

# بررسی اثر تابع ویژه در مقدار چشم‌داشتی کمیات فیزیکی یک ذره در یک چاه پتانسیل دوگانه متقارن

حسین گل نبی<sup>۱</sup>

تاریخ ارسال مهر ۹۵، پذیرش آبان ۹۵

**چکیده:** حل مسائل مکانیک کوانتومی نیاز به حل معادله شرودینگر دارد که در آن مقادیر ویژه و توابع ویژه بستگی به پتانسیل کاربردی دارند. با توجه به اهمیت موضوع در این مقاله کمیات فیزیکی یک ذره با استفاده از پتانسیل چاه دوگانه متقارن بررسی می‌شوند. در این مقاله، مقادیر چشم‌داشتی با استفاده از نرم افزار CUPS بررسی می‌شوند و اثر انتخاب توابع ویژه مختلف را بر روی کمیات فیزیکی مورد مطالعه قرار می‌دهیم. در انتها به تفسیر نتایج و نقش هر یک از این پارامترها در تغییرات حاصل شده و شرایط ویژه آنها می‌پردازیم.

**واژه‌های کلیدی:** مکانیک کوانتومی، معادله شرودینگر، چاه پتانسیل متقارن، مقادیر چشم‌داشتی، نرم افزار.

## ۱. مقدمه

مکانیک کوانتومی شاخه‌ای بنیادی از فیزیک نظری است که با پدیده‌های فیزیکی در مقیاس میکروسکوپی سر و کار دارد [۱]. بنیادی‌ترین تفاوت مکانیک کوانتومی با مکانیک کلاسیک در قلمرو کوانتومی است که به ذرات در اندازه‌های اتمی و زیر اتمی می‌پردازد. مکانیک کوانتومی بنیادی‌تر از مکانیک نیوتنی و الکترومغناطیس کلاسیک است، زیرا در مقیاس‌های اتمی و زیر اتمی که این نظریه‌ها با شکست مواجه می‌شوند، می‌تواند با دقت بیشتری بسیاری از پدیده‌ها را توصیف کند.

دومین تفاوت، مسئله کوانتتش است، یعنی ناپیوستگی در کمیت‌های فیزیکی است. در وضعیت کنونی درک مکانیک کوانتومی نقشی اساسی در توصیف و فهم پدیده

های طبیعی ایفا می‌کند. در واقع نمی‌توان پدیده‌هایی را که در مقیاس بسیار کوچک رخ می‌دهند خارج از چارچوب فیزیک کوانتومی توضیح داد. پدیده‌های بسیاری وجود دارند که در مقیاس میکروسکوپی، رفتار کوانتومی طبیعت را بروز می‌دهند. از این نظر است که می‌توان گفت مکانیک کوانتومی پایه درک کنونی ما از تمام پدیده‌های طبیعی، از جمله آن‌هایی است که به طور متداول در شیمی، زیست‌شناسی و غیره بررسی می‌شوند. با پیشرفت علوم رایانه‌ای و روش‌های محاسباتی امروزه مدل‌سازی مسایل فیزیکی و انجام اینگونه محاسبات مهم هستند [۲، ۳]. با توجه به اهمیت موضوع در این مقاله بررسی اثر تابع ویژه در مقدار چشم‌داشتی کمیات فیزیکی یک ذره در چاه پتانسیل دوگانه متقارن گزارش می‌شود.

۱. استاد، گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران

شمال. آدرس پست الکترونیک: golnabi@sharif.edu

تلفن: +۹۸۲۱۴۴۶۵۹۶۱۱.

