Quantum Mechanics ميكانيك الكم

References المصادر

1- الميكانيك الكمي تأليف د. جاسم محمد الحسيني ....
2- أساسيات ميكانيك الكم تأليف د. سالم حسن الشماع ..
3- Quantum Mechanics , A self - Teaching Guide

الميكانيك الكمي Q.M.

هو طريقة حساب جميع الظواهر الفيزيائية في كلا المقياسين الذري (المجهري) microscopic والعياني macroscopic ويقدم فيه طرق اكثر انتظاماً من الطرق المعتمدة في الفيزياء الكلاسيكية وكذلك فان الميكانيك الكمي حل التناقض القائم في الازدواجية المادية الموجية وترتبط فيما بينها بواسطة ثابت بلانك h فعند وضع $h=0$ في قوانين الميكانيك الكمي نحصل بصورة عامة على نتائج الفيزياء الكلاسيكية.

ويقسم الميكانيك الكمي الى غير النسبي Non-Relativistic Q. M. وهو صالح للطاقات واطئة تكون فيها سرعة الجسيمات صغيرة نسبة الى سرعة الضوء. والميكانيك الكمي النسبي Relativistic Q. M. ويستخدم عندما تقترب سرعة الجسيم من سرعة الضوء.

The wave function and its Interpretation دالة الموجة وتفسيرها

تعتبر معادلة الموجة في الميكانيك الكمي اساس الموضوع وقد طورت هذه المعادلة في العام ١٩٢٥ من قبل العالم شرودنكر واستناداً الى فرضية دي - برولي فان العلاقة بين طول الموجة المصاحب للجسيم λ وزخم الجسيم P

$$\lambda = h/p$$

وهذه العلاقة صحيحة لكلا الفوتونات والجسيمات فاذا كان الضوء يسلك بعض الأحيان كموجة وبعض الاحيان كجسيم كذلك فان الجسيمات

H.W. ① Evaluate $[\hat{P}_x^n , \hat{x}^n]$, $[\hat{H} , \hat{P}_x]$ for the Harmonic oscillator and $[\hat{P}_x , \hat{T}]$ and what is the physical meaning of the results ?

② Evaluate $[\hat{H} , \hat{T}]$ for a free particle ?

ثانياً

القيمة الذاتية والدالة الذاتية Eigen value and Eigen function

تعرف معادلة القيمة الذاتية Eigen Value Equation :

$$\hat{A}\psi_n = a_n \psi_n$$

حيث : a_n The eigen value to the operator $\hat{A}$

ψ_n The eigen function

Ex. ① If $\hat{A} = \frac{d}{dx}$ and $\psi_n(x) = e^{2ix}$ is ψ_n is an eigen function ?

Sol

$$\hat{A}\psi = \frac{d}{dx} e^{2ix}$$

$$= 2i\, e^{2ix}$$

$$\therefore \hat{A}\psi = a_n \psi_n$$

اذن $\psi = e^{2ix}$ هي دالة ذاتية والقيمة الذاتية $2i$

yes $\psi = e^{2ix}$ is eigen function and the eigen value $a_n = 2i$

Ex. ② If $\hat{A} = \frac{d^2}{dx^2}$ and $\psi_n(x) = \cos x$ find the eigen value ?

Sol

$$\because \hat{A}\psi = a_n \psi_n$$

$$= \frac{d^2}{dx^2}\cos x = \frac{d}{dx}(-\sin x) = -\cos x$$

$\therefore$ The eigen value $a_n = -1$

Ex. ③ Prove that the eigen function to the operator $\hat{A} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} - x^2$ is $\psi_{(x)} = e^{-\frac{1}{2}x^2}$ and find the eigen value ?

Sol $\because \hat{A}\psi = a\psi$

$$\therefore \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - x^2\right) e^{-\frac{1}{2}x^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-\frac{1}{2}x^2} - x^2 e^{-\frac{1}{2}x^2} = \frac{\partial}{\partial x}\left(-x e^{-\frac{1}{2}x^2}\right) - x^2 e^{-\frac{1}{2}x^2}$$

$$= -x\left(-x e^{-\frac{1}{2}x^2}\right) + e^{-\frac{1}{2}x^2}(-1) - x^2 e^{-\frac{1}{2}x^2}$$

$$= \cancel{x^2 e^{-\frac{1}{2}x^2}} - e^{-\frac{1}{2}x^2} - \cancel{x^2 e^{-\frac{1}{2}x^2}} = -e^{-\frac{1}{2}x^2} = -\psi$$

$\therefore$ The eigen value $= -1$

H.W: Prove that $\psi(x) = A e^{-\alpha x}$ eigen function to the Operator $\hat{F} = \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{d}{dx} + \frac{2\alpha}{x}$ and then find the eigen value ?

(Hint ; Result $f = \alpha^2$)

المؤثر الهيرميتي Hermition Operator

يطلق على المؤثر $\hat{F}$ بالمؤثر الهيرميتي الخطي إذا حقق العلاقة الآتية:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^* \hat{F} \psi_2 \, dv = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_2 \hat{F}^* \psi_1^* \, dv$$

وهناك خاصيتان تتصف بها المؤثرات الهيرميتية وهما:-

① القيمة المميزة لأي مؤثر هيرميتي هي قيمة حقيقية.

② الدالات المميزة للمؤثر الهيرميتي هي دالات متعامدة.

* ولإثبات الخاصية الأولى

Let $\hat{F}$ Hermition Operator

$$\therefore \hat{F}\psi = f\psi \quad \text{....①}$$

$$\therefore \hat{F}^*\psi^* = f^*\psi^* \quad \text{....②} \quad \text{Complex Conjugate}$$

بضرب المعادلة ① من اليسار بالدالة ψ^* ونضرب المعادلة ② من اليسار بالدالة ψ

$$\psi^*\hat{F}\psi = \psi^* f \psi$$

$$\psi \hat{F}^* \psi^* = \psi f^* \psi^*$$

بالتكامل ⇐

$$\int \psi^* \hat{F} \psi \, dv = f \int \psi^* \psi \, dv$$

$$\int \psi \hat{F}^* \psi^* \, dv = f^* \int \psi \psi^* \, dv$$

وتتساوى طرفي المعادلتين الأيسر حسب تعريف المؤثر الهيرميتي

$$\int \psi^* \hat{F} \psi \, dv = \int \psi \hat{F}^* \psi^* \, dv$$

أي أن طرفي المعادلتين الأيمن متساوي

$$f \int \psi^* \psi \, dv = f^* \int \psi \psi^* \, dv$$

$$\because \int \psi^* \psi \, dv = 1 \quad \text{Normalization Condition}$$

$$\therefore f = f^*$$

وهذا يدل على أن القيم المميزة للمؤثر الهيرميتي هي قيم حقيقية.

* ولاثبات الخاصية الثانية (الدالات المميزة للمؤثر الهيرميتي هي دوال متعامدة)
نفرض ψ_1 , ψ_2 هما دالتان مميزتان للمؤثر الهرميتي $\hat{F}$ والعائدة
للقيم المميزة f_1 , f_2 على التوالي وتحقيقهما معادلة القيمة المميزة فان :-

$$\hat{F}\psi_1 = f_1 \psi_1 \quad \cdots ①$$

$$\hat{F}\psi_2 = f_2 \psi_2 \quad \cdots ②$$

$$\hat{F}^*\psi_1^* = f_1^*\psi_1^*$$

وبأخذ المرافق المعقد للمعادلة ①

but $f_1^* = f_1$ — الخاصية الاولى للمؤثر الهرميتي (القيم الذاتية هي قيم حقيقية)

$$\therefore \hat{F}^*\psi_1^* = f_1 \psi_1^* \quad \cdots ③$$

نضرب معادلة ② من اليسار بـ ψ_1^* ومعادلة ③ من اليسار بـ ψ_2 وأخذ التكامل :-

$$\int \psi_1^* \hat{F} \psi_2 \, dv = \int \psi_1^* f_2 \psi_2 \, dv$$

$$\int \psi_2 \hat{F}^* \psi_1^* \, dv = \int \psi_2 f_1 \psi_1^* \, dv$$

وبطرح المعادلتين الاخيرتين :-

$$\int \psi_2 \hat{F}^* \psi_1^* \, dv - \int \psi_1^* \hat{F} \psi_2 \, dv = (f_1 - f_2)\int \psi_2 \psi_1^* \, dv$$

الطرف الايسر يساوي صفراً (Hermitian Operator Condition) شرط المؤثر الهرميتي :-

$$\therefore (f_1 - f_2)\int \psi_2 \psi_1^* \, dv = 0$$

but $f_1 - f_2 \neq 0$ — قيمتان مميزتان مختلفتان

$$\therefore \int \psi_2 \psi_1^* \, dv = 0$$

وهذا يعني أن الدالتين ψ_1 , ψ_2 والعائدتان للقيم المميزة f_1 , f_2 هما
متعامدتان (الدوال المتعامدة هي دوال مستقلة خطياً أي لا تعتمد الواحدة
على الأخرى)

Q: Prove that $\hat{P}_x$ is a Hermitian Operator?

