

مفاهیم بنیادی مکانیک کوانتومی

مقدمه ای بر فرمولبندی ریاضیاتی مکانیک کوانتومی

حسین شناور

گروه فیزیک، دانشکده علوم



دانشگاه هرمزگان

- خواهشمندم هرگونه اشتباه نوشتاری، مفهومی و یا محاسباتی را به آدرس ایمیل من ارسال کنید تا در ویرایش های بعدی تصحیحات لازم اعمال شوند:

h.shenavar@gmail.com

- از همکاران و دانشجویان محترم در دانشگاه هرمزگان، برای همفکری ها، حمایت ها و گوشزد نمودن نکات مفید سپاسگزارم.
- برای ضبط این درس ها از نرم افزار Camtasia استفاده شده است.

- مقدمه ای بر فرمولبندی ریاضیاتی مکانیک کوانتومی
- فضای حالت سیستم کوانتومی: کت و برا
- عملگرها

- فضای حالت سیستم کوانتومی: کت و برا
- عملگرها

- عملگرها

آنچه گذشت: آزمایش اشترن-گرلاخ و نتایج آن

در جلسه قبل به کمک آزمایش اشترن-گرلاخ فهمیدیم حالت کوانتومی سیستم توسط یک بردار که بر روی فضای مختلط تعریف شده است توصیف می شود. همچنین به کمک این آزمایش می توان موارد زیر را تا حدودی درک کرد:

۱ وجود تکانه زاویه ای ذاتی ذرات (اسپین).

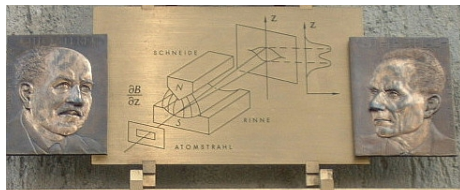
۲ کوانتش اسپین.

۳ رمبش تابع موج و روش اندازه گیری.

۴ اصل عدم قطعیت.

۵ برهمنهی کوانتومی.

۶ فضای هیلبرت.



IM FEBRUAR 1922 WURDE IN DIESEM GEBÄUDE DES
PHYSIKALISCHEN VEREINS, FRANKFURT AM MAIN,
VON OTTO STERN UND WALTHER GERLACH DIE
FUNDAMENTALE ENDECKUNG DER RAUMQUANTISIERUNG
DER MAGNETISCHEN MOMENTE IN ATOMEN GEMACHT.
AUF DEM STERN-GERLACH-EXPERIMENT BERUHEN WICHTIGE
PHYSIKALISCH-TECHNISCHE ENTWICKLUNGEN DES 20. JHDS.,
WIE KERNSPINRESONANZMETHODE, ATOMUHR ODER LASER.
OTTO STERN WURDE 1943 FÜR DIESE ENDECKUNG
DER NOBELPREIS VERLIEHEN.

اشترن و گرلاخ در ابتدا به دنبال آشکارسازی

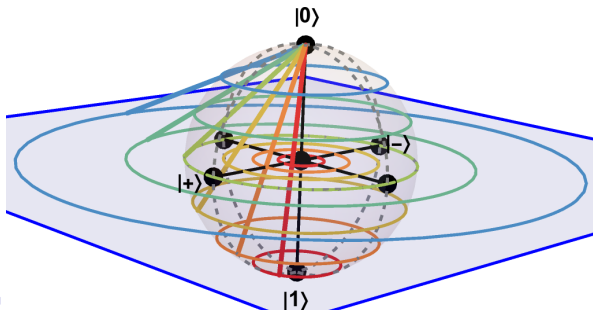
دوران الکترون ها به دور هسته (یعنی $\vec{L}$)

بودند؛ ولی آنها اسپین (یعنی $\vec{S}$) را یافتند!