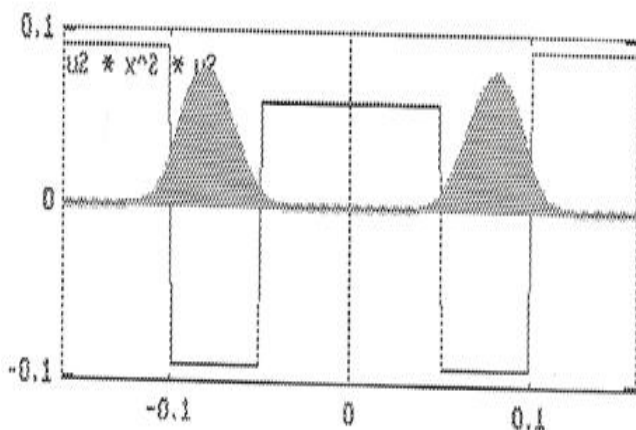
تغییرات تابع ویژه  $u_2$  را نشان می‌دهد که در بازه مذکور دارای یک بیشینه و کمینه است. همان‌طور که مشاهده می‌کنید تابع فرد است. پایین‌ترین تابع یعنی  $u_2$  احتمال پیدا نمودن ذره را در نقاط  $-0.075$  و  $0.075$  به ترتیب در چاه پتانسیل سمت راست و سمت چپ نشان می‌دهد. تابع  $u_3$  احتمال وجود ذره را به ترتیب در نقاط  $-0.08$ ،  $-0.06$ ،  $0.06$  و  $0.08$  نشان می‌دهد. همچنین تابع بالاتر  $u_4$  احتمال وجود ذره را به ترتیب در نقاط  $-0.08$ ،  $-0.06$ ،  $0.06$  و  $0.08$  نشان می‌دهد.

### ۳. تحلیل و تفسیر نتایج

با استفاده از نرم افزار CUPS محاسبات مختلفی انجام شده است که نتایج حاصله در این بخش بررسی می‌شوند. این محاسبات شامل کمیات فیزیکی مانند موقعیت، اندازه حرکت، و انرژی ذره می‌شوند که در زیر به ترتیب بررسی خواهند شد.

#### ۳-۱. اثر تابع ویژه بر موقعیت ذره

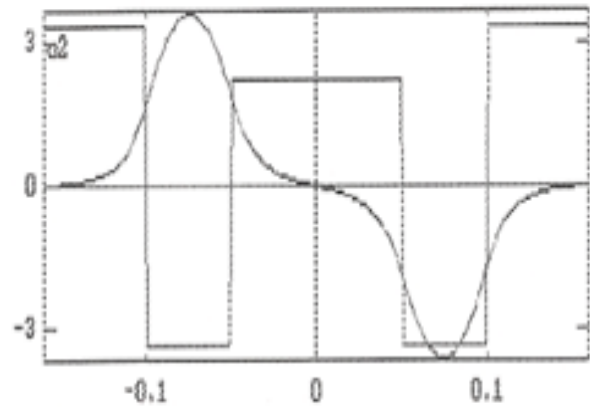
در این بخش ابتدا مقدار چشم‌داشتی موقعیت ذره یعنی  $\langle X \rangle$  برای سه تابع ویژه بررسی شده‌اند. با توجه به اینکه پاریتی  $X$  فرد است، مطابق انتظار این مقدار چشم‌داشتی برای هر سه تابع ویژه برابر صفر است. در بررسی دیگر مقدار چشم‌داشتی مربع موقعیت ذره یعنی  $\langle X^2 \rangle$  برای سه تابع ویژه بررسی شده‌اند که نتایج در شکل ۲ رسم شده است.



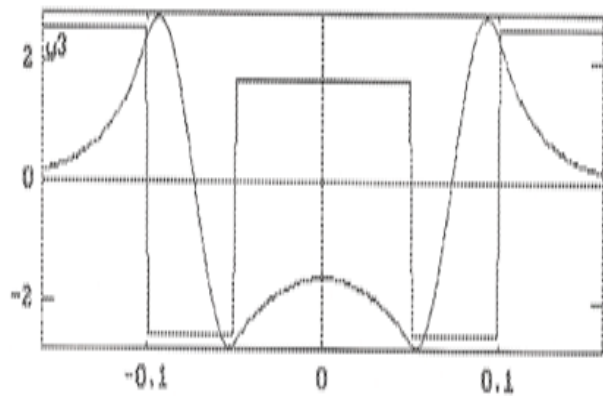
(a)

