گاما، شماره ی ِ ۹، زمستان ِ ۱۳۸۴

پراکنش در یک بعد[1]

محمد خرمی mamwad@mailaps.org X1-023 (2004/04/01)

کوانتم‌مکانیک ِ پراکنش ِ یک ذره یِ مقید به یک بعد بررسی، و تصویر ِ حالت‌ها یِ مانا با تصویر ِ بسته‌ها یِ موج مقایسه می‌شود.

0 مقدمه

در بررسی یِ پراکنش ِ یک‌بعدی در کوانتم‌مکانیک، نوعاً ویژه‌حالت‌ها یِ نامقید ِ همیلتنی یِ سیستم را به دست می‌آورند و با استفاده از آن‌ها معلوم می‌کنند اگر جریان ی از ذرات با انرژی یِ مشخص بر مرکز ِ پراکنش فرود آید، چه کسر ی از این جریان باز می‌تابد و چه کسر ی از آن به راه َ ش ادامه می‌دهد (مثلاً [1]). در آزمایش‌ها یِ عملی‌تر ِ پراکنش، نَه با جریان‌ها یِ با انرژی یِ مشخص بل که با بسته‌ها یی از ذرات سروکار داریم که پهنا یِ کم ی در مکان و تکانه دارند. این بسته‌ها یِ ذرات پراکنده می‌شوند، چنان که بخش ی از هر بسته باز می‌تابد و بخش ی از آن به راه َ ش ادامه می‌دهد. در چنین‌فرآیند ی دیگر حالت ِ سیستم مانا نیست: در گذشته یِ دور بسته ای داریم که به طرف ِ مرکز ِ پراکنش می‌رود، و در آینده یِ دور دو بسته که از مرکز ِ پراکنش دور می‌شوند؛ یک ی در همان جهت ِ قبلی حرکت می‌کند و دیگر ی باز تابیده است. در چنین‌تجربه ای، ضمناً می‌شود پرسید چه قدر طول می‌کشد تا بسته از نقطه ای پیش از مرکز ِ پراکنش به نقطه ای پس از مرکز ِ پراکنش برسد. این سئال برا یِ حالت‌ها یِ مانا بی‌معنی است، چون در حالت‌ها یِ مانا جا یِ ذره بی‌معنی است.

در این‌جا می‌خواهیم توصیف ِ بسته‌یِ‌موجی یِ پراکنش در یک بعد را بررسی کنیم. حالت ِ خاص ی از این بحث (پراکنش از پله یِ پتانسیل) به‌اجمال در [1] بررسی شده است.

[1] این مقاله، با اجازه یِ نویسنده، از منزل‌گاه ِ نویسنده برداشته شده است، و همه یِ حقوق ِ آن برا یِ نویسنده محفوظ است.

http://staff.alzahra.ac.ir/mamwad/x1/x1-023.pdf

1 معادله ي پی‌وسته‌گی

معادله يِ شْرُدينگر [a] برا يِ ذره ای به جرم ـِ m که تحت ـِ انرژی يِ پتانسیل ـِ V حرکت می‌کند

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2+V(\mathbf{r})\right]\psi(t,\mathbf{r})=i\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,\psi(t,\mathbf{r}) \tag{1}$$

است، که ψ تابعِ‌موج ـِ ذره، $\mathbf{r}$ مکان، و $\hbar$ ثابت ـِ پْلانک [b] تقسیم بر 2π است.

فرض کنید ψ و ϕ دو تابعِ‌موج اند که هردو معادله يِ (1) را بر می‌آورند. (1) را در ϕ^* ضرب می‌کنیم؛ مزدوجِ‌مختلط ـِ مانسته يِ (1) برا يِ ϕ را هم در ψ ضرب می‌کنیم؛ سپس دومعادله يِ حاصل را از هم کم می‌کنیم. نتیجه می‌شود

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

يا

$$\nabla\cdot\mathbf{j}+\frac{\partial\rho}{\partial t}=0, \tag{3}$$

که

$$\mathbf{j}\,:=\,-\frac{i\,\hbar}{2m}\,[\phi^*\,\nabla\psi-(\nabla\phi^*)\,\psi]\,,$$

$$\rho\,:=\,\phi^*\,\psi. \tag{4}$$

این، تعمیم ـِ معادله يِ پی‌وسته‌گی برا يِ یک تابعِ‌موج $(\phi=\psi)$ است [1]. اگر ψ و ϕ ویژه‌بردارها يِ همیلتنی متناظر با ویژه‌مقدارها يِ به‌ترتیب E و E' باشند، (3) می‌شود

$$\nabla\cdot\mathbf{j}+\frac{E-E'}{i\,\hbar}\,\rho=0. \tag{5}$$

2 حالت‌ها يِ مانا يِ نامقید در یک بعد

ذره ای به جرم ـِ m را در نظر بگیرید که مقید است در یک بعد تحت ـِ انرژی‌يِ‌پتانسیل ـِ V حرکت کند. فرض کنید $V(x)$ دور از مرکز ـِ پراکنش ثابت می‌شود، یعنی مرکز ـِ پراکنش جای‌گزیده است:

$$V(x)=\begin{cases} V_0, & x<M\\ \\ \tilde V_0, & x>N\end{cases}. \tag{6}$$

در این صورت همه یِ عددها یِ E با $E>V_0,\tilde V_0$ ویژه‌مقدار ِ همیلتنی یِ متناظر با چنین‌سیستم ی اند، و به ازا یِ هر یک از چنین E ها یی، این همیلتنی دو ویژه‌بردار ِ متمایز دارد. رفتار ِ تابعِ‌موج ِ متناظر با این ویژه‌بردارها دور از مرکز ِ پراکنش را می‌شود چنین گرفت.

