www.arsanjan.blogfa.com

فیزیک کوانتومی

استیون گاریوودیچ

ترجمه محی الدین شیخ الاسلامی

www.arsanjan.blogfa.com

فیزیک کوانتومی

استیون گازیورووویچ

ترجمهٔ محی‌الدین شیخ‌الاسلامی

مرکز نشر دانشگاهی، تهران

www.arsanjan.blogfa.com

Quantum Physics
Stephen Gasiorowicz
Second Edition
John Wiley & Sons, 1996

فیزیک کوانتومی
تألیف استیون گازیورو ویچ
ترجمهٔ محی‌الدین شیخ‌الاسلامی
ویراستهٔ دکتر منیژه رهبر
نسخه‌پرداز: زهرا رحیمدل قادر
حروفچین: پروین حاج اسماعیل زنجانی
مرکز نشر دانشگاهی، تهران
چاپ اول ۱۳۷۸
چاپ پنجم ۱۳۸۴
تعداد ۴۰۰۰
چاپ: محمدامین
حق چاپ برای مرکز نشر دانشگاهی محفوظ است

فهرست‌نویسی پیش از انتشار کتابخانهٔ ملی جمهوری اسلامی ایران

گازیورو ویچ، استیون، ۱۹۲۸ - Gasiorowicz, Stephen
فیزیک کوانتومی / استیون گازیورو ویچ؛ ترجمهٔ محی‌الدین شیخ‌الاسلامی؛ ویراستهٔ منیژه رهبر ــ تهران: مرکز نشر دانشگاهی، ۱۳۷۸.
چهار، ۵۹۹ ص. : مصور، جدول، نمودار. ــ (مرکز نشر دانشگاهی؛ ۹۵۲. فیزیک؛ ۸۷)
ISBN 964-01-0952-5

فهرست‌نویسی بر اساس اطلاعات فیپا.
عنوان اصلی: Quantum Physics, 2nd ed. 1996.
این کتاب با ناشران و مترجمان مختلف در سالهای متفاوت نیز منتشر شده است.
واژه‌نامه.
کتابنامه.
نمایه.
چاپ پنجم: ۱۳۸۴.
۱.کوانتوم. الف. شیخ‌الاسلامی، محی‌الدین، مترجم. ب. مرکز نشر دانشگاهی. ج. عنوان.
۹ف۲گ/۱۲/QC۱۷۴ ۵۳۰/۱۲
کتابخانهٔ ملی ایران ۷۸ - ۱۵۵۰۶م

www.arsanjan.blogfa.com

بسم‌الله‌الرحمن‌الرحیم

فهرست

عنوان	صفحه
پیشگفتار ویرایش اول	۱
پیشگفتار ویرایش دوم	۳
۱. محدودیتهای فیزیک کلاسیک	۵
۲. بسته‌های موج و رابطه‌های عدم قطعیت	۳۶
۳. معادلهٔ موج شرودینگر و تعبیر احتمالاتی	۵۳
۴. ویژه‌تابعها و ویژه‌مقدارها	۶۹
۵. پتانسیلهای یک‌بعدی	۹۴
۶. ساختار کلی مکانیک موجی	۱۴۴
۷. روشهای عملگری در مکانیک کوانتومی	۱۶۵
۸. دستگاههای N ذره‌ای	۱۸۶
۹. معادلهٔ شرودینگر در سه‌بعد (۱)	۲۰۵
۱۰. معادلهٔ شرودینگر در سه‌بعد (۲)	۲۱۵
۱۱. تکانهٔ زاویه‌ای	۲۴۰
۱۲. اتم هیدروژن	۲۶۰
۱۳. برهم‌کنش الکترون با میدان الکترومغناطیسی	۲۷۵
۱۴. عملگرها، ماتریسها، و اسپین	۳۰۱
۱۵. جمع تکانه‌های زاویه‌ای	۳۲۴
۱۶. نظریهٔ اختلال مستقل از زمان	۳۴۱
۱۷. اتم هیدروژن واقعی	۳۵۸
۱۸. اتم هلیم	۳۷۴

www.arsanjan.blogfa.com

عنوان	صفحه
۱۹. ساختار اتمها	۳۹۴
۲۰. مولکولها	۴۱۲
۲۱. تابش اتمی	۴۳۴
۲۲. مباحث برگزیده در نظریهٔ تابش	۴۶۶
۲۳. نظریهٔ برخورد	۴۹۳
۲۴. جذب تابش در ماده	۵۲۸
پیوست الف: انتگرال فوریه و توابع دلتا	۵۴۳
پیوست ب: عملگرها	۵۵۰
مبحث ویژهٔ ۱: سینماتیک نسبیتی	۵۵۷
مبحث ویژهٔ ۲: عملگر چگالی	۵۶۲
مبحث ویژهٔ ۳: تقریب ونتزل-کرامرز-بریلوئن	۵۶۹
مبحث ویژهٔ ۴: طول عمر، پهنای خط، و تشدید	۵۷۳
ثابتهای فیزیکی	۵۸۲
مراجع	۵۸۳
فهرست راهنما	۵۹۰

www.arsanjan.blogfa.com

پیشگفتار ویرایش اول

این کتاب را می‌توان درآمدی بر فیزیک کوانتومی دانست. در نگارش آن، چند نکته را به‌عنوان راهنما در نظر داشته‌ام.

۱. پیش از هر چیز، برای ایجاد درک شهودی در هر رشتهٔ جدیدی بهتر است که مطالعهٔ آن با مبنایی از شناخت مشروح دستگاههای ساده شروع شود. به همین دلیل، تعدادی از مسائل را با تفصیل بسیار حل کرده‌ام، به‌طوری که بینش حاصل از آن‌را می‌توان برای دستگاههای پیچیده‌تر به‌کار برد.

۲. هر جنبه‌ای از مکانیک کوانتومی در درک دست‌کم یکی از پدیده‌های فیزیکی مفید بوده است. در هر مرحله از شرح و بسط موضوع، روی کاربردها تأکید کرده‌ام. اگرچه هیچ مبحثی از فیزیک کوانتومی به‌طورکامل تشریح نشده است، اما هدف من پر کردن فاصلهٔ میان درس فیزیک نوین و ببین صوری‌تر مکانیک کوانتومی است. از این‌رو، کاربردهای بسیاری را بررسی کرده‌ام، و بر براورد مرتبهٔ بزرگی و اهمیت اعداد تأکید کرده‌ام.

۳. برای حفظ تعادل با سطح فیزیکی کتاب، ساختار ریاضی را تا حد امکان ساده گرفته‌ام. مفاهیم جدید، مانند عملگرها، و ابزارهای ریاضی جدید الزاماً ظاهر می‌شوند. عملگرها را بیشتر با استفاده از تشابه، به‌جای تعریف دقیق، بررسی کرده‌ام، و استفاده از ابزارهای ریاضی جدید را تا جایی که امکان داشته است به حداقل رسانده‌ام.

در رهیافت به نظریهٔ کوانتومی، مکانیک موجی و معادلهٔ شرودینگر را برای شروع انتخاب کرده‌ام. اگرچه با رهیافت بردار حالت سریعتر می‌توان به ساختار اساسی مکانیک کوانتومی رسید، اما تجربه نشان داده است که استفاده از ابزارهای آشناتر، مانند معادله‌های دیفرانسیل، نظریه را قابل فهمتر و همخوانی با فیزیک کلاسیک را شفافتر می‌کند.

حجم کتاب احتمالاً بیشتر از آن است که بتوان در یک سال به‌آسانی تدریس کرد. مطالب اساسی را می‌توان در یک سه ماههٔ تحصیلی تدریس کرد. این قسمت از کتاب تشکیل شده است از فصلهای ۱ تا ۶، ۸ و ۹ که در آنها شکل‌گیری نظریهٔ کوانتومی، معادلهٔ شرودینگر و ساختار کلی مکانیک موجی بیان شده‌اند. تعدادی مسئلهٔ ساده در فصل ۵ حل شده‌اند، و دربارهٔ رابطهٔ آنها با

www.arsanjan.blogfa.com

پدیده‌های فیزیک بحث شده است. تعمیم به دستگاههای چندذره‌ای و به سه بعد بررسی شده است. مطالب سه ماههٔ دوم مستقیماً به مسائل فیزیک اتمی مربوط می‌شوند، و در این قسمت از ابزار ریاضی پیچیده‌تری استفاده می‌شود. در اینجا دربارهٔ روشهای عملگری (فصل ۷)، تکانهٔ زاویه‌ای (فصل ۱۰)، اتم هیدروژن (فصل ۱۲)، عملگرها، ماتریسها و اسپین (فصل ۱۴)، جمع عملگرهای زاویه‌ای (فصل ۱۵)، نظریهٔ اختلال مستقل از زمان (فصل ۱۶) و اتم هیدروژن واقعی (فصل ۱۷) بحث می‌کنیم. این برنامه دانشجو را برای روبه رو شدن با مسائل بسیار متنوعی که طی سه ماههٔ سوم و آخر بررسی می‌شوند آماده می‌کند. این مسائل عبارت‌اند از برهم‌کنش ذرات باردار با میدان مغناطیسی (فصل ۱۳)، اتم هلیم (فصل ۱۸)، تابش اتمها و مباحث مربوط (فصلهای ۲۲ و ۲۳)، نظریهٔ برخورد (فصل ۲۴) و جذب تابش در ماده (فصل ۲۵). این قسمت با یک بحث کیفی‌تر دربارهٔ ساختار اتمها و مولکولها (فصلهای ۱۹ تا ۲۱) تکمیل می‌شود. آخرین فصل که دربارهٔ ذرات بنیادی و تقارنهای آنها است هدف دوگانه‌ای دارد که عبارت است از توصیف بعضی از پیشرفتهای اخیر در خط مقدم فیزیک و نشان دادن اینکه چگونه مفاهیم اساسی نظریهٔ کوانتومی در قلمرو فواصل بسیار کوچک کاربرد یافته‌اند.

در شرح و بسط موضوع اصلی طبعاً بعضی مباحث حاشیه‌ای پیش می‌آیند. به‌جای طولانی‌تر کردن فصلها، بخش جداگانهٔ "مباحث ویژه" را اضافه کرده‌ام. در اینجا سینماتیک نسبیتی، اصل هم‌ارزی، تقریب WKB، بحث مفصلی در طول عمر، پهنای خط و تشدید پراکندگی، و نظریهٔ یوکاوا برای نیروهای هسته‌ای بیان می‌شوند. به همان دلیل، درآمد کوتاهی بر انتگرال فوریه، تابع دلتای دیراک، و چند مطلب صوری دربارهٔ عملگرها در پیوستهای ریاضی آخر کتاب گنجانده شده‌اند.

به‌خاطر بحثهای بسیار دربارهٔ موضوع مکانیک کوانتومی، خود را مدیون همکارانم در دانشگاه مینه‌سوتا، مخصوصاً بنجامین بیمان و دونالد گفن، می‌دانم. از یوجین مرزباخر که دست‌نوشته‌ام را خوانده است و پیشنهادهای مفید بسیاری برای اصلاح آن داده است سپاسگزاری می‌کنم. همچنین از دانشجویانم در درس مکانیک کوانتومی مقدماتی که چندین سال درس داده‌ام تشکر می‌کنم. علاقهٔ آشکار آنها به موضوع مرا بر آن داشت تا یادداشتهای مکملی بنویسم که بعداً به‌صورت کتاب حاضر درآمد.

استیون گازیوروویچ

www.arsanjan.blogfa.com

پیشگفتار ویرایش دوم

ویرایش اول فیزیک کوانتومی بیش از ۲۰ سال قبل انتشار یافت. رهنمودهایی که در پیشگفتار آن مطرح کردم و همچنین رهیافت کلی آن‌را هنوز هم تأیید می‌کنم. ویرایش کنونی تفاوت اساسی با ویرایش اول ندارد اما از چند لحاظ مهم بهتر شده است.

آموزش

برای آسانتر شدن کار دانشجو، جزئیات بیشتری از استدلالها و محاسبات را بیان کرده‌ام و به بحثهای فیزیکی بیشتری در ورای نتایج صوری محاسبات پرداخته‌ام. همچنین تعداد عناوین بخشها و زیربخشها را زیادتر کرده‌ام، که این باعث می‌شود کار مدرس نظم بیشتری پیدا کند. در راستای هدف ارائهٔ کتابی دربارهٔ فیزیک کوانتومی تعداد کاربردها را افزایش داده‌ام.

کاربردها

تغییراتی بنیادی در تعداد زیادی از کاربردهایی که در متن کتاب گنجانده شده‌اند به‌وجود آورده‌ام. بحث گاز فرمیون واگن را برای محاسبهٔ ساده‌ای از شعاع ستارهٔ نوترونی گسترش داده‌ام. در بحث برهم‌کنش الکترون با میدان مغناطیسی، به ترازهای لانداؤ و مختصراً به اثر کوانتومی هال با اعداد درست اشاره کرده‌ام.

تغییراتی که در نیمهٔ دوم این ویرایش صورت گرفته‌اند عبارت‌اند از کوتاه کردن بحث ساختار مولکولی و حذف فصل مربوط به فیزیک ذرات بنیادی. در عوض، به نظریهٔ تابش توجه بیشتری کرده‌ام. در اینجا بحث ضرایب A و Bی اینشتین، لیزرها، سرد کردن اتمها، خواص اتمهای دوترازی در میدانهای الکتریکی شدید، و موضوع جذاب مشاهدهٔ جهشهای کوانتومی را اضافه کرده‌ام.

در بخش مباحث ویژه، بحث اصل هم‌ارزی اینشتین را، که مناسبتی با این کتاب ندارد، با بحثی دربارهٔ عملگر چگالی عوض کرده‌ام. دربارهٔ این عملگر توضیحی در متن درس داده نشده است، و افزودن آن باعث می‌شود که دانشجویان، اگر لازم باشد، بتوانند معلومات خود را گسترش دهند.

www.arsanjan.blogfa.com

سپاسگزاری

در سالهای گذشته با افرادی که از ویرایش اول استفاده کرده‌اند ارتباط داشته‌ام. غلطهای چاپی و همچنین مسائل غیرقابل حل را به من تذکر داده‌اند. چون این اشتباهات را نزدیک به ۲۰ سال قبل به من اطلاع داده‌اند (بسیاری از آنها در چاپ دوم تصحیح شدند) اسامی تمام آن افراد را به‌خاطر ندارم. وظیفهٔ خود می‌دانم که از همهٔ آنها تشکر کنم، از جمله از استادان ج س تِن و تام دِوْلین. تذکرات جالبی از استادان لوول براون، ریچارد روبینت، ایان گاتلند، یوآن‌ها، و روبرت لوری دریافت داشته‌ام، و مایلم مخصوصاً از دوست و همکارم ارل پیترسون برای پیشنهادهای مفیدش تشکر کنم.

استیون گاز یورورویچ

www.arsanjan.blogfa.com

۱

محدودیتهای فیزیک کلاسیک

پایان قرن نوزدهم و آغاز قرن بیستم دورهٔ بحران در فیزیک بود. یک رشته نتیجه‌های تجربی به مفاهیمی نیاز داشتند که کاملاً با فیزیک کلاسیک ناسازگارند. پیشرفت این مفاهیم، در یک کشاکش جذاب از حدسهای اساسی و آزمایشهای درخشان، در نهایت به نظریهٔ کوانتومی منجر شد.[۱] هدف ما در این فصل توصیف زمینهٔ این بحران و، پس از درک ماوقع، ارائهٔ مفاهیم جدید به ترتیبی است که اگرچه از لحاظ تاریخی درست نیست اما اسرارآمیز بودن گذار به نظریهٔ کوانتومی را برای خواننده کمتر می‌کند. مفاهیم جدید، یعنی خواص ذره‌ای تابش، خواص موجی ماده، و کوانتیدگی کمیتهای فیزیکی، در پدیده‌هایی که بررسی خواهیم کرد ظاهر می‌شوند.

---

۱. گزارش جالب‌توجهی از تکوین و تکامل نظریهٔ کوانتومی را می‌توان در کتاب زیر یافت.

M Jammer, *The Conceptual Development of Quantum Mechanics*, Second Edition, American Institute of Physics, New York 1983.

همچنین مراجعه کنید به

A Pais, *Subtle is The Lord...*, Oxford University Press, NY (1982), Ch 19.

www.arsanjan.blogfa.com

تابش جسم سیاه

تابش جسم سیاه کلاسیک

وقتی جسمی گرم می‌شود تابش می‌کند. در حالت تعادل، نورگسیل شده تمام طیف بسامدهای ν را با یک توزیع طیفی در بر می‌گیرد، که هم به بسامد نور، یا معادل آن طول‌موج λ، بستگی دارد و هم به دما. می‌توان کمیت توان گسیل $E(\lambda,T)$ را به‌صورت انرژی گسیل شده در طول‌موج λ در واحد سطح و در واحد زمان تعریف کرد. پژوهش نظری در حوزهٔ تابش گرمایی در سال ۱۸۵۹ با کار گوستاو کیرشهوف شروع شد که نشان داد به‌ازای یک λی معین نسبت توان گسیل E به ضریب جذب A، که بنا به تعریف کسر تابش فرودی با طول‌موج λ است که جسم جذب می‌کند، برای تمام جسمها یکسان است. کیرشهوف دو صفحهٔ گسیلنده و جذب‌کنندهٔ موازی در نظر گرفت و از شرط تعادل نشان داد که (به‌ازای هر λ) انرژی گسیل شده با انرژی جذب شده برابر است، یعنی نسبتهای E/A باید برای این دو صفحه یکسان باشند. اندکی پس از آن، او دریافت که برای جسم سیاه، که بنابه تعریف به سطحی گفته می‌شود که تمام تابش فرودی را کاملاً جذب می‌کند و در نتیجه برای آن $A = ۱$، تابع $E(\lambda,T)$ یک تابع جهانی است.

برای مطالعهٔ این تابع، لازم است که بهترین چشمهٔ ممکن تابش جسم سیاه را به‌دست آوریم. یک حل عملی این مسئله بررسی تابش گسیل شده از یک روزنهٔ کوچک در محفظه‌ای است که تا دمای T گرم شده است. با توجه به ناکاملیهای سطح داخلی کاواک، واضح است که هر تابشی که به روزنه فرود می‌آید دیگر نمی‌تواند از آن خارج شود. بدین‌ترتیب، سطح روزنه تقریباً یک "جذب‌کنندهٔ کامل" است، و در نتیجه تابش ناشی از آن واقعاً "تابش جسم سیاه" است. اگر روزنه به‌اندازهٔ کافی کوچک باشد، این تابش همان تابشی است که به دیواره‌های کاواک فرود می‌آید. بنابراین، دانستن توزیع تابش داخل کاواکی که دیواره‌های آن در دمای T هستند ضروری است.

کیرشهوف نشان داد که، بنابه قانون دوم ترمودینامیک، تابش داخل کاواک ــ برای هر طول‌موج ــ باید همسانگرد باشد، یعنی شار مستقل از راستا است؛ باید همگن باشد، یعنی در هر نقطه یکسان؛ است و باید برای تمام کاواکهای با دمای مساوی یکسان باشد.[۲] با استدلالهای سادهٔ هندسی می‌توان نشان داد که توان گسیل با چگالی انرژی $u(\lambda,T)$ در کاواک ارتباط دارد (مسئلهٔ ۱ـ۱). این رابطه به‌صورت زیر است

$$u(\lambda,T) = \frac{۴E(\lambda,T)}{c} \qquad (۱\text{ـ}۱)$$

چگالی انرژی کمیتی است که به لحاظ نظری اهمیت دارد، و درک دقیقتر آن در سال ۱۸۹۴ با

---

۲. این مطالب در بسیاری از کتابهای درسی فیزیک جدید و فیزیک آماری توضیح داده شده‌اند. مرجعهای مربوطه را می‌توانید در آخر این فصل و آخر کتاب بیابید.

www.arsanjanibloga.com

کار ویلهلم وین حاصل شد که بعدها به نام او،[۳] نشان داد چگالی انرژی باید به‌صورت زیر باشد

$$u(\lambda, T) = \lambda^{-5} f(\lambda T) \qquad (۱\text{ـ}۲)$$

که در آن f تابع هنوز نامعلومی از تنها یک متغیر است. اگر، چنانکه مناسبتر است، بخواهیم با چگالی انرژی برحسب بسامد $u(\nu, T)$ کار کنیم با توجه به اینکه $\lambda = c/\nu$ و

$$\begin{aligned} u(\nu, T) &= u(\lambda, T) \left| \frac{d\lambda}{d\nu} \right| \\ &= \frac{c}{\nu^2} u(\lambda, T) \end{aligned} \qquad (۱\text{ـ}۳)$$

قانون وین به‌صورت زیر در می‌آید

$$u(\nu, T) = \nu^3 g\left(\frac{\nu}{T}\right) \qquad (۱\text{ـ}۴)$$

این قانون، که تجربه آن‌را تأیید کرده است (شکل ۱ـ۱)، مستلزم دو پیامد زیر است:

۱. با داشتن توزیع طیفی تابش جسم سیاه در یک دمای معین، می‌توان توزیع در هر دمای دیگر را با استفاده از روابط بالا به‌دست آورد.

۲. اگر تابع $f(x)$ ــ یا معادل آن، تابع $g(x)$ــ به‌ازای یک مقدار $x > 0$ بیشینه‌ای داشته باشد، طول‌موج $\lambda_{(\max)}$ که در آن چگالی انرژی و در نتیجه توان گسیل بیشینه است با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$\lambda_{(\max)} = \frac{b}{T} \qquad (۱\text{ـ}۵)$$

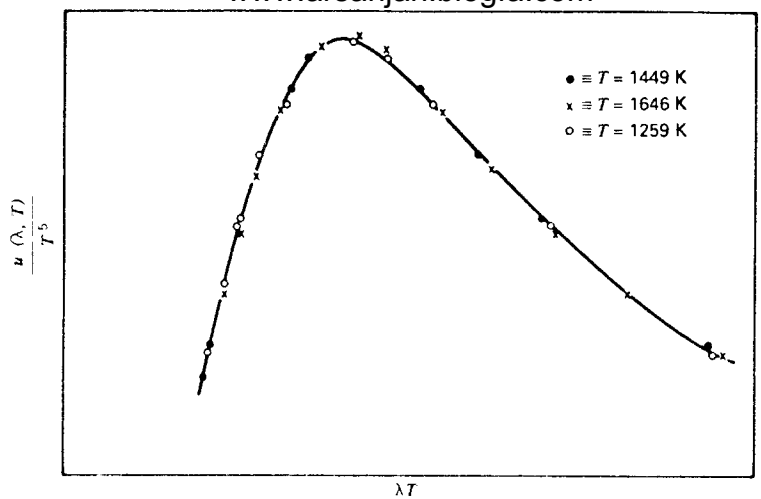
که در آن b یک ثابت جهانی است. مقدار این ثابت، بنابه آزمایشهای اوتولومر و ای پرینگزهایم (۱۸۹۷)، برابر است با $b = 0.2898\,\mathrm{cm\,K}$.

---

۳. وین یک کاواک کروی کاملاً بازتابنده را در نظر گرفت که به‌طور بی‌دررو منقبض می‌شود. تغییر توزیع انرژی برحسب λ باید به علت انتقال دوپلر در بازتاب باشد. به‌فصل ۵ از کتاب زیر مراجعه کنید

F K Richtmyer, E H Kennard, and J N Cooper, *Introduction to Modern Physics*, McGraw-Hill, New York, 1969.

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۱ـ۱ تأیید تجربی رابطهٔ ۱ـ۲ به‌صورت $u(\lambda,T)/T^5$ که یک تابع جهانی برحسب λT است.

وین با استفاده از یک الگو (که تنها به لحاظ تاریخی جالب توجه است) صورتی برای $g(\nu/T)$ به‌دست آورد که عبارت است از

$$g\left(\frac{\nu}{T}\right) = Ce^{-\beta\nu/T} \qquad (۶ـ۱)$$

و بسیار عجیب است که این تابع، که حاوی دو پارامتر قابل تنظیم است، با داده‌های بسامد زیاد (طول‌موج کم) کاملاً جور در می‌آید، اما با بعضی از مفاهیم بسیار کلی فیزیک کلاسیک سازگار نیست. جان ویلیام استروت ریلی، در سال ۱۹۰۰، نتیجهٔ زیر را به‌دست آورد

$$u(\nu,T) = \frac{۸\pi\nu^۲}{c^۳}kT \qquad (۷ـ۱)$$

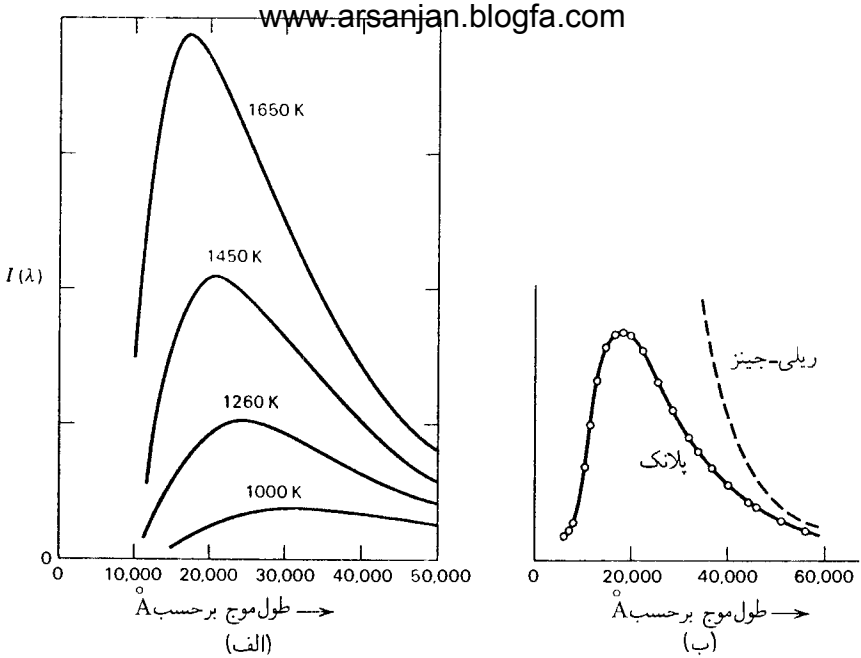
که در آن k ثابت بولتزمن ($۱٫۳۸ \times ۱۰^{-۱۶}\mathrm{erg/K}$) و c سرعت نور است، ($۳٫۰۰ \times ۱۰^{۱۰}\mathrm{cm/s}$) است. محاسبهٔ فرمول ۱ـ۷ شامل دو قسمت بود: (۱) تعیین انرژی میانگین به‌ازای هر درجهٔ آزادی برای یک دستگاه دینامیکی در حال تعادل گرمایی بر مبنای قانون کلاسیک همپاری انرژی،[۴] و (۲) تعیین تعداد مدها (یعنی درجه‌های آزادی) برای تابش الکترومغناطیسی محبوس در یک کاواک با بسامدی در بازهٔ $(\nu, \nu+d\nu)$.[۵]

---

۴. قانون همپاری پیش‌بینی می‌کند که انرژی میانگین به‌ازای هر درجهٔ آزادی $kT/۲$ است. برای یک نوسانگر ــ و مدهای میدان الکترومغناطیسی نوسانگرهای هماهنگ ساده هستند ــ یک سهم $kT/۲$ از انرژی جنبشی با یک سهم مساوی از انرژی پتانسیل جمع می‌شود و نتیجه kT است.

۵. تعداد این مدها $۴\pi\nu^۲/c^۳$ است که باید در ۲ ضرب شود زیرا امواج الکترومغناطیسی، که عرضی‌اند، متناظر با ←

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۱ـ۲ (الف) توزیع توان تابیده از جسم سیاه در دماهای مختلف. (ب) مقایسهٔ داده‌های تجربی در ۱۶۰۰K با فرمولهای پلانک و ریلی-جینز.

قانون ریلی-جینز۱ـ۷ (جینز یک اشتباه جزئی در محاسبهٔ ریلی را تصحیح کرد) در بسامدهای زیاد، برخلاف فرمول وین، با آزمایش توافق ندارد اما در بسامدهای کم بر منحنی تجربی منطبق است (شکل ۱ـ۲). قانون ریلی-جینز اساساً نمی‌تواند درست باشد، زیرا چگالی انرژی کل (انتگرال چگالی انرژی روی تمام بسامدها) را بینهایت پیش‌بینی می‌کند.

توزیع پلانک و کوانتوم انرژی

ماکس پلانک در سال ۱۹۰۰، از تلفیق نبوغ‌آمیز فرمول بسامد زیاد وین با قانون بسامد کم ریلی-جینز، فرمولی به‌دست آورد که به‌صورت زیر است

$$u(\nu,T)=\frac{8\pi h}{c^3}\,\frac{\nu^3}{e^{h\nu/kT}-1} \qquad (8\text{ـ}1)$$

در این فرمول، h، ثابت پلانک، یک پارامتر قابل تنظیم است که معلوم شد مقدار آن برابر است با $6{,}63\times10^{-27}\,\mathrm{erg\,s}$. این قانون به‌ازای $h\nu/kT \ll 1$ به‌صورت قانون ریلی-جینز در می‌آید،

نوسانگرهای هماهنگ دوبعدی هستند. این نتیجه را باز هم لازم داریم، و آنرا در فصل ۱۲ محاسبه خواهیم کرد.

www.arsanjan.blogfa.com

و به‌ازای $h\nu \gg kT$ تبدیل می‌شود به

$$u(\nu,T) = \frac{8\pi h}{c^3}\nu^3 e^{-h\nu/kT}(1-e^{-h\nu/kT})^{-1} \cong \frac{8\pi h}{c^3}\nu^3 e^{-h\nu/kT} \qquad (۹\text{ـ}۱)$$

اگر رابطهٔ ۱ـ۸ را به‌صورت حاصلضرب تعداد مدها (که می‌توان آن‌را از تقسیم چگالی انرژی ۱ـ۷ بر kT به‌دست آورد) و عامل دیگری، که می‌توان آن‌را انرژی متوسط به‌ازای هر درجهٔ آزادی تعبیر کرد، درآوریم:

$$u(\nu,T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\frac{h\nu}{e^{h\nu/kT}-1} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}kT\frac{h\nu/kT}{e^{h\nu/kT}-1} \qquad (۱۰\text{ـ}۱)$$

می‌بینیم که هرگاه بسامدها در مقایسه با kT/h کوچک نباشند قانون همپاری کلاسیک تغییر می‌کند. این تغییر در قانون همپاری نشان می‌دهد که اولاً مدها انرژی میانگینی دارند که تابع بسامد آنها است، و ثانیاً میانگین انرژی مدهای پُربسامد بسیار کوچک است. این قطع مؤثر مشکل فرمول چگالی ریلی‌ـجینز را برطرف می‌کند: انرژی کل در کاواکی با حجم واحد دیگر بینهایت نیست. داریم

$$U(T) = \frac{8\pi h}{c^3}\int_0^\infty d\nu \frac{\nu^3}{e^{h\nu/kT}-1} = \frac{8\pi h}{c^3}\left(\frac{kT}{h}\right)^4 \int_0^\infty \frac{(h\nu/kT)^3 d(h\nu/kT)}{e^{h\nu/kT}-1} = \frac{8\pi k^4}{h^3c^3}T^4\int_0^\infty dx\frac{x^3}{e^x-1} \qquad (۱۱\text{ـ}۱)$$

انتگرال را می‌توان محاسبه کرد،[۶] و نتیجه عبارت است از رابطهٔ استفان‌ـبولتزمن برای انرژی تابش کل در واحد حجم:

$$U(T) = aT^4 \qquad (۱۲\text{ـ}۱\text{الف})$$

6. $\int_0^\infty dx\, x^3(e^x-1)^{-1} = \int_0^\infty dx\, x^3 e^{-x}\sum_{n=0}^\infty e^{-nx} = \sum_{n=0}^\infty \frac{1}{(n+1)^4}\int_0^\infty dy\, y^3 e^{-y} = 6\sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^4} = \frac{\pi^4}{15}$

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن $\sigma = ۵٫۶۷ \times ۱۰^{-۵} \mathrm{erg/cm^۲K^۴}$ الف مدتها قبل با استفاده از استدلال ترمودینامیکی به‌دست آمده بود. این نتیجه را می‌توان به‌صورت توان گسیل کل جسم سیاه نیز نوشت:

$$E(T) = \sigma T^۴ \qquad (۱\text{ـ}۱۲\text{ب})$$

که در آن $\sigma = ۵٫۶۷ \times ۱۰^{-۵} \mathrm{erg/cm^۲sK^۴}$.

انحراف از قانون همپاری محض کاملاً هم غیرمنتظره نبود: یک پیامد قانون همپاری قانون گرمای ویژهٔ دولون‌ـپتی بود که بنابه آن حاصلضرب وزن اتمی (یا مولکولی) و گرمای ویژه برای تمام جامدها مقداری ثابت است. اما انحرافهایی از پیش‌بینی‌های دولون‌ـپتی از سال ۱۸۷۲ به‌بعد مشاهده شدند.[۷] این انحرافها نشان می‌دادند که گرمای ویژه در دماهای کم کاهش می‌یابد.[۸]

موفقیت بی‌چون و چرای رابطهٔ ۱ـ۸ باعث شد که پلانک به جستجوی منشأ آن بپردازد و پس از دو ماه به این نتیجه رسید که می‌توان آن‌را با این فرض به‌دست آورد که انرژی وابسته به هر مد میدان الکترومغناطیسی به‌طور پیوسته (با مقدار میانگین kT) تغییر نمی‌کند بلکه مضرب درستی از یک کوانتوم انرژی کمینهٔ ϵ است. در این شرایط، با استفاده از توزیع احتمال بولتزمن برای دستگاهی در تعادل گرمایی در دمای T

$$P(E) = \frac{e^{-E/kT}}{\sum\limits_{E} e^{-E/kT}} \qquad (۱\text{ـ}۱۳)$$

انرژی میانگین وابسته به هر مد را محاسبه می‌کنیم:

$$\overline{E} = \sum_{E} EP(E)$$

$$= \frac{\sum\limits_{n=۰}^{\infty} n\epsilon\, e^{-n\epsilon/kT}}{\sum\limits_{n=۰}^{\infty} e^{-n\epsilon/kT}}$$

---

۷. بنابه قانون همپاری، مجموعه‌ای از N نوسانگر ــ و شبکه‌ای از اتمها با نیروهای کشسان بین آنها را می‌توان چنین در نظر گرفت ــ دارای انرژی $۳NkT$ است که در آن ضریب ۳ ناشی از این است که برخلاف نوسانگرهای مربوط به میدان تابش در کاواک که دوبعدی هستند، در یک جسم جامد نوسانگرها سه‌بعدی‌اند. گرمای ویژه برای یک مول از مشتق‌گیری نسبت به T و قرار دادن $N = N_۰$، عدد آووگادرو، به‌دست می‌آید: $C_v = ۳N_۰k = ۳R$ که در آن $R = ۸٫۳۱۴ \times ۱۰^۷ \mathrm{erg/K}$.

۸. بحث بسیار کوتاهی دربارهٔ گرمای ویژه را در فصل ۲۰ خواهید دید.

www.arsanjan.blogfa.com

$$= \frac{-\epsilon \dfrac{d}{dx} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx}} \Bigg|_{x=\epsilon/kT}$$

$$= \epsilon \frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}} \Bigg|_{x=\epsilon/kT}$$

$$= \frac{\epsilon}{e^{\epsilon/kT} - 1} \qquad (۱۴_۱)$$

که با ۱_۱۰ سازگار است به شرط اینکه فرض کنیم

$$\epsilon = h\nu \qquad (۱۵_۱)$$

و تعداد مدها را تغییر ندهیم.

پلانک استدلال کرد که به دلیل ناشناخته‌ای اتمها در دیواره‌های کاواک تابش را به‌صورت "کوانتومهایی" با انرژی $nh\nu (n = ۱, ۲, ۳, \ldots)$ گسیل می‌کنند، اما به موجب سازگاری، چنانکه اینشتین چند سال بعد نشان داد، تابش الکترومغناطیسی به‌گونه‌ای رفتار می‌کند که انگار از مجموعه‌ای از کوانتومهای انرژی با انرژی $h\nu$ تشکیل شده است.[۹]

انرژیی که هر کوانتوم حمل می‌کند فوق‌العاده کم است. برای نور در ناحیهٔ اپتیکی، با مثلاً $\lambda = ۶۰۰۰ \text{Å}$، داریم

$$h\nu = h\frac{c}{\lambda} = \frac{۶٫۶۳ \times ۱۰^{-۲۷} \times ۳٫۰۰ \times ۱۰^{۱۰}}{۶ \times ۱۰^{-۵}} \simeq ۳٫۳ \times ۱۰^{-۱۲} \text{erg}$$

و در نتیجه تعداد کوانتومهای نور با این طول‌موج که به‌عنوان مثال از یک چشمهٔ ۱۰۰ واتی گسیل می‌شوند برابر است با

$$N = \frac{۱۰۰ \times ۱۰^{۷}}{۳٫۳ \times ۱۰^{-۱۲}} \simeq ۳ \times ۱۰^{۲۰} \text{quanta/s}$$

با این تعداد زیاد کوانتوم، شاید عجیب نباشد که ماهیت ذره‌ای نور را مستقیماً احساس نمی‌کنیم؛ خواهیم دید که در مقیاس ماکروسکوپیک نباید هیچ انحرافی از اپتیک کلاسیک وجود داشته باشد. با این‌همه، تعبیری که پلانک از فرمول خود ارائه کرد در تصویری که از تابش داریم تغییر اساسی به‌وجود می‌آورد.

---

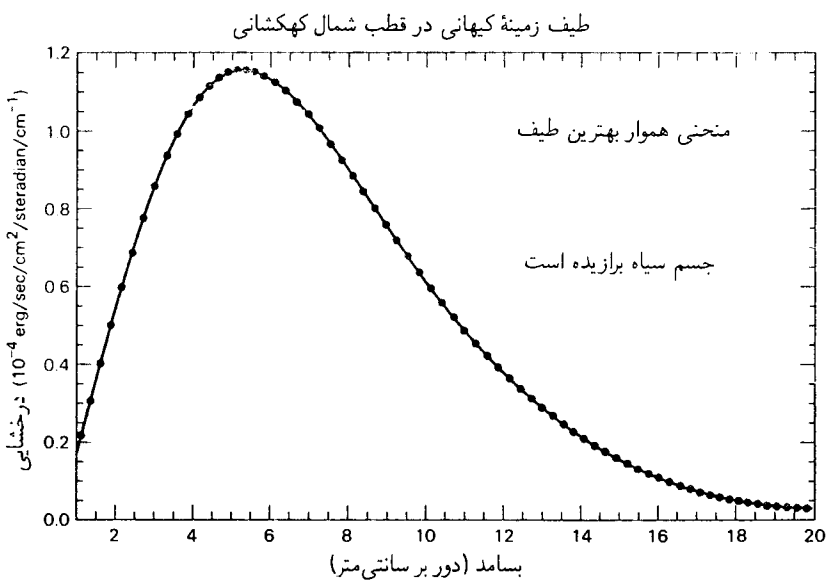
۹. به‌ازای یک بسامد معین ν، کوانتومها می‌توانند با هر تعداد درست موجود باشند و در نتیجه انرژی می‌تواند مقادیر $nh\nu$، با $n = ۰, ۱, ۲, ۳, \ldots$، داشته باشد.

www.arsanjan.blogfa.com

تابش میکروموج کیهانی زمینه

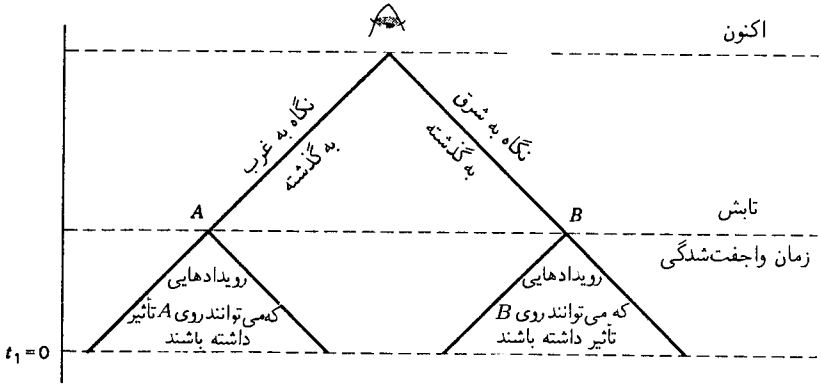
به‌علت پیشرفتهای ناشی از کشف زمینه‌ای در تابش کیهانی در ناحیهٔ میکروموج توسط پنزیاس و ویلسون در سال ۱۹۶۴، تابش جسم سیاه در خط مقدم فیزیک قرارگرفته است. در اواخر دههٔ ۱۹۴۰، جورج گاموف، رالف آلفر، و رابرت هرمن بعضی از پیامدهای الگوی مهبانگ آفرینش جهان را مطالعه کردند. کار آنها، و محاسباتی که بعداً پیبلس انجام داد، نشان داد که فراوانی کنونی هیدروژن در جهان را تنها به شرطی می‌توان درک کرد که مقدار زیادی تابش در مراحل کاملاً اولیهٔ جهان وجود می‌داشت. انبساط جهان باعث سرد شدن ماده و تابش موجود در جهان شد، و وقتی دما به حدود ۳۰۰۰K رسید تابش دیگر برهم‌کنش عمده‌ای با مادهٔ جهان نداشت زیرا الکترونهای آزاد توانستند با نوکلئونها ترکیب شوند و اتمها را تشکیل دهند. از آن زمان جهان نسبت به تابش شفاف شد، و دمای تابش با اندازهٔ "جعبه"ای که حاوی این تابش است، یعنی جهان، به‌طور خطی افت کرد. ماندهٔ فعلی تابش در چند سال اخیر توسط ماهوارهٔ ناسای کوبه (کاوشگر زمینهٔ کیهانی) مطالعه شده است. چنانکه شکل ۱ـ۳ نشان می‌دهد، طیف با دقت زیاد با توزیع جسم سیاه، مربوط به دمای کنونی ۲٫۷۳۵K، مطابقت دارد. این زمینهٔ تابش جسم سیاه کیهانی داستان مهبانگ را تأیید می‌کند، و اطلاعاتی دربارهٔ انبساط جهان و همچنین شرایطی که در زمان واجفت‌شدگی ایجاد شدند به‌دست می‌دهد.

تغییرات جزئی دما به‌صورت تابعی از راستا با حرکت منظومهٔ شمسی نسبت به مرکز کهکشان، که با حرکت کهکشان ما به‌سمت خوشهٔ کهکشانهای ویرگو (توده‌ای از ماده در فاصلهٔ حدود ۵۰



شکل۱ـ۳ نتایج اندازه‌گیریهای کوبه روی تابش زمینه.

www.arsanjan.blogfa.com



شکل ۱ـ۴ مسئلهٔ افق: ناظری که تابش جسم سیاه زمینه را با نگاه کردن به شرق و غرب اندازه‌گیری می‌کند اثر شرایط در A و B در زمان واجفت‌شدگی را می‌بیند. در الگوی مهبانگ مرسوم، برابری دماها در A و B را نمی‌توان درک کرد زیرا در زمان مهبانگ ($t_1 = 0$) مخروطهای نورگذشتهٔ A و B روی هم نمی‌افتند. داستان تورم فرض می‌کند که در نخستین دوره پس از مهبانگ جهان متحمل یک انبساط انفجاری نمایی شده است، و در نتیجه هر دو ناحیه درگذشتهٔ A و B از یک ناحیهٔ قدیمی‌تر و بسیار کوچکتر ناشی شده‌اند که در آن هیچ‌یک از این دو ناحیه خارج از قلمرو تأثیر یکدیگر نبوده‌اند. در نمودار بالا مقیاس ثابتی برای زمان رعایت نشده است زیرا بازهٔ بین مهبانگ و اکنون از مرتبهٔ 10^5 بار بزرگتر از بازهٔ بین مهبانگ و زمان واجفت‌شدگی است.

میلیون سال نوری) ترکیب شده است، سازگار هستند. سرعت این حرکت از مرتبهٔ $370\,km/s$ است و ناهمگنی را می‌توان به انتقال دوپلر وابسته به این حرکت نسبت داد. اگر این اثر را حذف کنیم، دما با دقتی بهتر از ۱ روی 10^5 یکنواخت می‌شود. این همگنی کیهانشناسان را با مسئله‌ای مواجه کرده است. تابش جسم سیاه دریافت شده از یک راستای خاص در آسمان تابش از آن قسمت آسمان در زمان واجفت‌شدگی است (که البته به‌علت انبساط جهان از آن زمان انتقال به سرخ یافته است). یکسانی طیفهای تابش در قسمتهای کاملاً مختلف آسمان نشاندهندهٔ برابری دماها در این قسمتهای آسمان در زمان واجفت‌شدگی است، اما چنین ناحیه‌هایی خارج از افق تأثیر یکدیگر هستند (به شکل ۱ـ۴ مراجعه کنید). در سال ۱۹۸۱ آلان گوت نظر داد که مراحل کاملاً اولیهٔ مهبانگ شامل دوره‌ای با افزایش نمایی واقعاً سریع بوده‌اند، به‌طوری که می‌توانیم قسمتهای مختلف آسمان در زمان واجفت‌شدگی را به یک مبدأ مشترک منسوب کنیم مشکل همگنی فوق‌العاده تا اندازه‌ای کم شد، اما هنوز به‌سختی می‌شد تصور کرد که از ناهمگنیهایی که باید وجود می‌داشتند تا بذر به هم پیوستن ماده برای تشکیل کهنترین کهکشانها را بپاشند نباید ردهایی وجود داشته باشد. بنابراین، وقتی به کیهانشناسان از طرف گروه کوبه مژده رسید که ناهمگنیهایی در سطح 5×10^{-6} در دما یافت شده‌اند آنها نفسی به‌آسودگی کشیدند. باید امید داشت که اندازه‌گیریهای دقیقتر برای کمک به درک جزئیات جهان اولیه ادامه یابد.

www.arsanjan.blogfa.com

اثر فوتوالکتریک

فرمول پلانک هر چند هم موفقیت‌آمیز بود اما نتیجه‌گیری ماهیت کوانتومی تابش از آن چندان الزامی نیست. سهم مهمی در پذیرفتن آن از کار آلبرت اینشتین حاصل شد، که در سال ۱۹۰۵ با استفاده از مفهوم ماهیت کوانتومی نور بعضی از خاصیتهای ویژهٔ فلزات را، وقتی در معرض نور مرئی و فرابنفش قرار می‌گیرند، توضیح داد.

کشف اثر فوتوالکتریک با کار هاینریش هرتز در سال ۱۸۸۷ آغاز شد. هرتز، وقتی درگیر آزمایشهای مشهور خود روی امواج الکترومغناطیسی بود، مشاهده کرد که اگر دو سر گاف جرقه در برابر نور بنفش ناشی از جرقه در مدار اولیه پوشانده شوند طول جرقهٔ القا شده در مدار ثانویه کاهش می‌یابد. مشاهدات او توجه بسیاری را به خود جلب کرد، و واقعیتهای زیر با آزمایشهای بیشتری به اثبات رسیدند:

۱. وقتی یک صفحهٔ فلزی صیقلی شده در معرض نور قرار می‌گیرد ممکن است الکترون گسیل کند،[۱۰] اما هیچ یون مثبتی گسیل نمی‌کند.

۲. گسیل الکترون از این صفحه به بسامد نور بستگی دارد. آستانه‌ای وجود دارد که به‌طور کلی از یک فلز به فلز دیگر فرق می‌کند: نور به شرطی می‌تواند جریان فوتوالکتریک تولید کند که بسامدش بزرگتر از بسامد آستانهٔ فلز باشد.

۳. بزرگی این جریان، اگر تولید شود، متناسب با شدت چشمهٔ نور است.

۴. انرژی فوتوالکترونها مستقل از شدت چشمهٔ نور است اما با بسامد نور فرودی به‌صورت خطی تغییر می‌کند.

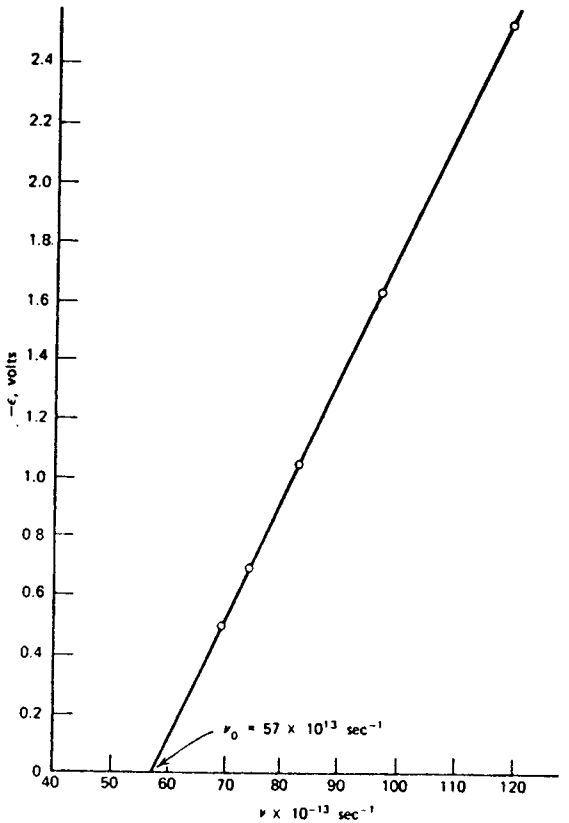
اگرچه وجود اثر فوتوالکتریک در چارچوب نظریهٔ الکترومغناطیس کلاسیک قابل درک بود ــزیرا می‌دانستند که فلزات دارای الکترون هستند و می‌شد تصور کرد که این الکترونها به علت جذب تابش شتاب بگیرندــ اما وابستگی اثر به بسامد در این نظریه قابل توضیح نیست. انرژیی که یک موج الکترومغناطیسی حمل می‌کند با شدت چشمه متناسب است و ربطی به بسامد ندارد. علاوه بر این، توضیح کلاسیک اثر فوتوالکتریک، که باید تمرکز انرژی روی تک‌تک فوتوالکترونها را در آن دخالت داد، متضمن یک تأخیر زمانی اجتناب‌ناپذیر بین ورود تابش و خروج الکترون است که هر چه شدت کمتر باشد طولانی‌تر است. در واقع چنین تأخیری حتی با تابش فرودی بسیار کم‌شدت هرگز، حداقل تا 10^{-9} ثانیه، مشاهده نشده است.

اینشتین تابش را متشکل از کوانتومهایی با انرژی $h\nu$ در نظر گرفت، که در آن ν بسامد نور است. جذب یک کوانتوم منفرد توسط یک الکترون ــفرایندی که می‌تواند کمتر از حد بالایی که قبلاً ذکر شد طول بکشد ــ انرژی الکترون را به‌اندازهٔ $h\nu$ افزایش می‌دهد. مقداری از این انرژی باید صرف جدا شدن الکترون از فلز شود. می‌توان انتظار داشت که این مقدار، W (که تابع کار نامیده می‌شود)، از یک فلز به فلز دیگر فرق کند، اما نباید به انرژی الکترون بستگی داشته باشد. بقیه به انرژی جنبشی الکترون تبدیل می‌شود، و در نتیجه، براساس این تصویر، رابطهٔ زیر باید بین

---

۱۰. این را می‌توان با یک آزمایش e/m اثبات کرد.

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۱ـ۵ داده‌های اثر فوتوالکتریک در نموداری از پتانسیل بازدارندهٔ لازم برای متوقف کردن شارش الکترونها از یک فلز (لیتیم)، یا معادل آن انرژی جنبشی الکترونها، برحسب بسامد نور فرودی. شیب خط h/e است.

سرعت الکترون v و بسامد نور ν برقرار باشد

$$\frac{1}{2}mv^2 = h\nu - W \qquad (۱۶_۱)$$

این فرمول متضمن وجود آستانه و رابطهٔ خطی بین انرژی جنبشی الکترون و بسامد است. تناسب میان جریان و شدت چشمه را نیز می‌توان برحسب این کوانتومهای نور، که بعداً فوتون نامیده شدند، توضیح داد: چشمهٔ نور هر چه شدیدتر باشد فوتونهای بیشتری گسیل می‌کند، و این فوتونها به‌نوبهٔ خود می‌توانند الکترونهای بیشتری آزاد کنند.

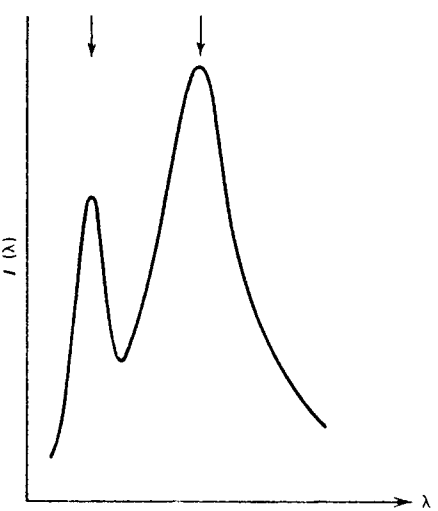
رابرت آندروز میلیکان آزمایشهای مفصلی انجام داد و درستی فرمول اینشتین را به‌اثبات رساند (شکل ۱ـ۵). آنچه آزمایشهای میلیکان و پیش از او نشان دادند این بود که اولاً نورگاهی مانند مجموعه‌ای

www.arsanjan.blogfa.com

از ذره‌ها رفتار می‌کند، و ثانیاً این "ذرات" می‌توانند منفرداً عمل کنند، و در نتیجه می‌توان وجود یک فوتون منفرد را پذیرفت و خواص آن را بررسی کرد. معلوم شده است که تابع کار W از مرتبهٔ چند الکترون ولت است ($1\text{eV} = ۱٫۶ \times ۱۰^{-۱۲}\text{erg}$)، و این نتیجه را می‌توان به خواص دیگر فلزات مربوط کرد.

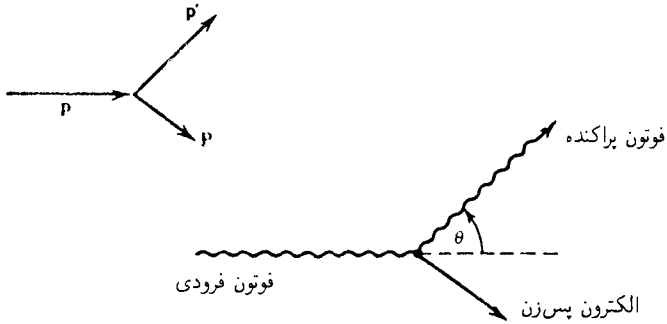
اثر کامپتون

آزمایشی که سرراست‌ترین مدرک ماهیت ذره‌ای تابش را در اختیار می‌گذارد اثر کامپتون است. آرتور هولی کامپتون کشف کرد تابشی با یک طول‌موج معین (در ناحیهٔ پرتو x) که از یک ورقهٔ فلزی می‌گذرد به‌گونه‌ای پراکنده می‌شود که با نظریهٔ تابش کلاسیک سازگار نیست. بنابه نظریهٔ کلاسیک، سازوکار این اثر عبارت است از تابش مجدد نور توسط الکترونهایی که با تابش فرودی به نوسان واداشته شده‌اند، و این منجر می‌شود به پیش‌بینی شدت مشاهده شده در زاویهٔ θ به‌صورت $(۱ + \cos^۲\theta)$ که به طول‌موج تابش فرودی بستگی ندارد. کامپتون دریافت که تابش پراکنده در یک زاویهٔ معین عملاً از دو مؤلفه تشکیل می‌شود: مؤلفه‌ای که طول‌موج آن همان طول‌موج تابش فرودی است، و مؤلفهٔ دیگری که طول‌موج آن نسبت به طول‌موج فرودی به مقداری که بستگی به زاویه دارد انتقال پیدا کرده است (شکل ۱ـ۶). کامپتون با در نظر گرفتن تابش فرودی به‌صورت باریکه‌ای از فوتونها که هر یک از آنها دارای انرژی $h\nu$ است و باعث پراکندگی کشسان یک الکترون منفرد می‌شود، توانست مؤلفهٔ "تغییریافته" را توضیح دهد. در یک برخورد کشسان، هم تکانه و هم انرژی باید پایسته باشند، و از این‌رو باید ابتدا تکانه‌ای به فوتون نسبت دهیم. با مقایسه با سینماتیک



شکل ۱ـ۶ طیف تابش پراکنده از کربن، نشاندهندهٔ خط تغییریافته در $۰٫۷۰۷۸\text{Å}^{\circ}$ (که طول‌موج تابش اولیه است) در سمت چپ و خط انتقال‌یافته در $۰٫۷۳۱۴\text{Å}^{\circ}$ در سمت راست.

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۱ـ۷ سینماتیک اثر کامپتون.

نسبیتی، نشان می‌دهیم که

$$p = \frac{h\nu}{c} \qquad (۱۷_۱)$$

اثبات به این ترتیب است که از رابطهٔ نسبیتی میان انرژی و تکانه، یعنی

$$E = [(m_0 c^2)^2 + (pc)^2]^{1/2} \qquad (۱۸_۱)$$

که در آن m_0 جرم سکون ذره است، نتیجه می‌گیریم که سرعت وابسته به این تکانه برابر است با

$$v = \frac{dE}{dp} = \frac{pc^2}{E} = \frac{pc^2}{(m_0^2 c^4 + p^2 c^2)^{1/2}} \qquad (۱۹_۱)$$

برای فوتون این سرعت همیشه c است، و در نتیجه جرم سکون فوتون باید صفر باشد. بنابراین، رابطهٔ ۱ـ۱۸ به‌صورت زیر در می‌آید

$$E = pc \qquad (۲۰_۱)$$

که با جاگذاری $E = h\nu$ رابطهٔ ۱ـ۱۷ را به‌دست می‌دهد. همچنین می‌توان ۱ـ۲۰ را از بررسی انرژی و تکانهٔ موج الکترومغناطیسی به‌دست آورد اما اثبات قیاسی ساده‌تر است.

اکنون فوتونی با تکانهٔ اولیهٔ $\mathbf{p}$ در نظر بگیرید که با یک الکترون ساکن برخورد می‌کند. پس از برخورد، تکانهٔ فوتون $\mathbf{p}'$ است و الکترون با تکانهٔ $\mathbf{P}$ پس می‌زند. از پایستگی تکانه داریم (شکل ۱ـ۷)

www.arsanjan.blogfa.com

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}' + \mathbf{P} \qquad (۲۱\text{ـ}۱)$$

که از آن به‌دست می‌آوریم

$$\mathbf{P}^۲ = (\mathbf{p} - \mathbf{p}')^۲ = \mathbf{p}^۲ + \mathbf{p}'^۲ - ۲\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}' \qquad (۲۲\text{ـ}۱)$$

رابطهٔ پایستگی انرژی به‌صورت زیر است

$$h\nu + mc^۲ = h\nu' + (m^۲c^۴ + P^۲c^۲)^{۱/۲} \qquad (۲۳\text{ـ}۱)$$

که در آن m جرم سکون الکترون است. در نتیجه،

$$\begin{aligned} m^۲c^۴ + P^۲c^۲ &= (h\nu - h\nu' + mc^۲)^۲ \\ &= (h\nu - h\nu')^۲ + ۲mc^۲(h\nu - h\nu') + m^۲c^۴ \end{aligned}$$

از طرف دیگر، ۱ـ۲۲ را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$P^۲ = \left(\frac{h\nu}{c}\right)^۲ + \left(\frac{h\nu'}{c}\right)^۲ - ۲\frac{h\nu}{c} \cdot \frac{h\nu'}{c} \cos\ \theta$$

یا

$$P^۲c^۲ = (h\nu - h\nu')^۲ + ۲(h\nu)(h\nu')(۱ - \cos\ \theta) \qquad (۲۴\text{ـ}۱)$$

که در آن θ زاویهٔ پراکندگی فوتون است. بنابراین،

$$h\nu'(۱ - \cos\ \theta) = mc^۲(\nu - \nu')$$

یا، هم‌ارز آن

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{mc}(۱ - \cos\ \theta) \qquad (۲۵\text{ـ}۱)$$

اندازه‌گیریهای مؤلفهٔ تغییریافته با این پیش‌بینی کاملاً توافق دارند. خط تغییرنیافته ناشی از پراکندگی از تمام اتم است؛ اگر به‌جای m جرم اتم را قرار دهیم، انتقال طول‌موج بسیار کوچک می‌شود زیرا

www.arsanjan.blogfa.com
جرم اتم چندین هزار برابر جرم الکترون است. کمیت h/mc، که بعد طول دارد، طول‌موج کامپتون الکترون نامیده می‌شود، و اندازهٔ آن برابر است با

$$\frac{h}{mc} \cong ۲٫۴ \times ۱۰^{-۱۰}\text{cm} \qquad (۲۶_۱)$$

اندازه‌گیریهای پس‌زنی الکترون نیز انجام شده‌اند، و که با نظریه توافق دارند. علاوه بر این، با آزمایشهای همفرودی با تفکیک زمانی خوب معلوم شده است که فوتون خروجی و الکترون پس‌زن همزمان ظاهر می‌شوند. دربارهٔ درستی تعبیر این برخورد به‌عنوان برخوردی از نوع "توپ بیلیارد" معمولی، یعنی رفتار ذره‌گونهٔ فوتون، تردیدی وجود ندارد. از آنجا که تابش خواص موجی هم دارد و تداخل و پراش از خود نشان می‌دهد، بروز مشکلات مفهومی دور از انتظار نیست. این مشکلات وجود دارند، و در پایان این فصل دربارهٔ آنها بحث خواهیم کرد.

خواص موجی و پراش الکترون

در سال ۱۹۲۳، دوبروی از شباهت اصل فرما در اپتیک و اصل کمترین کنش در مکانیک به این نتیجه رسید که ماهیت دوگانهٔ موجی‌ـذره‌ای تابش باید همتایی به‌صورت ماهیت دوگانهٔ ذره‌ای‌ـموجی ماده داشته باشد. بنابراین، ذرات باید در شرایط خاصی خواص موجی داشته باشند، و دوبروی رابطه‌ای برای طول‌موج وابسته به ذره به‌صورت زیر به‌دست آورد[۱۱]

$$\lambda = \frac{h}{p} \qquad (۲۷_۱)$$

که در آن h ثابت پلانک و p تکانهٔ ذره است. کار دوبروی توجه بسیاری را به‌خود جلب کرد، و اشخاصی بر آن شدند تا با مشاهدهٔ پراش الکترون آن‌را تأیید کنند.[۱۲] مشاهدهٔ تجربی این اثر در آزمایشهای کلینتون جوزف دیویسون وگرمر صورت گرفت. دیویسون وگرمر دریافتند که در پراکندگی الکترونها از سطح یک بلور، پراکندگی ممتازی در بعضی راستاها دیده می‌شود.

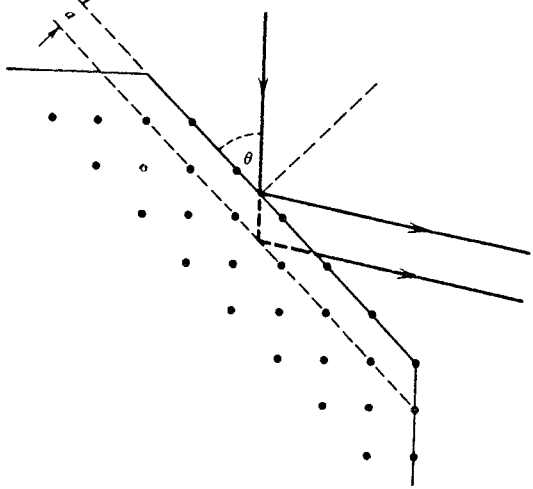
شکل ۱ـ۸ تصویر ساده شده‌ای است از آنچه اتفاق می‌افتد. در پراکندگی امواج از یک ساختار دوره‌ای، اختلاف فازی بین امواجی که از "صفحه‌های" پراکنندهٔ مجاور می‌آیند ایجاد می‌شود که مقدار آن $(۲\pi/\lambda)۲a \sin\theta$ است. اگر این اختلاف فاز برابر با $۲\pi n$ باشد، که در آن n یک عدد درست است، تداخل سازنده روی می‌دهد، یعنی وقتی که

$$\lambda = \frac{۲a \sin\theta}{n} \qquad (۲۸_۱)$$

۱۱. این رابطه مانند رابطهٔ فوتون $\lambda = c/\nu = hc/h\nu = hc/E = h/p$ است.

۱۲. تاریخچهٔ تأیید حدس دوبروی را می‌توان در کتاب ماکس یامر، که در زیرنویس ۱ معرفی شد، یافت.

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۱ـ۸ طرح کلی هندسهٔ پراکندگی الکترون.

نقش تداخلی را که دیویسون و گرمر در پراکندگی الکترون مشاهده کردند می‌توان با توجه به رابطهٔ ۱ـ۲۷ به فرمول بالا مربوط کرد. این تأیید گام مهمی در تکوین مکانیک موجی بود.

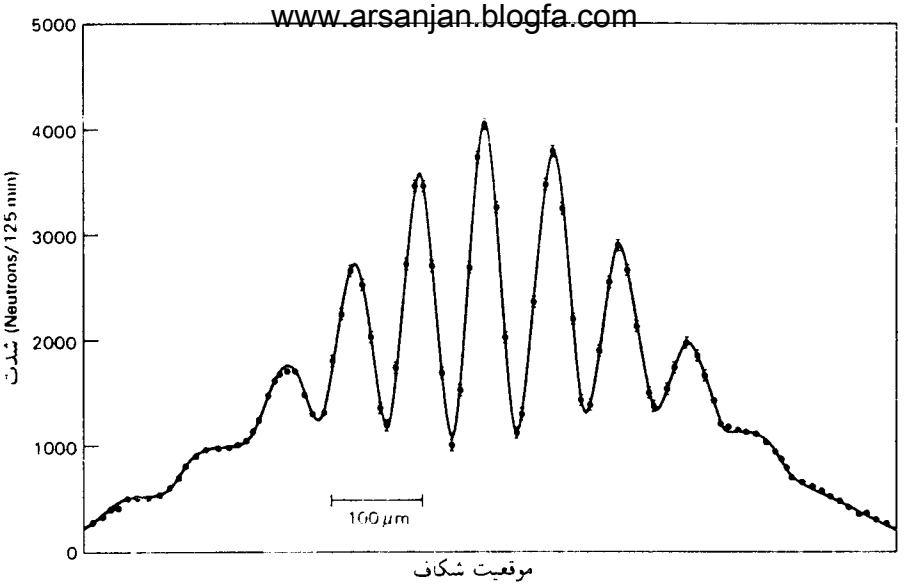
آزمایشهای پراش ذره از آن پس با باریکه‌های مولکول هیدروژن و هلیم، و با نوترونهای کند (شکل ۱ـ۹)، صورت گرفته‌اند. پراش نوترون مخصوصاً در مطالعهٔ ساختار بلورها مفید است. برای اینکه تصوری از نوع انرژیهایی که برای این آزمایشهای پراش لازم‌اند به‌دست آوریم، متذکر می‌شویم که فاصله‌های بلوری از مرتبهٔ آنگستروم هستند. این ثابت توری در آزمایش دیویسون‌ـگرمر، که در آن از نیکل استفاده شد، برابر بود با $a = ۲٫۱۵\text{Å}$. بنابراین، λ از مرتبهٔ $۱۰^{-۸}\text{cm}$ است، و در نتیجه $p = h/\lambda \cong ۶٫۶ \times ۱۰^{-۱۹}\text{gm cm/s}$. بدین‌ترتیب، انرژی جنبشی الکترون برابر است با $p^۲/۲m_e = (۶٫۶ \times ۱۰^{-۱۹})^۲/(۲ \times ۰٫۹ \times ۱۰^{-۲۷}) \cong ۲٫۵ \times ۱۰^{-۱۰}\text{ergs}$ و برای نوترون داریم

$$p^۲/۲m_n = (m_e/m_n) \times (\text{انرژی الکترون}) \cong (۱٫۸۴۰) \times ۲٫۵ \times ۱۰^{-۱۰}\text{ergs}$$
$$\cong ۱٫۳ \times ۱۰^{-۱۳}\text{ergs}$$

این انرژیها برحسب واحد مناسبتر الکترون ولت به‌ترتیب تقریباً برابر با ۱۶۰eV و $۰٫۰۸\text{eV}$ هستند.

در یک مقیاس ماکروسکوپیک، جنبه‌های موجی ذره‌ها را نمی‌توان مشاهده کرد. طول‌موج دوبروی برای قطره‌ای به اندازهٔ $۰٫۱\text{mm}$ که با سرعت ۱۰cm/s حرکت می‌کند برابر است با $\lambda \cong ۶٫۶ \times ۱۰^{-۲۷}/۲ \times ۱۰^{-۵} \cong ۱٫۶ \times ۱۰^{-۲۲}\text{cm}$ چون "اندازهٔ" پروتون حدود $۱۰^{-۱۳}\text{cm}$

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۱ـ۹ نقش پراش دوشکافی با طول‌موج ۱۸٫۵Å ≈ ۸. [۱۳]

است، بدیهی است که هیچ راهی برای مشاهدهٔ خواص موجی جسمی که اندازهٔ آن بسیار بیشتر از 10^{-4}cm است وجود ندارد. در مورد خواص ذره‌ای تابش، این کوچکی h است که ویژگیهای کلاسیک را تعیین می‌کند، به این معنی که جنبه‌های دوگانه تنها وقتی ظاهر می‌شوند که حاصلضرب تکانه و اندازه از مرتبهٔ h باشد. خواهیم دید که صورتبندی مکانیک کوانتومی این وضعیت را به‌خوبی توصیف می‌کند.

اتم بور

الگوی سیاره‌ای رادرفورد

کشف پرتوزایی توسط هانری بکرل در سال ۱۸۹۶ ابزار لازم برای پرداختن به ساختار اتم را، که مکمل مطالعهٔ گسیل تابش از اتمها بود، فراهم کرد. ارنست رادرفورد فیزیکدان پیشرو در مطالعهٔ ساختار اتمی بود، و نخستین کسی بود که از ذراتی که در واپاشی پرتوزا گسیل می‌شوند به‌عنوان پرتابه استفاده کرد. آزمایشهایی که هانس گایگر و مارسدن در سال ۱۹۰۸ به راهنمایی او انجام دادند، و در آنها ذرات α به ورقه‌های نازک برخورد می‌کردند، نشان دادند که کسری از ذره‌های α

۱۳. اقتباس مجاز از مقالهٔ

A Zeilinger, R. Gähler, C. G. Shull, W. Treimer, and W. Mampe, *Rev. Mod. Phys.* 60 1067 (1988).

www.arsanjan.blogfa.com

که به‌طور شگفت‌انگیزی بزرگ بود در زاویه‌های بزرگ پراکنده می‌شوند، و این نتیجه با پیش‌بینیهای مبتنی بر الگوی اتمی تامسون کاملاً ناسازگار بود. در الگوی تامسون فرض شده است که الکترونها در توزیعی از بار مثبت که حجم تمام اتم را تشکیل می‌دهد غوطه‌ور هستند. الکترونها ذرات α را منحرف نمی‌کنند زیرا جرم آنها $۱۰^{۴}$ بار کوچکتر است. بنابراین، بار مثبت باید باعث انحراف ذرات α باشد، و انحراف بزرگ‌ـزاویه ایجاب می‌کند که پتانسیل در سطح توزیع بار بزرگ باشد. این به‌نوبهٔ خود ایجاب می‌کند که بار مثبت به ناحیه‌ای بسیار کوچکتر از حجم اتم محدود باشد. رادرفورد الگوی جدیدی را پیشنهاد کرد که این داده‌ها را توجیه می‌کرد. در این الگو، تمام بار مثبت (و تقریباً تمام جرم) اتم در ناحیهٔ کوچکی در وسط اتم متمرکز شده است. این هستهٔ باردار مثبت الکترونهای باردار منفی را جذب می‌کند و چون قانون نیرو به‌صورت $۱/r^{۲}$ است الکترونها در مدارهای دایره‌ای یا بیضوی حول هسته حرکت می‌کنند.

این الگو اگرچه توجیه کمّی مناسبی برای داده‌های پراکندگی ذرات α به‌دست می‌داد اما با دو مشکل حل‌نشدنی مواجه بود. از آنجا که این الگو مستلزم حرکتی دوره‌ای برای الکترونها بود نمی‌توانست طیفهای تابش ناشی از اتمها را توضیح دهد، که ساختار هماهنگ منتظره‌ای (در قیاس با ریسمان مرتعش) ندارند و ساختار آنها به‌صورت زیر است

$$\frac{۱}{\lambda} = \text{const.} \left(\frac{۱}{n_{۱}^{۲}} - \frac{۱}{n_{۲}^{۲}} \right) \qquad (۲۹\text{ـ}۱)$$

که در آن $n_{۱}$ و $n_{۲}$ اعداد درست هستند. این الگو همچنین سازوکاری برای پایداری اتمها نداشت: یک الکترون در مدار دایره‌ای یا بیضوی دائماً شتاب دارد و بنابه نظریهٔ الکترومغناطیس باید تابش کند. اتلاف مداوم انرژی با سقوط الکترونها به درون هسته در مدت زمان بسیار کوتاهی (از مرتبهٔ $۱۰^{-۱۰}\text{s}$) به رمبش اتم منجر می‌شود.

اصول موضوعهٔ بور

نیلز بور در سال ۱۹۱۳، درست دو سال پس از پیشنهاد الگوی رادرفورد، اصولی را وضع کرد که، با بریدن از نظریهٔ کلاسیک، ساختار طیفی را توضیح می‌دادند و از مسئلهٔ پایداری اجتناب می‌کردند. بور فرض کرد که:

۱. الکترونها در مدارهایی حرکت می‌کنند که مقید به این شرط هستند که تکانهٔ زاویه‌ای آنها مضربی درستی از $h/۲\pi$ باشد، یعنی، برای مدارهای دایره‌ای به شعاع r، سرعت vی الکترونها محدود به رابطهٔ زیر است

$$mvr = \frac{nh}{۲\pi} \qquad (۳۰\text{ـ}۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com
و علاوه بر این، الکترونها در این مدارها با اینکه شتاب دارند تابش نمی‌کنند. می‌گوییم این الکترونها در حالتهای پایا هستند.

۲. الکترونها می‌توانند گذارهای ناپیوسته‌ای از یک مدار مجاز به مدارهای مجاز پایین‌تر انجام دهند، و تغییر انرژی، $E - E'$، به‌صورت تابش با بسامد زیر ظاهر می‌شود

$$\nu = \frac{E - E'}{h} \qquad (۳۱_۱)$$

اتم می‌تواند با جذب تابش الکترونهای خود را وادار به گذار به مداری با انرژی بیشتر کند.

اگر مدارهای دایره‌ای را در نظر بگیریم،[۱۴] پیامدهای این اصول برای اتمهای تک‌الکترونی مانند هیدروژن، هلیم یک بار یونیده، و غیره را می‌توان به‌آسانی به‌دست آورد. اگر بار هسته Ze، بار الکترون $e-$، و شعاع مدار r باشد، و اگر جرم هسته را بینهایت بگیریم، از موازنهٔ نیروی کولن با نیروی مرکزگریز داریم

$$\frac{Ze^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} \qquad (۳۲_۱)$$

از ترکیب این رابطه با ۱ـ۳۰ به رابطه‌های زیر می‌رسیم

$$v = \frac{2\pi e^2 Z}{hn} \qquad (۳۳_۱)$$

و

$$r = \frac{1}{4\pi^2}\,\frac{n^2h^2}{Ze^2m} \qquad (۳۴_۱)$$

انرژی برابر است با

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{Ze^2}{r} = -\frac{2\pi^2e^4Z^2m}{h^2n^2} \qquad (۳۵_۱)$$

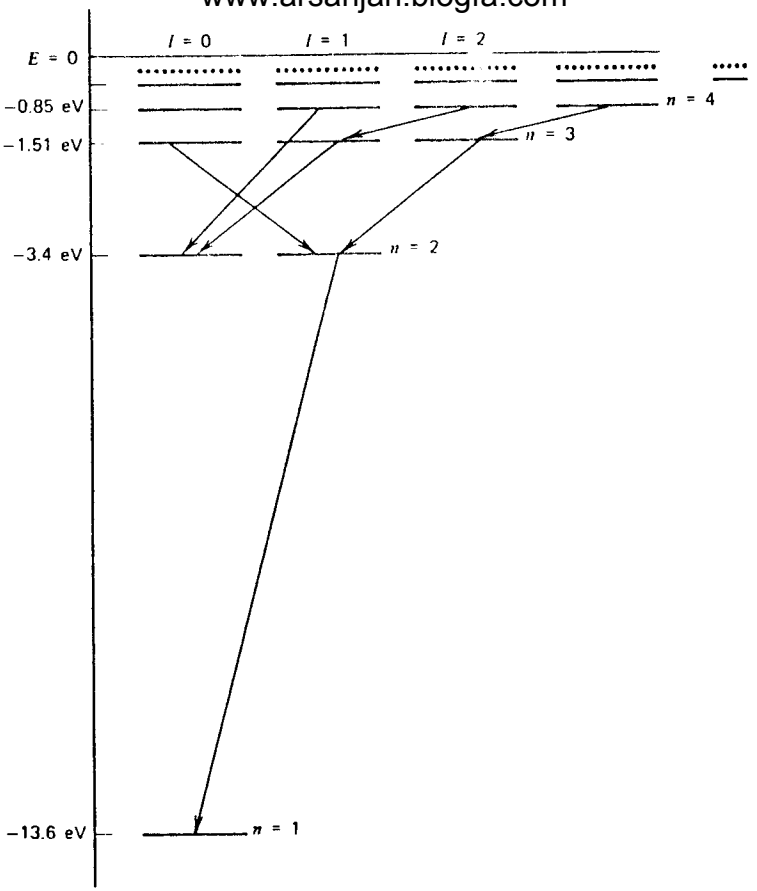
که از آن با توجه به‌اصل موضوعهٔ ۲ بلافاصله رابطهٔ کلی ۱ـ۲۹ به‌دست می‌آید (شکل ۱ـ۱۰).

پیش از محاسبهٔ این کمیتها برای به‌دست آوردن تصوری از اندازهٔ آنها، بعضی نمادهای بسیار مفید را معرفی می‌کنیم. اولاً، در اکثر فرمولهای مکانیک کوانتومی $h/2\pi$ بیشتر از h ظاهر می‌شود،

---

۱۴. اگر مدارهای مجاز بیضوی باشند، ساختار بسیار غنی‌تری پدیدار می‌شود. این موضوع را در فصل ۱۲ بررسی می‌کنیم.

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۱ـ۱۰ طیف اتم هیدروژن براساس الگوی اتمی بور. وجود اعداد کوانتومی l از بحث مدارهای بیضوی نتیجه می‌شود. خطهای واصل ترازهای انرژی بعضی از گذارهای اتمی غالب را نشان می‌دهند.

و از این‌رو آن‌را با یک نماد خاص نشان می‌دهیم:

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = ۱٫۰۵۴۵ \times ۱۰^{-۲۷} \mathrm{erg\ s} \qquad (۳۶_۱)$$

ثانیاً، برای اینکه رابطه‌های مربوط به انرژی ساده بمانند، به‌جای ν از بسامد زاویه‌ای ω استفاده می‌کنیم:

$$\omega = 2\pi\nu \qquad (۳۷_۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com

بنابراین، ۱ـ۱۳ به‌صورت زیر در می‌آید

$$\omega = \frac{E - E'}{h} \qquad (۳۸_۱)$$

همچنین، کوانتوم تابش حامل انرژی زیر است

$$E = h\omega \qquad (۳۹_۱)$$

ثالثاً، گاهی مناسبتر است از "طول‌موج کاهیده" استفاده کنیم:

$$\lambda\!\!\!^{-} = \frac{\lambda}{2\pi} = \frac{c}{\omega} \qquad (۴۰_۱)$$

بنابراین، رابطهٔ دوبروی به‌صورت زیر نوشته می‌شود

$$p = \frac{h}{\lambda} \qquad (۴۱_۱)$$

شرط کوانتش تکانهٔ زاویه‌ای بور به‌صورت زیر درمی‌آید

$$mvr = nh (n = ۱, ۲, ۳, \ldots) \qquad (۴۲_۱)$$

و سرانجام، بهتر است "ثابت ساختار ریز" بدون بعد را به‌کار ببریم:

$$\alpha = \frac{e^2}{hc} = \frac{۱}{۱۳۷٫۰۳۸۸} \qquad (۴۳_۱)$$

که تقریباً ۱/۱۳۷ است. برحسب این کمیتهای جدید، رابطه‌های ساده‌تر زیر را به‌دست می‌آوریم

$$\frac{v}{c} = \frac{Z\alpha}{n} \qquad r = \frac{n^2}{Z\alpha}\,\frac{h}{mc} \qquad (۴۴_۱)$$

و

$$E = -\frac{۱}{۲} mc^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \qquad (۴۵_۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com

توجه کنید که شعاع، که بعد طول دارد، برحسب h/mc یعنی طول‌موج کاهیدهٔ کامپتون الکترون، و انرژی برحسب mc^2 نوشته شده است. در تمام محاسبه‌های اتمی، نتیجه‌های مربوط به انرژی، طول، زمان، و تکانه را به‌ترتیب برحسب mc^2، h/mc، h/mc^2 و mc خواهیم نوشت. تکانهٔ زاویه‌ای همیشه به‌صورت مضربهای h ظاهر می‌شود.

اکنون بعضی از کمیتهای حاصل از نظریهٔ بور را محاسبه می‌کنیم. با توجه به اینکه

$$\begin{aligned} mc^2 &\cong 0.51 \times 10^6 \text{eV} \\ &\cong 0.51 \text{ MeV} \\ \frac{h}{mc} &\cong 3.9 \times 10^{-11} \text{ cm} \\ \frac{h}{mc^2} &\cong 1.3 \times 10^{-21} \text{s} \end{aligned} \qquad (۱\text{-}۴۶)$$

نتیجه می‌گیریم که

(الف) شعاع کوچکترین مدار بور (با $n = 1$) برابر است با

$$a_0 = \frac{137}{Z}\frac{h}{mc} = \frac{0.53}{Z}\text{Å} \qquad (۱\text{-}۴۷)$$

(ب) انرژی بستگی الکترون در کوچکترین مدار بور، یعنی انرژی لازم برای بردن الکترون به حالت $E = 0$ (متناظر با $n = \infty$) برابر است با

$$E = \frac{1}{2}mc^2(Z\alpha)^2 = 13.6Z^2\text{eV} \qquad (۱\text{-}۴۸)$$

بنابراین، به‌عنوان مثال، گذار از حالت $n = 1$ به حالت $n = 2$ برای هیدروژن ($z = 1$) متناظر است با تغییر انرژی $10.2\text{eV} = (1 - 1/4)13.6\text{eV}$. بسامد تابش گسیل‌شده را می‌توان از تبدیل این مقدار به ارگ محاسبه کرد، اما بهتر است این محاسبه را به‌صورت زیر انجام دهیم

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{mc^2\alpha^2\left(1 - \frac{1}{4}\right)}{2h} = \frac{3\alpha^2}{8}\frac{1}{1.3 \times 10^{-21}}\text{rad/s} \\ &\cong 1.5 \times 10^{16}\text{rad/s} \end{aligned}$$

www.arsanjan.blogfa.com

طول‌موج متناظر با آن برابر است با

$$\lambda = ۲\pi\frac{c}{\omega} = \frac{۱۶\pi}{۳\alpha^۲}\frac{h}{mc}$$
$$\cong ۱۲۰۰ \text{ Å}$$

که در ناحیهٔ فرابنفش قرار دارد.

موفقیت نظریهٔ بور در اتمهای هیدروژنگونه انگیزهٔ مهمی شد برای تحقیق بیشتر روی "اتم بور". اما با وجود دستاوردهای فوق‌العادهٔ بور و دیگران، واضح بود که این نظریه موقتی است. نظریهٔ بور چیزی در این باره که الکترونها کی باید جهشهای خود را انجام دهند نمی‌گوید؛ همچنین، قاعدهٔ کوانتش به دستگاههای دوره‌ای محدود می‌شد. بیان کلی‌تر زومرفلد و ویلسون، یعنی

$$\int_{\text{مسیر بسته}} p\,dq = nh \qquad (۴۹\text{-}۱)$$

که در آن p تکانهٔ مربوط به مختصهٔ q است، در بررسی هیچ مسئله‌ای، بجز آنچه به ترازهای اتمی هیدروژن مربوط بود، مفید واقع نشد.

کوانتش تکانهٔ زاویه‌ای در وضعیتهای دیگر نیز صادق است. کاربرد آن در مدارهای بیضوی تصویر کاملتری از طیف اتمهای هیدروژنگونه به‌دست داد، و در آزمایشهای اشترن و گرلاخ در سال ۱۹۲۲ مستقیماً مشاهده شد.

اصل تطابق

نیلز بور از این فکر که نظریهٔ کوانتومی او باید هر جا نظریهٔ کلاسیک کارایی دارد در آن ادغام شود بهرهٔ فراوان گرفت. این فکر به‌صورت اصل تطابق فرمولبندی شد. به زبان فنی، این اصل می‌گوید وقتی "اعداد کوانتومی" بزرگ باشند، مثلاً به‌ازای n بزرگ در اتم بور، حد کلاسیک باید احراز شود. البته همینکه یک نظریهٔ سازگار برای پدیده‌های کوانتومی ساخته شد خود به‌خود فیزیک کلاسیک را به‌عنوان یک حد در بر دارد، اما این اصل در راهنمایی به حدسهای نظری بسیار مفید بوده است، و همین اصل بود که هایزنبرگ را به‌مرحله‌ای رهنمون شد که توانست پرش غول‌آسای خود را به سمت مکانیک کوانتومی انجام دهد. برای اینکه نشان دهیم چگونه اصل تطابق برای الگوی اتمی بور صادق است، بسامد تابش گسیل‌شده را وقتی الکترون از مداری با عدد کوانتومی $n+۱$، که در آن n بسیار بزرگ است، به مداری با عدد کوانتومی n "جهش" می‌کند در نظر می‌گیریم. این زمینهٔ مناسبی برای جستجوی حد کلاسیک است، زیرا تکانهٔ زاویه‌ای nh واقعاً بسیار بزرگتر از h است. از لحاظ کلاسیک، الکترونی که با سرعت v در مدار دایره‌ای حرکت می‌کند باید با بسامد

www.arsanjan.blogfa.com

حرکتش تابش کند، یعنی با بسامد

$$\nu_{\rm cl} = \frac{v}{2\pi r} = \frac{Z\alpha c}{n}\,\frac{Z\alpha mc}{2\pi n^2\hbar} = \frac{(Z\alpha)^2 mc^2}{2\pi\hbar}\,\frac{1}{n^3} \qquad (۵۰\text{ـ}۱)$$

از طرف دیگر، بسامد تابش وابسته به این گذار، بنابه ۱ـ۳۱، برابر است با

$$\nu = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{1}{2\pi\hbar}\,\frac{mc^2}{2}(Z\alpha)^2\left[\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2}\right] \qquad (۵۱\text{ـ}۱)$$

که به‌ازای $n \gg 1$ به $\nu_{\rm cl}$ میل می‌کند. توجه کنید که این نتیجه بسیار مهم است، زیرا تنها بسامد وابسته به گذار $n+1 \to n$ است که با بسامد اصلی کلاسیک متناظر است. تابش وابسته به جهش $n+2 \to n$، حتی در حد n بزرگ، همتای کلاسیک ندارد. در فصل ۲۱ خواهیم دید که در مکانیک کوانتومی برای "مدارهای دایره‌ای" گذارهای $n+1 \to n$ وجود ندارند.

مسئلهٔ ذره‌ـموج

چنانکه از ملاحظات زیر می‌توان دید، این واقعیت که تابش هم خواص موجی و هم خواص ذره‌ای از خود نشان می‌دهد مشکل مفهومی عمیقی را به‌وجود می‌آورد.

۱. از بحث اثر فوتوالکتریک، به‌خصوص همبستگی تعداد الکترونهای گسیل‌شده با شدت تابش، استنباط می‌شود که شدت تابش الکترومغناطیسی با تعداد فوتونهای گسیل‌شده از چشمه متناسب است. اکنون یک آزمایش ذهنی[۱۵] را در نظر می‌گیریم که در آن تابش توسط یک دستگاه دوشکافی پراشیده می‌شود. فرض کنید شدت چشمه را آن‌قدر کم می‌کنیم که، به‌طور متوسط، در هر ساعت تنها یک فوتون به پرده برسد. توجه کنید که باید با فوتونهای کامل سروکار داشته باشیم: اثر کامپتون و اثر فوتوالکتریک نشان می‌دهند که نمی‌توان یک فوتون را به‌دو قسمت با بسامد ω اما انرژی کمتر از $\hbar\omega$ تقسیم کرد. کاهش شدت تابش فرودی نمی‌تواند تأثیری بر نقش پراش کلاسیک داشته باشد، زیرا این کاهش در واقع تنها مدت زمان انتقال تعداد زیادی فوتون از چشمه به پرده را افزایش می‌دهد. فوتونهایی که با فاصله یک ساعت به پرده می‌رسند مسلماً نمی‌توانند همبسته باشند، و بنابراین می‌توان این فرایند را از نوع یک فوتون در هر نوبت در نظر گرفت. واضح است که یک فوتون، به‌عنوان ذره، مسلماً از یکی از دو شکاف می‌گذرد. اگر به دستگاه آزمایش ذهنی خود یک دیدبان کوچک اضافه کنیم که اعلام کند فوتون از شکاف "۱" عبور کرده است یا از شکاف

---

۱۵. آزمایش ذهنی آزمایشی است که می‌توان آن‌را به‌تصور درآورد، یعنی آزمایشی که با قوانین شناختهٔ فیزیک سازگار است اما از لحاظ فنی نمی‌توان آن‌را انجام داد. به‌عنوان مثال، اندازه‌گیری شتاب ناشی از گرانی در سطح خورشید یک آزمایش ذهنی است، در حالی‌که اندازه‌گیری انتقال دوپلری برای نور خورشید در سفینه‌ای که با دو برابر سرعت نور حرکت می‌کند بی‌معنی است.

www.arsanjan.blogfa.com

"۲"، می‌توانیم فوتونها را به‌دو دسته، وابسته به دو شکاف، تقسیم کنیم. برای دستهٔ اول، می‌توانستیم شکاف ۲ را ببندیم، زیرا فوتون از آن نمی‌گذشت؛ برای دستهٔ دوم، می‌توانستیم شکاف ۱ را ببندیم. بنابراین، اگر آزمایش را با یک شکاف بسته در نیمی از زمان، و شکاف بستهٔ دیگر در نیمهٔ دیگر زمان، تکرار کنیم انتظار داریم نقش روی پرده، مثلاً یک صفحهٔ عکاسی، همانی باشد که قبلاً به‌دست آوردیم. اما چنین نیست، زیرا در آزمایش دوم نقش تداخل به‌دست نمی‌آید. در نتیجه، یک ناسازگاری وجود دارد که منشأ آن در این فرض است که حضور دیدبان، که نشان می‌دهد فوتون از کدام شکاف گذشته است، تأثیری بر آزمایش ندارد. در بحث اصل عدم قطعیت هایزنبرگ خواهیم دید که عمل دیدبان نقش تداخل را از میان می‌برد، و در نتیجه ناسازگاری نداریم. در این مرحله، کافی است متذکر شویم که اگر دیدبان وجود نداشته باشد هر فوتون مانند یک موج عمل می‌کند، و این پرسش که فوتون از کدام شکاف گذشته است بی‌معنی است. البته هنوز می‌توان برای شدت تابش در هر شکاف یک مقدار میانگین تعریف کرد: این تعریف الزاماً به‌معنای آن است که برای فوتونهای منفرد تنها می‌توان از احتمال عبور از این یا آن شکاف صحبت کرد.

۲. برای درک عبور تابش قطبیده از یک تحلیلگر، باز هم باید از مفهوم احتمال استفاده کنیم. می‌دانیم اگر یک باریکهٔ تابش پس از عبور از یک قطبشگر دارای شدت I_0 باشد این شدت پس از عبور باریکه از تحلیلگری که محور آن با محور قطبشگر زاویهٔ α می‌سازد به $I_0 \cos^2 \alpha$ کاهش می‌یابد. این تضعیف را برحسب فوتونهای منفردی که تقسیم‌ناپذیر هستند تنها به این‌صورت می‌توان توضیح داد که بگوییم فوتون با احتمال عبوری که از ساختمان دستگاه یعنی از زاویهٔ α پیروی می‌کند از دستگاه می‌گذرد یا نمی‌گذرد.

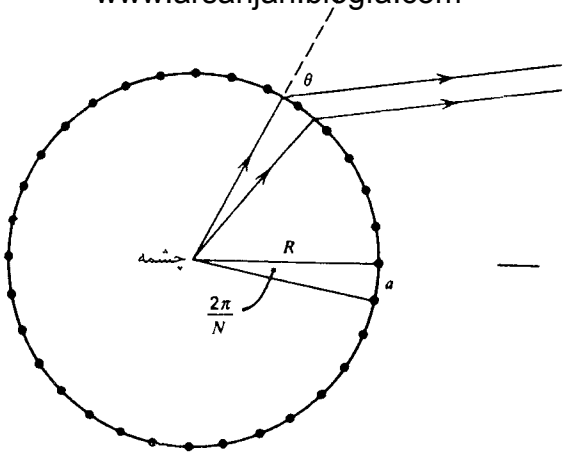
۳. به‌همین ترتیب، تابش از یک ستارهٔ دور را در نظر بگیرید. این ستاره چشمهٔ امواج کروی ناشی از برانگیختگی میدان الکترومغناطیسی است که با سرعت c منتشر می‌شوند. اما برحسب فوتونهای منفرد، بی‌معنی است که فرض کنیم یک فوتون معین از این چشمه روی کره‌ای به شعاع ct (که در آن t از لحظه‌ای حساب می‌شود که فوتون گسیل شده است) گسترده شده است، زیرا جمع شدن این فوتون در یک نقطه از صفحهٔ عکاسی یا شبکیهٔ چشم، اگر "واقعاً" اتفاق می‌افتاد، خلاف عقل سلیم بود. اما می‌توان این توزیع کروی را به‌عنوان تعیین‌کنندهٔ احتمال یافتن یک فوتون در یک زاویهٔ فضایی معین تعبیر کرد.

۴. گاهی ممکن است یک آزمایش معین را هم به زبان ذره‌ای و هم به زبان موجی تعبیر کرد، اما ارتباط میان این دو توصیفِ مکمل یک جنبهٔ غیرکلاسیک در جای دیگری وارد می‌کند. دیکی و ویتکه[16] آزمایش ذهنی زیر را ابداع کرده‌اند (شکل ۱ـ۱۱). یک قفس استوانه‌ای در نظر بگیرید که میله‌های آن به‌طور منظم و با فاصلهٔ زیر از یکدیگر قرار گرفته‌اند

$$a = 2\pi \frac{R}{N}$$

16. R H Dicke and J P Wittke, *Introduction to Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, Reading Mass (1960).

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۱ـ۱۱ مقطع عرضی "قفس" دیکی‌ـویتکه، که میله‌های هم‌فاصله و کمیتهای هندسی مربوط به آن‌را نشان می‌دهد.

که در آن R شعاع استوانه و N تعداد میله‌ها است. تابش گسیل‌شده از چشمه‌ای روی محور استوانه را در نظر بگیرید. میله‌ها به‌صورت توری پراش عمل می‌کنند. اگر باریکه در زاویهٔ θ نسبت به راستای اولیه‌اش خارج شود، شدت به‌شرطی بیشینه است که زاویه و طول‌موج در رابطهٔ زیر صدق کنند

$$a \sin \theta = n\lambda \qquad (n = ۱, ۲, ۳, \dots)$$

یعنی

$$\lambda = \frac{۲\pi R \sin \theta}{Nn} \qquad (۵۲\text{ـ}۱)$$

همچنین می‌توان قلهٔ شدت را با این فرض تعبیر کرد که ذرات در زاویهٔ θ از میله‌های قفس پراکنده می‌شوند. تکانهٔ منتقل‌شده به قفس $p \sin \theta$ است و در نتیجه تکانهٔ زاویه‌ای منتقل شده به قفس برابر است با

$$L = pR \sin \theta \qquad (۵۳\text{ـ}۱)$$

اما اگر از رابطهٔ دوبروی، $p = ۲\pi h/\lambda$، استفاده کنیم به‌دست می‌آوریم

$$L = \frac{۲\pi hNn}{۲\pi R \sin \theta} \cdot R \sin \theta = Nnh \qquad (۵۴\text{ـ}۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com

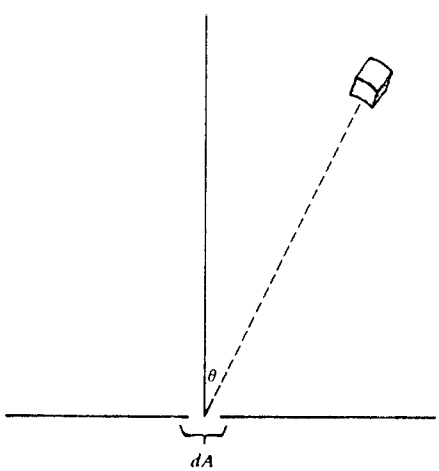
یعنی، تکانهٔ زاویه‌ای کوانتیده است! عامل N، چنانکه بعداً روشن خواهد شد، به‌این واقعیت مربوط می‌شود که اگر قفس را به‌اندازهٔ زاویهٔ $2\pi/N$ بچرخانیم تغییری در وضعیت آن داده نمی‌شود.

در سال ۱۹۲۵ نظریهٔ جدید مکانیک کوانتومی با کارهای ورنر هایزنبرگ، ماکس بورن، پاسکال یوردان، اروین شرودینگر، و پل دیراک آغاز شد. این نظریه راهی بود برای آشتی مفاهیم متعارض به‌بهای کنار گذاشتن مقداری از تفکرات کلاسیک. یکی از لذتهای دانشجوی فیزیک بودن همین توانایی پی بردن به این نظریهٔ زیبا و پیشرفتهای عظیمی است که این نظریه در درک ما از خواص ماده به‌وجود آورده است.

مسائل

۱ـ۱ رابطهٔ ۱ـ۱ میان چگالی انرژی در کاواک و توان گسیل را ثابت کنید.

[راهنمایی: برای این کار، از شکل زیر استفاده کنید. بزرگی جزء حجم dV برابر است با $r^2 dr \sin\theta\, d\theta\, d\phi$ که در آن r فاصله از مبدأ (واقع در روزنه‌ای به‌مساحت dA)، θ زاویه با محور قائم، و ϕ زاویهٔ سمتی حول محور عمود بر روزنه است. انرژی موجود در این جزء حجم برابر است با dV ضرب‌در چگالی انرژی. تابش همسانگرد است، بنابراین آنچه خارج می‌شود حاصلضرب زاویهٔ فضایی $dA\cos\theta/4\pi r^2$ در انرژی است. از این رابطه باید روی زاویه‌های ϕ و θ، و اگر شارش انرژی در زمان Δt مورد نظر باشد، روی r از ۰ تا $c\Delta t$ ــ فاصله‌ای که تابش در این بازه می‌پیماید ــ انتگرال گرفت.]



۱ـ۲ با استفاده از ۱ـ۱ و ۱ـ۱۲، فرمولی برای آهنگ کل تابش در واحد سطح جسم سیاه به‌دست آورید. فرض کنید خورشید مانند جسم سیاه تابش می‌کند. شعاع خورشید $R_\odot = ۷ \times ۱۰^{۱۰}\,\mathrm{cm}$، فاصلهٔ متوسط خورشید از زمین $d_\odot = ۱{,}۵ \times ۱۰^{۱۳}\,\mathrm{cm}$، و ثابت خورشیدی، یعنی مقدار انرژی

www.arsanjan.blogfa.com

که از خورشید وقتی بالای سر است به زمین می‌رسد، برابر است با $۱٫۴ \times ۱۰^{۶} \mathrm{erg/cm^{۲}s}$. با توجه به این اطلاعات، دمای سطح خورشید را براورد کنید.

۱ـ۳ با استفاده از ۱ـ۸، چگالی انرژی در بازهٔ طول‌موج $\Delta\lambda$ را به‌دست آورید. با استفاده از این جواب، مقدار $\lambda = \lambda_{(\max)}$ را، که به‌ازای آن این چگالی بیشینه است، محاسبه کنید. نشان دهید $\lambda_{(\max)}$ به‌صورت b/T است، و b را به‌دست آورید. با استفاده از براورد دمای سطح خورشید، $\lambda_{(\max)}$ را برای تابش خورشیدی تعیین کنید.

[راهنمایی: در محاسبهٔ b به‌جواب معادلهٔ $۵e^{-x} = (۵ - x)$ نیاز دارید. این معادله را به روش نموداری یا روش تقریبهای متوالی، که در آن ابتدا قرار می‌دهید $x = ۵ - \epsilon$ (با $\epsilon \ll ۱$)، حل کنید.]

۱ـ۴ نور فرابنفش با طول‌موج ۳۵۰۰Å به‌سطح پتاسیم می‌تابد. بیشینهٔ انرژی فوتوالکترونها $۱٫۶\mathrm{eV}$ است. مقدار تابع کار پتاسیم را محاسبه کنید؟

۱ـ۵ بیشینهٔ انرژی فوتوالکترونهای ناشی از آلومینیم برای تابش ۲۰۰۰Å برابر با $۲٫۳\mathrm{eV}$ و برای تابش ۲۵۸۰Å برابر با $۰٫۹\mathrm{eV}$ است. با استفاده از این داده‌ها، ثابت پلانک و تابع کار آلومینیم را به‌دست آورید.

۱ـ۶ یک فوتون $۱۰۰\mathrm{MeV}$ به یک پروتون ساکن برخورد می‌کند. بیشترین اتلاف انرژی ممکن برای این فوتون چقدر است؟

۱ـ۷ یک فوتون $۱۰۰\mathrm{keV}$ با یک الکترون ساکن برخورد می‌کند و در زاویهٔ ۹۰° پراکنده می‌شود. انرژی فوتون بعد از پراکندگی چقدر است؟ راستای پس‌زدن الکترون و انرژی جنبشی آن‌را برحسب الکترون ولت به‌دست آورید.

۱ـ۸ الکترونی با انرژی $۱۰۰\mathrm{MeV}$ با فوتونی به طول‌موج $۳ \times ۱۰^{۷} \text{Å}$ (مربوط به زمینهٔ جهانی تابش جسم سیاه) برخورد می‌کند. بیشترین انرژیی که این الکترون از دست می‌دهد چقدر است؟

۱ـ۹ باریکه‌ای از پرتوهای x توسط الکترونهای ساکن پراکنده می‌شود. اگر طول‌موج پرتوهای x که در زاویهٔ ۶۰° نسبت به محور باریکه پراکنده شده‌اند $۰٫۰۳۵ \text{Å}$ باشد، انرژی پرتوهای x باریکه را به‌دست آورید.

۱ـ۱۰ یک هستهٔ نیتروژن (با جرم تقریبی ۱۴× جرم پروتون) فوتونی با انرژی $۶٫۲\mathrm{MeV}$ گسیل می‌کند. اگر این هسته در ابتدا ساکن باشد، انرژی پس‌زنی هسته (برحسب الکترون ولت) چقدر است؟

۱ـ۱۱ بلوری با فاصلهٔ صفحات $۳٫۲ \text{Å}$ را در نظر بگیرید. مقدار انرژی (الف) الکترونها و (ب) هسته‌های هلیم (با جرم تقریبی ۴× جرم پروتون) چقدر باید باشد تا حداکثر سه بیشینهٔ تداخل را مشاهده کنیم؟

۱ـ۱۲ کوچکترین فاصلهٔ تفکیک‌پذیر برای میکروسکوپ از مرتبهٔ بزرگی طول‌موج به‌کار رفته است. در یک میکروسکوپ الکترونی، مقدار انرژی الکترونها چقدر باید باشد تا فاصله‌های (الف) ۱۵۰Å و (ب) ۵Å را تفکیک کند؟

www.arsanjan.blogfa.com

۱ـ۱۳ اگر فرض کنیم که در یک حالت مانای اتم هیدروژن الکترون در مداری دایره‌ای قرار می‌گیرد که محیط آن مضرب درستی از طول‌موج الکترون است، می‌توان نتایج نظریهٔ بور را به‌دست آورد. این کار را انجام دهید.

۱ـ۱۴ می‌خواهیم فاصلهٔ میان صفحه‌های مجاور در یک بلور را اندازه بگیریم. اگر پرتوهای x با طول‌موج ۰٫۵Å در زاویهٔ ۵° آشکارسازی شوند، این فاصله چقدر است؟ بیشنیهٔ دوم در چه زاویه‌ای مشاهده می‌شود؟

۱ـ۱۵ با استفاده از قاعده‌های کوانتش بور، ترازهای انرژی یک نوسانگر هماهنگ را، که برای آن انرژی $p^2/2m + m\omega^2 r^2/2$ یعنی نیرو $m\omega^2 r$ است، به‌دست آورید. تنها مدارهای دایره‌ای را در نظر بگیرید. مانستهٔ فرمول ریدبرگ را تعیین کنید. نشان دهید که اصل تطابق برای تمام مقادیر عدد کوانتومی n که در کوانتش تکانهٔ زاویه‌ای به‌کار می‌رود صادق است.

۱ـ۱۶ با استفاده از قاعده‌های کوانتش بور، حالتهای انرژی را به‌ازای پتانسیل زیر محاسبه کنید

$$V(r) = V_0 \left(\frac{r}{a}\right)^k$$

که در آن k بسیار بزرگ است. نمودار این پتانسیل را ترسیم کنید و نشان دهید مقادیر انرژی به $E_n \simeq Cn^2$ میل می‌کنند.

۱ـ۱۷ در نظریهٔ کلاسیک، توان، تابش‌شده توسط بار شتابدار e با فرمول کلاسیک زیر داده می‌شود

$$P = \frac{2}{3}\frac{e^2}{c^3}a^2 \text{erg/s}$$

که در آن a شتاب است. در مدار دایره‌ای $a = v^2/r$. توان تابش شده توسط یک الکترون در مدار بور مربوط به عدد کوانتومی n را محاسبه کنید. وقتی n بسیار بزرگ است، این توان باید بنابه اصل تطابق با نتیجهٔ درست مکانیک کوانتومی سازگار باشد.

۱ـ۱۸ آهنگ واپاشی برای الکترون در یک مدار را می‌توان به‌صورت توان تابیدهٔ P تقسیم بر انرژی گسیل شده در واپاشی تعریف کرد. با استفاده از رابطهٔ انرژی تابیده در نظریهٔ بور و رابطهٔ P از مسئلهٔ ۱۷، مقدار "تطابقی" آهنگ واپاشی را وقتی الکترون یک گذار از مدار n به مدار $n-1$ انجام می‌دهد به‌دست آورید. مقدار این آهنگ واپاشی را برای $n = 2$ محاسبه کنید. (این مقدار با نتیجهٔ واقعی نظریهٔ کوانتومی دقیقاً توافق ندارد، زیرا اصل تطابق برای مقادیر کوچک عدد کوانتومی صادق نیست.) آهنگ واپاشی را برای گذار از مدار n به مدار $n-m$ به‌دست آورید. طول عمر را، که مساوی با معکوس آهنگ واپاشی است، تعیین کنید.

۱ـ۱۹ انرژی کلاسیک برای یک چرخندهٔ تخت برابر است با

$$E = L^2/2I$$

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن L تکانهٔ زاویه‌ای و I گشتاور لختی است. با استفاده از قاعده‌های کوانتش بور، ترازهای انرژی این چرخنده را به‌دست آورید. اگر شرط بسامد بور برای تابش در گذارهای بین حالتهای n_1 و n_2 برقرار باشد، نشان دهید (الف) اصل تطابق صادق است، و (ب) این اصل ایجاب می‌کند که تنها گذارهای $\Delta = \pm 1$ روی دهند.

۱ـ۲۰ مولکولها گاهی مانند چرخنده‌ها رفتار می‌کنند. اگر طیفهای دورانی با تابشی مشخص شوند که طول‌موج آن از مرتبهٔ 10^7 Å است و این مشخصه برای براورد فاصله‌های بین اتمی در مولکول مانند H_2 به‌کار رود، چه نوع فاصله‌هایی را (برحسب Å) به‌دست می‌آوریم.

مراجع

مباحث این فصل را می‌توان در اکثر کتابهای درسی فیزیک جدید ملاحظه کرد. برای بحثهای بدیعتر مراجعه کنید به

Eyvind H Wichmann, *Quantum Physics*, McGraw-Hill, New York, 1969.

Richard P Feynman, Robert B Leighton, and Matthew Sands, *The Feynman Lectures on Physics*, Addison-Wesley, Reading, Mass, (1963).

