فصل دوم - دینامیک کوانتومی

در این بخش، در واقع تحول زمانی سیستم‌ها را بررسی می‌کنیم.

— تحول زمانی و معادلهٔ شرودینگر.

— در ابتدا باید عملگر تحول زمانی تعریف کنیم، به این صورت که حالت اولیه دلخواه را از زمان t_0 به t منتقل کند:

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

همچنین عملگر U انتظار داریم:

اول: قبل و بعد از تحول زمانی، احتمال حضور سیستم تغییر نکند، که در این صورت باید عملگر ما یکانی باشد:

$$\langle\alpha, t_0; t|\alpha, t_0; t\rangle = \langle\alpha, t_0|\alpha, t_0\rangle \Longrightarrow U^\dagger U = \mathbb{1}$$

توجه شود که ما در اینجا از خلق و نابودی سیستم چشم‌پوشی می‌کنیم ولی در نظریه میدان‌های کوانتومی مجددا تعمیم می‌دهیم.

دوم: تحول بتواند تکه تکه بتواند بیان شود؟ $\quad U(t_2,t_0) = U(t_2,t_1)\,U(t_1,t_0)$

سوم: در صورت اینکه تحول زمانی کوچکی را در نظر بگیریم، به این صورت باشد:

$$\lim_{dt\to 0} |\alpha, t_0; t_0+dt\rangle = \lim_{dt\to 0} U(t_0+dt, t_0)\,|\alpha, t_0\rangle = |\alpha, t_0\rangle$$

که در این صورت می‌توان گفت:

$$\lim_{dt\to 0} U(t_0+dt, t_0) = \mathbb{1}$$

+ با توجه به ویژگی‌هایی که از عملگر تحول زمانی انتظار داریم، می‌توان ادعا کرد: اگر این عملگر به فرم زیر باشد

که در آن Ω هرمیتی باشد، همه شرط‌ها را ارضا می‌کند: $U(t_0+dt,t_0)=\mathbb{1}-i\Omega\, dt$

+ برای اینکه فرم فوق بتواند شرط اول یعنی یکانی بودن را حفظ کند باید Ω هرمیتی باشد:

$$U^\dagger U=\mathbb{1} \longrightarrow (\mathbb{1}+i\Omega^\dagger dt)(\mathbb{1}-i\Omega\, dt)=\mathbb{1}$$

$$\longrightarrow \mathbb{1}+i(\Omega^\dagger \Omega)\,dt+O(dt^2)=\mathbb{1}$$

برای اینکه عبارت فوق در حد خطی، یعنی در مرتبه اول dt، برقرار باشد حتماً باید: $\Omega^\dagger=\Omega$

+ با توجه به تطابق مکانیک کلاسیک و کوانتوم می‌توان گفت: $\Omega = H/\hbar$

بنابراین برای تحول زمانی کوتاه مدت، که مولد آن انرژی است داریم: $U(t_0+dt,t_0)=\mathbb{1}-\frac{i}{\hbar}H\,dt$

+ حال که شکل کوچک تحول را یاد گرفتیم، می‌خواهیم به دنبال شکل‌های محدودتر تبدیل باشیم؛

برای این کار، تحول t_0 به $t+dt$ را به صورت مقابل می‌نویسیم: $U(t+dt,t_0)=U(t+dt,t)\,U(t,t_0)$

که قسمت اول چون تحول کوچک است، از قبل بلدیم:

$$U(t+dt,t_0)=(\mathbb{1}-iH\,dt)\,U(t,t_0)$$

$$U(t+dt,t_0)-U(t,t_0)=-\frac{i}{\hbar}H\,dt\;U(t,t_0)$$

سمت چپ معادله فوق، در واقع تعریف مشتق است، لذا:

$$\left.\frac{\partial U}{\partial t}\right|_t dt=\frac{-i}{\hbar}H\,dt\;U(t,t_0)$$

بنابراین می‌توان از معادله‌ی اخیر به دست آورد:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t,t_0) = H(t) U(t,t_0)}$$

این معادله به معادله‌ی شرودینگر معروف است که اگر روی حالت اثر کند، تحول آن را می‌دهد:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t,t_0)\,|\alpha, t_0\rangle = H(t)\, U(t,t_0)\,|\alpha, t_0\rangle$$

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0; t\rangle = H(t)\,|\alpha, t_0; t\rangle.}$$

در حالتی که $[H(t),H(t')]=0$ باشد، می‌توان معادله دیفرانسیل اولی را حل کرد:

$$U(t,t_0) = \exp\left\{ -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H(t')\,dt' \right\}$$

همین‌طور به آسانی می‌توان شکل انتگرالی معادله‌ی شرودینگر را از شکل دیفرانسیلی‌اش به صورت زیر به دست آورد:

$$\boxed{U(t,t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, H(t')\, U(t',t_0)}$$

- اگر از فرم انتگرالی معادله شرودینگر استفاده کنیم:

$$U(t,t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\, H(t_1)\, U(t_1,t_0)$$

حال می‌توان مجدداً $U(t_1,t_0)$ را از فرم انتگرالی معادله شرودینگر استفاده کرد:

$$U(t,t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt\, H(t_1)\left\{\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_2\, H(t_2)\, U(t_2,t_0)\right\}$$

مجدداً می‌توان به جای $U(t_2,t_0)$ و این کار را تکرار کرد، با تکرار n مرتبه این کار به دست می‌آید!

$$\boxed{U(t,t_0) = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n\, T\{H(t_1)H(t_2)\cdots H(t_n)\}}$$

و یا به صورت خلاصه‌تر می‌توان به صورت زیر نوشت که به دو عبارت ذیل و فوق، سری دایسون گویند.

$$\boxed{U(t,t_0) = T\exp\left\{-\left(\frac{i}{\hbar}\right)\int_{t_0}^{t} dt'\, H(t')\right\}}$$

اما جهت یادآوری اینکه ترتیب زمانی بین $H(t)$ها در عبارت‌های فوق حفظ شود نماد ترتیب زمانی T را اضافه می‌کنیم
اما در حالت خاص $[H(t),H(t')]=0$ نیازی به اینکه جابجا باشد و ترتیب زمانی دیگر اهمیت ندارد.

بحث اینکه آیا سری همگرا باشد نیز مربوط به سیستم و H دارد. و ممکن است این اتفاق رخ بدهد.

یادآوری شاید در حالت خاص $[H(t),H(t')]=0$:

$$U(t,t_0) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, H(t')\right\}$$

و اگر به صورتی که $H \neq H(t)$ باشد:

$$U(t,t_0) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\, H\right\}$$

+ تحول ویژه‌حالت مشترک انرژی

— برای پیدا کردن تحول زمانی یک حالت دلخواه از یافتن تحول همانطور که ذکر شد باید معادله شرودینگر را روی حالت اولیه اثر داد و معادله دیفرانسیل مربوطه را حل کرد. (صفحه‌ی 45)

اما در صورتی که یک عملگر را با H جابجا داشته باشیم:

$$[A, H] = 0$$

در این صورت $|a'\rangle$ را ویژه‌توابع مشترک همزمان دو اپراتور با بردار می‌نامیم:

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

حال می‌توان حالت دلخواه را در شرایط اولیه را به پایه‌های کامل انرژی بسط داد:

$$|\alpha, t_0\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\alpha, t_0\rangle = \sum_{a'} c_{a'}(t_0)\, |a'\rangle$$

با توجه به اینکه عملگر تحول زمان را می‌توان نیز بسط داد: ($H \neq H(t)$ در حالت خاص)

$$U(t, t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t - t_0) H\right] = \sum_{a'}\sum_{a''} |a'\rangle\langle a'| \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\Delta t\, H\right\} |a''\rangle\langle a''|$$

$$\underset{H.}{\overset{\text{با توجه}}{=}} \sum_{a'} |a'\rangle \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\Delta t\, E\right\} \langle a'|$$

بنابراین تحول زمانی حالت اولیه در شرایط با جایگذاری عبارات فوق:

$$|\alpha, t_0; t\rangle = U(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle = \sum_{a'} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\Delta t\, E\right\} c_{a'}(t_0)\, |a'\rangle.$$

که با بازتعریف $c_{a'}(t) = \exp\left(\frac{-i}{\hbar}\Delta t E\right) c_{a'}(t_0)$ می‌شود:

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \sum_{a'} c_{a'}(t)\, |a'\rangle$$

یعنی با داشتن H و $c_{a'}(t_0)$ ها می‌توان ویژه‌توابع $|a'\rangle$ را پیدا کرد و $c_{a'}(t)$ نیز قابل محاسبه با $c_{a'}(t_0)$ خواهد بود بنابراین تحول یافته حالت به سادگی

— برای حالت خاص، اگر سیستم در حالت اولیه در یکی از ویژه حالت‌های همزمان A و H باشد؛

$$|\alpha, t_0\rangle = |a'\rangle$$

تحول یافته‌ی حالت بعد از زمان t همچنان خودش است البته با یک فاز اضافی:

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\Delta t E\right)|a'\rangle$$

بنابراین اگر دو مشاهده‌پذیر سازگار داشته باشیم که A و H باشند ثابت حرکت خواهد بود. یعنی سیستم در حالت اولیه‌اش باقی خواهد ماند.
در واقع اگر A مشاهده‌پذیر اندازه‌گیری شود ویژه حالت خاصی از A که همان حالت H نیز است ولی چون جابجا می‌شوند، تحول نمی‌یابد بنابراین
این اتفاق از اسپین‌ها نیز می‌افتد؛ اگر S_z را مشاهده‌پذیر با S^2 نیز حالت سیستم می‌ماند.

— حال اگر فرض کنیم مشاهده‌پذیرهای دیگری از یک مجموعه کامل هستند که همگی با یکدیگر و البته با H سازگارند. برای این صورت ویژه توابع مشترک همزمان را $|K_i\rangle \equiv |a'_i, b'_i, \ldots\rangle$ می‌نامیم.

حال اگر حالت اولیه‌ای در t_0 داشته باشیم که بر پایه‌های کامل $|K_i\rangle$ نوشته باشیم:

$$|\alpha, t_0\rangle = \sum |K_i\rangle\langle K_i|\alpha, t_0\rangle$$

$$= \sum c_i^{\alpha}(t_0)|K_i\rangle$$

با توجه به اینکه عملگر مورد نظر نیز می‌توان نوشت (در حالت $H \neq H(t)$)

$$U(t, t_0) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\Delta t H\right\}$$

$$= \sum |K_i\rangle \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\Delta t E\right\}\langle K_i|$$

لذا در این حالت تحول یافته سیستم برابر خواهد بود:

$$|\alpha, t_0; t\rangle = U(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle = \sum_i \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\Delta t E_i\right\} c_i^{\alpha}(t_0)\,|K_i\rangle$$

$$= \sum_i c_i^{\alpha}(t)\,|K_i\rangle.$$

— به صورت قبل اگر حالت اولیه ویژه حالت مشترک باشد، خواهیم بود:

$$|\alpha, t_0\rangle = |k_i\rangle$$

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\Delta t E\right\} |k_i\rangle$$

— بنابراین یافتن تحول یافته سیستم، اگر سیستم ویژه حالت مشترک انرژی باشد بسیار آسان‌تر از حل معادلهٔ شرودینگر است.

بنابراین پیدا کردن مجموعهٔ کاملی از مشاهده‌پذیرها که دو به دو و البته با H سازگارند اهمیت زیادی دارد

بعد از پیدا کردن چنان مجموعه‌ای حالت اولیه سیستم را برای پایه‌ها مشترک بسط می‌دهیم و به آسانی تحول

زمانی سیستم را حساب می‌کنیم.

+ تحول زمانی مقدار چشمداشتی.

— در ابتدا مقدار چشمداشتی یک اپراتور کلی $O(t) = O$ را فرض می‌کنیم. و با شرط اینکه هامیلتونی عدد ثابت است: $H(t) = H(t_0)$ می‌توان

مقدار چشمداشتی را در هر لحظه‌ای محاسبه کرد:

+ در لحظهٔ اولیه و قبل از تحول یافتن سیستم مقدار چشمداشتی مطلوب است با:

$$\langle \alpha, t_0 | O(t) | \alpha, t_0\rangle = \langle \alpha, t_0 | k_i\rangle\langle k_i | O(t) | k_j\rangle\langle k_j | \alpha, t_0\rangle$$

$$= C_i^{\alpha *}(t_0) \quad O_{ij}(t) \quad C_j^{\alpha}(t_0)$$

در حالت خاص $[H, O(t)] = 0$، چون O نیز یک مجموعه کامل است، لذا $\langle k_i | O(t) | k_j\rangle = \delta_{ij} O_i$ بنابراین:

$$\langle \alpha, t_0 | O(t) | \alpha, t_0\rangle = |C_i^{\alpha}(t_0)|^2 \quad O_i(t)$$

• واضح است که در صورت نداشتن تابعیت زمانی O، مقدار چشمداشتی از لحظهٔ اول هر زمان کلی چه در حالت $[H,O]=0$، عدد ثابت است.

+ حال مقدار چشمداشتی اپراتور O را در t لحظه‌ای را، که تحول یافته است را به دست آوریم:

$$\langle \alpha, t_0; t|\, O(t)\, |\alpha, t_0; t\rangle = \langle \alpha, t_0|\, U^{\dagger}(t,t_0)\, O(t)\, U(t,t_0)\, |\alpha, t_0\rangle$$

$$= \sum_{k_i,k_j} \langle \alpha, t_0|k_i\rangle\langle k_i|\, U^{\dagger}(t,t_0)\, O(t)\, U(t,t_0)|k_j\rangle\langle k_j|\alpha, t_0\rangle$$

$$= \sum \underline{c_i^{\alpha *}(t_0)}\ \langle k_i|\, \underline{e^{i\Delta t E_i/\hbar}}\ O(t)\ \underline{\underline{e^{-i\Delta t E_j/\hbar}}}\, |k_j\rangle\ \underline{\underline{c_j^{\alpha}(t_0)}}$$

$$= \sum \underline{c_i^{\alpha *}(t)}\ \ \langle k_i|\, O(t)\, |k_j\rangle\ \ \underline{\underline{c_j^{\alpha}(t)}}$$

$$= c_i^{\alpha *}(t)\ \ O_{ij}(t)\ \ c_j^{\alpha}(t)$$

در حالت خاص که $[H, O(t)]=0$ باشد به صورت زیر است چون داریم: $\langle k_i|O|k_j\rangle = O_i\delta_{ij}$ بنابراین:

$$\langle \alpha, t_0; t|\, O(t)\, |\alpha, t_0; t\rangle = |c_i^{\alpha}(t_0)|^2\ O_i(t)$$

- بنابراین واضح است که در حالت کلی، مقدار چشمداشتی حتی اگر O تابعیت زمانی نداشته باشد، ثابت نیست. ولی در حالت خاص $[H,O]=0$ می‌تواند در صورت نداشتن تابعیت زمانی O ایستا باشد.

- از طرف دیگر واضح است که در حالت خاص $[H,O]=0$، مقدار چشمداشتی در لحظه اولیه و بعد از زمان t با یکدیگر برابر اند!

$$\langle \alpha, t_0|\, O(t)\, |\alpha, t_0\rangle = \langle \alpha, t_0; t|\, O(t)\, |\alpha, t_0; t\rangle = |c_i^{\alpha}(t_0)|^2\ O_i(t)$$

+ تحول حالت اسپین، مقدار چشمداشتی اسپین و حرکت تقدیمی (در میدان مغناطیسی).

- به عنوان یک مثال از تحول زمانی حالت و مقدار چشمداشتی یک اسپین در میدان مغناطیسی یکنواخت را می‌خواهیم مورد بررسی قرار دهیم.

را ابتدا تحول یک حالت کلی را بعد به بررسی آن می‌پردازیم.