اهداف این جلسه

در این جلسه می خواهیم ریاضیات مکانیک کوانتومی را به صورت مقدماتی بررسی کنیم. به ویژه با مفهوم کت ها و براها آشنا خواهیم شد که حالت یک سیستم را نشان می دهند. همچنین درباره عملگرهای کوانتومی بحث کرده و با ضرب های مختلف در فضای هیلبرت آشنا خواهیم شد. در سرتاسر این درس و درس های آینده از نمادگذاری دیراک (براکت) برای توصیف فضای برداری استفاده خواهیم کرد. البته جبر فضای برداری مورد نظر ما پیش از دیراک توسط ریاضی دانان توضیح داده شده بود.

با نمایش ماتریسی براکت و عملگرها در جلسه بعد آشنا خواهیم شد.

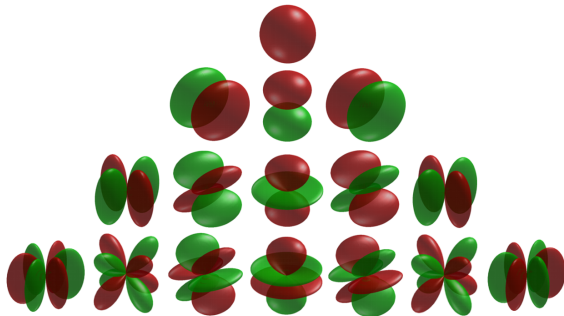


حالت سیستم کوانتومی چطور توصیف می شود؟

در مکانیک کلاسیک عملاً می توان با استفاده از سرعت و موقعیت اولیه و دانستن نیروهای وارده بر ذره، مسیر حرکت ذره را با دقت دلخواه تعیین کرد:

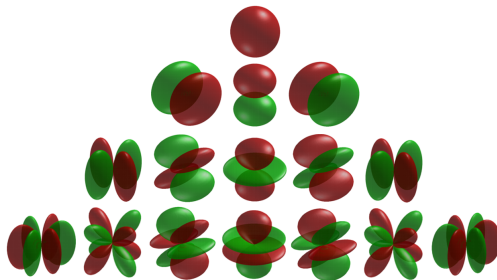
$$a = 1/m \sum F \xrightarrow{\text{integrate}} v \xrightarrow{\text{integrate}} x$$

در مکانیک کوانتومی چنین چیزی درست نیست و نمی توان موقعیت و تکانه ذره را با دقت نامحدود مشخص کرد. در عوض ما از حالت کوانتومی سیستم صحبت می کنیم و در انتها نیز می توانیم از "احتمال وجود ذره در یک حالت مشخص پس از یک زمان مشخص" صحبت کنیم.



حالت سیستم کوانتومی چطور توصیف می شود؟

- تابع حالت توصیف کننده سیستم می تواند، بسته به فیزیک سیستم، شامل پارامترهای موقعیت، اسپین، تکانه زاویه ای و ... و یا همه اینها باشد. بنابراین، توصیف حالت کوانتومی سیستم در حالت کلی چندان ساده نیست. ولی می توان نشان داد که ریاضیات خاصی (که همان جبر خطی فضای هیلبرت است) می تواند حالت های کوانتومی را به خوبی توصیف کند.
- حالت کوانتومی توصیف کننده سیستم را کت ket سیستم می نامیم. به عنوان یک اصل موضوعه می پذیریم که کت سیستم "شامل تمام اطلاعات معنی دار سیستم کوانتومی" مورد نظر است. در ادامه ویژگی های ریاضیاتی کت ها را توضیح خواهیم داد.
- فعلا می توانید کت ها را به صورت ماتریس های ستونی و برا ها را به صورت ماتریس های سطری تصور کنید.

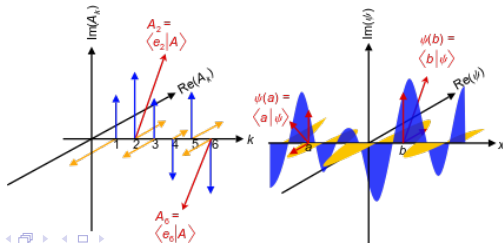


ویژگی های کت

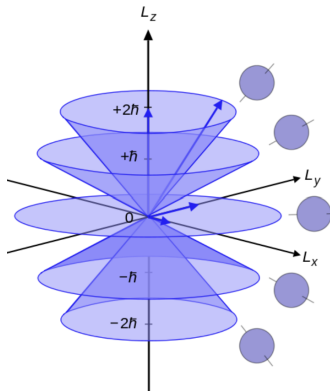
- دو کت را می توان با هم جمع کرد و نتیجه نیز یک کت خواهد بود:

$$|\gamma\rangle = |\alpha\rangle + |\beta\rangle$$
- حاصلضرب یک کت و یک عدد مختلط نیز یک کت است. همچنین فرقی نمی کند که ضریب $c \in \mathbb{C}$ در جلو و یا پشت کت قرار گیرد:

$$c |\alpha\rangle = |\alpha\rangle c$$
- اگر ضریب c صفر باشد آنگاه یک کت تهی (صفر null) تولید خواهد شد.
- یک اصل موضوعه دیگر مکانیک کوانتومی این است که کت های $|\alpha\rangle$ و $c |\alpha\rangle$ (به شرط $c \neq 0$) هم ارزش هستند؛ یعنی این دو کت حالت های فیزیکی یکسانی را توصیف می کنند. در این حالت می گوییم که جهت کت (و نه اندازه آن) اهمیت دارد.



مشاهده پذیرها



در مکانیک کوانتومی مشاهده پذیرها (مانند موقعیت، تکانه، اسپین و ...) را با عملگرهایی مانند A که بر روی فضای حالت عمل می کنند نشان می دهند. در حالت کلی، عملگرها از سمت چپ بر روی کت ها عمل می کنند و حاصل نیز یک کت خواهد بود:

$$A \cdot (|\alpha\rangle) = A|\alpha\rangle$$

درباره ذات این ضرب و ویژگی های آن در ادامه بیشتر خواهیم دید.

عموماً، حاصلضرب $A|\alpha\rangle$ یک کت کلی به ما خواهد داد؛ هرچند، کت های مشخصی وجود دارند که برای آنها $A|\alpha\rangle$ برابر حاصلضرب یک عدد ثابت در $|\alpha\rangle$ خواهد بود. این نوع کت ها را ویژه کت (eigenkets) می نامند و برای آنها داریم:

$$A|a'\rangle = a' |a'\rangle, \quad A|a''\rangle = a'' |a''\rangle, \quad \dots$$

در اینجا a' , a'' , ... عدد هستند و آنها را ویژه مقدار (eigenvalues) می نامند هرچند $|a'\rangle$, $|a''\rangle$ نشان دهنده ویژه کت اند.

ویژه حالت ها

- حالت فیزیکی متناظر با یک ویژه کت را ویژه حالت می نامند. مثلا اگر عملگر اسپین بر روی ویژه حالت های اسپینی اثر کند، انتظار داریم (بنا به آزمایش اشترن-گرایخ) که مقادیر $\pm \hbar/2$ را به عنوان ویژه مقدار دریافت کنیم. یعنی

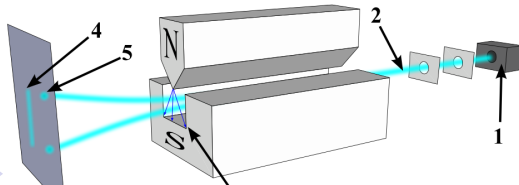
$$S_z |S_z; +\rangle = +\frac{\hbar}{2} |S_z; +\rangle \quad S_z |S_z; -\rangle = -\frac{\hbar}{2} |S_z; -\rangle$$

$$S_x |S_x; \pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2} |S_x; \pm\rangle \quad S_y |S_y; \pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2} |S_y; \pm\rangle \quad \text{و همچنین}$$

- می توان اثبات کرد که هر کت دلخواه را می توان با استفاده از ویژه کت ها بسط داد:

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle$$

به موضوع یکتایی و کامل بودن این بسط بعدا وارد خواهیم شد.