برای آشنایی با کارهای بور در تکوین و تکامل نظریهٔ کوانتومی مراجعه کنید به

Abraham Pais, *Niels Bohr's Times in Physics, Philosophy and Polity*, Oxford University Press, New York, 1991.

www.arsanjan.blogfa.com

۲

بسته‌های موج و رابطه‌های عدم قطعیت

مکانیک کوانتومی امکان درک تمام پدیده‌های مورد بحث در فصل ۱ را فراهم می‌آورد، و برای بررسی خواص اتمها، مولکولها، هسته‌های اتمی، و توده‌های آنها ضروری است. ما از طریق معادلهٔ شرودینگر و تعبیر مناسب جوابهای آن به مطالعهٔ مکانیک کوانتومی می‌پردازیم.[۱] برای به‌دست آوردن معادلهٔ شرودینگر از فیزیک کلاسیک راهی وجود ندارد، زیرا این معادله خارج از قلمرو فیزیک کلاسیک قرار دارد. در واقع، اروین شرودینگر معادلهٔ خود را با یک حدس عالی، مبتنی بر نظرات دوبروی، به‌دست آورد. ما این حدس را به‌صورت نسبتاً متفاوتی، با سازش خواص موجی و ذره‌ای الکترونها، توجیه می‌کنیم. پس از ارائهٔ معادلهٔ شرودینگر برای ذرهٔ آزاد، رابطهٔ عدم قطعیت بین مکان و تکانه را با استفاده از بعضی از خواص امواج به‌دست می‌آوریم، و مضامین آن‌را مورد بحث قرار می‌دهیم.

بسته‌های موج جایگزیده

تصور پیکربندی ذراتی که به‌نحوی رفتار موجی از خود نشان می‌دهند مشکل است. به همین دلیل بود که آزمایشهای کلاسیک پراش فرنل و یانگ باعث پذیرش همگانی نظریهٔ موجی نور شدند. از

---

۱. رهیافت دیگری را می‌توان در کتاب زیر یافت

R. P. Feynman R B Leighton and M Sands. *The Feynman Lectures on Physics*, Vol III, Addison-Wesley, Reading, Mass, 1964.

www.arsanjan.blogfa.com

طرف دیگر، می‌توان برای امواجی که بسیار جایگزیده هستند پیکربندیهایی را تصور کرد. (غرش رعد مثالی از برهم‌نهش امواج است که در یک مکان معین نسبت به زمان جایگزیده است.) این "بسته‌های موج" جایگزیده را می‌توان از برهم‌نهش امواج با بسامدهای مختلف به طریقی به‌دست آورد که خارج از یک منطقهٔ فضایی معین یکدیگر را به‌طور تقریباً کامل از بین ببرند. ابزارهای فنی این کار شامل انتگرالهای فوریه‌اند که در پیوست الف خلاصه‌ای از آنها برای خواننده‌ای که با رشتهٔ فوریه آشنایی دارد و بر دقت ریاضی تأکید نمی‌کند بیان شده است.

به‌عنوان مثال، تابعی را در نظر بگیرید که با رابطهٔ زیر تعریف می‌شود

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk\; g(k) e^{ikx} \qquad (۱\text{ـ}۲)$$

قسمت حقیقی $f(x)$ با $\int_{-\infty}^{\infty} dk\; g(k) \cos\; kx$ داده می‌شود که برهم‌نهش خطی امواجی با طول‌موج $\lambda = ۲\pi/k$ است، زیرا به‌ازای یک kی معین وقتی x به $x + ۲\pi/k$ تغییر می‌کند هر موج مجدداً تکرار می‌شود. برای روشن شدن مطلب، $g(k)$ را به‌صورت زیر انتخاب می‌کنیم

$$g(k) = e^{-\alpha(k-k_{\circ})^{۲}} \qquad (۲\text{ـ}۲)$$

انتگرال ۲ـ۱ را می‌توان محاسبه کرد. با $k' = k - k_{\circ}$ داریم

$$\begin{aligned} f(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} dk\; g(k) e^{i(k-k_{\circ})x} e^{ik_{\circ}x} \\ &= e^{ik_{\circ}x} \int_{-\infty}^{\infty} dk'\; e^{ik'x} e^{-\alpha k'^{۲}} \\ &= e^{ik_{\circ}x} \int_{-\infty}^{\infty} dk'\; e^{-\alpha[k'-(ix/۲\alpha)]^{۲}} e^{-(x^{۲}/۴\alpha)} \end{aligned}$$

در گام آخر عمل کامل کردن مجذور را انجام داده‌ایم. می‌توان نوشت $q = k' - (ix/۲\alpha)$ و باز هم انتگرال را روی محور حقیقی نگه داشت.[۲] با استفاده از

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk\; e^{-\alpha k^{۲}} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \qquad (۳\text{ـ}۲)$$

به‌دست می‌آوریم

$$f(x) = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{ik_{\circ}x} e^{-(x^{۲}/۴\alpha)} \qquad (۴\text{ـ}۲)$$

۲. برای خواننده‌ای که با نظریهٔ متغیرهای مختلط آشنا باشد توجیه این کار چندان مشکل نیست.

www.arsanjan.blogfa.com

$e^{ik_0 x}$ را "عامل فاز" می‌نامیم، زیرا $|e^{ik_0 x}|^2 = 1$. بنابراین، مجذور قدرمطلق $f(x)$ برابر است با

$$|f(x)|^2 = \frac{\pi}{\alpha} e^{-x^2/2\alpha} \qquad (۵_۲)$$

این تابع در $x = 0$ به‌اوج می‌رسد، و برحسب اندازهٔ α بستهٔ موجی را نشان می‌دهد که پهن (α بزرگ) یا بسیار باریک (α کوچک) است. بنابراین، می‌توانیم $|f(x)|^2$ را نمایش یک ذره در نظر بگیریم.

پهنای این بستهٔ موج را می‌توان $2\sqrt{2\alpha}$ گرفت، زیرا تابع به $1/e$ مقدار قلهٔ خودکاهش می‌یابد پهناهای $|f(x)|^2$ و $|g(k)|^2$ همبسته‌اند. در مثال بالا، مجذور $g(x)$ تابعی است که حول k_0 به‌اوج می‌رسد و پهنای آن $2/\sqrt{2\alpha}$ است. در اینجا یک دوجانبگی وجود دارد: تابعی که برحسب x شدیداً جایگزیده است برحسب k گسترده است، و برعکس. حاصلضرب این دو "پهنا" برابر است با

$$\Delta k\, \Delta x \sim \frac{2}{\sqrt{2\alpha}} \cdot 2\sqrt{2\alpha} = 4 \qquad (۶_۲)$$

مقدار دقیق ثابت عددی اهمیت ندارد؛ آنچه اهمیت دارد این است که این مقدار به α بستگی ندارد و از مرتبهٔ واحد است. این یک ویژگی کلی توابعی است که تبدیلهای فوریهٔ یکدیگرند (شکل ۲ـ۱). این نتیجه را با فرمول زیر نشان می‌دهیم

$$\Delta x\, \Delta k \gtrsim O(1) \qquad (۷_۲)$$

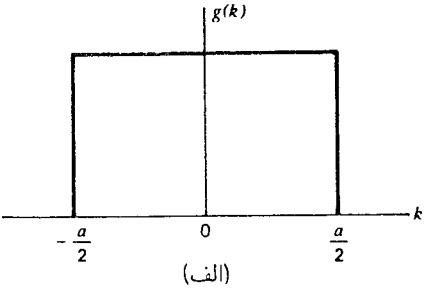
که در آن Δx و Δk "پهنا"های دو توزیع هستند، و منظور از $O(1)$ عددی است که می‌تواند به توابعی بستگی داشته باشد که با آنها سروکار داریم اما اختلاف چندانی با ۱ ندارد. کوچک کردن Δx و Δk با هم غیرممکن است. این یک ویژگی کلی بسته‌های موج است، و به‌زودی خواهیم دید که پیامدهای بسیار عمیقی برای مکانیک کوانتومی دارد.

انتشار بسته‌های موج

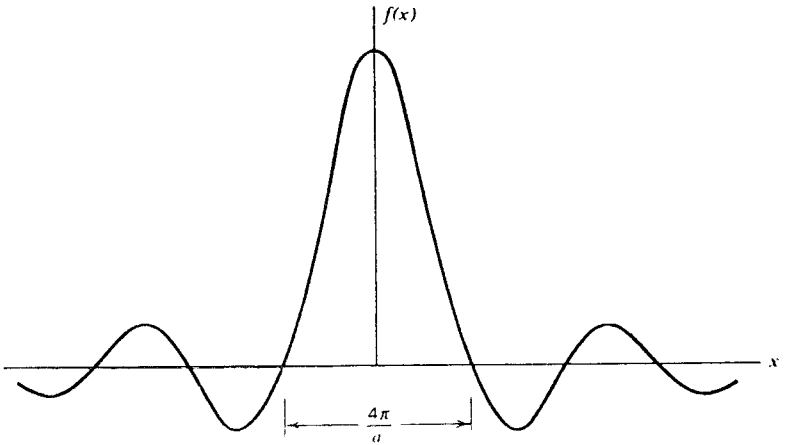
در رابطهٔ ۲ـ۱ تابع $f(x)$ از برهم‌نهش پیوسته‌ای از امواج سادهٔ e^{ikx} ساخته شده است. این بستهٔ موج چگونه در زمان منتشر می‌شود؟ پاسخ این سؤال به چگونگی انتشار تک‌تک امواج بستگی دارد. موج تخت ساده را عموماً به‌صورت زیر خواهیم نوشت (این نامگذاری به این دلیل است که تغییر فضایی موج تنها در راستای x است و به دو مختصهٔ دیگر y و z بستگی ندارد)

$$e^{ikx - i\omega t} \qquad (۸_۲)$$

www.arsanjan.blogfa.com



(الف)



(ب)

شکل۲ـ۱ رابطهٔ میان بستهٔ موج و تبدیل فوریهٔ آن برای یک بستهٔ موج مربعی شکل.

در اینجا $\omega = 2\pi\nu$ بسامد زاویه‌ای است. رابطهٔ کمیت k با طول‌موج عبارت است از $k = 2\pi/\lambda$. بنابراین، می‌توان موج سادهٔ بالا را به‌صورت

$$e^{2\pi i[(x/\lambda)-\nu t]} \qquad (۹_۲)$$

نیز نوشت. برای یک موج نور که در خلأ منتشر می‌شود، بین ν و λ رابطهٔ سادهٔ $\nu = c/\lambda$ برقرار است، و در نتیجه موج ساده در این مورد به‌صورت زیر در می‌آید

$$e^{2\pi i(x-ct)/\lambda} = e^{ik(x-ct)}$$

www.arsanjan.blogfa.com

اکنون اگر برهم‌نهش این امواج ساده با دامنهٔ $g(k)$ را در نظر بگیریم در زمان t داریم

$$f(x,t)=\int_{-\infty}^{\infty} dk\; g(k)e^{i k(x-ct)} = f(x-ct) \qquad (۱۰_۲)$$

این بستهٔ موج همان شکلی را دارد که در $t=0$ داشت، بجز اینکه اکنون به‌جای جایگزیدگی در $x=0$ در $x-ct=0$ جایگزیده است. بنابراین، بستهٔ موج نور با سرعت نور c در خلأ بدون واپیچش منتشر می‌شود.

اما ما با امواجی کار داریم که باید توصیف‌کنندهٔ ذرات باشند، و معلوم نیست رابطهٔ $\omega=kc$ در این مورد صادق باشد. به‌طور کلی، ω تابعی از k است، و از این‌رو می‌نویسیم

$$f(x,t)=\int dk\; g(k)e^{i kx-i\omega(k)t} \qquad (۱۱_۲)$$

فعلاً نمی‌دانیم تابع $\omega(k)$ چه صورتی دارد، اما می‌کوشیم آن‌را با این شرط تعیین کنیم که $f(x,t)$ شبیه یک ذرهٔ کلاسیک باشد که آزادانه حرکت می‌کند.

بستهٔ موجی را در نظر می‌گیریم که در فضای k، حول مقدار k_0، شدیداً جایگزیده است. این بستهٔ موج متناظر با انتخاب تابعی مانند ۲ـ۲ با σی بزرگ است. البته این بستهٔ موج در فضای x دقیقاً جایگزیده نیست، اما محاسبهٔ ما آسانتر می‌شود، و علاوه بر این می‌خواهیم حدسهای هوشمندانه‌ای بزنیم. چون سهم عمدهٔ انتگرال ۲ـ۱۱ بیشتر در اطراف $k=k_0$ است، $\omega(k)$ را حول k_0 بسط می‌دهیم و فرض می‌کنیم $\omega(k)$ برحسب k به‌سرعت تغییر نمی‌کند. بنابراین، می‌توان نوشت

$$\omega(k)\approx\omega(k_0)+(k-k_0)\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0}+\frac{1}{2}(k-k_0)^2\left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_{k_0} \qquad (۱۲_۲)$$

جملهٔ اول مقدار ثابتی، (مستقل از k) دارد. در جملهٔ دوم، کمیت $(d\omega/dk)|_{k_0}$ سرعت گروه[۳] است که انتشار بستهٔ موج را توصیف می‌کند. با نمادنگاری

$$\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0}=v_g \qquad (۱۳_۲)$$

---

۳. سرعت گروه مفهومی است که در هر کتابی که با انتشار موج سروکار دارد مورد بحث قرار می‌گیرد. به‌عنوان مثال، مراجعه کنید به

H Georgi, *The Physics of Waves*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, N J, 1993.

www.arsanjan.blogfa.com

و

$$\frac{1}{2}\left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_{k_0} = \beta \qquad (۱۴_۲)$$

و با $k' = k - k_0$، وابستگی زمانی این بستهٔ موج به‌صورت زیر در می‌آید

$$\begin{aligned} f(x,t) &= e^{ik_0 x - i\omega(k_0)t} \int_{-\infty}^{\infty} dk' e^{-\alpha k'^2} e^{ik'(x-v_g t)} e^{-ik'^2 \beta t} \\ &= e^{ik_0 x - i\omega(k_0)t} \int_{-\infty}^{\infty} dk' e^{ik'(x-v_g t)} e^{-(\alpha + i\beta t)k'^2} \end{aligned} \qquad (۱۵_۲)$$

این درست همان انتگرالی است که به ۲ـ۴ منجر شد و در آن $x - v_g t$ به‌جای x و $\alpha + i\beta t$ به‌جای α نشسته است. بنابراین، داریم

$$f(x,t) = e^{i[k_0 x - \omega(k_0)t]} \left(\frac{\pi}{\alpha + i\beta t}\right)^{1/2} e^{-[(x-v_g t)^2/4(\alpha + i\beta t)]} \qquad (۱۶_۲)$$

مجذور قدرمطلق این تابع به‌صورت زیر است

$$|f(x,t)|^2 = \left(\frac{\pi^2}{\alpha^2 + \beta^2 t^2}\right)^{1/2} e^{-[\alpha(x-v_g t)^2/2(\alpha^2 + \beta^2 t^2)]} \qquad (۱۷_۲)$$

که بستهٔ موجی را نشان می‌دهد که قلهٔ آن با سرعت v_g حرکت می‌کند، اما پهنای ثابتی ندارد: کمیتی که در $t = 0$ برابر با α بود اکنون $\alpha + (\beta^2 t^2/\alpha)$ شده است، یعنی بستهٔ موج پهن می‌شود. چون پهنا متناسب است با

$$\left(\alpha + \frac{\beta^2 t^2}{\alpha}\right)^{1/2} = \sqrt{\alpha}\left(1 + \frac{\beta^2 t^2}{\alpha^2}\right)^{1/2}$$

اگر α بزرگ باشد، یعنی اگر بستهٔ موج در زمان اولیه از لحاظ فضایی بزرگ باشد، آهنگ پهن شدن کوچک خواهد بود.

www.arsanjan.blogfa.com

از بستهٔ موج تا معادلهٔ شرودینگر

مهمترین نتیجهٔ بحث بالا این است که اگر بخواهیم ۲ـ۱۱ ذره‌ای با تکانهٔ p و انرژی جنبشی $p^2/2m$ را نشان دهد باید داشته باشیم

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{p}{m} \qquad (۱۸_۲)$$

علاوه بر این، اگر انرژی ذره را برابر با حاصلضرب بسامد زاویه‌ای وابسته به آن و h بگیریم:

$$E = h\omega \qquad (۱۹_۲)$$

که از رابطهٔ کوانتومی برای تابش استنباط شده است و در نتیجه

$$\omega = \frac{p^2}{2mh} \qquad (۲۰_۲)$$

آنگاه سازگاری ایجاب می‌کند رابطهٔ زیر برقرار باشد

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{h} \qquad (۲۱_۲)$$

که دوبروی اولین بار آن‌را به روش کم و بیش مشابهی به‌دست آورد.
رابطهٔ ۲ـ۱۱ را می‌توان برحسب p به‌صورت زیر نوشت[۴]

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp\ \phi(p) e^{i(px-Et)/\hbar} \qquad (۲۲_۲)$$

بستهٔ موج $\psi(x,t)$ یک جواب عمومی معادلهٔ دیفرانسیل جزئی زیر است

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp\ \phi(p) E\ e^{i(px-Et)/\hbar} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp\ \phi(p) \frac{p^2}{2m} e^{i(px-Et)/\hbar} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} \end{aligned} \qquad (۲۳_۲)$$

۴. عامل عددی جلو انتگرال را وقتی معنایی فیزیکی به $\phi(p)$ نسبت می‌دهیم توجیه خواهیم کرد.

www.arsanjan.blogfa.com
و این به‌شرطی است که، مانند قبل، حرکت "ذره" را در یک ناحیهٔ بدون پتانسیل، که در آن $E = p^2/2m$، توصیف کنیم. این معادله، و تعمیم آن به مورد ذرهٔ متحرک در یک پتانسیل، چکیدهٔ مهم بحثهایی است که قبلاً مطرح کردیم. باید تأکید کنیم که این معادله حاکی از یک حدس است: هیچ توجیهی بر اساس فیزیک کلاسیک برای تعویض ω با $E/\hbar$ و تعویض عدد موج k با $p/\hbar$ وجود ندارد.

هنوز هم با مشکل پهن‌شدن بسته‌های موج روبه‌رو هستیم. اگر بستهٔ گاؤسی ۲ـ۱۷ را در نظر بگیریم، می‌بینیم که هر قدر هم α بزرگ باشد زمانی خواهد رسید که این پهن‌شدگی قابل توجه می‌شود. اما این نتیجه مغایر تجربه است، که به روشنی نشان می‌دهد که، به عنوان مثال، هسته‌ها که بسیار ریز هستند طی مدت ۳×۱۰^{۹} سال ($۱۰^{۱۷}$ ثانیه) تغییری نکرده‌اند. در فصل ۳ خواهیم دید که مفهوم احتمال، که در فصل ۱ به آن اشاره شد، در اینجا دخالت می‌کند، و پهن‌شدگی واقعاً به این احتمال فزاینده مربوط می‌شود که ذره دور از جایی باشد که در $t = ۰$ جایگزیده بود.

رابطه‌های عدم قطعیت

یکی از مهمترین مشاهده‌های کیفی که در بحث بستهٔ موج داشتیم رابطهٔ دوجانبگی میان پهناها در فضاهای x و p است:

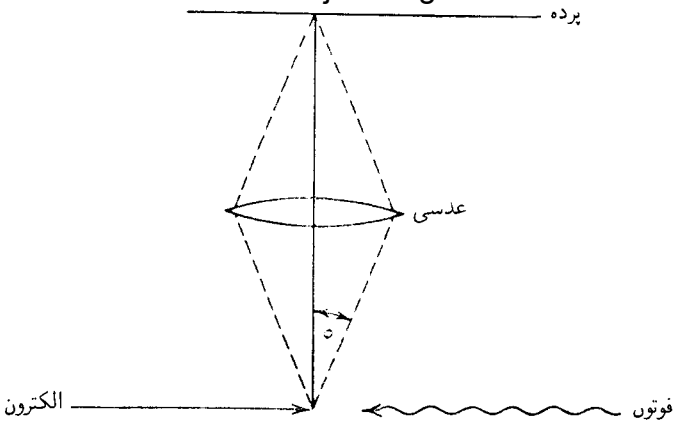
$$\Delta k \, \Delta x \gtrsim ۱ \qquad (۲۴ـ۲)$$

با ضرب این رابطه در $\hbar$ و استفاده از $\hbar k = p$، رابطهٔ عدم قطعیت هایزنبرگ را به‌دست می‌آوریم:

$$\Delta p \, \Delta x \gtrsim \hbar \qquad (۲۵ـ۲)$$

چون پهنا معرف ناحیه‌ای در فضای x یا فضای تکانه است که محتمل است ذره در آن باشد، رابطهٔ ۲ـ۲۵ نشان می‌دهد اگر سعی کنیم بستهٔ موج بسیار جایگزیده‌ای در فضای x بسازیم آنگاه، برخلاف آنچه در فیزیک کلاسیک مسلم فرض می‌شود، نسبت دادن یک تکانه کاملاً معین به‌آن غیرممکن می‌شود. به‌همین نحو، بستهٔ موجی که با تکانه‌ای مشخص می‌شود که در یک محدودهٔ باریک تعریف شده است باید از لحاظ فضایی بسیار پهن باشد. این محدودیتی است که مکانیک کوانتومی بر استفاده از مفاهیم کلاسیک برای توصیف یک دستگاه فیزیکی تحمیل می‌کند. مفاهیم کلاسیک مکان و تکانه مستقل از یکدیگر هستند: آنها به درجه‌های آزادی متفاوتی مربوط می‌شوند. در مکانیک کوانتومی، چنانکه در فصل ۶ با تفصیل بیشتری خواهیم دید، مکان و تکانهٔ یک دستگاه ویژگیهای مکمل یکدیگر هستند و نظریه هیچ آزمایشی را ممکن نمی‌داند که در آن بتوان هر دو را همزمان تعیین کرد. کوچکی $\hbar$ باعث می‌شود که مفاهیم متداول فیزیک کلاسیک

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۲ـ۲ طرح کلی میکروسکوپ هایزنبرگ برای اندازه‌گیری مکان الکترون.

تنها برای دستگاههای میکروسکوپیک کارایی نداشته باشند. به‌عنوان مثال، برای ذرهٔ غباری به جرم 10^{-4} و سرعت $10^{4}\mathrm{cm/s}$، عدم قطعیت یک قسمت در میلیون در حاصلضرب آنها ایجاب می‌کند که $\Delta p \sim 10^{-6}\mathrm{gcm/s}$ و در نتیجه $\Delta x \sim 10^{-21}\mathrm{cm}$، که 10^{8} بار کوچکتر از شعاع پروتون است! این وضعیت برای الکترونی که در یک مدار بور حرکت می‌کند صادق نیست. اگر بگیریم $\Delta p \sim p \sim mc\alpha$، آنگاه $\Delta x \sim \hbar/mc\alpha$ که از مرتبهٔ بزرگی شعاع مدارهای بور است.

اکنون چند آزمایش ذهنی را بررسی می‌کنیم که در آنها به‌تفصیل نشان خواهیم داد چگونه دوگانگی موج‌ـذره نمی‌گذارد رابطهٔ ۲ـ۲۵ نقض شود.

(الف) اندازه‌گیری مکان الکترون (میکروسکوپ هایزنبرگ). ترتیب آزمایش شکل ۲ـ۲ را در نظر بگیرید که مقصود از آن اندازه‌گیری مکان الکترون است. الکترونها در باریکه‌ای با تکانهٔ کاملاً معین p_x در جهت مثبت محور x حرکت می‌کنند. میکروسکوپ (عدسی+پرده) برای این است که با مشاهدهٔ نوری که الکترون آن‌را پراکنده می‌کند ببینیم الکترون کجا قرار دارد. نور را در جهت منفی x می‌تابانیم. یک الکترون خاص یک فوتون خاص را پراکنده می‌کند و این فوتون وارد میکروسکوپ می‌شود. توان تفکیک میکروسکوپ، یعنی دقتی که با آن می‌توان موقعیت الکترون را تعیین کرد، بنابه اپتیک موجی با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$\Delta x \sim \frac{\lambda}{\sin\ \phi} \qquad (۲۶_۲)$$

که در آن λ طول‌موج نور است. به‌نظر می‌رسد که با کوچک کردن λ و یا بزرگ کردن $\sin\phi$، می‌توانیم Δx را هر اندازه بخواهیم کوچک کنیم. اما اکنون نشان می‌دهیم که این کار تنها به‌بهای از دست دادن اطلاع دربارهٔ مؤلفهٔ x تکانهٔ الکترون امکانپذیر است. نظریهٔ کوانتومی به ما می‌گوید که آنچه روی پردهٔ پشت عدسی ثبت می‌شود در واقع فوتونهای منفردی هستند که به این علت به آنجا

www.arsanjan.blogfa.com

می‌رسند که توسط الکترونها پراکنده شده‌اند. راستای حرکت فوتون پس از پراکندگی در محدودهٔ زاویه‌ای که روی گشودگی تشکیل می‌شود نامعین است. در نتیجه، بزرگی تکانهٔ الکترون پس‌زده عدم‌قطعیتی دارد که عبارت است از

$$\Delta p_x \sim ۲\frac{h\nu}{c}\sin\ \phi \qquad (۲۷_۲)$$

بنابراین،

$$\Delta p_x \Delta x \sim ۲\frac{h\nu}{c}\sin\ \phi\frac{\lambda}{\sin\ \phi} \sim ۴\pi\hbar \qquad (۲۸_۲)$$

آیا می‌توان این مشکل را حل کرد؟ هر چه باشد، راستای فوتون با تکانهٔ آن همبسته است، و اگر بتوان به‌نحوی پس‌زنی پرده را اندازه گرفت می‌توان تکانهٔ فوتون (و در نتیجه تکانهٔ الکترون) را بهتر مشخص کرد. این درست، اما همینکه میکروسکوپ را به‌عنوان قسمتی از دستگاه "مشهود" در نظر گرفتیم باید نگران موقعیت آن باشیم زیرا تکانهٔ آن باید مشخص شود. اما میکروسکوپ هم باید از اصل عدم قطعیت تبعیت کند، و اگر بخواهیم تکانهٔ آن‌را مشخص کنیم مکان آن نامعین‌تر خواهد شد. وسیلهٔ مشاهدهٔ "کلاسیک" نهایی همیشه با این نامعینی روبه‌رو خواهد بود.

(ب) آزمایش دوشکافی. در فصل ۱ دیدیم که نقش تداخلی که در عبور الکترونها[۵] از دو شکاف مشاهده می‌شود منطقاً با توانایی ما برای دانستن اینکه الکترون ازکدام شکاف عبور می‌کند ناسازگار است، زیرا این آگاهی ایجاب می‌کند که این نقش نتیجهٔ برهم‌نهش الکترونهایی باشد که از این یا آن شکاف آمده‌اند. اما این برهم‌نهش نمی‌تواند نقش تداخل به‌وجود آورد. می‌توان با استفاده از اصل عدم قطعیت نشان داد که "دیدبانی" که شکاف گذر را شناسایی می‌کند نقش تداخل را خراب خواهد کرد. فرض کنید فاصلهٔ شکافها از یکدیگر a و فاصلهٔ شکافها تا پرده d باشد. شرط تداخل سازنده عبارت است از

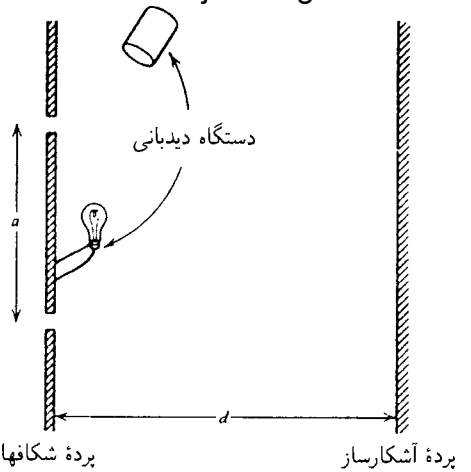
$$\sin\ \theta = n\frac{\lambda}{a} \qquad (۲۹_۲)$$

و در نتیجه فاصلهٔ بین بیشینه‌های مجاور روی پرده برابر است با $d\sin\ \theta_{n+۱} - d\sin\ \theta_n = d\lambda/a$. دیدبانی را در نظر بگیرید که مکان یک الکترون را درست پشت شکاف با دقت $\Delta y < a/۲$ تعیین می‌کند، یعنی نشان می‌دهد الکترون ازکدام شکاف گذشته است (شکل ۲ـ۳). در این کار، دیدبان باید تکانه‌ای در راستای y (موازی با پردهٔ شکافها) به الکترون بدهد که مقدار آن به‌اندازهٔ

$$\Delta p_y > \frac{۲h}{a} \qquad (۳۰_۲)$$

۵. البته ما دربارهٔ فوتونها بحث کردیم، اما همین مشکل برای الکترونها، که آنها نیز پراشیده می‌شوند، وجود دارد.

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۲ـ۳ آزمایش دوشکافی با دیدبان.

نادقیق است. در نتیجه

$$\frac{\Delta p_y}{p} > \frac{2}{a}\frac{h}{p} = \frac{2\lambda}{a} \qquad (۳۱_۲)$$

این عدم قطعیت یک ابهام در مکان الکترون روی پرده به‌وجود می‌آورد که حداقل آن $2\lambda d/a$ است. اما این مقدار بزرگتر از فاصلهٔ میان بیشینه‌ها است، و از این‌رو می‌توان نتیجه گرفت که کار دیدبان باعث از میان رفتن نقش پراش می‌شود، و هیچ‌گونه تناقض منطقی وجود ندارد. برعکس، البته می‌توانستیم استدلال کنیم که سازگاری منطقی ایجاب می‌کند که

$$\Delta p_y \Delta y > h \qquad (۳۲_۲)$$

(ج) "واقعیت" مدارها در اتم بور. چنانکه در فصل ۱ گفته شد، الگوی اتمی بور با مدارهایی سروکار دارد که شعاع آنها با $R_n = hn^2/\alpha mc$ داده می‌شود. بنابراین، آزمایشی که برای اندازه‌گیری حدود یک مدار خاص طراحی می‌شود باید به‌گونه‌ای باشد که با آن بتوان مکان الکترون در اتم را با دقت زیر اندازه گرفت

$$\Delta x \ll R_n - R_{n-1} \cong \frac{2hn}{\alpha mc} \qquad (۳۳_۲)$$

این کار باعث انتقال مهارنشدنی تکانه با بزرگی $\Delta p \gg mc\alpha/2n$ به‌الکترون می‌شود، و این به‌نوبهٔ

www.arsanjan.blogfa.com

خود عدم قطعیتی را در انرژی الکترون ایجاب می‌کند که مقدار آن از رابطهٔ زیر به‌دست می‌آید

$$\Delta E \simeq \frac{p\Delta p}{m} \gg \frac{mc\alpha}{n} \cdot \frac{\alpha c}{2n} = \frac{1}{2} \frac{mc^2\alpha^2}{n^2} \qquad (۳۴_۲)$$

که بسیار بزرگتر از انرژی بستگی الکترون در مدار است. در نتیجه، این اندازه‌گیری به‌احتمال زیاد الکترون را از مدار خارج می‌کند، و از این‌رو نمی‌توان تصویری از مدار به‌دست آورد.

(د) رابطهٔ عدم قطعیت انرژی-زمان. با نوشتن رابطهٔ ۲ـ۲۵ به‌صورت

$$\frac{p\Delta p}{m} \cdot \frac{\Delta x m}{p} \gtrsim \hbar$$

می‌توان عامل اول را معیاری از عدم قطعیت در انرژی دستگاه دانست، و عامل دوم را، که برابر است با $\Delta x/v$، معیاری از Δt یعنی عدم قطعیت در زمان جایگزینی دستگاه تعبیر کرد. بدین‌ترتیب، به‌رابطهٔ عدم قطعیت انرژی-زمان می‌رسیم:

$$\Delta E\, \Delta t \gtrsim \hbar \qquad (۳۵_۲)$$

این رابطه را می‌توان از صورت بستهٔ موج ۲ـ۲۲ هم به‌دست آورد، زیرا E و t در رابطهٔ دوجانبه‌ای همانند مورد x و p ظاهر می‌شوند؛ و همچنین می‌توان آن‌را از نظریهٔ نسبیت هم نتیجه گرفت، زیرا فضا و زمان، و تکانه و انرژی، ارتباط بسیار نزدیکی با هم دارند.[۶] در واقع، فضا و زمان در مکانیک کوانتومی غیرنسبیتی نقشهای نسبتاً متفاوتی دارند، و در حالی‌که می‌توان رابطهٔ ۲ـ۲۵ را از صورتبندی مکانیک کوانتومی به‌دست آورد برای رابطهٔ ۲ـ۳۵ این کار ممکن نیست. با وجود این، رابطهٔ عدم قطعیت انرژی-زمان به همان اندازهٔ رابطهٔ ۲ـ۲۵ قسمتی از ساختار کیفی مکانیک کوانتومی است. در این باره، به مبحث ویژهٔ ۴، "طول‌عمر، پهنای خط، و تشدید"، مراجعه کنید.

براوردهای مرتبهٔ بزرگی

با استفاده از رابطه‌های عدم قطعیت می‌توان مقادیر عددی تقریبی بعضی از کمیتها را در فیزیک میکروسکوپیک براورد کرد. مطالب را با چند مثال روشن می‌کنیم، که اولین آنها به اتم هیدروژن مربوط می‌شود. اگر بگوییم الکترون در داخل اتم هر مکانی می‌تواند داشته باشد، آنگاه اگر r مختصهٔ شعاعی آن باشد داریم

$$pr \sim \hbar \qquad (۳۶_۲)$$

---

۶. $(ct, \mathbf{r})$ و $(E/c, \mathbf{p})$ چاربردار هستند، و مؤلفه‌های آنها تحت تبدیلات لورنتس قرار می‌گیرند.

www.arsanjan.blogfa.com
از اینجا می‌توان انرژی را برحسب r بیان کرد:

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} = \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r} \qquad (۳۷_۲)$$

مقدار کمینهٔ انرژی از رابطهٔ زیر به‌دست می‌آید

$$\frac{\partial E}{\partial r} = -\frac{\hbar^2}{mr^3} + \frac{e^2}{r^2} = 0$$

بنابراین،

$$r = \frac{\hbar^2}{me^2} = \frac{\hbar}{mc\alpha} \qquad (۳۸_۲)$$

و مقدار Eی متناظر برابر است با

$$E = -\frac{1}{2}mc^2\alpha^2 \qquad (۳۹_۲)$$

البته، به‌دست آوردن این مقدار دقیق برای انرژی به این دلیل است که طرف راست ۲ـ۳۶ را مخصوصاً $\hbar$ گرفتیم. در واقع، به‌جای ۲ـ۳۶ می‌شد نوشت $pr \sim h$، که به همان اندازه اعتبار دارد، و نتیجهٔ دیگری به‌دست آورد. اما، تفاوت این مقدار جدید E با مقدار درست آن تنها در یک ضریب عددی است، و مرتبهٔ بزرگی عمومی باید باز هم همان باشد (یعنی، $E \sim mc^2\alpha^2$). نکتهٔ مهم این است که، برخلاف نظریهٔ کلاسیک، انرژی به‌موجب اصل عدم قطعیت از پایین کراندار است: افزایش انرژی پتانسیل (منفی)، که از کاهش r یعنی نزدیکتر شدن الکترون به هسته حاصل می‌شود، الزاماً باعث افزایش انرژی جنبشی می‌شود.

به‌عنوان مثالی دیگر، مسئلهٔ نیروهای هسته‌ای را در نظر بگیرید. برد این نیروها از مرتبهٔ یک فرمی، یعنی 10^{-13}cm، است. این ایجاب می‌کند که $p \sim h/r \sim 10^{-14}$g cm/s. انرژی جنبشی متناظر با این تکانه عبارت است از

$$\frac{p^2}{2M} \sim \frac{10^{-28}}{3{,}2 \times 10^{-24}} \sim 3 \times 10^{-5}\text{ergs} \qquad (۴۰_۲)$$

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن M جرم نوکلئون (پروتون یا نوترون) و برابر است با $۱٫۶ \times ۱۰^{-۲۴}$ g. چون پتانسیلی که باعث بستگی می‌شود باید بیشتر از این مقدار باشد، نتیجه می‌گیریم که

$$|V| \gtrsim ۳ \times ۱۰^{-۵}\text{ergs} \gtrsim ۲۰\,\text{MeV} \qquad (۴۱\text{ـ}۲)$$

باز هم، این تنها یک مرتبهٔ بزرگی تقریبی است، اما نشان می‌دهد که انرژی پتانسیل باید برحسب MeV اندازه‌گیری شود نه برحسب eV که در مورد اتمها به‌کار می‌رود.

یک مثال دیگر از نظریهٔ مزون یوکاوا برای نیروهای هسته به‌دست می‌آید. در سال ۱۹۳۵ یوکاوا نظر داد که نیروهای هسته‌ای از گسیل یک کوانتوم جدید (مزون یا پیون) توسط یکی از نوکلئونها و جذب آن توسط یک نوکلئون دیگر ناشی می‌شوند. اگر جرم این کوانتوم را با μ نشان دهیم، گسیل آن باعث عدم موازنه‌ای در انرژی به مقدار $\Delta E \sim \mu c^۲$ می‌شود که تنها می‌تواند در مدت $\Delta t \sim \hbar/E \sim \hbar/\mu c^۲$ روی دهد. برد متناظر با این زمان حرکت ذره از مرتبهٔ $c\Delta t \sim \hbar/\mu c$ است. اگر این برد را برابر با $r_۰ = ۱٫۴ \times ۱۰^{-۱۳}$cm بگیریم، به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \mu c^۲ \cong \frac{\hbar c}{r_۰} &= \frac{۱۰^{-۲۷} \times ۳ \times ۱۰^{۱۰}}{۱٫۴ \times ۱۰^{-۱۳}}\text{ergs} \\ &\simeq ۱۳۰\ \text{MeV} \end{aligned} \qquad (۴۲\text{ـ}۲)$$

وقتی سرانجام پیون کشف شد، معلوم شد که این براورد دقت قابل‌ملاحظه‌ای دارد، زیرا برای پیون $\mu c^۲ \simeq ۱۴۰\ \text{MeV}$.

به‌طور خلاصه، کوشش آزمونی ما برای تلفیق ویژگیهای موجی و ذره‌ای به‌گونه‌ای که به ساده‌ترین وجه با آزمایش سازگار باشد به عدم قطعیت در توصیف پدیده‌های اتمی در سطح کلاسیک منجر شد، و این عدم قطعیت هم برای توصیف سازگار آزمایشهای (ذهنی) ما لازم است و هم با مشاهدات ما توافق دارد.

مسائل

۱ـ۲ بستهٔ موج ۲ـ۱ را در نظر بگیرید که در آن $g(k)$ به‌صورت زیر تعریف می‌شود

$$\begin{aligned} g(k) &= ۰ && k < -K/۲ \\ &= N && -K/۲ < k < K/۲ \\ &= ۰ && K/۲ < k \end{aligned}$$

(الف) تابع $f(x)$ را به‌دست آورید.

www.arsanjan.blogfa.com

(ب) مقدار N را طوری تعیین کنید که

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx|f(x)|^{۲} = ۱$$

(ج) این مقدار را مقایسه کنید با مقداری که برای N از شرط زیر به‌دست می‌آید

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk|g(k)|^{۲} = \frac{۱}{۲\pi}$$

(د) نشان دهید که تعریف موجهی برای Δx، پهنای $f(x)$ در قسمت (الف)، رابطهٔ زیر را به‌دست می‌دهد

$$\Delta k\ \Delta x > ۱$$

که به مقدار K بستگی ندارد.

۲ـ۲ با فرض اینکه

$$g(k) = \frac{N}{k^{۲} + \alpha^{۲}}$$

تابع $f(x)$ را به‌دست آورید. با ترسیم این دو تابع، باز هم نشان دهید

$$\Delta k\ \Delta x > ۱$$

که مستقل از مقدار α است.

۲ـ۳ مسئلهٔ پهن‌شدن بستهٔ موج گاؤسی مربوط به ذرهٔ آزاد را در نظر بگیرید که برای آن رابطهٔ زیر برقرار است

$$\omega = \frac{\hbar k^{۲}}{۲m}$$

با استفاده از ۲ـ۱۷، تغییر نسبی اندازهٔ بستهٔ موج در یک ثانیه را برای موارد زیر محاسبه کنید

(الف) بستهٔ موجی که نمایشگر یک الکترون با اندازهٔ $۱۰^{-۴}$cm و $۱۰^{-۸}$cm است.

(ب) بستهٔ موجی که جسمی به جرم ۱g و با اندازهٔ ۱cm را نمایش می‌دهد.

بهتر است پهنا را برحسب $\hbar/mc$ بیان کنید، که در آن m جرم ذره‌ای است که با بستهٔ موج نمایش داده می‌شود.

www.arsanjan.blogfa.com

۲ـ۴ می‌خواهیم یک باریکهٔ الکترونی را به هدفی در فاصلهٔ $10^{4}\,\mathrm{km}$ بتابانیم. اگر اندازهٔ بستهٔ موج اولیه $1\,\mathrm{mm}$ باشد، اندازهٔ آن‌را پس از رسیدن به هدف به‌ازای انرژی جنبشی (الف) $13{,}6\,\mathrm{eV}$، و (ب) $100\,\mathrm{MeV}$ به‌دست آورید.

[تذکر: رابطهٔ میان انرژی جنبشی و تکانه همیشه $p^{2}/2m$ نیست!]

۲ـ۵ رابطهٔ میان طول‌موج و بسامد در یک موجبر به‌صورت زیر است

$$\lambda = \frac{c}{\sqrt{\nu^{2} - \nu_{0}^{2}}}$$

سرعت گروه این امواج را تعیین کنید.

۲ـ۶ برای امواج کشش سطحی در آب کم‌عمق، رابطهٔ میان بسامد و طول‌موج عبارت است از

$$\nu = \left(\frac{2\pi T}{\rho\lambda^{3}}\right)^{1/2}$$

که در آن T کشش سطحی و ρ چگالی است. سرعت گروه این امواج را محاسبه کنید و رابطهٔ آن‌را با سرعت فاز، که با $v_p = \lambda\nu$ تعریف می‌شود، به‌دست آورید. برای امواج‌گرانی (آب‌عمیق)، این رابطه به‌صورت زیر است

$$\nu = \left(\frac{g}{2\pi\lambda}\right)^{1/2}$$

سرعت گروه و سرعت فاز را تعیین کنید.

۲ـ۷ انرژی حالت پایهٔ نوسانگر هماهنگ را با استفاده از رابطهٔ عدم قطعیت براورد کنید. انرژی نوسانگر هماهنگ برابر است با

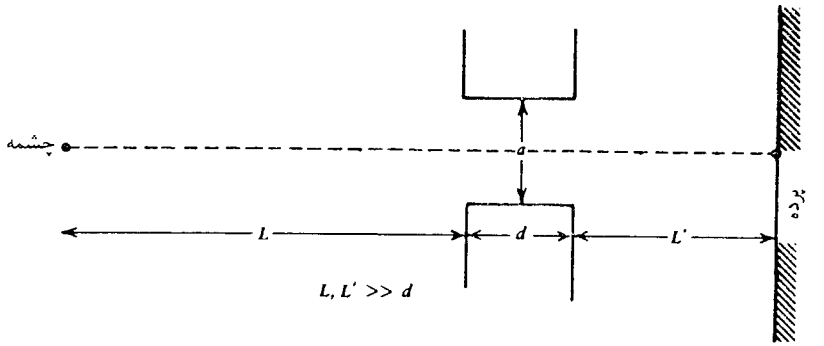
$$E = \frac{p^{2}}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^{2}x^{2}$$

۲ـ۸ با استفاده از رابطهٔ عدم قطعیت، انرژی حالت پایهٔ ذره‌ای در پتانسیل $V(x) = gx^{4}$ را براورد کنید. ابعاد جواب خود را وارسی کنید.

۲ـ۹ بعضی هسته‌ها، با اندازهٔ نوعی $10^{-12}\,\mathrm{cm}$، الکترونهایی با انرژی ۱ تا $10\,\mathrm{MeV}$ گسیل می‌کنند. با استفاده از اصل عدم قطعیت نشان دهید که الکترون با انرژی $1\,\mathrm{MeV}$ نمی‌تواند قبل از واپاشی در هسته وجود داشته باشد.

www.arsanjan.blogfa.com

۲ـ۱۰ به‌نظر می‌رسد دستگاهی که در زیر ترسیم شده است نقض رابطهٔ عدم قطعیت را ممکن می‌سازد. موقعیت عرضی را می‌توان با دقت $\Delta y \sim a$ تعیین کرد، و تکانهٔ عرضی باریکهٔ فرودی را می‌توان با بزرگ کردن اختیاری L تا حد امکان کوچک کرد. این دستگاه را به‌تفصیل تحلیل کنید، نکات پنهان فرضهای بالا را روشن کنید، و نشان دهید که رابطهٔ عدم قطعیت نقض نمی‌شود.



۲ـ۱۱ عدم قطعیت انرژی (پهنای خط) را برای حالتهایی که طول‌عمر آنها برابر است با (الف) $۲٫۶ \times ۱۰^{-۱۰}$ s، (ب) $۱۰^{-۲۳}$ s، و (ج) ۱۲ دقیقه (برحسب الکترون ولت) به‌دست آورید.

۲ـ۱۲ نور تکفامی به طول‌موج ۶۰۰۰ Å از یک بستاور سریع که برای $۱۰^{-۹}$ s باز است عبور می‌کند. پهن‌شدگی طول‌موجهای نور (ناتکفام) عبورکرده را تعیین کنید.

مراجع

بسته‌های موج در بسیاری ازکتابهای درسی توضیح داده می‌شوند. مفیدترین آنها در سطح این کتاب عبارت‌اند از

پاول جی، ال و ب کریسمن، مکانیک کوانتومی، ترجمهٔ پاشایی‌راد و سعادت، تهران مرکز نشر دانشگاهی، ۱۳۶۸، ۵۴۸ صفحه.

S Borowitz, *Fundamentals of Wave Mechanics*, W A Benjamin, New York, 1967.

D Bohm, *Quantum Theory*, Dover Publications Inc. New York, 1989.

تمام کتابهای درسی مکانیک کوانتومی الزاماً رابطه‌های عدم قطعیت را بررسی می‌کنند. جامعترین آنها را می‌توان درکتاب بوهم، که در بالا معرفی شد، و درکتاب زیر ملاحظه کرد.

W Heisenberg, *The Physical Principles of the Quantum Theory*, Dover Publications, New York, 1930.

بحثهای مربوط به رابطه‌های عدم قطعیت را همچنین می‌توان درکتابهای پیشرفته‌تری که در آخر این کتاب معرفی شده‌اند یافت.

www.arsanjan.blogfa.com

۳

معادلهٔ موج شرودینگر و تعبیراحتمالاتی

در این فصل بعضی از ویژگیهای معادلهٔ شرودینگر ذرهٔ آزاد را که در فصل ۲ به‌دست آوردیم بررسی می‌کنیم. با تعبیر احتمالاتی تابع موج آشنا می‌شویم، و آنگاه به تعریف تکانه در مکانیک کوانتومی و سپس به معادلهٔ شرودینگر مربوط به ذره در پتانسیل $V(x)$ می‌پردازیم. نقطهٔ شروع بحث ما معادلهٔ دیفرانسیل جزئی زیر است

$$ih\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{h^{۲}}{۲m}\frac{\partial^{۲}\psi(x,t)}{\partial x^{۲}} \qquad (۱\text{ـ}۳)$$

که آن‌را معادلهٔ درست برای توصیف ذرهٔ آزاد می‌گیریم.

با وارون کردن روندی که با آن به ۲ـ۲۳ رسیدیم، می‌بینیم که عمومی‌ترین جواب این معادله عبارت است از

$$\psi(x,t) = \frac{۱}{\sqrt{۲\pi\hbar}}\int dp\ \phi(p)e^{i[px-(p^{۲}/۲m)t]/\hbar} \qquad (۲\text{ـ}۳)$$

(دلیل ضریب بهنجارش در جلو انتگرال را در ۳ـ۲۷ خواهیم دید.) قبل از اینکه به بحث بسیار مهم تعبیر جواب معادلهٔ ۳ـ۱ یعنی $\psi(x,t)$ بپردازیم، باید تأکید کنیم که این معادله برحسب مشتق

www.arsanjan.blogfa.com

زمانی از مرتبهٔ اول است. بنابراین، اگر مقدار اولیهٔ ψ، مثلاً $\psi(x,0)$ معلوم باشد، می‌توان مقدار آن‌را در همهٔ زمانهای دیگر به‌دست آورد. این امر از صورت معادله برای کار با کامپیوتر[1]

$$\psi(x,t+\Delta t)=\psi(x,t)+\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}\Delta t \qquad (۳\text{-}۳)$$

یا از صورت عمومی‌ترین جواب آشکار است. با داشتن $\psi(x,0)$ می‌توان تابع $\phi(p)$ را از ۳ـ۲ به‌دست آورد. انتگرال فوریهٔ

$$\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dp\ \phi(p)e^{ipx/\hbar} \qquad (۴\text{-}۳)$$

را می‌توان وارون کرد، و با معلوم شدن $\phi(p)$ جواب به‌ازای تمام مقادیر t معلوم می‌شود. توجه کنید که در این معادلهٔ دیفرانسیل "عدم قطعیت" وجود ندارد: همینکه حالت اولیهٔ بستهٔ موج مشخص شد ــ و تا کنون هیچ محدودیتی برای $\psi(x,0)$ در نظر نگرفته‌ایم ــ آنگاه این بستهٔ موج در تمام زمانهای بعدی کاملاً مشخص می‌شود.

تعبیر احتمالاتی

در جستجوی تعبیری برای $\psi(x,t)$ باید به‌خاطر داشته باشیم که اولاً $\psi(x,t)$ به‌طورکلی یک تابع مختلط (مانند تابع ۲ـ۱۶) است، و ثانیاً تابع $|\psi(x,t)|$ در جایی‌که باید ذره وجود داشته باشد بزرگ و در جاهای دیگر کوچک است. این تابع همچنین دارای ویژگی پهن شدن است، که در فصل ۲ بررسی شد. تقریباً بلافاصله پس از کشف معادلهٔ شرودینگر (که تنها شش ماه پس از کشف مکانیک کوانتومی توسط هایزنبرگ در سال ۱۹۲۵ صورت گرفت)، ماکس بورن پراکندگی باریکه‌ای از الکترونها توسط یک هدف را مطالعه کرد، و از اینجا به تعبیر درست تابع موج پی برد. او نظر داد که کمیت

$$P(x,t)dx=|\psi(x,t)|^2dx \qquad (۵\text{-}۳)$$

عبارت است از احتمال اینکه ذره‌ای را که با تابع موج $\psi(x,t)$ توصیف می‌شود بتوان در زمان t بین x و $x+dx$ یافت. چگالی احتمال $P(x,t)$ حقیقی است، و در جایی که باید ذره وجود داشته باشد بزرگ است، و پهن‌شدگی آن به این معنا نیست که یک ذرهٔ معین پهن می‌شود، بلکه

---

۱. برای یک شبکهٔ گسسته، باید به‌جای $\partial\psi(x,t)/\partial t$ قرار دهیم $[\psi(x,t+\Delta t)-\psi(x,t)]/\Delta t$ که در آن Δt کوچک است اما صفر نیست.

www.arsanjan.blogfa.com

صرفاً به این معنا است که با گذشت زمان احتمال یافتن ذره در جایی که در $t = ۰$ قرار داشته است کمتر می‌شود.

برای صادق بودن این تعبیر باید شرط زیر برقرار باشد

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x,t)dx = ۱ \qquad (۶_۳)$$

زیرا ذره باید به هر حال در جایی باشد. در یک معادلهٔ خطی مانند ۳ـ۱، جواب $\psi(x,t)$ را می‌توان در یک ثابت ضرب کرد و نتیجه باز هم یک جواب خواهد بود. بنابراین، رابطهٔ ۳ـ۶ جوابهای $\psi(x,t)$ را به‌دسته‌ای از توابع محدود می‌کند که انتگرال‌پذیری مجذوری هستند. بعداً خواهیم دید که کافی است شرط زیر برقرار باشد

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx|\psi(x,۰)|^۲ < \infty \qquad (۷_۳)$$

یعنی توابع موج حالت اولیه باید انتگرال‌پذیر مجذوری باشند. وقتی بازهٔ انتگرال‌گیری نامتناهی است، این شرط ایجاب می‌کند که $\psi(x,۰)$ سریعتر از $x^{-۱/۲}$ به‌صفر میل کند. همچنین ضروری است که توابع موج $\psi(x,t)$ نسبت به x پیوسته باشند.

اهمیت فازها

چون کمیتی که معنای فیزیکی دارد $|\psi(x,t)|^۲$ است، به‌نظر می‌رسد که فاز جواب معادله به‌نحوی بی‌اهمیت است. این نتیجه‌گیری نادرست است! چون معادلهٔ ۳ـ۱ خطی است، اگر $\psi_۱(x,t)$ و $\psi_۲(x,t)$ جواب باشند، ترکیب خطی زیر نیز یک جواب است

$$\psi(x,t) = \psi_۱(x,t) + \psi_۲(x,t) \qquad (۸_۳)$$

اگر $\psi_۱(x,t) = R_۱e^{i\theta_۱}$ و $\psi_۲(x,t) = R_۲e^{i\theta_۲}$ که در آنها $R_۱$، $R_۲$، $\theta_۱$ و $\theta_۲$ حقیقی هستند، آنگاه

$$\begin{aligned} |\psi(x,t)|^۲ &= |e^{i\theta_۱}(R_۱ + R_۲e^{i(\theta_۲-\theta_۱)})|^۲ \\ &= R_۱^۲ + R_۲^۲ + ۲R_۱R_۲\cos(\theta_۱ - \theta_۲) \end{aligned} \qquad (۹_۳)$$

که نشان می‌دهد فاز نسبی مهم است. از فازکل در $\psi(x,t)$ می‌توان صرفنظر کرد؛ تنها فاز نسبی $\theta_۱ - \theta_۲$ بین توابع موج $\psi_۱$ و $\psi_۲$ در $|\psi|^۲$ ظاهر می‌شود.

www.arsanjan.blogfa.com

توجه کنید که سمت راست ۳ـ۹ درست همان چیزی است که در بررسی برهم‌نهش امواج می‌بینیم. در واقع، این خطی بودن توابع موج است که باعث نقش تداخلی می‌شود که ناشی از وجود کسینوس در این رابطه است، و وقتی از "رفتار موجی" الکترونها یا فوتونها صحبت می‌کنیم بیش از هر چیز منظور همین خطی بودن است.

جریان احتمال

اکنون نشان می‌دهیم که شرط ۳ـ۶، که در $t = ۰$ تحمیل شده است، در همهٔ زمانها برقرار است. باید از رابطهٔ ۳ـ۱ و همیوغ مختلط آن

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^۲}{۲m}\frac{\partial^۲\psi^*(x,t)}{\partial x^۲} \qquad (۱۰\text{ـ}۳)$$

در مشتق زمانی چگالی جاگذاری کنیم:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}P(x,t) &= \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi + \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}\\ &= \frac{۱}{i\hbar}\left(\frac{\hbar^۲}{۲m}\frac{\partial^۲\psi^*}{\partial x^۲}\psi - \frac{\hbar^۲}{۲m}\psi^*\frac{\partial^۲\psi}{\partial x^۲}\right)\\ &= -\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\hbar}{۲im}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi\right)\right]\end{aligned}$$

اگر شار (یا معادل آن، جریان احتمال) را با رابطهٔ زیر تعریف کنیم

$$j(x,t) = \frac{\hbar}{۲im}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi\right) \qquad (۱۱\text{ـ}۳)$$

می‌بینیم که

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x,t) + \frac{\partial}{\partial x}j(x,t) = ۰ \qquad (۱۲\text{ـ}۳)$$

با انتگرال‌گیری به‌دست می‌آوریم

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_{-\infty}^{\infty}dx\ P(x,t) = -\int_{-\infty}^{\infty}dx\frac{\partial}{\partial x}j(x,t) = ۰ \qquad (۱۳\text{ـ}۳)$$

www.arsanjan.blogfa.com

زیرا برای توابع انتگرال‌پذیر مجذوری $j(x,t)$ در بینهایت صفر می‌شود. در ضمن، اگر ناپیوستگیهایی برای $\psi(x)$ در نظر می‌گرفتیم به تکینگیهایی به‌صورت تابع دلتا[۲] در شار، و در نتیجه در چگالی احتمال، می‌رسیدیم که برای یک کمیت فیزیکی مشاهده‌پذیر قابل قبول نیست.

رابطهٔ ۳ـ۱۲ یک قانون پایستگی است، و این واقعیت را بیان می‌کند که هر تغییری در چگالی در ناحیه‌ای از x با تغییری در شار خالص به درون این ناحیه جبران می‌شود:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_a^b dx\, P(x,t) = -\int_a^b dx \frac{\partial}{\partial x} j(x,t) \\ = j(a,t) - j(b,t) \qquad (۱۴_۳)$$

اگر معادلهٔ ۳ـ۱ را به‌صورت زیر بنویسیم

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^۲}{۲m}\frac{\partial^۲\psi(x,t)}{\partial x^۲} + V(x)\psi(x,t) \qquad (۱۵_۳)$$

تعریف $P(x,t)$ و $j(x,t)$ و قانون پایستگی بالا برقرار می‌مانند به‌شرط اینکه $V(x)$ حقیقی باشد. این نتیجه مهم است، زیرا چنانکه بعداً نشان خواهیم داد، ۳ـ۱۵ معادلهٔ شرودینگر برای ذره در پتانسیل $V(x)$ است. تعمیم به سه بعد ساده است. معادلهٔ ۳ـ۱۵ تبدیل می‌شود به

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,y,z,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^۲}{۲m}\left(\frac{\partial^۲}{\partial x^۲}+\frac{\partial^۲}{\partial y^۲}+\frac{\partial^۲}{\partial z^۲}\right)\psi(x,y,z,t) \\ + V(x,y,z)\psi(x,y,z,t)$$

یعنی

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^۲}{۲m}\nabla^۲\psi(\mathbf{r},t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r},t) \qquad (۱۶_۳)$$

و تعمیم معادلهٔ ۳ـ۱۲ عبارت است از

$$\frac{\partial}{\partial t}P(\mathbf{r},t) + \boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = ۰ \qquad (۱۷_۳)$$

که در آن

$$P(\mathbf{r},t) = |\psi(\mathbf{r},t)|^۲ \qquad (۱۸_۳)$$

---

۲. برای بحثی دربارهٔ توابع دلتا به‌پیوست الف مراجعه کنید.

www.arsanjan.blogfa.com

و

$$\mathbf{j}(\mathbf{r},t)=\frac{\hbar}{2im}[\psi^*(\mathbf{r},t)\boldsymbol{\nabla}\psi(\mathbf{r},t)-\boldsymbol{\nabla}\psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)] \qquad (۳_۱۹)$$

مقادیر انتظاری، و تکانهٔ ذره

با داشتن چگالی احتمال $P(x,t)$، مقادیر انتظاری توابع x را می‌توان محاسبه کرد. به‌طور کلی، داریم

$$\langle f(x)\rangle=\int dx\ f(x)P(x,t)=\int dx\psi^*(x,t)f(x)\psi(x,t) \qquad (۳_۲۰)$$

این انتگرال تنها وقتی تعریف می‌شود که همگرا باشد. چون دلیل خاصی برای محدود کردن گسترهٔ تابع $f(x)$ که می‌خواهیم مقدار انتظاری آن‌را محاسبه کنیم وجود ندارد، بیان قبل دربارهٔ رفتار تابع موج در بینهایت را تعمیم می‌دهیم: فرض می‌کنیم تابع موج $\psi(x)$ و تمام مشتقهای آن در بینهایت با سرعت کافی صفر می‌شوند تا مشکلی پیش نیاید.

اگر بخواهیم مقدار انتظاری تکانه را محاسبه کنیم رابطهٔ مربوط به $\langle f(x)\rangle$ قابل استفاده نیست زیرا نمی‌دانیم چگونه می‌توان تکانه را برحسب x نوشت. روش زیر را امتحان می‌کنیم: چون به لحاظ کلاسیک داریم

$$p=mv=m\frac{dx}{dt} \qquad (۳_۲۱)$$

می‌نویسیم

$$\langle p\rangle=m\frac{d}{dt}\langle x\rangle=m\frac{d}{dt}\int dx\ \psi^*(x,t)x\psi(x,t) \qquad (۳_۲۲)$$

یا

$$\langle p\rangle=m\int_{-\infty}^{\infty}dx\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}x\psi+\psi^*x\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)$$

توجه کنید که dx/dt زیر انتگرال وجود ندارد. تنها کمیتی که با زمان تغییر می‌کند $\psi(x,t)$ است، و همین تغییر ψ است که باعث تغییر $\langle x\rangle$ با زمان می‌شود. با استفاده از ۳ـ۱ و همیوغ مختلط آن، به‌دست می‌آوریم

$$\langle p\rangle=\frac{\hbar}{2i}\int_{-\infty}^{\infty}dx\left(\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}x\psi-\psi^*x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right)$$

www.arsanjan.blogfa.com

اما

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}x\psi &= \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial x}x\psi\right) - \frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi - \frac{\partial\psi^*}{\partial x}x\frac{\partial\psi}{\partial x} \\ &= \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial x}x\psi\right) - \frac{\partial}{\partial x}(\psi^*\psi) + \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^* x\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) + \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} + \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} + \psi^* x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\end{aligned}$$

بنابراین، انتگرالده به‌صورت زیر است

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial x}x\psi - \psi^* x\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi^*\psi\right) + 2\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

و در نتیجه

$$\langle p\rangle = \int dx\ \psi^*(x,t)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t) \qquad (۲۳_۳)$$

زیرا انتگرال مشتقهای توابع انتگرال‌پذیر مجذوری صفر می‌شود.

از ۳ـ۲۳ نتیجه می‌گیریم که تکانه با عملگر زیر نمایش داده می‌شود

$$p = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \qquad (۲۴_۳)$$

با پذیرفتن این نتیجه، به نتیجهٔ کلی‌تر زیر می‌رسیم

$$\langle f(p)\rangle = \int dx\ \psi^*(x,t) f\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x,t) \qquad (۲۵_۳)$$

بنابراین، به‌عنوان مثال داریم

$$\langle p^2\rangle = \int dx\ \psi^*(x,t)\left(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\psi(x,t)$$

www.arsanjan.blogfa.com

تابع موج در فضای تکانه

با این نمایش اکنون می‌توان دربارهٔ معنای فیزیکی $\phi(p)$، که در ۳ـ۲ ظاهر می‌شود، بحث کرد. ابتدا متذکر می‌شویم که کافی است این معادله را تنها در $t = ۰$ در نظر بگیریم، زیرا $\phi(p)$ وابستگی زمانی ندارد. با

$$\psi(x) = \frac{۱}{\sqrt{۲\pi\hbar}} \int dp\ \phi(p) e^{ipx/\hbar} = \sqrt{\frac{\hbar}{۲\pi}} \int dk\ \phi(\hbar k) e^{ikx}$$

و با استفاده از فرمول وارون انتگرال فوریه، به‌دست می‌آوریم

$$\phi(\hbar k) = \frac{۱}{\sqrt{۲\pi\hbar}} \int dx\ \psi(x) e^{-ikx}$$

یا

$$\phi(p) = \frac{۱}{\sqrt{۲\pi\hbar}} \int dx\ \psi(x) e^{-ipx/\hbar} \qquad (۲۶\text{ـ}۳)$$

بنابراین، داریم

$$\begin{aligned} \int dp\ \phi^*(p)\phi(p) &= \int dp\ \phi^*(p) \frac{۱}{\sqrt{۲\pi\hbar}} \int dx\ \psi(x) e^{-ipx/\hbar} \\ &= \int dx\ \psi(x) \frac{۱}{\sqrt{۲\pi\hbar}} \int dp\ \phi^*(p) e^{-ipx/\hbar} \qquad (۲۷\text{ـ}۳) \\ &= \int dx\ \psi(x)\psi^*(x) = ۱ \end{aligned}$$

این نتیجه در ریاضیات قضیهٔ پارسوال نامیده می‌شود. بنابه این قضیه، اگر تابعی به ۱ بهنجار شده باشد تبدیل فوریهٔ آن نیز چنین است.

www.arsanjan.blogfa.com

اکنون می‌نویسیم

$$\begin{aligned}\langle p\rangle &= \int dx\ \psi^*(x)\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi(x)}{dx}\\ &= \int dx\ \psi^*(x)\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dp\ \phi(p)e^{ipx/\hbar}\\ &= \int dp\ \phi(p)p\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dx\ \psi^*(x)e^{ipx/\hbar}\\ &= \int dp\ \phi(p)p\phi^*(p)\end{aligned} \qquad (۲۸_۳)$$

این نتیجه، همراه با ۳ـ۲۷، به‌وضوح نشان می‌دهد که $\phi(p)$ را باید تابع موج در فضای تکانه تعبیر کرد، و از این‌رو $|\phi(p)|^2$ چگالی احتمال یافتن ذره با تکانهٔ p را به‌دست می‌دهد. اگر $\psi(x,t)$ جواب معادلهٔ ۳ـ۱۵ باشد، می‌توان $\phi(p,t)$ را با رابطهٔ زیر تعریف کرد

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dp\ \phi(p,t)e^{ipx/\hbar} \qquad (۲۹_۳)$$

این واقعیت که به‌طورکلی $\phi(p,t)$ دارای وابستگی زمانی است رابطه‌های ۳ـ۲۷ و ۳ـ۲۸ یا تعبیر آن‌را تغییر نمی‌دهد. برای اینکه این توهم پیش نیاید که با وجود تقارنی که میان فضاهای x و p، $p = (\hbar/i)(\partial/\partial x)$ عملگر است اما x عملگر نیست، متذکر می‌شویم که x هم در واقع یک عملگر است اما اتفاقاً صورت کاملاً ساده‌ای در فضای x دارد. برای محاسبهٔ $\langle f(x)\rangle$ در فضای تکانه، می‌توان با روشی بسیار شبیه به روش بالا نشان داد که

$$\langle x\rangle = \int dp\ \psi^*(p,t)\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\phi(p,t) \qquad (۳۰_۳)$$

به‌عبارت دیگر، نمایش عملگر x در فضای تکانه به‌صورت زیر است

$$x = i\hbar\frac{\partial}{\partial p} \qquad (۳۱_۳)$$

مثال زیر بعضی از محاسبات را برای یک تابع موج خاص $\psi(x)$ روشن می‌کند.

مثال: ذره‌ای را در نظر بگیرید که تابع موج بهنجارشدهٔ آن عبارت است از

$$\begin{aligned}\psi(x) &= 2\alpha\sqrt{\alpha}\,xe^{-\alpha x} && x > 0\\ &= 0 && x < 0\end{aligned}$$

www.arsanjan.blogfa.com

(الف) چگالی احتمال $P(x)=|\psi(x)|^2$ به‌ازای چه مقداری از x بیشینه می‌شود؟
(ب) مقادیر $\langle x\rangle$ و $\langle x^2\rangle$ را محاسبه کنید.
(ج) احتمال وجود ذره در بازهٔ $x=0$ تا $x=1/\alpha$ را به‌دست آورید.
(د) تابع $\phi(p)$ را تعیین کنید و با استفاده از آن $\langle p\rangle$ و $\langle p^2\rangle$ را به‌دست آورید.

(الف) چگالی احتمال $P(x)$ جایی بیشینه است که $dP(x)/dx=0$:

$$\frac{d}{dx}(x^2e^{-2\alpha x})=2x(1-\alpha x)e^{-2\alpha x}=0$$

یعنی در $x=1/\alpha$.

(ب)

$$\langle x\rangle=\int_0^\infty dx\; x(4\alpha^3x^2e^{-2\alpha x})=\frac{1}{4\alpha}\int_0^\infty dy\; y^3e^{-y}=\frac{3!}{4\alpha}=\frac{3}{2\alpha}$$

$$\langle x^2\rangle=\int_0^\infty dx\; x^2(4\alpha^3x^2e^{-2\alpha x})=\frac{4!}{8\alpha^2}=\frac{3}{\alpha^2}$$

(ج) احتمال مزبور برابر است با

$$P=\int_0^{1/\alpha}dx(4\alpha^3)x^2e^{-2\alpha x}=\frac{1}{2}\int_0^2 dy\; y^2e^{-y}=0.32$$

(د)

$$\phi(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_0^\infty dx\; e^{-ipx/\hbar}(2\alpha\sqrt{\alpha})xe^{-\alpha x}$$

$$=\sqrt{\frac{4\alpha^3}{2\pi\hbar}}\,\frac{d}{d\alpha}\int_0^\infty dx\; e^{-(\alpha+ip/\hbar)x}=-\sqrt{\frac{4\alpha^3}{2\pi\hbar}}\,\frac{1}{(\alpha+ip/\hbar)^2}$$

که از آن به‌دست می‌آوریم

$$\langle p\rangle=\int_{-\infty}^\infty dp\; p\;|\phi(p)|^2=\frac{4\alpha^3}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^\infty dp\frac{p}{(\alpha^2+p^2/\hbar^2)^2}=0$$

$$\langle p^2\rangle=\frac{4\alpha^3}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^\infty dp\frac{p^2}{(\alpha^2+p^2/\hbar^2)^2}=\frac{8\alpha^3}{2\pi\hbar}\int_0^\infty dp\frac{p^2}{(\alpha^2+p^2/\hbar^2)^2}$$

www.arsanjan.blogfa.com

با تعویض متغیر $p = h\alpha \tan\theta$ داریم

$$\langle p^2 \rangle = \frac{4\alpha^2 h^2}{\pi} \int_0^{\pi/2} d\theta \ \sin^2\theta = \alpha^2 h^2$$

معادلهٔ شرودینگر برای ذره در یک پتانسیل

معادلهٔ

$$ih\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{h^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}$$

را می‌توان با توجه به اتحاد $(h/i)(\partial/\partial x) = p_{\rm op}$ به‌صورت زیر نوشت

$$ih\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \frac{p_{\rm op}^2}{2m}\psi(x,t) \qquad (۳۲_۳)$$

عملگر طرف راست انرژی ذرهٔ آزاد است. اگر آن‌را به مورد ذره در یک پتانسیل تعمیم دهیم، می‌توانیم بنویسیم

$$ih\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \left[\frac{p_{\rm op}^2}{2m} + V(x)\right]\psi(x,t) \qquad (۳۳_۳)$$

یا به‌طور صریحتر

$$ih\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{h^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\ \psi(x,t) \qquad (۳۴_۲)$$

این معادله، که تعمیم ۳ـ۱ است، معادلهٔ اساسی مکانیک کوانتومی غیرنسبیتی است. معادلهٔ شرودینگر، اکنون به‌دست آوردیم، می‌توان به‌صورت زیر نیز نوشت

$$ih\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = H\ \psi(x,t) \qquad (۳۵_۳)$$

که در آن H عملگر انرژی است. H را عموماً هامیلتونی می‌نامند زیرا صورت عملگری تابع هامیلتون مکانیک کلاسیک است.

www.arsanjan.blogfa.com

خواهیم دید که عملگرها نقشی اساسی در مکانیک کوانتومی دارند، و به موقع خود چیزهای زیادی دربارهٔ ویژگیهای آنها می‌آموزیم. در این جا چند خاصیت مهم را بیان می‌کنیم:

۱. برخلاف اعداد معمولی، عملگرها همیشه جابه‌جا نمی‌شوند. اگر تعریف کنیم

$$[A,B]=AB-BA \tag{۳۶_۳}$$

آنگاه

$$\begin{aligned}[p,x]\psi(x,t)&=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}x\psi(x,t)-x\frac{h}{i}\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\\&=\frac{h}{i}\psi(x,t)\end{aligned} \tag{۳۷_۳}$$

بنابراین، رابطهٔ جابه‌جایی زیر را به‌دست می‌آوریم

$$[p,x]=\frac{h}{i} \tag{۳۸_۳}$$

این جابه‌جاناپذیری در تبدیل یک تابع کلاسیک $f(x,p)$ به‌صورت عملگری آن ابهام به‌وجود می‌آورد، و این قاعده را می‌پذیریم که $f(x,p)$ باید نسبت به x و p متقارن شود. برای مثال

$$\begin{aligned}xp&\to\frac{۱}{۲}(xp+px)\\x^۲p&\to\frac{۱}{۴}(x^۲p+۲xpx+px^۲)\end{aligned} \tag{۳۹_۳}$$

و غیره. بعداً خواهیم دید که رابطهٔ عدم قطعیت میان x و p ناشی از همین جابه‌جاناپذیری این دو متغیر است.

۲. وجود i در عملگر p ممکن است باعث تردید دربارهٔ حقیقی بودن مقدار انتظاری p شود. اما می‌توان وارسی کرد که $\langle p\rangle$ حقیقی است. داریم

$$\begin{aligned}\langle p\rangle-\langle p\rangle^*&=\int dx\;\psi^*(x)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x}-\int dx\;\psi(x)\left(-\frac{h}{i}\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)\\&=\frac{\hbar}{i}\int dx\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}+\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi\right)\\&=\frac{\hbar}{i}\int dx\frac{\partial}{\partial x}(\psi^*\psi)\\&=۰\end{aligned} \tag{۴۰_۳}$$

www.arsanjan.blogfa.com

و این به‌شرطی است که تابع موج در بینهایت صفر شود، که برای هر تابع انتگرال‌پذیر مجذوری صدق می‌کند. گاهی از تابعهایی استفاده می‌کنیم که انتگرال‌پذیر مجذوری نیستند اما شرایط دوره‌ای مشخصی دارند، برای مثال

$$\psi(x) = \psi(x + L) \qquad (۴۱_۳)$$

اگر کار را به ناحیهٔ $0 \leq x \leq L$ محدود کنیم آنگاه $(h/i)d/dx$ باز هم دارای مقدار انتظاری حقیقی است، زیرا در ۳ـ۴۰ داریم

$$\begin{aligned} \langle p \rangle - \langle p \rangle^* &= \frac{h}{i} \int_0^L dx \frac{\partial}{\partial x} (\psi^*(x)\psi(x)) \\ &= \frac{h}{i}|\psi(L)|^2 - \frac{h}{i}|\psi(0)|^2 = 0 \end{aligned} \qquad (۴۲_۳)$$

عملگری که برای تمام توابع موج قابل قبول دارای مقدار انتظاری حقیقی است عملگر هرمیتی نامیده می‌شود، و از این‌رو p نیز مانند x یک عملگر هرمیتی است.[۳] همچنین p^2 یک عملگر هرمیتی است،[۴] و اگر $V(x)$ حقیقی باشد هامیلتونی نیز هرمیتی است:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \qquad (۴۳_۳)$$

به‌طور خلاصه:

۱. وابستگی زمانی تابع موج با معادلهٔ دیفرانسیل جزئی مرتبهٔ اول زیر داده می‌شود

$$ih\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = H\ \psi(x,t) \qquad (۴۴_۳)$$

که در آن H عملگر $p^2/2m + V(x)$ است.

۲. تابعهای موج به تابعهای انتگرال‌پذیر مجذوری محدود می‌شوند.

۳. چگالی احتمال برای یافتن ذره در x عبارت است از

$$P(x,t) = |\psi(x,t)|^2 \qquad (۴۵_۳)$$

---

۳. مختصری از مبانی ریاضی عملگرها در پیوست ب بیان شده است.

۴. از این پس عملگر تکانه را با p (بدون شاخص op) نشان می‌دهیم مگر در مواردی که امکان اشتباه با کمیت p وجود داشته باشد.

www.arsanjan.blogfa.com

۴. تابع $\phi(p,t)$ که در رابطهٔ زیر وارد می‌شود

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp\ \phi(p,t) e^{ipx/\hbar} \qquad (۴۶_۳)$$

تابع موج در فضای تکانه است، و چگالی احتمال برای یافتن ذره‌ای با تکانهٔ p برابر است با $|\phi(p,t)|^2$.

۵. تکانهٔ p و مکان x عملگر هستند، یعنی کمیتهایی هستند که چون با هم جابه‌جا نمی‌شوند با اعداد تفاوت دارند. در فضای x، عملگر تکانه به‌صورت زیر است

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \qquad (۴۷_۳)$$

و در فضای p، صورت عملگر x عبارت است از

$$x = ih\frac{\partial}{\partial p} \qquad (۴۸_۳)$$

و هر دو با رابطهٔ جابه‌جایی اساسی زیر سازگار هستند

$$[p,x] = \frac{\hbar}{i} \qquad (۴۹_۳)$$

اکنون برای بررسی کمی مکانیک کوانتومی آمادگی داریم. مفهوم بستهٔ موج به عنوان نمایشگر ذره را کنار گذاشته‌ایم. این مفهوم در موجه کردن معادلهٔ شرودینگر مفید بود، اما اکنون این $\psi(x,t)$ و تعبیر احتمالاتی آن است که می‌گوید ذره کجا هست، بدون اینکه ذره "متشکل از امواج" در نظر گرفته شود.

مسائل

۳ـ۱ با محاسبهٔ صریح نشان دهید

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\ \psi^*(x) x \psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dp\ \phi^*(p) \left(ih\frac{\partial}{\partial p}\right) \phi(p)$$

[راهنمایی: رفتار $\phi(p)$ را در $p = \pm\infty$ در نظر بگیرید.]

۳ـ۲ نشان دهید قانون پایستگی ۳ـ۱۱، که در آن $\psi(x,t)$ جواب معادلهٔ شرودینگر ۳ـ۱۵ با

www.arsanjan.blogfa.com

پتانسیل $V(x)$ است، وقتی برقرار است که $V(x)$ حقیقی باشد.

۳ـ۳ فرض کنید $V(x)$ مختلط است. رابطه‌ای برای $\partial P(x,t)/\partial t$ و $(d/dt)\int dx P(x,t)$ به‌دست آورید. برای جذب، کمیت دوم باید منفی باشد. از اینجا چه نتیجه‌ای دربارهٔ $V(x)$ می‌گیرید؟

۴ـ۳ فرض کنید

$$\psi(x) = \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{-1/4} e^{-\alpha x^2/2}$$

(الف) مقدار $\langle x^n \rangle$ را برای nهای زوج محاسبه کنید. (چرا $\langle x^n \rangle$ برای nهای فرد صفر می‌شود؟)

(ب) بعداً خواهیم دید که در مکانیک کوانتومی عدم قطعیت در مکان را می‌توان با رابطهٔ $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$ توصیف کرد. Δx را برای تابع موج داده شده به‌دست آورید.

۵ـ۳ (الف) تابع $\phi(p)$ را برای دستگاهی که با تابع موج مسئلهٔ ۳ـ۴ توصیف می‌شود محاسبه کنید.

(ب) مقدار $\langle p^n \rangle$ را محاسبه کنید و نشان دهید که به‌ازای nهای فرد صفر می‌شود.

(ج) با فرض اینکه عدم قطعیت در تکانه با $\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$ داده می‌شود، Δp را به‌دست آورید.

(د) با استفاده از نتیجهٔ بالا و مقدار Δx که در مسئلهٔ ۳ـ۴ محاسبه کرده‌اید مقدار حاصلضرب $\Delta p\, \Delta x$ را تعیین کنید.

۶ـ۳ مقادیر $\langle x \rangle$، $\langle x^2 \rangle$ و Δx، و همچنین $\langle p \rangle$، $\langle p^2 \rangle$ و Δp، را برای دستگاهی محاسبه کنید که با تابع‌موج بهنجارشدهٔ زیر توصیف می‌شود

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2a^3}{\pi}}\, \frac{1}{x^2 + a^2}$$

با استفاده از این نتیجه‌ها، $\Delta p\, \Delta x$ را به‌دست آورید.

[تذکر: با استفاده از انتگرالهای پربندی می‌توان نشان داد

$$\varphi(p) = \sqrt{\frac{a}{h}} e^{-a|p|/h}$$

از این نتیجه، یا

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{x^2 + a^2} = \pi (a^2)^{-1/2}$$

www.arsanjan.blogfa.com

(و مشتقهای آن نسبت به $a^۲$) می‌توان برای محاسبهٔ انتگرالها استفاده کرد.]

۳ـ۷ مقادیر $\langle p \rangle$ و $\langle p^۲ \rangle$ را برای تابع موج $\psi(x) = R(x)e^{iS(x)/\hbar}$، که در آن $R(x)$ و $S(x)$ توابع حقیقی از x هستند، به‌دست آورید.

۳ـ۸× نشان دهید رابطهٔ عملگری زیر برقرار است

$$e^{ipa/\hbar} x e^{-ipa/\hbar} = x + a$$

عملگر e^A با رابطهٔ زیر تعریف می‌شود

$$e^A = \sum_{n=۰}^{\infty} A^n/n!$$

[راهنمایی: $e^{ipa/\hbar} x e^{-ipa/\hbar} f(p)$ را، که در آن $f(p)$ یک تابع اختیاری از p است، محاسبه کنید و نمایش $x = ih\, d/dp$ را به‌کار ببرید.]

۳ـ۹ $\psi(\theta)$ را که تابعی از متغیر زاویه‌ای θ است و به بازهٔ $-\pi \leq \theta \leq \pi$ محدود می‌شود در نظر بگیرید. اگر شرط $\psi(\pi) = \psi(-\pi)$ برقرار باشد، نشان دهید عملگر

$$L = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\theta}$$

دارای مقدار انتظاری حقیقی است.

۳ـ۱۰ $\phi(p)$ را که تابع موج یک ذره در فضای تکانه است در نظر بگیرید. اگر $\phi(p)$ تنها برای مقادیر مثبت p تعریف شده باشد، این تابع باید چه شرایطی را برآورده کند تا مقدار انتظاری x حقیقی باشد؟ (از ۳ـ۳۱ استفاده کنید.)

www.arsanjan.blogfa.com

۴

ویژه‌تابعها و ویژه‌مقدارها

معادلهٔ شرودینگر وابسته به زمان را که در فصل ۳ به‌دست آوردیم در نظر بگیرید:

$$ih\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{h^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\,\psi(x,t) \qquad (۱\text{-}۴)$$

این معادله را با تبدیل به یک جفت معادلهٔ دیفرانسیل معمولی برحسب یک متغیر می‌توان حل کرد. می‌نویسیم

$$\psi(x,t) = T(t)u(x) \qquad (۲\text{-}۴)$$

که ایجاب می‌کند

$$ihu(x)\frac{dT(t)}{dt} = \left[-\frac{h^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2} + V(x)u(x)\right]T(t)$$

با تقسیم بر $u(x)\,T(t)$ به‌دست می‌آوریم

$$ih\frac{dT(t)/dt}{T(t)} = \frac{-(h^2/2m)(d^2u(x)/dx^2) + V(x)u(x)}{u(x)} \qquad (۳\text{-}۴)$$

www.arsanjan.blogfa.com

این معادله تنها در صورتی صادق است که هر دو طرف آن برابر با یک مقدار ثابت باشند که آن‌را E می‌نامیم. جواب معادلهٔ

$$ih\frac{dT(t)}{dt} = ET(t) \qquad (۴_۴)$$

عبارت است از

$$T(t) = Ce^{-۲Et/h} \qquad (۵_۴)$$

که در آن C یک ثابت است. معادلهٔ دیگر به‌صورت زیر است

$$-\frac{h^۲}{۲m}\frac{d^۲u(x)}{dx^۲} + V(x)u(x) = Eu(x) \qquad (۶_۴)$$

این معادله را غالباً معادلهٔ شرودینگر مستقل از زمان می‌نامند، و دارای سرشتی کاملاً متفاوت از معادلهٔ ۴ـ۱ است. معادلهٔ ۴ـ۱ تحول زمانی $\psi(x,t)$ را توصیف می‌کند؛ ۴ـ۶ یک معادلهٔ ویژه‌مقداری است.

معادله‌های ویژه‌مقداری

بحث معادله‌های ویژه‌مقداری به بررسی دقیقتر عملگرها، که در فصل قبل ارائه شد، نیاز دارد. به‌طور کلی، عملگری که روی یک تابع عمل می‌کند آن‌را به تابع دیگری تبدیل می‌کند. چند مثال زیر را در نظر بگیرید

$$\begin{aligned}
Of(x) &= f(x) + x^۲ \\
Of(x) &= [f(x)]^۲ \\
Of(x) &= f(۳x^۲ + ۱) \\
Of(x) &= [df(x)/dx]^۳ \\
Of(x) &= df(x)/dx - ۲f(x) \\
Of(x) &= \lambda f(x)
\end{aligned} \qquad (۷_۴)$$

تمام این مثالها در این خاصیت با هم مشترک هستند که با فرض معلوم بودن تابع $f(x)$ قاعده‌ای داریم که $Of(x)$ را تعیین می‌کند. ردهٔ خاصی از عملگرها وجود دارند که عملگرهای خطی

www.arsanjan.blogfa.com

نامیده می‌شوند (این عملگرها را با L نشان می‌دهیم تا آنها را از عملگرهای عام O متمایز کنیم). عملگرهای خطی این خاصیت را دارند که

$$L[f_1(x) + f_2(x)] = Lf_1(x) + Lf_2(x) \qquad (۸\text{ـ}۴)$$

و، به‌ازای عدد مختلط اختیاری c،

$$Lcf(x) = cLf(x) \qquad (۹\text{ـ}۴)$$

بنابراین، در چند مثال بالا عملگرهای سوم، پنجم و ششم خطی هستند.

یک عملگر خطی یک تابع را به تابع دیگری تبدیل می‌کند، برای مثال،

$$Lf(x) = \frac{df(x)}{dx} - ۲f(x)$$

آموزنده است که تابعها را مانستهٔ بردارهای فضای سه‌بعدی در نظر بگیریم. در اینجا کار یک عملگر تبدیل یک بردار به بردار دیگری است. در مورد خاصی که تمام بردارها دارای طول واحد هستند، یک عملگر یک نقطه روی کرهٔ واحد را به نقطهٔ دیگری روی این کره تبدیل می‌کند. در این مثال خاص (و بسیار مناسب)، عملگر می‌تواند چرخش حول یک محور باشد. فرض کنید عملگر مزبور چرخشی به‌اندازهٔ مثلاً ۳۰° حول محور z است. به‌آسانی می‌توان دید که برای بردارهای مختلف تحت این عمل چه روی می‌دهد (شکل ۴ـ۱). دو بردار با ویژگی خاص وجود دارند: بردارهای یکه به سمت قطبهای شمال و جنوب تحت این چرخش به خودشان تبدیل می‌شوند. این یک مثال خاص از یک معادلهٔ عملگری مانند ۴ـ۶ است، که می‌توان آن‌را به‌صورت زیر نوشت

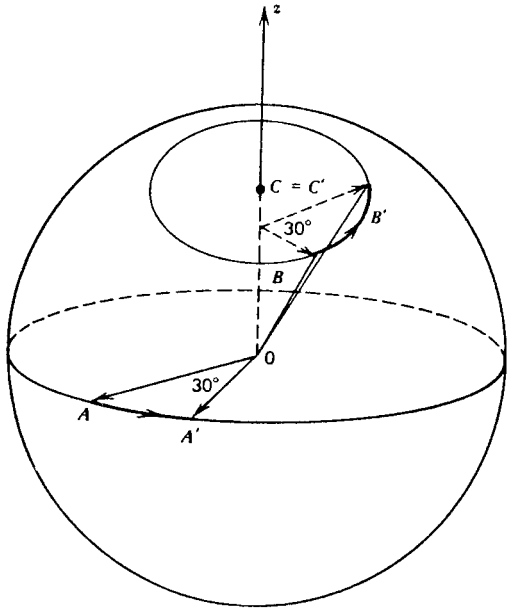
$$Hu_E(x) = Eu_E(x) \qquad (۱۰\text{ـ}۴)$$

بنابه این معادله، وقتی هامیلتونی H روی ردهٔ خاصی از تابعها عمل می‌کند، دوباره همان تابعی که روی آن عمل کرده است را می‌دهد که در یک مقدار ثابت ضرب شده است. این مقدار ثابت را ویژه‌مقدار می‌نامند. جواب معادله به E بستگی دارد، و از این‌رو آن‌را با E نشانگذاری کرده‌ایم. این جواب $u_E(x)$ را ویژه‌تابع عملگر H، مربوط به ویژه‌مقدار E، می‌نامند. چنانکه خواهیم دید، ویژه‌مقدارها می‌توانند گسسته باشند یا یک پیوستار تشکیل دهند.

مثال: مسئلهٔ ویژه‌مقداری $Lf(x) = \lambda f(x)$ را حل کنید که در آن، در ناحیهٔ $-a \le x \le a$، داریم

$$Lf(x) = \frac{h}{i}\frac{df(x)}{dx} - \beta x f(x)$$

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۴ـ۱ نمایش عملگری که تمام بردارهای واقع بر کرهٔ واحد را 30° می‌چرخاند: برای بردارهای روی استوا $(A - A')$، در یک عرض میانه $(B - B')$، و در قطب $(C - C'' = C')$.

و شرط مرزی $f(a) = f(-a)$ برقرار است

حل: این معادله را می‌توان به‌صورت زیر درآورد

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{i}{h}(\beta x + \lambda) f(x)$$

یا

$$\frac{df}{f} = \frac{i}{h}(\beta x + \lambda) dx$$

جواب عبارت است از

$$\ln f(x) = \frac{i}{h}(\beta x^2/2 + \lambda x) + \text{const.}$$

یا

$$f(x) = A\, e^{i\beta x^2/2h + i\lambda x/\hbar}$$

www.arsanjan.blogfa.com

شرط $f(a) = f(-a)$ ایجاب می‌کند $e^{۲i\lambda a} = ۱$. بنابراین، ویژه‌مقدارها با رابطهٔ زیر داده می‌شوند

$$\lambda = \pm\frac{n\pi}{a} \qquad (n = ۰, ۱, ۲, ۳, \dots)$$

جواب ۴ـ۲ به‌صورت $u_E(x)e^{-iEt/\hbar}$ است. چون معادلهٔ ۴ـ۱ خطی است، مجموعی از این نوع جوابها، مربوط به مقادیر مجاز E، باز هم یک جواب است. بنابراین، عمومی‌ترین جواب معادلهٔ ۴ـ۱ عبارت است از

$$\psi(x,t) = \sum_n C_n\, u_n(x)e^{-iE_n t/\hbar} + \int dE\; C(E)u_E(x)e^{-iEt/\hbar} \qquad (۱۱\text{ـ}۴)$$

که در آن $u_n(x)$ها مجموعهٔ کامل ویژه‌تابعهای مربوط به ویژه‌مقدارهای گسستهٔ E_n و $u_E(x)$ها ویژه‌تابعهای مربوط به ویژه‌مقدارهای پیوستهٔ E هستند. C_nها ثابتهای اختیاری و $C(E)$ها تابعهای اختیاری از E هستند. این ضرایب به این قید وابسته‌اند که $\psi(x,t)$ باید انتگرال‌پذیر مجذوری باشد.

ویژه‌مقدارهای عملگر H را ویژه‌مقدارهای انرژی می‌نامند، و دلیل آن‌را می‌توان از تعریف زیر استنباط کرد

$$H = \frac{p_{\text{op}}^۲}{۲m} + V(x) \qquad (۱۲\text{ـ}۴)$$

قبل از بررسی یک مثال بسیار ساده اما آموزنده، متذکر می‌شویم که اگر پتانسیل V تابع صریحی از زمان باشد نمی‌توان معادله را جداسازی کرد. بعداً خواهیم دید که در این مورد انرژی یک ثابت حرکت نیست.

مسئلهٔ ویژه‌مقداری برای ذره در جعبه

۴ـ۶ را با پتانسیل زیر در نظر می‌گیریم

$$\begin{aligned} V(x) &= \infty & x &< ۰ \\ &= ۰ & ۰ &< x < a \\ &= \infty & a &< x \end{aligned} \qquad (۱۳\text{ـ}۴)$$

از ۴ـ۶ دیده می‌شود که

$$\begin{aligned} u(x) &= ۰ & x &< ۰ \\ &= ۰ & a &< x \end{aligned} \qquad (۱۴\text{ـ}۴)$$

و داخل چاه، که در آن $V(x) = ۰$ معادلهٔ ۴ـ۶ را به‌صورت زیر می‌نویسیم

www.arsanjan.blogfa.com

$$\frac{d^۲u(x)}{dx^۲} + \frac{۲mE}{h^۲}u(x) = ۰ \qquad (۱۵_۴)$$

ابتدا توجه کنید که اگر $E < ۰$، این معادله به‌صورت زیر در می‌آید

$$\frac{d^۲u(x)}{dx^۲} - \kappa^۲u(x) = ۰$$

که در آن $\kappa^۲ = ۲m|E|/h^۲$. عمومی‌ترین جواب یک ترکیب خطی از $e^{\kappa x}$ و $e^{-\kappa x}$ است، و در حالی‌که $\sinh \kappa x$ در $x = ۰$ صفر می‌شود در $x = a$ صفر نیست. بنابراین، E نمی‌تواند منفی باشد. با Eی مثبت و نمادنگاری

$$k^۲ = \frac{۲mE}{h^۲} \qquad (۱۶_۴)$$

معادلهٔ ۴ـ۱۵ به‌صورت زیر در می‌آید

$$\frac{d^۲u(x)}{dx^۲} + k^۲u(x) = ۰ \qquad (۱۷_۴)$$

عمومی‌ترین جواب به‌صورت $A \sin kx + B \cos kx$ است، اما از شرط $u(۰) = ۰$ نتیجه می‌گیریم که جواب تنها عبارت است از

$$u(x) = A \sin kx \qquad (۱۸_۴)$$

شرط $u(a) = ۰$ ایجاب می‌کند که

$$ka = n\pi \qquad n = ۱, ۲, ۳, \ldots \qquad (۱۹_۴)$$

بنابراین، ویژه‌مقدارهای انرژی با رابطهٔ زیر داده می‌شوند

$$E_n = \frac{h^۲k^۲}{۲m} = \frac{h^۲\pi^۲n^۲}{۲ma^۲} \qquad n = ۱, ۲, ۳, \ldots \qquad (۲۰_۴)$$

به‌سادگی می‌توان دید که جوابها به‌ازای $A = \sqrt{۲/a}$ بهنجار شده‌اند:

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{۲}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \qquad (۲۱_۴)$$

www.arsanjan.blogfa.com

این جوابها دارای این ویژگی هستند که

$$\begin{aligned}\int_{\circ}^{a} dx\, u_n^*(x)u_m(x) &= \int_{\circ}^{a} dx \frac{۲}{a}\sin\frac{n\pi x}{a}\sin\frac{m\pi x}{a}\\ &= \frac{۱}{a}\int_{\circ}^{a} dx\,\left\{\cos\frac{(n-m)\pi x}{a} - \cos\frac{(n+m)\pi x}{a}\right\}\\ &= \frac{\sin(n-m)\pi}{(n-m)\pi} - \frac{\sin(n+m)\pi}{(n+m)\pi} \qquad (۲۲\text{-}۴)\\ &= ۰ \quad ، \quad n \neq m \quad \text{به‌ازای}\\ &= ۱ \quad ، \quad n = m \quad \text{به‌ازای}\end{aligned}$$

این نتیجه که

$$\int_{\circ}^{a} dx\, u_n^*(x)u_m(x) = \delta_{mn} \qquad (۲۳\text{-}۴)$$

نشان می‌دهد ویژه‌تابعهای مربوط به ویژه‌مقدارهای مختلف متعامد هستند. اگر ویژه‌تابعها درست بهنجار شده باشند، چنانکه در اینجا هستند، ۴ـ۲۳ را شرط راست‌هنجاری می‌نامند. چون جوابهای بالا حقیقی‌اند، همیوغ‌گیری مختلط در این معادله واقعاً لازم نیست، اما آن‌را برای سازگاری با بیان عامتر درج کرده‌ایم که وقتی به‌کار می‌رود که ویژه‌تابعها مختلط هستند. این مورد را در فصل ۶ نشان می‌دهیم.

بعضی اطلاعات فیزیکی را می‌توان از ویژه‌جوابها به‌دست آورد:

۱. حالت مربوط به کمترین انرژی، حالت پایه، با $u_۱(x)$ توصیف می‌شود، و کمترین انرژی برابر است با

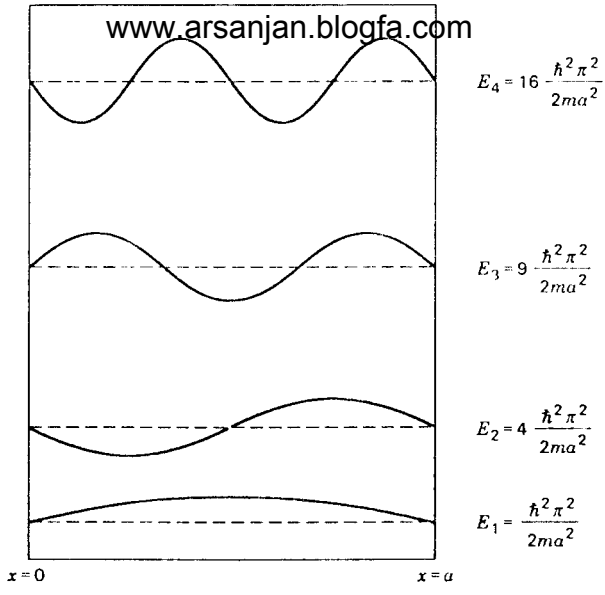
$$E_۱ = \frac{\pi^۲\hbar^۲}{۲ma^۲} \qquad (۲۴\text{-}۴)$$

توجه کنید که از دیدگاه کلاسیک کمترین انرژی باید مربوط به ذرهٔ ساکن در چاه باشد، و با $p = ۰$ و $V(x) = ۰$ مجموع انرژیهای جنبشی و پتانسیل باید صفر باشد. اما در اینجا می‌بینیم یک انرژی کمینه وجود دارد.

۲. چون جوابها حقیقی هستند داریم

$$\langle p \rangle = ۰ \qquad (۲۵\text{-}۴)$$

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۴ـ۲ ویژه‌جوابها برای ذره در جعبه.

زیرا به‌ازای هر تابع حقیقی انتگرال $\int dx\ R(x)h/i(dR(x)/dx)$ انگاری است، که این با شرط $\langle p\rangle = \langle p\rangle^*$ ناسازگار است مگر اینکه $\langle p\rangle = 0$. از طرف دیگر، $\langle p^2\rangle$ صفر نمی‌شود. در واقع، چون داخل جعبه داریم $p^2 = 2mE$، به‌ازای ویژه‌تابع $u_n(x)$ به‌دست می‌آوریم

$$\langle p^2\rangle = 2mE_n = \frac{h^2\pi^2n^2}{a^2} \qquad (۲۶_۴)$$

۳. چنانکه از شکل ۴ـ۲ می‌توان دید، هر چه تعداد گرهها (صفرها) در یک جواب بیشتر باشد انرژی مربوط به آن بیشتر است. این موضوع قابل درک است، زیرا انرژی جنبشی با خمیدگی جوابها زیاد می‌شود. مقدار انتظاری انرژی جنبشی عبارت است از

$$\begin{aligned}\langle K\rangle &= -\frac{h^2}{2m}\int dx\ u^*(x)\frac{d^2u(x)}{dx^2}\\ &= -\frac{h^2}{2m}\int dx\ \left[\frac{d}{dx}\left(u^*(x)\frac{du(x)}{dx}\right) - \frac{du^*(x)}{dx}\ \frac{du(x)}{dx}\right]\end{aligned} \qquad (۲۷_۴)$$

جملهٔ اول صفر می‌شود زیرا $u(x)$ و مشتقهای آن در بینهایت صفر می‌شوند، و در نتیجه باقی

www.arsanjan.blogfa.com

می‌ماند

$$\langle K \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \int dx \left| \frac{du(x)}{dx} \right|^2 \qquad (۲۸_۴)$$

که اگر $u(x)$ زیاد تغییر کند بزرگ است.

اصل بسط و تعبیر فیزیکی آن

بنابه قضیهٔ فوریه، هر تابع $\psi(x)$ را که برای آن شرایط مرزی $\psi(0) = \psi(a) = 0$ صادق باشند می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$\psi(x) = \sum C_n \sin \frac{n\pi x}{a} \qquad (۲۹_۴)$$

چون ویژه‌تابعهای H برای چاه نامتناهی با $\sin n\pi x/a$ متناسب‌اند، رابطهٔ بالا را برحسب ویژه‌تابعهای $u_n(x)$ می‌نویسیم:

$$\psi(x) = \sum A_n u_n(x) \qquad (۳۰_۴)$$

ضرایب A_n را می‌توان از رابطهٔ راست‌هنجاری ۴ـ۲۳ به‌دست‌آورد. در واقع، داریم

$$\int_0^a dx\, u_m^*(x)\psi(x) = \int_0^a dx\, u_m^*(x) \sum A_n u_n(x)$$
$$= \sum A_n \int_0^a dx\, u_m^*(x) u_n(x) = \sum A_n \delta_{mn}$$

و بنابراین،

$$A_n = \int_0^a dx\, u_n^*(x)\psi(x) \qquad (۳۱_۴)$$

مانند مورد بستهٔ موج آزاد، می‌توان تحول زمانی این تابع‌موج اولیهٔ اختیاری $\psi(x)$ را محاسبه کرد. چون هر یک از ویژه‌تابعهای $u_n(x)$ وابستگی زمانی خاص خود را به‌صورت $e^{-iE_n t/\hbar}$ اختیار می‌کند، رابطهٔ کلی زیر را داریم

$$\psi(x,t) = \sum A_n u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} \qquad (۳۲_۴)$$

www.arsanjan.blogfa.com

می‌توان ویژه‌تابعها را به‌مثابه مجموعه کاملی از بردارهای یکه متعامد $\mathbf{i}_k$ در یک فضای برداری در نظر گرفت. هر بردار $\mathbf{a}$ را می‌توان به‌صورت $\mathbf{a} = a_1\mathbf{i}_1 + a_2\mathbf{i}_2 + \cdots$ نوشت، و ضریبهای a_k با استفاده از راست‌هنجاری بردارهای یکه $(\mathbf{i}_k \cdot \mathbf{i}_m = \delta_{km})$ از $a_k = \mathbf{a} \cdot \mathbf{i}_k$ به‌دست می‌آیند.

برای تعبیر ضریبهای A_n، مقدار انتظاری انرژی را در یک حالت اختیاری $\psi(x)$ محاسبه می‌کنیم. چون داخل جعبه داریم $H = p^2/2m$ و خارج از آن $\psi(x) = 0$، و از آنجا که

$$Hu_n(x) = E_n u_n(x)$$

به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}\langle H\rangle = \int_0^a dx\ \psi^*(x)H\psi(x) &= \int_0^a dx\ \psi^*(x)H \sum A_n u_n(x)\\ &= \sum A_n \int_0^a dx\ \psi^*(x)E_n u_n(x) \qquad (۳۳\text{-}۴)\\ &= \sum E_n|A_n|^2\end{aligned}$$

علاوه بر این، شرط

$$\int_0^a dx\ \psi^*(x)\psi(x) = 1 \qquad (۳۴\text{-}۴)$$

ایجاب می‌کند که

$$1 = \int_0^a dx\ \psi^*(x)\sum A_n u_n(x) = \sum A_n A_n^* = \sum |A_n|^2 \qquad (۳۵\text{-}۴)$$

از معادلهٔ ۴ـ۳۳ و شرط بهنجارش ۴ـ۳۵ استنباط می‌شود که $|A_n|^2$ که در آن

$$A_n = \int dx\ u_n^*(x)\psi(x) \qquad (۳۶\text{-}۴)$$

باید احتمال اینکه از اندازه‌گیری انرژی برای حالت $\psi(x)$ ویژه‌مقدار E_n به‌دست آید تعبیر کرد. برای تکمیل تعبیر A_n باید این حکم را پذیرفت که تابع‌موج دستگاه، $\psi(x)$، هر چه باشد ویژه‌مقدارهای E_n تنها نتیجه‌های ممکن اندازه‌گیری انرژی هستند.

اگر دستگاه به‌عنوان مثال در ویژه‌حالت $u_k(x)$ باشد آنگاه از اندازه‌گیری انرژی الزاماً E_k به‌دست می‌آید. چون از تکرار اندازه‌گیری باید همان جواب اول به‌دست آید (وگرنه چگونه می‌توان

www.arsanjan.blogfa.com

درستی یک اندازه‌گیری را امتحان کرد؟)، ناچار باید نتیجه گرفت همینکه اندازه‌گیری انرژی روی یک حالت کلی $\psi(x)$ انجام شد، و مقدار E_k به‌دست آمد، این اندازه‌گیری حالت را به $u_k(x)$ تغییر می‌دهد. اندازه‌گیری در مکانیک کوانتومی عملاً یک فرایند دسته‌بندی است. وقتی می‌گوییم دستگاهی با تابع‌موج $\psi(x)$ توصیف می‌شود، مجموعهٔ بزرگی از دستگاههای یکسان (یک مجموعهٔ آماری) را در نظر داریم که همگی با $\psi(x)$ توصیف می‌شوند. اندازه‌گیریهای انرژی روی اعضای این مجموعه تعیین می‌کنند که چند تا از آنها دارای انرژی E_1، چند تا دارای انرژی E_2 هستند، و الی آخر. اندازه‌گیری دستگاهها را به مجموعه‌هایی دسته‌بندی می‌کند که، پس از اندازه‌گیری، دارای توابع موج $u_1(x)$، $u_2(x)$، و غیره هستند.

این حکمها به مسئلهٔ ذره در جعبه منحصر نیستند. آنها برای دستگاههای کلی‌تر با انرژی پتانسیل $V(x)$، و همچنین برای مشاهده‌پذیرهایی (علاوه بر انرژی)، مانند تکانه، تکانهٔ زاویه‌ای، و غیره، صادق‌اند.

مثال: ذره‌ای را در یک جعبه در نظر بگیرید. تابع‌موج ذره به‌صورت زیر است

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A(x/a) && 0 < x < a/2 \\ &= A(1 - x/a) && a/2 < x < a \end{aligned}$$

که در آن $A = \sqrt{12/a}$، و در نتیجه $\int_0^a dx|\psi(x)|^2 = 1$. این احتمال را محاسبه کنید که اندازه‌گیری انرژی ویژه‌مقدار E_n را به‌دست دهد.

حل: باید ضریب بسط A_n را محاسبه کنیم:

$$\begin{aligned} A_n &= \int_0^a dx\ \psi(x)\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a} \\ &= \frac{\sqrt{24}}{a}\left[\int_0^{a/2} dx\left(\frac{x}{a}\right)\sin\frac{n\pi x}{a} + \int_{a/2}^a dx\left(1 - \frac{x}{a}\right)\sin\frac{n\pi x}{a}\right] \end{aligned}$$

با تعویض متغیر $\pi x/a = u$ در انتگرال اول و $\pi x/a = \pi - u$ در انتگرال دوم، به‌دست می‌آوریم

$$A_n = \frac{\sqrt{24}}{\pi}\int_0^{\pi/2} du\frac{u}{\pi}\sin nu(1 - (-1)^n)$$

با توجه به عبارت داخل پرانتز، می‌بینیم که A_n به‌ازای nهای زوج صفر می‌شود. انتگرال را می‌توان

www.arsanjan.blogfa.com

به آسانی محاسبه کرد، و در نتیجه تنها به ازای nهای فرد داریم

$$A_n = \frac{\sqrt{۲۴}}{\pi} ۲ \frac{۱}{\pi n^۲} (-۱)^{n+۱}$$

بنابراین،

$$|A_n|^۲ = \frac{۹۶}{\pi^۴ n^۴} \qquad \text{به‌ازای } n \text{ فرد،}$$
$$= ۰ \qquad \text{به‌ازای } n \text{ زوج،}$$

با استفاده از این واقعیت که $\sum_{\text{همه}} n^{-۴} = \pi^۴/۹۰$ و

$$\sum_{\text{همه}} n^{-۴} = \sum_{\text{زوج}} n^{-۴} + \sum_{\text{فرد}} n^{-۴} = \sum_{\text{فرد}} n^{-۴} + (۱/۱۶) \sum_{\text{همه}} n^{-۴}$$

به‌آسانی می‌توان دید که مجموع تمام احتمالها برابر با ۱ است:

$$\frac{۹۶}{\pi^۴} \sum_{\text{فرد}} n^{-۴} = \frac{۹۶}{\pi^۴} \left(۱ - \frac{۱}{۱۶} \right) \sum_{\text{همه}} n^{-۴} = \frac{۹۶}{\pi^۴} \cdot \frac{۱۵}{۱۶} \cdot \frac{\pi^۴}{۹۰} = ۱$$

ویژه‌تابع تکانه، و ذرهٔ آزاد

عملگر انرژی H تنها عملگری‌نیست که دارای ویژه‌تابع و ویژه‌مقدار است. می‌خواهیم معادلهٔ ویژه‌مقداری برای عملگر تکانه، یعنی معادلهٔ

$$p_{\text{op}} u_p(x) = p u_p(x) \qquad (۳۷_۴)$$

را حل کنیم. چون $p_{\text{op}} = (h/i)(d/dx)$، این معادله به‌صورت زیر در می‌آید

$$\frac{du_p(x)}{dx} = \frac{ip}{h} u_p(x) \qquad (۳۸_۴)$$

و جواب آن عبارت است از

$$u_p(x) = C' e^{ipx/h} \qquad (۳۹_۴)$$

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن C ثابتی است که باید با بهنجارش به‌دست آوریم، و ویژه‌مقدار p حقیقی است، که در نتیجه ویژه‌تابع در $+\infty$ یا $-\infty$ نامتناهی نمی‌شود. این تنها قید روی p است: می‌گوییم $p_{\rm op}$ دارای طیف پیوسته است. بنابه تشابه با ۴ـ۲۳، می‌توان انتظار داشت که ویژه‌تابعها از یک شرط راست‌هنجاری پیروی کنند. می‌بینیم که

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} dx\; u^*_{p'}(x)u_p(x) &= |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\; e^{i(p-p')x/\hbar} \\ &= 2\pi|C|^2\hbar\delta(p-p')\end{aligned} \qquad (۴۰\text{ـ}۴)$$

با انتخاب

$$u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \qquad (۴۱\text{ـ}۴)$$

۴ـ۴۰ به‌صورت زیر در می‌آید

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\; u^*_{p'}(x)u_p(x) = \delta(p-p') \qquad (۴۲\text{ـ}۴)$$

تفاوت این نتیجه با ۴ـ۲۳ تنها در آن است که دلتای کرونکر δ_{mn}، که برای شاخصهای گسسته مناسب است، با تابع دلتای دیراک $\delta(p-p')$ برای شاخصهای پیوسته تعویض شده است.

