است تا یک یا چند حالت مقید ایجاد کند. در این مورد، مجموعهٔ کامل از تمام ویژه‌تابعهای گسسته و پیوستار تشکیل می‌شود، و باید به‌جای ۶ـ۷ نوشت

$$\psi(x) = \sum_n C_n u_n(x) + \int dp\, C(p) u_p(x) \tag{۶ـ۸}$$

در اینجا عدد درست n معرف حالتهای مقید و p معرف حالتهای پیوستار است. این نشانگذاری به این مناسبت است که به‌ازای مقادیر بزرگ x انرژی پتانسیل صفر می‌شود و ویژه‌مقدار انرژی با رابطهٔ $E = p^۲/۲m$ به‌مقدار تکانه مربوط می‌شود. ویژه‌تابعها را می‌توان در ثابتهایی ضرب کرد تا بهنجار شوند. شرایط راست‌هنجاری عبارت‌اند از

$$\begin{aligned} &\int dx\, u_m^*(x) u_n(x) = \delta_{mn} \\ &\int dx\, u_q^*(x) u_p(x) = \delta(p-q) \\ &\int dx\, u_n^*(x) u_p(x) = ۰ \end{aligned} \tag{۶ـ۹}$$

با توجه به اینکه هر ویژه‌تابع وابستگی زمانی ساده‌ای دارد که با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$u_E(x,t) = u_E(x) e^{-iEt/\hbar} \tag{۶ـ۱۰}$$

می‌توان تابع‌موج $\psi(x,t)$ را تعیین کرد. بنابراین، به‌دست می‌آوریم

$$\psi(x,t) = \sum_E C_E\, u_E(x) e^{-iEt/\hbar} \tag{۶ـ۱۱}$$

که صورت کلی‌تر آن عبارت است از

$$\psi(x,t) = \sum_n C_n u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} + \int dp\, C(p) u_p(x) e^{-ip^۲ t/۲m\hbar} \tag{۶ـ۱۲}$$

مشاهده‌پذیرهای دیگر

انرژی تنها یکی از ویژگیهای قابل‌مشاهدهٔ یک دستگاه است. دربارهٔ مشاهده‌پذیرهای دیگر مانند تکانه قبلاً بحث کردیم، و تکانهٔ زاویه‌ای را در یک فصل بعد بررسی می‌کنیم. درست همان‌طور که

انرژی ویژه‌مقدار عملگر انرژی (هامیلتونی H) است، تکانه نیز ویژه‌مقدار عملگر تکانهٔ p_{op} است. معادلهٔ ویژه‌مقداری عملگر تکانه به‌صورت زیر است

$$p_{\text{op}}u_p(x) \equiv \frac{\hbar}{i}\ \frac{d}{dx}u_p(x) = p\ u_p(x) \qquad (۶\text{ـ}۱۳)$$

ویژه‌مقدارها یک پیوستار تشکیل می‌دهند $(-\infty < p < \infty)$، و ویژه‌تابعها به‌صورت زیر هستند

$$u_p(x) = \frac{۱}{\sqrt{۲\pi\hbar}}e^{ipx/\hbar} \qquad (۶\text{ـ}۱۴)$$

این ویژه‌تابعها یک مجموعهٔ راست‌هنجار تشکیل می‌دهند:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\ u^*_{p_۱}(x)u_{p_۲}(x) = \delta(p_۱ - p_۲) \qquad (۶\text{ـ}۱۵)$$

قضیهٔ بسط معمولاً به‌صورت زیر نوشته می‌شود

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dp\ \phi(p)u_p(x) \qquad (۶\text{ـ}۱۶)$$

عملگر تکانه، مانند هامیلتونی، دارای ویژه‌مقدارهای حقیقی است.

عملگرهایی که تمام ویژه‌مقدارهای آنها حقیقی هستند عملگرهای هرمیتی نامیده می‌شوند. چون تمام مشاهده‌پذیرهای فیزیکی در این خاصیت شریک‌اند، باید آنها را با عملگرهای هرمیتی توصیف کرد.

اصل موضوعهٔ بسط و مانستگی برداری

برای یک مشاهده‌پذیر اختیاری، که با A نشان می‌دهیم، ویژه‌تابعهایی متناظر با ویژه‌مقدارهای حقیقی a وجود دارند:

$$Au_a(x) = au_a(x) \qquad (۶\text{ـ}۱۷)$$

ویژه‌تابعهای $u_a(x)$ یک مجموعهٔ متعامد تشکیل می‌دهند، و می‌توان آنها را بهنجار کرد:

$$\int dx\ u^*_{a_۱}(x)u_{a_۲}(x) = \delta_{a_۱a_۲} \qquad (۶\text{ـ}۱۸)$$

در اینجا $\delta_{a_1 a_2}$ دلتای کرونکر برای ویژه‌مقدارهای گسسته و تابع دلتای دیراک برای ویژه‌مقدارهای پیوسته است.

ویژه‌تابعهای $u_a(x)$ نیز یک مجموعهٔ کامل تشکیل می‌دهند؛ به‌عبارت دیگر، یک تابع (انتگرال‌پذیر مجذوری) اختیاری $\psi(x)$ را می‌توان برحسب ویژه‌تابعهای $u_a(x)$ بسط داد:

$$\psi(x) = \sum_a C_a \, u_a(x) \qquad (۱۹\text{-}۶)$$

از شرط راست‌هنجاری نتیجه می‌گیریم که

$$C_a = \int dx \, u_a^*(x)\psi(x) \qquad (۲۰\text{-}۶)$$

تعبیر ضرایب بسط

تعبیر ضرایب بسط C_a به‌صورت زیر است: اگرمشاهده‌پذیر A را برای مجموعه‌ای از دستگاههایی اندازه‌گیری کنیم که هر یک از آنها با تابع‌موج $\psi(x)$ توصیف می‌شوند که به یک بهنجار شده است، یعنی

$$\int dx \, \psi^*(x)\psi(x) = ۱ \qquad (۲۱\text{-}۶)$$

آنگاه

۱. نتیجهٔ هر اندازه‌گیری تنها می‌تواند یکی از ویژه‌مقدارهای a باشد.

۲. احتمال اینکه ویژه‌مقدار a به‌دست آید، یا به‌عبارت دیگر معلوم شود چه کسری از دستگاهها در این مجموعه دارای ویژه‌مقدار a هستند، برابر است با $|C_a|^۲$.

۳. اگر از اندازه‌گیری روی یک عضو این مجموعه یک ویژه‌مقدار معین مثلاً $a_۱$ به‌دست آمده باشد، این اندازه‌گیری باید حالت این دستگاه خاص را روی ویژه‌حالت $u_{a_۱}(x)$ تصویر کرده باشد. تنها از این راه است که می‌توان اطمینان یافت که اندازه‌گیری بعدیِ مشاهده‌پذیر A همین نتیجه را می‌دهد.

یک پیامد این تعبیر این است که احتمال اینکه مقدار مشاهده‌پذیر A برای یک دستگاه یکی از ویژه‌مقدارهای آن باشد برابر با یک است، یعنی

$$\sum_a |C_a|^۲ = ۱ \qquad (۲۲\text{-}۶)$$

که ناشی از رابطهٔ زیر است

$$\begin{aligned} 1 = \int dx\, \psi^*(x)\psi(x) &= \int dx \left(\sum_a C_a^* u_a^*(x)\right)\psi(x) \\ &= \sum_a C_a^* C_a \end{aligned}$$

از این فرمول نتیجه می‌گیریم

$$\begin{aligned} \sum_a C_a C_a^* &= \sum_a \int dx\, u_a^*(x)\psi(x) \int dy\, u_a(y)\psi^*(y) \\ &= \iint dx dy \psi^*(y)\psi(x) \sum_a u_a(y)u_a^*(x) = 1 \end{aligned} \qquad (۶\text{-}۲۳)$$

که نشان می‌دهد

$$\sum_a u_a(y)u_a^*(x) = \delta(x-y) \qquad (۶\text{-}۲۴)$$

این خاصیت ویژه‌تابعها را رابطهٔ تمامیت می‌نامیم، و با حکم قضیهٔ بسط هم‌ارز است.

مانستگی با فضای برداری

قضیهٔ بسط را می‌توان تعمیمی از بسط یک بردار $\mathbf{A}$ برحسب بردارهای یکهٔ راست‌هنجار در یک فضای برداری Nبعدی دانست:

$$\mathbf{A} = A_1\mathbf{i}_1 + A_2\mathbf{i}_2 + \cdots + A_N\mathbf{i}_N \qquad (۶\text{-}۲۵)$$

بردارهای یکه در رابطهٔ راست‌هنجاری زیر صدق می‌کنند

$$\mathbf{i}_k \cdot \mathbf{i}_l = \delta_{kl} \qquad (۶\text{-}۲۶)$$

و مانستهٔ ویژه‌تابعهای $u_a(x)$ هستند. ضرایب A_n با رابطهٔ زیر داده می‌شوند

$$A_n = \mathbf{i}_n \cdot \mathbf{A} \qquad (۶\text{-}۲۷)$$

و مانستهٔ C_a هستند. غالباً در بحثهای کوانتوم‌مکانیکی زبان فضاهای برداری را به‌کار می‌بریم. به عنوان مثال، ضرایب C_a را تصاویر $\psi(x)$ روی بردارهای پایهٔ $u_a(x)$ می‌نامیم، و کمیت

$$C_a = \int dx\ u_a^*(x)\psi(x)$$

را حاصلضرب نرده‌ای u_a و ψ می‌گوییم.

در واقع، مانستگی میان توابع موج $\psi(x)$ و بردارهای N بعدی کاملاً عمیق است. در هر دو مورد، با فضاهای خطی سروکار داریم: درست همان‌طور که از جمع دو بردار در فضای برداری یک بردار به‌دست می‌آید،

$$\mathbf{A} + \mathbf{B} = \mathbf{C}$$

مجموع دوتابع موج نیز یک تابع‌موج قابل قبول است، و در هر دو مورد یک ضرب نرده‌ای تعریف می‌کنیم.

تفاوت میان فضای برداری مکانیک کوانتومی و یک فضای برداری سادهٔ Nبعدی در این است که فضای برداری در مکانیک کوانتومی به‌صورت پیوسته بینهایت بعدی است. بنابراین، جمع گسسته در حاصلضرب نرده‌ای $\mathbf{A}\cdot\mathbf{B} = \sum_i A_i B_i$ به انتگرال در $\int dx\ \phi^*(x)\psi(x)$ تبدیل می‌شود. این نشان می‌دهد که در مکانیک کوانتومی باید به همگرایی انتگرالها توجه کنیم، و اثبات قضیهٔ بسط بسیار پیچیده می‌شود. در زبان ریاضی، فضای برداری در مکانیک کوانتومی را فضای هیلبرت می‌نامند. در توضیح مکانیک کوانتومی، هرگاه بتوانیم از پیچیدگیهای ریاضی صرفنظر می‌کنیم و از شباهت با فضای برداری معمولی آزادانه استفاده می‌کنیم.

عملگرها و مشاهده‌پذیرها

عملگر در فضاهای برداری یک بردار را به بردار دیگری تبدیل می‌کند. عملگرهای خطی به‌گونه‌ای هستند که

$$A(\alpha_1\psi_1(x) + \alpha_2\psi_2(x)) = \alpha_1 A\psi_1(x) + \alpha_2 A\psi_2(x) \qquad (۲۸\text{_}۶)$$

و اگر بخواهیم مشاهده‌پذیرها را نمایش دهند باید هرمیتی باشند. برای عملگرهای هرمیتی داریم

$$\langle A\rangle = \langle A\rangle^*$$

یعنی، به‌ازای حالت Ψ

$$\int dx\ \Psi^*(x) A\Psi(x) = \int dx\ (A\Psi(x))^* \Psi(x) \qquad (۶\_۲۹)$$

از اینجا نتیجه می‌گیریم که برای عملگرهای هرمیتی، به‌ازای دو تابع اختیاری ϕ و ψ، می‌توان نوشت

$$\int dx\ \phi^* A\psi = \int dx\ (A\phi)^* \psi \qquad (۶\_۳۰)$$

برای اثبات، فرض کنید

$$\Psi(x) = \phi(x) + \lambda\psi(x) \qquad (۶\_۳۱)$$

که در آن λ یک ثابت مختلط اختیاری است. بنابراین، از ۶ـ۲۹ داریم

$$\int dx\ \Psi^* A\Psi = \int dx\ (\phi^* + \lambda^* \psi^*) A(\phi + \lambda\psi) = \int dx\ \phi^* A\phi$$
$$+ |\lambda|^2 \int dx\ \psi^* A\psi + \lambda \int dx\ \phi^* A\psi + \lambda^* \int dx\ \psi^* A\phi \qquad (۶\_۳۲)$$

که همیوغ مختلط آن به‌صورت زیر است

$$\int dx\ (A\Psi)^* \Psi = \int dx\ (A\phi)^* \phi + |\lambda|^2 \int dx\ (A\psi)^* \psi$$
$$+ \lambda^* \int dx\ (A\psi)^* \phi + \lambda \int dx\ (A\phi)^* \psi$$

برای عملگر هرمیتی، در دو معادلهٔ بالا طرفهای چپ و همچنین دو جملهٔ اول طرفهای راست برابرند. چون λ یک پارامتر مختلط است، λ و λ^* مستقل از یکدیگرند و می‌توان ضریب آنها را جداگانه با هم برابر گرفت، و ۶ـ۳۰ به‌دست می‌آید.