Sol

$$\because \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \hat{P}_x \psi_m \, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m \hat{P}_x^* \psi_n^* \, dx$$ Hermitian operator Condition

$$\because \hat{P}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\therefore \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi_m \, dx$$

$$= -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \frac{\partial}{\partial x} \psi_m \, dx$$

Let $u = \psi_n^*$ and $dv = \frac{\partial}{\partial x} \psi_m$ $\therefore v = \psi_m$

$$\because \int_{-\infty}^{+\infty} u\,dv = uv \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} v\,du$$

$$= -i\hbar \psi_n^* \psi_m \Big|_{-\infty}^{+\infty} + i\hbar \int_{-\infty} \psi_m \frac{\partial}{\partial x} \psi_n^* \, dx$$

$x \Rightarrow \infty \quad \therefore \psi = 0$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_n^*\right) dx \quad \text{but } i\hbar \frac{\partial}{\partial x} = \hat{P}_x^*$$

$$\therefore \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \hat{P}_x \psi_m \, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m \hat{P}_x^* \psi_n^* \, dx$$

متحققة شرط المؤثر الهرميتي

$\therefore \hat{P}_x$ is a Hermitian Operator

Normalization والعيارية Orthogonal التعامد Orthonormal Wave function
الدوال

لقد بينا أن تفسير الاحتمالية $P=|\psi|^2=\psi^*\psi$ يتطلب أن تكون ψ عيارية أي تحقق الشرط الآتي :-

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi|^2 dv = 1$$

وهذا الشرط يدعى بالشرط العياري Normalization Condition.

ولقد ذكرنا أنه إذا كانت هناك دالتان موجيتان ψ_1 ، ψ_2 للمؤثر الحقيقي ولها قيمتان مختلفتان f_1 ، f_2 فتكون الدالتان متعامدتان أي تحققان شرط التعامد Orthogonal Condition أي أن :

$$\int\psi_1^*\psi_2\, dv = \int\psi_2^*\psi_1\, dv = 0$$

فعندما تكون الدوال الموجية متعامدة مع بعضها البعض وكل منها عيارية فيطلق على مثل هذه الدوال بدوال عيارية متعامدة Orthonormal ويعبر عنها رياضياً بالشكل الآتي :-

$$\int\psi_n^*\psi_m\, dv = \delta_{nm} = \begin{cases}0 & n\neq m\\ 1 & n=m\end{cases}$$

حيث أن الرمز δ يطلق عليه كرونكر دلتا

Kronker delta function

حيث يشير إلى العلاقات ما يلي التوضيح أي أن :-

$$\left.\begin{aligned}\int\psi_n^*\psi_n\, dv &= 1\\ \int\psi_m^*\psi_m\, dv &= 1\end{aligned}\right\} \text{when } n=m$$

أي أن الدالتين أعلاه تحقق شرط العيارية

أما في حالة $n\neq m$ أي تكون ψ_n ، ψ_m دوال مختلفة وبالتالي تحقق شرط التعامد وكالتالي :-

$$\left.\begin{aligned}\int\psi_n^*\psi_m\, dv &= 0\\ \int\psi_m^*\psi_n\, dv &= 0\end{aligned}\right\} \text{when } n\neq m$$

القيمة المتوقعة Expectation value

لا يمكن التنبؤ بنتيجة عملية القياس للنظام الموصوف في الحالة Ψ وفي هذه الحالة نأخذ معدل القيمة والذي يسمى في ميكانيك الكم بالقيمة المتوقعة.

ترمز للقيمة المتوقعة لمتغير ديناميكي وليكن A بالرمز $\langle A \rangle$ وكمية $\langle A \rangle$ تمثل معدل عدد كبير من القياسات التي اجريت على المتغير A في الحالة Ψ

$$\langle A \rangle = \frac{\int \Psi^* \hat{A} \Psi \, dv}{\int \Psi^* \Psi \, dv}$$ and for Ψ normalized $\int \Psi^* \Psi \, dv = 1$

$$\therefore \langle A \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi \, dv$$

For Examples

1 Position

$$\langle x \rangle = \int \Psi^* \hat{x} \Psi \, dx$$

2 Momentum

$$\langle P_x \rangle = \int \Psi^* \hat{P}_x \Psi \, dx \quad \text{and} \quad \hat{P}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\therefore \langle P_x \rangle = \int \Psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi \, dx \Rightarrow \langle P_x \rangle = -i\hbar \int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \cancel{\Psi} \, dx$$

3 Total energy

$$\langle E \rangle = \int \Psi^* \hat{E} \Psi \, dx \quad , \quad \because \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Rightarrow$$

$$\therefore \langle E \rangle = \int \Psi^* i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi \, dx \Rightarrow \langle E \rangle = i\hbar \int \Psi^* \frac{\partial}{\partial t} \Psi \, dx$$

4 Kinetic energy

$$\langle T \rangle = \int \Psi^* \hat{T} \Psi \, dx \quad , \quad \because \hat{T} = \frac{\hat{P}^2}{2m} \, , \quad \hat{P}^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$\therefore \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$\therefore \langle T \rangle = \int \Psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \Psi \, dx$$

$$\therefore \langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int \Psi^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi \, dx$$

التفاوت The Variance

يعرف التفاوت (اللاتحديد) بأنه الجذر التربيعي لمتوسط مربع انحراف القياس عن القيمة المتوقعة.

$$\Delta A = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle^{1/2}$$

$$\therefore (\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle$$

$$= \int \psi^* (A - \langle A \rangle)^2 \psi \, dv$$

$$= \int \psi^* (A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2) \psi \, dv$$

$$= \int \psi^* A^2 \psi \, dv - \int \psi^* 2A\langle A \rangle \psi \, dv + \int \psi^* \langle A \rangle^2 \psi \, dv$$

$$= \langle A^2 \rangle - 2\langle A \rangle \langle A \rangle + \langle A \rangle^2$$

$$\therefore (\Delta A)^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

For Examples

1 Position

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad \text{--- ①}$$

and $\langle x^2 \rangle = \int \psi^* x^2 \psi \, dx$

$\langle x \rangle^2 = \left(\int \psi^* x \psi \, dx \right)^2$ أي نحسب القيمة المتوقعة $\langle x \rangle$ ثم نربع النتيجة

وبعد حساب $\langle x^2 \rangle$ ، $\langle x \rangle^2$ نعوضها في ① لحساب التفاوت في الموقع Δx بعد جذر النتيجة الإجمالية

2 Momentum

$$(\Delta P)^2 = \langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2 \quad \text{--- ②}$$

$\langle p^2 \rangle = \int \psi^* \hat{p}^2 \psi \, dv$

and $\langle p \rangle^2 = \left(\int \psi^* \hat{p} \psi \, dv \right)^2$ أي نحسب القيمة المتوقعة $\langle p \rangle$ ثم نربع النتيجة.

وبعد حساب $\langle p^2 \rangle$ ، $\langle p \rangle^2$ نعوضها في معادلة ② لحساب التفاوت في الزخم ΔP بعد جذر النتيجة الإجمالية.

الدوال الذاتية وثوابت الحركة Eigen function and Constant of motion

اذا أثر المؤثر $\hat{A}$ على الدالة ψ فحولها الى عدد a مضروباً في الدالة ψ

كما في المعادلة التالية:- $\hat{A}\psi = a\psi$

عندئذ تسمى ψ بالدالة الذاتية eigenfunction للمؤثر $\hat{A}$ وأن a هي القيمة الذاتية eigen value، وأن القيمة المتوقعة Expectation value للكمية A هي:-

$$\langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi \, dv$$

but $\hat{A}\psi = a\psi$ مشتقة من المعادلة اعلاه

$$\therefore \langle A \rangle = \int \psi^* a \psi \, dV = a \int \psi^* \psi \, dV$$

but $\int \psi^* \psi \, dV = 1$ Normalization Condition باعتبار أن الدالة عيارية.

$$\therefore \langle A \rangle = a$$

وهذا يعني أن كل القياسات التي اجريت لقياس المتغير الفيزيائي A تعطي نفس القيمة a ويمكن القول في هذه الحالة أن الكمية A هي ثابت الحركة Constant of the motion والمقصود بثابت الحركة هو الكمية الفيزيائية التي لا تتغير مع الزمن أي أن:-

$$\frac{\partial \langle A \rangle}{\partial t} = 0$$

Q3/ Derive the Motion Equation?