این حکم که هر بستهٔ موج $\psi(x)$ را می‌توان برحسب مجموعهٔ کاملی از ویژه‌تابعها بسط داد در اینجا نیز قابل اثبات است. برای به‌دست آوردن مانستهٔ ۴ـ۳۰، باید در نظر داشت که روی شاخص پیوستهٔ p جمع می‌زنیم، و از این‌رو می‌نویسیم

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dp\; \phi(p) \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \qquad (۴۳\text{ـ}۴)$$

بنابه تعبیر تلویحی در ۴ـ۳۶، مجذور قدرمطلق

$$\phi(p) = \int dx \left(\frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\right)^* \psi(x) \qquad (۴۴\text{ـ}۴)$$

یعنی $|\phi(p)|^2$ این احتمال را تعیین می‌کند که از اندازه‌گیری تکانه برای بستهٔ موج اختیاری $\psi(x)$ ویژه‌مقدار p به‌دست آید. بدین‌ترتیب، حدسی که در فصل ۳ دربارهٔ $\phi(p)$ زدیم توجیه می‌شود.

www.arsanjan.blogfa.com

مثال: ذره‌ای در حالت پایهٔ یک جعبه با دیواره‌هایی در $x = 0$ و $x = a$ قرار دارد. دیواره‌های جعبه ناگهان به $\pm\infty$ برده می‌شوند، و در نتیجه ذره آزاد می‌شود. احتمال اینکه ذره تکانه‌ای در بازهٔ $(p, p + dp)$ داشته باشد چقدر است؟ چون ذرهٔ آزاد با تکانهٔ p دارای انرژی $p^2/2m$ است، که لزومی ندارد با انرژی حالت پایه برابر باشد، انرژی پایسته نیست. چگونه این ناپایستگی امکانپذیر است؟

حل: تابع‌موج اولیه به‌صورت زیر است

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a} \qquad 0 \le x \le a$$

چنانکه در ۴ـ۴۴ دیدیم، دامنهٔ احتمال اینکه ذره در این حالت دارای تکانهٔ p باشد با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi h}} \int_0^a dx\, e^{ipx/h} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a}$$

حدود انتگرال از این شرط تعیین شده‌اند که $\psi(x)$ در سمت چپ $x = 0$ و سمت راست $x = a$ صفر است، زیرا دیواره‌ها ابتدا در این دو نقطه قرار دارند. این انتگرال را می‌توان به‌سادگی محاسبه کرد. به‌دست می‌آوریم

$$\phi(p) = -e^{-ipa/2h} \frac{2\pi/a}{\sqrt{\pi h a}} \frac{\cos\, pa/2h}{(\pi/a)^2 - (p/h)^2}$$

و در نتیجه

$$|\phi(p)|^2 dp = \frac{4\pi}{ha^3} \frac{\cos^2(pa/2h)}{((\pi/a)^2 - (p/h)^2)^2} dp$$

انرژی پایسته نیست زیرا انرژی پتانسیل واقعاً وابسته به زمان است. در واقع، $\psi(x)$ با انتقال دیواره‌ها از $x = 0$ و $x = a$ به $\pm\infty$ به‌سرعت تغییر می‌کند.

توجه کنید که (۱) وقتی p بسیار بزرگتر از $h\pi/a$ می‌شود احتمال به‌سرعت افت می‌کند، و (۲) چگالی احتمال در $p = h\pi/a$ نامتناهی نمی‌شود زیرا صورت کسر به‌ازای این مقدار صفر می‌شود.

www.arsanjan.blogfa.com

اکنون به هامیلتونی ذرهٔ آزاد برمی‌گردیم. وقتی $V(x)$ همه جا صفر است، معادلهٔ ویژه‌مقداری انرژی به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} + k^2u(x) = 0 \qquad (۴۵_۴)$$

که در آن $k^2 = 2mE/\hbar^2$. جوابهای این معادله e^{ikx} و e^{-ikx}، یا ترکیبهای خطی آنها مانند $\cos kx$ و $\sin kx$، هستند. اشکال همهٔ این جوابها این است که انتگرال‌پذیر مجذوری نیستند، زیرا $\int_{-\infty}^{\infty} dx|Ae^{ikx} + Be^{-ikx}|^2$ به‌ازای تمام مقادیر A و B واگرا است. این مشکل را می‌توان از سه راه رفع کرد:

(الف) می‌توان مسئلهٔ ذره آزاد را حالت حدی مسئلهٔ ذره در جعبه‌ای در نظر گرفت که دیواره‌های آن در بینهایت‌اند. برای حل این مسئله، باید کار مربوط به مسئلهٔ ویژه‌مقداری ذره در جعبه را کمی تغییر دهیم. اگر دیواره‌های جعبه را در $a/2-$ و $a/2+$ بگیریم، می‌توانیم با میل دادن a به‌سمت ∞ جعبه را بزرگ کنیم. این کار چندان پیچیده نیست. کافی است مبدأ را به‌اندازهٔ $a/2$ به‌سمت راست منتقل کنیم، و اگر $x - a/2$ را به‌جای x در ویژه‌تابعها بگذاریم این انتقال دیواره‌ها تحقق می‌یابد. ویژه‌تابعها اکنون به‌صورت زیر در می‌آیند

$$\begin{aligned} u_n(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi(x - a/2)}{a} \\ &= \sqrt{\frac{2}{a}} \left\{ \sin \frac{n\pi x}{a} \cos \frac{n\pi}{2} - \cos \frac{n\pi x}{a} \sin \frac{n\pi}{2} \right\} \end{aligned} \qquad (۴۶_۴)$$

به‌ازای n زوج داریم $\cos(n\pi/2) = (-1)^{n/2}$ و $\sin(n\pi/2) = 0$. بنابراین، تنها جملهٔ اول باقی می‌ماند، و می‌توان ضریب فاز $(-1)^{n/2}$ را حذف کرد. بدین‌ترتیب، ویژه‌تابعها به‌ازای n زوج عبارت‌اند از

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \qquad (n = 2, 4, 6, \ldots) \qquad (۴۷_۴)$$

اگر n فرد باشد، به روش مشابه به‌دست می‌آوریم

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{n\pi x}{a} \qquad (n = 1, 3, 5, \ldots) \qquad (۴۸_۴)$$

www.arsanjan.blogfa.com

در حد $a \to \infty$، این ویژه‌تابعها ظاهراً بی‌معنی می‌شوند. در واقع، تمام آنها به‌ازای n متناهی متناظر با انرژیهای زیرند

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2} \to 0$$

وقتی $n \to \infty$، جوابهای غیرصفر را تنها در صورتی به‌دست می‌آوریم که کمیت زیر متناهی باشد

$$k = \frac{n\pi}{a} \qquad (۴۹_۴)$$

در این مورد، جوابها عبارت‌اند از

$$\sqrt{\frac{2}{a}} \sin\ kx;\ \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\ kx \qquad (۵۰_۴)$$

که در آنها عامل $1/\sqrt{a}$ را می‌توان نگه داشت. این عامل در جواب مربوط به هر پرسشی دربارهٔ دستگاه حذف خواهد شد.

(ب) می‌توان با بسته‌های موج کار کرد. جوابی به‌صورت

$$\psi(x) = e^{ikx} \qquad (۵۱_۴)$$

یک مورد خاص از ۴ـ۴۳ است که در آن

$$\phi(p) = \sqrt{2\pi\hbar}\ \delta(p - \hbar k) \qquad (۵۲_۴)$$

که یک توزیع با قلهٔ نامتناهی در فضای تکانه است. فرض کنید به‌جای این توزیع حدی از تابع $\sqrt{2\pi\hbar}\ g(p - \hbar k)$ که قلهٔ بسیار تیزی دارد استفاده کنیم. آنگاه به‌جای e^{ikx} خواهیم داشت

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \int dp\ e^{ipx/\hbar} g(p - \hbar k) \\ &= e^{ikx} \int dq\ e^{iqx/\hbar} g(q) \end{aligned} \qquad (۵۳_۴)$$

که یک موج تخت، e^{ikx}، است که در تابع بسیار پهنی از x ضرب شده است. می‌توان این تابع را چنان پهن گرفت که در ناحیهٔ مورد نظر فیزیکی اساساً ثابت باشد. اما عدم قطعیت تکانه از

www.arsanjan.blogfa.com

مرتبهٔ بزرگی $\hbar$ تقسیم بر پهنای بستهٔ موج در فضای x است، و اگر اندازهٔ این پهنا ماکروسکوپیک باشد عدم قطعیت در تکانه قابل چشمپوشی است. بدین‌ترتیب، شرایط ریاضی بدون هیچ‌گونه تغییری در فیزیک مسئله برآورده می‌شوند. این توصیف بستهٔ‌موجی در واقع به آنچه از لحاظ فیزیکی روی می‌دهد از همه نزدیکتر است، زیرا هیچ راهی برای آماده‌سازی حالت اولیه، به‌عنوان مثال شلیک یک تفنگ الکترونی، هرگز نمی‌تواند در عمل یک ویژه‌حالت دقیق تکانه به‌وجود آورد.

(ج) می‌توان مسئله را با توجه به این نکته بررسی کرد که مشکل بهنجارش ناشی از این است که ذره با تابع موجی مانند e^{ikx} نمی‌تواند در هیچ ناحیه‌ای از فضا محبوس باشد، و در نتیجه احتمال یافتن آن همه جا صفر است. اگر به پرسشهایی که متضمن احتمال یافتن ذره در هر ناحیهٔ متناهی هستند نپردازیم، هیچ مشکلی پیش نمی‌آید. یک راه احتراز از مشکل بهنجارش کارکردن با جریان احتمال یا شار

$$j(x) = \frac{\hbar}{2im}\left[\psi^*(x)\frac{d\psi(x)}{dx} - \frac{d\psi^*(x)}{dx}\psi(x)\right] \qquad (۵۴\text{-}۴)$$

است که در اوایل فصل ۳ معرفی کردیم. برای تابع‌موج $Ce^{ipx/\hbar}$، شار برابر است با $|C|^2 p/m$؛ برای تابع‌موج $Ce^{-ipx/\hbar}$، شار برابر است با $-|C|^2 p/m$. با توجه به اینکه در یک مسئلهٔ یک‌بعدی، شار ذرات با چگالی ۱ ذره بر سانتی‌متر که با سرعت $v = p/m$ حرکت می‌کنند ــ یعنی تعدادی که از یک نقطه مانند $x = x_0$ در هر ثانیه می‌گذرد ــ درست برابر با v است، می‌بینیم که $|C|^2$ نشاندهندهٔ چگالی ذرات بر سانتی‌متر است. بنابراین، ۴ـ۴۱ ذراتی با چگالی $1/2\pi\hbar$ بر سانتی‌متر را نمایش می‌دهد.

در سه‌بعد، با

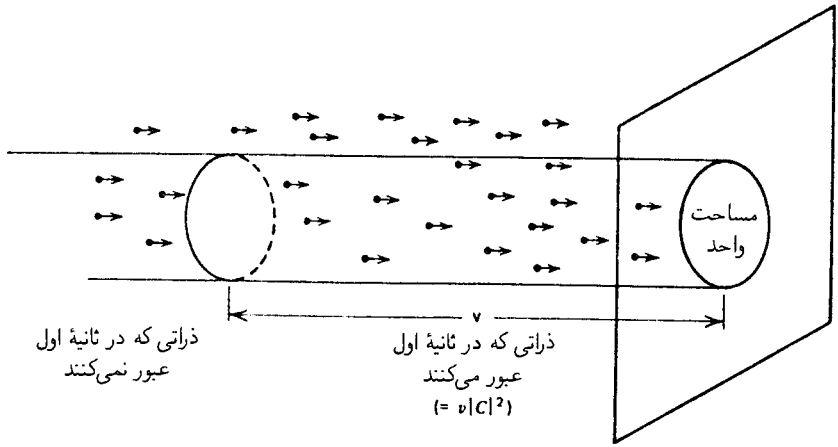
$$u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = C\, e^{i\mathbf{p}.\mathbf{r}/\hbar} \qquad (۵۵\text{-}۴)$$

شار برابر است با $|C|^2\mathbf{p}/m$ که به شارش ذراتی مربوط می‌شود که با چگالی $|C|^2$ بر سانتی‌مترمکعب با سرعت $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$ از واحد سطح عمود بر $\mathbf{p}$ می‌گذرند (شکل ۴ـ۳).

واگنی

معادلهٔ ویژه‌مقداری انرژی ۴ـ۴۵ دارای دو جواب مستقل e^{ikx} و e^{-ikx} است. همچنین، جفت جوابهای حقیقی $\cos kx$ و $\sin kx$ نیز مستقل از یکدیگرند. هر جفتی که انتخاب کنیم می‌بینیم که، برخلاف مسئلهٔ ذره در جعبه، دو جواب وجود دارند که به یک مقدار انرژی مربوط می‌شوند. این نمونه‌ای است از آنچه غالباً روی می‌دهد: ممکن است بیش از یک ویژه‌تابع مستقل برای یک ویژه‌مقدار عملگر هرمیتی وجود داشته باشند. در چنین مواردی می‌گوییم واگنی داریم.

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۴ـ۳ رابطهٔ میان سرعت ذرات و شار، یعنی تعداد ذراتی که از واحد سطح عمود بر سرعت در واحد زمان می‌گذرند.

در دو موردی که قبلاً بیان کردیم، هر دو جفت جواب متعامدند: یعنی به‌ازای $k \neq 0$ داریم

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx (e^{-ikx})^* e^{ikx} = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{2ikx} = 0$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \sin kx \cos kx = 0 \qquad (۵۶_۴)$$

همیشه می‌توان ترکیبهای خطیی ساخت که رابطهٔ تعامد صادق باشد. مستقل از وجود واگنی، ویژه‌تابعهای متناظر با یک انرژی معین $E = h^2k^2/2m$ بر ویژه‌تابعهای متناظر با یک انرژی دیگر عمودند.

چه چیز دو ویژه‌تابع واگن را از هم متمایز می‌کند؟ برای مجموعهٔ (e^{ikx} و e^{-ikx})، تفاوت در این است که آنها ویژه‌تابعهای عملگر تکانه متناظر با ویژه‌مقدارهای مختلف تکانه هستند:

$$p_{\text{op}} e^{\pm ikx} = \frac{h}{i} \frac{d}{dx} e^{\pm ikx} = \pm hk\, e^{\pm ikx} \qquad (۵۷_۴)$$

برای پاسخ به همین پرسش دربارهٔ جوابهای $\sin kx$ و $\cos kx$، مفهوم پاریته را معرفی می‌کنیم.

پاریته

ویژه‌تابعهای ذرهٔ آزاد ($\sin kx, \cos kx$) و همچنین ویژه‌تابعهای ذره در جعبه‌ای بین $-a/2$ تا $+a/2$ که با ۴ـ۴۷ و ۴ـ۴۸ داده شده‌اند، تحت تعویض $x \to -x$ یا زوج هستند یا فرد. ذره را

www.arsanjan.blogfa.com

در جعبه‌ای می‌گیریم که حول $x = 0$ متقارن است. فرض کنید حالت اولیهٔ $\psi(x)$ نسبت به x زوج است. بنابراین، $\psi(x)$ باید به‌صورت زیر باشد

$$\psi(x) = \sum A_n \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{n\pi x}{a} \qquad (۵۸_۴)$$

که در آن جمع روی $n = 1, 3, 5, \ldots$ گرفته می‌شود. در زمانهای بعد این تابع‌موج به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\psi(x,t) = \sum A_n \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{n\pi x}{a} e^{-2iE_n t/\hbar} \qquad (۵۹_۴)$$

یعنی تابع‌موج در زمانهای بعد باز هم نسبت به x زوج است. به‌همین ترتیب، تابع‌موجی که ابتدا فرد است فرد باقی می‌ماند. بنابراین، برای جعبهٔ مزبور که حول $x = 0$ تقارن دارد، زوجیت و فردیت ویژگیهایی مستقل از زمان هستند. می‌توان گفت که زوجیت و فردیت ثابتهای حرکت‌اند. چون هر ثابت حرکتی برای ما مهم است، این بحث را تا اندازه‌ای فرمولبندی می‌کنیم.

این کار را با معرفی عملگر پاریته انجام می‌دهیم که قاعدهٔ عمل آن انعکاس $x \to -x$ است. بنابراین، برای هر تابع‌موج $\psi(x)$ داریم

$$P\psi(x) = \psi(-x) \qquad (۶۰_۴)$$

در نتیجه، برای تابع‌موج زوج می‌توان نوشت

$$P\psi^{(+)}(x) = \psi^{(+)}(x) \qquad (۶۱_۴)$$

و برای تابع موج فرد

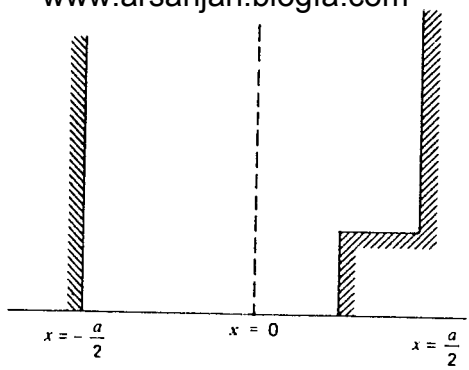
$$P\psi^{(-)}(x) = -\psi^{(-)}(x) \qquad (۶۲_۴)$$

این دو معادله معادله‌های ویژه‌مقداری‌اند، و آنچه نشان داده‌ایم این است که توابع زوج ویژه‌تابعهای P با ویژه‌مقدار $+1$ و توابع فرد ویژه‌تابعهای P با ویژه‌مقدار -1 هستند. در مسئلهٔ ذره در جعبه، توابع $\cos(n\pi x/a)$ و $\sin(n\pi x/a)$ نه تنها ویژه‌تابعهای H بلکه همزمان ویژه‌تابعهای P نیز هستند.

مقادیر ± 1 تنها ویژه‌مقدارهای ممکن‌اند. فرض کنید

$$Pu(x) = \lambda u(x) \qquad (۶۳_۴)$$

www.arsanjan.blogfa.com



شکل ۴ـ۴ جعبه‌ای که تحت انعکاس تقارن ندارد.

با اعمال دوبارهٔ P، به‌دست می‌آوریم

$$P^2 u(x) = P\lambda u(x) = \lambda^2 u(x) \qquad (۶۴\text{ـ}۴)$$

اما $P^2 u(x) = u(x)$، زیرا دو انعکاس متوالی نباید چیزی را تغییر دهند. در نتیجه، $\lambda^2 = 1$، یعنی $\lambda = \pm 1$. هر تابع اختیاری را می‌توان به‌صورت مجموع یک تابع زوج و یک تابع فرد نوشت:

$$\psi(x) = \frac{1}{2}[\psi(x) + \psi(-x)] + \frac{1}{2}[\psi(x) - \psi(-x)] \qquad (۶۵\text{ـ}۴)$$

یعنی، مانند مورد ویژه‌تابعهای H که قبلاً بحث شد، هر تابعی را می‌توان برحسب ویژه‌تابعهای این عملگر جدید بسط داد.

پیدایش صریح زوجیت و فردیت به این دلیل است که جعبه را نسبت به $x = 0$ متقارن گرفته‌ایم. اگر جعبه را بین ۰ و a گرفته بودیم هیچ چیز تغییر نمی‌کرد، و باز هم تحت انعکاس حول $x = a/2$ تقارن وجود می‌داشت. اما این نوع تقارن چندان نمایان نیست. درس مهمی که در اینجا باید بیاموزیم این است که در طرح یک مسئلهٔ مکانیک کوانتومی همیشه باید توجه خود را به تقارنهای موجود در هامیلتونی مسئله معطوف کنیم، و مختصات را به‌گونه‌ای انتخاب کنیم که این تقارنها را به‌روشنی نشان دهند. اگر جعبه نامنظم باشد (شکل ۴ـ۴)، هیچ تغییر مختصاتی باعث ایجاد تقارن نمی‌شود. نکتهٔ مهم این است که تقارن باید در هامیلتونی باشد.[۱] این واقعیت را می‌توان با این پرسش که در چه شرایطی یک تابع زوج برای همیشه زوج باقی می‌ماند روشن‌تر

---

۱. وقتی با جعبه سروکار داریم دیواره‌ها را به‌عنوان قسمتی از پتانسیل، یعنی هامیلتونی، در نظر می‌گیریم. به همین دلیل است که به‌جای شرایط مرزی صحبت از هامیلتونی می‌کنیم.

www.arsanjan.blogfa.com

دید. فرض کنید

$$\psi(x,\circ) = \psi(-x,\circ) \equiv \psi^{(+)}(x) \qquad (۶۶_۴)$$

تحول زمانی با معادلهٔ زیر داده می‌شود

$$ih\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = H\psi(x,t) \qquad (۶۷_۴)$$

اگر P را بر این معادله اعمال کنیم به‌دست می‌آوریم

$$ih\frac{\partial}{\partial t}P\psi(x,t) = PH\psi(x,t) \qquad (۶۸_۴)$$

تحت شرایط خاصی که

$$PH\psi(x,t) = HP\psi(x,t) \qquad (۶۹_۴)$$

که وقتی برقرار است که H تحت $x \to -x$ زوج باشد، یعنی وقتی که $V(x)$ یک تابع زوج باشد (زیرا $d^۲/dx^۲$ زوج است)، داریم

$$ih\frac{\partial}{\partial t}[P\psi(x,t)] = H[P\psi(x,t)] \qquad (۷۰_۴)$$

بنابراین، توابع

$$\psi^{(+)}(x,t) = \frac{۱}{۲}(۱+P)\psi(x,t) \qquad (۷۱_۴)$$

و

$$\psi^{(-)}(x,t) = \frac{۱}{۲}(۱-P)\psi(x,t) \qquad (۷۲_۴)$$

جداگانه در معادلهٔ شرودینگر صدق می‌کنند، و اگر حالت اولیه زوج (یا فرد) باشد با هم مخلوط نمی‌شوند. تنها اگر برای تمام حالتهای ممکن داشته باشیم

$$(PH - HP)\psi(x,t) = \circ \qquad (۷۳_۴)$$

www.arsanjan.blogfa.com

یعنی اگر P و H با هم جابه‌جا شوند.

$$[P, H] = 0 \qquad (۷۴\text{ـ}۴)$$

آنگاه شرط استقلال از زمان برای پاریته برقرار است. خواهیم دید که این شرط مهم کاملاً عمومیت دارد: هر عملگری که وابستگی زمانی صریح نداشته باشد و با هامیلتونی H جابه‌جا شود یک ثابت حرکت است. مخصوصاً، اگر پتانسیل با زمان تغییر کند، یعنی داشته باشیم $V(x,t)$، آنگاه مانند مورد مکانیک کلاسیک خود انرژی یک ثابت حرکت نیست. توجه کنید که وقتی V تابع t است، جداسازی معادله به معادلهٔ مربوط به وابستگی زمانی و معادلهٔ ویژه‌مقداری انرژی غیرممکن است.

به‌طور خلاصه، آنچه ویژه‌تابعهای واگن را متمایز می‌کند این است که همهٔ آنها ویژه‌تابعهای همزمان عملگر هرمیتی دیگری هستند. عملگرهای p_{op} و P هر دو این ویژگی را دارند که با هامیلتونی $p_{\mathrm{op}}^2/2m$ در این مسئله جابه‌جا می‌شوند. بعداً خواهیم دید که این یک شرط لازم برای وجود ویژه‌تابعهای همزمان است. به‌عنوان مثال، p_{op} و P با هم جابه‌جا نمی‌شوند (زیرا $(\hbar/i)(d/dx)$ تحت $x \to -x$ تغییر علامت می‌دهد)، و در نتیجه ویژه‌تابعهای یکی از این عملگرها نمی‌توانند ویژه‌تابعهای همزمان دیگری باشند.

از دو مسئلهٔ ساده‌ای که بررسی کردیم مطالب بسیار زیادی دربارهٔ مکانیک کوانتومی یاد گرفته‌ایم. در فصلهای بعد به این مطالب بازمی‌گردیم و آنها را تعمیم می‌دهیم. در فصل ۵ باز هم چند مسئلهٔ بسیار ساده را بررسی می‌کنیم، اما این بار به‌جای پرداختن به ویژگیهای ریاضی، توجه خود را به دستگاههای فیزیکی معطوف می‌کنیم که مسائل مزبور الگوهای سادهٔ آنها هستند.

مسائل

۴ـ۱ از میان عملگرهای زیر آنهایی را که خطی هستند مشخص کنید:

(الف) $O_1\psi(x) = x^3\psi(x)$ (ب) $O_2\psi(x) = x(d/dx)\psi(x)$

(ج) $O_3\psi(x) = \lambda\psi^*(x)$ (د) $O_4\psi(x) = e^{\psi(x)}$

(ه) $O_5\psi(x) = [d\psi(x)/dx] + a$ (و) $O_6\psi(x) = \int_{-\infty}^{x} dx'(\psi(x')x')$

۴ـ۲ مسئلهٔ ویژه‌مقداری زیر را حل کنید

$$O_6\psi(x) = \lambda\psi(x)$$

به‌ازای چه مقادیری از ویژه‌مقدار λ ویژه‌تابعها انتگرال‌پذیر مجذوری هستند؟

www.arsanjan.blogfa.com

[راهنمایی: از دو طرف معادله نسبت به x مشتق بگیرید.]

۳ـ۴ جابه‌جاگرهای زیر را به‌دست آورید: (الف) $[O_۲, O_۴]$؛ (ب) $[O_۱, O_۲]$. روش محاسبهٔ $[A, B]$ نوشتن $A(B\psi) - B(A\psi)$ به‌صورت $C\psi$ است.

۴ـ۴ عدم قطعیت

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^۲ \rangle}$$

را برای $u_n(x)$ که در ۴ـ۲۱ داده شده است محاسبه کنید. با استفاده از $\langle p^۲ \rangle$ که با ۴ـ۲۸ داده شده است حاصلضرب

$$\Delta p \, \Delta x$$

را به‌دست آورید. توجه کنید که برای حالتهای بالاتر عدم قطعیت با n افزایش می‌یابد.

۵ـ۴ ذره‌ای در حالت پایهٔ جعبه‌ای است که دیواره‌های آن در $x = \pm a$ قرار دارند. دیواره‌های جعبه ناگهان به $x = \pm b$ (که در آن $b > a$) برده می‌شوند. احتمال اینکه ذره در پتانسیل جدید در حالت پایه یافت شود چقدر است؟ احتمال اینکه ذره در اولین حالت برانگیخته باشد چقدر است؟ جواب سادهٔ این مورد توضیح ساده‌ای دارد. این توضیح چیست؟

۶ـ۴ فرض کنید ذره‌ای با تابع‌موج

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{۲}{a}} \qquad \frac{-a}{۲} < x < ۰$$
$$= ۰ \qquad ۰ < x < \frac{a}{۲}$$

در نیمهٔ چپ جعبه‌ای که دیواره‌های آن در $x = \pm a/۲$ هستند جایگزین شده است.

(الف) آیا این ذره در زمانهای بعد جایگزیده باقی می‌ماند؟

(ب) اگر انرژی ذره را اندازه‌گیری کنیم، انرژی حالت پایه و انرژی اولین حالت برانگیخته با چه احتمالی به‌دست می‌آیند؟

۷ـ۴ برای پتانسیلی به‌صورت

$$V(x) = \infty \qquad x < ۰; \quad x > a$$
$$= ۰ \qquad ۰ < x < a$$

www.arsanjan.blogfa.com

ویژه‌تابعها عبارت‌اند از

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{۲}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$$

فرض کنید تابع‌موج اولیهٔ بهنجارشدهٔ ذره‌ای در این پتانسیل به‌صورت زیر باشد

$$\psi(x, ۰) = A \sin^۵ \left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

(الف) $\psi(x, t)$ را تعیین کنید.
(ب) A را بدون محاسبهٔ انتگرال $\int d\theta \ \sin^{۱۰} \theta$ به‌دست آورید.
(ج) اگر $E_n = n^۲\pi^۲\hbar^۲/۲ma^۲$، احتمال به‌دست آمدن $E_۲$ در اندازه‌گیری انرژی چقدر است؟
[راهنمایی: $[(e^{i\theta} - e^{-i\theta})/۲i]^۵$ را به‌صورت رشتهٔ توانی $e^{۵i\theta} + \cdots - e^{-۵i\theta}$ بسط دهید و آن‌را به‌یک رشتهٔ شامل $\sin ۵\theta$ و غیره تبدیل کنید.]

۸ـ۴ محاسبه‌های مثال صفحهٔ ۸۲ را برای ذره‌ای که ابتدا در nامین ویژه‌حالت است تکرار کنید. نشان دهید احتمال مربوط عبارت است از

$$\frac{۲n^۲\pi}{\hbar a^۳} \ \frac{۱ - (-۱)^n \cos\ pa/\hbar}{[(p/\hbar)^۲ - (n\pi/a)^۲]^۲}$$

این توزیع را ترسیم کنید و نشان دهید که با رابطهٔ عدم قطعیت و به‌ازای n بزرگ با اصل تطابق سازگار است.

۹ـ۴ ذره‌ای در فضای آزاد ابتدا به‌صورت بستهٔ موجی است که با رابطهٔ زیر توصیف می‌شود

$$\psi(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{۱/۴} e^{-\alpha x^۲/۲}$$

(الف) احتمال اینکه تکانهٔ ذره در بازهٔ $(p, p + dp)$ باشد چقدر است؟
(ب) مقدار انتظاری انرژی را به‌دست آورید. آیا می‌توانید با استدلالی تقریبی، برمبنای "اندازهٔ" تابع‌موج و اصل عدم قطعیت، نشان دهید که چرا این جواب باید تقریباً همین باشد.

۱۰ـ۴ تابع‌موج ذره‌ای به‌صورت زیر است

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

www.arsanjan.blogfa.com

شار مربوط به آن را به‌دست آورید.

۴ـ۱۱ شار وابسته به ذره‌ای را تعیین کنید که با تابع‌موج زیر توصیف می‌شود

$$\psi(x) = u(x)e^{ikx}$$

که در آن $u(x)$ یک تابع حقیقی است.

۴ـ۱۲ ویژه‌تابعهای مربوط به جعبه‌ای را که دیواره‌های آن در $x = \pm a$ هستند در نظر بگیرید. بدون محاسبهٔ انتگرال، نشان دهید مقدار انتظاری کمیت

$$x^2p^2 + 3xp^2x + p^2x^2$$

برای تمام ویژه‌تابعها صفر می‌شود.

۴ـ۱۳ ثابت کنید عملگر پاریته، که با رابطهٔ زیر تعریف می‌شود

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

یک عملگر هرمیتی است. همچنین ثابت کنید ویژه‌تابعهای P، مربوط به ویژه‌مقدارهای $+1$ و -1، متعامد هستند.

۴ـ۱۴ با استفاده از مفهوم پاریته، نشان دهید که در مثال صفحهٔ ۷۹ ضرایب A_n برای nهای زوج باید همگی صفر شوند.

۴ـ۱۵ ویژه‌حالتهای ذره‌ای در جعبهٔ نامتناهی را، که با ۴ـ۲۱ داده می‌شوند، در نظر بگیرید. $\langle x^2 \rangle$ و $\langle x \rangle$ را محاسبه کنید. با استفاده از این نتایج، کمیت $\Delta x \equiv \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$ را برای ویژه‌حالت $u_n(x)$ به‌دست آورید. Δx نمایشگر عدم قطعیت در عملگر x است، و باید به براورد سادهٔ $\Delta x \approx a$ نزدیک باشد.

مراجع

بحث مفصلی دربارهٔ خواص معادله‌های دیفرانسیل مرتبهٔ دوم در مکانیک کوانتومی را می‌توان در کتابهای زیر یافت.

پاول ج ل؛ کریسمنّ ب، مکانیک کوانتومی، ترجمهٔ پاشایی‌راد و سعادت، تهران، مرکز نشر دانشگاهی، ۱۳۶۸؛ و

D S Saxon, *Elementary Quantum Mechanics*, Holden- Day, San Francisco, 1968.

همچنین به کتابهای پیشرفته‌تری که در آخر این کتاب معرفی شده‌اند مراجعه کنید.

www.arsanjan.blogfa.com

۵

پتانسیلهای یک‌بعدی

در این فصل چند مسئلهٔ ساده مربوط به حرکت یک‌بعدی را حل می‌کنیم. این مسائل از دو لحاظ جالب توجه‌اند: یکی اینکه بعضی اثرات غیرکلاسیک را روشن می‌کنند، و دیگر اینکه، اگرچه جهانی که در آن زندگی می‌کنیم سه‌بعدی است، بسیاری از وضعیتهای فیزیکی عملاً یک‌بعدی هستند.

پلهٔ پتانسیل

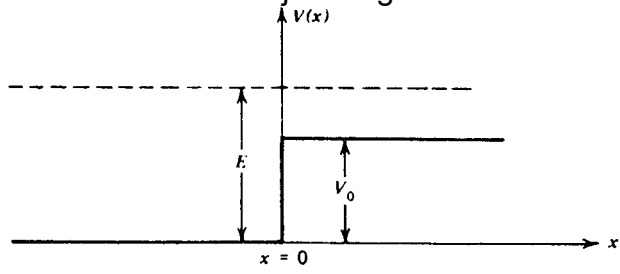
در این مسئله پتانسیل عبارت است از (شکل ۵ـ۱)

$$\begin{aligned} V(x) &= ۰ \qquad x < ۰ \\ &= V_۰ \qquad x > ۰ \end{aligned} \tag{۱ـ۵}$$

معادلهٔ شرودینگر

$$-\frac{h^۲}{۲m}\frac{d^۲u(x)}{dx^۲} + V(x)u(x) = Eu(x) \tag{۲ـ۵}$$

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۵ـ۱ پلهٔ پتانسیل.

را به‌صورت زیر می‌نویسیم

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]u(x) = 0 \qquad (۳ـ۵)$$

مطابق معمول، قرار می‌دهیم

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2 \qquad (۴ـ۵)$$

و همچنین می‌نویسیم

$$\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} = q^2 \qquad (۵ـ۵)$$

عمومی‌ترین جواب معادلهٔ ۵ـ۳ به‌ازای $x < 0$، که در آن $V(x) = 0$، عبارت است از

$$u(x) = e^{ikx} + R\,e^{-ikx} \qquad (۶ـ۵)$$

اندازهٔ شار خالص در جهت مثبت x برابر است با

$$j = \frac{\hbar}{2im}[(e^{-ikx} + R^* e^{ikx})(ik\,e^{ikx} - ikR\,e^{-ikx}) - \text{[همیوغ مختلط}]$$
$$= \frac{\hbar k}{m}(1 - |R|^2) \qquad (۷ـ۵)$$

e^{ikx} با شار $\hbar k/m$ را می‌توان یک موج ورودی در نظر گرفت. اگر هیچ پتانسیلی وجود نداشت، می‌توانستیم e^{ikx} را برای تمام xها به‌عنوان جواب انتخاب کنیم، و از این رو R را به‌وجود پتانسیل نسبت

www.arsanjan.blogfa.com

می‌دهیم. این پتانسیل باعث به‌وجود آمدن موج بازتابیدهٔ Re^{-ikx} با شار بازتابیدهٔ $hk|R|^2/m$ می‌شود.

برای $x > 0$، جواب را به‌صورت زیر می‌نویسیم

$$u(x) = T\, e^{iqx} \tag{۸ـ۵}$$

البته عمومی‌ترین جواب برای $x > 0$ یک ترکیب خطی از e^{iqx} و e^{-iqx} است، اما جمله‌ای شامل e^{-iqx} موجی را نشان می‌دهد که از $+\infty$ در جهت منفی حرکت می‌کند، و در این "آزمایش" که موج از سمت چپ فرستاده شده است تنها یک موج تراگسیلیده می‌تواند در سمت راست وجود داشته باشد. شار مربوط به ۵ـ۸ برابر است با

$$j = \frac{\hbar q}{m}|T|^2 \tag{۹ـ۵}$$

چون در این مسئله وابستگی زمانی نداریم، قانون پایستگی ۳ـ۱۲ ایجاب می‌کند که $j(x)$ مستقل از x باشد. بنابراین، شار در طرف راست پله باید برابر با شار در طرف چپ باشد، یعنی

$$\frac{\hbar k}{m}(1 - |R|^2) = \frac{\hbar q}{m}|T|^2 \tag{۱۰ـ۵}$$

پیوستگی تابع‌موج ایجاب می‌کند که

$$1 + R = T \tag{۱۱ـ۵}$$

که از تطبیق دو جواب در $x = 0$ به‌دست آمده است. با وجود ناپیوستگی در پتانسیل، شیب تابع‌موج نیز پیوسته است. این را می‌توان با انتگرال گرفتن از ۵ـ۳ از $-\epsilon$ تا $+\epsilon$ (که ϵ کوچک اختیاری و مثبت است) و با استفاده از پیوستگی تابع‌موج نشان داد:

$$\begin{aligned}\left(\frac{du}{dx}\right)_{\epsilon} - \left(\frac{du}{dx}\right)_{-\epsilon} &= \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \frac{d}{dx}\frac{du}{dx} \\ &= \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]u(x) = 0\end{aligned} \tag{۱۲ـ۵}$$

برای ارجاع در آینده، متذکر می‌شویم که اگر پتانسیل شامل جمله‌ای مانند $V_0\,\delta(x-a)$ باشد، با

www.arsanjan.blogfa.com

انتگرال‌گیری از معادلهٔ ۵ـ۳ از $a-\epsilon$ تا $a+\epsilon$ به‌دست می‌آوریم

$$\left(\frac{du}{dx}\right)_{a+\epsilon} - \left(\frac{du}{dx}\right)_{a-\epsilon} = \frac{2m}{\hbar^2}\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx\, V_0\,\delta(x-a)u(x) = \frac{2m}{\hbar^2}V_0\,u(a) \qquad (۱۳\text{ـ}۵)$$

پیوستگی مشتق تابع‌موج در $x=0$، برای این مسئله، ایجاب می‌کند که

$$ik(1-R) = iqT \qquad (۱۴\text{ـ}۵)$$

بنابراین، می‌توان R و T را از ۵ـ۱۱ و ۵ـ۱۴ به‌دست آورد:

$$R = \frac{k-q}{k+q}$$
$$T = \frac{2k}{k+q} \qquad (۱۵\text{ـ}۵)$$

با استفاده از این رابطه‌ها می‌توان شارهای بازتابیده و تراگسیلیده را محاسبه کرد:

$$\frac{\hbar k}{m}|R|^2 = \frac{\hbar k}{m}\left(\frac{k-q}{k+q}\right)^2$$
$$\frac{\hbar q}{m}|T|^2 = \frac{\hbar k}{m}\,\frac{4kq}{(k+q)^2} \qquad (۱۶\text{ـ}۵)$$

متذکر می‌شویم که:

۱. برخلاف مکانیک کلاسیک، که بنابر آن ذره درگذر از یک پلهٔ پتانسیل کند می‌شود (به دلیل پایستگی انرژی) اما هرگز بازتابیده نمی‌شود، در اینجا کسری از ذرات فرودی بازتابیده می‌شوند، که این البته پیامد ویژگیهای موجی ذره است. بازتاب جزئی نور از فصل مشترک دو محیط یک پدیدهٔ آشنا است.

۲. با استفاده از ۵ـ۱۶ می‌توان به‌آسانی وارسی کرد که قانون پایستگی ۵ـ۱۰ واقعاً صادق است.

۳. به‌ازای $E \gg V_0$، یعنی وقتی q از پایین به k میل می‌کند، نسبت شار بازتابیده به شار فرودی، یعنی $|R|^2$، به صفر میل می‌کند. این نتیجه با درک شهودی ما توافق دارد که می‌گوید در انرژیهای بسیار زیاد وجود پله تنها اختلال اندکی در انتشار موج به‌وجود می‌آورد.

www.arsanjan.blogfa.com

۴. اگر انرژی E کمتر از V_0 باشد q انگاری می‌شود. در این مورد، جواب برای $x > 0$ باید به‌صورت

$$u(x) = T\, e^{-|q|x} \qquad (۱۷_۵)$$

باشد تا در $+\infty$ نامتناهی نشود. می‌بینیم که اکنون

$$|R|^2 = \left(\frac{k - i|q|}{k + i|q|}\right)\left(\frac{k - i|q|}{k + i|q|}\right)^* = 1 \qquad (۱۸_۵)$$

بنابراین، مانند مکانیک کلاسیک، اکنون بازتاب کلی داریم. اما توجه کنید که ضریب

$$T = \frac{2k}{k + i|q|} \qquad (۱۹_۵)$$

صفر نیست، و قسمتی از موج به درون ناحیهٔ ممنوع نفوذ می‌کند. این پدیدهٔ نفوذ نیز مشخصهٔ امواج است، و به‌زودی خواهیم دید که "تونل‌زدن" در سدهایی را امکانپذیر می‌سازد که در توصیف کلاسیک باید کاملاً مانع عبور ذرات باشند. هیچ شاری به‌طرف راست وجود ندارد، زیرا $j(x)$ برای جواب حقیقی صفر می‌شود حتی اگر ضریب جلو آن‌را مختلط بگیریم. پدیدهٔ بازتاب کلی از لحاظ ریاضی همان پدیده‌ای است که برای نور روی می‌دهد وقتی نور با زاویه‌ای بزرگتر از زاویهٔ حد به فصل مشترک دو محیط (از محیطی با n بزرگتر به محیطی با n کمتر) می‌تابد. این نور بازتاب داخلی کلی می‌یابد، اما در واقع یک میدان الکترومغناطیسی که به‌طور نمایی کاهش می‌یابد به درون ناحیهٔ ممنوع نفوذ می‌کند.

۵. یک ویژگی پتانسیل فوق‌العاده نیز این است که R و T را می‌توان تنها برحسب E و $(E - V_0)$ نوشت، یعنی مستقل از $\hbar$ که ظاهراً می‌توانیم آن‌را در اینجا برابر با صفر بگیریم. به‌نظر می‌رسد که با یک تناقض روبه‌رو هستیم، زیرا $\hbar = 0$ را به حد کلاسیک مربوط می‌کنیم. آیا این وضعیت به‌معنای آن است که می‌توانستیم برای چنین پتانسیلی بازتاب جزئی را در حد کلاسیک به‌دست آوریم؟ تناقضی درکار نیست، زیرا یک شرط رسیدن به حد کلاسیک این است که طول‌موج دوبروی $(\lambda = 2\pi\hbar/p)$ در مقایسه با اندازه‌های مربوط دستگاه کوچک باشد. در این مثال، اندازهٔ مربوط پهنای ناحیه‌ای است که در آن پتانسیل از صفر تا V_0 تغییر می‌کند، و این پهنا در وضعیت حدی صفر است. بنابراین، برای این پتانسیل ایده‌آل ناحیهٔ کلاسیک وجود ندارد. اگر این پتانسیل را گرد می‌کردیم آنگاه در انرژیهای به‌اندازهٔ کافی زیاد شرط مربوط به رفتارکلاسیک را واقعاً به‌دست می‌آوردیم، اما چنانکه قبلاً گفتیم اگرانرژی به‌اندازهٔ کافی زیاد باشد بازتابی وجود ندارد.

www.arsanjan.blogfa.com

چاه پتانسیل

اکنون پتانسیل زیر را در نظر می‌گیریم (شکل ۵ـ۲)

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 && x < -a \\ &= -V_0 && -a < x < a \\ &= 0 && a < x \end{aligned} \qquad (۲۰ـ۵)$$

با در نظرگرفتن مورد $E > 0$، باز هم می‌نویسیم

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \qquad (۲۱ـ۵)$$

و

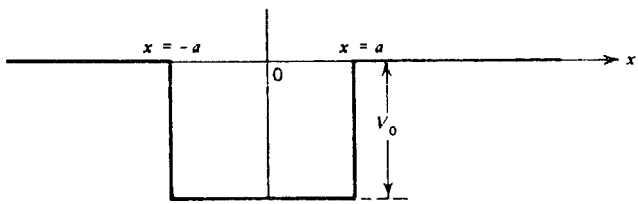
$$q^2 = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2} \qquad (۲۲ـ۵)$$

جوابهای معادلهٔ شرودینگر در سه ناحیهٔ متمایز برای ذره‌ای که از سمت چپ می‌آید به‌صورت زیر هستند

$$\begin{aligned} u(x) &= e^{ikx} + R\, e^{-ikx} && x < -a \\ u(x) &= A\, e^{iqx} + B\, e^{-iqx} && -a < x < a \\ u(x) &= T\, e^{ikx} && a < x \end{aligned} \qquad (۲۳ـ۵)$$

این جوابها به‌ترتیب به شار ورودی $\hbar k/m$ از سمت چپ، شار بازتابیدهٔ $\hbar k|R|^2/m$، و شار تراگسیلیدهٔ $\hbar k|T|^2/m$ به‌سمت راست مربوط‌اند. در داخل چاه امواجی هستند که به علت بازتاب در دو ناپیوستگی در $\pm a$ در دو جهت حرکت می‌کنند. بنابه پایستگی شار باید داشته باشیم

$$\frac{\hbar k}{m}(1 - |R|^2) = \frac{\hbar q}{m}(|A|^2 - |B|^2) = \frac{\hbar k}{m}|T|^2 \qquad (۲۴ـ۵)$$



شکل۵ـ۲ چاه پتانسیل.

www.arsanjan.blogfa.com

با جورکردن توابع موج و همچنین مشتقهای آنها، چهار معادلهٔ زیر به‌دست می‌آیند

$$\begin{aligned} e^{-ika} + R\, a^{ika} &= A\, e^{-iqa} + B\, e^{iqa} \\ ik(e^{-ika} - R\, e^{ika}) &= iq(A\, e^{-iqa} - B\, e^{iqa}) \\ A\, e^{iqa} + B\, e^{-iqa} &= T\, e^{ika} \\ iq(A\, e^{iqa} - B\, e^{-iqa}) &= ikT\, e^{ika} \end{aligned} \qquad (۲۵_۵)$$

که از آنها، با کمی عملیات جبری، به نتایج زیر می‌رسیم

$$\begin{aligned} R &= i\, e^{-۲ika} \frac{(q^۲ - k^۲)\sin\, ۲qa}{۲kq\, \cos\, ۲qa - i(q^۲ + k^۲)\sin\, ۲qa} \\ T &= e^{-۲ika} \frac{۲kq}{۲kq\, \cos\, ۲qa - i(q^۲ + k^۲)\sin\, ۲qa} \end{aligned} \qquad (۲۶_۵)$$

باز هم، اگر $E \gg V_۰$، عملاً هیچ بازتابی وجود ندارد زیرا $۲kq \ll q^۲ - k^۲$؛ و وقتی $E \to ۰$، تراگسیل به‌صفر نزدیک می‌شود. یک نکتهٔ مخصوصاً جالب توجه این است که در مورد خاصی که $\sin ۲qa = ۰$، یعنی برای انرژیهای مثبتی که از رابطهٔ زیر به‌دست می‌آیند

$$E = -V_۰ + \frac{n^۲\pi^۲\hbar^۲}{۸ma^۲} \qquad n = ۱, ۲, ۳, \ldots \qquad (۲۷_۵)$$

هیچ بازتابی وجود ندارد. این در واقع الگویی است برای آنچه در پراکندگی الکترونهای کم انرژی ($۰٫۱\,\mathrm{eV}$) از اتمهای گاز خنثی، مانند نئون و آرگون، روی می‌دهد که در آن تراگسیل به‌طور غیرعادی بزرگ است. این اثر، که رامساتر و تاونزند آن‌را کشف کردند، به‌عنوان تشدید در تراگسیل توصیف می‌شود. البته در بحث دقیقتر باید ملاحظات سه‌بعدی را دخالت داد. به‌زبان موجی، این اثر ناشی از تداخل ویرانگر بین موج بازتابیده در $x = -a$ و موجی است که یک بار، دو بار، سه بار، ... در لبهٔ $x = a$ بازتابیده می‌شود. شرط تشدید $۲qa = n\pi$، که می‌توان آن‌را به‌صورت زیر نوشت

$$\lambda = \frac{۲\pi}{q} = \frac{۴a}{n} \qquad (۲۸_۵)$$

درست همان شرطی است که تداخل‌سنج فابری-پرو را توصیف می‌کند.

www.arsanjan.blogfa.com

سد پتانسیل

در اینجا پتانسیل عبارت است از

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 && x < -a \\ &= V_0 && -a < x < a \\ &= 0 && a < x \end{aligned} \qquad (۲۹_۵)$$

تنها انرژیهای $E < V_0$ را در نظر می‌گیریم، یعنی انرژیهایی که به‌ازای آنها در فیزیک کلاسیک هیچ نفوذی به درون سد صورت نمی‌گیرد (شکل ۵ـ۳).

در داخل سد معادلهٔ زیر را داریم

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)u(x) = 0$$

یعنی

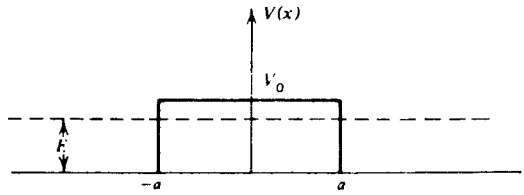
$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} - \kappa^2 u(x) = 0 \qquad (۳۰_۵)$$

جواب عمومی

$$u(x) = A\, e^{-\kappa x} + B\, e^{\kappa x} \qquad |x| < a \qquad (۳۱_۵)$$

را با جوابهای زیر جور می‌کنیم

$$\begin{aligned} u(x) &= e^{ikx} + R\, e^{-ikx} && x < -a \\ &= T\, e^{ikx} && x > a \end{aligned} \qquad (۳۲_۵)$$



شکل۵ـ۳ سد پتانسیل. انرژی به گونه‌ای است که ذرهٔ کلاسیک کاملا توسط سد بازتابیده می‌شود.

www.arsanjan.blogfa.com

عملاً لزومی ندارد که معادله‌های مربوطه را حل کنیم، زیرا می‌توان نتایج را از ۵ـ۲۶ با جاگذاری زیر به‌دست آورد

$$q \to i\kappa = i\sqrt{(2m/h^2)(V_0 - E)} \qquad (۳۳_۵)$$

بنابراین، برای مثال داریم

$$T = e^{-2ika}\frac{2k\kappa}{2k\kappa\cosh 2\kappa a + i(k^2 - \kappa^2)\sinh 2\kappa a} \qquad (۳۴_۵)$$

و در نتیجه

$$|T|^2 = \frac{(2k\kappa)^2}{(k^2 + \kappa^2)^2\sinh^2 2\kappa a + (2k\kappa)^2} \qquad (۳۵_۵)$$

اگرچه انرژی کمتر از ارتفاع سد است اما تراگسیل وجود دارد. این یک پدیدهٔ موجی است، و در مکانیک کوانتومی نیز ذرات همین پدیده را از خود نشان می‌دهند. اغلب با این پدیدهٔ تونل‌زنی ذره در سد مواجه می‌شویم، و بعضی کاربردهای آن‌را بعداً بررسی خواهیم کرد.

در اینجا لختی به تحلیل یک مشکل ظاهری می‌پردازیم. تابع‌موج در داخل سد صفر نمی‌شود، و از این‌رو به نظر می‌رسد احتمالی برای یافتن ذره با انرژی جنبشی منفی وجود دارد. این را چگونه می‌توان تعبیر کرد؟ برای اجتناب از تناقض با فیزیک کلاسیک باید از رابطهٔ عدم قطعیت استفاده کنیم. هر آزمایشی برای مطالعهٔ ذره در داخل سد پتانسیل باید مکان آن‌را با دقت زیر مشخص کند

$$\Delta x \ll 2a \qquad (۳۶_۵)$$

این اندازه‌گیری باعث می‌شود تکانه‌ای با عدم قطعیت زیر به ذره منتقل شود

$$\Delta p \gg h/2a \qquad (۳۷_۵)$$

که متناظر است با انتقال انرژی

$$\Delta E \gg h^2/8ma^2 \qquad (۳۸_۵)$$

برای مشاهدهٔ انرژی جنبشی منفی، این عدم قطعیت باید بسیار کوچکتر از $|E - V_0|$ باشد، و در نتیجه داریم

$$\frac{h^2\kappa^2}{2m} \gg E \gg \frac{h^2}{8ma^2} \qquad (۳۹_۵)$$

www.arsanjan.blogfa.com

که ایجاب می‌کند $۲\kappa a \gg ۱$، و تحت این شرایط احتمال نفوذ به درون سد، که از رابطهٔ زیر به‌دست می‌آید

$$|T|^۲ \simeq \left(\frac{۴k\kappa}{k^۲+\kappa^۲}\right)^۲ e^{-۲\kappa a} \qquad (۴۰_۵)$$

تا حد صفر کوچک می‌شود (به عنوان مثال، به‌ازای $\kappa a = ۱۰$ داریم $e^{-۲\kappa a} = ۱۰^{-۱۸}$).

رابطهٔ تقریبی برای نسبت شار تراگسیلیده به شار فرودی، $|T|^۲$، تابع فوق‌العاده حساسی از پهنای سد و اختلاف میان ارتفاع سد و انرژی فرودی است، زیرا

$$\kappa a = \left[\frac{۲ma^۲}{h^۲}(V_۰ - E)\right]^{۱/۲} \qquad (۴۱_۵)$$

به‌طور کلی، سدهای موجود در پدیده‌های فیزیکی مستطیلی نیستند، و برای بررسی بعضی از کاربردها باید ابتدا رابطه‌ای تقریبی برای ضریب تراگسیل $|T|^۲$ از سدی که شکل نامنظم دارد به‌دست آورد. راه درست انجام این کار، با توجه به این واقعیت که برای اکثر پتانسیلها جواب دقیقی وجود ندارد، استفاده از روش تقریب ونتزل-کرامرز-بریلوئن (WKB) است.[۱] بحثی که در اینجا بیان می‌کنیم کمتر ریاضی است.

چنانکه دیده می‌شود رابطهٔ ۵-۴۰ حاصلضرب دو جمله است که در آن جملهٔ نمایی اهمیت بسیار بیشتری دارد. اگر بنویسیم

$$\ln|T|^۲ \simeq -۲\kappa(۲a) + ۲\ln\frac{۲(ka)(\kappa a)}{(ka)^۲+(\kappa a)^۲}$$

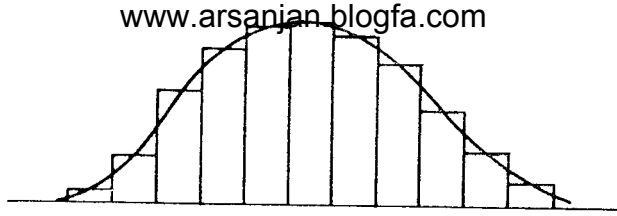
می‌بینیم که در اکثر شرایط جملهٔ اول به‌ازای هر مقدار معقولی برای κa بر جملهٔ دوم غلبه دارد. روشی که در اینجا به‌کار می‌بریم این است که یک سد خمیدهٔ هموار را به‌صورت تعدادی سد مستطیلی در نظر می‌گیریم که کنار هم قرارگرفته‌اند (شکل ۵-۴). چون ضریبهای تراگسیل را وقتی کوچک باشند می‌توان در هم ضرب کرد[۲] (در واقع، وقتی بیشتر شار بازتابیده می‌شود، تراگسیل از

---

۱. برای تقریب WKB به مبحث ویژهٔ ۳ مراجعه کنید.

۲. این حکم تنها برای قسمت نمایی که بیشترین اهمیت را دارد درست است، زیرا می‌توان دید که با دو برابر کردن پهنا ضریب تراگسیل $|T|^۲$ تقریباً مجذور می‌شود.

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۵ـ۴ تقریب سد خمیدهٔ هموار با سدهای پتانسیل مستطیلی کنار هم.

هر لایه یک رویداد مستقل و نامحتمل است)، می‌توان با تقریب نوشت

$$\begin{aligned}\ln|T|^2 &\approx \sum_{\text{سدهای جزئی}} \ln|T_{\text{سدهای جزئی}}|^2 \\ &\approx -2\sum \Delta x\langle\kappa\rangle \\ &\approx -2\int_{\text{سد}} dx\,\sqrt{(2m/\hbar^2)[V(x)-E]}\end{aligned} \qquad (۴۲ـ۵)$$

در هر سد جزئی، Δx پهنای سد و $\langle\kappa\rangle$ مقدار میانگین κی مربوط به این سد است. در آخرین گام، حد سدهای بینهایت باریک را گرفته‌ایم. در عبارت بالا واضح است که این تقریب در نزدیکی "نقاط برگشت" که در آنها انرژی و پتانسیل تقریباً برابرند کمترین دقت را دارد، زیرا در این نقاط رابطهٔ ۵ـ۴۰ تقریب خوبی برای ۵ـ۳۵ نیست. همچنین مهم است که $V(x)$ تابع کند تغییری از x باشد، زیرا در غیر این‌صورت تقریب سد منحنی با تعدادی سد مستطیلی تنها هنگامی ممکن است که این سدها باریک باشند، و در اینجا باز هم ۵ـ۴۰ تقریب بدی است. بررسی مناسب، با استفاده از تقریب WKB، متضمن بحث دربارهٔ رفتار در نزدیکی نقاط برگشت است. با وجود این، برای اکثر کاربردها، با تقریب خوب می‌توان نوشت

$$|T|^2 \approx e^{-2\int dx\,\sqrt{(2m/\hbar^2)[V(x)-E]}} \qquad (۴۳ـ۵)$$

که در آن انتگرال روی ناحیه‌ای گرفته می‌شود که ریشهٔ دوم حقیقی است.

پدیده‌های تونل‌زنی

پدیدهٔ تونل‌زنی ذره در فیزیک اتمی و هسته‌ای کاملاً متداول است، و در اینجا چند مثال از آن‌را بررسی می‌کنیم.

www.arsanjan.blogfa.com

گسیل سرد

الکترونهای درون یک فلز را در نظر بگیرید. چنانکه در بحث اثر فوتوالکتریک در فصل ۱ گفته شد، این الکترونها را پتانسیلی در فلز نگه می‌دارد که در تقریب اول می‌توان آن‌را با جعبه‌ای به ارتفاع متناهی، مطابق شکل ۵ـ۵الف، نشان داد. این الکترونها عملاً در ترازهای انرژیی انباشته شده‌اند که بسیار چگال‌اند، زیرا جعبه بسیار پهن است. ویژگی الکترونها این است که بیشتر از دو الکترون نمی‌توانند یک تراز معین انرژی را اشغال کنند[۳]؛ بنابراین، در پایینترین حالت انرژی فلز، تمام ترازها تا یک انرژی مشخص که انرژی فرمی نامیده می‌شود (و به چگالی الکترونهای آزاد بستگی دارد) پر شده‌اند. وقتی دما از صفر مطلق بیشتر است، تعداد کمی از الکترونها به‌علت برانگیختگی گرمایی به ترازهای بالاتر می‌روند، اما این تعداد حتی در دمای اتاق هم کم است. اختلاف میان انرژی فرمی و لبهٔ چاه انرژی لازم برای خارج ساختن یک الکترون است؛ این انرژی را تابع کار می‌نامند، که در بحث مربوط به اثر فوتوالکتریک گفته شد. الکترونها را می‌توان با انتقال انرژی به آنها، توسط فوتون یا با گرم کردن، از فلز خارج کرد. همچنین می‌توان آنها را با اعمال یک میدان الکتریکی خارجی $\mathscr{E}$ از فلز جدا کرد. این گسیل سرد به این دلیل روی می‌دهد که میدان خارجی پتانسیلی را که الکترون "می‌بیند"، اگر این الکترون در سطح "دریا"ی ترازها باشد، از W به $(W - e\mathscr{E}x)$ تغییر می‌دهد (شکل ۵ـ۵ب). در این مورد، ضریب تراگسیل عبارت است از

$$|T|^2 = e^{-2\int_0^a dx[2m(W-e\mathscr{E}x)/\hbar^2]^{1/2}} \qquad (۴۴ـ۵)$$

که چون

$$\int dx(A+Bx)^{1/2} = \frac{(A+Bx)^{3/2}}{3B/2}$$

به‌صورت زیر در می‌آید

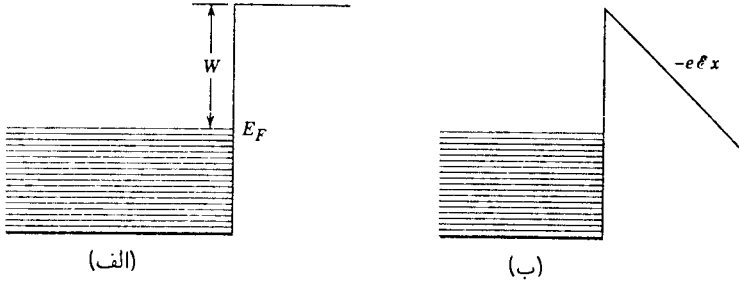
$$|T|^2 = e^{-4\sqrt{2/3}\sqrt{mW/\hbar^2}(W/e\mathscr{E})} \qquad (۴۵ـ۵)$$

این رابطه، که فرمول فاؤلر-نوردهایم نامیده می‌شود، تنها یک توصیف تقریبی از گسیل سرد است. یک اثر اضافی، که به‌آسانی می‌توان آن‌را در محاسبه وارد کرد، جذب الکترون به صفحه توسط بار تصویر است. یک اثر دیگر، که بررسی آن بسیار مشکلتر است، این است که ناکاملیهایی در سطح فلز وجود دارند که میدان الکتریکی را به‌صورت موضعی تغییر می‌دهند، و چون $\mathscr{E}$ در نما ظاهر می‌شود این تغییر می‌تواند تفاوت زیادی به‌وجود آورد. در ضمن، می‌بینیم که نما را می‌توان برحسب ضخامت سد در سطح دریای فرمی نوشت، زیرا این ضخامت از رابطهٔ زیر به‌دست می‌آید

---

۳. این ویژگی الکترونها را اصل طرد پاؤلی توصیف می‌کند که آن‌را در فصل ۸ بررسی می‌کنیم.

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۵ـ۵ (الف) ترازهای انرژی الکترون در فلز. E_F انرژی فرمی و W تابع کار است. (ب) پتانسیل به‌علت وجود میدان الکتریکی خارجی تغییر کرده است.

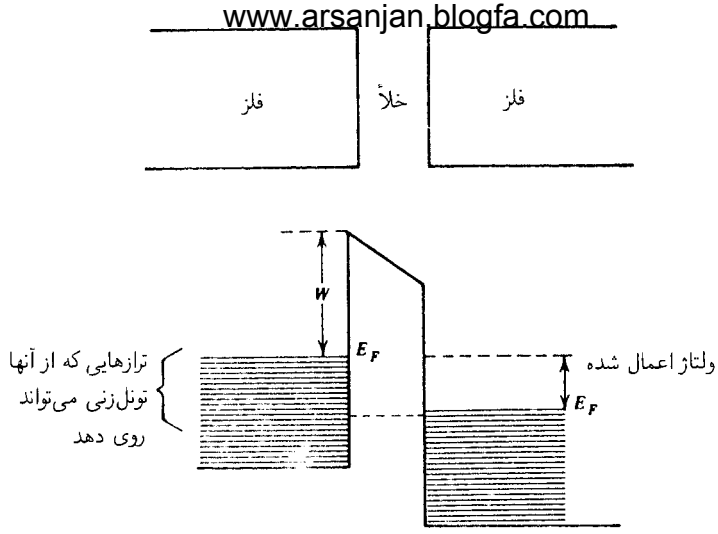
$$a = \frac{W}{e\mathscr{E}} \qquad (۴۶_۵)$$

در پانزده سال گذشته نوعی گسیل سرد کاربرد مهمی در میکروسکوپ تونل‌زنی روبشی (STM) یافته است. این ابزار مبتنی بر حساسیت بسیار زیاد گسیل سرد به‌فاصله است. جریان الکتریکی حاصل از اختلاف پتانسیل الکتریکی بین سطح یک فلز و نوک یک میلهٔ بسیار تیز تنگستن بالای سطح برحسب فاصله از سطح به‌طور نمایی تغییر می‌کند، و از این راه مطالعهٔ بسیار تفصیلی توپوگرافی سطح فلز ممکن می‌شود. کار STM به‌بعضی پدیده‌های غیرمنتظره و پیشرفتهای فن‌آوری بستگی دارد.

قبل از هر چیز، برای به‌دست آوردن تفکیک ۱ آنگسترومی (یا کمتر) حد پراش متداول ایجاب می‌کند تابشی از مرتبهٔ ۱۰keV به‌کار ببریم. مطالعهٔ غیرتخریبی سطح با این انرژی ممکن نیست. در یک میکروسکوپ الکترونی به الکترونهایی از مرتبهٔ ۱۵۰eV نیاز داریم، که باز هم برای روبش سطوح بیش از حد زیاد است. چنانکه اوکیف در سال ۱۹۵۶ بیان داشته است، می‌توان با نوعی میکروسکوپ جدید از حد پراش اجتناب کرد. در این نوع میکروسکوپ، نور از یک حفرهٔ کوچک به شیئی که مستقیماً جلو حفره قرار دارد می‌تابد، و این شئ نور تراگسیلیده یا بازتابیده را تغییر می‌دهد. در این میکروسکوپ جدید، این اندازهٔ حفره است که توان تفکیک میکروسکوپ را تعیین می‌کند. STM بر این اساس کار می‌کند. نوک تنگستن، که پتانسیل به آن اعمال می‌شود، به‌منزلهٔ "حفره" عمل می‌کند.

اختلاف پتانسیل ۱۰ ولتی در بازهٔ حدود۵Å میدانهای الکتریکی بسیار بزرگی به‌وجود می‌آورد، و این میدانها تعدادی اتم از نوک، برای تیز کردن آن، "بیرون می‌کشند". برای مثال، یک نوک که شعاع آن با ماشینکاری به۱۰۰۰Å رسیده است به‌طور کاملاً عادی باید بتواند، به‌علت حساسیت جریان به‌فاصله از سطح نمونه، فاصله‌های عرضی تا۴۵Å را تفکیک کند. برآمدگیهای اتمی ریز این توان تفکیک را به ۱ تا ۲ آنگستروم کاهش می‌دهند.

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۵ـ۶ نمودار انرژی برای تونل‌زنی بین دو فلز که با خلأ از هم جدا شده‌اند. تونل‌زنی بین فلزها تنها وقتی ممکن است که حالتهای خالی در طرف راست وجود داشته باشند. این حالتهای خالی وقتی به‌وجود می‌آیند که برای پایین آوردن تراز فرمی در طرف راست ولتاژ eV اعمال شود.

مفید بودن STM به‌توانایی آزمایشگر برای ثابت نگه داشتن فاصله از سطح، یا به‌عبارتی جریان، بستگی دارد. اکنون این کار را می‌توان با پایه‌های سرامیکی (پیزوالکتریک) انجام داد، که وقتی میدان الکتریکی به آنها اعمال می‌شود منبسط یا منقبض می‌شوند. محل آنها را می‌توان با دقت بسیار زیاد با تداخل‌سنج تعیین کرد، و از این راه می‌توان فاصلهٔ ثابتی بین نوک و سطح رویبه برقرار کرد.

از STM برای مطالعهٔ سطوح فلزات و بعضی نیمرساناها استفاده کرده‌اند. به‌تازگی، اتمها و مولکولها را روی سطوح، یا با لغزاندن آنها توسط نوک یا با بلند کردن آنها از سطح و نشاندن آنها در جای دیگر توسط نوک، جابه‌جا کرده‌اند.

پدیدهٔ تونل‌زنی همچنین وقتی روی می‌دهد که دو صفحهٔ فلزی را به هم نزدیک کنیم. شکل ۵ـ۶ وضعیت را بدون اختلاف پتانسیل و با اختلاف پتانسیل نشان می‌دهد. بدون اختلاف پتانسیل، تونل‌زنی ممکن نیست زیرا ترازها در دو طرف سد پر هستند. اعمال حتی یک میدان الکتریکی ضعیف باعث تغییر شکل جزئی سد ــ اثری که قابل چشمپوشی است ــ و پایین رفتن دریای فرمی در یک طرف سد می‌شود. در نتیجه، چند تراز خالی متناظر با ترازهای پر در طرف دیگر سد به‌وجود می‌آیند، و اکنون تونل‌زنی می‌تواند با ضریب تراگسیل زیر روی دهد

$$|T|^2 \simeq e^{-2\sqrt{(2mW/\hbar^2)}a} \qquad (۴۷_۵)$$

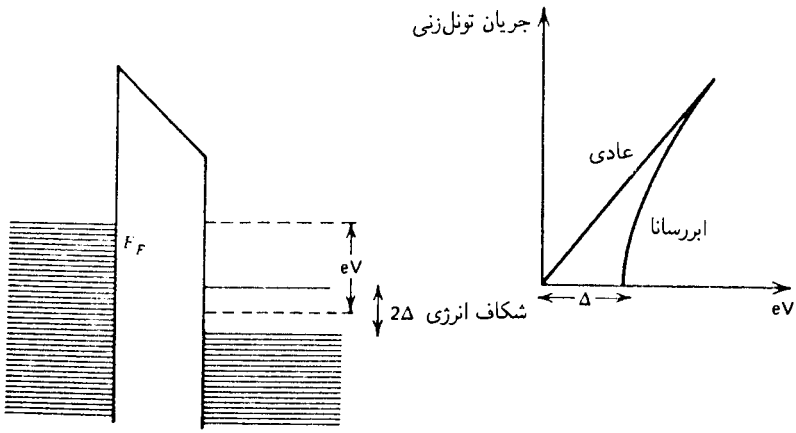
www.arsanjan.blogfa.com

این عامل مانند مقاومت عمل می‌کند. متأسفانه این رابطه به عرض گاف a بسیار حساس است، و چون برای تابع کاری از مرتبهٔ چند الکترون ولت این عرض باید از مرتبهٔ چند آنگستروم باشد، صاف کردن و موازی کردن صفحه‌های فلزی به‌اندازهٔ کافی امکانپذیر نیست. این فرمول برای توضیح جریانهایی به‌کار می‌رود که بین دو صفحه‌ای برقرارند که با یک اکسید از هم جدا شده‌اند $(\mathrm{Ni}-\mathrm{NiO}-\mathrm{Pb})$ و فاصلهٔ آنها را می‌توان تا ۵۰ Å کوچک کرد، و در این مورد با آزمایش توافق دارد.

تونل‌زنی در ابررساناها

یک اثر جالب توجه وقتی روی می‌دهد که فلز طرف راست در حالت ابررسانایی باشد. یک مشخصهٔ چنین حالتی این است که در بالای تراز فرمی گافی در چگالی تراز وجود دارد، یعنی بین انرژیهای $E_F-\Delta$ و $E_F+\Delta$، که در آنها Δ از مرتبهٔ $10^{-3}\,\mathrm{eV}$ و انرژی فرمی E_F از مرتبهٔ $10\,\mathrm{eV}$ است، هیچ حالت مجازی وجود ندارد. این ترازها از بین نمی‌روند بلکه به بالا و پایین فشرده می‌شوند، و در نتیجه چگالی تراز درست در پایین و بالای گاف بسیار زیاد است. اگر میدان الکتریکی به‌اندازهٔ کافی کوچک باشد، یعنی اگر $a\mathscr{E} \leq \Delta/e$، تونل‌زنی روی نخواهد داد زیرا الکترونها جایی برای رفتن ندارند. ویژگیهای کیفی رابطهٔ جریان-ولتاژ و نمودار انرژی در شکل ۵ـ۷ نشان داده شده‌اند. این ویژگیها با آزمایشهایی که جیائور برای نخستین بار در سال ۱۹۶۰ انجام داد. به‌خوبی توافق دارند.

از این آزمایشهای تونل‌زنی می‌توان برای مطالعهٔ جزئیات حالت ابررسانایی استفاده کرد. اعتقاد بر این است که گاف موجود در چگالی تراز انرژی در بالای دریای فرمی ناشی از جاذبهٔ میان



شکل۵ـ۷ نمودار انرژی برای تونل‌زنی از فلز به ابررسانا. در اینجا، برخلاف تونل‌زنی فلز-فلز در شکل ۵ـ۶، تونل‌زدن به درون گاف انرژی مجاز نیست. این وضعیت، چنانکه نشان داده شده است، بر مشخصهٔ جریان-ولتاژ تأثیر می‌گذارد.

www.arsanjan.blogfa.com

زوجهای الکترون است، و برابر است با انرژی لازم برای شکستن این زوج. با این تصویر، می‌توان انتظار داشت که پرتودهی به "ساندویچ" ابررسانا-اکسید-ابررسانا بعضی از زوجها را بشکند، و تک‌الکترونهایی که از فوتونها انرژی جنبشی می‌گیرند می‌توانند به ناحیهٔ تراز‌های اشغال‌نشده در بالای گاف بروند، و سپس در گاف تونل بزنند، و در نتیجه جریان افزایش می‌یابد. این تونل‌زنیِ "فوتون-یاری" مشاهده شده است. در مثالهای دیگر تونل‌زنی در ابررساناها اتصالهای جوزفسون دخالت دارند.[۴]

تونل‌زنی در فیزیک هسته‌ای

پدیدهٔ تونل‌زنی در فیزیک هسته‌ای نیز اهمیت دارد. هسته‌ها دستگاههای بسیار پیچیده‌ای هستند، اما در شرایط خاصی می‌توان آنها را به‌صورت ذرات مستقلی در نظر گرفت که ترازهای یک چاه پتانسیل را اشغال کرده‌اند. با این تصویر ذهنی، واپاشی یک هسته به ذرهٔ α (هستهٔ هلیم با $Z = ۲$) و هستهٔ فرزند را می‌توان تونل‌زنی ذرهٔ α در سدی توصیف کرد که از پتانسیل کولنی میان هستهٔ فرزند و ذرهٔ α ناشی می‌شود. ذرهٔ α را نباید در حالت مقید در نظر گرفت: اگر چنین بود، هسته نمی‌توانست واپاشد. در واقع، باید انرژی این ذره را مثبت گرفت، و تنها مانع واپاشی آن وجود سد است.[۵]

می‌نویسیم

$$|T|^۲ = e^{-G} \qquad (۴۸\text{-}۵)$$

که در آن

$$G = ۲\left(\frac{۲m}{\hbar^۲}\right)^{۱/۲} \int_R^b dr \left(\frac{Z_۱ Z_۲ e^۲}{r} - E\right)^{۱/۲} \qquad (۴۹\text{-}۵)$$

R شعاع هسته است[۶]، و b نقطهٔ برگشت است که از صفر شدن انتگرالده به‌دست می‌آید (شکل ۵-۸)؛ $A_۱$ بار هستهٔ فرزند، و $Z_۲$ بار ذره‌ای است که گسیل می‌شود (در اینجا برابر با ۲ است). انتگرال را

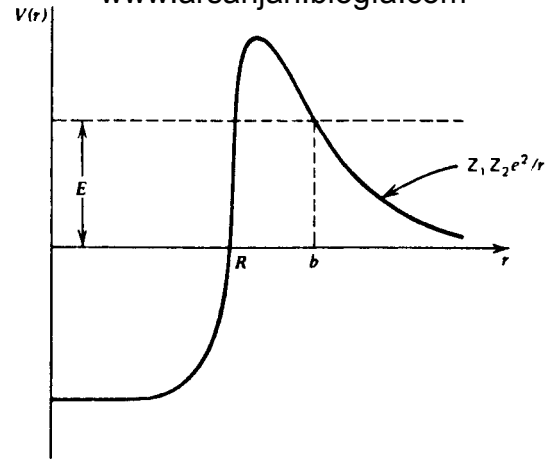
---

۴. بحث زیبایی دربارهٔ ابررسانایی و اثرهای مختلف جوزفسون را می‌توان در فصل ۲۱ از جلد سوم کتاب زیر یافت:
R H Feynman, R B Leighton and M Sands, *Feynman Lectures on Physics*, Addison-Wesley, Reading Mass, 1965.

۵. اگر تصور این امر برای شما مشکل است که دافعه مانع جدا شدن دو جسم می‌شود، فرایند وارون، یعنی گیراندازی e^- را در نظر بگیرید. بدیهی است که سد می‌خواهد ذرهٔ α را دور نگه دارد.

۶. در واقع، اولین براوردهای شعاع هسته از مطالعهٔ واپاشی آلفازا به‌دست آمدند. امروزه از اندازهٔ توزیع بار که با پراکندگی الکترونها از هسته‌ها به‌دست می‌آید برای تعیین شعاع هسته‌ها استفاده می‌کنند. البته نباید انتظار داشت که این دو رهیافت دقیقا نتیجهٔ یکسانی به‌دست دهند.

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۵ـ۸ سد پتانسیل برای واپاشی آلفازا.

می‌توان دقیقاً محاسبه کرد:

$$\int_R^b dr\ \left(\frac{1}{r}-\frac{1}{b}\right)^{1/2} = \sqrt{b}\left[\cos^{-1}\left(\frac{R}{b}\right)^{1/2} - \left(\frac{R}{b}-\frac{R^2}{b^2}\right)^{1/2}\right] \qquad (۵۰_۵)$$

در انرژیهای کم (نسبت به ارتفاع سد کولنی در $r=R$ داریم $b \gg R$، و در نتیجه

$$G \simeq 2\left(\frac{2mZ_1Z_2e^2b}{\hbar^2}\right)^{1/2}\left[\frac{\pi}{2}-\left(\frac{R}{b}\right)^{1/2}\right] \qquad (۵۱_۵)$$

که در آن $b = Z_1Z_2e^2/E$. اگر برای انرژی ذرهٔ α بنویسیم $E = mv^2/2$ که در آن v سرعت نهایی ذره است، به‌دست می‌آوریم

$$G \simeq \frac{2\pi Z_1Z_2e^2}{\hbar v} = 2\pi\alpha Z_1Z_2\left(\frac{c}{v}\right) \qquad (۵۲_۵)$$

زمانی را که طول می‌کشد تا ذرهٔ α از هسته خارج شود می‌توان به روش زیر براورد کرد: احتمال عبور از سد در هر برخورد e^{-G} است. بنابراین، تعداد برخوردهای لازم برای خروج برابر است با $n \simeq e^G$. زمان بین برخوردها از مرتبهٔ $2R/v$ است که در آن R شعاع هسته و v سرعت ذرهٔ α در داخل هسته است. بنابراین، طول‌عمر برابر است با

$$\tau \simeq \frac{2R}{v}e^G \qquad (۵۳_۵)$$

www.arsanjan.blogfa.com

سرعت ذرهٔ α در داخل هسته مفهوم مبهمی است، و کل تصویر در واقع کلاسیک است، و از این‌رو عامل جلو e^G را نمی‌توان بدون یک نظریهٔ مناسبتر به‌درستی پیش‌بینی کرد. از ملاحظات بالا تنها مرتبهٔ بزرگی آن‌را به‌دست می‌آوریم. برای ذرهٔ α با انرژی ۱MeV داریم

$$v = \sqrt{\frac{2E}{m}} = c\sqrt{\frac{2E}{mc^2}} = 3 \times 10^{10}\sqrt{\frac{2}{4 \times 940}} \simeq 7{,}0 \times 10^8 \mathrm{cm/s}$$

علاوه بر این، برای R می‌گیریم

$$R \simeq 1{,}5 \times 10^{-13} A^{1/3} \mathrm{cm} \qquad (5\text{-}54)$$

و به‌ازای $A = 216$، عامل مزبور را $2{,}6 \times 10^{-21}$ به‌دست می‌آوریم. همچنین، می‌توان G را به‌صورت زیر نوشت

$$G \simeq 4\frac{Z_1}{\sqrt{E(\mathrm{MeV})}} \qquad (5\text{-}55)$$

بنابراین، برای αهای کم‌انرژی، خط راست زیر به‌دست می‌آید

$$\log_{10}\frac{1}{\tau} \simeq \mathrm{const.} - 1{,}73\frac{Z_1}{\sqrt{E(\mathrm{MeV})}} \qquad (5\text{-}56)$$

که ثابت آن، وقتی τ به‌جای ثانیه برحسب سال سنجیده می‌شود، از مرتبهٔ ۲۷ تا ۲۸ است. شکل ۵ـ۹ نشان می‌دهد که با داده‌های مربوط به طول‌عمر تعداد زیادی گسیلنده‌های α برازش خوبی با فرمول زیر به‌دست می‌آید

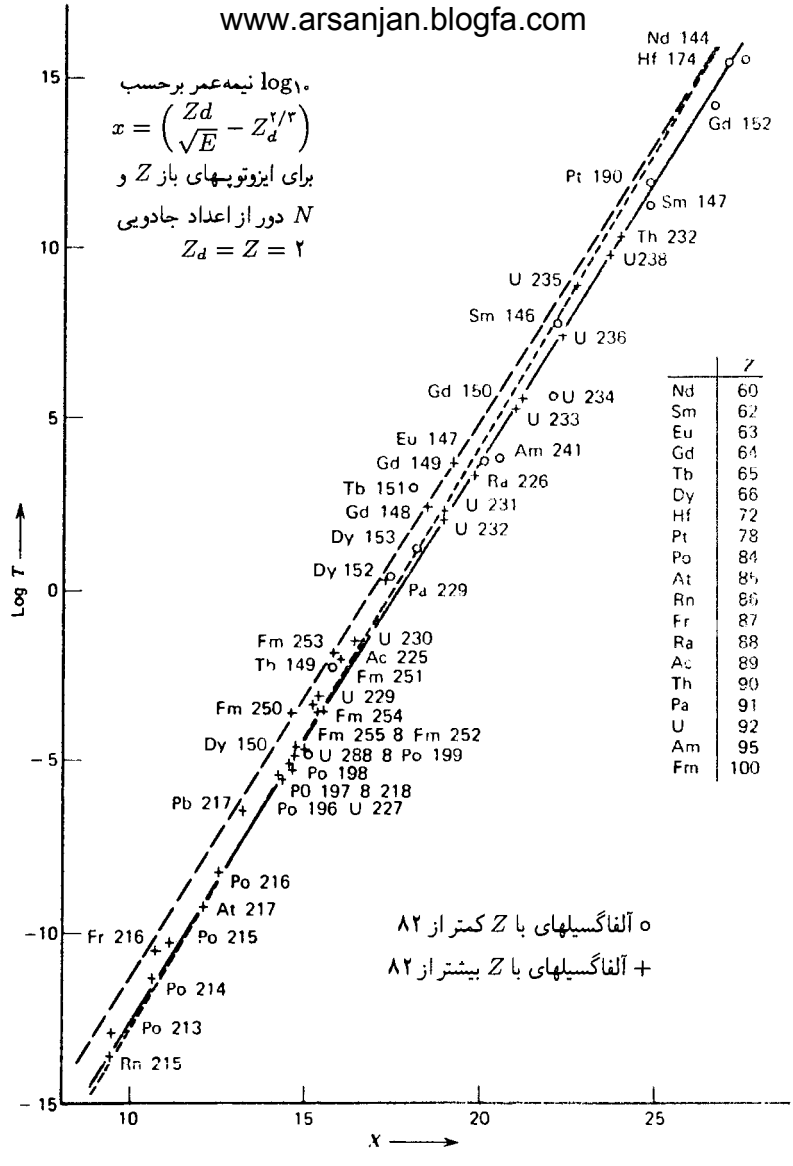
$$\log_{10}\frac{1}{\tau} = C_2 - C_1\frac{Z_1}{\sqrt{E}}$$

که در آن $C_1 = 1{,}61$ و $C_2 = 28{,}9 + 1{,}6Z_1^{2/3}$. بدین‌ترتیب، ملاحظات بسیار ساده برازش نسبتاً چشمگیری با داده‌ها به‌دست می‌دهند.

برای انرژیهای بزرگتر α، عامل G تابع R است، و با $R = r_0 A^{1/3}$ می‌بینیم که r_0 ثابت است، یعنی این تصور که یک سد کولنی جای پتانسیل واقعی را در خارج از هسته به‌عهده گرفته است چندان بی‌اعتبار نیست. در اینجا نیز با بررسیهای سادهٔ کیفی می‌توان داده‌ها را توجیه کرد.

این واقعیت که احتمال یک واکنش (مثلاً گیراندازی) بین هسته‌ها با عامل $e^{-2(Z_1Z_2/\sqrt{E})}$ (برای α، $Z_2 = 2$) کاهش می‌یابد ایجاب می‌کند که در انرژیهای کم و یا برای Zهای بزرگ این

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۵ـ۹ نمودار $\log_{۱۰} ۱/\tau$ برحسب $C_۲ - C_۱ Z_۱/\sqrt{E}$ با $C_۱ = ۱٫۶۱$ و $C_۲ = ۲۸٫۹ + ۱٫۶ Z_۱^{۲/۳}$ که کند تغییر است.[۷]

واکنشها نادر باشند. به‌همین دلیل است که تمام کوششها برای ساختن رآکتورهای گرماهسته‌ای را

7. E K Hyde, I Perlman, and G T Seaborg, *The Nuclear Properties of the Heavy Elements*, Vol. 1, Prentice Hall, Englewood Cliffs, N J (1964), reprinted by permission.

www.arsanjan.blogfa.com

روی سوختن هیدروژن (در واقع هیدروژن سنگین ــ دوتریم) متمرکز می‌کنند:

$$_1H^2 + {}_1H^2 \rightarrow {}_2He^3 + n \qquad (3{,}27\ \text{MeV})$$

$$_1H^2 + {}_1H^2 \rightarrow {}_2H^3 + p \qquad (4{,}03\ \text{MeV})$$

$$_1H^2 + {}_1H^3 \rightarrow {}_2He^4 + n \qquad (17{,}6\ \text{MeV})$$

زیرا واکنشهایی که در آنها عناصری با Zهای بزرگتر دخیل‌اند به انرژیهای بسیار بیشتر، یعنی دماهای بسیار زیادتر، نیاز دارند، و از این‌رو مسائل محصورسازی آنها جدی‌تر است. به همین دلیل، در رآکتورهای هسته‌ای برای شکافت عناصر سنگین از نوترون استفاده می‌کنند. پروتونها، در انرژیهای کم موجود، نمی‌توانند برای انجام واکنش با هسته‌ها به‌اندازهٔ کافی به آنها نزدیک شوند.

حالتهای مقید در چاه پتانسیل

علاوه بر جوابهای مربوط به $E > 0$ که در بخش چاه پتانسیل بررسی کردیم، جالب توجه است که برای پتانسیل منفی، یعنی $V_0 > 0$ در ۵ـ۲۰، جوابهایی به‌ازای $E < 0$ نیز وجود دارند. خواهیم دید که این جوابها گسسته‌اند. با نمادنگاری

$$\kappa^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} \qquad (5\text{ـ}57)$$

جوابهای مربوط به ناحیه‌های خارج از چاه که در بینهایت کراندار هستند عبارت‌اند از

$$\begin{aligned} u(x) &= C_1\, e^{\kappa x} && x < -a \\ u(x) &= C_2\, e^{-\kappa x} && a < x \end{aligned} \qquad (5\text{ـ}58)$$

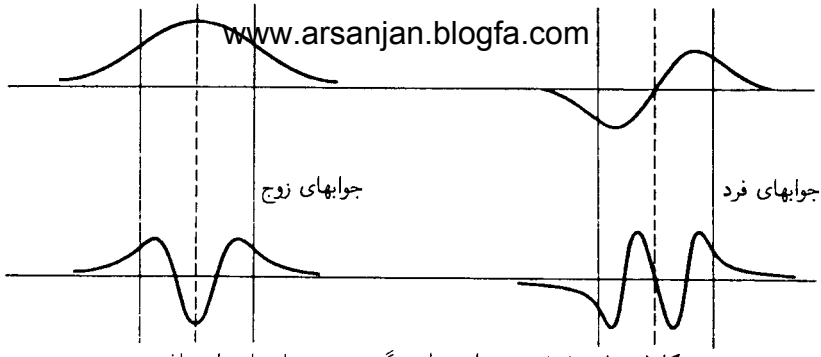
چون با تابعهای حقیقی سروکار داریم، بهتر است جواب داخل چاه را به‌صورت زیر بنویسیم

$$u(x) = A\, \cos\, qx + B\, \sin\, qx \qquad -a < x < a \qquad (5\text{ـ}59)$$

توجه کنید که

$$q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - |E|) > 0 \qquad (5\text{ـ}60)$$

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۵ـ۱۰ جوابهای مربوط به طیف گسسته در چاه پتانسیل جاذب.

از جورکردن جوابها و مشتقها در لبه‌های $x = \pm a$ داریم

$$\begin{aligned} C_1\, e^{-\kappa a} &= A\, \cos\, qa - B\, \sin\, qa \\ \kappa C_1\, e^{-\kappa a} &= q(A\, \sin\, qa + B\, \cos\, qa) \\ C_2\, e^{-\kappa a} &= A\, \cos\, qa + B\, \sin\, qa \\ -\kappa C_2\, e^{-\kappa a} &= -q(A\, \sin\, qa - B\, \cos\, qa) \end{aligned} \qquad (۶۱_۵)$$

از ترکیب این معادله‌ها به‌دست می‌آوریم

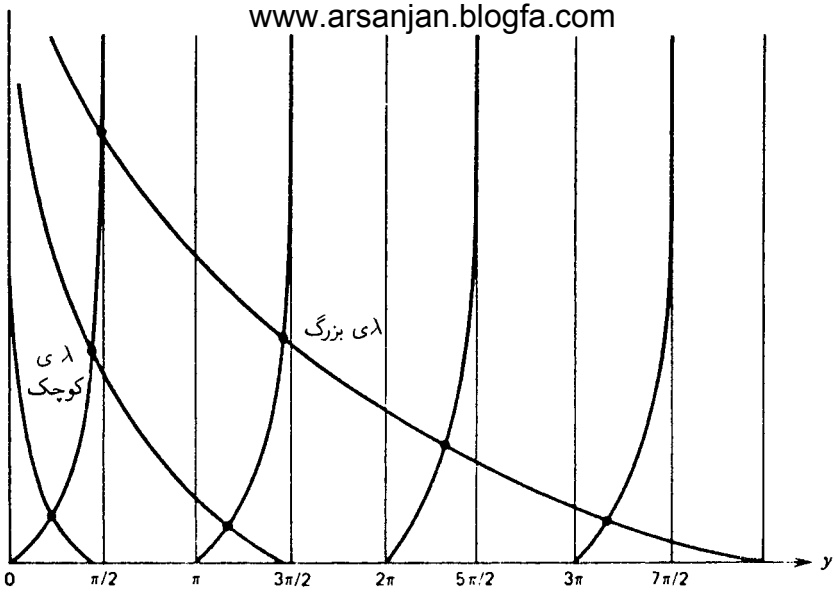
$$\begin{aligned} \kappa &= q\frac{A\, \sin\, qa - B\, \cos\, qa}{A\, \cos\, qa + B\, \sin\, qa} \\ &= q\frac{A\, \sin\, qa - B\, \cos\, qa}{A\, \cos\, qa + B\, \sin\, qa} \end{aligned} \qquad (۶۲_۵)$$

این تساوی ایجاب می‌کند که $AB = 0$، یعنی جوابها نسبت به x یا زوج‌اند ($B = 0$) یا فرد ($A = 0$). این توابع موج تقریباً به‌صورتی هستند که در شکل ۵ـ۱۰ نشان داده شده‌اند. حالت پایه، که گره ندارد، زوج است. این یک ویژگی کلی دستگاههای ساده است. شرایط تعیین‌کنندهٔ انرژی از ۵ـ۶۲ به‌دست می‌آیند:

$$\begin{aligned} \kappa &= q\, \tan\, qa \quad \text{جوابهای زوج} \\ \kappa &= -q\, \cot\, qa \quad \text{جوابهای فرد} \end{aligned} \qquad (۶۳_۵)$$

این رابطه‌ها را جدا از هم بررسی می‌کنیم.

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۵ـ۱۱ موقعیت ویژه‌مقدارهای گسسته برای جوابهای زوج در چاه مربعی. منحنیهای صعودی نمودار $\tan y$ هستند؛ منحنیهای نزولی تابع $\sqrt{\lambda - y^2}/y$ را به‌ازای مقادیر مختلف λ نمایش می‌دهند.

(الف) جوابهای زوج:
با نمادنگاری

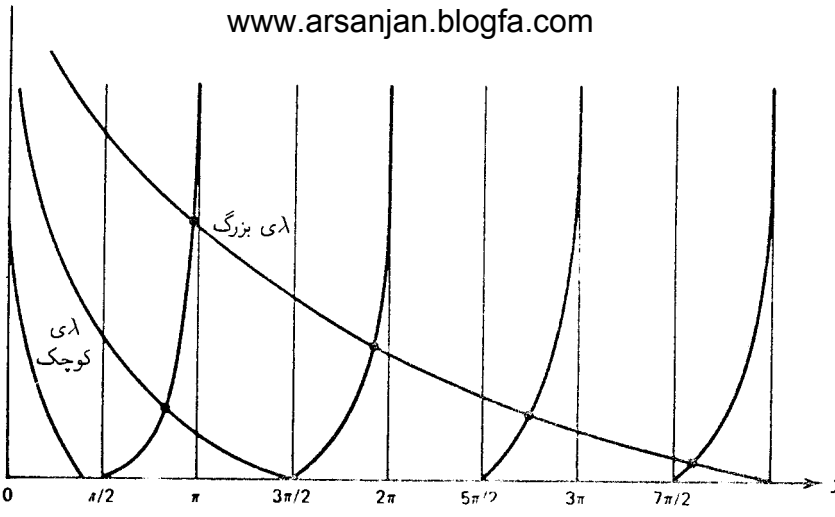
$$\lambda = \frac{2mV_0 a^2}{h^2} \qquad (۶۴ـ۵)$$
$$y = qa$$

اولین رابطه از ۵ـ۶۳ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y} = \tan y \qquad (۶۵ـ۵)$$

اگر $\tan y$ و $\sqrt{\lambda - y^2}/y$ را برحسب y ترسیم کنیم (شکل ۵ـ۱۱)، نقاط تلاقی آنها ویژه‌مقدارها را تعیین می‌کنند. این ویژه‌مقدارها یک مجموعهٔ گسسته تشکیل می‌دهند. هر چه λ بزرگتر باشد، منحنیهای مربوط به $\sqrt{\lambda - y^2}/y$ دورتر می‌روند، یعنی وقتی پتانسیل عمیقتر و یا پهنتر است تعداد حالتهای مقید بیشتر است. این شکل همچنین نشان می‌دهد که هر قدر هم که λ کوچک باشد، همیشه دست‌کم یک حالت مقید وجود دارد. این مشخصهٔ چاه جاذب یک‌بعدی است و برای

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۵ـ۱۲ موقعیت ویژه‌مقدارهای گسسته برای جوابهای فرد در چاه مربعی. منحنیهای صعودی نمودار $-\cot y$ هستند؛ منحنیهای نزولی تابع $\sqrt{\lambda - y^2}/y$ را به‌ازای مقادیر مختلف λ نمایش می‌دهند. توجه کنید که به‌ازای $\lambda < (\pi/2)^2$ هیچ ویژه‌مقدار فردی وجود ندارد.

پتانسیلهای سه‌بعدی، که رفتاری بسیار شبیه به مسئلهٔ جوابهای فرد دارند که بعداً بررسی می‌کنیم، صادق نیست. با بزرگتر شدن λ، فاصلهٔ ویژه‌مقدارها برحسب y به مقدار ثابتی میل می‌کند، و نقاط تلاقی از رابطهٔ تقریبی زیر به‌دست می‌آیند

$$y \simeq \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi \qquad n = 0, 1, 2, \ldots \qquad (۶۶_۵)$$

که همان رابطهٔ ویژه‌مقدار برای جوابهای زوج در یک چاه نامتناهی است که مرکز آن در مبدأ است (ویژه‌تابعها در ۴ـ۴۸ داده شده‌اند). این نتیجه غیرمنتظره نیست، زیرا برای حالتهایی که در اعماق چاه قرار دارند نامتناهی نبودن آن اهمیت چندانی ندارد.

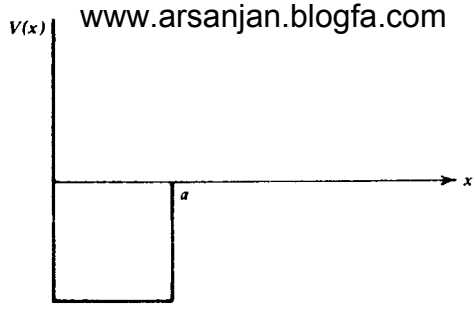
(ب) جوابهای فرد:

در اینجا رابطهٔ ویژه‌مقدار به‌صورت زیر است

$$\frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y} = -\cot y \qquad (۶۷_۵)$$

چون $-\cot y = \tan(\pi/2 + y)$، نمودار شکل ۵ـ۱۲ همان نمودار شکل ۵ـ۱۱ است با این تفاوت که منحنیهای تانژانت به اندازهٔ $\pi/2$ جابه‌جا شده‌اند. رفتار λی بزرگ کم‌وبیش یکسان است،

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۵ـ۱۳ پتانسیل معادل برای جوابهای فرد مسئلهٔ حالت مقید چاه مربعی.

و به جای ۵ـ۶۶ داریم

$$y \simeq n\pi \qquad n = ۱, ۲, ۳, \ldots \tag{۶۸ـ۵}$$

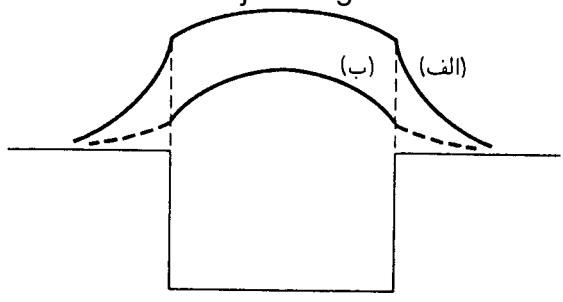
برخلاف مورد جوابهای زوج، در اینجا به‌شرطی تلاقی روی می‌دهد که $\sqrt{\lambda^۲ - \pi^۲/۴} > ۰$، یعنی اگر

$$\frac{۲mV_۰a^۲}{\hbar^۲} \geq \frac{\pi^۲}{۴} \tag{۶۹ـ۵}$$

جوابهای فرد همگی در $x = ۰$ صفر می‌شوند، و در نتیجه مسئلهٔ حالت مقید برای جوابهای فرد با مورد چاه پتانسیل شکل ۵ـ۱۳ یکسان است، زیرا برای این چاه باید شرط $u(۰) = ۰$ را اعمال کنیم. خواهیم دید که چنین شرایطی بر توابع موج در جهان سه‌بعدی اعمال می‌شوند.

محاسبات مفصلی که انجام دادیم به درک کیفی علت وجود ویژه‌مقدارهای گسسته کمک می‌کنند. این ویژه‌مقدارها از این‌رو ظاهر می‌شوند که توابع موج باید در بینهایت صفر شوند. این را می‌توان به‌صورت نموداری در شکل ۵ـ۱۴ دید. تابع موج حالت پایهٔ زوج‌ـپاریته در داخل چاه، که به‌صورت $\cos qx$ است، باید به‌طور پیوسته به یک نمایی نزولی $e^{-\alpha|x|}$، با $\alpha^۲ = ۲mE_B/\hbar^۲$، متصل شود. انرژی بستگی بزرگ به‌معنای یک نمایی است که به سرعت افت می‌کند. چون $q^۲ = (۲mV_۰/\hbar^۲ - \alpha^۲)$، انرژی بستگی بزرگ به‌معنای $q^۲$ی کوچک است، یعنی تابع‌موج کاملاً تخت است: بنابراین، جورکردن ناممکن است. به‌تدریج که E_Bی آزمونی را کاهش می‌دهیم، نمایی با سرعت کمتری افت می‌کند و تابع موج داخل چاه خمیدگی بیشتری می‌یابد، و در نتیجه در یک نقطه جورکردن (شیب پیوسته) ممکن می‌شود. اگر مقدار α را از این نقطه کمتر کنیم، منحنی خارجی تخت‌تر از آن خواهد بود که با تابع‌موج خمیده‌تر داخلی جور شود. برای اولین حالت برانگیخته، تابع موج فرد‌ـپاریته در مبدأ صفر می‌شود، و در نتیجه اگر بتواند در داخل چاه پتانسیل به‌طرف محور افقی برگردد تنها می‌تواند به یک نمایی نزولی متصل شود. شرط برگشت آن درست

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۵ـ۱۴ (الف) ناجوری با E_Bی بیش از حد بزرگ. (ب) ناجوری با E_Bی بیش از حد کوچک.

به‌اندازه‌ای که بتواند به یک خط راست ($\alpha = 0$) متصل شود این است که $\sin\ qa = 1$، و در نتیجه $qa = \pi/2$، که با شرط ۵ـ۶۹ متناظر است.

پتانسیلهای تابع دلتا

پتانسیلی را در نظر می‌گیریم که رفتار فضایی آن به صورت $\delta(x)$ است. چون $\delta(x)$ دارای بعد عکس طول است، بهتر است که پتانسیل جاذب $V(x)$ را به‌صورت زیر بنویسیم

$$V(x) = -\frac{\hbar^2 \lambda}{2ma}\delta(x) \qquad (۵ـ۷۰)$$

در اینجا a یک کمیت اختیاری با بعد طول است، و در نتیجه λ کمیت بی‌بعدی است که آن‌را برای مشخص کردن قدرت پتانسیل نوشته‌ایم. معادله‌ای که باید حل کنیم، به‌ازای $E < 0$، عبارت است از

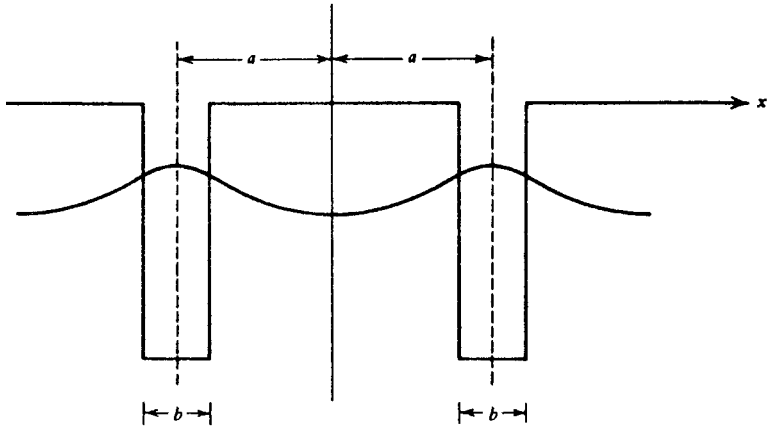
$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} - \kappa^2 u(x) = -\frac{\lambda}{a}\delta(x)\ u(x) \qquad (۵ـ۷۱)$$

که در آن $\kappa^2 = 2m|E|/\hbar^2$. جواب باید در همه جا، بجز $x = 0$، در معادلهٔ $d^2u/dx^2 - \kappa^2 x = 0$ صدق کند، و اگر بخواهیم در $x \to \pm\infty$ صفر شود باید بنویسیم

$$\begin{aligned} u(x) &= e^{-\kappa x} \qquad x > 0 \\ &= e^{\kappa x} \qquad x < 0 \end{aligned} \qquad (۵ـ۷۲)$$

به‌دلیل پیوستگی تابع موج، ضرایب جوابهای دو ناحیه یکسان هستند (و در اینجا آنها را برابر با ۱ گرفته‌ایم ــ می‌توان بعداً تابع را بهنجار کرد). مشتق تابع‌موج در این مورد پیوسته نیست. چنانکه

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۵ـ۱۵ چاه پتانسیل یک‌بعدی دوگانه. تابع‌موج یک حالت مقید ترسیم شده است. وضعیت حدی ۵ـ۷۵ را در نظر می‌گیریم.

قبلاً گفتیم (معادلهٔ ۵ـ۱۳)، داریم

$$\left(\frac{du}{dx}\right)_{x=0+} - \left(\frac{du}{dx}\right)_{x=0-} = -\frac{\lambda}{a}u(0) \qquad (۷۳_۵)$$

از اینجا رابطهٔ ویژه‌مقدار به‌دست می‌آید:

$$-\kappa - \kappa = -\frac{\lambda}{a}$$

یعنی

$$\kappa = \frac{\lambda}{2a} \qquad (۷۴_۵)$$

پتانسیل تابع دلتای دوگانه جالبتر است زیرا راه سریعی برای مطالعهٔ خواص چاه دوگانهٔ عمیق و کم عرض، که در شکل ۵ـ۱۵ نشان داده شده است، فراهم می‌کند. می‌نویسیم

$$(2m/\hbar^2)V(x) = -\frac{\lambda}{a}[\delta(x-a) + \delta(x+a)] \qquad (۷۵_۵)$$

(در اینجا a در توصیف بزرگی پتانسیل دیگر یک طول اختیاری نیست، بلکه به شکل پتانسیل بستگی دارد.) چون پتانسیل تحت تعویض $x \to -x$ متقارن است، جوابها باید پاریتهٔ معین داشته باشند، و ابتدا جوابهای زوج را در نظر می‌گیریم.

www.arsanjan.blogfa.com

۱. برای جواب زوج می‌نویسیم

$$\begin{aligned} u(x) &= e^{-\kappa x} && x > a \\ &= A\cosh \kappa x && a > x > -a \\ &= e^{\kappa x} && x < -a \end{aligned} \qquad (۷۶_۵)$$

و از پیوستگی تابع موج به‌دست می‌آوریم

$$e^{-\kappa a} = A\cosh \kappa a \qquad (۷۷_۵)$$

به‌علت تقارن، کافی است شرط ناپیوستگی برای مشتق در $x = a$ را به‌کار ببریم. چیز جدیدی از $x = -a$ حاصل نمی‌شود. به‌دست می‌آوریم

$$-\kappa e^{-\kappa a} - \kappa A \sinh \kappa a = -\frac{\lambda}{a} e^{-\kappa a} \qquad (۷۸_۵)$$

و رابطهٔ ویژه‌مقدار عبارت است از

$$\tanh \kappa a = \frac{\lambda}{\kappa a} - ۱ \qquad (۷۹_۵)$$

این رابطه را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$\frac{\lambda}{\kappa a} - ۱ = \frac{e^{\kappa a} - e^{-\kappa a}}{e^{\kappa a} + e^{-\kappa a}} = \frac{۱ - e^{-۲\kappa a}}{۱ + e^{-۲\kappa a}}$$

که از آن به‌دست می‌آوریم

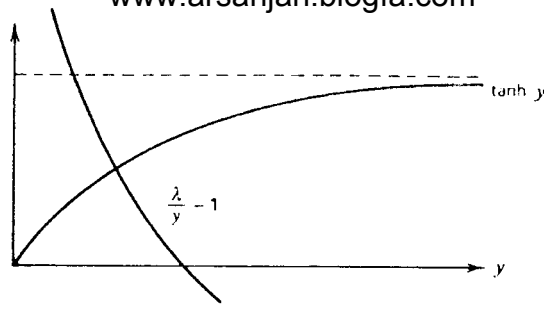
$$e^{-۲\kappa a} = \frac{۲\kappa a}{\lambda} - ۱ \qquad (۸۰_۵)$$

برای λی بزرگ باید $۲\kappa a$ اندکی بزرگتر از λ باشد. اگر $۲\kappa a = \lambda + \epsilon$ را امتحان کنیم، معادلهٔ ۵ـ۸۰ تا مرتبهٔ ϵ به‌صورت $e^{-\lambda} \approx \epsilon/\lambda$ در می‌آید، و بنابراین

$$۲\kappa a = \lambda + \lambda e^{-\lambda} \qquad (۸۱_۵)$$

می‌توان دید که برای جواب زوج همواره یک تک‌حالت مقید وجود دارد. شکل ۵ـ۱۶ نمودار معادلهٔ

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۵ـ۱۶ حل معادلهٔ ویژه‌مقدار $\tanh y = \lambda/y - 1$.