از قسمت دوم رابطه هامیلتونی باید به صورت مقابل باشد:

$$H = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} = \left(-\frac{g_e e}{2m_e c}\vec{S}\right)\cdot(B\hat{z})$$

با توجه به اینکه $g_e \simeq 2$ است:

$$H = -\frac{g_e e}{2m_e c} B S_z = -\frac{eB}{m_e c} S_z$$

با تعریف $\omega = -\frac{eB}{m_e c}$ که عددی مثبت است (چون $e<0$):

$$H = \omega S_z$$

بنابراین اپراتور تحول به صورت زیر قابل نوشتن است:

$$U(t,t_0) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\omega S_z\right\}$$

یادآوری می‌کنیم که چون $\{H, S_z\}=0$ لذا طبق قضیه پایین صفحه 50، مقدار چشمداشتی در طول زمان تغییر نمی‌کند و البته ثابت است.

حال با توجه به عبارت به دست آمده فوق، می‌توان نوشت اگر سیستم در حالت اولیه دلخواه زیر باشد:

$$|\alpha,t_0\rangle = c_+(t_0)|+\rangle + c_-(t_0)|-\rangle$$

$$|\alpha,t_0;t\rangle = U(t,t_0)\,|\alpha,t_0\rangle = e^{-i(t-t_0)\omega S_z/\hbar}\left[c_+(t_0)|+\rangle + c_-(t_0)|-\rangle\right]$$

$$= c_+(t_0)\,e^{-i(t-t_0)\omega/2}|+\rangle - c_-(t_0)\,e^{+i(t-t_0)\omega/2}|-\rangle$$

به طور خاص می‌توان گفت:

اگر $|\alpha,t_0\rangle = |\pm\rangle \;;\; |\alpha,t_0;t\rangle = e^{\mp i(t-t_0)\omega/2}|\pm\rangle$

اگر $|\alpha,t_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle \;;\; |\alpha,t_0;t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{e^{-i(t-t_0)\omega/2}|+\rangle \pm e^{+i(t-t_0)\omega/2}|-\rangle\right\}$

اگر $|\alpha,t_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle \pm \frac{i}{\sqrt{2}}|-\rangle \;;\; |\alpha,t_0;t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{e^{-i(t-t_0)\omega/2}|+\rangle \pm e^{+i(t-t_0)\omega/2}|-\rangle\right\}$

به عبارتی این موضوع با شهودمان سازگار است چون میدان $\vec{B} = B\hat{z}$ است، اگر اسپین در جهت z باشد، در حالت اولیه انتظار داریم با گذشت زمان به سمت میدان در آید و احتمال تغییر کند ولی اگر در راستای میدان باشد از سمت دیگه تغییری در احتمال نخواهیم داشت.

— حال اگر بخواهیم احتمال یافتن حالت‌های مختلف بعد از زمان t، در صورت مشخص بودن حالت اولیه سیستم را مشخص کنیم می‌توان مثال‌های زیر را مورد مطالعه قرار داد:

$$\langle S_z\pm | S_z+, t_0; t\rangle = \langle S_z\pm | e^{-i(t-t_0)\omega/2} |S_z+\rangle = \begin{cases} e^{-i(t-t_0)\omega/2} & \langle S_z+| \\ 0 & \langle S_z-| \end{cases}$$

$$\langle S_z\pm | S_x+, t_0; t\rangle = \langle \pm | \frac{1}{\sqrt{2}}\left[e^{-i(t-t_0)\omega/2}|+\rangle + e^{+i(t-t_0)\omega/2}|-\rangle\right] = \frac{e^{\mp i(t-t_0)\omega/2}}{\sqrt{2}}$$

$$\langle S_x\pm | S_x+, t_0; t\rangle = \frac{1}{2}\left(\langle+| \pm \langle-|\right)\cdot\left(e^{-i\Delta t\,\omega/2}|+\rangle + e^{+i\Delta t\,\omega/2}|-\rangle\right) = \begin{cases} \cos(\Delta t\,\omega/2) & S_x+ \\ i\sin(\Delta t\,\omega/2) & S_x- \end{cases}$$

به همان علتی که در فوق اشاره کردیم با شهود سازگار است. یعنی حالت اولیه اگر در z باشد تغییری نمی‌کند ولی در حالت‌های دیگر احتمال یافتن حالت‌های دیگر تغییر می‌کند: چون سیستم سعی دارد با میدان مغناطیسی هم جهت شود.

— در مورد مقدار چشم‌داشتی، اگر فرض کنیم سیستم در حالت اولیه $S_x\pm$ بوده داریم:

$$\langle S_x\pm, t_0; t | S_x | S_x\pm, t_0; t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{i\omega\Delta t/2} \quad e^{-i\omega\Delta t/2}\right)\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{-i\omega\Delta t/2} \\ e^{+i\omega\Delta t/2} \end{pmatrix}$$

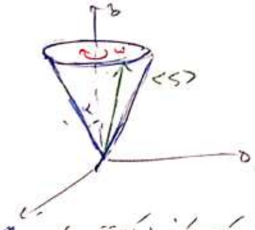
$$= \pm\frac{\hbar}{2}\cos(\omega t)$$

$$\langle S_x\pm, t_0; t | S_y | S_x\pm, t_0; t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{i\omega\Delta t/2} \quad e^{-i\omega\Delta t/2}\right)\cdot\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{-i\omega\Delta t/2} \\ e^{+i\omega\Delta t/2} \end{pmatrix}$$

$$= \pm\frac{\hbar}{2}\sin(\omega\Delta t)$$

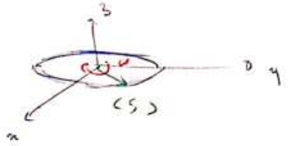
$$\langle S_x\pm, t_0; t | S_z | S_x\pm, t_0; t\rangle = 0$$

در حالت کلی‌تر اگر حالت اولیه به صورت $\begin{pmatrix} \cos \alpha/2 \\ \sin \alpha/2 \end{pmatrix}$ باشد می‌توان نشان داد که همان مغناطیس در میدان مغناطیسی را (با) حرکت تقدیمی با فرکانس $\omega = -\frac{eB}{m_e c}$ می‌باشد که به صورت شکل مقابل می‌توان داد و به چرخش که در مورد دوم است که ...



می‌توان به صورت کلاسیکی به آن اشاره کرد:

در حالتی که دیدیم، $\alpha = \frac{\pi}{2}$ بود. که $\langle S_z \rangle$ روی صفر باقی می‌ماند و $\langle S_x \rangle$ و $\langle S_y \rangle$ روی یک دایره حرکت می‌کنند (حرکت تقدیمی)



— تصویر شرودینگر در مقابل تصویر هایزنبرگ.

— دیدیم که حالت‌ها و اپراتورها می‌توانند با اپراتور دیگری به تبدیل یا تحول یابند:

$$\begin{cases} |\alpha'\rangle = U|\alpha\rangle \\ X' = U^\dagger X U \end{cases}$$

— تا به حال توصیف سیستم‌ها و تحول و تعریف داستان فیزیک با فضا یا تحول حالت سیستم سر و کار داشتیم، در حالی که می‌توان این اثر را در تحول اپراتورها جای داد و دیگر تحولی برای حالت‌ها قائل نشویم! لذا مقدار منتظره با تغییر نمی‌کند!

$$\underbrace{\langle\beta| X |\alpha\rangle'}_{\text{Schrödinger's picture}} = \langle\beta|U^\dagger X U|\alpha\rangle = \underbrace{\langle\beta| X' |\alpha\rangle}_{\text{Heisenberg's picture}}$$

Schrödinger's picture ⟷ Heisenberg's picture

حال اگر U، همان توصیف تحول زمانی باشد، $U = U(t, t_0)$، سمت چپ توصیف شرودینگر است سمت راست هایزنبرگ.

- به عنوان یک مثال خاص اگر U انتقال باشد خواهیم داشت:

$$|\alpha'\rangle = \tau(dx')|\alpha\rangle = \left(\mathbb{1} + -\frac{i}{\hbar} dx' p\right)|\alpha\rangle$$

حال اگر عناصر ماتریس حساب کنیم:

$$'\langle\beta|x^i|\alpha\rangle' = \langle\beta|\tau^\dagger x^i \tau|\alpha\rangle =$$

$$'\langle\beta|x^i|\alpha\rangle' = \langle\beta|(\mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} dx'^j p^j) x^i (\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} dx'^k p^k)|\alpha\rangle$$

$$'\langle\beta|x^i|\alpha\rangle' = \langle\beta|\, x^i + \frac{i}{\hbar} dx'^j \underbrace{[p^j, x^i]}_{=-i\hbar\delta_{ij}} + O(dx'^2)\,|\alpha\rangle$$

$$'\langle\beta|x^i|\alpha\rangle' = \langle\beta|\overbrace{x^i}^{\text{اپراتور}} + \overbrace{dx'^i}^{\text{عدد}}|\alpha\rangle$$

تصویر شرودینگر — حالت‌ها اصل را دنبال می‌کنند، اپراتور ثابت است.

تصویر هایزنبرگ — حالت‌ها جابجا نشده‌اند، اثر اپراتور اعمال شده است.

- در حالت کلی می‌توان نشان داد اگر U اپراتور تحول باشد، یک اپراتور در تصویر هایزنبرگ چگونه تحول می‌یابد:

$$\boxed{A^H(t) = U^\dagger(t,t_0)\, A^S(t)\, U(t,t_0)}$$

تحول U به صورت مقابل داده می‌شود:

$$\partial_t U(t,t_0) = \frac{-i}{\hbar} H\cdot U(t,t_0)$$

توجه شود که اپراتورهایی که بیشتر سروکار داریم، مانند L، P، ... در تصویر شرودینگر ذاتاً تحول زمانی ندارند ولی

با این حال در تصویر هایزنبرگ تحول زمانی خواهند داشت:

$$\boxed{\frac{dA^H}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A^H, H^H] + \left\{\frac{\partial A(t)}{\partial t}\right\}^H}$$

اثبات:

$$\frac{dA^H}{dt} = \left(\frac{\partial}{\partial t} U^\dagger\right) A^S U + U^\dagger\left(\frac{\partial A^S}{\partial t}\right) U + U^\dagger A^S \left(\frac{\partial U}{\partial t}\right)$$

$$= \left(\frac{i}{\hbar} U^\dagger H\right) A^S U + U^\dagger\left(\frac{\partial A^S}{\partial t}\right) U + U^\dagger A^S\left(-\frac{i}{\hbar} H U\right)$$

$$= -\frac{1}{i\hbar} \underbrace{U^\dagger H U}_{=H^H} \underbrace{U^\dagger A^S U}_{=A^H} + U^\dagger\left(\frac{\partial A^S}{\partial t}\right) U + \frac{1}{i\hbar} \underbrace{U^\dagger A^S U}_{=A^H} \underbrace{U^\dagger H U}_{=H^H} = \frac{1}{i\hbar}[A^H, H^H] + \left[\frac{\partial A^S(t)}{\partial t}\right]^H$$

- توجه شود برای حالت خاص $[H(t), H(t')]=0$، می‌توان گفت در هامیلتونی نیز با شرایط ذکر شده داریم:

$$H^H(t) = U^\dagger(t,t_0)\, H^S(t)\, U(t,t_0) = H^S(t)$$

در حالتی که H مستقل از زمان نیز باشد، معادله فوق برقرار خواهد بود (زیرا $\left(\frac{d}{dt}H = [H, H] = 0\right)$

- در فیزیک کلاسیک برای هر تابعی می‌توان نوشت: $A = A(q, p, t)$:

$$\frac{d}{dt}A(q,p,t) = \frac{\partial A}{\partial q}\dot{q} + \frac{\partial A}{\partial p}\dot{p} + \frac{\partial A}{\partial t} = \frac{\partial A}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q} + \frac{\partial A}{\partial t}$$

$$= \underbrace{[A, H]_P}_{\text{(براکت پواسون)}} + \frac{\partial A}{\partial t}$$

لذا با مقایسه ی معادله فوق و معادله هایزنبرگ واضح است که باید:

$$\frac{1}{i\hbar}[\ ,\ ]_{QM} \longleftrightarrow [\ ,\ ]_{P\,(classic)}$$

- مثال: برای ذره آزاد داریم $H = \frac{1}{2m}\vec{p}^2$ بنابراین می‌توان نوشت: (توجه شود که اندیس‌های H را جهت سهولت نوشته نشده است)

$$\frac{d}{dt}\vec{P} = \frac{1}{i\hbar}[P, H] = \frac{1}{i\hbar}\left[\vec{P}, \frac{1}{2m}\vec{P}^2\right] = 0$$

$$\frac{d}{dt}\hat{X}_i = \frac{1}{i\hbar}[x_i, H] = \frac{1}{i\hbar}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p_i}\right) H = \frac{\partial}{\partial P_i}\frac{1}{2m}P^2 = \frac{1}{m}P_i = \frac{1}{m}P_i(0)\, t$$

در فضای تکانه نوشتیم، توجه شود
می‌توان نشان داد x^H در فضای تکانه
مشابه x^S است.

(خطا، غلط و صحیح باید: شیب مربوط به کتاب است)

پس می‌توان از عبارت فوق گفت: $X_i(t) = X_i(0) + \frac{1}{m}P_i(0)\, t$ لذا با اینکه جابجاگر زیر برقرار است: $[x_i(0), x_j(0)] = 0$

ولی جابجاگر زیر به صورت زیر می‌شود:

$$[x_i(t), x_j(0)] = \left[\frac{P_i(t)}{m} t, x_j(0)\right] = \frac{1}{m}(-i\hbar\,\delta_{ij})\, t$$

$$\langle (\Delta x_i)^2 \rangle_t \langle (\Delta x_i)^2 \rangle_{t=0} \geq \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2}$$

بنابراین می‌توان این را برای مدت طولانی نوشت:

یعنی اگر ذره جایگزیده هم که باشد با گذر زمان باز تر می‌شود (حتی مستقل از زمان به توان t^2 خواهد بود) این اتفاق در ذره آزاد

مراقب باشید که تو مدت کوتاه ذره از موج بسته باز نمی‌شود. ولی ... وقتی ... جایگزیده بماند. ولی اگر حالت اولیه

سوج باز باشد، با گذر زمان جمع می‌شود!... ؟ نظریه ... در QFT ... در حالت کلاسیک! ولی منطقی با قانون ...

ندارد؟

- در حالت کلی تر در یک ذره تحت اثر پتانسیل نیز باشد، خواهیم داشت: $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ بنابراین:

$$\frac{d}{dt} p_i = \frac{1}{i\hbar}[p_i, H] = \frac{1}{i\hbar}[p_i, \frac{1}{2m}p^2 + V(x)] = \frac{1}{i\hbar}\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) V(x) = -\frac{\partial V}{\partial x_i}$$

$$\frac{d}{dt} x_i = \frac{1}{i\hbar}[x_i, H] = \frac{1}{i\hbar}[x_i, \frac{1}{2m}p^2 + V(x)] = \frac{1}{i\hbar}\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p_i}\right)\frac{1}{m}p^2 = \frac{1}{m} p_i$$

$$\frac{d^2}{dt^2} x_i = \frac{1}{i\hbar}\left[\frac{dx_i}{dt}, H\right] = \frac{1}{i\hbar}\left[\frac{1}{m}p_i, \frac{1}{2m}p^2 + V(x)\right] = \frac{1}{i\hbar}\frac{1}{m}\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}\right) V(x)$$

بنابراین با ترکیب این معادلات می‌توان معادله‌ای مانند قانون دوم نیوتن را بیان کرد: (فقط در تصویر هایزنبرگ)

شبیه معادله کلاسیک است

$$m \frac{d^2}{dt^2}\vec{x} = \frac{d}{dt}\vec{p} = -\vec{\nabla} V(x)$$

حال اگر بر حسب مقادیر چشمداشتی بنویسیم (فرق ندارد در کدام تصویر باشیم) به معادله‌ای که به قضیه اهرنفست Ehrenfest معروف است:

$$m \frac{d^2}{dt^2}\langle \vec{x} \rangle = \frac{d}{dt}\langle \vec{p} \rangle = -\langle \vec{\nabla} V(x) \rangle$$

- پس دیدیم که یکی از مزیت های ما بیان ساده تصویر هایزنبرگ دیدن شباهت ها و تفاوت های مکانیک کوانتومی با کلاسیک است.