Sol

$$\because \langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi \, dV$$

$$\therefore \frac{\partial}{\partial t} \langle A \rangle = \frac{\partial}{\partial t} \int \psi^* \hat{A} \psi \, dv$$

$$\therefore \frac{\partial}{\partial t} \langle A \rangle = \int \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{A} \psi + \psi^* \hat{A} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) dv \quad \text{--- (1)}$$

$$\left.\begin{aligned} &\because i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \\ &-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \hat{H}^* \psi^* \quad \text{Complex Conjucate} \end{aligned}\right\} \text{---- (2)} \quad \begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \psi \\ \frac{\partial \psi^*}{\partial t} &= +\frac{i}{\hbar} \hat{H}^* \psi^* \end{aligned}$$

(2) in (1) $\Rightarrow$

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle A \rangle = \int \left(\frac{i}{\hbar} (\hat{H}\psi)^* \hat{A} \psi - \frac{i}{\hbar} \psi^* \hat{A} \hat{H} \psi \right) dv$$

$$\int (\hat{H}\psi)^* \hat{A}\psi \, dv = \int \psi^* \hat{H} \hat{A}\psi \, dv$$ ومن تعريف المؤثر الهيرميتي لدينا :

Hermition Operator

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle A\rangle = \frac{i}{\hbar}\int (\psi^* \hat{H}\hat{A}\psi - \psi^* \hat{A}\hat{H}\psi)\, dv$$ وبالتعويض بالمعادلة أ ينتج ⟸

$$= \frac{i}{\hbar}\int \psi^* (\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H})\psi \, dv$$

but $\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H} = [\hat{H}, \hat{A}]$

and $\int \psi^* [\hat{H}, \hat{A}]\psi \, dv = \langle [\hat{H}, \hat{A}]\rangle$

$$\therefore \frac{\partial}{\partial t}\langle A\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{A}]\rangle$$

Q/ Show that $\hat{P}_x$ of a free particle is constant of the motion?

Sol:-

$$\because \frac{\partial}{\partial t}\langle A\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{A}]\rangle \quad \text{Motion Equation}$$

$$\therefore \frac{\partial}{\partial t}\langle P_x\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{P}_x]\rangle$$

$$\because \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \Rightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$ for a free particle (جسيم)

and $\hat{P}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

$$\therefore \frac{\partial}{\partial t}\langle P_x\rangle = \frac{i}{\hbar}\left\langle \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right]\right\rangle$$

$$= \frac{i}{\hbar}\left\langle \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi - \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\psi\right)\right)\right\rangle$$

$$= \frac{i}{\hbar}\left\langle \frac{i\hbar^3}{2m}\frac{\partial^3}{\partial x^3}\psi - \frac{i\hbar^3}{2m}\frac{\partial^3}{\partial x^3}\psi \right\rangle = 0$$

$$\because \frac{\partial}{\partial t}\langle P_x\rangle = 0 \quad \therefore P_x \text{ is Constant of the motion}$$

المادية يجب أن تتصرف بطريقة مماثلة أي يجب أن ترافقها خاصية موجية.

وبناءاً على النظرية التقليدية لوصف الحركة الموجية فان شدة الموجة I تتعين بمربع سعة الموجة والذي يتمثل بالمجال الكهربائي E_0

$$\therefore I \propto E_0$$

بينما في الوصف الجسيمي فان الشدة تتعين بعدد الفوتونات التي تمر خلال وحدة المساحة في وحدة الزمن. فعند وصف الجسيمات المادية كالالكترون في الذرة. أن الالكترون لا يتحرك بعيداً عن النواة ويكون محدداً في الحركة في الحيز الذي يبعد حوالي 10^{-10} m عن النواة، ويمكن التعبير عن ارتباطه بمجال المادة بدلالة الموجات المستقرة (أو الواقفة) والتي تكون موجودة في هذا الحيز بسعة تتغير من نقطة الى أخرى ضمن هذا الحيز وتكون صفراً خارجه.

أي أن مجال المادة يصف حركة الجسيم ويطلق على سعة مجال المادة بالدالة الموجية ψ فان شدة مجال المادة (كثافة الاحتمالية Probability density) تتناسب مع مربع سعة الموجة أي أن شدة مجال المادة تعطى بالعلاقة:

$$|\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\,\psi(x)$$

حيث $\psi^*(x)$ تمثل الدالة المقترنة المرافقة للدالة $\psi(x)$

حيث تم تفسير هذه العلاقة من قبل العالم الألماني ماكس بورن Max Born

اذا كان الجسيم يتحرك على امتداد محور x فان احتمالية Probability وجود الجسيم في المنطقة $x, x+dx$ هي $\psi^*(x)\,\psi(x)\,dx$

أما احتمالية وجود الجسيم على محور x

$$\int \psi^*(x)\,\psi(x)\,dx = \int |\psi(x)|^2 dx = 1$$

وان قيمة التكامل تساوي 1 وذلك لافتراضنا وجود الجسيم على محور x حيث يشير 1 الى حتمية وجود الجسيم

وفي الحالة العامة يمكن التعبير عن الحركة الموجية للجسيم في الفضاء بدلالة الاحداثيات المتعامدة (x, y, z)، فاذا أردنا احتمالية تواجد الجسيم في عنصر الحجم dv فيمكن التعبير عن الاحتمالية بالشكل التالي

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,y,z)|^2\, dx\, dy\, dz = 1$$

نظرية ارنفست Ehrenfist's theorem

أن النتيجة التي يتنبأها الميكانيك الكلاسيكي هي في الواقع القيمة المتوقعة Expectation value تلك القيمة تبعاً لقوانين الميكانيك الكمي

① $\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{1}{m}\langle p\rangle$

To prove ①

$\because \frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [H, x]\rangle$ --- ① motion Equation

Now we use $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$

$$[H, x] = \left[\frac{p^2}{2m} + V(x), x\right]$$
$$= \left[\frac{p^2}{2m}, x\right] + [V(x), x] \quad \text{--- ②}$$

but $[V(x), x] = 0$ --- ⓐ

and $\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, x\right] = \left[\frac{\hat{p}}{2m}, x\right]\hat{p} + \hat{p}\left[\frac{\hat{p}}{2m}, x\right]$ --- ⓑ

$$\left[\frac{\hat{p}}{2m}, x\right]\psi = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\partial}{\partial x}x\psi - x\frac{\partial}{\partial x}\psi\right)$$
$$= -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi + \cancel{x\frac{\partial\psi}{\partial x}} - \cancel{x\frac{\partial\psi}{\partial x}}\right)$$
$$= -\frac{i\hbar}{2m}\psi$$

$\therefore \left[\frac{\hat{p}}{2m}, x\right] = -\frac{i\hbar}{2m}$ in ⓑ

$$\therefore \left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, x\right] = -\frac{i\hbar}{2m}\hat{p} + p\left(-\frac{i\hbar}{2m}\right)$$
$$= -\frac{i\hbar}{m}\hat{p} \quad \text{--- ©}$$

© and ⓐ in ② $\Rightarrow$

$[\hat{H}, \hat{x}] = -\frac{i\hbar}{m}\hat{p}$

$\therefore \frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{i}{\hbar}\left\langle -\frac{i\hbar}{m}\hat{p}\right\rangle$

او يمكن كتابة $\langle p_x\rangle = m\frac{d\langle x\rangle}{dt}$ وهنا $\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{1}{m}\langle p_x\rangle$
يطابق لعلاقة تعريف الزخم في الحركة $p = m\frac{dx}{dt}$ نلاحظ انه في ميكانيك الكم نتعامل مع القيمة المتوقعة.