ویژه‌مقدار ۵ـ۷۹ را با $y = \kappa a$ نشان می‌دهد. از این شکل واضح است که، منحنی $\tanh y$ با $\lambda/y - 1$ تنها در یک نقطه تلاقی می‌کند. بدیهی است که در $y = \lambda$ طرف راست ۵ـ۷۹ صفر می‌شود، در حالی‌که $\tanh y > 0$. بنابراین، تلاقی به‌ازای $y < \lambda$ روی می‌دهد. از طرف دیگر، چون $\tanh y < 1$، باید در نقطهٔ تلاقی داشته باشیم $\lambda/y < 2$، یعنی

$$\kappa > \frac{\lambda}{2a} \qquad (۸۲_۵)$$

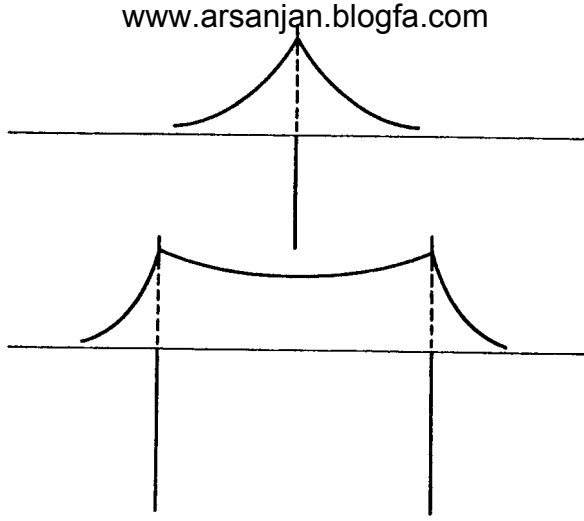
از مقایسهٔ این رابطه با ۵ـ۷۴ می‌بینیم که انرژی برای چاه دوگانه عدد منفی بزرگتری است، یعنی انرژی در این مورد کمتر است. توجه کنید که علت این امر این نیست که قدرت یک جفت پتانسیل از قدرت یک تک پتانسیل بیشتر است، چنانکه برای یک الکترون مقید به دو پروتون در مقایسه با یک الکترون مقید به یک پروتون صادق است. علت وابستگی شدیدتر آن است که، همان‌طور که شکل ۵ـ۱۷ نشان می‌دهد، همساز کردن یک نمایی سریعاً نزولی به یک تابع متقارن (در اینجا $\cosh x$) با یک ناپیوستگی در شیب به‌صورتی که داده شده است، آسانتر از همساز کردن آن با یک نمایی به همان اندازه نزولی در طرف دیگر پتانسیل است. در جهان واقعی، انرژی یک تک الکترون مقید به دو پروتون که فاصلهٔ کمی از یکدیگر دارند کمتر از انرژی یک تک پروتون به‌علاوهٔ یک اتم هیدروژن در دور دست است، اگرچه برای مورد اول دافعهٔ مؤثرتری بین پروتونها وجود دارد. در اینجا نیز اثر غالب، نحوهٔ همسازی تابع‌موج با وضعیت هندسی است.

۲. جواب فرد به‌صورت زیر است

$$\begin{aligned} u(x) &= e^{-\kappa x} && x > a \\ &= A \sinh \kappa x && a > x > -a \\ &= -e^{\kappa x} && x < -a \end{aligned} \qquad (۸۳_۵)$$

باز هم، به‌دلیل پاد تقارن، کافی است شرایط را در مثلاً $x = a$ به‌کار ببریم. از پیوستگی تابع موج

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۵ـ۱۷ توابع موج حالت مقید برای پتانسیلهای تابع دلتای جاذب تک و دوگانه. قدرت پتانسیل را ناپیوستگی شیبهای تابع موج در پتانسیلها تعیین می‌کند. این در هر سه مورد یکسان است و نشان می‌دهد که برای پتانسیل دوگانه افت با شیب تندتر به طرف راست و به طرف چپ امکانپذیر است.

داریم

$$A \sinh \kappa a = e^{-\kappa a} \qquad (۸۴_۵)$$

و معادلهٔ ناپیوستگی عبارت است از

$$-\kappa\, e^{-\kappa a} - \kappa A \cosh \kappa a = -\frac{\lambda}{a} e^{-\kappa a} \qquad (۸۵_۵)$$

از ترکیب این دو معادله شرط ویژه‌مقدار به‌دست می‌آید:

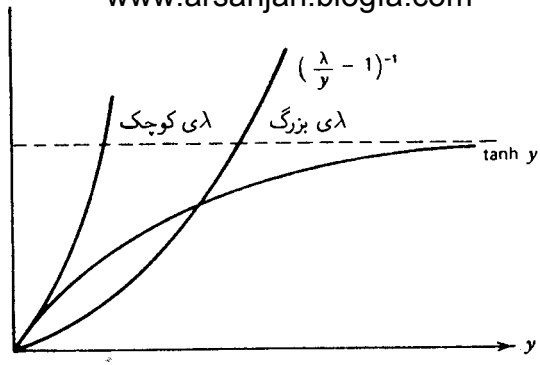
$$\coth \kappa a = \frac{\lambda}{\kappa a} - ۱ \qquad (۸۶_۵)$$

این معادله را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$\frac{\lambda}{\kappa a} - ۱ = \frac{e^{\kappa a} + e^{-\kappa a}}{e^{\kappa a} - e^{-\kappa a}} = \frac{۱ + e^{-۲\kappa a}}{۱ - e^{-۲\kappa a}}$$

درست مانند مورد ویژه‌مقدار حالت پایه، می‌توان جواب را به‌ازای $\lambda \gg ۱$ تعیین کرد. این جواب

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۵ـ۱۸ حل رابطهٔ ویژه‌مقدار $\tanh y = (\lambda/y - ۱)^{-۱}$.

از تغییر علامت $e^{-۲\kappa a}$ به‌دست می‌آید، و در نتیجه داریم

$$۲\kappa a = \lambda - \lambda e^{-\lambda} \qquad (۸۷_۵)$$

می‌توان نشان داد که این جواب فرد حداکثر یک حالت مقید دارد. شکل ۵ـ۱۸ نمودار عکس معادلهٔ ویژه‌مقدار یعنی

$$\tanh \kappa a = \left(\frac{\lambda}{\kappa a} - ۱\right)^{-۱}$$

را با $y = \kappa a$ نشان می‌دهد.

تنها در صورتی یک نقطهٔ تلاقی وجود دارد که در مبدأ شیب $\tanh y$بزرگتر از شیب $(\lambda/y - ۱)^{-۱}$ باشد، یعنی اگر

$$\lambda > ۱ \qquad (۸۸_۵)$$

در $y = \lambda/۲$، جملهٔ $(\lambda/y - ۱)^{-۱}$ برابر با ۱ است، در نتیجه تلاقی باید به‌ازای $y < \lambda/۲$ روی دهد، یعنی

$$\kappa < \frac{\lambda}{۲a} \qquad (۸۹_۵)$$

بنابراین، جواب فرد، اگر حالت مقیدی وجود داشته باشد، نسبت به جواب زوج با شدت کمتری مقید است. تابع‌موج، که باید از صفر بگذرد، باید بین دیواره‌ها شیب تندی داشته باشد، و از این‌رو

www.arsanjan.blogfa.com

تنها می‌تواند به یک نمایی همساز شود که با سرعت کمتری افت می‌کند. بسته به‌اندازهٔ λ، ممکن است یک حالت مقید با پاریتهٔ فرد وجود داشته باشد یا نداشته باشد.

اکنون برهم‌نهشی از حالت پایهٔ $u_e(x)$ با انرژی E_e و حالت برانگیختهٔ $u_o(x)$ با انرژی E_o را به‌صورت زیر در نظر می‌گیریم (e و o به‌ترتیب معرف زوج و فرد هستند)

$$\psi(x) = \frac{u_e(x) + \alpha u_o(x)}{\sqrt{1+\alpha^2}} \qquad (۹۰_۵)$$

که در آن α را به‌گونه‌ای انتخاب می‌کنیم که $\int_{-\infty}^{0} dx|\psi(x)|^2$ تا حد امکان کوچک شود، یعنی "الکترون" در دورترین فاصلهٔ ممکن در طرف راست جایگزیده باشد. پس از زمان t، تابع‌موج به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= (u_e(x)e^{-iE_e t/\hbar} + \alpha u_0(x)e^{-iE_0 t/\hbar})/\sqrt{1+\alpha^2} \\ &= e^{-iE_e t/\hbar}[u_e(x) + \alpha\, e^{-i(E_0 - E_e)t/\hbar} u_0(x)]/\sqrt{1+\alpha^2}\end{aligned} \qquad (۹۱_۵)$$

یعنی رابطهٔ فاز میان دو قسمت تغییر می‌کند. به‌ویژه، در زمانی که به‌ازای آن

$$e^{-i(E_0 - E_e)t/\hbar} = -1 \qquad (۹۲_۵)$$

"الکترون"، دقیقاً همان‌گونه که در $t = 0$ در طرف راست جایگزیده بود، در طرف چپ جایگزیده می‌شود. بنابراین، الکترون رفتاری نوسانی دارد که می‌توان آن‌را با رفت و برگشت الکترون بین دو پتانسیل با بسامد زیر بیان کرد

$$\omega = \omega_{oe} = \frac{E_o - E_e}{\hbar} \qquad (۹۳_۵)$$

با استفاده از مقادیر انرژی به‌ازای λی بزرگ به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}\omega &= \frac{1}{\hbar}\,\frac{\hbar^2}{2ma^2}(-(\kappa_0 a)^2 - (-(\kappa_e a)^2)) \\ &= \frac{\hbar}{8ma^2}((\lambda + \lambda e^{-\lambda})^2 - (\lambda - \lambda e^{-\lambda})^2) \\ &= \frac{\hbar\lambda^2}{2ma^2}e^{-\lambda} \\ &= \frac{\hbar}{2ma^2}e^{-\lambda + 2\ln\lambda}\end{aligned} \qquad (۹۴_۵)$$

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن عامل $\hbar/2ma^2$ دارای ابعاد بسامد است، و عامل نمایی نشاندهندهٔ وابستگی پارامتری به λ است. می‌توان ثابت کرد که دورهٔ نوسانی که در بالا توصیف کردیم تقریباً برابر با زمان تونل‌زنی در سدی است که دو چاه را از هم جدا می‌کند.[۸]

الگوی کرونیگ-پنی

فلزات معمولاً دارای ساختار بلوری هستند، یعنی یونها آرایشی دارند که از لحاظ فضایی دوره‌ای است. این دوره‌مندی بر حرکت الکترونهای آزاد در فلز تأثیر می‌گذارد، و این اثر با الگوی ساده‌ای نشان داده می‌شود که اکنون بررسی می‌کنیم. دوره‌مندی ساختار بلوری موجب می‌شود پتانسیل نیز دوره‌ای باشد، و از این‌رو می‌توان نوشت

$$V(x+a) = V(x) \qquad (۹۵_۵)$$

چون جملهٔ انرژی جنبشی $-(\hbar^2/2m)(d^2/dx^2)$ با تبدیل $x \to x+a$ تغییر نمی‌کند، تمام هامیلتونی تحت جابه‌جایی $x \to x+a$ ناوردا است. برای مورد پتانسیل صفر، یعنی وقتی جواب مربوط به یک انرژی معین $E = \hbar^2k^2/2m$ به‌صورت زیر است

$$\psi(x) = e^{ikx} \qquad (۹۶_۵)$$

جابه‌جایی ایجاب می‌کند

$$\psi(x+a) = e^{ik(x+a)} = e^{ika}\psi(x) \qquad (۹۷_۵)$$

که جواب اصلی ضرب‌در یک عامل فاز است، و در نتیجه

$$|\psi(x+a)|^2 = |\psi(x)|^2 \qquad (۹۸_۵)$$

بنابراین، مشاهده‌پذیرها در x و $x+a$ یکسان هستند، یعنی نمی‌توان گفت در x هستیم یا در $x+a$. همچنین در این مثال تأکید می‌کنیم که تفاوت $\psi(x)$ با $\psi(x+a)$ تنها در یک عامل فاز است، اما این عامل الزاماً به‌صورت e^{ikx} نخواهد بود.

در اینجا به‌اختصار به بررسی صوری‌تر این شرط می‌پردازیم. ناوردایی هامیلتونی در جابه‌جایی $x \to x+a$ را می‌توان به‌صورت زیر بررسی کرد. فرض کنید D_a عملگری است که قاعدهٔ عمل

---

۸. این‌را می‌توان برای پتانسیلهای شکل ۵ـ۱۵ توجیه کرد. رابطه‌های تقریبی که برای احتمال تراگسیل به‌دست آورده‌ایم در مورد پتانسیلهای تابع دلتا قابل استفاده نیستند.

www.arsanjan.blogfa.com

آن عبارت است از

$$D_a f(x) = f(x+a) \qquad (۹۹_۵)$$

ناوردایی مزبور ایجاب می‌کند که

$$[H, D_a] = ۰ \qquad (۱۰۰_۵)$$

اکنون به تعیین ویژه‌مقدارهای عملگر D_a می‌پردازیم. از معادلهٔ ویژه‌مقداری

$$D_a \psi(x) = \lambda_a \psi(x) \qquad (۱۰۱_۵)$$

و با توجه به

$$D_{-a} D_a f(x) = D_a D_{-a} f(x) = f(x) \qquad (۱۰۲_۵)$$

می‌بینیم که $\lambda_a \lambda_{-a} = ۱$، و در نتیجه λ_a باید به‌صورت $e^{\sigma a}$ باشد. اکنون $\psi(x)$، ویژه‌تابع همزمان H و D_a، را در نظر می‌گیریم و تابع زیر را تعریف می‌کنیم

$$u(x) = e^{-\sigma x} \psi(x) \qquad (۱۰۳_۵)$$

با اعمال D_a به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} D_a u(x) = u(x+a) &= e^{-\sigma(x+a)} D_a \psi(x) \\ &= e^{-\sigma(x+a)} e^{\sigma a} \psi(x) \\ &= e^{-\sigma x} \psi(x) = u(x) \end{aligned} \qquad (۱۰۴_۵)$$

بنابراین، $u(x)$ یک تابع دوره‌ای با دورهٔ a است:

$$u(x+a) = u(x) \qquad (۱۰۵_۵)$$

و $\psi(x) = e^{\sigma x} u(x)$. باید توجه کرد که انتگرال‌پذیری مجذوری ایجاب می‌کند که قسمت حقیقی σ صفر باشد، و در نتیجه ویژه‌تابع همزمان H و D_a باید به‌صورت زیر باشد

$$\psi(x) = e^{ix \mathrm{Im}\sigma} u(x) \qquad (۱۰۶_۵)$$

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن $u(x) = u(x+a)$. بهتر است بنویسیم $\mathrm{Im}\sigma = \phi/a$. رابطهٔ ۵ـ۱۰۶ را، که قضیهٔ بلوخ نامیده می‌شود، نخستین بار فلیکس بلوخ در مکانیک کوانتومی به‌کار برد، اما آن‌را در متون ریاضی قضیهٔ فلوکه می‌نامند.

برای ساده کردن جبر مسئله، پتانسیل $V(x)$ را به‌صورت رشته‌ای از پتانسیلهای تابع دلتای دافعه می‌گیریم:

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\lambda}{a}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta(x-na) \qquad (۱۰۷_۵)$$

در غیر از نقاط $x = na$، جواب عبارت است از جواب معادلهٔ ذرهٔ آزاد است، یعنی ترکیبی خطی از $\sin\ kx$ و $\cos\ kx$ است (برای سادگی با توابع حقیقی کار می‌کنیم). در ناحیه R_n که با $(n-1)a \le x \le na$ تعریف می‌شود، فرض می‌کنیم

$$\psi(x) = A_n \sin\ k(x-na) + B_n \cos\ k(x-na) \qquad (۱۰۸_۵)$$

و در ناحیهٔ R_{n+1} که با $na \le x \le (n+1)$ تعریف می‌شود داریم

$$\psi(x) = A_{n+1}\sin\ k[x-(n+1)a] + B_{n+1}\cos\ k[x-(n+1)a] \qquad (۱۰۹_۵)$$

پیوستگی تابع‌موج (در $x = na$) ایجاب می‌کند که

$$-A_{n+1}\sin\ ka + B_{n+1}\cos\ ka = B_n \qquad (۱۱۰_۵)$$

و شرط ناپیوستگی ۵ـ۱۳ در اینجا به‌صورت زیر در می‌آید

$$kA_{n+1}\cos\ ka + kB_{n+1}\sin\ ka - kA_n = \frac{\lambda}{a}B_n \qquad (۱۱۱_۵)$$

از این دو معادله به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} A_{n+1} &= A_n\cos\ ka + (g\ \cos\ ka - \sin\ ka)B_n \\ B_{n+1} &= (g\ \sin\ ka + \cos\ ka)B_n + A_n\ \sin\ ka \end{aligned} \qquad (۱۱۲_۵)$$

که در آنها $g = \lambda/ka$.

www.arsanjan.blogfa.com

بنابه قضیهٔ بلوخ باید

$$\psi(x+a) = e^{i(x+a)\mathrm{Im}\sigma} u(x+a) = e^{i\phi} e^{ix\mathrm{Im}\sigma} u(x) = e^{i\phi}\psi(x) \qquad (۱۱۳_۵)$$

که ایجاب می‌کند

$$\psi(R_{n+۱}) = e^{i\phi}\psi(R_n) \qquad (۱۱۴_۵)$$

این در صورتی صادق است که

$$\begin{aligned} A_{n+۱} &= e^{i\phi} A_n \\ B_{n+۱} &= e^{i\phi} B_n \end{aligned} \qquad (۱۱۵_۵)$$

با جاگذاری در ۵ـ۱۱۲، یک شرط سازگاری به‌دست می‌آوریم که عبارت است از

$$(e^{i\phi} - \cos\ ka)(e^{i\phi} - g\ \sin\ ka - \cos\ ka) = \sin\ ka(g\ \cos\ ka - \sin\ ka)$$

یعنی

$$e^{۲i\phi} - e^{i\phi}(۲\cos\ ka + g\ \sin\ ka) + ۱ = ۰$$

با ضرب کردن در $e^{-i\phi}$، به رابطهٔ زیر می‌رسیم

$$\cos\ \phi = \cos\ ka + \frac{۱}{۲}\, g\ \sin\ ka \qquad (۱۱۶_۵)$$

اگر شرایط مرزی دوره‌ای برای "بلور" را به‌گونه‌ای بگیریم که

$$\psi(R_{n+N}) = \psi(R_n) \qquad (۱۱۷_۵)$$

آنگاه از ۵ـ۱۱۴ به‌این نتیجه می‌رسیم که $e^{iN\phi} = ۱$، یعنی

$$\phi = \frac{۲\pi}{N} m \qquad m = ۰, \pm ۱, \pm ۲, \ldots \qquad (۱۱۸_۵)$$

www.arsanjan.blogfa.com

با استفاده از انتگرال‌پذیری مجدوری نشان دادیم که σ باید انگاری باشد. اگر مقادیر x تا بینهایت ادامه نداشته باشند، باید بنویسیم $(e^{\sigma a})^N = ۱$ و در نتیجه باید $\sigma a = i\phi$، که باز هم یک عدد انگاری محض است.

ϕ را با qa نشان می‌دهیم که در آن q عدد موج الکترون در جعبه‌ای است به طول Na با شرایط مرزی دوره‌ای و بدون پتانسیل، یعنی وقتی هیچ یونی وجود ندارد. بنابراین، رابطهٔ ۵ـ۱۱۶ باید به‌صورت زیر نوشته شود

$$\cos\ qa = \cos\ ka + \frac{۱}{۲}\,\lambda\frac{\sin\ ka}{ka} \qquad (۱۱۹\text{ـ}۵)$$

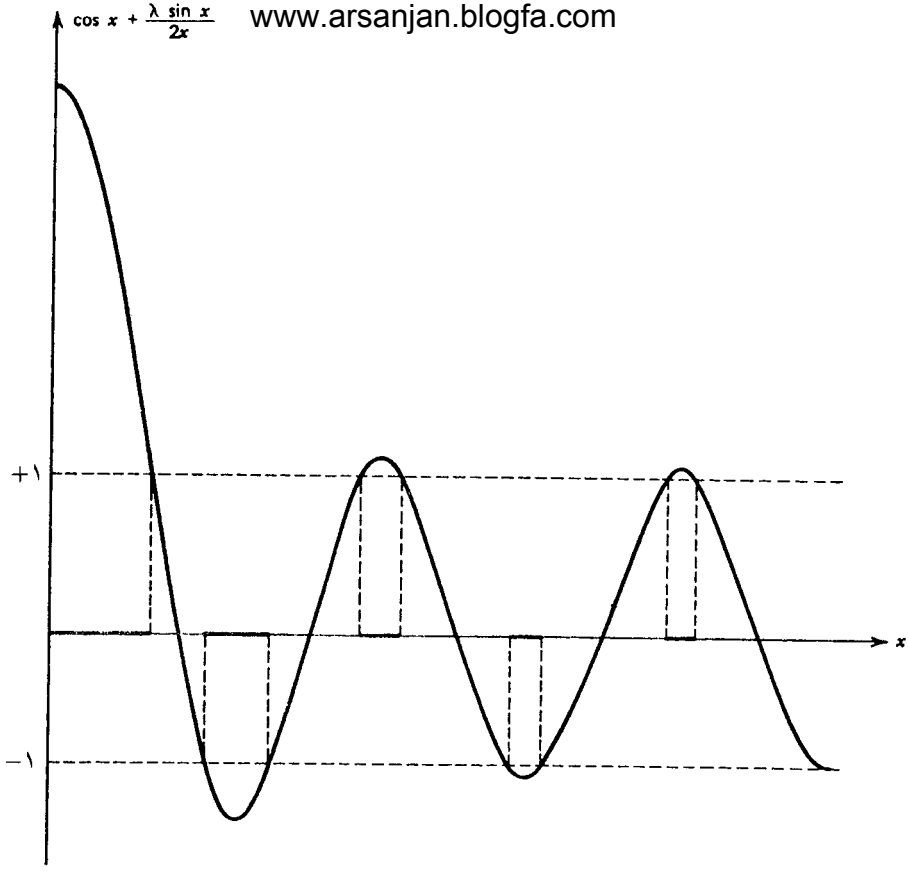
این نتیجه بسیار جالب توجه است زیرا نشان می‌دهد قدرمطلق طرف راست نمی‌تواند از ۱ بزرگتر باشد، یعنی روی گستره‌های ممکن انرژی $E = \hbar^۲k^۲/۲m$ محدودیتهایی وجود دارند که تابع پارامترهای "بلور" هستند. شکل ۵ـ۱۹ نمودار $\cos\ x + \lambda(\sin\ x)/۲x$ را برحسب $x = ka$ نشان می‌دهد. خطهای افقی کرانهای $\cos\ qa$ هستند، و ناحیه‌هایی از x که در آنها منحنی خارج از این محدوده می‌افتد ناحیه‌های ممنوع هستند. بنابراین، نوارهای انرژی مجازی وجود دارند که با ناحیه‌های ممنوع از هم جدا شده‌اند. توجه کنید که آغاز یک نوار ممنوع متناظر است با شرط

$$qa = n\pi \qquad n = \pm۱, \pm۲, \pm۳, \ldots \qquad (۱۲۰\text{ـ}۵)$$

اما این رابطه دقیقاً شرط بازتاب براگ در فرود عمودی است. وجود گافهای انرژی را می‌توان به‌طورکیفی درک کرد. در تقریب اول، الکترونها آزاد هستند مگر اینکه بازتاب براگ، وقتی اختلاف فاز امواجی که از اتمهای متوالی بازتابیده می‌شوند مضرب درستی از ۲π است روی دهد، یعنی وقتی شرط ۵ـ۱۲۰ برقرار است. این بازتابها امواج ساکن، با موجهای زوج و فردی که به‌ترتیب به‌صورت $\cos \pi x/a$ و $\sin \pi x/a$ هستند، به‌وجود می‌آورند. ترازهای انرژی متناظر با این امواج ساکن واگن‌اند. هرگاه برهم‌کنش جاذبه میان الکترونها و یونهای مثبت در $x = ma$ (که در آن m عدد درست است) را منظورکنیم، انرژی حالتهای زوج که در محل یونها به‌اوج می‌رسد افت می‌کند و انرژی حالتهای فرد که بین آنها حداکثر است افزایش می‌یابد. بنابراین، واگنی انرژی در $k = n\pi/a$ شکافته می‌شود که نتیجهٔ آن، چنانکه در شکل ۵ـ۱۹ نشان داده شده است، گافهای انرژی است.

الگوی کرونیگ-پنی به نظریهٔ فلزها، عایقها، و نیمرساناها مربوط می‌شود، زیرا (چنانکه بعداً خواهیم دید) ترازهای انرژی اشغال شده توسط الکترونها نمی‌توانند الکترونهای دیگری بپذیرند. در واقع، یک فلز می‌تواند نوار انرژیی داشته باشد که کاملاً پر نشده است. با اعمال میدان الکتریکی خارجی، الکترونها شتاب می‌گیرند و اگر حالتهای تکانه‌ای برای آنها موجود باشند این الکترونها تحت تأثیر میدان الکتریکی این حالتهای تکانه را اشغال می‌کنند. اما عایقها دارای نوارهای کاملاً پر

www.arsanjan.blogfa.com



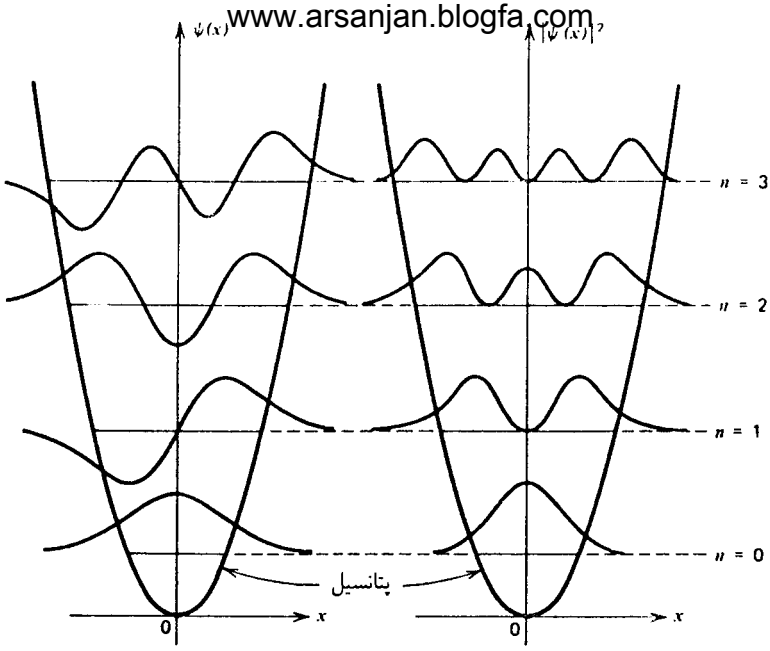
شکل۵ـ۱۹ نمودار $\cos x + (\lambda \sin x)/2x$ برحسب x. خطهای افقی کرانهای ± ۱ را نشان می‌دهند. ناحیه‌هایی از x که در آنها منحنی خارج از باریکهٔ $(+۱, -۱)$ قرار می‌گیرد ممنوع هستند.

هستند، و الکترونها نمی‌توانند در میدان الکتریکی شتاب بگیرند زیرا هیچ حالت خالی نزدیکی وجود ندارد. اگر میدان الکتریکی به‌اندازهٔ کافی شدید باشد، این الکترونها می‌توانند از گاف انرژی ممنوع "بجهند" و به یک نوار انرژی مجاز خالی بروند. این جهش متناظر است با خراب شدن عایق. نیمرسانا عایقی است که گاف ممنوع آن بسیار باریک است. در اینجا، تغییر وضعیت کوچکی، مثلاً افزایش دما، می‌تواند باعث "جهش" شود و عایق به رسانا تبدیل می‌شود.

نوسانگر هماهنگ

به‌عنوان آخرین مثال، نوسانگر هماهنگ را در نظر می‌گیریم (شکل ۵ـ۲۰). برخلاف مثالهایی که تاکنون بررسی کردیم، حل معادلهٔ دیفرانسیل نوسانگر هماهنگ چندان ساده نیست، و یک دلیل

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۵ـ۲۰ ویژه‌تابعهای نوسانگر هماهنگ، و چگالیهای احتمال برای چهار ویژه‌مقدار اول. به زوج و فرد بودن ویژه‌تابعها توجه کنید.

بررسی این مسئله یادگیری روش حل این نوع معادلات است.

هامیلتونی کلاسیک برای نوسانگر هماهنگ عبارت است از

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 \qquad (۱۲۱ـ۵)$$

و در نتیجه معادلهٔ ویژه‌مقداری آن به‌صورت زیر است

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2u(x) = Eu(x) \qquad (۱۲۲ـ۵)$$

با استفاده از بسامد نوسانگر

$$\omega = \sqrt{k/m} \qquad (۱۲۳ـ۵)$$

و با معرفی

$$\epsilon = \frac{2E}{\hbar\omega} \qquad (۱۲۴ـ۵)$$

www.arsanjan.blogfa.com

و تعویض متغیر

$$y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \qquad (۱۲۵_۵)$$

صورت ساده‌تر زیر را برای معادله به‌دست می‌آوریم

$$\frac{d^۲u}{dy^۲} + (\epsilon - y^۲)u = ۰ \qquad (۱۲۶_۵)$$

که در آن تمام کمیتها بی‌بعد هستند.

وقتی $y^۲ \to \infty$، جملهٔ شامل ϵ به‌ازای هر ویژه‌مقدار ϵ قابل چشمپوشی است، و از این‌رو $u(y)$ باید در معادلهٔ مجانبی زیر صدق کند

$$\frac{d^۲u_۰(y)}{dy^۲} - y^۲u_۰(y) = ۰ \qquad (۱۲۷_۵)$$

که با ضرب کردن در $۲du_۰/dy$ می‌توان آن‌را به‌صورت زیر نوشت

$$\frac{d}{dy}\left(\frac{du_۰}{dy}\right)^۲ - y^۲\frac{d}{dy}(u_۰^۲) = ۰ \qquad (۱۲۸_۵)$$

یا

$$\frac{d}{dy}\left[\left(\frac{du_۰}{dy}\right)^۲ - y^۲u_۰^۲\right] = -۲yu_۰^۲ \qquad (۱۲۹_۵)$$

اگر جملهٔ طرف راست را حذف کنیم این معادله تا حد زیادی ساده می‌شود. فرض می‌کنیم این کار را می‌توان انجام داد، و سپس درستی این فرض را وارسی می‌کنیم. با حذف طرف راست به‌دست می‌آوریم

$$\frac{du_۰}{dy} = (C + y^۲u_۰^۲)^{۱/۲}$$

که در آن C ثابت انتگرال‌گیری است. چون $u_۰(y)$ و $du_۰/dy$ باید در بینهایت صفر شوند، باید داشته باشیم $C = ۰$. بنابراین،

$$\frac{du_۰}{dy} = \pm yu_۰ \qquad (۱۳۰_۵)$$

www.arsanjan.blogfa.com

که جواب آن، که در بینهایت قابل قبول است، عبارت است از

$$u_0(y) = e^{-y^2/2} \qquad (۱۳۱_۵)$$

اکنون می‌توان دید که جملهٔ $2yu_0^2 = 2y\,e^{-y^2}$ در مقایسه با

$$\frac{d}{dy}(y^2u_0^2) = \frac{d}{dy}(y^2e^{-y^2}) \simeq -4y^3e^{-y^2}$$

به‌ازای yهای بزرگ واقعاً قابل چشمپوشی است. اگر تابع جدیدی مانند $h(y)$ را وارد کنیم به‌طوری که

$$u(y) = h(y)e^{-y^2/2} \qquad (۱۳۲_۵)$$

آنگاه معادلهٔ دیفرانسیل به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{d^2h(y)}{dy^2} - 2y\frac{dh(y)}{dy} + (\epsilon - 1)h(y) = 0 \qquad (۱۳۳_۵)$$

این نتیجه ممکن است ساده‌سازی چندانی به‌نظر نرسد، اما اکنون می‌توان با دانستن رفتار جواب در بینهایت رفتار آن‌را در نزدیکی $y = 0$ بررسی کرد. رشتهٔ توانی زیر را امتحان می‌کنیم

$$h(y) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m y^m \qquad (۱۳۴_۵)$$

با قرار دادن این رشته در معادلهٔ ۵ـ۱۳۳، معلوم می‌شود که ضرایب y^m در رابطهٔ بازگشتی زیر صدق می‌کنند

$$(m+1)(m+2)a_{m+2} = (2m - \epsilon + 1)a_m \qquad (۱۳۵_۵)$$

بنابراین، با داشتن a_0 و a_1، می‌توان رشته‌های زوج و فرد جداگانه‌ای به‌دست آورد. اینکه این رشته‌ها با هم مخلوط نمی‌شوند نتیجهٔ ناوردایی هامیلتونی تحت بازتاب است. به‌ازای یک مقدار اختیاری ϵ ، برای mهای بزرگ (مثلاً $m > N$) به‌دست می‌آوریم

$$a_{m+2} \simeq \frac{2}{m}a_m \qquad (۱۳۶_۵)$$

www.arsanjan.blogfa.com

بنابراین، جواب تقریباً برابر است با

$$h(y) = (\text{یک چندجمله‌ای برحسب } y) +$$
$$+a_N\left[y^N + \frac{۲}{N}y^{N+۲} + \frac{۲^۲}{N(N+۲)}y^{N+۴} + \frac{۲^۳}{N(N+۲)(N+۴)}y^{N+۶} + \cdots\right]$$

در اینجا برای سادگی تنها جواب زوج را در نظر گرفته‌ایم. رشتهٔ نامتناهی را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$A_N y^۲\left(\frac{N}{۲}-۱\right)!\left[\frac{(y^۲)^{N/۲-۱}}{(N/۲-۱)!} + \frac{(y^۲)^{N/۲}}{(N/۲)!} + \frac{(y^۲)^{N/۲+۱}}{(N/۲+۱)!} + \cdots\right]$$

بهتر است قرار می‌دهیم $N = ۲k$، و در نتیجه رشته به‌صورت زیر درمی‌آید

$$y^۲(k-۱)!\left[\frac{(y^۲)^{k-۱}}{(k-۱)!} + \frac{(y^۲)^k}{k!} + \frac{(y^۲)^{k+۱}}{(k+۱)!} + \cdots\right]$$
$$= y^۲(k-۱)!\left[e^{y^۲} - \left\{۱ + y^۲ + \frac{(y^۲)^۲}{۲!} + \cdots + \frac{(y^۲)^{k-۲}}{(k-۲)!}\right\}\right]$$

که به‌صورت یک چندجمله‌ای + یک ثابت $\times\ y^۲e^{y^۲}$ است. وقتی این را در ۵ـ۱۳۲ می‌گذاریم جوابی به‌دست می‌آوریم که در بینهایت صفر نمی‌شود. جواب قابل قبول وقتی به‌دست می‌آید که رابطهٔ بازگشتی ۳ـ۱۳۵ در جایی قطع شود. بنابراین، باید

$$\epsilon = ۲N + ۱ \qquad (۱۳۷\text{ـ}۵)$$

به‌ازای این مقدار خاص ϵ، از ترکیب روابط بازگشتی به‌دست می‌آوریم

$$a_{۲k} = (-۲)^k\frac{N(N-۲)\cdots(N-۲k+۴)(N-۲k+۲)}{(۲k)!}a_۰ \qquad (۱۳۸\text{ـ}۵)$$

و

$$a_{۲k+۱} = (-۲)^k\frac{(N-۱)(N-۳)\cdots(N-۲k+۳)(N-۲k+۱)}{(۲k+۱)!}a_۱ \qquad (۱۳۹\text{ـ}۵)$$

www.arsanjan.blogfa.com

بنابراین، به نتیجه‌های زیر می‌رسیم:

۱. ویژه‌مقدارها گسسته و هم‌فاصله هستند. معادلهٔ ۵ـ۱۳۷ تبدیل می‌شود به

$$E = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \qquad (۱۴۰\text{ـ}۵)$$

که صورت آشنایی دارد، زیرا این رابطهٔ میان انرژی و بسامد همان رابطه‌ای است که پلانک برای مدهای میدان تابش کشف کرد. این نتیجه اتفاقی نیست، زیرا تجزیهٔ میدان الکترومغناطیسی به مدهای بهنجار اساساً تجزیه به نوسانگرهای هماهنگی است که واجفتیده‌اند.

۲. چندجمله‌ایهای $h(y)$، با تقریب ثابتهای بهنجارش، چندجمله‌ایهای هرمیت $H_n(y)$ هستند که ویژگیهای آنها را می‌توان در بیشتر کتابهای درسی ریاضی فیزیک یافت. در اینجا تنها به بیان کلی ویژگیهای آنها بسنده می‌کنیم:

$H_n(y)$ در معادلهٔ دیفرانسیل زیر صدق می‌کند

$$\frac{d^2H_n(y)}{dy} - 2y\frac{dH_n(y)}{dy} + 2nH_n(y) = 0 \qquad (۱۴۱\text{ـ}۵)$$

رابطه‌های بازگشتی برای چندجمله‌ایهای هرمیت عبارت‌اند از

$$H_{n+1} - 2yH_n + 2nH_{n-1} = 0 \qquad (۱۴۲\text{ـ}۵)$$

$$H_{n+1} + \frac{dH_n}{dy} - 2yH_n = 0 \qquad (۱۴۳\text{ـ}۵)$$

همچنین داریم

$$\sum_n H_n(y)\frac{z^n}{n!} = e^{2zy-z^2} \qquad (۱۴۴\text{ـ}۵)$$

و

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2}\frac{d^n}{dy^n}e^{-y^2} \qquad (۱۴۵\text{ـ}۵)$$

بهنجارش چندجمله‌ایهای هرمیت به‌گونه‌ای است که

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy\, e^{-y^2}H_n(y)^2 = 2^n n!\sqrt{\pi} \qquad (۱۴۶\text{ـ}۵)$$

www.arsanjan.blogfa.com

صورت صریح تعدادی از چندجمله‌ایهای هرمیت را در اینجا می‌نویسیم

$$\begin{aligned}
H_0(y) &= 1 \\
H_1(y) &= 2y \\
H_2(y) &= 4y^2 - 2 \\
H_3(y) &= 8y^3 - 12y \\
H_4(y) &= 16y^4 - 48y^2 + 12 \\
H_5(y) &= 32y^5 - 160y^3 + 120y
\end{aligned} \qquad (۱۴۷_۵)$$

تعامد ویژه‌تابعهای متناظر با مقادیر مختلف n را می‌توان به‌سادگی اثبات کرد. اگر معادله‌های ویژه‌مقداری

$$\frac{d^2u_n}{dx^2} = \frac{mk}{\hbar^2}x^2u_n - \frac{2mE_n}{\hbar^2}u_n$$

و

$$\frac{d^2u_1^*}{dx^2} = \frac{mk}{\hbar^2}x^2u_1^* - \frac{2mE_1}{\hbar^2}u_1^*$$

را به‌ترتیب در u_l^* و u_n ضرب کنیم و سپس معادلهٔ دوم را از معادلهٔ اول کم کنیم، به‌دست می‌آوریم

$$\frac{d}{dx}\left(u_1^*\frac{du_n}{dx} - \frac{du_l^*}{dx}u_n\right) = \frac{2m}{\hbar^2}(E_l - E_n)u_l^*u_n$$

با انتگرال‌گیری از این معادله روی x از $-\infty$ تا $+\infty$، طرف چپ صفر می‌شود زیرا ویژه‌تابعها و مشتقهای آنها در $x = \pm\infty$ صفر می‌شوند. بنابراین، داریم

$$(E_l - E_n)\int_{-\infty}^{\infty} dx\; u_l^*(x)u_n(x) = 0 \qquad (۱۴۸_۵)$$

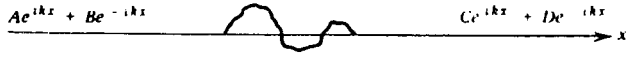
که نشان می‌دهد ویژه‌تابعهایی که برای آنها $E_l \neq E_n$ متعامد هستند. دلیل اهمیت نوسانگر هماهنگ در مکانیک کوانتومی، همچون در مکانیک کلاسیک، این است که هراختلال کوچک دستگاه از حالت تعادل آن باعث نوسانهایی کوچکی می‌شود که در نهایت به مدهای بهنجار، یعنی نوسانگرهای مستقل، قابل تجزیه‌اند.

www.arsanjan.blogfa.com

۳. چنانکه ۵ـ۱۴۰ نشان می‌دهد، حتی پایینترین حالت دارای مقداری انرژی است، که انرژی نقطهٔ صفر نامیده می‌شود. وجود این انرژی یک اثر صرفاً کوانتوم‌ـمکانیکی است، و می‌توان آن‌را با توجه به اصل عدم قطعیت تعبیر کرد. همین انرژی نقطهٔ صفر است که باعث می‌شود هلیم در دماهای فوق‌العاده کم "منجمد" نشود بلکه در فشارهای عادی تا دماهایی از مرتبهٔ $۱۰^{-۳}\mathrm{K}$ مایع باقی بماند. برای اتمهای سبکتر بسامد ω بزرگتر است، و به همین دلیل این اثر برای مثلاً نیتروژن روی نمی‌دهد. این اثر همچنین به جزئیات نیروهای میان اتمی نیز بستگی دارد، و از این‌رو است که هیدروژن مایع منجمد می‌شود.

مسائل

۵ـ۱ یک پتانسیل اختیاری جایگزیده در یک بخش متناهی از محور x را در نظر بگیرید. جوابهای معادلهٔ شرودینگر در ناحیه‌های چپ و راست این پتانسیل در شکل زیر داده شده‌اند



نشان دهید اگر بنویسیم

$$C = S_{۱۱}A + S_{۱۲}D$$
$$B = S_{۲۱}A + S_{۲۲}D$$

یعنی امواج "ورودی" و امواج "خروجی" را با معادلهٔ ماتریسی زیر به هم مربوط کنیم

$$\begin{pmatrix} C \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{۱۱} & S_{۱۲} \\ S_{۲۱} & S_{۲۲} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix}$$

آنگاه رابطه‌های زیر برقرارند

$$|S_{۱۱}|^۲ + |S_{۲۱}^۲|^۲ = ۱$$
$$|S_{۱۲}|^۲ + |S_{۲۲}|^۲ = ۱$$
$$S_{۱۱}S_{۱۲}^* + S_{۲۱}S_{۲۲}^* = ۰$$

با استفاده از این رابطه‌ها نشان دهید ماتریس پراکندگی

$$S = \begin{pmatrix} S_{۱۱} & S_{۱۲} \\ S_{۲۱} & S_{۲۲} \end{pmatrix}$$

www.arsanjan.blogfa.com

و ترانهاد آن یکانی هستند.

[راهنمایی: از پایستگی شار و اینکه A و B می‌توانند اعداد مختلط اختیاری باشند استفاده کنید.]

۵ـ۲ عناصر ماتریسی پراکندگی $S_{۱۱}$، $S_{۱۲}$، $S_{۲۱}$ و $S_{۲۲}$ را برای پتانسیل زیر محاسبه کنید

$$\begin{aligned} V(x) &= ۰ && x < -a \\ &= V_۰ && -a < x < a \\ &= ۰ && x < a \end{aligned}$$

و نشان دهید شرایط کلی مسئلهٔ ۵ـ۱ واقعاً برقرار هستند.

۵ـ۳ عناصر ماتریسی $S_{۱۱}$، ...، $S_{۲۲}$ توابعی از k هستند. نشان دهید

$$S_{۱۱}(-k) = S_{۱۱}^*(k)$$

$$S_{۲۲}(-k) = S_{۲۲}^*(k)$$

$$S_{۱۲}(-k) = S_{۲۱}^*(k)$$

یعنی ماتریس S دارای خاصیت زیر است

$$S(-k) = S^+(k)$$

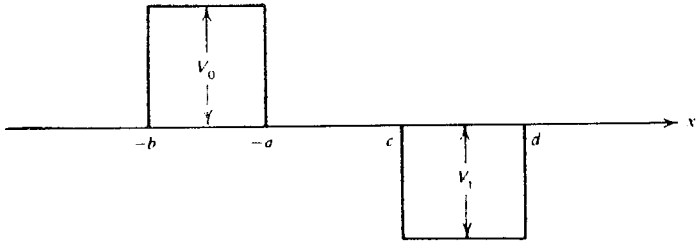
۵ـ۴ جواب فرد مربوط به چاه پتانسیل (مثلاً معادلهٔ ۵ـ۶۷) را در نظر بگیرید، که می‌توان از آن به عنوان الگو برای پتانسیل سه‌بعدی با تکانهٔ زاویه‌ای صفر استفاده کرد. اگر عرض چاه را $۱٫۴ \times ۱۰^{-۱۳}\text{cm}$ و انرژی بستگی دستگاه را $-۲٫۲\text{MeV}$ بگیریم، و اگر جرم مربوط $۰٫۸ \times ۱۰^{-۲۴}\text{g}$ باشد، عمق چاه پتانسیل را برحسب MeV به‌دست آورید.

[راهنمایی: (۱) ابتدا فاصله‌ها و جرمها را برحسب جرمی بیان کنید، که در نتیجه عرض چاه به‌صورت $d(\hbar/\mu c)$ و انرژی بستگی به‌صورت $\epsilon(\mu c^۲)$ درآید. جرم داده شده می‌تواند جرم مناسبی باشد. (۲) انرژی بستگی بسیار کوچک، تقریباً برابر با صفر، است. اگر این انرژی صفر می‌بود ۵ـ۶۹ مقدار $V_۰$ را به‌دست می‌داد. حول این مقدار بسط دهید.]

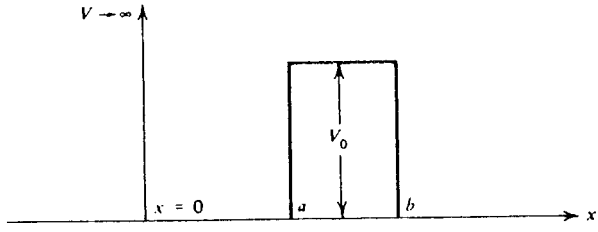
۵ـ۵ بدون حل معادلهٔ شرودینگر جوابها را برای موارد زیر به‌دست آورید به‌طوری که تنها جور

www.arsanjan.blogfa.com

کردن ویژه‌تابعها و مشتقهای آنها باقی بماند.



(الف) اگر پتانسیل نبود شار $\hbar k/m$ از سمت چپ می‌آمد؛ فرض کنید $E < V_0$.



(ب) اگر پتانسیل نبود شار $\hbar k/m$ از سمت راست می‌آمد؛ فرض کنید $E < V_0$.

۵ـ۶ نشان دهید شرایط مربوط به حالت مقید ۵ـ۶۳ را می‌توان با صفر کرن مخرج کسرها در ۵ـ۲۶ به‌ازای $k = i\kappa$ به‌دست آورد. ثابت کنید که این نتیجه اتفاقی نیست.

۵ـ۷ نشان دهید که برای پتانسیل

$$\frac{2m}{\hbar^2}V(x) = \frac{\lambda}{a}\delta(x-b)$$

ماتریس پراکندگی به‌صورت زیر است

$$\begin{pmatrix} \dfrac{2ika}{2ika-\lambda} & \dfrac{\lambda}{2ika-\lambda}e^{-2ikb} \\ \dfrac{\lambda}{2ika-\lambda}e^{2ikb} & \dfrac{2ika}{2ika-\lambda} \end{pmatrix}$$

ثابت کنید این ماتریس یکانی است، و اگر عناصر آن بینهایت شوند شرط مربوط به حالتهای مقید به‌دست می‌آید. (این نتیجه تنها برای $\lambda > 0$ برقرار است.)

۵ـ۸ مقدار α در ۵ـ۹۰ را چنان محاسبه کنید که ذره تا حد امکان دور از مبدأ و در سمت راست آن جایگزین شود.

۵ـ۹ توابع موج مربوط به سه ویژه‌مقدار اول نوسانگر هماهنگ را به تفصیل محاسبه کنید.

www.arsanjan.blogfa.com

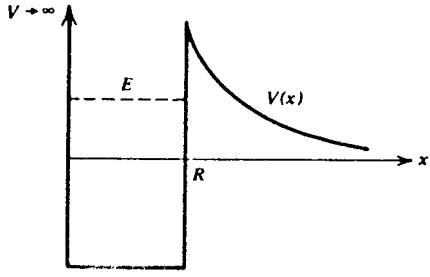
۵ـ۱۰ پتانسیل نوسانگر هماهنگ ساده را که با یک جمله کوچک درجهٔ سوم مختل شده است در نظر بگیرید:

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2\left(x^2 - \frac{1}{a}x^3\right)$$

اگر a در مقایسه با اندازهٔ مشخصهٔ $(\hbar/m\omega)^{1/2}$ بزرگ باشد، مدت زمانی را براورد کنید که طول می‌کشد تا ذره‌ای در حالت پایه به ناحیهٔ دور در سمت راست "نشت" کند. توجه کنید که فقط با این اختلال حالت کمترین انرژی وجود ندارد، زیرا به‌ازای xهای به‌اندازهٔ کافی بزرگ پتانسیل بینهایت عمیق می‌شود.

۵ـ۱۱ پتانسیلی را که با شکل زیر نشان داده شده است در نظر بگیرید، که در آن

$$V(x) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mx^2} \qquad x > R_0$$



طول عمر ذره‌ای با انرژی E را در این چاه پتانسیل براورد کنید. (پتانسیل $V(x)$ نمایشگر یک سد مرکزگریز در جهان سه‌بعدی است.) نتیجه را برحسب کمیت بی‌بعد l/kR بیان کنید، که در آن $E = \hbar^2k^2/2m$ و $l \gg 1$.

۵ـ۱۲ پتانسیل کرونیگ‌ـپنی را با شرط زیر در نظر بگیرید

$$\lambda = 3\pi$$

(الف) نمودار تفصیلی

$$\cos x + \frac{\lambda}{2}\frac{\sin x}{x}$$

را برحسب $x = ka$ ترسیم کنید.

www.arsanjan.blogfa.com

(ب) نشان دهید نوارهای انرژی ممنوع درست بالاتر از $ka = n\pi$ شروع می‌شوند.
(ج) نشان دهید با افزایش λ نوارهای انرژی مجاز باریکتر می‌شوند.
(د) انرژی $\hbar^2 k^2/2m$ را برحسب q ترسیم کنید.

۱۳ـ۵ پتانسیل زیر را در نظر بگیرید

$$\begin{aligned} V(X) &= \infty && x < 0 \\ &= -V_0 && 0 < x < a \\ &= 0 && a < x \end{aligned}$$

فرض کنید موج تختی با تکانه hk و شار hk/m از $+\infty$ فرستاده شده است. (الف) نشان دهید دامنهٔ موج بازتابیده را می‌توان به‌صورت $Ce^{i\delta}$ نوشت. (ب) C را محاسبه کنید و رابطه‌ای به‌دست آورید که از آن بتوان δ را تعیین کرد.

۱۴ـ۵ استدلال زیر را در نظر بگیرید: اگر الکترونی در پتانسیلی به عرض a داشته باشیم، انرژی جنبشی آن بنابه اصل عدم قطعیت بزرگتر از $\hbar^2/2ma^2$ است. بنابراین، برای اینکه حالت مقیدی وجود داشته باشد، انرژی پتانسیل نه تنها باید منفی باشد بلکه قدرمطلق آن باید بزرگتر از $\hbar^2/2ma^2$ باشد. از طرف دیگر، چنانکه دیدیم، برای چاه یک‌بعدی هر قدر هم که عمق چاه کم باشد همیشه یک حالت مقید وجود دارد. در این استدلال چه چیزی غلط است؟

۱۵ـ۵ پتانسیل زیر را در نظر بگیرید

$$\begin{aligned} V(x) &= \infty && x < 0 \\ &= 0 && x > a \\ &= \text{یک تابع منفی از } a \end{aligned}$$

فرض کنید تابع موج داخلی به‌گونه‌ای است که

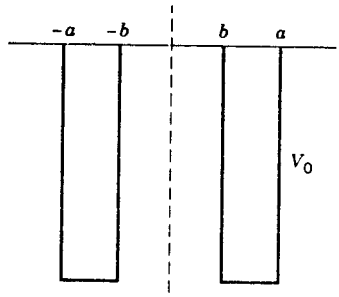
$$\frac{1}{u}\frac{du}{dx}\bigg|_{x=a} = f(E)$$

(الف) انرژی بستگی یک حالت مقید را برحسب $f(E_B)$ تعیین کنید.
(ب) فرض کنید $f(E)$ برحسب E به‌کندی تغییر می‌کند به‌طوری که می‌توان آن‌را ثابت گرفت. اگر تابع‌موج برای $x > a$ به‌صورت $e^{-ikx} + R(k)e^{ikx}$ باشد، دامنهٔ موج بازتابیدهٔ $R(k)$ را

www.arsanjan.blogfa.com

به‌دست آورید، و تحقیق کنید که $|R(k)| = ۱$.

۵ـ۱۶ ذره‌ای را در چاه دوگانهٔ شکل زیر در نظر بگیرید



نشان دهید شرایط ویژه‌مقدار را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$\tan q(a-b) = \frac{q\alpha(۱ + \tanh \alpha b)}{q^۲ - \alpha^۲ \tanh \alpha b}$$

و

$$\tan q(a-b) = \frac{q\alpha(۱ + \coth \alpha b)}{q^۲ - \alpha^۲ \coth \alpha b}$$

که به‌ترتیب مربوط به جوابهای زوج و فرد هستند، و در آنها

$$E + V_۰ = h^۲q^۲/۲m \quad \text{و} \quad -E = h^۲\alpha^۲/۲m$$

۵ـ۱۷ مثال مسئلهٔ ۵ـ۱۶ را در نظر بگیرید.

(الف) نشان دهید وقتی $b \to ۰$ شرایط ویژه‌مقدار به شرایط مربوط به چاه منفرد میل می‌کنند.

(ب) موردی را در نظر بگیرید که فاصلهٔ بین مراکز چاهها زیاد می‌شود اما عرض چاهها ثابت می‌ماند. نشان دهید ویژه‌مقدارهای زوج و فرد به یکدیگر نزدیک می‌شوند. اختلاف انرژی میان کمترین ویژه‌مقدارهای زوج و فرد را براورد کنید.

[راهنمایی: به‌ازای مقادیر بزرگ z داریم $\tanh z = ۱ - ۲e^{-۲z}$. $e^{-۲z}$ را تا کمترین مرتبه در نظر بگیرید.]

۵ـ۱۸ قضیهٔ ویریال را ثابت کنید، که در یک‌بعد به‌صورت زیر است

$$\left\langle \frac{p^۲}{۲m} \right\rangle = \frac{۱}{۲}\left\langle x\frac{dV}{dx} \right\rangle$$

www.arsanjan.blogfa.com

برای این کار (الف) نشان دهید برای توابع موج حقیقی $\psi(x)$ داریم

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\ \psi(x)\ x\frac{dV(x)}{dx}\psi(x) = -\langle V\rangle + ۲\int_{-\infty}^{\infty} dx\frac{d\psi}{dx}xV(x)\psi(x)$$

(ب) با استفاده از معادلهٔ ویژه‌مقداری انرژی ثابت کنید

$$۲\int_{-\infty}^{\infty} dx\frac{d\psi}{dx}xV(x)\psi(x) = E + \frac{\hbar^{۲}}{۲m}\int_{-\infty}^{\infty} dx\left(\frac{d\psi}{dx}\right)^{۲}$$

مراجع

الگوی کرونیگ‌ـپنی درکتاب زیر نیز به‌تفصیل بررسی شده است

E Merzbacher, *Quantum Mechanics* (2nd edition), John Wiley & Sons, New York, 1970.

برای بحث مفصلتری دربارهٔ "نظریهٔ نواری" مراجعه کنید به

C Kittel, *Introduction to Solid State Physics* (6th edition), John Wiley & Sons, New York, 1986, Chapter 9.

برای بحث کاملتری دربارهٔ نفوذ در سد، با استفاده از تقریب WKB، به کتابهای پیشرفته‌تری که در آخر این کتاب معرفی شده‌اند مراجعه کنید.

www.arsanjan.blogfa.com

۶

ساختار کلی مکانیک موجی

در این فصل به گردآوری و تشریح مفصل اصول و مفاهیمی می‌پردازیم که قبلاً در ضمن حل چندمسئلهٔ خاص به‌تدریج بیان کردیم. اصل موضوعهٔ بسط و معنای فیزیکی آن، عملگرها، بردارهای حالت، واگنی، و حد کلاسیک از این جمله هستند. در این فصل نمادنگاری دیراک را نیز معرفی می‌کنیم. از این نمادنگاری گاهی در بقیهٔ کتاب استفاده خواهیم کرد، اما موجز بودنش ارزش ارائه در این مرحله از مطالعهٔ مکانیک کوانتومی را به آن می‌دهد.

ویژه‌تابعها و ویژه‌مقدارها

عملگر هامیلتونی

حالت یک دستگاه فیزیکی با یک تابع‌موج توصیف می‌شود که حاوی تمام اطلاعات دربارهٔ دستگاه است. تابع‌موج به زمان وابسته است، و تحول زمانی آن با معادلهٔ زیر داده می‌شود

$$ih\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = H\psi(x,t) \qquad (۱\text{-}۶)$$

www.arsanjan.blogfa.com

عملگر H، هامیلتونی، که در مکانیک کوانتومی دارای نقشی اساسی است، روی تابع‌موج $\psi(x,t)$ عمل می‌کند. این عملگر برای دستگاه سادهٔ متشکل از یک ذره درپتانسیل V به‌صورت زیر است

$$H = \frac{p_{\text{op}}^{۲}}{۲m} + V(x) \qquad (۲\text{ـ}۶)$$

اگر $V(x)$ بستگی صریح به زمان نداشته باشد، می‌توان جواب معادلهٔ ۶ـ۱ را به‌صورت زیر نوشت

$$\psi(x,t) = u_E(x)e^{-iEt/\hbar} \qquad (۳\text{ـ}۶)$$

که در آن $u_E(x)$ جواب معادلهٔ زیر است

$$Hu_E(x) = Eu_E(x) \qquad (۴\text{ـ}۶)$$

$u_E(x)$ را ویژه‌تابع هامیلتونی و E را ویژه‌مقدار می‌نامند.

در این فصل روی دو ویژگی مهم ویژه‌تابعهای H تأکید می‌کنیم:

۱. ویژه‌تابعهای مربوط به ویژه‌مقدارهای مختلف (یعنی مقادیر مختلف ثابت E) متعامدند ــ به‌این معنی که

$$\int dx\ u_E^*(x)u_{E'}(x) = ۰ \qquad E \neq E' \qquad (۵\text{ـ}۶)$$

۲. این ویژه‌تابعها یک مجموعهٔ کامل تشکیل می‌دهند ــ به‌این معنی که تابع اختیاری $\psi(x)$ را که انتگرال‌پذیر مجذوری است به‌طوری که

$$\int dx\ \psi^*(x)\psi(x) < \infty \qquad (۶\text{ـ}۶)$$

می‌توان برحسب ویژه‌تابعهای هامیلتونی بسط داد:

$$\psi(x) = \sum_E C_E\ u_E(x) \qquad (۷\text{ـ}۶)$$

طیف H ممکن است گسسته باشد، مانند مورد چاه نامتناهی و نوسانگر هماهنگ. اگر وقتی $x \to \infty$ پتانسیل $V(x)$ به صفر میل کند، ویژه‌مقدارها می‌توانند هم گسسته باشند و هم یک پیوستار تشکیل دهند. این وضعیت برای پتانسیل جاذبه‌ای روی می‌دهد که به‌اندازهٔ کافی عمیق

www.arsanjan.blogfa.com

است تا یک یا چند حالت مقید ایجاد کند. در این موارد، مجموعهٔ کامل از تمام ویژه‌تابعهای گسسته و پیوستار تشکیل می‌شود، و باید به‌جای ۶ـ۷ نوشت

$$\psi(x) = \sum_n C_n u_n(x) + \int dp\, C(p) u_p(x) \qquad (۸\text{ـ}۶)$$

در اینجا عدد درست n معرف حالتهای مقید و p معرف حالتهای پیوستار است. این نشانگذاری به این مناسبت است که به‌ازای مقادیر بزرگ x انرژی پتانسیل صفر می‌شود و ویژه‌مقدار انرژی با رابطهٔ $E = p^۲/۲m$ به‌مقدار تکانه مربوط می‌شود. ویژه‌تابعها را می‌توان در ثابتهایی ضرب کرد تا بهنجار شوند. شرایط راست‌هنجاری عبارت‌اند از

$$\begin{aligned} \int dx\, u_m^*(x) u_n(x) &= \delta_{mn} \\ \int dx\, u_q^*(x) u_p(x) &= \delta(p-q) \\ \int dx\, u_n^*(x) u_p(x) &= ۰ \end{aligned} \qquad (۹\text{ـ}۶)$$

با توجه به اینکه هر ویژه‌تابع وابستگی زمانی ساده‌ای دارد که با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$u_E(x,t) = u_E(x) e^{-iEt/\hbar} \qquad (۱۰\text{ـ}۶)$$

می‌توان تابع‌موج $\psi(x,t)$ را تعیین کرد. بنابراین، به‌دست می‌آوریم

$$\psi(x,t) = \sum_E C_E\, u_E(x) e^{-iEt/\hbar} \qquad (۱۱\text{ـ}۶)$$

که صورت کلی‌تر آن عبارت است از

$$\psi(x,t) = \sum_n C_n u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} + \int dp\, C(p) u_p(x) e^{-ip^۲ t/۲m\hbar} \qquad (۱۲\text{ـ}۶)$$

مشاهده‌پذیرهای دیگر

انرژی تنها یکی از ویژگیهای قابل‌مشاهدهٔ یک دستگاه است. دربارهٔ مشاهده‌پذیرهای دیگر مانند تکانه قبلاً بحث کردیم، و تکانهٔ زاویه‌ای را در یک فصل بعد بررسی می‌کنیم. درست همان‌طور که

www.arsanjan.blogfa.com

انرژی ویژه‌مقدار عملگر انرژی (هامیلتونی H) است، تکانه نیز ویژه‌مقدار عملگر تکانهٔ $p_{\rm op}$ است. معادلهٔ ویژه‌مقداری عملگر تکانه به‌صورت زیر است

$$p_{\rm op}u_p(x) \equiv \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}u_p(x) = p\,u_p(x) \qquad (۱۳_۶)$$

ویژه‌مقدارها یک پیوستار تشکیل می‌دهند $(-\infty < p < \infty)$، و ویژه‌تابعها به‌صورت زیر هستند

$$u_p(x) = \frac{۱}{\sqrt{۲\pi\hbar}}e^{ipx/h} \qquad (۱۴_۶)$$

این ویژه‌تابعها یک مجموعهٔ راست‌هنجار تشکیل می‌دهند:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\; u^*_{p_۱}(x)u_{p_۲}(x) = \delta(p_۱ - p_۲) \qquad (۱۵_۶)$$

قضیهٔ بسط معمولاً به‌صورت زیر نوشته می‌شود

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dp\;\phi(p)u_p(x) \qquad (۱۶_۶)$$

عملگر تکانه، مانند هامیلتونی، دارای ویژه‌مقدارهای حقیقی است.

عملگرهایی که تمام ویژه‌مقدارهای آنها حقیقی هستند عملگرهای هرمیتی نامیده می‌شوند. چون تمام مشاهده‌پذیرهای فیزیکی در این خاصیت شریک‌اند، باید آنها را با عملگرهای هرمیتی توصیف کرد.

اصل موضوعهٔ بسط و مانستگی برداری

برای یک مشاهده‌پذیر اختیاری، که با A نشان می‌دهیم، ویژه‌تابعهایی متناظر با ویژه‌مقدارهای حقیقی a وجود دارند:

$$Au_a(x) = au_a(x) \qquad (۱۷_۶)$$

ویژه‌تابعهای $u_a(x)$ یک مجموعهٔ متعامد تشکیل می‌دهند، و می‌توان آنها را بهنجار کرد:

$$\int dx\; u^*_{a_۱}(x)u_{a_۲}(x) = \delta_{a_۱a_۲} \qquad (۱۸_۶)$$

www.arsanjan.blogfa.com

در اینجا $\delta_{a_1 a_2}$ دلتای کرونکر برای ویژه‌مقدارهای گسسته و تابع دلتای دیراک برای ویژه‌مقدارهای پیوسته است.

ویژه‌تابعهای $u_a(x)$ نیز یک مجموعهٔ کامل تشکیل می‌دهند؛ به‌عبارت دیگر، یک تابع (انتگرال‌پذیر مجذوری) اختیاری $\psi(x)$ را می‌توان برحسب ویژه‌تابعهای $u_a(x)$ بسط داد:

$$\psi(x) = \sum_a C_a\, u_a(x) \qquad (۱۹\text{ـ}۶)$$

از شرط راست‌هنجاری نتیجه می‌گیریم که

$$C_a = \int dx\; u_a^*(x)\psi(x) \qquad (۲۰\text{ـ}۶)$$

تعبیر ضرایب بسط

تعبیر ضرایب بسط C_a به‌صورت زیر است: اگرمشاهده‌پذیر A را برای مجموعه‌ای از دستگاههایی اندازه‌گیری کنیم که هر یک از آنها با تابع‌موج $\psi(x)$ توصیف می‌شوند که به یک بهنجار شده است، یعنی

$$\int dx\; \psi^*(x)\psi(x) = ۱ \qquad (۲۱\text{ـ}۶)$$

آنگاه

۱. نتیجهٔ هر اندازه‌گیری تنها می‌تواند یکی از ویژه‌مقدارهای a باشد.

۲. احتمال اینکه ویژه‌مقدار a به‌دست آید، یا به‌عبارت دیگر معلوم شود چه کسری از دستگاهها در این مجموعه دارای ویژه‌مقدار a هستند، برابر است با $|C_a|^۲$.

۳. اگر از اندازه‌گیری روی یک عضو این مجموعه یک ویژه‌مقدار معین مثلاً $a_۱$ به‌دست آمده باشد، این اندازه‌گیری باید حالت این دستگاه خاص را روی ویژه‌حالت $u_{a_۱}(x)$ تصویر کرده باشد. تنها از این راه است که می‌توان اطمینان یافت که اندازه‌گیری بعدیِ مشاهده‌پذیر A همین نتیجه را می‌دهد.

یک پیامد این تعبیر این است که احتمال اینکه مقدار مشاهده‌پذیر A برای یک دستگاه یکی از ویژه‌مقدارهای آن باشد برابر با یک است، یعنی

$$\sum_a |C_a|^۲ = ۱ \qquad (۲۲\text{ـ}۶)$$

www.arsanjan.blogfa.com

که ناشی از رابطهٔ زیر است

$$۱ = \int dx\ \psi^*(x)\psi(x) = \int dx\ \left(\sum_a C_a^* u_a^*(x)\right)\psi(x)$$
$$= \sum_a C_a^* C_a$$

از این فرمول نتیجه می‌گیریم

$$\sum_a C_a C_a^* = \sum_a \int dx\ u_a^*(x)\psi(x) \int dy\ u_a(y)\psi^*(y)$$
$$= \iint dxdy\psi^*(y)\psi(x) \sum_a u_a(y)u_a^*(x) = ۱ \qquad (۲۳_۶)$$

که نشان می‌دهد

$$\sum_a u_a(y)u_a^*(x) = \delta(x-y) \qquad (۲۴_۶)$$

این خاصیت ویژه‌تابعها را رابطهٔ تمامیت می‌نامیم، و با حکم قضیهٔ بسط هم‌ارز است.

مانستگی با فضای برداری

قضیهٔ بسط را می‌توان تعمیمی از بسط یک بردار $\mathbf{A}$ برحسب بردارهای یکهٔ راست‌هنجار در یک فضای برداری Nبعدی دانست:

$$\mathbf{A} = A_۱\mathbf{i}_۱ + A_۲\mathbf{i}_۲ + \cdots + A_N\mathbf{i}_N \qquad (۲۵_۶)$$

بردارهای یکه در رابطهٔ راست‌هنجاری زیر صدق می‌کنند

$$\mathbf{i}_k \cdot \mathbf{i}_l = \delta_{kl} \qquad (۲۶_۶)$$

و مانستهٔ ویژه‌تابعهای $u_a(x)$ هستند. ضرایب A_n با رابطهٔ زیر داده می‌شوند

$$A_n = \mathbf{i}_n \cdot \mathbf{A} \qquad (۲۷_۶)$$

www.arsanjan.blogfa.com

و مانستهٔ C_a هستند. غالباً در بحثهای کوانتوم-مکانیکی زبان فضاهای برداری را به‌کار می‌بریم. به عنوان مثال، ضرایب C_a را تصاویر $\psi(x)$ روی بردارهای پایهٔ $u_a(x)$ می‌نامیم، و کمیت

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

را حاصلضرب نرده‌ای u_a و ψ می‌گوییم.

در واقع، مانستگی میان توابع موج $\psi(x)$ و بردارهای N بعدی کاملاً عمیق است. در هر دو مورد، با فضاهای خطی سروکار داریم: درست همان‌طور که از جمع دو بردار در فضای برداری یک بردار به‌دست می‌آید،

$$\mathbf{A} + \mathbf{B} = \mathbf{C}$$

مجموع دوتابع موج نیز یک تابع‌موج قابل قبول است، و در هر دو مورد یک ضرب نرده‌ای تعریف می‌کنیم.

تفاوت میان فضای برداری مکانیک کوانتومی و یک فضای برداری سادهٔ Nبعدی در این است که فضای برداری در مکانیک کوانتومی به‌صورت پیوسته بینهایت بعدی است. بنابراین، جمع گسسته در حاصلضرب نرده‌ای $\mathbf{A}\cdot\mathbf{B} = \sum_i A_i B_i$ به انتگرال در $\int dx\, \phi^*(x)\psi(x)$ تبدیل می‌شود. این نشان می‌دهد که در مکانیک کوانتومی باید به همگرایی انتگرالها توجه کنیم، و اثبات قضیهٔ بسط بسیار پیچیده می‌شود. در زبان ریاضی، فضای برداری در مکانیک کوانتومی را فضای هیلبرت می‌نامند. در توضیح مکانیک کوانتومی، هرگاه بتوانیم از پیچیدگیهای ریاضی صرفنظر می‌کنیم و از شباهت با فضای برداری معمولی آزادانه استفاده می‌کنیم.

عملگرها و مشاهده‌پذیرها

عملگر در فضاهای برداری یک بردار را به بردار دیگری تبدیل می‌کند. عملگرهای خطی به‌گونه‌ای هستند که

$$A(\alpha_1\psi_1(x) + \alpha_2\psi_2(x)) = \alpha_1 A\psi_1(x) + \alpha_2 A\psi_2(x) \qquad (۲۸_۶)$$

و اگر بخواهیم مشاهده‌پذیرها را نمایش دهند باید هرمیتی باشند. برای عملگرهای هرمیتی داریم

$$\langle A\rangle = \langle A\rangle^*$$

www.arsanjan.blogfa.com

یعنی، به‌ازای حالت Ψ

$$\int dx\ \Psi^*(x)A\Psi(x) = \int dx\ (A\Psi(x))^*\Psi(x) \qquad (۲۹_۶)$$

از اینجا نتیجه می‌گیریم که برای عملگرهای هرمیتی، به‌ازای دو تابع اختیاری ϕ و ψ، می‌توان نوشت

$$\int dx\ \phi^\dagger A\psi = \int dx\ (A\phi)^*\psi \qquad (۳۰_۶)$$

برای اثبات، فرض کنید

$$\Psi(x) = \phi(x) + \lambda\psi(x) \qquad (۳۱_۶)$$

که در آن λ یک ثابت مختلط اختیاری است. بنابراین، از ۶ـ۲۹ داریم

$$\int dx\ \Psi^\dagger A\Psi = \int dx\ (\phi^\dagger + \lambda^*\psi^\dagger)A(\phi + \lambda\psi) = \int dx\ \phi^\dagger A\phi + |\lambda|^2 \int dx\ \psi^\dagger A\psi + \lambda \int dx\ \phi^\dagger A\psi + \lambda^* \int dx\ \psi^\dagger A\phi \qquad (۳۲_۶)$$

که همیوغ مختلط آن به‌صورت زیر است

$$\int dx\ (A\Psi)^\dagger\Psi = \int dx\ (A\phi)^*\phi + |\lambda|^2 \int dx\ (A\psi)^*\psi + \lambda^* \int dx\ (A\psi)^\dagger\phi + \lambda \int dx\ (A\phi)^*\psi$$

برای عملگر هرمیتی، در دو معادلهٔ بالا طرفهای چپ و همچنین دو جملهٔ اول طرفهای راست برابرند. چون λ یک پارامتر مختلط است، λ و λ^* مستقل از یکدیگرند و می‌توان ضریب آنها را جداگانه با هم برابر گرفت، و ۶ـ۳۰ به‌دست می‌آید.

اگر عملگر A هرمیتی نباشد، می‌توان عملگر همیوغ هرمیتی $A^\dagger$ را، برای هر جفت تابع‌موج، با رابطهٔ زیر تعریف کرد

$$\int dx\ (A\phi)^*\psi = \int dx\ \phi^\dagger A^\dagger\psi \qquad (۳۳_۶)$$

www.arsanjan.blogfa.com

نمادنگاری دیراک

پل‌آدرین موریس دیراک یک نمادنگاری بسیار مختصر و مفید معمول کرد که هم برای فضاهای برداری با بعد متناهی و هم در مورد فضاهای هیلبرت به‌کار می‌رود. به هر تابع‌موج ψ یک بردار حالت، که با $|\psi\rangle$ نشان می‌دهیم و آن‌را کِت می‌نامیم، نسبت می‌دهیم. همچنین، به هر تابع‌موج همیوغ مختلط ϕ^* کمیت $\langle\phi|$ را نسبت می‌دهیم و آن‌را بِرا می‌نامیم. حاصلضرب نرده‌ای ϕ^* و ψ را با یک "براکت"[۱] نشان می‌دهیم:

$$\int dx\ \phi^*\psi = \langle\phi|\psi\rangle \qquad (۳۴_۶)$$

بلافاصله نتیجه می‌شود که

$$\langle\phi|\psi\rangle^* = \langle\psi|\phi\rangle \qquad (۳۵_۶)$$

انتگرال شامل یک عملگر را می‌توان به دو طریق هم‌ارز زیر نوشت

$$\int dx\ \phi^* A\psi = \langle\phi|A\psi\rangle = \langle\phi|A|\psi\rangle \qquad (۳۶_۶)$$

عملگر همیوغ هرمیتی برای هر جفت حالت با رابطهٔ زیر تعریف می‌شود

$$\langle A\phi|\psi\rangle = \langle\phi|A^\dagger|\psi\rangle \qquad (۳۷_۶)$$

اگر A یک عدد باشد می‌توان آن‌را از براکت خارج کرد:

$$\langle\phi|a\psi\rangle = a\langle\phi|\psi\rangle \qquad (۳۸_۶)$$

و

$$\langle a\phi|\psi\rangle = a^*\langle\phi|\psi\rangle \qquad (۳۹_۶)$$

معادله‌های ویژه‌مقداری به‌صورت زیر نوشته می‌شوند

$$A|a\rangle = a|a\rangle \qquad (۴۰_۶)$$

---

۱. دیراک "بِرا" و "کِت" را از تقسیم واژهٔ انگلیسی *bracket*، معادل واژهٔ فرانسوی کروشه، گرفته است.م.

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن ویژه‌حالت را با ویژه‌مقدار خودش نشانگذاری کرده‌ایم. چگونگی تبدیل این معادله به یک معادلهٔ وابسته به x از نوع ۶ـ۴ را در فصل ۷ بیان می‌کنیم. شرط راست‌هنجاری در نمادنگاری دیراک به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\langle a_1|a_2\rangle = \delta_{a_1 a_2} \qquad (۴۱_۶)$$

و قضیهٔ بسط به‌صورت زیر نوشته می‌شود

$$|\psi\rangle = \sum_a C_a\,|a\rangle \qquad (۴۲_۶)$$

با ضرب کردن در یک ویژه‌حالت خاص از سمت چپ، به‌دست می‌آوریم

$$\langle b|\psi\rangle = \sum_a C_a\,\langle b|a\rangle = \sum_a C_a\,\delta_{ab} = C_b \qquad (۴۳_۶)$$

بنابراین، می‌توان نوشت

$$\langle \phi|\psi\rangle = \sum_a C_a\,\langle \phi|a\rangle = \sum_a \langle \phi|a\rangle\langle a|\psi\rangle \qquad (۴۴_۶)$$

چون این نتیجه برای هر ϕ و ψ صادق است، می‌توان رابطهٔ بالا را "تفکیک" کرد و مانستهٔ ۶ـ۲۴ در نمادنگاری دیراک را به‌دست آورد:

$$\sum_a |a\rangle\langle a| = ۱ \qquad (۴۵_۶)$$

این بخش را با مثالی دربارهٔ استفاده از نمادنگاری دیراک در اثبات تعامد ویژه‌تابعهای عملگرهای هرمیتی متناظر با ویژه‌مقدارهای مختلف به‌پایان می‌رسانیم. رابطهٔ زیر را در نظر بگیرید

$$\langle b|A|a\rangle = a\langle b|a\rangle \qquad (۴۶_۶)$$

از طرف دیگر، می‌توان نوشت

$$\langle b|A^\dagger|a\rangle = \langle A(b)|a\rangle = b^*\langle b|a\rangle \qquad (۴۷_۶)$$

www.arsanjan.blogfa.com

زیرا $\langle b|$ یک ویژه‌حالت عملگر A با ویژه‌مقدار b است، و این کمیت در برا ظاهر می‌شود. اما برای عملگر هرمیتی داریم $A = A^\dagger$، و در نتیجه

$$a\langle b|a\rangle = b^*\langle b|a\rangle \qquad (۴۸_۶)$$

اگر قرار دهیم $\langle b| = |a\rangle$، بلافاصله می‌بینیم که ویژه‌مقدارها باید حقیقی باشند. بنابراین، $b = b^*$ و از ۶ـ۴۸ به‌رابطهٔ زیر می‌رسیم.

$$(a - b)\langle b|a\rangle = ۰ \qquad (۴۹_۶)$$

که همان چیزی است که می‌خواستیم ثابت کنیم، زیرا به‌ازای $a \neq b$ باید $\langle b|a\rangle$ صفر شود.

واگنی و مشاهده‌پذیرهای همزمان

در دو مسئله‌ای که در فصل ۴ بررسی کردیم، یعنی ذره درجعبه و ذرهٔ آزاد، دیدیم که ویژه‌تابعها به‌طور همزمان ویژه‌تابعهای H و یک عملگر دیگر، در مورد اول پاریته و در مورد دوم تکانه، بودند و دیدیم که در هر دو مورد H با عملگرهای مزبور جابه‌جا می‌شد. اکنون شرایط کلی امکان این جابه‌جایی را بررسی می‌کنیم.

ویژه‌تابعهای u_a مربوط به ویژه‌مقدار aی عملگر A،

$$Au_a(x) = au_a(x) \qquad (۵۰_۶)$$

هنگامی ویژه‌تابعهای همزمان عملگر دیگری مانند B هستند که

$$Bu_a(x) = bu_a(x) \qquad (۵۱_۶)$$

اما این ایجاب می‌کند که

$$ABu_a(x) = Abu_a(x) = bAu_a(x) = abu_a(x)$$

و

$$BAu_a(x) = Bau_a(x) = aBu_a(x) = abu_a(x)$$

www.arsanjan.blogfa.com

از این‌رو به‌دست می‌آوریم

$$(AB - BA)u_a(x) = ۰ \qquad (۵۲\text{ـ}۶)$$

اگر این رابطه تنها برای یک u_a برقرار باشد چندان جالب توجه نیست، اما اگر برای مجموعهٔ کامل u_a صادق باشد به‌این معنی است که برای تمام تابعهای انتگرال‌پذیر مجذوری $\psi(x) = \sum_a C_a u_a(x)$ می‌توان نوشت

$$\begin{aligned}\sum_a C_a(AB - BA)u_a(x) &= (AB - BA)\sum C_a u_a(x) \\ &= (AB - BA)\,\psi(x) = ۰\end{aligned} \qquad (۵۳\text{ـ}۶)$$

یعنی عملگرها جابه‌جا می‌شوند:

$$[A, B] = ۰ \qquad (۵۴\text{ـ}۶)$$

برعکس، اگر دو عملگر هرمیتی A و B جابه‌جا شوند، یعنی رابطهٔ ۶ـ۵۴ برقرار باشد، آنگاه

$$\begin{aligned}AB u_a(x) &= BA u_a(x) \\ &= aB u_a(x)\end{aligned} \qquad (۵۵\text{ـ}۶)$$

یعنی

$$A[B u_a(x)] = a[B u_a(x)] \qquad (۵۶\text{ـ}۶)$$

بنابراین، تابع $Bu_a(x)$ نیز یک ویژه‌تابع A با ویژه‌مقدار a است. اگر به‌ازای هر ویژه‌مقدار a تنها یک ویژه‌تابع عملگر A وجود داشته باشد، آنگاه $Bu_a(x)$ باید متناسب با $u_a(x)$ باشد:

$$B u_a(x) = b u_a(x) \qquad (۵۷\text{ـ}۶)$$

بنابراین، $u_a(x)$ ویژه‌تابع همزمان A و B است. این وضعیت، که در آن ویژه‌تابعهای A واگن نیستند، موردی است که برای ذره در جعبه دیدیم. از طرف دیگر، اگر دو ویژه‌تابع A متناظر با ویژه‌مقدار a وجود داشته باشند، یعنی، چنانکه در مثال ذرهٔ آزاد دیدیم، واگنی دوگانه داشته باشیم:

$$\begin{aligned}A u_a^{(۱)}(x) &= a u_a^{(۱)}(x) \\ A u_a^{(۲)}(x) &= a u_a^{(۲)}(x)\end{aligned} \qquad (۵۸\text{ـ}۶)$$

www.arsanjan.blogfa.com

تنها می‌توان گفت که $Bu_a^{(1)}(x)$ و $Bu_a^{(2)}(x)$ باید ترکیبهای خطی $u_a^{(1)}(x)$ و $u_a^{(2)}(x)$ باشند:

$$\begin{aligned} Bu_a^{(1)}(x) &= b_{11}u_a^{(1)}(x) + b_{12}u_a^{(2)}(x) \\ Bu_a^{(2)}(x) &= b_{21}u_a^{(1)}(x) + b_{22}u_a^{(2)}(x) \end{aligned} \qquad (۵۹_۶)$$

اما بدیهی است که می‌توان از ترکیبهای خطی این دو معادله معادله‌هایی از نوع زیر به‌دست آورد

$$\begin{aligned} Bv_a^{(1)}(x) &= b_+ v_a^{(1)}(x) \\ Bv_a^{(2)}(x) &= b_- v_a^{(2)}(x) \end{aligned} \qquad (۶۰_۶)$$

برای مثال،

$$\begin{aligned} B(u_a^{(1)} + \lambda u_a^{(2)}) &= (b_{11} + \lambda b_{21})u_a^{(1)} + (b_{12} + \lambda b_{22})u_a^{(2)} \\ &= b_\pm(u_a^{(1)} + \lambda u_a^{(2)}) \end{aligned}$$

با این شرط که λ را طوری انتخاب کنیم که

$$\frac{b_{12} + \lambda b_{22}}{b_{11} + \lambda b_{21}} = \lambda$$

این یک معادلهٔ درجهٔ دوم است، و دو مقدار برای λ، متناظر با دو ویژه‌مقدار $b_\pm$، وجود دارند. بهتر است که ویژه‌تابعهای همزمان A و B در ۶ـ۶۰ را با $u_{ab}^{(1)}(x)$ و $u_{ab}^{(2)}(x)$ نشان دهیم. چون این ویژه‌تابعها متناظر با ویژه‌مقدارهای مختلف عملگر B هستند با هم متعامدند. در عمل، برای واگنی دوگانه، اگر ویژه‌تابعهای واگن A را عمود بر یکدیگر بگیریم (مثلاً، e^{ikx} و e^{-ikx} برای ذرهٔ آزاد) خودبه‌خود ویژه‌تابعهای B نیز هستند.

حتی پس از یافتن ویژه‌تابعهای A و تعیین ترکیبهای خطیی که ویژه‌تابعهای عملگر جابه‌جاشوندهٔ B هستند، ممکن است واگنی کاملاً از بین نرفته باشد، یعنی چند ویژه‌تابع همزمان A و B با همان a و b وجود داشته باشند. این نشان می‌دهد که باید عملگر سومی مانند C وجود داشته باشد که با A و B جابه‌جا شود و تابع را می‌توان چنان بازترکیب کرد که ویژه‌تابعهای همزمان A و B و C باشد و ویژه‌مقدارهای آن ویژه‌تابعهای واگن A و B را متمایز کنند. این روند تا از بین رفتن کامل واگنی ادامه می‌یابد. مجموعهٔ عملگرهای دو به‌دو جابه‌جاشوندهٔ A، B، C، ...، M، که ویژه‌تابعهای مشترک آنها را تعیین می‌کنیم، مجموعهٔ کامل مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده نامیده

www.arsanjan.blogfa.com

می‌شود. داریم

$$\begin{aligned}[A,B]=[A,C]=\cdots=[A,M]=0\\ [B,C]=[B,D]=\cdots=[B,M]=0\end{aligned} \qquad (۶۱_۶)$$

و غیره، با ویژه‌تابعهای همزمان $u_{ab\cdots m}(x)$:

$$\begin{aligned}Au_{ab\cdots m}(x)&=au_{ab\cdots m}(x)\\ Bu_{ab\cdots m}(x)&=bu_{ab\cdots m}(x)\\ Mu_{ab\cdots m}(x)&=mu_{ab\cdots m}(x)\end{aligned} \qquad (۶۲_۶)$$

برای حالتی که با $u_{abc\cdots m}(x)$ توصیف می‌شود مقادیر مشاهده‌پذیرهای A، B، C، ...، M معین هستند. این بیشترین اطلاعاتی است که می‌توان یکباره راجع به دستگاه داشته باشیم، زیرا اگر عملگر دیگری را در نظر بگیریم که تابعی از A، B، ...، M نباشد (چون اینها جابه‌جا می‌شوند، چنین تابعی بدون ابهام تعریف می‌شود) از اندازه‌گیری آن یک مقدار دقیق در حالت $u_{ab\cdots m}(x)$ به‌دست نمی‌آید. به‌طور کلی، اگر دو عملگر با هم جابه‌جا نشوند نوعی رابطهٔ عدم قطعیت برای دقتی که می‌توان این دو مشاهده‌پذیر را تعیین کرد وجود دارد.

رابطه‌های عدم قطعیت

یک راه ساده برای تعریف عدم قطعیت وابسته به یک عملگر A توصیف آن با استفاده از افت‌وخیز حول مقدار میانگین است. عملگر A و یک حالت بهنجارشدهٔ کلی را در نظر می‌گیریم که با ψ توصیف می‌شود. مقدار میانگین A همان مقدار انتظاری $\langle\psi|A|\psi\rangle$ است که آن‌را با نماد اختصاری $\langle A\rangle$ نشان می‌دهیم. مجذور انحراف از میانگین معیاری از افت‌وخیز است. با این کمیت است که مجذور عدم قطعیت $(\Delta A)^2$ را تعریف می‌کنیم:

$$\begin{aligned}(\Delta A)^2\equiv\langle(A-\langle A\rangle)^2\rangle&=\langle A^2-2A\langle A\rangle+\langle A\rangle^2\rangle\\ &=\langle A^2\rangle-\langle A\rangle^2\end{aligned} \qquad (۶۳_۶)$$

زیرا مقدار میانگین عددی مانند $\langle A\rangle^2$ درست برابر با همان عدد است.

در پیوست ب نشان می‌دهیم که اگر دو عملگر هرمیتی A و B جابه‌جا نشوند عدم قطعیتهای ΔA و ΔB همبسته‌اند، و رابطهٔ آنها به‌صورت زیر است

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2\geq\frac{1}{4}\langle i[A,B]\rangle^2 \qquad (۶۴_۶)$$

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن $[A,B]=AB-BA$

توجه کنید که اگر حالت ψ اتفاقاً یک ویژه‌حالت یکی از عملگرها، مثلاً A، باشد آنگاه

$$\begin{aligned}(\Delta A)^{۲} &= \langle a|A^{۲}|a\rangle - \langle a|A|a\rangle^{۲} \\ &= a^{۲}\langle a|a\rangle - [a\langle a|a\rangle]^{۲} = ۰\end{aligned} \qquad (۶۵_۶)$$

که برخلاف انتظار نیست، زیرا عدم قطعیتی وجود ندارد. بنابراین، طرف چپ ۶ـ۶۴ صفر می‌شود. در طرف راست هم صفر به‌دست می‌آید زیرا

$$\begin{aligned}\langle a|[A,B]|a\rangle &= \langle a|AB|a_a\rangle - \langle a|BA|a_a\rangle \\ &= \langle A(a)|B|a\rangle - \langle a|B|A(a)\rangle \\ &= a\langle a|B|a\rangle - a\langle a|B|a\rangle = ۰\end{aligned}$$

برای عملگرهای x و p، که برای آنها $[x,p]=i\hbar$، به‌دست می‌آوریم

$$(\Delta x)^{۲}(\Delta p)^{۲} \geq \frac{\hbar^{۲}}{۴} \qquad (۶۶_۶)$$

توجه کنید که در محاسبه‌های بالا هیچ استفاده‌ای از ویژگیهای موجی، توابع موج فضای x و فضای p، یا دوگانگی موج‌ـذره نشده است. نتیجهٔ به‌دست آمده تنها به ویژگیهای عملگری مشاهده‌پذیرهای A و B بستگی دارد.

وابستگی زمانی و حد کلاسیک

اکنون به مسئلهٔ مهم حد کلاسیک نظریهٔ کوانتومی می‌پردازیم. برای این کار ابتدا باید تغییرات زمانی مقدار انتظاری عملگرها را بررسی کنیم. به‌طورکلی، مقدار انتظاری یک عملگر با زمان تغییر می‌کند. این تغییر می‌تواند به دلیل وابستگی صریح خود عملگر به زمان باشد، مانند عملگر $x+pt/m$، و یا می‌تواند به این دلیل باشد که مقدار انتظاری نسبت به تابع‌موجی گرفته می‌شود که خودش با زمان تغییر می‌کند. اگر بنویسیم

$$\langle A\rangle_t = \int \psi^{*}(x,t)A\psi(x,t)dx \qquad (۶۷_۶)$$

www.arsanjan.blogfa.com

آنگاه

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle A\rangle_t &= \int \psi^*(x,t)\frac{\partial A}{\partial t}\psi(x,t)dx \\ &+ \int \frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial t}A\psi(x,t)dx \\ &+ \int \psi^*(x,t)A\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}dx \\ &= \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle_t + \int \left(\frac{1}{i\hbar}H\psi(x,t)\right)^* A\psi(x,t) \\ &+ \int \psi^*(x,t)A\left(\frac{1}{i\hbar}H\psi(x,t)\right) \\ &= \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle_t + \frac{i}{\hbar}\int \psi^*(x,t)HA\psi(x,t)dx \\ &- \frac{i}{\hbar}\int \psi^*(x,t)AH\psi(x,t)dx\end{aligned}$$

بنابراین

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle_t = \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle_t + \frac{i}{\hbar}\langle[H,A]\rangle_t \qquad (۶۸_۶)$$

در این محاسبه از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که H یک عملگر هرمیتی است. نتیجه می‌گیریم که اگر A وابستگی صریح به زمان نداشته باشد، تغییر مقدار انتظاری برای هر حالتی به‌صورت زیر است

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle_t = \frac{i}{\hbar}\langle[H,A]\rangle_t \qquad (۶۹_۶)$$

هرگاه این عملگر با H جابه‌جا شود، مقدار انتظاری آن همیشه ثابت است، و می‌توان گفت این مشاهده‌پذیر یک ثابت حرکت است. اگر H عضوی از مجموعهٔ کامل مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده باشد، تمام مشاهده‌پذیرهای دیگر این مجموعه ثابتهای حرکت خواهند بود.

www.arsanjan.blogfa.com

در اینجا به‌ترتیب $A = x$ و $A = p$ را در (۶ـ۶۹) قرار می‌دهیم. بدست می‌آوریم

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

اما x با هر تابعی از x جابه‌جا می‌شود:

$$[V(x), x] = 0 \qquad (۶ـ۷۰)$$

و از این‌رو تنها باید $[p^2, x]$ را محاسبه کنیم:

$$[p^2, x] = p[p, x] + [p, x]p$$
$$= \frac{2\hbar}{i}p \qquad (۶ـ۷۱)$$

بنابراین، به‌دست می‌آوریم

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \left\langle \frac{p}{m}\right\rangle \qquad (۶ـ۷۲)$$

اکنون می‌نویسیم

$$\frac{d}{dt}\langle p\rangle = \frac{i}{\hbar}\left\langle \left[\frac{p^2}{2m} + V(x), p\right]\right\rangle$$
$$= -\frac{i}{\hbar}\langle [p, V(x)]\rangle \qquad (۶ـ۷۳)$$

زیرا بدیهی است که p^2 با p جابه‌جا می‌شود. برای محاسبهٔ آخرین جابه‌جاگر، می‌نویسیم

$$pV(x)\psi(x) - V(x)p\psi(x) = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}[V(x)\psi(x)] - \frac{\hbar}{i}V(x)\frac{d}{dx}\psi(x)$$
$$= \frac{\hbar}{i}\frac{dV(x)}{dx}\psi(x) \qquad (۶ـ۷۴)$$

www.arsanjan.blogfa.com

بنابراین،

$$[p, V(x)] = \frac{\hbar}{i} \frac{dV(x)}{dx} \qquad (۷۵_۶)$$

و در نتیجه

$$\frac{d}{dt}\langle p\rangle_t = -\left\langle \frac{dV(x)}{dx} \right\rangle_t \qquad (۷۶_۶)$$

از ترکیب ۶ـ۷۲ و ۶ـ۷۶ به‌دست می‌آوریم

$$m\frac{d^2}{dt^2}\langle x\rangle_t = -\left\langle \frac{dV(x)}{dx} \right\rangle_t \qquad (۷۷_۶)$$

این رابطه بسیار شبیه معادلهٔ حرکت ذرهٔ کلاسیک در پتانسیل $V(x)$ است:

$$m\frac{d^2 x_{\mathrm{cl}}}{dt^2} = -\frac{dV(x_{\mathrm{cl}})}{dx_{\mathrm{cl}}} \qquad (۷۸_۶)$$

تنها چیزی که ما را از پذیرفتن اتحاد

$$x_{\mathrm{cl}} = \langle x\rangle \qquad (۷۹_۶)$$

باز می‌دارد این است که

$$\left\langle \frac{dV}{dx} \right\rangle \neq \frac{d}{d\langle x\rangle} V(\langle x\rangle) \qquad (۸۰_۶)$$

تحت شرایطی که نامساوی بالا به یک تساوی تقریبی تبدیل می‌شود، حرکت اساساً کلاسیک است، و اهرنفست برای نخستین بار متوجه این نکته شد. این تساوی تقریبی ایجاب می‌کند که پتانسیل تابعی کندتغییر از شناسهٔ خود باشد. اگر بنویسیم

$$F(x) = -\frac{dV(x)}{dx} \qquad (۸۱_۶)$$

www.arsanjan.blogfa.com

آنگاه

$$F(x) = F(\langle x\rangle) + (x - \langle x\rangle)F'(\langle x\rangle) + \frac{(x - \langle x\rangle)^2}{2!}F''(\langle x\rangle) + \cdots$$

اگر عدم قطعیت $(\Delta x)^2 = \langle (x - \langle x\rangle)^2\rangle$ کوچک باشد، و بتوان از جمله‌های بالاتر در بسط صرفنظر کنیم، به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}\langle F(x)\rangle &\cong F(\langle x\rangle) + \langle x - \langle x\rangle\rangle F'(\langle x\rangle)\\ &\cong F(\langle x\rangle)\end{aligned} \qquad (۸۲_۶)$$

این رابطه می‌تواند حتی برای الکترونها و ذرات زیراتمی دیگر معتبر باشد، و برای میدانهای ماکروسکوپیک تقریب خوبی است، و به این دلیل می‌توان مدار الکترون یا پروتون در شتابدهنده‌ها را با معادله‌های کلاسیک حرکت توصیف کرد.

مسائل

۱ـ۶ اگر A و B عملگرهای هرمیتی باشند، ثابت کنید (۱) عملگر AB تنها به شرطی هرمیتی است که A و B جابه‌جا شوند، یعنی $AB = BA$، و (۲) عملگر $(A + B)^n$ هرمیتی است.

۲ـ۶ ثابت کنید عملگر A هر چه باشد، $A + A^\dagger$ و $i(A - A^\dagger)$، و همچنین $AA^\dagger$، هرمیتی هستند.

۳ـ۶ ثابت کنید اگر H عملگر هرمیتی باشد همیوغ هرمیتی عملگر e^{iH} (که با $\sum_{n=0}^{\infty} i^n H^n/n!$ تعریف می‌شود) به‌صورت e^{-iH} است.

۴ـ۶ نامساوی شوارتز را اثبات کنید:

$$\langle\psi|\psi\rangle\langle\phi|\phi\rangle \geq |\langle\psi|\phi\rangle|^2$$

توجه کنید که این نامساوی هم‌ارز $\cos^2\theta \leq 1$ برای بردارهای سه‌بعدی است.

[راهنمایی: $\langle\psi + \lambda\phi|\psi + \lambda\phi\rangle \geq 0$ را در نظر بگیرید و مقدار λ را که به‌ازای آن طرف چپ کمینه می‌شود محاسبه کنید.]

۵ـ۶ برای پتانسیل

$$\begin{aligned}V(x) &= \infty \qquad x < 0\\ &= 0 \qquad 0 < x < a\\ &= \infty \qquad a < x\end{aligned}$$

www.arsanjan.blogfa.com

ویژه‌تابعهای بهنجارشده عبارت‌اند از $u_n(x) = \sqrt{۲/a}\sin(n\pi x/a)$. نشان دهید

$$\sum_n \sqrt{\frac{۲}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\sqrt{\frac{۲}{a}}\sin\frac{n\pi y}{a} = \delta(x-y) \qquad ۰ \le x, y \le a$$

۶ـ۶ اگر A هرمیتی باشد، نشان دهید $\langle A^۲\rangle \ge ۰$.

۶ـ۷ عملگر هرمیتی H دارای ویژگی زیر است

$$H^۴ = ۱$$

ویژه‌مقدارهای این عملگر H را به‌دست آورید. اگر H هرمیتی نباشد، ویژه‌مقدارهای آن‌را تعیین کنید.

۶ـ۸ عملگر U را یکانی می‌گوییم اگر دارای ویژگی زیر باشد

$$UU^\dagger = U^\dagger U = ۱$$

نشان دهید اگر $\langle\psi/\psi\rangle = ۱$ آنگاه $\langle U\psi/U\psi\rangle = ۱$.

۶ـ۹ نشان دهید اگر A هرمیتی باشد e^{iA} یکانی است.

۶ـ۱۰ نشان دهید اگر مجموعهٔ کامل $\{u_a\}$ راست‌هنجار باشد:

$$\langle u_a|u_b\rangle = \delta_{ab}$$

مجموعهٔ بردارهای

$$|v_a\rangle = U|u_a\rangle$$

که در آن U یکانی است نیز راست‌هنجار است.

۶ـ۱۱ برای ذره‌ای در یک جعبهٔ نامتناهی در حالتی که با عدد کوانتومی n مشخص می‌شود، نشان دهید

$$\Delta p\,\Delta x \sim hn$$

۶ـ۱۲ با استفاده از رابطهٔ جابه‌جایی میان تکانهٔ p و مکان x، معادله‌هایی را به‌دست آورید که

www.arsanjan.blogfa.com

وابستگی زمانی $\langle x \rangle$ و $\langle p \rangle$ را به‌ازای هامیلتونیهای زیر بیان کنید

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m(\omega_1^2 x^2 + \omega_2 x + \epsilon) \qquad \text{(الف)}$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - \frac{A}{x^2} \qquad \text{(ب)}$$

اولین مجموعهٔ معادله‌ها (هامیلتونی الف) را حل کنید.

۱۳ـ۶ هامیلتونی الکترونی در یک میدان الکتریکی نوسانی به‌صورت زیر است

$$H = \frac{p^2}{2m} - (eE_0 \cos \omega t)x$$

(dx/dt)، (dp/dt)، و (dH/dt) را محاسبه کنید.

مراجع

ساختار کلی مکانیک موجی در تمام کتابهای مکانیک کوانتومی بررسی می‌شود. برای مثال، می‌توانید به کتابهای زیر مراجعه کنید

پاول جی، ال و ب کریسمن، مکانیک کوانتومی، ترجمهٔ پاشایی‌راد و سعادت، تهران، مرکز نشر دانشگاهی، ۱۳۶۸، ۵۴۸ صفحه.

D Bohm, *Quantum Theory*, Dover Publishers, Inc. New York, 1989.

R H Dicke and J P Wittke, *Introduction to Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, Reading, Mass, 1960

و کتاب پیشرفته‌تر

E Merzbacher, *Quantum Mechanics*, John Wiley & Sons, New York, 1970.

www.arsanjan.blogfa.com

۷

روشهای عملگری در مکانیک کوانتومی

در بحث ساختار کلی مکانیک موجی، به عملگرهای معرف مشاهده‌پذیرها و ویژه‌تابعهای آنها به یک اندازه اهمیت دادیم. اگرچه در یک جا ویژه‌تابعها را همانند یک پایهٔ راست‌هنجار از بردارهای یکه در فضای برداری Nبعدی توصیف کردیم ــ که مسلماً از اهمیت آنها می‌کاهد ــ اما به‌نظر می‌رسید که آنها، نه عملگرها، در بررسی مسائل فیزیکی در فصل ۵ نقش اول را به‌عهده دارند. در این فصل، با استفاده از یک مثال ساده، نشان خواهیم داد که (الف) برای یافتن طیف ویژه‌مقدار تنها با استفاده از عملگرها می‌توان نتیجه‌های بسیاری به‌دست آورد، و (ب) توصیف ویژه‌تابعها به‌عنوان پایه را می‌توان اندکی مجردتر کرد. این توصیف به این دلیل اهمیت دارد که تاکنون تنها توابعی را در نظر گرفته‌ایم که به x یا به p بستگی دارند، اما در آینده نشان خواهیم داد که مشاهده‌پذیرهایی وجود دارند که نمی‌توان آنها را مستقیماً به‌فضای x وابسته کرد، و برای آنها باید مفهوم مجردتر ویژه‌حالت را تعریف کرد. این نکات در جریان بررسی مثال مزبور، مسئلهٔ نوسانگر هماهنگ، روشنتر خواهند شد.[۱]

---

۱. مسائلی که حل دقیق دارند، چه به‌صورت معادله‌های دیفرانسیل چه به‌صورت عملگری، اندک هستند. مسئلهٔ نوسانگر هماهنگ از همه ساده‌تر و از این‌رو برای اهداف ما از همه مناسبتر است.

www.arsanjan.blogfa.com

طیف انرژی نوسانگر هماهنگ

هامیلتونی نوسانگر هماهنگ به‌صورت زیر است

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \qquad (۱_۷)$$

که در آن x و p عملگر هستند. بر نمایش p به‌صورت $(\hbar/i)(d/dx)$ تأکید نمی‌کنیم. تنها نتیجهٔ این نمایش صریح، که در فصل ۳ به‌دست‌آوردیم، رابطهٔ جابه‌جایی بنیادی زیر است

$$[p, x] = \frac{h}{i} \qquad (۲_۷)$$

به لحاظ کلاسیک، هامیلتونی نوسانگر هماهنگ را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$H = \omega\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2}}x - i\frac{p}{\sqrt{2m\omega}}\right)\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2}}x + i\frac{p}{\sqrt{2m\omega}}\right)$$

اما چون p و x جابه‌جا نمی‌شوند، داریم

$$\begin{aligned}
&\omega\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2}}x - i\frac{p}{\sqrt{2m\omega}}\right)\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2}}x + i\frac{p}{\sqrt{2m\omega}}\right) \\
&= \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 - \frac{i\omega}{2}(px - xp) \\
&= H - \frac{1}{2}h\omega
\end{aligned} \qquad (۳_۷)$$

در اینجا برای عملگرهایی که $H - h\omega/2$ به آنها تجزیه شده است یک نمادنگاری خاص معرفی می‌کنیم:

$$\begin{aligned}
A &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + i\frac{p}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \\
A^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - i\frac{p}{\sqrt{2m\omega\hbar}}
\end{aligned} \qquad (۴_۷)$$

که در آنها عامل اضافی $\sqrt{1/\hbar}$ را برای این وارد کرده‌ایم که A و $A^\dagger$ بی‌بعد باشند. چون x و p هرمیتی هستند، $A^\dagger$ واقعاً همیوغ هرمیتی A است. توجه کنید که

$$[A, A^\dagger] = \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x, -i\frac{p}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\right] + \left[i\frac{p}{\sqrt{2m\omega\hbar}}, \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x\right] = 1 \qquad (۵_۷)$$

www.arsanjan.blogfa.com

هامیلتونی به‌صورت زیر درمی‌آید

$$H = \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + A^\dagger A\right) \qquad (۶_۷)$$

این سادگی هامیلتونی موجب سادگی رابطه‌های جابه‌جایی A و $A^\dagger$ با H می‌شود. داریم[۲]

$$[H, A] = [\hbar\omega A^\dagger A, A] = \hbar\omega[A^\dagger, A]A = -\hbar\omega A \qquad (۷_۷)$$

و

$$[H, A^\dagger] = [\hbar\omega A^\dagger A, A^\dagger] = \hbar\omega A^\dagger[A, A^\dagger] = \hbar\omega A^\dagger \qquad (۸_۷)$$

توجه کنید که یک راه ساده برای به‌دست آوردن رابطه‌های جابه‌جایی شامل عملگرهای الحاقی هرمیتی استفاده از اتحاد زیر است

$$[A, B]^\dagger = (AB - BA)^\dagger = B^\dagger A^\dagger - A^\dagger B^\dagger = [B^\dagger, A^\dagger] \qquad (۹_۷)$$

مخصوصاً داریم

$$\begin{aligned}[H, A]^\dagger = [A^\dagger, H] &= -[H, A^\dagger] \\ &= (-\hbar\omega A)^\dagger\end{aligned} \qquad (۱۰_۷)$$

که از آن رابطهٔ ۷ـ۸ به‌دست می‌آید.

اکنون معادلهٔ ویژه‌مقداری را می‌نویسیم:

$$Hu_E = Eu_E \qquad (۱۱_۷)$$

درگذشته، هرگاه چنین معادله‌ای را می‌نوشتیم، منظور آن بود که H شامل عملگرهای دیفرانسیلی مانند d/dx است و u_E تابعی از x است. این فرض مناسب بود زیرا با عملگرهایی سروکار داشتیم

---

۲. از قاعده‌های جابه‌جایی که در پیوست ب نشان داده شده‌اند مکرراً استفاده خواهیم کرد، از جمله

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B \quad \text{و} \quad [A + B, C] = [A, C] + [B, C]$$

بدیهی است که ترتیب عملگرها نباید به‌هم بخورد.

www.arsanjan.blogfa.com
که مشخصاً به فضایی مربوط می‌شدند که با تمام تابعهای انتگرال‌پذیر مجذوری از x تعریف شده بود، اما در آنچه اکنون انجام می‌دهیم چیزهایی را که عملگرها روی آنها عمل می‌کنند چندان مشخص نمی‌کنیم. تنها فرض می‌کنیم که آنها در یک فضای برداری مجرد تعریف شده‌اند، و این فضا را بعداً به‌فضای توابع x مربوط خواهیم کرد. برای انتقال این تجرید به زبانی که برای توصیف معادله‌ها از آن استفاده می‌کنیم، به‌جای ویژه‌تابع صحبت می‌کنیم، و آنچه را تابع‌موج یا بستهٔ‌موج نامیدیم اکنون بردار حالت می‌نامیم. بنابراین، به‌جای ویژه‌تابع $u_{ab\cdots m}$ مربوط به بزرگترین مجموعهٔ مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده می‌توان ویژه‌بردار یا ویژه‌حالت $u_{ab\cdots m}$ را به‌کار برد؛ شاخصهای a، b، ...، m معرف ویژه‌مقدارهای عملگرهای A، B، ...، M هستند، و این توصیف، بدون x، به‌روشنی حاوی بیشترین اطلاعات ممکن است.