- حال در نمایش ویژه حالت‌های سیستم را در دو تصویر بررسی کنیم که چطور قابل تبدیل به هم دیگر هستند. توجه شود که ویژه حالت‌ها در هر دو تصویر می‌توانند وابسته به زمان باشند ولی در حالت‌های خاص می‌توانند فارغ از زمان هم باشند …

حال یک معادله اساسی اپراتور U را داشتیم بیان می‌کرد، H تحول زمانی U است به صورت: $i\hbar\,\partial_t U(t,t_0) = H\,U(t,t_0)$

در تصویر شرودینگر، در واقع حالت‌ها و پایه‌ها به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\boxed{\begin{aligned} |\alpha,t\rangle_S &= U(t,t_0)|\alpha,t_0\rangle_S \\ A_S(t)\,|a'(t)\rangle_S &= a'(t)\,|a'(t)\rangle_S \end{aligned}}$$

البته توجه شود که ببینید همه نقطه‌ای که سروکار داریم، ket‌ها پایه‌ها و اپراتور مربوطه مستقل از زمان‌اند.

حال برای پیدا کردن تحول زمانی حالت‌ها در تصویر هایزنبرگ، عنصر ماتریسی زیر را بررسی می‌کنیم:

$${}_S\langle\beta,t|A_S(t)|\alpha,t\rangle_S = \underbrace{{}_S\langle\beta,t_0|U^\dagger(t,t_0)}_{={}_H\langle\beta,t|}\ \underbrace{A_S(t)\,U(t,t_0)}_{=A_H(t)}\ \underbrace{|\alpha,t_0\rangle_S}_{=|\alpha,t\rangle_S}$$

بنابراین حالت‌ها به صورت مقابل خواهند شد:

$$\boxed{|\alpha,t\rangle_H = |\alpha,t_0\rangle_H = |\alpha,t_0\rangle_S}$$

برای پیدا کردن تحول زمانی پایه‌ها در تصویر هایزنبرگ، از معادله ویژه مقداری شرودینگر شروع می‌کنیم:

$$A_S(t)\,|a'(t)\rangle_S = a'(t)\,|a'(t)\rangle_S \xrightarrow{\times U^\dagger(t,t_0)} \underbrace{U^\dagger A_S U}_{=A_H}\ \underbrace{U^\dagger|a'(t)\rangle_S}_{=|a'(t),t\rangle_H} = a'(t)\ \underbrace{U^\dagger|a'(t)\rangle_S}_{=|a'(t),t\rangle_H}$$

بنابراین پایه‌ها به دست می‌آید:

$$\boxed{\begin{aligned} A_H\,|a'(t),t\rangle_H &= a'(t)\,|a'(t),t\rangle_H \\ |a'(t),t\rangle_H &= U^\dagger(t,t_0)\,|a'(t)\rangle_S \end{aligned}}$$

توجه شود که ویژه مقادیر دست نخورده باقی مانده‌اند در هر دو تصویر.

+ دامنه‌ی همبستگی ، رابطه‌ی عدم قطعیت انرژی - زمان

- با توجه به اینکه حالت بعد از تحول زمانی چقدر به حالت ابتدایی‌اش شباهت دارد، دامنه‌ی همبستگی را مطابق با ... تعریف می‌کنیم:

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

$$= \sum_{ij} \langle \alpha, t_0 | k_i \rangle \langle k_i | e^{-i(t-t_0)H/\hbar} | k_j \rangle \langle k_j | \alpha, t_0 \rangle$$

$$= \sum_{ij} c_i^{\alpha *}(t_0) \; e^{-i(t-t_0)E_j/\hbar} \, \delta_{ij} \, c_j^{\alpha}(t_0)$$

$$= \sum_i c_i^{\alpha *}(t_0) \, c_i^{\alpha}(t_0) \; e^{-i(t-t_0)E_i/\hbar}$$

در حالتی که پیوسته باشد می‌توان نوشت:

$$C(t) = \int dE \, \rho(E) \, |g(E)|^2 \, e^{-i(t-t_0)(E-E_0)/\hbar} \; e^{-i(t-t_0)E_0/\hbar}$$

بنابراین واضح است که عبارت فوق یک تبدیل فوریه است بین t و E بنابراین به طور مشابه رابطه‌ی عدم قطعیت خواهیم داشت : $\Delta E \, \Delta t \simeq \hbar$

از مثال سیستم نیز می‌توان گفت که رابطه‌ی عدم قطعیت دارد ، در مقادیر بالای زمان

با پاسخ انتگرال صفر خواهد شد در حوالی $\Delta t \, \Delta E \sim \hbar$ ها باشد که غیر صفر باشد.

- نوسانگر هماهنگ ساده.

- به علت اهمیت این مثال خاص هم از نظر آموزشی هم از نظر کاربرد در مباحث بسیار زیاد فیزیک، درک خواص و ویژگی‌های نوسانگر ساده مهم است.

در واقع همیلتونی مورد نظر را می‌نویسیم: $H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}kx^2=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$

- برای پیدا کردن این جواب‌ها یا ویژه مقادیر و ویژه توابع H، به دو روش می‌توان عمل کرد: (1) معادله دیفرانسیل را به روش عادی حل کرد (2) از روش جبری با روش اپراتورها حل کرد. در اینجا روش دوم مد نظر ما است که مطالب آموزنده‌ای را در بر دارد. بنا به این راه‌یافت

همیلتونی را به صورت زیر بازنویسی می‌کنیم:

$$H=\hbar\omega\left(\frac{p^2}{2m\hbar\omega}+\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)=\hbar\omega\left\{\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x-\frac{ip}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\right)\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x+\frac{ip}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\right)-i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\overbrace{[x,p]}^{=i\hbar}\right\}$$

با با تعریف زیر خواهیم داشت:

$$a=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x+\frac{ip}{m\omega}\right),\quad a^\dagger=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x-\frac{ip}{m\omega}\right).$$

$$H=(\underbrace{a^\dagger a}_{\equiv N}+\tfrac{1}{2})\hbar\omega=(N+\tfrac{1}{2})\hbar\omega$$

- همینطور $a^\dagger a\equiv N$ را تعریف می‌کنیم. لازم به ذکر است که $a^\dagger$ بالا برنده یا خلق است و a پایین آورنده یا فنا کننده است و البته N شمارنده است.

- یکی از خصوصیات مشخص N، $[N,H]=0$ است. و البته رابطه جابجایی a و $a^\dagger$ به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$[a,a^\dagger]=\left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x+\frac{ip}{\sqrt{2m\hbar\omega}},\ \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x-\frac{ip}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\right]=\frac{-i}{2\hbar}\overbrace{[x,p]}^{=i\hbar}+\frac{i}{2\hbar}\overbrace{[p,x]}^{=-i\hbar}=1$$

- یکی دیگر از خصوصیات N، علاوه به جابجایی با H، هرمیتی بودن آن است که با تعریف $N=a^\dagger a$ واضح است، لذا: $N|n\rangle=n|n\rangle$

که چون N هرمیتی است، n ها نیز حقیقی خواهند بود.

- با توجه به خصوصیات بالای N، می‌توان گفت که به جای دنبال ویژه توابع و مقادیر H بودن می‌توان به دنبال ویژه توابع و مقادیر N بود.

همچنین روابط جابجایی زیر مفید است:

$$[N,a]=[a^\dagger a, a]=a^\dagger\overbrace{[a,a]}^{=0}+[a^\dagger,a]a=-a$$

$$[N,a^\dagger]=[a^\dagger a, a^\dagger]=a^\dagger[a,a^\dagger]+\overbrace{[a^\dagger,a^\dagger]}^{=0}a=a^\dagger$$

— با اثر N روی $a|n\rangle$ و $a^\dagger|n\rangle$ می‌توان دید که a, $a^\dagger$ به ترتیب پایین و بالا می‌برند:

$$N\,a|n\rangle=(\overbrace{[N,a]}^{-a}+aN)|n\rangle=a(N-1)|n\rangle=(n-1)\,a|n\rangle \xrightarrow{\text{با توجه}} a|n\rangle=c|n-1\rangle$$

$$N\,a^\dagger|n\rangle=([N,a^\dagger]+a^\dagger N)|n\rangle=a^\dagger(N+1)|n\rangle=(n+1)\,a|n\rangle \longrightarrow a^\dagger|n\rangle=d|n+1\rangle$$

حال با بهنجارسازی می‌توان c و d را پیدا کرد:

$$\langle n-1|n-1\rangle=1 \rightarrow \langle n|\frac{a^\dagger}{c^*}\frac{a}{c}|n\rangle=1 \rightarrow \frac{n}{|c|^2}\langle n|n\rangle=1 \rightarrow c=\sqrt{n}$$

$$\langle n+1|n+1\rangle=1 \rightarrow \langle n|\frac{a}{d^*}\frac{a^\dagger}{d}|n\rangle=1 \rightarrow \frac{1}{|d|^2}\langle n|[a,a^\dagger]+a^\dagger a|n\rangle=\frac{n+1}{|d|^2} \rightarrow d=\sqrt{n+1}$$

بنابراین داریم:

$$a|n\rangle=\sqrt{n}\,|n-1\rangle \qquad , \quad a^\dagger|n\rangle=\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$$

نکته قابل توجه در مورد N این است که علاوه بر اینکه چون هرمیتی است ویژه‌مقادیرش باید حقیقی باشد، باید غیرمنفی نیز باشد. زیرا ویژه‌مقادیر a, $a^\dagger$، متناسب با رادیکال است:

$$n=\langle n|N|n\rangle=\langle n|a^\dagger\,a|n\rangle \geqslant 0$$

— یکی دیگر از خصوصیات N این است که ویژه‌مقادیرش تماماً اعداد صحیح هستند؛ برای نشان دادن این فرض خلف را به این صورت در نظر می‌گیریم که n، صحیح نباشد. بنابراین:

"جزء صحیح"

$$a^{\widetilde{[n]}+1}|n\rangle=\sqrt{n}\;a^{[n]}|n-1\rangle=\sqrt{n}\sqrt{n-1}\;a^{[n]-1}|n-2\rangle=\cdots$$

$$=\sqrt{n(n-1)\cdots(n-[n]+1)}\;\;a\,|n-[n]\rangle$$

حال اگر فرض خلف را در نظر بگیریم $n\neq[n]$ باشد. لذا:

$$a|n-[n]\rangle=\sqrt{n-[n]}\;\underbrace{|n-[n]+1\rangle}_{\text{این یک مقدار منفی است!}} \qquad \times$$

پس فرض خلف باطل و حکم صادق است.

- بنابراین ویژه‌مقادیر N، اعدادی حقیقی، غیرمنفی و صحیح هستند. و این با این شرط که یک حالت کف داشته باشیم

به حالت پایه معروف است:

$$a|0\rangle = 0$$

و به همین صورت بالا بردن برای:

$$a^+|0\rangle = \sqrt{1}\,|1\rangle \quad \text{و} \quad (a^+)^2|0\rangle = \sqrt{2}\,|2\rangle, \ldots$$

به عبارتی حالت‌های $|n\rangle$ را می‌توان از حالت پایه به صورت زیر ساخت:

$$|n\rangle = \frac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$$

- بنابراین ویژه مقادیر را بدست آوریم:

$$H|n\rangle = (N+\tfrac{1}{2})\hbar\omega|n\rangle = (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega\,|n\rangle$$

که چون حالت پایه داریم، $n=0$ حالت پایه است که به صورت مقابل است.

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

- مقدار آن بدست آورد:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(a+a^+) \quad , \quad p = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\,(a^+-a)$$

- هدف بعدی ما تعیین ویژه توابع است. با استفاده ابتدا، اثر x، p را روی $|n\rangle$ می‌بینیم:

$$x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(a+a^+)|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n}\,|n-1\rangle + \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle\right)$$

$$p|n\rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\,(-a+a^+)|n\rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(-\sqrt{n}\,|n-1\rangle + \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle\right)$$

عناصر ماتریس را نیز به صورت زیر نگاه می‌کنیم:

$$\langle n'|x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n}\,\delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1}\right) \quad , \quad \langle n|x|n\rangle = 0$$

$$\langle n'|p|n\rangle = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\; i\left(-\sqrt{n}\,\delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1}\right) \quad , \quad \langle n|p|n\rangle = 0$$

برای پیدا کردن ویژه توابع از حالت پایه شروع می‌کنیم.

$$a|0\rangle = 0 \rightarrow \langle x'|a|0\rangle = 0 \rightarrow \langle x'|\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x + \frac{ip}{\sqrt{2m\hbar\omega}}|0\rangle = 0$$

$$\rightarrow \left\{\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x' + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\left(-i\hbar\frac{d}{dx'}\right)\right\}\langle x'|0\rangle = 0 \rightarrow \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left[x' + \underbrace{\frac{\hbar}{m\omega}}_{=x_0^2}\frac{d}{dx'}\right]\psi_0(x') = 0$$

حالت طبیعی است

— تابع معادله بنیادی با آن شکل معلوم است!

$$\psi_0(x') = \frac{e^{-\frac{x'^2}{2x_0^2}}}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}}$$

— توجه شود که ابزار ریاضیاتی معادله دیفرانسیلی مرتبه دوم را که داشتیم آسان‌تر کرد به عبارتی از مرتبه دوم به اول تقلیل یافت.

— بنابراین حالت‌های بالاتر را نیز می‌توان با عمل a^+ به دست آورد. توجه شود که حالت‌ها توابع به ترتیب زوج و فرد هستند.

$$\psi_1(x') = \langle x'|1\rangle = \langle x'|a^+|0\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}x_0}\right)\left(x' - x_0^2\frac{d}{dx'}\right)\langle x'|0\rangle.$$

$$\vdots$$

$$\psi_n(x') = \langle x'|n\rangle = \langle x'|(a^+)^n|0\rangle = \left(\frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{2^n n!}}\right)\left(\frac{1}{x_0^{n+\frac{1}{2}}}\right)\left(x' - x_0^2\frac{d}{dx}\right)^n \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x'}{x_0}\right)^2\right]$$

— به همان ترتیب می‌توان به دست آورد:

$$x^2 = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)(a^2 + a^{+2} + a^+a + aa^+).$$

— لذا مقادیر چشمداشتی x^2، p^2 را نیز می‌توان بیان کرد در حالت پایه:

$$\langle 0|x^2|0\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} = \frac{x_0^2}{2}$$

$$\langle 0|p^2|0\rangle = \frac{\hbar m\omega}{2}$$

— به طور مشابه، رابطه عدم قطعیت را نیز به صورت زیر می‌نویسیم در حالت پایه:

$$\langle(\Delta x)^2\rangle_0 = \langle x^2\rangle_0 - \cancel{\langle x\rangle_0}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

$$\langle(\Delta p)^2\rangle_0 = \langle p^2\rangle_0 - \cancel{\langle p\rangle_0}^2 = \frac{\hbar m\omega}{2}$$

لذا داریم:

$$\langle(\Delta x)^2\rangle_0 \langle(\Delta p)^2\rangle_0 = \frac{\hbar}{4}.$$

برای حالت‌های برانگیخته نیز می‌توان نوشت:

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p)^2\rangle = \left(n+\frac{1}{2}\right)^2\hbar^2$$

- مقدار چشمداشتی انرژی پتانسیل و جنبشی به حالت پایه نیز مطلوب است:

$$\langle 0|K(p)|0\rangle = \langle 0|\frac{p^2}{2m}|0\rangle = \frac{1}{4}\hbar\omega = \frac{E_0}{2}$$

$$\langle 0|V(x)|0\rangle = \langle 0|\frac{1}{2}m\omega^2x^2|0\rangle = \frac{1}{4}\hbar\omega = \frac{E_0}{2}$$

متوسط انرژی‌های جنبشی و پتانسیل یکسان شده و هر کدام برابر نصف انرژی کل، E_0، حالت است. و این حالت ناشی از قضیه ویریال است.

