1 ذره در یک بُعد، حالتها یِ مقید

حالتها یِ مقید متناظر با انرژیها یی یَند که از انرژی-یِ-پتانسیل در هم $(-\infty)$ و هم ∞ کوچکتر َند. به عنوان ِ یک مثال ِ ساده، این انرژی-یِ-پتانسیل ِ تکِئی-ثابت را بررسی میکنم.

$$V(x) = V_0, \qquad x < 0. \tag{1}$$

$$V(x) = 0, \qquad 0 < x < a. \tag{2}$$

$$V(x) = V_0, \qquad x > a. \tag{3}$$

جرم ِ ذره را با m نشان میدهم. V_0 مثبت است. حالتها یِ مقید متناظر با این َند که

$$E < V_0. \tag{4}$$

با این شرط، جواب ِ معادله یِ ویژه-مقداری برا یِ انرژی میشود

$$\psi(x) = A' \exp(\kappa\, x), \qquad x < 0. \tag{5}$$

$$\psi(x) = A \exp(\mathrm{i}\, k\, x) + B \exp(-\mathrm{i}\, k\, x), \quad 0 < x < a. \tag{6}$$

$$\psi(x) = A'' \exp(-\kappa\, x), \qquad x > a. \tag{7}$$

k و κ چنین تعریف شده اند.

$$k = \sqrt{\frac{2\, m\, E}{\hbar^2}}. \tag{8}$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{2\, m\, (V_0 - E)}{\hbar^2}}. \tag{9}$$

اینها هم ان شبیه ِ هم ان روابط ی یَند که برا یِ مسئله یِ پراکندگی به کار رفتند. با این تفاوت که به جا یِ عدد- ِ-مُج ِ مُهومی در ناحیه ِ کلاسیکی-ممنوع، κ تعریف شده، که حقیقی و مثبت است، و این شرطها هم اعمال شده اند که تابع- ِ-مُج در هم $(-\infty)$ و هم ∞ محدود بماند.

پیوستگی ی ِ تابع- ِ-مُج و مشتق ِ آن در 0 و a نتیجه میدهند

$$A' = A + B. \tag{10}$$

$$\kappa\, A' = \mathrm{i}\, k\, (A - B). \tag{11}$$

$$A'' \exp(-\kappa\, a) = A\, \exp(\mathrm{i}\, k\, a) + B\, \exp(-\mathrm{i}\, k\, a). \tag{12}$$

$$-\kappa\, A'' \exp(-\kappa\, a) = \mathrm{i}\, k\, [A\, \exp(\mathrm{i}\, k\, a) - B\, \exp(-\mathrm{i}\, k\, a)]. \tag{13}$$

بین ِ اینها A' و A'' را حذف میکنم:

$$0 = (\kappa - \mathrm{i}\, k)\, A + (\kappa + \mathrm{i}\, k)\, B. \tag{14}$$

$$0 = (\kappa + \mathrm{i}\, k)\, A\, \exp(\mathrm{i}\, k\, a) + (\kappa - \mathrm{i}\, k)\, B\, \exp(-\mathrm{i}\, k\, a). \tag{15}$$

یا،

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\kappa - \mathrm{i}\, k) & (\kappa + \mathrm{i}\, k) \\ (\kappa + \mathrm{i}\, k)\, \exp(\mathrm{i}\, k\, a) & (\kappa - \mathrm{i}\, k)\, \exp(-\mathrm{i}\, k\, a) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}. \tag{16}$$

این یک دستگاه ِ دُ معادله برا یِ دُ مجهول ِ A و B است. شرط ِ این که این دستگاه جواب ِ نابدهی داشته باشد (تنها-جواب َ ش صفر نباشد) این است که دترمینان ِ ماتریس ِ ضرایب صفر باشد:

$$0 = (\kappa - \mathrm{i}\, k)^2\, \exp(-\mathrm{i}\, k\, a) - (\kappa + \mathrm{i}\, k)^2\, \exp(\mathrm{i}\, k\, a), \tag{17}$$

یا،

$$\exp(2\, \mathrm{i}\, k\, a) = \left(\frac{\kappa - \mathrm{i}\, k}{\kappa + \mathrm{i}\, k}\right)^2. \tag{18}$$

از (8) و (9) دیده میشود

$$\frac{2\, m\, V_0\, a^2}{\hbar^2} = (\kappa\, a)^2 + (k\, a)^2. \tag{19}$$

طرف ِ راست ِ این رابطه یک کمیت ِ بی-بُعد است. آن را با R^2 نشان میدهم، که R مثبت است:

$$R = \sqrt{\frac{2\, m\, V_0\, a^2}{\hbar^2}}. \tag{20}$$

پس،

$$R=\sqrt{(\kappa\, a)^2+(k\, a)^2}. \qquad (21)$$

از این رابطه معلوم است که $(\kappa\, a)$ و $(k\, a)$ را میشود بر حسب ِ R و یک زاویه یِ θ، که بین ِ 0 و $(\pi/2)$ است، نوشت:

$$\kappa\, a=R\,\cos\theta. \qquad (22)$$

$$k\, a=R\,\sin\theta. \qquad (23)$$

به این ترتیب (18) میشود

$$\exp(2\,\mathrm{i}\,R\,\sin\theta)=\exp(-4\,\mathrm{i}\,\theta), \qquad (24)$$

یا

$$1=\exp[\mathrm{i}\,(2\,R\,\sin\theta+4\,\theta)]. \qquad (25)$$

که یعنی

$$2\,R\,\sin\theta+4\,\theta=n\,(2\,\pi), \qquad (26)$$

یا

$$R\,\sin\theta+2\,\theta=n\,\pi. \qquad (27)$$

n صحیح است. طرف ِ چپ ِ (27) یک تابع ِ صعودی از θ است. کمینه یِ آن در $(\theta=0)$ به دست میئاید، که متناظر با $(n=0)$ میشود. این متناظر با $(k=0)$ است. از (11) دیده میشود اگر k صفر باشد A' هم صفر است. و در این حالت (10) نتیجه میدهد $(A+B)$ صفر است. همچنین، از (13) دیده میشود اگر k صفر باشد A'' است. و (5) و (6) و (7) نشان میدهند در این حالت ψ همه-جا صفر است. پس $(k=0)$ متناظر با ویژه-بردار نیست.

بیشینه یِ طرفِ چپِ (27) در θ برابر با $(\pi/2)$ رخ میدهد، و مقدارَش $(R+\pi)$ است. پس معادله یِ (27) فقط برا یِ n ها یِ مثبت جواب دارد، به شرط ی که

$$n \leq 1+\frac{R}{\pi}. \tag{28}$$

پس به ازا یِ هر یک عددها یِ صحیحِ از 1 تا جزئ-ِ-صحیحِ طرفِ راستِ (28)، یک حالتِ مقید هست. یعنی $\mathcal{N}_{\rm b}$ (تعدادِ حالتها یِ مقید) چنین است.

$$\mathcal{N}_{\rm b}=\left[1+\frac{R}{\pi}\right], \tag{29}$$

یا

$$\mathcal{N}_{\rm b}=1+\left[\frac{R}{\pi}\right]. \tag{30}$$

R با a و جذرِ V_0 متناسب است، که a پهنا یِ چاه و V_0 عمقِ چاه است. با افزایشِ هر یک از این-دُ، R زیاد میشود و هر بار که (R/pi) از یک عددِ صحیح بیشتر شود، یک ی به تعدادِ حالتها یِ مقید اضافه میشود.

یک حالتِ حد ی که مسئله را سادتر میکند این است که V_0 بینهایت شود. در این صورت تعدادِ حالتها یِ مقید بینهایت میشود، و البته همه یِ ویژه-بردارها یِ انرژی هم مقید میشوند، چون E هر چه باشد از بینهایت کمتر است. وقت ی V_0 بینهایت است، R هم بینهایت است. وقت ی R بزرگ باشد، در (27) میشود از $(2\,\theta)$ در برابرِ $(R\,\sin\theta)$ چشم پوشید. در این صورت (27) چنین میشود

$$R\,\sin\theta=n\,\pi, \tag{31}$$

که یعنی

$$k\,a=n\,\pi. \tag{32}$$

از (19) معلوم میشود در این حالت κ بینهایت است. وقت ی κ بینهایت شود، از (11) و (13) نتیجه میشود

$$A'=0. \tag{33}$$

$$A''\,\exp(-\kappa\,a)=0. \tag{34}$$

اینها نشان میدهند تابع- ِ-مُج در $(x < 0)$ و $(x > a)$ صفر است. ضمنَن از (34) و (10) نتیجه میشود

$$A + B = 0. \tag{35}$$

به این ترتیب،

$$\begin{aligned}\psi(x) &= A\,[\exp(\mathrm{i}\,k\,x) - \exp(-\mathrm{i}\,k\,x)],\\ &= 2\,\mathrm{i}\,A\,\sin(k\,x),\end{aligned} \tag{36}$$

که با استفاده از (32) نتیجه میدهد

$$\psi(0) = 0. \tag{37}$$

$$\psi(a) = 0. \tag{38}$$

اینها نشان میدهند مسئله یِ جسم در چاه- ِ-پتانسیل ِ بینهایت را میشود سادِتر فرمولبندی کرد: جسم بین ِ $(x = 0)$ و $(x = a)$ آزاد است، اما نمیتواند از این ناحیه بیرون برود، و تابع- ِ-مُج هم در مرز ِ این ناحیه صفر است. پس معادله یِ مستقل-از-زمان ِ شْرُدینگِر میشود

$$E\,\psi = -\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{\mathrm{d}^2\,\psi}{\mathrm{d}\,x^2}, \quad 0 < x < a. \tag{39}$$

البته همراه با شرایط- ِ-مرزی یِ (37) و (38). جواب ِ این مسئله هم ان (6) است، و (37) معادله یِ (35) را نتیجه میدهد. پس تابع- ِ-مُج به شکل ِ (36) درمیئاید:

$$\psi(x) = C\,\sin(k\,x). \tag{40}$$

شرط- ِ-مرزی یِ باقیمانده، (38)، نتیجه میدهد

$$\sin(k\,a) = 0. \tag{41}$$

و این هم ان (32) است. با معلوم-شدن ِ k، میشود انرژی را از (8) به دست آورد. جوابها یِ آخر برا یِ ویژه-مقدار و ویژه-بردار ِ همیلتنی میشوند.

$$k_n = \frac{n\,\pi}{a}. \tag{42}$$

$$E_n = \frac{n^2\,\pi^2\,\hbar^2}{2\,m\,a^2}. \tag{43}$$

$$\psi_n(x) = C\,\sin\frac{n\,\pi\,x}{a}. \tag{44}$$