اکنون ۷ـ۷ را بر u_E اعمال می‌کنیم:

$$HAu_E - AHu_E = -\hbar\omega Au_E$$

با استفاده از ۷ـ۱۱، به‌دست می‌آوریم

$$HAu_E = (E - \hbar\omega)Au_E \qquad (۱۲\text{ـ}۷)$$

این معادله نشان می‌دهد که اگر u_E ویژه‌حالت H با ویژه‌مقدار E باشد، Au_E نیز ویژه‌حالت H با ویژه‌مقدار $E - \hbar\omega$ است، یعنی متناظر با ویژه‌مقداری است که به اندازهٔ یک

$$\epsilon = \hbar\omega \qquad (۱۳\text{ـ}۷)$$

کمتر است. بنابراین، می‌توان نوشت

$$Au_E = c(E)u_{E-\epsilon} \qquad (۱۴\text{ـ}۷)$$

وجود ثابت $c(E)$ لازم است، زیرا حتی اگر u_E به ۱ بهنجار شده باشد Au_E الزاماً چنین نیست. در تأکید بر جدایی از وابستگی به x، شرط بهنجارش که همیشه به‌صورت

$$\int u_E^*(x)u_E(x)dx = ۱$$

نوشته می‌شد اکنون با استفاده از نمادنگاری دیراک به‌صورت زیر نوشته می‌شود

$$\langle u_E|u_E\rangle = ۱ \qquad (۱۵\text{ـ}۷)$$

www.arsanjan.blogfa.com

ویژه‌حالتها را همیشه به ۱ بهنجار کرد. اگر دو ویژه‌حالت متعلق به پیوستار باشند، که در این مورد

$$\langle u_E|u_{E'}\rangle = \begin{cases}\delta(E-E')\\ \text{یا } \delta(p-p')\end{cases} \qquad (۱۶_۷)$$

اکنون اگر ۷ـ۷ را بر حالت $u_{E-\epsilon}$ اعمال کنیم، دقیقاً به همان طریق می‌بینیم که $Au_{E-\epsilon}$ ، یا معادل آن $A^۲u_E$، حالتی با انرژی $E-۲\epsilon$ را می‌دهد. بنابراین، با اعمال مکرر A روی یک u_E می‌توان حالتهای با انرژی کمتر و کمتر را تولید کرد. عملگر A را به همین مناسبت عملگر کاهنده می‌نامند. حدی برای تکرار اعمال A وجود دارد زیرا یک پیامد ۷ـ۱ این است که مقدار انتظاری H باید همیشه مثبت باشد. در واقع، برای یک تابع‌موج اختیاری داریم

$$\begin{aligned}\langle\psi|p^۲|\psi\rangle &= \int \psi^*(x)p^۲\psi(x)dx = \int [p^\dagger\psi(x)]^*(p\psi)dx\\ &= \int [p\psi(x)]^*[p\psi(x)]dx\\ &= h^۲\int |d\psi(x)/dx|^۲dx \geq ۰\end{aligned} \qquad (۱۷_۷)$$

که در نمادنگاری بی‌مختصات به‌صورت زیر بیان می‌شود

$$\begin{aligned}\langle\psi|p^۲|\psi\rangle &= \langle p^\dagger\psi|p\psi\rangle\\ &= \langle p\psi|p\psi\rangle \geq ۰\end{aligned} \qquad (۱۸_۷)$$

به‌همین ترتیب، چون x نیز یک عملگر هرمیتی است، داریم

$$\begin{aligned}\langle\psi|x^۲|\psi\rangle &= \langle x^\dagger\psi|x\psi\rangle\\ &= \langle x\psi|x\psi\rangle \geq ۰\end{aligned} \qquad (۱۹_۷)$$

و حاصلضرب نرده‌ای هر بردار در خودش مجذور طول آن است که یک عدد مثبت است. بنابراین، روند کاهش باید در جایی که حالت پایه است قطع شود. یعنی، اگر حالت پایه را با $u_۰$ نشان دهیم، باید

$$Au_۰ = ۰ \qquad (۲۰_۷)$$

www.arsanjan.blogfa.com

انرژی حالت پایه برابر است با

$$Hu_0 = (\hbar\omega A^\dagger A + \frac{1}{2}\hbar\omega)u_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega\, u_0 \qquad (۲۱_۷)$$

اکنون ۷ـ۸ را بر حالت پایه اعمال می‌کنیم:

$$HA^\dagger u_0 - A^\dagger H u_0 = \hbar\omega A^\dagger u_0$$

یعنی،

$$HA^\dagger u_0 = (\hbar\omega + \frac{1}{2}\hbar\omega)A^\dagger u_0 \qquad (۲۲_۷)$$

انرژی به‌اندازهٔ یک $\hbar\omega$ افزایش یافته است، و از این‌رو $A^\dagger$ را عملگر افزاینده می‌نامند. نمادنگاری خود را اندکی تغییر می‌دهیم، به این معنی که هر حالت را با تعداد $\hbar\omega$های افزون بر انرژی حالت پایهٔ $\hbar\omega/2$ نشانگذاری می‌کنیم. بنابراین، می‌نویسیم

$$A^\dagger u_0 = cu_1 \qquad (۲۳_۷)$$

توجه کنید که ۷ـ۱۲ ایجاب می‌کند که

$$Au_1 = c'u_0 \qquad (۲۴_۷)$$

یعنی $A^\dagger$ و A روی یک "نردبان" پله به پله حرکت می‌کنند. تمام حالتها را می‌توان با اعمال مکرر $A^\dagger$ بر u_0 تولید کرد. در نتیجه، طیف انرژی با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad n = 0, 1, 2, \ldots \qquad (۲۵_۷)$$

بدین‌ترتیب، توانسته‌ایم طیف انرژی را بدون حل هیچ معادلهٔ دیفرانسیلی به‌دست آوریم. همچنین یک نمایش کلی از ویژه‌بردارها داریم:

$$u_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(A^\dagger)^n u_0 \qquad (۲۶_۷)$$

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن ثابت درست بهنجارش را برگزیده‌ایم. برای به‌دست آوردن این ثابت این است که با توجه به رابطهٔ جابه‌جایی

$$[A, A^\dagger] = ۱$$

از تساوی صوری زیر استفاده کنیم

$$A = \frac{d}{dA^\dagger} \qquad (۲۷_۷)$$

بنابراین، می‌توانیم بنویسیم

$$\langle u_۰ | A^m (A^\dagger)^n | u_۰ \rangle = \left\langle u_۰ \left| \left(\frac{d}{dA^\dagger} \right)^m (A^\dagger)^n \right| u_۰ \right\rangle$$

به‌ازای $m < n$، برای طرف راست به‌دست می‌آوریم

$$n(n-۱)(n-۲)\cdots(n-m+۱)\langle u_۰ | (A^\dagger)^{n-m} | u_۰ \rangle$$

به‌آسانی دیده می‌شود که براکت برابر با صفر است:

$$\langle u_۰ | (A^\dagger)^{n-m} | u_۰ \rangle = \langle A u_۰ \left| (A^\dagger)^{n-m-۱} \right| u_۰ >= ۰$$

زیرا $A u_۰ = ۰$. به‌ازای $m > n$، طرف چپ را به‌صورت زیر می‌نویسیم

$$\langle u_۰ | A^m (A^\dagger)^n | u_۰ \rangle = \left\langle u_۰ \left| A^{m-n} \left(\frac{d}{dA^\dagger} \right)^n (A^\dagger)^n \right| u_۰ \right\rangle$$

پس از مشتق گرفتن به این نتیجه می‌رسیم که $n!\langle u_۰ | A^{m-n} | u_۰ \rangle = ۰$. به‌ازای $m = n$ داریم

$$\langle u_۰ | A^n (A^\dagger)^n | u_۰ \rangle = \left\langle u_۰ \left| \left(\frac{d}{dA^\dagger} \right)^n (A^\dagger)^n \right| u_۰ \right\rangle = n!$$

بنابراین، ضریب بهنجارش در ۷ـ۲۶ درست است، و همچنین نشان داده‌ایم که

$$\langle u_m | u_n \rangle = ۰ \qquad m \neq n \qquad (۲۸_۷)$$

www.arsanjan.blogfa.com

این حکم که هر بردار حالت اختیاری را می‌توان برحسب ویژه‌حالتهای H بسط داد اکنون به‌صورت مستقل از مختصات زیر نوشته می‌شود

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} C_n u_n \qquad (۲۹_۷)$$

و چون $\langle u_m | u_n \rangle = \delta_{mn}$، داریم

$$C_m = \langle u_m | \psi \rangle \qquad (۳۰_۷)$$

نمایشهای حالتهای مجرد: از عملگرها تا معادلهٔ شرودینگر

نشان دادیم که می‌توان ویژه‌مقدارهای انرژی نوسانگر هماهنگ را تنها با استفاده از روشهای عملگری به‌دست آورد. در این مسئله تنها چیزی که برای تعیین ویژه‌حالتها به آن احتیاج داریم انرژی است، یعنی اعداد درست $n = 0, 1, 2, \ldots$ که در رابطهٔ زیر ظاهر می‌شوند

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$$

و از این‌رو مجموعهٔ کامل مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده تنها شامل H است.[۳] بدین‌ترتیب، شاخص n در u_n تمام محتوای آن‌را توصیف می‌کند. بنابراین، می‌توانیم نقش ممتاز ویژه‌تابع در فضای x، $u_n(x)$، را کنار بگذاریم، بجز اینکه: $u_n(x)$ اطلاعات بیشتری به‌ما می‌دهد زیرا چگالی احتمال یافتن ذره در x را (از طریق $|u_n(x)|^2$) تعیین می‌کند. با وجود این، آیا این مضمون اضافی می‌تواند تابع‌موج فضای x را ممتاز کند؟ برای مثال، نقش تابع‌موج $\phi(p)$ را در فضای تکانه یادآور می‌شویم. چنانکه در فصل ۳ دیدیم، $\phi(p)$ تبدیل فوریهٔ تابع‌موج فضای x است و از این‌رو ممکن است برای آن نقش ممتازی در نظر بگیریم، اما بعداً توضیح دادیم که $\phi(p)$، مثلاً در ۴ـ۴، "صرفاً" یک ضریب بسط در بسط تابع‌موج اختیاری $\psi(x)$ برحسب ویژه‌تابعهای عملگر تکانه است، و به همین دلیل مجذور قدرمطلق آن احتمال یافتن تکانهٔ p برای آن حالت را به‌دست می‌دهد. به‌همین‌ترتیب، این واقعیت که $|\psi(x)|^2$ چگالی احتمال یافتن x برای مکان دستگاه است را می‌توان چنین تعبیر کرد که $\psi(x)$ ضریب بسط یک حالت مجرد اختیاری برحسب ویژه‌حالتهای عملگر مکان x_{op} است. معادلهٔ ویژه‌مقداری مربوط را به‌صورت زیر می‌نویسیم

$$x_{\text{op}} \phi_x = x \phi_x \qquad (۳۱_۷)$$

---

۳. عدد n معرف پاریته نیز هست. حالتهایی که با اعداد زوج n مشخص می‌شوند پاریتهٔ مثبت و آنهایی که با اعداد فرد مشخص می‌شوند پاریتهٔ منفی دارند. این خاصیت از فرد بودن A و $A^\dagger$ تحت انعکاس ناشی می‌شود.

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن x را به‌عنوان شاخص نوشتیم تا تأکید کنیم که ϕ_x ویژه‌حالت مربوط به x است، درست همان‌گونه که u_n ویژه‌حالت مربوط به n است. طیف عملگر هرمیتی $x_{\rm op}$ پیوسته است، به‌طوری که قضیهٔ بسط، به‌جای اینکه به‌صورت ۷ـ۲۹ باشد، در واقع به‌صورت زیر است

$$\psi = \int dx\, C(x)\phi_x \qquad (۳۲\text{ـ}۷)$$

چون ویژه‌حالتهایی که در ۷ـ۳۱ آمده‌اند یک مجموعهٔ راست‌هنجار تشکیل می‌دهند، یعنی

$$\langle \phi_x | \phi_{x'} \rangle = \delta(x - x') \qquad (۳۳\text{ـ}۷)$$

به‌دست می‌آوریم

$$C(x) = \langle \phi_x | \psi \rangle \qquad (۳۴\text{ـ}۷)$$

و این کمیت دامنهٔ احتمال یافتن ذره در x است ــ یا به‌عبارت مشخصتر، از اندازه‌گیری مشاهده‌پذیر x ویژه‌مقدار x با احتمال $|C(x)|^2$ به‌دست می‌آید. کافی است نمادنگاری را تغییر دهیم و ۷ـ۳۲ را به‌صورت

$$\psi = \int dx \psi(x)\, \phi_x \qquad (۳۵\text{ـ}۷)$$

بنویسیم تا نشان دهیم تابع‌موج فضای x نقش ممتازی ندارد، و استفاده از آن تنها برای آسانی است. اصول اساسی با عملگرها و ویژه‌بردارها و ویژه‌مقدارهای آنها در یک فضای مجرد سروکار دارند، و بقیهٔ چیزها به نمایش مربوط می‌شوند. البته این نمایش در به‌دست آوردن مقادیر عددی، که هدف فیزیک است، اهمیت فوق‌العاده‌ای دارد. به همین دلیل است که بر ساختار صوری نظریه تأکید چندانی نمی‌کنیم، و همچنان از توابع‌موج استفاده خواهیم کرد. بعداً با عملگرهایی سروکار خواهیم داشت که مانستهٔ کلاسیک ندارند، مانند اسپین الکترون و سایر ذرات، و در آنجا آزادی استفاده از نمایشهای دیگر را خواهیم دید.

برای مراجعهٔ آینده بهتر است دامنهٔ به‌دست آمدن مقدار x در اندازه‌گیری مکان را برای یک ویژه‌حالت تکانهٔ u_p محاسبه کنیم، یعنی می‌خواهیم $\psi(x)$ را که با رابطهٔ زیر تعریف می‌شود محاسبه کنیم

$$u_p = \int dx\, \psi(x)\phi_x \qquad (۳۶\text{ـ}۷)$$

www.arsanjan.blogfa.com

بنابه قواعدی که گفتیم، داریم

$$\psi(x) = \langle \phi_x | u_p \rangle \qquad (۳۷_۷)$$

اما می‌دانیم که دامنهٔ یافتن ذره‌ای با تکانهٔ p در نقطهٔ x با تابع‌موج ذرهٔ آزاد زیر داده می‌شود

$$\psi(x) = \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{۲\pi\hbar}} \qquad (۳۸_۷)$$

بنابراین، به‌این نتیجه می‌رسیم که

$$\langle x|p\rangle = \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{۲\pi\hbar}} \qquad (۳۹_۷)$$

که در آن برای ساده‌نویسی از تغییر نمادنگاری $|u_p\rangle \to |p\rangle, |\phi_x\rangle \to |x\rangle$ استفاده کرده‌ایم. توجه کنید که

$$\int dp \langle x|p\rangle\langle p|x'\rangle = \delta(x - x') \qquad (۴۰_۷)$$

و

$$\int dx \, \langle p|x\rangle\langle x|p'\rangle = \delta(p - p') \qquad (۴۱_۷)$$

با تعمیم رابطهٔ کاملیت ۶ـ۴۵،

$$\sum_a |u_a\rangle\langle u_a| = ۱ \qquad (۴۲_۷)$$

به‌متغیرهای پیوسته، به‌دست می‌آوریم

$$\int dp \, |p\rangle\langle p| = ۱ \qquad (۴۳_۷)$$

و

$$\int dx \, |x\rangle\langle x| = ۱ \qquad (۴۴_۷)$$

www.atsabjan.blogfa.com

بنابراین، رابطه‌های ۷ـ۴۰ و ۷ـ۴۱ را می‌توان به صورت

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x') \qquad (۷ـ۴۵\text{الف})$$

و

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p - p') \qquad (۷ـ۴۵\text{ب})$$

توجه کنید که ۷ـ۴۵الف همان ۷ـ۳۳ با نمادنگاری ساده است.
چگونه از این ساختار مجرد به معادلهٔ شرودینگر می‌رسیم؟ ابتدا ۷ـ۲۰ را در نظر بگیرید:

$$A|u_\circ\rangle = \circ$$

بنابراین، داریم

$$\langle x|A|u_\circ\rangle = \circ$$

یعنی

$$\left\langle x \left| \sqrt{\frac{m\omega}{۲\hbar}} x_{\rm op} + i\frac{p_{\rm op}}{\sqrt{۲m\omega\hbar}} \right| u_\circ \right\rangle = \circ \qquad (۷ـ۴۶)$$

اکنون از اعمال عملگر x روی حالت $\langle x|$ به‌دست می‌آوریم

$$x_{\rm op}|x\rangle = x|x\rangle \qquad (۷ـ۴۷)$$

و در نتیجه

$$\langle x|x_{\rm op}|u_\circ\rangle = x\langle x|u_\circ\rangle = xu_\circ(x) \qquad (۷ـ۴۸)$$

www.arsanjan.blogfa.com

و

$$\begin{aligned}\langle x|p_{\rm op}|u_\circ\rangle &= \int dp\ \langle x|p_{\rm op}|p\rangle\langle p|u_\circ\rangle \\ &= \int dp\ p\langle x|p\rangle\langle p|u_\circ\rangle \\ &= \int dp\ p\ \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\langle p|u_\circ\rangle \\ &= \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\int dp\ \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\langle p|u_\circ\rangle \\ &= \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\int dp\ \langle x|p\rangle\langle p|u_\circ\rangle \\ &= \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}u_\circ(x)\end{aligned} \qquad (۴۹_۷)$$

بنابراین، رابطهٔ $A|u_\circ\rangle = \circ$ در فضای x به‌صورت معادلهٔ دیفرانسیل زیر درمی‌آید

$$\left(m\omega x + \hbar\frac{d}{dx}\right)u_\circ(x) = \circ \qquad (۵۰_۷)$$

جواب این معادلهٔ دیفرانسیل ساده عبارت است از

$$u_\circ(x) = Ce^{-m\omega x^2/2\hbar} \qquad (۵۱_۷)$$

ثابت C از شرط بهنجارش $u_\circ(x)$ به ۱ به‌دست می‌آید:

$$۱ = C^2\int_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{-m\omega x^2/\hbar} = C^2\sqrt{\frac{\hbar\pi}{m\omega}}$$

یا

$$C = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \qquad (۵۲_۷)$$

www.arsanjan.blogfa.com

همچنین می‌توان حالتهای بالاتر انرژی را مستقیماً با استفاده از رابطهٔ زیر به‌دست آورد

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}}(A^\dagger)^n u_0(x)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,\frac{d}{dx}\right)^n e^{-m\omega x^2/2\hbar} \qquad (۵۳_۷)$$

به‌طور کلی، معادلهٔ

$$H|u_E\rangle = E|u_E\rangle \qquad (۵۴_۷)$$

وقتی به‌صورت

$$\langle x|H|u_E\rangle = E\langle x|u_E\rangle \qquad (۵۵_۷)$$

نوشته شود به‌معادلهٔ دیفرانسیل زیر برای $\langle x|u_E\rangle = u_E(x)$ تبدیل می‌شود

$$Hu_E(x) = Eu_E(x) \qquad (۵۶_۷)$$

که در آن در H، x به‌جای x_{op} و $(\hbar/i)\ (d/dx)$ به‌جای p_{op} گذاشته می‌شود.

وابستگی زمانی عملگرها

این فصل را با بررسی تحول زمانی یک دستگاه به روش مستقل از نمایش به‌پایان می‌رسانیم. معادلهٔ شرودینگر وابسته به زمان

$$i\hbar\frac{d\psi(t)}{dt} = H\psi(t) \qquad (۵۷_۷)$$

در اینجا یک معادلهٔ عملگری در یک فضای مجرد است. $\psi(t)$ یک بردار است، و راستای آن تابع زمان است. این معادله را می‌توان به‌آسانی حل کرد. جواب آن، اگر H وابستگی صریح به زمان نداشته باشد، عبارت است از

$$\psi(t) = e^{-iHt/\hbar}\psi(0) \qquad (۵۸_۷)$$

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن $\psi(\circ)$ بردار در زمان $t = \circ$ است، و عملگر $e^{-iHt/\hbar}$ با رابطهٔ زیر تعریف می‌شود

$$e^{-iHt/\hbar} = \sum_{n=\circ}^{\infty} \frac{(-iHt/\hbar)^n}{n!} \qquad (۵۹_۷)$$

جواب ۷ـ۵۸ امکان توصیف تغییر زمانی مقدار انتظاری عملگری مانند B را، که وابستگی صریح به زمان نداشته باشد، فراهم می‌سازد:

$$\begin{aligned} \langle B\rangle_t &= \langle\psi(t)|B\psi(t)\rangle \\ &= \langle e^{-iHt/\hbar}\psi(\circ)|B\ e^{-iHt/\hbar}\psi(\circ)\rangle \\ &= \langle\psi(\circ)|e^{iHt/\hbar}B\ e^{-iHt/\hbar}\psi(\circ)\rangle \qquad (۶۰_۷) \\ &= \langle\psi(\circ)|B(t)\psi(\circ)\rangle \\ &= \langle B(t)\rangle_\circ \end{aligned}$$

در اینجا از

$$(e^{-iHt/\hbar})^\dagger = e^{iH^\dagger t/\hbar} = e^{iHt/\hbar} \qquad (۶۱_۷)$$

و از تعریف زیر استفاده کرده‌ایم

$$B(t) = e^{iHt/\hbar}B\ e^{-iHt/\hbar} \qquad (۶۲_۷)$$

بنابه ۷ـ۶۰، مقدار انتظاری عملگر مستقل از زمان B را برای حالتی که به‌صورت ۷ـ۵۸ با زمان تغییر می‌کند می‌توان به‌صورت مقدار انتظاری عملگر وابسته به زمان $B(t)$ (که با ۷ـ۶۲ داده می‌شود) برای حالت مستقل از زمان $\psi(\circ)$ نوشت. این نتیجه در بررسی صوری مکانیک کوانتومی بسیار مفید است، زیرا به‌آسانی می‌توان یک بار برای همیشه پایه‌ای از ویژه‌بردارهای راست‌هنجار در فضای برداری مجرد ساخت و نگران این نبود که بردارهای پایه چگونه با زمان تغییر می‌کنند. این روش را نمایش هایزنبرگ می‌نامند، در حالی‌که اگر B را مستقل از زمان بگیریم در نمایش شرودینگر کار می‌کنیم. از هر نمایشی که استفاده کنیم، نتیجه یکی است: مانند این است که در توصیف چرخش یک جسم نسبت به یک دستگاه مختصات، جسم را بچرخانیم و دستگاه مختصات را ثابت بگیریم یا جسم را ساکن بگیریم و دستگاه مختصات را بچرخانیم. انتخاب به سهولت کار بستگی دارد. اگر با نمایش هایزنبرگ کار کنیم، بردارهای حالت ثابت‌اند، و در بررسی تحول زمانی

www.arsanjan.blogfa.com

دستگاه احتیاجی به استفاده از تصویر پادینگر نیست. مشاهده‌پذیر با زمان از ۷ـ۶۲ به‌دست می‌آید:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}B(t) &= \frac{i}{\hbar}He^{iHt/\hbar}B\,e^{-iHt/\hbar} - \frac{i}{\hbar}e^{iHt/\hbar}BH\,e^{-iHt/\hbar}\\ &= \frac{i}{\hbar}HB(t) - \frac{i}{\hbar}B(t)H \qquad (۶۳_۷)\\ &= \frac{i}{\hbar}[H, B(t)]\end{aligned}$$

که شباهت زیادی به ۶ـ۶۹ دارد. معادلهٔ ۶ـ۶۹ معادله‌ای برای مقدار انتظاری است، اما چون صورت آن مستقل از حالتی است که در آن مقدار انتظاری محاسبه می‌شود باید حاکی از خواص عملگر باشد، و معادلهٔ ۷ـ۶۳ این را صریحاً نشان می‌دهد.

برای نوسانگر هماهنگ داریم

$$H = \hbar\omega A^\dagger A + \frac{۱}{۲}\hbar\omega$$

و چون H یک ثابت حرکت است، می‌توانیم بنویسیم

$$H = \hbar\omega A^\dagger(t)A(t) + \frac{۱}{۲}\hbar\omega \qquad (۶۴_۷)$$

همچنین با استفاده از ۷ـ۶۲ می‌توان نشان داد که

$$[A(t), A^\dagger(t)] = ۱ \qquad (۶۵_۷)$$

بنابراین، ۷ـ۷ و ۷ـ۸ به‌همان صورت باقی می‌مانند، و به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}A(t) &= -i\omega A(t)\\ \frac{d}{dt}A^\dagger(t) &= i\omega A^\dagger(t)\end{aligned} \qquad (۶۶_۷)$$

بدین‌ترتیب، وابستگی زمانی $A(t)$ و $A^\dagger(t)$ از حل ۷ـ۶۶ به‌دست می‌آید:

$$\begin{aligned}A(t) &= e^{-i\omega t}A(۰)\\ A^\dagger(t) &= e^{i\omega t}A^\dagger(۰)\end{aligned} \qquad (۶۷_۷)$$

www.arsanjan.blogfa.com

با استفاده از رابطهٔ ۷ـ۴ به‌سادگی می‌توان نشان داد که

$$p(t) = p(\circ)\ \cos\ \omega t - m\omega x(\circ)\ \sin\ \omega t$$
$$x(t) = x(\circ)\ \cos\ \omega t + \frac{p(\circ)}{m\omega} \sin\ \omega t \qquad (۶۸_۷)$$

که عملگرهای $x(t)$ و $p(t)$ را برحسب عملگرهای $x(\circ)$ و $p(\circ)$ بیان می‌کنند.

مسائل

۷ـ۱ با استفاده از رابطهٔ جابه‌جایی ۷ـ۵ و تعریف حالت u_n که با ۷ـ۲۶ داده شده است، ثابت کنید

$$Au_n = \sqrt{n}\ u_{n-۱}$$

[راهنمایی: از روش استقراء استفاده کنید، یعنی نشان دهید اگر این رابطه برای n برقرار باشد برای $n+۱$ هم برقرار است، و آن‌را مستقیماً برای $n = ۱$ اثبات کنید.]

۷ـ۲ با استفاده از رابطهٔ قبل نشان دهید اگر $f(A^\dagger)$ یک چندجمله‌ای برحسب $A^\dagger$ باشد، آنگاه

$$Af(A^\dagger)u_\circ = \frac{df(A^\dagger)}{dA^\dagger}u_\circ$$

توجه کنید که نمایش A به‌صورت

$$A = \frac{d}{dA^\dagger}$$

با رابطهٔ جابه‌جایی ۷ـ۵ سازگار است و کاملاً شبیه به نمایش زیر است

$$p = \frac{\hbar}{i}\ \frac{d}{dx}$$

۷ـ۳ $\langle u_n|x|u_m\rangle$ را محاسبه کنید و نشان دهید که بجز برای $n = m \pm ۱$ مقدار آن برابر صفر است.

[راهنمایی: با توجه به $\langle u_n|A^\dagger|u_m\rangle = \langle Au_n|u_m\rangle = \langle u_m|A|u_n\rangle^*$، کافی است $\langle u_n|A|u_m\rangle$ را به‌دست آورید. از نتایج مسئلهٔ ۷ـ۱ استفاده کنید.]

www.arsanjan.blogfa.com

۴ـ۷ $\langle u_n|p|u_m\rangle$ را محاسبه کنید.

۵ـ۷ با استفاده از نتایج مسئله‌های ۳ـ۷ و ۴ـ۷، $\langle u_m|px|u_n\rangle$ را با محاسبهٔ $\sum_k \langle u_m|p|u_k\rangle\langle u_k|x|u_n\rangle$ به‌دست آورید

۶ـ۷ $\langle u_m|xp|u_n\rangle$ را به روش مسئلهٔ ۵ـ۷ محاسبه کنید.

۷ـ۷ با استفاده از نتایج مسئله‌های ۵ـ۷ و ۶ـ۷ نشان دهید

$$\langle u_m|[p,x]|u_n\rangle = \frac{\hbar}{i}\delta_{mn}$$

۸ـ۷ $\langle u_n|x|u_n\rangle$ و $\langle u_n|x^2|u_n\rangle$ را به‌دست آورید.

۹ـ۷ $\langle u_n|p|u_n\rangle$ و $\langle u_n|p^2|u_n\rangle$ را محاسبه کنید.

۱۰ـ۷ با استفاده از تعریف متداول

$$(\Delta x)^2 = \langle u_n|x^2|u_n\rangle - (\langle u_n|x|u_n\rangle)^2$$

$(\Delta x)^2(\Delta p)^2$ را محاسبه کنید.

۱۱ـ۷ یک جفت عملگر A و $A^\dagger$ را که در رابطهٔ جابه‌جایی زیر صدق می‌کنند در نظر بگیرید

$$[A, A^\dagger] = 1$$

(الف) نشان دهید عملگر $N = A^\dagger A$ دارای ویژه‌مقدارهای $n = 0, 1, 2, \ldots$ است.
(ب) نشان دهید هامیلتونی نوسانگر هماهنگ را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$H = \hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}\right)$$

۱۲ـ۷ حالت $|\alpha\rangle$ را که در معادلهٔ زیر صدق می‌کند حالت همدوس می‌نامند

$$A|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$$

(الف) نشان دهید حالت $|\alpha\rangle$ را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$|\alpha\rangle = C\, e^{\alpha A^\dagger}|0\rangle$$

www.arsanjan.blogfa.com

(ب) C را با استفاده از نتیجه مسئلهٔ ۷ـ۱ به‌دست آورید.

(ج) حالت $|\alpha\rangle$ را برحسب ویژه‌حالتهای عملگر شمار N، $|n\rangle$، بسط دهید و با استفاده از آن احتمال این را که حالت همدوس حاوی n کوانتوم باشد به‌دست آورید. این توزیع را توزیع پواسون می‌نامند.

(د) $\langle\alpha|N|\alpha\rangle$ را که میانگین تعداد کوانتومها در حالت همدوس است محاسبه کنید.

۱۳ـ۷ با استفاده از معادلهٔ عمومی عملگری حرکت ۷ـ۶۳، وابستگی زمانی عملگر $x(t)$ را که در هامیلتونی زیر وارد می‌شود به‌دست آورید

$$H = \frac{p^{۲}(t)}{۲m} + mgx(t)$$

۱۴ـ۷ هامیلتونی توصیف‌کنندهٔ نوسانگر یک‌بعدی در میدان الکتریکی خارجی را در نظر بگیرید:

$$H = \frac{p^{۲}(t)}{۲m} + \frac{۱}{۲}m\omega^{۲}x^{۲}(t) - e\mathscr{E}x(t)$$

معادلهٔ حرکت عملگرهای $p(t)$ و $x(t)$ را با استفاده از ۷ـ۶۳ و رابطهٔ جابه‌جایی زیر به‌دست آورید

$$[p(t), x(t)] = \frac{h}{i}$$

نشان دهید این معادلهٔ حرکت درست همان معادلهٔ کلاسیک حرکت است. $x(t)$ و $p(t)$ را برحسب $x(۰)$ و $p(۰)$ به‌دست آورید. ثابت کنید

$$[x(t_۱), x(t_۲)] \neq ۰ \qquad t_۱ \neq t_۲$$

این نتیجه نشان می‌دهد که عملگرهایی که در یک زمان جابه‌جا می‌شوند در زمانهای مختلف الزاماً جابه‌جا نمی‌شوند.

۱۵ـ۷ با استفاده از ۷ـ۵۳، ویژه‌تابعهای مربوط به n مساوی با ۱، ۲ و ۳ را محاسبه کنید. (تذکر: ترتیب x و d/dx را در بسط دوجمله‌ای رعایت کنید.)

۱۶ـ۷ با استفاده از نتایج مسئلهٔ ۷ـ۲ نشان دهید

$$e^{\lambda A}f(A)u_۰ = f(A + \lambda)u_۰$$

www.arsanjan.blogfa.com

[راهنمایی: جملهٔ نمایی را بسط دهید و از رابطه‌های

$$f(x+a)=\sum \frac{a^n}{n!}f^{(n)}(x)$$

$$f^{(n)}(x)=\frac{d^n}{dx^n}f(x)$$

در حل مسئله استفاده کنید.]

۱۷ـ۷ با استفاده از نتایج مسئلهٔ ۱۶ـ۷، رابطهٔ عملگری زیر را ثابت کنید

$$e^{\lambda A}f(A^\dagger)e^{-\lambda A}=f(A^\dagger+\lambda)$$

توجه کنید که یک رابطهٔ عملگری باید وقتی روی یک حالت اختیاری عمل می‌کند برقرار باشد. یک حالت اختیاری به‌صورت $g(A^\dagger)u_\circ$ در نظر بگیرید. بنابراین، باید نشان دهید

$$e^{\lambda A}f(A^\dagger)e^{-\lambda A}g(A^\dagger)u_\circ=f(A^\dagger+\lambda)g(A^\dagger)u_\circ$$

این رابطه را می‌توان از رابطهٔ کلی زیر نیز به‌دست آورد

$$e^{\lambda A}A^\dagger\, e^{-\lambda A}=A^\dagger+\lambda[A,A^\dagger]+\frac{\lambda^2}{2!}[A,[A,A^\dagger]]+\cdots$$

۱۸ـ۷ با استفاده از رابطهٔ قبل نشان دهید

$$e^{aA+bA^\dagger}=e^{aA}e^{bA^\dagger}e^{-(1/2)ab}$$

روش اثبات این است که ابتدا فرض می‌کنیم

$$e^{\lambda(aA+bA^\dagger)}\equiv e^{\lambda aA}F(\lambda)$$

نسبت به λ مشتق می‌گیریم:

$$(aA+bA^\dagger)e^{\lambda(aA+bA^\dagger)}=aA\, e^{\lambda aA}F(\lambda)+e^{\lambda aA}\frac{dF}{d\lambda}$$

www.arsanjan.blogfa.com

یا

$$(aA + bA^\dagger)e^{\lambda aA}F(\lambda) = aA\, e^{\lambda aA}(F\lambda) + e^{\lambda aA}\frac{dF}{d\lambda}$$

با استفاده از مسئلهٔ ۷ـ۱۷، به‌دست می‌آوریم

$$\frac{dF}{d\lambda} = (bA^\dagger - \lambda ab)F(\lambda)$$

و در نتیجه

$$F(\lambda) = e^{\lambda bA^\dagger}e^{-(۱/۲)\lambda^۲ ab}$$

۷ـ۱۹ با استفاده از راهکار مسئلهٔ ۷ـ۱۷، نشان دهید

$$e^{\lambda A^\dagger}f(A)e^{-\lambda A^\dagger} = f(A - \lambda)$$

و از این رابطه، با استفاده از روشی که در مسئلهٔ ۷ـ۱۸ گفته شد، ثابت کنید

$$e^{aA+bA^\dagger} = e^{bA^\dagger}\, e^{aA}\, e^{(۱/۲)ab}$$

۷ـ۲۰ با استفاده از نتیجهٔ بالا نشان دهید

$$e^{ikx} = e^{ik\sqrt{\hbar/۲m\omega}\, A^\dagger}e^{ik\sqrt{\hbar/۲m\omega}\, A}e^{-(\hbar k^۲/۴m\omega)}$$

با توجه به رابطهٔ

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{۲m\omega}}(A + A^\dagger)$$

$\langle u_۰|e^{ikx}|u_۰\rangle$ را محاسبه کنید.

۷ـ۲۱ نشان دهید نتیجهٔ مسئلهٔ قبل درست همان است که از انتگرال زیر به‌دست می‌آید

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\; u_۰^*(x)e^{ikx}u_۰(x)$$

www.arsanjan.blogfa.com

مراجع

مطالب این فصل تقریباً در تمام کتابهایی که در پایان کتاب معرفی شده‌اند یافت می‌شوند. توصیه می‌شود به چندتایی از آنها مراجعه کنید، زیرا مطالعهٔ یک مبحث پایه از دیدگاههای مختلف همواره مفید است.

www.arsanjan.blogfa.com

۸

دستگاههای N ذره‌ای

بحث مربوط به ذرهٔ منفرد را می‌توان به‌آسانی به دستگاههای Nذره‌ای تعمیم داد. دستگاه N ذره‌ای با یک تابع‌موج $\psi(x_1, x_2, \ldots, x_N)$ توصیف می‌شود، که به‌صورت زیر بهنجار شده است

$$\int \cdots \int dx_1 dx_2 \cdots dx_N |\psi(x_1, x_2, \ldots, x_N)|^2 = 1 \qquad (۱\text{ـ}۸)$$

تعبیر $|\psi(x_1, x_2, \ldots, x_N)|^2$ تعمیم تعبیر $|\psi(x)|^2$ است، یعنی این کمیت چگالی احتمال یافتن ذرهٔ ۱ در x_1، ذرهٔ ۲ در x_2، ...، و ذرهٔ N در x_N است. تحول زمانی این تابع‌موج از حل معادلهٔ دیفرانسیل زیر به‌دست می‌آید

$$ih\frac{\partial}{\partial t}\psi(x_1, \ldots, x_N; t) = H\psi(x_1, \ldots, x_N; t) \qquad (۲\text{ـ}۸)$$

که در آن هامیلتونی باز هم مطابق صورت کلاسیک

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m_i} + V(x_1, x_2, \ldots, x_N) \qquad (۳\text{ـ}۸)$$

www.arsanjan.blogfa.com

به‌صورت زیر ساخته می‌شود

$$H = -\hbar^2 \left(\frac{1}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \cdots + \frac{1}{2m_N} \frac{\partial^2}{\partial x_N^2} \right) + V(x_1, \ldots, x_N) \qquad (۴\text{ـ}۸)$$

تمام صورتبندی مکانیک کوانتومی که قبلاً به‌دست آوریم به‌آسانی قابل تعمیم است، به‌شرطی که عملگرهایی که مشاهده‌پذیرهای تک‌ذره‌ای را توصیف می‌کنند وقتی به ذره‌های مختلف مربوط می‌شوند با هم جابه‌جا شوند؛ برای مثال

$$[p_i, x_j] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij} \qquad (۵\text{ـ}۸)$$

اگر میدانهای خارجی، مانند میدان گرانش زمین یا میدانهای الکتریکی و مغناطیسی که از خارج اعمال می‌شوند، وجود نداشته باشند انرژی پتانسیل تنها به‌فاصلهٔ نسبی ذرات بستگی دارد:

$$V = V(x_1 - x_2, x_1 - x_3, \ldots, x_{N-1} - x_N), \qquad (۶\text{ـ}۸)$$

همین‌طور هم باید باشد، زیرا در غیاب عامل خارجی که به‌نحوی یک "مبدأ" تعیین می‌کند، جابه‌جایی کل دستگاه نباید هیچ یک از خواص فیزیکی آن‌را تغییر دهد. به‌عبارت دیگر، شکل پتانسیل ۸ـ۶ پیامد ناوردایی تمام کمیتهای مهم فیزیکی تحت تبدیل زیر است

$$x_i \to x_i + a \qquad (۷\text{ـ}۸)$$

یک مورد خاص بسیار مهم از ۸ـ۶، مورد نیروهای دوجسمی است که برای آن

$$V = \sum_{i>j} V(x_i - x_j) \qquad (۸\text{ـ}۸)$$

جمع روی تمام شاخصهای i و j، با قید $i > j$ برای اجتناب از دوباره‌شماری و شمارش $i = j$، انجام می‌شود. در واقع در توصیف الکترونها در یک اتم، با پتانسیل کولنی مشترک و همچنین دافعهٔ الکترون‌ـالکترون سروکار خواهیم داشت، و در اینجا هسته یک مبدأ به‌وجود می‌آورد. پتانسیل در این مورد تعمیم سه‌بعدی کمیت زیر است

$$\sum_{i=1}^{N} W(x_i) + \sum_{i>j} V(x_i - x_j) \qquad (۹\text{ـ}۸)$$

www.arsanjan.blogfa.com

پایستگی تکانهٔ کل

در مکانیک کلاسیک، وقتی نیروهای خارجی وجود ندارند تکانهٔ کل پایسته است. این پایستگی از معادله‌های حرکت زیر به‌دست می‌آید

$$m_i \frac{d^2 x_i}{dt^2} = -\frac{\partial}{\partial x_i} V(x_1 - x_2, x_1 - x_3, \ldots, x_{N-1} - x_N) \qquad (۱۰\text{ـ}۸)$$

که یک پیامد آن عبارت است از

$$\frac{d}{dt} \sum_i m_i \frac{dx_i}{dt} = -\sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} V(x_1 - x_2, \ldots, x_{N-1} - x_N) = 0 \qquad (۱۱\text{ـ}۸)$$

دلیل صفر شدن طرف راست معادلهٔ بالا این است که به‌ازای هر شناسه در V از اعمال $\sum_i \partial/\partial x_i$ بر V جمله‌های مساوی و مخالف به‌دست می‌آیند. برای مثال، با $u = x_1 - x_2$، $v = x_1 - x_3$ و $w = x_2 - x_3$ داریم

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x_2} + \frac{\partial}{\partial x_3}\right) V(u, v, w) = \frac{\partial V}{\partial u} + \frac{\partial V}{\partial v} - \frac{\partial V}{\partial u} + \frac{\partial V}{\partial w} - \frac{\partial V}{\partial v} - \frac{\partial V}{\partial w} = 0$$

بنابراین، کمیت

$$P = \sum_i m_i \frac{dx_i}{dt} \qquad (۱۲\text{ـ}۸)$$

یک ثابت حرکت است.

در مکانیک کوانتومی نیز همین نتیجه‌گیری صادق است. این مطلب را با استفاده از ناوردایی هامیلتونی تحت تبدیل ۸ـ۷ نشان می‌دهیم. این ناوردایی ایجاب می‌کند که هر دو معادلهٔ

$$H u_E(x_1, x_2, \ldots, x_N) = E u_E(x_1, x_2, \ldots, x_N) \qquad (۱۳\text{ـ}۸)$$

و

$$H u_E(x_1 + a, x_2 + a, \ldots, x_N + a) = E u_E(x_1 + a, x_2 + a, \ldots, x_N + a) \qquad (۱۴\text{ـ}۸)$$

www.arsanjan.blogfa.com

برقرار باشند، a را بینهایت کوچک می‌گیریم، به‌طوری که بتوان از جمله‌های $O(a^2)$ را صرفنظر کرد. بنابراین،

$$\begin{aligned} u(x_1+a,\dots,x_N+a) &\simeq u(x_1,\dots,x_N)+a\frac{\partial}{\partial x_1}u(x_1,\dots,x_N) \\ &\quad + a\frac{\partial}{\partial x_2}\,u(x_1,\dots,x_N)+\cdots \\ &\simeq u(x_1,\dots,x_N)+a\sum_i \frac{\partial}{\partial x_i}u(x_1,\dots,x_N) \end{aligned}$$

با کم کردن ۸ـ۱۳ از ۸ـ۱۴ به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} aH\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial x_i}\right)u_E(x_1,\dots,x_N) &= aE\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial x_i}\right)u_E(x_1,\dots,x_N) \\ &= a\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial x_i}\right)Eu_E(x_1,\dots,x_N) \\ &= a\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial x_i}\right)Hu_E(x_1,\dots,x_N) \end{aligned} \qquad (۱۵ـ۸)$$

اکنون اگر تعریف کنیم

$$P=\frac{\hbar}{i}\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial x_i}\equiv\sum_{i=1}^{N}p_i \qquad (۱۶ـ۸)$$

به‌طوری که P عملگر تکانهٔ کل است، می‌بینیم که نشان داده‌ایم

$$(HP-PH)u_E(x_1,\dots,x_N)=0 \qquad (۱۷ـ۸)$$

چون ویژه‌حالتهای انرژی برای دستگاه N ذره‌ای یک مجموعهٔ کامل تشکیل می‌دهند، به این معنی که هر تابعی از x_1، x_2، ...، x_N را می‌توان برحسب تمام $u_E(x_1,\dots,x_N)$ها بسط داد، معادلهٔ بالا نشان می‌دهد که به‌ازای هر تابع اختیاری $\psi(x_1,\dots,x_N)$ می‌توان نوشت

$$[H,P]\psi(x_1,\dots,x_N)=0 \qquad (۱۸ـ۸)$$

www.arsanjan.blogfa.com

بنابراین،

$$[H, P] = 0 \qquad (۱۹_۸)$$

اما این رابطهٔ عملگری نشان می‌دهد که تکانهٔ کل P مربوط به دستگاه N ذره‌ای یک ثابت حرکت است. این یک پیامد بسیار مهم حکمی دربارهٔ ماهیت فضا است. این حکم که مبدایی وجود ندارد، یعنی قوانین فیزیک تحت یک جابه‌جایی ثابت ناوردا هستند، به یک قانون پایستگی منجر می‌شود. در مکانیک کوانتومی نسبیتی هیچ پتانسیلی به‌صورتی که در اینجا در نظر می‌گیریم وجود ندارد؛ با این همه، این اصل ناوردایی باز هم به پایستگی تکانهٔ کل منجر می‌شود.

دستگاه دو ذره‌ای

ما بیشتر با دستگاه دوذره‌ای سروکار داریم که اکنون به بررسی آن می‌پردازیم. برای دو ذرهٔ بدون برهم کنش، هامیلتونی به‌صورت سادهٔ زیر است

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} \qquad (۲۰_۸)$$

چون این دو ذره کاملاً ناهمبسته‌اند، می‌توان احتمال یافتن یک ذره در x_1 و دیگری در x_2 را به‌صورت حاصلضرب دو احتمال مستقل نوشت:

$$P(x_1, x_2) = P(x_1)P(x_2) \qquad (۲۱_۸)$$

بنابراین، جواب معادلهٔ

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right) u(x_1, x_2) = Eu(x_1, x_2) \qquad (۲۲_۸)$$

باید به‌صورت زیر قابل جداسازی باشد

$$u(x_1, x_2) = \phi_1(x_1)\phi_2(x_2) \qquad (۲۳_۸)$$

با جاگذاری این جواب در ۸ـ۲۲ و تقسیم بر $u(x_1, x_2)$، به‌دست می‌آوریم

$$\frac{-(\hbar^2/2m_1)(d^2\phi_1(x_1)/dx_1^2)}{\phi_1(x_1)} + \frac{-(\hbar^2/2m_2)(d^2\phi_2(x_2)/dx_2^2)}{\phi_2(x_2)} = E \qquad (۲۴_۸)$$

www.arsanjan.blogfa.com

دو جملهٔ این معادله به متغیرهای مختلفی بستگی دارند، و به این دلیل آنها را به‌ترتیب مساوی با ثابتهای E_1 و E_2 قرار می‌دهیم:

$$E = E_1 + E_2$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{d^2\phi_1(x_1)}{dx_1^2} = E_1\phi_1(x_1) \qquad (۲۵_۸)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{d^2\phi_2(x_2)}{dx_2^2} = E_2\phi_2(x_2)$$

این دو معادله به‌سادگی حل می‌شوند، و در نتیجه به‌دست می‌آوریم

$$u(x_1, x_2) = C\, e^{ik_1x_1 + ik_2x_2} \qquad (۲۶_۸)$$

که در آن

$$k_1^2 = \frac{2m_1E_1}{\hbar^2} \qquad k_2^2 = \frac{2m_2E_2}{\hbar^2} \qquad (۲۷_۸)$$

اکنون می‌خواهیم این جواب را برحسب مختصات زیر بیان کنیم

$$x = x_1 - x_2$$

$$X = \frac{m_1x_1 + m_2x_2}{m_1 + m_2} \qquad (۲۸_۸)$$

که به‌ترتیب عبارت‌اند از فاصلهٔ میان دو ذره و مختصهٔ مرکز جرم. می‌نویسیم

$$k_1x_1 + k_2x_2 = \alpha(x_1 - x_2) + \beta\frac{m_1x_1 + m_2x_2}{m_1 + m_2}$$

و از آن، با توجه به مستقل بودن x_1 و x_2، به‌دست می‌آوریم

$$\beta = k_1 + k_2 \equiv K$$

$$\alpha = \frac{m_2k_1 - m_1k_2}{m_1 + m_2} \equiv k$$

بنابراین، جواب ۸ـ۲۶ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$u(x_1, x_2) = C\, e^{iKX}\, e^{ikx} \qquad (۲۹_۸)$$

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن $K = k_1 + k_2$ عدد موج مربوط به تکانهٔ کل و k عدد موج مربوط به تکانهٔ نسبی است. در ۸ـ۲۹، عامل اول حرکت مرکز جرم را نشان می‌دهد و عامل دوم تابع موج "داخلی" است. انرژی را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2(m_1 + m_2)} + \frac{\hbar^2 k^2}{2}\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right) \qquad (۸ـ۳۰)$$

که در آن جملهٔ اول انرژی یک دستگاه دوذره‌ای به جرم $m_1 + m_2$ است که آزادانه با تکانهٔ کل حرکت می‌کند؛ جملهٔ دوم انرژی داخلی است. اگر جرم کاهیدهٔ μ را با رابطهٔ زیر تعریف کنیم

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \qquad (۸ـ۳۱)$$

آنگاه انرژی داخلی به‌صورت $\hbar^2 k^2/2\pi$ درمی‌آید که عملاً یک انرژی تک‌ذره‌ای است، یعنی انرژی یک ذرهٔ آزاد به جرم μ و تکانهٔ $\hbar k$ است.

اگر به هامیلتونی ۸ـ۲۰ پتانسیلی که تنها به $x_1 - x_2$ بستگی دارد افزوده شود، خواهیم داشت

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right) u(x_1, x_2) + V(x_1 - x_2)u(x_1, x_2) = Eu(x_1, x_2) \qquad (۸ـ۳۲)$$

از روابط ۸ـ۲۸ داریم

$$\begin{aligned} x_1 &= X + \frac{\mu}{m_1}x \\ x_2 &= X - \frac{\mu}{m_2}x \end{aligned} \qquad (۸ـ۳۳)$$

با استفاده از این مختصات و با اندکی محاسبه، معادلهٔ ۸ـ۳۲ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)}\frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right) u(x, X) = Eu(x, X) \qquad (۸ـ۳۴)$$

اگر بنویسیم

$$u(x, X) = e^{iKX}\phi(x) \qquad (۸ـ۳۵)$$

www.arsanjan.blogfa.com

نتیجه می‌گیریم که معادلهٔ مربوط به $\phi(x)$ به طور ویژه است

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\phi(x)}{dx^2}+V(x)\,\phi(x)=\epsilon\phi(x) \qquad (۳۶_۸)$$

که یک معادلهٔ شرودینگر تک‌ذره‌ای با جرم کاهیده است، و در آن انرژی ϵ عبارت است از

$$\epsilon=E-\frac{\hbar^2K^2}{2(m_1+m_2)} \qquad (۳۷_۸)$$

در فصل ۹ این جداسازی را از راه نسبتاً پیچیده‌تری به‌دست خواهیم آورد.

ذرات یکسان

شواهد قانع‌کننده‌ای وجود دارند که نشان می‌دهند الکترونها تمایزناپذیرند. اگر الکترونها تمایزپذیر بودند طیف یک اتم، مثلاً هلیم، می‌بایست از یک آزمایش به آزمایش دیگر، بسته به اینکه "چه نوع" الکترونهایی در اتم وجود می‌داشتند، تغییر می‌کرد. چنین تغییری هرگز مشاهده نشده است. به‌همین‌ترتیب، طیفهای هسته‌ای نیز همیشه یکسان هستند، که نشان می‌دهد پروتونها و همچنین نوترونها تمایزناپذیرند. شواهد مشابهی از آزمایشهای فیزیک انرژی زیاد قاطعانه نشان می‌دهند که سایر ذره‌ها، مثلاً مزونهای پی، نیز تمایزناپذیر هستند. این یک ویژگی صرفاً کوانتوم‌ـمکانیکی است: در مکانیک کلاسیک می‌توان (اصولاً) مسیر همهٔ ذرات را دنبال کرد، و در نتیجه آنها واقعاً تمایزپذیر هستند.

بعداً خواهیم دید که الکترونها با یک عدد کوانتومی درونی که اسپین نامیده می‌شود مشخص می‌شوند. بنابراین، مجموعهٔ کامل اعداد کوانتومی برای توصیف الکترون باید شامل نشان اسپینی هم باشد، که آن‌را با σ مشخص می‌کنیم. در آینده (از فصل ۱۴ به‌بعد) خواهیم دید که این نشان اسپینی σ دومقداری است، یعنی دو الکترون را که از هر لحاظ (غیر از اسپین) یکسان هستند می‌توان از روی مقدار σی آنها از هم تمیز داد. یک الکترون سوم، با همان اعداد کوانتومی دو الکترون دیگر، باید یک نشان اسپینی داشته باشد که مقدار آن با مقدار نشان اسپینی یکی از دو الکترون اول مساوی است، زیرا σ تنها می‌تواند دو مقدار داشته باشد که آنها را معمولاً با $(\pm)$ نشان خواهیم داد. وجود نشان اسپینی تأثیر دیگری بر پیامدهای تمایزناپذیری دارد که اکنون دربارهٔ آن بحث می‌کنیم.

هامیلتونی ذرات تمایزناپذیر باید نسبت به مختصات ذرات کاملاً متقارن باشد. برای دستگاه دوذره‌ای، اگر پتانسیل به نشان اسپینی ذرات بستگی نداشته باشد، هامیلتونی به‌صورت زیر است

$$H=\frac{p_1^2}{2m}+\frac{p_2^2}{2m}+V(x_1,x_2) \qquad (۳۸_۸)$$

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن

$$V(x_1, x_2) = V(x_2, x_1) \qquad (۳۹_۸)$$

این تقارن را به‌صورت نمادین زیر می‌نویسیم

$$H(1, 2) = H(2, 1) \qquad (۴۰_۸)$$

و اگر هامیلتونی شامل عملگرهایی مربوط به اسپینهای دوذره باشد، باید آن‌را نیز در نشانگذاری "۱" و "۲" وارد کرد.

تابع‌موج دستگاه Nذره‌ای که، به‌عنوان مثال، با انرژی کل نشاندار شده است اکنون باید با نشانهای اسپینی σ_1، σ_2، ...، σ_N نیز نشاندار شود. بنابراین، برای یک دستگاه دوذره‌ای، معادلهٔ ویژه‌مقداری عبارت است از

$$H(1, 2)u_{E\sigma_1\sigma_2}(1, 2) = Eu_{E\sigma_1\sigma_2}(1, 2) \qquad (۴۱_۸)$$

چون جای نشانها اهمیتی ندارد، می‌توان با تعویض نشانهای "۱" و "۲ "معادلهٔ ۸ـ۴۱ را به‌صورت زیر نوشت

$$H(2, 1)u_{E\sigma_2\sigma_1}(2, 1) = Eu_{E\sigma_2\sigma_1}(2, 1) \qquad (۴۲_۸)$$

از طرف دیگر، با توجه به ۸ـ۴۰ داریم

$$H(1, 2)u_{E\sigma_2\sigma_1}(2, 1) = Eu_{E\sigma_2\sigma_1}(2, 1) \qquad (۴۳_۸)$$

اکنون از رهیافت صوری بحث پاریته استفاده می‌کنیم. با معرفی عملگر تبادل P_{12} که وقتی روی یک حالت عمل کند دو ذرهٔ یکسان را که با ۱ و ۲ نشاندار شده‌اند تعویض می‌کند:

$$P_{12}u_{E\sigma_1\sigma_2}(1, 2) = u_{E\sigma_2\sigma_1}(2, 1) \qquad (۴۴_۸)$$

www.arsanjan.blogfa.com

معادلهٔ ۸ـ۴۳ را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} H(1,2)P_{12}u_{E\sigma_1\sigma_2}(1,2) &= Eu_{E\sigma_2\sigma_1}(2,1) \\ &= EP_{12}u_{E\sigma_1\sigma_2}(1,2) \\ &= P_{12}Eu_{E\sigma_1\sigma_2}(1,2) \\ &= P_{12}H(1,2)u_{E\sigma_1\sigma_2}(1,2) \end{aligned} \qquad (۴۵_۸)$$

چون این نتیجه برای مجموعهٔ کامل ویژه‌تابعهای همزمان H و عملگرهای اسپین $u_{E\sigma_1\sigma_2}(1,2)$ برقرار است، رابطهٔ عملگری زیر را به‌دست می‌آوریم

$$[H, P_{12}] = 0 \qquad (۴۶_۸)$$

بنابراین، P_{12} نیز مانند پاریته یک ثابت حرکت است. علاوه بر این، چون با دو تبادل متوالی $1 \rightarrow 2$ و $2 \rightarrow 1$ به‌حالت اول برمی‌گردیم، داریم

$$(P_{12})^2 = 1 \qquad (۴۷_۸)$$

که نشان می‌دهد ویژه‌مقدارهای P_{12} عبارت‌اند از ± 1. درست همان‌طور که توابع زوج و فرد ویژه‌تابعهای عملگر پاریته هستند، ویژه‌تابعهای عملگر تبادل حالتهای متقارن و پادمتقارن زیر هستند

$$\begin{aligned} \psi^{(S)}(1,2) &= \frac{1}{N_{2S}}[\psi(1,2) + \psi(2,1)] \\ \psi^{(A)}(1,2) &= \frac{1}{N_{2a}}[\psi(1,2) - \psi(2,1) \end{aligned} \qquad (۴۸_۸)$$

که در آنها N_2ها ثابتهای بهنجارش‌اند. این واقعیت که P_{12} یک ثابت حرکت است ایجاب می‌کند که حالتی که در یک زمان اولیه متقارن است همواره متقارن بماند و یک حالت پادمتقارن همیشه پادمتقارن باشد.

اصل پاؤلی

تقارن یا پادتقارن تحت تعویض دو ذره یک مشخصهٔ ذرات است و چیزی نیست که بتوان آن‌را در آماده‌سازی حالت اولیه تدارک دید. بنابه این قانون مهم طبیعت، که پاؤلی آن‌را کشف کرد،

www.arsanjan.blogfa.com

۱. دستگاههای متشکل از ذرات یکسان با اسپین نیم فرد (یعنی ۱/۲، ۳/۵، ۵/۲، ...) با توابع موج پادمتقارن توصیف می‌شوند. این نوع ذرات را فرمیون می‌نامند. فرمیونها از آمار فرمی‌ـدیراک پیروی می‌کنند.

۲. دستگاههای متشکل از ذرات یکسان با اسپین درست (یعنی ۰، ۱، ۲، ...) با توابع موج پادمتقارن توصیف می‌شوند. این ذرات بوزون نامیده می‌شوند و از آمار بوزـاینشتین پیروی می‌کنند. ما بیشتر با الکترونها، پروتونها و نوترونها که اسپین ۱/۲ دارند و با بوزونهای اسپین ۰، که بدون نشان اسپینی هستند، سروکار داریم.

قانون بالا به حالتهای N ذره‌ای گسترش می‌یابد. برای دستگاهی متشکل از N فرمیون یکسان، تابع‌موج تحت تعویض هر جفت ذره پادمتقارن است. برای مثال، یک تابع‌موج سه ذره‌ای، که درست پادمتقارن شده است، به‌صورت زیر است

$$\psi^{(A)}(1,2,3) = \frac{1}{N_{3a}}[\psi(1,2,3) - \psi(2,1,3) + \psi(2,3,1) - \psi(3,2,1) + \psi(3,1,2) - \psi(1,3,2)] \qquad (۴۹_۸)$$

در حالی‌که تابع‌موج سه بوزون یکسان عبارت است از

$$\psi^{(S)}(1,2,3) = \frac{1}{N_{3S}}[\psi(1,2,3) + \psi(2,1,3) + \psi(2,3,1) + \psi(3,2,1) + \psi(3,1,2) + \psi(1,3,2] \qquad (۵۰_۸)$$

باید تأکید کنیم که برای بیشتر از دو ذرهٔ یکسان اصولاً می‌توان تقارن آمیخته داشت: به‌عنوان مثال، تابع‌موج تحت تبادلهای (۱,۲) و (۱,۳) پادمتقارن اما تحت تبادل (۲,۳) متقارن است. اما اصل پاؤلی این حالتهای متقارن آمیخته را رد می‌کند.

N فرمیون در یک چاه پتانسیل

اکنون یک مورد خاص بسیار جالب توجه را بررسی می‌کنیم که در آن N فرمیون با یکدیگر برهم‌کنش ندارند اما با یک پتانسیل مشترک برهم‌کنش می‌کنند. در این مورد داریم

$$H = \sum_{i=1}^{N} H_i \qquad (۵۱_۸)$$

که در آن

$$H_i = \frac{p_i^2}{2m} + V(x_i) \qquad (۵۲_۸)$$

www.arsanjan.blogfa.com

ویژه‌حالتهای هامیلتونی تک‌ذره‌ای را با $u_{E\sigma_k}(x_k)$ نشان می‌دهیم:

$$H_k u_{E\sigma_k}(x_k) = E_k u_{E\sigma_k}(x_k) \qquad (۵۳\text{-}۸)$$

واضح است که به‌ازای هر مقدار E_k دو مقدار ممکن برای نشان اسپینی σ_k داریم.
جواب معادلهٔ

$$H u_E(۱, ۲, \dots, N) = E u_E(۱, ۲, \dots, N) \qquad (۵۴\text{-}۸)$$

عبارت است از

$$u_E(۱, ۲, ۳, \dots, N) = u_{E_۱\sigma_۱}(x_۱) u_{E_۲\sigma_۲}(x_۲), \dots, u_{E_N\sigma_N}(x_N) \qquad (۵۵\text{-}۸)$$

که با حذف نشانهای σ_i که با E_i همراه هستند، آن‌را به‌صورت زیر می‌نویسیم

$$u_E(۱, ۲, ۳, \dots, N) = u_{E_۱}(x_۱) u_{E_۲}(x_۲), \dots, u_{E_N}(x_N) \qquad (۵۶\text{-}۸)$$

همچنین داریم

$$E = E_۱ + E_۲ + \cdots + E_N \qquad (۵۷\text{-}۸)$$

اکنون باید تابع موج ۸ـ۵۶ را پادمتقارن کنیم. اگر تنها دو ذره داشته باشیم، بدیهی است که

$$u^{(A)}(۱, ۲) = \frac{۱}{\sqrt{۲}} [u_{E_۱}(x_۱) u_{E_۲}(x_۲) - u_{E_۱}(x_۲) u_{E_۲}(x_۱)] \qquad (۵۸\text{-}۸)$$

با سه ذره، تابع‌موج پادمتقارن شده به‌صورت زیر است

$$\begin{aligned} u^{(A)}(۱, ۲, ۳) = \frac{۱}{\sqrt{۶}} [& u_{E_۱}(x_۱) u_{E_۲}(x_۲) u_{E_۳}(x_۳) - u_{E_۱}(x_۲) u_{E_۲}(x_۱) u_{E_۳}(x_۳) \\ & + u_{E_۱}(x_۲) u_{E_۲}(x_۳) u_{E_۳}(x_۱) - u_{E_۱}(x_۳) u_{E_۲}(x_۲) u_{E_۳}(x_۱) \\ & + u_{E_۱}(x_۳) u_{E_۲}(x_۱) u_{E_۳}(x_۲) - u_{E_۱}(x_۱) u_{E_۲}(x_۳) u_{E_۳}(x_۲)] \end{aligned} \qquad (۵۹\text{-}۸)$$

www.arsanjan.blogfa.com

برای N ذره، جواب را می‌توان در قالب یک دترمینان، که دترمینان اسلیتر نامیده می‌شود، نوشت:[۱]

$$u^{(A)}(۱,۲,\ldots,N)=\frac{۱}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} u_{E_۱}(x_۱) & u_{E_۱}(x_۲) & \cdots & u_{E_۱}(x_N) \\ u_{E_۲}(x_۱) & u_{E_۲}(x_۲) & \cdots & u_{E_۲}(x_N) \\ \vdots & & & \\ u_{E_N}(x_۱) & u_{E_N}(x_۲) & \cdots & u_{E_N}(x_N) \end{vmatrix} \qquad (۶۰_۸)$$

توجه کنید که در سه معادلهٔ بالا نشان σ_k را که با E_k همراه است حذف کرده‌ایم. بدیهی است که تعویض دو ذره به معنای تعویض دو ستون در این دترمینان است و این به‌نوبهٔ خود باعث تغییر علامت دترمینان می‌شود. اگر دو الکترون در ویژه‌حالت انرژی یکسانی باشند، به‌عنوان مثال $E_۱=E_۲$، و اگر در یک حالت اسپینی باشند، یعنی $\sigma_۱=\sigma_۲$، آنگاه دترمینان به‌ازای $x_۱=x_۲$ صفر می‌شود، یعنی این دو الکترون نمی‌توانند در یک مکان باشند. بدین‌ترتیب، شرط پادتقارن عامل ایجاد یک برهم‌کنش مؤثر بین دو فرمیون است: می‌بینیم که دو ذره از این نوع می‌خواهند از یکدیگر دور بمانند، زیرا وقتی فاصلهٔ بین آنها به صفر میل می‌کند تابع‌موج مشترک صفر می‌شود. بنابراین، حتی ذرات بدون برهم‌کنش به‌گونه‌ای رفتار می‌کنند که انگار یک برهم‌کنش دافعه میان آنها وجود دارد. خواهیم دید که مجموعهٔ کامل مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده برای الکترونها شامل یک مشاهده‌پذیر اضافی دومقداری وابسته به اسپین نیز هست. پس حالتی که در آن انرژی، تکانهٔ زاویه‌ای پاریته، و غیره معین هستند حداکثر با دو الکترون (با متغیر اسپینی مخالف) اشغال می‌شود. این مورد خاصی از اصل طرد پاؤلی است.

کی پادمتقارن‌سازی لازم است؟

این حکم که "دو الکترون نمی‌توانند در یک حالت کوانتومی باشند" ایجاب می‌کند که تابع‌موج دستگاه دو الکترونی نسبت به مختصات این دو الکترون پادمتقارن باشد. این سؤال پیش می‌آید که وقتی یک اتم هیدروژن را روی زمین و یک اتم هیدروژن دیگر را در ماه بررسی می‌کنیم باید نگران این موضوع باشیم؟ اگر این دو اتم در حالت پایه باشند آیا الزاماً باید حالتهای اسپینی مخالف داشته باشند؟ اگر یک اتم هیدروژن سوم درحالت پایه را در نظر بگیریم چه پیش می‌آید؟ درک شهودی به ما می‌گوید که نگرانی بی‌مورد است، و اشتباه نمی‌کند. برای مشاهدهٔ درستی این نتیجه‌گیری، تفاوت میان استفاده از تابع‌موج کاملاً ناهمبستهٔ دو الکترون

$$\psi_a(x_۱)\psi_b(x_۲) \qquad (۶۱_۸)$$

---

۱. برای N بوزون یکسان، تابع‌موج کاملاً متقارن است، و صورت کلی را می‌توان با بسط دترمینان ۸ـ۶۰ و تغییر تمام علامتهای منفی به مثبت به‌دست آورد.

www.arsanjan.blogfa.com

و تابع‌موج پادمتقارن شدهٔ

$$\frac{1}{N}(\psi_a(x_1)\,\psi_b(x_2) - \psi_a(x_2)\,\psi_b(x_1)) \qquad (۶۲_۸)$$

را بررسی می‌کنیم. ضریب بهنجارش N از شرط زیر تعیین می‌شود

$$\frac{1}{N^2}\int dx_1 \int dx_2\, |\psi_2(x_1)\psi_b(x_2) - \psi_a(x_2)\psi_b(x_1)|^2 = 1 \qquad (۶۳_۸)$$

که با

$$\int dx\, |\psi_a(x)|^2 = \int dx\, |\psi_b(x)|^2 = 1 \qquad (۶۴_۸)$$

به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\begin{aligned} N^2 &= 2\left(1 + \left|\int dx\, \psi_a^*(x)\psi_b(x)\right|^2\right) \\ &\equiv 2(1 + |S_{ab}|^2) \end{aligned} \qquad (۶۵_۸)$$

فرض کنید بخواهیم احتمال یافتن الکترون a را در یک ناحیهٔ فضایی R محاسبه کنیم. برای تابع‌موج ناهمبستهٔ ۸ـ۶۱ که آن‌را با $\Psi(x,y) = \psi_a(x)\psi_b(y)$ نشان می‌دهیم، چگالی احتمال از رابطهٔ زیر به‌دست می‌آید

$$P(R) = \int_R dx \int dy\, |\psi_a(x)^2\, |\psi_b(y)|^2 = \int_R dx\, |\psi_a(x)|^2 \qquad (۶۶_۸)$$

روی تمام گسترهٔ مختصات الکترون b انتگرال گرفته‌ایم زیرا جای آن برای ما مهم نیست.
برای تابع‌موج پادمتقارن داریم

$$|\Psi(x,y)|^2 = \frac{1}{N^2}[\psi_a^*(x)\psi_b^*(y) - \psi_b^*(x)\psi_a^*(y)][\psi_a(x)\psi_b(y) - \psi_b(x)\psi_a(y)]$$

که باید از آن روی متغیرهای وابسته به الکترون a در ناحیهٔ R و روی گسترهٔ کامل مختصات مربوط

www.arsanjan.blogfa.com

به الکترون b انتگرال بگیریم. به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}P_a(R) =& \frac{1}{N^2}\int_R dx\ |\psi_a(x)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dy\ |\psi_b(y)|^2 \\ &+ \frac{1}{N^2}\int_R dy\ |\psi_a(y)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\ |\psi_b(x)|^2 \\ &- \frac{1}{N^2}\int_R dx \int_R dy\ [\psi_a^*(x)\psi_b(x)\psi_b^*(y)\psi_a(y) \\ &+ \psi_b^*(x)\psi_a(x)\ \psi_a^*(y)\psi_b(y)] \\ =& \frac{2}{N^2}\int_R dx\ |\psi_a(x)|^2 - \frac{2}{N^2}\int_R dx \int_R dy\ \psi_a^*(x)\psi_b(x)\psi_b^*(y)\psi_a(y)\end{aligned} \tag{۶۷_۸}$$

در جملهٔ تداخلی هر دو انتگرال روی ناحیهٔ R گرفته می‌شوند، زیرا در هر دو انتگرال تابع‌موجی با شاخص a وجود دارد. تفاوت میان دو چگالی احتمال وقتی حائز اهمیت می‌شود که انتگرال همپوشی $\int_R dx\ \psi_a^*(x)\psi_b(x)$ در ناحیهٔ R برای متغیر x قابل ملاحظه باشد. چون توابع موج برای حالتهای مقید به‌طور نمایی کاهش می‌یابند، واضح است که این انتگرال وقتی مهم است که اتمها به یکدیگر بسیار نزدیک باشند.

برای مثال، یک دستگاه دو الکترونی را در نظر بگیرید که دو الکترون آن با دو بستهٔ موج گاؤسی، یکی حول مبدأ و دیگری حول $x = L$، نمایش داده می‌شوند. در محاسبهٔ احتمال یافتن یک الکترون در یک ناحیهٔ R انتگرال همپوشی $Ce^{-\beta x^2}$ و $Ce^{-\beta(x-L)^2}$ به‌صورت زیر وارد می‌شود

$$C^2\int_R dx\ e^{-\beta(x^2+(x-L)^2)}$$

که به‌سادگی می‌توان دید که متناسب با $e^{-\beta L^2/2}$ است. بنابراین، اگر L بزرگ باشد انتگرال همپوشی به‌سرعت صفر می‌شود، و این درک شهودی که لازم نیست تابع‌موج الکترون مورد نظر با همهٔ یا با هر یک از الکترونهای دور پادمتقارن باشد درست از آب درمی‌آید

اصل طرد پاؤلی را باید در اتمها و مولکولها به‌حساب آورد نه در وضعیتهایی که فاصلهٔ اتمها از یکدیگر بسیار زیاد است. حتی در شبکه‌های بلوری، که در آنها فاصلهٔ بین اتمها چند آنگستروم است، همپوشی اغلب کوچک است، و پادمتقارن‌سازی ضرورت ندارد.

انرژی حالت پایه برای ذرات آزاد در یک جعبه

یک پیامد جالب اصل طرد پاؤلی این است که حالت پایه برای N الکترون در یک پتانسیل تفاوت بسیاری با حالت پایه برای N بوزون یا N ذرهٔ تمایزپذیر دارد. به‌عنوان مثال، جعبهٔ پتانسیل نامتناهی

www.arsanjan.blogfa.com

زیر را در نظر بگیرید

$$\begin{aligned} V(x) &= \infty & x &< 0 \\ &= 0 & 0 &< x < b \\ &= \infty & b &< x \end{aligned} \qquad (۶۸_۸)$$

جواب معادلهٔ شرودینگر که در $x = 0$ و $x = L$ صفر می‌شود به‌صورت زیر است

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{b}} \sin \frac{n\pi x}{b} \qquad (۶۹_۸)$$

که در آن $n = 1, 2, 3, \ldots$. ویژه‌مقدارهای انرژی عبارت‌اند از

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mb^2} \qquad (۷۰_۸)$$

برای N بوزون بدون برهم‌کنش، حالت پایه شامل تمام ذرات در حالت $n = 1$ است، و در نتیجه انرژی با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$E = N\frac{\hbar^2 \pi^2}{2mb^2} \qquad (۷۱_۸)$$

و انرژی به‌ازای هر ذره عبارت است از

$$\frac{E}{N} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mb^2} \qquad (۷۲_۸)$$

برای N فرمیون بدون برهم‌کنش وضعیت کاملاً متفاوت است. در هر یک از حالتهای $n = 1$، ۲، ۳، ... تنها دو الکترون می‌توانند وجود داشته باشند، و در نتیجه تعداد حالتهای اشغال شده $N/2$ است. بنابراین، انرژی کل برابر است با

$$E = 2\sum_{n=1}^{N/2} \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mb^2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{mb^2} \frac{N^3}{24} \qquad (۷۳_۸)$$

در محاسبهٔ نتیجهٔ بالا، N را بزرگ گرفته‌ایم، و از این‌رو مهم نیست که آخرین تراز با یک الکترون اشغال شده است یا با دو الکترون، و از تقریب زیر استفاده کرده‌ایم

$$\sum_{n=1}^{N/2} n^2 \approx \int_1^{N/2} n^2 dx \simeq \frac{1}{3}\left(\frac{N}{2}\right)^3$$

www.arsanjan.blogfa.com

بنابراین، انرژی به‌ازای هر ذره عبارت است از

$$\frac{E}{N} = \frac{\hbar^2\pi^2}{24mb^2}N^2 \qquad (۷۴\text{ـ}۸)$$

که با N^2 افزایش می‌یابد. به‌عبارت دیگر، به‌ازای یک انرژی معین، تعداد بوزونهایی که چاه را اشغال می‌کنند متناسب با E است، در حالی‌که تعداد فرمیونهای اشغال‌کنندهٔ چاه با $E^{1/2}$ متناسب است. بالاترین ترازی که فرمیونها اشغال می‌کنند ترازی است که برای آن $n = N/2$، و انرژی آن برابر است با

$$E_F = \frac{\hbar^2\pi^2N^2}{8mb^2} \qquad (۷۵\text{ـ}۸)$$

شاخص پایین F را به این دلیل نوشته‌ایم که این انرژی را انرژی فرمی می‌نامند. انرژی فرمی را می‌توان برحسب چگالی فرمیونها، که در این مسئلهٔ یک‌بعدی برابر است با $\rho = N/b$، نوشت:

$$E_F = \frac{\hbar^2\pi^2}{8m}\rho^2 \qquad (۷۶\text{ـ}۸)$$

اهمیت این مطالب را در فصل ۹ خواهیم دید.

اصل طرد نقش فوق‌العاده مهمی در ساختار اتمها دارد. تنوع بسیار زیاد خواص شیمیایی عناصر مختلف مستقیماً ناشی از این واقعیت است که تعداد محدودی الکترون می‌توانند یک ویژه‌حالت انرژی معین را اشغال کنند. در این باره در فصل ۱۹ بحث خواهیم کرد.

مسائل

۱ـ۸ جرم کاهیدهٔ یک دستگاه الکترون-پروتون را به‌دست آورید و آن‌را با جرم کاهیدهٔ دستگاه الکترون-دوترون مقایسه کنید. جرم کاهیدهٔ دستگاهی متشکل از دو ذرهٔ یکسان را تعیین کنید.

۲ـ۸ ثابت کنید عملگر تبادل P_{12} هرمیتی است.

۳ـ۸ دو الکترون بدون برهم‌کنش را در یک چاه پتانسیل نامتناهی در نظر بگیرید. اگر این دو الکترون در حالت اسپینی یکسان باشند تابع‌موج حالت پایه را به‌دست آورید.

۴ـ۸ دو الکترون در یک حالت اسپینی یکسان را در نظر بگیرید که با پتانسیل زیر برهم‌کنش دارند

$$V(|x_1 - x_2|) = -V_0 \qquad |x_1 - x_2| \le a$$
$$= 0 \qquad \text{هر جای دیگر}$$

www.arsanjan.blogfa.com

کمترین انرژی این حالت دو الکترونی را با فرض اینکه تکانهٔ کل این الکترونها صفر است به‌دست آورید

[راهنمایی: معادله را به روشی که به ۸ـ۳۷ از آن حاصل شد جدا کنید و سپس اصل پاؤلی را به‌کار ببرید.]

۸ـ۵ دو ذرهٔ یکسان را که با عملگر انرژی زیر توصیف می‌شوند در نظر بگیرید

$$H = H(p_1, x_1) + H(p_2, x_2)$$

که در آن

$$H(p, x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

حرکت مرکز جرم را جدا کنید، و طیف انرژی این دستگاه را به‌دست آورید. نشان دهید این طیف با طیفی که از حل

$$H\psi(x_1, x_2) = E\psi(x_1, x_2)$$

با

$$\psi(x_1, x_2) = u_1(x_1)u_2(x_2)$$

به‌دست می‌آید توافق دارد. دربارهٔ واگنی طیف انرژی بحث کنید.

۸ـ۶ دو الکترون را که با هامیلتونی زیر توصیف می‌شوند در نظر بگیرید

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + V(x_1) + V(x_2)$$

که در آن به‌ازای $x < 0$ و $x > a$ داریم $V(x) = \infty$، و در بازهٔ $0 < x < a$ داریم $V(x) = 0$.

فرض کنید الکترونها در حالت اسپینی یکسانی باشند، یعنی $\sigma_1 = \sigma_2$.

(الف) کمترین انرژی این حالت دوالکترونی را تعیین کنید.

(ب) ویژه‌تابع انرژی را برای این حالت پایه به‌دست آورید.

(ج) انرژی و تابع‌موج اولین حالت برانگیخته را، باز هم با فرض $\sigma_1 = \sigma_2$، به‌دست آورید.

۸ـ۷ یک دستگاه دو الکترونی را در نظر بگیرید که برای آن $\sigma_1 = \sigma_2$، و از این‌رو لازم نیست اسپین را در نظر بگیریم. فرض کنید الکترونها به‌صورت بسته‌های موج گاؤسی حول $x = a$

www.arsanjan.blogfa.com

و $x = -a$ هستند، یعنی توابع موج آنها به‌ترتیب عبارت‌اند از $(\sqrt{\pi}/\mu)e^{-\mu^2(x-a)^2/2}$ و $(\sqrt{\pi}/\mu)e^{-\mu^2(x+a)^2/2}$. یک تابع‌موج دو الکترونی با بهنجارش مناسب بسازید. فرض کنید $1/\mu = 0.5$Å. براورد کنید که به‌ازای چه مقادیری از a می‌توان اثرات اصل پاؤلی را تا دقت ۱ روی ۱۰۰۰ نادیده گرفت.

۸ـ۸ با استفاده از تابع‌موج دستگاه دو الکترونی مسئلهٔ ۸ـ۷، احتمال این را محاسبه کنید که فاصلهٔ بین دو الکترون در بازهٔ $(x, x + dx)$ باشد. همچنین نشان دهید که مقدار انتظاری مرکز جرم این دستگاه دو الکترونی برابر است با $\langle(x_1 + x_2)/2\rangle = 0$.

[راهنمایی: x_1 و x_2 را برحسب مختصهٔ مرکز جرم $X = (x_1+x_2)/2$ و فاصلهٔ $x = x_1-x_2$ بنویسید، و تابع‌موج را برحسب این متغیرها بیان کنید.]

۸ـ۹ چگالی احتمال مربوط به مسئلهٔ ۸ـ۸ را برحسب x برای دو مورد (الف) $1/a = \mu/2$، و (ب) $1/a = 2\mu$ ترسیم کنید. مفهوم فیزیکی نتایج را بیان کنید.

۸ـ۱۰ فرض کنید در مسئله‌های ۸ـ۷ تا ۸ـ۹ به‌جای الکترون بوزون داریم. تغییر در فرمولها را بنویسید، چگالی احتمال را برحسب x برای دو فاصله ترسیم کنید، و تفاوت میان فرمیونها و بورونها را از لحاظ چگالی احتمال توضیح دهید.

مراجع

به هر یک از مراجع آخر فصل ۶ و همچنین دو کتاب زیر مراجعه کنید.

D S Saxon, *Elementary Quantum Mechanics*, Holden-Day, San Francisco, 1968.

D Park *Introduction to the Quantum Theory*, (3rd Ed) McGraw-Hill, New York, 1992.

www.arsanjan.blogfa.com

۹

معادلهٔ شرودینگر در سه‌بعد (۱)

هامیلتونی یک ذره که در فضای سه‌بعدی حرکت می‌کند عبارت است از

$$H = \frac{P_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(x, y, z) \qquad (۱_۹)$$

در این فصل پتانسیلی را در نظر می‌گیریم که به‌صورت زیر است

$$V(x, y, z) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z) \qquad (۲_۹)$$

به‌آسانی می‌توان دید که معادلهٔ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) u_E(x, y, z) + [V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)] u_E(x, y, z) = E u_E(x, y, z) \qquad (۳_۹)$$

با جداسازی زیر حل می‌شود

$$u_E(x, y, z) = u_{\epsilon_1}(x) v_{\epsilon_2}(y) w_{\epsilon_3}(z) \qquad (۴_۹)$$

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن تابعهای سمت راست جوابهای معادله‌های زیر هستند

$$\left[-\frac{\hbar^۲}{۲m}\frac{d^۲}{dx^۲}+V_۱(x)\right]u_{\epsilon_۱}(x)=\epsilon_۱u_{\epsilon_۱}(x)$$
$$\left[-\frac{\hbar^۲}{۲m}\frac{d^۲}{dy^۲}+V_۲(y)\right]v_{\epsilon_۲}(y)=\epsilon_۲v_{\epsilon_۲}(y) \qquad (۵_۹)$$
$$\left[-\frac{\hbar^۲}{۲m}\frac{d^۲}{dz^۲}+V_۳(z)\right]w_{\epsilon_۳}(z)=\epsilon_۳w_{\epsilon_۳}(z)$$

و

$$E=\epsilon_۱+\epsilon_۲+\epsilon_۳$$

ذرهٔ آزاد در جعبه

یک مثال مخصوصاً جالب تعمیم سه‌بعدی چاه پتانسیل نامتناهی است. اگر جعبهٔ سه‌بعدی مکعبی به ضلع L باشد، آنگاه

$$\begin{aligned} V_۱(x) &= \infty & x &< ۰ \\ &= ۰ & ۰ &< x < L \\ &= \infty & L &< x \end{aligned} \qquad (۶_۹)$$

و غیره. بنابراین، جواب عمومی عبارت است از

$$u_E(x,y,z)=\left(\frac{۲}{L}\right)^{۳/۲}\sin\frac{n_۱\pi x}{L}\sin\frac{n_۲\pi y}{L}\sin\frac{n_۳\pi z}{L} \qquad (۷_۹)$$

و

$$E=\frac{\hbar^۲\pi^۲}{۲mL^۲}(n_۱^۲+n_۲^۲+n_۳^۲) \qquad (۸_۹)$$

توجه کنید که واگنی در این مسئله بسیار زیاد است: تعداد جوابها به‌ازای یک مقدار معین E برابر است با تعداد مجموعه‌های اعداد درست $\{n_۱,n_۲,n_۳\}$ که در ۹ـ۸ صدق می‌کنند. واگنی معمولاً

www.arsanjan.blogfa.com

ناشی از وجود عملگرهای جابه‌جاشونده است و این مثال نیز از این قاعده مستثنی نیست. در اینجا عملگرهای جابه‌جاشونده H_x، H_y و H_z هستند، که به‌صورت زیر تعریف می‌شوند

$$\begin{aligned} H_x &= \frac{p_x^2}{2m} + V_1(x) \\ H_y &= \frac{p_y^2}{2m} + V_2(y) \\ H_z &= \frac{p_z^2}{2m} + V_3(z) \end{aligned} \qquad (۹\text{ـ}۹)$$

و

$$H_x + H_y + H_z = H \qquad (۹\text{ـ}۱۰)$$

اثرات اصل طرد

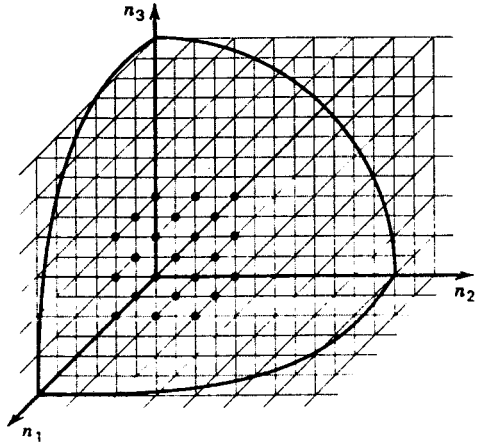
پتانسیلی که در بالا در نظر گرفتیم چنان ساده است که می‌توان از آن برای بحث دربارهٔ انرژیهای الکترونهای بدون برهم‌کنش (و سایر فرمیونهای یکسان) در جعبهٔ سه‌بعدی استفاده کرد. به‌عنوان اولین گام، بهتر است انرژی حالت پایهٔ N فرمیون یکسان بدون برهم‌کنش، مثلاً الکترون، را در جعبه‌ای به حجم L^3 به‌دست آوریم. برای هر سه‌تایی اعداد درست $(1,1,1)$، $(1,1,2)$، $(1,2,1)$، $(2,1,1)$، ...، می‌توان دو الکترون در نظر گرفت. مسئلهٔ یافتن انرژی را به‌صورت آسانتری مطرح می‌کنیم: چند سه‌تایی اعداد درست (n_1, n_2, n_3) وجود دارند که برای آنها E در ۹ـ۸ کمتر از انرژی E_F است؟ هر سه‌تایی یک نقطهٔ شبکه در یک فضای سه‌بعدی تشکیل می‌دهد، و اگر تعداد این نقاط بسیار زیاد باشد، با تقریب بسیار خوب می‌توان گفت که آنها باید در کره‌ای به شعاع R قرار داشته باشند که بنابه ۹ـ۸ با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = R^2 = \frac{2mE_F}{\hbar^2\pi^2}L^2 \qquad (۹\text{ـ}۱۱)$$

این تعداد برابر است با حجم یک هشتم کره که برای آن تمام n_iها مثبت‌اند (شکل ۹ـ۱). بنابراین، تعداد نقطه‌های شبکه برابر است با

$$\frac{1}{8}\cdot\frac{4\pi}{3}R^3 = \frac{1}{8}\,\frac{4\pi}{3}\left(\frac{2mE_F}{\hbar^2\pi^2}L^2\right)^{3/2} \qquad (۹\text{ـ}۱۲)$$

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۹ـ۱ شمارش حالتها برای دستگاه ذرات مستقل.

و تعداد الکترونها با انرژی کمتر از انرژی E_F دو برابر این است، یعنی

$$N = \frac{\pi}{3} L^3 \left(\frac{2mE_F}{\hbar^2 \pi^2} \right)^{3/2} \qquad (۱۳_۹)$$

تعداد الکترونها، چنانکه باید، متناسب با حجم جعبه است. برحسب چگالی الکترونها،

$$n = \frac{N}{L^3} \qquad (۱۴_۹)$$

داریم

$$E_F = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{3n}{\pi} \right)^{2/3} \qquad (۱۵_۹)$$

انرژی E_F متعلق به پرانرژی‌ترین الکترون در حالت پایهٔ یک گاز الکترونی به چگالی n است. این انرژی را انرژی فرمی می‌نامند، و نشان‌گذاری آن با F به همین دلیل است.

برای محاسبهٔ انرژی کل، می‌توان تعداد نقاط شبکه را به‌صورت

$$\frac{1}{8} \int_{|\mathbf{n}| \le R} d^3\mathbf{n} \qquad (۱۶_۹)$$

نوشت که در آن ضریب ۱/۸ از قید مثبت بودن اعداد درست در ۹ـ۸ ناشی می‌شود؛ در انتگرال ۹ـ۱۶ این قید برداشته شده است و ضریب جلو انتگرال به‌جای آن گذاشته شده است.

www.arsanjan.blogfa.com

این انرژی باید دو برابر شود، زیرا برای هر نقطهٔ شبکه دو الکترون با یک انرژی وجود دارند. بنابراین، انرژی کل برابر است با

$$\begin{aligned} E_{\text{کل}} &= \frac{\hbar^2\pi^2}{mL^2}\,\frac{1}{8}\int \mathbf{n}^2 d^3\mathbf{n} \\ &= \frac{\hbar^2\pi^2}{8mL^2}4\pi\int_0^R n^4\,dn \\ &= \frac{\hbar^2\pi^2}{10mL^2}R^5 \end{aligned} \qquad (۹\text{ـ}۱۷)$$

چون رابطهٔ R با تعداد الکترونها به‌صورت زیر است

$$N = 2\cdot\frac{1}{8}\cdot\frac{4\pi}{3}R^3 \qquad (۹\text{ـ}۱۸)$$

در نهایت به‌دست می‌آوریم

$$E_{\text{کل}} = \frac{\hbar^2\pi^3}{10mL^2}\left(\frac{3N}{\pi}\right)^{5/3} \qquad (۹\text{ـ}۱۹)$$

که برحسب چگالی $n = N/L^3$ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$E_{\text{کل}} = \frac{\hbar^2\pi^3}{10m}\left(\frac{3n}{\pi}\right)^{5/3}L^3 \qquad (۹\text{ـ}۲۰)$$

پیامدهای اصل طرد پاؤلی کاملاً گیج‌کننده هستند. تعدادی از آنها را پس از ملاحظات زیر بررسی می‌کنیم:

(الف) عدد موج که با $E = \hbar^2k^2/2m$ در سطح "دریای فرمی" تعریف می‌شود با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} \qquad (۹\text{ـ}۲۱)$$

چون $k = 2\pi/\lambda$، برای طول‌موج دوبروی به‌دست می‌آوریم

$$\lambda = 2{,}03n^{-1/3} \qquad (۹\text{ـ}۲۲)$$

www.arsanjan.blogfa.com
از آنجا که $n^{-1/3}$ تقریباً برابر با فاصلهٔ میان ذره‌ای d است، نتیجهٔ بالا را می‌توان به‌صورتی که به‌آسانی به‌خاطر سپرده می‌شود بیان کرد:

$$d = \frac{\lambda_F}{2} \qquad (۹_۲۳)$$

این رابطه چیزی با ارزشتر از یک وسیلهٔ یادسپاری است. چون اصل طرد نمی‌گذارد دو الکترون با اعداد کوانتومی یکسان کنار هم قرارگیرند رابطهٔ بالا به‌معنای این است که آنها باید دست‌کم به‌اندازهٔ یک نیم‌موج از هم فاصله داشته باشند.

(ب) اگر تعداد الکترونها را ثابت بگیریم، آنگاه ۹ـ۱۹ برحسب حجم حاوی الکترونها به‌صورت زیر درمی‌آید

$$E_{\text{کل}} = \frac{\hbar^2\pi^2}{10m}\left(\frac{3N}{\pi}\right)^{5/3} V^{-2/3} \qquad (۹_۲۴)$$

اگر N بزرگ باشد، این نتیجه عملاً مستقل از شکل حجم است. در محاسبات بالا از مکعب استفاده کردیم زیرا این راه برای محاسبه از همه ساده‌تر است.

فشار واگنی و کاربردهای اخترفیزیکی

اگر گاز الکترونی را متراکم کنیم الکترونها به یکدیگر نزدیکتر می‌شوند، و در نتیجه طول‌موج دوبروی کاهش می‌یابد، یعنی انرژی زیاد می‌شود. بنابراین، مقاومتی در برابر تراکم ظاهر می‌شود؛ فشار مانع تراکم را فشار واگنی می‌نامند. این فشار با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$\begin{aligned} p_{\text{واگنی}} &= -\frac{\partial E_{\text{tot}}}{\partial V} \\ &= \frac{\hbar^2\pi^2}{15m}\left(\frac{3n}{\pi}\right)^{5/3} \end{aligned} \qquad (۹_۲۵)$$

مدول کپه‌ای B (عکس تراکم‌پذیری) برای یک ماده به‌صورت زیر تعریف می‌شود

$$B = -V\frac{\partial p}{\partial V} \qquad (۹_۲۶)$$

و اگر به‌جای p فشار واگنی را قرار دهیم به‌دست می‌آوریم $B = 5p_{\text{واگنی}}/3$، و در نتیجه

$$B = \frac{\hbar^2\pi^2}{9m}\left(\frac{3n}{\pi}\right)^{5/3} \qquad (۹_۲۷)$$

www.arsanjan.blogfa.com

استفاده از الگوی گاز الکترونی واگن برای ستاره مرجع بزرگی و جرم مدول کپه‌ای B را به‌دست می‌دهد. به‌عنوان مثال، برای سدیم $n = ۲٫۶۵ \times ۱۰^{۲۲} \mathrm{cm}^{-۳}$، و در نتیجه $B = ۹٫۲ \times ۱۰^{۱۰} \mathrm{dyne/cm}^{۲}$. مقدار تجربی $۶٫۴ \times ۱۰^{۱۰} \mathrm{dyne/cm}^{۲}$ است.

مقاومت در برابر تراکم که منشأ آن در اصل طرد پاؤلی است نقش مهمی در تکامل ستاره‌ای دارد. ستاره‌ها با واکنشهای هسته‌ای متوالی "می‌سوزند". هیدروژن با واکنشهای زیر به هلیم تبدیل می‌شود

$$^{۱}\mathrm{H} + {}^{۱}\mathrm{H} \rightarrow {}^{۲}\mathrm{H} + e^{+} + \nu + ۱٫۴۴\mathrm{MeV}$$

$$^{۲}\mathrm{H} + {}^{۱}\mathrm{H} \rightarrow {}^{۳}\mathrm{He} + \gamma + ۵٫۴۹\mathrm{MeV}$$

$$^{۳}\mathrm{He} + {}^{۳}\mathrm{He} \rightarrow {}^{۴}\mathrm{He} + {}^{۱}\mathrm{H} + {}^{۱}\mathrm{H} + ۱۲٫۸۵\mathrm{MeV}$$

وقتی تمام هیدروژن به هلیم تبدیل شد این سوختن متوقف می‌شود. انقباض گرانشی هلیم را متراکم می‌کند تا اینکه هلیم با واکنش زیر شروع به سوختن می‌کند

$$^{۴}\mathrm{He} + {}^{۴}\mathrm{He} \rightarrow {}^{۸}\mathrm{Be} + \gamma - ۹۵\ \mathrm{keV}$$

$$^{۸}\mathrm{Be} + {}^{۴}\mathrm{He} \rightarrow {}^{۱۲}\mathrm{C} + \gamma + ۷٫۴\ \mathrm{MeV}$$

انواع فرایندهای هسته‌ای زیادتر می‌شوند، و فرایند ترکیب هسته‌ها را اکنون کاملاً می‌دانیم. در یک مرحله، وقتی که ستاره عمدتاً از آهن، سیلیسیم، و عنصرهای مجاور تشکیل شده است، سوختن متوقف می‌شود. آنگاه ماده انقباض گرانشی را از سر می‌گیرد، و تنها مانع در برابر رمبش گرانشی کامل اثر فشار واگنی است.

اگر فرض کنیم چگالی مادهٔ ρ مستقل از شعاع است و شکل ستاره کروی است، فشار گرانشی به‌آسانی محاسبه می‌شود. انرژی پتانسیل ماده در پوسته‌ای بین شعاعهای r و $r + dr$ برابر است با

$$dV_g = -G\frac{(۴\pi\rho r^{۳}/۳)(۴\pi\rho r^{۲}dr)}{r} = -\frac{(۴\pi)^{۲}G\rho^{۲}}{۳}r^{۴}dr \qquad (۲۸_۹)$$

و در نتیجه انرژی پتانسیل مادهٔ موجود در کره‌ای به‌شعاع R عبارت است از

$$V_g = -\frac{(۴\pi)^{۲}G\rho^{۲}}{۳}\int_{۰}^{R} r^{۴}\,dr = -\frac{(۴\pi)^{۲}}{۱۵}G\rho^{۲}R^{۵} \qquad (۲۹_۹)$$

رابطهٔ میان ρ، R و جرم ستارهٔ M را هم داریم. ستاره از N نوکلئون (به‌صورت آهن، سیلیسیم و

www.arsanjan.blogfa.com

غیره) هر یک به جرم m_n تشکیل شده است، و از این‌رو

$$\frac{۴\pi}{۳}\rho R^۳ = M = (NM_n) \qquad (۳۰_۹)$$

بنابراین، رابطهٔ انرژی پتانسیل گرانشی برحسب حجم ستاره به‌صورت زیر است

$$V_g = -\frac{۳}{۵}\left(\frac{۴\pi}{۳}\right)^{۱/۳} G(Nm_n)^۲ V^{-۱/۳} \qquad (۳۱_۹)$$

فشار گرانشی برابر است با

$$p_g = -\frac{\partial V_g}{\partial V} = -\frac{۱}{۵}\left(\frac{۴\pi}{۳}\right)^{۱/۳} G(Nm_n)^۲ V^{-۴/۳} \qquad (۳۲_۹)$$

این فشار با فشار واگنی، که بنابه ۹ـ۲۵ به‌صورت زیر است، مخالفت می‌کند

$$p_{\text{واگنی}} = \frac{\hbar^۲\pi^۳}{۱۵m_e}\left(\frac{۳n}{\pi}\right)^{۵/۳} = \frac{\hbar^۲\pi^۳}{۱۵m_e}\left(\frac{۳N_e}{\pi}\right)^{۵/۳} V^{-۵/۳} \qquad (۳۳_۹)$$

که در آن N_e تعداد الکترونهای ستاره است و با تعداد پروتونهای آن برابر است. با فرض مساوی بودن تعداد پروتونها و نوترونها، داریم $N_e = N/۲$.

این دو فشار، به‌ازای یک مقدار معین N، وقتی با هم موازنه می‌کنند که

$$\frac{۱}{۵}\left(\frac{۴\pi}{۳}\right)^{۱/۳} G(Nm_n)^۲ V^{-۴/۳} = \frac{\hbar^۲\pi^۳}{۱۵m_e}\left(\frac{۳N_e}{\pi}\right)^{۵/۳} V^{-۵/۳}$$

یعنی وقتی که شعاع ستاره برابر است با R^*:

$$R^* = \left(\frac{۳}{۴\pi}\right)^{۱/۳} V^{۱/۳} = \left(\frac{۸۱\pi^۲}{۱۲۸}\right)^{۱/۳} \frac{\hbar^۲}{Gm_e m_n^۲} N^{-۱/۳} \qquad (۳۴_۹)$$

برای ستاره‌ای با جرم خورشید داریم

$$N \approx \frac{۲ \times ۱۰^{۳۳}\text{g}}{۱٫۶۷ \times ۱۰^{-۲۴}\text{g}} = ۱٫۲ \times ۱۰^{۵۷}$$

www.arsanjan.blogfa.com

و شعاع ستارهٔ واگن برابر است با $R \approx ۱۰^{۴}\text{km} \times ۱۰^{-۱} \times ۱۰^{۱} = ۱۰^{۴}\text{km}$. شعاع یک ستارهٔ ناواگن مانند خورشید تقریباً $۷ \times ۱۰^{۸}\text{km}$ است.

اگر جرم ستاره اندکی بیشتر از جرم خورشید باشد انرژی میانگین الکترونها افزایش می‌یابد. وقتی الکترونها به انرژیهای نسبیتی می‌رسند رابطهٔ بالا برای فشار واگنی تغییر عمده‌ای پیدا می‌کند. در واقع، انرژی الکترون دیگر $p^{۲}/۲m_e$ نیست بلکه pc است. می‌توان نشان داد (مسئلهٔ ۹ـ۱) که در این وضعیت فشار واگنی با $V^{-۴/۳}$ تغییر می‌کند، و اگر مقدار N به‌اندازهٔ کافی بزرگ باشد فشار گرانشی بر فشار واگنی غالب می‌شود. یک نتیجهٔ این فشار خالص زیاد این است که واکنش زیر روی می‌دهد

$$e^- + p \to n + \nu$$

نوترینوها فرار می‌کنند زیرا ماده، حتی مادهٔ واگن، برای آنها شفاف است، و آنچه می‌ماند یک ستارهٔ نوترونی است. فشار واگنی نوترونها را، که فرمیون هستند و بنابراین از اصل طرد پیروی می‌کنند، می‌توان به همان روش مربوط به فشار الکترون محاسبه کرد و البته به‌جای N_e باید N و به‌جای m_e باید m_n گذاشت. در این مورد به‌دست می‌آوریم

$$R_n^* = \left(\frac{۸۱\pi^{۲}}{۱۶}\right)^{۱/۳} \frac{\hbar^{۲}}{Gm_n^{۳}} N^{-۱/۳} \qquad (۳۵\text{ـ}۹)$$

برای ستاره‌ای که جرمش دو برابر خورشید است سرانجام به نتیجهٔ $R_n^* \approx ۱۰\text{km}$ می‌رسیم. اگر جرم (یا معادل آن N) چنان بزرگ باشد که نوترونها نسبیتی شوند آنگاه موازنه‌ای در برابر فشار گرانشی بسیار زیاد وجود نخواهد داشت، و یک سیاهچاله شکل می‌گیرد.

مسائل

۹ـ۱ انرژی فرمی برای گازی از فرمیونها را با این فرض که فرمیونها بدون جرم هستند، و در نتیجه رابطهٔ انرژی‌ـتکانه به‌صورت $E = pc$ است، از نو محاسبه کنید.

۹ـ۲ واگنی حالتها در یک جعبهٔ مکعبی با حجم $L^{۳}$ را برحسب E محاسبه کنید، یعنی تعداد حالتها را در بازهٔ $(E, E + dE)$ به‌دست آورید و با استفاده از آن چگالی حالتهای یک گاز الکترونی را، با توجه به اینکه به‌ازای هر حالت انرژی دو الکترون داریم، تعیین کنید.

[راهنمایی: چند $(n_۱, n_۲, n_۳)$ وجود دارند که برای آنها $\sum_i n_i^{۲} = ۲mEL^{۲}/\hbar^{۲}\pi^{۲}$؟]

۹ـ۳ طیف انرژی الکترونهای آزاد را در جعبه‌ای به اضلاع a، a و L، با فرض $a \ll L$، به‌دست آورید. دربارهٔ فاصلهٔ الکترونها به‌ازای $a = ۱۰\text{Å}$ و $L = ۱۰^{-۴}\text{cm}$ بحث کنید.

۹ـ۴ چگالی انرژی یک گاز فوتونی را در یک جعبهٔ مکعبی با حجم $L^{۳}$، با توجه به اینکه به‌ازای

www.arsanjan.blogfa.com

هر حالت انرژی دو فوتون (دو حالت قطبش) وجود دارند، محاسبه کنید.

۹ـ۵ طیف انرژی یک گاز فوتونی را در جعبه‌ای به اضلاع a، a و L، با $a \ll L$، به‌دست آورید.

۹ـ۶ با توجه به اینکه چگالی تعداد الکترونهای آزاد در مس $۸٫۵ \times ۱۰^{۲۲}\text{cm}^{-۳}$ است، (۱) انرژی فرمی را برحسب الکترون ولت، و (۲) سرعت الکترونی را که انرژی جنبشی آن برابر با انرژی فرمی است محاسبه کنید.

۹ـ۷ یک هسته از N نوترون و Z پروتون، با $N + Z = A$، تشکیل شده است. اگر شعاع هسته با $R = r_۰ A^{۱/۳}$ داده شود، که در آن $r_۰ = ۱٫۱\text{fm} = ۱۰^{-۱۳}\text{cm})$، و اگر جرمهای نوترون و پروتون تقریباً $۱٫۶ \times ۱۰^{-۲۴}\text{g}$ باشند، رابطهٔ انرژی فرمی را برای "گاز" پروتون و "گاز" نوترون، با فرض حرکت آزاد پروتونها و نوترونها، به‌دست آورید. این انرژیهای فرمی را به‌ازای $N = ۱۲۶$ و $Z = ۸۲$ تعیین کنید.

۹ـ۸ یک گاز نوترونی را در حالت پایه در نظر بگیرید که برای آن چگالی جرم ρ از $۱۰^{۱۱}$ تا $۱۰^{۱۶}$ گرم بر سانتیمترمکعب تغییر می‌کند. انرژی فرمی را برحسب ρ به‌دست آورید. توجه کنید که در یک نقطه این گاز نوترونی نسبیتی می‌شود. در چه گستره‌ای از چگالیها باید از فرمولهای نسبیتی استفاده کنیم؟

www.arsanjan.blogfa.com

۱۰

معادلهٔ شرودینگر در سه‌بعد (۲)

پتانسیل مرکزی

در این فصل مورد بسیار مهمی را در نظر می‌گیریم که در آن پتانسیل $V(x,y,z)$ تنها به $r=\sqrt{x^۲+y^۲+z^۲}$ بستگی دارد. برای یک دستگاه دوذره‌ای با پتانسیلی که تنها به‌فاصلهٔ بین دو ذره بستگی دارد، هامیلتونی به‌صورت زیر است

$$H=\frac{\mathbf{p}_۱^۲}{۲m_۱}+\frac{\mathbf{p}_۲^۲}{۲m^۲}+V(|\mathbf{r}_۱-\mathbf{r}_۲|) \qquad (۱\text{-}۱۰)$$

با تجزیهٔ متداول به مختصات مرکز جرم و نسبی

$$\mathbf{R}=\frac{m_۱\mathbf{r}_۱+m_۲\mathbf{r}_۲}{m_۱+m_۲} \qquad (۲\text{-}۱۰)$$

$$\mathbf{r}=\mathbf{r}_۱-\mathbf{r}_۲$$

www.arsanjan.blogfa.com

و با تکانه‌های کل و نسبی

$$\begin{aligned}\mathbf{P} &= \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 \\ \mathbf{p} &= \frac{m_2\mathbf{p}_1 - m_1\mathbf{p}_2}{m_1 + m_2}\end{aligned} \qquad (۳_۱۰)$$

هامیلتونی به‌صورت زیر درمی‌آید

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(|\mathbf{r}|) \qquad (۴_۱۰)$$

در اینجا M جرم کل دستگاه است که با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$M = m_1 + m_2 \qquad (۵_۱۰)$$

و جرم کاهیدهٔ μ عبارت است از

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{M} \qquad (۶_۱۰)$$

به‌سادگی می‌توان دید که

$$\begin{aligned}[P_i, R_j] &= \frac{h}{i}\delta_{ij} \\ [p_i, r_j] &= \frac{h}{i}\delta_{ij}\end{aligned} \qquad (۷_۱۰)$$

و تمام جابه‌جاگرهای دیگر صفر هستند. چون پتانسیل تابع مختصهٔ مرکز جرم $\mathbf{R}$ نیست، عملگر تکانهٔ کل $\mathbf{P}$ با H جابه‌جا می‌شود، و می‌توان ویژه‌تابعهای مشترکی برای $\mathbf{P}$ و H به‌دست آورد. ویژه‌تابعهای $\mathbf{P}$ عبارت‌اند از

$$U(\mathbf{P}, \mathbf{R}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{P}\cdot\mathbf{R}/h} \qquad (۸_۱۰)$$

بنابراین، ویژه‌تابع H به‌صورت زیر است

$$\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = U(\mathbf{P}, \mathbf{R})u_E(\mathbf{r}) \qquad (۹_۱۰)$$

www.arsanjan.blogfa.com

به‌طوری که $u_E(\mathbf{r})$ در معادلهٔ

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2\mu}+V(r)\right)u_E(\mathbf{r})=Eu_E(\mathbf{r}) \qquad (۱۰\text{ـ}۱۰)$$

که در آن E انرژی داخلی، یعنی انرژی کل منهای انرژی حرکت دستگاه دوذره‌ای $P^2/2M$، است. معادلهٔ ۱۰ـ۱۰ را به‌صورت زیر می‌نویسیم

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(r)\right)u_E(\mathbf{r})=Eu_E(\mathbf{r}) \qquad (۱۰\text{ـ}۱۱)$$

پیامدهای ناوردایی چرخشی

در این بخش نشان می‌دهیم که ۱۰ـ۱۱ را می‌توان به‌گونه‌ای جداسازی کرد که تنها مختصهٔ شعاعی r در معادلهٔ ویژه‌مقداری انرژی ظاهر شود. در مکانیک کلاسیک این جداسازی با استفاده از تکانهٔ زاویه‌ای انجام می‌شود. با

$$\mathbf{L}=\mathbf{r}\times\mathbf{p} \qquad (۱۰\text{ـ}۱۲)$$

به‌دست می‌آوریم

$$\mathbf{L}^2=(\mathbf{r}\times\mathbf{p})\cdot(\mathbf{r}\times\mathbf{p})=\mathbf{r}^2\mathbf{p}^2-(\mathbf{r}\cdot\mathbf{p})^2$$

و در نتیجه

$$\begin{aligned}\mathbf{p}^2&=\frac{1}{r^2}(\mathbf{r}\cdot\mathbf{p})^2+\frac{1}{r^2}\mathbf{L}^2\\&=p_r^2+\frac{1}{r^2}\mathbf{L}^2\end{aligned} \qquad (۱۰\text{ـ}۱۳)$$

برای پتانسیل مرکزی (وقتی V تنها به r بستگی دارد) نیرو شعاعی است و لنگری بر دستگاه وارد نمی‌شود. بنابراین، $\mathbf{L}$ یک ثابت حرکت است و $\mathbf{L}^2$ تنها یک عدد است. در نتیجه، معادلهٔ

$$E=\frac{1}{2\mu}\mathbf{p}^2+V(r)$$

تنها شامل مختصهٔ شعاعی است. همین نتیجه برای مکانیک کوانتومی صدق می‌کند. در بقیهٔ این بخش:

www.arsanjan.blogfa.com

۱. عملگر تکانهٔ زاویه‌ای را از شرط ناوردا بودن هامیلتونی تحت چرخش تعیین می‌کنیم؛ و
۲. معادلهٔ شعاعی را به‌دست می‌آوریم.