$$\psi_k(x)=\begin{cases} e^{i\,k\,x}+R(k)\,e^{-i\,k\,x}, & x<M\\ \\ \tilde T(k)\,e^{i\,\tilde k\,x}, & x>N\end{cases}, \tag{7}$$

و

$$\tilde\psi_k(x)=\begin{cases} T(k)\,e^{-i\,k\,x}, & x<M\\ \\ e^{-i\,\tilde k\,x}+\tilde R(k)\,e^{i\,\tilde k\,x}, & x>N\end{cases}. \tag{8}$$

k و $\tilde k$ مثبت اند و

$$E=\frac{\hbar^2\,k^2}{2m}+V_0=\frac{\hbar^2\,\tilde k^2}{2m}+\tilde V_0. \tag{9}$$

تابع‌موج ِ (7) متناظر با جریان ی از ذرات است که از چپ به مرکز ِ پراکنش فرود می‌آید، و تابع‌موج ِ (8) متناظر با جریان ی از ذرات که از راست به مرکز ِ پراکنش فرود می‌آید.

E ها یی که بین ِ V_0 و $\tilde V_0$ اند هم ویژه‌مقدار ِ همیلتنی اند. اما به ازا یِ این E ها همیلتنی فقط یک ویژه‌بردار دارد. مثلاً اگر $V_0<E<\tilde V_0$، آن‌گاه

$$\psi_k(x)=\begin{cases} e^{i\,k\,x}+R(k)\,e^{-i\,k\,x}, & x<M\\ \\ \tilde{\mathcal{T}}(k)\,e^{-\tilde\kappa\,k\,x}, & x>N\end{cases}, \tag{10}$$

که $\tilde\kappa$ مثبت است و

$$E=\frac{\hbar^2\,k^2}{2m}+V_0=-\frac{\hbar^2\,\tilde\kappa^2}{2m}+\tilde V_0. \tag{11}$$

از مانسته یِ یک‌بعدی یِ (5) انتگرال می‌گیریم:

$$(E-E')\int_A^B \mathrm{d}x\;\phi^*\,\psi=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\phi^*\,\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}-\frac{\mathrm{d}\phi^*}{\mathrm{d}x}\,\psi\right)_A^B. \tag{12}$$

برا یِ حالت ی که $E>V_0,\tilde V_0$، عبارت‌ها یِ

$$\begin{aligned}\psi&=\psi_k+\alpha\,\tilde\psi_k,\\ \phi&=\psi_k+\beta\,\tilde\psi_k\end{aligned} \tag{13}$$

(با α و β یِ ثابت) را در (12) می‌گذاریم، و می‌گیریم $A<M$ و $B>N$. نتیجه می‌شود

$$
\begin{aligned}
0 \,=\, & i\,\tilde{k}\,[\beta^*\,e^{i\,\tilde{k}\,B} + (\tilde{T}^* + \beta^*\,\tilde{R}^*)\,e^{-i\,\tilde{k}\,B}]\,[-\alpha\,e^{-i\,\tilde{k}\,B} + (\tilde{T} + \alpha\,\tilde{R})\,e^{i\,\tilde{k}\,B}] \\
& + i\,\tilde{k}\,[-\beta^*\,e^{i\,\tilde{k}\,B} + (\tilde{T}^* + \beta^*\,\tilde{R}^*)\,e^{-i\,\tilde{k}\,B}]\,[\alpha\,e^{-i\,\tilde{k}\,B} + (\tilde{T} + \alpha\,\tilde{R})\,e^{i\,\tilde{k}\,B}] \\
& - i\,k\,[e^{-i\,k\,A} + (R^* + \beta^*\,T^*)\,e^{i\,k\,A}]\,[e^{i\,k\,A} - (R + \alpha\,T)\,e^{-i\,k\,A}] \\
& - i\,k\,[e^{-i\,k\,A} - (R^* + \beta^*\,T^*)\,e^{i\,k\,A}]\,[e^{i\,k\,A} + (R + \alpha\,T)\,e^{-i\,k\,A}], \qquad (14)
\end{aligned}
$$

یا

$$
\tilde{k}\,[-\beta^*\,\alpha + (\tilde{T}^* + \beta^*\,\tilde{R}^*)\,(\tilde{T} + \alpha\,\tilde{R})] + k\,[-1 + (R^* + \beta^*\,T^*)\,(R + \alpha\,T)] = 0. \qquad (15)
$$

این معادله به ازا يِ همه يِ مقدارها يِ α و β درست است. از این‌جا،

$$
\begin{aligned}
\tilde{k}\,\tilde{T}^*\,\tilde{T} + k\,R^*\,R \,&=\, k, && (16)\\
\tilde{k}\,\tilde{R}^*\,\tilde{R} + k\,T^*\,T \,&=\, \tilde{k}, && (17)\\
\tilde{k}\,\tilde{R}^*\,\tilde{T} + k\,T^*\,R \,&=\, 0, && (18)
\end{aligned}
$$