### ۲. انتخاب توابع ویژه مختلف

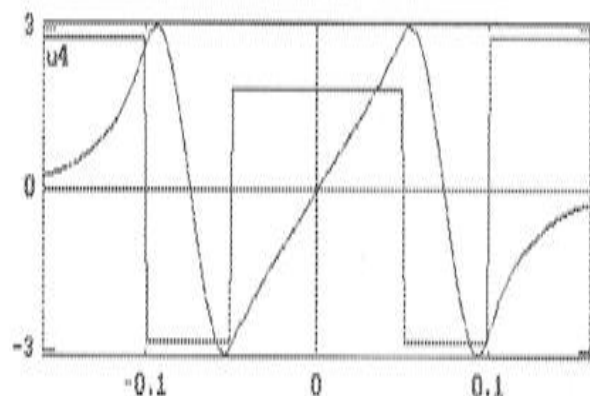
نرم افزار CUPS انتخاب توابع ویژه مختلف را امکان‌پذیر می‌سازد [۴، ۵]. بعنوان مثال شکل ۱ را در نظر بگیرید که سه توابع ویژه مختلف را نشان می‌دهد.



(a)



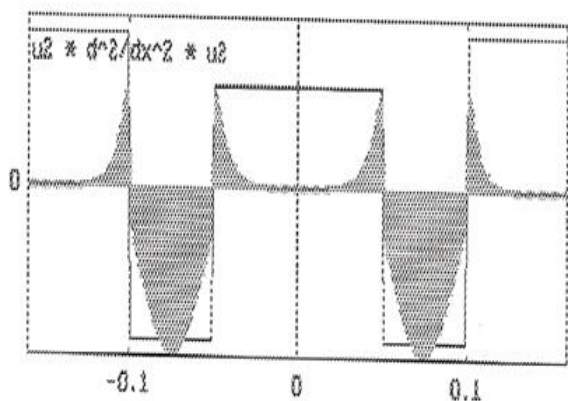
(b)



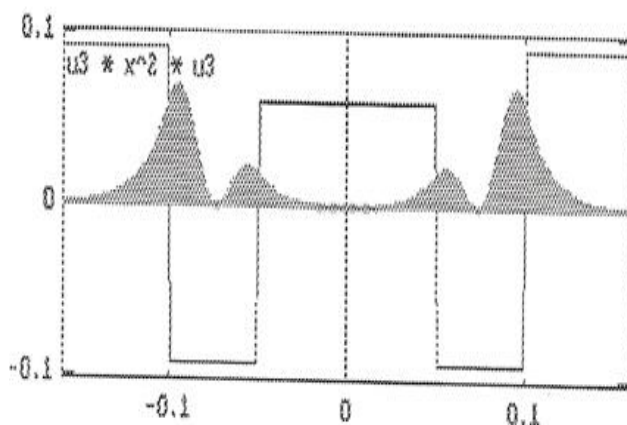
(c)

شکل ۱. سه توابع ویژه مختلف را نشان می‌دهد.

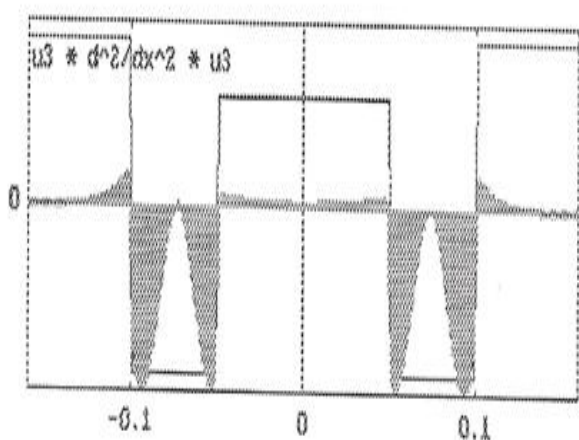
شکل 3(a) با نماد  $u_2$  و شکل 3(b) با نماد  $u_3$  و شکل 3(c) با نماد  $u_4$  سه تابع را نشان می‌دهند. تصویر (a)