+ عملگر پاریته

- عملگر را به صورت مقابل تعریف می‌کنیم:

$$\Pi f(x) = f(-x)$$

که در آن:

$$\Pi^2 f(x) = \Pi f(-x) = f(x) \rightarrow \Pi^2 = 1$$

- ویژه مقادیر آن نیز به صورت مقابل است اگر ویژه توابع زوج یا فرد باشند:

$$\Pi \psi_\pm(x) = \psi_\pm(-x) = \pm\psi_\pm(x).$$

- در صورتی که $V(x)$ یک تابع زوج باشد عملگر H و Π می‌توانند جابجا شوند و لذا ویژه توابع مشترک خواهند داشت:

$$[\Pi, H] = [\Pi, \frac{p^2}{2m} + V(x)] = 0$$

+ تحول زمانی نوسانگر

- حال با داشتن ویژه توابع و ویژه مقادیر هامیلتونی می‌توان در مورد تحول زمانی حالت‌ها و یا مشاهده‌پذیرهایی مانند x و p بحث کرد.

در واقع تا اینجا فرض شده بود در یک لحظه خاص مانند $t_0=0$ که عملگرها در تصویر شرودینگر ثابت هستند، هستیم.

حال در ادامه با تصویر هایزنبرگ تحول این سیستم را مورد بررسی قرار خواهیم داد. به این معنی که x, p, a, $a^\dagger$, ... وابسته به زمان اند.

$$\frac{dP}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[P,H]+\cancel{\frac{\partial P}{\partial t}}=\frac{1}{i\hbar}\left[P,\frac{P^2}{2m}+V(x)\right]=\frac{1}{i\hbar}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)V(x) \quad \text{(I)}$$

$$=-\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)=m\omega^2x$$

$$\frac{dx}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[x,H]=\frac{1}{i\hbar}\left[x,\frac{P^2}{2m}+V(x)\right]=\frac{1}{i\hbar}\left(i\hbar\frac{d}{dp}\right)\frac{P^2}{2m}=\frac{1}{m}P \quad \text{(II)}$$

$$\frac{d^2x}{dt^2}=\frac{1}{m}\frac{dP}{dt}=\frac{1}{m}(-m\omega^2x)=-\omega^2x. \quad \text{(III)}$$

از معادله دیفرانسیل فوق می‌توان به صورت زیر نوشت :

$$x(t)=A\cos(\omega t)+B\sin(\omega t)$$

$$=x(0)\cos(\omega t)+B\sin(\omega t)$$ با توجه به اینکه $x(t=0)=x(0)$:

$$=x(0)\cos(\omega t)+\frac{1}{m\omega}P(0)\sin(\omega t)$$ با توجه به اینکه $\frac{dx}{dt}=\frac{1}{m}P$ ... :

از طرف دیگر می‌توان با توجه به $P(t)=m\frac{dx}{dt}$ نوشت :

$$P(t)=-m\omega x(0)\sin(\omega t)+P(0)\cos(\omega t)$$

$$\frac{da}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[a,H]=\frac{1}{i\hbar}\left[a,\left(a^{\dagger}a+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\right]=\frac{1}{i\hbar}\overbrace{[a,a^{\dagger}]}^{=1}a\hbar\omega=-i\omega a. \quad \text{(IV)}$$

و البته می‌توان نوشت ; (V)

$$\frac{da^{\dagger}}{dt}=i\omega a^{\dagger}$$

بنابراین از معادلات دیفرانسیل (IV) و (V) نیز می‌توان نوشت :

$$a(t)=a(0)e^{-i\omega t}$$

$$a^{\dagger}(t)=a^{\dagger}(0)e^{i\omega t}$$

از دو معادله بالا نتیجه می‌توان دید که $G(t)$ نیز مانند H، مستقل از زمان است.

— برای پیدا کردن تحول یک اپراتور مثل $A(t)$، از لم بیکر - هاوسدورف نیز می‌توان استفاده کرد:

$$A(t) = \exp(iG\lambda).A(0)\exp(-iG\lambda) = A(0) + i\lambda[G, A(0)] + \left(\frac{i^2\lambda^2}{2!}\right)[G,[G,A(0)]]$$
$$+\cdots+\left(\frac{i^n\lambda^n}{n!}\right).[G,[G,[G,\ldots[G,A(0)]]]\ldots]+\cdots$$

— بنابراین الان آماده هستیم که در صورت داشتن حالت اولیه تحول سیستم را بررسی کنیم.

— به عنوان مثال اگر حالت اولیه (در دو تصویر یکسان است و البته در هایزنبرگ حالت تحول ندارد)، یکی از ویژه توابع H باشد:

$$|\alpha, t_0\rangle_{S,H} = |\alpha, t\rangle_H = |n\rangle$$

$$|\alpha, t_0; t\rangle = e^{-iHt/\hbar}|n\rangle = e^{-iE_nt/\hbar}|n\rangle$$ تحول زمانی مطلوب است!!

به جز صورت مقادیر چشم‌داشتی x, p مطلوب است!!

$${}_S\langle\alpha, t_0; t|x_S|\alpha, t_0; t\rangle_S = {}_S\langle\alpha, t_0|e^{iHt/\hbar}x_S e^{-iHt/\hbar}|\alpha, t_0\rangle_S$$
$$= \langle n|e^{iE_nt/\hbar}x_H e^{-iE_nt/\hbar}|n\rangle = 0$$

$${}_S\langle\alpha, t_0; t|P_S|\alpha, t_0; t\rangle_S = 0$$

چون در مورد حالت‌های $|n\rangle$ که حالت‌های مانا هستند ویژه مقادیر را حساب کردیم، مقادیر چشم‌داشتی صفر هستند؛ در صورتی که

حالت متفاوت داشته باشیم تحول را خواهیم دید که مقادیر چشم‌داشتی غیر صفر هستند.

— به عنوان آخرین مثال که مقادیر چشم‌داشتی نیز عینه روابط معادله کلاسیک باشد (نوسانگر) حالت‌های

همدوس را به صورت زیر در نظر بگیریم که به صورت زیر هستند!

$$\psi_\lambda(x') = \langle x'|\lambda\rangle = \langle x'|e^{-ip\ell/\hbar}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\,x_0}}\, e^{-\frac{1}{2}\frac{(x'-\ell)^2}{x_0^2}}$$

که در آن، $\lambda = \ell\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} = \frac{\ell}{\sqrt{2}\,x_0}$ است. لذا مقادیر چشم‌داشتی به صورت زیر به دست می‌آیند:

$$\langle\lambda|x(t)|\lambda\rangle = \ell\cos\omega t \quad , \quad \langle\lambda|p(t)|\lambda\rangle = -\ell m\omega\sin\omega t.$$

— معادله موج شرودینگر.

— معادله بنیادی‌ای که به دست آوردیم به صورت مقابل بود. که با در نظر گرفتن $H=\frac{p^2}{2m}+V(x)$ به صورت زیر می‌شود:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha,t\rangle = \left\{\frac{p^2}{2m}+V(x)\right\}|\alpha,t\rangle$$

هر دو طرف با اعمال $\langle x'|$ از چپ داریم:

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

بنابراین معادله (۱) منجر به معادله‌ای به زبان شرودینگر به صورت زیر می‌شود:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_\alpha(x',t) = \left\{-\frac{\hbar^2\nabla'^2}{2m}+V(x')\right\}\psi_\alpha(x',t)$$

لذا انتظار می‌رود با داشتن پتانسیل و حل معادلات فوق ψ_α معلوم شود.

— در صورتی که $V=V(x)$ هیچ وابستگی زمانی نداشته باشد با جداسازی متغیرها معادله را به دو معادله مجزا شکافت تا آنچه حاصل

با در نظر گرفتن $\psi_\alpha(x',t)=u_\alpha(x')T_\alpha(t)$ می‌رسیم:

$$u_\alpha(x')\, i\hbar\frac{d}{dt}T_\alpha(t) = T_\alpha(t)\left\{-\frac{\hbar^2\nabla'^2}{2m}+V(x')\right\}u_\alpha(x')$$

توجه شود که در صورتی که $V(x,t)=X(x)T(t)$ نیز باشد می‌توان جداسازی کرد و به دو معادله شکافت:

حال با ضرب طرفین به $\frac{1}{u_\alpha(x')T_\alpha(t)}$ می‌توان نوشت:

$$i\hbar \frac{1}{T_\alpha(t)}\frac{d}{dt}T_\alpha(t) = \frac{1}{u_\alpha(x')}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'^2 + V(x')\right]u_\alpha(x')$$

واضح است که طرفین معادله فوق به علت مستقل بودن متغیرها مربوطه، از هم مستقل هستند لذا انتظار می‌رود هر دو سمت برابر یک عدد ثابت موسوم به "ثابت جدایی" باشند که همان مقدار انرژی E را نشان می‌دهد. لذا:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}T_E(t) = -\frac{i}{\hbar}E\,T_E(t) \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'^2 + V(x')\right]u_E(x') = E\,u_E(x') \end{cases}$$

پاسخ به حل در معادله فوق که به حرکت زمانی "موسوم به قسمت مستقل از زمان" می‌انجامد، که البته واضح است که جواب قسمت زمانی به صورت ذیل است:

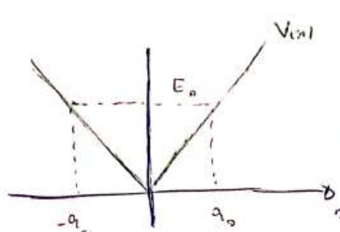
$$T_E(t) = e^{-iEt/\hbar}$$

ولی پاسخ قسمت مستقل از زمان متناسب با $V(x)$ سامانه حل می‌گردد که در واقع همان ویژه توابع هامیلتونی هستند:

$$H\,|k'\rangle = E\,|k'\rangle$$

+ چاه پتانسیل مثلثی (پتانسیل خطی)

- برای حالتی که پتانسیل به صورت مقابل داده شده است مفاهیم ویژه توابع و مقادیر را برآورد کنیم: $V(x) = K|x|$



+ با توجه به اینکه پتانسیل مقید است، انتظار داریم ویژه مقادیر گسسته باشند.

+ همینطور انتظار داریم چون توان x، یک است، (کمتر از نوسانگر که توان دو است) ویژه مقادیر به ترازهای بالاتر که می‌روند کاهش یابند فاصله شان (هرچه توان x بالا برود، فاصله بین ترازها بیشتر می‌شود)

+ با توجه به اینکه این پتانسیل زوج است، می‌توان از پاریته استفاده کرد و صرفاً یک طرف را حل کرد و ویژه‌تابع‌ها را داد و سپس به هم وصل کرد.

معادله ویژه مقداری ما به صورت روبرو نوشته می‌شود:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx'^2}+k|x'|\right)u_E(x')=E\,u_E(x')$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2mk}\frac{d^2}{dx'^2}+x'\right)u_E(x')=E\,u_E(x')$$

حال با تعریف $x_0'^3=\frac{\hbar^2}{mk}$:

$$\left(-\frac{x_0'^2}{2}\frac{d^2}{dx'^2}+\frac{x'}{x_0'}\right)u_E(x')=\frac{E}{kx_0'}u_E(x')$$

و با در نظر گرفتن $y=\frac{x'}{x_0'}$ و تعریف $\varepsilon=\frac{E}{kx_0'}=\frac{E}{E_0'}$:

$$\left[\frac{1}{2^{1/3}}\frac{d^2}{dy^2}-2^{1/3}(y-\varepsilon)\right]u_E(y)=0$$

یک تغییر متغیر دیگر انجام می‌دهیم به صورت $z=2^{1/3}(y-\varepsilon)$ بنابراین:

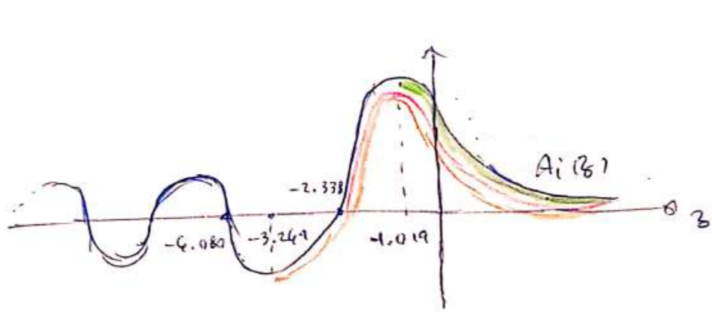
$$\left[\frac{d^2}{dz^2}-z\right]u_E(z)=0$$

توجه شود که در نقطه برگشت کلاسیکی، یعنی $E=ka$ در $x=a$، $z=0$ است زیرا آنجا $y=\varepsilon$ باشد یعنی $E=ka$.
و همینطور در $x=0$، $y=0$ است بنابراین $z=-2^{1/3}\varepsilon$ خواهد بود.

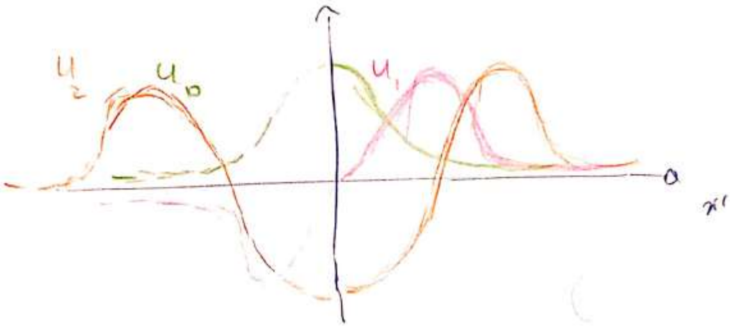
پاسخ معادله فوق، توابع ایری (Airy) هستند که به صورت مقابل نمایش داده می‌شوند:

$$u(z)=a\,A_i(z)+b\,B_i(z)$$

توجه شود که چون پتانسیل ما متقارن است، لذا جوابی را که واگرا می‌شود را کنار می‌گذاریم، قسمت $B_i(z)$ نیز از سمت راست واگرا می‌شود لذا $b=0$ را انتخاب می‌کنیم و فقط نوع اول توابع Airy را نگه می‌داریم.



