قاسم نعیمی، راضیه سرلک(۱۳٦۲)، عطیه فردوسی زاده(۱۳٦٤)
تهران ـ مشاوران صعود ماهان: ۱٤۰۱
۲٦۸ص: جدول، نمودار، (آمادگی آزمون دکتری)
شابک ISB/N: 978-600-458-657-3
وضعیت فهرستنویسی: فیپا مختصر
فارسی ـ چاپ اول
۱-مکانیک کوانتومی پیشرفته ۲- آزمونها و تمرینها
۲- آزمون دوره‌های تحصیلات تکمیلی ۴-دانشگاه‌ها و مدارس عالی ـ ایران ـ آزمونها
دکتر قاسم نعیمی، راضیه سرلک، عطیه فردوسی زاده
ج ـ عنوان
شماره کتابشناسی ملی: ۵۷۵۱۸۸۸

انتشارات مشاوران صعود ماهان

❑ **نام کتاب:** .... مکانیک کوانتومی پیشرفته
❑ **مدیران مسئول:** .... مجید و هادی سیّاری
❑ **مولفین:** دکتر قاسم نعیمی (عضو هیأت علمی دانشگاه آزاد اسلامی واحد قزوین)، راضیه سرلک، عطیه فردوسی زاده
❑ **مدیربرنامه ریزی و تولید محتوا:** .... سمیه بیگی
❑ **ناشر:** .... مشاوران صعود ماهان
❑ **نوبت و تاریخ چاپ:** .... اول /۱۴۰۱
❑ **تیراژ:** .... ۱۰۰۰ نسخه
❑ **قیمت:** ۲/۶۹۰/۰۰۰ریال
❑ **شابک:** ISBN۹۷۸-۶۰۰-۴۵۸-۶۵۷-۳

انتشارات مشاوران صعود ماهان:تهران ـ خیابان ولیعصر، بالاتر از تقاطع ولیعصر مطهری، پلاک ۲۰۵۰
تلفن: ۸۸۱۰۰۱۱۳ و ۸۸۴۰۱۳۱۳

مقدمه ناشر

بنام خدا

ایمان داریم که هر تغییر و تحول بزرگی در مسیر زندگی بدون تحول معرفت و نگرش میسر نخواهد بود. پس بیایید با اندیشه توکل، تفکر، تلاش و تحمل در توسعه دنیای فکریمان برای نیل به آرامش و آسایش توأمان اولین گام را برداریم. چون همگی یقین داریم دانایی، توانایی می‌آورد.

شاد باشید و دلی را شاد کنید

برادران سیاری

۹۴

مقدمه مولف

نگاهی به تعداد داوطلبان آزمون دکتری نشان می‌دهد که در سال‌های اخیر تقاضا برای ادامه تحصیل در دوره دکتری به طور چشم‌گیری افزایش یافته است. مشکل اساسی اغلب داوطلبان، تعداد و تنوع منابع درسی است. بنابراین در این کتاب سعی شده است که به نیازهای شما در مورد مکانیک کوانتومی پاسخ داده شود. در این مجموعه پس از ارائه کامل شرح درس در هر فصل سوالاتی آزمون‌های سراسری و یک سری تمرینات بصورت تشریحی پاسخ داده شده است. در فصل اول سعی شده تمام مقدمات ریاضی مکانیک کوانتومی که برای یادگیری این درس ضروری است آورده شود و در فصل‌های بعد در مورد تحول زمانی در مکانیک کوانتومی، اندازه حرکت زاویه‌ای، تقارن در مکانیک کوانتومی، نظریه اختلال، ذرات یکسان و نظریه پراکندگی بحث شده است.

با این وجود واضح است که این کتاب نیز خالی از اشکال نبوده و پیشنهادات و انتقادات شما می‌تواند در بهبود آن کمک شایانی به ما برساند.

دکتر قاسم نعیمی
راضیه سرلک
عطیه فردوسی زاده

فهرست مطالب

فصل اوّل

مقدمات ریاضی مکانیک کوانتومی

این فصل به بررسی کلی ابزارهای ریاضی که در مکانیک کوانتومی به کار می‌روند اختصاص یافته است. مطالب را به طور فشرده و به این منظور که مطالعه فصل‌های بعدی را برای خواننده‌هایی که با این ابزار آشنا نیستند تسهیل کند، ارائه خواهیم کرد.

فضای هیلبرت

فضای هیلبرت از دو گونه موجود ریاضی که عبارتند از بردارها $(\Psi, X, \Phi, \ldots)$ و اسکالرها $(a, b, c, \ldots)$ تشکیل شده است، که دارای ویژگی‌های زیر است:

ویژگی‌های جمع:

- اگر Ψ و Φ بردارهای یک فضا باشند، $\Phi + \Psi$ نیز برداری از همان فضاست.
- جابجا پذیری دو بردار $\Phi + \Psi$ به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$\Psi + \Phi = \Phi + \Psi$$

- شرکت پذیری

$$(\Psi + \Phi) + \chi = \Psi + (\Phi + \chi) \qquad (۱.۱)$$

- عضو خنثی

$$o + \Psi = \Psi + o = \Psi$$

* وجود بردار معکوس یا متقارن: در واقع هر بردار Ψ باید یک بردار معکوس $(-\Psi)$ به صورت زیر داشته باشد.

$$\Psi + (-\Psi) = (-\Psi) + \Psi = 0 \qquad (۱.۲)$$

ویژگی‌های ضرب:

$$a(\Psi + \Phi) = a\Psi + a\Phi \quad , \quad (a + b)\Psi = a\Psi + b\Psi$$
$$a(b\Psi) = (ab)\Psi \quad , \quad I.\Psi = \Psi.I = \Psi \qquad (۱.۳)$$
$$o.\Psi = \Psi.o = o$$

ضرب داخلی دو بردار بصورت زیر تعریف می‌شود.

$$(\Psi, \Phi) = (\Phi, \Psi)^* = \int \Psi^* \Phi \, dv \qquad (۱.۴)$$

ضرب داخلی دارای ویژگی‌های زیر است:

۱- خطی بودن

$$(\Psi, a\Phi_1 + b\Phi_2) = a(\Psi, \Phi_1) + b(\Psi, \Phi_2) \qquad (۱.۵)$$

۲- ضرب داخلی یک بردار در خودش یک عدد حقیقی غیر منفی است.

$$(\Psi, \Psi) = \int dv|\Psi|^2 \geq o \qquad (۱.۶)$$

$\sqrt{(\Psi, \Psi)}$ هنجار Ψ نامیده می‌شود. بنابراین با استفاده از رابطه (۱.۶) می‌توان ضریب بهنجار را برای هر بردار Ψ پیدا کرد.

در نامساوی شوارتز

$$|(\Psi_1, \Psi_2)| \leq \sqrt{(\Psi_1, \Psi_1)}\sqrt{(\Psi_2, \Psi_2)} \qquad (۱.۷)$$

این نامساوی در صورتی به یک تساوی تبدیل می‌شود که فقط و فقط دو تابع Ψ_1 و Ψ_2 متناسب با یکدیگر باشند.

پایه‌های متعامد گسسته در فضای هیلبرت

مجموعه $\{u(r)\}$ $i = 1,2, \dots n,$ در صورتی متعامدند که داشته باشیم:

$$(u_i, u_j) = \int d_r^3 u_i^*(r) u_j(r) = \delta_{ij}$$

که در آن δ_{ij} تابع دلتای کرونکر است. که برای $i = j$ برابر با یک و برای $i \neq j$ برابر با صفر است.

این مجموعه در صورتی یک پایه تشکیل می‌دهد که به ازای هر $\Psi(r)$ در فضای هیلبرت داشته باشیم:

$$\Psi(r) = \sum_{i=1}^{n} c_i u_i(r)$$

c_i ها ضرائب بسط می‌باشند که از طریق رابطه زیر به دست می‌آیند:

$$(u_j, \Psi) = (u_j, \sum_i c_i u_i) = \sum_i c_i (u_j, u_i) = \sum_i c_i \delta_{ij} = c_j$$

به عبارت دیگر

$$c_i = (u_i, \Psi) = \int d^3 r u_i^*(r) \Psi(r)$$

به عنوان مثال در فضای هندسی معمولی (e_1, e_2, e_3) یک پایه برای هر بردار دلخواه می‌باشند.

نکته: فرض کنید $\Psi(r), \Phi(r)$ دو تابع موج باشند که قابل بسط بر حسب $u_j(r)$ باشند، در این صورت برای ضرب داخلی این دو بردار داریم

$$\Phi(r) = \sum_i b_i u_i(r) \quad , \quad \Psi_{(r)} = \sum_j c_j u_j(r)$$

$$(\Phi, \Psi) = \sum_{i,j} b_i^* . c_j (u_i, u_j) = \sum_{i,j} b_i^* c_j \delta_{ij} = \sum_i b_i^* c_i$$

به ویژه

$$(\Psi, \Psi) = \sum_i |c_i|^2$$

نمایش کمیت‌هایی با طیف پیوسته

از آنجا که در فیزیک برخی از کمیت‌های قابل اندازه‌گیری مانند مکان و اندازه حرکت یک ذره دارای طیف پیوسته می‌باشند، به بررسی کمیت‌های پیوسته می‌پردازیم.

امواج تخت

برای سادگی مورد یک بعدی را بررسی می‌کنیم، تبدیل فوریه $\Phi(p), \Psi(x)$ به صورت زیر تعریف می شود.

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \Phi(p) e^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

$$\Phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi(x) e^{-\frac{ipx}{\hbar}}$$

تابع موج $u_p(x)$ (یک موج تخت با بردار موج $\frac{p}{\hbar}$) در نظر بگیرید:

با جایگذاری در روابط بالا داریم:

$$\Psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \Phi(\mathrm{p}) u_p(x)$$

$$\Phi(\mathrm{p}) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi(x) u_p^*(x)$$

روابط بالا این ایده را بیان می‌کند که هر تابع دلخواه $\Psi(x)$ را می‌توان بر حسب $u_p(x)$ بسط داد، چون شاخص $u_p(x)$ بطور پیوسته تغییر می‌کند و نه گسسته، جمع‌بندی $\sum i$ در بخش قبلی باید با انتگرال گیری روی p جایگزین شود.

با توجه به تعریف تابع دلتای دیراک:

$$\delta(u) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{iku}$$

داریم:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp u_p(x) u_p^*(\acute{x}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{\hbar} e^{\frac{ip(x-\acute{x})}{\hbar}} = \delta(x-\acute{x})$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx u_p^*(x) u_{\acute{u}}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{\hbar} e^{\frac{ix(p-\acute{p})}{\hbar}} = \delta(p-\acute{p})$$

بنابراین می‌توان $u_p(\vec{r}) = (\frac{1}{2\pi\hbar})^{3/2} \; e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}.\vec{r}}$ را به عنوان تشکیل دهنده‌های یک پایه پیوسته در نظر گرفت، کلیه روابطی که در بخش قبل برای پایه گسسته $\{u_i.(\vec{r})\}$ برقرار بود را می‌توان به پایه پیوسته تعمیم داد.

$$i \leftrightarrow p$$

$$\sum_i \leftrightarrow \int d^3p \quad \text{و} \quad \delta_{ij} \leftrightarrow \delta(p-\acute{p})$$

یک مجموعه‌ی توابعی از $\vec{r}$،$\{w_\alpha(\vec{r})\}$ را که با یک شاخص پیوسته α مشخص شده‌اند و در دو رابطه زیر:

$$\int d^3\vec{r}\, w_\alpha^*(\vec{r}) w_{\acute{\alpha}}(\vec{r}) = \delta(\vec{\alpha}-\vec{\acute{\alpha}})$$

$$\int d_\alpha^3\, w_\alpha\, (\vec{r}) w_\alpha^*(\vec{\acute{r}}) = \delta(\vec{r}-\vec{\acute{r}})$$

صدق کنند یک پایه متعامد پیوسته می‌نامند.

همیشه می‌توان نوشت:

$$\Psi(\vec{r}) = \int d^3\acute{r}\, \Psi(\vec{\acute{r}}) \;\; \delta(\vec{r}-\vec{\acute{r}})$$

با جایگذاری $\delta(\vec{r}-\vec{\acute{r}})$ در رابطه فوق داریم:

$$\Psi(\vec{r}) = \int d^3\alpha \left[\int d^3\vec{\acute{r}} w_\alpha^*(\vec{\acute{r}}) \Psi(\vec{\acute{r}})\right] \;\; w_\alpha(\vec{r})$$

$$\Psi(\vec{r}) = \int d_\alpha^3\, c(\vec{\alpha}) \;\; w_\alpha(\vec{r}) \;\;,\;\; c(\alpha) = \int d^3\vec{\acute{r}}\, w_\alpha^*(\vec{\acute{r}}) \Psi(\vec{\acute{r}})$$

رابطه به دست آمده بیانگر این واقعیت است که هر تابع موج $\Psi(\vec{r})$ دارای یک بسط یکتا بر حسب $w_\alpha(\vec{r})$ می‌باشد که $c(\alpha)$ ضرائب بسط می‌باشند.