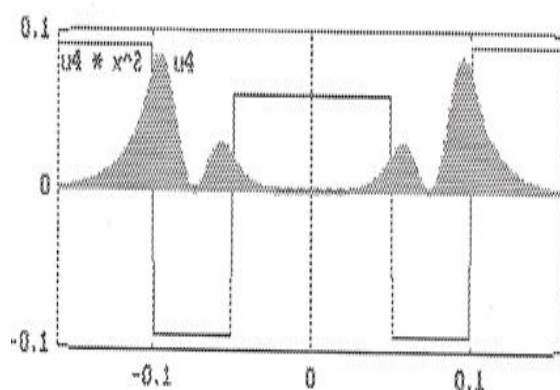
(a)



(b)



(b)



(c)

شکل ۲. نمودار تغییرات مقدار چشم‌داشتی مربع

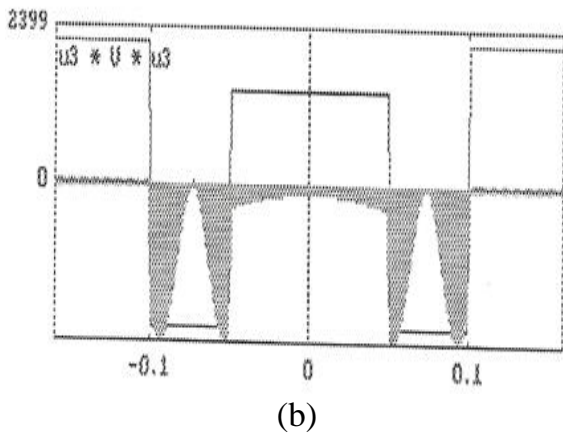
موقعیت برای سه تابع ویژه.

شکل ۲ تغییرات مربوط به مقدار چشم‌داشتی مربع موقعیت را برای یک چاه پتانسیل یک بعدی در بازه  $[-0.1, 0.1]$  نشان می‌دهد. مطابق معمول شکل 3(a) مربوط به تابع ویژه  $u_2$  و شکل 3(b) مربوط به تابع ویژه  $u_3$  و شکل 3(c) مربوط به تابع ویژه  $u_4$  است. در شکل ۳ بطور کلی انتگرال کمیات با سطح زیر منحنی‌ها نمایش داده شده‌اند. برای تابع ویژه  $u_2$  دو قله در نقاط  $-0.075$  و  $0.075$  مشاهده می‌شوند. برای تابع ویژه  $u_3$  مطابق شکل (b) چهار قله در نقاط  $-0.08$ ،  $-0.06$ ،  $0.06$  و  $0.08$  مشاهده می‌شوند. برای تابع ویژه  $u_4$  مطابق شکل (c) چهار قله در نقاط  $-0.06$ ،  $-0.08$ ،  $0.08$  و  $0.06$  مشاهده می‌شوند. همان‌طور که مشاهده می‌کنید مقدار چشم‌داشتی به دلیل این‌که هر دو تابع زوج هستند صفر نمی‌شود و مقداری مثبت است.

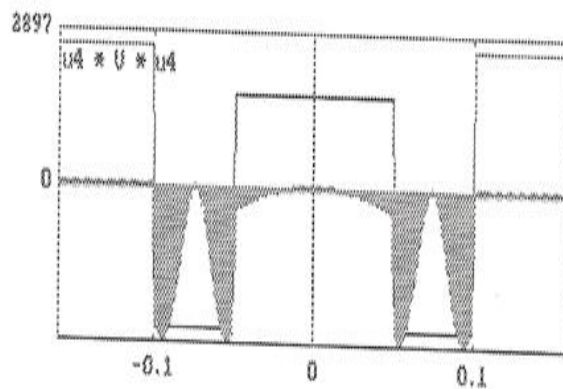
شکل ۳. نمودار تغییرات مقدار چشم‌داشتی مشتق دوم موقعیت (اندازه حرکت) برای سه تابع ویژه.