② $\frac{d}{dt}\langle p\rangle = -\langle \frac{dV}{dx}\rangle$

$\because \frac{d}{dt}\langle p\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{P}]\rangle$ --- ① motion Equation

Now we use $H = \frac{P^2}{2m} + V$

$\therefore [\hat{H},\hat{P}] = [\frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{V}, \hat{P}]$

$[\hat{H},\hat{P}] = [\frac{\hat{P}^2}{2m}, P] + [\hat{V},\hat{P}]$ --- ②

but $[\frac{\hat{P}^2}{2m},\hat{P}]\psi = \frac{1}{2m}(\hat{P}^2\hat{P}\psi - \hat{P}\hat{P}^2\psi) = 0$ --- ⓐ

and $[\hat{V},\hat{P}]\psi = \hat{V}\hat{P}\psi - PV\psi$ $\quad (\hat{P} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x})$

$\therefore [\hat{V},\hat{P}]\psi = -i\hbar(V\frac{\partial}{\partial x}\psi - \frac{\partial}{\partial x}V\psi)$

$= -i\hbar(V\cancel{\frac{\partial\psi}{\partial x}} - V\cancel{\frac{\partial\psi}{\partial x}} - \psi\frac{\partial V}{\partial x}) = +i\hbar\frac{\partial V}{\partial x}\psi$

$\therefore [\hat{V},\hat{P}] = i\hbar\frac{\partial V}{\partial x}$ --- ⓑ

ⓐ and ⓑ in ② $\Longrightarrow$

$[\hat{H},\hat{P}] = 0 + i\hbar\frac{\partial V}{\partial x} = i\hbar\frac{\partial V}{\partial x}$ in eq ① $\Rightarrow$

$\frac{d}{dt}\langle P\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle i\hbar\frac{dV}{dx}\rangle$

$\therefore \frac{d}{dt}\langle P\rangle = -\langle\frac{dV}{dx}\rangle$

These results together (① and ②) give us Ehrenfest theorem, Which states that the laws of classical mechanics embodied in Newton's Law hold for the Expectation Values of quantum Operators x and p.

This establishes a Correspondence between classical and quantum dynamics.

Q/ Prove that $\langle E \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle$ and What is the physical meaning of the result?

sol

$$\because \; i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi \qquad \text{TDSE}$$

but $\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ and $\hat{T} = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2$ (interms of operators)

$$\therefore \; \hat{E}\psi = \hat{T}\psi + V\psi$$

* ψ* ضرب ونأخذ التكامل

$$\int \psi^* E \psi \, dv = \int \psi^* \hat{T} \psi \, dv + \int \psi^* V \psi \, dv$$

$$\therefore \; \langle E \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle$$

ونلاحظ أن النتيجة تماثل نتيجة أساسية في الميكانيك الكلاسيكي حيث تماثل في ميكانيك الكم بالقيمة المتوقعة Expectation Value.

حفظ الاحتمالية The Conservation of probability

$\because P(x,t) = \psi^*(x,t)\,\psi(x,t)$ The probability density

$\therefore \frac{\partial}{\partial t} P = \frac{\partial}{\partial t}(\psi^* \psi)$

$$\frac{\partial}{\partial t} P = \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \quad \text{---- (1)}$$

$$\because i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + V\psi \qquad \div i\hbar \Rightarrow$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{-\hbar}{2mi}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{1}{i\hbar} V\psi \quad \text{--- (a)}$$

and $\frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{\hbar}{2mi}\frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} - \frac{1}{i\hbar} V \psi^*$ By taking Complex Conjugate — (b)

$*\ \psi^*$ from left to eq. (a) and $*\ \psi$ from left to eq (b) $\Rightarrow$

$$\left.\begin{aligned} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar}{2mi}\psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{1}{i\hbar} V \psi^* \psi \\ \text{and } \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} &= \frac{\hbar}{2mi}\psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} - \frac{1}{i\hbar} V \psi \psi^* \end{aligned}\right\} \text{--- (2)}$$

eq (2) in eq (1) $\Rightarrow$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2mi}\psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \cancel{\frac{1}{i\hbar} V \psi^* \psi} + \frac{\hbar}{2mi}\psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} - \cancel{\frac{1}{i\hbar} V \psi \psi^*}$$

$$\therefore \frac{\partial P}{\partial t} = \frac{-\hbar}{2mi}\left(\psi^*(x,t)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) - \psi(x,t)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi^*(x,t)\right)$$

We see that the result on the right side is $-\partial j/\partial x$

$\therefore \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0$ The continuity equation of probability

and In three dimension this generalizes to:-

$$J(r,t) = \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*\right] \quad \text{Probability Current}$$

and $\frac{\partial P}{\partial t} + \nabla \cdot J = 0$ The continuity equation of probability

والتي تعني أن احتمالية ايجاد الجسيم داخل حجم قدره V يساوي سالب احتمالية كثافة التيار خلال السطح A

Ex: Find the probability current to the wave function $\psi(x,t) = 3K e^{ikx}$ where k is a Constant ?

Sol

$\because J = \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*\right]$ Probability current eq.

$\because \psi = 3k e^{ikx}$ $\therefore \psi^* = 3k e^{-ikx}$

$\therefore \nabla \psi = 3k(ik) e^{ikx}$ and $\nabla \psi^* = 3k(-ik) e^{-ikx}$

$= 3ik^2 e^{ikx}$ and $= -3ik^2 e^{-ikx}$

$\Rightarrow J = \frac{\hbar}{2mi}\left[3k e^{-ikx}(3ik^2 e^{ikx}) - 3k e^{ikx}(-3ik^2 e^{-ikx})\right]$

$= \frac{\hbar}{2mi}\left[9ik^3 e^{0} + 9ik^3 e^{0}\right] = \frac{9\hbar k^3}{m}$

Ex: Find the probability current to the wave function $\psi = 5e^{2x}$?

Sol

$\because J = \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*\right]$

$\because \psi = 5e^{2x} = \psi^*$

and $\nabla \psi = 10 e^{2x} = \nabla \psi^*$

$\therefore J = \frac{\hbar}{2mi}\left[5e^{2x}(10e^{2x}) - 5e^{2x}(10e^{2x})\right]$

$= \frac{\hbar}{2mi}\left[50e^{4x} - 50e^{4x}\right]$

$= 0$

الانحلال Degeneracy

في حالات معينة يرافق مستوى طاقة أكثر من دالة موجية واحدة ψ_n حيث تكون هذه الدوال مستقلة خطياً عن بعضها البعض Linearly independent (لا يمكن التعبير عن احدى هذه الدوال بدلالة خطية من الدوال الأخرى) ففي مثل هذه الحالة يسمى مستوى الطاقة منحلاً Degenerate ودرجة الانحلال تساوي عدد الدوال المستقلة المرافقة لذلك المستوى.

فإذا كان مستوى الطاقة E_n منحلاً بدرجة انحلال Degre of degeneracy N فان عدد الدوال المستقلة تكون:-

$$\psi_n^1, \psi_n^2, \psi_n^3, \ldots, \psi_n^N$$

مبدأ التركيب الخطي Linear superposition principle

ان مبدأ التركيب يشمل جميع العوامل الخطية.

نفرض ان لدينا مجموعة من الدوال ψ_1, ψ_2, ψ_3 .... وهي تصف حالات نظام فان هذه الدوال تدعى بالدوال المسموحة لهذا النظام ولكل منها حالة خاصة. وعندئذ يمكن كتابة الدالة الجديدة Φ والتي تمثل الجمع الخطي للدالات المسموحة:

$$\Phi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \cdots + c_n\psi_n$$

$$\therefore \Phi = \sum_n c_n \psi_n$$

تخضع المعادلة اعلاه الشروط القياسية والتعامد

التماثل Parity

تتضمن دالة الموجة في أكثر الأحيان صفة مهمة تلعب دوراً مهماً في الظواهر الفيزيائية هي أن الدوال تملك على التماثل تناظراً زوجياً وفردياً بالنسبة للانعكاس في الإحداثيات خلال نقطة الأصل.

إذا كانت ψ دالة لـ x فإن :-

$\psi(x) = \psi(-x)$ دالة زوجية   even function

$\psi(x) = -\psi(-x)$ دالة فردية   odd function

ويمكن التمثيل بهذه المسألة من خلال مؤثر خاص هو مؤثر التماثل parity Operator

حيث يؤثر مؤثر التماثل P على الدالة الموجية وكالآتي :-

$$P\psi(x) = \psi(-x) \quad \text{---} ①$$

وإذا اعتبرنا معادلة القيمة الذاتية فإن

$$P\psi(x) = \lambda\psi(x) \quad \text{---} ②$$

وبتطبيق P مرة ثانية على معادلة ① فإن :-

$$P^2\psi(x) = P\psi(-x) = \psi(x)$$

ولكن من معادلة ② فإن :-

$$P^2\psi(x) = P(\lambda\psi(x)) = \lambda^2\psi(x) \Rightarrow \lambda = \pm 1$$

An even function for which $\psi(x) = \psi(-x)$ have eigen value $+1$ and can be said even parity.

