1 تحول ِ مکان و تکانه

ذره ای را در نظر بگیرید که حالت َ ش با جا یِ آن تُصیف میشود. فضا-یِ-هیلبِرت ِ متناظر با چنین-سیستم ی با حالتها یِ با مکان ِ مشخص ساخته مشود. یعنی حالت ِ سیستم را میشود بر حسب ِ ویژه-بردارها یِ مکان بسط داد. اگر فضا یک-بُعدی باشد،

$$|\psi\rangle = \int \mathrm{d}\, x\, \psi(x)\, |x\rangle, \tag{1}$$

و اگر فضا n بُعدی باشد،

$$|\psi\rangle = \int \mathrm{d}^n\, r\, \psi(\boldsymbol{r})\, |\boldsymbol{r}\rangle. \tag{2}$$

بد نیست توجه شود که فضا یِ مکان با فضا-یِ-هیلبِرت ِ متناظر فرق دارد. فضا یِ مکان مجموعه یِ بردارها یِ $\boldsymbol{r}$ است، در حال ی که فضا یِ هیلبِرت مجموعه یِ ترکیبها یِ خطی از $|\boldsymbol{r}\rangle$ ها ست. بین ِ $\boldsymbol{r}$ ها و $|\boldsymbol{r}\rangle$ ها یک تناظر ِ یک-به-یک هست، اما بین ِ ترکیب-ِ-خطیها یِ $|\boldsymbol{r}\rangle$ ها و خُد ِ $|\boldsymbol{r}\rangle$ ها، یا $\boldsymbol{r}$ ها، چنین-تناظر ی نیست. به یک معنی یِ نَ-چندان-دقیق، بُعد ِ فضا-یِ-هیلبِرت تعداد ِ اعضا یِ فضا یِ مکان است، که بینهایت است. در حال ی که بُعد ِ فضا یِ مکان محدود است.

اثر ِ عملگرها یِ مکان، $\boldsymbol{R}$، و تکانه، $\boldsymbol{P}$، بر بردار ِ حالت را میشود بر حسب ِ تابع-ِ-مُج نوشت:

$$\langle \boldsymbol{r}|\boldsymbol{R}|\psi\rangle = \boldsymbol{r}\, \psi(\boldsymbol{r}), \tag{3}$$

$$\langle \boldsymbol{r}|\boldsymbol{P}|\psi\rangle = -\mathrm{i}\, \hbar\, (\boldsymbol{\nabla}\, \psi)(\boldsymbol{r}), \tag{4}$$

$\boldsymbol{R}$ و $\boldsymbol{P}$ بردارها یی یَند که مئلفِها یِ شان عملگر است. اگر فضا یِ مکان سه-بُعدی باشد،

$$\boldsymbol{R} = \hat{\boldsymbol{x}}\, X + \hat{\boldsymbol{y}}\, Y + \hat{\boldsymbol{z}}\, Z, \tag{5}$$

$$\boldsymbol{P} = \hat{\boldsymbol{x}}\, P_x + \hat{\boldsymbol{y}}\, P_y + \hat{\boldsymbol{z}}\, P_z, \tag{6}$$

و به طُر ِ کلی (وقت ی فضا یِ مکان n بُعدی ست)،

$$\boldsymbol{R} = \sum_{j=1}^{n} \hat{\boldsymbol{e}}_j\, R_j. \tag{7}$$

$$\boldsymbol{P} = \sum_{j=1}^{n} \hat{\boldsymbol{e}}_j\, P_j. \tag{8}$$

R_j خا عملگر َند و با هم جا-به-جا میشوند. P_j ها هم عملگر َند و با هم جا-به-جا میشوند. جا-به-جاگرها یِ مئلفِها یِ مکان و تکانه هم چنین است.

$$[R_j, P_k] = \mathrm{i}\,\hbar\,\delta_{j\,k}. \tag{9}$$

شکل ِ مئلفِئی یِ (3) و (4) هم میشود

$$\langle \boldsymbol{r}|R_j|\psi\rangle = r_j\,\psi(\boldsymbol{r}), \tag{10}$$

$$\langle \boldsymbol{r}|P_j|\psi\rangle = -\mathrm{i}\,\hbar\,(\partial_j\,\psi)(\boldsymbol{r}), \tag{11}$$