### ۳-۲. اثر تابع ویژه بر اندازه حرکت ذره

تغییرات مربوط به مقدار چشم‌داشتی مشتق موقعیت را برای چاه پتانسیل داده شده بررسی می‌کنیم. با توجه به این‌که عملگر اندازه حرکت ذره در فضای موقعیت



(b)



شکل ۴. نمودار تغییرات مقدار چشم‌داشتی انرژی پتانسیل ذره برای سه تابع ویژه.

با ملاحظه شکل‌های a و b و c مشخص می‌شود که نتیجه انتگرال منفی است که نشان می‌دهد مقدار انرژی پتانسیل منفی برای هر سه، با افزایش مرتبه تابع ویژه، افزایش می‌یابد. مطابق شکل (a) دو قله منفی در نقاط  $0.075$  و  $-0.075$  مشاهده می‌شوند. برای تابع ویژه  $u_3$  مطابق شکل (b) چهار قله در نقاط  $0.08$ ،  $-0.06$ ،  $0.06$  و  $-0.08$  مشاهده می‌شوند. برای تابع ویژه  $u_4$  مطابق شکل (c) چهار قله در نقاط  $0.06$ ،  $-0.06$ ،  $0.08$  و  $-0.08$  مشاهده می‌شوند. و  $0.08$  مشابه با تابع  $u_3$  مشاهده می‌شوند.

#### ۳-۴. اثر تابع ویژه بر انرژی کل ذره

مانند حالت‌های قبل ابتدا اثر تابع ویژه  $u_2$  بررسی شده است و سپس اثر تابع ویژه  $u_3$  و  $u_4$  بررسی شده‌اند. مقدار چشم‌داشتی انرژی کل همانند انرژی پتانسیل بررسی شده است و نتایج در شکل ۵ نمایش داده شده‌اند. با ملاحظه شکل‌های (a) و (b) و (c) مشخص است

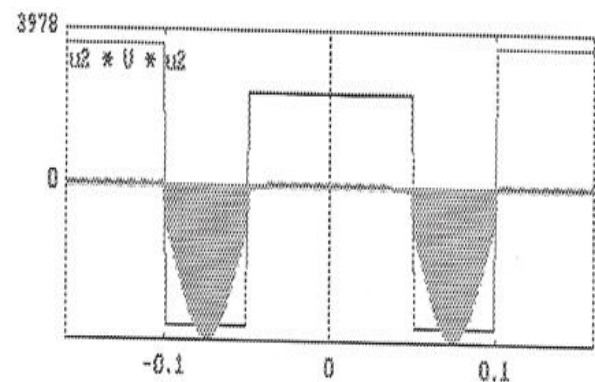
به صورت مشتق تعریف می‌شود در نتیجه این عملگر بیان‌کننده مقدار چشم‌داشتی اندازه حرکت ذره تحت این پتانسیل است.

ابتدا اثر تابع ویژه  $u_2$  بررسی شده که متقارن است و دارای یک کمینه و بیشینه می‌باشد و سپس اثر تابع ویژه  $u_3$  و  $u_4$  بررسی شده‌اند. مقدار چشم‌داشتی تابع مشتق بررسی شده است که به دلیل فرد بودن تابع مشتق و زوج بودن مربع تابع ویژه حاصل برای هر سه تابع برابر صفر است. این مقدار با بالا رفتن تابع ویژه تغییری نمی‌کند و تغییرات تابع همانند تغییرات موقعیت ذره است.

