بسم الله الرحمن الرحیم

5.3: The Schrödinger Equation

Erwin Schrödinger (1887–1961, Austria). Although he disagreed with the probabilistic interpretation that was later given to his work, he developed the mathematical theory of wave mechanics that for the first time permitted the wave behavior of physical systems to be calculated.

(۱) یک بسته موج به شکل خاص را ساخته شد به ذره نسبت دادیم

$$y(x) \longrightarrow y(x,t) \longrightarrow \underbrace{\psi(x,t)}$$

Wave function   تابع موج

معادله‌ای که تحول تابع موج (بسته موج) را بررسی می‌کند (تعیین می‌کند)

مکانیک موجی است که توسط معادله شرودینگر داده می‌شود.

Ref: Relativistic Quantum Mechanics   (۲)

W. Greiner

Non-Relativistic Quantum Wave Equation

$$E\psi = \underbrace{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}}_{\hat{E}} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + \underbrace{V(\bar{r})} \right] \underbrace{\psi(\bar{r},t)}$$

دینامیک زمانی مشخص می‌کند   انرژی جنبشی   انرژی پتانسیل   تابع موج منتسب به ذره

عملگر   جرم در حال سکون ذره

$$\langle \hat{H} \rangle = E = \left[\frac{\langle \hat{p}^2 \rangle}{2m_0} + \langle V(\bar{r}) \rangle \right] , \quad \hat{p} \equiv$$ عملگر مربوط به اندازه حرکت

Operator

$$\boxed{\hat{H} \equiv i\hbar \frac{\partial}{\partial t}}$$

$$\boxed{\hat{p} \equiv -i\hbar \nabla}$$

★ عملگرهای جبری

Algebric Operators

هر کمیت مشاهده پذیر دارای یک توصیف مناسب عملگری است

مقدار مشاهده شده $\underbrace{\langle \hat{O} \rangle}_{\text{Expectation Value}} = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \underbrace{\int d^3\cancel{x}\, \psi^* \hat{O} \psi}$

مقدار چشم داشتی

مشابه یادآوری

$\langle f(x) \rangle = \int dx\, f(x) \underbrace{P(x)}_{\text{احتمال}}$

$1 = \int d^3x \langle \psi | \psi \rangle = \int d^3 \underbrace{r}\, |\psi|^2 =$ احتمال کل

$d\vec{r},\ d^3x,\ dx\,dy\,dz,\ dx_1 dx_2 dx_3$

شرط بهنجارش (Normalization Condition)

$$\boxed{|\psi(x,t)|^2 d^3\cancel{x} \equiv \text{احتمال پیدا شدن ذره در } x \text{ و } x+dx}$$

$|\psi\rangle \equiv |M, p, J, \lambda, B, Q, L, N_\mu\rangle$

جرم ذره

اندازه تکانه

اندازه تکانه زاویه‌ای

Helicity

Baryonic No.

Charge

Lepton No

Muon No

Relativistic Quantum Wave Equation (۳)

$$p^\mu p_\mu = \frac{E^2}{c^2} - \vec{p}\cdot\vec{p} = m_0^2 c^2$$

$$\hat{p}^\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu} = i\hbar \left\{ \frac{\partial}{\partial (ct)}, -\frac{\partial}{\partial x}, -\frac{\partial}{\partial y}, -\frac{\partial}{\partial z} \right\}$$

$$= i\hbar \left\{ \frac{\partial}{\partial (ct)}, -\vec{\nabla} \right\} = \{ \hat{p}_0, \hat{\vec{p}} \} \rightarrow \text{چاربردار}$$

Covariant form

$$\hat{p}^{\mu}\hat{p}_{\mu}\,\psi = m_0^2 c^2 \psi \quad : \text{Klein – Gordon Equa}$$

$$\left(\Box + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2}\right)\psi = \left(\frac{\partial^2}{c^2\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2}\right)\psi$$

$$\Box \equiv \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \equiv \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta$$

Dirac Equation ۴

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[\frac{\hbar c}{i}\left(\hat{\alpha}_1\frac{\partial}{\partial x^1} + \hat{\alpha}_2\frac{\partial}{\partial x^2} + \hat{\alpha}_3\frac{\partial}{\partial x^3}\right) + \hat{\beta} m_0 c^2\right]$$

$$\psi = \hat{H}\psi$$

$\alpha \equiv$ Pauli's matrix (اسپینی)

$$\psi = \begin{pmatrix}\phi \\ \chi\end{pmatrix}$$

۵

$\lambda_D = \dfrac{h}{p}$ طول موج دوبروی ← پراش الکترون‌ها را توضیح دهیم.