روابط راستا هنجاری تعامد و بستاری برای مجموعه‌ای از کت‌های، گسسته $\{|u_i>\}$ یا پیوسته $\{|w_\alpha>\}$ به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\langle u_i|u_j\rangle = \delta_{ij} \qquad , \qquad \langle w_\alpha|w_{\acute{\alpha}}\rangle = \delta(\alpha-\acute{\alpha}) \qquad (۱)$$

$$|\Psi>=\sum_i c_i|u_i> \quad (a) \qquad ,|\Psi>=\int d\alpha\, c(\alpha)\,|w_\alpha> \quad (b) \qquad (۲)$$

طرفین رابطه (۲) در قسمت (a) را در $\langle u_j|$ و هر دو طرف رابطه (۲) در قسمت (b) را در $\langle w_{\acute{\alpha}}|$ ضرب نرده‌ای می‌کنیم، با استفاده از روابط (۱) عباراتی برای مؤلفه‌های $c(a'), c_j$ به صورت زیر به دست می‌آید.

$$\langle u_j|\Psi\rangle = c_j \qquad , \qquad \langle w_{\acute{\alpha}}|\Psi\rangle = c(\acute{\alpha})$$

پس در رابطه (۲)، c_i را با $\langle u_j|\Psi\rangle$ و $c(\alpha)$ را با $\langle w_\alpha|\Psi\rangle$ جایگزین می‌کنیم.

$$|\Psi\rangle = \sum_i c_i|u_i> = \sum_i \langle u_i|\Psi\rangle|u_i\rangle$$

$$= \sum_i |u_i> \langle u_i|\Psi\rangle = \left(\sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\right)|\Psi\rangle$$

$$|\Psi\rangle = \int d\alpha\, c(\alpha)|w_\alpha\rangle = \int d\alpha\langle w_\alpha|\Psi\rangle|w_\alpha\rangle$$

$$= \int d\alpha|w_\alpha\rangle\langle w_\alpha|\Psi\rangle = \left(\int d\alpha|w_\alpha\rangle\langle w_\alpha|\right)|\Psi\rangle$$

به این ترتیب مشاهده می‌شود که دو عملگر زیر

$$\int d\alpha|w_\alpha\rangle\langle w_\alpha|\,, \quad \sum_i |u_i\rangle\langle u_i|$$

اگر روی هر کت $|\Psi\rangle$ عمل کنند همان کت را می‌دهند، چون $|\Psi\rangle$ دلخواه است نتیجه می‌شود

$$\boxed{\sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = \mathrm{I}}$$

$$\boxed{\int d\alpha|w_\alpha\rangle\langle w_\alpha| = \mathrm{I}}$$

که I معرف عملگر همانی است.

برخی از خواص مهم تابع دلتای دیراک

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x)dx = f(0)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x-a)dx = f(a)$$

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon\to ۰}\left(\frac{Sin(^x/_\varepsilon)}{\pi x}\right) \qquad , \qquad \delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx}dk$$

$$\delta(-x) = \delta(x) \qquad , \ \delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x)$$

$$f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a) \ , \ \int \delta(a-x)\delta(x-b)dx = \delta(a-b)$$

$$\int \delta(x)dx = 1 \qquad ,\delta\big(g(x)\big) = \sum_i \frac{1}{|\acute{g}(x_i)|}\delta(x-x_i)$$

$$\delta(\vec{r}-\vec{\acute{r}}) = \delta(x-\acute{x})\delta(y-\acute{y})\delta(z-\acute{z}), \delta(\vec{r}-\vec{\acute{r}}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{i\vec{k}.(\vec{r}-\vec{\acute{r}})}d^3k$$

$$\delta[(x-a)(x-b)] = \frac{1}{|a-b|}[\delta(x-a)+\delta(x-b)] \qquad ,a\neq b$$

$$\delta(x^2-a^2) = \frac{1}{2|a|}[\delta(x-a)+\delta(x+a)] \qquad ,a\neq ۰$$

نمادگذاری دیراک

در این نمادگذاری هر بردار ستونی را توسط موجودی به نام کت نمایش می‌دهیم

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = |a\rangle$$

و هر بردار سطری را توسط موجودی به نام برا نمایش می‌دهیم:

$$\vec{a} = (a_1 \;\; a_2 \;\; \dots \; a_n) = \langle a|$$

به این ترتیب الحاقی هر کت a می‌شود برا a و بالعکس.

$$|a\rangle \overset{\text{عمل الحاقی}}{\rightleftarrows} \langle a|$$

ضرب داخلی در نمایش دیراک به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\vec{a}.\vec{b} = (a_1^* \;\; a_2^* \;\; \dots \;\; a_n^*) \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = \langle a|b\rangle$$

الحاق یک کمیت نرده‌ای مزدوج مختلط آن است.

هر بردار را در نمایش دیراک می‌توان بر حسب کت‌ها یا براهای پایه بسط داد

$$\boldsymbol{|a\rangle = \sum_{i=1}^{N} a_i|e_i\rangle \qquad , \;\; \langle a| = \sum_{i=1}^{N} \langle e_i|a_i^* \;\; = \sum_{i=1}^{N} u_i^* \langle e_i|}$$

برخی از خواص مهم در نمادگذاری دیراک

$$\langle \Phi|\Psi\rangle = \langle \Psi|\Phi\rangle^*$$
$$\langle \Phi|(\lambda_1\Psi_1 + \lambda_2\Psi_2)\rangle = \lambda_1\langle \Phi|\Psi_1\rangle + \lambda_2\langle \Phi|\Psi_2\rangle$$
$$\langle(\lambda_1\Psi_1 + \lambda_2\Psi_2)|\Phi\rangle = \lambda_1^*\langle \Psi_1|\Phi\rangle + \lambda_2^*\langle \Psi_2|\Phi\rangle$$

عملگرهای خطی

یک عملگر خطی A بنا به تعریف یک موجود ریاضی است که به هر تابع Ψ یک تابع دیگر $\acute{\Psi}$ وابسته می‌کند

$$\acute{\Psi}(r) = A\Psi(\mathrm{r})$$
$$A[\lambda_1\Psi_1(r) + \lambda_2\Psi_2(r)]\lambda_1 A\Psi_1(r) + \lambda_2 A\Psi_2(r) \qquad (۲.۸)$$

به عنوان مثال عملگر پاریته که تعریف آن به صورت زیر است یک عملگر خطی است.

$$\pi\Psi(x,y,z) = \Psi(-x,-y,-z)$$

و یا عملگر مکان و عملگر مشتق گیری نسبت به x نیز یک عملگر خطی است.

$$\hat{X}\Psi(x,y,z) = x\Psi(x,y,z)$$
$$D_x\Psi(x,y,z) = \frac{\partial\Psi(x,y,z)}{\partial x}$$

اما عملگر A در فرم زیر خطی نیست

$$A\Psi(x) = [\Psi(\mathrm{x})]^2$$

می‌توان نشان داد که شرط دوم رابطه(۲.۸) برای این عملگر صادق نیست.

$$A(\lambda_1\Psi_1(x) + \lambda_2\Psi_2(x)) = [\lambda_1\Psi_1(x) + \lambda_2\Psi_2(x)]^2 \neq$$
$$\lambda_1[\Psi_1(x)]^2 + \lambda_2[\Psi_2(x)]^2$$

در نمایش دیراک عملگرهای خطی به صورت زیر تعریف می شود:

$|\hat{\Psi}\rangle = \hat{A}|\Psi\rangle$

$\hat{A}(\lambda_1|\Psi_1\rangle + \lambda_2|\Psi_2\rangle) = \lambda_1\hat{A}|\Psi_1\rangle + \lambda_2\hat{A}|\Psi_2\rangle$

جابجایی و پادجابه‌جایی دو عملگر $\hat{A}$ و $\hat{B}$ بنا به تعریف به صورت

$[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$

$\{\hat{A},\hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$

تعریف می‌شوند. با استفاده از دو رابطه بالا حاصل ضرب دو عملگر را می‌توان به صورت زیر نوشت

$\hat{A}\hat{B} = \frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}] + \frac{1}{2}\{\hat{A},\hat{B}\}$

اگر دو عملگر با هم جابجا شوند داریم

$[f(\hat{A}), g(\hat{B})] = 0$

تعریف مقدار میانگین

مقدار میانگین مشاهده پذیر $\hat{A}$ به صورت زیر تعریف می‌شود

$\langle\hat{A}\rangle = \int \Psi^*\hat{A}\Psi dV$

عملگر هرمیتی

عملگر $\hat{A}$ هرمیتی نامیده می‌شود اگر

$\langle\Psi_1|\hat{A}\Psi_2\rangle = \langle\hat{A}\Psi_1|\Psi_2\rangle$

$\int \Psi_1^*\hat{A}\Psi_2 dV = \int (\hat{A}\Psi_1)^* \Psi_2 dV$

Ψ_1 و Ψ_2 توابع انتگرال پذیر مجذوری‌اند که مشتق های آنها در مرزهای ناحیه انتگرال گیری صفر است.

اگر عمگر $\hat{A}$ هرمیتی نباشد می‌توان عملگر همیوغ $\hat{A}^+$ را برای هر جفت تابع موج با رابطهٔ زیر تعریف کرد

$\int dV (\hat{A}\Psi_1)^*\Psi_2 = \int dV \Psi_1^* A^\dagger \Psi_2$

نکته: در مکانیک کوانتومی مشاهده پذیرهای فیزیکی همه عملگرهای هرمیتی و خطی می باشند، زیرا عملگرهای هرمیتی دارای مقدار میانگین حقیقی می‌باشند.

$\langle\hat{A}\rangle = \int \Psi^*\hat{A}\Psi dV = \int (\hat{A}\Psi)^*\Psi dV = [\int \Psi^*(\hat{A}\Psi) dV]^* = \langle\hat{A}\rangle^*$

همیوغ هرمیتی کردن در نمادگذاری دیراک

در نمادگذاری دیراک، همیوغ هرمیتی کردن بسیار ساده است، کافی است مراحل زیر انجام شود:

ثابت‌ها را با همیوغ‌های مختلط آنها
کت‌ها را با براهای وابسته به آنها
براها را با کت‌ها وابسته به آنها
عملگرها را با الحاقیشان
جایگزین کنیم

ترتیب فاکتورها را معکوس می‌کنیم (با وجود این، محل ثابت‌ها هیچ اهمیتی ندارد).

مثال: $\lambda\langle u|A|v\rangle|w\rangle\langle\Psi|$ ، یک عمگر است $\langle u|A|v\rangle$ عدد هستند) الحاقی این عملگر کدام است؟

$(\lambda\langle u|A|v\rangle|w\rangle\langle\Psi|)^\dagger = |\Psi><w|\langle v|A^\dagger|u\rangle\lambda^*$

که می‌تواند با تغییر محل λ^* و $\langle v|A^\dagger|u\rangle$ ، به صورت زیر نوشته شود

$\lambda^*\langle v|A^\dagger|u\rangle \ |\Psi><w|$

مثال: همیوغ هرمیتی کت زیر را پیدا کنید؟

$$\lambda|u><v|w>$$
$$(\lambda|u><v|w>)^{\dagger}=\langle w|v\rangle\langle u|\lambda^{*}=\lambda^{*}\langle w|v\rangle\langle u|$$

جابجایی عملگرهای مکان و تکانه

$$[\hat{p}_x,\hat{x}]\Psi_{(x)}=\hat{p}_x\hat{x}\Psi_{(x)}-\hat{x}\hat{p}_x\Psi_{(x)}$$
$$\hat{p}_x\Psi_{(x)}=-i\hbar\frac{d\Psi_{(x)}}{dx}\qquad,\qquad\hat{x}\Psi_{(x)}=x\Psi_{(x)}$$
$$[\hat{p}_x,\hat{x}]\Psi_{(x)}=-i\hbar\frac{d}{dx}\left(x\Psi_{(x)}\right)-\hat{x}\left(-i\hbar\frac{d\Psi_{(x)}}{dx}\right)$$
$$=-i\hbar x\frac{d\Psi_{(x)}}{dx}-i\hbar\Psi_{(x)}+i\hbar x\frac{d\Psi_{(x)}}{dx}=-i\hbar\Psi_{(x)}$$

پس

$$[\hat{p}_x,\hat{x}]=-i\hbar$$

برخی از خواص مهم عملگرها

$$[\hat{A},\hat{B}]=-[\hat{B},\hat{A}]$$
$$[[\hat{A},[\hat{B}+\hat{C}]]=[\hat{A},\hat{B}]+[\hat{A},\hat{C}]$$
$$[\hat{A},[\hat{B}\hat{C}]]=[\hat{A},\hat{B}]\hat{C}+\hat{B}[\hat{A},\hat{C}]$$
$$[A,[\hat{B},\hat{C}]]+\left[\hat{B},[\hat{C},\hat{A}]\right]+\left[\hat{C},[\hat{A},\hat{B}]\right]=\circ$$
$$[A,B]^{+}=[B^{\dagger},A^{\dagger}]$$

نکته: حاصل ضرب دو عملگر هرمیتی A و B فقط زمانی هرمیتی است که $[A,B]=0$

توابع عملگرها

هر تابع خوش تعریف از عمگر $\hat{A}$ را می‌توان به صورت زیر بسط داد

$$F(\hat{A})=\sum_{n=0}^{\infty}f_n\hat{A}^n$$

به عنوان مثال، عملگر e^{A} به صورت زیر تعریف می‌شود

$$e^{\hat{A}}=\sum_{n=.}^{\infty}\frac{\hat{A}^n}{n!}=1+\hat{A}+\frac{\hat{A}^2}{2!}+\cdots+\frac{\hat{A}^n}{n!}+\cdots$$

❊ توجه کنید که اگر ضرائب f_n حقیقی باشند و $\hat{A}$ هرمیتی باشد، $F(\hat{A})$ نیز هرمیتی خواهد بود.