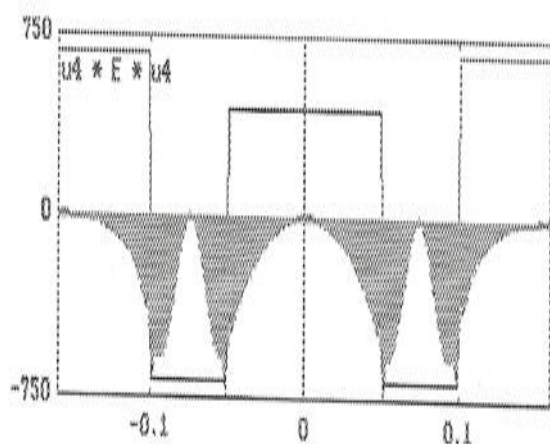
تغییرات تابع مشتق دوم را می‌توان با تغییرات  $p^2$  مشابه دانست. با توجه به این نکته که  $K=P^2/m$  در نتیجه با مشاهده تغییرات این تابع تغییرات انرژی جنبشی ذره را می‌توان بدست آورد. ابتدا تابع ویژه  $u_2$  که دارای یک بیشینه و کمینه می‌باشد را بررسی می‌کنیم و سپس اثر تابع ویژه  $u_3$  و  $u_4$  را بررسی می‌کنیم. مقدار چشم‌داشتی تابع مشتق دوم در شکل ۳ به تصویر کشیده شده است که حاصل آن منفی می‌باشد ولی با توجه به علامت منفی در تعریف عملگر انرژی جنبشی ذره مثبت می‌شود.

#### ۳-۳. اثر تابع ویژه بر انرژی پتانسیل ذره

ابتدا اثر تابع ویژه  $u_2$  بررسی شده و سپس اثر تابع ویژه  $u_3$  و  $u_4$  بررسی شده‌اند. مقدار چشم‌داشتی انرژی پتانسیل بررسی شده است و نتایج در شکل ۴ نمایش داده شده‌اند.



(a)



(c)

شکل ۵. نمودار تغییرات مقدار چشم‌داشتی انرژی کل ذره برای سه تابع ویژه.

#### ۴. مقایسه نتایج و نتیجه‌گیری

برای مقایسه بهتر مقدار چشم‌داشتی کمیات فیزیکی برحسب توابع ویژه مختلف  $u_2$ ,  $u_3$ , و  $u_4$  در جدول شماره ۱ آمده‌اند. همانطوری که بحث شد با توجه به اینکه پاریتی  $x$  فرد است مطابق انتظار مقدار چشم‌داشتی موقعیت مستقل از تابع ویژه است و برای هر سه تابع ویژه برابر صفر است.

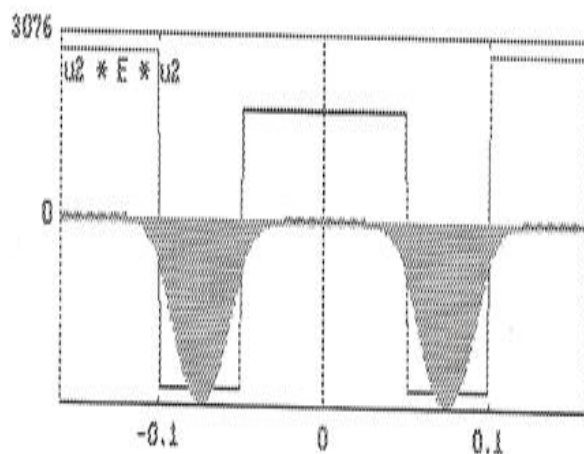
جدول شماره ۱: مقدار چشم‌داشتی کمیات فیزیکی بر حسب توابع مختلف.