An odd function for which $\psi(x) = -\psi(-x)$ have eigen value -1 and can be said odd parity.

The even and odd parity of any wave function can be constructed using :-

$$\psi_e(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi(x) + \psi(-x)\right]$$

$$\psi_o(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi(x) - \psi(-x)\right]$$

When the potential is symmetric $V(x) = V(-x)$, The Hamiltonian H commutes with the parity Operator, This means that if $\psi(x)$ is an eigen function of H, so is $P\psi(x)$

الحالات المكممة Quantized states

تتحدد بعض الكميات الديناميكية مثل الطاقة والزخم الزاوي للنظام بصورة دقيقة قيماً معرفة ومتميزة فيقال عنها انها مكممة.

بما أن دوال الموجة التي تمثل الحالة التي تكون فيها الكمية معرفة القيمة تماماً هي الدالة التي تحقق الشرط:

$$\hat{A}\Psi = a\Psi \quad --- ①$$

حيث a ثابت حقيقي وتكون الكمية الديناميكية $\hat{A}$ معرفة القيمة بالكمية a وبالتالي:

$$\langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi \, dv \quad --- ②$$

eq ① in eq ② $\Rightarrow$

$$\langle A \rangle = \int \psi^* a \psi \, dv = a \int \psi^* \psi \, dv$$

but $\int \psi^* \psi \, dv = 1$ Normalized أي أن الدالة معيارية

$$\therefore \langle A \rangle = a$$

كذلك فإن:

$$\langle A^2 \rangle = \int \psi^* \hat{A}^2 \psi \, dv$$

$$= \int \psi^* \hat{A}(\hat{A}\psi) \, dv \quad \text{but } \hat{A}\psi = a\psi \Rightarrow$$

$$= \int \psi^* \hat{A} \, a \psi \, dv = a \int \psi^* \hat{A} \psi \, dv$$

$$= a^2 \int \psi^* \psi \, dv \quad \text{but } \int \psi^* \psi \, dv = 1 \text{ Normalized}$$

$$\therefore \langle A^2 \rangle = a^2$$

and $(\Delta A)^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$ The variance

$$= a^2 - a^2 = 0$$

وبعبارة أخرى ليس هناك شك أو لادقة في قيمة A بل أن A معرفة بالقيمة المعينة a

ومن المعلوم أن معادلة ① هي معادلة قيمة ذاتية حيث أن a هي القيمة الذاتية (المميزة) للكمية الديناميكية $\hat{A}$.

Q/ The wave function for a particle Confined to $0 \leq x \leq 0.3$ was $\psi(x) = e^{3i}$ find the normalization Constant ?

Sol

$\because \int \psi^*(x)\psi(x)\,dx = 1$ Normalization Condition

and $\psi(x) = e^{3i} \Rightarrow \psi^*(x) = e^{-3i}$

$\therefore \int_0^{0.3} A e^{-3i} A e^{3i}\,dx = 1$

$\Rightarrow A^2 \int_0^{0.3} e^0\,dx = 1 \Rightarrow A^2 (x]_0^{0.3}) = 0 \Rightarrow A^2(0.3) = 1$

$\Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{0.3}} \Rightarrow \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{0.3}} e^{3i}$

Q/ A particle move with a wave function $\psi(x) = Ae^{ix^2}$ at interval $(0, 0.5)$ find (a) The normalization Constant A (b) The expectation value x, P ?

Sol (a) $\because \int |\psi(x)|^2\,dx = 1$ Normalization Condition

and $\psi(x) = Ae^{ix^2} \Rightarrow \psi^*(x) = Ae^{-ix^2}$

$\therefore \int_0^{0.5} Ae^{-ix^2} Ae^{ix^2}\,dx = 1 \Rightarrow |A|^2 \int_0^{0.5} e^{-ix^2+ix^2}\,dx = 1$

$\therefore |A|^2\, x\Big|_0^{0.5} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{2} \Rightarrow \psi(x) = \sqrt{2}\,e^{ix^2}$

Sol (b) $\because \langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi\, dv$

$\therefore \langle x \rangle = \int_0^{0.5} \sqrt{2} e^{-ix^2}\, x \sqrt{2} e^{ix^2}\,dx = 2\frac{x^2}{2}\Big|_0^{0.5} =$

and $\langle P \rangle = \int_0^{0.5} \sqrt{2} e^{-ix^2} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \sqrt{2} e^{ix^2}\,dx$

$= -2i\hbar \int_0^{0.5} e^{-ix^2}(2ix)\, e^{ix^2}\,dx = 4\hbar \int_0^{0.5} x\,dx$

$= \hbar 4 \frac{x^2}{2}\Big|_0^{0.5}$

H.W: find the expectation value for T ?

Q/ A particle move in One - dimension with a Wave function $\psi = Ae^{-x^2}$ at interval $0 \to \infty$ find the normalization Constant?

Sol

$$\therefore \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\,\psi(x)\,dx = 1 \qquad \text{and} \qquad \psi(x) = Ae^{-x^2} = \psi^*(x)$$

$$\therefore A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2x^2}\,dx = 1 \quad = \quad \underline{\underline{2}}|A|^2 \int_{\underline{\underline{0}}}^{\infty} e^{-2x^2}\,dx = 1 \quad \text{---} ①$$

$$\text{Let } u = 2x^2 \quad \therefore x^2 = \frac{u}{2} \Rightarrow x = \frac{\sqrt{u}}{\sqrt{2}} \quad \therefore dx = \frac{1}{\sqrt{2}}\,\frac{1}{2}\,u^{-1/2}\,du$$

بالتعويض في معادلة ①

$$2|A|^2 \int_0^{\infty} e^{-u}\,\frac{1}{\sqrt{2}}\,\frac{1}{2}\,u^{-1/2}\,du = 1$$

$$\therefore \frac{1}{\sqrt{2}}|A|^2 \int_0^{\infty} u^{-1/2}\,e^{-u}\,du = 1$$

$$\text{but} \quad \int_0^{\infty} u^{-1/2}\,e^{-u}\,du = \sqrt{\pi}$$

بالتعويض بالتكامل الرياضي

$$\therefore \frac{1}{\sqrt{2}}|A|^2 \left(\sqrt{\pi}\right) = 1 \quad \therefore |A|^2 = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} \quad \therefore A = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/4}$$

Q/ suppose that a certain probability distribution is given by $P(x) = \frac{9}{4}\frac{1}{x^3}$ for $1 \leq x \leq 3$ Find the probability in $\frac{5}{2} \leq x \leq 3$?

Sol

$$\therefore P(x) = \int |\psi(x)|^2\,dx$$

$$\therefore P(x) = \frac{9}{4}\int_{5/2}^{3} \frac{1}{x^3}\,dx \quad = \frac{9}{4}\,\frac{x^{-2}}{-2}\Big|_{5/2}^{3}$$

$$= +\frac{9}{8}\left(\frac{1}{9} - \frac{4}{25}\right) = 0.055$$

$\therefore$ 5.5 percent chance to find the particle in $5/2 \leq x \leq 3$.

وهذا يعني أن الجسيم موجود بالتأكيد ضمن هذا الفضاء ويطلق على المعادلة الأخيرة بالشرط العياري Normalization Condition ويطلق على الدالة التي تحقق هذا الشرط بالدالة العيارية

وأن التفسير الفيزيائي للدالة الموجية ψ بأن تعطي وصفاً كاملاً لحالة الجسيم وليست تمثل الاحتمالية.

$$\because \psi_{(x,t)} = A_0 e^{i\left(\frac{2\pi}{\lambda}x - \omega t\right)}$$

$$\because E = h\nu = \hbar\omega$$

$$\because \lambda = \frac{h}{P} \qquad \text{and} \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$$\therefore \frac{2\pi x}{\lambda} = \frac{2\pi x}{h} P = \frac{xP}{\hbar} \quad \text{and} \quad \omega t = \frac{E}{\hbar} t$$

$$\therefore \psi_{(x,t)} = A_0 e^{\frac{i}{\hbar}(Px - Et)}$$

معادلة شرودنكر المعتمدة على الزمن.

