بنام خداوند بخشاینده و مهربان

جزوه کوانتوم II پیشرفته

جناب آقای دکتر مسعودی

هیئت علمی دانشگاه الزهرا

علوم تحقیقات تهران

ارشد حالت جامد

(1)

۱) معادله شرودینگر وابسته به زمان

۲) ویژه کت های هامیلتونی در لحظه t

۳) معادله شرودینگر مستقل از زمان

۴) روابط شار احتمال

۵) نشان دادن برقراری رابطه کوانتومی در حد کلاسیک

۶) نشان دادن هامیلتونی ژاکوبی در کوانتوم به صورت گلدشتاین در کلاسیک

۷) حل معادله‌ی شرودینگر به روش تقریب نیمه کلاسیک (WKB)

جلسه اول

معادله موج شرودینگر:

۱) در تصویر شرودینگر تحول زمانی $|\alpha, t_0, t\rangle$ را در پایه $\underline{\underline{x}}$ بررسی می‌کنیم.

$$\langle \vec{x} | \alpha, t_0, t\rangle = \psi_\alpha(x, t)$$

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(x)$$

$$\langle x'' | V(x) | x' \rangle$$

$$x | \vec{x}' \rangle = x' | \vec{x}' \rangle$$

$$V(\vec{x}) | \vec{x}' \rangle = \underset{\text{ویژه مقدار در کت است}}{V(\vec{x}')} | \vec{x}' \rangle \xrightarrow{\text{دگر}} \langle \vec{x}' | V(\vec{x}) = \langle \vec{x}' | V(\vec{x}')$$

$$= V(x') \langle x'' | x' \rangle = V(x') \delta(x'' - x')$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0, t\rangle = H |\alpha, t_0, t\rangle$$ معادله شرودینگر

از چپ ضرب در $\langle x' |$

$$\langle x' | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0, t\rangle = \langle x' | \hat{H} | \alpha, t_0, t\rangle$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x' | \alpha, t_0, t\rangle = \langle x' | \hat{H} | \alpha, t_0, t\rangle$$

طرف دوم تساوی بالا:

$$\langle x' | \frac{P^2}{2m} + V(x) | \alpha, t_0, t\rangle$$

$$= \langle x' | \frac{P^2}{2m} | \alpha, t_0, t\rangle + \langle x' | V(x) | \alpha, t_0, t\rangle$$

②

$$\vec{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \xrightarrow{\text{۳ بعد}} \vec{p} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$$

$$\frac{p^2}{2m}|\vec{x}\rangle = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}|\vec{x}\rangle = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx'^2}|\vec{x}'\rangle$$

$$= \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla'^2\langle \vec{x}' | \alpha, t_0, t\rangle + V(\vec{x}')\langle x' | \alpha, t_0, t\rangle$$

$$= \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla'^2\psi(\vec{x}', t) + V(\vec{x}')\psi(\vec{x}', t)$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x}', t) = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla'^2\psi(\vec{x}', t) + V(\vec{x}')\psi(\vec{x}', t)$$

معادله موج وابسته به زمان شرودینگر را بدست آوردیم.

$$|\alpha, t_0, t\rangle = U(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle$$

$$= e^{-i\underset{E_{a'}}{\hat{H}}(t-t_0)/\hbar}|\alpha, t_0\rangle$$

ویژه کت هامیلتونی را در لحظه t_0 داریم می‌خواهیم ببینیم در لحظه t چه می‌شود.

a' ها ویژه کت H هستند

فرض می‌کنیم سیستم در ویژه کت انرژی‌اش باشد

ویژه کت

$$|\alpha, t_0, t\rangle = |a', t_0, t\rangle$$

$$H|a'\rangle = E_{a'}|a'\rangle$$

$$|a', t_0, t\rangle = e^{-i\frac{H(t-t_0)}{\hbar}}|a', t_0\rangle$$

$$= e^{-iE_{a'}\frac{(t-t_0)}{\hbar}}|a', t_0\rangle$$

ویژه مقدار H

برای راحتی فرض می‌کنیم : $t_0 = 0$

$$\boxed{|a', t\rangle = e^{-iE_{a'}t/\hbar} |a'\rangle}$$

طرفین را در برای x' ضرب می‌کنیم :