Expectation	$u_2$	$u_3$	$u_4$
$x$	۰	۰	۰
$x^2$	۰/۰۰۵۸	۰/۰۰۵۰	۰/۰۰۶۱
$d/dx$	۰	۰	۰
$d^2/dx^2$	-۱۱۵۵/۵	-۲۲۹۵/۹	-۳۰۵۹/۹
$x.d/dx$	-۰/۴۹۹۳	-۰/۴۹۸۶	-۰/۴۹۸۱
$d/dx.x$	۰/۴۹۹۳	۰/۴۹۸۶	۰/۴۹۸۱
$V$	-۲۷۶/۰	-۱۵۶/۲	-۱۷۴/۹
$E$	-۲۳۱/۹	-۶۸/۷	-۶۲/۲

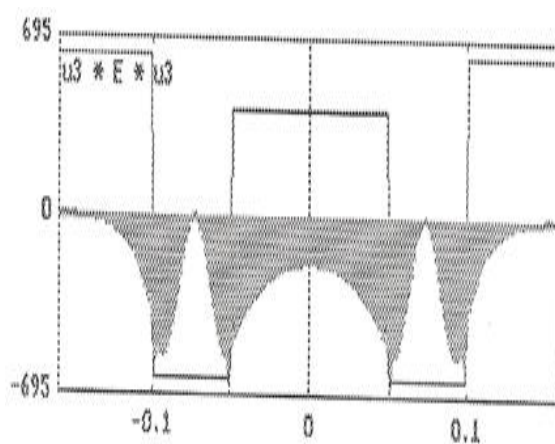
برای مقدار چشم‌داشتی  $x^2$  همان‌طور که در جدول شماره ۱ مشاهده می‌شود مقدار چشم‌داشتی به دلیل

که نتیجه انتگرال منفی است و نشان‌دهنده مقدار انرژی کل منفی برای هر سه تابع ویژه است.

مطابق شکل (a) دو قله منفی در نقاط  $-۰/۰۷۵$  و  $۰/۰۷۵$  مشاهده می‌شوند. برای تابع ویژه  $u_3$  مطابق شکل (b) چهار قله در نقاط  $-۰/۰۸$ ،  $-۰/۰۶$ ،  $۰/۰۶$  و  $۰/۰۸$  مشاهده می‌شوند. برای تابع ویژه  $u_4$  مطابق شکل (c) دوباره چهار قله در نقاط  $-۰/۰۸$ ،  $-۰/۰۶$ ،  $۰/۰۶$  و  $۰/۰۸$  مشاهده می‌شوند.



(a)



(b)

ویژه دارد و با افزایش مرتبه تابع ویژه به سرعت کاهش می یابد. از طرف دیگر انرژی کل منفی نشانگر حالت یک ذره مقید در این چاه پتانسیل دوگانه متقارن است. در پایان نتایج بدست آمده بیانگر این واقعیت است که مطالعات نرم افزاری و شبیه سازی مسایل کوانتومی می تواند اطلاعات دقیق و مهمی را در اسرع وقت در اختیار ما قرار دهد در حالی که حل تحلیلی برخی مسایل فیزیکی نا ممکن و یا نیاز به صرف وقت و انرژی زیادتری دارد [۶ و ۷].

### مراجع

[1] Sakurai J. J., Modern Quantum Mechanics, Addison-Wesely, New York, 1985.

[2] Koonin S. E., Meredith D. C., Computational Physics, Addison-Wesely, New York, 1990.

[3] Hawkins B., and Jones S., Classical Mechanics Simulations: The Consortium for Upper Level Physics Software, Wiley, 1995.

[4] [www.wiley.com/college/math/physics/sales/CUPS](http://www.wiley.com/college/math/physics/sales/CUPS), Consortium for Upper-Level Physics Software (CUPS).

[5] Hiller J. R., Quantum Mechanics Simulations: The Consortium for Upper-Level Physics Software (Cups) 1st Edition, Wiley, 1995.

[6] Vazifehshenas T. and Salavati-Fard T., Geometrical asymmetry effects on energy and momentum transfer rates in a double-quantum-well structure: Linear regime, Physics B Condensed matter No: 462, 2015, pp: 112-116.