Time dependent schrodinger Equation (TDSE)

$$\because \psi_{(x,t)} = A_0 e^{\frac{i}{\hbar}(Px - Et)}$$

$$\therefore \frac{\partial \psi_{(x,t)}}{\partial x} = A_0 e^{\frac{i}{\hbar}(Px - Et)} \frac{i}{\hbar} P \qquad * -i\hbar \Rightarrow$$

$$-i\hbar \frac{\partial \psi_{(x,t)}}{\partial x} = P \psi_{(x,t)} \quad \text{----} \ (1)$$

$$\text{and} \quad -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi_{(x,t)}}{\partial x^2} = P^2 \psi_{(x,t)} \quad \text{---} \ (2)$$

$$\because \psi_{(x,t)} = A_0 e^{\frac{i}{\hbar}(Px - Et)}$$

$$\therefore \frac{\partial \psi_{(x,t)}}{\partial t} = A_0 e^{\frac{i}{\hbar}(Px - Et)} \frac{i}{\hbar}(-E)$$

30

Q/ A free particle with a wave function $\psi(x) = e^{ikx}$ is forced to move along $0 \leq x \leq 1$ and $\psi(x) = 0$ elsewhere, determine the probability for finding the particle in interval $(0.25 / 0.75)$ and find Δx (the variance for position)?

Sol

$$\because P(x) = \int \psi^*_{(x)} \psi(x) \, dx$$

and $\psi(x) = e^{ikx} \Rightarrow \psi^*(x) = e^{-ikx}$

$$\therefore P(x) = \int_{0.25}^{0.75} e^{-ikx} e^{ikx} dx = \int_{0.25}^{0.75} dx$$

$$= x \Big|_{0.25}^{0.75} = (0.75 - 0.25) = 0.5$$

$$\because (\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad \text{The Variance}$$

$$\langle x \rangle = \int \psi^* x \psi \, dx = \int_0^1 e^{-ikx} x e^{ikx} dx$$

$$= \frac{x^2}{2}\Big|_0^1 = \frac{1}{2} \Rightarrow \langle x \rangle^2 = \frac{1}{4}$$

and $\langle x^2 \rangle = \int \psi^* x^2 \psi \, dx$

$$= \int_0^1 e^{-ikx} x^2 e^{ikx} dx = \int_0^1 x^2 dx$$

$$= \frac{x^3}{3}\Big|_0^1 = \frac{1}{3}$$

$$\therefore (\Delta x)^2 = \frac{1}{3} - \frac{1}{4} = \frac{1}{12}$$

$$\therefore \Delta x = \sqrt{\frac{1}{12}}$$

H.W ① Find the Current density for the flow of particle move with the wave function $\psi(x) = 5e^{ix^2}$ where the operator is $\frac{\partial}{\partial x}$?

② Use uncertainty principle to prove impossibility of finding the electron inside the nucleus ?

③ IS the wave function $\psi(x) = \cos x^2$ an eigen function to the operator $\hat{P}_x^2$ or not? If yes find the eigen value ?

④ The wave function for a particle Confined to $0 \leq x \leq a$ is $\psi(x) = A\sin(\frac{\pi x}{a})$ Find ⓐ The normalization Constant A ⓑ Determine the probability that the particle is found in the interval $\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{3a}{4}$?

⑤ Consider a particle trapped in a well with potential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{otherwise} \end{cases}$$

Show that $\psi(x,t) = A\sin(kx)\exp(-iEt/\hbar)$ solves the Schrodinger equation provided that $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$?

⑥ $\psi(x) = A(ax - x^2)$ for $0 \leq x \leq a$

ⓐ Normalize the wave function ⓑ Find Δx

⑦ Find A and B so that

$$\phi(x) = \begin{cases} A & \text{for } 0 \leq x \leq a \\ Bx & \text{for } a \leq x \leq b \end{cases}$$ is normalized ?

Q/

If the wave function $\psi(x) = A(ax - x^2)$ for $0 \leq x \leq a$

ⓐ Normalize the wave function ?

ⓑ Find $\langle x \rangle$?

Sol

ⓐ $\int |\psi|^2 dx = 1$ but $\psi(x) = A(ax - x^2) = \psi^*(x)$

$$\Rightarrow \int_0^a A^2 (ax - x^2)^2 dx = A^2 \int_0^a (a^2 x^2 - 2ax^3 + x^4) dx$$

$$= A^2 \left[\int_0^a a^2 x^2 dx - \int_0^a 2ax^3 dx + \int_0^a x^4 dx \right]$$

$$= A^2 \left[a^2 \frac{x^3}{3} \Big|_0^a - a \frac{x^4}{2} \Big|_0^a + \frac{x^5}{5} \Big|_0^a \right]$$

$$= A^2 \left[\frac{a^5}{3} - \frac{a^5}{2} + \frac{a^5}{5} \right] = A^2 \left[\frac{10a^5}{30} - 15\frac{a^5}{30} + 6\frac{a^5}{30} \right]$$

$$= A^2 \frac{a^5}{30} \Rightarrow A = \sqrt{30/a^5}$$

ⓑ $\langle x \rangle = \int \psi^* x \psi \, dx = \frac{30}{a^5} \int_0^a x (ax - x^2)^2 dx$

$$= \frac{30}{a^5} \int_0^a (a^2 x^3 - 2ax^4 + x^5) dx$$

$$= \frac{30}{a^5} \left[a^2 \frac{x^4}{4} \Big|_0^a - 2a \frac{x^5}{5} \Big|_0^a + \frac{x^6}{6} \Big|_0^a \right]$$

$$= \frac{30}{a^5} \left[\frac{a^6}{4} - 2\frac{a^6}{5} + \frac{a^6}{6} \right] = \frac{30}{a^5} \left[\frac{15a^6 - 24a^6 + 10a^6}{60} \right]$$

$$= \frac{30}{a^5} \frac{a^6}{60} = \frac{a}{2}$$

تمثيل ديراك Dirac notation

لقد أدخل ديراك بعض الرموز لوصف حالة النظام تعتمد أساساً على الصفة الاتجاهية لحالات الجسيم وتتضمن برا وكيت

$\langle bra | ket \rangle$

حيث وصف ديراك حالة النظام بواسطة متجه حالة عوضاً عن دالة حالة ورمز لها بالرمز $|ket\rangle$ (متجه كيت) فمثلاً :-

وهذه تمثل مركبة المتجه $|\psi\rangle$ باتجاه x $\quad \psi(x) = \langle x | \psi \rangle$

كما أدخل الرمز للمتجه المرافق Complex-

Conjucate $\langle \psi |$ متجه Bra حيث $\quad \psi^*(x) = \langle \psi | x \rangle$

أي الاتجاهين $|x\rangle$, $\langle x|$ تمثلان مجموعة كاملة حيث $\int |x\rangle\langle x| dx = 1$

وإليك بعض الأمثلة بتمثيل ديراك والتي كنا نستخدم تمثيل شرودنكر :-

① Eigen Value Equation معادلة القيمة المميزة

$$\hat{A}\psi = a\psi$$

$$\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle$$

② Normalization Condition الشرط المعياري

$$\int \psi^*(x)\,\psi(x)\,dx = 1$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1$$

③ Orthagonal Condition الشرط التعامدي

$$\int \psi_1^*(x)\,\psi_2(x)\,dx = 0$$

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0$$

④ Hermetion Operator Condition شرط المؤثر الهرميتي

$$\int \psi_1^* \hat{F} \psi_2 \, dv = \int \psi_2 (\hat{F}\psi_1)^* \, dv$$

$$\langle \psi_1 | \hat{F}\psi_2 \rangle = \langle \hat{F}\psi_1 | \psi_2 \rangle$$

ومن التعريف فإن

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle^*$$

وبذلك يمكن كتابة شرط المؤثر الهرميتي

$$\langle \psi_1 | \hat{F}\psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \hat{F}\psi_1 \rangle^*$$

تمثيل هايزنبرغ Heisenberg representation

حيث وضع العالم هايزنبرك طريقة لوصف حالة النظام بأستخدام المصفوفات.

ففي هذه الطريقة نصف حالة النظام ψ بمصفوفة ذات عمود واحد ويرمز لها بالرمز ( )

كما نصف الدالة المعقدة المرافقة ψ^* بمصفوفة ذات صف واحد ويرمز لها بالرمز $\smile$

أما المؤثر Operator فيوصف بمصفوفة مربعة بحجم $(n \times n)$

For Example: If $|\psi\rangle = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ \vdots \\ z_n \end{bmatrix}$ find the Complex Conjugate?

Sol

$$\because |\psi\rangle = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ \vdots \\ z_n \end{bmatrix}$$

$$\therefore \langle\psi| = \left[z_1^*, z_2^*, z_3^* \ldots z_n^* \right]$$

Ex: Two vectors are defined by:-

$$|A\rangle = \begin{pmatrix} 2 \\ -7i \\ 1 \end{pmatrix} \quad , \quad |B\rangle = \begin{pmatrix} 1+3i \\ 4 \\ 8 \end{pmatrix}$$

Find $\langle A|B\rangle$?