اگر عملگر A هرمیتی نباشد، می‌توان عملگر همیوغ هرمیتی $A^\dagger$ را، برای هر جفت تابع‌موج، با رابطهٔ زیر تعریف کرد

$$\int dx\ (A\phi)^* \psi = \int dx\ \phi^* A^\dagger \psi \qquad (۶\_۳۳)$$

نمادنگاری دیراک

پل‌آدرین موریس دیراک یک نمادنگاری بسیار مختصر و مفید معمول کرد که هم برای فضاهای برداری با بعد متناهی و هم در مورد فضاهای هیلبرت به‌کار می‌رود. به هر تابع‌موج ψ یک بردار حالت، که با $|\psi\rangle$ نشان می‌دهیم و آن‌را کِت می‌نامیم، نسبت می‌دهیم. همچنین، به هر تابع‌موج همیوغ مختلط ϕ^* کمیت $\langle\phi|$ را نسبت می‌دهیم و آن‌را بِرا می‌نامیم. حاصلضرب نرده‌ای ϕ^* و ψ را با یک "براکت"[1] نشان می‌دهیم:

$$\int dx\, \phi^*\psi = \langle\phi|\psi\rangle \tag{۶_۳۴}$$

بلافاصله نتیجه می‌شود که

$$\langle\phi|\psi\rangle^* = \langle\psi|\phi\rangle \tag{۶_۳۵}$$

انتگرال شامل یک عملگر را می‌توان به دو طریق هم‌ارز زیر نوشت

$$\int dx\, \phi^* A\psi = \langle\phi|A\psi\rangle = \langle\phi|A|\psi\rangle \tag{۶_۳۶}$$

عملگر همیوغ هرمیتی برای هر جفت حالت با رابطهٔ زیر تعریف می‌شود

$$\langle A\phi|\psi\rangle = \langle\phi|A^\dagger|\psi\rangle \tag{۶_۳۷}$$

اگر A یک عدد باشد می‌توان آن‌را از براکت خارج کرد:

$$\langle\phi|a\psi\rangle = a\langle\phi|\psi\rangle \tag{۶_۳۸}$$

و

$$\langle a\phi|\psi\rangle = a^*\langle\phi|\psi\rangle \tag{۶_۳۹}$$

معادله‌های ویژه‌مقداری به‌صورت زیر نوشته می‌شوند

$$A|a\rangle = a|a\rangle \tag{۶_۴۰}$$

---

۱. دیراک "بِرا" و "کِت" را از تقسیم واژهٔ انگلیسی *bracket*، معادل واژهٔ فرانسوی کروشه، گرفته است‌ـم.

که در آن ویژه‌حالت را با ویژه‌مقدار خودش نشانگذاری کرده‌ایم. چگونگی تبدیل این معادله به یک معادلهٔ وابسته به x از نوع ۶ـ۴ را در فصل ۷ بیان می‌کنیم. شرط راست‌هنجاری در نمادنگاری دیراک به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\langle a_1|a_2\rangle = \delta_{a_1 a_2} \tag{۶ـ۴۱}$$

و قضیهٔ بسط به‌صورت زیر نوشته می‌شود

$$|\psi\rangle = \sum_a C_a\, |a\rangle \tag{۶ـ۴۲}$$

با ضرب کردن در یک ویژه‌حالت خاص از سمت چپ، به‌دست می‌آوریم

$$\langle b|\psi\rangle = \sum_a C_a\, \langle b|a\rangle = \sum_a C_a\, \delta_{ab} = C_b \tag{۶ـ۴۳}$$

بنابراین، می‌توان نوشت

$$\langle \phi|\psi\rangle = \sum_a C_a\, \langle \phi|a\rangle = \sum_a \langle \phi|a\rangle\langle a|\psi\rangle \tag{۶ـ۴۴}$$

چون این نتیجه برای هر ϕ و ψ صادق است، می‌توان رابطهٔ بالا را "تفکیک" کرد و مانستهٔ ۶ـ۲۴ در نمادنگاری دیراک را به‌دست آورد:

$$\sum_a |a\rangle\langle a| = 1 \tag{۶ـ۴۵}$$

این بخش را با مثالی دربارهٔ استفاده از نمادنگاری دیراک در اثبات تعامد ویژه‌تابعهای عملگرهای هرمیتی متناظر با ویژه‌مقدارهای مختلف به‌پایان می‌رسانیم. رابطهٔ زیر را در نظر بگیرید

$$\langle b|A|a\rangle = a\langle b|a\rangle \tag{۶ـ۴۶}$$

از طرف دیگر، می‌توان نوشت

$$\langle b|A^\dagger|a\rangle = \langle A(b)|a\rangle = b^*\langle b|a\rangle \tag{۶ـ۴۷}$$

زیرا $|b\rangle$ یک ویژه‌حالت عملگر A با ویژه‌مقدار b است، و این کمیت در برا ظاهر می‌شود. اما برای عملگر هرمیتی داریم $A = A^\dagger$، و در نتیجه

$$a\langle b|a\rangle = b^*\langle b|a\rangle \qquad (۴۸\text{ـ}۶)$$

اگر قرار دهیم $\langle a| = \langle b|$، بلافاصله می‌بینیم که ویژه‌مقدارها باید حقیقی باشند. بنابراین، $b = b^*$ و از ۶ـ۴۸ به‌رابطهٔ زیر می‌رسیم.

$$(a - b)\langle b|a\rangle = ۰ \qquad (۴۹\text{ـ}۶)$$

که همان چیزی است که می‌خواستیم ثابت کنیم، زیرا به‌ازای $a \neq b$ باید $\langle b|a\rangle$ صفر شود.

واگنی و مشاهده‌پذیرهای همزمان

در دو مسئله‌ای که در فصل ۴ بررسی کردیم، یعنی ذره درجعبه و ذرهٔ آزاد، دیدیم که ویژه‌تابعها به‌طور همزمان ویژه‌تابعهای H و یک عملگر دیگر، در مورد اول پاریته و در مورد دوم تکانه، بودند و دیدیم که در هر دو مورد H با عملگرهای مزبور جابه‌جا می‌شد. اکنون شرایط کلی امکان این جابه‌جایی را بررسی می‌کنیم.

ویژه‌تابعهای u_a مربوط به ویژه‌مقدار aی عملگر A،

$$Au_a(x) = au_a(x) \qquad (۵۰\text{ـ}۶)$$

هنگامی ویژه‌تابعهای همزمان عملگر دیگری مانند B هستند که

$$Bu_a(x) = bu_a(x) \qquad (۵۱\text{ـ}۶)$$

اما این ایجاب می‌کند که

$$ABu_a(x) = Abu_a(x) = bAu_a(x) = abu_a(x)$$

و

$$BAu_a(x) = Bau_a(x) = aBu_a(x) = abu_a(x)$$

از این‌رو به‌دست می‌آوریم

$$(AB - BA)u_a(x) = 0 \qquad (۶\text{-}۵۲)$$

اگر این رابطه تنها برای یک u_a برقرار باشد چندان جالب توجه نیست، اما اگر برای مجموعهٔ کامل u_a صادق باشد به‌این معنی است که برای تمام تابعهای انتگرال‌پذیر مجذوری $\psi(x) = \sum_a C_a u_a(x)$ می‌توان نوشت

$$\begin{aligned}\sum_a C_a(AB - BA)u_a(x) &= (AB - BA)\sum C_a u_a(x)\\ &= (AB - BA)\,\psi(x) = 0\end{aligned} \qquad (۶\text{-}۵۳)$$

یعنی عملگرها جابه‌جا می‌شوند:

$$[A, B] = 0 \qquad (۶\text{-}۵۴)$$

برعکس، اگر دو عملگر هرمیتی A و B جابه‌جا شوند، یعنی رابطهٔ ۶ـ۵۴ برقرار باشد، آنگاه

$$\begin{aligned}ABu_a(x) &= BAu_a(x)\\ &= aBu_a(x)\end{aligned} \qquad (۶\text{-}۵۵)$$

یعنی

$$A[Bu_a(x)] = a[Bu_a(x)] \qquad (۶\text{-}۵۶)$$

بنابراین، تابع $Bu_a(x)$ نیز یک ویژه‌تابع A با ویژه‌مقدار a است. اگر به‌ازای هر ویژه‌مقدار a تنها یک ویژه‌تابع عملگر A وجود داشته باشد، آنگاه $Bu_a(x)$ باید متناسب با $u_a(x)$ باشد:

$$Bu_a(x) = bu_a(x) \qquad (۶\text{-}۵۷)$$

بنابراین، $u_a(x)$ ویژه‌تابع همزمان A و B است. این وضعیت، که در آن ویژه‌تابعهای A واگن نیستند، موردی است که برای ذره در جعبه دیدیم. از طرف دیگر، اگر دو ویژه‌تابع A متناظر با ویژه‌مقدار a وجود داشته باشند، یعنی، چنانکه در مثال ذرهٔ آزاد دیدیم، واگنی دوگانه داشته باشیم:

$$\begin{aligned}Au_a^{(1)}(x) &= au_a^{(1)}(x)\\ Au_a^{(2)}(x) &= au_a^{(2)}(x)\end{aligned} \qquad (۶\text{-}۵۸)$$

تنها می‌توان گفت که $Bu_a^{(1)}(x)$ و $Bu_a^{(2)}(x)$ باید ترکیبهای خطی $u_a^{(1)}(x)$ و $u_a^{(2)}(x)$ باشند:

$$\begin{aligned} Bu_a^{(1)}(x) &= b_{11}u_a^{(1)}(x) + b_{12}u_a^{(2)}(x) \\ Bu_a^{(2)}(x) &= b_{21}u_a^{(1)}(x) + b_{22}u_a^{(2)}(x) \end{aligned} \tag{۶ـ۵۹}$$

اما بدیهی است که می‌توان از ترکیبهای خطی این دو معادله معادله‌هایی از نوع زیر به‌دست آورد

$$\begin{aligned} Bv_a^{(1)}(x) &= b_+v_a^{(1)}(x) \\ Bv_a^{(2)}(x) &= b_-v_a^{(2)}(x) \end{aligned} \tag{۶ـ۶۰}$$

برای مثال،

$$\begin{aligned} B(u_a^{(1)} + \lambda u_a^{(2)}) &= (b_{11} + \lambda b_{21})u_a^{(1)} + (b_{12} + \lambda b_{22})u_a^{(2)} \\ &= b_\pm(u_a^{(1)} + \lambda u_a^{(2)}) \end{aligned}$$

با این شرط که λ را طوری انتخاب کنیم که

$$\frac{b_{12} + \lambda b_{22}}{b_{11} + \lambda b_{21}} = \lambda$$

این یک معادلهٔ درجهٔ دوم است، و دو مقدار برای λ، متناظر با دو ویژه‌مقدار $b_\pm$، وجود دارند. بهتر است که ویژه‌تابعهای همزمان A و B در ۶ـ۶۰ را با $u_{ab}^{(1)}(x)$ و $u_{ab}^{(2)}(x)$ نشان دهیم. چون این ویژه‌تابعها متناظر با ویژه‌مقدارهای مختلف عملگر B هستند با هم متعامدند. در عمل، برای واگنی دوگانه، اگر ویژه‌تابعهای واگن A را عمود بر یکدیگر بگیریم (مثلاً، e^{ikx} و e^{-ikx} برای ذرهٔ آزاد) خودبه‌خود ویژه‌تابعهای B نیز هستند.

حتی پس از یافتن ویژه‌تابعهای A و تعیین ترکیبهای خطیی که ویژه‌تابعهای عملگر جابه‌جاشوندهٔ B هستند، ممکن است واگنی کاملاً از بین نرفته باشد، یعنی چند ویژه‌تابع همزمان A و B با همان a و b وجود داشته باشند. این نشان می‌دهد که باید عملگر سومی مانند C وجود داشته باشد که با A و B جابه‌جا شود و تابع را می‌توان چنان بازترکیب کرد که ویژه‌تابعهای همزمان A و B و C باشد و ویژه‌مقدارهای آن ویژه‌تابعهای واگن A و B را متمایز کنند. این روند تا از بین رفتن کامل واگنی ادامه می‌یابد. مجموعهٔ عملگرهای دو به‌دو جابه‌جاشوندهٔ A، B، C، . . .، M، که ویژه‌تابعهای مشترک آنها را تعیین می‌کنیم، مجموعهٔ کامل مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده نامیده

می‌شود. داریم

$$\begin{aligned} [A,B] &= [A,C] = \cdots = [A,M] = ۰ \\ [B,C] &= [B,D] = \cdots = [B,M] = ۰ \end{aligned} \qquad (۶\_۶۱)$$

و غیره، با ویژه‌تابعهای همزمان $u_{ab\cdots m}(x)$:

$$\begin{aligned} Au_{ab\cdots m}(x) &= au_{ab\cdots m}(x) \\ Bu_{ab\cdots m}(x) &= bu_{ab\cdots m}(x) \\ Mu_{ab\cdots m}(x) &= mu_{ab\cdots m}(x) \end{aligned} \qquad (۶\_۶۲)$$

برای حالتی که با $u_{abc\cdots m}(x)$ توصیف می‌شود مقادیر مشاهده‌پذیرهای A، B، C، ...، M معین هستند. این بیشترین اطلاعاتی است که می‌توان یکباره راجع به دستگاه داشته باشیم، زیرا اگر عملگر دیگری را در نظر بگیریم که تابعی از A، B، ...، M نباشد (چون اینها جابه‌جا می‌شوند، چنین تابعی بدون ابهام تعریف می‌شود) از اندازه‌گیری آن یک مقدار دقیق در حالت $u_{ab\cdots m}(x)$ به‌دست نمی‌آید. به‌طور کلی، اگر دو عملگر با هم جابه‌جا نشوند نوعی رابطهٔ عدم قطعیت برای دقتی که می‌توان این دو مشاهده‌پذیر را تعیین کرد وجود دارد.