نکات بسیار مهم

۱- عملگر $\hat{A}$ با هر تابعی از خودش $F(\hat{A})$ جابجا می‌شود.

$$[\hat{A},F(\hat{A})]=\circ$$
$$[\hat{A},\hat{B}]=\hat{C}\rightarrow[\hat{A},F(\hat{B})]=\hat{C}\frac{dF(\hat{B})}{d\hat{B}}$$

برای مثال

$$[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar\rightarrow\left[\hat{x},\frac{\hat{p}^2}{2m}\right]=i\hbar\frac{\hat{p}}{m}$$
$$\frac{d}{dt}(\hat{A}+\hat{B})=\frac{d\hat{A}}{dt}+\frac{d\hat{B}}{dt}$$
$$\frac{d}{dt}(\hat{A}\hat{B})=(\frac{d\hat{A}}{dt})\hat{B}+\hat{A}\frac{d\hat{B}}{dt}$$

برای مثال

$$\frac{d}{dt}\left(e^{\hat{A}t}e^{\hat{B}t}\right) = \hat{A}e^{\hat{A}t}e^{\hat{B}t} + e^{\hat{A}t}\hat{B}e^{\hat{B}t}$$

دو اتحاد مهم

$$e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}e^{-\lambda\hat{A}} = \hat{B} + \frac{\lambda}{1!}[\hat{A},\hat{B}] + \frac{\lambda^2}{2!}\left[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]\right] + \cdots$$

قاعده بیکر – هاسدورف

$$e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} = e^{\hat{A}+\hat{B}+\frac{[\hat{A},\hat{B}]}{2}+\frac{[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]}{3!}+\cdots}$$

در اتحاد دوم اگر $\left[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]\right]$ مساوی صفر باشد داریم.

$$e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} = e^{\hat{A}+\hat{B}+\frac{[\hat{A},\hat{B}]}{2}}$$

این رابطه به فرمول گلابر معروف است.

عملگرهای یکانی

یک عملگری یکانی است اگر معکوس آن U^{-1} با الحاقی آن برابر باشد.

$$u^{-1} = u^{+} \Rightarrow uu^{-1} = uu^{\dagger} = 1$$

نکته: اگر $\hat{A}$ یک عملگر هرمیتی باشد، عملگر $\hat{T} = e^{i\hat{A}}$ یکانی است:

$$\hat{T}^{\dagger} = e^{-i\hat{A}^{\dagger}} = e^{-i\hat{A}} \qquad \hat{T}^{\dagger}\hat{T} = e^{-i\hat{A}}e^{i\hat{A}} = \mathrm{I} \ \ , \quad \hat{T}\hat{T}^{+} = e^{-i\hat{A}}e^{-i\hat{A}} = \mathrm{I}$$

و همچنین حاصل ضرب دو عملگر یکانی، نیز یکانی خواهد بود.

$$(UV)(UV)^{\dagger} = (UV)\left(V^{\dagger}U^{\dagger}\right) = U\left(VV^{\dagger}\right)U^{\dagger} = UU^{\dagger} = \mathrm{I}$$

نکته: به کمک یک عملگر هرمیتی $(\hat{A} = \hat{A}^{\dagger})\hat{A}$ می‌توان یک عملگر یکانی به صورت زیر ساخت.

$$U = e^{i\alpha A}$$

که درآن α یک عدد حقیقی است.

$$UU^{\dagger} = e^{i\alpha A}\left(e^{i\alpha A}\right)^{\dagger} = e^{i\alpha A}e^{-i\alpha A^{\dagger}} = e^{i\alpha(A-A^{\dagger})} = \mathrm{I}$$

نکته: از تأثیر عملگر یکانی روی یک حالت پایه، می‌توان حالت پایه جدید ساخت.

$$|\tilde{a}_i\rangle = U|a_i\rangle \qquad (*)$$

که در اینجا $|a_i\rangle$ حالت قدیم و $|\tilde{a}_i\rangle$ حالت جدید است.

نکته مهم: برای هر عملگر داریم:

$$\boxed{\left\langle\tilde{a}\middle|\tilde{A}\middle|\tilde{\acute{a}}\right\rangle = \langle\acute{a}|A|\acute{a}\rangle}$$

با قرار دادن رابطه * در این رابطه خواهیم یافت.

$$\langle\acute{a}u^{\dagger}|\tilde{A}|u\acute{a}\rangle = \langle\acute{a}|u^{\dagger}\tilde{A}u|\acute{a}\rangle = \langle\acute{a}|A|\acute{a}\rangle \rightarrow u^{\dagger}\tilde{A}u = A$$

با ضرب کردن این رابطه از طرف چپ در u و از طرف راست در $u^{\dagger}$ داریم.

$$\tilde{A} = UAU^{\dagger}$$

معادله بالا را می‌توان به عنوان تبدیل $\tilde{A}$ ی عملگر A توسط تبدیل یکانی U در نظر گرفت.

نکته: به سادگی می‌توان نشان داد که ضرب اسکالر، تحت تبدیلات یکانی ناورد است زیرا:

$$\left\langle\tilde{a}\middle|\tilde{\acute{a}}\right\rangle = \langle\acute{a}u^{\dagger}|u|\acute{a}\rangle = \langle\acute{a}|u^{\dagger}u|\acute{a}\rangle = \langle\acute{a}|\acute{a}\rangle$$

نکته: عملگر یکانی $e^{\frac{i\hat{p}}{\hbar}}$ مولد انتقال است یعنی

$$e^{\frac{i\hat{p}}{\hbar}}|x\rangle = |x+a\rangle$$

نکته: $e^{iE\hat{L}_z}$ مولد چرخش است.

نمایش ماتریسی

هر بردار را می‌توان با یک ماتریس ستونی و همیوغ آن را با یک ماتریس سطری نمایش داد. زمانی که بردار دلخواه را بر اساس پایه‌های فضا بسط می‌دهیم، ضرایب بسط همان آرایه‌های ماتریس بردار دلخواه می‌باشند:

$$|a\rangle = \sum_{i=1}^{n} a_i |u_i\rangle \equiv \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ . \\ . \\ . \\ a_N \end{pmatrix}$$

$$\langle a| = \sum_{i=1}^{n} a_i^* \langle u_i| \equiv (a_1^* a_2^* \dots a_N^*)$$

در این نمایش عمل الحاقی با تعویض هر آرایه با همیوغ مختلط خود و سپس تعویض جای سطرها با ستون‌ها انجام می‌شود:

$$a_{ij} \xrightarrow{\text{عمل الحاقی}} a_{ji}^*$$

ضرب داخلی دو بردار در نمایش ماتریس بصورت زیر تعریف می‌شود.

$$\langle a|b\rangle = (a_1^* a_2^* \dots a_N^*) \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ . \\ . \\ . \\ b_N \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^{N} a_i^* b_1$$

نمایش ماتریسی عملگر

بنا به تعریف عملگر مشاهده شد

$$\hat{A}|a\rangle = |b\rangle \Rightarrow \sum_i \hat{A}\, a_i |u_i\rangle = \sum_i b_i |u_i\rangle$$

دو طرف رابطه را در یک $\langle u_j|$ ضرب می‌کنیم

$$\sum_i \langle u_j|\hat{A}|u_i\rangle a_i = \sum_i \langle u_j|u_i\rangle b_i = b_j$$

$$\Rightarrow \sum_i \left\langle u_j \middle| \hat{A} \middle| u_i \right\rangle a_i = b_j$$

اگر تعریف کنیم $A_{ji} = \left\langle u_j \middle| \hat{A} \middle| u_i \right\rangle$ آنگاه می‌توان $\hat{A}$ را به صورت یک ماتریس مربعی نوشت.

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_N \end{bmatrix}$$

به عنوان مثال برای محاسبه مقدار میانگین $\hat{A}$ خواهیم داشت

$$\langle \hat{A}\rangle = \left\langle \Psi \middle| \hat{A} \middle| \Psi \right\rangle = \left(\sum_n a_n^* \langle u_n| \right) \hat{A} \left(\sum_m a_m |u_n\rangle\right)$$

$$\sum_{m,n} a_n^* a_m \left\langle u_n \middle| \hat{A} \middle| u_m \right\rangle = \sum_{m,n} a_n^* a_m A_{nm}$$

ماتریس متقارن: ماتریسی است که اگر جای سطر و ستون آن را عوض کنیم (عمل ترانهاد) تغییر نکند

$A_{ij} = A_{ji}$ یا $A = A^T$

ماتریس پاد متقارن: ماتریسی است که اگر جای سطر و ستون آن را عوض کنیم (عمل ترانهاد) قرینه شود

$A_{ij} = -A_{ji}$ یا $A = -A^T$

ماتریس هرمیتی: ماتریسی است که با ماتریس الحاقی خود برابر است

$A_{ij} = A_{ji}^*$ یا $A = A^\dagger$

ماتریس پادهرمیتی: ماتریسی است که برابر منفی الحاقی خود است

$A_{ij} = -A_{ji}^*$ یا $A = -A^\dagger$

ماتریس متعامد: ماتریسی است ترانهاد و معکوسش برابر باشد

$A^T = A^{-1}$ یا $AA^T = \hat{I}$ یا $(AA^T)_{mn} = \delta_{mn}$

ماتریس یکانی: ماتریسی است که الحاقی آن و معکوسش برابر باشد

$A^\dagger = A^{-1}$ یا $AA^\dagger = \hat{I}$ یا $(AA^\dagger)_{mn} = \delta_{mn}$

رد

مجموع آرایه‌های روی قطر اصلی ماتریس یک عملگر، رد خوانده می‌شوند. برای یک نمایش در پایه‌های $\{|u_i>\}$ رد به صورت زیر نشان داده می‌شود

$$Tr(\hat{A}) = \sum_n A_{nn} = \sum_n \langle u_n|\hat{A}|u_n\rangle$$

خواص رد

$$\hat{T}r(A^\dagger) = \left(\hat{T}r(A)\right)^*$$
$$\hat{T}r(\alpha A + \beta B + \gamma C + \cdots) = \alpha\hat{T}r(A^\dagger) + \beta Tr(B) + \gamma Tr(c) + \cdots$$
$$\hat{T}r(\hat{A}\hat{B}\hat{C}) = \hat{T}r(\hat{C}\hat{A}\hat{B}) = \hat{T}r(\hat{B}\hat{C}\hat{A})$$

با استفاده از رابطه آخر می‌توان اثبات کرد که رد یک عملگر تحت تبدیلات یکانی ثابت خواهند ماند.

اگر $\acute{\hat{A}} = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger$ آنگاه:

$$\hat{T}r\left(\acute{\hat{A}}\right) = \hat{T}r(\hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger) = \hat{T}r(\hat{U}^\dagger\hat{U}\hat{A}) = \hat{T}r(\hat{I}\hat{A}) = \hat{T}r(\hat{A})$$

یا به عبارت دیگر رد یک عملگر در نمایش‌های مختلف یکسان است

$$\hat{T}r\left(\acute{\hat{A}}\right) = \sum_m \langle \acute{\varphi}_m|\hat{A}(\sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|)|\acute{\Phi}_m\rangle$$
$$= \sum_{m,n} \langle\varphi_n|\acute{\varphi}_m\rangle\langle\acute{\varphi}_m|\hat{A}|\varphi_n\rangle = \sum_n \langle\varphi_n|(\sum_m |\acute{\varphi}_m\rangle\langle\acute{\varphi}_m|)\hat{A}|\varphi_n\rangle$$
$$= \sum_n \langle\varphi_n|\hat{A}|\varphi_n\rangle$$

می‌توان نشان داد

$$\sum_n\sum_m |\langle U_n|\hat{C}|U_m\rangle|^2 = Tr(\hat{C}\hat{C}^\dagger)$$
$$\sum_n\sum_m |\langle U_n|\hat{C}|U_m\rangle|^2 = \sum_n\sum_m \langle U_n|\hat{C}|U_m\rangle\langle U_n|\hat{C}|U_m\rangle^*$$
$$\sum_n\sum_m \langle U_n|\hat{C}|U_m\rangle\langle U_m|\hat{C}^\dagger|U_n\rangle = \sum_n \langle U_n|\hat{C}C^\dagger|U_n\rangle = \hat{T}r(\hat{C}\hat{C}^\dagger)$$

معادله ویژه مقداری مشاهده پذیرها

$|\Psi\rangle$ یک ویژه بردار (ویژه کت) عملگر خطی $\hat{A}$ نامیده می‌شود اگر داشته باشیم

$$A|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle$$

که در آن λ یک عدد مختلط است. این مقادیر λ را ویژه مقدارهای $\hat{A}$ می‌نامیم. مجموعه این ویژه مقدارها، طیف A نامیده می‌شود.