Sol $\because |A\rangle = \begin{pmatrix} 2 \\ -7i \\ 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \langle A| = (2^* \ -7i^* \ 1^*) = (2 \ 7i \ 1)$

$$\therefore \langle A|B\rangle = (2 \ 7i \ 1) \begin{pmatrix} 1+3i \\ 4 \\ 8 \end{pmatrix}$$

$$= 2(1+3i) + 7i(4) + 1(8)$$

$$= 2 + 6i + 28i + 8$$

$$= 10 + 34i$$

$$\therefore\ i\hbar \frac{\partial \Psi_{(x,t)}}{\partial t} = E\Psi \quad \text{--- (3)}$$

$$\because\ E = T + V_{(x)} = \frac{P^2}{2m} + V_{(x)} \quad * \Psi$$

$$E\Psi = \frac{P^2\Psi}{2m} + V_{(x)}\,\Psi \quad \text{--- (4)} \qquad \text{(2) and (3) in (4)} \Rightarrow$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_{(x,t)}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi_{(x,t)}}{\partial x^2} + V_{(x)}\,\Psi_{(x,t)}$$

In three dimen

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_{(r,t)}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \Psi_{(r,t)} + V_{(r)}\,\Psi_{(r,t)}$$

المعادلة الاخيرة هي معادلة شرودنكر المعتمدة على الزمن TDSE

معادلة شرودنكر غير المعتمدة على الزمن

Time Independent schrodinger Equation TISE

$$\because\ \Psi_{(x,t)} = A_o e^{\frac{i}{\hbar}(PX - Et)}$$

$$\text{Let } \Psi_{(x,t)} = \phi_{(t)}\,\Psi_{(x)}$$

$$\therefore\ \Psi_{(x,t)} = e^{(-i/\hbar)Et}\,\Psi_{(x)} \quad \text{--- (1)}$$

$$\because\ i\hbar \frac{\partial \Psi_{(x,t)}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi_{(x,t)}}{\partial x^2} + V_{(x)}\,\Psi_{(x,t)} \qquad \text{TDSE}$$

(1) in TDSE $\Rightarrow$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{-i/\hbar Et}\,\Psi_{(x)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-i/\hbar Et}\,\Psi_{(x)} + V_{(x)}\, e^{-i/\hbar Et}\,\Psi_{(x)}$$

$$i\hbar \left(-\frac{i}{\hbar}E\right)\Psi_{(x)}\,\cancel{e^{-i/\hbar Et}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi_{(x)}}{\partial x^2}\,\cancel{e^{-i/\hbar Et}} + V_{(x)}\,\Psi_{(x)}\,\cancel{e^{-i/\hbar Et}}$$

$$\therefore\ E\Psi_{(x)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi_{(x)} + V_{(x)}\,\Psi_{(x)}$$

In three dimen $\quad \nabla^2\Psi_{(r)} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V_{(r)}\right)\Psi_{(r)} = 0 \qquad$ TISE

Solution of TDSE حل معادلة شرودنكر

$$\because\ -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi_{(r,t)} + V_{(r)}\Psi_{(r,t)} = i\hbar\frac{\partial\Psi_{(r,t)}}{\partial t} \quad \text{---①}\quad \text{TDSE}$$

Let $\Psi_{(r,t)} = \psi_{(r)}\,\psi_{(t)}$ seperation of variables

$$\therefore\ \frac{\partial\Psi_{(r,t)}}{\partial t} = \psi_{(r)}\frac{\partial\psi_{(t)}}{\partial t} \quad \text{and} \quad \nabla^2\Psi_{(r,t)} = \psi_{(t)}\nabla^2\psi_{(r)} \quad \text{---②}$$

② in ① $\Rightarrow$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_{(t)}\nabla^2\psi_{(r)} + V_{(r)}\psi_{(r)}\psi_{(t)} = i\hbar\,\psi_{(r)}\frac{\partial\psi_{(t)}}{\partial t} \quad \div\,\psi_{(r)}\psi_{(t)} \Rightarrow$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2\psi_{(r)}}{\psi_{(r)}} + V_{(r)} = i\hbar\frac{1}{\psi_{(t)}}\frac{\partial\psi_{(t)}}{\partial t} \quad \text{---④}$$

تعويض في معادلة ④ اذا احد اطراف المعادلة تعتمد على r و t وتساوي الطاقة لذلك على الطرفين

$$\therefore\ i\hbar\frac{1}{\psi_{(t)}}\frac{\partial\psi_{(t)}}{\partial t} = E$$

$$\int_0^t\frac{\partial\psi_{(t)}}{\psi_{(t)}} = -\frac{i}{\hbar}E\int_0^t dt$$

$$\therefore\ \ln\psi_{(t)}\Big|_0^t = -\frac{i}{\hbar}Et \Rightarrow \ln\frac{\psi_{(t)}}{\psi_{(0)}} = -\frac{i}{\hbar}Et$$

$$\therefore\ \psi_{(t)} = \psi_{(0)}\,e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$$\because\ \Psi_{(r,t)} = \psi_{(r)}\,\psi_{(t)} \Rightarrow \Psi_{(r,t)} = \psi_{(r)}\left(\psi_{(0)}\,e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\right)$$

If $\psi_{(0)} = 1 \Rightarrow$

$$\Psi_{(r,t)} = \psi_{(r)}\,e^{(-i/\hbar)Et} \quad \text{The solution of TDSE}$$

Q/ If $\Psi_{(r,t)} = \psi_{(r)}\,e^{(-i/\hbar)Et}$ prove that the probability independent of time?

Sol $\because\ |\Psi_{(x,t)}|^2 = \Psi^*_{(x,t)}\,\Psi_{(x,t)}$

$$= \psi^*_{(x)}\,e^{iEt/\hbar}\,\psi_{(x)}\,e^{-iEt/\hbar}$$

$$= \psi^*_{(x)}\,\psi_{(x)}\,e^{iEt/\hbar - iEt/\hbar} = \psi^*_{(x)}\,\psi_{(x)}\,e^{0}$$

$$= |\psi_{(x)}|^2 \quad \text{Independent of time.}$$

المؤثرات Operators

الكميات التي يمكن قياسها تجريبياً مثل الموضع والزخم والطاقة تسمى بالكميات الملاحظة observables وتمثل هذه الكميات في الميكانيك الكمي بالمؤثرات.

والمؤثر هو الكمية التي اذا أثرت على دالة الموجة حولتها الى دالة موجية جديدة.

ويمكن التمييز بين الكمية الملاحظة A والكمية التي يرمز لمؤثرها في الميكانيك الكمي بالرمز $\hat{A}$ او A_{op} وكما موضح في الآتي.

① مؤثر الموضع $\hat{r}$

$$\hat{r} = r$$

or $\hat{x} = x$, $\hat{y} = y$, $\hat{z} = z$

② مؤثر الزخم $\hat{P}$

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla$$

or $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$, $\hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}$, $\hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$

③ مؤثر الزخم الزاوي $\hat{L}$

$$\hat{L} = -i\hbar\nabla \times r$$

④ مؤثر الطاقة الحركية $\hat{T}$

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

⑤ مؤثر الطاقة الكلية (الهاملتونية) Hamiltonian Operator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$$

من معادلة شرودنكر TDSE

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_{(r,t)} + V_{(r)}\psi_{(r,t)} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_{(r,t)}$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{(r)}\right)\psi_{(r,t)} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_{(r,t)}$$

$$H\psi_{(r,t)} = E\psi_{(r,t)}$$

من الجدير بالذكر أن المؤثرات الكمية يجب أن تتصف بصفات معينة

ليكن $\hat{F}$ مؤثر operator

و ψ_1 , ψ_2 دالتان مستوفيتان بشروط الدالة (أحادية القيمة، مستمرة، وممكن تكاملها) فيطلق على $\hat{F}$ مؤثراً خطياً اذا حقق الشرط التالي:

$$\hat{F}(\psi_1 + \psi_2) = \hat{F}\psi_1 + \hat{F}\psi_2$$ 7

$$\hat{F}(C\psi) = C\hat{F}\psi \quad \text{where } C \text{ is Constant}$$

وعلى سبيل المثال لكن $\hat{F} = \frac{d}{dx}$ نلاحظ انه خطياً لكونه يحقق الشرط اعلاه

$$\frac{d}{dx}(\psi_1(x) + \psi_2(x)) = \frac{d}{dx}\psi_1(x) + \frac{d}{dx}\psi_2(x)$$

ومن الجدير بالذكر انه ليست جميع المؤثرات خطية ولكن $\hat{F} = \sqrt{\ }$ نلاحظ

$$\sqrt{\psi_1 + \psi_2} \neq \sqrt{\psi_1} + \sqrt{\psi_2}$$

كما أن المؤثرات تخضع للعمليات الجبرية (الجمع، الطرح، الضرب)

لكن $\hat{F}$ ، $\hat{M}$ مؤثرين يؤثران على الدالة ψ :-

$$(\hat{F} + \hat{M})\psi = \hat{F}\psi + \hat{M}\psi$$

$$(\hat{F} - \hat{M})\psi = \hat{F}\psi - \hat{M}\psi$$

$$\hat{F}\hat{M}\psi = \hat{F}(\hat{M}\psi)$$

أي أن المؤثر $\hat{M}$ يؤثر على الدالة ψ والمؤثر $\hat{F}$ يؤثر على النتيجة.