رابطه‌های عدم قطعیت

یک راه ساده برای تعریف عدم قطعیت وابسته به یک عملگر A توصیف آن با استفاده از افت‌وخیز حول مقدار میانگین است. عملگر A و یک حالت بهنجارشدهٔ کلی را در نظر می‌گیریم که با ψ توصیف می‌شود. مقدار میانگین A همان مقدار انتظاری $\langle\psi|A|\psi\rangle$ است که آن‌را با نماد اختصاری $\langle A\rangle$ نشان می‌دهیم. مجذور انحراف از میانگین معیاری از افت‌وخیز است. با این کمیت است که مجذور عدم قطعیت $(\Delta A)^۲$ را تعریف می‌کنیم:

$$\begin{aligned} (\Delta A)^۲ \equiv \langle (A-\langle A\rangle)^۲\rangle &= \langle A^۲ - ۲A\langle A\rangle + \langle A\rangle^۲\rangle \\ &= \langle A^۲\rangle - \langle A\rangle^۲ \end{aligned} \qquad (۶\_۶۳)$$

زیرا مقدار میانگین عددی مانند $\langle A\rangle^۲$ درست برابر با همان عدد است.

در پیوست ب نشان می‌دهیم که اگر دو عملگر هرمیتی A و B جابه‌جا نشوند عدم قطعیتهای ΔA و ΔB همبسته‌اند، و رابطهٔ آنها به‌صورت زیر است

$$(\Delta A)^۲(\Delta B)^۲ \geq \frac{۱}{۴}\langle i[A,B]\rangle^۲ \qquad (۶\_۶۴)$$

که در آن $[A, B] = AB - BA$.

توجه کنید که اگر حالت ψ اتفاقاً یک ویژه‌حالت یکی از عملگرها، مثلاً A، باشد آنگاه

$$\begin{aligned}(\Delta A)^{۲} &= \langle a|A^{۲}|a\rangle - \langle a|A|a\rangle^{۲} \\ &= a^{۲}\langle a|a\rangle - [a\langle a|a\rangle]^{۲} = ۰\end{aligned} \tag{۶\_۶۵}$$

که برخلاف انتظار نیست، زیرا عدم قطعیتی وجود ندارد. بنابراین، طرف چپ ۶ـ۶۴ صفر می‌شود. در طرف راست هم صفر به‌دست می‌آید زیرا

$$\begin{aligned}\langle a|[A, B]|a\rangle &= \langle a|AB|a_a\rangle - \langle a|BA|a_a\rangle \\ &= \langle A(a)|B|a\rangle - \langle a|B|A(a)\rangle \\ &= a\langle a|B|a\rangle - a\langle a|B|a\rangle = ۰\end{aligned}$$

برای عملگرهای x و p، که برای آنها $[x, p] = i\hbar$، به‌دست می‌آوریم

$$(\Delta x)^{۲}(\Delta p)^{۲} \geq \frac{\hbar^{۲}}{۴} \tag{۶\_۶۶}$$

توجه کنید که در محاسبه‌های بالا هیچ استفاده‌ای از ویژگیهای موجی، توابع موج فضای x و فضای p، یا دوگانگی موج‌ـذره نشده است. نتیجهٔ به‌دست آمده تنها به ویژگیهای عملگری مشاهده‌پذیرهای A و B بستگی دارد.

وابستگی زمانی و حد کلاسیک

اکنون به مسئلهٔ مهم حد کلاسیک نظریهٔ کوانتومی می‌پردازیم. برای این کار ابتدا باید تغییرات زمانی مقدار انتظاری عملگرها را بررسی کنیم. به‌طور کلی، مقدار انتظاری یک عملگر با زمان تغییر می‌کند. این تغییر می‌تواند به دلیل وابستگی صریح خود عملگر به زمان باشد، مانند عملگر $x + pt/m$ و یا می‌تواند به این دلیل باشد که مقدار انتظاری نسبت به تابع‌موجی گرفته می‌شود که خودش با زمان تغییر می‌کند. اگر بنویسیم

$$\langle A\rangle_t = \int \psi^*(x, t)A\psi(x, t)dx \tag{۶\_۶۷}$$

آنگاه

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle A\rangle_t =& \int \psi^*(x,t)\frac{\partial A}{\partial t}\psi(x,t)dx \\ &+\int \frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial t}A\psi(x,t)dx \\ &+\int \psi^*(x,t)A\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}dx \\ =&\left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle_t+\int \left(\frac{1}{i\hbar}H\psi(x,t)\right)^* A\psi(x,t) \\ &+\int \psi^*(x,t)A\left(\frac{1}{i\hbar}H\psi(x,t)\right) \\ =&\left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle_t+\frac{i}{\hbar}\int \psi^*(x,t)HA\psi(x,t)dx \\ &-\frac{i}{\hbar}\int \psi^*(x,t)AH\psi(x,t)dx\end{aligned}$$

بنابراین

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle_t = \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle_t + \frac{i}{\hbar}\langle[H,A]\rangle_t \qquad (۶\text{-}۶۸)$$

در این محاسبه از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که H یک عملگر هرمیتی است. نتیجه می‌گیریم که اگر A وابستگی صریح به زمان نداشته باشد، تغییر مقدار انتظاری برای هر حالتی به‌صورت زیر است

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle_t = \frac{i}{\hbar}\langle[H,A]\rangle_t \qquad (۶\text{-}۶۹)$$

هرگاه این عملگر با H جابه‌جا شود، مقدار انتظاری آن همیشه ثابت است، و می‌توان گفت این مشاهده‌پذیر یک ثابت حرکت است. اگر H عضوی از مجموعهٔ کامل مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده باشد، تمام مشاهده‌پذیرهای دیگر این مجموعه ثابتهای حرکت خواهند بود.

در اینجا به‌ترتیب $A = x$ و $A = p$ را در نظر می‌گیریم. بنابراین داریم

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle x\rangle &= \frac{i}{\hbar}\langle [H, x]\rangle \\ &= \frac{i}{\hbar}\left\langle \left[\frac{p^2}{2m} + V(x), x\right] \right\rangle\end{aligned}$$

اما x با هر تابعی از x جابه‌جا می‌شود:

$$[V(x), x] = 0$$
(۶_۷۰)

و از این‌رو تنها باید $[p^2, x]$ را محاسبه کنیم:

$$\begin{aligned}[p^2, x] &= p[p, x] + [p, x]p \\ &= \frac{2\hbar}{i}p\end{aligned}$$
(۶_۷۱)

بنابراین، به‌دست می‌آوریم

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \left\langle \frac{p}{m} \right\rangle$$
(۶_۷۲)

اکنون می‌نویسیم

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle p\rangle &= \frac{i}{\hbar}\left\langle \left[\frac{p^2}{2m} + V(x), p\right] \right\rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar}\langle [p, V(x)]\rangle\end{aligned}$$
(۶_۷۳)

زیرا بدیهی است که p^2 با p جابه‌جا می‌شود. برای محاسبهٔ آخرین جابه‌جاگر، می‌نویسیم

$$\begin{aligned}pV(x)\psi(x) - V(x)p\psi(x) &= \frac{\hbar}{i}\,\frac{d}{dx}[V(x)\psi(x)] - \frac{\hbar}{i}V(x)\frac{d}{dx}\psi(x) \\ &= \frac{\hbar}{i}\,\frac{dV(x)}{dx}\psi(x)\end{aligned}$$
(۶_۷۴)

بنابراین،

$$[p, V(x)] = \frac{\hbar}{i}\,\frac{dV(x)}{dx} \qquad (۶\_۷۵)$$

و در نتیجه

$$\frac{d}{dt}\langle p\rangle_t = -\left\langle \frac{dV(x)}{dx}\right\rangle_t \qquad (۶\_۷۶)$$

از ترکیب ۶ـ۷۲ و ۶ـ۷۶ به‌دست می‌آوریم

$$m\frac{d^2}{dt^2}\langle x\rangle_t = -\left\langle \frac{dV(x)}{dx}\right\rangle_t \qquad (۶\_۷۷)$$

این رابطه بسیار شبیه معادلهٔ حرکت ذرهٔ کلاسیک در پتانسیل $V(x)$ است:

$$m\frac{d^2 x_{\rm cl}}{dt^2} = -\frac{dV(x_{\rm cl})}{dx_{\rm cl}} \qquad (۶\_۷۸)$$

تنها چیزی که ما را از پذیرفتن اتحاد

$$x_{\rm cl} = \langle x\rangle \qquad (۶\_۷۹)$$

باز می‌دارد این است که

$$\left\langle \frac{dV}{dx}\right\rangle \neq \frac{d}{d\langle x\rangle}V(\langle x\rangle) \qquad (۶\_۸۰)$$

تحت شرایطی که نامساوی بالا به یک تساوی تقریبی تبدیل می‌شود، حرکت اساساً کلاسیک است، و اهرنفست برای نخستین بار متوجه این نکته شد. این تساوی تقریبی ایجاب می‌کند که پتانسیل تابعی کندتغییر از شناسهٔ خود باشد. اگر بنویسیم

$$F(x) = -\frac{dV(x)}{dx} \qquad (۶\_۸۱)$$

آنگاه

$$F(x) = F(\langle x\rangle) + (x - \langle x\rangle)F'(\langle x\rangle) + \frac{(x-\langle x\rangle)^2}{2!}F''(\langle x\rangle) + \cdots$$

اگر عدم قطعیت $(\Delta x)^2 = \langle (x - \langle x\rangle)^2\rangle$ کوچک باشد، و بتوان از جمله‌های بالاتر در بسط صرفنظر کنیم، به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \langle F(x)\rangle &\cong F(\langle x\rangle) + \langle x - \langle x\rangle\rangle F'(\langle x\rangle) \\ &\cong F(\langle x\rangle) \end{aligned} \qquad (۸۲\_۶)$$

این رابطه می‌تواند حتی برای الکترونها و ذرات زیراتمی دیگر معتبر باشد، و برای میدانهای ماکروسکوپیک تقریب خوبی است، و به این دلیل می‌توان مدار الکترون یا پروتون در شتابدهنده‌ها را با معادله‌های کلاسیک حرکت توصیف کرد.

مسائل

۱ـ۶ اگر A و B عملگرهای هرمیتی باشند، ثابت کنید (۱) عملگر AB تنها به شرطی هرمیتی است که A و B جابه‌جا شوند، یعنی $AB = BA$، و (۲) عملگر $(A+B)^n$ هرمیتی است.

۲ـ۶ ثابت کنید عملگر A هر چه باشد، $A + A^\dagger$ و $i(A - A^\dagger)$، و همچنین $AA^\dagger$، هرمیتی هستند.

۳ـ۶ ثابت کنید اگر H عملگر هرمیتی باشد همیوغ هرمیتی عملگر e^{iH} (که با $\sum_{n=0}^{\infty} i^n H^n/n!$ تعریف می‌شود) به‌صورت e^{-iH} است.

۴ـ۶ نامساوی شوارتز را اثبات کنید:

$$\langle\psi|\psi\rangle\langle\phi|\phi\rangle \geq |\langle\psi|\phi\rangle|^2$$

توجه کنید که این نامساوی هم‌ارز $\cos^2\theta \leq 1$ برای بردارهای سه‌بعدی است.
[راهنمایی: $\langle\psi + \lambda\phi|\psi + \lambda\phi\rangle \geq 0$ را در نظر بگیرید و مقدار λ را که به‌ازای آن طرف چپ کمینه می‌شود محاسبه کنید.]

۵ـ۶ برای پتانسیل

$$\begin{aligned} V(x) &= \infty \qquad && x < 0 \\ &= 0 && 0 < x < a \\ &= \infty && a < x \end{aligned}$$

ویژه‌تابعهای بهنجارشده عبارت‌اند از $u_n(x) = \sqrt{2/a}\sin(n\pi x/a)$. نشان دهید

$$\sum_n \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi y}{a} = \delta(x-y) \qquad 0 \le x, y \le a$$

۶ـ۶ اگر A هرمیتی باشد، نشان دهید $\langle A^2\rangle \geq 0$.

۷ـ۶ عملگر هرمیتی H دارای ویژگی زیر است

$$H^4 = 1$$

ویژه‌مقدارهای این عملگر H را به‌دست آورید. اگر H هرمیتی نباشد، ویژه‌مقدارهای آن‌را تعیین کنید.

۸ـ۶ عملگر U را یکانی می‌گوییم اگر دارای ویژگی زیر باشد

$$UU^\dagger = U^\dagger U = 1$$

نشان دهید اگر $\langle \psi/\psi\rangle = 1$ آنگاه $\langle U\psi/U\psi\rangle = 1$.

۹ـ۶ نشان دهید اگر A هرمیتی باشد e^{iA} یکانی است.

۱۰ـ۶ نشان دهید اگر مجموعهٔ کامل $\{u_a\}$ راست‌هنجار باشد:

$$\langle u_a|u_b\rangle = \delta_{ab}$$

مجموعهٔ بردارهای

$$|v_a\rangle = U|u_a\rangle$$

که در آن U یکانی است نیز راست‌هنجار است.

۱۱ـ۶ برای ذره‌ای در یک جعبهٔ نامتناهی در حالتی که با عدد کوانتومی n مشخص می‌شود، نشان دهید

$$\Delta p\, \Delta x \sim hn$$

۱۲ـ۶ با استفاده از رابطهٔ جابه‌جایی میان تکانهٔ p و مکان x، معادله‌هایی را به‌دست آورید که

وابستگی زمانی $\langle x\rangle$ و $\langle p\rangle$ را به‌ازای هامیلتونیهای زیر بیان کنید

(الف) $$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m(\omega_1^2 x^2 + \omega_2 x + \epsilon)$$

(ب) $$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - \frac{A}{x^2}$$

اولین مجموعهٔ معادله‌ها (هامیلتونی الف) را حل کنید.