که می‌شود آن را نوشت

$$
\begin{pmatrix} R^* & \tilde{T}^* \\ T^* & \tilde{R}^* \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} k & 0 \\ 0 & \tilde{k} \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} R & T \\ \tilde{T} & \tilde{R} \end{pmatrix}
= \begin{pmatrix} k & 0 \\ 0 & \tilde{k} \end{pmatrix}. \qquad (19)
$$

از (16) تا (18)، ضمناً نتیجه می‌شود

$$
\begin{aligned}
|\tilde{R}| \,&=\, |R|, && (20)\\
\tilde{k}\,R^*\,\tilde{T} + k\,T^*\,\tilde{R} \,&=\, 0. && (21)
\end{aligned}
$$

در حالت ی که $V_0 < E < \tilde{V}_0$، به جا يِ (14) خواهیم داشت

$$
\begin{aligned}
0 \,=\, & -\tilde{\kappa}\,\tilde{\mathfrak{T}}^*\,e^{-\tilde{\kappa}\,B}\,\tilde{\mathfrak{T}}\,e^{\tilde{\kappa}\,B} + \tilde{\kappa}\,\tilde{\mathfrak{T}}^*\,e^{-\tilde{\kappa}\,B}\,\tilde{\mathfrak{T}}\,e^{\tilde{\kappa}\,B} \\
& - i\,k\,[e^{-i\,k\,A} + R^*\,e^{i\,k\,A}]\,[e^{i\,k\,A} - R\,e^{-i\,k\,A}] \\
& - i\,k\,[e^{-i\,k\,A} - R^*\,e^{i\,k\,A}]\,[e^{i\,k\,A} + R\,e^{-i\,k\,A}], \qquad (22)
\end{aligned}
$$

که برا يِ رسیدن به آن، در (13) گذاشته ایم $\alpha = \beta = 0$. نتیجه می‌شود

$$R^*\,R=1,\qquad V_0<E<\tilde V_0. \tag{23}$$

این بار می‌گیریم

$$\begin{aligned}\psi\;&=\;\psi_k,\\ \phi\;&=\;\psi_{k'}.\end{aligned} \tag{24}$$

در حالت ی که $E, E' > V_0, \tilde V_0$، معادله یِ (12) می‌شود

$$\begin{aligned}\int_A^B \mathrm{d}x\;\psi^*_{k'}\,\psi_k = \mathrm{pf}\left[\frac{\hbar^2}{2m\,(E-E')}\right]\{\; & -i\,(\tilde k+\tilde k')\,\tilde T'^*\,\tilde T\,e^{i\,(\tilde k-\tilde k')\,B}\\ & +i\,(k+k')\,[e^{i\,(k-k')\,A}-R'^*\,R\,e^{i\,(k'-k)\,A}]\\ & -i\,(k-k')\,[R\,e^{-i\,(k+k')\,A}-R'^*\,e^{i\,(k+k')\,A}]\}.\end{aligned} \tag{25}$$

با استفاده از

$$\lim_{S\to\pm\infty} e^{i\,S\,x}\,\mathrm{pf}\left(\frac{1}{x}\right)=\pm i\pi\delta(x), \tag{26}$$

نتیجه می‌شود

$$\begin{aligned}\lim_{\substack{A\to-\infty\\ B\to+\infty}}\int_A^B \mathrm{d}x\;\psi^*_{k'}\,\psi_k\;&=\;\pi[(1+|R|^2)\,\delta(k-k')+|\tilde T|^2\,\delta(\tilde k-\tilde k')]\\ &\quad+\pi(R+R'^*)\,\delta(k+k').\end{aligned} \tag{27}$$

با تعریف ِ

$$\langle\phi|\psi\rangle := \lim_{\substack{A\to-\infty\\ B\to+\infty}}\int_A^B \mathrm{d}x\;\phi^*\,\psi, \tag{28}$$

نتیجه می‌شود

$$\langle\psi_{k'}|\psi_k\rangle = 2\pi\delta(k-k'), \tag{29}$$

که در رسیدن به آن از (16)،

$$\frac{1}{\tilde k}\,\delta(\tilde k-\tilde k')=\frac{1}{k}\,\delta(k-k'), \tag{30}$$

و مثبت‌بودن ِ k و k' استفاده شده است. مثبت‌بودن ِ k و k' جمله ي آخر ِ طرف ِ راست ِ (27) را حذف می‌کند.

سرانجام، می‌گیریم

$$\begin{aligned} \psi &= \psi_k, \\ \phi &= \tilde{\psi}_{k'}. \end{aligned} \tag{31}$$

معادله يِ (12) می‌شود

$$\begin{aligned} \int_A^B \mathrm{d}x\ \tilde{\psi}_{k'}^*\,\psi_k = \mathrm{pf}\left[\frac{\hbar^2}{2m\,(E-E')}\right]\{ & -i\,(\tilde{k}+\tilde{k}')\,\tilde{R}'^*\,\tilde{T}\,e^{i\,(\tilde{k}-\tilde{k}')\,B} \\ & -i\,(k+k')\,T'^*\,R\,e^{i\,(k'-k)\,A} \\ & +i\,(\tilde{k}'-\tilde{k})\,\tilde{T}\,e^{i\,(\tilde{k}+\tilde{k}')\,B} \\ & +i\,(k-k')\,T'^*\,e^{i\,(k+k')\,A}]\}, \end{aligned} \tag{32}$$