بسته موج که تنهایی توسط λ_D داده می‌شود.

$$\Delta p = \frac{h}{\lambda_D^2}\,\Delta\lambda$$

موج اینجا در خصوص تابع موج مربوط به ذره محبوس در جعبه ← گسستگی در طیف انرژی

همانطور که در نظریه موجی نور، اپتیک هندسی حد طول موج کوتاه اپتیک موجی است

پس انتظار داریم مکانیک کلاسیک هم حد طول موج کوتاه دوبروی در مکانیک کوانتومی باشد

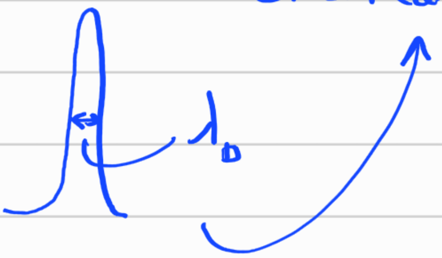
سایه، نیم سایه، شکست — تداخل، پراش

$$\text{Geometric optics} \equiv \lim_{\lambda \to 0} \text{Wave optics}$$

λ / a

$$\text{Classical Mechanics} \equiv \lim_{\lambda_D \to 0} \text{Quantum Mechanics}$$

جایگزیدگی — گستردگی



۴) شرودینگر در سال ۱۹۲۶ معادله تحول موج را مشتق کرد

شروع کنیم مشتق را

فرض یک تابع موج

بسته موج

$$\psi(x) = A \sin Kx \qquad \boxed{K = \frac{2\pi}{\lambda}} \quad \text{عدد موج}$$

$$\frac{d\psi}{dx} = KA \cos Kx$$

$$\frac{d}{dx}\frac{d\psi}{dx} = \frac{d^2\psi}{dx^2} = -K^2 A \sin Kx = -\underbrace{K^2 \frac{\hbar^2}{2m}}_{E} \frac{2m}{\hbar^2} \underbrace{A \sin Kx}_{\psi(x)}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$$

$$\boxed{\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E_K \psi(x)}$$

فقط انرژی جنبشی

$$\lambda_D = \frac{h}{p} = \frac{\hbar 2\pi}{p} \rightarrow \frac{\lambda_D}{2\pi} = \frac{\hbar}{p} = K^{-1}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E_K\psi$$

if $E = \frac{p^2}{2m} + V$

$E = E_k + V$

$E_k = E - V$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = (E - V)\psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi + V\psi = E\psi$$

1D: Time Independent Schrödinger Equ

$$\boxed{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V\right)\psi = E\psi}$$

یک معادله دیفرانسیل مرتبه دو

Energy operator $\rightarrow$ $\hat{H}\psi = E\psi$ $\leftarrow$ eigen value

eigen vector

۲ شرط مرزی یا ۲ شرط اولیه

$$\boxed{\text{تعداد ذرات} \quad \hat{N}\psi = N\psi}$$

$$\left.\begin{aligned} &\psi(x_i) = \checkmark \\ &\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x = x_i} = \checkmark \end{aligned}\right\}$$ Initial Values (Initial conditions)

۷ برای اضافه کردن زمان

$$\psi(x) \longrightarrow \underline{\psi(x,t) = \psi(x)e^{-i\omega t}}$$

$$\omega = \frac{E}{\hbar}$$

$$\underline{\hbar\omega = E = E_K + V}$$

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

$$= E\,\psi(x)\,e^{-i\omega t}$$

$$= \hbar\omega\,\psi(x)\,e^{-i\omega t}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t)\right]\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\underbrace{e^{-i\omega t}\,\psi(x)}_{\psi(x,t)}$$

3D

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right]\psi(r,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(r,t)}$$

$V=0$

$$\frac{\hat{p}^2}{2m}\psi = E\,\psi$$

عملگر

مقدار

$$\hat{p} = +i\hbar\nabla$$

$$\hat{p}^2 = -\hbar^2\nabla^2 \quad \Rightarrow \quad \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

$$\psi(x,t) = A\,e^{i(kx-\omega t)}$$

$$= A\left[\cos(kx-\omega t) + i\,\sin(kx-\omega t)\right]$$

$$\psi^{phy} = Re(\psi)$$

or

$$= Im(\psi)$$

Eigen-Value Problem

$$\hat{H}\psi = \hat{E}\psi \longrightarrow \boxed{(\hat{H}-\hat{E})\psi = 0}$$

$$\hat{H} \to -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V \qquad \hat{E} \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

$$\det|\hat{H} - E\hat{I}| = 0$$

حل این موجود ← ویژه تابع ویژه مقادیر می دهد.

$$\langle \hat{p}_x \rangle = \left\langle -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \right\rangle$$

$$\langle \hat{E} \rangle = \left\langle i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \right\rangle$$

$$\langle \hat{H} \rangle = \left\langle -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V \right\rangle$$

$\vdots$

Probability and Normalization 4

هدف اصلی معادله شرودینگر رسیدن به خواص ذره که توسط $\psi(x,t)$ داده می شود

$$p(x,t)\,dx = \psi^*(x,t)\,\psi(x,t)\,dx$$

$$= |\psi(x,t)|^2\,dx$$

احتمال پیدا شدن ذره در مکان x, $x+dx$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,|\psi(x,t)|^2 = 1 \leftarrow \text{شرط بهنجارش}$$