ویژه کت‌های غیرتبهگن و تبهگن

اگر ویژه کت‌ها، ویژه مقادیر متفاوت داشته باشند غیر تبهگن نامیده می‌شوند.

در صورتی که دو یا چند ویژه کت، ویژه مقادیر یکسان داشته باشند تبهگن نامیده می‌شوند.

مثال: معادله ویژه مقداری $\frac{d^2u_{(x)}}{dx^2} + k^2u_{(x)} = 0$ دارای دو جواب مستقل e^{-ikx}, e^{ikx} است. که دارای ویژه مقادیر یکسان می‌باشند، بنابراین این دو دسته جواب تبهگن می‌باشند.

نکته ۱: اگر دو طرف رابطه ویژه مقداری را همیوغ هرمیتی کنیم، خواهیم داشت:

$$\langle\Psi|A^\dagger = \lambda^*\langle\Psi|$$

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.

نکته ۲: به این واقعیت تأکید می‌شود که بجز در مواردی که A هرمیتی باشد هیچ چیز نمی‌توان از پیش، دربارهٔ $A|\Psi\rangle$ گفت.

یافتن ویژه مقدارها و ویژه بردارهای یک عملگر

$$A|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle$$

طرفین رابطه ویژه مقداری را در $\langle u_i|$ ضرب کنیم

$$\langle u_i|A|\Psi\rangle = \lambda\langle u_i|\Psi\rangle$$

با قرار دادن رابطه بستاری بین $A, |\Psi\rangle$ نتیجه خواهیم گرفت

$$\sum_j \langle u_i|A|u_j\rangle\langle u_j|\Psi\rangle = \lambda\langle u_i|\Psi\rangle$$

با نمادگذاری معمول

$$\langle u_i|\Psi\rangle = C_i \quad , \quad \langle u_i|A|u_j\rangle = A_{ij}$$

معادله به صورت زیر نوشته می‌شود

$$\sum_j A_{ij}C_j = \lambda C_i$$

یا

$$\sum_j [A_{ij} - \lambda\delta_{ij}]C_j = 0$$

رابطه بالا را می‌توان به عنوان یک دستگاه معادلات در نظر گرفت که مجهولات آن C_j ها (مؤلفه‌های ویژه بردار) هستند. چون این دستگاه خطی و همگن است، در صورتی دارای یک جواب غیر بدیهی است که فقط و فقط دترمینان ضرائب صفر باشد. شرط فوق به صورت زیر نوشته می‌شود

$$Det[A - \lambda I] = 0$$

که در آن A ماتریس $N \times N$ از عناصر A_{ij} و I ماتریس واحد است.

$$\begin{bmatrix} A_{11}-\lambda & A_{12} & A_{13} & \cdots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22-\lambda} & A_{23} & \cdots & A_{ZN} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \\ A_{1N} & A_{2N} & A_{3N} & \cdots & A_{NN}-\lambda \end{bmatrix} = 0$$

این یک معادله درجه Nام از λ است. در نتیجه دارای N ریشه حقیقی یا موهومی، مختلف یا یکسان است.

نکته: در مورد عملگرهایی که قطری هستند به خاطر داشته باشید که ویژه مقادیر آنها همان عناصر روی قطر اصلی هستند و ویژه بردارهایشان همان بردارهای پایه می‌باشند.

$$\hat{H} = \hbar\omega \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \circ & \circ \\ \circ & \frac{3}{2} & \circ \\ \circ & \circ & \frac{5}{2} \end{pmatrix} \longrightarrow \lambda_1 = \frac{\hbar\omega}{2} \quad , \quad \lambda_2 = \frac{3}{2}\hbar\omega \quad , \quad \lambda_3 = \frac{5}{2}\hbar\omega$$

$$|n_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ \circ \\ \circ \end{pmatrix} \quad , \quad |n_2\rangle = \begin{pmatrix} \circ \\ 1 \\ \circ \end{pmatrix} \quad , \quad |n_3\rangle = \begin{pmatrix} \circ \\ \circ \\ 1 \end{pmatrix}$$

خواص ویژه مقدارها و ویژه بردارهای یک عملگر هرمیتی

۱- ویژه مقدارهای یک عملگر هرمیتی حقیقی‌اند.

۲- دو ویژه بردار یک عملگر هرمیتی متناظر با دو ویژه مقدار متفاوت متعامدند.

اثبات: رابطه زیر را در نظر بگیرید

$$\langle b|A|a\rangle = a\langle b|a\rangle$$

که $|a\rangle$ یک ویژه حالت $\hat{A}$ با ویژه مقدار a است، از طرف دیگر می‌توان نوشت:

$$\langle b|A^{\dagger}|a\rangle = \langle A(b)|a\rangle = b^{*}\langle b|a\rangle$$

زیرا $|b\rangle$ یک ویژه حالت عملگر A با ویژه مقدار b است. اما برای عملگر هرمیتی داریم $A = A^{\dagger}$، و در نتیجه

$$a\langle b|a\rangle = b^{*}\langle b|a\rangle$$
$$(a-b^{*})\langle b|a\rangle = 0$$

اگر قرار دهیم $|b\rangle = |a\rangle$ بلافاصله دیده می‌شود که ویژه مقدارها باید حقیقی باشند. بنابراین $b = b^{*}$ و به ازای $a \neq b$ باید $\langle b|a\rangle$ صفر باشد که این همان شرط تعامد است.

تعبیر احتمالی

چگونگی تعبیر موج توصیف کننده ذره و اینکه آیا می‌توان این موج را موجود فیزیکی در نظر گرفت یا نه مسئله مورد بحث سال‌های اول مکانیک کوانتومی بود. ماکس بورن راه را برای تعبیر آماری تابع موج ذره هموار کرد.

از آنجا که Ψ ممکن است مختلط باشد در حالی که احتمال همیشه حقیقی است. پس Ψ تعبیر فیزیکی خاصی ندارد، اما ماکس بورن $\Psi^{*}\Psi = |\Psi(\vec{r},t)|^2$ را به عنوان تعریف احتمالی معرفی کرد.

بر اساس تعبیر آماری ماکس بورن

$$|\Psi(\vec{r},t)|^2 dv$$

احتمال یافتن ذره‌ای در عنصر حجم $dv = dxdydz$ در زمان t را نشان می‌دهد. عبارت فوق را به یک بهنجار می‌کنیم. یعنی Ψ را طوری انتخاب می‌کنیم که

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(\vec{r},t)|^2 dv = 1$$

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \sum_{i,j} c_i^{*} c_j \langle c_i|u_j\rangle = \sum_i |c_i|^2 = 1$$

عبارت فوق به این معنی است که ذره در جایی از فضا یافت شود.

تابع موجود را در صورتی می‌توان بهنجار کرد که Ψ انتگرال پذیر مجذوری باشد یعنی:

$$\int |\Psi(\vec{r},t)|^2 dv < \infty$$

اندازه گیری

به تعبیر دیراک در مکانیک کوانتمی اندازه گیری مشاهده پذیر باعث می‌شود سیستم به یکی از ویژه حالت‌های ممکن جهش کند، همچنین در بخش‌های قبل دیدیم که می‌توان حالت یک سیستم را بر اساس پایه‌های فضا بسط داد. احتمال جهش به هر یک از ویژه حالت‌ها توسط مربع اندازه ضریب بسط سیستم بر روی آن ویژه حالت بدست آید:

$$\text{احتمال جهش بر روی حالت } u_i = |c_i|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} |u_i(\vec{x})\Psi(\vec{x})|^2 dv$$

$$|c_i|^2 = |\langle u_i|\Psi\rangle|^2$$

مقدار میانگین و احتمال

مقدار متوسط مشاهده پذیر $\hat{A}$ در حالت Ψ را به صورت $\langle\hat{A}\rangle$ نمایش می‌دهند. این مقدار را به عنوان میانگین نتایج به دست آمده، وقتی که تعداد زیادی اندازه‌گیری از این مشاهده پذیر روی دستگاه‌هایی که همگی در حالت Ψ قرار دارند انجام شود تعریف می‌کنیم. نمایش ریاضی مقدار میانگین یک مشاهده پذیر بر روی حالت Ψ در صورتی که بهنجار فرض شود به صورت زیر تعریف می‌شود

$$\langle\hat{A}\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(\vec{x},t)\hat{A}\Psi(\vec{x},t)dv$$

همچنین برای نمایش دیراک داریم

$$\langle\hat{A}\rangle = \langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle = \sum_{i,j} c_i^* \langle u_i|\hat{A}|u_j\rangle c_j$$

اگر $|u_i\rangle$ ویژه حالت‌های $\hat{A}$ باشند خواهیم داشت

$$\hat{A}|u_i\rangle = a_i|u_i\rangle$$
$$\Rightarrow \langle\hat{A}\rangle = \sum_i |c_i|^2 a_i = \sum_i p_i a_i$$

که p_i ها احتمال حضور سیستم در حالت $|u_i\rangle$ را نمایش می‌دهند

$$p_i = |\langle u_i|\Psi\rangle|^2$$

اگر $|\Psi\rangle$ بهنجار نباشد رابطه قبل به صورت زیر نوشته می‌شود

$$\langle\hat{A}\rangle = \frac{\sum_i p_i a_i}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \quad , \qquad P_i = \frac{|\langle u_i|\Psi\rangle|^2}{\langle\Psi|\Psi\rangle}$$

نکته: اگر $\hat{A}$ و $\hat{B}$ دو عملگر جابه‌جا شونده باشند و ویژه مقادیر $\hat{A}$ غیرتبهگن باشند بنابراین آرایه‌های ماتریس $\langle\acute{\acute{a}}|\hat{B}|\acute{a}\rangle$ قطری هستند (یادآور می‌شود که ماتریس A قطری خواهد بود زیرا در پایه‌های $\{|\acute{a}\rangle\}$ یعنی ویژه مقدارهای خودش نمایش داده شده است) برای اثبات به سادگی داریم:

$$\langle\acute{\acute{a}}|[\hat{A},\hat{B}]|\acute{a}\rangle = (\acute{\acute{a}} - \acute{a})\langle\acute{\acute{a}}|B|\acute{a}\rangle = 0$$

بنابراین اگر $\acute{a} \neq \acute{\acute{a}}$ باشد آرایه $\langle\acute{\acute{a}}|\hat{B}|\acute{a}\rangle$ صفر خواهد بود:

$$\langle\acute{\acute{a}}|\hat{B}|\acute{a}\rangle = \delta_{\acute{a},\acute{\acute{a}}}\langle\acute{a}|\hat{B}|\acute{a}\rangle$$

بنابراین هر دو عملگر را می‌توان در یک پایه به صورت قطری نمایش داد.

$$\hat{B}|\acute{a}\rangle \sum_{\acute{\acute{a}},\acute{\acute{\acute{a}}}} |\acute{\acute{\acute{a}}}\rangle\langle\acute{\acute{\acute{a}}}|\hat{B}|\acute{\acute{a}}\rangle\langle\acute{\acute{a}}|\acute{a}\rangle(\langle\acute{a}|\hat{B}|\acute{a}\rangle)|\acute{a}\rangle$$

با تعریف $\acute{b} = \langle\acute{a}|B|\acute{a}\rangle$ خواهیم دید که $|\acute{a}\rangle$ ویژه کت $\hat{B}$ نیز خواهد بود. برای نمایش این نکته که $|\acute{a}\rangle$ ویژه کت مشترک $\hat{A}$ و $\hat{B}$ است آن را به صورت زیر می‌نویسیم

$$|\acute{a}\rangle \longrightarrow |\acute{a},\acute{b}\rangle$$
$$\hat{A}|\acute{a},\acute{b}\rangle = \acute{a}|\acute{a},\acute{b}\rangle$$

$$\hat{B}|\acute{a},\acute{b}\rangle = \acute{b}|\acute{a},\acute{b}\rangle$$
$$\left\langle \acute{a},\acute{\acute{b}}\middle|\acute{a},\acute{b}\right\rangle = \delta_{\acute{a},\acute{a}}\delta_{\acute{b},\acute{b}}$$

عدم قطعیت

عدم قطعیت برای عملگر $\hat{A}$ به صورت زیر تعریف می شود

$$\Delta\hat{A} = \hat{A} - \langle\hat{A}\rangle$$

که میانگین گیری در جمله دوم بر روی یک سیستم فیزیکی مشخص انجام می‌گیرد.