و از آن‌جا،

$$\begin{aligned} \langle\tilde{\psi}_{k'}|\psi_k\rangle &= \pi[\tilde{R}^*\,\tilde{T}\,\delta(\tilde{k}-\tilde{k}')+T^*\,R\,\delta(k-k')] \\ &\quad +\pi[\tilde{T}\,\delta(\tilde{k}+\tilde{k}')+T'^*\,\delta(k+k')]. \end{aligned} \tag{33}$$

با استفاده از (30)، (18)، و این که k، k'، $\tilde{k}$، و $\tilde{k}'$ مثبت اند، نتیجه می‌شود

$$\langle\tilde{\psi}_{k'}|\psi_k\rangle = 0. \tag{34}$$

سرانجام (با محاسبه ای کاملاً مشابه با آن چه برا يِ رسیدن به (29) به کار رفت)

$$\langle\tilde{\psi}_{k'}|\tilde{\psi}_k\rangle = 2\pi\delta(\tilde{k}-\tilde{k}'). \tag{35}$$

معادله‌ها يِ (29)، (34)، و (35)، رابطه‌ها يِ طول و تعامد ِ ویژه‌بردارها يِ نامقید ِ انرژی اند. به‌ساده‌گی می‌شود نشان داد مثلاً (29) در حالت ِ $V_0 < E < \tilde{V}_0$ یا $V_0 < E' < \tilde{V}_0$ هم درست است. در این حالت (25) تبدیل می‌شود به

$$\begin{aligned} \int_A^\infty \mathrm{d}x\ \psi_{k'}^*\,\psi_k \,=\, \mathrm{pf}\left[\frac{\hbar^2}{2m\,(E-E')}\right]\{ & +i\,(k+k')\,[e^{i\,(k-k')\,A}-R'^*\,R\,e^{i\,(k'-k)\,A}] \\ & -i\,(k-k')\,[R\,e^{-i\,(k+k')\,A}-R'^*\,e^{i\,(k+k')\,A}]\}, \end{aligned} \tag{36}$$

و با استفاده از (23)، دوباره به (29) می‌رسیم.

3 پراکنش ـِ بسته‌ها یِ موج در یک بعد

بسته‌یِ‌موج ی متناظر با ذره ای به جرم ـِ m را در نظر بگیرید که مقید است در یک بعد حرکت کند و در زمان ـِ t_0 در طرف ـِ چپ ـِ یک مرکز ـِ پراکننده (متناظر با انرژی‌یِ‌پتانسیل ـِ V) و دور از آن است (یعنی مقدار ـِ تابعِ‌موج ـِ متناظر با آن، فقط به ازا یِ $M \ll x$ با V به شکل ـِ (6) قابلِ‌ملاحظه است). برا یِ بررسی یِ تحول ـِ این بسته‌یِ‌موج (ψ)، آن را بر حسب ـِ ویژه‌بردارها یِ همیلتنی بسط می‌دهیم. در این بسط حالت‌ها یِ مقید ظاهر نمی‌شوند، چون تابعِ‌موج ـِ متناظر با آن‌ها جای‌گزیده است و جاها یی که ψ (در زمان ـِ t_0) قابلِ‌ملاحظه است صفر می‌شود، پس ψ بر این حالت‌ها عمود است. به این ترتیب،

$$\psi(t_0, x) = \int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\, C(k)\, \psi_k(x) + \int \frac{\mathrm{d}\tilde{k}}{2\pi}\, \tilde{C}(k)\, \tilde{\psi}_k(x), \tag{37}$$

که

$$\begin{aligned} C(k) &= \int \mathrm{d}x\ \psi_k^*(x)\, \psi(t_0, x), \\ &= \int \mathrm{d}x\ [e^{-i\,k\,x} + R^*(k)\, e^{i\,k\,x}]\, \psi(t_0, x), \end{aligned} \tag{38}$$

و

$$\begin{aligned} \tilde{C}(k) &= \int \mathrm{d}x\ \tilde{\psi}_k^*(x)\, \psi(t_0, x), \\ &= \begin{cases} \displaystyle\int \mathrm{d}x\ T^*(k)\, e^{i\,k\,x}\, \psi(t_0, x), & E > V_0, \tilde{V}_0 \\ 0, & V_0 > E > \tilde{V}_0 \end{cases}. \end{aligned} \tag{39}$$

(در رابطه یِ (39)، اگر $V_0 > E > \tilde{V}_0$، آن‌گاه $\tilde{\psi}_k$ در x ها یِ طرف ـِ چپ ـِ مرکز ـِ پراکنش و دور از آن صفر است. پس $\tilde{C}(k)$ صفر می‌شود.)

دو حالت در نظر می‌گیریم:

i فرض کنید بسته یِ موج در زمان ـِ t_0 تکانه یِ تقریباًمشخص ی دارد و به طرف ـِ مرکز ـِ پراکننده می‌رود. این متناظر است با آن که در زمان ـِ t_0، طیف ـِ تکانه یِ بسته‌یِ‌موج حول ـِ $\hbar\, k_0$ (با $k_0 > 0$)

جای‌گزیده است. در این صورت بسته‌یِ‌موج در زمان ِ t_0 بر موج‌ها یِ تخت ِ با تکانه یِ منفی عمود است، و (38) و (39) می‌شوند

$$C(k) \;=\; \int \mathrm{d}x\; e^{-i\,k\,x}\,\psi(t_0,x),$$

$$\tilde{C}(k) \;=\; 0. \tag{40}$$

شکل ِ این بسته‌یِ‌موج در زمان ِ t می‌شود

$$\psi(t,x) = \int \frac{\mathrm{d}k\;\mathrm{d}y}{2\pi}\;\psi_k(x)\,e^{-i\,k\,y}\,e^{E\,(t-t_0)/(i\,\hbar)}\,\psi(t_0,y). \tag{41}$$