۱۳ـ۶ هامیلتونی الکترونی در یک میدان الکتریکی نوسانی به‌صورت زیر است

$$H = \frac{p^2}{2m} - (eE_0 \cos \omega t)x$$

(dx/dt)، (dp/dt)، و (dH/dt) را محاسبه کنید.

مراجع

ساختار کلی مکانیک موجی در تمام کتابهای مکانیک کوانتومی بررسی می‌شود. برای مثال، می‌توانید به کتابهای زیر مراجعه کنید

پاول جی، ال و ب کریسمن، مکانیک کوانتومی، ترجمهٔ پاشایی‌راد و سعادت، تهران، مرکز نشر دانشگاهی، ۱۳۶۸، ۵۴۸ صفحه.

D Bohm, *Quantum Theory*, Dover Publishers, Inc. New York, 1989.

R H Dicke and J P Wittke, *Introduction to Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, Reading, Mass, 1960

و کتاب پیشرفته‌تر

E Merzbacher, *Quantum Mechanics*, John Wiley & Sons, New York, 1970.

۷

روشهای عملگری در مکانیک کوانتومی

در بحث ساختار کلی مکانیک موجی، به عملگرهای معرف مشاهده‌پذیرها و ویژه‌تابعهای آنها به یک اندازه اهمیت دادیم. اگرچه در یک جا ویژه‌تابعها را همانند یک پایهٔ راست‌هنجار از بردارهای یکه در فضای برداری Nبعدی توصیف کردیم ــ که مسلماً از اهمیت آنها می‌کاهد ــ اما به‌نظر می‌رسید که آنها، نه عملگرها، در بررسی مسائل فیزیکی در فصل ۵ نقش اول را به‌عهده دارند. در این فصل، با استفاده از یک مثال ساده، نشان خواهیم داد که (الف) برای یافتن طیف ویژه‌مقدار تنها با استفاده از عملگرها می‌توان نتیجه‌های بسیاری به‌دست آورد، و (ب) توصیف ویژه‌تابعها به‌عنوان پایه را می‌توان اندکی مجردتر کرد. این توصیف به این دلیل اهمیت دارد که تاکنون تنها توابعی را در نظر گرفته‌ایم که به x یا به p بستگی دارند، اما در آینده نشان خواهیم داد که مشاهده‌پذیرهایی وجود دارند که نمی‌توان آنها را مستقیماً به‌فضای x وابسته کرد، و برای آنها باید مفهوم مجردتر ویژه‌حالت را تعریف کرد. این نکات در جریان بررسی مثال مزبور، مسئلهٔ نوسانگر هماهنگ، روشنتر خواهند شد.[1]

---

۱. مسائلی که حل دقیق دارند، چه به‌صورت معادله‌های دیفرانسیل چه به‌صورت عملگری، اندک هستند. مسئلهٔ نوسانگر هماهنگ از همه ساده‌تر و از این‌رو برای اهداف ما از همه مناسبتر است.

طیف انرژی نوسانگر هماهنگ

هامیلتونی نوسانگر هماهنگ به‌صورت زیر است

$$H = \frac{p^۲}{۲m} + \frac{۱}{۲}m\omega^۲ x^۲ \qquad (۱\text{-}۷)$$

که در آن x و p عملگر هستند. بر نمایش p به‌صورت $(\hbar/i)(d/dx)$ تأکید نمی‌کنیم. تنها نتیجهٔ این نمایش صریح، که در فصل ۳ به‌دست‌آوردیم، رابطهٔ جابه‌جایی بنیادی زیر است

$$[p, x] = \frac{\hbar}{i} \qquad (۲\text{-}۷)$$

به لحاظ کلاسیک، هامیلتونی نوسانگر هماهنگ را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$H = \omega\left(\sqrt{\frac{m\omega}{۲}}x - i\frac{p}{\sqrt{۲m\omega}}\right)\left(\sqrt{\frac{m\omega}{۲}}x + i\frac{p}{\sqrt{۲m\omega}}\right)$$

اما چون p و x جابه‌جا نمی‌شوند، داریم

$$\begin{aligned}
&\omega\left(\sqrt{\frac{m\omega}{۲}}x - i\frac{p}{\sqrt{۲m\omega}}\right)\left(\sqrt{\frac{m\omega}{۲}}x + i\frac{p}{\sqrt{۲m\omega}}\right)\\
&= \frac{p^۲}{۲m} + \frac{m\omega^۲}{۲}x^۲ - \frac{i\omega}{۲}(px - xp) \qquad (۳\text{-}۷)\\
&= H - \frac{۱}{۲}\hbar\omega
\end{aligned}$$

در اینجا برای عملگرهایی که $H - \hbar\omega/۲$ به آنها تجزیه شده است یک نمادنگاری خاص معرفی می‌کنیم:

$$\begin{aligned}
A &= \sqrt{\frac{m\omega}{۲\hbar}}x + i\frac{p}{\sqrt{۲m\omega\hbar}}\\
A^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega}{۲\hbar}}x - i\frac{p}{\sqrt{۲m\omega\hbar}}
\end{aligned} \qquad (۴\text{-}۷)$$

که در آنها عامل اضافی $\sqrt{۱/\hbar}$ را برای این وارد کرده‌ایم که A و $A^\dagger$ بی‌بعد باشند. چون x و p هرمیتی هستند، $A^\dagger$ واقعاً همیوغ هرمیتی A است. توجه کنید که

$$[A, A^\dagger] = \left[\sqrt{\frac{m\omega}{۲\hbar}}x, -i\frac{p}{\sqrt{۲m\omega\hbar}}\right] + \left[i\frac{p}{\sqrt{۲m\omega\hbar}}, \sqrt{\frac{m\omega}{۲\hbar}}x\right] = ۱ \qquad (۵\text{-}۷)$$

هامیلتونی به‌صورت زیر درمی‌آید

$$H = \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + A^\dagger A\right) \qquad (۷ـ۶)$$

این سادگی هامیلتونی موجب سادگی رابطه‌های جابه‌جایی A و $A^\dagger$ با H می‌شود. داریم[۲]

$$[H, A] = [\hbar\omega A^\dagger A, A] = \hbar\omega[A^\dagger, A]A = -\hbar\omega A \qquad (۷ـ۷)$$

و

$$[H, A^\dagger] = [\hbar\omega A^\dagger A, A^\dagger] = \hbar\omega A^\dagger[A, A^\dagger] = \hbar\omega A^\dagger \qquad (۷ـ۸)$$

توجه کنید که یک راه ساده برای به‌دست آوردن رابطه‌های جابه‌جایی شامل عملگرهای الحاقی هرمیتی استفاده از اتحاد زیر است

$$[A, B]^\dagger = (AB - BA)^\dagger = B^\dagger A^\dagger - A^\dagger B^\dagger = [B^\dagger, A^\dagger] \qquad (۷ـ۹)$$

مخصوصاً داریم

$$\begin{aligned} [H, A]^\dagger = [A^\dagger, H] &= -[H, A^\dagger] \\ &= (-\hbar\omega A)^\dagger \end{aligned} \qquad (۷ـ۱۰)$$

که از آن رابطهٔ ۷ـ۸ به‌دست می‌آید.

اکنون معادلهٔ ویژه‌مقداری را می‌نویسیم:

$$H u_E = E u_E \qquad (۷ـ۱۱)$$

درگذشته، هرگاه چنین معادله‌ای را می‌نوشتیم، منظور آن بود که H شامل عملگرهای دیفرانسیلی مانند d/dx است و u_E تابعی از x است. این فرض مناسب بود زیرا با عملگرهایی سروکار داشتیم

---

۲. از قاعده‌های جابه‌جایی که در پیوست ب نشان داده شده‌اند مکرراً استفاده خواهیم کرد، از جمله

$$[A + B, C] = [A, C] + [B, C] \qquad و \qquad [AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$$

بدیهی است که ترتیب عملگرها نباید به‌هم بخورد.

که مشخصاً به فضایی مربوط می‌شدند که با تمام تابعهای انتگرال‌پذیر مجذوری از x تعریف شده بود، اما در آنچه اکنون انجام می‌دهیم چیزهایی را که عملگرها روی آنها عمل می‌کنند چندان مشخص نمی‌کنیم. تنها فرض می‌کنیم که آنها در یک فضای برداری مجرد تعریف شده‌اند، و این فضا را بعداً به‌فضای توابع x مربوط خواهیم کرد. برای انتقال این تجرید به زبانی که برای توصیف معادله‌ها از آن استفاده می‌کنیم، به‌جای ویژه‌تابع از ویژه‌حالت صحبت می‌کنیم، و آنچه را تابع‌موج یا بستهٔ‌موج نامیدیم اکنون بردار حالت می‌نامیم. بنابراین، به‌جای ویژه‌تابع $u_{ab\cdots m}$ مربوط به بزرگترین مجموعهٔ مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده می‌توان ویژه‌بردار یا ویژه‌حالت $u_{ab\cdots m}$ را به‌کار برد؛ شاخصهای a، b، ...، m معرف ویژه‌مقدارهای عملگرهای A، B، ...، M هستند، و این توصیف، بدون x، به‌روشنی حاوی بیشترین اطلاعات ممکن است.

اکنون ۷ـ۷ را بر u_E اعمال می‌کنیم:

$$HAu_E - AHu_E = -\hbar\omega Au_E$$

با استفاده از ۷ـ۱۱، به‌دست می‌آوریم

$$HAu_E = (E - \hbar\omega)Au_E \tag{۷ـ۱۲}$$

این معادله نشان می‌دهد که اگر u_E ویژه‌حالت H با ویژه‌مقدار E باشد، Au_E نیز ویژه‌حالت H با ویژه‌مقدار $E - \hbar\omega$ است، یعنی متناظر با ویژه‌مقداری است که به اندازهٔ یک

$$\epsilon = \hbar\omega \tag{۷ـ۱۳}$$

کمتر است. بنابراین، می‌توان نوشت

$$Au_E = c(E)u_{E-\epsilon} \tag{۷ـ۱۴}$$

وجود ثابت $c(E)$ لازم است، زیرا حتی اگر u_E به ۱ بهنجار شده باشد Au_E الزاماً چنین نیست. در تأکید بر جدایی از وابستگی به x، شرط بهنجارش که همیشه به‌صورت

$$\int u_E^*(x)u_E(x)dx = ۱$$

نوشته می‌شد اکنون با استفاده از نمادنگاری دیراک به‌صورت زیر نوشته می‌شود

$$\langle u_E|u_E\rangle = ۱ \tag{۷ـ۱۵}$$

ویژه‌حالتها را همیشه به ۱ بهنجار خواهیم کرد، مگر اینکه متعلق به پیوستار باشند، که در این مورد

$$\langle u_E | u_{E'} \rangle = \begin{cases} \delta(E - E') \\ \text{یا } \delta(p - p') \end{cases} \qquad (۱۶\text{_}۷)$$

اکنون اگر ۷_۷ را بر حالت $u_{E-\epsilon}$ اعمال کنیم، دقیقاً به همان طریق می‌بینیم که $Au_{E-\epsilon}$ ، یا معادل آن $A^{۲}u_E$، حالتی با انرژی $E - ۲\epsilon$ را می‌دهد. بنابراین، با اعمال مکرر A روی یک u_E می‌توان حالتهای با انرژی کمتر و کمتر را تولید کرد. عملگر A را به همین مناسبت عملگر کاهنده می‌نامند. حدی برای تکرار اعمال A وجود دارد زیرا یک پیامد ۷_۱ این است که مقدار انتظاری H باید همیشه مثبت باشد. در واقع، برای یک تابع‌موج اختیاری داریم

$$\begin{aligned} \langle \psi | p^{۲} | \psi \rangle &= \int \psi^*(x) p^{۲} \psi(x) dx = \int [p^{+} \psi(x)]^* (p\psi) dx \\ &= \int [p\psi(x)]^* [p\psi(x)] dx \\ &= \hbar^{۲} \int |d\psi(x)/dx|^{۲} dx \geq ۰ \end{aligned} \qquad (۱۷\text{_}۷)$$

که در نمادنگاری بی‌مختصات به‌صورت زیر بیان می‌شود

$$\begin{aligned} \langle \psi | p^{۲} | \psi \rangle &= \langle p^{\dagger} \psi | p\psi \rangle \\ &= \langle p\psi | p\psi \rangle \geq ۰ \end{aligned} \qquad (۱۸\text{_}۷)$$

به‌همین ترتیب، چون x نیز یک عملگر هرمیتی است، داریم

$$\begin{aligned} \langle \psi | x^{۲} | \psi \rangle &= \langle x^{\dagger} \psi | x\psi \rangle \\ &= \langle x\psi | x\psi \rangle \geq ۰ \end{aligned} \qquad (۱۹\text{_}۷)$$

و حاصلضرب نرده‌ای هر بردار در خودش مجذور طول آن است که یک عدد مثبت است. بنابراین، روند کاهش باید در جایی که حالت پایه است قطع شود. یعنی، اگر حالت پایه را با $u_۰$ نشان دهیم، باید

$$Au_۰ = ۰ \qquad (۲۰\text{_}۷)$$

انرژی حالت پایه برابر است با

$$Hu_\circ = (\hbar\omega A^\dagger A + \frac{۱}{۲}\hbar\omega)u_\circ = \frac{۱}{۲}\hbar\omega\ u_\circ \qquad (۲۱\text{_}۷)$$