توجه شود که ویژه توابع به صورت زیر به دست می‌آیند از روی تابع ایری، شکل جاهایی که خود و مشتق صفر شوند،
چون طبق شرط مرزی باید در $x=0$ صفر شود و مشتق نیز صفر شود. که در $x=0$ ها $z_n^{center}=-2^{\frac{1}{3}}\varepsilon_n$
هاست و به عبارتی باید در این‌ها $A_i(z_n^{center})$, $A_i'(z_n^{center})$ صفر باشند. که از روی شکل تابع که رسم شد
مشخص است. بنابراین ویژه توابع و ویژه مقادیر مشخص‌اند:



ویژه مقادیر نیز به صورت مقابل مشخص می‌شوند:

$$z_0^{center} = -1.019 \to -2^{1/3}\varepsilon_0 = -1.019 \to -2^{1/3}\left\{\frac{E_0}{(\hbar^2 k^2/m)^{1/3}}\right\} = -1.019$$

بنابراین:

$$E_0 = 1.019\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)^{1/3}$$

به همین صورت:

$$E_1 = 2.338\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)^{1/3}$$

+ تفسیر تابع موج

— مقدار چشمداشتی یک اپراتور دلخواه در حالت α بعد از تحول در زمان t به صورت زیر است: (مثلاً در فضای مکان تغییر را در نظر دارد)

$$\langle \alpha, t_0; t | A(x,p) | \alpha, t_0; t\rangle = \int d^3x' \langle \alpha, t_0; t | x'\rangle \langle x' | A(x,p) | \alpha, t_0; t\rangle$$

$$= \int d^3x' \langle \alpha, t_0; t | x'\rangle A(x', -i\hbar\nabla') \langle x' | \alpha, t_0; t\rangle$$

$$= \int d^3x' \; \psi_\alpha^*(x', t) \, A(x', -i\hbar\nabla) \, \psi_\alpha(x, t)$$

بنابراین می‌توان از $d^3x\,\psi^*(\vec{x},t)\,\psi(\vec{x},t)$ تعبیر احتمال کرد به طوری که احتمال پیدا شدن ذره در d^3x با مرکزیت $\vec{x}$ و در زمان t را به ما می‌دهد. لذا با این تعبیر انتظار داریم: $\|\psi\|^2 = \int |\psi(\vec{x},t)|^2 d^3x = \int \psi^*\psi\, d^3x$

— حال به دنبال معادله پایستگی هستیم. به این منظور یک بار معادله شرودینگر وابسته به زمان و یک بار مزدوج آن را می‌نویسیم و طرفین آنها را در ψ^* و ψ به ترتیب ضرب کرده و از یکدیگر کم می‌کنیم. بنابراین با در نظر گرفتن پتانسیل به صورت کلی (مختلط) خواهیم داشت:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*\right) + (V - V^*)\psi\psi^*$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\left(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right) + (V - V^*)\psi\psi^*$$

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)}_{=\rho(x,t)\ \text{چگالی احتمال}} + \vec{\nabla}\cdot\underbrace{\left[-\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*\right)\right]}_{=\vec{j}(x,t)\ \text{جریان}} = -\frac{i}{\hbar}(V - V^*)\psi\psi^*$$

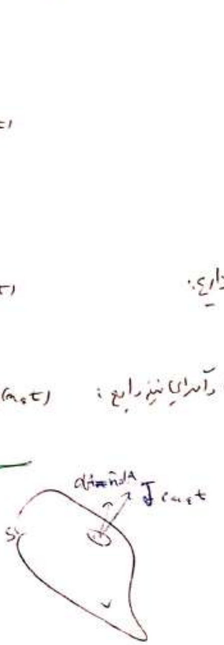
$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{x},t) + \vec{\nabla}\cdot\vec{j} = -\frac{i}{\hbar}\underbrace{\left[V(\vec{x}) - V^*(\vec{x})\right]}_{=2\,\mathrm{Im}[V(x)]}\rho(\vec{x},t)$$

با انتگرال‌گیری داریم:

$$\int d^3x\,\frac{\partial\rho(\vec{x},t)}{\partial t} = \int d^3x\,\nabla\cdot\vec{j} + \frac{2}{\hbar}\int d^3x\,\mathrm{Im}[V(x)]\,\rho(x,t)$$

با توجه به قضیه دیورژانس نیز داریم:

$$\underbrace{\frac{d}{dt}\int_V d^3x\,\rho(x,t)}_{\text{احتمال}} = \underbrace{-\oint_S \vec{j}(x,t)\cdot d\vec{A}}_{\text{شار و جریان}} + \underbrace{\frac{2}{\hbar}\int_V d^3x\,\mathrm{Im}[V(x)]\,\rho(x,t)}_{\text{آهنگ تولید ذره}}$$



— توجه شود که مکانیک کوانتومی $\hbar$ کار با پتانسیل‌هایی که تولید ذره دارند ابزار مناسبی ندارد. لذا معمولاً این بحث در میدان‌های کوانتومی بررسی می‌کنیم. ولی می‌توان به صورت دستی بعضی مواقع پتانسیل را طوری مختلط در نظر گرفت و اثر تولید ذره (حالا) را بدهد.

- به طوری که پتانسیل حقیقی باشد (قسمت موهومی نداشته باشد)، می‌توان به دست آورد:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \nabla \cdot \vec{j} = 0$$

- به طور کلی تابع موج کلی که به صورت مقابل نمایش می‌دهیم می‌توان جریان را به صورت زیر حساب کرد:

$$\psi_\alpha(\vec{x},t) = \sqrt{\rho_\alpha(\vec{x},t)}\, e^{\frac{i}{\hbar} S_\alpha(\vec{x},t)}$$

که در آن $\rho = \psi^*\psi$ و $\rho_\alpha, S_\alpha \in \mathbb{R}$ است.

$$\vec{j}(\vec{x},t) = \mathrm{Re}\left\{ \sqrt{\rho}\, e^{-iS/\hbar} \frac{-i\hbar\nabla}{m}\left(\sqrt{\rho}\, e^{iS/\hbar}\right) \right\}$$

$$= \mathrm{Re}\left\{ \sqrt{\rho}\, e^{-iS/\hbar} \frac{i\hbar}{m}\left(\frac{\nabla\rho}{2\sqrt{\rho}} + \sqrt{\rho}\,\frac{i}{\hbar}\nabla S \right) e^{iS/\hbar} \right\} = \frac{1}{m}\rho(\vec{x},t)\,\vec{\nabla} S(\vec{x},t)$$

$$= \frac{1}{m}\psi^*(x,t)\,(\vec{\nabla}S)\,\psi(x,t)$$

به عنوان مثال برای تابع موج تخت که به صورت مقابل است، جریان را به دست می‌آوریم:

$$\psi(x,t) = \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(p x - Et)}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

$$\vec{J}(x,t) = \frac{1}{m}\psi^*(x,t)\left(-i\hbar\nabla\right)\psi(x,t)$$

— تقریب نیمه‌کلاسیک (WKB)

- معادله شرودینگر مستقل از زمان را به صورت زیر بازنویسی می‌کنیم:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{x})\right]u_E(\vec{x}) = E\,u_E(\vec{x})$$

$$\underbrace{-\hbar^2\frac{d^2}{dx^2}}_{=p^2} u_E(\vec{x}) = 2m[E - V(\vec{x})]\,u_E(x)$$

به جای p^2 می‌توان نوشت: $p^2 = 2m[E - V(x)]$.

- برای ذره آزاد که $V(x) = 0$ است، می‌توان از معادله دیفرانسیل فوق به دست آورد:

$$u_E(x) = N e^{\pm\frac{i}{\hbar}p.x}$$

و اگر پتانسیل کند تغییر باشد، معمولاً انتظار داریم معادله به صورت مقابل پاسخ داشته باشد:

$$u_E(x) = e^{\frac{i}{\hbar}W(x)}$$

حال با جایگذاری در معادله دیفرانسیل خواهیم داشت:

$$-\hbar^2\frac{d}{dx}\left(\frac{i}{\hbar}\frac{dW}{dx}e^{iW/\hbar}\right) = p^2_{(x)}\,e^{iW/\hbar}$$

$$-\hbar^2\frac{i}{\hbar}\left\{\frac{d^2W}{dx^2} + \frac{i}{\hbar}\left(\frac{dW}{dx}\right)^2\right\}e^{iW/\hbar} = p^2_{(x)}\,e^{iW/\hbar}$$

$$-i\hbar\,W''_{(x)} + W'^2_{(x)} = p^2_{(x)}$$

$$-i\hbar\,W''_{(x)} + W'^2_{(x)} = 2m[E - V(x)]$$

حال برای اینکه تقریب کلاسیک برقرار باشد، از $\hbar$ های کوچک چشم‌پوشی کنیم، عبارتی که ... باید نسبت به $\hbar$ از مرتبه بالاتری باشد تا تقریب‌مان را با اعتبار باشد. برای اینکه بتوان محاسبات انجام داد، $W(x)$ را نسبت به $\hbar$ بسط می‌دهیم:

$$W(x) = W_0(x) + \hbar W_1(x) + \hbar^2 W_2(x) + \dots$$

حال با جایگذاری خواهیم داشت:

$$-i\hbar(W_0'' + \hbar W_1'' + \dots) + (W_0' + \hbar W_1' + \dots)^2 = p^2_{(x)}$$

$$-i\hbar(W_0'' + \hbar W_1'' + \dots) + (W_0'^2 + 2\hbar W_0' W_1' + \dots) = p^2_{(x)}$$

به ازای مرتبه صفر $\hbar$:

$$W_0'^2(x) = P^2(x) \to W_0(x) = \pm\int^x P(x')\,dx' + C'_\pm$$

به مرتبه اول $\hbar$:

$$iW_0'' + 2W_0'W_1' = 0 \to W_1(x) = \frac{P'}{2P} = \frac{i}{2}\ln|P(x)| + D'$$

بنابراین اگر به مراتب صفر و اول $\hbar$ اکتفا کنیم می‌توان تقریب نیمه‌کلاسیک حاصل که موسوم به WKB است را نوشت:

$$u_{WKB}(x) \simeq \exp\left\{ \frac{i}{\hbar}\left[\pm\int^x P(x')\,dx' + C'_\pm + \frac{i}{2}\hbar\ln|P(x)| + \hbar D' \right]\right\}$$

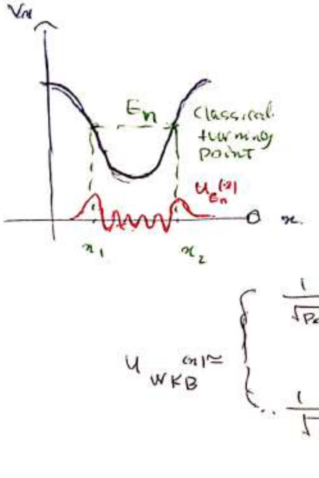
$$= \frac{C_\pm}{\sqrt{|P(x)|}} \exp\left[\pm\frac{i}{\hbar}\int^x P(x')\,dx\right]$$

$$= \frac{C_\pm}{\sqrt{|P(x)|}} \exp\left[\pm i\,\varphi(x)\right]$$

در حالت مقید:

- توجه شود تا زمانی که $V < E$ است، P حقیقی است ولی با نفوذ در پتانسیل یعنی $V > E$، حالت موهومی می‌شود:

$$P(x) = \pm\sqrt{2m[E - V(x)]} = \pm i\sqrt{2m(V-E)} = \pm i|P(x)|.$$



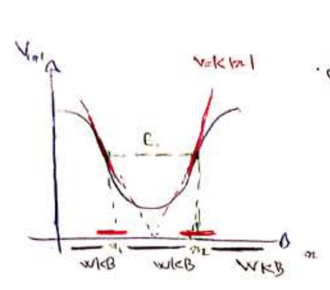
در واقع این اتفاق در نفوذ از دیوار پتانسیل می‌افتد. بنابراین ± یعنی سمت

بخواهیم تقریب تابع موج نیمه‌کلاسیکی را بنویسیم می‌شود:

$$u_{WKB}(x) \simeq \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{P(x)}}\left(C_+ e^{i\varphi(x)} + C_- e^{-i\varphi(x)}\right) & ; \quad x_1 < x < x_2 \\[2ex] \dfrac{1}{\sqrt{P(x)}}\left(C\, e^{|\varphi(x)|} + D\, e^{-|\varphi(x)|}\right) & ; \quad x < x_1 \text{ or } x_2 < x \end{cases}$$

شرط اینکه بتوانیم در حالت مقید بهنجار کنیم، جمله‌ای که واگرا می‌شود را باید صفر کنیم یعنی $C = 0$ می‌شود.

- حال می‌رسیم به نواحی‌ای که $E=V(x)$ است، $P(x)=0$ است بنابراین پاسخ WKB دارای اعتبار نخواهد بود.



برای این نواحی باید تقریب قبلی (پتانسیل خطی) را که پاسخ هایش توابع ایری بودند را به کار ببریم.

با فرض $\alpha=\left[\frac{2mV'(0)}{\hbar^2}\right]^{1/3}$ می‌توان نوشت:

$$u_{patch}(x)=aA_i(\alpha x')+bB_i(\alpha x')$$

که در واقع:
$$P(x')=\sqrt{2m[E-E-V'(0)x']}=\sqrt{\hbar^2\alpha^3(-x')}=\hbar\alpha^{3/2}\sqrt{-x'}$$

- حال برای تکمیل جواب از سمت داخل و خارج باید وصله پینه‌کاری انجام (را) با تقریب‌های گفته شده جدا جدا به راحتی در نظر بگیریم:

+ برای نواحی خارج یعنی $x-x_2>0$ با تقریب‌های بالا که $\int_0^{x'}P(x'')dx''=\hbar\alpha^{3/2}\int_0^{x'}\sqrt{x'}=\frac{2}{3}\hbar(\alpha x')^{3/2}$ لذا:

$$u_{WKB}(x')\simeq\frac{D}{\sqrt{\hbar\alpha^{3/2}}\,x'^{1/4}}\exp\left[-\frac{2}{3}(\alpha x')^{3/2}\right]$$

در تقریب پتانسیل خطی نیز چون $\hbar$ متناسب کوچک نسبت به سیستم است می‌توان گفت α خیلی بزرگ است لذا $z=\alpha x\gg 1$:

$$u_{patch}(x)\simeq\frac{a}{2\sqrt{\pi}(\alpha x')^{1/4}}e^{-2/3(\alpha x')^{3/2}}+\frac{b}{\sqrt{\pi}(\alpha x')^{1/4}}e^{2/3(\alpha x')^{3/2}}$$

حال در اینجا وصله پینه‌کاری مانند الگوی آن وصله است که با مقایسه دو جواب فوق می‌توان گفت باید:

$$b=0\ ,\quad a=\sqrt{\frac{4\pi}{\hbar\alpha}}\,D$$

+ برای نواحی داخلی یعنی $x-x_2<0$ نیز داریم:

$$u_{WKB}(x')\simeq\frac{1}{\sqrt{\hbar\alpha^{3/2}}(-x')^{1/4}}\left[C_+e^{i\frac{2}{3}(-\alpha x')^{3/2}}+C_-e^{-i\frac{2}{3}(-\alpha x')^{3/2}}\right]$$

با قسمت تقریب فرض شده نیز از تقریب پتانسیل خطی در x_2 را داریم $-\xi = -\alpha x' \gg 1$:

$$\psi_{\text{patch}}(x) \cong \frac{a}{\sqrt{\pi}\,(-\alpha x')^{1/4}} \sin\left[\frac{2}{3}(-\alpha x')^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right] + b(\ldots)$$

$$= \frac{a}{\sqrt{\pi}\,(-\alpha x')^{1/4}} \frac{1}{2i}\left[e^{i\pi/4} e^{i\frac{2}{3}(-\alpha x')^{3/2}} - e^{-i\pi/4} e^{-i\frac{2}{3}(-\alpha x')^{3/2}} \right]$$

بنابراین با مقایسه با "پاسخ" خواهیم داشت:

$$a = \sqrt{\frac{4\pi}{\hbar\alpha}}\, D = i\sqrt{\frac{4\pi}{\hbar\alpha}}\, e^{-i\pi/4} C_+ = -i\sqrt{\frac{4\pi}{\hbar\alpha}}\, e^{i\pi/4} C_-$$

- جواب نهایی که می‌توان نوشت به صورت مقابل است:

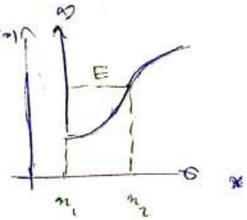
$$\psi_{WKB}(x) = \begin{cases} \dfrac{2D}{\sqrt{p(x)}} \sin\left\{\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_x^{x_2} p(x')\,dx' + \dfrac{\pi}{4}\right\} & ; \; x < x_2 \\[2ex] \dfrac{D}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left[-\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_{x_2}^{x} |p(x')|\,dx'\right] & ; \; x > x_2 \end{cases}$$

که در اینجا $p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$ است.

- توجه شود که از این تقریب زمانی استفاده می‌شود که دنبال حل تحلیلی هستیم ولی حل سخت است و ترجیح حل‌های عددی می‌توانیم دیدگاه تحلیلی و ویژگی‌های سیستم را برای ما روشن کند. البته حل تحلیلی ارزشمند است چون نکات آموزشی نهفته است.