با استفاده از رابطه بالا می‌توان نوشت

$$\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle = \langle(\hat{A}^2 - 2\hat{A}\langle\hat{A}\rangle + \langle\hat{A}\rangle^2)\rangle = \langle\hat{A}^2\rangle - \langle\hat{A}\rangle^2$$

این رابطه پخش شدگی یا انحراف معیار سیستم هنگام اندازه گیری مشاهده پذیر $\hat{A}$ می‌باشد.

اکنون رابطه عدم قطعیت بین دو مشاهده پذیر به صورت زیر تعریف می شود

$$\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle\langle(\Delta\hat{B})^2\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle|^2$$

همانطورکه پیداست مشاهده پذیرهایی که جابه‌جایشان صفر است عدم قطعیت صفر خواهند داشت.

به عنوان مثال برای مشاهده پذیرهای تکانه و مکان خواهیم داشت:

$$[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar \Rightarrow \qquad \langle(\Delta\hat{x})^2\rangle\langle(\Delta\hat{p})^2\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle i\hbar\rangle|^2$$
$$\langle(\Delta\hat{x})\rangle\langle(\Delta\hat{p})\rangle \geq \frac{\hbar}{2}$$

پاریته: یک سیستم فیزیکی در نظر بگیرید، عملگر پاریته π توسط عمل روی بردارهای $|r\rangle$ تعریف می‌شود.

$$\pi|\vec{r}\rangle = |-\vec{r}\rangle$$

بنابراین، عناصر ماتریسی π در نمایش $\{|\vec{r}\rangle\}$ عبارتند از

$$\langle\vec{r}\,|\,\pi\,|\,\vec{r}'\rangle = \langle\vec{r}\,|-\vec{r}'\rangle = \delta(r\dagger\vec{r}')$$

و برای بردار حالت $|\Psi\rangle$ داریم

$$\langle\vec{r}|\pi|\Psi\rangle = \Psi_+(-\vec{r})$$

در واقع اگر سیستم فیزیکی داشته باشیم که بردار حالت آن $|\Psi\rangle$ باشد $\pi|\Psi\rangle$ سیستم فیزیکی را تشریح می‌کند که توسط انعکاس نسبت به محورها به دست آمده باشد.

مثال: برای حالت یک بعدی قاعده عمل پاریته انعکاس $x \to -x$ است. بنابراین برای هر تابع موج $\Psi(x)$ داریم:

$$\pi\Psi(x) = \Psi(-x) \qquad (*)$$

خواص عملگر پاریته π

۱- با توجه به رابطه (*)، برای تابع زوج می‌توان نوشت

$$\pi\Psi^{(+)}(x) = \Psi^{(+)}(x)$$

و برای تابع فرد

$$\pi\Psi^{(-)}(x) = -\Psi^{(-)}(x)$$

دو رابطه بالا معادله ویژه مقداری هستند و مشاهده می‌شود که توابع زوج ویژه تابع π با ویژه مقدار ۱+ و توابع فرد ویژه توابع π با ویژه مقدار ۱- هستند.

فرض کنید

$$\pi\Psi(x) = \lambda\Psi(x)$$

با اعمال دوباره π خواهیم داشت:

$$\pi^2\Psi(x) = \pi\lambda\Psi(x) = \lambda^2\Psi(x)$$

اما $\pi^2\Psi(x)$ همان $\Psi(x)$ است. زیرا دو انعکاس متوالی چیزی را تغییر نمی‌دهد در این صورت $\lambda^2 = 1$ و $\lambda = \pm 1$.

نکته: هر تابع اختیاری را می‌توان به صورت مجموع یک تابع زوج و یک تابع فرد نوشت.

$$\Psi(x) = \frac{1}{2}[\Psi(x) + \Psi(-x)] + \frac{1}{2}[\Psi(x) - \Psi(-x)]$$

۲- همیوغ هرمیتی عملگر پاریته با خودش برابر است. (π هرمیتی است).

$$\langle\vec{r}|\pi|\Psi\rangle = \langle-\vec{r}|\Psi\rangle$$

چون این معادله برای تمام $|\Psi\rangle$ معتبر است، می‌توان نتیجه گرفت:

$$\langle\vec{r}|\pi = \langle-\vec{r}|$$

بعلاوه همیوغ هرمیتی عملگر پاریته به صورت زیر است

$$\langle\vec{r}|\pi^\dagger = \langle-\vec{r}|$$

از دو رابطه بالا می‌توان نتیجه گرفت که π هرمیتی است.

$$\pi^\dagger = \pi$$

۳- همانطور که قبلاً در (۲) اشاره شد $\pi^{-1} = \pi$ بنابراین

$$\pi^{-1} = \pi^\dagger$$

بنابراین π یکانی است.

۴- دو عملگر P_+ و P_- را به صورت زیر تعریف می‌کنیم.

$$P_+ = \frac{1}{2}(1+\pi) \qquad , \; P_- = \frac{1}{2}(1-\pi)$$

این عملگرها هرمیتی اند و به سادگی می‌توان نشان داد که

$$p_+^2 = p_+ \quad , \quad p_-^2 = p_-$$

و بلافاصله می‌توان دید که

$$p_+ + p_- = \mathrm{I}$$

لذا برای هر $|\Psi\rangle$ داریم

$$|\Psi\rangle = (p_+ + p_-)|\Psi\rangle = |\Psi_+\rangle + |\Psi_-\rangle$$
$$|\Psi_+\rangle = p_+|\Psi\rangle \qquad , \qquad |\Psi_-\rangle = p_-|\Psi\rangle$$

که

روابط بالا را در نمایش $\{|\mathrm{r}\rangle\}$ می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\langle\vec{r}|\Psi_+\rangle = \Psi_+(r) \qquad , \qquad \langle\vec{r}|\Psi_-\rangle = \Psi_-(r)$$

که $\Psi_+(r)$ و $\Psi_-(r)$ به ترتیب توابع موج زوج و فرد هستند.

عملگرهای زوج و فرد

یک عملگر زوج B_+ عملگری است که با π جابجایی پذیر است. یک عملگر فرد B_- عملگری است که با π پادجابجایی پذیر است.

$$[\pi, B_+] = 0 \qquad , \; \{\pi, B_-\} = 0$$

قواعد گزینش در مورد عناصر ماتریسی عملگرهای زوج و فرد

۱- عناصر ماتریسی یک عملگر زوج بین بردارها یا حالت‌هایی با پاریته مخالف صفر است.

۲- عناصر ماتریسی یک عملگر فرد بین بردارها یا حالت‌هایی با پاریته یکسان صفر است.

مثال: برای عملگرهای Z, Y, X داریم:

$$\pi X|\vec{r}\rangle = \pi X|x,y,z\rangle = x\pi|x,y,z\rangle$$
$$x|-x,-y,-y\rangle = x|-\vec{r}\rangle$$
$$X\pi|\vec{r}\rangle = X|-x,-y,-y\rangle = -x|-x,-y,-y\rangle = -x|-\vec{r}\rangle$$

با جمع کردن این دو رابطه داریم

$$(\pi X + X\pi)|\vec{r}\rangle = ۰ \qquad \Rightarrow \quad \{X, \pi\} = ۰$$

لذا X فرد است.

فضای مختصات و اندازه حرکت

در فیزیک برخی کمیت‌های قابل اندازه گیری مانند مکان و اندازه حرکت دارای طیف پیوسته می‌باشند و معادله ویژه مقداری برای $\hat{x}$ و $\hat{p}$ عبارتند از

$$\hat{x}|\acute{x}\rangle = \acute{x}|\acute{x}\rangle \quad , \quad \hat{p}|\acute{p}\rangle = \acute{p}|\acute{p}\rangle$$

در این حالت ویژه حالت‌های $|\acute{x}\rangle$ و $|\acute{p}\rangle$ باید به تابع دلتای دیراک بهنجار شوند،

$$\left\langle \acute{X} \middle| \acute{\acute{X}} \right\rangle = \delta\left(\acute{X} - \acute{\acute{X}}\right) \quad , \quad \left\langle \acute{P} \middle| \acute{\acute{P}} \right\rangle = \delta\left(\acute{P} - \acute{\acute{P}}\right)$$

مؤلفه‌های ماتریسی $\hat{p}$ و $\hat{x}$ در نمایش‌های مکان و اندازه حرکت بصورت زیر است

$$\langle \acute{x}|\hat{p}|\acute{\acute{x}}\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial \acute{x}}\delta(\acute{x} - \acute{\acute{x}})$$
$$\langle \acute{p}|\hat{x}|\acute{\acute{p}}\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial \acute{p}}\delta(\acute{p} - \acute{\acute{p}})$$

عناصر ماتریسی $\langle \acute{x}|\hat{p}^n|\acute{\acute{x}}\rangle$ و $\langle \acute{p}|\hat{p}^n|\acute{\acute{p}}\rangle$ را می‌توان با محاسبه حاصل ضرب ماتریسی به سادگی محاسبه کرد، به طور خلاصه داریم

$$\langle \acute{x}|\hat{p}^n|\acute{\acute{x}}\rangle = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial \acute{x}}\right)^n \delta(\acute{x} - \acute{\acute{x}})$$
$$\langle \acute{p}|\hat{x}^n|\acute{\acute{p}}\rangle = \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial \acute{p}}\right)^n \delta(\acute{p} - \acute{\acute{p}})$$

از طرف دیگر خواهیم داشت

$$\langle \acute{x}|\hat{p}|\acute{p}\rangle = \acute{p}\langle \acute{x}|\acute{p}\rangle$$

یا

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial \acute{x}}\langle \acute{x}|\acute{p}\rangle = \langle \acute{x}|\hat{p}|\acute{p}\rangle$$

با استفاده از این دو رابطه می‌توان $\langle \acute{x}|\acute{p}\rangle$ را از طریق معادله دیفرانسیل زیر محاسبه کرد

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial \acute{x}}\langle \acute{x}|\acute{p}\rangle = \acute{p}\langle \acute{x}|\acute{p}\rangle$$

که جواب آن عبارتست از:

$$\langle \acute{x}|\acute{p}\rangle = \Psi_{\acute{p}}(\acute{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i\acute{p}\acute{x}}{\hbar}}$$

اگر $\psi(x,t)$ و $\phi(p,t)$ به ترتیب نمایش مختصاتی حالت ذره و نمایش اندازه حرکتی ذره باشند از طریق تبدیل فوریه با هم ارتباط دارند.

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int \Phi(p,t)e^{\frac{ipx}{\hbar}}dp$$
$$\Phi(p,t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int \Psi(x,t)e^{\frac{-ipx}{\hbar}}dx$$

در مسائل سه بعدی ضریب انتگرال به جای توان $\frac{1}{2}$ دارای توان $\frac{3}{2}$ است.

نکته: تبدیل فوریه یک تابع گاوسی، گاوسی است. تبدیل فوریه یک تابع لورنتسی، به صورت زیر است:

$$\Psi(x) = \frac{A}{x^2+1}\ , \phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{ipx}{\hbar}}\Psi(x)dx = \frac{A}{2\sqrt{\hbar}}e^{-|k|}\ , A = \sqrt{\frac{\pi}{2}}$$

نکته: مقدار میانگین یک تابع دلخواه در دو نمایش به صورت زیر است

$$\langle F(\vec{r})\rangle = \int \Phi^*(\vec{p})F(i\hbar\vec{\nabla}_p)\Phi(\vec{p})d^3p$$
$$\langle F(\vec{p})\rangle = \int \Psi^*(\vec{r})F(-i\hbar\vec{\nabla})\Psi(\vec{r})d^3r$$

مسائل حل شده فصل اول

۱- عملگر $\hat{B}=\hat{x}+a\frac{d}{dx}$ که در آن a مقدار ثابت حقیقی است را در نظر بگیرید. جابه‌جا گر $[B,B^{\dagger}]$ چیست؟

$$\hat{B}=\hat{x}+a\frac{d}{dx}\ ,\hat{B}^{\dagger}=\hat{x}^{\dagger}+a^{*}(\frac{d}{dx})^{\dagger}=\hat{x}-a\frac{d}{dx}$$
$$[\hat{B},\hat{B}^{\dagger}]=\left\{\left(\hat{x}+a\frac{d}{dx}\right)\left(\hat{x}-a\frac{d}{dx}\right)-\left(\hat{x}-a\frac{d}{dx}\right)\left(\hat{x}+a\frac{d}{dx}\right)\right\}$$
$$\hat{B}\,\hat{B}^{\dagger}=\left(\hat{x}-a\frac{d}{dx}\right)=\hat{x}^{2}-a\hat{x}\frac{d}{dx}+a\frac{d}{dx}\hat{x}-a^{2}\frac{d^{2}}{dx^{2}}$$
$$\hat{B}^{\dagger}\hat{B}=\left(\hat{x}-a\frac{d}{dx}\right)\left(\hat{x}+a\frac{d}{dx}\right)=\hat{x}^{2}+a\hat{x}\frac{d}{dx}-a\frac{d}{dx}\hat{x}-a^{2}\frac{d^{2}}{dx^{2}}$$
$$[\hat{B},\hat{B}^{\dagger}]=-2a\hat{x}\frac{d}{dx}+2a\hat{x}\frac{d}{dx}\hat{x}=-2a\left(\hat{x}\frac{d}{dx}-\frac{d}{dx}\hat{x}\right)$$