اکنون ۷ـ۸ را بر حالت پایه اعمال می‌کنیم:

$$HA^\dagger u_\circ - A^\dagger H u_\circ = \hbar\omega A^\dagger u_\circ$$

یعنی،

$$HA^\dagger u_\circ = (\hbar\omega + \frac{۱}{۲}\hbar\omega)A^\dagger u_\circ \qquad (۲۲\text{_}۷)$$

انرژی به‌اندازهٔ یک $\hbar\omega$ افزایش یافته است، و از این‌رو $A^\dagger$ را عملگر افزاینده می‌نامند. نمادنگاری خود را اندکی تغییر می‌دهیم، به این معنی که هر حالت را با تعداد $\hbar\omega$های افزون بر انرژی حالت پایهٔ $\hbar\omega/۲$ نشانگذاری می‌کنیم. بنابراین، می‌نویسیم

$$A^\dagger u_\circ = cu_۱ \qquad (۲۳\text{_}۷)$$

توجه کنید که ۷ـ۱۲ ایجاب می‌کند که

$$Au_۱ = c' u_\circ \qquad (۲۴\text{_}۷)$$

یعنی $A^\dagger$ و A روی یک "نردبان" پله به پله حرکت می‌کنند. تمام حالتها را می‌توان با اعمال مکرر $A^\dagger$ بر $u_\circ$ تولید کرد. در نتیجه، طیف انرژی با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$E = \left(n + \frac{۱}{۲}\right)\hbar\omega \qquad n = ۰, ۱, ۲, \ldots \qquad (۲۵\text{_}۷)$$

بدین‌ترتیب، توانسته‌ایم طیف انرژی را بدون حل هیچ معادلهٔ دیفرانسیلی به‌دست آوریم. همچنین یک نمایش کلی از ویژه‌بردارها داریم:

$$u_n = \frac{۱}{\sqrt{n!}}(A^\dagger)^n u_\circ \qquad (۲۶\text{_}۷)$$

که در آن ثابت درست بهنجارش را وارد کرده‌ایم. یک راه به‌دست آوردن این ثابت این است که با
توجه به رابطهٔ جابه‌جایی

$$[A, A^\dagger] = ۱$$

از تساوی صوری زیر استفاده کنیم

$$A = \frac{d}{dA^\dagger} \qquad (۷\text{ـ}۲۷)$$

بنابراین، می‌توانیم بنویسیم

$$\langle u_۰ | A^m (A^\dagger)^n | u_۰ \rangle = \left\langle u_۰ \left| \left(\frac{d}{dA^\dagger} \right)^m (A^\dagger)^n \right| u_۰ \right\rangle$$

به‌ازای $m < n$، برای طرف راست به‌دست می‌آوریم

$$n(n-۱)(n-۲)\cdots(n-m+۱)\langle u_۰ | (A^\dagger)^{n-m} | u_۰ \rangle$$

به‌آسانی دیده می‌شود که براکت برابر با صفر است:

$$\langle u_۰ | (A^\dagger)^{n-m} | u_۰ \rangle = \langle A u_۰ \left| (A^\dagger)^{n-m-۱} \right| u_۰ > = ۰$$

زیرا $A u_۰ = ۰$. به‌ازای $m > n$، طرف چپ را به‌صورت زیر می‌نویسیم

$$\langle u_۰ | A^m (A^\dagger)^n | u_۰ \rangle = \left\langle u_۰ \left| A^{m-n} \left(\frac{d}{dA^\dagger} \right)^n (A^\dagger)^n \right| u_۰ \right\rangle$$

پس از مشتق گرفتن به این نتیجه می‌رسیم که $n! \langle u_۰ | A^{m-n} | u_۰ \rangle = ۰$. به‌ازای $m = n$ داریم

$$\langle u_۰ | A^n (A^\dagger)^n | u_۰ \rangle = \left\langle u_۰ \left| \left(\frac{d}{dA^\dagger} \right)^n (A^\dagger)^n \right| u_۰ \right\rangle = n!$$

بنابراین، ضریب بهنجارش در ۷ـ۲۶ درست است، و همچنین نشان داده‌ایم که

$$\langle u_m | u_n \rangle = ۰ \qquad m \neq n \qquad (۷\text{ـ}۲۸)$$

این حکم که هر بردار حالت اختیاری را می‌توان برحسب ویژه‌حالتهای H بسط داد اکنون به‌صورت مستقل از مختصات زیر نوشته می‌شود

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} C_n u_n \qquad (۲۹\_۷)$$

و چون $\langle u_m|u_n\rangle = \delta_{mn}$، داریم

$$C_m = \langle u_m|\psi\rangle \qquad (۳۰\_۷)$$

نمایشهای حالتهای مجرد: از عملگرها تا معادلهٔ شرودینگر

نشان دادیم که می‌توان ویژه‌مقدارهای انرژی نوسانگر هماهنگ را تنها با استفاده از روشهای عملگری به‌دست آورد. در این مسئله تنها چیزی که برای تعیین ویژه‌حالتها به آن احتیاج داریم انرژی است، یعنی اعداد درست $n = 0, 1, 2, \ldots$ که در رابطهٔ زیر ظاهر می‌شوند

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$$

و از این‌رو مجموعهٔ کامل مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده تنها شامل H است.[۳] بدین‌ترتیب، شاخص n در u_n تمام محتوای آن‌را توصیف می‌کند. بنابراین، می‌توانیم نقش ممتاز ویژه‌تابع در فضای x، $u_n(x)$، را کنار بگذاریم، بجز اینکه: $u_n(x)$ اطلاعات بیشتری به‌ما می‌دهد زیرا چگالی احتمال یافتن ذره در x را (از طریق $|u_n(x)|^2$) تعیین می‌کند. با وجود این، آیا این مضمون اضافی می‌تواند تابع‌موج فضای x را ممتاز کند؟ برای مثال، نقش تابع‌موج $\phi(p)$ را در فضای تکانه یادآور می‌شویم. چنانکه در فصل ۳ دیدیم، $\phi(p)$ تبدیل فوریهٔ تابع‌موج فضای x است و از این‌رو ممکن است برای آن نقش ممتازی در نظر بگیریم، اما بعداً توضیح دادیم که $\phi(p)$، مثلاً در ۴ـ۴، "صرفاً" یک ضریب بسط در بسط تابع‌موج اختیاری $\psi(x)$ برحسب ویژه‌تابعهای عملگر تکانه است، و به همین دلیل مجذور قدرمطلق آن احتمال یافتن تکانهٔ p برای آن حالت را به‌دست می‌دهد. به‌همین‌ترتیب، این واقعیت که $|\psi(x)|^2$ چگالی احتمال یافتن x برای مکان دستگاه است را می‌توان چنین تعبیر کرد که $\psi(x)$ ضریب بسط یک حالت مجرد اختیاری برحسب ویژه‌حالتهای عملگر مکان x_{op} است. معادلهٔ ویژه‌مقداری مربوط را به‌صورت زیر می‌نویسیم

$$x_{\mathrm{op}}\phi_x = x\phi_x \qquad (۳۱\_۷)$$

---

۳. عدد n معرف پاریته نیز هست. حالتهایی که با اعداد زوج n مشخص می‌شوند پاریتهٔ مثبت و آنهایی که با اعداد فرد مشخص می‌شوند پاریتهٔ منفی دارند. این خاصیت از فرد بودن A و $A^\dagger$ تحت انعکاس ناشی می‌شود.

که در آن x را به‌عنوان شاخص نوشته‌ایم تا تأکید کنیم که ϕ_x ویژه‌حالت مربوط به x است، درست همان‌گونه که u_n ویژه‌حالت مربوط به n است. طیف عملگر هرمیتی x_{op} پیوسته است، به‌طوری که قضیهٔ بسط، به‌جای اینکه به‌صورت ۷ـ۲۹ باشد، در واقع به‌صورت زیر است

$$\psi = \int dx\, C(x)\phi_x$$ (۷ـ۳۲)

چون ویژه‌حالتهایی که در ۷ـ۳۱ آمده‌اند یک مجموعهٔ راست‌هنجار تشکیل می‌دهند، یعنی

$$\langle \phi_x | \phi_{x'} \rangle = \delta(x - x')$$ (۷ـ۳۳)

به‌دست می‌آوریم

$$C(x) = \langle \phi_x | \psi \rangle$$ (۷ـ۳۴)

و این کمیت دامنهٔ احتمال یافتن ذره در x است ـــ یا به‌عبارت مشخصتر، از اندازه‌گیری مشاهده‌پذیر x ویژه‌مقدار x با احتمال $|C(x)|^2$ به‌دست می‌آید. کافی است نمادنگاری را تغییر دهیم و ۷ـ۳۲ را به‌صورت

$$\psi = \int dx \psi(x)\, \phi_x$$ (۷ـ۳۵)

بنویسیم تا نشان دهیم تابع‌موج فضای x نقش ممتازی ندارد، و استفاده از آن تنها برای آسانی است. اصول اساسی با عملگرها و ویژه‌بردارها و ویژه‌مقدارهای آنها در یک فضای مجرد سروکار دارند، و بقیهٔ چیزها به نمایش مربوط می‌شوند. البته این نمایش در به‌دست آوردن مقادیر عددی، که هدف فیزیک است، اهمیت فوق‌العاده‌ای دارد. به همین دلیل است که بر ساختار صوری نظریه تأکید چندانی نمی‌کنیم، و همچنان از توابع‌موج استفاده خواهیم کرد. بعداً با عملگرهایی سروکار خواهیم داشت که مانستهٔ کلاسیک ندارند، مانند اسپین الکترون و سایر ذرات، و در آنجا آزادی استفاده از نمایشهای دیگر را خواهیم دید.

برای مراجعهٔ آینده- بهتر است دامنهٔ به‌دست آمدن مقدار x در اندازه‌گیری مکان را برای یک ویژه‌حالت تکانهٔ u_p محاسبه کنیم، یعنی می‌خواهیم $\psi(x)$ را که با رابطهٔ زیر تعریف می‌شود محاسبه کنیم

$$u_p = \int dx\, \psi(x)\phi_x$$ (۷ـ۳۶)

بنابه قواعدی که گفتیم، داریم

$$\psi(x) = \langle \phi_x | u_p \rangle \qquad (۷\_۳۷)$$

اما می‌دانیم که دامنهٔ یافتن ذره‌ای با تکانهٔ p در نقطهٔ x با تابع‌موج ذرهٔ آزاد زیر داده می‌شود

$$\psi(x) = \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{۲\pi\hbar}} \qquad (۷\_۳۸)$$

بنابراین، به‌این نتیجه می‌رسیم که

$$\langle x|p \rangle = \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{۲\pi\hbar}} \qquad (۷\_۳۹)$$

که در آن برای ساده‌نویسی از تغییر نمادنگاری $|\phi_x\rangle \to |x\rangle$ ،$|u_p\rangle \to |p\rangle$ استفاده کرده‌ایم. توجه کنید که

$$\int dp \langle x|p\rangle\langle p|x'\rangle = \delta(x-x') \qquad (۷\_۴۰)$$

و

$$\int dx \ \langle p|x\rangle\langle x|p'\rangle = \delta(p-p') \qquad (۷\_۴۱)$$

با تعمیم رابطهٔ کاملیت ۶_۴۵،

$$\sum_a |u_a\rangle\langle u_a| = ۱ \qquad (۷\_۴۲)$$

به‌متغیرهای پیوسته، به‌دست می‌آوریم

$$\int dp \ |p\rangle\langle p| = ۱ \qquad (۷\_۴۳)$$

و

$$\int dx \ |x\rangle\langle x| = ۱ \qquad (۷\_۴۴)$$

بنابراین، رابطه‌های ۷_۴۰ و ۷_۴۱ به‌ترتیب [illegible]

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x') \qquad \text{(۷\_۴۵الف)}$$

و

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p - p') \qquad \text{(۷\_۴۵ب)}$$

توجه کنید که ۷_۴۵الف همان ۷_۳۳ با نمادنگاری ساده است.