ناحیه یِ انتگرال‌گیری رو یِ k، فقط شامل ِ k ها یِ مثبت است. اما چون $C(k)$ جز در ناحیه یِ باریک ی حول ِ k_0 صفر است، می‌شود ناحیه یِ انتگرال‌گیری رو یِ k را همه یِ k ها گرفت. از این‌جا، در حالت ی که $E_0 > V_0, \tilde{V}_0$

$$\psi(t,x) = \begin{cases} \displaystyle\int \frac{\mathrm{d}k\;\mathrm{d}y}{2\pi}\;[e^{i\,k\,x} + R(k)\,e^{-i\,k\,x}]\,e^{-i\,k\,y}\,e^{E\,(t-t_0)/(i\,\hbar)}\,\psi(t_0,y), & x < M, \\ \displaystyle\int \frac{\mathrm{d}k\;\mathrm{d}y}{2\pi}\;\tilde{T}(k)\,e^{i\,\tilde{k}\,x}\,e^{-i\,k\,y}\,e^{E\,(t-t_0)/(i\,\hbar)}\,\psi(t_0,y), & x > N \end{cases}. \tag{42}$$

تعریف می‌کنیم

$$G_0(t,x;t_0,y) := \int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\;e^{i\,k\,(x-y)}\,e^{E\,(t-t_0)/(i\,\hbar)}. \tag{43}$$

G_0 انتشارگر ِ ذره یِ آزاد است [1]. با استفاده از این که ناحیه یِ انتگرال‌گیری رو یِ k، عملاً ناحیه ای باریک حول ِ k_0 است، انتگرال‌گیری رو یِ k در (42) به‌ساده‌گی انجام می‌شود. برا یِ محاسبه یِ انتگرال ِ اول در (42)، فاز ِ R را حول ِ $k = k_0$ بسط می‌دهیم. نتیجه می‌شود

$$\int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\;R(k)\,e^{i\,k\,(-x-y)}\,e^{E\,(t-t_0)/(i\,\hbar)} \;=\; R(k_0)\,e^{-i\,a\,k_0}$$

$$\times \int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\;e^{i\,k\,(a-x-y)}\,e^{E\,(t-t_0)/(i\,\hbar)},$$

$$=\; R(k_0)\,e^{-i\,a\,k_0}\,G_0(t,a-x;t_0,y), \tag{44}$$

که در آن a مشتق ِ فاز ِ R نسبت به k است:

$$a := \mathrm{Im}\left(\frac{\mathrm{d}\ln R}{\mathrm{d}k}\right). \tag{45}$$

به همین ترتیب، برا یِ محاسبه یِ انتگرال ـِ دوم در (42)، مقدار ـِ $\tilde{k}$ و فاز ـِ $\tilde{T}$ را حول ـِ $k = k_0$ بسط می‌دهیم. نتیجه می‌شود

$$\int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\,\tilde{T}(k)\,e^{i\,(\tilde{k}\,x-k\,y)}\,e^{E\,(t-t_0)/(i\,\hbar)} \;=\; \tilde{T}(k_0)\,e^{i\,[\tilde{k}_0\,x-k_0\,(\tilde{b}+c\,x)]}$$

$$\times\int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\,e^{i\,k\,(\tilde{b}+c\,x-y)}\,e^{E\,(t-t_0)/(i\,\hbar)},$$

$$\begin{aligned} &= \tilde{T}(k_0)\,e^{i\,[\tilde{k}_0\,x-k_0\,(\tilde{b}+c\,x)]}\\ &\quad\times G_0(t,\tilde{b}+c\,x;t_0,y), \end{aligned} \tag{46}$$

که در آن

$$\tilde{b} := \mathrm{Im}\left(\frac{\mathrm{d}\ln\tilde{T}}{\mathrm{d}k}\right),$$

$$c := \frac{\mathrm{d}\tilde{k}}{\mathrm{d}k} = \frac{k}{\tilde{k}}. \tag{47}$$

به این ترتیب،

$$\psi(t,x) = \begin{cases} \psi_0(t,x) + R(k_0)\,e^{-i\,a\,k_0}\,\psi_0(t,a-x), & x < M\\[2ex] \tilde{T}(k_0)\,e^{i\,[\tilde{k}_0\,x-k_0\,(\tilde{b}+c\,x)]}\,\psi_0(t,\tilde{b}+c\,x), & x > N \end{cases}, \tag{48}$$

که ψ_0 تابعِ‌موج ـِ متناظر با ذره ای به جرم ـِ m است که در انرژی‌یِ‌پتانسیل ـِ ثابت ـِ V_0 حرکت می‌کند و حالت ـَ‌ش در زمان ـِ t_0 با ψ توصیف می‌شود:

$$\psi_0(t,x) := \int \mathrm{d}y\;G_0(t,x;t_0,y)\,\psi(t_0,y). \tag{49}$$

برا یِ ذره یِ آزاد، تحول ـِ مقدار ـِ چشم‌داشتی یِ مکان با زمان به این شکل است.

$$\begin{aligned} X_0(t) &:= \int \mathrm{d}x\;x\,|\psi_0(t,x)|^2,\\ &= X_0(t_0) + \frac{\hbar\,k_0}{m}\,(t-t_0). \end{aligned} \tag{50}$$