که ∂_j مشتقگیری نسبت به r_j است. چگالی یِ احتمال برا یِ یافتن ِ ذره در نقطه یِ $\boldsymbol{r}$ برابر با $|\psi(\boldsymbol{r})|^2$ است، و چگالی یِ احتمال برا یِ این که تکانه یِ ذره $\boldsymbol{p}$ باشد $|\langle \boldsymbol{P}=\boldsymbol{p}|\psi\rangle|^2$ است، که

$$\langle \boldsymbol{P}=\boldsymbol{p}|\boldsymbol{r}\rangle = h^{-n/2}\,\exp\left(\frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}{\mathrm{i}\,\hbar}\right). \tag{12}$$

پس،

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{P}=\boldsymbol{p}|\psi\rangle &= \int \mathrm{d}^n\,r\,\langle \boldsymbol{P}=\boldsymbol{p}|\boldsymbol{r}\rangle\,\langle \boldsymbol{r}|\psi\rangle,\\ &= h^{-n/2}\int \mathrm{d}^n\,r\,\exp\left(\frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}{\mathrm{i}\,\hbar}\right)\,\psi(\boldsymbol{r}).\end{aligned} \tag{13}$$

یعنی $\langle \boldsymbol{P}=\boldsymbol{p}|\psi\rangle$ برابر با $\tilde{\psi}(\boldsymbol{p})$ است، که $\tilde{\psi}$ تبدیل- ِ-فوریه یِ ψ است:

$$\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}) = h^{-n/2}\int \mathrm{d}^n\,r\,\exp\left(\frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}{\mathrm{i}\,\hbar}\right)\,\psi(\boldsymbol{r}). \tag{14}$$

و البته (لطفَن این را نشان دهید)،

$$\psi(\boldsymbol{r}) = h^{-n/2}\int \mathrm{d}^n\,r\,\exp\left(-\frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}{\mathrm{i}\,\hbar}\right)\,\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}). \tag{15}$$

هَمیلتنی برا یِ ذره ای به جرم ِ m که تحت ِ انرژی-یِ-پتانسیل ِ V (احتمالَن وابسته به زمان) است، چنین است.

$$H(t) = \frac{\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{P}}{2\,m} + V(t,\boldsymbol{R}). \tag{16}$$

پس

$$\langle \boldsymbol{r}|H(t)|\psi\rangle = \frac{-\hbar^2}{2\,m}\,(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\nabla}\,\psi)(\boldsymbol{r}) + V(t,\boldsymbol{r})\,\psi(\boldsymbol{r}). \tag{17}$$

معادله یِ شْرُدینگر، با اثر-دادنِ $\langle \boldsymbol{r}|$ از چپ بر آن، میشود

$$\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial}{\partial\,t}\,\langle \boldsymbol{r}|\psi\rangle = \langle \boldsymbol{r}|H(t)|\psi\rangle, \tag{18}$$

یعنی،

$$\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial\,\psi}{\partial\,t}(t,\boldsymbol{r}) = \frac{-\hbar^2}{2\,m}\,(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\nabla}\,\psi)(t,\boldsymbol{r}) + V(t,\boldsymbol{r})\,\psi(t,\boldsymbol{r}). \tag{19}$$

یک ی از پیامدها یِ این معادله، رابطه یِ پیوستگی برا یِ احتمال است. چگالی یِ احتمال برا یِ یافتنِ ذره در $\boldsymbol{r}$ را با $\rho(\boldsymbol{r})$ نشان میدهم:

$$\begin{aligned}\rho(t,\boldsymbol{r}) &= |\psi(t,\boldsymbol{r})|^2,\\ &= \bar{\psi}(t,\boldsymbol{r})\,\psi(t,\boldsymbol{r}).\end{aligned} \tag{20}$$

به این ترتیب،

$$\dot{\rho} = \bar{\psi}\,\dot{\psi} + \dot{\bar{\psi}}\,\dot{\psi}. \tag{21}$$

$\dot{\psi}$ از (20) به دست میئاید. $\dot{\bar{\psi}}$ هم مزدوج-ِ-مختلطِ $\dot{\psi}$ است:

$$-\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial\,\bar{\psi}}{\partial\,t}(t,\boldsymbol{r}) = \frac{-\hbar^2}{2\,m}\,(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\nabla}\,\bar{\psi})(t,\boldsymbol{r}) + V(t,\boldsymbol{r})\,\bar{\psi}(t,\boldsymbol{r}). \tag{22}$$