- توجه شود که این تقریب در جاهایی اعتبار دارد که تغییرات پتانسیل نسبت به طول موج بسیار کم باشد. یعنی در حالت‌های متعلق به n ها (ترازها) با n بزرگ‌تر اعتبار بیشتری دارد و به مثال چاه پتانسیل ... جواب WKB و جواب دقیقاً یکسان‌اند چون پتانسیل تغییرات ندارد.

- توجه شود این روش WKB به این که در وسط x_1, x_2 چه شکل پتانسیلی داریم حساس نخواهد شد و تنها تغییرات پتانسیل اهمیت دارد.



— حالا این پاسخ به دست آمده می‌توانیم بسیاری از مسائل را حل کنیم.

+ اگر پتانسیل به صورت مقابل باشد که در x_1 به ∞ برود:

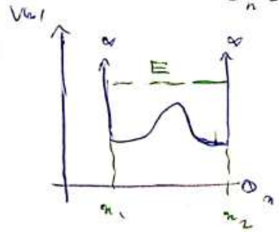
به حد حل اینجا با جواب قبلی چون با نزدیک شدن E به V از سمت چپ:

هیچ وقت امکان پیوسته شدن نداریم. «ایده‌ی ۲» بدین از سمت چپ نیاز نیست تنها کاری که باید انجام دهیم رعایت

شرایط مرزی است. به صورتی که $\psi_{WKB}(x=x_1)=0$ باید باشد:

$$\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} p(x')\,dx' + \frac{\pi}{4} = n\pi \to \int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m(E_n-V(x))}\,dx = \left(n-\frac{1}{4}\right)\pi\hbar$$

$$\to E_n = \dots$$



+ اگر پتانسیل مانند شکل روبرو باشد که از دو طرف به ∞ رود:

به شبیه کردن جواب اینجا نیازی به فرمول‌های اتصال نداریم و تنها باید شرایط مرزی

که عبارت است از $u_{WKB}(x=x_1)=0$, $u_{WKB}(x=x_2)=0$ را ارضا بتوانیم بکنیم. از شرایط مرزی داریم:

برای اینجا از شکل u_{WKB} یا کلی که در صفحه 73 مطرح شد استفاده کنیم چون در تمام ناحیه $V<E$ است مانند

ناحیه‌ی $x_1<x<x_2$ است بنابراین داریم:

$$u_{WKB}(x) = \frac{1}{\sqrt{p(x)}}\left(C_+ e^{i\phi(x)} + C_- e^{i\phi(x)}\right)$$

یا به صورت مثلثاتی بنویسیم:

$$= \frac{1}{\sqrt{p(x)}}\left(C_1 \sin(\phi(x)) + C_2 \cos(\phi(x))\right)$$

که با توجه به تعریف φ و $\varphi=\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} p(x')dx'$ در صورتی که $x=x_1$ باشد، $\varphi(x_1)=0$ می‌شود لذا باید C_2 صفر شود تا

در انتها نقطه ψ_{WKB} مطابق با $u(x=x_2)$ نیز باید داشته باشیم:

$$\varphi(x_2)=n\pi \rightarrow \int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m(E_n-V(x'))}\,dx' = n\pi\hbar$$

$$\rightarrow E_n=\dots$$

+ برای چاه پتانسیل که نیز می‌توان از پاسخ [illegible] استفاده کرد با شرط $V(x)=0$ می‌توان نوشت:

$$\rightarrow E_n=\frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2$$

که همانطور که اشاره کردیم چون تغییرات پتانسیل نسبت به طول موج [illegible] نبود، جواب دقیق را به ما داد.

+ برای چاه پتانسیل بدون دیوار، نیز می‌توان از این کار برد استفاده کرد.

به طوری که در اینجا می‌توان از حل صفحه 75 بهره برد، از هر دو قسمت داخل جواب را داشت:

$$\cancel{-\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} p(x')dx' - \frac{\pi}{4} = n\pi}$$

$$\cancel{\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{x_2} p(x')dx' + \frac{\pi}{4} = n\pi}$$

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x)\,dx = \left(n-\frac{1}{2}\right)\pi\hbar$$

$\lambda(x)_{WKB}=\frac{2D}{\sqrt{\pi}}\sin(\dots)$ // $u(x)_{WKB}$

در جواب صفحه 75 به دست آمده است حول x_2 از سمت داخل را گرفتیم است.

انتظار داریم [illegible] به صورت متقارن در حول x_1 از سمت داخل به دست آورده باشد

اگر $\sin(\theta_1)=\sin(\theta_2)$ باشد $\theta_1+\theta_2=\pi$ [illegible] اما

- انتشارگر و انتگرال مسیر فاینمن

+ انتشارگر

- می‌توان تحول یک تابع موج را به صورت زیر نوشت که با تعریف $K(x'',t;x',t_0)$ به عنوان انتشارگر تابع موج را از (x',t_0) به (x'',t) می‌برد:

$$\Psi_\alpha(\vec{x}'',t) = \langle x''|\alpha,t_0;t\rangle = \langle x''|U(t,t_0)|\alpha,t_0\rangle = \int d^3x' \langle x''|U(t,t_0)|x'\rangle\langle x'|\alpha,t_0\rangle$$

به عبارتی می‌توان نوشت:

$$\Psi_\alpha(x'',t) = \int d^3x' \, K(x'',t;x',t_0)\, \Psi_\alpha(x',t_0),$$

که در آن $K(x'',t;x',t_0)$ که به صورت زیر تعریف شده:

$$K(x'',t;x',t_0) = \langle x''|U(t,t_0)|x'\rangle = \langle x''|e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}|x'\rangle$$

یا به عبارتی:

$$K(x'',t;x',t_0) = \sum_{a'} e^{-\frac{i}{\hbar}E_{a'}(t-t_0)}\langle x''|a'\rangle\langle a'|x'\rangle.$$

- یکی از خواص بدیهی انتشارگر، وابسته بودن آن در صورت $t=t_0$ است که چون هیچ زمانی نگذشته انتشارگر نیز تابع:

$$\lim_{t\to t_0} K(x'',t;x',t_0) = \delta(x''-x')$$

- و اپراتور تحول زمانی نسبت مهمی است که به صورت $G(t) = Tr\, U$ نشان داده می‌شود و عبارت است از:

$$G(t) = \int d^3x' \langle x'|U(t,t_0)|x'\rangle = \int d^3x' \, K(x',t;x',t_0) = \int \sum_{a'} e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}|\langle x'|a'\rangle|^2 d^3x'$$

بنابراین:

$$G(t) = \sum_{a'} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_{a'}(t-t_0)\right)$$

همچنین می‌توان تبدیل فوریه این کمیت را نوشت:

$$\tilde{G}(E) = -\frac{i}{\hbar}\int_0^\infty dt\, G(t)\, e^{iEt/\hbar} = -\frac{i}{\hbar}\int_0^\infty dt \sum_{a'} e^{-iE_{a'}t/\hbar}\, e^{i(E+i\epsilon)t/\hbar} = \sum_{a'} \frac{e^{-\frac{it}{\hbar}(E_{a'}-i\epsilon-E)}}{E_{a'}-i\epsilon-E}\Bigg|_0^\infty$$

لذا:

$$\tilde{G}(E) = \sum_{a'} \frac{1}{E-(E_{a'}-i\epsilon)}$$

— مواقعی که با مسأله‌ای سر و کار داریم که چند حالت اولیه داریم و می‌خواهیم تحول آنها را تحت یک پتانسیل بیابیم، راه به صرفه‌ای به نظر می‌رسد که با حل معادله‌ی موج شرودینگر یا با حل با اپراتور تحول زمانی ویژه‌توابع و مقادیر را محاسبه کنیم. در این مسائل مناسب است که انتشارگر محاسبه شود برای پتانسیل مورد نظر، سپس با اعمال روی حالت‌های اولیه تحول آنها را بیابیم.

+ انتشارگر به عنوان تابع گرین

— همان‌که معلوم شد مسائلی می‌توانند با حل انتشارگر سود ببرند، اما محاسبه‌ی انتشارگر نیز با رابطه‌ای که تعریف کردیم، چندان آسان نیست. برای $t>t_0$، اگر رابطه‌ی تعریف انتشارگر در صفحه‌ی قبل را در $i\hbar\partial_t$ ضرب کنیم:

$$i\hbar\partial_t K(x'',t;x',t_0) = \langle x''|i\hbar\partial_t U(t,t_0)|x'\rangle$$

$$= \langle x''|H U(t,t_0)|x'\rangle$$

$$= H(x'',-i\hbar\nabla'')\langle x''|U(t,t_0)|x'\rangle$$

$$= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla''^2+V(x'')\right]K(x'',t;x',t_0)$$

بنابراین از عبارت فوق می‌توان نوشت:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla''^2+V(x'')-i\hbar\partial_t\right]K(x'',t;x',t_0) = i\hbar\,\delta^{3}(x''-x')\,\delta(t-t_0)$$

واضح و بدیهی است که از عبارت فوق استنباط کرد که انتشارگر، تابع گرین اپراتور دیفرانسیلی $\mathbb{L} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla''^2+V(x'')-i\hbar\partial_t$ است.

بنابراین یکی از روش‌های ساده‌تر، محاسبه‌ی انتشارگر به کار های دیگر، محاسبه‌ی تابع گرین اپراتور دیفرانسیلی مذکور است که با تغییر پتانسیل، می‌تواند شکل‌های گوناگونی به خود بگیرد.

+ انتشارگر مشابه دامنه گذار و انتگرال مسیر فاینمن

- با توجه به رابطه تعریف انتشارگر در ابتدا، می‌توان انتشارگر را به صورت زیر نمایش داد:

$$K(x'',t;x',t_0) = \langle x''| e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} |x'\rangle = \langle x''| e^{-iHt/\hbar} e^{iHt_0/\hbar} |x'\rangle$$

بنابراین:

$$K(x'',t;x',t_0) = \langle x'',t|x',t_0\rangle$$

واضح است که عبارت فوق نشان دهنده این است که انتشارگر معادل است با دامنه گذار حالت از (x',t_0) به (x'',t) و به

عبارت دیگر توان دوم آن احتمال گذار را بین این دو نقطه خواهد داد و بسیار سودمند است.

می‌توان دامنه گذار بین این دو نقطه را به تکه‌های کوچک کوچک تقسیم کرد و به صورت ذیل نوشت اگر بین t_1 و t_N را به $N-1$

قسمت مساوی تقسیم کنیم:

$$K(x_N,t_N;x_1,t_1) = \langle x_N,t_N;x_1,t_1\rangle = \int dx_{N-1}\int dx_{N-2}\cdots\int dx_2\ \langle x_N,t_N;x_{N-1},t_{N-1}\rangle$$

$$\times\langle x_{N-1},t_{N-1};x_{N-2},t_{N-2}\rangle\cdots\langle x_2,t_2;x_1,t_1\rangle$$

حال به بازه‌های کوچک زمانی که N ... می‌توان نوشت: $\Delta t = \frac{t_f - t_i}{n}$:

$$\langle x_{j+1},t_{j+1}|x_j,t_j\rangle = \langle x_{j+1}|e^{-\frac{i}{\hbar}H\Delta t}|x_j\rangle \simeq \langle x_{j+1}|1-\frac{i}{\hbar}H\Delta t|x_j\rangle$$

$$=\langle x_{j+1}|1-\frac{i}{\hbar}\Delta t\left[\frac{P^2}{2m}+V(x)\right]|x_j\rangle =$$

$$=\left\{1-\frac{i}{\hbar}\Delta t\, V\left(\frac{x_{j+1}+x_j}{2}\right)\right\}\underbrace{\langle x_{j+1}|x_j\rangle}_{=\delta(x_{j+1},j)} - \frac{i}{\hbar}\Delta t\int dp_{j+1}\int dp_j\,\langle x_{j+1}|P_{j+1}\rangle\underbrace{\langle P_{j+1}|T(p)|P_j\rangle}_{=T(P_{j+1})\delta_{(j+1,j)}}\langle P_j|x_j\rangle$$

$$=\int\frac{dP_{j+1}}{2\pi\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}P_{j+1}(x_{j+1}-x_j)}\left\{1-\frac{i}{\hbar}\left[V\left(\frac{x_{j+1}-x_j}{2}\right)+T(P_{j+1})\right]\right\}$$

$$=\int\frac{dP_{j+1}}{2\pi\hbar}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[P_{j+1}(x_{j+1}-x_j)-\frac{\Delta t}{m}P_{j+1}^2-\Delta t\,V\left(\frac{x_{j+1}+x_j}{2}\right)\right]\right\}$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \exp\left\{ \frac{\left[\frac{i}{\hbar}(x_{j+1}-x_j)\right]^2}{4\frac{i}{\hbar}\frac{\Delta t}{2m}} \right\} \sqrt{\frac{\pi\, 2m\hbar}{i\Delta t}} \exp\left\{ -\frac{i\Delta t}{\hbar} V\left(\frac{x_{j+1}+x_j}{2}\right) \right\}$$

$$= \sqrt{\frac{m}{i2\pi\hbar\Delta t}} \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{j+1}-x_j}{t_{j+1}-t_j} \right)^2 - V\left(\frac{x_{j+1}+x_j}{2} \right) \right] (t_{j+1}-t_j) \right\}$$

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \langle x_f, t_f | x_i, t_i \rangle .$$

بنابراین می‌توان نوشت :

$$K(x_f,t_f; x_i,t_i) = \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \cdots \int dx_2 \, \langle x_N, t_N | x_{N-1}, t_{N-1} \rangle \langle x_{N-1}, t_{N-1} | x_{N-2}, t_{N-2} \rangle \cdots \langle x_2 t_2 | x_1 t_1 \rangle$$

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \left(\frac{m}{i2\pi\hbar\Delta t} \right)^{\frac{N}{2}} \int \left(\prod_{j=2}^{N} dx_j \right) \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{j+1}-x_j}{t_{j+1}-t_j} \right)^2 - V(x_j) \right] \Delta t \right\}$$

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int Dx \, \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \left[\frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x) \right] dt \right\}$$

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int Dx \, \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int \mathcal{L} \, dt \right]$$

بنابراین واضح است که با داشتن لاگرانژی متناظر پتانسیل، انتشارگر را صورت فوق محاسبه کرد. و به انتگرال مسیر فاینمن موسوم است.

توجه شود که این عبارت بسیار جالب است چون جمع روی تمام مسیرها ممکن است! برخلاف مکانیک کلاسیک که تنها راه کلاسیک مسیر هستیم و البته این هست که چطور از کلاسیک به رژیم کوانتومی برسیم جالب است.

موضوع دیگری که باید به آن توجه کرد این است که مسیرهای خارج از مسیر کلاسیکی در اینجا برخلاف نسبیت خاص مجاز است ولی چون در آن نواحی مسیر به سرعت زیگزاگی است سهم اندکی در انتگرال پیدا می‌کنند و تقریباً بسیار نزدیکی به حالت کلاسیکی بدست ما آید.