(ψ_0 را بهنجار گرفته ایم.) حالا سه‌بسته‌یِ‌موج ـِ آزاد ی که در (48) ظاهر شده اند را در نظر بگیرید. مقدار ـِ چشم‌داشتی یِ مکان ـِ متناظر با هر یک از این بسته‌ها، از رابطه ای مشابه با (50) به دست می‌آید. پهنا یِ هر یک هم برا یِ t ها یِ بزرگ با $\sqrt{t}$ متناسب است. پس برا یِ t ها یِ به حدِکافی‌بزرگ، فاصله یِ مقدار ـِ چشم‌داشتی یِ مکان ـِ متناظر با هر یک از این بسته‌ها از ناحیه یِ $[M, N]$ متناسب با t، و پهنا یِ هر یک از این بسته‌ها متناسب با $\sqrt{t}$ است. بنابراین هر یک از این بسته‌ها کاملاً در یک ی از ناحیه‌ها یِ $x < M$ یا $x > N$ است، و این که بسته یِ خاص ی در کدام ناحیه است، از مقدار ـِ چشم‌داشتی یِ مکان ـِ متناظر با آن تعیین می‌شود. با استفاده از (50)،

$$\int \mathrm{d}x\; x\, |\psi_0(t, a - x)|^2 \;=\; a - X_0(t_0) - \frac{\hbar\, k_0}{m}\,(t - t_0), \tag{51}$$

$$\int \mathrm{d}x\; x\, |\psi_0(t, \tilde{b} + c\,x)|^2 \;=\; \frac{1}{c}\,\left[\frac{\tilde{k}_0\, X_0(t_0)}{k_0} + \frac{\hbar\, \tilde{k}_0}{m}\,(t - t_0) - \frac{\tilde{k}_0\, \tilde{b}}{k_0}\right]. \tag{52}$$

از (50) دیده می‌شود مقدار ـِ چشم‌داشتی یِ مکان ـِ متناظر با جمله یِ اول ـِ $\psi(t, x)$ در $x < M$، برا یِ t ها یِ بزرگ در ناحیه یِ $x > N$ است. پس این جمله در t ها یِ بزرگ نقش ی ندارد. به این ترتیب، در t ها یِ بزرگ تابع ـِ موج دو بخش دارد:

$$\psi(t, x) = \begin{cases} \psi_R(t, x) := R(k_0)\, e^{-i\,a\,k_0}\, \psi_0(t, a - x), & x < M \\ \\ \psi_T(t, x) := \tilde{T}(k_0)\, e^{i\,[\tilde{k}_0\,x - k_0\,(\tilde{b} + c\,x)]}\, \psi_0(t, \tilde{b} + c\,x), & x > N \end{cases}, \tag{53}$$

و داریم

$$\int \mathrm{d}x\; |\psi_R(t, x)|^2 \;=\; |R(k_0)|^2, \tag{54}$$

$$\int \mathrm{d}x\; |\psi_T(t, x)|^2 \;=\; \frac{\tilde{k}_0}{k_0}\, |\tilde{T}(k_0)|^2. \tag{55}$$

این‌ها به ترتیب احتمال ـِ بازتابش ـِ ذره یا عبور ـِ ذره از مرکز ـِ پراکننده اند، که همان ضریب‌ها یِ بازگشت و عبور اند که از تحلیل ـِ مستقیم ـِ حالت‌ها یِ مانا یِ نامقید به دست می‌آیند [1]. مقدار ـِ چشم‌داشتی یِ مکان ـِ متناظر با هر یک از این دوبسته‌یِ‌موج ـِ تشکیل‌دهنده یِ ψ می‌شود

$$X_R(t) \;=\; a - X_0(t_0) - \frac{\hbar\, k_0}{m}\,(t - t_0), \tag{56}$$

$$X_T(t) \;=\; \frac{\tilde{k}_0\, X_0(t_0)}{k_0} + \frac{\hbar\, \tilde{k}_0}{m}\,(t - t_0) - \frac{\tilde{k}_0\, \tilde{b}}{k_0}. \tag{57}$$

رابطه‌ ی (56) ذره ای را توصیف می‌کند که در طرف ِ چپ ِ مرکز ِ پراکننده، با سرعت ِ $(\hbar k_0/m)$ به طرف ِ چپ حرکت می‌کند. (57) هم ذره ای را توصیف می‌کند که در طرف ِ راست ِ مرکز ِ پراکننده، با سرعت ِ $(\hbar \tilde{k}_0/m)$ به طرف ِ راست حرکت می‌کند. به این ترتیب، ذره ای که به طرف ِ مرکز ِ پراکننده می‌رود با احتمال ِ معین ی از آن می‌گذرد و در این صورت سرعت َش به همان اندازه ای تغییر می‌کند که از مکانیک ِ کلاسیک انتظار می‌رود، و با احتمال ِ معین ی از مرکز ِ پراکننده باز می‌تابد و در این صورت سرعت َش منفی می‌شود.

در حالت ِ خاص ی که $\tilde{V}_0$ و V_0 برابر باشند، $\tilde{k}_0$ هم با k_0 برابر می‌شود و (57) می‌شود

$$X_T(t) = X_0(t) - \tilde{b}$$

$$= X_0\left(t - \frac{m\,\tilde{b}}{\hbar\,k_0}\right). \qquad (58)$$

این یعنی ذره ای که از مرکز ِ پراکننده گذشته، به فاصله‌ ی $\tilde{b}$ یا به اندازه‌ ی زمان ِ $m\,\tilde{b}/(\hbar\,k_0)$ عقب افتاده.