فضای دوگان و یا فضای برا

- در انتها نتایج اندازه گیری های ما تعدادی کمیت های احتمالاتی و تعدادی اسکالر هستند. بنابراین، بهتر است بفهمیم که چطور می توان از بردارهای کت تعدادی اسکالر ساخت. برای اینکار باید فضای دوگان (dual) فضای کت را معرفی کنیم. این فضا را فضای براها می نامیم.
- می پذیریم که به ازای هر کت مانند $|\alpha\rangle$ یک دوگان آن مانند $\langle\alpha|$ وجود دارد که آن را برا bra می نامیم. این بردار را نیز می توان مانند زیر بسط داد:

$$\langle\alpha| = \sum_{a'} c_{a'} \langle a'|$$

دقت کنید که یک تناظر یک به یک بین بردارها در فضای کت و فضای برا وجود دارد (dual correspondence):

$$|\alpha\rangle \xleftrightarrow{\text{DC}} \langle\alpha|$$

$$|a'\rangle, |a''\rangle, \dots \xleftrightarrow{\text{DC}} \langle a'|, \langle a''|, \dots$$

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle \xleftrightarrow{\text{DC}} \langle\alpha| + \langle\beta|$$

- همچنین دوگان برهمنهی دو کت به صورت زیر نوشته می شود:
- $$c_\alpha |\alpha\rangle + c_\beta |\beta\rangle \xleftrightarrow{\text{DC}} c_\alpha^* \langle\alpha| + c_\beta^* \langle\beta|$$

ضرب داخلی برا و کت

- حالا می توان ضرب داخلی بین برا و کت را تعریف کرد که خروجی آن یک اسکالر است:

$$\langle \beta | \alpha \rangle = (\langle \beta |) \cdot (| \alpha \rangle)$$

البته نتیجه چنین ضربی در حالت کلی یک کمیت مختلط است. توجه کنید که برای تشکیل ضرب داخلی، همیشه یکی از حالت ها از فضای کت و دیگری از فضای برا می آید.

- یک ویژگی بسیار مهم ضرب داخلی این است که کمیت های $\langle \beta | \alpha \rangle$ و $\langle \alpha | \beta \rangle$ مزدوج مختلط همدیگر هستند:

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \langle \alpha | \beta \rangle^*$$

تمرین: اثبات کنید که $\langle \alpha | \alpha \rangle$ یک کمیت حقیقی است.

- فرض مهم دیگر این است که $\langle \alpha | \alpha \rangle \geq 0$. حالت $\langle \alpha | \alpha \rangle = 0$ برای کت های تهی درست است. وجود چنین شرطی برای تفسیر احتمالی خودسازگار از سیستم های کوانتومی الزامی است.

- حالت های متعامد: اگر برای دو کت داشته باشیم $\langle \alpha | \beta \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle = 0$ ، آنگاه می گوییم دو کت $|\alpha\rangle$ و $|\beta\rangle$ بر هم عمودند.

- نرمال سازی کت ها: با توجه به اینکه فقط جهت کت در فضای برداری اهمیت دارد، همیشه می توان از کت نرمال شده $|\tilde{\alpha}\rangle$ به جای کت $|\alpha\rangle$ استفاده کرد:

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle}} |\alpha\rangle$$

تمرین: ثابت کنید $\langle \tilde{\alpha} | \tilde{\alpha} \rangle = 1$.

عملگرها و جبر آنها

- ما در ادامه عملگرها در حالت کلی را با X و Y و عملگرهایی که نشان دهنده کمیت های مشاهده پذیر فیزیکی هستند را با A و B نشان خواهیم داد.
- یک عملگر از سمت چپ بر روی کت و از سمت راست بر روی برا عمل می کند:

$$(\langle \alpha |) . X = \langle \alpha | X \quad X . (| \alpha \rangle) = X | \alpha \rangle$$
- البته نتیجه حاصله یک برا و یا کت دیگر است.
- می گوئیم دو عملگر X و Y با هم برابر هستند اگر و فقط اگر برای هر کت $|\alpha\rangle$ داشته باشیم

$$X|\alpha\rangle = Y|\alpha\rangle \quad \Leftrightarrow \quad X = Y$$
- همچنین می گوئیم عملگر X یک عملگر تهی (null) است اگر برای هر کت $|\alpha\rangle$ داشته باشیم

$$X|\alpha\rangle = 0$$
- جمع عملگرها خاصیت جابجایی و شرکت پذیری دارد:

$$X + Y = Y + X \quad X + (Y + Z) = (X + Y) + Z$$
- اکثر عملگرهایی که ما در مکانیک کوانتومی در نظر می گیریم خطی هستند یعنی

$$X(c_\alpha |\alpha\rangle + c_\beta |\beta\rangle) = c_\alpha X|\alpha\rangle + c_\beta X|\beta\rangle$$
- ولی عملگر وارون زمانی (time reversal) خطی نیست. با این عملگر در بخش های پیشرفته تر برخورد خواهیم کرد.