فرض کنید ψ بهنجار نشد

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, |\psi(x,t)|^2 = B$$

$$\boxed{\psi^{\text{Normalized}} = \frac{\psi}{\sqrt{B}}}$$

جلسه ۱۵

$\underbrace{|\psi|^2}$ تعبیر احتمال پیدا کرد

$\boxed{\text{Recall that} \quad \langle x \rangle = \int dx\; x\; \underline{P(x)}}$

$$\langle x \rangle = \int d^3r\; x\, |\psi|^2$$

متوسط مکان ذره در محور x ؟

$$\langle \hat{f} \rangle = \int d^3r\; \psi^* \hat{f}\, \psi$$

1D

$$\langle \hat{p}_x \rangle = \int dx\; \psi^*\, \underset{\uparrow \atop -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}}{\hat{p}_x}\, \psi$$

این رویکرد به ازای هر کمیت یک معادل تحلیلی پیدا شود و بین ψ^* و ψ ساندویچ شود

$$= \underbrace{\langle \psi | \hat{p}_x | \psi \rangle} = \int dx\; \psi^* \hat{p}_x\, \psi$$

5.4: Application of the Schrödinger Equation

Separation of Variables ①

جداسازی متغیرها:

$\psi(x,t) = \psi(x)\,\phi(t)$ اگر H مستقل از زمان باشد می‌توان نوشت

پس

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

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

بر $\underbrace{\psi(x)\phi(t)}$ تقسیم کنیم

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + V(x)}_{x} = \underbrace{i\hbar\frac{1}{\phi(t)}\frac{\partial}{\partial t}\phi}_{t} = cts$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x) = \underbrace{cts}_{D}$$

$$i\hbar\frac{1}{\phi(t)}\frac{d}{dt}\phi(t) = \underbrace{cts}_{D} \longrightarrow \phi(t) = e^{-i\frac{Dt}{\hbar}}$$

$$\omega \equiv \frac{D}{\hbar}$$

$$\boxed{D = \hbar\omega = E}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2}{dx^2}\psi + V = E$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi + V\psi = E\psi}$$

معادله شرودینگر مستقل از زمان.

$$\boxed{\Psi(x,t) = \psi(x)\,\phi(t) = \psi(x)\,e^{-iEt/\hbar}}$$

شرایط فیزیکی وجود موج ψ

(۱) $\Psi(x,t)$ باید در معادله شرودینگر صدق کنند

(۲) $\Psi(x,t)$ و $\frac{d}{dx}\Psi(x,t)$ پیوسته باشند

(۳) $\Psi(x,t)$ و $\frac{d}{dx}\Psi(x,t)$ متناهی باشند

(۴) $\Psi(x,t)$ و $\frac{d}{dx}\Psi(x,t)$ تکتا باشند

(۵) $\lim_{x\to\infty}\psi \to 0$ ← انتگرال بهنجارش متناهی باشد

---

(۲) ویژگی‌های خطی معادله شرودینگر

خطی

ندارد

$\frac{d}{dx}\frac{d}{dy}$, $\frac{d}{dx}\frac{d}{dt}$

خطی بودن معادله تضمین می‌کند که اگر ψ_1 و ψ_2

در معادله صدق کنند در آن صورت

$$\psi_3 = C_1\psi_1 + C_2\psi_2$$

ψ_3 نیز در معادله صدق می‌کند.

اصل برهم‌نهی صادق است

۳) از جمله اولین کاربردهای معادله شرودینگر

Hydrogen Atom

Planck Spectrum

۴) مثال ①:

Solution for Constant Potential Energy.

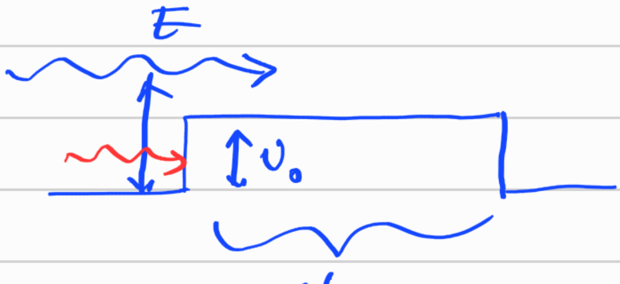
1-Dimension one-Particle

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi$$

$$\begin{cases} E = E_k + V \\ V = U_0 \\ E > U_0 \end{cases}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -K^2\psi$$

$$K \equiv \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-U_0)}$$



$\psi = ?$

عدد موج

$\frac{2\pi}{\lambda}$

$$\boxed{\psi(x) = A\sin Kx + B\cos Kx}$$

$A = ?$

$B = ?$

شرایط مرزی

اگر $U_0 > E$ باشد:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = K'^2\psi$$

$$K' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)}$$

$$\psi(x) = Ae^{k'x} + Be^{-k'x}$$

با عنایت به شرایط مرزی و اینکه $\boxed{x>0}$ داریم

پس الزاماً باید $A=0$ چون واگرایی داریم.

$$\psi(x) = Be^{-k'x} \quad x>0$$

که نفوذ کاهشی در سد را شاهد هستیم