المؤثر المتبدل Commutator

نفترض بأن المؤثرين $\hat{A}$ ، $\hat{B}$ يؤثران بصورة متتالية على الدالة ψ فنطلق على المؤثرين $\hat{A}$ ، $\hat{B}$ بالتبادليين Commutator اذا حققا الشرط الآتي

$$\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{B}\hat{A}\psi \Rightarrow \hat{A}\hat{B}\psi - \hat{B}\hat{A}\psi = 0$$

$$\Rightarrow \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$$

$$\hat{C} = [\hat{A}, \hat{B}] = 0$$ وتكتب باختصار

Where $\hat{C}$ is Commutator

وأن هذه الصفة تؤدي الى امكانية ايجاد مجموعة كاملة من الدالات المميزة الذاتية ψ_n لكل من $\hat{A}$ ، $\hat{B}$ وهذا يعني امكانية قياسهما تجريبياً بآن واحد بدقة متناهية (آنياً)

$$\hat{A}\psi_n = A_n\psi_n$$

$$\hat{B}\psi_n = B_n\psi_n$$

حيث A_n ، B_n مقادير ثابتة تمثل القيم المميزة العائدة للدالة ψ_n

ومن الأمثلة على المؤثرات التبادلية

$$[\hat{X},\hat{V}_x]=0 \quad , \quad [\hat{x},\hat{y}]=0 \quad , \quad [\hat{P}_x,\hat{P}_y]=0 \quad , \quad [\hat{P}_x,\hat{T}]=0$$

أما إذا كان المؤثران $\hat{A}$ ، $\hat{B}$ غير تبادليين فانهما:-

$$\hat{A}\hat{B}\psi \neq \hat{B}\hat{A}\psi \Rightarrow [\hat{A},\hat{B}]\neq 0$$

وهذا يعني أنه لا يمكن قياس $\hat{A}$ ، $\hat{B}$ آنياً وبدقة متناهية وهذا يتعلق

مع مبدأ اللادقة (اللاتحديد) Heisenberg Uncertainty principle

ومن الأمثلة على المؤثرات غير التبادلية:-

$$\left[\frac{d}{dx},x^2\right]\neq 0 \quad , \quad [\hat{H},\hat{P}_x]\neq 0 \quad , \quad [\hat{V}_{(x)},\hat{P}_x]\neq 0 \quad , \quad [\hat{X},P_x]\neq 0$$

وأن الخواص الرياضية للمؤثر المتبادل Commutator هي:-

1- $[\hat{A},\hat{B}]=-[\hat{B},\hat{A}]$

2 $[\hat{A},\hat{A}]=0$

3 $[\hat{A},\hat{B}+\hat{C}]=[\hat{A},\hat{B}]+[\hat{A},\hat{C}]$

4 $[\hat{A}+\hat{B},\hat{C}]=[\hat{A},\hat{C}]+[\hat{B},\hat{C}]$

5 $[\hat{A},\hat{B}\hat{C}]=[\hat{A},\hat{B}]\hat{C}+\hat{B}[\hat{A},\hat{C}]$

6 $[\hat{A}\hat{B},\hat{C}]=[\hat{A},\hat{C}]\hat{B}+\hat{A}[\hat{B},\hat{C}]$

7 $[\hat{A}^2,\hat{C}]=[\hat{A},\hat{C}]\hat{A}+\hat{A}[\hat{A},\hat{C}]=\hat{A}[\hat{A},\hat{C}]+[\hat{A},\hat{C}]\hat{A}$

8 $[\hat{A},[\hat{B},\hat{C}]]+[\hat{C},[\hat{A},\hat{B}]]+[\hat{B},[\hat{C},\hat{A}]]=0$

9 $[\hat{A},b]=0$

Where $\hat{A},\hat{B},\hat{C}$ Linear Operators and b is a Constant

Ex: Evaluate $\left[\frac{\partial}{\partial x},\frac{\partial^n}{\partial x^n}\right]$?

sol:

$$\left[\frac{\partial}{\partial x},\frac{\partial^n}{\partial x^n}\right]\psi=\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial^n}{\partial x^n}\psi-\frac{\partial^n}{\partial x^n}\frac{\partial}{\partial x}\psi$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^{n+1}}{\partial x^{n+1}}\psi_n-\frac{\partial^{n+1}}{\partial x^{n+1}}\psi_n=0 \qquad \text{Commute}$$

Ex: Evaluate $[\frac{d}{dx}, x^2]$?

Sol

$$[\frac{d}{dx}, x^2]\psi = \frac{d}{dx}x^2\psi - x^2\frac{d}{dx}\psi = 2x\psi + \cancel{x^2\frac{d\psi}{dx}} - \cancel{x^2\frac{d\psi}{dx}}$$

$$\therefore [\frac{d}{dx}, x^2] = 2x$$

Ex: Evaluate $[\hat{x}^n, \hat{P}_x]$?

Sol

$$[\hat{x}^n, \hat{P}_x]\psi = \hat{x}^n\hat{P}_x\psi - \hat{P}_x\hat{x}^n\psi \quad \text{but } \hat{P}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

$$= -i\hbar\left(x^n\frac{\partial}{\partial x}\psi - \frac{\partial}{\partial x}\hat{x}^n\psi\right)$$

$$= -i\hbar\left(\cancel{x^n\frac{\partial\psi}{\partial x}} - nx^{n-1}\psi - \cancel{x^n\frac{\partial\psi}{\partial x}}\right) = i\hbar n x^{n-1}\psi$$

$$\therefore [\hat{x}^n, \hat{P}_x] = i\hbar n x^{n-1}$$

Ex: Prove that $[\hat{H}, \hat{x}] = -\frac{i\hbar}{m}\hat{P}_x$?

Sol: $\because \hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V \Rightarrow [\hat{H}, \hat{x}] = [\frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{V}, \hat{x}]$

$$[\frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{V}, \hat{x}] = [\frac{\hat{P}^2}{2m}, \hat{x}] + [\hat{V}, \hat{x}] \quad \text{--- (1)}$$

but: $[\hat{V}, \hat{x}]\psi = Vx\psi - xV\psi = 0 \Rightarrow [\hat{V}, \hat{x}] = 0$ --- (2)

and $[\frac{\hat{P}^2}{2m}, \hat{x}] = [\frac{\hat{P}}{2m}, x]\hat{P} + \hat{P}[\frac{\hat{P}}{2m}, x]$ --- (3)

$$[\frac{\hat{P}}{2m}, x]\psi = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\partial}{\partial x}x\psi - x\frac{\partial}{\partial x}\psi\right)$$

$$= \frac{-i\hbar}{2m}\left(\psi + \cancel{x\frac{\partial\psi}{\partial x}} - \cancel{x\frac{\partial\psi}{\partial x}}\right) = -\frac{i\hbar}{2m}\psi \Rightarrow [\frac{\hat{P}}{2m}, \hat{x}] = -\frac{i\hbar}{2m} \quad \text{--- (4)}$$

(4) in (3) $\Rightarrow$

$$[\frac{\hat{P}^2}{2m}, \hat{x}] = \frac{-i\hbar}{2m}\hat{P} - \hat{P}\frac{i\hbar}{2m} = \frac{-i\hbar}{m}\hat{P} \quad \text{--- (5)}$$

(2) and (5) in (1) $\Rightarrow$

$$[\hat{H}, \hat{x}] = -\frac{i\hbar}{m}\hat{P}$$