با اعمال رابطه فوق بر روی تابع Ψ داریم

$$[\hat{B},\hat{B}^{\dagger}]\Psi=-2a\left[\hat{x}\frac{d}{dx}-\frac{d}{dx}\hat{x}\right]\Psi(x)=-2a\left[x\frac{d\Psi}{dx}-\Psi-x\frac{d\Psi}{dx}\right]$$
$$[\hat{B},\hat{B}^{\dagger}]\Psi=-2a\Psi$$
$$[\hat{B},\hat{B}^{\dagger}]=2a$$

۲- عملگر $\hat{B}$ بر حسب عملگر $\hat{A}$ به صورت $\hat{B}=e^{i\hat{A}}$ تعریف شده است. شرط خطی و یکانی بودن عملگر $\hat{B}$ چیست؟

برای یکانی بودن B باید داشته باشیم

$$\hat{B}^{\dagger}\hat{B}=\hat{I}\quad ,\quad \hat{B}=e^{i\hat{A}}\Rightarrow\hat{B}^{\dagger}=e^{i\hat{A}^{\dagger}}$$
$$\hat{B}^{\dagger}=\hat{B}^{-1}\Rightarrow e^{-i\hat{A}^{\dagger}}\quad e^{-i\hat{A}}\Rightarrow\hat{A}^{\dagger}=\hat{A}$$

بنابراین $\hat{A}$ باید هرمیتی باشد.

۳- اگر $|\Psi\rangle$ معرف یک حالت دستگاه و $\hat{u}$ عملگر یکانی و همچنین داشته باشیم، $\hat{u}|\Psi\rangle=|\Phi\rangle$ آنگاه $\langle\Phi|\Phi\rangle$ چه خصوصیتی خواهد داشت؟

$$\hat{u}|\Psi\rangle=|\Phi\rangle$$
$$\langle\Phi|\Phi\rangle=\langle\Psi u^{\dagger}|\hat{u}\Psi\rangle=\langle\Psi|\hat{u}^{\dagger}u|\Psi\rangle=\langle\Psi|\Psi\rangle$$

به این معنی است که طول بردار (حالت) در طی تبدیلات یکانی ثابت است.

۴- تابع موج ذره‌ای در فضای اندازه حرکت خطی در یک بعد به شکل $\Phi(p)=\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4}e^{\frac{-\alpha p^{2}}{2}}$ است که در آن α مقدار ثابت حقیقی است. عدم قطعیت در سنجش اندازه حرکت خطی را به دست آورید.

برای محاسبه Δp باید ابتدا $\langle p^{2}\rangle$ و $\langle p\rangle^{2}$ را محاسبه کنیم. با استفاده از تعریف $\langle p^{n}\rangle$ می‌توان اثبات کرد که:

$$\langle\hat{p}^{n}\rangle=\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{-d}{d\alpha}\right)^{\frac{n}{2}}\left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}}$$

لذا اگر n فرد باشد $\langle p^{n}\rangle=0$ در نتیجه $\langle p\rangle=0$ و به ازای $n=2$ داریم

$$\langle\hat{p}^{2}\rangle=\frac{1}{2\alpha}\Rightarrow\quad\Delta\hat{p}=\sqrt{\langle\hat{p}^{2}\rangle-\langle\hat{p}\rangle^{2}}=\frac{1}{\sqrt{2\alpha}}$$

۵- هامیلتونی یک ذره کلاسیک به صورت $H = \lambda X^2 p$ است. هامیلتونی کوانتومی با فرض حقیقی بودن ثابت λ چیست؟

با توجه به این که $\hat{x}$ و $\hat{p}$ در کوانتوم با هم جابه‌جا پذیر نیستند در تعبیر یک تابع کلاسیک $f(\hat{x},\hat{p})$ به صورت عملکردی آن ابهام به وجود می‌آید. برای رفع این ابهام این قاعده را می‌پذیریم که $f(\hat{x},\hat{p})$ نسبت به x و p متقارن شود.

به عنوان مثال:

$$xp \longrightarrow \frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x})$$
$$x^2p \longrightarrow \frac{1}{4}(\hat{x}^2\hat{p}+2\hat{x}\hat{p}\hat{x}+\hat{p}\hat{x}^2)$$
$$\Rightarrow \lambda x^2 p \longrightarrow \frac{1}{2}(\hat{x}^2(\hat{x}\hat{p})+(\hat{x}\hat{p})\hat{x}) \longrightarrow \frac{\lambda}{2}(\hat{x}\frac{\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x}}{2}+\frac{\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x}}{2}\hat{x})$$
$$\Rightarrow \hat{H} \longrightarrow \frac{\lambda}{4}(\hat{x}^2\hat{p}+2\hat{x}\hat{p}\hat{x}+\hat{p}\hat{x}^2)$$

۶- تابع موج ذره‌ای آزاد در فضای یک بعدی به صورت بسته موجی است که با رابطه‌ی $\Psi(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{\frac{-\alpha x^2}{2}}$ توصیف می‌شود. مقدار انتظاری (میانگین) اندازه حرکت ذره را به دست آورید.

تابع موج ذره زوج است و چون در محاسبه $\langle\hat{p}\rangle$ از تابع مشتق گرفته می‌شود لذا انتگرال به صورت یک تابع فرد است. از طرفی چون انتگرال گیری روی یک بازه متقارن صورت می‌گیرد لذا حاصل برابر صفر خواهد بود.

$$\langle\hat{p}\rangle_\Psi = \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)\Psi dx = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\alpha X^2}{2}}(-\alpha x)e^{\frac{\alpha X^2}{2}}dx = ۰$$

۷- عملگر $\hat{L}$ در ناحیه $-a \le x \le a$ به صورت $\hat{L}f(x) = \frac{\hbar}{i}\frac{df(x)}{dx} - \beta X f(x)$ تعریف شده است. تابع $f(x)$ در شرط مرزی $f(-a) = f(a)$ صدق می‌کند. ویژه مقادیر این عملگر را به دست آوردید.

$$\hat{L}f(x) = \lambda f(x) \Rightarrow \frac{df(x)}{dx} = \frac{i}{\hbar}(\beta x+\lambda)f(x)$$
$$\frac{df}{f} = \frac{i}{\hbar}(\beta x+\lambda)f(x) \quad \Rightarrow \ln(f(x)) = \frac{i}{\hbar}\left(\frac{1}{2}\beta X^2+\lambda X\right) + \text{مقدار ثابت}$$
$$\Rightarrow f(x) = Aexp\left\{\frac{i\beta X^2}{2\hbar}+\frac{i\lambda X}{\hbar}\right\}$$

با اعمال شرط مرزی $f(a) = f(-a)$ داریم:

$$Aexp\left\{\frac{i\beta a^2}{2\hbar}+\frac{i\lambda a}{\hbar}\right\} = Aexp\left\{\frac{i\beta a^2}{2\hbar}-\frac{i\lambda a}{\hbar}\right\}$$
$$\exp\left\{\frac{i\lambda a}{\hbar}\right\} = \exp\left\{-\frac{i\lambda a}{\hbar}\right\} \Rightarrow \exp\left\{\frac{2i\lambda a}{\hbar}\right\} = 1$$
$$\frac{2\lambda a}{\hbar} = 2n\pi \Rightarrow \lambda = \frac{n\pi\hbar}{a}, n = ۰,1,2,\dots$$

۸- عملگر $\hat{A}$ به صورت زیر تعریف می‌شود. حاصل جابه‌جاگر $[\hat{X},\hat{A}]$ را به دست آورید.

$$\hat{A}f(x) = \int_0^x f(\acute{x})d\acute{x}$$
$$[\hat{X},\hat{A}]f(x) = (\hat{X}\hat{A}-\hat{A}\hat{X})f(x) = x\int_0^x f(\acute{x})d\acute{x} - \int_0^x \acute{x}f(\acute{x})d\acute{x}$$

با استفاده از انتگرال به روش جزء به جز خواهیم داشت:

$$\begin{cases}\acute{x} = u \Rightarrow d\acute{x} = du \quad \Rightarrow v = \int_0^x \acute{x}f(x)d\acute{x} \\ f(\acute{x})d\acute{x} = dv\end{cases}$$
$$\Rightarrow \int_0^x \acute{x}f(\acute{x})d\acute{x} = uv - \int vdu = x\int_0^x f(\acute{x})d\acute{x} - \int_0^x\left[\int_0^{\acute{x}} f(\acute{\acute{x}})d\acute{\acute{x}}\right]d\acute{x}$$
$$\Rightarrow [\hat{x},\hat{A}]f(x) = x\int_0^x f(\acute{x})dx - x\int_0^x f(\acute{x})d\acute{x} + \int_0^x\left[\int_0^{\acute{x}} f(\acute{\acute{x}})d\acute{\acute{x}}\right]d\acute{x}$$
$$\Rightarrow [\hat{x},\hat{A}]f(x) = \int_0^x\left[\int_0^{\acute{x}} f(\acute{\acute{x}})d\acute{\acute{x}}\right]d\acute{x} \Rightarrow [\hat{x},\hat{A}] = \hat{A}^2$$

۹- اگر $\hat{A}$ و $\hat{B}$ دو عملگر باشند در چه مواردی اتحاد $e^{\hat{A}+\hat{B}}=e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}$ برقرار است؟

تابع $f(\lambda)=e^{\lambda\hat{A}}e^{\lambda\hat{B}}$ را معرفی می‌کنیم. از طرفی داریم:

$$[\hat{B}^n,\hat{A}]=n\hat{B}^{n-1}[\hat{B},\hat{A}],[\hat{B}\hat{A}^n]=n\hat{A}^{n-1}[\hat{B},\hat{A}]$$

بنابراین:

$$[\hat{B},e^{-\lambda\hat{A}}]=\sum_{n=\circ}^{+\infty}(-1)^n\frac{\lambda^n}{n!}[\hat{B},\hat{A}^n]=n\hat{A}^{n-1}[\hat{B},\hat{A}]$$

این بدان معنی است که:

$$\hat{B}e^{-\lambda\hat{A}}=\lambda e^{-\lambda\hat{A}}(\hat{B}-\lambda[\hat{B},\hat{A}]) \quad \text{یا} \quad e^{-\lambda\hat{A}}\hat{B}e^{-\lambda\hat{A}}=\hat{B}\lambda[\hat{A},\hat{B}]$$

حال با مشتق گیری از تابع $F(x)$ نسبت به λ:

$$\frac{dd(\lambda)}{d\lambda}=\hat{A}e^{\lambda\hat{A}}e^{\lambda\hat{B}}+e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}e^{\lambda\hat{B}}=(\hat{A}+e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}e^{-\lambda\hat{A}})F(\lambda)$$

$$\frac{dd(\lambda)}{d\lambda}=(\hat{A}+\hat{B}+\lambda[\hat{A},\hat{B}])F(\lambda)$$

چون عملگرها مستقل از λ می‌باشند، با در نظر گرفتن این عملگرها به صورت ثابت‌های معمولی می‌توان از این معادله دیفرانسیل برای $f(\lambda)$ انتگرال گیری کرد، که در این صورت به ما می‌دهد

$$f(\lambda)=e^{(\hat{A}+\hat{B})\lambda+[\hat{A},\hat{B}]\frac{\lambda^2}{2}}$$

ثابت هنجارش را مساوی واحد انتخاب نمودیم زیرا $f(\circ)=1$ و با قرار دادن $\lambda=1$ اتحاد زیر را بدست می‌آوریم:

$$e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}=e^{\hat{A}+\hat{B}}$$

که نشان می‌دهد، قاعده فوق تنها در صورتی برآورده می‌شود که عملگرهای $\hat{A}$ و $\hat{B}$ جابجاپذیر باشند.

۱۰- پاد جابجایی دو عملگر $\hat{A}$ و $\hat{B}$ صفر است. اگر Ψ ویژه حالت مشترک این دو عملگر باشد رابطه بین ویژه مقادیر $\hat{A}$ و $\hat{B}$ را حساب کنید.