چگونه از این ساختار مجرد به معادلهٔ شرودینگر می‌رسیم؟ ابتدا ۷_۲۰ را در نظر بگیرید:

$$A|u_\circ\rangle = \circ$$

بنابراین، داریم

$$\langle x|A|u_\circ\rangle = \circ$$

یعنی

$$\left\langle x \left| \sqrt{\frac{m\omega}{۲\hbar}} x_{\text{op}} + i\frac{p_{\text{op}}}{\sqrt{۲m\omega\hbar}} \right| u_\circ \right\rangle = \circ \qquad (۷\_۴۶)$$

اکنون از اعمال عملگر x روی حالت $\langle x|$ به‌دست می‌آوریم

$$x_{\text{op}}|x\rangle = x|x\rangle \qquad (۷\_۴۷)$$

و در نتیجه

$$\langle x|x_{\text{op}}|u_\circ\rangle = x\langle x|u_\circ\rangle = xu_\circ(x) \qquad (۷\_۴۸)$$

و

$$\begin{aligned}\langle x|p_{\text{op}}|u_{\circ}\rangle &= \int dp\ \langle x|p_{\text{op}}|p\rangle\langle p|u_{\circ}\rangle \\ &= \int dp\ p\langle x|p\rangle\langle p|u_{\circ}\rangle \\ &= \int dp\ p\ \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{۲\pi\hbar}}\langle p|u_{\circ}\rangle \\ &= \frac{\hbar}{i}\ \frac{d}{dx}\int dp\ \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{۲\pi\hbar}}\langle p|u_{\circ}\rangle \\ &= \frac{\hbar}{i}\ \frac{d}{dx}\int dp\ \langle x|p\rangle\langle p|u_{\circ}\rangle \\ &= \frac{\hbar}{i}\ \frac{d}{dx}u_{\circ}(x)\end{aligned} \qquad (۴۹\_۷)$$

بنابراین، رابطهٔ $A|u_{\circ}\rangle = \circ$ در فضای x به‌صورت معادلهٔ دیفرانسیل زیر درمی‌آید

$$\left(m\omega x + \hbar\frac{d}{dx}\right)u_{\circ}(x) = \circ \qquad (۵۰\_۷)$$

جواب این معادلهٔ دیفرانسیل ساده عبارت است از

$$u_{\circ}(x) = Ce^{-m\omega x^{۲}/۲\hbar} \qquad (۵۱\_۷)$$

ثابت C از شرط بهنجارش $u_{\circ}(x)$ به ۱ به‌دست می‌آید:

$$۱ = C^{۲}\int_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{-m\omega x^{۲}/\hbar} = C^{۲}\sqrt{\frac{\hbar\pi}{m\omega}}$$

یا

$$C = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{۱/۲} \qquad (۵۲\_۷)$$

همچنین می‌توان حالتهای بالاتر انرژی را مستقیماً با استفاده از رابطهٔ زیر به‌دست آورد

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}}(A^\dagger)^n u_0(x)$$

(۷ـ۵۳)

$$= \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,\frac{d}{dx}\right)^n e^{-m\omega x^2/2\hbar}$$

به‌طور کلی، معادلهٔ

$$H|u_E\rangle = E|u_E\rangle \qquad (۷ـ۵۴)$$

وقتی به‌صورت

$$\langle x|H|u_E\rangle = E\langle x|u_E\rangle \qquad (۷ـ۵۵)$$

نوشته شود به‌معادلهٔ دیفرانسیل زیر برای $\langle x|u_E\rangle = u_E(x)$ تبدیل می‌شود

$$Hu_E(x) = Eu_E(x) \qquad (۷ـ۵۶)$$

که در آن در H، x به‌جای $x_{\rm op}$ و $(\hbar/i)\ (d/dx)$ به‌جای $p_{\rm op}$ گذاشته می‌شود.

وابستگی زمانی عملگرها

این فصل را با بررسی تحول زمانی یک دستگاه به روش مستقل از نمایش به‌پایان می‌رسانیم. معادلهٔ شرودینگر وابسته به زمان

$$i\hbar\frac{d\psi(t)}{dt} = H\psi(t) \qquad (۷ـ۵۷)$$

در اینجا یک معادلهٔ عملگری در یک فضای مجرد است. $\psi(t)$ یک بردار است، و راستای آن تابع زمان است. این معادله را می‌توان به‌آسانی حل کرد. جواب آن، اگر H وابستگی صریح به زمان نداشته باشد، عبارت است از

$$\psi(t) = e^{-iHt/\hbar}\psi(0) \qquad (۷ـ۵۸)$$

که در آن $\psi(\circ)$ بردار در زمان $t = \circ$ است، و عملگر $e^{-iHt/\hbar}$ با رابطهٔ زیر تعریف می‌شود

$$e^{-iHt/\hbar} = \sum_{n=\circ}^{\infty} \frac{(-iHt/\hbar)^n}{n!} \tag{۵۹\_۷}$$

جواب ۷ـ۵۸ امکان توصیف تغییر زمانی مقدار انتظاری عملگری مانند B را، که وابستگی صریح به زمان نداشته باشد، فراهم می‌سازد:

$$\begin{aligned} \langle B \rangle_t &= \langle \psi(t) | B \psi(t) \rangle \\ &= \langle e^{-iHt/\hbar} \psi(\circ) | B\ e^{-iHt/\hbar} \psi(\circ) \rangle \\ &= \langle \psi(\circ) | e^{iHt/\hbar} B\ e^{-iHt/\hbar} \psi(\circ) \rangle \\ &= \langle \psi(\circ) | B(t) \psi(\circ) \rangle \\ &= \langle B(t) \rangle_\circ \end{aligned} \tag{۶۰\_۷}$$

در اینجا از

$$(e^{-iHt/\hbar})^\dagger = e^{iH^\dagger t/\hbar} = e^{iHt/\hbar} \tag{۶۱\_۷}$$

و از تعریف زیر استفاده کرده‌ایم

$$B(t) = e^{iHt/\hbar} B\ e^{-iHt/\hbar} \tag{۶۲\_۷}$$

بنابه ۷ـ۶۰، مقدار انتظاری عملگر مستقل از زمان B را برای حالتی که به‌صورت ۷ـ۵۸ با زمان تغییر می‌کند می‌توان به‌صورت مقدار انتظاری عملگر وابسته به زمان $B(t)$ (که با ۷ـ۶۲ داده می‌شود) برای حالت مستقل از زمان $\psi(\circ)$ نوشت. این نتیجه در بررسی صوری مکانیک کوانتومی بسیار مفید است، زیرا به‌آسانی می‌توان یک بار برای همیشه پایه‌ای از ویژه‌بردارهای راست‌هنجار در فضای برداری مجرد ساخت و نگران این نبود که بردارهای پایه چگونه با زمان تغییر می‌کنند. این روش را نمایش هایزنبرگ می‌نامند، در حالی‌که اگر B را مستقل از زمان بگیریم در نمایش شرودینگر کار می‌کنیم. از هر نمایشی که استفاده کنیم، نتیجه یکی است: مانند این است که در توصیف چرخش یک جسم نسبت به یک دستگاه مختصات، جسم را بچرخانیم و دستگاه مختصات را ثابت بگیریم یا جسم را ساکن بگیریم و دستگاه مختصات را بچرخانیم. انتخاب به سهولت کار بستگی دارد. اگر با نمایش هایزنبرگ کار کنیم، بردارهای حالت ثابت‌اند، و در بررسی تحول زمانی

دستگاه احتیاجی به استفاده از آنها نداریم. چگونگی تغییر یک مشاهده‌پذیر با زمان از ۷ـ۶۲
به‌دست می‌آید:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}B(t) &= \frac{i}{\hbar}He^{iHt/\hbar}B\, e^{-iHt/\hbar} - \frac{i}{\hbar}e^{iHt/\hbar}BH\, e^{-iHt/\hbar} \\ &= \frac{i}{\hbar}HB(t) - \frac{i}{\hbar}B(t)H \\ &= \frac{i}{\hbar}[H, B(t)] \end{aligned} \qquad (۷ـ۶۳)$$

که شباهت زیادی به ۶ـ۶۹ دارد. معادلهٔ ۶ـ۶۹ معادله‌ای برای مقدار انتظاری است، اما چون صورت آن مستقل از حالتی است که در آن مقدار انتظاری محاسبه می‌شود باید حاکی از خواص عملگر باشد، و معادلهٔ ۷ـ۶۳ این را صریحاً نشان می‌دهد.

برای نوسانگر هماهنگ داریم

$$H = \hbar\omega A^\dagger A + \frac{1}{2}\hbar\omega$$

و چون H یک ثابت حرکت است، می‌توانیم بنویسیم

$$H = \hbar\omega A^\dagger(t)A(t) + \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad (۷ـ۶۴)$$

همچنین با استفاده از ۷ـ۶۲ می‌توان نشان داد که

$$[A(t), A^\dagger(t)] = 1 \qquad (۷ـ۶۵)$$

بنابراین، ۷ـ۷ و ۷ـ۸ به‌همان صورت باقی می‌مانند، و به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}A(t) &= -i\omega A(t) \\ \frac{d}{dt}A^\dagger(t) &= i\omega A^\dagger(t) \end{aligned} \qquad (۷ـ۶۶)$$

بدین‌ترتیب، وابستگی زمانی $A(t)$ و $A^\dagger(t)$ از حل ۷ـ۶۶ به‌دست می‌آید:

$$\begin{aligned} A(t) &= e^{-i\omega t}A(0) \\ A^\dagger(t) &= e^{i\omega t}A^\dagger(0) \end{aligned} \qquad (۷ـ۶۷)$$

با استفاده از رابطهٔ ۷ـ۴ به‌سادگی می‌توان نشان داد که

$$p(t) = p(\circ)\ \cos\ \omega t - m\omega x(\circ)\ \sin\ \omega t$$

$$x(t) = x(\circ)\ \cos\ \omega t + \frac{p(\circ)}{m\omega} \sin\ \omega t \qquad (۷\text{ـ}۶۸)$$

که عملگرهای $x(t)$ و $p(t)$ را برحسب عملگرهای $x(\circ)$ و $p(\circ)$ بیان می‌کنند.

مسائل

۷ـ۱ با استفاده از رابطهٔ جابه‌جایی ۷ـ۵ و تعریف حالت u_n که با ۷ـ۲۶ داده شده است، ثابت کنید

$$Au_n = \sqrt{n}\, u_{n-۱}$$

[راهنمایی: از روش استقراء استفاده کنید، یعنی نشان دهید اگر این رابطه برای n برقرار باشد برای $n+۱$ هم برقرار است، و آن‌را مستقیماً برای $n=۱$ اثبات کنید.]

۷ـ۲ با استفاده از رابطهٔ قبل نشان دهید اگر $f(A^\dagger)$ یک چندجمله‌ای برحسب $A^\dagger$ باشد، آنگاه

$$Af(A^\dagger)u_\circ = \frac{df(A^\dagger)}{dA^\dagger} u_\circ$$

توجه کنید که نمایش A به‌صورت

$$A = \frac{d}{dA^\dagger}$$

با رابطهٔ جابه‌جایی ۷ـ۵ سازگار است و کاملاً شبیه به نمایش زیر است

$$p = \frac{\hbar}{i}\, \frac{d}{dx}$$

۷ـ۳ $\langle u_n|x|u_m\rangle$ را محاسبه کنید و نشان دهید که بجز برای $n = m \pm ۱$ مقدار آن برابر صفر است.

[راهنمایی: با توجه به $\langle u_n|A^\dagger|u_m\rangle = \langle Au_n|u_m\rangle = \langle u_m|A|u_n\rangle^*$، کافی است $\langle u_n|A|u_m\rangle$ را به‌دست آورید. از نتایج مسئلهٔ ۷ـ۱ استفاده کنید.]

۴ـ۷ $\langle u_n|p|u_m\rangle$ را محاسبهٔ کنید.

۵ـ۷ با استفاده از نتایج مسئله‌های ۷ـ۳ و ۷ـ۴، $\langle u_m|px|u_n\rangle$ را با محاسبهٔ $\sum_k \langle u_m|p|u_k\rangle\langle u_k|x|u_n\rangle$ به‌دست آورید

۶ـ۷ $\langle u_m|xp|u_n\rangle$ را به روش مسئلهٔ ۷ـ۵ محاسبه کنید.

۷ـ۷ با استفاده از نتایج مسئله‌های ۷ـ۵ و ۷ـ۶ نشان دهید

$$\langle u_m|[p,x]|u_n\rangle = \frac{\hbar}{i}\delta_{mn}$$

۸ـ۷ $\langle u_n|x|u_n\rangle$ و $\langle u_n|x^{۲}|u_n\rangle$ را به‌دست آورید.

۹ـ۷ $\langle u_n|p|u_n\rangle$ و $\langle u_n|p^{۲}|u_n\rangle$ را محاسبه کنید.

۱۰ـ۷ با استفاده از تعریف متداول

$$(\Delta x)^{۲} = \langle u_n|x^{۲}|u_n\rangle - (\langle u_n|x|u_n\rangle)^{۲}$$

$(\Delta x)^{۲}(\Delta p)^{۲}$ را محاسبه کنید.

۱۱ـ۷ یک جفت عملگر A و $A^\dagger$ را که در رابطهٔ جابه‌جایی زیر صدق می‌کنند در نظر بگیرید

$$[A, A^\dagger] = ۱$$

(الف) نشان دهید عملگر $N = A^\dagger A$ دارای ویژه‌مقدارهای $n = ۰, ۱, ۲, \ldots$ است.

(ب) نشان دهید هامیلتونی نوسانگر هماهنگ را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$H = \hbar\omega\left(N + \frac{۱}{۲}\right)$$

۱۲ـ۷ حالت $|\alpha\rangle$ را که در معادلهٔ زیر صدق می‌کند حالت همدوس می‌نامند

$$A|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$$

(الف) نشان دهید حالت $|\alpha\rangle$ را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$|\alpha\rangle = C\, e^{\alpha A^\dagger}|۰\rangle$$

(ب) C را با استفاده از نتیجهٔ مسئلهٔ ۷ـ۲ به‌دست آورید.

(ج) حالت $|\alpha\rangle$ را برحسب ویژه‌حالتهای عملگر شمار N، $|n\rangle$، بسط دهید و با استفاده از آن احتمال این را که حالت همدوس حاوی n کوانتوم باشد به‌دست آورید. این توزیع را توزیع پواسون می‌نامند.

(د) $\langle\alpha|N|\alpha\rangle$ را که میانگین تعداد کوانتومها در حالت همدوس است محاسبه کنید.

۱۳ـ۷ با استفاده از معادلهٔ عمومی عملگری حرکت ۷ـ۶۳، وابستگی زمانی عملگر $x(t)$ را که در هامیلتونی زیر وارد می‌شود به‌دست آورید

$$H = \frac{p^{۲}(t)}{۲m} + mgx(t)$$

۱۴ـ۷ هامیلتونی توصیف‌کنندهٔ نوسانگر یک‌بعدی در میدان الکتریکی خارجی را در نظر بگیرید:

$$H = \frac{p^{۲}(t)}{۲m} + \frac{۱}{۲}m\omega^{۲}x^{۲}(t) - e\mathscr{E}x(t)$$

معادلهٔ حرکت عملگرهای $p(t)$ و $x(t)$ را با استفاده از ۷ـ۶۳ و رابطهٔ جابه‌جایی زیر به‌دست آورید

$$[p(t), x(t)] = \frac{\hbar}{i}$$

نشان دهید این معادلهٔ حرکت درست همان معادلهٔ کلاسیک حرکت است. $x(t)$ و $p(t)$ را برحسب $x(\circ)$ و $p(\circ)$ به‌دست آورید. ثابت کنید

$$[x(t_۱), x(t_۲)] \neq \circ \qquad t_۱ \neq t_۲$$

این نتیجه نشان می‌دهد که عملگرهایی که در یک زمان جابه‌جا می‌شوند در زمانهای مختلف الزاماً جابه‌جا نمی‌شوند.