به این ترتیب،

$$\begin{aligned}\dot{\rho} &= \frac{1}{\mathrm{i}\,\hbar}\,\left[\bar{\psi}\,\left(\frac{-\hbar^2}{2\,m}\,\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\nabla}\,\psi + V\,\psi\right) - \left(\frac{-\hbar^2}{2\,m}\,\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\nabla}\,\bar{\psi} + V\,\bar{\psi}\right)\,\psi\right],\\ &= \frac{\mathrm{i}\,\hbar}{2\,m}[\bar{\psi}\,(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\nabla}\,\psi) - (\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\nabla}\,\bar{\psi})\,\psi],\\ &= \boldsymbol{\nabla}\cdot\left\{\frac{\mathrm{i}\,\hbar}{2\,m}\,[\bar{\psi}\,(\boldsymbol{\nabla}\,\psi) - (\boldsymbol{\nabla}\,\bar{\psi})\,\psi]\right\}.\end{aligned} \tag{23}$$

یا،

$$0 = \dot{\rho} + \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{J}, \tag{24}$$

که

$$\boldsymbol{J} = -\frac{\mathrm{i}\,\hbar}{2\,m}\,[\bar{\psi}\,(\boldsymbol{\nabla}\,\psi) - (\boldsymbol{\nabla}\,\bar{\psi})\,\psi]. \tag{25}$$

و البته دیده میشود

$$\boldsymbol{J} = \mathrm{Re}\left(-\frac{\mathrm{i}\,\hbar}{m}\,\bar{\psi}\,\boldsymbol{\nabla}\,\psi\right). \tag{26}$$

به $\boldsymbol{J}$ چگالی-یِ-جریان ِ احتمال، و به (24) معادله یِ پیوستگی برا یِ احتمال میگویند. انتگرال ِ (24) بر ناحیه یِ $\mathbb{V}$ میشود،

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\,t}\int_{\mathbb{V}} \mathrm{d}^n\,r\,\rho + \int_{\mathbb{V}} \mathrm{d}^n\,\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{J}, \\ &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\,t}\int_{\mathbb{V}} \mathrm{d}^n\,r\,\rho + \oint_{\partial\,\mathbb{V}} \mathrm{d}\,\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{J}. \end{aligned} \tag{27}$$

$(\partial\,\mathbb{V})$ مرز ِ $\mathbb{V}$ است، و برا یِ رسیده به برابری یِ دوم قضله یِ دیورژانس به کار رفته. رابطه یِ (27) را میشود چنین نوشت.

$$0 = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\,t}\,[\mathrm{Prob}(\boldsymbol{r} \in \mathbb{V})] + I(\partial\,\mathbb{V}), \tag{28}$$

که $[\mathrm{Prob}(\boldsymbol{r} \in \mathbb{V})]$ احتمال ِ یافتن ِ ذره در $\mathbb{V}$ است و $[I(\partial\,\mathbb{V})]$ جریان ی که از $(\partial\,\mathbb{V})$ میگذرد:

$$\mathrm{Prob}(\boldsymbol{r} \in \mathbb{V}) = \int_{\mathbb{V}} \mathrm{d}^n\,r\,\rho. \tag{29}$$

$$I(\partial\,\mathbb{V}) = \oint_{\partial\,\mathbb{V}} \mathrm{d}\,\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{J}. \tag{30}$$

رابطه یِ (28) شکل ِ انتگرالی یِ معادله یِ پیوستگی ست. معادله یِ پیوستگی برا یِ کمیت ِ Q (اینجا احتمال) میگوید Q خلق یا نابود نمیشود: علت ِ تغییر ِ Q در $\mathbb{V}$ جریان ِ Q از بیرون به درون ِ $\mathbb{V}$ یا از درون به بیرون ِ $\mathbb{V}$ است.

به عنوان ِ یک مثال، اگر تابع- ِ-مُج ِ سیستم یک مُج ِ تخت باشد،

$$\psi(\boldsymbol{r}) = c\ \exp(\mathrm{i}\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}), \tag{31}$$

که c و $\boldsymbol{k}$ ثابت َند، چگالی یِ احتمال و چگالی-ی-ِجریان ِ احتمال میشوند

$$\rho = |c|^2. \tag{32}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{J} &= \frac{\hbar\,\boldsymbol{k}}{m}\,|c|^2,\\ &= \frac{\hbar\,\boldsymbol{k}}{m}\,\rho. \end{aligned} \tag{33}$$

$(\hbar\,\boldsymbol{k})$ تکانه یِ متناظر با مُج- ِ-تخت است. پس

$$\boldsymbol{J} = \rho\,\boldsymbol{v}, \tag{34}$$

که $\boldsymbol{v}$ سرعت ِ متناظر با مُج- ِ-تخت است. اگر ρ چگالی یِ ذره باشد، $\boldsymbol{J}$ چگالی-ی-ِجریان ِ ذره است، که میشود چگالی یِ ذره ضرب در سرعت.