در حالت ی که $V_0 < E_0 < \tilde{V}_0$،

$$\psi(t,x) = \begin{cases} \displaystyle\int \frac{\mathrm{d}k\ \mathrm{d}y}{2\pi}\,[e^{i\,k\,x} + R(k)\,e^{-i\,k\,x}]\,e^{-i\,k\,y}\,e^{E\,(t-t_0)/(i\,\hbar)}\,\psi(t_0,y), & x < M, \\ \displaystyle\int \frac{\mathrm{d}k\ \mathrm{d}y}{2\pi}\,\tilde{\mathfrak{T}}(k)\,e^{-\tilde{\kappa}\,x}\,e^{-i\,k\,y}\,e^{E\,(t-t_0)/(i\,\hbar)}\,\psi(t_0,y), & x > N \end{cases}. \qquad (59)$$

در این حالت انتگرال ِ اول عوض نمی‌شود. برا یِ محاسبه‌ یِ انتگرال ِ دوم، داریم

$$\int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\,\tilde{\mathfrak{T}}(k)\,e^{-\tilde{\kappa}\,x - i\,k\,y}\,e^{E\,(t-t_0)/(i\,\hbar)} = \tilde{\mathfrak{T}}(k_0)\,e^{-\tilde{\kappa}_0\,x - i\,k_0\,\tilde{b}'}$$

$$\times \int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\,e^{i\,k\,(\tilde{b}'-y)}\,e^{E\,(t-t_0)/(i\,\hbar)},$$

$$= \tilde{\mathfrak{T}}(k_0)\,e^{-\tilde{\kappa}_0\,x - i\,k_0\,\tilde{b}'}\,G_0(t,\tilde{b}';t_0,y), \qquad (60)$$

که در آن

$$\tilde{b}' := \mathrm{Im}\left(\frac{\mathrm{d}\ln\tilde{\mathfrak{T}}}{\mathrm{d}k}\right). \qquad (61)$$

به این ترتیب، مانسته‌ یِ (48) می‌شود

$$\psi(t,x) = \begin{cases} \psi_0(t,x) + R(k_0)\, e^{-i\,a\,k_0}\, \psi_0(t, a-x), & x < M \\ \\ \tilde{\mathfrak{T}}(k_0)\, e^{-\tilde{\kappa}_0\,x - i\,k_0\,\tilde{b}'}\, \psi_0(t, \tilde{b}'), & x > N \end{cases}. \tag{62}$$

مقدار ـ $\psi_0(t,\tilde{b}')$ در t ها یِ بزرگ صفر است. پس در این حالت هم $\psi(t,x)$ به همان شکل ـ (53) است، اما با $\psi_T = 0$. یعنی موج ـ عبوری نداریم. موج ـ بازتابیده به همان شکل ـ قبل است، و البته همه یِ موج باز می‌تابد. این از (23) و (54) نتیجه می‌شود.

ii فرض کنید بسته یِ موج در زمان ـ t_0 تکانه یِ تقریباًمشخص ی دارد و از مرکز ـ پراکننده دور می‌شود. این متناظر است با آن که در زمان ـ t_0، طیف ـ تکانه یِ بسته‌یِ‌موج حول ـ $(-\hbar\,k_0)$ (با $k_0 > 0$) جای‌گزیده است. در این صورت بسته‌یِ‌موج در زمان ـ t_0 بر موج‌ها یِ تخت ـ با تکانه یِ مثبت عمود است، و (38) و (39) می‌شوند

$$C(k) \;=\; \int \mathrm{d}x\; R^*(k)\, e^{i\,k\,x}\, \psi(t_0, x),$$

$$\tilde{C}(k) \;=\; \int \mathrm{d}x\; T^*(k)\, e^{i\,k\,x}\, \psi(t_0, x). \tag{63}$$

شکل ـ این بسته‌یِ‌موج در زمان ـ t می‌شود

$$\psi(t,x) \;=\; \int \frac{\mathrm{d}k\;\mathrm{d}y}{2\pi}\; \psi_k(x)\, R^*(k)\, e^{i\,k\,y}\, e^{E\,(t-t_0)/(i\,\hbar)}\, \psi(t_0, y)$$

$$+ \int \frac{\mathrm{d}\tilde{k}\;\mathrm{d}y}{2\pi}\; \tilde{\psi}_k(x)\, T^*(k)\, e^{i\,k\,y}\, e^{E\,(t-t_0)/(i\,\hbar)}\, \psi(t_0, y). \tag{64}$$

فرض کنید $E_0 > V_0, \tilde{V}_0$. در این حالت،

$$\psi(t,x) \;=\; \int \frac{\mathrm{d}k\;\mathrm{d}y}{2\pi}\; \left\{ [e^{i\,k\,x} + R(k)\, e^{-i\,k\,x}]\, R^*(k) + \frac{\mathrm{d}\tilde{k}}{\mathrm{d}k}\, T(k)\, e^{-i\,k\,x}\, T^*(k) \right\}$$

$$\times e^{i\,k\,y}\, e^{E\,(t-t_0)/(i\,\hbar)}\, \psi(t_0, y), \qquad x < M, \tag{65}$$