۱۵ـ۷ با استفاده از ۷ـ۵۳، ویژه‌تابعهای مربوط به n مساوی با ۱، ۲ و ۳ را محاسبه کنید. (تذکر: ترتیب x و d/dx را در بسط دوجمله‌ای رعایت کنید.)

۱۶ـ۷ با استفاده از نتایج مسئلهٔ ۷ـ۲ نشان دهید

$$e^{\lambda A} f(A^{\dagger})u_{\circ} = f(A^{\dagger} + \lambda)u_{\circ}$$

[راهنمایی: جملهٔ نمایی را بسط دهید و از رابطه‌های

$$f(x+a) = \sum \frac{a^n}{n!} f^{(n)}(x)$$
$$f^{(n)}(x) = \frac{d^n}{dx^n} f(x)$$

در حل مسئله استفاده کنید.]

۷ـ۱۷ با استفاده از نتایج مسئلهٔ ۷ـ۱۶، رابطهٔ عملگری زیر را ثابت کنید

$$e^{\lambda A} f(A^\dagger) e^{-\lambda A} = f(A^\dagger + \lambda)$$

توجه کنید که یک رابطهٔ عملگری باید وقتی روی یک حالت اختیاری عمل می‌کند برقرار باشد. یک حالت اختیاری به‌صورت $g(A^\dagger)u_\circ$ در نظر بگیرید. بنابراین، باید نشان دهید

$$e^{\lambda A} f(A^\dagger) e^{-\lambda A} g(A^\dagger) u_\circ = f(A^\dagger + \lambda) g(A^\dagger) u_\circ$$

این رابطه را می‌توان از رابطهٔ کلی زیر نیز به‌دست آورد

$$e^{\lambda A} A^\dagger\, e^{-\lambda A} = A^\dagger + \lambda [A, A^\dagger] + \frac{\lambda^۲}{۲!}[A,[A,A^\dagger]] + \cdots$$

۷ـ۱۸ با استفاده از رابطهٔ قبل نشان دهید

$$e^{aA+bA^\dagger} = e^{aA} e^{bA^\dagger} e^{-(۱/۲)ab}$$

روش اثبات این است که ابتدا فرض می‌کنیم

$$e^{\lambda(aA+bA^\dagger)} \equiv e^{\lambda a A} F(\lambda)$$

نسبت به λ مشتق می‌گیریم:

$$(aA+bA^\dagger) e^{\lambda(aA+bA^\dagger)} = aA\, e^{\lambda a A} F(\lambda) + e^{\lambda a A} \frac{dF}{d\lambda}$$

یا

$$(aA + bA^\dagger)e^{\lambda aA}F(\lambda) = aA\, e^{\lambda aA}(F\lambda) + e^{\lambda aA}\frac{dF}{d\lambda}$$

با استفاده از مسئلهٔ ۷ـ۱۷، به‌دست می‌آوریم

$$\frac{dF}{d\lambda} = (bA^\dagger - \lambda ab)F(\lambda)$$

و در نتیجه

$$F(\lambda) = e^{\lambda bA^\dagger} e^{-(۱/۲)\lambda^۲ ab}$$

۷ـ۱۹ با استفاده از راهکار مسئلهٔ ۷ـ۱۷، نشان دهید

$$e^{\lambda A^\dagger} f(A) e^{-\lambda A^\dagger} = f(A - \lambda)$$

و از این رابطه، با استفاده از روشی که در مسئلهٔ ۷ـ۱۸ گفته شد، ثابت کنید

$$e^{aA+bA^\dagger} = e^{bA^\dagger}\ e^{aA}\ e^{(۱/۲)ab}$$

۷ـ۲۰ با استفاده از نتیجهٔ بالا نشان دهید

$$e^{ikx} = e^{ik\sqrt{\hbar/۲m\omega}\, A^\dagger} e^{ik\sqrt{\hbar/۲m\omega}\, A} e^{-(\hbar k^۲/۴m\omega)}$$

با توجه به رابطهٔ

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{۲m\omega}}(A + A^\dagger)$$

$\langle u_۰|e^{ikx}|u_۰\rangle$ را محاسبه کنید.

۷ـ۲۱ نشان دهید نتیجهٔ مسئلهٔ قبل درست همان است که از انتگرال زیر به‌دست می‌آید

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_۰^*(x) e^{ikx} u_۰(x)$$

مراجع

مطالب این فصل تقریباً در تمام کتابهایی که در پایان کتاب معرفی شده‌اند یافت می‌شوند. توصیه می‌شود به چندتایی از آنها مراجعه کنید، زیرا مطالعهٔ یک مبحث پایه از دیدگاههای مختلف همواره مفید است.

۸

دستگاههای N ذره‌ای

بحث مربوط به ذرهٔ منفرد را می‌توان به‌آسانی به دستگاههای Nذره‌ای تعمیم داد. دستگاه N ذره‌ای با یک تابع‌موج $\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ توصیف می‌شود، که به‌صورت زیر بهنجار شده است

$$\int \cdots \int dx_1 dx_2 \cdots dx_N |\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)|^2 = 1 \qquad (۸\text{ـ}۱)$$

تعبیر $|\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)|^2$ تعمیم تعبیر $|\psi(x)|^2$ است، یعنی این کمیت چگالی احتمال یافتن ذرهٔ ۱ در x_1، ذرهٔ ۲ در x_2، ...، و ذرهٔ N در x_N است. تحول زمانی این تابع‌موج از حل معادلهٔ دیفرانسیل زیر به‌دست می‌آید

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x_1, \dots, x_N; t) = H\psi(x_1, \dots, x_N; t) \qquad (۸\text{ـ}۲)$$

که در آن هامیلتونی باز هم مطابق صورت کلاسیک

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m_i} + V(x_1, x_2, \dots, x_N) \qquad (۸\text{ـ}۳)$$

به‌صورت زیر ساخته می‌شود

$$H = -\hbar^2 \left(\frac{1}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \cdots + \frac{1}{2m_N} \frac{\partial^2}{\partial x_N^2} \right) + V(x_1, \ldots, x_N) \qquad (۸\_۴)$$

تمام صورتبندی مکانیک کوانتومی که قبلاً به‌دست آوریم به‌آسانی قابل تعمیم است، به‌شرطی که عملگرهایی که مشاهده‌پذیرهای تک‌ذره‌ای را توصیف می‌کنند وقتی به ذره‌های مختلف مربوط می‌شوند با هم جابه‌جا شوند؛ برای مثال

$$[p_i, x_j] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij} \qquad (۸\_۵)$$

اگر میدانهای خارجی، مانند میدان گرانش زمین یا میدانهای الکتریکی و مغناطیسی که از خارج اعمال می‌شوند، وجود نداشته باشند انرژی پتانسیل تنها به‌فاصلهٔ نسبی ذرات بستگی دارد:

$$V = V(x_1 - x_2, x_1 - x_3, \ldots, x_{N-1} - x_N), \qquad (۸\_۶)$$

همین‌طور هم باید باشد، زیرا در غیاب عامل خارجی که به‌نحوی یک "مبدأ" تعیین می‌کند، جابه‌جایی کل دستگاه نباید هیچ یک از خواص فیزیکی آن‌را تغییر دهد. به‌عبارت دیگر، شکل پتانسیل ۸_۶ پیامد ناوردایی تمام کمیتهای مهم فیزیکی تحت تبدیل زیر است

$$x_i \to x_i + a \qquad (۸\_۷)$$

یک مورد خاص بسیار مهم از ۸_۶، مورد نیروهای دوجسمی است که برای آن

$$V = \sum_{i>j} V(x_i - x_j) \qquad (۸\_۸)$$

جمع روی تمام شاخصهای i و j، با قید $i > j$ برای اجتناب از دوباره‌شماری و شمارش $i = j$، انجام می‌شود. در واقع در توصیف الکترونها در یک اتم، با پتانسیل کولنی مشترک و همچنین دافعهٔ الکترون_الکترون سروکار خواهیم داشت، و در اینجا هسته یک مبدأ به‌وجود می‌آورد. پتانسیل در این مورد تعمیم سه‌بعدی کمیت زیر است

$$\sum_{i=1}^{N} W(x_i) + \sum_{i>j} V(x_i - x_j) \qquad (۸\_۹)$$

پایستگی تکانهٔ کل

در مکانیک کلاسیک، وقتی نیروهای خارجی وجود ندارند تکانهٔ کل پایسته است. این پایستگی از معادله‌های حرکت زیر به‌دست می‌آید

$$m_i \frac{d^2 x_i}{dt^2} = -\frac{\partial}{\partial x_i} V(x_1 - x_2, x_1 - x_3, \ldots, x_{N-1} - x_N) \qquad (۱۰\text{ـ}۸)$$

که یک پیامد آن عبارت است از

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sum_i m_i \frac{dx_i}{dt} &= -\sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} V(x_1 - x_2, \ldots, x_{N-1} - x_N) \\ &= 0 \end{aligned} \qquad (۱۱\text{ـ}۸)$$

دلیل صفر شدن طرف راست معادلهٔ بالا این است که به‌ازای هر شناسه در V از اعمال $\sum_i \partial/\partial x_i$ بر V جمله‌های مساوی و مخالف به‌دست می‌آیند. برای مثال، با $u = x_1 - x_2$، $v = x_1 - x_3$، و $w = x_2 - x_3$، داریم

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x_2} + \frac{\partial}{\partial x_3}\right) V(u, v, w) &= \frac{\partial V}{\partial u} + \frac{\partial V}{\partial v} - \frac{\partial V}{\partial u} + \frac{\partial V}{\partial w} - \frac{\partial V}{\partial v} - \frac{\partial V}{\partial w} \\ &= 0 \end{aligned}$$

بنابراین، کمیت

$$P = \sum_i m_i \frac{dx_i}{dt} \qquad (۱۲\text{ـ}۸)$$

یک ثابت حرکت است.

در مکانیک کوانتومی نیز همین نتیجه‌گیری صادق است. این مطلب را با استفاده از ناوردایی هامیلتونی تحت تبدیل ۸ـ۷ نشان می‌دهیم. این ناوردایی ایجاب می‌کند که هر دو معادلهٔ

$$H u_E(x_1, x_2, \ldots, x_N) = E u_E(x_1, x_2, \ldots, x_N) \qquad (۱۳\text{ـ}۸)$$

و

$$H u_E(x_1 + a, x_2 + a, \ldots, x_N + a) = E u_E(x_1 + a, x_2 + a, \ldots, x_N + a) \qquad (۱۴\text{ـ}۸)$$

برقرار باشند، a را بینهایت کوچک می‌گیریم، به‌طوری که بتوان از جمله‌های $O(a^{2})$ را صرفنظر کرد. بنابراین،

$$\begin{aligned} u(x_1+a,\dots,x_N+a) &\simeq u(x_1,\dots,x_N)+a\frac{\partial}{\partial x_1}u(x_1,\dots,x_N) \\ &\quad + a\frac{\partial}{\partial x_2}\,u(x_1,\dots,x_N)+\cdots \\ &\simeq u(x_1,\dots,x_N)+a\sum_i\frac{\partial}{\partial x_i}u(x_1,\dots,x_N) \end{aligned}$$

با کم کردن ۸ـ۱۳ از ۸ـ۱۴ به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} aH\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial x_i}\right)u_E(x_1,\dots,x_N) &= aE\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial x_i}\right)u_E(x_1,\dots,x_N) \\ &= a\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial x_i}\right)Eu_E(x_1,\dots,x_N) \qquad (۸\text{ـ}۱۵) \\ &= a\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial x_i}\right)Hu_E(x_1,\dots,x_N) \end{aligned}$$

اکنون اگر تعریف کنیم

$$P=\frac{\hbar}{i}\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial x_i}\equiv\sum_{i=1}^{N}p_i \qquad (۸\text{ـ}۱۶)$$

به‌طوری که P عملگر تکانهٔ کل است، می‌بینیم که نشان داده‌ایم

$$(HP-PH)u_E(x_1,\dots,x_N)=0 \qquad (۸\text{ـ}۱۷)$$

چون ویژه‌حالتهای انرژی برای دستگاه N ذره‌ای یک مجموعهٔ کامل تشکیل می‌دهند، به این معنی که هر تابعی از x_1، x_2، ...، x_N را می‌توان برحسب تمام $u_E(x_1,\dots,x_N)$ها بسط داد، معادلهٔ بالا نشان می‌دهد که به‌ازای هر تابع اختیاری $\psi(x_1,\dots,x_N)$ می‌توان نوشت

$$[H,P]\psi(x_1,\dots,x_N)=0 \qquad (۸\text{ـ}۱۸)$$

بنابراین،

$$[H, P] = 0 \qquad (۸\_۱۹)$$

اما این رابطهٔ عملگری نشان می‌دهد که تکانهٔ کل P مربوط به دستگاه N ذره‌ای یک ثابت حرکت است. این یک پیامد بسیار مهم حکمی دربارهٔ ماهیت فضا است. این حکم که مبدایی وجود ندارد، یعنی قوانین فیزیک تحت یک جابه‌جایی ثابت ناوردا هستند، به یک قانون پایستگی منجر می‌شود. در مکانیک کوانتومی نسبیتی هیچ پتانسیلی به‌صورتی که در اینجا در نظر می‌گیریم وجود ندارد؛ با این همه، این اصل ناوردایی باز هم به پایستگی تکانهٔ کل منجر می‌شود.