[7] Song D-Y, Localization or tunneling in asymmetric double-well potentials, Annals of Pysics, No. 362, 2015, pp. 609.

این که هر دو تابع زوج هستند صفر نمی شود و مقداری مثبت است و این مقدار با بالا رفتن تابع ویژه تغییر می کند.

مقدار چشم‌داشتی تابع مشتق  $d/dx$  به دلیل فرد بودن تابع مشتق و زوج بودن مربع تابع ویژه حاصل برای هر سه تابع برابر صفر است. این مقدار با بالا رفتن تابع ویژه تغییری نمی کند و تغییرات اندازه حرکت  $p$  همانند تغییرات موقعیت ذره یعنی  $X$  برابر صفر است.

تغییرات تابع مشتق دوم  $d^2/dx^2$  در جدول شماره ۱ نشان داده شده است. مقدار چشم‌داشتی این کمیت منفی است و این مقدار با بالا رفتن تابع ویژه افزایش می یابد. تغییرات تابع مشتق دوم  $d^2/dx^2$  را می توان با تغییرات  $p^2$  متناسب دانست. در نتیجه با مشاهده تغییرات این تابع تغییرات انرژی جنبشی ذره را می توان بدست آورد. مقدار چشم‌داشتی تابع مشتق دوم در جدول ۱ نشان داده شده است که حاصل آن مقداری منفی می باشد ولی با توجه به علامت منفی در تعریف عملگر مقدار چشم‌داشتی انرژی جنبشی ذره مثبت می شود و این مقدار با بالا رفتن تابع ویژه افزایش می یابد.

تغییرات مربوط به عملگر  $x.d/dx$  در حقیقت متناسب با همان مقدار  $x.p$  است. مقدار چشم‌داشتی آن مطابق جدول ۱ منفی است و با بالا رفتن تابع ویژه کاهش می یابد. تغییرات مربوط به عملگر  $d/dx.x$  متناسب با مقدار  $p.x$  است که مقدار چشم‌داشتی آن مثبت است و دوباره با بالا رفتن تابع ویژه کاهش می یابد. مطابق انتظار و طبق جدول شماره ۱ مقدار چشم‌داشتی  $p.x$  از لحاظ عددی با مقدار چشم‌داشتی  $x.p$  برابر ولی با علامت مخالف است.

با ملاحظه جدول شماره ۱ مشخص است که مقدار چشم‌داشتی انرژی پتانسیل ذره یعنی  $V$  برای هر سه تابع ویژه منفی است و مقدار چشم‌داشتی بستگی به نوع تابع ویژه دارد. در بخش پایانی به بررسی و تحلیل تغییرات مقدار چشم‌داشتی انرژی کل ذره برای سه تابع ویژه می پردازیم. مطابق جدول شماره ۱ مقدار چشم‌داشتی انرژی کل ذره یعنی  $E$  برای هر سه تابع ویژه منفی است و مقدار چشم‌داشتی بستگی به نوع تابع

# Effect of Eigenfunction on the Expectation Values of Different Physical Parameters for a Particle in a Double Well Potential

H. Golnabi

## Abstract

In this paper, using the CUPS software the expectation value for a particle in a symmetric Double Well Potential is computed. Expectations values for different physical quantities such as position, momentum, kinetic energy, potential energy and total energy are reported for three different eigenfunctions. The effects of the eigenfunction on the computed quantities are investigated and results are compared for a better interpretation. The physical reason for the differences in the results is given for the obtained parameters. Some quantities such as expectation value of the position and momentum are insensitive to the chosen eigenfunction, but parameters such as particle energy is very sensitive to the eigenfunction change. The obtained results clearly show that such a computational method is an important tool in solving quantum mechanical problems with great advantage in respect to the analytical methods.

**Keywords:** Quantum Mechanics, Schrodinger Equation, Symmetric Double Well, Expectation Value, Software.