۱) $a\neq\circ$, $b\neq\circ$ ۲) $ab=\circ$ ۳) $a=b\neq\circ$ ۴) $a=-b\neq\circ$

داده‌های مسئله شامل روابط مقابل می‌شود.

$$\{\hat{A},\hat{B}\}=\circ \quad , \quad \hat{A}|\Psi\rangle=a|\Psi\rangle$$

$$\hat{B}|\Psi\rangle=b|\Psi\rangle$$

$$\{\hat{A},\hat{B}\}|\Psi\rangle=\circ \Rightarrow \quad \hat{A}\hat{B}\Psi+\hat{B}\hat{A}\Psi=\circ \quad \Rightarrow ab\Psi+ba\Psi=\circ$$

از طرفی همانطور که در مسئله اشاره شده ویژه کت مشترک $|\Psi\rangle$ را داشته باشند باید با هم جابجا شوند.

$$[\hat{A},\hat{B}]\Psi\rangle=\hat{A}\hat{B}\Psi-\hat{B}\hat{A}\Psi=\circ \Rightarrow ab\Psi-ba\Psi=\circ \Rightarrow ab-ba=\circ$$

$$\begin{cases} ab+ba=\circ \\ ba-ab=\circ \end{cases} \quad \Rightarrow \quad 2ab=\circ \quad \Rightarrow ab=0$$

گزینه ۲ صحیح است.

۱۱- رابطه عدم قطعیت بین مختصات $\hat{x}$ و انرژی جنبشی $\hat{T}=\frac{\hat{P}_x^2}{2m}$ را بدست آورید.

۱) $\frac{\hbar}{2}\left|\langle\frac{p}{m}\rangle\right|$ ۲) $\frac{\hbar}{2m}$ ۳- $\frac{\hbar}{2}\langle\frac{p^2}{2m}\rangle$ ۴- $\frac{\hbar}{2}|p|$

$$[\hat{X},\hat{T}]=\frac{1}{2m}[\hat{X},\hat{P}_x^2]=\frac{1}{2m}(\hat{P}_x[\hat{X},\hat{P}_x]+[\hat{X},\hat{P}_x]\hat{P}_x)=\frac{i\hbar}{m}\hat{P}_x$$

$$\Delta X\Delta T\geq\frac{1}{2}|\langle[\hat{X},\hat{T}]\rangle|=\frac{\hbar}{2m}|\langle\hat{P}\rangle|$$

گزینه ۱ صحیح است.

۱۲- تابع موج ذره‌ای در یک بعد در فضای اندازه حرکت به شکل $\Phi(p)=\frac{1}{(\pi\alpha)^{\frac{1}{4}}}e^{-\frac{-p^2}{2\alpha}}$ که α عددی حقیقی و مثبت است. میانگین مقدار عملگر $\hat{X}$ در این حالت چقدر است؟

$$\langle\hat{x}\rangle_\Phi=\langle\Phi(p)|\hat{X}|\Phi(p)\rangle=\frac{1}{(\pi\alpha)^{\frac{1}{2}}}\int_{-\infty}^{+\infty}\Phi^*(P)\hat{X}\Phi(P)dP$$
$$=(\pi\alpha)^{-\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{P^2}{2\alpha}}(i\hbar\frac{d}{dp})e^{-\frac{P^2}{2\alpha}}dP=i\hbar(\pi\alpha)^{-\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}(-\frac{2p}{\alpha})e^{-\frac{P^2}{\alpha}}dP$$
$$=\frac{-2i\hbar}{\alpha}(\pi\alpha)^{-\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}pe^{-\frac{p^2}{\alpha}}dp=\text{۰}$$

۱۳- ذره‌ای در حالت $|\Psi\rangle$ است و تابع موج آن $\Psi(r)=\langle r|\Psi\rangle$ می‌باشد.

الف) مقدار میانگین عملگر $\hat{A}=|r\rangle\langle r|$ را بیابید. ب) $\langle r|p|\Psi\rangle$ را محاسبه کنید. ج) مقدار میانگین عملگر $K_2=\frac{(|r\rangle\langle r|\hat{P}+\hat{P}|r\rangle\langle r|)}{2m}$ را بیابید که در آن P عملگر اندازه حرکت خطی و m جرم ذره است.

$$\langle\hat{A}\rangle=\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle=\langle\Psi|r\rangle\langle r|\Psi\rangle=\Psi^*(r)\Psi(r)=|\Psi(r)|^2$$

مولفه X عبارت $\langle r|\hat{p}|\Psi\rangle$ به صورت زیر خواهد بود:

$$\langle r|\hat{P}|\Psi\rangle_X=\langle r|P_x|\Psi\rangle=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi(r)}{\partial X}$$

به همین ترتیب می‌توان ۲ مؤلفه دیگر را به دست آورد. بنابراین:

$$\langle r|\hat{p}|\Psi\rangle=\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\Psi$$
$$\langle\hat{K}_r\rangle=\frac{1}{2m}(\langle\Psi|r\rangle\langle r|\hat{P}|\Psi\rangle+\langle\Psi|\hat{P}|\text{r}\rangle\langle r|\Psi\rangle)$$
$$=\frac{1}{2m}\left(\Psi^*(r)\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\Psi(r)+\frac{\hbar}{i}(\vec{\nabla}\Psi^*)\Psi(r)\right)+\frac{1}{m}Re\left[\Psi^*\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\Psi\right)\right]$$

۱۴- نشان دهید عملگر $\exp(\frac{-i\hat{P}_x}{\hbar})$ جابه‌جایی به اندازه ℓ در جهت X را توصیف می‌کند.

عملگری که جابه‌جایی ذره را در راستای X به اندازه ℓ ایجاد می‌کند باید به صورت زیر بر روی تابع ذره (Ψ) اثر کند:

$$\hat{A}\Psi(x)=\Psi(x-\ell)$$

نکته: تبدیل فوق در حقیقت دستگاه مختصات را به اندازه ℓ به عقب می‌برد.

با استفاده از بسط تیلور خواهیم داشت:

$$\Psi(x-\ell)=\Psi(x)-\ell\acute{\Psi}(x)+\frac{\ell^2}{2i}\acute{\acute{\Psi}}(x)+\cdots+\frac{(-\ell)^n}{n!}\Psi^{(n)}(x)+\cdots$$

در نمایش $\hat{X}$، عملگر اندازه حرکت به صورت $P_x\Psi(\alpha)=-i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial X}$ عمل می کند

$$\Psi(x-\ell)=\Psi(x)-\frac{i\ell}{\hbar}P_x\Psi(x)+\frac{2}{2!}+\left(\frac{i\ell}{\hbar}\right)^2P_x^2\Psi(x)+\cdots=\exp\left(-\frac{i\ell P_x}{\hbar}\right)\Psi(x)$$

۱۵- عملگر $\hat{H}$ را با استفاده از نمایش دیراک به صورت زیر نشان می‌دهند. هرمیتی بودن $\hat{H}$ را بررسی کنید و سپس ویژه مقادیر و ویژه کت‌های متناظر را به دست آورید.

α ثابتی است حقیقی که دیمانسیون برابر $\hat{H}$ دارد.

$$\hat{H}=a(|1\rangle\langle1|-|2\rangle\langle2|+|1\rangle\langle2|+|2\rangle\langle1|)$$
$$\hat{H}^\dagger=a^*(|1\rangle\langle1|-|2\rangle\langle2|+|1\rangle\langle2|+|2\rangle\langle1|)^\dagger=a(|1\rangle\langle1|-|2\rangle\langle2|+|2\rangle\langle1|+|1\rangle\langle2|)$$

بنابراین $\hat{H}$ هرمیتی است.

$$\Rightarrow\hat{H}^\dagger=\hat{H}$$

برای بدست آوردن ویژه مقادیر، $\hat{H}$ را به صورت ماتریس نمایش می‌دهیم

$$H_{11}=\langle1|\hat{H}|1\rangle=a\qquad H_{12}=\langle1|\hat{H}|2\rangle=a$$
$$H_{21}=\langle2|\hat{H}|1\rangle=a\qquad H_{22}=\langle2|\hat{H}|2\rangle=-a$$

$$\hat{H}=a\begin{pmatrix}1&1\\1&-1\end{pmatrix}\Rightarrow\begin{vmatrix}a-\lambda&a\\a&-a-\lambda\end{vmatrix}=0$$

$$(a-\lambda)(-a-\lambda)-1=0\Rightarrow\lambda^2+2a=0\Rightarrow\begin{cases}\lambda_1=-\sqrt{2}a\\\lambda_2=-\sqrt{2}a\end{cases}$$

برای عملگر $\hat{H}$ دو ویژه مقدار بدست آمده که برای بدست آوردن ویژه کت متناظر با هر یک خواهیم داشت:

$$a\begin{pmatrix}1&1\\1&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\b_1\end{pmatrix}=a\sqrt{2}\begin{pmatrix}a_1\\b_1\end{pmatrix}\Rightarrow a_1+b_1=\sqrt{2}a_1$$

$$a_1-b_1=\sqrt{2}b_1$$

همین طور برای بهنجار بودن خواهیم داشت: $a_1^2+b_1^2=1$

با حل معادله فوق مقادیر a_1 ، b_1 بدست می‌آیند.

$$|a_1\rangle=\frac{1}{\sqrt{4-2\sqrt{2}}}\begin{pmatrix}1\\\sqrt{2}-1\end{pmatrix}$$

$$a\begin{pmatrix}1&1\\1&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_2\\b_2\end{pmatrix}=-a\sqrt{2}\begin{pmatrix}a_2\\b_2\end{pmatrix}\Rightarrow\begin{cases}a_2+b_2=-\sqrt{2}a_2\\a_2-b_2=-\sqrt{2}a_2\\a_2^2+b_2^2=1\end{cases}$$

$$\Rightarrow|u_2\rangle=\frac{1}{\sqrt{4+2\sqrt{2}}}\begin{pmatrix}-1\\\sqrt{2}+1\end{pmatrix}$$

$$|u_1\rangle=\frac{1}{\sqrt{4-2\sqrt{2}}}|1\rangle+\frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{4-2\sqrt{2}}}|2\rangle$$

$$|u_2\rangle=\frac{-1}{\sqrt{4+2\sqrt{2}}}|1\rangle+\frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{4+2\sqrt{2}}}|2\rangle$$

۱۶- شرط آنکه عملگر $e^{-\frac{iHt}{\hbar}}$ یکانی باشد چیست؟ (H مستقل از زمان است)

۱) $H^{-1}=H^{\dagger}$ ۲) $H=H^{\dagger}$ ۳) $H=H^{*}$ ۴) $H=H^{-1}$

گزینه ۲ صحیح است.

شرط یکانی بودن $u^{-1}=u^{\dagger}$

$$uu^{-1}=uu^{\dagger}=\mathrm{I}\quad e^{-\frac{iHt}{\hbar}}e^{\frac{iH^{\dagger}t}{\hbar}}=\mathrm{I}\Rightarrow e^{\frac{it}{\hbar}(H^{\dagger}-H)}=I$$

۱۷- اگر A و B دو عملگر باشند در چه مواردی اتحاد $e^{A+B}=e^{A}e^{B}$ برقرار است؟

۱) فقط اگر A و B یکانی باشند ۲) اگر A و B جابجا شوند.

۳) فقط اگر A و B هرمیتی باشند. ۴) همواره برقرار است.

رابطه گلابر $e^{A}e^{B}=e^{A+B+\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}$

پس رابطه بالا در صورتی برقرار است که A و B جابجا شوند.

گزینه ۲ صحیح است.

۱۸- ویژه تابع عملگر اندازه حرکت خطی، ویژه حالت عملگر پاریته با چه ویژه مقداری است؟

۱) با ویژه مقدار ∓ 1 است. ۲) ویژه تابع پاریته نیست.

۳) با ویژه مقدار $+1$ است. ۴) با ویژه مقدار -1 است.

در صورتی دو عملگر ویژه تابع مشترک دارند که با هم جابجا شوند.

$$[\pi,p(x)]\Psi(x)=\pi p(x)\Psi(x)\quad p(x)\pi(x)\Psi(x)$$
$$=\pi\big(p(x)\Psi(x)\big)\quad p(x)\Psi(-\mathrm{x})=p(-x)\Psi(-x)-p(x)\Psi(-\mathrm{x})$$

بنابراین ویژه حالت مشترک ندارند.

گزینه ۲ صحیح است.

۱۹- هامیلتونی یک سیستم دو حالته به صورت $H=E_0(|1\rangle\langle 1|+2|1\rangle\langle 2|+2|2\rangle\langle 1|+4|2\rangle\langle 2|)$ داده شده است. در صورت اندازه گیری انرژی چه مقداری نتیجه می‌شود؟

۱) $4E_0\,,E_0$ ۲) $2(1-\sqrt{2})E_0,2(1+\sqrt{2})E_0$ ۳) $5E_0$ و صفر ۴) $6E_0\,,3E_0$

گزینه ۳ صحیح است.

$$H=\begin{pmatrix}\langle 1|H|1\rangle & \langle 1|H|2\rangle\\ \langle 2|H|1\rangle & \langle 2|H|2\rangle\end{pmatrix}$$

$$H=\begin{pmatrix}E_0 & 2E_0\\ 2E_0 & 4E_0\end{pmatrix}\Rightarrow \lambda_1,\lambda_2=5E_0\,,o$$

۲۰- کدام‌یک از عملگرهای زیر هرمیتی نیستند؟

۱) xp ۲) xpx ۳) xpy ۴) $xzpy$

با توجه به نکته گفته شده اگر دو عملگر هرمیتی باشند یعنی $A^\dagger=A$ و $B^\dagger=B$، حاصلضرب آن‌ها در صورتی هرمیتی است که دو عملگر جابجاپذیر باشند، که در بین گزینه‌ها $x\,,p_x$ با هم جابجاپذیر نیستند. بنابراین گزینه ۲ صحیح است.