دستگاه دو ذره‌ای

ما بیشتر با دستگاه دوذره‌ای سروکار داریم که اکنون به بررسی آن می‌پردازیم. برای دو ذرهٔ بدون برهم کنش، هامیلتونی به‌صورت سادهٔ زیر است

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} \qquad (۸\_۲۰)$$

چون این دو ذره کاملاً ناهمبسته‌اند، می‌توان احتمال یافتن یک ذره در x_1 و دیگری در x_2 را به‌صورت حاصلضرب دو احتمال مستقل نوشت:

$$P(x_1, x_2) = P(x_1)P(x_2) \qquad (۸\_۲۱)$$

بنابراین، جواب معادلهٔ

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right)u(x_1, x_2) = Eu(x_1, x_2) \qquad (۸\_۲۲)$$

باید به‌صورت زیر قابل جداسازی باشد

$$u(x_1, x_2) = \phi_1(x_1)\phi_2(x_2) \qquad (۸\_۲۳)$$

با جاگذاری این جواب در ۸ـ۲۲ و تقسیم بر $u(x_1, x_2)$، به‌دست می‌آوریم

$$\frac{-(\hbar^2/2m_1)(d^2\phi_1(x_1)/dx_1^2)}{\phi_1(x_1)} + \frac{-(\hbar^2/2m_2)(d^2\phi_2(x_2)/dx_2^2)}{\phi_2(x_2)} = E \qquad (۸\_۲۴)$$

دو جملهٔ این معادله به متغیرهای مختلفی بستگی دارند، و به این دلیل آنها را به‌ترتیب مساوی با ثابتهای E_1 و E_2 قرار می‌دهیم:

$$E = E_1 + E_2$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{d^2\phi_1(x_1)}{dx_1^2} = E_1\phi_1(x_1) \qquad (۸\_۲۵)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{d^2\phi_2(x_2)}{dx_2^2} = E_2\phi_2(x_2)$$

این دو معادله به‌سادگی حل می‌شوند، و در نتیجه به‌دست می‌آوریم

$$u(x_1, x_2) = C\, e^{ik_1x_1 + ik_2x_2} \qquad (۸\_۲۶)$$

که در آن

$$k_1^2 = \frac{2m_1E_1}{\hbar^2} \qquad k_2^2 = \frac{2m_2E_2}{\hbar^2} \qquad (۸\_۲۷)$$

اکنون می‌خواهیم این جواب را برحسب مختصات زیر بیان کنیم

$$x = x_1 - x_2$$
$$X = \frac{m_1x_1 + m_2x_2}{m_1 + m_2} \qquad (۸\_۲۸)$$

که به‌ترتیب عبارت‌اند از فاصلهٔ میان دو ذره و مختصهٔ مرکز جرم. می‌نویسیم

$$k_1x_1 + k_2x_2 = \alpha(x_1 - x_2) + \beta\frac{m_1x_1 + m_2x_2}{m_1 + m_2}$$

و از آن، با توجه به مستقل بودن x_1 و x_2، به‌دست می‌آوریم

$$\beta = k_1 + k_2 \equiv K$$

$$\alpha = \frac{m_2k_1 - m_1k_2}{m_1 + m_2} \equiv k$$

بنابراین، جواب ۸ـ۲۶ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$u(x_1, x_2) = C\, e^{iKX}\, e^{ikx} \qquad (۸\_۲۹)$$

که در آن $K = k_1 + k_2$ عدد موج مربوط به تکانهٔ کل و k عدد موج مربوط به تکانهٔ نسبی است. در ۸ـ۲۹، عامل اول حرکت مرکز جرم را نشان می‌دهد و عامل دوم تابع موج "داخلی" است. انرژی را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2(m_1 + m_2)} + \frac{\hbar^2 k^2}{2}\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right) \qquad (۸\text{ـ}۳۰)$$

که در آن جملهٔ اول انرژی یک دستگاه دوذره‌ای به جرم $m_1 + m_2$ است که آزادانه با تکانهٔ کل حرکت می‌کند؛ جملهٔ دوم انرژی داخلی است. اگر جرم کاهیدهٔ μ را با رابطهٔ زیر تعریف کنیم

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \qquad (۸\text{ـ}۳۱)$$

آنگاه انرژی داخلی به‌صورت $\hbar^2 k^2/2\pi$ درمی‌آید که عملاً یک انرژی تک‌ذره‌ای است، یعنی انرژی یک ذرهٔ آزاد به جرم μ و تکانهٔ $\hbar k$ است.

اگر به هامیلتونی ۸ـ۲۰ پتانسیلی که تنها به $x_1 - x_2$ بستگی دارد افزوده شود، خواهیم داشت

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{\partial^2}{\partial xc_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right)u(x_1, x_2) + V(x_1 - x_2)u(x_1, x_2) = Eu(x_1, x_2) \qquad (۸\text{ـ}۳۲)$$

از روابط ۸ـ۲۸ داریم

$$x_1 = X + \frac{\mu}{m_1}x$$
$$x_2 = X - \frac{\mu}{m_2}x \qquad (۸\text{ـ}۳۳)$$

با استفاده از این مختصات و با اندکی محاسبه، معادلهٔ ۸ـ۳۲ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)}\frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)u(x, X) = Eu(x, X) \qquad (۸\text{ـ}۳۴)$$

اگر بنویسیم

$$u(x, X) = e^{iKX}\phi(x) \qquad (۸\text{ـ}۳۵)$$

نتیجه می‌گیریم که معادلهٔ مربوط به $\phi(x)$ به‌صورت زیر است

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\,\frac{d^2\phi(x)}{dx^2}+V(x)\,\phi(x)=\epsilon\phi(x) \tag{۳۶ـ۸}$$

که یک معادلهٔ شرودینگر تک‌ذره‌ای با جرم کاهیده است، و در آن انرژی ϵ عبارت است از

$$\epsilon=E-\frac{\hbar^2K^2}{2(m_1+m_2)} \tag{۳۷ـ۸}$$

در فصل ۹ این جداسازی را از راه نسبتاً پیچیده‌تری به‌دست خواهیم آورد.

ذرات یکسان

شواهد قانع‌کننده‌ای وجود دارند که نشان می‌دهند الکترونها تمایزناپذیرند. اگر الکترونها تمایزپذیر بودند طیف یک اتم، مثلاً هلیم، می‌بایست از یک آزمایش به آزمایش دیگر، بسته به اینکه "چه نوع" الکترونهایی در اتم وجود می‌داشتند، تغییر می‌کرد. چنین تغییری هرگز مشاهده نشده است. به‌همین‌ترتیب، طیفهای هسته‌ای نیز همیشه یکسان هستند، که نشان می‌دهد پروتونها و همچنین نوترونها تمایزناپذیرند. شواهد مشابهی از آزمایشهای فیزیک انرژی زیاد قاطعانه نشان می‌دهند که سایر ذره‌ها، مثلاً مزونهای پی، نیز تمایزناپذیر هستند. این یک ویژگی صرفاً کوانتوم‌ـمکانیکی است: در مکانیک کلاسیک می‌توان (اصولاً) مسیر همهٔ ذرات را دنبال کرد، و در نتیجه آنها واقعاً تمایزپذیر هستند.

بعداً خواهیم دید که الکترونها با یک عدد کوانتومی درونی که اسپین نامیده می‌شود مشخص می‌شوند. بنابراین، مجموعهٔ کامل اعداد کوانتومی برای توصیف الکترون باید شامل نشان اسپینی هم باشد، که آن‌را با σ مشخص می‌کنیم. در آینده (از فصل ۱۴ به‌بعد) خواهیم دید که این نشان اسپینی σ دومقداری است، یعنی دو الکترون را که از هر لحاظ (غیر از اسپین) یکسان هستند می‌توان از روی مقدار σی آنها از هم تمیز داد. یک الکترون سوم، با همان اعداد کوانتومی دو الکترون دیگر، باید یک نشان اسپینی داشته باشد که مقدار آن با مقدار نشان اسپینی یکی از دو الکترون اول مساوی است، زیرا σ تنها می‌تواند دو مقدار داشته باشد که آنها را معمولاً با $(\pm)$ نشان خواهیم داد. وجود نشان اسپینی تأثیر دیگری بر پیامدهای تمایزناپذیری دارد که اکنون دربارهٔ آن بحث می‌کنیم.

هامیلتونی ذرات تمایزناپذیر باید نسبت به مختصات ذرات کاملاً متقارن باشد. برای دستگاه دوذره‌ای، اگر پتانسیل به نشان اسپینی ذرات بستگی نداشته باشد، هامیلتونی به‌صورت زیر است

$$H=\frac{p_1^2}{2m}+\frac{p_2^2}{2m}+V(x_1,x_2) \tag{۳۸ـ۸}$$

که در آن

$$V(x_۱, x_۲) = V(x_۲, x_۱) \tag{۸_۳۹}$$

این تقارن را به‌صورت نمادین زیر می‌نویسیم

$$H(۱, ۲) = H(۲, ۱) \tag{۸_۴۰}$$

و اگر هامیلتونی شامل عملگرهایی مربوط به اسپینهای دوذره باشد، باید آن‌را نیز در نشانگذاری "۱" و "۲" وارد کرد.

تابع‌موج دستگاه Nذره‌ای که، به‌عنوان مثال، با انرژی کل نشاندار شده است اکنون باید با نشانهای اسپینی $\sigma_۱$، $\sigma_۲$، ...، σ_N نیز نشاندار شود. بنابراین، برای یک دستگاه دوذره‌ای، معادلهٔ ویژه‌مقداری عبارت است از

$$H(۱, ۲)u_{E\sigma_۱\sigma_۲}(۱, ۲) = Eu_{E\sigma_۱\sigma_۲}(۱, ۲) \tag{۸_۴۱}$$

چون جای نشانها اهمیتی ندارد، می‌توان با تعویض نشانهای "۱" و "۲" معادلهٔ ۸_۴۱ را به‌صورت زیر نوشت

$$H(۲, ۱)u_{E\sigma_۲\sigma_۱}(۲, ۱) = Eu_{E\sigma_۲\sigma_۱}(۲, ۱) \tag{۸_۴۲}$$

از طرف دیگر، با توجه به ۸_۴۰ داریم

$$H(۱, ۲)u_{E\sigma_۲\sigma_۱}(۲, ۱) = Eu_{E\sigma_۲\sigma_۱}(۲, ۱) \tag{۸_۴۳}$$

اکنون از رهیافت صوری بحث پاریته استفاده می‌کنیم. با معرفی عملگر تبادل $P_{۱۲}$ که وقتی روی یک حالت عمل کند دو ذرهٔ یکسان را که با ۱ و ۲ نشاندار شده‌اند تعویض می‌کند:

$$P_{۱۲}u_{E\sigma_۱\sigma_۲}(۱, ۲) = u_{E\sigma_۲\sigma_۱}(۲, ۱) \tag{۸_۴۴}$$

معادلهٔ ۸ـ۴۳ را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} H(1,2)P_{12}u_{E\sigma_1\sigma_2}(1,2) &= Eu_{E\sigma_2\sigma_1}(2,1) \\ &= EP_{12}u_{E\sigma_1\sigma_2}(1,2) \\ &= P_{12}Eu_{E\sigma_1\sigma_2}(1,2) \\ &= P_{12}H(1,2)u_{E\sigma_1\sigma_2}(1,2) \end{aligned} \quad (۴۵\text{ـ}۸)$$

چون این نتیجه برای مجموعهٔ کامل ویژه‌تابعهای همزمان H و عملگرهای اسپین $u_{E\sigma_1\sigma_2}(1,2)$ برقرار است، رابطهٔ عملگری زیر را به‌دست می‌آوریم

$$[H, P_{12}] = 0 \quad (۴۶\text{ـ}۸)$$

بنابراین، P_{12} نیز مانند پاریته یک ثابت حرکت است. علاوه بر این، چون با دو تبادل متوالی $2 \to 1$ و $1 \to 2$ به‌حالت اول برمی‌گردیم، داریم

$$(P_{12})^2 = 1 \quad (۴۷\text{ـ}۸)$$

که نشان می‌دهد ویژه‌مقدارهای P_{12} عبارت‌اند از ± 1. درست همان‌طور که توابع زوج و فرد ویژه‌تابعهای عملگر پاریته هستند، ویژه‌تابعهای عملگر تبادل حالتهای متقارن و پادمتقارن زیر هستند

$$\begin{aligned} \psi^{(S)}(1,2) &= \frac{1}{N_{2S}}[\psi(1,2) + \psi(2,1)] \\ \psi^{(A)}(1,2) &= \frac{1}{N_{2a}}[\psi(1,2) - \psi(2,1)] \end{aligned} \quad (۴۸\text{ـ}۸)$$

که در آنها N_2ها ثابتهای بهنجارش‌اند. این واقعیت که P_{12} یک ثابت حرکت است ایجاب می‌کند که حالتی که در یک زمان اولیه متقارن است همواره متقارن بماند و یک حالت پادمتقارن همیشه پادمتقارن باشد.

اصل پاؤلی

تقارن یا پادتقارن تحت تعویض دو ذره یک مشخصهٔ ذرات است و چیزی نیست که بتوان آن‌را در آماده‌سازی حالت اولیه تدارک دید. بنابه این قانون مهم طبیعت، که پاؤلی آن‌را کشف کرد،