ناوردایی تحت چرخش حول محور z

مورد خاص چرخش حول محور z به‌اندازهٔ زاویهٔ θ را در نظر بگیرید: با

$$\begin{aligned} x' &= x\ \cos\ \theta - y\ \sin\ \theta \\ y' &= x\ \sin\ \theta + y\ \cos\ \theta \end{aligned} \qquad (۱۴_۱۰)$$

به‌آسانی می‌توان دید که

$$r' = (x'^{۲} + y'^{۲} + z'^{۲})^{۱/۲} = (x^{۲} + y^{۲} + z^{۲})^{۱/۲} = r$$

و

$$\left(\frac{\partial}{\partial x'}\right)^{۲} + \left(\frac{\partial}{\partial y'}\right)^{۲} = \left(\cos\ \theta\frac{\partial}{\partial x} - \sin\ \theta\frac{\partial}{\partial y}\right)^{۲} + \left(\sin\ \theta\frac{\partial}{\partial x} + \cos\ \theta\frac{\partial}{\partial y}\right)^{۲}$$
$$= \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^{۲} + \left(\frac{\partial}{\partial y}\right)^{۲}$$

چون هامیلتونی یک ویژگی ناوردایی دارد، انتظار داریم، همچنانکه در مورد پاریته و ناوردایی تحت جابه‌جایی دیدیم، یک قانون پایستگی به‌دست آوریم. برای تعیین عملگرهایی که با H جابه‌جا می‌شوند، یک چرخش بینهایت کوچک حول محور z در نظر می‌گیریم. با نگه داشتن جمله‌هایی که تنها تا مرتبهٔ θ هستند، یعنی

$$\begin{aligned} x' &= x - \theta y \\ y' &= y + \theta x \end{aligned} \qquad (۱۵_۱۰)$$

می‌نویسیم

$$Hu_E(x - \theta y, y + \theta x, z) = Eu_E(x - \theta y, y + \theta x, z) \qquad (۱۶_۱۰)$$

اگر این معادله را تا مرتبهٔ اول برحسب θ بسط دهیم و معادلهٔ

$$Hu_E(x, y, z) = Eu_E(x, y, z) \qquad (۱۷_۱۰)$$

www.arsanjan.blogfa.com

را از آن کم کنیم، به‌دست می‌آوریم

$$H\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)u_E(x,y,z)=E\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)u_E(x,y,z) \quad (۱۸_۱۰)$$

طرف راست این معادله را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)E\,u_E(x,y,z)=\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)H\,u_E(x,y,z) \quad (۱۹_۱۰)$$

اگر تعریف کنیم

$$L_z=\frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)=xp_y-yp_x \quad (۲۰_۱۰)$$

آنگاه از ترکیب ۱۰ـ۱۸ و ۱۰ـ۱۹ به‌دست می‌آوریم

$$(HL_z-L_zH)u_E(x,y,z)=۰$$

چون $u_E(\mathbf{r})$ها یک مجموعهٔ کامل تشکیل می‌دهند، این رابطه موجب رابطهٔ عملگری زیر می‌شود

$$[H,L_z]=۰ \quad (۲۱_۱۰)$$

L_z در اینجا مؤلفهٔ z عملگر تکانهٔ زاویه‌ای زیر است

$$\mathbf{L}=\mathbf{r}\times\mathbf{p} \quad (۲۲_۱۰)$$

اگر چرخش را حول محورهای x و y در نظر بگیریم به دو معادلهٔ زیر می‌رسیم

$$\begin{aligned}[H,L_x]&=۰\\ [H,L_y]&=۰\end{aligned} \quad (۲۳_۱۰)$$

بنابراین، سه مؤلفهٔ عملگر تکانهٔ زاویه‌ای با هامیلتونی جابه‌جا می‌شوند، یعنی تکانهٔ زاویه‌ای یک ثابت حرکت است. این نتیجه با این قانون کلاسیک که نیروهای مرکزی پایستگی تکانهٔ زاویه‌ای را ایجاب می‌کنند همسنگ است.

www.arsanjan.blogfa.com

رابطهٔ جابه‌جایی تکانهٔ زاویه‌ای

عملگرهای H، L_x، L_y و L_z یک مجموعهٔ کامل از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده تشکیل نمی‌دهند و از این‌رو نمی‌توانند ویژه‌تابعهای همزمان داشته باشند. برای مثال،

$$\begin{aligned}[L_x, L_y] &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] \\ &= [yp_z, zp_x] - [zp_y, zp_x] - [yp_z, xp_z] + [zp_y, xp_z] \\ &= y[p_z, z]p_x + x[z, p_z]p_y \\ &= \frac{\hbar}{i}(yp_x - zp_y) \qquad (۲۴\text{-}۱۰) \\ &= i\hbar L_z\end{aligned}$$

به‌همین ترتیب، به‌دست می‌آوریم

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x \qquad (۲۵\text{-}۱۰)$$

$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y \qquad (۲۶\text{-}۱۰)$$

رابطه‌های جابه‌جایی ۱۰ـ۲۴ تا ۱۰ـ۲۷ را می‌توان در فرمول زیر خلاصه کرد

$$\mathbf{L} \times \mathbf{L} = i\hbar\mathbf{L}$$

یک پیامد این رابطه‌های جابه‌جایی این است که تنها یک مؤلفهٔ $\mathbf{L}$ را می‌توان با H برای تشکیل مجموعهٔ مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده برگزید. برای اثبات، فرض کنید ویژه‌تابعی از L_x با ویژه‌مقدار l_1 داریم که به‌طور همزمان ویژه‌تابع L_y با ویژه‌مقدار l_2 نیز هست:

$$L_x u = l_1 u$$
$$L_y u = l_2 u$$

بنابراین، باید $L_x L_y u = l_1 l_2 u$ و $L_y L_x u = l_2 l_1 u$. در نتیجه، با توجه به ۱۰ـ۲۴ به‌دست می‌آوریم $L_z u = 0$. اما آنگاه

$$L_y u = \frac{1}{i\hbar}(L_z L_x - L_x L_z)u = \frac{1}{i\hbar} L_z l_1 u = 0$$

www.arsanjan.blogfa.com

این نتیجه ایجاب می‌کند که $l_1 = 0$. بنابراین، تنها برای $\mathbf{L} = 0$ هر سه مؤلفهٔ $\mathbf{L}$ می‌توانند ویژه‌تابعهای همزمان داشته باشند.

بدین‌ترتیب، برای تشکیل مجموعهٔ مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده تنها یک مؤلفهٔ $\mathbf{L}$ را می‌توان با H برگزید. اما می‌توان وضعیت را تا حدی بهتر کرد، زیرا، چنانکه ۱۰ـ۲۴ تا ۱۰ـ۲۶ ایجاب می‌کنند، $\mathbf{L}^2$ با هر سه مؤلفهٔ $\mathbf{L}$ جابه‌جا می‌شود:

$$\begin{aligned}[L_z, \mathbf{L}^2] &= [L_z, L_x^2 + L_y^2 + L_z^2] = [L_z, L_x^2] + [L_z, L_y^2] \\ &= L_x[L_z, L_x] + [L_z, L_x]L_x + L_y[L_z, L_y] + [L_z, L_y]L_y \\ &= i\hbar L_x L_y + i\hbar L_y L_x - i\hbar L_y L_x - i\hbar L_x L_y \qquad (۱۰\text{ـ}۲۷) \\ &= 0\end{aligned}$$

و غیره. بنابراین، عملگرهای H، $\mathbf{L}^2$ و L_z (که این یکی صرفاً قراردادی است) را به‌عنوان مجموعهٔ کامل مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده انتخاب می‌کنیم. می‌توانستیم پاریته را هم اضافه کنیم زیرا واضح است که هامیلتونی تحت $x \to -x$، $y \to -y$ و $z \to -z$ ناوردا است، اما چنانکه بعداً خواهیم دید با تعیین $\mathbf{L}^2$ پاریته نیز تعیین می‌شود.

جداسازی متغیرها برای معادلهٔ شرودینگر

در فصل ۱۱ ویژه‌مقدارها و ویژه‌تابعهای L_z و $\mathbf{L}^2$ را به‌دست می‌آوریم؛ در اینجا تنها متذکر می‌شویم که با استفاده از آنها حل معادلهٔ شرودینگر بسیار ساده‌تر می‌شود. این وضعیت پیامد رابطه‌ای است که در زیر به‌دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned}\mathbf{L}^2 = (\mathbf{r} \times \mathbf{p})^2 =& [(\mathbf{r} \times \mathbf{p})_x]^2 + [(\mathbf{r} \times \mathbf{p})_y]^2 + [(\mathbf{r} \times \mathbf{p})_z]^2 \\ =& -\hbar^2 \left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \\ & -\hbar^2 \left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \\ & -\hbar^2 \left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \\ =& -\hbar^2 \left[x^2\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + y^2\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\right.\end{aligned}$$

www.arsanjan.blogfa.com

$$+z^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)-2xy\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}-2yz\frac{\partial^2}{\partial y\partial z}$$

$$-2zx\frac{\partial^2}{\partial z\partial x}-2x\frac{\partial}{\partial x}-2y\frac{\partial}{\partial y}-2z\frac{\partial}{\partial z}\Bigg]$$

و همچنین داریم

$$\begin{aligned}(\mathbf{r}\cdot\mathbf{p})^2 &= -\hbar^2\left(x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z}\right)\\ &= -\hbar^2\left(x^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}+y^2\frac{\partial^2}{\partial y^2}+z^2\frac{\partial^2}{\partial z^2}+2xy\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}+2yz\frac{\partial^2}{\partial y\partial z}\right.\\ &\quad\left.+2zx\frac{\partial^2}{\partial z\partial x}+x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z}\right)\end{aligned} \tag{۲۸ـ۱۰}$$

مجموع این دو برابر است با

$$-\hbar^2(x^2+y^2+z^2)\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+\hbar^2\left(x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z}\right) \tag{۲۹ـ۱۰}$$

بنابراین، اتحاد زیر را به‌دست می‌آوریم

$$\mathbf{L}^2+(\mathbf{r}\cdot\mathbf{p})^2=r^2\mathbf{p}^2+i\hbar\mathbf{r}\cdot\mathbf{p} \tag{۳۰ـ۱۰}$$

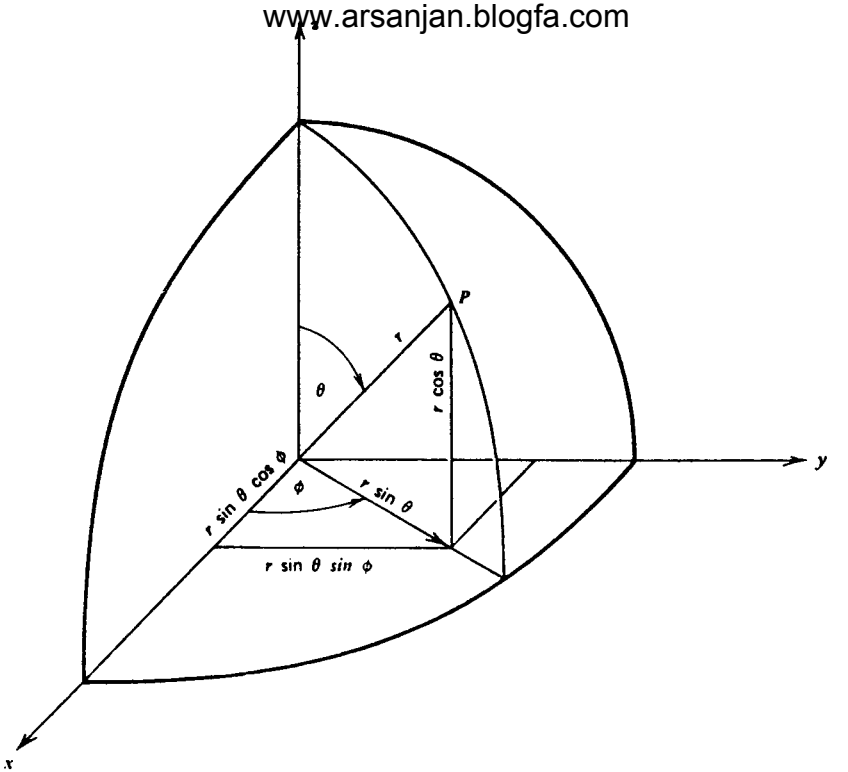
چون با عملگرها سروکار داریم، رعایت ترتیب عوامل ضروری است. از اتحاد بالا نتیجه می‌گیریم که

$$\mathbf{p}^2=\frac{1}{r^2}\left[\mathbf{L}^2+(\mathbf{r}\cdot\mathbf{p})^2-i\hbar\mathbf{r}\cdot\mathbf{p}\right] \tag{۳۱ـ۱۰}$$

این رابطه به این دلیل با نتیجهٔ کلاسیک ۱۰ـ۱۳ تفاوت دارد که $\mathbf{r}$ و $\mathbf{p}$ جابه‌جا نمی‌شوند. با

$$\mathbf{p}^2=\frac{1}{r^2}\mathbf{L}^2-\hbar^2\frac{1}{r^2}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)^2-\hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} \tag{۳۲ـ۱۰}$$

www.arsanjan.blogfa.com



شکل ۱۰ـ۱ تعریف مختصات کروی (r, θ, ϕ) و رابطهٔ آنها با مختصات دکارتی (x, y, z).

معادلهٔ شرودینگر به‌صورت زیر درمی‌آید

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{\hbar^2 r^2}\mathbf{L}^2\right]u_E(\mathbf{r})+V(r)u_E(\mathbf{r})=Eu_E(\mathbf{r}) \qquad (۳۳\text{ـ}۱۰)$$

اگر در مختصات کروی کار کنیم (شکل ۱۰ـ۱)، که طبعاً باید چنین باشد، آنگاه تنها عملگری که زاویه‌های قطبی θ و ϕ در آن دخالت دارند $\mathbf{L}^2$ است. بنابراین، اگر ویژه‌تابعها را به‌صورت زیر بنویسیم

$$u_E(\mathbf{r}) = Y_\lambda(\theta,\phi)R_{E\lambda}(r) \qquad (۳۴\text{ـ}۱۰)$$

که در آن Y_λ ویژه‌تابع عملگر $\mathbf{L}^2$ است:

$$\mathbf{L}^2 Y_\lambda(\theta,\phi) = \lambda\, Y_\lambda(\theta,\phi) \qquad (۳۵\text{ـ}۱۰)$$

www.arsanjan.blogfa.com

آنگاه معادلهٔ ۱۰ـ۳۴ به معادلهٔ ویژه‌مقداری $\mathbf{L}^2$ (معادلهٔ ۱۰ـ۳۵) و یک معادلهٔ صرفاً شعاعی (معادلهٔ ۱۰ـ۳۹) تفکیک می‌شود. روش بالا واقعاً تفاوتی با روش مرسوم جداسازی متغیرها ندارد، اما در آن بر نقش تقارن در تعیین مجموعهٔ کامل عملگرهای جابه‌جاشونده تأکید شده است.

λ چنانکه باید دارای ابعاد $\hbar^2$ است، و آن‌را به‌صورت زیر می‌نویسیم

$$\lambda = l(l+1)\hbar^2 \qquad (۳۶\text{ـ}۱۰)$$

در فصل بعد ثابت می‌کنیم که $l = 0, 1, 2, 3, \ldots$، و در تحلیل زیر از این نتیجه استفاده خواهیم کرد. ویژه‌تابعهای عملگر $\mathbf{L}^2$ را در واقع به‌صورت $Y_{lm}(\theta,\phi)$ می‌نویسیم که در آن شاخص پایین m نشان می‌دهد که $Y_{lm}(\theta,\phi)$ ویژه‌تابع همزمان $\mathbf{L}^2$ و L_z است:

$$L_z Y_{lm}(\theta,\phi) = m\hbar Y_{lm}(\theta,\phi) \qquad (۳۷\text{ـ}۱۰)$$

قبلاً گفتیم که l یک عدد درست است، و خواهیم دید که m نیز یک عدد درست است که در $-l \le m \le l$ صدق می‌کند. چون Y_{lm} ویژه‌تابع عملگرهای هرمیتی است، Y_{lm}های متناظر با ویژه‌مقدارهای مختلف متعامد هستند. در فصل بعد ثابت می‌کنیم که وقتی این ویژه‌تابعها به‌طور مناسب بهنجار شده باشند، داریم

$$\int d\Omega\, Y_{l_1 m_1}(\theta,\phi)^* Y_{l_2 m_2}(\theta,\phi) \equiv \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, Y_{l_1 m_1}(\theta,\phi)^* Y_{l_2 m_2}(\theta,\phi) = \delta_{l_1 l_2}\,\delta_{m_1 m_2} \qquad (۳۸\text{ـ}۱۰)$$

معادلهٔ شعاعی

اگر ۱۰ـ۳۴، ۱۰ـ۳۵ و ۱۰ـ۳۶ را در ۱۰ـ۳۳ بگذاریم، معادلهٔ شرودینگر شعاعی زیر را به‌دست می‌آوریم

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{d}{dr}\right)+\frac{1}{r}\frac{d}{dr}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_{Elm}(r)+V(r)R_{Elm}(r)=ER_{Elm} \qquad (۳۹\text{ـ}۱۰)$$

توجه کنید که در این معادله وابستگی به m وجود ندارد. بنابراین، به‌ازای یک مقدار معین l همیشه یک واگنی $(2l+1)$تایی داریم، زیرا تمام مقادیر ممکن m دارای یک انرژی هستند. معادلهٔ ۱۰ـ۳۹

www.arsanjan.blogfa.com

را، با حذف شاخص زائد m، می‌توان به‌صورت توابع شعاعی، می‌توان به‌صورت زیر درآورد

$$\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)R_{nl}(r)-\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right]R_{nl}(r)+\frac{2\mu E}{\hbar^2}R_{nl}(r)=0 \qquad (۴۰_۱۰)$$

جوابهای این معادله را برای انواعی از پتانسیل بررسی می‌کنیم که در بینهایت سریعتر از $1/r$ به صفر میل می‌کنند، به‌استثنای مورد مهم پتانسیل کولنی که در فصل ۱۲ بیان خواهیم کرد. همچنین فرض می‌کنیم این پتانسیلها در مبدأ به اندازهٔ $1/r^2$ تکین نیستند، و در نتیجه

$$\lim_{r\to 0} r^2V(r)=0 \qquad (۴۱_۱۰)$$

گاهی بهتر است تابع زیر را وارد کنیم

$$u_{nl}(r)=rR_{nl}(r) \qquad (۴۲_۱۰)$$

از آنجا که

$$\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)\frac{u_{nl}(r)}{r}=\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}u_{nl}(r) \qquad (۴۳_۱۰)$$

به‌دست می‌آوریم

$$\frac{d^2u_{nl}(r)}{dr^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E-V(r)-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u_{nl}(r)=0 \qquad (۴۴_۱۰)$$

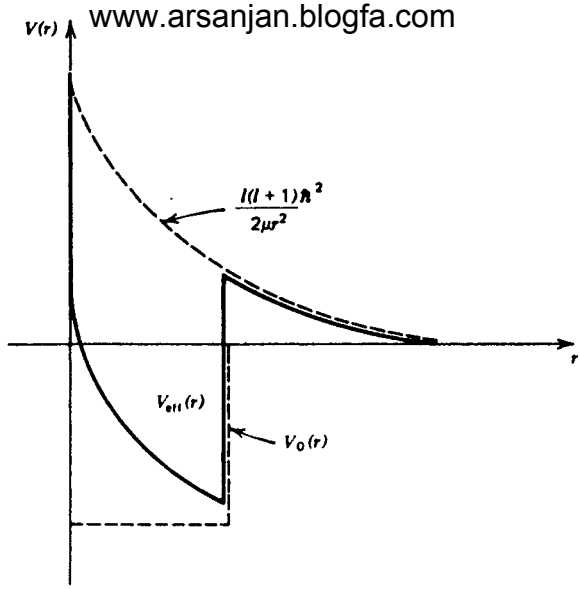
این معادله شباهت بسیار زیادی با معادلهٔ یک‌بعدی دارد، بجز اینکه
(الف) به پتانسیل $V(r)$ یک سد دافعهٔ مرکزگریزی اضافه شده است:

$$V(r)\to V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \qquad (۴۵_۱۰)$$

(ب) تعریف $u_{nl}(r)$ و متناهی بودن تابع‌موج در مبدأ ایجاب می‌کنند که

$$u_{nl}(0)=0 \qquad (۴۶_۱۰)$$

www.arsanjan.blogfa.com



شکل ۱۰ـ۲ پتانسیل مؤثر در معادلهٔ شعاعی برای $u = rR(r)$ وقتی پتانسیل واقعی یک چاه مستطیلی است.

که در نتیجه معادله بیشتر شبیه مسئلهٔ یک‌بعدی می‌شود که برای آن در ناحیهٔ سمت چپ مبدأ $V = +\infty$ (شکل ۱۰ـ۲).

ابتدا معادلهٔ شعاعی را، با حذف تمام شاخصهای پایین برای سادگی، در نزدیکی مبدأ در نظر می‌گیریم. وقتی $r \to 0$، با نگه داشتن جمله‌های مهم، معادلهٔ شعاعی به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{d^2u}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}u \simeq 0 \qquad (۴۷_۱۰)$$

زیرا پتانسیل به‌ازای مقادیر به‌اندازهٔ کافی کوچک r وقتی شرط ۴۱ـ۱۰ برقرار باشد سهمی ندارد. اگر حدس زیر را به‌کار ببریم

$$u(r) \sim r^s \qquad (۴۸_۱۰)$$

می‌بینیم که معادله به‌شرطی صادق است که

$$s(s-1) - l(l+1) = 0 \qquad (۴۹_۱۰)$$

یعنی $s = l+1$ یا $s = -l$. جوابی که در شرط $u(0) = 0$ صدق می‌کند، یعنی جوابی که مانند r^{l+1} رفتار می‌کند، جواب منظم نامیده می‌شود. جوابی که مانند r^{-l} رفتار می‌کند جواب

نامنظم است. برای تابع‌موج شعاعی $R(r)$ داریم r^l و جواب نامنظم به‌صورت r^{-l-1} است.

www.ariamjan.blogfa.com

به‌ازای مقادیر بزرگ r می‌توان جمله‌های پتانسیل را حذف کرد، و معادله به‌صورت زیر در می‌آید

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2}u \simeq 0 \qquad (۵۰_۱۰)$$

شرط انتگرال‌پذیری مجذوری ایجاب می‌کند که

$$1 = \int d^3r|\psi(\mathbf{r})|^2 = \int_0^\infty r^2\, dr \int d\Omega|R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)|^2$$
$$= \int_0^\infty r^2\, dr|R_{nl}(r)|^2 \qquad (۵۱_۱۰)$$

یعنی

$$\int_0^\infty dr|u_{nl}(r)|^2 = 1 \qquad (۵۲_۱۰)$$

بنابراین، تابع‌موج باید در بینهایت صفر شود. اگر $E < 0$، و در نتیجه

$$\frac{2\mu E}{\hbar^2} = -\alpha^2 \qquad (۵۳_۱۰)$$

جواب مجانبی به‌صورت زیر است

$$u(r) \sim e^{-\alpha r} \qquad (۵۴_۱۰)$$

اگر $E > 0$، جوابهایی که به‌دست می‌آوریم تنها در جعبه هنجارپذیر هستند (به‌بحث مربوط در فصل ۴ مراجعه کنید). با

$$\frac{2\mu E}{\hbar^2} = k^2 \qquad (۵۵_۱۰)$$

جواب به‌ازای مقادیر به اندازهٔ کافی بزرگ r به‌طوری که $V(r)$ قابل چشمپوشی باشد به‌صورت ترکیبی خطی از e^{ikr} و e^{-ikr} است، و ترکیب مناسب از این شرط تعیین می‌شود که جواب مجانبی به‌طور پیوسته به جوابی که در مبدأ منظم است متصل شود. اکنون به بررسی چند مثال می‌پردازیم.

www.arsanjan.blogfa.com

ذرهٔ آزاد

در این مثال $V(r) = ۰$، اما هنوز هم یک سد مرکزگریزی وجود دارد. معادلهٔ شعاعی ۱۰ـ۴۰ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\left[\frac{d^۲}{dr^۲} + \frac{۲}{r}\frac{d}{dr} - \frac{l(l+۱)}{r^۲}\right] R(r) + k^۲ R(r) = ۰ \qquad (۵۶_۱۰)$$

با معرفی متغیر $\rho = kr$ به‌دست می‌آوریم

$$\frac{d^۲R}{d\rho^۲} + \frac{۲}{\rho}\frac{dR}{d\rho} - \frac{l(l+۱)}{\rho^۲}R + R = ۰ \qquad (۵۷_۱۰)$$

یا

$$\frac{d^۲u}{d\rho^۲} - \frac{l(l+۱)}{\rho^۲}u + u = ۰$$

این معادله به‌ازای $l = ۰$ به‌صورت $d^۲u/d\rho^۲ + u = ۰$ درمی‌آید که جوابهای آن $\sin\rho$ و $\cos\rho$ هستند، یعنی جواب منظم عبارت است از

$$R_۰(\rho) = \frac{\sin\rho}{\rho} \qquad (۵۸_۱۰)$$

و جواب نامنظم به‌صورت زیر است

$$R_۰(\rho) = \frac{\cos\rho}{\rho} \qquad (۵۹_۱۰)$$

به‌ازای مقادیر دیگر l، جوابها را می‌توان برحسب توابع ساده‌ای بیان کرد. جواب منظم تابع بسل کروی است که با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$j_l(\rho) = (-\rho)^l \left(\frac{۱}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^l \left(\frac{\sin\rho}{\rho}\right) \qquad (۶۰_۱۰)$$

و جواب نامنظم که تابع نویمان کروی نامیده می‌شود به‌صورت زیر است

$$n_l(\rho) = -(-\rho)^l \left(\frac{۱}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^l \left(\frac{\cos\rho}{\rho}\right) \qquad (۶۱_۱۰)$$

www.arsanjan.blogfa.com

از این توابع چند تای اول را می‌توان به‌صورت

$$
\begin{aligned}
j_0(\rho) &= \frac{\sin\ \rho}{\rho} \qquad n_0(\rho) = -\frac{\cos\ \rho}{\rho} \\
j_1(\rho) &= \frac{\sin\ \rho}{\rho^2} - \frac{\cos\ \rho}{\rho} \qquad n_1(\rho) = -\frac{\cos\ \rho}{\rho^2} - \frac{\sin\ \rho}{\rho} \\
j_2(\rho) &= \left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho}\right)\sin\ \rho - \frac{3}{\rho^2}\cos\ \rho \\
n_2(\rho) &= -\left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho}\right)\cos\ \rho - \frac{3}{\rho^2}\sin\ \rho
\end{aligned}
\qquad (۶۲_۱۰)
$$

ترکیبهای مناسب برای مقادیر بزرگ ρ عبارت‌اند از توابع هنکل کروی

$$h_l^{(1)}(\rho) = j_l(\rho) + i n_l(\rho) \qquad (۶۳_۱۰)$$

و

$$h_l^{(2)}(\rho) = [h_l^{(1)}(\rho)]^* \qquad (۶۴_۱۰)$$

چند تابع هنکل کروی را هم در زیر می‌نویسیم

$$
\begin{aligned}
h_0^{(1)}(\rho) &= \frac{e^{i\rho}}{i\rho} \\
h_1^{(1)}(\rho) &= -\frac{e^{i\rho}}{\rho}\left(1 + \frac{i}{\rho}\right) \\
h_2^{(1)}(\rho) &= \frac{i\ e^{i\rho}}{\rho}\left(1 + \frac{3i}{\rho} - \frac{3}{\rho^2}\right)
\end{aligned}
\qquad (۶۵_۱۰)
$$

موارد زیر مخصوصاً قابل توجه‌اند.

(الف) رفتار در نزدیکی مبدأ: به‌ازای $\rho \ll l$ به‌دست می‌آوریم

$$j_l(\rho) \approx \frac{\rho^l}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot \cdots \cdot (2l+1)} \qquad (۶۶_۱۰)$$

و

$$n_l(\rho) \simeq -\frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \cdots \cdot (2l-1)}{\rho^{l+1}} \qquad (۶۷_۱۰)$$

www.arsanjan.blogfa.com

(ب) به‌ازای $\rho \gg l$ رابطه‌های مجانبی زیر را به‌دست می‌آوریم

$$j_l(\rho) \simeq \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right) \qquad (۶۸_۱۰)$$

و

$$n_l(\rho) \simeq -\frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right) \qquad (۶۹_۱۰)$$

و در نتیجه

$$h_l^{(1)}(\rho) \simeq -\frac{i}{\rho} e^{i(\rho - l\pi/2)} \qquad (۷۰_۱۰)$$

جوابی که در مبدأ منظم است به‌صورت زیر است

$$R_l(r) = j_l(kr) \qquad (۷۱_۱۰)$$

و صورت مجانبی آن، با استفاده از ۱۰ـ۶۸، عبارت است از

$$R_l(r) \simeq -\frac{1}{2ikr}[e^{-i(kr - l\pi/2)} - e^{i(kr - l\pi/2)}] \qquad (۷۲_۱۰)$$

چاه پتانسیل نامتناهی

چاه پتانسیل نامتناهی سه‌بعدی زیر را در نظر بگیرید

$$\begin{aligned} V(r) &= 0 \qquad r < a \\ &= \infty \qquad r > a \end{aligned} \qquad (۷۳_۱۰)$$

در این مورد، با

$$\frac{2\mu E}{\hbar^2} = k^2 \qquad (۷۴_۱۰)$$

جوابی که در $r = 0$ منظم است عبارت است از

$$R(r) = A j_l(kr) \qquad (۷۵_۱۰)$$

www.arsanjan.blogfa.com

و ویژه‌مقدارها از شرط صفر شدن تابع موج روی دیواره به‌دست می‌آیند، یعنی از

$$j_l(ka) = 0 \qquad (۷۶_۱۰)$$

ریشه‌های این معادله به‌ازای چند مقدار l در جدول زیر نوشته شده‌اند

$l = 0$	۱	۲	۳	۴	۵
۳٫۱۴	۴٫۴۹	۵٫۷۶	۶٫۹۹	۸٫۱۸	۹٫۳۶
۶٫۲۸	۷٫۷۳	۹٫۱۰	۱۰٫۲۴		
۹٫۴۲					

از ۱۰ـ۶۸ نتیجه می‌گیریم که به‌ازای مقادیر بزرگ ka (در واقع $ka \gg l$) این ریشه‌ها از $ka \approx n\pi + l\pi/2$ به‌دست می‌آیند.

مجموعهٔ کامل ویژه‌تابعهای همزمان H، $\mathbf{L}^2$ و L_z عبارت‌اند از

$$u_{nl}(r) = Aj_l(k_{ln}r)Y_{lm}(\theta, \phi) \qquad (۷۷_۱۰)$$

که در آن k_{nl}ها از $j_l(k_{nl}a) = 0$ به‌دست می‌آیند، و A ضریب بهنجارش است. توجه کنید که به‌ازای هر یک از نامساویهای $n \neq n'$ و $l \neq l'$ داریم

$$\int d^3r\, u_{n'l'}(\mathbf{r})u_{nl}(\mathbf{r}) = 0 \qquad (۷۸_۱۰)$$

تعامد نسبت به اعداد کوانتومی l و m به Y_{lm}ها مربوط می‌شود. تعامد نسبت به عدد n، که ویژه‌مقدارهای مختلف انرژی را به‌ازای مقادیر ثابت l و m متمایز می‌کند، نیز مسلماً باید وجود داشته باشد، و در واقع در بحث توابع بسل داریم

$$\int_0^1 dt\, j_l(\alpha_m t)j_l(\alpha_n t) = 0 \qquad m \neq n \qquad (۷۹_۱۰)$$

که در آن $j_l(\alpha_n) = 0$. این رابطه هم‌ارز رابطهٔ تعامد توابع شعاعی مربوط به مقادیر مختلف عدد کوانتومی شعاعی n است.

طیف چاه مستطیلی نامتناهی را می‌توان به‌صورت زیر توصیف کرد: اگر به‌ازای یک مقدار معین l، اولین ریشه را با $n = 1$ نشانگذاری کنیم، دومین ریشه را با $n = 2$، و غیره، و اگر از

www.arsanjan.blogfa.com

نمادنگاری مرسوم طیف نمایی برای مقادیر مختلف l استفاده کنیم.

$$S:\ l=۰$$
$$P:\ l=۱$$
$$D:\ l=۲$$
$$F:\ l=۳$$
$$G:\ l=۴$$

آنگاه ترتیب ترازها به‌صورت زیر خواهد بود

$$۱S;\ ۱P;\ ۱D;\ ۲S;\ ۱F;\ ۲P;\ ۱G;\ ۲D;\ ۱H;\ ۳S;\ \cdots$$

به‌عنوان یک الگو، هسته را متشکل از نوترونها و پروتونها در یک چاه نامتناهی می‌گیریم. چون نوترونها و پروتونها ذراتی با اسپین ۱/۲ یعنی فرمیون هستند، بیشتر از دو نوترون و بیشتر از دو پروتون نمی‌توانند یک حالت معین را اشغال کنند. اگر تنها پروتونها را در نظر بگیریم، می‌بینیم که در حالت $۱S$ تنها دو پروتون می‌توانند وجود داشته باشند. برای تراز بعدی $(۱D)$ داریم $l=۱$، و در نتیجه سه حالت (متناظر با سه مقدار ممکن m) وجود دارند، و از این‌رو این تراز با شش پروتون پر می‌شود. برای تراز $۱D$، با پنج مقدار ممکن m (زیرا $l=۲$)، ده پروتون برای پرکردن این "پوسته" لازم‌اند. بدین‌ترتیب، ترازها وقتی پر می‌شوند که تعداد پروتونها برابر باشد با ۲، ۸(= ۲ + ۶)، ۱۸(= ۲ + ۶ + ۱۰)، ۲۰(= ۱۸ + ۲)، ۳۲(= ۲۰ + ۱۴)، ۴۰، ۵۸، ۹۰، ۹۲، ۱۰۶، ...، و همچنین است برای نوترونها. بررسی هسته‌های واقعی نشان می‌دهد که برای اعداد "جادویی" ۲، ۸، ۲۰، ۲۸، ۵۰، ۸۲، ۱۲۶، ... هسته‌ها ویژگیهای خاصی از خود نشان می‌دهند که می‌توان آنها را به ترازهای پر، یعنی پوسته‌های بسته، نسبت داد. تفاوت میان اعداد "جادویی" واقعی و آنهایی که از الگوی ابتدایی بالا به‌دست می‌آیند ناشی از آن است که یک پتانسیل اضافی وابسته به اسپین وجود دارد و این پتانسیل ترازها را کم‌وبیش جابه‌جا می‌کند و از این‌رو ترتیب اعداد تغییر می‌کند. الگوی پوسته‌ای هسته، اگر به‌طور مناسب ساخته شود، بسیاری از خواص هسته‌ها را توضیح می‌دهد.

شاید اینکه در نظرگرفتن هسته‌ها به‌صورت ذرات مستقل در یک چاه تقریب خوبی به‌دست می‌دهد کمی اسرارآمیز به‌نظر برسد، چون می‌دانیم نیروهای بین نوکلئونها بسیار قوی هستند. توضیح در اصل طرد نهفته است. هسته‌ها در یک چاه از طریق برخورد با یکدیگر برهم‌کنش می‌کنند. یک برخورد به‌طورکلی باعث می‌شود که نوکلئون به‌حالت کوانتومی دیگری پراکنده شود. در حالت پایه،

www.arsanjan.blogfa.com

پراکندگی صورت نمی‌گیرد زیرا [illegible] در نتیجه نمی‌توانند به‌عنوان حالتهای نهایی قابل دسترسی به‌کار آیند.

در زیر مثال دیگری را بررسی می‌کنیم که مانستهٔ سه‌بعدی تراگسیل و بازتاب از چاهها یا سدهای یک‌بعدی است.

جوابهای پیوستار برای چاه مربعی

پتانسیل زیر را در نظر بگیرید

$$\begin{aligned} V(r) &= -V_\circ & r < a \\ &= \circ & r > a \end{aligned} \qquad (۸۰_۱۰)$$

بنابراین، معادلهٔ شعاعی به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{d^۲R}{dr^۲} + \frac{۲}{r}\frac{dR}{dr} - \frac{l(l+۱)}{r^۲}R + \frac{۲\mu}{\hbar^۲}(V_\circ + E)R = \circ \qquad r < a \qquad (۸۱_۱۰)$$

$$\frac{d^۲R}{dr^۲} + \frac{۲}{r}\frac{dR}{dr} - \frac{l(l+۱)}{r^۲}R + \frac{۲\mu E}{\hbar^۲}R = \circ \qquad r > a$$

جواب برای $r > a$ ترکیبی از جوابهای منظم و نامنظم معادلهٔ بدون میدان است:

$$R_l(r) = Bj_l(kr) + Cn_l(kr) \qquad (۸۲_۱۰)$$

در حالی‌که جواب برای $r < a$ باید جواب منظم باشد، یعنی

$$R_l(r) = Aj_l(\kappa r) \qquad (۸۳_۱۰)$$

که در آن، مانند سابق،

$$\kappa^۲ = \frac{۲\mu(E + V_\circ)}{\hbar^۲} \qquad (۸۴_۱۰)$$

از جورکردن $(۱/R_l)dR_l/dr$ در $r = a$ داریم

$$\kappa\left[\frac{dj_l(\rho)/d\rho}{j_l(\rho)}\right]_{\rho=\kappa a} = k\left[\frac{Bdj_l/d\rho + Cdn_l/d\rho}{Bj_l(\rho) + Cn_l(\rho)}\right]_{\rho=ka} \qquad (۸۵_۱۰)$$

www.arsanjan.blogfa.com

که از آن می‌توان C/B را به‌دست آورد. جواب مجانبی عبارت است از

$$R_{nl}(r) \approx \frac{B}{2ikr}(e^{i(kr-l\pi/2)} - e^{-i(kr-l\pi/2)} - \frac{C}{2kr}(e^{i(kr-l\pi/2)} + e^{-i(kr-l\pi/2)} \approx \frac{-C+iB}{2kr}\left[e^{-i(kr-l\pi/2)} + \frac{C+iB}{C-iB}e^{i(kr-l\pi/2)}\right] \qquad (۸۶_۱۰)$$

ضریب جلوکروشه، غیر از وابستگی لازم $1/r$، اهمیتی ندارد زیرا دامنه را شرط بهنجارش تعیین می‌کند. رابطهٔ میان دو تابع نمایی دارای اهمیت فیزیکی است. قبل از هر چیز، متذکر می‌شویم که این دو جمله امواج کروی را نشان می‌دهند که یکی ورودی و دیگری خروجی است. در غیاب پتانسیل داریم $C = 0$، و ضریب موج کروی خروجی -1 می‌شود. در حضور پتانسیل، این ضریب دارای قدرمطلق ۱ است، زیرا از ۱۰ـ۸۵ می‌توان دید که B/C حقیقی است. بنابراین،

$$\left|\frac{C+iB}{C-iB}\right|^2 = \frac{1+iB/C}{1-iB/C} \times \frac{1-iB/C}{1+iB/C} = 1 \qquad (۸۷_۱۰)$$

این ضریب را بنابه قرارداد به‌صورت زیر می‌نویسیم

$$\frac{C+iB}{C-iB} \equiv -e^{2i\delta_l(k)} \qquad (۸۸_۱۰)$$

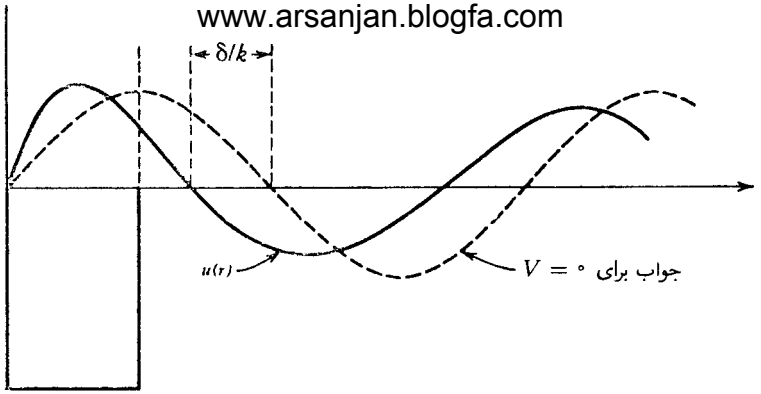
(که معادل است با $C/B = -\tan\delta_l(k)$)، و در نتیجه صورت مجانبی جواب شعاعی $R_{nl}(r)$ عبارت است از

$$R_{nl}(r) \approx \frac{\text{const.}}{r}\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l(k)\right) \qquad (۸۹_۱۰)$$

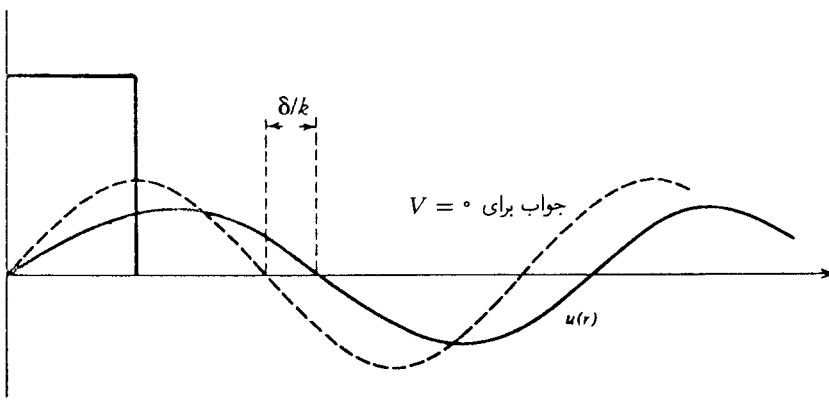
کمیت $\delta_l(k)$ را به‌همین دلیل انتقال فاز می‌نامند. در واقع، ۱۰ـ۸۹ صورت مجانبی به‌ازای هر پتانسیل حقیقی است، زیرا مجذور قدرمطلق ضریب موج کروی ورودی باید با مجذور قدرمطلق ضریب موج خروجی برابر باشد. این همان بیان پایستگی شار است: برای یک پتانسیل حقیقی، ذرات نه به وجود می‌آیند و نه پتانسیل آنها را جذب می‌کند.

محاسبهٔ C/B از ۱۰ـ۸۵ بجز برای $l = 0$ عملاً پرزحمت است. همچون در مسئلهٔ حالت مقید، استفاده از $u(r) = rR(r)$ محاسبه را تا حد زیادی ساده می‌کند. تنها کافی است $A\sin kr$ را با $B\sin kr + C$ در $r = a$ جور کنیم تا رابطه‌ای برای $\tan\delta_0$ به‌دست آید.

www.arsanjan.blogfa.com



شکل ۱۰ـ۳ جواب پیوستار $u(r) = rR(r)$ برای پتانسیل جاذبه (با $l = 0$).



شکل ۱۰ـ۴ جواب پیوستار $u(r) = rR(r)$ برای پتانسیل دافعه (با $l = 0$).

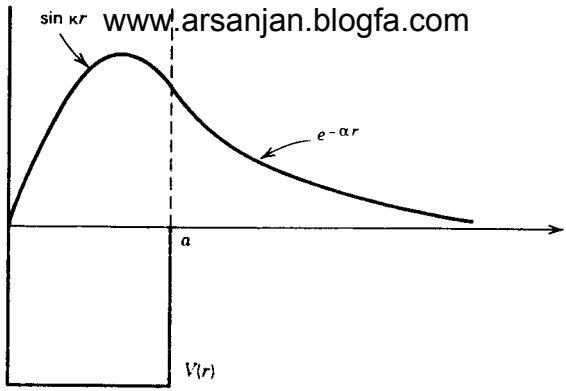
برای این مورد، نمودار کلی نتایج را در شکلهای ۱۰ـ۳ و ۱۰ـ۴ ترسیم کرده‌ایم. این شکلها نشان می‌دهند که پتانسیل جاذبه تمایل دارد تابع‌موج را "به‌درون بکشد"، در حالی‌که پتانسیل دافعه می‌خواهد آن‌را "به بیرون براند". در فصل ۴، در بحث نظریهٔ برخورد، به این مطالب باز می‌گردیم.

چاه مربعی، حالتهای مقید

می‌خواهیم جوابهای حالت مقید را، که برای آنها $E < 0$، به‌دست آوریم. می‌نویسیم

$$\frac{2\mu}{\hbar^2}(V_0 + E) = \kappa^2$$
$$\frac{2\mu}{\hbar^2}E = -\alpha^2 \qquad (۱۰\text{ـ}۹۰)$$

www.arsanjan.blogfa.com



شکل ۱۰ـ۵ نمودار کلی تابع‌موج $u(r) = rR(r)$ برای چاه مربعی جاذبه وقتی تنها یک حالت مقید وجود دارد (با $l = 0$).

جواب در $r < a$، که باید در مبدأ منظم باشد، عبارت است از

$$R(r) = Aj_l(\kappa r) \qquad (۹۱_۱۰)$$

جواب در $r > a$ باید به‌ازای $r \to \infty$ صفر شود. معادلهٔ دوم ۱۰ـ۸۱ درست معادلهٔ مربوط به این تابع بسل کروی است بجز اینکه $i\alpha$ به‌جای k می‌نشیند. جوابی که مانند e^{ikr} رفتار می‌کند اکنون نمایی نزولی می‌شود، یعنی برای $r > a$ داریم

$$R(r) = Bh_l^{(1)}(i\alpha r) \qquad (۹۲_۱۰)$$

این دو جواب، و همچنین مشتقهای آنها، باید در $r = a$ جور شوند. بنابراین، شرط زیر را به‌دست می‌آوریم

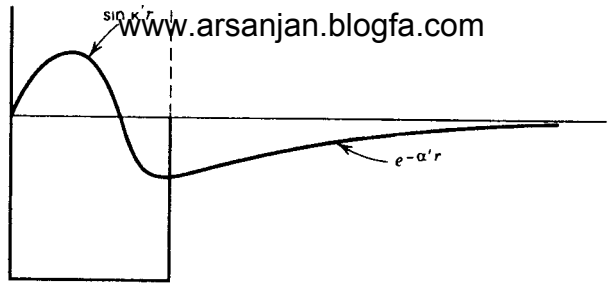
$$\kappa \left[\frac{dj_l(\rho)/d\rho}{j_l(\rho)}\right]_{\rho=\kappa a} = i\alpha \left[\frac{dh_l^{(1)}(\rho)/d\rho}{h_1^{(1)}(\rho)}\right]_{\rho=i\alpha a} \qquad (۹۳_۱۰)$$

این یک معادلهٔ غیرجبری بسیار پیچیده است که در آن l، V_0 و E دخیل‌اند. به‌ازای $l = 0$ مسئله بسیار ساده می‌شود. برحسب $u(r) = rR(r)$، باز هم به وضعیتی می‌رسیم که با پتانسیل یک‌بعدی با $V(x) = \infty$ در $x < 0$ یکسان است. از فصل ۵ (رابطهٔ ۵ـ۶۹) می‌دانیم که در این مورد تنها به شرطی یک یا چند حالت مقید داریم که

$$\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} > \frac{\pi^2}{4}$$

شکلهای ۱۰ـ۵ و ۱۰ـ۶ توابع موج مربوط به دو حالت مقید اول را به‌ازای $l = 0$ نشان می‌دهند.

www.arsanjan.blogfa.com



شکل ۱۰ـ۶ نمودار کلی تابع‌موج $u(r) = rR(r)$ برای چاه مربعی جاذبه وقتی دو حالت مقید وجود دارند (با $l = 0$). در اینجا تنها تابع‌موج مربوط به دومین حالت مقید ترسیم شده است.

مسائل

۱۰ـ۱ تحقیق کنید که P_i، R_i، p_i و r_i در روابط جابه‌جایی ۱۰ـ۷ صدق می‌کنند.

۱۰ـ۲ فرض کنید دوترون (متشکل از یک نوترون و یک پروتون، با جرم مساوی) یک حالت مقید با $l = 0$ است، و پتانسیل یک چاه مربعی به گسترهٔ $r_0 = 2{,}8 \times 10^{-13}\,\mathrm{cm}$ است. اگر انرژی بستگی $-2{,}18\,\mathrm{MeV}$ باشد، عمق پتانسیل را به‌دست آورید.

[راهنمایی: حول انرژی بستگی صفر که برای آن V_0 با ۴۱ـ۵ داده می‌شود بسط دهید.]

۱۰ـ۳ انتقال فاز $l = 0$ را برای چاه پتانسیل مربعی محاسبه کنید. با استفاده از روشی که در ۱۰ـ۸۵ خلاصه شده است، مورد پتانسیل جاذبه و دافعه را به‌تفصیل بررسی کنید. دربارهٔ حدهای مختلف، مانند مقادیر بزرگ و کوچک E، و مقادیر بزرگ و کوچک V_0، بحث کنید.

۱۰ـ۴ نشان دهید برای پراکندگی $l = 0$ از یک چاه مستطیلی با گسترهٔ اختیاری و عمق V_0 همواره می‌توان انتقال فاز را به‌صورت زیر نوشت

$$k \cot \delta_0 = -\frac{1}{a} + \frac{r_{\mathrm{eff}} k^2}{2} + O(k^4)$$

رابطه‌ای برای a و r_{eff} برحسب پارامترهای چاه به‌دست آورید.

۱۰ـ۵ یک پتانسیل با صورت اختیاری که به‌ازای $r \geq a$ صفر می‌شود در نظر بگیرید. فرض کنید مشتق لگاریتمی تابع شعاعی در داخل چاه، یعنی

$$\frac{1}{R}\frac{dR(r)}{dr}\bigg|_{r=a} = f_l(E)$$

برحسب انرژی به کندی تغییر می‌کند. برای $l = 0$:

(الف) اگر پتانسیل دارای حالت مقیدی با انرژی E_B باشد، مقدار $f_0(E_B)$ را محاسبه کنید.

www.arsanjan.blogfa.com

(ب) اگر $f_0(E)$ مستقل از E باشد، انتقال فاز را برحسب انرژی به‌دست آورید.
(ج) اگر $f_0(E) = f_0(E_B) + (E - E_B)f_0'$، f_0' چگونه در انتقال فاز وارد می‌شود؟ ساده‌تر این است که (ب) و (ج) را برحسب $k \cot \delta_0(k)$ حل کنید، و این راه بهتری برای ارائهٔ نتایج است.

۱۰ـ۶ پتانسیل زیر را در نظر بگیرید

$$V(r) = \infty \qquad r < a$$
$$V(r) = 0 \qquad r > a$$

انتقال فاز $l = 0$ را محاسبه کنید، و آن‌را در حد مقادیر بسیار کوچک ka و همچنین در حد مقادیر بسیار بزرگ ka به‌دست آورید. توجه کنید که این پتانسیل الگویی برای کرهٔ نفوذناپذیر است.

۱۰ـ۷ شرط ویژه‌مقدار مربوط به یک چاه پتانسیل مربعی به گسترهٔ a و عمق V_0 را به‌ازای $l = 1$ در نظر بگیرید. رابطه‌ای به‌دست آورید که از آن بتوانید مقدار V_0 را برای انرژی بستگی صفر تعیین کنید.

۱۰ـ۸ نشان دهید که برای چاه مربعی وقتی $k \to 0$، داریم

$$k^{2l+1} \cot \delta_l(k) \to \text{const.}$$

۱۰ـ۹ شار سه‌بعدی با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$\mathbf{j} = \frac{h}{2i\mu}[\psi^*(\mathbf{r})\nabla\psi(\mathbf{r}) - \nabla\psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})]$$

انتگرال شار شعاعی روی تمام زاویه‌ها، یعنی $\int d\Omega \mathbf{i}_r \cdot \mathbf{j}$، را برای توابع موج

$$\psi(\mathbf{r}) = C\frac{e^{\pm ikr}}{r}Y_{lm}(\theta, \phi)$$

با

$$\int d\Omega |Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 = 1$$

محاسبه کنید، و نشان دهید این توابع به امواج کروی ورودی و یا خروجی مربوط می‌شوند.

۱۰ـ۱۰ نشان دهید شار در راستای سمتی، $\mathbf{i}_\theta \cdot \mathbf{j}$، در مقایسه با j_r به‌ازای مقادیر بسیار بزرگ r قابل چشمپوشی است.

www.larsanjan.blogfa.com

۱۰ـ۱۱ معادلهٔ شعاعی $\ell = 0$ برای پتانسیل مورس (که به‌صورت زیر نامیده می‌شود) در نظر بگیرید

$$V(r) = V_0 [e^{-2(r-r_0)/a} - 2e^{-(r-r_0)/a}]$$

ویژه‌مقدارهای انرژی را با ساده کردن معادلهٔ دیفرانسیل به‌دست آورید. این کار را با وارد کردن متغیر جدید $x = Ce^{-r/a}$ انجام دهید که در آن C چنان انتخاب می‌شود که معادله تا حد امکان ساده شود. سپس معادله را به روشی که برای مسئلهٔ نوسانگر هماهنگ ساده در فصل ۵ به‌کار برده شد بررسی کنید.

پتانسیل را ترسیم کنید. نشان دهید برای پتانسیل عریض و عمیق حالتهای مقید پایین تقریباً همان حالتهای نوسانگر هماهنگ هستند، و علت را توضیح دهید.

مراجع

خواص عمومی معادلات دیفرانسیل مرتبهٔ دوم در زمینهٔ مکانیک کوانتومی در کتاب زیر بررسی شده‌اند.

پاول جی ل و ب کریسمن، مکانیک کوانتومی، ترجمهٔ پاشایی راد و سعادت، تهران، مرکز نشر دانشگاهی، ۱۳۶۸.

بحث جامعی دربارهٔ این معادله‌ها را می‌توان در کتاب زیر ملاحظه کرد

P M Morse and H Feshbach, *Methods of Theoretical Physics*, McGraw-Hill, New York, 1953.

www.arsanjan.blogfa.com

۱۱

تکانهٔ زاویه‌ای

عملگرهای تکانهٔ زاویه‌ای در مختصات کروی

در این فصل ویژه‌مقدارها و ویژه‌تابعهای عملگرهای L_z و $\mathbf{L}^2$ را به‌دست می‌آوریم. چون تکانهٔ زاویه‌ای دارای ابعاد h است، می‌توان معادله‌های ویژه‌مقداری را به‌صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} L_z Y_{lm} &= m\hbar Y_{lm} \\ \mathbf{L}^2 Y_{lm} &= l(l+1)\hbar^2 Y_{lm} \end{aligned} \qquad (۱\text{-}۱۱)$$

که در آن m و $l(l+1)$ اعداد حقیقی هستند. مناسبت نوشتن ویژه‌مقدار $\mathbf{L}^2$ به‌این صورت خاص بعداً معلوم خواهد شد. چند روش برای محاسبه وجود دارند. روش مرسوم این است که مؤلفه‌های $\mathbf{L}$ را در مختصات کروی بنویسیم. داریم

$$\begin{aligned} x &= r\ \sin\ \theta\ \cos\ \phi \\ y &= r\ \sin\ \theta\ \sin\ \phi \\ z &= r\ \cos\ \theta \end{aligned} \qquad (۲\text{-}۱۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com

در نتیجه

$$\begin{aligned} dx &= \sin\theta\cos\phi\,dr + r\cos\theta\cos\phi\,d\theta - r\sin\theta\sin\phi\,d\phi \\ dy &= \sin\theta\sin\phi dr + r\cos\theta\sin\phi\,d\theta + r\sin\theta\cos\phi\,d\phi \\ dz &= \cos\theta\,dr - r\sin\theta\,d\theta \end{aligned} \qquad (۳_۱۱)$$

که از حل آنها به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} dr &= \sin\theta\cos\phi\,dx + \sin\theta\sin\phi\,dy + \cos\theta\,dz \\ d\theta &= \frac{۱}{r}(\cos\theta\cos\phi\,dx + \cos\theta\sin\phi\,dy - \sin\theta\,dz) \\ d\phi &= \frac{۱}{r\sin\theta}(-\sin\phi\,dx + \cos\phi\,dy) \end{aligned} \qquad (۴_۱۱)$$

با استفاده از این معادله‌ها نتیجه می‌گیریم که

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\phi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\phi} \\ &= \sin\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{۱}{r}\cos\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \sin\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{۱}{r}\cos\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} \\ \frac{\partial}{\partial z} &= \cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} \end{aligned} \qquad (۵_۱۱)$$

بنابراین،

$$L_z = \frac{h}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = \frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial\phi} \qquad (۶_۱۱)$$

با معرفی عملگرهای زیر می‌توان دو مؤلفهٔ دیگر تکانهٔ زاویه‌ای را فشرده‌تر بیان کرد

$$L_\pm = L_x \pm iL_y \qquad (۷_۱۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com

در مختصات دکارتی و کروی داریم

$$
\begin{aligned}
L_{\pm} &= \frac{h}{i}\left[y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y} \pm i\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\right] \\
&= \frac{h}{i}\left[\pm iz\left(\frac{\partial}{\partial x} \pm i\frac{\partial}{\partial y}\right) \mp i(x \pm iy)\frac{\partial}{\partial z}\right] \\
&= \pm hr\ \cos\theta\left(\sin\theta\, e^{\pm i\phi}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\theta\, e^{\pm i\phi}\frac{\partial}{\partial\theta} \pm \frac{i\, e^{\pm i\phi}}{r\ \sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \\
&\quad \mp hr\ \sin\theta\, e^{\pm i\phi}\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right)
\end{aligned}
\tag{۸ـ۱۱}
$$

بنابراین،

$$
L_{\pm} = h\, e^{\pm i\phi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\ \cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{۹ـ۱۱}
$$

اکنون با استفاده از رابطهٔ

$$
\begin{aligned}
L_+L_- &= (L_x + iL_y)(L_x - iL_y) \\
&= L_x^2 + L_y^2 - i[L_x, L_y]
\end{aligned}
\tag{۱۰ـ۱۱}
$$

عملگر $\mathbf{L}^2$ را به‌صورت زیر به‌دست می‌آوریم

$$
\begin{aligned}
\mathbf{L}^2 &= L_z^2 + L_+L_- + i[L_x, L_y] \\
&= L_+L_- + L_z^2 - hL_z
\end{aligned}
\tag{۱۱ـ۱۱}
$$

در سطر دوم از ۱۰ـ۲۴ استفاده کرده‌ایم. بدین‌ترتیب، یک عملگر دیفرانسیلی مرتبهٔ دوم شامل θ و ϕ به‌دست می‌آید، و اکنون می‌توانیم به حل معادله‌های دیفرانسیلی مربوط به ۱۱ـ۱ بپردازیم. حل این معادله‌ها در بسیاری از کتابهای درسی مکانیک کوانتومی یا الکترودینامیک کلاسیک بیان می‌شود. در اینجا معادلهٔ دوم ۱۱ـ۱ را به‌روش جبری حل می‌کنیم، اما قبل از آن ویژه‌تابعهای L_z را به‌دست می‌آوریم.

www.arsanjan.blogfa.com

ویژه‌تابعها و ویژه‌مقدارهای L_z

معادلهٔ ویژه‌مقداری

$$L_z Y_{lm} = mhY_{lm} \qquad (۱۲_۱۱)$$

با استفاده از ۱۱ـ۶ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{\partial}{\partial\phi} Y_{lm}(\theta,\phi) = imY_{lm}(\theta,\phi) \qquad (۱۳_۱۱)$$

و در نتیجه جواب به‌صورت $Y_{lm}(\theta,\phi) = \Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\phi)$ است، که در آن $\Phi_m(\phi)$ جواب معادلهٔ زیر است

$$\frac{d\Phi_m(\phi)}{d\phi} = im\Phi_m(\phi) \qquad (۱۴_۱۱)$$

این جواب با شرط بهنجارش

$$\int_0^{2\pi} d\phi|\Phi_m|^2 = 1 \qquad (۱۵_۱۱)$$

عبارت است از

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \qquad (۱۶_۱۱)$$

گاهی گفته می‌شود که چون چرخش ۳۶۰ درجه‌ای، یعنی تبدیل $\phi \to \phi + 2\pi$، نباید تغییری در دستگاه ایجاد کند لازم است که

$$e^{2\pi im} = 1 \qquad (۱۷_۱۱)$$

و در نتیجه m یک عدد درست است. این استدلال کاملاً صحیح نیست، زیرا کمیتهایی که در مشاهده‌پذیرهای فیزیکی وارد می‌شوند از نوع $\int_0^{2\pi} d\phi\ \psi_1^*(\phi)\ A\psi_2(\phi)$ هستند که در آن توابع موج $\psi(\phi)$ به‌صورت زیر بیان می‌شوند

$$\psi(\phi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} C_m \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}} \qquad (۱۸_۱۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com

اگر بخواهیم این توابع موج اختیاری تحت تبدیل $\phi \to \phi + 2\pi$ تغییر نکنند (بجز برای یک عامل فازکلی) به این نتیجه می‌رسیم که کلی‌ترین مقادیر مجاز m عبارت‌اند از $m = \text{عددِدرست} + c$، که c در اینجا یک مقدار ثابت است. تنها اگر عملگر L_z را بخشی از کل مجموعهٔ (L_x, L_y, L_z) در نظر بگیریم می‌توان چیزی دربارهٔ ثابت c گفت. بعداً استدلال خواهیم کرد که ویژه‌مقدارها حول صفر به‌صورت متقارن توزیع شده‌اند، و در نتیجه $c = 0$ یا $c = 1/2$، و برای عملگرهای این فصل تنها مقدار $c = 0$، یعنی این شرط که m یک عدد درست است، را می‌پذیریم.

معادلهٔ ویژه‌مقداری L_z در زمینهٔ دیگری نیز ظاهر می‌شود. یک چرخندهٔ کلاسیک را در نظر بگیرید که در صفحهٔ xy می‌چرخد. اگر گشتاور لختی I باشد، انرژی آن برابر است با

$$E = \frac{L_z^2}{2I} \qquad (۱۹_۱۱)$$

و در نتیجه هامیلتونی عبارت است از

$$H = \frac{L_z^2}{2I} \qquad (۲۰_۱۱)$$

اما به‌آسانی می‌توان دید که ویژه‌مقدارهای این هامیلتونی به‌صورت زیر هستند

$$E_m = \frac{h^2 m^2}{2I} \qquad (۲۱_۱۱)$$

و ویژه‌تابعها عبارت‌اند از $e^{\pm im\phi}$. واگنی وجود دارد، زیرا H با L_z جابه‌جا می‌شود، و به‌ازای یک مقدار معین E_m دو ویژه‌تابع متناظر با دو جهت چرخش وجود دارند. اگر N ذره را با فاصله‌های زاویه‌ای مساوی $2\pi/N$ روی یک دایره به‌طور صلب مستقر کنیم، و اگر این ذرات یکسان باشند، جواب معادلهٔ ویژه‌مقداری انرژی

$$H\Phi_E(\phi) = E\Phi_E(\phi) \qquad (۲۲_۱۱)$$

باز هم به‌صورت $e^{\pm i\lambda\phi}$ خواهد بود. این دستگاه فیزیکی تحت چرخش $2\pi/N$ رادیان (یا مضرب درستی از این زاویه) بدون تغییر می‌ماند، و جوابها باید حاکی از این ناوردایی باشند. همان نوع استدلالهایی که نشان می‌دهند m باید یک عدد درست باشد اکنون ایجاب می‌کنند که $\lambda = N \times$ (عدد درست). بنابراین[۱]، انرژی برابر است با

$$E = \frac{h^2 (Nm)^2}{2I} \qquad (۲۳_۱۱)$$

۱. شاید لازم باشد آزمایش ذهنی دیکی-ویتکه در فصل ۱ را دوباره مرور کنید.

www.arsanjan.blogfa.com

عملگرهای افزاینده و کاهنده برای تکانهٔ زاویه‌ای

اکنون به معادله‌های ۱۱ـ۱ بازمی‌گردیم، و می‌خواهیم ویژه‌مقدارها را به روشی شبیه به مورد نوسانگر هماهنگ در فصل ۷ به‌دست آوریم. ویژه‌تابعهای عملگرهای هرمیتی L_z و $\mathbf{L}^2$، مربوط به ویژه‌مقدارهای مختلف، متعامد هستند، و با بهنجارش مناسب می‌نویسیم

$$\langle Y_{l'm'}|Y_{lm}\rangle = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \qquad (۲۴_۱۱)$$

از آنجا که

$$\langle Y_{lm}|(L_x^2+L_y^2+L_z^2)Y_{lm}\rangle = \langle L_xY_{lm}|L_xY_{lm}\rangle + \langle L_yY_{lm}|L_yY_{lm}\rangle + m^2\hbar^2 \geq 0 \qquad (۲۵_۱۱)$$

نتیجه می‌گیریم که

$$l(l+1) \geq 0 \qquad (۲۶_۱۱)$$

عملگرهای $L_\pm$ که در ۱۱ـ۷ معرفی شدند در تحلیل زیر بسیار مفیدند، و خواهیم دید که در واقع عملگرهای افزاینده و کاهنده هستند. قبلاً دیدیم که

$$\mathbf{L}^2 = L_+L_- + L_z^2 - \hbar L_z \qquad (۲۷_۱۱)$$

و می‌توان نشان داد که

$$\mathbf{L}^2 = L_-L_+ + L_z^2 + \hbar L_z \qquad (۲۸_۱۱)$$

از این دو رابطه، و همچنین مستقیماً از ۱۰ـ۲۴، به‌دست می‌آوریم

$$[L_+, L_-] = 2\hbar L_z \qquad (۲۹_۱۱)$$

سایر رابطه‌های جابه‌جایی مربوط عبارت‌اند از

$$[L_+, L_z] = [L_x + iL_y, L_z] = -i\hbar L_y - \hbar L_x = -\hbar L_+ \qquad (۳۰_۱۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com

و

$$[L_-, L_z] = \hbar L_- \qquad (۳۱_۱۱)$$

همچنین، با توجه به $[\mathbf{L}^۲, \mathbf{L}] = ۰$ نتیجه می‌گیریم که

$$\begin{aligned} [\mathbf{L}^۲, L_\pm] &= ۰ \\ [\mathbf{L}^۲, L_z] &= ۰ \end{aligned} \qquad (۳۲_۱۱)$$

بنابراین، می‌توان نوشت

$$\mathbf{L}^۲ L_\pm Y_{lm} = L_\pm \mathbf{L}^۲ Y_{lm} = l(l+۱)\hbar^۲ L_\pm Y_{lm} \qquad (۳۳_۱۱)$$

و این نشان می‌دهد که $L_\pm Y_{lm}$ نیز ویژه‌تابعهای $\mathbf{L}^۲$ با ویژه‌مقداری هستند که با l مشخص می‌شود. از طرف دیگر، داریم

$$\begin{aligned} L_z L_+ Y_{lm} &= (L_+ L_z + \hbar L_+) Y_{lm} \\ &= m\hbar L + Y_{lm} + \hbar L_+ Y_{lm} \\ &= \hbar(m+۱) L_+ Y_{lm} \end{aligned} \qquad (۳۴_۱۱)$$

بنابراین، $L_+ Y_{lm}$ نیز ویژه‌تابع L_z با ویژه‌مقدار $\hbar(m+۱)$ است، یعنی به m یک واحد افزوده شده است. به‌همین ترتیب، می‌توان نشان داد

$$L_z L_- Y_{lm} = \hbar(m-۱) L_- Y_{lm} \qquad (۳۵_۱۱)$$

پس $L_- Y_{lm}$ ویژه‌تابع L_z است در حالی‌که از m یک واحد کاسته شده است. از این‌رو، L_+ و L_- را به ترتیب عملگرهای افزاینده و کاهنده می‌نامیم. می‌توان نوشت

$$L_\pm Y_{lm} = C_\pm(l,m) Y_{l,m\pm۱} \qquad (۳۶_۱۱)$$

با توجه به هرمیتی بودن L_x و L_y داریم

$$L_\pm^\dagger = (L_x \pm i L_y)^\dagger = L_x \mp i L_y = L_\mp \qquad (۳۷_۱۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com

بنابراین، می‌توان رابطهٔ

$$\langle L_{\pm}Y_{lm}|L_{\pm}Y_{lm}\rangle \geq ۰ \qquad (۳۸_۱۱)$$

را به‌صورت زیر نوشت

$$\langle Y_{lm}|L_{\mp}L_{\pm}Y_{lm}\rangle \geq ۰ \qquad (۳۹_۱۱)$$

و در نتیجه با استفاده از ۱۱ـ۲۷ و ۱۱ـ۲۸ به‌دست می‌آوریم

$$\langle Y_{lm}|(\mathbf{L}^{۲} - L_z^{۲} \pm \hbar L_z)Y_{lm}\rangle \geq ۰ \qquad (۴۰_۱۱)$$

که نشان می‌دهد

$$\begin{aligned} l(l+۱) &\geq m^{۲} + m \\ l(l+۱) &\geq m^{۲} - m \end{aligned} \qquad (۴۱_۱۱)$$

چون $l(l+۱) \geq ۰$، می‌توانیم بدون نقض کلیت قرار دهیم $l \geq ۰$.[۲] بنابراین، از ۱۱ـ۴۱ نتیجه می‌گیریم که

$$-l \leq m \leq l \qquad (۴۲_۱۱)$$

اگر m یک مقدار کمینه (m_-) داشته باشد، آنگاه برای ویژه‌حالت مربوط داریم

$$L_-Y_{lm_-} = ۰ \qquad (۴۳_۱۱)$$

برای محاسبهٔ m_-، ۱۱ـ۲۷ را بر Y_{lm} اعمال می‌کنیم و به‌دست می‌آوریم

$$l(l+۱)h^{۲} = {m_-}^{۲}h^{۲} - m_-h^{۲} \qquad (۴۴_۱۱)$$

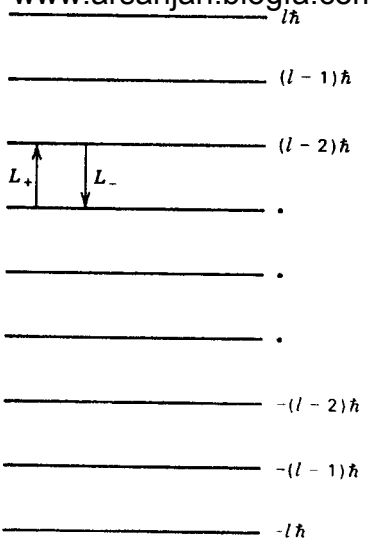
به‌همین ترتیب، اگر m بیشینه‌ای داشته باشد (m_+) باید

$$L_+Y_{lm_+} = ۰ \qquad (۴۵_۱۱)$$

---

۲. اگر $l+۱ \geq ۰$ را بگیریم کافی است تعریف کنیم $L = -l-۱$ و به‌جای l قدیمی L مثبت جدید را قرار دهیم. چیزی تغییر نمی‌کند زیرا $L(L+۱) = l(l+۱)$.

www.arsanjan.blogfa.com



شکل ۱۱ـ۱ طیف عملگر L_z برای یک مقدار معین l.

و از اعمال ۱۱ـ۲۸ بر Y_{lm_+} به‌دست می‌آوریم

$$l(l+1)\hbar^2 = m_+^2\hbar^2 + m_+\hbar^2 \qquad (۴۶_۱۱)$$

در نتیجه

$$\begin{aligned} m_- &= -l \\ m_+ &= +l \end{aligned} \qquad (۴۷_۱۱)$$

چون مقدار بیشینه باید از مقدار کمینه با گامهای واحد (اعمال مکرر L_+) به‌دست آید، معلوم می‌شود که (شکل ۱۱ـ۱): (الف) به‌ازای یک l معین $(2l+1)$ حالت وجود دارند، یعنی $2l+1$ یک عدد درست است. و (ب) m می‌تواند مقادیر زیر را بگیرد

$$m = -l, -l+1, -l+2, \ldots, l-1, l$$

امکان نیم فرد بودن l، یعنی $l = 1/2, 3/2, \ldots$، را در فصل ۱۴ در بحث اسپین بررسی می‌کنیم. در این فصل تنها مقادیر درست l را در نظر می‌گیریم.

همچنین می‌توان ضرایب $C_\pm(l,m)$ را که در (۱۱ـ۳۶) وارد می‌شوند محاسبه کرد. می‌نویسیم

www.arsanjan.blogfa.com

$$\begin{aligned}|C_\pm(l,m)|^2\langle Y_{l,m\pm1}|Y_{l,m\pm1}\rangle &= \langle L_\pm Y_{lm}|L_\pm Y_{lm}\rangle \\ &= \langle Y_{lm}|L_\mp L_\pm Y_{lm}\rangle \\ &= \langle Y_{lm}|\mathbf{L}^2 - L_z^2 \mp \hbar L_z)Y_{lm}\rangle \\ &= \hbar^2[l(l+1) - m(m\pm1)]\end{aligned}$$

بنابراین، با انتخاب فاز مناسب، به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}C_+(l,m) &= \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m+1)} = \hbar\sqrt{(l-m)(l+m+1)} \\ C_-(l,m) &= \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m-1)} = \hbar\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\end{aligned} \qquad (۴۸_۱۱)$$

هماهنگهای کروی

آنچه را می‌توان از روشهای عملگری به‌دست آورد در بالا گفتیم. اکنون با استفاده از صورت صریح عملگرهای L_z و $L_\pm$ رابطه‌های مربوط به ویژه‌تابعهای $\mathbf{L}^2$ را برحسب زاویه‌های θ و ϕ به‌دست می‌آوریم. این مشابه با مورد ۷ـ۵۰ تا ۷ـ۵۳ است. بنابه آنچه قبلاً گفتیم، می‌نویسیم

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = \Theta_{lm}(\theta)e^{im\phi} \qquad (۴۹_۱۱)$$

و رابطهٔ ۱۱ـ۴۵ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\hbar\, e^{i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\,\cot\,\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\Theta_{ll}(\theta)e^{il\phi} = \hbar\, e^{i(l+1)\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - l\,\cot\,\theta\right)\Theta_{ll}(\theta) = 0 \qquad (۵۰_۱۱)$$

به‌سادگی می‌توان دید که جواب این معادله، با تقریب یک ضریب ثابت که آن‌را بعداً از شرط بهنجارش به‌دست می‌آوریم، عبارت است از

$$\Theta_{ll}(\theta) = (\sin\,\theta)^l \qquad (۵۱_۱۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com

هر حالت اختیاری را می‌توان با اعمال عملگر کاهنده به‌دست آورد:

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = C(L_-)^{l-m}(\sin\ \theta)^l e^{il\phi} \qquad (۵۲\text{-}۱۱)$$

ابتدا می‌نویسیم

$$\begin{aligned} L_-Y_{ll}(\theta,\phi) &= h\ e^{-i\phi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\ \cot\ \theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)(\sin\ \theta)^l e^{il\phi} \\ &= h\ e^{i(l-1)\phi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} - l\ \cot\ \theta\right)(\sin\ \theta)^l \end{aligned}$$

اما برای یک تابع اختیاری $f(\theta)$ می‌توان نشان داد

$$\left(\frac{d}{d\theta} + l\ \cot\ \theta\right) f(\theta) = \frac{1}{(\sin\ \theta)^l}\frac{d}{d\theta}\left[(\sin\ \theta)^l f(\theta)\right] \qquad (۵۳\text{-}۱۱)$$

و در نتیجه داریم

$$Y_{l,l-1} = C'\frac{e^{i(l-1)\phi}}{(\sin\ \theta)^l}\left(-\frac{d}{d\theta}\right)\left[(\sin\ \theta)^l(\sin\ \theta)^l\right] \qquad (۵۴\text{-}۱۱)$$

مرحلهٔ بعد نیز از همین قرار است، بجز اینکه به‌جای l می‌گذاریم $l-1$ و ۱۱ـ۵۳ را بر ۱۱ـ۵۴ اعمال می‌کنیم:

$$\begin{aligned} Y_{l,l-2} &= C''\frac{e^{i(l-2)\phi}}{(\sin\ \theta)^{l-1}}\left(-\frac{d}{d\theta}\right)\left[(\sin\ \theta)^{l-1}\frac{1}{(\sin\ \theta)^l}\left(-\frac{d}{d\theta}\right)(\sin\ \theta)^{2l}\right] \\ &= C''(-1)^2\frac{e^{i(l-2)\phi}}{(\sin\ \theta)^{l-1}}\frac{d}{d\theta}\left[\frac{1}{\sin\ \theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\ \theta)^{2l}\right] \qquad (۵۵\text{-}۱۱) \end{aligned}$$

با واردکردن متغیر جدید $u = \cos\theta$ داریم $d/du = -1/(\sin\ \theta)(d/d\theta)$، و رابطه‌های ۱۱ـ۵۴ و ۱۱ـ۵۵ به‌صورت زیر درمی‌آیند

$$\begin{aligned} Y_{l,l-1} &= C'\frac{e^{i(l-1)\phi}}{(\sin\ \theta)^{l-1}}\frac{d}{du}[(1-u^2)^l] \\ Y_{l,l-2} &= C''\frac{e^{i(l-2)\phi}}{(\sin\ \theta)^{l-2}}\frac{d^2}{du^2}[(1-u^2)^l] \end{aligned} \qquad (۵۶\text{-}۱۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com

رابطهٔ کلی عبارت است از

$$Y_{lm} = C\frac{e^{im\phi}}{(\sin\ \theta)^m}\left(\frac{d}{du}\right)^{l-m}[(1-u^2)^l] \qquad (۵۷_۱۱)$$

ویژه‌تابعها را باید بهنجارکنیم. چون با زاویه‌های کروی کار می‌کنیم، که گسترهٔ انتگرال‌گیری روی آنها $0 \leq \phi \leq 2\pi$ و $0 \leq \theta \leq \pi$ است (شکل ۱۰ـ۱)، و در اینجا انتگرال روی سطح کره (با $r = \text{const.}$) عبارت است از

$$\int d\Omega = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\ \theta\, d\theta \qquad (۵۸_۱۱)$$

باید بنویسیم

$$\langle Y_{lm}|Y_{lm}\rangle = 1 = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{1} du|C|^2\left[\frac{1}{(1-u^2)^{m/2}}\left(\frac{d}{du}\right)^{l-m}(1-u^2)^l\right]^2$$

محاسبهٔ این انتگرال پرزحمت است، و به نوشتن ویژه‌تابعهای بهنجارشده، با فازهایی که بنابه قرارداد به‌کار می‌روند، بسنده می‌کنیم: به‌ازای $m \geq 0$ داریم

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = (-1)^m\left[\frac{2l+l}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right]^{1/2}P_1^m(\cos\ \theta)e^{im\phi} \qquad (۵۹_۱۱)$$

علاوه بر این،

$$Y_{l,-m} = (-1)^m Y_{lm}^* \qquad (۶۰_۱۱)$$

چندجمله‌ایهای لژاندر وابسته (به‌ازای $m \geq 0$) با رابطهٔ زیر داده می‌شوند

$$P_1^m(u) = (-1)^{l+m}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\frac{(1-u^2)^{-m/2}}{2^l l!}\left(\frac{d}{du}\right)^{l-m}(1-u^2)^l \qquad (۶۱_۱۱)$$

و برای مقادیر منفی m داریم

$$P_l^{-m}(u) = (-1)^m\frac{(l-m)!}{(1+m)!}P_l^m(u) \qquad (۶۲_۱۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com

به‌ازای $m = l$ (یا $m = -l$)، به‌دست می‌آوریم

$$Y_{ll}(\theta, \phi) = K (\sin\ \theta)^l e^{il\phi}$$

که در آن K مقداری ثابت است. بنابراین، توزیع احتمال برحسب زاویهٔ قطبی نسبت به محور z به‌صورت زیر است

$$|Y_{ll}|^2 = K^2 (\sin\ \theta)^{2l} \qquad (۶۳_۱۱)$$

مشاهده می‌کنیم که برای مقادیر بزرگ l این تابع تقریباً به صفحهٔ استوایی محدود است. در واقع، بیشترین مقدار L_z به‌ازای $m = l$ روی می‌دهد، و از این‌رو $\mathbf{L}^2 \approx L_z^2$. در حد کلاسیک، که در آن $l \gg 1$، داریم

$$\frac{\mathbf{L}^2 - L_z^2}{\mathbf{L}^2} = \frac{1}{l} \to 0 \qquad (۶۴_۱۱)$$

یعنی می‌توان تکانهٔ زاویه‌ای را در یک راستای خاص (در اینجا محور z) قرار داد. این هم‌راستایی متناظر است با اینکه $\langle L_x^2 \rangle = \langle L_y^2 \rangle = 0$، که وقتی اثرات مکانیک کوانتومی مهم می‌شوند غیرممکن است (به‌علت رابطه‌های جابه‌جایی).

چند ویژه‌تابع را در زیر می‌نویسیم

$$\begin{aligned}
Y_{0,0} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\
Y_{1,1} &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{i\phi} \sin\ \theta \\
Y_{1,0} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\ \theta \\
Y_{2,2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} e^{2i\phi} \sin^2 \theta \\
Y_{2,1} &= -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} e^{i\phi} \sin\theta\ \cos\ \theta \\
Y_{2,0} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\ \cos^2 \theta - 1)
\end{aligned} \qquad (۶۵_۱۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com

قضیهٔ بسط

$Y_{lm}(\theta,\phi)$ها که توابع راست‌هنجاری از θ و ϕ هستند یک مجموعهٔ کامل تشکیل می‌دهند. بنابراین، در اینجا قضیهٔ بسط ایجاب می‌کند که هر تابعی از θ و ϕ را بتوان به‌صورت زیر بسط داد

$$f(\theta,\phi)=\sum\sum C_{lm}Y_{lm}(\theta,\phi) \qquad (۶۶_۱۱)$$

که در آن

$$C_{lm}=\int d\Omega\, Y^{*}_{lm}(\theta,\phi)f(\theta,\phi) \qquad (۶۷_۱۱)$$

و انتگرال‌گیری روی زاویهٔ فضایی با ۱۱ـ۵۸ تعریف می‌شود. همچنین بنابه قضیهٔ بسط اگر $f(\theta,\phi)$ تابع‌موج زاویه‌ای یک حالت باشد که به‌صورت زیر بهنجار شده است

$$\int d\Omega|f(\theta,\phi)|^{۲}=۱ \qquad (۶۸_۱۱)$$

آنگاه $|C_{lm}|^{۲}$ احتمال این است که از اندازه‌گیری همزمان $\mathbf{L}^{۲}$ و L_z در این حالت به‌ترتیب $l(l+۱)\hbar^{۲}$ و $m\hbar$ به‌دست آید.

احتمال به‌دست آمدن $l(l+۱)\hbar^{۲}$ از اندازه‌گیری $\mathbf{L}^{۲}$ عبارت است از

$$P(l)=\sum_{m=-l}^{l}|C_{lm}|^{۲} \qquad (۶۹_۱۱)$$

و به‌سادگی می‌توان دید که مقدار انتظاری L_z برابر است با

$$\langle\mathbf{L}_z\rangle=\sum_{l}\sum_{m=-l}^{l}m\hbar|C_{lm}|^{۲} \qquad (۷۰_۱۱)$$

قضیهٔ بسط ۱۱ـ۶۶ را با نمادنگاری مجرد زیر در نظر بگیرید

$$|\psi\rangle=\sum_{l,m}C_{lm}|Y_{lm}\rangle \qquad (۷۱_۱۱)$$

با توجه به شرط راست‌هنجاری

$$\langle Y_{l'm'}|Y_{lm}\rangle=\delta_{ll'}\delta_{mm'} \qquad (۷۲_۱۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com

به‌دست می‌آوریم

$$C_{lm} = \langle Y_{lm}|\psi\rangle \qquad (۷۳_۱۱)$$

۱۱ـ۷۱ با جاگذاری ۱۱ـ۷۳ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$|\psi\rangle = \sum_{l} \sum_{m=-۱}^{l} |Y_{lm}\rangle\langle Y_{lm}|\psi\rangle$$

بنابراین، باید

$$\sum_{l} \sum_{m=-۱}^{l} |Y_{lm}\rangle\langle Y_{lm}| = ۱ \qquad (۷۴_۱۱)$$

که در آن ۱ عملگر واحد است.

با استفاده از قضیهٔ بسط می‌توان به این پرسش که اغلب مطرح می‌شود پاسخ داد: راستای z چه ویژگی خاصی دارد؟ آیا نمی‌توان تکانهٔ زاویه‌ای را (تا جایی که ممکن است) با محور x همراستا کرد؟ پاسخ این است که این کار واقعاً امکانپذیر است. چنین حالتی، که باید در نزدیکی صفحهٔ استوایی حول محور x (در مجاورت $\phi = \pi/۲$) محدود باشد، یک ترکیب خطی خاص از Y_{lm}ها خواهد بود، و خواص فیزیکی آن دقیقاً همان خواص حالت Y_{ll} است.

موج تخت برحسب هماهنگهای کروی

جواب معادلهٔ ذرهٔ آزاد

$$\nabla^۲\psi(\mathbf{r}) + k^۲\psi(\mathbf{r}) = ۰$$

را می‌توان به‌دو صورت نوشت. یک صورت این جواب همان جواب موج تخت است:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \qquad (۷۵_۱۱)$$

راه دیگر این است که آن‌را به‌صورت یک برهم‌نهشی خطی از جوابهای پاره‌موجی بنویسیم:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum\sum A_{lm} j_l(kr)\, Y_{lm}(\theta,\phi) \qquad (۷۶_۱۱)$$

بنابراین، می‌توان A_{lm} را از ... به‌دست آورد. توجه کنید که زاویه‌های کروی θ و ϕ مختصات بردار $\mathbf{r}$ نسبت به یک راستای اختیاری هستند که آن‌را محور z می‌گیریم. اگر این محور z را با جهت $\mathbf{k}$ (که تا اینجا یک جهت اختیاری است) تعریف کنیم آنگاه می‌توان نوشت

www.arsanjan.blogfa.com

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = e^{ikr\cos\theta} \qquad (۷۷_۱۱)$$

بنابراین، سمت چپ ۱۱ـ۷۶ تابع زاویهٔ سمتی ϕ نیست و از این‌رو در سمت راست تنها جمله‌هایی با $m = ۰$ می‌توانند ظاهر شوند؛ در نتیجه، با استفاده از

$$Y_{l۰}(\theta,\phi) = \left(\frac{۲l+۱}{۴\pi}\right)^{۱/۲} P_l(\cos\theta) \qquad (۷۸_۱۱)$$

که در آن $P_l(\cos\theta)$ چندجمله‌ای لژاندر است، به‌دست می‌آوریم

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=۰}^{\infty}\left(\frac{۲l+۱}{۴\pi}\right)^{۱/۲} A_l j_l(kr) P_l(\cos\theta) \qquad (۷۹_۱۱)$$

با توجه به رابطهٔ

$$\frac{۱}{۲}\int_{-۱}^{۱} d(\cos\theta) P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) = \frac{\delta_{ll'}}{۲l+۱} \qquad (۸۰_۱۱)$$

که پیامد مستقیم رابطهٔ راست‌هنجاری برای Y_{lm}ها و ۱۱ـ۷۸ است، نتیجه می‌گیریم که

$$A_l j_l(kr) = \frac{۱}{۲}[۴\pi(۲l+۱)]^{۱/۲}\int_{-۱}^{۱} dz P_l(z) e^{ikrz} \qquad (۸۱_۱۱\text{الف})$$

دو طرف این معادله را در حد $kr \to ۰$ با هم مقایسه می‌کنیم. جملهٔ طرف چپ عبارت است از

$$A_l \frac{(kr)^l}{۱\cdot۳\cdot۵\cdot\ldots\cdot(۲l+۱)}$$

و در طرف راست، جملهٔ شامل $(kr)^l$ به‌صورت زیر است

$$\frac{۱}{۲}[۴\pi(۲l+۱)]^{۱/۲}(ikr)^l\int_{-۱}^{۱} dz\, P_l(z) z^l/l! \qquad (۸۱_۱۱\text{ب})$$

www.arsanjan.blogfa.com

انتگرال را می‌توان با توجه به اینکه $P_l(z)$ یک چندجمله‌ای درجهٔ l برحسب z است محاسبه کرد. ضریب جملهٔ مربوط به بزرگترین توان، z^l، با استفاده از ۱۱ـ۶۱ به‌دست می‌آید

$$(-1)^l \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dz}\right)^l (1-z^2)^l = \frac{2l(2l-1)(2l-2)\cdots(l+1)}{2^l l!} z^l + O(z^{l-2})$$

بنابراین، چون طرف چپ همان $P_l(z)$ است و $O(z^{l-2})$ شامل $P_{l-2}(z)$، $P_{l-4}(z)$، ... است، داریم

$$z^l = \frac{2^l l!}{2l(2l-1)(2l-2)\cdots(l+1)} P_l(z) + \text{جمله‌های شامل } P_{l-2}(z) \text{ و ماقبل}$$

با جاگذاری در ۱۱ـ۸۱ب و استفاده از ۱۱ـ۸۰، سرانجام به‌دست می‌آوریم

$$A_l \frac{(kr)^l}{1\cdot 3\cdot 5\cdot\cdots\cdot(2l+1)} = \frac{1}{2}[4\pi(2l+1)]^{1/2}(ikr)^l \frac{1}{l!} \frac{2^l l!}{2l(2l-1)(2l-2)\cdots(l+1)} \frac{2}{2l+1}$$

با تعیین Al، بسط ۱۱ـ۷۹ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos\theta) \qquad (۱۱ـ۸۲)$$

که در بحث نظریهٔ برخورد بسیار مفید است.

مسائل

۱۱ـ۱ یک مولکول از دو اتم یکسان تشکیل شده است که هر یک در حالت پایهٔ خود دارای اسپین ۰ است. در میان برانگیختگیهای ممکن این مولکول، برانگیختگیهای چرخشی را در نظر می‌گیریم. اگر این چرخش تنها حول محور z باشد، به‌طوری که $H = L_z^2/2I$، و فاصلهٔ بین اتمها را ثابت بگیریم، طیف چرخشی را به‌دست آورید. اگر اسپین اتمها ۱/۲ باشد و هر دو اتم در یک حالت اسپینی باشند، طیف به‌چه صورتی درمی‌آید؟

۱۱ـ۲ هماهنگهای کروی در ۱۱ـ۶۵ را برحسب $x = r\sin\theta\cos\phi$، $y = r\sin\theta\sin\phi$ و $z = r\cos\theta$ بیان کنید.

www.arsanjan.blogfa.com

۳ـ۱۱ $\langle Y_{lm_1}|L_x|Y_{lm_2}\rangle$ و $\langle Y_{lm_1}|L_y|Y_{lm_2}\rangle$ را محاسبه کنید.

۴ـ۱۱ $\langle Y_{lm_1}|L_x^2|Y_{lm_2}\rangle$ و $\langle Y_{lm_1}|L_y^2|Y_{lm_2}\rangle$ را محاسبه کنید.

[راهنمایی: با استفاده از ۱۱ـ۳۶ و ۱۱ـ۴۸، $\langle Y_{lm_1}|L_+^2|Y_{lm_2}\rangle$ و کمیتهای لازم دیگر را محاسبه کنید.]

۵ـ۱۱ هامیلتونی یک چرخنده با تقارن محوری با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$H = \frac{L_x^2 + L_y^2}{2I_1} + \frac{L_z^2}{2I_2}$$

ویژه‌مقدارهای H را به‌دست آورید. طیف را با فرض $I_1 > I_2$ ترسیم کنید.

۶ـ۱۱ ثابت کنید $\langle L_x^2\rangle = \langle L_y^2\rangle = 0$ فقط برای حالتی با تکانهٔ زاویه‌ای کل $l = 0$ ممکن است.

[راهنمایی: از رابطهٔ کاملیت

$$\sum\sum |Y_{lm}\rangle\langle Y_{lm}| = 1$$

استفاده کنید.]

۷ـ۱۱ اگر محور کوانتش در راستای x باشد، یعنی L_x عملگر برگزیده باشد، می‌توان نقطهٔ $\mathbf{r}$ را با زاویه‌های Θ و Φ تعریف کرد که به‌ترتیب عبارت‌اند از زاویه‌ای که بردار مکان $\mathbf{r}$ با محور x می‌سازد و زاویه‌ای که تصویر $\mathbf{r}$ روی صفحهٔ yz (عمود بر محور x) با محور y می‌سازد. هماهنگهای کروی را در این مورد با $Y_{LM}(\Theta, \Phi)$ نشان می‌دهیم، و اینها را می‌توان برحسب $Y_{lm}(\theta, \phi)$ها بسط داد:

$$Y_{LM}(\Theta, \Phi) = \sum_l \sum_m C_{lm}(L, M) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

(الف) Θ و Φ را برحسب θ و ϕ به‌دست آورید.

(ب) تابع‌موج مربوط به $M = L$ را در نظر بگیرید، و خواص $C_{lm}(L, L)$ را تا جایی که می‌توانید تعیین کنید.

۸ـ۱۱ صورت صریح هماهنگهای کروی بهنجارشدهٔ $l = 3$، Y_{33}، Y_{32}، Y_{31} و Y_{30}، را به‌دست آورید.

۹ـ۱۱ با استفاده از روشی که در این فصل به‌اختصار بیان شد، دربارهٔ چرخش در چهار بعد بحث کنید. تعمیم L در اینجا عبارت است از مجموعهٔ عملگرهایی که می‌توان آنها را به‌صورت زیر نوشت

$$L_{ij} = -i(x_i\partial_j - x_j\partial_i)$$

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن ∂_i نشاندهندهٔ $\partial/\partial x_i$ است، و i و $j = ۱, ۲, ۳$. با وارد کردن

$$(J_۱, J_۲, J_۳) = (L_{۲۳}, L_{۳۱}, L_{۱۲})$$

و

$$(K_۱, K_۲, K_۳) = (L_{۱۴}, L_{۲۴}, L_{۳۴})$$

(الف) رابطه‌های جابه‌جایی تمام این شش عملگر را بین خودشان به‌دست آورید.
(ب) نشان دهید هر یک از عملگرهای

$$\mathbf{J}^{(+)} = \frac{۱}{۲}(\mathbf{J} + \mathbf{K}); \ \mathbf{J}^{(-)} = \frac{۱}{۲}(\mathbf{J} - \mathbf{K})$$

از رابطه‌های جابه‌جایی عملگر تکانهٔ زاویه‌ای پیروی می‌کنند و با یکدیگر جابه‌جا می‌شوند. با استفاده از نتیجهٔ نهایی، بزرگترین مجموعهٔ مشاهده‌پذیرهای جابه‌جا شونده را به‌دست آورید، و از اینجا اعداد کوانتومی را که باید برای نشانگذاری ویژه‌تابعها به‌کار برده شوند تعیین کنید.

۱۱ـ۱۰ ذره‌ای در یک پتانسیل متقارن کروی در حالتی است که با بستهٔ موج زیر توصیف می‌شود

$$\psi(x, y, z) = C(xy + yz + zx)e^{-\alpha r^۲}$$

احتمال اینکه از اندازه‌گیری مجذور تکانهٔ زاویه‌ای مقدار ۰ به‌دست آید چقدر است؟ احتمال به‌دست آمدن $۶\hbar^۲$ را تعیین کنید. اگرمعلوم شود که l برابر با ۲ است، احتمالهای نسبی مربوط به $m = ۲, ۱, ۰, -۱, -۲$ را محاسبه کنید.

۱۱ـ۱۱ الگوی زیر را برای یک استوانهٔ کاملاً هموار در نظر بگیرید: این حلقه‌ای است به شعاع R متشکل از ذرات یکسان هم‌فاصله به جرم M/N، و در نتیجه جرم حلقه M و گشتاور لختی آن $MR^۲$ است. مقادیر ممکن تکانهٔ زاویه‌ای و ویژه‌مقدارهای انرژی را محاسبه کنید. اختلاف انرژی بین حالت پایه با تکانهٔ زاویه‌ای صفر و اولین حالت برانگیخته چقدر است؟ نشان دهید که این تفاضل به‌ازای $N \to \infty$ به بینهایت میل می‌کند. این نتیجه را با انرژی یک استوانهٔ "دندانه‌ای" که فاقد تقارن تحت چرخش $۲\pi/N$ رادیان است، مقایسه کنید. این مثال نشان می‌دهد که به چرخش درآوردن یک استوانهٔ کاملاً هموار غیرممکن است، و این نتیجه سازگار با این واقعیت است که برای استوانهٔ کاملاً هموار چنین چرخشی غیرقابل مشاهده است.

۱۱ـ۱۲ $\mathbf{L}^۲$ را برحسب $\partial/\partial\theta$ و $\partial/\partial\phi$ بیان کنید. معادلهٔ دیفرانسیل حاکم بر Θ_{lm} را که در ۱۱ـ۴۹ وارد شده است بنویسید.

مراجع

www.arsanjan.blogfa.com

مطالب این فصل را می‌توان در هر یک از کتابهایی که در کتابشناسی معرفی شده‌اند پیدا کرد. برای نگاهی عمیقتر به پیامدهای ناوردایی تحت چرخش، مخصوصاً مراجعه کنید به

K Gottfried, *Quantum Mechanics*, Vol 1, W A Benjamin, New York, 1966.

M E Rose, *Elementary Theory of Angular Momentum*, John Wiley & Sons, New York, 1957.

www.arsanjan.blogfa.com

۱۲

اتم هیدروژن

اتم هیدروژن از همهٔ اتمها ساده‌تر است، زیرا بیش از یک الکترون ندارد. بنابراین، معادلهٔ شرودینگر پس از جدا کردن حرکت مرکز جرم یک معادلهٔ تک‌ذره‌ای می‌شود. اتمهای هیدروژنگونه را در نظر می‌گیریم، یعنی اتمهایی که تنها یک الکترون دارند اما هسته‌های آنها می‌توانند بیشتر از یک پروتون داشته باشند. بنابراین، پتانسیل عبارت است از

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \qquad (۱_۱۲)$$

و معادلهٔ شرودینگر شعاعی به‌صورت زیر است

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right) R + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right] R = 0 \qquad (۲_۱۲)$$

تنها حالتهای مقید، یعنی جوابهای مربوط به $E < 0$، را بررسی می‌کنیم با استفاده از تعویض متغیر مناسب

$$\rho = \left(\frac{8\mu|E|}{\hbar^2}\right)^{1/2} r \qquad (۳_۱۲)$$

www.arsanjan.blogfa.com

معادله به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}R+\left(\frac{\lambda}{\rho}-\frac{1}{4}\right)R=0 \qquad (۴_۱۲)$$

که در آن پارامتر بی‌بعد λ عبارت است از

$$\lambda=\frac{Ze^2}{\hbar}\left(\frac{\mu}{2|E|}\right)^{1/2}=Z\alpha\left(\frac{\mu c^2}{2|E|}\right)^{1/2} \qquad (۵_۱۲)$$

صورت دوم معادله برای محاسبه ساده‌تر است، زیرا $\alpha=1/137$ و انرژی برحسب جرم سکون بیان شده است؛ اما صورت اول به‌روشنی نشان می‌دهد که سرعت نور c واقعاً در معادلهٔ شرودینگر ظاهر نمی‌شود، یعنی این معادله دقیقاً یک معادلهٔ غیرنسبیتی است.

طیف انرژی

معادلهٔ ۱۲ـ۴ را به روشی که دیگر با آن آشنا هستیم حل می‌کنیم. ابتدا رفتار مجانبی آن‌را تعیین می‌کنیم. به‌ازای مقادیر بزرگ ρ، معادله به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}-\frac{1}{4}R\simeq 0 \qquad (۶_۱۲)$$

که جواب آن، با رفتار مناسب در بینهایت، به‌صورت $R\sim e^{-\rho/2}$ است. مانند مورد نوسانگر هماهنگ، می‌نویسیم

$$R(\rho)=e^{-\rho/2}G(\rho) \qquad (۷_۱۲)$$

در ۱۲ـ۴ جاگذاری می‌کنیم و معادلهٔ مربوط به $G(\rho)$ را به‌دست می‌آوریم. پس از عملیات ریاضی لازم، به معادلهٔ زیر می‌رسیم

$$\frac{d^2G}{d\rho^2}-\left(1-\frac{2}{\rho}\right)\frac{dG}{d\rho}+\left[\frac{\lambda-1}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]G=0 \qquad (۸_۱۲)$$

اکنون $G(\rho)$ را به‌صورت بسط توانی زیر می‌نویسیم

$$G(\rho)=\rho^s\sum_{n=0}^{\infty}a_n\rho^n \qquad (۹_۱۲)$$

www.arsanjan.blogfa.com

این واقعیت که $R(\rho)$ و در نتیجه $G(\rho)$ در مبدأ مانند ρ^l رفتار می‌کنند در فصل ۱۰ برای تمام پتانسیلهای صادق در ۱۰ـ۴۱ اثبات شد. با جاگذاری ۱۲ـ۹ در معادلهٔ دیفرانسیل، رابطه‌ای میان ضرایب مختلف a_n به‌دست می‌آوریم. این رابطهٔ بازگشتی از معادلهٔ دیفرانسیل حاکم بر

$$H(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \rho^n \qquad (۱۲ـ۱۰)$$

به‌دست می‌آید، که عبارت است از

$$\frac{d^2H}{d\rho^2} + \left(\frac{2l+2}{\rho} - 1\right)\frac{dH}{d\rho} + \frac{\lambda - 1 - l}{\rho}H = 0 \qquad (۱۲ـ۱۱)$$

در واقع، با جاگذاری $G(\rho) = \rho^l H(\rho)$ در ۱۲ـ۸ داریم

$$\sum_{n=0}^{\infty}\left[n(n-1)a_n\rho^{n-2} + na_n\rho^{n-1}\left(\frac{2l+2}{\rho} - 1\right) + (\lambda - 1 - l)a_n\rho^{n-1}\right] = 0$$

(۱۲ـ۱۲)

یا

$$\sum_{n=0}^{\infty}\{(n+1)[na_{n+1} + (2l+2)a_{n+1}] + (\lambda - 1 - l - n)a_n\}\rho^{n-1} = 0$$

چون ضرایب توانهای مختلف ρ باید صفر باشند، رابطهٔ بازگشتی زیر به‌دست می‌آید

$$\frac{a_{n+1}}{a_n} = \frac{n + l + 1 - \lambda}{(n+1)(n+2l+2)} \qquad (۱۲ـ۱۳)$$

به‌ازای مقادیر بزرگ n این رابطه تبدیل می‌شود به

$$\frac{a_{n+1}}{a_n} \simeq \frac{1}{n} \qquad (۱۲ـ۱۴)$$

و، مانند مورد مسئلهٔ نوسانگر هماهنگ، می‌توان نشان داد جوابی که در بینهایت خوشرفتار باشد به‌دست نمی‌آید مگر اینکه رشتهٔ ۱۲ـ۹ قطع شود. یعنی برای یک مقدار معین l، به‌ازای یک n که آن‌را با n_r نشان می‌دهیم باید داشته باشیم

$$\lambda = n_r + l + 1 \qquad (۱۲ـ۱۵)$$

www.arsanjan.blogfa.com

با تعریف عدد کوانتومی اصلی به

$$n = n_r + l + ۱ \qquad (۱۶_۱۲)$$

از این واقعیت که $n_r \geq ۰$ نتیجه می‌گیریم که

(۱) $n \geq l + ۱$

(۲) n یک عدد درست است

(۳) رابطهٔ

$$\lambda = n \qquad (۱۷_۱۲)$$

ایجاب می‌کند که

$$E = -\frac{۱}{۲}\mu c^۲ \frac{(Z\alpha)^۲}{n^۲}$$

که از الگوی قدیمی بور با آن آشنا هستیم. توجه کنید که در این رابطه جرم کاهیده ظاهر می‌شود؛ البته این نتیجه منحصر به رهیافت معادلهٔ دیفرانسیلی نیست. در نظریهٔ قدیمی بور نیز می‌توان با بررسی مناسب مدارهای کلاسیک، با شرط کوانتیده بودن تکانهٔ زاویه‌ای، جرم کاهیده را در فرمول انرژی وارد کرد. وجود جرم کاهیدهٔ

$$\mu = \frac{mM}{m + M} \qquad (۱۸_۱۲)$$

که در آن m جرم الکترون و M جرم هسته است، به‌معنای این است که بسامدهای

$$\omega_{ij} = \frac{E_i - E_j}{h} = \frac{mc^۲/۲h}{۱ + m/M}(Z\alpha)^۲ \left(\frac{۱}{n_j^۲} - \frac{۱}{n_i^۲}\right) \qquad (۱۹_۱۲)$$

برای اتمهای هیدروژنگونهٔ مختلف اندکی متفاوت هستند. مخصوصاً، تفاوت میان طیف هیدروژن و طیف دوتریم ــ که در آن M بسیار نزدیک به دو برابر جرم پروتون است ــ باعث شد که یوری در سال ۱۹۳۲ دوتریم را کشف کند.

www.arsanjan.blogfa.com

واگنی طیف

اکنون واگنی طیف انرژی را بررسی می‌کنیم. در حالت پایه، یعنی وقتی $\lambda = ۱$، باید داشته باشیم $n_r = ۰$ و $l = ۰$. تنها یک حالت پایه وجود دارد. به‌ازای $\lambda = ۲$، دو امکان وجود دارند:
(۱) $n_r = ۱$ و $l = ۰$. در اینجا با نوشتن ۱۲ـ۱۳ به‌صورت

$$\frac{a_{n+۱}}{a_n} = \frac{n - n_r}{(n+۱)(n+۲l+۲)} \qquad (۲۰_۱۲)$$

دیده می‌شود که $a_۱/a_۰ = -۱/(۱ \times ۲)$، و در نتیجه

$$H(\rho) = a_۰(۱ - \rho/۲) \qquad (۲۱_۱۲)$$

در حالی‌که توزیع زاویه‌ای تقارن کروی دارد. (۲) $n_r = ۰$ و $l = ۱$. در اینجا تابع‌موج شعاعی ثابت است: $H(\rho) = a_۰$، اما قسمت زاویه‌ای تابع‌موج حاوی $Y_{۱m}(\theta, \phi)$ است. واگنی $(۲l + ۱)$ است، و در نتیجه سه حالت از این نوع وجود دارند. واگنی کل به‌ازای $\lambda = n = ۲$ برابر است با $۳ + ۱ = ۴ = ۲^۲$.

به‌ازای $\lambda = ۳$، سه امکان وجود دارند: (۱) $n_r = ۲$ و $l = ۰$. در اینجا یک حالت با $a_۲/a_۱ = -۱/۶$ و $a_۱/a_۰ = -۱$ داریم، و در نتیجه

$$H(\rho) = a_۰\left(۱ - \rho + \frac{۱}{۶}\rho^۲\right) \qquad (۲۲_۱۲)$$

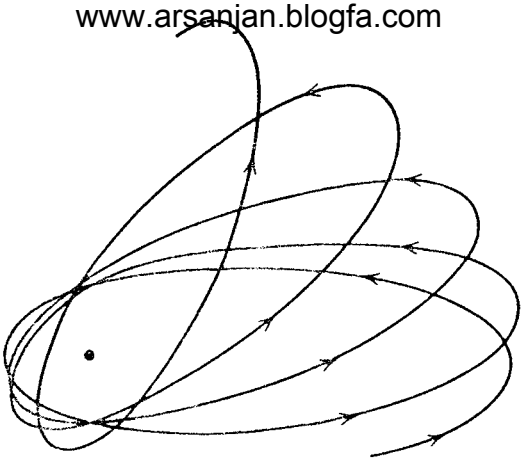
(۲) $n_r = ۱$ و $l = ۱$، و سه حالت با $H(\rho) = a_۰(۱ - \rho/۴)$ داریم. (۳) $n_r = ۰$ و $l = ۲$ که تعداد حالتهای آن برابر است با $۵ = (۲l + ۱)$، و در اینجا $H(\rho) = a_۰$. بدین‌ترتیب، $۱ + ۳ + ۵ = ۹ = ۳^۲$ حالت واگن با ویژه‌مقدار $\lambda = n = ۳$ وجود دارند. به‌طور کلی، واگنی برای $\lambda = n$ برابر است با

$$۱ + ۳ + ۵ + \cdots + [۲(n-۱) + ۱] = n^۲ \qquad (۲۳_۱۲)$$

از پیش انتظار داریم که برای پتانسیل شعاعی واگنی $(۲l + ۱)$ باشد، زیرا هامیلتونی شعاعی تنها به $\mathbf{L}^۲$ بستگی دارد و مستقل از L_z است. اما یک واگنی اضافی وجود دارد. این واگنی خاص مشخصهٔ پتانسیل $۱/r$ است. اگر این پتانسیل کولنی را با افزودن یک جمله به‌صورت زیر تغییر دهیم

$$V(r) = -\frac{Ze^۲}{r} + \frac{h^۲}{۲\mu}\frac{g^۲}{r^۲} \qquad (۲۴_۱۲)$$

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۱۲ـ۱ مدار برای پتانسیلی که دقیقاً به‌صورت $1/r$ نیست روی خودش بسته نمی‌شود بلکه دارای حرکت تقدیمی است. اگر پتانسیل شعاعی باشد مدار هامنی باقی می‌ماند.