عملگرهای هرمیتی

• موجوداتی مانند $\langle \alpha | X | \alpha \rangle$ در حالت کلی دوگان هم نیستند. در عوض ما مزدوج هرمیتی یک عملگر مانند X را با $X^\dagger$ نشان داده و آن را به صورت زیر تعریف می کنیم:

$$X | \alpha \rangle \xleftrightarrow{DC} \langle \alpha | X^\dagger$$

• عملگر هرمیتی: می گوئیم یک عملگر هرمیتی است اگر $X = X^\dagger$. همه مشاهده پذیرهای کوانتومی عملگرهایی هرمیتی هستند زیرا هرمیتی بودن عملگر تضمین می کند که ویژه مقادیر خروجی آن اعداد حقیقی باشند. در زیر مثال هایی از مشاهده پذیرهای کوانتومی را می بینید.

Physical properties		Operators	
Name of Operator	Observables	Operators	Symbols
Position	Position with x coordinate	$\mathbf{x}$	$\mathbf{x}$
Momentum	x component of momentum	$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$	p_x
Angular momentum	z component of angular momentum	$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$	L_z
K.E operator	Kinetic energy	$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$	T
P.E operator	Potential energy	$V_{(x)}$	V
Total energy (E)	Hamiltonian operator (Time-Independent)	$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{(x)}$	$\hat{H}$
Total energy (E)	Hamiltonian operator (Time-dependent)	$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$	$\hat{H}$

ضرب عملگرها

- ضرب عملگرها در حالت کلی خاصیت جابجایی ندارد ولی خاصیت شرکت پذیری دارد:

$$XY \neq YX \quad X(YZ) = (XY)Z = XYZ$$

همچنین می توان نوشت:

$$X(Y|\alpha\rangle) = (XY)|\alpha\rangle = XY|\alpha\rangle \quad (\langle\beta|X)Y = \langle\beta|(XY) = \langle\beta|XY$$

و البته می توان نوشت $(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger$ زیرا

$$XY|\alpha\rangle = X(Y|\alpha\rangle) \quad \xleftrightarrow{DC} \quad (\langle\alpha|Y^\dagger)X^\dagger = \langle\alpha|Y^\dagger X^\dagger$$

- ضرب خارجی (outer product): ضرب خارجی یک کت و یک برا به صورت $|\beta\rangle\langle\alpha|$ تعریف می شود که یک عملگر است.

- توجه: موجودی مانند $\langle\alpha|\beta\rangle$ یک عدد است ولی $|\beta\rangle\langle\alpha|$ عملگر است.

- ضرب های غیر مجاز: ضرب هایی مانند $X|\alpha\rangle$ و $\langle\alpha|X$ بی معنی هستند.

- پرسش: آیا با نمایش ماتریسی می توانید بی معنی بودن این ضرب ها را توضیح دهید؟

- همچنین اگر موجودات $|\alpha\rangle$ و $|\beta\rangle$ مربوط به فضای مشابهی (مانند فضای تکانه) باشند، ضرب هایی مانند $|\alpha\rangle\langle\beta|$ بی معنی خواهند بود. ولی اگر این دو مربوط به فضاهای متفاوتی باشند (مانند تکانه و اسپین) آنگاه حاصلضرب $|\alpha\rangle\langle\beta|$ کاملاً معنی دار است؛ هرچند بهتر است به شکل $|\alpha\rangle\langle\beta| \otimes$ نوشته شود.