۲۱- کدام یک از توابع زیر برای یک تابع حالت، حداقل عدم قطعیت را داراست؟

۱) دلتای دیراک ۲) سینوسی ۳) گوسی ۴) لورنتسی

گزینه ۳ صحیح است.

همانطورکه می دانیم تابع موج گوسی حداقل عدم قطعیت را داراست.

۲۲- هامیلتونی سیستمی در فضای هیلبرت دو بعدی به صورت

$$H=\beta\big[|a_1\rangle\langle a_2|+|a_2\rangle\langle a_1|\big]$$

است که در آن β ضریب ثابت حقیقی و $|a_i\rangle$ ها ویژه بردار عملگر هرمیتی A با ویژه مقدار متناظر a_i است نمایش عملگر A در پایه متشکل از ویژه بردارهای انرژی کدام است؟(کنکور۹۳)

۱) $\begin{pmatrix}a_1 & 0\\ 0 & a_2\end{pmatrix}$ ۲) $\begin{pmatrix}\beta & a_1-a_2\\ a_1-a_2 & \beta\end{pmatrix}$

۳) $\frac{1}{2}\begin{pmatrix}a_1 & a_1-a_2\\ a_1-a_2 & a_2\end{pmatrix}$ ۴) $\frac{1}{2}\begin{pmatrix}a_1+a_2 & a_1-a_2\\ a_1-a_2 & a_1+a_2\end{pmatrix}$

ابتدا هامیلتونی را به صورت ماتریسی می‌نویسیم

$$H=\begin{pmatrix}0 & \beta\\ \beta & 0\end{pmatrix}$$

سپس ویژه مقادیر H را محاسبه کرده و ماتریس یکانی که H را قطری می‌کند را بدست می‌آوریم.

$$\det(H-\lambda I)=0\Rightarrow\begin{vmatrix}-\lambda & \beta\\ \beta & -\lambda\end{vmatrix}=0\rightarrow\ \lambda=\pm\beta$$

$$\begin{pmatrix}0 & \beta\\ \beta & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{pmatrix}=\beta\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{pmatrix}\rightarrow\begin{pmatrix}\beta\alpha_2\\ \beta\alpha_1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\beta\alpha_1\\ \beta\alpha_2\end{pmatrix}\ \Rightarrow|\vec{r}_1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix}$$

$$\lambda_2=-\beta\Rightarrow|\vec{r}_2\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -1\end{pmatrix}$$

A در پایه‌های خودش قطری است.

$$\hat{A}=a_1|a_1\rangle\langle a_1|+a_2|a_2\rangle\langle a_2|=\begin{pmatrix}a_1 & 0\\ 0 & a_2\end{pmatrix}$$

و در نمایش H بصورت زیر بدست می‌آید.

$$\overbrace{\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}}^{U}\overbrace{\begin{pmatrix}a_1 & 0\\ 0 & a_2\end{pmatrix}}^{A}\overbrace{\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}}^{U^+}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{a_1}{\sqrt{2}} & \frac{a_1}{\sqrt{2}} \\ \frac{a_2}{\sqrt{2}} & \frac{-a_2}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} a_1+a_2 & a_1-a_2 \\ a_1-a_2 & a_1+a_2 \end{pmatrix}$$

گزینه ۴ صحیح است.

۲۳- اگر A_1 عملگر پایین‌بر برای نوسانگر هماهنگ یک بعدی اوّل و A_2 عملگر پایین‌بر برای نوسانگر هماهنگ یک بعدی دوم باشد در آن صورت شرط آن که عملگر

$$C = \alpha A_1 + \beta A_2$$

که در آن α و β ضرایب ثابت مختلطی هستند در رابطه $[C, C^+] = 1$ صدق کند کدام است؟(کنکور ۹۳)

۱) $|\alpha|^2 - |\beta|^2 + \alpha\beta^* + \alpha^*\beta = 1$

۲) $|\alpha|^2 - |\beta|^2 = 1$

۳) $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$

۴) $|\alpha|^2 + |\beta|^2 + \alpha\beta^* + \beta\alpha^* = 1$

$$[C, C^+] = 1 \rightarrow [\alpha A_1 + \beta A_2 \,,\, \alpha^* A_1^+ + \beta^* A_2^+] = 1$$

$$[\alpha A_1, \alpha^* A_1^+] + [\alpha A_1 \,,\, \beta^* A_2^+] + [\beta A_2 \,,\, \alpha^* A_1^+] + [\beta A_2 + \beta^* A_2^+] = 1$$

عملگرهای دو نوسانگر مجزا با هم جابجا می‌شوند.

$[A_1, A_1^+] = 1$ داریم

$$\alpha\alpha^* + \beta\beta^* = 1$$

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

گزینه ۳ صحیح است.

۲۴- ماتریس $A = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}$ را در نظر بگیرید ماتریس $\ln(\hat{1} + \hat{A})$ کدام است؟

ویژه مقادیر ماتریس A را حساب می‌کنیم:

$$\det(A - \lambda I) = 0$$

$$\begin{vmatrix} 3-\lambda & 2 \\ 2 & 3-\lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow (3-\lambda)^2 = 4 \Rightarrow \begin{matrix} \lambda = 1 \\ \lambda = 5 \end{matrix}$$

$$\text{if} \quad A|a\rangle = a|a\rangle$$

$$F(A)|a\rangle = F(a)|a\rangle$$

$$\ln(1+A)|a\rangle = \ln(1+a)|a\rangle$$

$$\lambda_1 = 1 \quad \Rightarrow \quad |a_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$\lambda_1 = 5 \quad \Rightarrow \quad |a_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} A'_{11} & A'_{12} \\ A'_{21} & A'_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\ln(1+1)\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} A'_{11} - A'_{12} = \ln 2 \\ A'_{21} - A'_{22} = -\ln 2 \end{cases}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} A'_{11} & A'_{12} \\ A'_{21} & A'_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\ln(6)\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} A'_{11} + A'_{12} = \ln 6 \\ A'_{21} + A'_{22} = -\ln 6 \end{cases}$$

با حل چهار معادله بالا خواهیم داشت.

$$\ln(\hat{1} + \hat{A}) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \ln(12) & \ln(3) \\ \ln(3) & \ln(12) \end{pmatrix}$$

فصل دوم

تحول زمانی در مکانیک کوانتومی

در حالت کلی عملگر تحول به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$T(q)=e^{-i\hat{G}\frac{q}{\hbar}}$$

۱)تحول زمانی

$$\hat{U}(t)=e^{-i\hat{H}\frac{t}{\hbar}}$$

اگر $U(t)$ روی $|\alpha,t=0\rangle$ اثر کند آن را به $|\alpha,t\rangle$ تبدیل می‌کند.

$$\hat{U}(t)|\alpha,t=0\rangle=|\alpha,t\rangle$$

۲) تحول مکانی

$$\tau(a)=e^{-i\hat{p}\frac{a}{\hbar}}$$

اگر $\hat{\tau}(a)$ روی $|x\rangle$ اثر کند آن را به $|x+a\rangle$ تبدیل می‌کند.

$$\hat{\tau}(a)|x\rangle=|x+a\rangle$$

۳) تحول دوران

$$\hat{R}_n(\theta)=e^{-i\,\hat{\vec{J}}.\hat{n}\frac{\theta}{\hbar}}$$

اگر $\hat{R}_n(\theta)$ روی $|\beta\rangle$ اثر کند آن را به اندازه θ دوران می‌دهد.

$$\hat{R}_n(\theta)|\beta\rangle=|\beta+\theta\rangle$$

نکته: تمام عملگرهای تحول یکانی می‌باشند و مولدهای آنها $\hat{P},\hat{H}$ و $\hat{J}$ هرمیتی‌اند.

عملگر تحول زمانی

در مورد عملگر تحول زمانی باید دقّت کرد که:

۱- اگر $\frac{\partial H}{\partial t}$ صفر باشد به این حالت پایا می‌گویند.

در حالت پایا هامیلتونی ثابت حرکت است و با داشتن تابع موج در زمان t_0، در زمان t خواهیم داشت:

$$U(t,t_0)=e^{\frac{-i}{\hbar}H(t-t_0)}$$

$$\psi(x,t)=e^{\frac{-iH}{\hbar}(t-t_0)}\psi(x,t_0)$$

با کوچک بودن زمان t و $t_0=0$ می‌توان $U(dt)$ را بسط داد:

$$t_\circ=\circ \rightarrow U(dt)=\sum\frac{\left(-iH\frac{dt}{\hbar}\right)^n}{n!}\simeq 1-iH\frac{dt}{\hbar}$$

در بسط بالا چون dt کوچک است از مرتبه‌های dt^2 و.... می‌توان صرف‌نظر کرد.

اگر H وابسته به زمان باشد آنگاه برای عملگرد تحول زمانی

$$U(t)=e^{-i\int H(t)\frac{dt}{\hbar}}$$

از سری دایسون استفاده می‌شود که به صورت زیر است

$$U(t,t_\circ)=1+\sum_{n=\circ}^{\infty}\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n\int_\circ^t dt_1\int_\circ^{t_1}dt_2\ldots H(t_1)H(t_2)\ldots$$

۲- برای این که یک سیستم را تحول زمانی دهیم نیاز است همه اجزای سیستم را تحول زمانی دهیم که عبارتند از:

الف- ویژه تابع، بردار پایه، ویژه حالت، ویژه بردار

ب- تابع موج، بردار حالت

ج- عملگرها

موجودات هر خانواده، رفتارهای مشابهی دارند برای مثال ویژه حالت و ویژه بردار هیچ فرقی با هم ندارند

$$\hat{A}U_a=aU_a \quad , \quad \hat{A}|a_i\rangle=a_i|a_i\rangle$$

اگر ویژه بردار بتواند حالت سیستم را توصیف کند آنگاه ویژه بردار می‌تواند نقش ویژه حالت را نیز برعهده گیرد، یعنی ویژه بردار و ویژه حالت شخصیّت‌شان یکسان است.

اگر عملگر A هرمیتی باشد آنگاه $|a_i\rangle$ ها یک مجموعه کامل تشکیل می‌دهند و می‌توان هر تابع دلخواهی را برحسب آن‌ها بسط داد بنابراین می‌توان یک نماینده از بین آن‌ها انتخاب کرد و رفتار آن را بررسی کرد که این نماینده بردار پایه است.

کت دلخواه $|\alpha\rangle$ را می‌توان به صورت زیر بسط داد:

$$|\alpha\rangle=\sum_i C_i|a_i\rangle$$

با ضرب $\langle x|$ در دو طرف رابطه بالا داریم

$$\langle x|\alpha\rangle=\sum_i C_i\langle x|a_i\rangle \rightarrow \psi_\alpha(x)=\sum_i C_i\psi_{a_i}(x)$$

از قسمت ب، نماینده، تابع موج انتخاب می‌شود.

لزومی وجود ندارد که هر سه این کمیّت‌ها با زمان متحول شوند فقط کافی است کمیّت‌هایی تحول زمانی پیدا کنند که بتوانند کل سیستم را به‌طور زمانی جلو ببرند یعنی می‌توان تصویرهای مختلفی انتخاب کرد که یکی یا دو تا از این کمیّت‌ها با زمان تغییر کنند این تصویرها تصویر شرودینگر، تصویر هانیزنبرگ و برهم کنش هستند که در جدول زیر آمده‌اند.

تصویر	بردار پایه	تابع موج	عملگر
شرودینگر	بدون تغییر	$\psi(x,t)=U(t)\psi(x)$	بدون تغییر
هایزنبرگ	$a(t)=U^+(t)a(\circ)$	بدون تغییر	$A(t)=U^+(t)A(\circ)U(t)$

نکته (۱)

۱) $\psi_S(x,t=\circ)=\psi_H(x,t=\circ)$

۲) $a_S(\circ)=a_H(\circ)$

$\hat{A}_S(\circ)=\hat{A}_H(\circ)$

نکته (۲)

در تصویر شرودینگر کمیتها با عملگر $\hat{U}$ جلو می‌روند و عملگر $\hat{U}^+$ آنها را برمی‌گرداند (به عقب می‌برد)

نکته (۳)

در تصویرهای هایزنبرگ کمیّت‌ها با عملگر $\hat{U}^+$ جلو می‌روند و عملگر $\hat{U}$ آن‌ها را برمی‌گرداند.