معادلهٔ شعاعی بدون تغییر می‌ماند، بجز اینکه به‌جای $l(l+1)/r^2$ اکنون داریم $l^*(l^*+1)/r^2$ که در آن $l^*(l^*+1) = l(l+1) + g^2$، یعنی $l^* = -1/2 + \sqrt{(l+1/2)^2 + g^2}$. این تغییر باعث می‌شود انرژی به‌صورت زیر درآید

$$E = -\frac{1}{2}\mu c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{[n_r + 1/2 + \sqrt{(l+1/2)^2 + g^2}]^2} \qquad (۲۵_۱۲)$$

که، به‌عنوان مثال، برای $(n_r = 1, l = 2)$ و $(n_r = 2, l = 1)$ دیگر واگن نیست. واگنی مشخصهٔ پتانسیل $1/r$ را سابقاً "اتفاقی" می‌نامیدند، زیرا دلیل واضحی برای آن وجود نداشت اما باید دید که منظور از "واضح" چیست. از مکانیک کلاسیک می‌دانیم که پتانسیل $1/r$ ویژگیهای خاصی دارد: مدارها بیضیهایی هستند که سمتگیری ثابتی در فضا دارند و حرکت تقدیمی (شکل ۱۲ـ۱) انجام نمی‌دهند. تغییرات کوچک در این پتانسیل باعث حرکت تقدیمی می‌شوند. این تغییرات می‌توانند ناشی از عوامل مختلف باشند، مثلاً اختلالهای ناشی از سایر سیارات در مسئلهٔ کپلر. در بررسی مدار عطارد معلوم شده بود که پس از احتساب اثر سایر سیارات باز هم یک حرکت تقدیمی حضیض عطارد به مقدار $42''$ در هر قرن بدون توضیح می‌ماند. این حرکت تقدیمی را سرانجام نظریهٔ نسبیت‌عام اینشتین توضیح داد: بر اساس این نظریه، باید دقیقاً پتانسیل $1/r^2$ را به پتانسیل نیوتونی $1/r$ اضافه کرد.

در اتم هیدروژن واقعی اختلالهای کوچکی ناشی از اثرات اسپینی و اثرات نسبیتی وجود دارند. این اثرات را در فصل ۱۷ بررسی می‌کنیم. اما با یک تقریب بسیار خوب، مقادیر ممکن l به‌ازای

www.arsanjan.blogfa.com

یک مقدار معین n عبارت‌اند از $l = ۰, ۱, ۲, \ldots, (n-۱)$ و به‌ازای هر یک از اینها واگنی $(۲l+۱)$ است. بنابراین، واگنی کل باز هم $n^۲$ است. چون برای الکترون دو حالت مربوط به اسپین آن وجود دارند، واگنی صحیح در واقع $۲n^۲$ است. این موضوع نقش مهمی در توصیف کوانتوم‌ـمکانیکی جدول تناوبی دارد.

ویژه‌تابعهای شعاعی

اکنون به معادلهٔ شعاعی بازمی‌گردیم. از رابطهٔ بازگشتی ۱۲ـ۱۳ با تبدیل n به k و λ به n:

$$a_{k+۱} = \frac{k+l+۱-n}{(k+۱)(k+۲l+۲)} a_k \qquad (۲۶\text{ـ}۱۲)$$

به‌دست می‌آوریم

$$a_{k+۱} = (-۱)^{k+۱} \frac{n-(k+l+۱)}{(k+۱)(k+۲l+۲)} \cdot \frac{n-(k+l)}{k(k+۲l+۱)} \cdots \frac{n-(l+۱)}{۱\cdot(۲l+۲)} a_۰ \qquad (۲۷\text{ـ}۱۲)$$

با استفاده از این رابطه می‌توان بسط رشتهٔ توانی مربوط به $H(\rho)$ را به‌دست آورد. در واقع، $H(\rho)$ چندجمله‌ای لاگر وابسته است:

$$H(\rho) = L_{n-l-۱}^{(۲l+۱)}(\rho) \qquad (۲۸\text{ـ}۱۲)$$

جدول این چندجمله‌ایها و ویژگیهای آنها را در اغلب کتابهای ریاضی و ریاضی فیزیک یافت می‌شوند.[۱]

با استفاده از

$$a_۰ = \frac{h}{\mu c \alpha} \qquad (۲۹\text{ـ}۱۲)$$

---

۱. یک کتاب بسیار مفید در این زمینه کتابدستی زیر است

M Abramowitz and I A Stegun (eds), *Handbook of Mathematical Functions*, National Bureau of Standards Publication, Washington, D C, 1964.

www.arsanjan.blogfa.com

چند تابع شعاعی را با تبدیل به متغیر بی‌بعد $\rho = Zr/a_0$ در زیر می‌نویسیم

$$R_{10}(r) = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$$

$$R_{20}(r) = 2\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\left(1 - \frac{Zr}{2a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$$

$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \qquad (۳۰_۱۲)$$

$$R_{30}(r) = 2\left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2}\left[1 - \frac{2Zr}{3a_0} + \frac{2(Zr)^2}{27a_0^2}\right] e^{-Zr/3a_0}$$

$$R_{31}(r) = \frac{4\sqrt{2}}{3}\left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2}\frac{Zr}{a_0}\left(1 - \frac{Zr}{6a_0}\right) e^{Zr/3a_0}$$

$$R_{32}(r) = \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}}\left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-Zr/3a_0}$$

ویژگیهای کیفی زیر را می‌توان از بررسی ویژه‌جوابها به‌دست آورد:

الف) رفتار r^l به‌ازای مقادیر کوچک r، که باعث می‌شود تابع‌موج در گستره‌ای از شعاعها که با l افزایش می‌یابد کوچک بماند، پیامد وجود سد مرکزگریزی دافعه‌ای است که الکترونها را از نزدیک شدن به هسته بازمی‌دارد.

(ب) رابطهٔ ۱۲ـ۲۶ نشان می‌دهد $H(\rho)$ یک چندجمله‌ای از درجهٔ $n_r = n - l - 1$ است، و از این‌رو n_r گره (صفر) شعاعی دارد. توزیع چگالی احتمال

$$P(r) = r^2[R_{nl}]^2 \qquad (۳۱_۱۲)$$

$n - 1$ "برآمدگی" دارد. وقتی l، به‌ازای یک مقدار معین n، دارای بیشترین مقدار خود است ($l = n - 1$) تنها یک برآمدگی وجود دارد. چنانکه از ۱۲ـ۳۰ استنباط می‌شود، و چنانکه می‌توان از جواب معادلهٔ دیفرانسیل دید،

$$R_{n,n-1}(r) \propto r^{n-1} e^{-Zr/a_0 n} \qquad (۳۲_۱۲)$$

www.arsanjan.blogfa.com

بنابراین، چگالی احتمال $P(r) \propto r^{2n} e^{-2Zr/na_0}$ در یک r که از رابطهٔ زیر به‌دست می‌آید بیشینه می‌شود

$$\frac{dP(r)}{dr} = \left(2nr^{2n-1} - \frac{2Z}{a_0 n} r^{2n} \right) e^{-2Zr/na_0} = 0 \qquad (۳۳_۱۲)$$

یعنی در

$$r = \frac{n^2 a_0}{Z} \qquad (۳۴_۱۲)$$

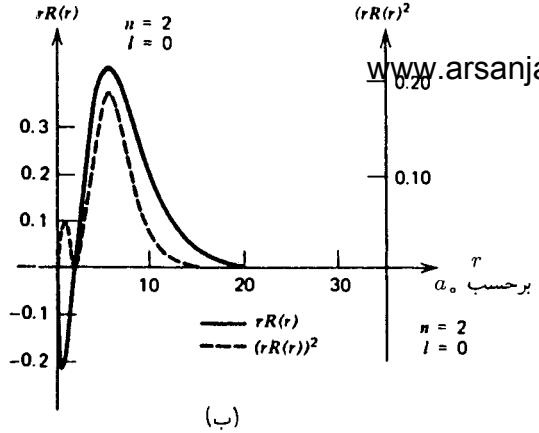
که مقداری است که از اتم بور برای مدارهای دایره‌ای به‌دست می‌آید. چگالیهای احتمال مربوط به مقادیر کوچکتر l برآمدگیهای بیشتری دارند. می‌توان نشان داد که این برآمدگیها متناظر با مدارهای بیضوی در حد اعداد کوانتومی بزرگ هستند.

(ج) نمودارهای چگالی احتمال شعاعی $P(r)$ برای یافتن الکترون در فاصلهٔ r از مبدأ را می‌توان با استفاده از توابع موج ترسیم کرد. شکل ۱۲ـ۲ طرح کلی را نشان می‌دهد. باید به‌خاطر داشت که تابع‌موج قسمت زاویه‌ای هم دارد، که مجذور قدرمطلق آن $[P_l^m(\cos\theta)]^2$ است. نمودارهای توابع لژاندر وابستهٔ $P_l^m(\cos\theta)$ در شکل ۱۲ـ۳ داده شده‌اند. چنانکه دیده می‌شود، با افزایش m چگالی احتمال از محور z به سمت صفحهٔ استوایی منتقل می‌شود. وقتی $|m| = l$، چنانکه ۱۱ـ۶۳ نشان می‌دهد داریم $|P_l^l(\cos\theta)|^2 \propto \sin^{2l}\theta$. این تابع حول $\theta = \pi/2$ به‌اوج می‌رسد. می‌توان نشان داد که با افزایش l پهنای قله مانند $l^{-1/2}$ کاهش می‌یابد، و در نتیجه به‌ازای اعداد کوانتومی بزرگ به تصویر کلاسیک مدارهای هامنی می‌رسیم. پهنای متناهی قله را می‌توان با ملاحظات زیر توضیح داد. وقتی $|m| = l$ داریم $L_z^2 = l^2$ و در نتیجه $L_x^2 + L_y^2 = l$. بنابراین، بردار تکانهٔ زاویه‌ای هیچگاه نمی‌تواند کاملاً در راستای یک محور قرار گیرد. در ضمن، واگنی m به ما امکان می‌دهد تا "مدار" را نسبت به یک محور دیگر سمتیابی کنیم، و از این‌رو هیچ محور z متمایزی واقعاً وجود ندارد. بدین‌ترتیب، حالتی که یک ویژه‌حالت L_z با ویژه‌مقدار l است در راستای x "سمت‌گیری" می‌کند. تابع‌موج اکنون یک ترکیب خطی از توابع $Y_{lm}(\theta, \phi)$ است، اما انرژی به‌علت واگنی همان انرژی مربوط به مدارهایی است که در راستای z سمتگیری کرده‌اند.

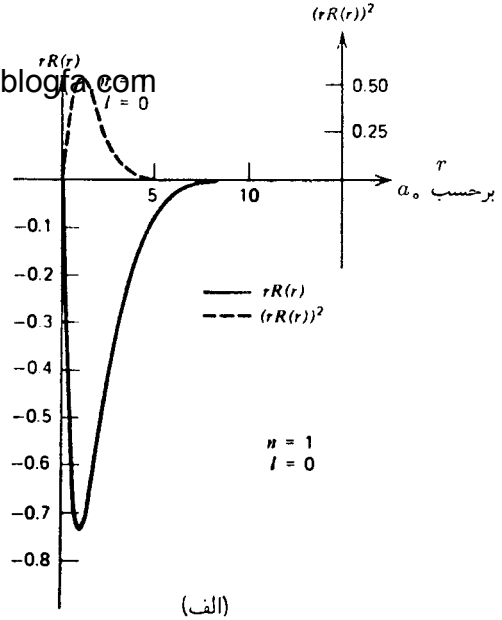
(د) با داشتن توابع موج، می‌توان $\langle r^k \rangle$ را با استفاده از رابطهٔ زیر محاسبه کرد

$$\langle r^k \rangle = \int_0^\infty dr\, r^{2+k} [R_{nl}(r)]^2 \qquad (۳۵_۱۲)$$

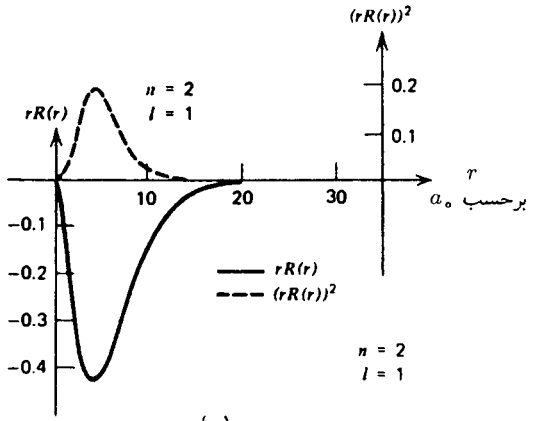
www.arsanjan.blogfa.com



(ب)



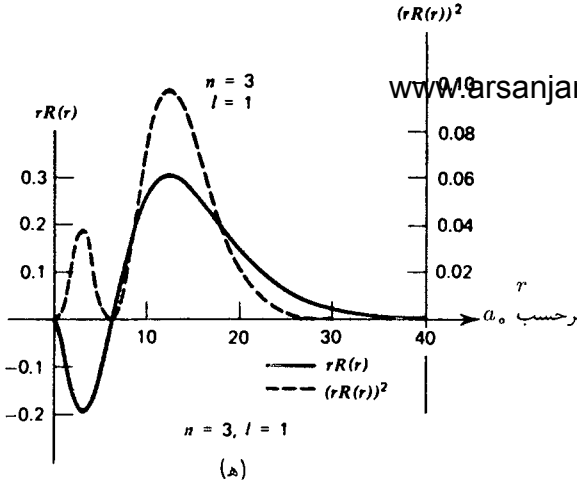
(الف)



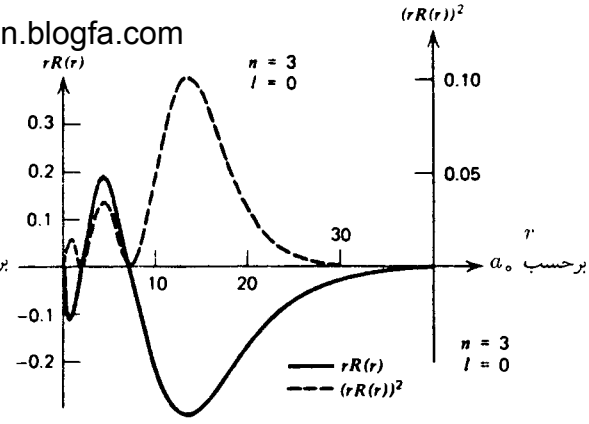
(ج)

شکل۱۲ـ۲ توابع‌موج شعاعی $u(r) = rR(r)$ و توابع چگالی احتمال شعاعی $u^2(r)$ برای مقادیر $n = ۱، ۲، ۳$، و مقادیر ممکن l. محور طول چپ معرف $u(r)$ و محور طول راست معرف $u^2(r)$ است. توابع موج با خط پر و توزیعهای احتمال با خط‌چین نشان داده شده‌اند. محور عرض معرف r برحسب a_0 است.

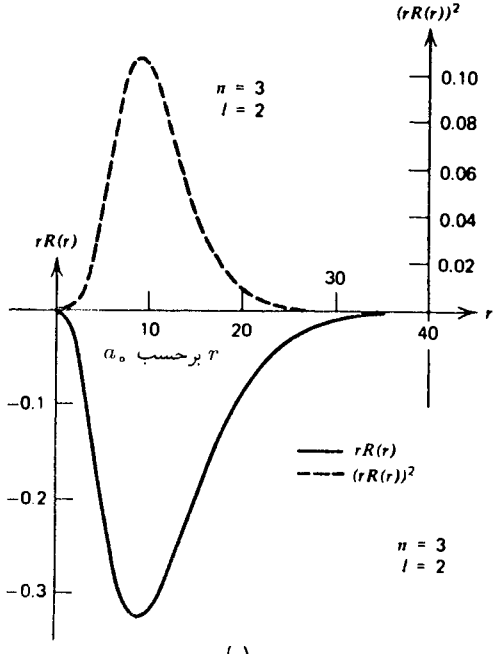
www.arsanjan.blogfa.com



(هـ)



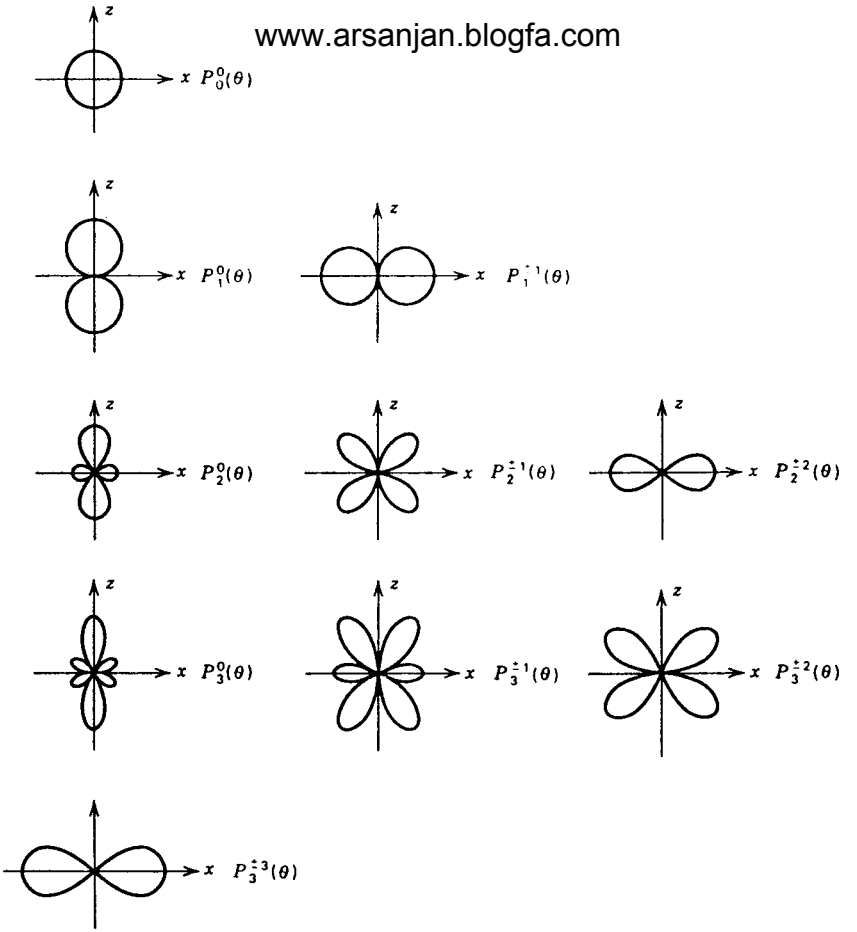
(د)



(و)

شکل۱۲ـ۲ ادامه.

www.arsanjan.blogfa.com



شکل ۳ـ۱۲ نمودارهای چندجمله‌ایهای لژاندر وابسته برحسب θ (زاویهٔ میان محور z و صفحهٔ استوایی که با محور x نشان داده شده است).

بعضی مقادیر انتظاری مفید عبارت‌اند از

$$\langle r \rangle = \frac{a_0}{2Z}[3n^2 - l(l+1)]$$

$$\langle r^2 \rangle = \frac{a_0^2 n^2}{2Z^2}[5n^2 + 1 - 3l(l+1)]$$

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{Z}{a_0 n^2}$$

www.arsanjan.blogfa.com

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{Z^2}{a_0^2 n^3 \left(l + \frac{1}{2}\right)}$$

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{Z^3}{a_0^3 n^3 l \left(l + \frac{1}{2}\right)(l+1)} \qquad (۳۶_۱۲)$$

در پراکندگی الکترون (یا پروتون) با جوابهای معادلهٔ شرودینگر برای پتانسیل $1/r$ به‌ازای $E > 0$ نیز سروکار داریم. اینها شامل توابع خاص، توابع فوق هندسی همشار، هستند. بررسی این جوابها فراتر از اهداف این کتاب است.

مسائل

۱ـ۱۲ طول‌موجهای مربوط به گذارهای $2P \to 1S$ را در موارد زیر مقایسه کنید. (۱) هیدروژن، (۲) دوتریم (با جرم هسته‌ای دو برابر جرم پروتون)، (۳) پوزیترونیم (حالت مقید از یک الکترون و یک پوزیترون که جرم آن برابر با جرم الکترون است).

۲ـ۱۲ یک الکترون در حالت پایهٔ تریتیم، که هستهٔ آن متشکل از یک پروتون و دو نوترون است، قرار دارد. یک واکنش هسته‌ای باعث می‌شود هستهٔ این اتم ناگهان به He^3، متشکل از دو پروتون و یک نوترون، تبدیل شود. احتمال این را به‌دست آورید که الکترون در حالت پایهٔ He^3 باقی بماند.

۳ـ۱۲ مانستهٔ نسبیتی معادلهٔ شرودینگر برای الکترونی با اسپین ۰ (که البته برای الکترون واقعی قابل استفاده نیست) صورت عملگری رابطهٔ زیر است

$$(E - V)^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$$

یعنی

$$\left(\frac{E}{\hbar c} + \frac{Ze^2}{\hbar c}\,\frac{1}{r}\right)^2 \psi = -\nabla^2 \psi + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 \psi$$

(الف) معادلهٔ شعاعی را به‌دست آورید.

(ب) طیف ویژه‌مقدارها را با توجه به ارتباط نزدیک معادلهٔ شعاعی قسمت (الف) با معادلهٔ شعاعی مربوط به مسئلهٔ اتم هیدروژن به‌دست آورید.

www.arsanjan.blogfa.com

۴ـ۱۲ با استفاده از رابطهٔ $\langle V \rangle_{n,l}$ یک

$$\langle T \rangle_{n,l} = \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle_{n,l}$$

را برای یک ویژه‌حالت اختیاری اتم هیدروژنگونه (با Z اختیاری) محاسبه کنید. نشان دهید که به‌طور کلی برای این پتانسیل داریم

$$\langle T \rangle = -\frac{1}{2}\langle V \rangle$$

این یک مثال خاص از قضیهٔ ویریال است.

۵ـ۱۲ الکترونی در میدان کولنی یک پروتون در حالتی است که با تابع‌موج زیر توصیف می‌شود

$$\frac{1}{6}[4\psi_{100}(\mathbf{r}) + 3\psi_{211}(\mathbf{r}) - \psi_{210}(\mathbf{r}) + \sqrt{10}\,\psi_{21-1}(\mathbf{r})]$$

(الف) مقدار انتظاری انرژی را محاسبه کنید.
(ب) مقدار انتظاری $\mathbf{L}^2$ را به‌دست آورید.
(ج) مقدار انتظاری L_z را تعیین کنید.

۶ـ۱۲ الکترونی در میدان کولنی یک پروتون در حالتی است که با تابع‌موج زیر توصیف می‌شود

$$\psi(\mathbf{r}) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{3/2} e^{-\alpha^2 r^2/2}$$

رابطه‌ای برای احتمال یافتن الکترون در حالت پایهٔ این اتم هیدروژن به‌دست آورید.

۷ـ۱۲ رابطهٔ ۱۲ـ۳۲ را با استفاده از رابطهٔ بازگشتی اثبات کنید.

۸ـ۱۲ الکترون یک اتم هیدروژن در حالت $n = 2$، $l = 1$، $m = 0$ است. تابع‌موج آن‌را در فضای تکانه به‌دست آورید.

۹ـ۱۲ مقدار انتظاری تابع $f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ در هر حالت پایا ثابت است. برای هامیلتونی

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r)$$

ثابت کنید

$$0 = \frac{d}{dt}\langle \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [H, \mathbf{r} \cdot \mathbf{p}] \rangle$$

www.arsanjan.blogfa.com

و نشان دهید

$$\left\langle \frac{\mathbf{p}^2}{m} \right\rangle = \langle \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\nabla} V(r) \rangle$$

با استفاده از این رابطه، نتیجهٔ مسئلهٔ ۱۲ـ۴ را اثبات کنید. همچنین با استفاده از این نتیجه، $\langle 1/r \rangle$ را به‌دست آورید.

۱۲ـ۱۰ با استفاده از فنونی که در این فصل بیان شدند، مسئلهٔ نوسانگر هماهنگ سه‌بعدی را با

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2$$

بررسی کنید. توجه کنید که چندجمله‌ایهای لاگر وابسته در این مسئله نیز ظاهر می‌شوند.

۱۲ـ۱۱ بنابه نظر جولین شوینگر، نیروی شعاعی متوسط باید برای حالتهای پایا صفر شود. با استفاده از این نتیجه، $\langle n,l|1/r^3|n,l \rangle$ را محاسبه کنید.

[راهنمایی: کمیت

$$\left\langle n,l \left| \frac{d}{dr} \left[\frac{h^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r} \right] \right| n,l \right\rangle$$

را محاسبه کنید.]

مراجع

برای بحث مفصلی دربارهٔ اتمهای هیدروژنگونه به کتاب زیر مراجعه کنید

E U Condon and G H Shortley, *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge University Press, Cambridge, England, 1959.

مسئلهٔ اتم هیدروژن در تمام کتابهای مکانیک کوانتومی بررسی می‌شود.

www.arsanjan.blogfa.com

۱۳

برهم‌کنش الکترون با میدان الکترومغناطیسی

نظریهٔ کلاسیک

در فصل ۱۲ برهم‌کنش الکترون را با میدان ایستای کولنی ناشی از یک بار نقطه‌ای بررسی کردیم. برای تعمیم این بررسی به برهم کنش با میدان مغناطیسی یا الکتریکی خارجی باید ابتدا نظریهٔ کلاسیک را مرور کنیم. معادلات ماکسول برای خلأ در دستگاه گاؤسی عبارت‌اند از

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r},t) = 0 \qquad (۱\text{-}۱۳)$$

$$\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{E}(\mathbf{r},t) + \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r},t)}{\partial t} = 0 \qquad (۲\text{-}۱۳)$$

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r},t) = 4\pi\rho(\mathbf{r},t) \qquad (۳\text{-}۱۳)$$

$$\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{B}(\mathbf{r},t) - \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{E}(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \frac{4\pi}{c}\mathbf{j}(\mathbf{r},t) \qquad (۴\text{-}۱۳)$$

که در آنها چگالیهای بار و جریان $\rho(\mathbf{r},t)$ و $\mathbf{j}(\mathbf{r},t)$ چشمه‌های میدانهای الکترومغناطیسی $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ و $\mathbf{B}(\mathbf{r},t)$ هستند. معادلهٔ پایستگی بار

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r},t) = 0 \qquad (۵\text{-}۱۳)$$

www.arsanjan.blogfa.com

خودبه‌خود صادق است.

الکترون به‌عنوان یک نقطهٔ مادی به جرم μ و بار $-e$ تابع معادلهٔ نیروی لورنتس است:

$$\mu\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = -e[(\mathbf{E}(\mathbf{r},t) + \frac{\mathbf{v}}{c}\times\mathbf{B}(\mathbf{r},t)] \qquad (۶_۱۳)$$

گذار به مکانیک کوانتومی با ساختن هامیلتونی برای این دستگاه انجام می‌گیرد. برای این کار باید پتانسیلهای این دستگاه الکترومغناطیسی را تعریف کنیم. با توجه به دو معادلهٔ اول ماکسول، ۱۳ـ۱ و ۱۳ـ۲، می‌توان پتانسیلهای برداری و نرده‌ای $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ و $\phi(\mathbf{r},t)$ را به‌گونه‌ای تعریف کرد که

$$\begin{aligned}\mathbf{B}(\mathbf{r},t) &= \boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\\ \mathbf{E}(\mathbf{r},t) &= -\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}(\mathbf{r},t)}{\partial t} - \boldsymbol{\nabla}\phi(\mathbf{r},t)\end{aligned} \qquad (۷_۱۳)$$

در معادلهٔ حرکت الکترون پتانسیلهای $\mathbf{A}$ و ϕ مستقیماً دخالت ندارند. این پتانسیلها خوش تعریف نیستند. اگر در معادلهٔ

$$\mathbf{B}(\mathbf{r},t) = \boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$$

$\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ را به

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r},t) = \mathbf{A}(\mathbf{r},t) - \boldsymbol{\nabla}f(\mathbf{r},t) \qquad (۸_۱۳)$$

تبدیل کنیم معادله تغییر نمی‌کند زیرا $\nabla\times\nabla f(\mathbf{r},t) = 0$. اگر، علاوه بر تبدیل ۱۳ـ۸، ϕ را به

$$\phi'(\mathbf{r},t) = \phi(\mathbf{r},t) + \frac{1}{c}\frac{\partial f(\mathbf{r},t)}{\partial t} \qquad (۹_۱۳)$$

تبدیل کنیم میدان الکتریکی تغییر نمی‌کند. این ناوردایی، که ناوردایی تحت تبدیلات پیمانه‌ای نامیده می‌شود، به ما امکان می‌دهد تا پتانسیلها را به‌صورتهای مختلف، مناسب با منظوری که داریم، تعریف کنیم.

زوج معادله‌های وابسته به چشمهٔ ۱۳ـ۳ و ۱۳ـ۴ اکنون به‌صورت زیر درمی‌آیند

$$-\nabla^2\phi(\mathbf{r},t) - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}(\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{A}) = 4\pi\rho(\mathbf{r},t) \qquad (۱۰_۱۳)$$

www.arsanjan.blogfa.com

و

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \mathbf{A}(\mathbf{r},t)}{\partial t^2} + \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\nabla\phi = \frac{4\pi}{c}\mathbf{j}(\mathbf{r},t)$$

یا

$$-\nabla^2 \mathbf{A}(\mathbf{r},t) + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \mathbf{A}(\mathbf{r},t)}{\partial t^2} + \nabla\left(\nabla\cdot\mathbf{A} + \frac{1}{c}\frac{\partial\phi}{\partial t}\right) = \frac{4\pi}{c}\mathbf{j}(\mathbf{r},t) \qquad (۱۱\text{ـ}۱۳)$$

اگر توزیع بار ایستا باشد، یعنی چگالی ρ مستقل از زمان باشد، بهتر است پیمانه را طوری انتخاب کنیم که

$$\nabla\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = 0 \qquad (۱۲\text{ـ}۱۳)$$

این انتخاب $f(\mathbf{r},t)$ را پیمانهٔ کولن می‌نامند. در این مورد داریم

$$-\nabla^2\phi(\mathbf{r}) = 4\pi\rho(\mathbf{r}) \qquad (۱۳\text{ـ}۱۳)$$

یعنی یک پتانسیل نرده‌ای مستقل از زمان داریم، و معادلهٔ مربوط به $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$-\nabla^2\mathbf{A}(\mathbf{r},t) + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\mathbf{A}(\mathbf{r},t)}{\partial t^2} = \frac{4\pi}{c}\mathbf{j}(\mathbf{r},t) \qquad (۱۴\text{ـ}۱۳)$$

وقتی توزیع بار ایستا نیست، بهتر است پیمانهٔ لورنتس را انتخاب کنیم که برای آن

$$\nabla\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r},t) + \frac{1}{c}\frac{\partial\phi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = 0 \qquad (۱۵\text{ـ}۱۳)$$

با این انتخاب، معادلهٔ مربوط به پتانسیل برداری بدون تغییر می‌ماند، اما اکنون پتانسیل نرده‌ای نیز از یک معادلهٔ موج پیروی می‌کند. نکتهٔ مهمی که باید تذکر دهیم این است که رابطهٔ

$$\nabla\times(\nabla\times\mathbf{A}) = -\nabla^2\mathbf{A} + \nabla(\nabla\cdot\mathbf{A})$$

که در به‌دست آوردن ۱۳ـ۱۱ به‌کار می‌رود تنها در مختصات دکارتی معتبر است. بنابراین، واضح است که $\nabla^2\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ را باید برحسب x، y و z محاسبه کنیم.

www.arsanjan.blogfa.com

برای گذار به مکانیک کوانتومی باید از فرمولبندی هامیلتون برای معادلهٔ حرکت ۱۳ـ۶ استفاده کنیم. در غیاب برهم‌کنش با میدان الکترومغناطیسی، به‌آسانی می‌توان دید که از معادله‌های هامیلتون

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}$$
$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i} \qquad (۱۶_۱۳)$$

و

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + V(r) \qquad (۱۷_۱۳)$$

به‌دست می‌آوریم

$$\mu \frac{d^2 x_i}{dt^2} = -\frac{\partial V}{\partial x_i} = F_i \qquad (۱۸_۱۳)$$

همیلتونی برای برهم‌کنش الکترون با میدان الکترومغناطیسی خارجی، که با پتانسیلهای $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ و $\phi(\mathbf{r},t)$ نمایش داده می‌شود، به‌صورت زیر است

$$H = \frac{(\mathbf{p} + (e/c)\mathbf{A}(\mathbf{r},t))^2}{2\mu} + e\phi(\mathbf{r},t) \qquad (۱۹_۱۳)$$

معادله‌های حرکت هامیلتون عبارت‌اند از

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{p_i + (e/c)A_i}{\mu} \qquad (۲۰_۱۳)$$

و

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i} = -\frac{e}{\mu c}\left(p_k + \frac{e}{c}A_k\right)\frac{\partial A_k}{\partial x_i} + e\frac{\partial \phi}{\partial x_i} \qquad (۲۱_۱۳)$$

بنابراین

$$\mu \frac{d^2 x_i}{dt^2} = \frac{dp_i}{dt} + \frac{e}{c}\left(\frac{\partial A_i}{\partial t} + \frac{\partial A_i}{\partial x_k}\frac{dx_k}{dt}\right)$$
$$= e\frac{\partial \phi}{\partial x_i} + \frac{e}{c}\frac{\partial A_i}{\partial t} - \frac{e}{c}\frac{\partial A_k}{\partial x_i}\frac{dx_k}{dt} + \frac{e}{c}\frac{\partial A_i}{\partial x_k}\frac{dx_k}{dt} \qquad (۲۲_۱۳)$$

www.arsanjan.blogfa.com

دو جملهٔ اول برابر با $-eE_i$ و دومی $\frac{1}{2}mv_i^2$ هستند. بدین‌ترتیب، ۱۳ـ۱۹ انتخاب درستی برای هامیلتونی H است.

معادلهٔ شرودینگر الکترون در میدان الکترومغناطیسی

معادلهٔ شرودینگر برای الکترون در میدان الکترومغناطیسی به‌صورت زیر است

$$\left[\frac{((\hbar/i)\boldsymbol{\nabla}+(e/c)\mathbf{A}(\mathbf{r},t))^2}{2\mu}+e\phi(\mathbf{r},t)\right]\psi(\mathbf{r},t)=i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} \qquad (۱۳ـ۲۳)$$

که در آن $(\hbar/i)\boldsymbol{\nabla}$ را به‌جای عملگر $\mathbf{p}$ نوشته‌ایم. قبل از اینکه به حل معادلهٔ ویژه‌مقداری انرژی بپردازیم، لازم است ناوردایی پیمانه‌ای را بررسی کنیم. اگر معادلهٔ ۱۳ـ۲۳ را برحسب $\mathbf{A}'$ و ϕ' که با ۱۳ـ۸ و ۱۳ـ۹ تعریف می‌شوند بنویسیم، به‌دست می‌آوریم

$$\left[\frac{((\hbar/i)\boldsymbol{\nabla}+(e/c)\mathbf{A}'(\mathbf{r},t)+(e/c)\boldsymbol{\nabla}f(\mathbf{r},t))^2}{2\mu}+e\phi'(\mathbf{r},t)\right.$$
$$\left.-\frac{e}{c}\frac{\partial f(\mathbf{r},t)}{\partial t}\right]\psi(\mathbf{r},t)=i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t}$$

که معادلهٔ متفاوتی به‌نظر می‌رسد. به‌آسانی می‌توان دید که اگر تبدیلهای ۱۳ـ۸ و ۱۳ـ۹ را با یک تغییر فاز در تابع‌موج، $\psi(\mathbf{r},t)\to\psi'(\mathbf{r},t)$، همراه کنیم به‌طوری که

$$\psi'(\mathbf{r},t)=e^{i\Lambda(\mathbf{r},t)}\psi(\mathbf{r},t) \qquad (۱۳ـ۲۴)$$

آنگاه چون

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial t}(e^{-i\Lambda}\psi')=-i\frac{\partial\Lambda}{\partial t}\psi+e^{-i\Lambda}\frac{\partial\psi'}{\partial t}$$

و

$$\frac{\hbar}{i}\nabla\psi=\frac{\hbar}{i}\nabla(e^{-i\Lambda}\psi')=-\hbar\nabla\Lambda\psi-e^{-i\Lambda}\frac{\hbar}{i}\nabla\psi'$$

معادلهٔ اصلی برحسب $\mathbf{A}'$، ϕ' و ψ' به‌دست می‌آید به شرط اینکه قرار دهیم

$$\Lambda(\mathbf{r},t)=\frac{e}{\hbar c}f(\mathbf{r},t) \qquad (۱۳ـ۲۵)$$

www.arsanjan.blogfa.com

اکنون به معادلهٔ شرودینگر بازمی‌گردیم. تنها میدانهای مستقل از زمان را در نظر می‌گیریم، یعنی $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{r})$ و $\phi = \phi(\mathbf{r})$. در این مورد، می‌توان نوشت

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(\mathbf{r}) \qquad (۲۶_۱۳)$$

و

$$\left[\frac{۱}{۲\mu}\left(\frac{\hbar}{i}\boldsymbol{\nabla} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\cdot\left(\frac{h}{i}\boldsymbol{\nabla} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) + e\phi(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \qquad (۲۷_۱۳)$$

که به‌صورت زیر درمی‌آید

$$-\frac{\hbar^۲}{۲\mu}\nabla^۲\psi - \frac{ie\hbar}{\mu c}\mathbf{A}\cdot\boldsymbol{\nabla}\psi - \frac{ie\hbar}{۲\mu c}(\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{A})\psi + \frac{e^۲}{۲\mu c^۲}A^۲\psi + e\phi(\mathbf{r})\psi = E\psi \qquad (۲۸_۱۳)$$

اکنون با استفاده از آزادی انتخاب تابع پیمانهٔ $f(\mathbf{r})$ به‌گونه‌ای که

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r}) = ۰ \qquad (۲۹_۱۳)$$

به‌دست می‌آوریم

$$-\frac{\hbar^۲}{۲\mu}\nabla^۲\psi - \frac{ie\hbar}{\mu c}\mathbf{A}\cdot\boldsymbol{\nabla}\psi + \frac{e^۲}{۲\mu c^۲}A^۲\psi + e\phi(\mathbf{r})\psi = E\psi \qquad (۳۰_۱۳)$$

میدان مغناطیسی ثابت

برای میدان مغناطیسی یکنواخت ثابت $\mathbf{B}$ می‌توان نوشت[۱]

$$\mathbf{A} = -\frac{۱}{۲}\mathbf{r}\times\mathbf{B} \qquad (۳۱_۱۳)$$

بنابراین، $\mathbf{A}$ برحسب سه مؤلفه‌اش عبارت است از

$$\mathbf{A} = -\frac{۱}{۲}(yB_z - zB_y,\ zB_x - xB_z,\ xB_y - yB_z)$$

---

۱. توجه کنید که این انتخاب یکتا نیست، زیرا می‌توان گرادیان هر تابعی را به $\mathbf{A}$ اضافه کرد بدون اینکه $\mathbf{B}$ تغییر کند. اما این انتخاب بسیار مناسب است.

www.arsanjan.blogfa.com

و در نتیجه

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{A} &= \left(\tfrac{1}{2}B_x + \tfrac{1}{2}B_{x'},\ B_{y'},\ B_z\right)\\ &= \mathbf{B}\end{aligned}$$

اکنون جملهٔ دوم در ۱۳ـ۳۰ به‌صورت زیر در می‌آید

$$\begin{aligned}\frac{ie\hbar}{2\mu c}\mathbf{r}\times\mathbf{B}\cdot\nabla\psi &= -\frac{ie\hbar}{2\mu c}\mathbf{B}\cdot\mathbf{r}\times\boldsymbol{\nabla}\psi\\ &= \frac{e}{2\mu c}\mathbf{B}\cdot\mathbf{r}\times\frac{\hbar}{i}\boldsymbol{\nabla}\psi = \frac{e}{2\mu c}\mathbf{B}\cdot\mathbf{L}\psi\end{aligned} \qquad (۱۳\text{ـ}۳۲)$$

و برای جملهٔ سوم، اگر راستای $\mathbf{B}$ را محور z بگیریم، داریم

$$\frac{e^2}{8\mu c^2}(\mathbf{r}\times\mathbf{B})^2\psi = \frac{e^2}{8\mu c^2}[r^2\mathbf{B}^2 - (\mathbf{r}\cdot\mathbf{B})^2]\psi = \frac{e^2B^2}{8\mu c^2}(x^2+y^2)\psi \qquad (۱۳\text{ـ}۳۳)$$

نتیجهٔ بالا به‌صورت پتانسیل نوسانگر هماهنگ دوبعدی است.

بزرگیهای این دو جمله را با هم مقایسه می‌کنیم. نسبت این دو را با گرفتن $\langle L_z\rangle$ از مرتبهٔ h و $\langle x^2+y^2\rangle$ از مرتبهٔ a_0^2، که a_0 شعاع بور است، براورد می‌کنیم:

$$\begin{aligned}\frac{(e^2/8\mu c^2)a_0^2B^2}{(e/2\mu c)\hbar B} &\simeq \frac{1}{4}\frac{e^2}{\hbar c}\frac{B}{e/a_0^2} \simeq \frac{1}{548}\frac{B}{e/a_0^2}\\ &\approx \frac{B}{548(4{,}8\times10^{-10})/(0{,}5\times10^{-8})^2}\\ &\approx \frac{B}{9\times10^9\,\mathrm{G}}\end{aligned} \qquad (۱۳\text{ـ}۳۴)$$

بنابراین، در دستگاههای اتمی، با میدانهایی که نوعاً در آزمایشگاه در دسترس هستند، یعنی $B \lesssim 10^4\,\mathrm{G}$، جملهٔ درجهٔ دوم مسلماً قابل چشمپوشی است. به روش مشابهی می‌توان جمله‌ای را که برحسب B خطی است با مقایسه با انرژی پتانسیل کولنی براورد کرد:

$$\frac{(e/2\mu c)\hbar B}{e^2/a_0} \approx \frac{1}{2}\frac{\hbar/\mu c}{e/a_0}B \approx \frac{1}{274}\frac{B}{e/a_0^2} \approx \frac{B}{5\times10^9\,\mathrm{G}} \qquad (۱۳\text{ـ}۳۵)$$

www.arsanjan.blogfa.com

بنابراین، جملهٔ خطی ترازهای انرژی اتمی را تنها اندکی مختل می‌کند. جملهٔ درجهٔ دوم در دو وضعیت می‌تواند بسیار مهم شود: اگر میدان مغناطیسی بسیار شدید باشد؛ تصور می‌رود که میدانهایی به بزرگی 10^{12} گاؤس می‌توانند در سطح ستاره‌های نوترونی وجود داشته باشند، و این میدانها تغییرات بنیانی در ساختار اتمها ایجاد می‌کنند.[۲] جملهٔ درجهٔ دوم در بررسی حرکت ماکروسکوپیک الکترونها در میدان خارجی، مثلاً حرکت الکترون در یک سنکروترون، نیز اهمیت دارد.

اثر بهنجار زیمان

ابتدا تنها جملهٔ خطی را در نظر می‌گیریم، و محور z را در راستای $\mathbf{B}$ انتخاب می‌کنیم. بنابراین، به هامیلتونی مربوط به $\mathbf{B} = 0$ جملهٔ زیر اضافه می‌شود

$$H_1 = \frac{e}{2\mu c} B L_z \qquad (۳۶_۱۳)$$

اگر بسامد زیر را، که بسامد لارمور نامیده می‌شود، تعریف کنیم

$$\frac{eB}{2\mu c} = \omega_L \qquad (۳۷_۱۳)$$

و ویژه‌حالتهای انرژی را در نظر بگیریم که همزمان ویژه‌حالتهای $\mathbf{L}^2$ و L_z هستند، آنگاه جملهٔ اضافی ۱۳ـ۳۶ وقتی روی یک ویژه‌حالت اثر کند یک عدد به‌دست می‌دهد، یعنی

$$H_1 u_{nlm}(\mathbf{r}) = \hbar\omega_L m u_{nlm}(\mathbf{r}) \qquad (۳۸_۱۳)$$

که در آن m ویژه‌مقدار مؤلفهٔ z تکانهٔ زاویه‌ای، با $-l \leq m \leq l$، است. بنابراین، ترازهای انرژی موجود با واگنی $(2l+1)$تایی به $2l+1$ مؤلفهٔ همفاصله، با انرژیهای

$$E = -\frac{1}{2}\mu c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} + \hbar\omega_L m \qquad (۳۹_۱۳)$$

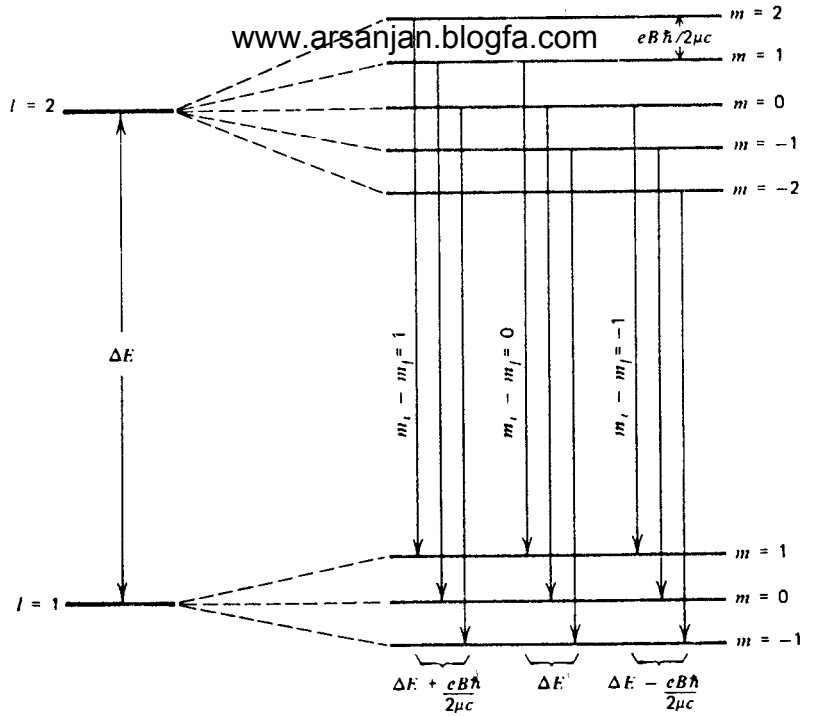
شکافته می‌شوند. اندازهٔ شکافتگی برابر است با

---

۲. مراجعه کنید به

R Cohen, L Lodenquai, and M Ruderman, *Phys Rev Lett*, **25**, 467 (1970).

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۱۳ـ۱ اثر بهنجار زیمان: از پانزده گذار ممکن بین حالتهای $l = ۲$ و $l = ۱$، که توسط میدان مغناطیسی شکافته شده‌اند، تنها نه گذار، مربوط به $\Delta m = m_i - m_f = -۱, ۰, ۱$، در تشکیل سه خط دخالت دارند.

$$\frac{eB\hbar}{۲\mu c} = \frac{e\hbar}{۲\mu c}\left(\frac{B}{e/a_۰^۲}\right)\frac{e}{a_۰^۲}$$

$$= \frac{e^۲\hbar}{۲\mu c}\left(\frac{\mu c\alpha}{\hbar}\right)^۲\left(\frac{B}{e/a_۰^۲}\right)$$

$$= \left(\frac{۱}{۲}\alpha^۲\mu c^۲\right)\alpha\frac{B}{e/a_۰^۲}$$

$$= \left(\frac{B}{۲{,}۴ \times ۱۰^۹}\right) \times ۱۳{,}۶ \text{ eV}$$

چون بنابه قاعده‌های گزینش (که بعداً خواهیم دید) تنها گذارهایی مجازند که در آنها m یا بدون تغییر بماند یا به اندازهٔ ۱ تغییر کند، معلوم می‌شود که خط منفردی که گذار با $B = ۰$ را نشان می‌دهد به سه خط شکافته می‌شود شکل (۱۳ـ۱). این اثر را اثر بهنجار زیمان می‌نامند. در واقع، اگر حالت اسپینی الکترون دراتم حالتی با اسپین صفر نباشد، برهم‌کنش اسپین الکترون

www.arsanjan.blogfa.com

با میدان مغناطیسی نقش قبلاً پیش‌بینی شد را تغییر می‌دهد. این اثر متداولتر را، که اثر نابهنجار زیمان نامیده می‌شود، پس از بحث اسپین بررسی خواهیم کرد.

میدانهای مغناطیسی بزرگ و حد کلاسیک

حل مسئلهٔ الکترون در میدان مغناطیسی ثابت تحت شرایطی که از نمی‌توان جملهٔ B^2 را صرفنظر کرد اما پتانسیل کولنی قابل چشمپوشی است جالب توجه است. در این شرایط، و باز هم با انتخاب راستای $\mathbf{B}$ به‌عنوان محور z، معادلهٔ شرودینگر با توجه به ۱۳ـ۳۰، ۱۳ـ۳۲ و ۱۳ـ۳۳ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi + \frac{eB}{2\mu c}L_z\psi + \frac{e^2B^2}{8\mu c^2}(x^2+y^2)\psi = E\psi \qquad (۱۳ـ۴۰)$$

حضور "پتانسیل" (x^2+y^2) نشان می‌دهد که برای جداسازی متغیرها از مختصات استوانه‌ای استفاده کنیم. با نوشتن

$$\begin{aligned} x &= \rho\ \cos\ \phi \\ y &= \rho\ \sin\ \phi \end{aligned} \qquad (۱۳ـ۴۱)$$

و به روشی که در آغاز فصل ۱۱ مطرح شد به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \cos\ \phi\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{\sin\ \phi}{\rho}\ \frac{\partial}{\partial\phi} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \sin\ \phi\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\cos\ \phi}{\rho}\ \frac{\partial}{\partial\phi} \end{aligned} \qquad (۱۳ـ۴۲)$$

و در نتیجه

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\ \frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\ \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \qquad (۱۳ـ۴۳)$$

اکنون اگر بنویسیم

$$\psi(\mathbf{r}) = u_m(\rho)e^{im\phi}e^{ikz} \qquad (۱۳ـ۴۴)$$

www.arsanjan.blogfa.com

نتیجه می‌گیریم که معادلهٔ دیفرانسیل [illegible] از

$$\frac{d^2u}{d\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{du}{d\rho}-\frac{m^2}{\rho^2}u-\frac{e^2B^2}{4\hbar^2c^2}\rho^2u+\left(\frac{2\mu E}{\hbar^2}-\frac{eB\hbar m}{\hbar^2c}-k^2\right)u=0 \qquad (۴۵_۱۳)$$

با وارد کردن متغیر

$$x=\sqrt{\frac{eB}{2\hbar c}}\rho \qquad (۴۶_۱۳)$$

معادله به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{d^2u}{dx^2}+\frac{1}{x}\frac{du}{dx}-\frac{m^2}{x^2}u-x^2u+\lambda u=0 \qquad (۴۷_۱۳)$$

که در آن

$$\lambda=\frac{4\mu c}{eB\hbar}\left(E-\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}\right)-2m \qquad (۴۸_۱۳)$$

می‌توان به‌سادگی دید که (الف) رفتار $u(x)$ در بینهایت که از

$$\frac{d^2u}{dx^2}-x^2u\approx 0$$

تعیین می‌شود به‌صورت $u(x)\sim e^{-x^2/2}$ است، و (ب) رفتار $u(x)$ در نزدیکی $x=0$ که از

$$\frac{d^2u}{dx^2}+\frac{1}{x}\frac{du}{dx}-\frac{m^2}{x^2}u\approx 0$$

تعیین می‌شود به‌صورت $u(x)\sim x^{|m|}$ است. بنابراین، می‌نویسیم

$$u(x)=x^{|m|}e^{-x^2/2}G(x) \qquad (۴۹_۱۳)$$

و با جاگذاری در ۱۳ـ۴۷ معادلهٔ دیفرانسیل حاکم بر $G(x)$ را به‌دست می‌آوریم:

$$\frac{d^2G}{dx^2}+\left(\frac{2|m|+1}{x}-2x\right)\frac{dG}{dx}+(\lambda-2-2|m|)G=0 \qquad (۵۰_۱۳)$$

www.arsanjan.blogfa.com

این معادله با تعویض متغیر

$$y = x^2 \tag{۵۱ـ۱۳}$$

به‌صورت معادلهٔ ۱۲ـ۱۱ در می‌آید:

$$\frac{d^2G}{dy^2} + \left(\frac{|m|+1}{y} - 1\right)\frac{dG}{dy} + \frac{\lambda - 2 - 2|m|}{4y}\,G = 0 \tag{۵۲ـ۱۳}$$

اکنون می‌توان به روش فصل ۱۲ عمل کرد. مقایسه با ۱۲ـ۱۱ نشان می‌دهد که باید داشته باشیم

$$\frac{1}{4}\lambda - \frac{1+|m|}{2} = n_r \tag{۵۳ـ۱۳}$$

که یک شرط ویژه‌مقدار با $n_r = 0, 1, 2, 3, \ldots$ است. این رابطه ایجاب می‌کند که $E - \hbar^2k^2/2\mu$، یعنی انرژی منهای انرژی جنبشی حرکت آزاد در راستای z، از رابطهٔ زیر به‌دست آید

$$E - \frac{\hbar^2k^2}{2\mu} = \frac{eB\hbar}{2\mu c}(2n_r + 1 + |m| + m) \tag{۵۴ـ۱۳}$$

و

$$G(y) = L_{n_r}^{|m|}(y) \tag{۵۵ـ۱۳}$$

این جواب را تنها در حد کلاسیک بررسی می‌کنیم. برای این کار، ابتدا نظریهٔ کلاسیک را مرور می‌کنیم. با فرض هامیلتونی ۱۳ـ۱۹، بدون جملهٔ پتانسیل نرده‌ای، داریم

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{p} + (e/c)\mathbf{A}}{\mu} \tag{۵۶ـ۱۳}$$

و با $\mathbf{A} = -(1/2)\mathbf{r} \times \mathbf{B}$ به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}\mu\mathbf{r} \times \mathbf{v} &= \mathbf{r} \times \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{r} \times \left(-\frac{1}{2}\mathbf{r} \times \mathbf{B}\right) \\ &= \mathbf{L} - \frac{e}{2c}[\mathbf{r}(\mathbf{r}\cdot\mathbf{B}) - r^2\mathbf{B}]\end{aligned} \tag{۵۷ـ۱۳}$$

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن از اتحاد زیر استفاده کرده‌ایم

$$\mathbf{a}\times(\mathbf{b}\times\mathbf{c})=\mathbf{b}(\mathbf{a}\cdot\mathbf{c})-\mathbf{c}(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}) \qquad (۵۸_۱۳)$$

مؤلفهٔ معادلهٔ ۱۳ـ۵۷ در راستای z عبارت است از

$$\mu(\mathbf{r}\times\mathbf{v})_z = L_z + \frac{e}{۲c}B(x^۲+y^۲)$$

یا

$$\mu\rho v = L_z + \frac{eB}{۲c}\rho^۲ \qquad (۵۹_۱۳)$$

از رابطهٔ نیروی وارد بر الکترون

$$\mathbf{F}=-\frac{e}{c}\mathbf{v}\times\mathbf{B} \qquad (۶۰_۱۳)$$

برای حرکت دورانی به‌دست می‌آوریم

$$\frac{\mu v^۲}{\rho}=\frac{evB}{c} \qquad (۶۱_۱۳)$$

از ترکیب این معادله با ۱۳ـ۵۹ به دو رابطهٔ زیر می‌رسیم

$$\frac{۱}{۲}\mu v^۲=\frac{eB}{\mu c}L_z \qquad (۶۲_۱۳)$$

و

$$\rho=\left[\frac{۲c}{eB}L_z\right]^{۱/۲} \qquad (۶۳_۱۳)$$

اکنون به رابطهٔ انرژی ۱۳ـ۵۴ بازمی‌گردیم. به دلیل کوچکی h، انرژی فقط وقتی می‌تواند برای مقادیر معقول B اندازهٔ ماکروسکوپیک داشته باشد که $(۲n_r+۱+|m|+m)$ بسیار بزرگ باشد. دو مورد وجود دارند: (الف) اگر $m<۰$، آنگاه n_r بسیار بزرگ است. اما n_r درجهٔ چندجمله‌ای $L_{n_r}^{|m|}(y)$ را تعیین می‌کند، یعنی تعداد صفرهای تابع را،[۳] و اگر این بسیار بزرگ باشد تابع نمی‌تواند

۳. نگاه کنید به بحث آغاز بخش مربوط به واگنی طیف در فصل ۱۲.

www.arsanjan.blogfa.com

در گسترهٔ کوچکی از y که در آن مدار کلاسیک قرار دارد بزرگ باشد. (ب) اگر $m > 0$، ضریب به‌صورت $(2n_r + 1 + 2m)$ درمی‌آید، و این می‌تواند به‌ازای مقادیر کوچک n_r بزرگ باشد به شرط اینکه m بزرگ باشد. در اینجا انرژی عبارت است از

$$E - \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \simeq \frac{eB}{\mu c}\hbar m \qquad (۶۴_۱۳)$$

که با نتیجهٔ کلاسیک توافق دارد. توجه کنید که مقدار

$$L_z = \hbar m \qquad (۶۵_۱۳)$$

همان‌طور که انتظار می‌رود مثبت است.

همچنین می‌توان نشان داد که شعاع مدار، که از بیشینه شدن توزیع احتمال شعاعی تعیین می‌شود، با مقدار کلاسیک تطابق دارد. فرض می‌کنیم $n_r = 0$. در این مورد، $L_{n_r}^{|m|}(y)$ یک مقدار ثابت است، و مجذور تابع‌موج بنابر ۱۳ـ۴۹ و ۱۲ـ۵۵ عبارت است از

$$P(x) = x^{2|m|}e^{-x^2} \qquad (۶۶_۱۳)$$

این کمیت در جایی بیشینه است که

$$\frac{dP}{dx} = (2|m|x^{2|m|-1} - 2x^{2|m|+1})e^{-x^2} = 0$$

یعنی در

$$x = \sqrt{|m|} \qquad (۶۷_۱۳)$$

که به‌دست می‌دهد

$$\rho = \left(\frac{2c}{eB}\hbar m\right)^{1/2} \qquad (۶۸_۱۳)$$

این مسئله مثال جالبی از اصل تطابق است.

www.arsanjan.blogfa.com

ترازهای لانداؤ

انتخاب $\mathbf{A} = (-yB/۲, xB/۲, ۰)$ یکتا نیست. انتخاب

$$\mathbf{A} = (۰, Bx, ۰) \tag{۶۹_۱۳}$$

نیز همان میدان مغناطیسی را به‌دست می‌دهد. اختلاف این $\mathbf{A}$ با $-\mathbf{r} \times \mathbf{B}/۲ = \mathbf{A}$ در یک تبدیل پیمانه‌ای ساده است:

$$\left(\frac{-yB}{۲}, \frac{xB}{۲}, ۰\right) = (۰, Bx, ۰) - \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)\left(\frac{yxB}{۲}\right) \tag{۷۰_۱۲}$$

با این انتخاب پتانسیل برداری، عملگر هامیلتونی برای الکترون در میدان مغناطیسی ثابت به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\begin{aligned}\frac{۱}{۲\mu}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^۲ &= \frac{۱}{۲\mu}\left(p_x^۲ + \left(p_y + \frac{eB}{c}x\right)^۲ + p_z^۲\right) \\ &= \frac{۱}{۲\mu}\left(p_x^۲ + p_y^۲ + \frac{۲eB}{c}xp_y + \left(\frac{eB}{c}\right)^۲ x^۲ + p_z^۲\right)\end{aligned} \tag{۷۱_۱۳}$$

بدیهی است که $[H, p_y] = ۰$ و $[H, p_z] = ۰$، و در نتیجه می‌توان توابعی ساخت که ویژه‌تابعهای همزمان p_y، p_z و H باشند. باز هم این حالت را یک ویژه‌تابع p_z با ویژه‌مقدار صفر می‌گیریم. اگر ویژه‌مقدار p_y را به‌صورت $\hbar k$ بنویسیم آنگاه ویژه‌تابع همزمان به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\psi(x, y) = e^{iky}v(x) \tag{۷۲_۱۳}$$

که درآن $v(x)$ عبارت است از جواب معادلهٔ

$$\frac{۱}{۲\mu}\left(-\hbar^۲\frac{d^۲}{dx^۲} + \left(\frac{eB}{c}\right)^۲\left(x + \frac{\hbar ck}{eB}\right)^۲\right)v(x) = Ev(x) \tag{۷۳_۱۳}$$

که دقیقاً معادلهٔ یک نوسانگر هماهنگ است که نقطهٔ تعادل آن به‌جای اینکه در $x = ۰$ باشد در $-x_۰ = -\hbar kc/eB$ قرار دارد. بنابراین، می‌توان جواب را به‌صورت زیر نوشت

$$\psi(x, y) = e^{i\epsilon Bx_۰ y/\hbar c}u(x - x_۰) \tag{۷۴_۱۳}$$

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن $u(x)$ ویژه‌جواب نوسانگر هماهنگ با نقطهٔ تعادل $x = ۰$ است. مقایسه با پتانسیل نوسانگر هماهنگ $\mu\omega^۲x^۲/۲$ نشان می‌دهد که

$$\omega = \frac{eB}{\mu c} \qquad (۷۵_۱۳)$$

و ویژه‌مقدارهای انرژی عبارت‌اند از

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{۱}{۲}\right) \quad n = ۰, ۱, ۲, ۳, \ldots \qquad (۷۶_۱۳)$$

این ترازهای انرژی را ترازهای لانداؤ می‌نامند.

اگر الکترون در نواری محبوس باشد که دارای اندازهٔ $L_۱$ در راستای x و اندازهٔ $L_۲$ در راستای y است، شرط مرزی در راستای y

$$\psi(y) = \psi(y + L_۲) \qquad (۷۷_۱۳)$$

ایجاب می‌کند که

$$\frac{eBx_۰}{\hbar c}L_۲ = ۲\pi n' \qquad n' = ۰, ۱, ۲, \ldots \qquad (۷۸_۱۳)$$

از آنجا که

$$۰ < x_۰ < L_۱ \qquad (۷۹_۱۳)$$

نتیجه می‌گیریم که

$$۰ \le n' \le \frac{eB}{۲\pi\hbar c}L_۱L_۲ \qquad (۸۰_۱۳)$$

به‌سادگی می‌توان وارسی کرد که $\hbar c/eB$ دارای ابعاد مساحت است. (یک راه سریع این کار این است که توجه کنیم که eBv/c و در نتیجه eB ابعاد نیرو دارد: $[eB] = [ML/T^۲]$، در حالی‌که $\hbar c$ دارای ابعاد $[ML^۳/T^۲] = [ML/T][L][L/T] = [x][p]$است.) طول مغناطیسی l_B را با رابطهٔ زیر تعریف می‌کنیم

$$l_B^۲ = \frac{\hbar c}{eB} \qquad (۸۱_۱۳)$$

www.arsanjan.blogfa.com

بنابراین،

$$n^*_{\max} = \frac{L_1 L_2}{2\pi l_B^2} = (\text{مساحت نمونه})/2\pi l_B^2 \qquad (۸۲_۱۳)$$

اکنون ببینیم وقتی پایینترین تراز لانداؤ ($n = 0$) پر است چه پیش می‌آید. یک نمونهٔ دوبعدی به مساحت A می‌تواند به‌ازای هر تراز انرژی یک الکترون بگیرد (شاید بپرسید چرا در هر حالت انرژی مطابق معمول دو الکترون وجود ندارند، اما چنانکه در فصل بعد خواهیم دید الکترونها دارای گشتاور مغناطیسی وابسته به اسپین هستند، و در نتیجه حالتهای "بالا" و "پایین" الکترون انرژیهای متفاوتی دارند). بنابراین، تعداد کل الکترونهایی که پایینترین تراز لانداؤ را پر می‌کنند برابر است با $n^*_{\max} = A/2\pi l_B^2$.

اثر کوانتومی هال با اعداد درست

بحث بالا به اثر کوانتومی هال با اعداد درست که اخیراً کشف شده است مربوط می‌شود (شکل ۱۳ـ۲). در اینجا به توصیف ساده‌ای از این پدیده بسنده می‌کنیم. اگر یک میدان الکتریکی را در جهت مثبت y به نمونهٔ دوبعدی اعمال کنیم، الکترونها در جهت منفی y حرکت می‌کنند، و چگالی جریان عبارت است از

$$j_y = \sigma_0 E_y \qquad (۸۳_۱۳)$$

که در آن $\sigma_0 = n_e^2 \tau_0 / m_e^*$. در اینجا n_e چگالی الکترون، m_e^* جرم مؤثر الکترون در ماده، و τ_0 کمیتی با بعد زمان است، که می‌توان آن‌را زمان بین برخوردهای الکترون با ناخالصیها و رویدادهای دیگری تعبیر کرد که باعث می‌شوند الکترون انرژی از دست بدهد و به‌طور نامحدود از میدان الکتریکی شتاب نگیرد.

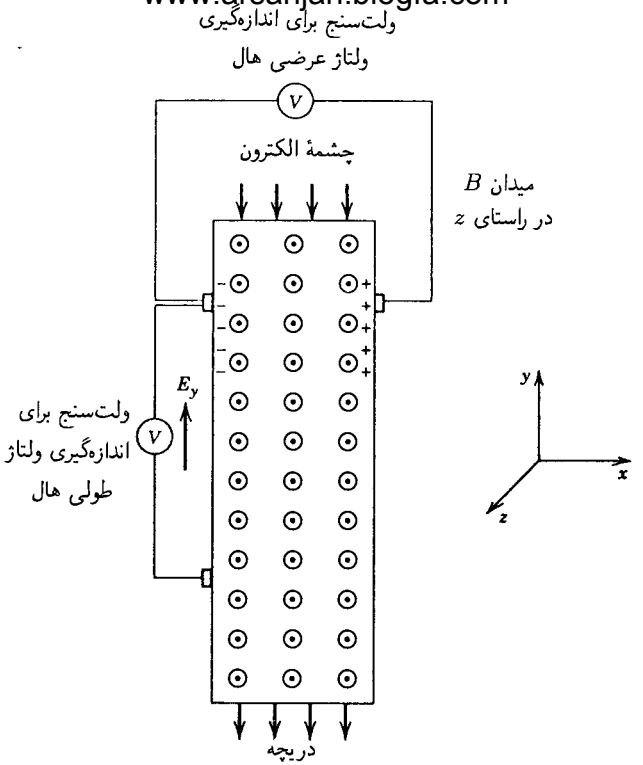
اگر میدان مغناطیسی B را در جهت z اعمال کنیم، به هر الکترون نیروی اضافی $\mathbf{F} = -e(\mathbf{v} \times \mathbf{B})/c$ وارد می‌شود. رابطهٔ سرعت $\mathbf{v}$ با چگالی جریان به‌صورت $\mathbf{j} = -n_e e \mathbf{v}$ است، و در نتیجه الکترونها به گونه‌ای رفتار می‌کنند که انگار میدان الکتریکی اضافی زیر به آنها اعمال می‌شود

$$\mathbf{E}' = \frac{(\mathbf{v} \times \mathbf{B})}{c} = \frac{-\mathbf{j} \times \mathbf{B}}{n_e e c}$$

بنابراین، در حضور میدان مغناطیسی چگالی جریان با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$\mathbf{j} = \sigma_0 \mathbf{E} - \sigma_0 \mathbf{j} \times \mathbf{B}/n_e e c \qquad (۸۴_۱۳)$$

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۱۳ـ۲ طرح کلی برای اندازه‌گیری ولتاژ هال.

که در آن $\mathbf{B}$ در راستای عمود بر صفحهٔ نمونه است. بنابراین، از حل معادله‌های

$$j_x = -\frac{\sigma_0 B}{n_e e c} j_y$$

$$j_y = \sigma_0 E_y + \frac{\sigma_0 B}{n_e e c} j_x$$

و با توجه به تعریف τ_0 به‌دست می‌آوریم

$$j_y = \frac{\sigma_0}{1 + (eB\tau_0/m_c^* c)^2} E_y$$

$$j_x = -\frac{n_e e c}{B}\left(1 - \frac{1}{1 + (eB\tau_0/m_c^* c)^2}\right) E_y \qquad (۸۵_۱۳)$$

تعداد کل الکترونها را می‌توان با $f n_{\max}^+$ نشان داد که در آن f نسبت تعداد کل الکترونها به

www.arsanjan.blogfa.com

تعداد حالتهای لانداؤ $n^*_{\max}$ است

$$n_e = \frac{f n^*_{\max}}{A} = f\frac{eB}{hc} \qquad (۸۶_۱۳)$$

با استفاده از این رابطه به‌دست می‌آوریم

$$\frac{j_y}{E_y} = \sigma_\circ \frac{1}{1+(eB\tau_\circ/m^*_e c)^2}$$
$$\frac{j_x}{e_y} = -\frac{fe^2}{h} + \frac{n_e ec/B}{1+(eB\tau_\circ/m^*_e c)^2} \qquad (۸۷_۱۳)$$

چگالی الکترونها و میدان مغناطیسی B در اختیار آزمایشگر است. اگر n_e ثابت باشد و B تغییر کند، آنگاه نسبتهای ۱۳ـ۸۷ را می‌توان برحسب B اندازه گرفت. از طرف دیگر، اگر B ثابت و n_e متغیر باشد، این نسبتها را می‌توان برحسب n_e اندازه گرفت. فون کلیتسینگ، دوردا، و پپر در سال ۱۹۸۰ نشان دادند که مقادیر B که به‌ازای آنها $f = ۱, ۲, ۳, \ldots$ باعث می‌شوند که (الف) $|j_x/E_y| = f(e^2/h)$، و (ب) $(j_y|E_y|) = ۰$. یک توضیح سادهٔ این اثر این است که وقتی ترازهای لانداؤ پر هستند الکترون نمی‌تواند به‌طور کشسان پراکنده شود، زیرا این الکترون نمی‌تواند به حالت دیگری با همان انرژی پس‌زده شود. الکترون نمی‌تواند با برانگیختگی گرمایی به تراز لانداؤ بعدی برود، زیرا در دماهای کم $(T \approx ۰٫۱\mathrm{K})$ و میدانهای مغناطیسی بزرگ $(B \approx ۱۰^5\mathrm{G})$، $kt \ll eBh/\mu c$. بنابراین $\tau_\circ \to \infty$، و نتیجهٔ مشاهده شده پیامد ۱۳ـ۸۷ است. این بحث بیش از حد ساده شده است، زیرا در آن اثرهای بسیار زیادی که در وضعیت واقعی روی می‌دهند به‌حساب نیامده‌اند. برای مثال، بعضی از الکترونها در ناکاملیهای شبکهٔ بلوری به‌دام می‌افتند. ترازهای لانداؤ به‌علت اثرات گرمایی و ناخالصی تیز نیستند، و برهم‌کنشهای الکترون‌ـالکترون کاملاً نادیده گرفته شده‌اند. با وجود این، وقتی همهٔ این پیچیدگیها را منظور کنیم، باز هم در مقادیر بحرانی B نسبت j_x/E_y را با دقتی بهتر از ۱ روی ۱۰ میلیون مضرب درستی از e^2/h به‌دست می‌آوریم.[۴]

---

۴. چنانکه آر لافلین نشان داده است، این کوانتش دقیق در واقع پیامد ناوردایی پیمانه‌ای است. نمونه‌ای از این استدلال را می‌توانید در کتاب زیر ببینید

C Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, Sixth Edition, John Wiley & Sons, Inc New York (1986).

www.arsanjan.blogfa.com

کوانتش شار و اثر آهارانوف-بوهم

حال به بحث پس از ۱۳-۲۳ باز می‌گردیم. در یک روش کاملاً صوری، می‌توانیم معادلهٔ

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{h}{i}\nabla + \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r})\right)^2 \psi(\mathbf{r}) + V(r)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \qquad (۸۸\text{-}۱۳)$$

را بنویسیم

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{-i(e/hc)f(\mathbf{r})}\psi_0(\mathbf{r}) \qquad (۸۹\text{-}۱۳)$$

حل کنیم. در اینجا $\psi_0(\mathbf{r})$ جواب معادلهٔ زیر است

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{h}{i}\nabla\right)^2 \psi_0(\mathbf{r}) + V(r)\psi_0(\mathbf{r}) = E\psi_0(\mathbf{r}) \qquad (۹۰\text{-}۱۳)$$

و تابع $f(\mathbf{r})$ انتگرال خطی زیر است که از یک نقطهٔ ثابت معین P تا نقطهٔ $\mathbf{r}$ گرفته می‌شود

$$f(\mathbf{r}) = \int_P^{\mathbf{r}} d\mathbf{r}' \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}') \qquad (۹۱\text{-}۱۳)$$

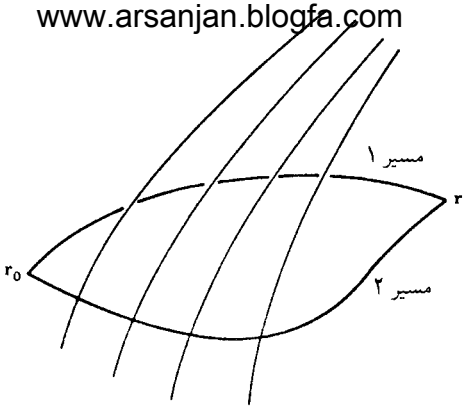
این انتگرال تنها وقتی $\mathbf{B} = 0$، یعنی در یک ناحیهٔ آزاد از میدان، معنی دارد زیرا اختلاف انتگرال در دو مسیر مختلف، که آنها را با ۱ و ۲ نشانگذاری می‌کنیم، برابر است با

$$\int_1 d\mathbf{r}' \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}', t) - \int_2 d\mathbf{r}' \mathbf{A}(\mathbf{r}', t) = \oint d\mathbf{r}' \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}', t)$$
$$= \int_S \nabla' \times \mathbf{A}(\mathbf{r}', t) \cdot d\mathbf{S} = \int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = \Phi \qquad (۹۲\text{-}۱۳)$$

که در آن از قضیهٔ استوکس استفاده کرده‌ایم، و Φ شار میدان مغناطیسی از سطحی است که بین دو مسیر قرار دارد (شکل ۱۳-۳). بنابراین، تنها اگر $\Phi = 0$ ضریب فاز در ۱۳-۸۹ مستقل از انتخاب مسیر انتگرال خطی خواهد بود. این استقلال وقتی لازم است که بخواهیم تابع موج تک‌مقداری باشد.

اگر بین دو مسیر سد وجود داشته باشد توابع موج الکترونهایی که روی این دو مسیر حرکت می‌کنند با هم تداخل می‌کنند. یک پیامد جالب این است که اگر الکترونی در یک ناحیه مرکب حرکت کند که همبند ساده نیست بلکه "حفره"ای را احاطه کرده باشد که

www.arsanjan.blogfa.com



شکل ۱۳ـ۳ انتگرالهای $\int_{r_0}^{r} A(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}'$ در دو مسیر ۱ و ۲ به‌طور کلی یکسان نیستند، زیرا اختلاف آنها برابر است با شار مغناطیسی Φ در حلقهٔ بسته.

حاوی شار Φ است آنگاه این الکترون پس از تکمیل مدار ضریب فاز اضافی $e^{ie\Phi/\hbar c}$ به‌دست می‌آورد. شرط تک‌مقدار بودن تابع‌موج الکترون، به‌طوری که ضریب فاز برابر واحد شود، ایجاب می‌کند که شار محصور کوانتیده باشد:

$$\Phi = \frac{2\pi\hbar c}{e} n \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \qquad (۹۳_۱۳)$$

این وضعیت در حرکت الکترونها در یک حلقهٔ ابررسانا که ناحیهٔ حاوی شار را احاطه کرده است پیش می‌آید. نخستین آزمایشها، که در سال ۱۹۶۱ انجام شدند[5]، مبتنی بر طرح زیر بودند: حلقه‌ای از ماده‌ای که می‌تواند ابررسانا شود در یک میدان مغناطیسی خارجی در دمایی بالاتر از دمای بحرانی قرار داده می‌شود، و از این‌رو حلقه ابررسانا نیست. چون ابررساناها خطوط میدان مغناطیسی را بجز در یک لایهٔ سطحی نازک دفع می‌کنند، در داخل ابررساناها $\mathbf{B} = 0$. این پدیده را اثر مایسنر می‌نامند.[6] اگر این حلقه را تا دمایی کمتر از دمای بحرانی سرد کنیم ابررسانا می‌شود، و شار مغناطیسی در داخل حلقه به دام می‌افتد (شکل ۱۳ـ۴). اندازه‌گیری سادهٔ شار نشان می‌دهد که رابطهٔ ۱۳ـ۹۳ با تقریب یک ضریب ثابت برقرار است، یعنی

$$\Phi = \frac{2\pi\hbar c}{(2e)} n \qquad (۹۴_۱۳)$$

5. B S Deaver and W Fairbank, *Phys Rev Lett*, **7**, 43 (1961); R Döll and M Nabauer; *ibid*, 7, 51 (1961).

۶. برای یک بحث عالی از این نشانه‌های ماکروسکوپیک مکانیک کوانتومی مطالعهٔ فصل ۲۱ از جلد سوم سخنرانیهای فاینمن دربارهٔ فیزیک اکیداً توصیه می‌شود.

www.arsanjan.blogfa.com

و

$$[L_-, L_z] = \hbar L_- \qquad (۳۱_۱۱)$$

همچنین، با توجه به $[\mathbf{L}^۲, \mathbf{L}] = ۰$ نتیجه می‌گیریم که

$$\begin{aligned} [\mathbf{L}^۲, L_\pm] &= ۰ \\ [\mathbf{L}^۲, L_z] &= ۰ \end{aligned} \qquad (۳۲_۱۱)$$

بنابراین، می‌توان نوشت

$$\mathbf{L}^۲ L_\pm Y_{lm} = L_\pm \mathbf{L}^۲ Y_{lm} = l(l+۱)\hbar^۲ L_\pm Y_{lm} \qquad (۳۳_۱۱)$$

و این نشان می‌دهد که $L_\pm Y_{lm}$ نیز ویژه‌تابعهای $\mathbf{L}^۲$ با ویژه‌مقداری هستند که با l مشخص می‌شود. از طرف دیگر، داریم

$$\begin{aligned} L_z L_+ Y_{lm} &= (L_+ L_z + \hbar L_+) Y_{lm} \\ &= m\hbar L + Y_{lm} + \hbar L_+ Y_{lm} \\ &= \hbar(m+۱) L_+ Y_{lm} \end{aligned} \qquad (۳۴_۱۱)$$

بنابراین، $L_+ Y_{lm}$ نیز ویژه‌تابع L_z با ویژه‌مقدار $\hbar(m+۱)$ است، یعنی به m یک واحد افزوده شده است. به‌همین ترتیب، می‌توان نشان داد

$$L_z L_- Y_{lm} = \hbar(m-۱) L_- Y_{lm} \qquad (۳۵_۱۱)$$

پس $L_- Y_{lm}$ ویژه‌تابع L_z است در حالی‌که از m یک واحد کاسته شده است. از این‌رو، L_+ و L_- را به ترتیب عملگرهای افزاینده و کاهنده می‌نامیم. می‌توان نوشت

$$L_\pm Y_{lm} = C_\pm(l,m) Y_{l,m\pm۱} \qquad (۳۶_۱۱)$$

با توجه به هرمیتی بودن L_x و L_y داریم

$$L_\pm^\dagger = (L_x \pm i L_y)^\dagger = L_x \mp i L_y = L_\mp \qquad (۳۷_۱۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com

بنابراین، می‌توان رابطهٔ

$$\langle L_{\pm}Y_{lm}|L_{\pm}Y_{lm}\rangle \geq ۰ \qquad (۳۸_۱۱)$$

را به‌صورت زیر نوشت

$$\langle Y_{lm}|L_{\mp}L_{\pm}Y_{lm}\rangle \geq ۰ \qquad (۳۹_۱۱)$$

و در نتیجه با استفاده از ۱۱ـ۲۷ و ۱۱ـ۲۸ به‌دست می‌آوریم

$$\langle Y_{lm}|(\mathbf{L}^{۲} - L_z^{۲} \pm \hbar L_z)Y_{lm}\rangle \geq ۰ \qquad (۴۰_۱۱)$$

که نشان می‌دهد

$$\begin{aligned} l(l+۱) &\geq m^{۲} + m \\ l(l+۱) &\geq m^{۲} - m \end{aligned} \qquad (۴۱_۱۱)$$

چون $l(l+۱) \geq ۰$، می‌توانیم بدون نقض کلیت قرار دهیم $l \geq ۰$.[۲] بنابراین، از ۱۱ـ۴۱ نتیجه می‌گیریم که

$$-l \leq m \leq l \qquad (۴۲_۱۱)$$

اگر m یک مقدار کمینه (m_-) داشته باشد، آنگاه برای ویژه‌حالت مربوط داریم

$$L_-Y_{lm_-} = ۰ \qquad (۴۳_۱۱)$$

برای محاسبهٔ m_-، ۱۱ـ۲۷ را بر Y_{lm} اعمال می‌کنیم و به‌دست می‌آوریم

$$l(l+۱)h^{۲} = {m_-}^{۲}h^{۲} - m_-h^{۲} \qquad (۴۴_۱۱)$$

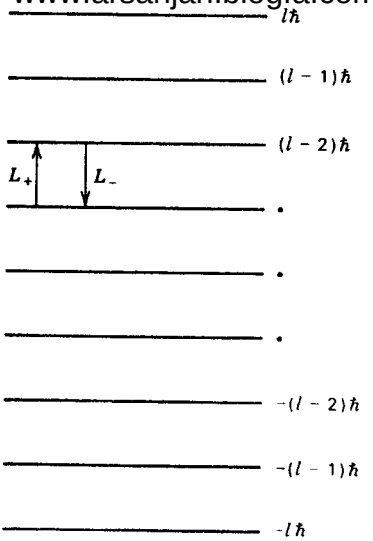
به‌همین ترتیب، اگر m بیشینه‌ای داشته باشد (m_+) باید

$$L_+Y_{lm_+} = ۰ \qquad (۴۵_۱۱)$$

---

۲. اگر $l+۱ \geq ۰$ را بگیریم کافی است تعریف کنیم $L = -l-۱$ و به‌جای l قدیمی L مثبت جدید را قرار دهیم. چیزی تغییر نمی‌کند زیرا $L(L+۱) = l(l+۱)$.

www.arsanjan.blogfa.com



شکل ۱۱ـ۱ طیف عملگر L_z برای یک مقدار معین l.

و از اعمال ۱۱ـ۲۸ بر Y_{lm_+} به‌دست می‌آوریم

$$l(l+1)\hbar^2 = m_+^2\hbar^2 + m_+\hbar^2 \qquad (۴۶_۱۱)$$

در نتیجه

$$\begin{aligned} m_- &= -l \\ m_+ &= +l \end{aligned} \qquad (۴۷_۱۱)$$

چون مقدار بیشینه باید از مقدار کمینه با گامهای واحد (اعمال مکرر L_+) به‌دست آید، معلوم می‌شود که (شکل ۱۱ـ۱): (الف) به‌ازای یک l معین $(2l+1)$ حالت وجود دارند، یعنی $2l+1$ یک عدد درست است. و (ب) m می‌تواند مقادیر زیر را بگیرد

$$m = -l, -l+1, -l+2, \ldots, l-1, l$$

امکان نیم فرد بودن l، یعنی $l = 1/2, 3/2, \ldots$، را در فصل ۱۴ در بحث اسپین بررسی می‌کنیم. در این فصل تنها مقادیر درست l را در نظر می‌گیریم.

همچنین می‌توان ضرایب $C_\pm(l,m)$ را که در (۱۱ـ۳۶) وارد می‌شوند محاسبه کرد. می‌نویسیم

www.arsanjan.blogfa.com

$$\begin{aligned}|C_\pm(l,m)|^2\langle Y_{l,m\pm1}|Y_{l,m\pm1}\rangle &= \langle L_\pm Y_{lm}|L_\pm Y_{lm}\rangle \\ &= \langle Y_{lm}|L_\mp L_\pm Y_{lm}\rangle \\ &= \langle Y_{lm}|\mathbf{L}^2 - L_z^2 \mp \hbar L_z)Y_{lm}\rangle \\ &= \hbar^2[l(l+1) - m(m\pm1)]\end{aligned}$$

بنابراین، با انتخاب فاز مناسب، به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}C_+(l,m) &= \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m+1)} = \hbar\sqrt{(l-m)(l+m+1)} \\ C_-(l,m) &= \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m-1)} = \hbar\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\end{aligned} \qquad (۴۸_۱۱)$$

هماهنگهای کروی

آنچه را می‌توان از روشهای عملگری به‌دست آورد در بالا گفتیم. اکنون با استفاده از صورت صریح عملگرهای L_z و $L_\pm$ رابطه‌های مربوط به ویژه‌تابعهای $\mathbf{L}^2$ را برحسب زاویه‌های θ و ϕ به‌دست می‌آوریم. این مشابه با مورد ۷ـ۵۰ تا ۷ـ۵۳ است. بنابه آنچه قبلاً گفتیم، می‌نویسیم

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = \Theta_{lm}(\theta)e^{im\phi} \qquad (۴۹_۱۱)$$

و رابطهٔ ۱۱ـ۴۵ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\hbar\, e^{i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\,\cot\,\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\Theta_{ll}(\theta)e^{il\phi} = \hbar\, e^{i(l+1)\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - l\,\cot\,\theta\right)\Theta_{ll}(\theta) = 0 \qquad (۵۰_۱۱)$$

به‌سادگی می‌توان دید که جواب این معادله، با تقریب یک ضریب ثابت که آن‌را بعداً از شرط بهنجارش به‌دست می‌آوریم، عبارت است از

$$\Theta_{ll}(\theta) = (\sin\,\theta)^l \qquad (۵۱_۱۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com

هر حالت اختیاری را می‌توان با اعمال عملگر کاهنده به‌دست آورد:

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = C(L_-)^{l-m}(\sin\ \theta)^l e^{il\phi} \qquad (۵۲\text{-}۱۱)$$

ابتدا می‌نویسیم

$$\begin{aligned} L_-Y_{ll}(\theta,\phi) &= h\ e^{-i\phi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\ \cot\ \theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)(\sin\ \theta)^l e^{il\phi} \\ &= h\ e^{i(l-1)\phi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} - l\ \cot\ \theta\right)(\sin\ \theta)^l \end{aligned}$$

اما برای یک تابع اختیاری $f(\theta)$ می‌توان نشان داد

$$\left(\frac{d}{d\theta} + l\ \cot\ \theta\right) f(\theta) = \frac{1}{(\sin\ \theta)^l}\frac{d}{d\theta}\left[(\sin\ \theta)^l f(\theta)\right] \qquad (۵۳\text{-}۱۱)$$

و در نتیجه داریم

$$Y_{l,l-1} = C'\frac{e^{i(l-1)\phi}}{(\sin\ \theta)^l}\left(-\frac{d}{d\theta}\right)\left[(\sin\ \theta)^l(\sin\ \theta)^l\right] \qquad (۵۴\text{-}۱۱)$$

مرحلهٔ بعد نیز از همین قرار است، بجز اینکه به‌جای l می‌گذاریم $l-1$ و ۱۱ـ۵۳ را بر ۱۱ـ۵۴ اعمال می‌کنیم:

$$\begin{aligned} Y_{l,l-2} &= C''\frac{e^{i(l-2)\phi}}{(\sin\ \theta)^{l-1}}\left(-\frac{d}{d\theta}\right)\left[(\sin\ \theta)^{l-1}\frac{1}{(\sin\ \theta)^l}\left(-\frac{d}{d\theta}\right)(\sin\ \theta)^{2l}\right] \\ &= C''(-1)^2\frac{e^{i(l-2)\phi}}{(\sin\ \theta)^{l-1}}\frac{d}{d\theta}\left[\frac{1}{\sin\ \theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\ \theta)^{2l}\right] \end{aligned} \qquad (۵۵\text{-}۱۱)$$

با واردکردن متغیر جدید $u = \cos\theta$ داریم $d/du = -1/(\sin\ \theta)(d/d\theta)$، و رابطه‌های ۱۱ـ۵۴ و ۱۱ـ۵۵ به‌صورت زیر درمی‌آیند

$$\begin{aligned} Y_{l,l-1} &= C'\frac{e^{i(l-1)\phi}}{(\sin\ \theta)^{l-1}}\frac{d}{du}[(1-u^2)^l] \\ Y_{l,l-2} &= C''\frac{e^{i(l-2)\phi}}{(\sin\ \theta)^{l-2}}\frac{d^2}{du^2}[(1-u^2)^l] \end{aligned} \qquad (۵۶\text{-}۱۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com

رابطهٔ کلی عبارت است از

$$Y_{lm} = C\frac{e^{im\phi}}{(\sin\ \theta)^m}\left(\frac{d}{du}\right)^{l-m}[(1-u^2)^l] \qquad (۵۷_۱۱)$$

ویژه‌تابعها را باید بهنجارکنیم. چون با زاویه‌های کروی کار می‌کنیم، که گسترهٔ انتگرال‌گیری روی آنها $0 \le \phi \le 2\pi$ و $0 \le \theta \le \pi$ است (شکل ۱۰ـ۱)، و در اینجا انتگرال روی سطح کره (با $r = \text{const.}$) عبارت است از

$$\int d\Omega = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\ \theta\, d\theta \qquad (۵۸_۱۱)$$

باید بنویسیم

$$\langle Y_{lm}|Y_{lm}\rangle = 1 = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{1} du|C|^2\left[\frac{1}{(1-u^2)^{m/2}}\left(\frac{d}{du}\right)^{l-m}(1-u^2)^l\right]^2$$

محاسبهٔ این انتگرال پرزحمت است، و به نوشتن ویژه‌تابعهای بهنجارشده، با فازهایی که بنابه قرارداد به‌کار می‌روند، بسنده می‌کنیم: به‌ازای $m \ge 0$ داریم

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = (-1)^m\left[\frac{2l+l}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right]^{1/2} P_1^m(\cos\ \theta)e^{im\phi} \qquad (۵۹_۱۱)$$

علاوه بر این،

$$Y_{l,-m} = (-1)^m Y_{lm}^* \qquad (۶۰_۱۱)$$

چندجمله‌ایهای لژاندر وابسته (به‌ازای $m \ge 0$) با رابطهٔ زیر داده می‌شوند

$$P_1^m(u) = (-1)^{l+m}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\frac{(1-u^2)^{-m/2}}{2^l l!}\left(\frac{d}{du}\right)^{l-m}(1-u^2)^l \qquad (۶۱_۱۱)$$

و برای مقادیر منفی m داریم

$$P_l^{-m}(u) = (-1)^m\frac{(l-m)!}{(1+m)!}P_l^m(u) \qquad (۶۲_۱۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com

به‌ازای $m = l$ (یا $m = -l$)، به‌دست می‌آوریم

$$Y_{ll}(\theta, \phi) = K (\sin\ \theta)^l e^{il\phi}$$

که در آن K مقداری ثابت است. بنابراین، توزیع احتمال برحسب زاویهٔ قطبی نسبت به محور z به‌صورت زیر است

$$|Y_{ll}|^2 = K^2(\sin\ \theta)^{2l} \qquad (۶۳_۱۱)$$

مشاهده می‌کنیم که برای مقادیر بزرگ l این تابع تقریباً به صفحهٔ استوایی محدود است. در واقع، بیشترین مقدار L_z به‌ازای $m = l$ روی می‌دهد، و از این‌رو $\mathbf{L}^2 \approx L_z^2$. در حد کلاسیک، که در آن $l \gg 1$، داریم

$$\frac{\mathbf{L}^2 - L_z^2}{\mathbf{L}^2} = \frac{1}{l} \to 0 \qquad (۶۴_۱۱)$$

یعنی می‌توان تکانهٔ زاویه‌ای را در یک راستای خاص (در اینجا محور z) قرار داد. این هم‌راستایی متناظر است با اینکه $\langle L_x^2 \rangle = \langle L_y^2 \rangle = 0$، که وقتی اثرات مکانیک کوانتومی مهم می‌شوند غیرممکن است (به‌علت رابطه‌های جابه‌جایی).

چند ویژه‌تابع را در زیر می‌نویسیم

$$\begin{aligned}
Y_{0,0} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\
Y_{1,1} &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{i\phi} \sin\ \theta \\
Y_{1,0} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\ \theta \\
Y_{2,2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} e^{2i\phi} \sin^2 \theta \\
Y_{2,1} &= -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} e^{i\phi} \sin\theta\ \cos\ \theta \\
Y_{2,0} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\ \cos^2 \theta - 1)
\end{aligned} \qquad (۶۵_۱۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com

قضیهٔ بسط

$Y_{lm}(\theta,\phi)$ها که توابع راست‌هنجاری از θ و ϕ هستند یک مجموعهٔ کامل تشکیل می‌دهند. بنابراین، در اینجا قضیهٔ بسط ایجاب می‌کند که هر تابعی از θ و ϕ را بتوان به‌صورت زیر بسط داد

$$f(\theta,\phi)=\sum\sum C_{lm}Y_{lm}(\theta,\phi) \qquad (۶۶_۱۱)$$

که در آن

$$C_{lm}=\int d\Omega\, Y^{*}_{lm}(\theta,\phi)f(\theta,\phi) \qquad (۶۷_۱۱)$$

و انتگرال‌گیری روی زاویهٔ فضایی با ۱۱ـ۵۸ تعریف می‌شود. همچنین بنابه قضیهٔ بسط اگر $f(\theta,\phi)$ تابع‌موج زاویه‌ای یک حالت باشد که به‌صورت زیر بهنجار شده است

$$\int d\Omega|f(\theta,\phi)|^{۲}=۱ \qquad (۶۸_۱۱)$$

آنگاه $|C_{lm}|^{۲}$ احتمال این است که از اندازه‌گیری همزمان $\mathbf{L}^{۲}$ و L_z در این حالت به‌ترتیب $l(l+۱)\hbar^{۲}$ و $m\hbar$ به‌دست آید.

احتمال به‌دست آمدن $l(l+۱)\hbar^{۲}$ از اندازه‌گیری $\mathbf{L}^{۲}$ عبارت است از

$$P(l)=\sum_{m=-l}^{l}|C_{lm}|^{۲} \qquad (۶۹_۱۱)$$

و به‌سادگی می‌توان دید که مقدار انتظاری L_z برابر است با

$$\langle\mathbf{L}_z\rangle=\sum_{l}\sum_{m=-l}^{l}m\hbar|C_{lm}|^{۲} \qquad (۷۰_۱۱)$$

قضیهٔ بسط ۱۱ـ۶۶ را با نمادنگاری مجرد زیر در نظر بگیرید

$$|\psi\rangle=\sum_{l,m}C_{lm}|Y_{lm}\rangle \qquad (۷۱_۱۱)$$

با توجه به شرط راست‌هنجاری

$$\langle Y_{l'm'}|Y_{lm}\rangle=\delta_{ll'}\delta_{mm'} \qquad (۷۲_۱۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com

به‌دست می‌آوریم

$$C_{lm} = \langle Y_{lm}|\psi\rangle \qquad (۷۳_۱۱)$$

۷۱ـ۱۱ با جاگذاری ۷۳ـ۱۱ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$|\psi\rangle = \sum_{l} \sum_{m=-۱}^{l} |Y_{lm}\rangle\langle Y_{lm}|\psi\rangle$$

بنابراین، باید

$$\sum_{l} \sum_{m=-۱}^{l} |Y_{lm}\rangle\langle Y_{lm}| = ۱ \qquad (۷۴_۱۱)$$

که در آن ۱ عملگر واحد است.

با استفاده از قضیهٔ بسط می‌توان به این پرسش که اغلب مطرح می‌شود پاسخ داد: راستای z چه ویژگی خاصی دارد؟ آیا نمی‌توان تکانهٔ زاویه‌ای را (تا جایی که ممکن است) با محور x همراستا کرد؟ پاسخ این است که این کار واقعاً امکانپذیر است. چنین حالتی، که باید در نزدیکی صفحهٔ استوایی حول محور x (در مجاورت $\phi = \pi/۲$) محدود باشد، یک ترکیب خطی خاص از Y_{lm}ها خواهد بود، و خواص فیزیکی آن دقیقاً همان خواص حالت Y_{ll} است.

موج تخت برحسب هماهنگهای کروی

جواب معادلهٔ ذرهٔ آزاد

$$\nabla^۲\psi(\mathbf{r}) + k^۲\psi(\mathbf{r}) = ۰$$

را می‌توان به‌دو صورت نوشت. یک صورت این جواب همان جواب موج تخت است:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \qquad (۷۵_۱۱)$$

راه دیگر این است که آن‌را به‌صورت یک برهم‌نهشی خطی از جوابهای پاره‌موجی بنویسیم:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum\sum A_{lm} j_l(kr)\, Y_{lm}(\theta,\phi) \qquad (۷۶_۱۱)$$

بنابراین، می‌توان A_{lm} را از ... به‌دست آورد. توجه کنید که زاویه‌های کروی θ و ϕ مختصات بردار $\mathbf{r}$ نسبت به یک راستای اختیاری هستند که آن‌را محور z می‌گیریم. اگر این محور z را با جهت $\mathbf{k}$ (که تا اینجا یک جهت اختیاری است) تعریف کنیم آنگاه می‌توان نوشت

www.arsanjan.blogfa.com

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = e^{ikr\cos\theta} \qquad (۷۷_۱۱)$$

بنابراین، سمت چپ ۱۱ـ۷۶ تابع زاویهٔ سمتی ϕ نیست و از این‌رو در سمت راست تنها جمله‌هایی با $m = ۰$ می‌توانند ظاهر شوند؛ در نتیجه، با استفاده از

$$Y_{l۰}(\theta,\phi) = \left(\frac{۲l+۱}{۴\pi}\right)^{۱/۲} P_l(\cos\theta) \qquad (۷۸_۱۱)$$

که در آن $P_l(\cos\theta)$ چندجمله‌ای لژاندر است، به‌دست می‌آوریم

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=۰}^{\infty}\left(\frac{۲l+۱}{۴\pi}\right)^{۱/۲} A_l j_l(kr) P_l(\cos\theta) \qquad (۷۹_۱۱)$$

با توجه به رابطهٔ

$$\frac{۱}{۲}\int_{-۱}^{۱} d(\cos\theta) P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) = \frac{\delta_{ll'}}{۲l+۱} \qquad (۸۰_۱۱)$$

که پیامد مستقیم رابطهٔ راست‌هنجاری برای Y_{lm}ها و ۱۱ـ۷۸ است، نتیجه می‌گیریم که

$$A_l j_l(kr) = \frac{۱}{۲}[۴\pi(۲l+۱)]^{۱/۲}\int_{-۱}^{۱} dz P_l(z) e^{ikrz} \qquad (۸۱_۱۱\text{الف})$$

دو طرف این معادله را در حد $kr \to ۰$ با هم مقایسه می‌کنیم. جملهٔ طرف چپ عبارت است از

$$A_l \frac{(kr)^l}{۱\cdot۳\cdot۵\cdot\ldots\cdot(۲l+۱)}$$

و در طرف راست، جملهٔ شامل $(kr)^l$ به‌صورت زیر است

$$\frac{۱}{۲}[۴\pi(۲l+۱)]^{۱/۲}(ikr)^l\int_{-۱}^{۱} dz\, P_l(z) z^l/l! \qquad (۸۱_۱۱\text{ب})$$

www.arsanjan.blogfa.com

انتگرال را می‌توان با توجه به اینکه $P_l(z)$ یک چندجمله‌ای درجهٔ l برحسب z است محاسبه کرد. ضریب جملهٔ مربوط به بزرگترین توان، z^l، با استفاده از ۱۱ـ۶۱ به‌دست می‌آید

$$(-1)^l \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dz}\right)^l (1-z^2)^l = \frac{2l(2l-1)(2l-2)\cdots(l+1)}{2^l l!} z^l + O(z^{l-2})$$

بنابراین، چون طرف چپ همان $P_l(z)$ است و $O(z^{l-2})$ شامل $P_{l-2}(z)$، $P_{l-4}(z)$، ... است، داریم

$$z^l = \frac{2^l l!}{2l(2l-1)(2l-2)\cdots(l+1)} P_l(z) + \text{جمله‌های شامل } P_{l-2}(z) \text{ و ماقبل}$$

با جاگذاری در ۱۱ـ۸۱ب و استفاده از ۱۱ـ۸۰، سرانجام به‌دست می‌آوریم

$$A_l \frac{(kr)^l}{1\cdot 3\cdot 5\cdot\cdots\cdot(2l+1)} = \frac{1}{2}[4\pi(2l+1)]^{1/2}(ikr)^l \frac{1}{l!} \frac{2^l l!}{2l(2l-1)(2l-2)\cdots(l+1)} \frac{2}{2l+1}$$

با تعیین Al، بسط ۱۱ـ۷۹ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos\theta) \qquad (۱۱ـ۸۲)$$

که در بحث نظریهٔ برخورد بسیار مفید است.

مسائل

۱۱ـ۱ یک مولکول از دو اتم یکسان تشکیل شده است که هر یک در حالت پایهٔ خود دارای اسپین ۰ است. در میان برانگیختگیهای ممکن این مولکول، برانگیختگیهای چرخشی را در نظر می‌گیریم. اگر این چرخش تنها حول محور z باشد، به‌طوری که $H = L_z^2/2I$، و فاصلهٔ بین اتمها را ثابت بگیریم، طیف چرخشی را به‌دست آورید. اگر اسپین اتمها ۱/۲ باشد و هر دو اتم در یک حالت اسپینی باشند، طیف به‌چه صورتی درمی‌آید؟

۱۱ـ۲ هماهنگهای کروی در ۱۱ـ۶۵ را برحسب $x = r\sin\theta\cos\phi$، $y = r\sin\theta\sin\phi$ و $z = r\cos\theta$ بیان کنید.

www.arsanjan.blogfa.com

۳ـ۱۱ $\langle Y_{lm_1}|L_x|Y_{lm_2}\rangle$ و $\langle Y_{lm_1}|L_y|Y_{lm_2}\rangle$ را محاسبه کنید.

۴ـ۱۱ $\langle Y_{lm_1}|L_x^2|Y_{lm_2}\rangle$ و $\langle Y_{lm_1}|L_y^2|Y_{lm_2}\rangle$ را محاسبه کنید.

[راهنمایی: با استفاده از ۱۱ـ۳۶ و ۱۱ـ۴۸، $\langle Y_{lm_1}|L_+^2|Y_{lm_2}\rangle$ و کمیتهای لازم دیگر را محاسبه کنید.]

۵ـ۱۱ هامیلتونی یک چرخنده با تقارن محوری با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$H = \frac{L_x^2 + L_y^2}{2I_1} + \frac{L_z^2}{2I_2}$$

ویژه‌مقدارهای H را به‌دست آورید. طیف را با فرض $I_1 > I_2$ ترسیم کنید.

۶ـ۱۱ ثابت کنید $\langle L_x^2\rangle = \langle L_y^2\rangle = 0$ فقط برای حالتی با تکانهٔ زاویه‌ای کل $l = 0$ ممکن است.

[راهنمایی: از رابطهٔ کاملیت

$$\sum\sum |Y_{lm}\rangle\langle Y_{lm}| = 1$$

استفاده کنید.]

۷ـ۱۱ اگر محورکوانتش در راستای x باشد، یعنی L_x عملگر برگزیده باشد، می‌توان نقطهٔ $\mathbf{r}$ را با زاویه‌های Θ و Φ تعریف کرد که به‌ترتیب عبارت‌اند از زاویه‌ای که بردار مکان $\mathbf{r}$ با محور x می‌سازد و زاویه‌ای که تصویر $\mathbf{r}$ روی صفحهٔ yz (عمود بر محور x) با محور y می‌سازد. هماهنگهای کروی را در این مورد با $Y_{LM}(\Theta, \Phi)$ نشان می‌دهیم، و اینها را می‌توان برحسب $Y_{lm}(\theta, \phi)$ها بسط داد:

$$Y_{LM}(\Theta, \Phi) = \sum_l \sum_m C_{lm}(L, M) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

(الف) Θ و Φ را برحسب θ و ϕ به‌دست آورید.

(ب) تابع‌موج مربوط به $M = L$ را در نظر بگیرید، و خواص $C_{lm}(L, L)$ را تا جایی که می‌توانید تعیین کنید.

۸ـ۱۱ صورت صریح هماهنگهای کروی بهنجارشدهٔ $l = 3$، Y_{33}، Y_{32}، Y_{31} و Y_{30}، را به‌دست آورید.

۹ـ۱۱ با استفاده از روشی که در این فصل به‌اختصار بیان شد، دربارهٔ چرخش در چهار بعد بحث کنید. تعمیم L در اینجا عبارت است از مجموعهٔ عملگرهایی که می‌توان آنها را به‌صورت زیر نوشت

$$L_{ij} = -i(x_i\partial_j - x_j\partial_i)$$

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن ∂_i نشاندهندهٔ $\partial/\partial x_i$ است، و i و $j = ۱, ۲, ۳$. با وارد کردن

$$(J_۱, J_۲, J_۳) = (L_{۲۳}, L_{۳۱}, L_{۱۲})$$

و

$$(K_۱, K_۲, K_۳) = (L_{۱۴}, L_{۲۴}, L_{۳۴})$$

(الف) رابطه‌های جابه‌جایی تمام این شش عملگر را بین خودشان به‌دست آورید.
(ب) نشان دهید هر یک از عملگرهای

$$\mathbf{J}^{(+)} = \frac{۱}{۲}(\mathbf{J} + \mathbf{K}); \ \mathbf{J}^{(-)} = \frac{۱}{۲}(\mathbf{J} - \mathbf{K})$$

از رابطه‌های جابه‌جایی عملگر تکانهٔ زاویه‌ای پیروی می‌کنند و با یکدیگر جابه‌جا می‌شوند. با استفاده از نتیجهٔ نهایی، بزرگترین مجموعهٔ مشاهده‌پذیرهای جابه‌جا شونده را به‌دست آورید، و از اینجا اعداد کوانتومی را که باید برای نشانگذاری ویژه‌تابعها به‌کار برده شوند تعیین کنید.

۱۱ـ۱۰ ذره‌ای در یک پتانسیل متقارن کروی در حالتی است که با بستهٔ موج زیر توصیف می‌شود

$$\psi(x, y, z) = C(xy + yz + zx)e^{-\alpha r^۲}$$

احتمال اینکه از اندازه‌گیری مجذور تکانهٔ زاویه‌ای مقدار ۰ به‌دست آید چقدر است؟ احتمال به‌دست آمدن $۶\hbar^۲$ را تعیین کنید. اگرمعلوم شود که l برابر با ۲ است، احتمالهای نسبی مربوط به $m = ۲, ۱, ۰, -۱, -۲$ را محاسبه کنید.

۱۱ـ۱۱ الگوی زیر را برای یک استوانهٔ کاملاً هموار در نظر بگیرید: این حلقه‌ای است به شعاع R متشکل از ذرات یکسان هم‌فاصله به جرم M/N، و در نتیجه جرم حلقه M و گشتاور لختی آن $MR^۲$ است. مقادیر ممکن تکانهٔ زاویه‌ای و ویژه‌مقدارهای انرژی را محاسبه کنید. اختلاف انرژی بین حالت پایه با تکانهٔ زاویه‌ای صفر و اولین حالت برانگیخته چقدر است؟ نشان دهید که این تفاضل به‌ازای $N \to \infty$ به بینهایت میل می‌کند. این نتیجه را با انرژی یک استوانهٔ "دندانه‌ای" که فاقد تقارن تحت چرخش $۲\pi/N$ رادیان است، مقایسه کنید. این مثال نشان می‌دهد که به چرخش درآوردن یک استوانهٔ کاملاً هموار غیرممکن است، و این نتیجه سازگار با این واقعیت است که برای استوانهٔ کاملاً هموار چنین چرخشی غیرقابل مشاهده است.

۱۱ـ۱۲ $\mathbf{L}^۲$ را برحسب $\partial/\partial\theta$ و $\partial/\partial\phi$ بیان کنید. معادلهٔ دیفرانسیل حاکم بر Θ_{lm} را که در ۱۱ـ۴۹ وارد شده است بنویسید.