$$\langle x' | a', t\rangle = e^{-iE_{a'}t/\hbar} \langle x' | a'\rangle$$

$$u_{a'}(\vec{x}', t) = e^{-iE_{a'}t/\hbar} \, u_{a'}(\vec{x}')$$

ویژه توابع انرژی

جای ψ ، u می‌گذاریم (در معادله شرودینگر) :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} u_{a'}(x', t) = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla'^2 u_{a'}(\vec{x}', t) + V(\vec{x}') \, u_{a'}(\vec{x}', t)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left\{ e^{-iE_{a'}t/\hbar} u_{a'}(\vec{x}') \right\} = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla'^2 u_{a'}(\vec{x}') \, e^{-iE_{a'}t/\hbar} + V(\vec{x}') u_{a'}(\vec{x}') e^{-iE_{a'}t/\hbar}$$

$$E_{a'} e^{-iE_{a'}t/\hbar} u_{a'}(\vec{x}') = e^{-iE_{a'}t/\hbar} \left\{ \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla'^2 u_{a'}(\vec{x}') + V(\vec{x}') \, u_{a'}(\vec{x}') \right\}$$

$$\boxed{\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla'^2 u_{a'}(\vec{x}') + V(\vec{x}') \, u_{a'}(\vec{x}') = E_{a'} u_{a'}(\vec{x}')}$$ معادله مستقل از زمان شرودینگر

چگالی احتمال اینکه ذره در محدوده خاصی باشد

$$\rho(x', t) = \psi(x', t) \, \psi^*(x', t) = |\psi(x', t)|^2$$

$$\rho(x', t) \, d^3x' \equiv$$ احتمال اینکه ذره در حجم d^3x' یافت شود (در زمان t)

می‌توان با استفاده از معادله شرودینگر نشان داد :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) + \nabla \cdot J(x, t) = 0$$ معادله پیوستگی (قابل اثبات و در دروس پایانی)

$$\rho(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}, t) \, \psi^*(\vec{x}, t)$$

شار احتمال

$$\vec{J}(x,t) = \frac{-i\hbar}{2m}\left[\psi^* \nabla\psi - (\nabla\psi)^* \psi\right]$$

$$J(x,t) = \frac{\hbar}{m}\, Im(\psi^* \nabla\psi)$$

با می توان نشان داد:

$$\int \vec{J}(\vec{x},t)\, d^3x = \frac{\langle \vec{P} \rangle_t}{m}$$

اثبات: $\langle \hat{A} \rangle_t = \int \psi^*(\vec{x},t)\, \hat{A}\, \psi(x,t)\, d^3x$

$$\vec{P} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$$

$$\frac{-i\hbar}{2m}\int (\psi^* \nabla\psi - (\nabla\psi)^* \psi)\, d^3x$$

(هیئت تابع موج)

اگر $\psi(\vec{x},t) = \sqrt{\rho(\vec{x},t)}\; e^{i S(\vec{x},t)/\hbar}$

تابع حقیقی

فاز دلخواه است چون توان ۲ فاز را می برد

و $\rightarrow \psi^*(\vec{x},t) = \sqrt{\rho(\vec{x},t)}\; e^{-i S(\vec{x},t)/\hbar}$ *

از ψ مشتق می گیریم

$$\nabla\psi = e^{iS/\hbar}\, \nabla\sqrt{\rho} + \frac{i}{\hbar}\, e^{iS/\hbar} \sqrt{\rho}\, \nabla S \quad **$$

$$\psi^* \nabla\psi = \sqrt{\rho}\, \nabla\sqrt{\rho} + \underbrace{\frac{i}{\hbar}\rho\nabla S}_{\text{موهومی}}$$

** و * را جایگذاری کنیم

$$Im(\psi^* \nabla\psi) = \frac{\rho\nabla S}{\hbar}$$

موهومی یعنی قسمتی که i دارد را می خواهد

$$J = \frac{\hbar}{m}\, Im(\psi^* \nabla\psi) = \frac{\hbar}{m}\,\frac{\rho\nabla S}{\hbar} = \frac{\rho\nabla S}{m}$$

$$\boxed{J(x,t) = \frac{\rho\nabla S}{m}}$$

با بررسی تغییرات مکانی فاز به شار احتمال می رسیم

e^{ikx} , $e^{iS/\hbar}$

که برای موج تخت شبیه $p.x$ است

$S = p.x$

$\nabla S = p$

$\frac{p}{m} = v$ $\quad \frac{P}{m}K$

اگر حد کلاسیک را بررسی کنیم هم در الکتریسیته و مکانیک سیالات است $J = \rho v$

$K = \frac{v}{v}$ $\quad P = mv$

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

$$i\hbar\left[\frac{\partial\sqrt{\rho}}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}\sqrt{\rho}\frac{\partial S}{\partial t}\right]=\frac{-\hbar^2}{2m}\left[(\nabla^2\sqrt{\rho}+\frac{2i}{\hbar}(\nabla\sqrt{\rho})\cdot(\nabla S)-\frac{1}{\hbar^2}\sqrt{\rho}|\nabla S|^2\right.$$