کاربردهای بسیار مهم اصل شرکت پذیری

● اصل شرکت پذیری $X(YZ) = (XY)Z = XYZ$ را در نظر بگیرید. دیراک اولین فردی بود که اهمیت بنیادین این اصل در محاسبات کوانتومی را تشخیص داد. مثلاً ضرب خارجی $|\beta\rangle\langle\alpha|$ را در نظر بگیرید که بر روی کت $|\gamma\rangle$ عمل می کند $|\beta\rangle\langle\alpha| \cdot |\gamma\rangle$. البته با توجه به اصل شرکت پذیری ضرب می توان نوشت:

$$(|\beta\rangle\langle\alpha|) \cdot |\gamma\rangle = |\beta\rangle (\langle\alpha|\gamma\rangle)$$

که در آن کمیت $\langle\alpha|\gamma\rangle$ یک اسکالر است. بنابراین موجود $|\beta\rangle (\langle\alpha|\gamma\rangle)$ عملاً حاصل ضرب یک اسکالر در یک بردار است.

● نکته: وقتی ضرب خارجی بر روی یک کت عمل می کند، نتیجه عملاً یک کت دیگر است. پس مجاز هستیم موجود $|\beta\rangle\langle\alpha|$ را به عنوان یک عملگر در نظر بگیریم چون عملگرها وقتی بر روی کت ها اثر می کردند، یک کت جدید تشکیل می دادند.

● توجه کنید که عملگر $|\beta\rangle\langle\alpha|$ کت $|\gamma\rangle$ را در جهت کت $|\beta\rangle$ تصویر خواهد کرد. در درس های بعدی این نکته را تا سرحد ممکن بررسی کرده و تعمیم خواهیم داد زیرا این نکته می تواند به ما در فهم اصل اندازه گیری و تغییر پایه های فضا کمک کند.

● تمرین: ثابت کنید که اگر $X = |\beta\rangle\langle\alpha|$ آنگاه $X^\dagger = |\alpha\rangle\langle\beta|$.

کاربردهای بسیار مهم اصل شرکت پذیری

- فشرده سازی یک عملگر بین یک کت و یک برا: موجود $\langle \beta | X | \alpha \rangle$ را در نظر بگیرید. برای محاسبه مقدار این موجود می توان اول کمیت $X | \alpha \rangle$ را محاسبه کرد و سپس آن را از سمت راست در برا $\langle \beta |$ ضرب کرد:

$$\langle \beta | X | \alpha \rangle = (\langle \beta |) \cdot (X | \alpha \rangle)$$

$$\langle \beta | X | \alpha \rangle = (\langle \beta | X) \cdot (| \alpha \rangle) \quad \text{البته روشی دیگر هم ممکن است:}$$

$$\langle \beta | X | \alpha \rangle = (\langle \beta |) \cdot (X | \alpha \rangle) = (\langle \beta | X) \cdot (| \alpha \rangle) \quad \text{و نتیجه یکسان است:}$$

- ویژگی اساسی عملگرهای هرمیتی: به محاسبه زیر دقت کنید

$$\langle \beta | X | \alpha \rangle = (\langle \beta |) \cdot (X | \alpha \rangle)$$

$$\text{حال از دو ویژگی} \quad \langle \alpha | X^\dagger = \langle \alpha | X \rangle^* \quad \text{و} \quad X | \alpha \rangle \xrightarrow{\text{DC}} \langle \alpha | X^\dagger \quad \text{استفاده کرده و می نویسیم:}$$

$$\langle \beta | X | \alpha \rangle = (\langle \beta |) \cdot (X | \alpha \rangle) = \left\{ (\langle \alpha | X^\dagger) \cdot | \beta \rangle \right\}^* = \langle \alpha | X^\dagger | \beta \rangle^*$$

این رابطه برای هر عملگری درست است. هرچند برای هر عملگر هرمیتی داریم $A = A^\dagger$ ؛ پس

$$\langle \beta | A | \alpha \rangle = \langle \alpha | A | \beta \rangle^*$$

- نمادگذاری کت و برا به نظر کاملاً مجرد و تا حدی ترسناک است؛ ولی نگران نباشید. در جلسه بعد با نمایش ماتریسی این نمادگذاری آشنا خواهیم شد و فهم نمادگذاری کت و برا آسانتر می شود.