و

$$\psi(t,x) \;=\; \int \frac{\mathrm{d}\tilde{k}\;\mathrm{d}y}{2\pi}\; \left\{ \frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}\tilde{k}}\, \tilde{T}(k)\, e^{i\,\tilde{k}\,x}\, R^*(k) + [e^{-i\,\tilde{k}\,x} + \tilde{R}(k)\, e^{i\,\tilde{k}\,x}]\, T^*(k) \right\}$$

$$\times e^{i\,k\,y}\, e^{E\,(t-t_0)/(i\,\hbar)}\, \psi(t_0, y), \qquad x > N. \tag{66}$$

داریم

$$
\begin{aligned}
|R|^2+\frac{\mathrm{d}\tilde{k}}{\mathrm{d}k}\,|T|^2 &= |\tilde{R}|^2+\frac{k}{\tilde{k}}\,|T|^2,\\
&= 1,
\end{aligned}
\tag{67}
$$

که برا یِ رسیدن به آن (20) و (17) به کار رفته است، و

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}\tilde{k}}\,R^*\,\tilde{T}+T^*\,\tilde{R} &= \frac{\tilde{k}}{k}\,R^*\,\tilde{T}+T^*\,\tilde{R},\\
&= 0,
\end{aligned}
\tag{68}
$$

که برا یِ رسیدن به آن (21) به کار رفته است. با استفاده از (67) و (68)، رابطه‌ها یِ (65) و (66) می‌شوند

$$
\psi(t,x)=\begin{cases}\displaystyle\int\frac{\mathrm{d}k\ \mathrm{d}y}{2\pi}\,[R^*(k)\,e^{i\,k\,x}+e^{-i\,k\,x}]\,e^{i\,k\,y}\,e^{E\,(t-t_0)/(i\,\hbar)}\,\psi(t_0,y), & x<M\\ \displaystyle\int\frac{\mathrm{d}\tilde{k}\ \mathrm{d}y}{2\pi}\,T^*(k)\,e^{-i\,\tilde{k}\,x}\,e^{i\,k\,y}\,e^{E\,(t-t_0)/(i\,\hbar)}\,\psi(t_0,y), & x>N\end{cases}. \tag{69}
$$

با استدلال ی مشابه ِ آن چه برا یِ رسیدن به (53) به کار رفت، دیده می‌شود جمله یِ متناسب با R^* بسته‌یِ‌موج یِ را توصیف می‌کند که در طرف ِ راست ِ مرکز ِ پراکننده است و به طرف ِ راست می‌رود، و جمله یِ متناسب با T^* بسته‌یِ‌موج ی را که در طرف ِ چپ ِ مرکز ِ پراکننده است و به طرف ِ چپ می‌رود. پس در $t>t_0$، این دوجمله اثر ی در ψ ندارند. از این‌جا نتیجه می‌شود

$$
\psi(t,x)=\psi_0(t,x),\qquad t>t_0. \tag{70}
$$

حالا فرض کنید $V_0<E_0<\tilde{V}_0$. در این حالت انتگرال ِ دوم در طرف ِ راست ِ (64) صفر می‌شود، چون ناحیه یِ انتگرال‌گیری $k=k_0$ را در بر ندارد و انتگرال‌ده فقط در ناحیه یِ باریک ی حول ِ $k=k_0$ غیرِصفر است. به این ترتیب (64) می‌شود

$$
\psi(t,x)=\begin{cases}\displaystyle\int\frac{\mathrm{d}k\ \mathrm{d}y}{2\pi}\,[R^*(k)\,e^{i\,k\,x}+e^{-i\,k\,x}]\,e^{i\,k\,y}\,e^{E\,(t-t_0)/(i\,\hbar)}\,\psi(t_0,y), & x<M\\ \displaystyle\int\frac{\mathrm{d}k\ \mathrm{d}y}{2\pi}\,R^*(k)\,\tilde{\mathcal{T}}(k)\,e^{-\tilde{\kappa}\,x}\,e^{i\,k\,y}\,e^{E\,(t-t_0)/(i\,\hbar)}\,\psi(t_0,y), & x>N\end{cases}, \tag{71}
$$

که در آن (23) به کار رفته، و این که انتگرال‌ده جز در ناحیه یِ باریک ی حول ِ $k=k_0$ صفر است. دیده می‌شود جمله یِ متناسب با $\mathcal{T}$ یک نمایی یِ کاهنده از x ضرب در $\psi_0(t,\tilde{b}'')$ است، که $\tilde{b}''$ مشتق ِ

فاز ـ $R^* \tilde{\mathfrak{T}}$ نسبت به k است. ψ_0 تابعِ‌موج ـ ذره ای را توصیف می‌کند که به چپ می‌رود. پس بخش ی از ψ که متناسب با $\tilde{\mathfrak{T}}$ است، در $t > t_0$ صفر است. بخش ـ باقی‌مانده هم شبیه ـ حالت ـ $E_0 > V_0, \tilde{V}_0$ است. پس در حالت ـ $V_0 < E_0 < \tilde{V}_0$ هم (70) برقرار است.

چنان که انتظار می‌رفت، در این حالت بسته ي موج مثل ـ یک بسته‌يِ‌موج ـ آزاد به حرکت ادامه می‌دهد و از مرکز ـ پراکننده دور می‌شود.

4 مرجع

[1] Ramamurti Shankar; "Principles of quantum mechanics", 2nd edition (Plenum press, 1994) chapter 5

5 اسم‌ها يِ خاص

[a] Schrödinger

[b] Planck