$$\left.+(\frac{i}{\hbar})\sqrt{\rho}\,\nabla^2 S\right]+\sqrt{\rho}\,V(x)$$

$$\hbar|\nabla^2 S|\ll|\nabla S|^2$$

چون $\hbar$ کوچک است

$$\frac{1}{2m}|\nabla S|^2+V(x)+\frac{\partial S}{\partial t}=0$$

هامیلتون ژاکوبی در مکانیک کلاسیک که S فاز تابع موج است.

پس در $\hbar$ کوچک معادله شرودینگر کاستیم به هامیلتون ژاکوبی کلاسیک رسید.

$$S(x,t)=W(x)-Et$$

که تابع دلخواه مستقل از زمان — مستقل از زمان

برای حل معادله بالا:

تقریب شبه کلاسیک برای حل معادله شرودینگر در حالت مانا WKB

$$P_{classic}=\nabla S=\nabla W$$

$$W=\int p\,dx$$

$$E=\frac{p^2}{2m}+V(x)$$

$$p=\pm\sqrt{2m(E-V(x))}$$

$$S=\pm\int^{x}\sqrt{2m(E-V(x'))}\,dx'-Et$$

که را داریم دنبال ψ هستیم

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot J = 0 \longrightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0$$

در حالت مانا $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\rho}{m}\frac{\partial S}{\partial x}\right) = 0$$

$$\frac{d}{dx}\left(\frac{\rho}{m}\frac{dw}{dx}\right) = 0 \longrightarrow \frac{\rho}{m}\frac{dw}{dx} = \text{Const}$$

$$\rho = \frac{\text{Const}}{\frac{dw}{dx}} = \frac{cte}{[2m(E-V(x))]^{\frac{1}{2}}}$$

$$\sqrt{\rho} = \frac{\text{ثابت}}{[2m(E-V(x))]^{\frac{1}{4}}}$$

پس $\psi(x,t) = \dfrac{\text{ثابت}}{[2m(E-V(x))]^{\frac{1}{4}}} \exp\left\{ \pm\dfrac{i}{\hbar} \int^{x} \sqrt{2m(E-V(x))}\, dx - \dfrac{iEt}{\hbar} \right\}$

با تقریب نیمه کلاسیک (حل WKB) عبارت صورت بالا را پیدا کردیم.

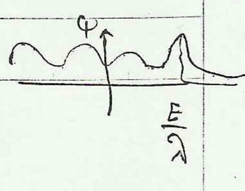
۱) معادله شرودینگر وابسته به زمان
۲) ویژه کت هامیلتونی در لحظه t
۳) معادله شرودینگر مستقل از زمان
۴) روابط شار احتمال
۵) نشان دادن برقراری رابطه کوانتومی در حد کلاسیک
۶) نشان دادن هامیلتون ژاکوبی در کوانتوم بصورت گلدشتاین در کلاسیک
۷) حل معادله شرودینگر به روش تقریب نیمه کلاسیک (WKB)

به روش تقریب WKB — خوشحال‌تر و...

سوال ۲۴ :
$$\frac{\text{ثابت}}{[E-V(x)]^{\frac{1}{4}}} \exp\left\{ \pm\frac{i}{\hbar}\int dx' \sqrt{2m(E-V(x'))} \right\}$$

$$= \frac{\text{ثابت}}{[E-V\lambda(x)]^{\frac{1}{4}}} \exp\left\{ \pm\frac{i}{\hbar}\int dx' \sqrt{2m(E-\lambda x')} \right\} = \frac{C}{(E-\lambda x)^{\frac{1}{4}}} \exp\left\{ \pm\frac{i}{\hbar}\left(-\frac{1}{2m\lambda}\right)\int u^{\frac{1}{2}} du \right\}$$

$$\frac{C}{(E-\lambda x)^{\frac{1}{4}}} \exp\left\{ \pm\frac{i}{\hbar}\left(-\frac{2}{3}\frac{1}{2m\lambda}\left(2m(E-\lambda x)\right)^{\frac{3}{2}}\right\}\right|_{-\infty}^{+\infty}$$



$$\underbrace{(2m(E-\lambda x))^{\frac{1}{2}}}_{u} \Rightarrow du = -2m\lambda dx'$$