نکات مهم این درس

انتظار این است که در انتهای این درس شما بتوانید فرمولبندی ریاضیاتی مکانیک کوانتومی و مهم ترین نتایج آن را به درستی توضیح دهید. به ویژه انتظار می رود که بتوانید پرسش های زیر را پاسخ دهید:

- ۱ جمع عملگری چه ویژگی هایی دارد؟
- ۲ ضرب عملگری چه ویژگی هایی دارد؟
- ۳ مشاهده پذیرها در مکانیک کوانتومی با چه عملگرهایی توصیف می شوند؟ چرا؟
- ۴ عملگرهای هرمیتی چه نوع عملگرهایی هستند؟
- ۵ چطور می توان یک کت را در جهت کت دیگر تصویر کرد؟
- ۶ منظور از کت تهی چیست؟
- ۷ چرا به فضاهای کت و برا به صورت همزمان نیاز داریم؟
- ۸ منظور از ویژه حالت و ویژه مقدار چیست؟

اگر درباره هرکدام از مفاهیم یاد شده بالا مشکلی احساس می کنید، لطفا درس را یک بار دیگر مرور کنید.

فراموش نکنیم که بهترین راه برای درک و ”درونی سازی“ مفاهیم ریاضی و فیزیک، حل مساله است. به همین دلیل سعی کنید دانسته های خود را با حل سوالات زیر محک زده و تقویت کنید.

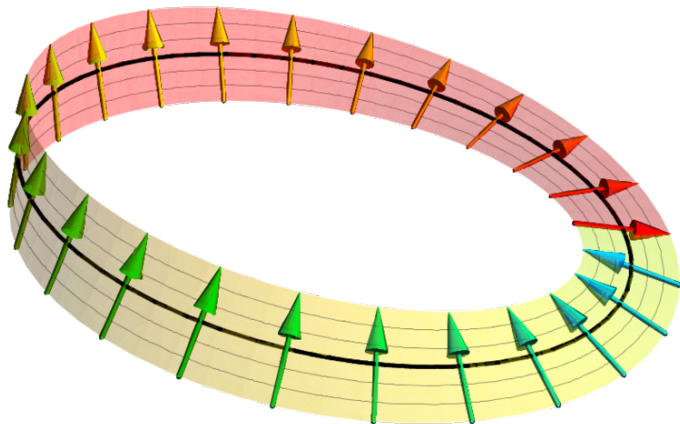


تمرین ها

- لطفا پرسش ها و تمرین های موجود در متن درس را پاسخ دهید.

مبحث بعدی: نمایش ماتریسی فضای حالت و عملگرها

• ساختار مجرد ریاضیاتی که در این جلسه بنا کردیم کاملاً کلی است. در جلسه بعد می آموزیم که چطور می توان این ساختار مجرد را به وسیله نمایش ماتریسی حالت ها و عملگرها بهتر تصور کرد. البته در ابتدا ویژه کت ها و کت های پایه را بررسی خواهیم کرد.



منابع

- ❶ Modern Quantum Mechanics, 3rd Edition, by J. J. Sakurai and Jim Napolitano, Cambridge University Pr.
- ❷ Principles of Quantum Mechanics by Ramamurti Shankar, Plenum Press
- ❸ Quantum Mechanics: Concepts and Applications, 2nd Edition by Nouredine Zettili
- ❹ Introduction to Quantum Mechanics by David J. Griffiths
- ❺ Quantum Mechanics: An Introduction by Walter Greiner
- ❻ Quantum Physics I by Prof. Barton Zwiebach, MIT OpenCourseWare
<https://ocw.mit.edu/courses/8-04-quantum-physics-i-spring-2016/>
- ❼ Quantum Physics II by Prof. Barton Zwiebach, MIT OpenCourseWare
<https://ocw.mit.edu/courses/8-06-quantum-physics-iii-spring-2018/>
- ❽ Professor M does Science,
<https://www.youtube.com/@ProfessorMdoesScience>

با سپاس از توجه شما