— همانطور که دیدیم برای هامیلتونی کلی $H = \frac{p^2}{2m} + V(x,t)$، با حالت اولیه $|\alpha,t_0\rangle$ حالت تحول یافته به صورت زیر بیان می‌شود:

$$|\alpha,t_0;t\rangle = T\left\{\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H\,dt'\right)\right\}|\alpha,t_0\rangle$$

— حال در صورتی که یک پتانسیل وابسته به زمان به هامیلتونی اضافه شود، $\tilde{H} = H + V_0(t)$، حالت تحول یافته بعد از t برابر می‌شود با:

$$|\tilde{\alpha},t_0;t\rangle = T\left\{\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\tilde{H}\,dt'\right)\right\}|\alpha,t_0\rangle = T\left\{\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}(H+V_0(t'))\,dt'\right)\right\}|\alpha,t_0\rangle$$

$$= \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} V_0(t')\,dt\right\} T\left\{\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H\,dt'\right]\right\}|\alpha,t_0\rangle$$

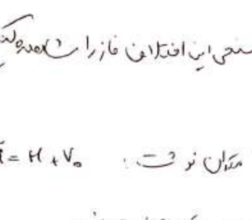
— در صورتی که پتانسیلی که افزودیم وابستگی زمانی نیز نداشته باشد و تنها مقدار ثابت باشد به صورت V_0، خواهیم داشت:

$$|\tilde{\alpha},t_0;t\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)V_0\right) T\left\{\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H\,dt'\right]\right\}|\alpha,t_0\rangle$$

واضح است که یک اختلاف فاز در صورت وجود پتانسیل جدید ظاهر می‌شود، بنابراین انتظار داریم در تداخل سنجی این اختلاف فاز را مشاهده کنیم.

— حال، به عنوان یک مثال از پتانسیل جدید مستقل از زمان: یک سامانه گرانشی $V_0 = mgz$ می‌توان نوشت: $\tilde{H} = H + V_0$.

حال آمده شارهای نوترون را از دو مسیر ABD و ACD، از A به D می‌رسانیم که مسیرها به صورت شکل نشان داده شده‌اند.



پتانسیل گرانشی اندر مسیر AC، همانند در مسیر BD برابر $mgl_2\sin\delta$ خواهد بود.

اختلاف فاز بین دو مسیر برابر اختلاف فازهای مسیر BD و AC می‌شود. توجه شود که چون مسیر AB و CD هر دو یک سطح گرانشی را دارند همدیگر را خنثی می‌کنند. لذا:

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\varphi_{ABD}-\varphi_{ACD})T\right] = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}mgl_2\sin\delta\,T\right).$$

که در عبارت فوق $T = \frac{l_1}{v} = \frac{l_1}{p/m} = \frac{l_1 m_n}{\hbar/\lambda} = \frac{l_1 m}{\hbar/\lambda}$ بنابراین:

$$\exp\left(-i\,\frac{m^2}{\hbar^2}l_1 l_2\sin\delta\,\lambda\right)$$

که این فاز های در نوترون‌ها تداخلی قابل رصد می‌باشد.

- تبدیل پیمانه‌ای در الکترومغناطیس:

- یادآوری: تا اینجا معادله شرودینگر را به صورت مقابل داریم:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right)|\alpha, t_0; t\rangle = 0$$

که در اینجا یک پتانسیل کلی (که نیرودار است)، $V = V_s(x,t)$، داریم:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \frac{P^2}{2m} - V_s(\vec{x},t)\right)|\alpha, t_0; t\rangle = 0$$

+ تبدیل پیمانه‌ای کلی $U(1)$

- حال می‌خواهیم ببینیم در صورتی که حالت سیستم به صورت زیر که به تبدیل پیمانه‌ای کلی $U(1)$ معروف است، تبدیل یابد آیا معادله در چه شرایطی باز هم جزء معادله‌های شرودینگر خواهد ماند:

$$|\tilde{\alpha}, t_0; t\rangle = e^{ic}|\alpha, t_0; t\rangle \quad , \quad e^{ic} \in U(1) \quad , \quad c \equiv cte.$$

با قرار دادن این عبارت معادله به فرم زیر می‌شود:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \frac{P^2}{2m} - V_s\right)|\tilde{\alpha}, t_0; t\rangle = 0$$

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \frac{P^2}{2m} - V_s\right)e^{ic}|\alpha, t_0; t\rangle = 0$$

حال طرفین را در e^{-ic} ضرب می‌کنیم:

$$e^{-ic}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \frac{P^2}{2m} - V_s\right)e^{ic}|\alpha, t_0; t\rangle = 0$$

چون c عدد ثابتی است، e^{-ic} می‌تواند عبور کند از اپراتورها:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \frac{P^2}{2m} - V_s\right)\underbrace{e^{-ic}e^{ic}}_{=1}|\alpha, t_0; t\rangle = 0$$

لذا می‌توان دید معادله‌ی شرودینگر تحت این تبدیل ناوردا است:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \frac{P^2}{2m} - V_s\right)|\alpha, t_0; t\rangle = 0$$

- لازم به ذکر است که ناوردایی تحت این تبدیل طبق قضیه‌ی نوتر، منجر به پایستگی [illegible] ها می‌شود و [illegible] را پایا [illegible].

+ تبدیل پیمانه‌ای موضعی $U(1)$

- به صورتی که در تبدیل اخیر $c = c(\vec{x},t)$ باشد، به تبدیل موضعی $U(1)$ شناخته می‌شود. حال می‌خواهیم در مورد ناوردایی معادله‌ی شرودینگر تحت این تبدیل تحقیق کنیم:

$$e^{-ic(\vec{x},t)}\left\{\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \frac{P^2}{2m} - V_s\right)e^{ic(\vec{x},t)}\right\}|\alpha, t_0; t\rangle = 0$$

ناوردا - ثابت … $AB = BA + [A,B]$ آنگاه، $A = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \frac{P^2}{2m} - V_s$, $B = e^{ic(x,t)}$ باشد:

$$e^{-ic(x,t)}\left\{ e^{+ic(x,t)}\left(i\hbar\,\partial_t - \frac{P^2}{2m} - V_s\right) + \left[i\hbar\partial_t - \frac{P^2}{2m} - V_s(x,t)\ ,\ e^{ic(x,t)}\right]\right\}|\alpha, t_0; t\rangle = 0$$

حال از طرفی می‌توان نوشت:

$$\left[\frac{\partial}{\partial t}, e^{ic(x,t)}\right] = i\frac{\partial c}{\partial t}e^{ic(x,t)}$$

$$e^{-ic}\vec{P}^2 e^{+ic} = e^{-ic}P\,e^{+ic}e^{-ic}P\,e^{ic} = [e^{-ic}(\underbrace{P}_{=A}\underbrace{e^{+ic}}_{=B})]^2 = \left\{e^{-ic}\left(e^{ic}P + [P, e^{ic}]\right)\right\}^2$$

$$= \{e^{-ic}(e^{ic}P + e^{ic}(-i\hbar\nabla)(ic))\}^2 = (P + \hbar\nabla c)^2$$

با استفاده از دو عبارت فوق می‌توان گفت:

$$\left(i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t} + i\frac{\partial c}{\partial t}\right) - \frac{1}{2m}(P + \hbar\nabla c)^2 - V_s(x,t)\right)|\alpha, t_0; t\rangle = 0$$

واضح است که عبارت‌های $i\hbar\, i\frac{\partial c}{\partial t}$ و $+\hbar\nabla c$ اضافه‌تر از معادله‌ی شرودینگر هستند. بنابراین برای اینکه تحت این تبدیل معادله‌ی شرودینگر

ناوردا بماند باید چنین تبدیل حالت، هامیلتونی نیز به گونه‌ای تبدیل شود که این دو عبارت را بتواند حذف کند.

بیایید چنین هامیلتونی را تعریف کنیم:

$$H = \frac{1}{2m}\{P - \frac{e}{c}\vec{A}(x,t)\}^2 + V_s(x,t) + e\varphi(x,t)$$

که در نهایت فرض می‌کنیم e بار الکتریکی و $(\varphi, \vec{A})$ چاربردار الکترومغناطیسی‌اند.

حال اگر چنین تبدیل حالت α به $\tilde{\alpha}$ ، H به $\tilde{H}$ به گونه‌ای تبدیل شود که:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{2m}[P - \frac{e}{c}\tilde{A}(x,t)]^2 - V_s(x,t) - e\tilde{\varphi}(x,t)\right)|\tilde{\alpha}, t_0; t\rangle = 0 \quad (*)$$

$$\left((i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hbar\frac{\partial c}{\partial t} - e\tilde{\varphi}) - \frac{1}{2m}(P + \hbar\vec{\nabla}c - \frac{e}{c}\tilde{A})^2 - V_s(x,t)\right)|\alpha, t_0; t\rangle = 0 \quad (I)$$

باید روابط زیر برقرار باشند تا بتوان گفت معادله‌ی شرودینگر با چنین هامیلتونی‌ای در چنین تبدیل حالت، هامیلتونی به صورت زیر تبدیل یافته

ناوردا است:

$$\tilde{\varphi}(x,t) = \varphi(x,t) - \frac{\hbar}{e}\frac{\partial}{\partial t}c(x,t)$$

$$\tilde{A}(x,t) = A(x,t) + \frac{\hbar c}{e}\vec{\nabla}c(x,t)$$

- بنابراین اینطور میتوان خلاصه کرد که ، الزام برداشتن تقارن موضعی U(1) معادله شرودینگر منجر به وجود آمدن نظریه الکترومغناطیس شد ولی

اینها برداشت اشتباه است و اصول هامیلتونی الکترومغناطیس است که تقارن موضعی U(1) را دارد و این موضوع نیز باید ثابت شود.

حال مردم با دیدن چنین تقارنی سعی کردند با الهام از این تقارن، گروه های پیچیده تر را بررسی کنند و آنچه دارند که به نظریه های پیمانه

است یافتند و این کشف بزرگی بود با این سرنخ که منجر به نظریه های ضعیف و قوی شد.

- به منظور جمع بندی باید ضرب در یک تابع فاز را نوشت که معادله شرودینگر تحت تبدیل موضعی U(1) در صورتیکه به صورت زیر تبدیل یابد ناوردا است:

$$|\tilde{\alpha}, t_0; t\rangle = e^{i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(x,t)} |\alpha, t_0; t\rangle$$

$$\tilde{\Phi}(x,t) = \varphi(x,t) - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\Lambda(x,t)$$

$$\tilde{A}(x,t) = A(x,t) + \nabla\Lambda(x,t)$$

- همینطور میتوان عملگر تحول را به صورت زیر بیان کرد:

$$|\tilde{\alpha}, t_0; t\rangle = \tilde{U}(t,t_0)\,|\tilde{\alpha}, t_0\rangle = \tilde{U}(t,t_0)\, e^{ie/\hbar c}\, |\alpha, t_0)$$

از طرفی میدانیم که عملگر U(1) است:

$$|\tilde{\alpha}, t_0; t\rangle = e^{\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(x,t)} |\alpha, t_0; t\rangle = e^{\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(x,t)}\, U(t,t_0)\,|\alpha, t_0)$$

با مقایسه دو عبارت فوق میتوان نوشت:

$$\tilde{U}(t,t_0) = e^{ie/\hbar c\,\Lambda(x,t)}\; U(t,t_0)\; e^{-\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(x,t)}$$

- به سادگی میتوان ثابت کرد در معادله شرودینگر اولیه به جای مشتق های معمولی مشتق هموردا با تعریف زیر را قرار دهیم به شکل

معادله ⊕ صفحه 84 در می آید.

$$D_\mu \equiv \partial_\mu + i\frac{e}{\hbar c}A_\mu$$

که البته با چنین تبدیل موضعی U(1) به صورت زیر تبدیل می یابد که به شکل معادله ⊕ در می آید.

$$\tilde{D}_\mu = e^{-\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(x,t)}\, D_\mu$$

- حال هامیلتونی جدید را اگر تعریف کنیم، به شکل مکانیک کلاسیک تکانه سینماتیکی را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$\Pi = m\frac{dx}{dt} \xlongequal{\text{استفاده هایزنبرگ}} m\frac{1}{i\hbar}[x, H] = \frac{m}{i\hbar} i\hbar \nabla_p H = \underbrace{P}_{\text{این تکانه‌ی متعارف هست.}} - \frac{e}{c}A(x,t)$$

حال اگر بخواهیم به شکل مکانیک کلاسیک، معادله‌ی حرکت نیوتن بنویسیم:

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{d\Pi}{dt}$$

$$= \frac{1}{i\hbar}[\Pi_i, H] + \frac{\partial \Pi_i}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\left[\Pi_i, \frac{\Pi^2}{2m} + e\varphi + V_s\right] - \frac{e}{c}\frac{\partial A_i}{\partial t}$$

با توجه به جابجاگرها:

$$[\Pi_i, \Pi_j] = [P_i - \frac{e}{c}A_i, P_j - \frac{e}{c}A_j] = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}(-\frac{e}{c}A_j) + i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j}(-\frac{e}{c}A_i)$$

$$= i\frac{\hbar e}{c}\epsilon_{ijk}B_k$$

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{d\Pi}{dt}$$

بنابراین ادامه می‌دهیم:

$$= \frac{1}{i\hbar}\left\{\frac{1}{2m}[\Pi_i, \Pi_j]\Pi_j + \frac{1}{2m}\Pi_j[\Pi_i, \Pi_j] + [P_i, e\varphi + V_s]\right\} - \frac{e}{c}\frac{\partial A_i}{\partial t}$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\left\{\frac{1}{2m}\frac{i\hbar e}{c}\epsilon_{ijk}(B_k\Pi_j + \Pi_j B_k) - i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}(e\varphi + V_s)\right\} - \frac{e}{c}\frac{\partial A_i}{\partial t}$$

$$= e\left(-\nabla\varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial A}{\partial t}\right) + \frac{e}{2c}\left(\frac{dx}{dt}\times B - B\times\frac{dx}{dt}\right) - \nabla V_s$$

$$= eE + \frac{e}{2c}\left(\frac{dx}{dt}\times B - B\times\frac{dx}{dt}\right) - \nabla V_s$$

واقع است که به شکل نیروی لورنتسی در آمده‌ایم که بدست‌آمدن آن بوده که هامیلتونی مربوط به الکترومغناطیس است.

- معادله‌ی پیوستگی بار را نیز می‌توان بدست آورد، به طوری که معادله‌ی شرودینگر با هامیلتونی متناظر الکترومغناطیس را مزدوج کرده و در ψ ضرب می‌کنیم، همچنین این را از معادله شرودینگر با هامیلتونی الکترومغناطیس ضرب در ψ^* کم می‌کنیم. در این صورت:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^* - 2\frac{ie}{\hbar c}(\psi^* A\cdot\nabla\psi + \psi A\cdot\nabla\psi^* + \nabla\cdot A\,\psi^*\psi)\right\} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)$$

$$-\frac{\hbar}{2m}\nabla\cdot\left[\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*-\frac{2ie}{\hbar c}\psi^*A\psi\right]=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)+\nabla\left[-\frac{i\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)-\frac{e}{mc}\psi^*A\psi\right]=0$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)+\nabla\left\{-\frac{i\hbar}{2m}\left[\psi^*\left(\nabla-\frac{ie}{\hbar c}A\right)\psi-\psi\left(\nabla+\frac{ie}{\hbar c}A\right)\psi^*\right]\right\}=0$$

$$\partial_t\rho(x,t)+\nabla\cdot\vec{j}(x,t)=0$$

بنابراین با تعریف $\rho=\psi^*\psi$ ، جریان j معادله پیوستگی حاصل می‌آید:

— چون $\vec{D}$ به صورت ذیل تعریف شده:

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

$$=\frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}\,(\psi^*\vec{D}\psi)=\frac{\hbar}{m}\mathrm{Im}\left\{\psi^*\left(\nabla-\frac{ie}{c\hbar}A\right)\psi\right\}=\frac{\hbar}{m}\mathrm{Im}(\psi^*\nabla\psi)-\frac{e}{mc}A\psi^*\psi$$

با توجه به اینکه اگر $z=a+ib$ را در i ضرب کنیم داریم $-iz=-ia+b$:

$$=\frac{1}{m}\mathrm{Re}\left\{\psi^*\left(-i\hbar\vec{\nabla}-\frac{e}{c}A\right)\psi\right\}$$

$$=\frac{1}{m}\mathrm{Re}\left\{\psi^*\left(P-\frac{e}{c}A\right)\psi\right\}=\frac{1}{m}\mathrm{Re}(\psi^*\Pi\psi)$$

که مثل بقیه جریان‌های فیزیکی، جریان متناسب با سرعت (تکانه) شد.

— چون در معادلات ماکسول علاوه بر A و φ (یا به عبارتی B و E) که به صورت زیر ثابت باقی می‌مانند، تبدیل می‌یابند:

$$\tilde{\vec{E}}=-\nabla\tilde{\varphi}-\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\vec{A}}=-\nabla\left(\varphi-\frac{1}{c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t}\right)-\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}(A+\nabla\Lambda)=\vec{E}$$

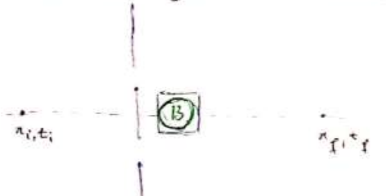
$$\tilde{\vec{B}}=\vec{\nabla}\times\tilde{\vec{A}}=\nabla\times(A+\nabla\Lambda)=\nabla\times A=B$$

$$\tilde{\rho}(x,t)=\tilde{\psi}^*(x,t)\,\tilde{\psi}(x',t)=\psi^*(x,t)\,e^{-\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(x,t)}\,e^{\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(x,t)}\,\psi(x,t)=\rho(x,t)$$

$$\tilde{\vec{j}}(x,t)=\frac{1}{m}\mathrm{Re}\left\{\tilde{\psi}^*\left(P-\frac{e}{c}\tilde{A}\right)\tilde{\psi}\right\}=\frac{1}{m}\mathrm{Re}\left\{\psi^*e^{-\frac{ie\Lambda}{\hbar c}}\left(P-\frac{e}{c}\tilde{A}\right)e^{\frac{ie\Lambda}{\hbar c}}\psi\right\}$$

$$=\frac{1}{m}\mathrm{Re}\left\{\psi^*(P-eA)\psi\right\}=\vec{j}(x,t)$$

- در اینجا آزمایش را به صورت آزمایش دوشکاف یانگ با یک سیم‌لوله‌ی بسیار باریک مستقیم بین دو شکاف از پشت با سیم‌لوله قرار می‌دهیم.



والبته آن را ایده‌آلی در نظر گرفته تا الکترون‌ها به آن نفوذ نکنند.

حال اگر B را داشته باشیم میدان A را به صورت زیر به دست آوریم:

$$\phi = \int B\cdot n\,da = \int (\nabla\times A)\cdot n\,da = \oint A\cdot dl.$$

ت. استوکس

به ازای داخل سیم‌لوله $\rho_0>\rho$:

$$\pi\rho^2 B = 2\pi\rho A \longrightarrow A^{in}(\rho) = \frac{B}{2}\rho^2\hat{\varphi}$$

به ازای خارج سیم‌لوله $\rho_0<\rho$:

$$\pi\rho_0^2 B = 2\pi\rho A \longrightarrow A^{out}(\rho) = \frac{B}{2}\rho_0^2\hat{\varphi}\ (=cte).$$

حال از روی میدان A میدان مغناطیسی را به صورت زیر به دست آوریم:

$$B = \nabla\times A = \hat{\rho}\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial A_z}{\partial\varphi} - \frac{\partial A_\varphi}{\partial z}\right) + \hat{\varphi}\left(\frac{\partial A_\rho}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial\rho}\right) + \hat{z}\,\frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial}{\partial\rho}[\rho A_\varphi] - \frac{\partial A_\rho}{\partial\varphi}\right)$$

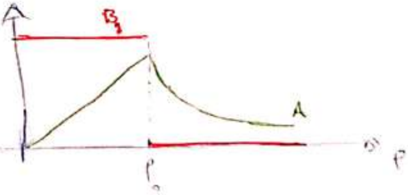
به ازای داخل سیم‌لوله $\rho_0>\rho$:

$$B = B\hat{z}$$

به ازای خارج سیم‌لوله $\rho_0<\rho$:

$$B = 0.$$

بنابراین می‌توان نوشت.



- حال می‌خواهیم احتمال یافتن ذره یا به عبارتی گذار ذره از x_i,t_i به x_f,t_f که روی صفحه اتفاق افتاده را بیابیم.

به این منظور از روش انتگرال مسیر بهره می‌بریم. بنابراین با داشتن H، تبدیل لژاندر می‌زنیم تا L به دست آید سپس با انتگرال مسیرهای ممکن احتمال گذار را بیابیم.

هامیلتونی مربوطه برابر است با:

$$H=\frac{1}{2}\left[P-\frac{e}{c}A(x,t)\right]^2+e\varphi(x,t)+V_s(x,t)$$

می‌توان لاگرانژین را با تبدیل لژاندر به دست آورد:

$$\mathcal{L}=\frac{1}{2}(p\cdot\dot{x}+\dot{x}\cdot p)-H$$

$$=\frac{1}{2}\left\{\left(m\dot{x}+\frac{e}{c}A\right)\dot{x}+\dot{x}\left(m\dot{x}+\frac{e}{c}A\right)\right\}-\left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2+e\varphi+V_s\right)$$

$$=\frac{1}{2}m\dot{x}^2-e\varphi-V_s+\frac{e}{2c}(\dot{x}\cdot A+A\cdot\dot{x})$$

بنابراین می‌توان نوشت:

$$\int_{t_i}^{t_f}\mathcal{L}\,dt=\int\left[\frac{1}{2}m\dot{x}^2+\frac{e}{c}\dot{x}\cdot A(x)\right]dt=\int_{t_i}^{t_f}\frac{1}{2}m\dot{x}^2+\frac{e}{c}\int_{x_i}^{x_f}A(x)\,ds$$

توجه شود که انتگرال مسیر فوق مستقل از مسیر است، چرا که $\nabla\cdot B=0$ یا $\nabla\cdot(\nabla\times A)=0$ است و لذا در مسیر بسته انتگرال A صفر خواهد بود بنابراین هر مسیر را معادل مسیر مشخصی با شرایط انتگرال فرض شود. $x_i \to x_f$

حال می‌توان انتشارگر را مطابق انتگرال مسیر فاینمن محاسبه کرد:

$$K(x_f,t_f;x_i,t_i)=\underbrace{\int}_{\text{کل مسیرها}} D[x(t)]\,e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f}\mathcal{L}(x,\dot{x})dt}$$

$$=\underbrace{\int}_{\text{مسیرها از شکاف ۱}} D[x(t)]\,e^{\frac{i}{\hbar}\int\mathcal{L}dt}+\underbrace{\int}_{\text{مسیرهای پایینی}} D[x(t)]\,e^{\frac{i}{\hbar}\int\mathcal{L}dt}$$

$$\overset{\text{چون مستقل از مسیر است}}{=}\exp\left[\frac{ie}{\hbar c}\int_{x_i}^{x_f}A(x)\,ds\right]\int_{\text{بالایی}} D[x(t)]\,e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f}\frac{m}{2}\dot{x}^2dt}$$

$$+\exp\left[\frac{ie}{\hbar c}\int_{x_i}^{x_f}A(x)\cdot ds\right]\int_{\text{پایینی}} D[x(t)]\,e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f}\frac{m}{2}\dot{x}^2dt}$$

چون x_i و x_f برای همه یکسان است می‌توان گفت:

$$=\underbrace{\int}_{\text{کل مسیرها}} D[x(t)]\,e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f}\frac{m}{2}\dot{x}^2dt}\left\{\underbrace{\exp\left\{\frac{ie}{\hbar c}\int_{x_i}^{x_f}A(x)\,ds\right\}}_{\text{بالایی}\ =A}+\underbrace{\exp\left\{\frac{ie}{\hbar c}\int_{x_i}^{x_f}A(x)\,ds\right\}}_{\text{پایینی}\ =B}\right\}$$

بنابراین با تعریف A و B به صورت فوق احتمال گذار از x_i به x_f به صورت زیر خواهد بود:

$$|K(x_f,t_f;x_i,t_i)|^2 = \left| e^{\frac{i(A+B)}{2}} \left(e^{\frac{i(A-B)}{2}} + e^{-\frac{i(A-B)}{2}}\right)\right|^2 \left|\int_{\text{بدون}}^{\text{با}} D[x(t)]\, e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} \frac{m}{2}\dot{x}^2 dt}\right|^2$$

به تحقیق در مورد شرح تداخل، باید قسمت تداخلی را ببینیم. حال اگر (A−B) مرتبه یعنی از مسیر ۱ رفته و از مسیر ۲ برگردیم و این

برابر مقدار شار محصور شده توسط این مسیر بسته خواهد بود که برابر $\oint A.ds$ می‌باشد.

و دیگری انتگرال مسیر به فاصله بین دو شکاف، فاصله پرتو و پرده و ... است که اهمیتی برایمان ندارد. لذا:

$$|K(x_f,t_f;x_i,t_i)|^2 \sim \cos^2\left\{\frac{e}{2\hbar c}\oint A(\vec{x}).ds\right\} = \cos^2\left(\frac{|e|}{2\hbar c}\Phi_B\right) = \cos^2\left(\frac{2\pi}{2\phi_0}\Phi_B\right)$$

بنابراین واضح است که با صفر بودن Φ_B، یا خاموش بودن میدان مغناطیسی، تداخل سازنده خواهد بود. ولی با افزایش میدان می‌تواند تداخل را ویرانگر و مجدداً سازنده کند! این عجیب است چون در رهیافت مکانیک کلاسیک در نواحی که میدان مغناطیسی نداریم نمی‌تواند اثری گذاشته باشد. حال در اینجا می‌بینیم که علیرغم ایزوله بودن میدان، اثر دارد و در واقع این به اثر آهارانوف-بوهم موسوم است و طبق تجربه تایید شده که صحت تئوری را می‌گوید.

— تک قطبی مغناطیسی

— به منظور یادآوری از الکترومغناطیس، پتانسیل الکتریکی و پتانسیل برداری را به صورت زیر بسط می‌دادیم:

$$\varphi(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\left[\frac{1}{r}\int \rho(r')d\tau' + \frac{1}{r^2}\int r'\cos\alpha\, \rho(r')\, d\tau' + \dots\right]$$

$$A(r) = \frac{\mu_0 I}{4\pi}\left[\frac{1}{r}\underbrace{\cancel{\oint dl'}}_{\text{صفر}} + \frac{1}{r^2}\oint r'\cos\theta'\, dl' + \frac{1}{r^3}\oint (r')^2\left(\frac{3}{2}\cos^2\theta - \frac{1}{2}\right)dl' + \dots\right]$$

که جملات اول تک قطبی، دوم دوقطبی و ... الکتریکی و مغناطیسی هستند به ترتیب. که البته چون $\oint dl = 0$ است، تک قطبی مغناطیسی نمی‌تواند وجود داشته باشد!

- اما در صورتی که تک قطبی مغناطیسی وجود داشته باشد، انتظار داریم مشابه قانون گاوس، برای تک قطبی مغناطیسی نیز نوشت.

برای تک قطبی الکتریکی می‌توان نوشت:

$$\varphi(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}\int \rho(r)\,d\tau$$

بنابراین با توجه به اینکه $E=-\nabla\varphi$، می‌نویسیم:

$$\nabla\cdot E = 4\pi\rho \longrightarrow \vec{E} = \frac{e}{r^2}\hat{r}$$

حال برای تک قطبی مغناطیسی داریم:

$$A(r) = \frac{\mu_0 I}{4\pi}\frac{1}{r}\oint dl$$

با توجه به اینکه $B=\nabla\times A$ می‌نویسیم:

$$\nabla\cdot B = 4\pi\rho_m \longrightarrow \vec{B} = \frac{e_m}{r^2}\hat{r}$$

امکان نوشتن عبارت فوق تنها در زمانی مجاز است که A یک تابع پیوسته نباشد (چون اگر پیوسته باشد، $\nabla\cdot\nabla\times A=0$ باید برقرار باشد) و با وجود تک قطبی مغناطیسی این پیوستگی از بین می‌رود و مجاز می‌شود.

حال اگر $\vec{B}$ را به صورت زیر در مختصات کروی بنویسیم:

$$\vec{B} = \vec{\nabla}\times A = \hat{r}\frac{1}{r\sin\theta}\left\{\frac{\partial}{\partial\theta}(A_\varphi\sin\theta) - \frac{\partial A_\theta}{\partial\varphi}\right\} + \hat{\theta}\frac{1}{r}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial A_r}{\partial\varphi} - \frac{\partial}{\partial r}(rA_\varphi)\right] + \hat{\varphi}\left[\frac{\partial}{\partial r}(rA_\theta) - \frac{\partial A_r}{\partial\theta}\right]$$

بنابراین برای داشتن عبارت $\vec{B} = \frac{e_m}{r^2}\hat{r}$، چندین انتخاب برای A می‌توان داشت که همان به علت آزادی پیمانه‌ای است.

ساده‌ترین انتخاب به شکل به صورت $\vec{A} = A_\varphi\hat{\varphi}$ می‌باشد. که در آن A_φ به صورت زیر باشد و a آزاد است.

$$A_\varphi = e_m\,\frac{a - \cos\theta}{r\sin\theta}$$

همانطور که انتظار داشتیم $\vec{A}$، تکینگی دارد، که این اجازه را به ما می‌دهد که $\nabla\cdot B\neq 0$ باشد.

به خاصیت داشتن تکینگی به نقاط مشخص به $a=\pm1$ یک جفت پتانسیل برداری به دست می‌آوریم که به $a=1$، فقط در $\theta=\pi-\epsilon$ تکینگی دارد و به $a=-1$ فقط در $\theta=\epsilon$ تکینگی دارد. [می‌توان از A^ϵ همه با استفاده کرد و کافی است نقاط تکین را لحاظ کردن تکینگی‌ها این

که مفروض $\theta=\pi-\epsilon$ است، که در امتداد $z-$ است، را رشته دیراک گویند]

- از نقاطی که $A^{I,II}$ اشتراک دارند انتظار داریم که $\vec{B}$ یکتایی ایجاد کنند. چه از A^{I} استفاده کنیم چه از A^{II}، به عبارتی فیزیک یکسانی

داریم، بنابراین انتظار می‌رود که $A^{II} - A^{I}$ با یک تبدیل پیمانه‌ای تبدیل شود. برای اینکه نشان دهیم تبدیل پیمانه‌ای می‌شود

داریم باید اختلاف $A^{I,II}$، گرادیان یک عبارت باشد:

$$A^{II} - A^{I} = \frac{-2e_m}{r\sin\theta}\,\hat{\varphi} = \nabla(-2e_m\varphi)$$

بنابراین تبدیل پیمانه‌ای برقرار است. به ازای $\Lambda = -2e_m\varphi$.

حال چنین پیمانه‌ای با مشابه‌سازی، حالت‌ها به صورت زیر به هم مربوط شوند:

$$\psi_{II}(r,t) = e^{+\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(r,t)}\,\psi_{I}(r,t) = \exp\left\{\frac{ie}{\hbar c}(-2e_m\varphi)\right\}\psi_{I}(r,t) = \exp\left(-\frac{2iee_m\varphi}{\hbar c}\right)\psi_{I}(r,t)$$

چنانچه بخواهیم حالت‌ها تک مقداره باشند، باید از مضارب صحیح 2π باشد:

$$\frac{2ee_m}{\hbar c} = 2N\pi\,.$$

به عبارت دیگر مقدار مقابل باید مقادیر صحیح $(0, \pm1, \pm2, \dots)$ را باشد:

$$N = \frac{2ee_m}{\hbar c}$$

حال طبق معادله بدست آمده، چون می‌دانیم بار الکتریکی وجود دارد، بار مغناطیسی در صورت وجود باید، قطعاً کوانتیده داشته باشد:

$$e_m = \left(\frac{\hbar c}{2|e|}\right)N \approx \left(\frac{137}{2}|e|\right)N$$

و البته در صورتی که بار مغناطیسی یافت شود توجیه می‌شود که چرا بار الکتریکی کوانتیده است!