مراجع

www.arsanjan.blogfa.com

مطالب این فصل را می‌توان در هر یک از کتابهایی که در کتابشناسی معرفی شده‌اند پیدا کرد. برای نگاهی عمیقتر به پیامدهای ناوردایی تحت چرخش، مخصوصاً مراجعه کنید به

K Gottfried, *Quantum Mechanics*, Vol 1, W A Benjamin, New York, 1966.

M E Rose, *Elementary Theory of Angular Momentum*, John Wiley & Sons, New York, 1957.

www.arsanjan.blogfa.com

۱۲

اتم هیدروژن

اتم هیدروژن از همهٔ اتمها ساده‌تر است، زیرا بیش از یک الکترون ندارد. بنابراین، معادلهٔ شرودینگر پس از جدا کردن حرکت مرکز جرم یک معادلهٔ تک‌ذره‌ای می‌شود. اتمهای هیدروژنگونه را در نظر می‌گیریم، یعنی اتمهایی که تنها یک الکترون دارند اما هسته‌های آنها می‌توانند بیشتر از یک پروتون داشته باشند. بنابراین، پتانسیل عبارت است از

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \qquad (۱_۱۲)$$

و معادلهٔ شرودینگر شعاعی به‌صورت زیر است

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right) R + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right] R = 0 \qquad (۲_۱۲)$$

تنها حالتهای مقید، یعنی جوابهای مربوط به $E < 0$، را بررسی می‌کنیم با استفاده از تعویض متغیر مناسب

$$\rho = \left(\frac{8\mu|E|}{\hbar^2}\right)^{1/2} r \qquad (۳_۱۲)$$

www.arsanjan.blogfa.com

معادله به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}R+\left(\frac{\lambda}{\rho}-\frac{1}{4}\right)R=0 \qquad (۴_۱۲)$$

که در آن پارامتر بی‌بعد λ عبارت است از

$$\lambda=\frac{Ze^2}{\hbar}\left(\frac{\mu}{2|E|}\right)^{1/2}=Z\alpha\left(\frac{\mu c^2}{2|E|}\right)^{1/2} \qquad (۵_۱۲)$$

صورت دوم معادله برای محاسبه ساده‌تر است، زیرا $\alpha=1/137$ و انرژی برحسب جرم سکون بیان شده است؛ اما صورت اول به‌روشنی نشان می‌دهد که سرعت نور c واقعاً در معادلهٔ شرودینگر ظاهر نمی‌شود، یعنی این معادله دقیقاً یک معادلهٔ غیرنسبیتی است.

طیف انرژی

معادلهٔ ۱۲ـ۴ را به روشی که دیگر با آن آشنا هستیم حل می‌کنیم. ابتدا رفتار مجانبی آن‌را تعیین می‌کنیم. به‌ازای مقادیر بزرگ ρ، معادله به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}-\frac{1}{4}R\simeq 0 \qquad (۶_۱۲)$$

که جواب آن، با رفتار مناسب در بینهایت، به‌صورت $R\sim e^{-\rho/2}$ است. مانند مورد نوسانگر هماهنگ، می‌نویسیم

$$R(\rho)=e^{-\rho/2}G(\rho) \qquad (۷_۱۲)$$

در ۱۲ـ۴ جاگذاری می‌کنیم و معادلهٔ مربوط به $G(\rho)$ را به‌دست می‌آوریم. پس از عملیات ریاضی لازم، به معادلهٔ زیر می‌رسیم

$$\frac{d^2G}{d\rho^2}-\left(1-\frac{2}{\rho}\right)\frac{dG}{d\rho}+\left[\frac{\lambda-1}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]G=0 \qquad (۸_۱۲)$$

اکنون $G(\rho)$ را به‌صورت بسط توانی زیر می‌نویسیم

$$G(\rho)=\rho^l\sum_{n=0}^{\infty}a_n\rho^n \qquad (۹_۱۲)$$

www.arsanjan.blogfa.com

این واقعیت که $R(\rho)$ و در نتیجه $G(\rho)$ در مبدأ مانند ρ^l رفتار می‌کنند در فصل ۱۰ برای تمام پتانسیلهای صادق در ۱۰ـ۴۱ اثبات شد. با جاگذاری ۱۲ـ۹ در معادلهٔ دیفرانسیل، رابطه‌ای میان ضرایب مختلف a_n به‌دست می‌آوریم. این رابطهٔ بازگشتی از معادلهٔ دیفرانسیل حاکم بر

$$H(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \rho^n \qquad (۱۲ـ۱۰)$$

به‌دست می‌آید، که عبارت است از

$$\frac{d^2H}{d\rho^2} + \left(\frac{2l+2}{\rho} - 1\right)\frac{dH}{d\rho} + \frac{\lambda - 1 - l}{\rho}H = 0 \qquad (۱۲ـ۱۱)$$

در واقع، با جاگذاری $G(\rho) = \rho^l H(\rho)$ در ۱۲ـ۸ داریم

$$\sum_{n=0}^{\infty}\left[n(n-1)a_n\rho^{n-2} + na_n\rho^{n-1}\left(\frac{2l+2}{\rho} - 1\right) + (\lambda - 1 - l)a_n\rho^{n-1}\right] = 0$$

(۱۲ـ۱۲)

یا

$$\sum_{n=0}^{\infty}\{(n+1)[na_{n+1} + (2l+2)a_{n+1}] + (\lambda - 1 - l - n)a_n\}\rho^{n-1} = 0$$

چون ضرایب توانهای مختلف ρ باید صفر باشند، رابطهٔ بازگشتی زیر به‌دست می‌آید

$$\frac{a_{n+1}}{a_n} = \frac{n + l + 1 - \lambda}{(n+1)(n+2l+2)} \qquad (۱۲ـ۱۳)$$

به‌ازای مقادیر بزرگ n این رابطه تبدیل می‌شود به

$$\frac{a_{n+1}}{a_n} \simeq \frac{1}{n} \qquad (۱۲ـ۱۴)$$

و، مانند مورد مسئلهٔ نوسانگر هماهنگ، می‌توان نشان داد جوابی که در بینهایت خوشرفتار باشد به‌دست نمی‌آید مگر اینکه رشتهٔ ۱۲ـ۹ قطع شود. یعنی برای یک مقدار معین l، به‌ازای یک n که آن‌را با n_r نشان می‌دهیم باید داشته باشیم

$$\lambda = n_r + l + 1 \qquad (۱۲ـ۱۵)$$

www.arsanjan.blogfa.com

با تعریف عدد کوانتومی اصلی به‌صورت

$$n = n_r + l + ۱ \qquad (۱۶_۱۲)$$

از این واقعیت که $n_r \geq ۰$ نتیجه می‌گیریم که

(۱) $n \geq l + ۱$

(۲) n یک عدد درست است

(۳) رابطهٔ

$$\lambda = n \qquad (۱۷_۱۲)$$

ایجاب می‌کند که

$$E = -\frac{۱}{۲}\mu c^۲ \frac{(Z\alpha)^۲}{n^۲}$$

که از الگوی قدیمی بور با آن آشنا هستیم. توجه کنید که در این رابطه جرم کاهیده ظاهر می‌شود؛ البته این نتیجه منحصر به رهیافت معادلهٔ دیفرانسیلی نیست. در نظریهٔ قدیمی بور نیز می‌توان با بررسی مناسب مدارهای کلاسیک، با شرط کوانتیده بودن تکانهٔ زاویه‌ای، جرم کاهیده را در فرمول انرژی وارد کرد. وجود جرم کاهیدهٔ

$$\mu = \frac{mM}{m + M} \qquad (۱۸_۱۲)$$

که در آن m جرم الکترون و M جرم هسته است، به‌معنای این است که بسامدهای

$$\omega_{ij} = \frac{E_i - E_j}{h} = \frac{mc^۲/۲h}{۱ + m/M}(Z\alpha)^۲ \left(\frac{۱}{n_j^۲} - \frac{۱}{n_i^۲}\right) \qquad (۱۹_۱۲)$$

برای اتمهای هیدروژنگونهٔ مختلف اندکی متفاوت هستند. مخصوصاً، تفاوت میان طیف هیدروژن و طیف دوتریم ــ که در آن M بسیار نزدیک به دو برابر جرم پروتون است ــ باعث شد که یوری در سال ۱۹۳۲ دوتریم را کشف کند.

www.arsanjan.blogfa.com

واگنی طیف

اکنون واگنی طیف انرژی را بررسی می‌کنیم. در حالت پایه، یعنی وقتی $\lambda = ۱$، باید داشته باشیم $n_r = ۰$ و $l = ۰$. تنها یک حالت پایه وجود دارد. به‌ازای $\lambda = ۲$، دو امکان وجود دارند:
(۱) $n_r = ۱$ و $l = ۰$. در اینجا با نوشتن ۱۲ـ۱۳ به‌صورت

$$\frac{a_{n+۱}}{a_n} = \frac{n - n_r}{(n+۱)(n+۲l+۲)} \qquad (۲۰\text{ـ}۱۲)$$

دیده می‌شود که $a_۱/a_۰ = -۱/(۱ \times ۲)$، و در نتیجه

$$H(\rho) = a_۰(۱ - \rho/۲) \qquad (۲۱\text{ـ}۱۲)$$

در حالی‌که توزیع زاویه‌ای تقارن کروی دارد. (۲) $n_r = ۰$ و $l = ۱$. در اینجا تابع‌موج شعاعی ثابت است: $H(\rho) = a_۰$، اما قسمت زاویه‌ای تابع‌موج حاوی $Y_{۱m}(\theta, \phi)$ است. واگنی $(۲l + ۱)$ است، و در نتیجه سه حالت از این نوع وجود دارند. واگنی کل به‌ازای $\lambda = n = ۲$ برابر است با $۱ + ۳ = ۴ = ۲^۲$.

به‌ازای $\lambda = ۳$، سه امکان وجود دارند: (۱) $n_r = ۲$ و $l = ۰$. در اینجا یک حالت با $a_۱/a_۰ = -۱$ و $a_۲/a_۱ = -۱/۶$ داریم، و در نتیجه

$$H(\rho) = a_۰\left(۱ - \rho + \frac{۱}{۶}\rho^۲\right) \qquad (۲۲\text{ـ}۱۲)$$

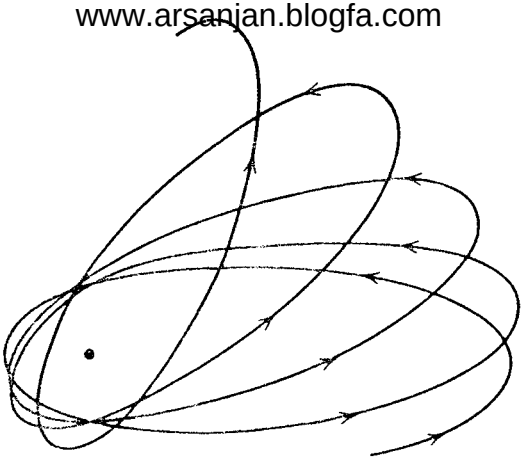
(۲) $n_r = ۱$ و $l = ۱$، و سه حالت با $H(\rho) = a_۰(۱ - \rho/۴)$ داریم. (۳) $n_r = ۰$ و $l = ۲$ که تعداد حالتهای آن برابر است با $۵ = (۲l + ۱)$، و در اینجا $H(\rho) = a_۰$. بدین‌ترتیب، $۱ + ۳ + ۵ = ۹ = ۳^۲$ حالت واگن با ویژه‌مقدار $\lambda = n = ۳$ وجود دارند. به‌طور کلی، واگنی برای $\lambda = n$ برابر است با

$$۱ + ۳ + ۵ + \cdots + [۲(n-۱) + ۱] = n^۲ \qquad (۲۳\text{ـ}۱۲)$$

از پیش انتظار داریم که برای پتانسیل شعاعی واگنی $(۲l + ۱)$ باشد، زیرا هامیلتونی شعاعی تنها به $\mathbf{L}^۲$ بستگی دارد و مستقل از L_z است. اما یک واگنی اضافی وجود دارد. این واگنی خاص مشخصهٔ پتانسیل $۱/r$ است. اگر این پتانسیل کولنی را با افزودن یک جمله به‌صورت زیر تغییر دهیم

$$V(r) = -\frac{Ze^۲}{r} + \frac{h^۲}{۲\mu}\frac{g^۲}{r^۲} \qquad (۲۴\text{ـ}۱۲)$$

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۱۲ـ۱ مدار برای پتانسیلی که دقیقاً به‌صورت $1/r$ نیست روی خودش بسته نمی‌شود بلکه دارای حرکت تقدیمی است. اگر پتانسیل شعاعی باشد مدار هامنی باقی می‌ماند.

معادلهٔ شعاعی بدون تغییر می‌ماند، بجز اینکه به‌جای $l(l+1)/r^2$ اکنون داریم $l^*(l^*+1)/r^2$ که در آن $l^*(l^*+1) = l(l+1) + g^2$، یعنی $l^* = -1/2 + \sqrt{(l+1/2)^2 + g^2}$. این تغییر باعث می‌شود انرژی به‌صورت زیر درآید

$$E = -\frac{1}{2}\mu c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{[n_r + 1/2 + \sqrt{(l+1/2)^2 + g^2}]^2} \qquad (۲۵_۱۲)$$

که، به‌عنوان مثال، برای $(n_r = 1, l = 2)$ و $(n_r = 2, l = 1)$ دیگر واگن نیست. واگنی مشخصهٔ پتانسیل $1/r$ را سابقاً "اتفاقی" می‌نامیدند، زیرا دلیل واضحی برای آن وجود نداشت اما باید دید که منظور از "واضح" چیست. از مکانیک کلاسیک می‌دانیم که پتانسیل $1/r$ ویژگیهای خاصی دارد: مدارها بیضیهایی هستند که سمتگیری ثابتی در فضا دارند و حرکت تقدیمی (شکل ۱۲ـ۱) انجام نمی‌دهند. تغییرات کوچک در این پتانسیل باعث حرکت تقدیمی می‌شوند. این تغییرات می‌توانند ناشی از عوامل مختلف باشند، مثلاً اختلالهای ناشی از سایر سیارات در مسئلهٔ کپلر. در بررسی مدار عطارد معلوم شده بود که پس از احتساب اثر سایر سیارات باز هم یک حرکت تقدیمی حضیض عطارد به مقدار $42''$ در هر قرن بدون توضیح می‌ماند. این حرکت تقدیمی را سرانجام نظریهٔ نسبیت‌عام اینشتین توضیح داد: بر اساس این نظریه، باید دقیقاً پتانسیل $1/r^2$ را به پتانسیل نیوتونی $1/r$ اضافه کرد.

در اتم هیدروژن واقعی اختلالهای کوچکی ناشی از اثرات اسپینی و اثرات نسبیتی وجود دارند. این اثرات را در فصل ۱۷ بررسی می‌کنیم. اما با یک تقریب بسیار خوب، مقادیر ممکن l به‌ازای

www.arsanjan.blogfa.com

یک مقدار معین n عبارت‌اند از $l = ۰, ۱, ۲, \ldots, (n-۱)$ و به‌ازای هر یک از اینها واگنی $(۲l+۱)$ است. بنابراین، واگنی کل باز هم $n^۲$ است. چون برای الکترون دو حالت مربوط به اسپین آن وجود دارند، واگنی صحیح در واقع $۲n^۲$ است. این موضوع نقش مهمی در توصیف کوانتوم‌ـمکانیکی جدول تناوبی دارد.

ویژه‌تابعهای شعاعی

اکنون به معادلهٔ شعاعی بازمی‌گردیم. از رابطهٔ بازگشتی ۱۲ـ۱۳ با تبدیل n به k و λ به n:

$$a_{k+۱} = \frac{k+l+۱-n}{(k+۱)(k+۲l+۲)} a_k \qquad (۲۶\text{ـ}۱۲)$$

به‌دست می‌آوریم

$$a_{k+۱} = (-۱)^{k+۱} \frac{n-(k+l+۱)}{(k+۱)(k+۲l+۲)} \cdot \frac{n-(k+l)}{k(k+۲l+۱)} \cdots \frac{n-(l+۱)}{۱\cdot(۲l+۲)} a_۰ \qquad (۲۷\text{ـ}۱۲)$$

با استفاده از این رابطه می‌توان بسط رشتهٔ توانی مربوط به $H(\rho)$ را به‌دست آورد. در واقع، $H(\rho)$ چندجمله‌ای لاگر وابسته است:

$$H(\rho) = L_{n-l-۱}^{(۲l+۱)}(\rho) \qquad (۲۸\text{ـ}۱۲)$$

جدول این چندجمله‌ایها و ویژگیهای آنها را در اغلب کتابهای ریاضی و ریاضی فیزیک یافت می‌شوند.[۱]

با استفاده از

$$a_۰ = \frac{h}{\mu c \alpha} \qquad (۲۹\text{ـ}۱۲)$$

---

۱. یک کتاب بسیار مفید در این زمینه کتابدستی زیر است

M Abramowitz and I A Stegun (eds), *Handbook of Mathematical Functions*, National Bureau of Standards Publication, Washington, D C, 1964.

www.arsanjan.blogfa.com

چند تابع شعاعی را با تبدیل به r و a_0 در زیر می‌نویسیم

$$R_{10}(r) = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$$

$$R_{20}(r) = 2\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\left(1 - \frac{Zr}{2a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$$

$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \qquad (۳۰_۱۲)$$

$$R_{30}(r) = 2\left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2}\left[1 - \frac{2Zr}{3a_0} + \frac{2(Zr)^2}{27a_0^2}\right] e^{-Zr/3a_0}$$

$$R_{31}(r) = \frac{4\sqrt{2}}{3}\left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2}\frac{Zr}{a_0}\left(1 - \frac{Zr}{6a_0}\right) e^{Zr/3a_0}$$

$$R_{32}(r) = \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}}\left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-Zr/3a_0}$$

ویژگیهای کیفی زیر را می‌توان از بررسی ویژه‌جوابها به‌دست آورد:

الف) رفتار r^l به‌ازای مقادیر کوچک r، که باعث می‌شود تابع‌موج در گستره‌ای از شعاعها که با l افزایش می‌یابد کوچک بماند، پیامد وجود سد مرکزگریزی دافعه‌ای است که الکترونها را از نزدیک شدن به هسته بازمی‌دارد.

(ب) رابطهٔ ۱۲ـ۲۶ نشان می‌دهد $H(\rho)$ یک چندجمله‌ای از درجهٔ $n_r = n - l - 1$ است، و از این‌رو n_r گره (صفر) شعاعی دارد. توزیع چگالی احتمال

$$P(r) = r^2[R_{nl}]^2 \qquad (۳۱_۱۲)$$

$n - 1$ "برآمدگی" دارد. وقتی l، به‌ازای یک مقدار معین n، دارای بیشترین مقدار خود است ($l = n - 1$) تنها یک برآمدگی وجود دارد. چنانکه از ۱۲ـ۳۰ استنباط می‌شود، و چنانکه می‌توان از جواب معادلهٔ دیفرانسیل دید،

$$R_{n,n-1}(r) \propto r^{n-1} e^{-Zr/a_0 n} \qquad (۳۲_۱۲)$$

www.arsanjan.blogfa.com

بنابراین، چگالی احتمال $P(r) \propto r^{2l} e^{-2Zr/na_0}$ در یک r که از رابطهٔ زیر به‌دست می‌آید بیشینه می‌شود

$$\frac{dP(r)}{dr} = \left(2nr^{2n-1} - \frac{2Z}{a_0 n} r^{2n} \right) e^{-2Zr/na_0} = 0 \qquad (۳۳_۱۲)$$

یعنی در

$$r = \frac{n^2 a_0}{Z} \qquad (۳۴_۱۲)$$

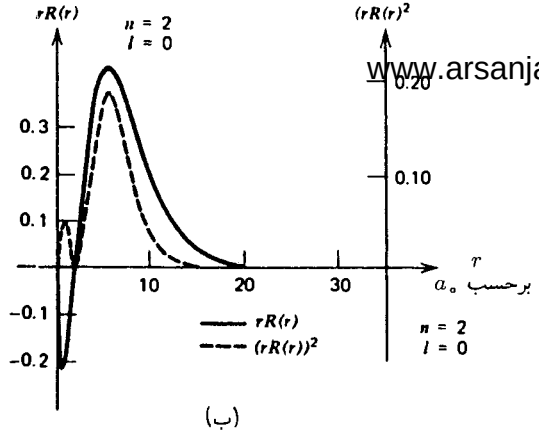
که مقداری است که از اتم بور برای مدارهای دایره‌ای به‌دست می‌آید. چگالیهای احتمال مربوط به مقادیر کوچکتر l برآمدگیهای بیشتری دارند. می‌توان نشان داد که این برآمدگیها متناظر با مدارهای بیضوی در حد اعداد کوانتومی بزرگ هستند.

(ج) نمودارهای چگالی احتمال شعاعی $P(r)$ برای یافتن الکترون در فاصلهٔ r از مبدأ را می‌توان با استفاده از توابع موج ترسیم کرد. شکل ۱۲ـ۲ طرح کلی را نشان می‌دهد. باید به‌خاطر داشت که تابع‌موج قسمت زاویه‌ای هم دارد، که مجذور قدرمطلق آن $[P_l^m(\cos\theta)]^2$ است. نمودارهای توابع لژاندر وابستهٔ $P_l^m(\cos\theta)$ در شکل ۱۲ـ۳ داده شده‌اند. چنانکه دیده می‌شود، با افزایش m چگالی احتمال از محور z به سمت صفحهٔ استوایی منتقل می‌شود. وقتی $|m| = l$، چنانکه ۱۱ـ۶۳ نشان می‌دهد داریم $|P_l^l(\cos\theta)|^2 \propto \sin^{2l}\theta$. این تابع حول $\theta = \pi/2$ به‌اوج می‌رسد. می‌توان نشان داد که با افزایش l پهنای قله مانند $l^{-1/2}$ کاهش می‌یابد، و در نتیجه به‌ازای اعداد کوانتومی بزرگ به تصویر کلاسیک مدارهای هامنی می‌رسیم. پهنای متناهی قله را می‌توان با ملاحظات زیر توضیح داد. وقتی $|m| = l$ داریم $L_z^2 = l^2$ و در نتیجه $L_x^2 + L_y^2 = l$. بنابراین، بردار تکانهٔ زاویه‌ای هیچگاه نمی‌تواند کاملاً در راستای یک محور قرار گیرد. در ضمن، واگنی m به ما امکان می‌دهد تا "مدار" را نسبت به یک محور دیگر سمتیابی کنیم، و از این‌رو هیچ محور z متمایزی واقعاً وجود ندارد. بدین‌ترتیب، حالتی که یک ویژه‌حالت L_z با ویژه‌مقدار l است در راستای x "سمت‌گیری" می‌کند. تابع‌موج اکنون یک ترکیب خطی از توابع $Y_{lm}(\theta, \phi)$ است، اما انرژی به‌علت واگنی همان انرژی مربوط به مدارهایی است که در راستای z سمتگیری کرده‌اند.

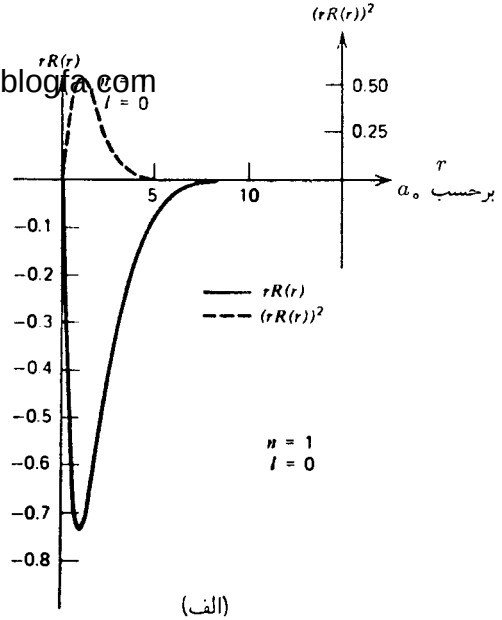
(د) با داشتن توابع موج، می‌توان $\langle r^k \rangle$ را با استفاده از رابطهٔ زیر محاسبه کرد

$$\langle r^k \rangle = \int_0^\infty dr\, r^{2+k} [R_{nl}(r)]^2 \qquad (۳۵_۱۲)$$

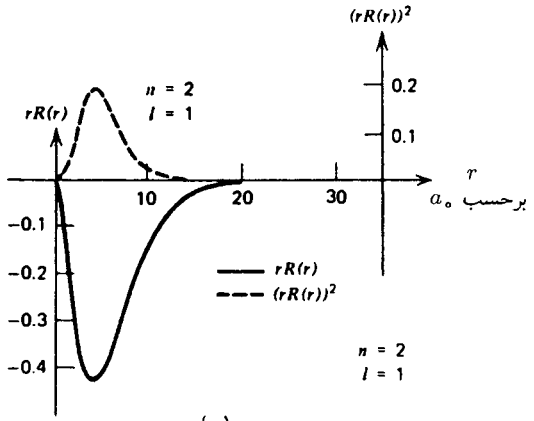
www.arsanjan.blogfa.com



(ب)



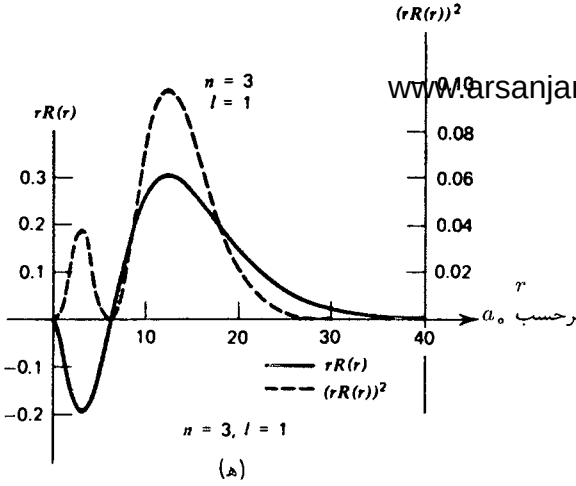
(الف)



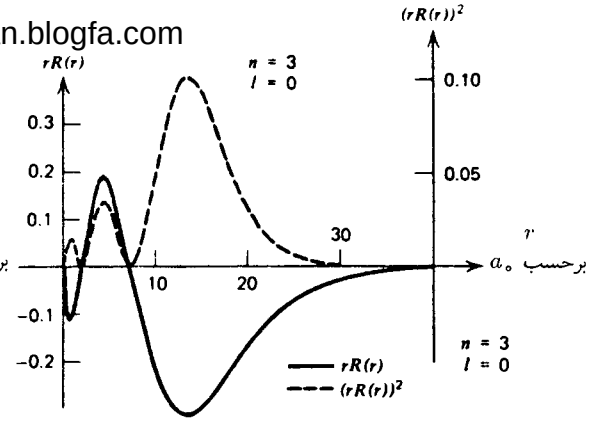
(ج)

شکل۱۲ـ۲ توابع‌موج شعاعی $u(r) = rR(r)$ و توابع چگالی احتمال شعاعی $u^2(r)$ برای مقادیر $n = ۱، ۲، ۳$، و مقادیر ممکن l. محور طول چپ معرف $u(r)$ و محور طول راست معرف $u^2(r)$ است. توابع موج با خط پر و توزیعهای احتمال با خط‌چین نشان داده شده‌اند. محور عرض معرف r برحسب a_0 است.

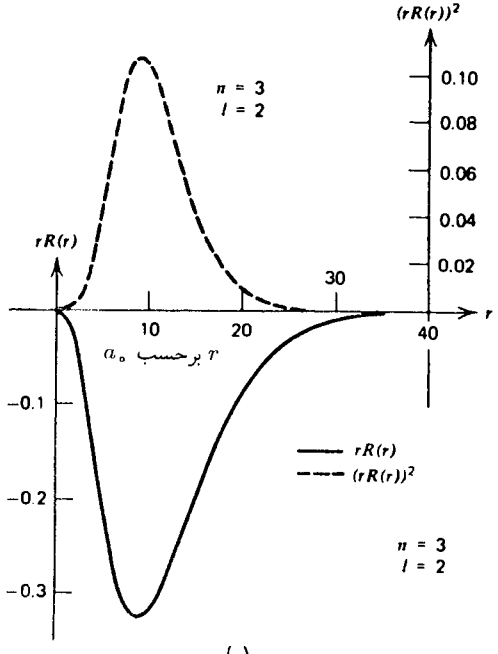
www.arsanjan.blogfa.com



(هـ)



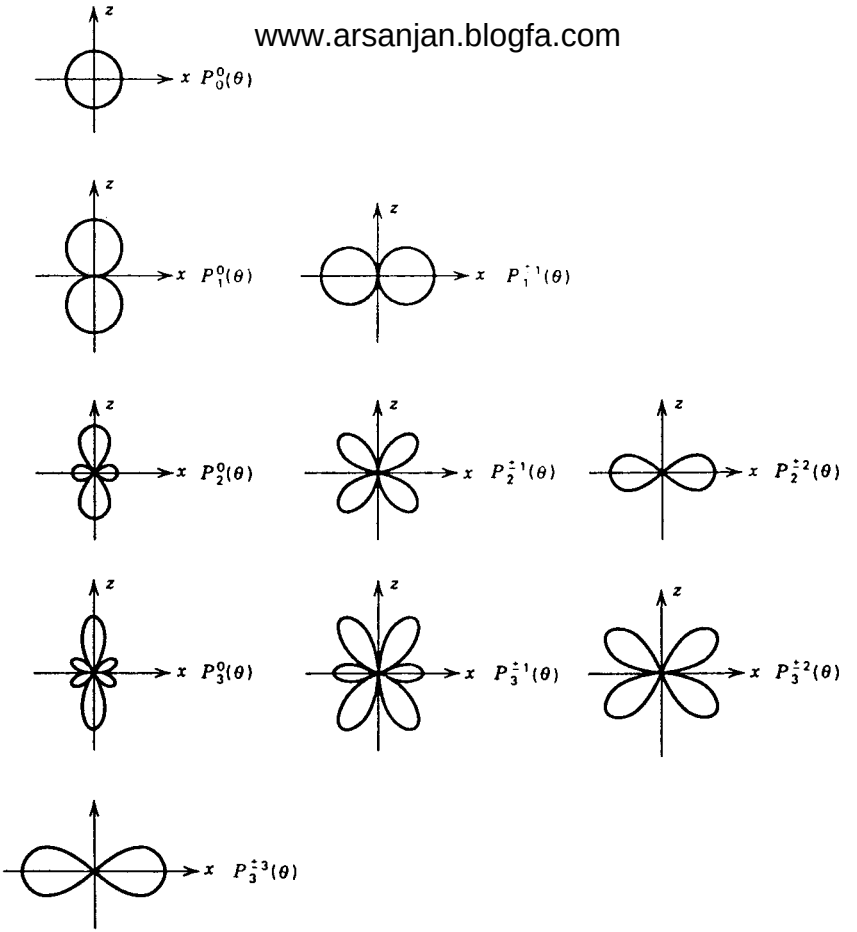
(د)



(و)

شکل۱۲ـ۲ ادامه.

www.arsanjan.blogfa.com



شکل ۳ـ۱۲ نمودارهای چندجمله‌ایهای لژاندر وابسته برحسب θ (زاویهٔ میان محور z و صفحهٔ استوایی که با محور x نشان داده شده است).

بعضی مقادیر انتظاری مفید عبارت‌اند از

$$\langle r \rangle = \frac{a_0}{2Z}[3n^2 - l(l+1)]$$

$$\langle r^2 \rangle = \frac{a_0^2 n^2}{2Z^2}[5n^2 + 1 - 3l(l+1)]$$

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{Z}{a_0 n^2}$$

www.arsanjan.blogfa.com

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{Z^2}{a_0^2 n^3 \left(l + \frac{1}{2}\right)}$$

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{Z^3}{a_0^3 n^3 l \left(l + \frac{1}{2}\right)(l+1)} \qquad (۳۶_۱۲)$$

در پراکندگی الکترون (یا پروتون) با جوابهای معادلهٔ شرودینگر برای پتانسیل $1/r$ به‌ازای $E > 0$ نیز سروکار داریم. اینها شامل توابع خاص، توابع فوق هندسی همشار، هستند. بررسی این جوابها فراتر از اهداف این کتاب است.

مسائل

۱ـ۱۲ طول‌موجهای مربوط به گذارهای $2P \to 1S$ را در موارد زیر مقایسه کنید. (۱) هیدروژن، (۲) دوتریم (با جرم هسته‌ای دو برابر جرم پروتون)، (۳) پوزیترونیم (حالت مقید از یک الکترون و یک پوزیترون که جرم آن برابر با جرم الکترون است).

۲ـ۱۲ یک الکترون در حالت پایهٔ تریتیم، که هستهٔ آن متشکل از یک پروتون و دو نوترون است، قرار دارد. یک واکنش هسته‌ای باعث می‌شود هستهٔ این اتم ناگهان به He^3، متشکل از دو پروتون و یک نوترون، تبدیل شود. احتمال این را به‌دست آورید که الکترون در حالت پایهٔ He^3 باقی بماند.

۳ـ۱۲ مانستهٔ نسبیتی معادلهٔ شرودینگر برای الکترونی با اسپین ۰ (که البته برای الکترون واقعی قابل استفاده نیست) صورت عملگری رابطهٔ زیر است

$$(E - V)^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$$

یعنی

$$\left(\frac{E}{\hbar c} + \frac{Ze^2}{\hbar c}\,\frac{1}{r}\right)^2 \psi = -\nabla^2 \psi + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 \psi$$

(الف) معادلهٔ شعاعی را به‌دست آورید.

(ب) طیف ویژه‌مقدارها را با توجه به ارتباط نزدیک معادلهٔ شعاعی قسمت (الف) با معادلهٔ شعاعی مربوط به مسئلهٔ اتم هیدروژن به‌دست آورید.

www.arsanjan.blogfa.com

۴ـ۱۲ با استفاده از رابطهٔ $\langle 1/r \rangle_{n,l}$ یک

$$\langle T \rangle_{n,l} = \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle_{n,l}$$

را برای یک ویژه‌حالت اختیاری اتم هیدروژنگونه (با Z اختیاری) محاسبه کنید. نشان دهید که به‌طور کلی برای این پتانسیل داریم

$$\langle T \rangle = -\frac{1}{2}\langle V \rangle$$

این یک مثال خاص از قضیهٔ ویریال است.

۵ـ۱۲ الکترونی در میدان کولنی یک پروتون در حالتی است که با تابع‌موج زیر توصیف می‌شود

$$\frac{1}{6}[4\psi_{100}(\mathbf{r}) + 3\psi_{211}(\mathbf{r}) - \psi_{210}(\mathbf{r}) + \sqrt{10}\,\psi_{21-1}(\mathbf{r})]$$

(الف) مقدار انتظاری انرژی را محاسبه کنید.
(ب) مقدار انتظاری $\mathbf{L}^2$ را به‌دست آورید.
(ج) مقدار انتظاری L_z را تعیین کنید.

۶ـ۱۲ الکترونی در میدان کولنی یک پروتون در حالتی است که با تابع‌موج زیر توصیف می‌شود

$$\psi(\mathbf{r}) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{3/2} e^{-\alpha^2 r^2/2}$$

رابطه‌ای برای احتمال یافتن الکترون در حالت پایهٔ این اتم هیدروژن به‌دست آورید.

۷ـ۱۲ رابطهٔ ۱۲ـ۳۲ را با استفاده از رابطهٔ بازگشتی اثبات کنید.

۸ـ۱۲ الکترون یک اتم هیدروژن در حالت $n = 2$، $l = 1$، $m = 0$ است. تابع‌موج آن‌را در فضای تکانه به‌دست آورید.

۹ـ۱۲ مقدار انتظاری تابع $f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ در هر حالت پایا ثابت است. برای هامیلتونی

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r)$$

ثابت کنید

$$0 = \frac{d}{dt}\langle \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [H, \mathbf{r} \cdot \mathbf{p}] \rangle$$

www.arsanjan.blogfa.com

و نشان دهید

$$\left\langle \frac{\mathbf{p}^2}{m} \right\rangle = \langle \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\nabla} V(r) \rangle$$

با استفاده از این رابطه، نتیجهٔ مسئلهٔ ۱۲ـ۴ را اثبات کنید. همچنین با استفاده از این نتیجه، $\langle 1/r \rangle$ را به‌دست آورید.

۱۲ـ۱۰ با استفاده از فنونی که در این فصل بیان شدند، مسئلهٔ نوسانگر هماهنگ سه‌بعدی را با

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2$$

بررسی کنید. توجه کنید که چندجمله‌ایهای لاگر وابسته در این مسئله نیز ظاهر می‌شوند.

۱۲ـ۱۱ بنابه نظر جولین شوینگر، نیروی شعاعی متوسط باید برای حالتهای پایا صفر شود. با استفاده از این نتیجه، $\langle n,l|1/r^3|n,l\rangle$ را محاسبه کنید.

[راهنمایی: کمیت

$$\left\langle n,l \left| \frac{d}{dr} \left[\frac{h^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r} \right] \right| n,l \right\rangle$$

را محاسبه کنید.]

مراجع

برای بحث مفصلی دربارهٔ اتمهای هیدروژنگونه به کتاب زیر مراجعه کنید

E U Condon and G H Shortley, *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge University Press, Cambridge, England, 1959.

مسئلهٔ اتم هیدروژن در تمام کتابهای مکانیک کوانتومی بررسی می‌شود.

www.arsanjan.blogfa.com

۱۳

برهم‌کنش الکترون با میدان الکترومغناطیسی

نظریهٔ کلاسیک

در فصل ۱۲ برهم‌کنش الکترون را با میدان ایستای کولنی ناشی از یک بار نقطه‌ای بررسی کردیم. برای تعمیم این بررسی به برهم کنش با میدان مغناطیسی یا الکتریکی خارجی باید ابتدا نظریهٔ کلاسیک را مرور کنیم. معادلات ماکسول برای خلأ در دستگاه گاؤسی عبارت‌اند از

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r},t) = 0 \qquad (۱\text{-}۱۳)$$

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r},t) + \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r},t)}{\partial t} = 0 \qquad (۲\text{-}۱۳)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r},t) = 4\pi\rho(\mathbf{r},t) \qquad (۳\text{-}۱۳)$$

$$\nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{r},t) - \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{E}(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \frac{4\pi}{c}\mathbf{j}(\mathbf{r},t) \qquad (۴\text{-}۱۳)$$

که در آنها چگالیهای بار و جریان $\rho(\mathbf{r},t)$ و $\mathbf{j}(\mathbf{r},t)$ چشمه‌های میدانهای الکترومغناطیسی $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ و $\mathbf{B}(\mathbf{r},t)$ هستند. معادلهٔ پایستگی بار

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r},t) = 0 \qquad (۵\text{-}۱۳)$$

www.arsanjan.blogfa.com

خودبه‌خود صادق است.

الکترون به‌عنوان یک نقطهٔ مادی به جرم μ و بار $-e$ تابع معادلهٔ نیروی لورنتس است:

$$\mu\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = -e[(\mathbf{E}(\mathbf{r},t) + \frac{\mathbf{v}}{c}\times\mathbf{B}(\mathbf{r},t)] \qquad (۶_۱۳)$$

گذار به مکانیک کوانتومی با ساختن هامیلتونی برای این دستگاه انجام می‌گیرد. برای این کار باید پتانسیلهای این دستگاه الکترومغناطیسی را تعریف کنیم. با توجه به دو معادلهٔ اول ماکسول، ۱ـ۱۳ و ۲ـ۱۳، می‌توان پتانسیلهای برداری و نرده‌ای $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ و $\phi(\mathbf{r},t)$ را به‌گونه‌ای تعریف کرد که

$$\begin{aligned}\mathbf{B}(\mathbf{r},t) &= \boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\\ \mathbf{E}(\mathbf{r},t) &= -\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}(\mathbf{r},t)}{\partial t} - \boldsymbol{\nabla}\phi(\mathbf{r},t)\end{aligned} \qquad (۷_۱۳)$$

در معادلهٔ حرکت الکترون پتانسیلهای $\mathbf{A}$ و ϕ مستقیماً دخالت ندارند. این پتانسیلها خوش تعریف نیستند. اگر در معادلهٔ

$$\mathbf{B}(\mathbf{r},t) = \boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$$

$\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ را به

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r},t) = \mathbf{A}(\mathbf{r},t) - \boldsymbol{\nabla}f(\mathbf{r},t) \qquad (۸_۱۳)$$

تبدیل کنیم معادله تغییر نمی‌کند زیرا $\nabla\times\nabla f(\mathbf{r},t) = 0$. اگر، علاوه بر تبدیل ۸ـ۱۳، ϕ را به

$$\phi'(\mathbf{r},t) = \phi(\mathbf{r},t) + \frac{1}{c}\frac{\partial f(\mathbf{r},t)}{\partial t} \qquad (۹_۱۳)$$

تبدیل کنیم میدان الکتریکی تغییر نمی‌کند. این ناوردایی، که ناوردایی تحت تبدیلات پیمانه‌ای نامیده می‌شود، به ما امکان می‌دهد تا پتانسیلها را به‌صورتهای مختلف، مناسب با منظوری که داریم، تعریف کنیم.

زوج معادله‌های وابسته به چشمهٔ ۳ـ۱۳ و ۴ـ۱۳ اکنون به‌صورت زیر درمی‌آیند

$$-\nabla^2\phi(\mathbf{r},t) - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}(\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{A}) = 4\pi\rho(\mathbf{r},t) \qquad (۱۰_۱۳)$$

www.arsanjan.blogfa.com

و

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \mathbf{A}(\mathbf{r},t)}{\partial t^2} + \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\nabla\phi = \frac{4\pi}{c}\mathbf{j}(\mathbf{r},t)$$

یا

$$-\nabla^2 \mathbf{A}(\mathbf{r},t) + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \mathbf{A}(\mathbf{r},t)}{\partial t^2} + \nabla\left(\nabla\cdot\mathbf{A} + \frac{1}{c}\frac{\partial\phi}{\partial t}\right) = \frac{4\pi}{c}\mathbf{j}(\mathbf{r},t) \qquad (۱۱\text{ـ}۱۳)$$

اگر توزیع بار ایستا باشد، یعنی چگالی ρ مستقل از زمان باشد، بهتر است پیمانه را طوری انتخاب کنیم که

$$\nabla\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = 0 \qquad (۱۲\text{ـ}۱۳)$$

این انتخاب $f(\mathbf{r},t)$ را پیمانهٔ کولن می‌نامند. در این مورد داریم

$$-\nabla^2\phi(\mathbf{r}) = 4\pi\rho(\mathbf{r}) \qquad (۱۳\text{ـ}۱۳)$$

یعنی یک پتانسیل نرده‌ای مستقل از زمان داریم، و معادلهٔ مربوط به $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$-\nabla^2\mathbf{A}(\mathbf{r},t) + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\mathbf{A}(\mathbf{r},t)}{\partial t^2} = \frac{4\pi}{c}\mathbf{j}(\mathbf{r},t) \qquad (۱۴\text{ـ}۱۳)$$

وقتی توزیع بار ایستا نیست، بهتر است پیمانهٔ لورنتس را انتخاب کنیم که برای آن

$$\nabla\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r},t) + \frac{1}{c}\frac{\partial\phi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = 0 \qquad (۱۵\text{ـ}۱۳)$$

با این انتخاب، معادلهٔ مربوط به پتانسیل برداری بدون تغییر می‌ماند، اما اکنون پتانسیل نرده‌ای نیز از یک معادلهٔ موج پیروی می‌کند. نکتهٔ مهمی که باید تذکر دهیم این است که رابطهٔ

$$\nabla\times(\nabla\times\mathbf{A}) = -\nabla^2\mathbf{A} + \nabla(\nabla\cdot\mathbf{A})$$

که در به‌دست آوردن ۱۳ـ۱۱ به‌کار می‌رود تنها در مختصات دکارتی معتبر است. بنابراین، واضح است که $\nabla^2\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ را باید برحسب x، y و z محاسبه کنیم.

www.arsanjan.blogfa.com

برای گذار به مکانیک کوانتومی باید از فرمولبندی هامیلتون برای معادلهٔ حرکت ۱۳ـ۶ استفاده کنیم. در غیاب برهم‌کنش با میدان الکترومغناطیسی، به‌آسانی می‌توان دید که از معادله‌های هامیلتون

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}$$
$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i} \qquad (۱۶_۱۳)$$

و

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + V(r) \qquad (۱۷_۱۳)$$

به‌دست می‌آوریم

$$\mu \frac{d^2 x_i}{dt^2} = -\frac{\partial V}{\partial x_i} = F_i \qquad (۱۸_۱۳)$$

همیلتونی برای برهم‌کنش الکترون با میدان الکترومغناطیسی خارجی، که با پتانسیلهای $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ و $\phi(\mathbf{r},t)$ نمایش داده می‌شود، به‌صورت زیر است

$$H = \frac{(\mathbf{p} + (e/c)\mathbf{A}(\mathbf{r},t))^2}{2\mu} + e\phi(\mathbf{r},t) \qquad (۱۹_۱۳)$$

معادله‌های حرکت هامیلتون عبارت‌اند از

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{p_i + (e/c)A_i}{\mu} \qquad (۲۰_۱۳)$$

و

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i} = -\frac{e}{\mu c}\left(p_k + \frac{e}{c}A_k\right)\frac{\partial A_k}{\partial x_i} + e\frac{\partial \phi}{\partial x_i} \qquad (۲۱_۱۳)$$

بنابراین

$$\mu \frac{d^2 x_i}{dt^2} = \frac{dp_i}{dt} + \frac{e}{c}\left(\frac{\partial A_i}{\partial t} + \frac{\partial A_i}{\partial x_k}\frac{dx_k}{dt}\right)$$
$$= e\frac{\partial \phi}{\partial x_i} + \frac{e}{c}\frac{\partial A_i}{\partial t} - \frac{e}{c}\frac{\partial A_k}{\partial x_i}\frac{dx_k}{dt} + \frac{e}{c}\frac{\partial A_i}{\partial x_k}\frac{dx_k}{dt} \qquad (۲۲_۱۳)$$

دو جملهٔ اول برابر با $-eE_i$ و دومی $(v/c)(v \times B)_i$ هستند. بدین‌ترتیب، ۱۳ـ۱۹ انتخاب درستی برای هامیلتونی H است.

www.arsanjan.blogfa.com

معادلهٔ شرودینگر الکترون در میدان الکترومغناطیسی

معادلهٔ شرودینگر برای الکترون در میدان الکترومغناطیسی به‌صورت زیر است

$$\left[\frac{((\hbar/i)\boldsymbol{\nabla} + (e/c)\mathbf{A}(\mathbf{r},t))^2}{2\mu} + e\phi(\mathbf{r},t)\right]\psi(\mathbf{r},t) = i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} \qquad (۱۳\text{ـ}۲۳)$$

که در آن $(\hbar/i)\boldsymbol{\nabla}$ را به‌جای عملگر $\mathbf{p}$ نوشته‌ایم. قبل از اینکه به حل معادلهٔ ویژه‌مقداری انرژی بپردازیم، لازم است ناوردایی پیمانه‌ای را بررسی کنیم. اگر معادلهٔ ۱۳ـ۲۳ را برحسب $\mathbf{A}'$ و ϕ' که با ۱۳ـ۸ و ۱۳ـ۹ تعریف می‌شوند بنویسیم، به‌دست می‌آوریم

$$\left[\frac{((\hbar/i)\boldsymbol{\nabla} + (e/c)\mathbf{A}'(\mathbf{r},t) + (e/c)\boldsymbol{\nabla}f(\mathbf{r},t))^2}{2\mu} + e\phi'(\mathbf{r},t) - \frac{e}{c}\frac{\partial f(\mathbf{r},t)}{\partial t}\right]\psi(\mathbf{r},t) = i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t}$$

که معادلهٔ متفاوتی به‌نظر می‌رسد. به‌آسانی می‌توان دید که اگر تبدیلهای ۱۳ـ۸ و ۱۳ـ۹ را با یک تغییر فاز در تابع‌موج، $\psi(\mathbf{r},t) \to \psi'(\mathbf{r},t)$، همراه کنیم به‌طوری که

$$\psi'(\mathbf{r},t) = e^{i\Lambda(\mathbf{r},t)}\psi(\mathbf{r},t) \qquad (۱۳\text{ـ}۲۴)$$

آنگاه چون

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}(e^{-i\Lambda}\psi') = -i\frac{\partial\Lambda}{\partial t}\psi + e^{-i\Lambda}\frac{\partial\psi'}{\partial t}$$

و

$$\frac{\hbar}{i}\nabla\psi = \frac{\hbar}{i}\nabla(e^{-i\Lambda}\psi') = -\hbar\nabla\Lambda\psi - e^{-i\Lambda}\frac{\hbar}{i}\nabla\psi'$$

معادلهٔ اصلی برحسب $\mathbf{A}'$، ϕ' و ψ' به‌دست می‌آید به شرط اینکه قرار دهیم

$$\Lambda(\mathbf{r},t) = \frac{e}{\hbar c}f(\mathbf{r},t) \qquad (۱۳\text{ـ}۲۵)$$

www.arsanjan.blogfa.com

اکنون به معادلهٔ شرودینگر بازمی‌گردیم. تنها میدانهای مستقل از زمان را در نظر می‌گیریم، یعنی $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{r})$ و $\phi = \phi(\mathbf{r})$. در این مورد، می‌توان نوشت

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(\mathbf{r}) \qquad (۲۶_۱۳)$$

و

$$\left[\frac{۱}{۲\mu}\left(\frac{\hbar}{i}\boldsymbol{\nabla} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\cdot\left(\frac{h}{i}\boldsymbol{\nabla} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) + e\phi(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \qquad (۲۷_۱۳)$$

که به‌صورت زیر درمی‌آید

$$-\frac{\hbar^۲}{۲\mu}\nabla^۲\psi - \frac{ie\hbar}{\mu c}\mathbf{A}\cdot\boldsymbol{\nabla}\psi - \frac{ie\hbar}{۲\mu c}(\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{A})\psi + \frac{e^۲}{۲\mu c^۲}A^۲\psi + e\phi(\mathbf{r})\psi = E\psi \qquad (۲۸_۱۳)$$

اکنون با استفاده از آزادی انتخاب تابع پیمانهٔ $f(\mathbf{r})$ به‌گونه‌ای که

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r}) = ۰ \qquad (۲۹_۱۳)$$

به‌دست می‌آوریم

$$-\frac{\hbar^۲}{۲\mu}\nabla^۲\psi - \frac{ie\hbar}{\mu c}\mathbf{A}\cdot\boldsymbol{\nabla}\psi + \frac{e^۲}{۲\mu c^۲}A^۲\psi + e\phi(\mathbf{r})\psi = E\psi \qquad (۳۰_۱۳)$$

میدان مغناطیسی ثابت

برای میدان مغناطیسی یکنواخت ثابت $\mathbf{B}$ می‌توان نوشت[۱]

$$\mathbf{A} = -\frac{۱}{۲}\mathbf{r}\times\mathbf{B} \qquad (۳۱_۱۳)$$

بنابراین، $\mathbf{A}$ برحسب سه مؤلفه‌اش عبارت است از

$$\mathbf{A} = -\frac{۱}{۲}(yB_z - zB_y,\ zB_x - xB_z,\ xB_y - yB_z)$$

---

۱. توجه کنید که این انتخاب یکتا نیست، زیرا می‌توان گرادیان هر تابعی را به $\mathbf{A}$ اضافه کرد بدون اینکه $\mathbf{B}$ تغییر کند. اما این انتخاب بسیار مناسب است.

www.arsanjan.blogfa.com

و در نتیجه

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{A} &= \left(\frac{۱}{۲}B_x+\frac{۱}{۲}B_{x'},\ B_{y'},\ B_z\right)\\ &= \mathbf{B}\end{aligned}$$

اکنون جملهٔ دوم در ۱۳ـ۳۰ به‌صورت زیر در می‌آید

$$\begin{aligned}\frac{ie\hbar}{۲\mu c}\mathbf{r}\times\mathbf{B}\cdot\nabla\psi &= -\frac{ie\hbar}{۲\mu c}\mathbf{B}\cdot\mathbf{r}\times\boldsymbol{\nabla}\psi\\ &= \frac{e}{۲\mu c}\mathbf{B}\cdot\mathbf{r}\times\frac{\hbar}{i}\boldsymbol{\nabla}\psi = \frac{e}{۲\mu c}\mathbf{B}\cdot\mathbf{L}\psi\end{aligned}\qquad(۱۳\text{ـ}۳۲)$$

و برای جملهٔ سوم، اگر راستای $\mathbf{B}$ را محور z بگیریم، داریم

$$\frac{e^۲}{۸\mu c^۲}(\mathbf{r}\times\mathbf{B})^۲\psi = \frac{e^۲}{۸\mu c^۲}[r^۲\mathbf{B}^۲-(\mathbf{r}\cdot\mathbf{B})^۲]\psi = \frac{e^۲B^۲}{۸\mu c^۲}(x^۲+y^۲)\psi \qquad (۱۳\text{ـ}۳۳)$$

نتیجهٔ بالا به‌صورت پتانسیل نوسانگر هماهنگ دوبعدی است.

بزرگیهای این دو جمله را با هم مقایسه می‌کنیم. نسبت این دو را با گرفتن $\langle L_z\rangle$ از مرتبهٔ h و $\langle x^۲+y^۲\rangle$ از مرتبهٔ $a_۰^۲$، که $a_۰$ شعاع بور است، براورد می‌کنیم:

$$\begin{aligned}\frac{(e^۲/۸\mu c^۲)a_۰^۲B^۲}{(e/۲\mu c)\hbar B} &\simeq \frac{۱}{۴}\frac{e^۲}{\hbar c}\frac{B}{e/a_۰^۲} \simeq \frac{۱}{۵۴۸}\frac{B}{e/a_۰^۲}\\ &\approx \frac{B}{۵۴۸(۴{,}۸\times۱۰^{-۱۰})/(۰{,}۵\times۱۰^{-۸})^۲}\\ &\approx \frac{B}{۹\times۱۰^۹\mathrm{G}}\end{aligned}\qquad(۱۳\text{ـ}۳۴)$$

بنابراین، در دستگاههای اتمی، با میدانهایی که نوعاً در آزمایشگاه در دسترس هستند، یعنی $B\lesssim۱۰^۴\mathrm{G}$، جملهٔ درجهٔ دوم مسلماً قابل چشمپوشی است. به روش مشابهی می‌توان جمله‌ای را که برحسب B خطی است با مقایسه با انرژی پتانسیل کولنی براورد کرد:

$$\frac{(e/۲\mu c)\hbar B}{e^۲/a_۰} \approx \frac{۱}{۲}\frac{\hbar/\mu c}{e/a_۰}B \approx \frac{۱}{۲۷۴}\frac{B}{e/a_۰^۲} \approx \frac{B}{۵\times۱۰^۹\mathrm{G}} \qquad (۱۳\text{ـ}۳۵)$$

www.arsanjan.blogfa.com

بنابراین، جملهٔ خطی ترازهای انرژی اتمی را تنها اندکی مختل می‌کند. جملهٔ درجهٔ دوم در دو وضعیت می‌تواند بسیار مهم شود: اگر میدان مغناطیسی بسیار شدید باشد؛ تصور می‌رود که میدانهایی به بزرگی $۱۰^{۱۲}$ گاؤس می‌توانند در سطح ستاره‌های نوترونی وجود داشته باشند، و این میدانها تغییرات بنیانی در ساختار اتمها ایجاد می‌کنند.[۲] جملهٔ درجهٔ دوم در بررسی حرکت ماکروسکوپیک الکترونها در میدان خارجی، مثلاً حرکت الکترون در یک سنکروترون، نیز اهمیت دارد.

اثر بهنجار زیمان

ابتدا تنها جملهٔ خطی را در نظر می‌گیریم، و محور z را در راستای $\mathbf{B}$ انتخاب می‌کنیم. بنابراین، به هامیلتونی مربوط به $\mathbf{B} = ۰$ جملهٔ زیر اضافه می‌شود

$$H_۱ = \frac{e}{۲\mu c} B L_z \qquad (۳۶_۱۳)$$

اگر بسامد زیر را، که بسامد لارمور نامیده می‌شود، تعریف کنیم

$$\frac{eB}{۲\mu c} = \omega_L \qquad (۳۷_۱۳)$$

و ویژه‌حالتهای انرژی را در نظر بگیریم که همزمان ویژه‌حالتهای $\mathbf{L}^۲$ و L_z هستند، آنگاه جملهٔ اضافی ۱۳ـ۳۶ وقتی روی یک ویژه‌حالت اثر کند یک عدد به‌دست می‌دهد، یعنی

$$H_۱ u_{nlm}(\mathbf{r}) = \hbar \omega_L m u_{nlm}(\mathbf{r}) \qquad (۳۸_۱۳)$$

که در آن m ویژه‌مقدار مؤلفهٔ z تکانهٔ زاویه‌ای، با $-l \leq m \leq l$، است. بنابراین، ترازهای انرژی موجود با واگنی $(۱ + ۲l)$تایی به $۱ + ۲l$ مؤلفهٔ همفاصله، با انرژیهای

$$E = -\frac{۱}{۲}\mu c^۲ \frac{(Z\alpha)^۲}{n^۲} + \hbar \omega_L m \qquad (۳۹_۱۳)$$

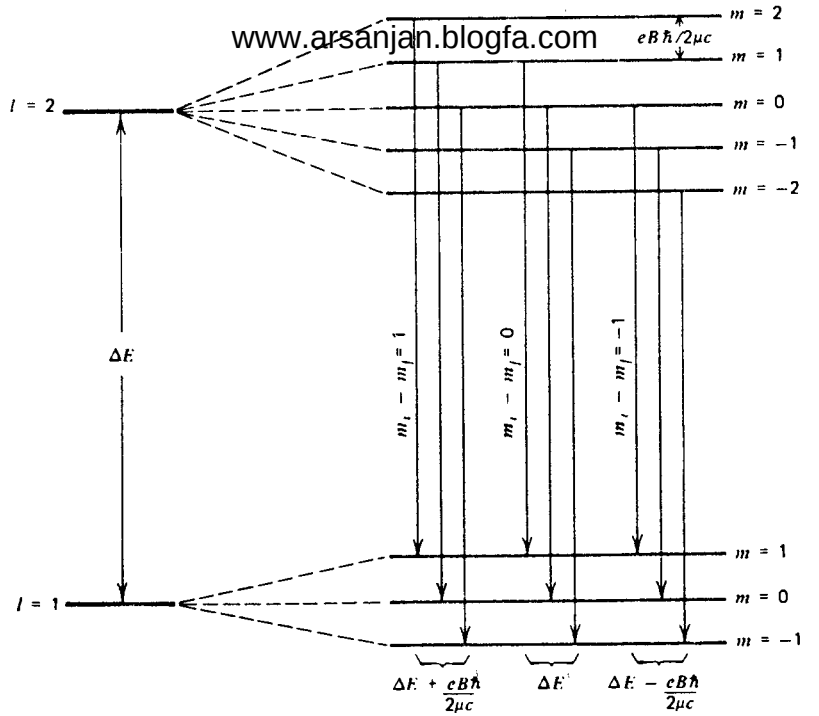
شکافته می‌شوند. اندازهٔ شکافتگی برابر است با

---

۲. مراجعه کنید به

R Cohen, L Lodenquai, and M Ruderman, *Phys Rev Lett*, **25**, 467 (1970).

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۱۳ـ۱ اثر بهنجار زیمان: از پانزده گذار ممکن بین حالتهای $l = ۲$ و $l = ۱$، که توسط میدان مغناطیسی شکافته شده‌اند، تنها نه گذار، مربوط به $\Delta m = m_i - m_f = -۱, ۰, ۱$، در تشکیل سه خط دخالت دارند.

$$\begin{aligned}\frac{eB\hbar}{۲\mu c} &= \frac{e\hbar}{۲\mu c}\left(\frac{B}{e/a_۰^۲}\right)\frac{e}{a_۰^۲} \\ &= \frac{e^۲\hbar}{۲\mu c}\left(\frac{\mu c\alpha}{\hbar}\right)^۲\left(\frac{B}{e/a_۰^۲}\right) \\ &= \left(\frac{۱}{۲}\alpha^۲\mu c^۲\right)\alpha\frac{B}{e/a_۰^۲} \\ &= \left(\frac{B}{۲٫۴ \times ۱۰^۹}\right) \times ۱۳٫۶\ \text{eV}\end{aligned}$$

چون بنابه قاعده‌های گزینش (که بعداً خواهیم دید) تنها گذارهایی مجازند که در آنها m یا بدون تغییر بماند یا به اندازهٔ ۱ تغییر کند، معلوم می‌شود که خط منفردی که گذار با $B = ۰$ را نشان می‌دهد به سه خط شکافته می‌شود شکل (۱۳ـ۱). این اثر را اثر بهنجار زیمان می‌نامند. در واقع، اگر حالت اسپینی الکترون دراتم حالتی با اسپین صفر نباشد، برهم‌کنش اسپین الکترون

www.arsanjan.blogfa.com

با میدان مغناطیسی نقش قبلاً پیش‌بینی شد را تغییر می‌دهد. این اثر متداولتر را، که اثر نابهنجار زیمان نامیده می‌شود، پس از بحث اسپین بررسی خواهیم کرد.

میدانهای مغناطیسی بزرگ و حد کلاسیک

حل مسئلهٔ الکترون در میدان مغناطیسی ثابت تحت شرایطی که از نمی‌توان جملهٔ B^2 را صرفنظر کرد اما پتانسیل کولنی قابل چشمپوشی است جالب توجه است. در این شرایط، و باز هم با انتخاب راستای $\mathbf{B}$ به‌عنوان محور z، معادلهٔ شرودینگر با توجه به ۱۳ـ۳۰، ۱۳ـ۳۲ و ۱۳ـ۳۳ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi + \frac{eB}{2\mu c}L_z\psi + \frac{e^2B^2}{8\mu c^2}(x^2+y^2)\psi = E\psi \qquad (۱۳ـ۴۰)$$

حضور "پتانسیل" (x^2+y^2) نشان می‌دهد که برای جداسازی متغیرها از مختصات استوانه‌ای استفاده کنیم. با نوشتن

$$\begin{aligned} x &= \rho\ \cos\ \phi \\ y &= \rho\ \sin\ \phi \end{aligned} \qquad (۱۳ـ۴۱)$$

و به روشی که در آغاز فصل ۱۱ مطرح شد به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \cos\ \phi\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{\sin\ \phi}{\rho}\ \frac{\partial}{\partial\phi} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \sin\ \phi\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\cos\ \phi}{\rho}\ \frac{\partial}{\partial\phi} \end{aligned} \qquad (۱۳ـ۴۲)$$

و در نتیجه

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\ \frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\ \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \qquad (۱۳ـ۴۳)$$

اکنون اگر بنویسیم

$$\psi(\mathbf{r}) = u_m(\rho)e^{im\phi}e^{ikz} \qquad (۱۳ـ۴۴)$$

www.arsanjan.blogfa.com

نتیجه می‌گیریم که معادلهٔ دیفرانسیل حاکم بر $u(\rho)$ از

$$\frac{d^2u}{d\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{du}{d\rho}-\frac{m^2}{\rho^2}u-\frac{e^2B^2}{4\hbar^2c^2}\rho^2u+\left(\frac{2\mu E}{\hbar^2}-\frac{eB\hbar m}{\hbar^2c}-k^2\right)u=0 \qquad (۴۵_۱۳)$$

با وارد کردن متغیر

$$x=\sqrt{\frac{eB}{2\hbar c}}\rho \qquad (۴۶_۱۳)$$

معادله به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{d^2u}{dx^2}+\frac{1}{x}\frac{du}{dx}-\frac{m^2}{x^2}u-x^2u+\lambda u=0 \qquad (۴۷_۱۳)$$

که در آن

$$\lambda=\frac{4\mu c}{eB\hbar}\left(E-\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}\right)-2m \qquad (۴۸_۱۳)$$

می‌توان به‌سادگی دید که (الف) رفتار $u(x)$ در بینهایت که از

$$\frac{d^2u}{dx^2}-x^2u\approx 0$$

تعیین می‌شود به‌صورت $u(x)\sim e^{-x^2/2}$ است، و (ب) رفتار $u(x)$ در نزدیکی $x=0$ که از

$$\frac{d^2u}{dx^2}+\frac{1}{x}\frac{du}{dx}-\frac{m^2}{x^2}u\approx 0$$

تعیین می‌شود به‌صورت $u(x)\sim x^{|m|}$ است. بنابراین، می‌نویسیم

$$u(x)=x^{|m|}e^{-x^2/2}G(x) \qquad (۴۹_۱۳)$$

و با جاگذاری در ۱۳ـ۴۷ معادلهٔ دیفرانسیل حاکم بر $G(x)$ را به‌دست می‌آوریم:

$$\frac{d^2G}{dx^2}+\left(\frac{2|m|+1}{x}-2x\right)\frac{dG}{dx}+(\lambda-2-2|m|)G=0 \qquad (۵۰_۱۳)$$

www.arsanjan.blogfa.com

این معادله با تعویض متغیر

$$y = x^2 \tag{۵۱ـ۱۳}$$

به‌صورت معادلهٔ ۱۲ـ۱۱ در می‌آید:

$$\frac{d^2G}{dy^2} + \left(\frac{|m|+1}{y} - 1\right)\frac{dG}{dy} + \frac{\lambda - 2 - 2|m|}{4y}\,G = 0 \tag{۵۲ـ۱۳}$$

اکنون می‌توان به روش فصل ۱۲ عمل کرد. مقایسه با ۱۲ـ۱۱ نشان می‌دهد که باید داشته باشیم

$$\frac{1}{4}\lambda - \frac{1+|m|}{2} = n_r \tag{۵۳ـ۱۳}$$

که یک شرط ویژه‌مقدار با $n_r = 0, 1, 2, 3, \ldots$ است. این رابطه ایجاب می‌کند که $E - \hbar^2k^2/2\mu$، یعنی انرژی منهای انرژی جنبشی حرکت آزاد در راستای z، از رابطهٔ زیر به‌دست آید

$$E - \frac{\hbar^2k^2}{2\mu} = \frac{eB\hbar}{2\mu c}(2n_r + 1 + |m| + m) \tag{۵۴ـ۱۳}$$

و

$$G(y) = L_{n_r}^{|m|}(y) \tag{۵۵ـ۱۳}$$

این جواب را تنها در حد کلاسیک بررسی می‌کنیم. برای این کار، ابتدا نظریهٔ کلاسیک را مرور می‌کنیم. با فرض هامیلتونی ۱۳ـ۱۹، بدون جملهٔ پتانسیل نرده‌ای، داریم

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{p} + (e/c)\mathbf{A}}{\mu} \tag{۵۶ـ۱۳}$$

و با $\mathbf{A} = -(1/2)\mathbf{r} \times \mathbf{B}$ به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}\mu\mathbf{r} \times \mathbf{v} &= \mathbf{r} \times \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{r} \times \left(-\frac{1}{2}\mathbf{r} \times \mathbf{B}\right) \\ &= \mathbf{L} - \frac{e}{2c}[\mathbf{r}(\mathbf{r}\cdot\mathbf{B}) - r^2\mathbf{B}]\end{aligned} \tag{۵۷ـ۱۳}$$

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن از اتحاد زیر استفاده کرده‌ایم

$$\mathbf{a}\times(\mathbf{b}\times\mathbf{c})=\mathbf{b}(\mathbf{a}\cdot\mathbf{c})-\mathbf{c}(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}) \qquad (۵۸_۱۳)$$

مؤلفهٔ معادلهٔ ۱۳ـ۵۷ در راستای z عبارت است از

$$\mu(\mathbf{r}\times\mathbf{v})_z = L_z + \frac{e}{۲c}B(x^۲+y^۲)$$

یا

$$\mu\rho v = L_z + \frac{eB}{۲c}\rho^۲ \qquad (۵۹_۱۳)$$

از رابطهٔ نیروی وارد بر الکترون

$$\mathbf{F}=-\frac{e}{c}\mathbf{v}\times\mathbf{B} \qquad (۶۰_۱۳)$$

برای حرکت دورانی به‌دست می‌آوریم

$$\frac{\mu v^۲}{\rho}=\frac{evB}{c} \qquad (۶۱_۱۳)$$

از ترکیب این معادله با ۱۳ـ۵۹ به دو رابطهٔ زیر می‌رسیم

$$\frac{۱}{۲}\mu v^۲=\frac{eB}{\mu c}L_z \qquad (۶۲_۱۳)$$

و

$$\rho=\left[\frac{۲c}{eB}L_z\right]^{۱/۲} \qquad (۶۳_۱۳)$$

اکنون به رابطهٔ انرژی ۱۳ـ۵۴ بازمی‌گردیم. به دلیل کوچکی h، انرژی فقط وقتی می‌تواند برای مقادیر معقول B اندازهٔ ماکروسکوپیک داشته باشد که $(۲n_r+۱+|m|+m)$ بسیار بزرگ باشد. دو مورد وجود دارند: (الف) اگر $m<۰$، آنگاه n_r بسیار بزرگ است. اما n_r درجهٔ چندجمله‌ای $L_{n_r}^{|m|}(y)$ را تعیین می‌کند، یعنی تعداد صفرهای تابع را،[۳] و اگر این بسیار بزرگ باشد تابع نمی‌تواند

۳. نگاه کنید به بحث آغاز بخش مربوط به واگنی طیف در فصل ۱۲.

www.arsanjan.blogfa.com

در گسترهٔ کوچکی از y که در آن مدار کلاسیک قرار دارد بزرگ باشد. (ب) اگر $m > 0$، ضریب به‌صورت $(2n_r + 1 + 2m)$ درمی‌آید، و این می‌تواند به‌ازای مقادیر کوچک n_r بزرگ باشد به شرط اینکه m بزرگ باشد. در اینجا انرژی عبارت است از

$$E - \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \simeq \frac{eB}{\mu c}\hbar m \qquad (۶۴_۱۳)$$

که با نتیجهٔ کلاسیک توافق دارد. توجه کنید که مقدار

$$L_z = \hbar m \qquad (۶۵_۱۳)$$

همان‌طور که انتظار می‌رود مثبت است.

همچنین می‌توان نشان داد که شعاع مدار، که از بیشینه شدن توزیع احتمال شعاعی تعیین می‌شود، با مقدار کلاسیک تطابق دارد. فرض می‌کنیم $n_r = 0$. در این مورد، $L_{n_r}^{|m|}(y)$ یک مقدار ثابت است، و مجذور تابع‌موج بنابر ۱۳ـ۴۹ و ۱۲ـ۵۵ عبارت است از

$$P(x) = x^{2|m|}e^{-x^2} \qquad (۶۶_۱۳)$$

این کمیت در جایی بیشینه است که

$$\frac{dP}{dx} = (2|m|x^{2|m|-1} - 2x^{2|m|+1})e^{-x^2} = 0$$

یعنی در

$$x = \sqrt{|m|} \qquad (۶۷_۱۳)$$

که به‌دست می‌دهد

$$\rho = \left(\frac{2c}{eB}\hbar m\right)^{1/2} \qquad (۶۸_۱۳)$$

این مسئله مثال جالبی از اصل تطابق است.

www.arsanjan.blogfa.com

ترازهای لانداؤ

انتخاب $\mathbf{A} = (-yB/۲, xB/۲, ۰)$ یکتا نیست. انتخاب

$$\mathbf{A} = (۰, Bx, ۰) \qquad (۶۹_۱۳)$$

نیز همان میدان مغناطیسی را به‌دست می‌دهد. اختلاف این $\mathbf{A}$ با $\mathbf{A} = -\mathbf{r} \times \mathbf{B}/۲$ در یک تبدیل پیمانه‌ای ساده است:

$$\left(\frac{-yB}{۲}, \frac{xB}{۲}, ۰\right) = (۰, Bx, ۰) - \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)\left(\frac{yxB}{۲}\right) \qquad (۷۰_۱۲)$$

با این انتخاب پتانسیل برداری، عملگر هامیلتونی برای الکترون در میدان مغناطیسی ثابت به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\begin{aligned}\frac{۱}{۲\mu}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^۲ &= \frac{۱}{۲\mu}\left(p_x^۲ + \left(p_y + \frac{eB}{c}x\right)^۲ + p_z^۲\right) \\ &= \frac{۱}{۲\mu}\left(p_x^۲ + p_y^۲ + \frac{۲eB}{c}xp_y + \left(\frac{eB}{c}\right)^۲ x^۲ + p_z^۲\right)\end{aligned} \qquad (۷۱_۱۳)$$

بدیهی است که $[H, p_y] = ۰$ و $[H, p_z] = ۰$، و در نتیجه می‌توان توابعی ساخت که ویژه‌تابعهای همزمان p_y، p_z و H باشند. باز هم این حالت را یک ویژه‌تابع p_z با ویژه‌مقدار صفر می‌گیریم. اگر ویژه‌مقدار p_y را به‌صورت $\hbar k$ بنویسیم آنگاه ویژه‌تابع همزمان به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\psi(x, y) = e^{iky}v(x) \qquad (۷۲_۱۳)$$

که درآن $v(x)$ عبارت است از جواب معادلهٔ

$$\frac{۱}{۲\mu}\left(-\hbar^۲\frac{d^۲}{dx^۲} + \left(\frac{eB}{c}\right)^۲\left(x + \frac{\hbar ck}{eB}\right)^۲\right)v(x) = Ev(x) \qquad (۷۳_۱۳)$$

که دقیقاً معادلهٔ یک نوسانگر هماهنگ است که نقطهٔ تعادل آن به‌جای اینکه در $x = ۰$ باشد در $-x_۰ = -\hbar kc/eB$ قرار دارد. بنابراین، می‌توان جواب را به‌صورت زیر نوشت

$$\psi(x, y) = e^{i\epsilon Bx_۰ y/\hbar c}u(x - x_۰) \qquad (۷۴_۱۳)$$

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن $u(x)$ ویژه‌جواب نوسانگر هماهنگ با نقطهٔ تعادل $x = ۰$ است. مقایسه با پتانسیل نوسانگر هماهنگ $\mu\omega^۲x^۲/۲$ نشان می‌دهد که

$$\omega = \frac{eB}{\mu c} \qquad (۷۵_۱۳)$$

و ویژه‌مقدارهای انرژی عبارت‌اند از

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{۱}{۲}\right) \quad n = ۰, ۱, ۲, ۳, \ldots \qquad (۷۶_۱۳)$$

این ترازهای انرژی را ترازهای لانداؤ می‌نامند.

اگر الکترون در نواری محبوس باشد که دارای اندازهٔ $L_۱$ در راستای x و اندازهٔ $L_۲$ در راستای y است، شرط مرزی در راستای y

$$\psi(y) = \psi(y + L_۲) \qquad (۷۷_۱۳)$$

ایجاب می‌کند که

$$\frac{eBx_۰}{\hbar c}L_۲ = ۲\pi n' \qquad n' = ۰, ۱, ۲, \ldots \qquad (۷۸_۱۳)$$

از آنجا که

$$۰ < x_۰ < L_۱ \qquad (۷۹_۱۳)$$

نتیجه می‌گیریم که

$$۰ \le n' \le \frac{eB}{۲\pi\hbar c}L_۱L_۲ \qquad (۸۰_۱۳)$$

به‌سادگی می‌توان وارسی کرد که $\hbar c/eB$ دارای ابعاد مساحت است. (یک راه سریع این کار این است که توجه کنیم که eBv/c و در نتیجه eB ابعاد نیرو دارد: $[eB] = [ML/T^۲]$، در حالی‌که $\hbar$ دارای ابعاد $[ML^۲/T^۲] = [ML/T][L][L/T] = [x][p]$است.) طول مغناطیسی l_B را با رابطهٔ زیر تعریف می‌کنیم

$$l_B^۲ = \frac{\hbar c}{eB} \qquad (۸۱_۱۳)$$

www.arsanjan.blogfa.com

بنابراین،

$$n^*_{\max} = \frac{L_1 L_2}{2\pi l_B^2} = (\text{مساحت نمونه})/2\pi l_B^2 \qquad (۸۲_۱۳)$$

اکنون ببینیم وقتی پایینترین تراز لانداؤ ($n = 0$) پر است چه پیش می‌آید. یک نمونهٔ دوبعدی به مساحت A می‌تواند به‌ازای هر تراز انرژی یک الکترون بگیرد (شاید بپرسید چرا در هر حالت انرژی مطابق معمول دو الکترون وجود ندارند، اما چنانکه در فصل بعد خواهیم دید الکترونها دارای گشتاور مغناطیسی وابسته به اسپین هستند، و در نتیجه حالتهای "بالا" و "پایین" الکترون انرژیهای متفاوتی دارند). بنابراین، تعداد کل الکترونهایی که پایینترین تراز لانداؤ را پر می‌کنند برابر است با $n^*_{\max} = A/2\pi l_B^2$.

اثر کوانتومی هال با اعداد درست

بحث بالا به اثر کوانتومی هال با اعداد درست که اخیراً کشف شده است مربوط می‌شود (شکل ۱۳ـ۲). در اینجا به توصیف ساده‌ای از این پدیده بسنده می‌کنیم. اگر یک میدان الکتریکی را در جهت مثبت y به نمونهٔ دوبعدی اعمال کنیم، الکترونها در جهت منفی y حرکت می‌کنند، و چگالی جریان عبارت است از

$$j_y = \sigma_0 E_y \qquad (۸۳_۱۳)$$

که در آن $\sigma_0 = n_e^2 \tau_0 / m_e^*$. در اینجا n_e چگالی الکترون، m_e^* جرم مؤثر الکترون در ماده، و τ_0 کمیتی با بعد زمان است، که می‌توان آن‌را زمان بین برخوردهای الکترون با ناخالصیها و رویدادهای دیگری تعبیر کرد که باعث می‌شوند الکترون انرژی از دست بدهد و به‌طور نامحدود از میدان الکتریکی شتاب نگیرد.

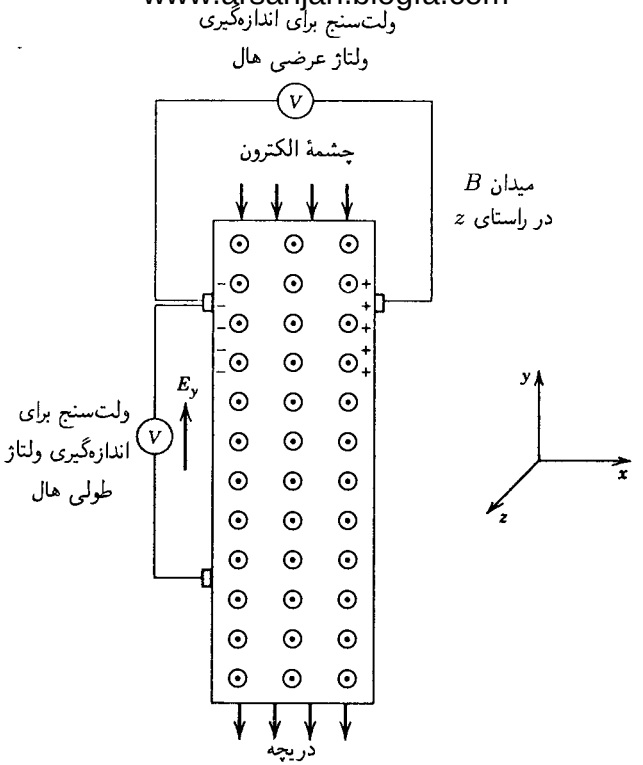
اگر میدان مغناطیسی B را در جهت z اعمال کنیم، به هر الکترون نیروی اضافی $\mathbf{F} = -e(\mathbf{v} \times \mathbf{B})/c$ وارد می‌شود. رابطهٔ سرعت $\mathbf{v}$ با چگالی جریان به‌صورت $\mathbf{j} = -n_e e \mathbf{v}$ است، و در نتیجه الکترونها به گونه‌ای رفتار می‌کنند که انگار میدان الکتریکی اضافی زیر به آنها اعمال می‌شود

$$\mathbf{E}' = \frac{(\mathbf{v} \times \mathbf{B})}{c} = \frac{-\mathbf{j} \times \mathbf{B}}{n_e e c}$$

بنابراین، در حضور میدان مغناطیسی چگالی جریان با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$\mathbf{j} = \sigma_0 \mathbf{E} - \sigma_0 \mathbf{j} \times \mathbf{B}/n_e e c \qquad (۸۴_۱۳)$$

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۱۳ـ۲ طرح کلی برای اندازه‌گیری ولتاژ هال.

که در آن $\mathbf{B}$ در راستای عمود بر صفحهٔ نمونه است. بنابراین، از حل معادله‌های

$$j_x = -\frac{\sigma_0 B}{n_e e c} j_y$$

$$j_y = \sigma_0 E_y + \frac{\sigma_0 B}{n_e e c} j_x$$

و با توجه به تعریف τ_0 به‌دست می‌آوریم

$$j_y = \frac{\sigma_0}{1 + (eB\tau_0/m_c^* c)^2} E_y$$

$$j_x = -\frac{n_e e c}{B}\left(1 - \frac{1}{1 + (eB\tau_0/m_c^* c)^2}\right) E_y \qquad (۸۵_۱۳)$$

تعداد کل الکترونها را می‌توان با $f n_{\max}^+$ نشان داد که در آن f نسبت تعداد کل الکترونها به

www.arsanjan.blogfa.com

تعداد حالتهای لانداؤ $n^*_{\max}$ است

$$n_e = \frac{f n^*_{\max}}{A} = f\frac{eB}{hc} \qquad (۸۶_۱۳)$$

با استفاده از این رابطه به‌دست می‌آوریم

$$\frac{j_y}{E_y} = \sigma_\circ \frac{1}{1+(eB\tau_\circ/m^*_e c)^2}$$
$$\frac{j_x}{e_y} = -\frac{fe^2}{h} + \frac{n_e ec/B}{1+(eB\tau_\circ/m^*_e c)^2} \qquad (۸۷_۱۳)$$

چگالی الکترونها و میدان مغناطیسی B در اختیار آزمایشگر است. اگر n_e ثابت باشد و B تغییر کند، آنگاه نسبتهای ۱۳ـ۸۷ را می‌توان برحسب B اندازه گرفت. از طرف دیگر، اگر B ثابت و n_e متغیر باشد، این نسبتها را می‌توان برحسب n_e اندازه گرفت. فون کلیتسینگ، دوردا، و پپر در سال ۱۹۸۰ نشان دادند که مقادیر B که به‌ازای آنها $f = ۱, ۲, ۳, \ldots$ باعث می‌شوند که (الف) $|j_x/E_y| = f(e^2/h)$، و (ب) $(j_y|E_y|) = ۰$. یک توضیح سادهٔ این اثر این است که وقتی ترازهای لانداؤ پر هستند الکترون نمی‌تواند به‌طور کشسان پراکنده شود، زیرا این الکترون نمی‌تواند به حالت دیگری با همان انرژی پس‌زده شود. الکترون نمی‌تواند با برانگیختگی گرمایی به تراز لانداؤ بعدی برود، زیرا در دماهای کم $(T \approx ۰٫۱\mathrm{K})$ و میدانهای مغناطیسی بزرگ $(B \approx ۱۰^5\mathrm{G})$، $kt \ll eBh/\mu c$. بنابراین $\tau_\circ \to \infty$، و نتیجهٔ مشاهده شده پیامد ۱۳ـ۸۷ است. این بحث بیش از حد ساده شده است، زیرا در آن اثرهای بسیار زیادی که در وضعیت واقعی روی می‌دهند به‌حساب نیامده‌اند. برای مثال، بعضی از الکترونها در ناکاملیهای شبکهٔ بلوری به‌دام می‌افتند. ترازهای لانداؤ به‌علت اثرات گرمایی و ناخالصی تیز نیستند، و برهم‌کنشهای الکترون‌ـالکترون کاملاً نادیده گرفته شده‌اند. با وجود این، وقتی همهٔ این پیچیدگیها را منظور کنیم، باز هم در مقادیر بحرانی B نسبت j_x/E_y را با دقتی بهتر از ۱ روی ۱۰ میلیون مضرب درستی از e^2/h به‌دست می‌آوریم.[۴]

---

۴. چنانکه آر لافلین نشان داده است، این کوانتش دقیق در واقع پیامد ناوردایی پیمانه‌ای است. نمونه‌ای از این استدلال را می‌توانید در کتاب زیر ببینید

C Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, Sixth Edition, John Wiley & Sons, Inc New York (1986).

www.arsanjan.blogfa.com

کوانتش شار و اثر آهارانوف-بوهم

حال به بحث پس از ۱۳-۲۳ باز می‌گردیم. در یک روش کاملاً صوری، می‌توانیم معادلهٔ

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{h}{i}\nabla + \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r})\right)^2 \psi(\mathbf{r}) + V(r)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \qquad (۸۸\text{-}۱۳)$$

را بنویسیم

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{-i(e/hc)f(\mathbf{r})}\psi_0(\mathbf{r}) \qquad (۸۹\text{-}۱۳)$$

حل کنیم. در اینجا $\psi_0(\mathbf{r})$ جواب معادلهٔ زیر است

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{h}{i}\nabla\right)^2 \psi_0(\mathbf{r}) + V(r)\psi_0(\mathbf{r}) = E\psi_0(\mathbf{r}) \qquad (۹۰\text{-}۱۳)$$

و تابع $f(\mathbf{r})$ انتگرال خطی زیر است که از یک نقطهٔ ثابت معین P تا نقطهٔ $\mathbf{r}$ گرفته می‌شود

$$f(\mathbf{r}) = \int_P^{\mathbf{r}} d\mathbf{r}' \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}') \qquad (۹۱\text{-}۱۳)$$

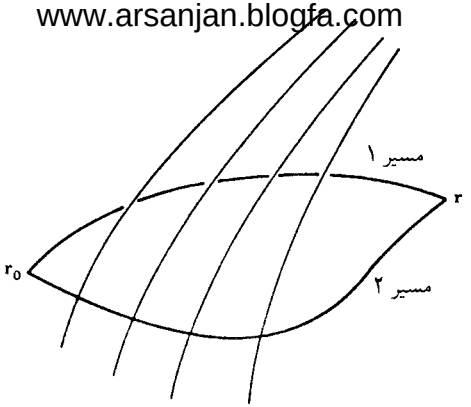
این انتگرال تنها وقتی $\mathbf{B} = 0$، یعنی در یک ناحیهٔ آزاد از میدان، معنی دارد زیرا اختلاف انتگرال در دو مسیر مختلف، که آنها را با ۱ و ۲ نشانگذاری می‌کنیم، برابر است با

$$\int_1 d\mathbf{r}' \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}', t) - \int_2 d\mathbf{r}' \mathbf{A}(\mathbf{r}', t) = \oint d\mathbf{r}' \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}', t)$$
$$= \int_S \nabla' \times \mathbf{A}(\mathbf{r}', t) \cdot d\mathbf{S} = \int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = \Phi \qquad (۹۲\text{-}۱۳)$$

که در آن از قضیهٔ استوکس استفاده کرده‌ایم، و Φ شار میدان مغناطیسی از سطحی است که بین دو مسیر قرار دارد (شکل ۱۳-۳). بنابراین، تنها اگر $\Phi = 0$ ضریب فاز در ۱۳-۸۹ مستقل از انتخاب مسیر انتگرال خطی خواهد بود. این استقلال وقتی لازم است که بخواهیم تابع موج تک‌مقداری باشد.

اگر بین دو مسیر سد وجود داشته باشد توابع موج الکترونهایی که روی این دو مسیر حرکت می‌کنند با هم تداخل می‌کنند. یک پیامد جالب این است که اگر الکترونی در یک ناحیه مقید شود که حرکت کند که همبند ساده نیست بلکه "حفره"ای را احاطه کرده باشد که

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۱۳ـ۳ انتگرالهای $\int_{r_0}^{r} A(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}'$ در دو مسیر ۱ و ۲ به‌طور کلی یکسان نیستند، زیرا اختلاف آنها برابر است با شار مغناطیسی Φ در حلقهٔ بسته.

حاوی شار Φ است آنگاه این الکترون پس از تکمیل مدار ضریب فاز اضافی $e^{ie\Phi/\hbar c}$ به‌دست می‌آورد. شرط تک‌مقدار بودن تابع‌موج الکترون، به‌طوری که ضریب فاز برابر واحد شود، ایجاب می‌کند که شار محصور کوانتیده باشد:

$$\Phi = \frac{2\pi\hbar c}{e} n \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \qquad (۹۳_۱۳)$$

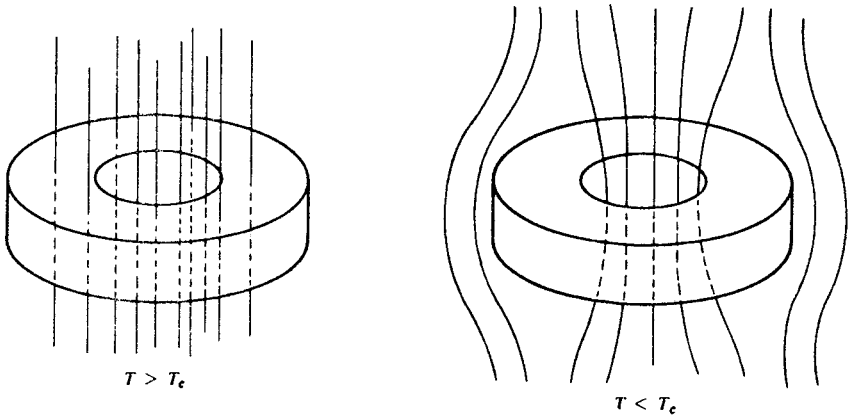
این وضعیت در حرکت الکترونها در یک حلقهٔ ابررسانا که ناحیهٔ حاوی شار را احاطه کرده است پیش می‌آید. نخستین آزمایشها، که در سال ۱۹۶۱ انجام شدند[5]، مبتنی بر طرح زیر بودند: حلقه‌ای از ماده‌ای که می‌تواند ابررسانا شود در یک میدان مغناطیسی خارجی در دمایی بالاتر از دمای بحرانی قرار داده می‌شود، و از این‌رو حلقه ابررسانا نیست. چون ابررساناها خطوط میدان مغناطیسی را بجز در یک لایهٔ سطحی نازک دفع می‌کنند، در داخل ابررساناها $\mathbf{B} = 0$. این پدیده را اثر مایسنر می‌نامند.[6] اگر این حلقه را تا دمایی کمتر از دمای بحرانی سرد کنیم ابررسانا می‌شود، و شار مغناطیسی در داخل حلقه به دام می‌افتد (شکل ۱۳ـ۴). اندازه‌گیری سادهٔ شار نشان می‌دهد که رابطهٔ ۱۳ـ۹۳ با تقریب یک ضریب ثابت برقرار است، یعنی

$$\Phi = \frac{2\pi\hbar c}{(2e)} n \qquad (۹۴_۱۳)$$

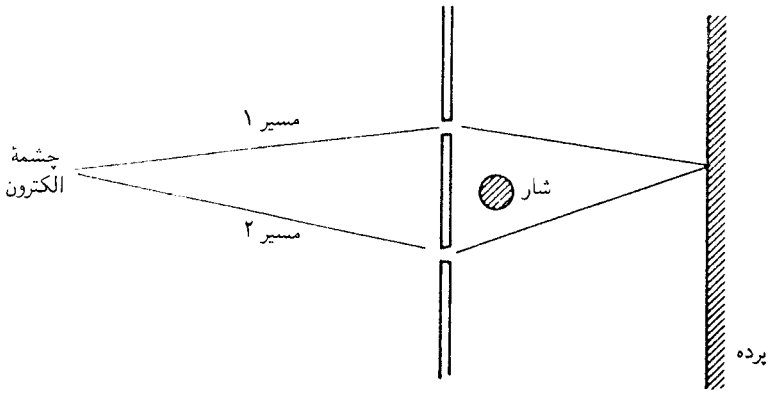
5. B S Deaver and W Fairbank, *Phys Rev Lett*, **7**, 43 (1961); R Döll and M Nabauer; *ibid*, 7, 51 (1961).

۶. برای یک بحث عالی از این نشانه‌های ماکروسکوپیک مکانیک کوانتومی مطالعهٔ فصل ۲۱ از جلد سوم سخنرانیهای فاینمن دربارهٔ فیزیک اکیداً توصیه می‌شود.

www.arsanjan.blogfa.com



شکل ۱۳ـ۴ یک ابررسانا در دمای T که بیشتر از دمای بحرانی T_c است مانند هر فلز معمولی دیگر رفتار می‌کند، و خطهای شار مغناطیسی می‌توانند به درون آن نفوذ کنند. وقتی دما کاهش داده می‌شود تا اینکه $T < T_c$، حلقه ابررسانا می‌شود و خطهای شار مغناطیسی را دفع می‌کند. بعضی از این خطها در حلقه به دام می‌افتند. این شار محصور کوانتیده است.



شکل ۱۳ـ۵ طرح کلی آزمایش اندازه‌گیری انتقال نقش تداخل الکترون توسط شار مغناطیسی محصور.

این نتیجه با درک کنونی ما از پدیدهٔ ابررسانایی سازگار است، که بنابه آن "حالتهای همبستهٔ" زوجهای الکترون (با بار $2e$!) موجودات بنیادی هستند که در ابررساناها با آنها سروکار داریم.

نشانهٔ دیگری از وابستگی فاز تابع‌موج به شار را می‌توان، اصولاً، در یک آزمایش تداخل مشاهده کرد که در آن سیملوله‌ای که شار مغناطیسی را محصور می‌کند بین شکافهای دستگاه دوشکافی قرار داده می‌شود (شکل ۱۳ـ۵). نقش تداخل روی پرده ناشی از برهم‌نهش دو قسمت

www.arsanjan.blogfa.com

تابع‌موج است:

$$\psi = \psi_1 + \psi_2 \qquad (۹۵_۱۳)$$

که در آن ψ_1 معرف قسمتی از تابع‌موج است که الکترونی را توصیف می‌کند که مسیر ۱ را می‌پیماید، و ψ_2 قسمت مربوط به مسیر ۲ است. در حضور سیملوله، داریم

$$\begin{aligned}\psi &= \psi_1 e^{ie/\hbar c \int_1 dr\cdot A} + \psi_2 e^{ie/\hbar c \int_2 dr\cdot A} \\ &= (\psi_1 e^{ie\Phi/\hbar c} + \psi_2) e^{ie/\hbar c \int_2 dr\cdot A}\end{aligned} \qquad (۹۶_۱۳)$$

بنابراین، شار باعث یک تغییر فاز نسبی بین ψ_1 و ψ_2 می‌شود و این فاز نسبی طرح تداخل را تغییر می‌دهد. این اثر، که ابتدا آهارانوف و بوهم متوجه آن شدند، به‌صورت تجربی مشاهده شده است.

مسائل

۱ـ۱۳ یک ذره به جرم m در یک نوسانگر هماهنگ سه‌بعدی با انرژی پتانسیل $m\omega^2 r^2/2$ دارای طیفی است که از رابطهٔ زیر به‌دست می‌آید

$$E = \hbar\omega(2n_r + l + 3/2)$$

که در آن n_r عدد کوانتومی شعاعی $(n_r = 0, 1, 2, 3, \ldots)$ و l تکانهٔ زاویه‌ای مداری $(l = 0, 1, 2, 3, \ldots)$ است. فرض کنید ذره دارای بار q است و در میدان مغناطیسی ضعیف $\mathbf{B}$ قرار دارد. طیف آن‌را برای سه حالت اول انرژی ترسیم کنید.

۲ـ۱۳ یک اتم پوزیترونیم، از یک الکترون و یک پوزیترون (با بار $e+$ و جرم m_e) را در حالت مقید هیدروژنگونه، را در نظر بگیرید. هامیلتونی این دستگاه را در یک میدان مغناطیسی خارجی ثابت بنویسید، و نشان دهید که (با نادیده گرفتن اسپینهای الکترون و پوزیترون) اثر زیمان روی نمی‌دهد.

۳ـ۱۳ ذره‌ای به جرم M به یک سر میلهٔ صلب بدون جرمی به طول ثابت R متصل شده است. سر دیگر میله در مبدأ ثابت است، و میله می‌تواند آزادانه حول این نقطهٔ ثابت بچرخد.

(الف) استدلال کنید که چرا هامیلتونی این دستگاه را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$H = \frac{\mathbf{L}^2}{2I} = \frac{(\mathbf{R}\times\mathbf{p})^2}{2I}$$

که در آن $I = MR^2$.

www.arsanjan.blogfa.com

(ب) اگر ذره حامل بار q باشد و این چرخانه در میدان مغناطیسی ثابت $\mathbf{B}$ گذاشته شود، هامیلتونی جدید را به دست آورید.

(ج) طیف انرژی را به‌ازای مقادیر کوچک B تعیین کنید.

۱۳ـ۴ طول‌موجهای سه خط زیمان را در گذار $3D \to 2P$ برای هیدروژن در میدان $10^4\,\mathrm{G}$ به‌دست آورید.

۱۳ـ۵ توزیع ۱۳ـ۵۵ را در نظر بگیرید:

$$P(x) = x^{2m} e^{-x^2} \qquad (m > 0)$$

که می‌دانیم مقدار آن در $x = \sqrt{m}$ بیشینه است. نشان دهید پهنای این توزیع تقریباً برابر است با $1/2\sqrt{m}$.

[راهنمایی: قرار دهید $x = \sqrt{m}(1+\delta)$ و $P(x)/P_{\max}$ را محاسبه کنید.]

۱۳ـ۶ نشان دهید برای دستگاهی که با هامیلتونی

$$H = \frac{[\mathbf{p} + (e/c)\mathbf{A}(\mathbf{r},t)]^2}{2\mu}$$

توصیف می‌شود، شار $\mathbf{j}$، که در معادلهٔ

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\psi + \boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{j} = 0$$

صدق می‌کند، با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2i\mu}\left[\psi^*\boldsymbol{\nabla}\psi - \psi\boldsymbol{\nabla}\psi^* + \frac{2ie}{\hbar c}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\psi^*\psi\right]$$

۱۳ـ۷ مسئلهٔ ویژه‌مقداری را برای یک ذرهٔ باردار در میدان مغناطیسی $\mathbf{B} = (0,0,B)$ و میدان الکتریکی متعامد $\mathbf{E} = (E,0,0)$ حل کنید.

[راهنمایی: انتخاب مناسب پیمانه اهمیت دارد.]

۱۳ـ۸ این مسئله مثالی است که نشان می‌دهد چگونه شار مغناطیسی محصور تکانهٔ زاویه‌ای یک ذره را در ناحیهٔ خارج از لولهٔ شار تغییر می‌دهد. یک میدان مغناطیسی محصور در ناحیهٔ استوانه‌ای $\rho < a$ را در نظر بگیرید. شار را Φ بگیرید. در ناحیهٔ $\rho > a$ میدان مغناطیسی وجود ندارد، و در نتیجه پتانسیل برداری به‌صورت زیر است

$$\mathbf{A}(\rho,\theta,z) = \boldsymbol{\nabla}\Lambda(\rho,\theta,z)$$

www.arsanjan.blogfa.com

(الف) انتخاب پیمانهٔ $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ را طوری بیابید که

$$\nabla^2 \Lambda = 0$$

نشان دهید جواب این معادله، که در ۱۳ـ۹۲ صدق می‌کند، عبارت است از

$$\Lambda = \frac{1}{2\pi}\Phi\theta$$

(ب) تکانهٔ زاویه‌ای حول محور تقارن

$$(\mu \mathbf{r} \times \mathbf{v})_z = \tilde{L}_z = \left[\mathbf{r} \times \left(\frac{\hbar}{i}\nabla + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\right]_z$$

را در مختصات استوانه‌ای محاسبه کنید، و نشان دهید به‌ازای Λی بالا برابر است با

$$\tilde{L}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{e}{c}\frac{\Phi}{2\pi}$$

(ج) مسئلهٔ ویژه‌مقداری $\tilde{L}_z\psi = \lambda\psi$ را حل کنید، و نشان دهید تک‌مقدار بودن ویژه‌تابعها موجب کوانتش شار می‌شود.

۱۳ـ۹ الکترونی را در نظر بگیرید که در ناحیهٔ بین دو استوانه به شعاعهای a و b $(b > a)$ محصور شده است. (الف) معادلهٔ شرودینگر را در مختصات استوانه‌ای جداسازی کنید (معادلهٔ ۱۳ـ۴۳)، و نشان دهید این معادله را می‌توان برحسب توابع بسل حل کرد. چه شرایطی ویژه‌مقدارهای انرژی را تعیین می‌کنند؟ (ب) دربارهٔ واگنی ویژه‌تابعهای انرژی بحث کنید. این واگنی از کجا ناشی می‌شود؟ برای توابع بسل به یادداشت زیر مراجعه کنید.

یادداشت: جوابهای معادلهٔ بسل

$$\frac{d^2u}{dz^2} + \frac{1}{z}\frac{du}{dz} + \left(1 - \frac{n^2}{z^2}\right)u = 0$$

که در آن n عدد درست است دو نوع هستند: جوابهای منظم

$$J_n(z) = \left(\frac{z}{2}\right)^n \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(iz/2)^{2l}}{l!(n+1)!}$$

www.arsanjan.blogfa.com

که توابع بسل نامیده می‌شوند، و جوابهای نامنظم

$$N_n(z) = \frac{۲}{\pi} J_n(z) \log \frac{\gamma z}{۲} - \frac{۱}{\pi} \left(\frac{z}{۲}\right)^n \sum_{l=۰}^{\infty} \frac{(iz/۲)^{۲l}}{l!(n+l)!} a_{nl}$$

$$- \frac{۱}{\pi} \left(\frac{z}{۲}\right)^{-n} \sum_{l=۰}^{n-۱} \frac{(n-l-۱)!}{l!} \left(\frac{z}{۲}\right)^{۲l}$$

$$(\log \gamma = ۰٫۵۷۷۲ \ldots) \qquad a_{nl} = \left(\sum_{m=۱}^{l} \frac{۱}{m} + \sum_{m=۱}^{l+n} \frac{۱}{m} \right)$$

که توابع نویمان نامیده می‌شوند. رفتار مجانبی این توابع به‌صورت زیر است

$$J_n(z) \sim \left(\frac{۲}{\pi z}\right)^{۱/۲} \cos\left(z - \frac{n\pi}{۲} - \frac{\pi}{۴}\right) \left[۱ + \mathrm{O}\left(\frac{۱}{z^۲}\right)\right]$$

$$N_n(z) \sim \left(\frac{۲}{\pi z}\right)^{۱/۲} \sin\left(z - \frac{n\pi}{۲} - \frac{\pi}{۴}\right) \left[۱ + \mathrm{O}\left(\frac{۱}{z^۲}\right)\right]$$

بحث مفصل ویژگیهای این توابع را می‌توان در اکثر کتابهای ریاضی فیزیک که به توابع خاص می‌پردازند یافت.

مراجع

دربارهٔ ویژگیهای مختلف حرکت الکترون در میدان مغناطیسی به روش بسیار جالبی درکتاب زیر بحث شده است

R P Feynman, R B Leighton and M Sands, *The Feynman Lectures on Physics*, Vol III, Addison- Wesley, Reading, Mass, 1965.

برای بحث مفصلی دربارهٔ آزمایشهایی که اثر آهارانوف‌ـبوهم را بدون ابهام اثبات می‌کنند، و برای یک بحث عالی دربارهٔ نظریهٔ مربوط مراجعه کنید به

M Peshkin and A Tonomura, *The Aharanov-Bohm Effect*, Lecture Notes in Physics, Vol 340, Springer-Verlag, Berlin/ New York, 1989.

www.arsanjan.blogfa.com

۱۴

عملگرها، ماتریسها، و اسپین

نمایش ماتریسی عملگرهای نوسانگر هماهنگ

بررسی صحیح اتمها بدون در نظر گرفتن اسپین الکترون غیرممکن است. این ویژگی الکترونها مانستهٔ کلاسیک ندارد، و چنانکه به‌زودی خواهیم دید باید آن‌را به روشهای نسبتاً مجرد بررسی کنیم. خوشبختانه برای کنار گذاشتن توصیف وابسته به فضای مختصات تا حدی آمادگی داریم، زیرا نوسانگر هماهنگ (فصل ۷) و مسئلهٔ ویژه‌مقداری تکانهٔ زاویه‌ای

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 Y_{lm} &= \hbar^2 l(l+1) Y_{lm} \\ L_z Y_{lm} &= \hbar m Y_{lm} \end{aligned} \qquad (۱\text{-}۱۴)$$

را با روشهای عملگری بررسی کردیم. برای نوسانگر هماهنگ دیدیم که حالتها با رابطهٔ زیر تعریف می‌شوند

$$u_n = \frac{1}{(n!)^{1/2}} (A^\dagger)^n u_0 \qquad (۲\text{-}۱۴)$$

www.arsanjan.blogfa.com

که برای آن معادلهٔ زیر برقرار است

$$Hu_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)u_n \qquad (۳_۱۴)$$

و همچنین توانستیم تأثیر عملگرهای افزاینده و کاهنده را بر u_n محاسبه کنیم:

$$A^\dagger u_n = \sqrt{(n+1)}\,u_{n+1} \qquad (۴_۱۴)$$

و

$$Au_n = \sqrt{n}\,u_{n-1} \qquad (۵_۱۴)$$

همچنین نشان دادیم که

$$\langle u_m|u_n\rangle = \delta_{mn} \qquad (۶_۱۴)$$

و این حکمی است که می‌توان آن‌را برای ویژه‌حالتهای تمام عملگرهای هرمیتی (در اینجا H) برقرار کرد. اگر u_m را در ۱۴ـ۳ تا ۱۴ـ۵ ضرب نرده‌ای کنیم به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}
\langle u_m|Hu_n\rangle &\equiv \langle u_m|H|u_n\rangle = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\,\delta_{mn}\\
\langle u_m|A^\dagger u_n\rangle &\equiv \langle u_m|A^\dagger|u_n\rangle = \sqrt{(n+1)}\,\delta_{m,n+1}\\
\langle u_m|Au_n\rangle &\equiv \langle u_m|A|u_n\rangle = \sqrt{n}\,\delta_{m,n-1}
\end{aligned} \qquad (۷_۱۴)$$

که در آنها از نمادنگاری متقارنتر زیر استفاده کرده‌ایم

$$\langle u_i|\mathrm{O}|u_j\rangle \equiv \langle u_i|\mathrm{O}u_j\rangle \qquad (۸_۱۴)$$

این کمیتها را می‌توان به‌صورت آرایه‌هایی که ماتریس نامیده می‌شوند مرتب کرد. در نمادنگاری قراردادی برای عنصر ماتریسی M_{ij} شاخص اول نشان سطر و شاخص دوم نشان ستون آرایه

است. بنابراین، اگر حاصلضرب نرده‌ای $\langle u_m|Hu_n\rangle$ را با H_{mn} نشان دهیم، به‌دست می‌آوریم

www.arsanjan.blogfa.com

$$H = h\omega \begin{pmatrix} ۱/۲ & ۰ & ۰ & ۰ & \cdots \\ ۰ & ۳/۲ & ۰ & ۰ & \cdots \\ ۰ & ۰ & ۵/۲ & ۰ & \cdots \\ ۰ & ۰ & ۰ & ۷/۲ & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \qquad (۹_۱۴)$$

به‌همین ترتیب داریم

$$A^\dagger = \begin{pmatrix} ۰ & ۰ & ۰ & ۰ & \cdots \\ \sqrt{۱} & ۰ & ۰ & ۰ & \cdots \\ ۰ & \sqrt{۲} & ۰ & ۰ & \cdots \\ ۰ & ۰ & \sqrt{۳} & ۰ & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \end{pmatrix} \qquad (۱۰_۱۴)$$

و

$$A = \begin{pmatrix} ۰ & \sqrt{۱} & ۰ & ۰ & \cdots \\ ۰ & ۰ & \sqrt{۲} & ۰ & \cdots \\ ۰ & ۰ & ۰ & \sqrt{۳} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \end{pmatrix} \qquad (۱۱_۱۴)$$

آرایهٔ $\langle u_m|F|u_n\rangle$ها را، که در آن F یک عملگر است و u_iها یک مجموعهٔ کامل تشکیل می‌دهند، نمایش ماتریسی F در پایهٔ متشکل از u_i می‌نامیم. باید نشان دهیم این نامگذاری موجه است. به‌عنوان مثال، ضرب ماتریسی با رابطهٔ زیر تعریف می‌شود

$$(FG)_{ij} = \sum_n (F)_{in}(G)_{nj} \qquad (۱۲_۱۴)$$

و باید این رابطه را برای "نمایشهای ماتریسی" عملگرهای F و G تحقیق کنیم. برای این کار، حالت Gu_j را در نظر می‌گیریم و با استفاده از کامل بودن مجموعهٔ u_iها آن‌را به‌صورت زیر بسط می‌دهیم

$$Gu_j = \sum_n C_n u_n \qquad (۱۳_۱۴)$$

www.arsanjan.blogfa.com

ضرایب C_n با رابطهٔ زیر داده می‌شوند

$$C_n = \langle u_n|G|u_j\rangle \qquad (۱۴\text{ـ}۱۴)$$

بنابراین،

$$\begin{aligned}\langle u_i|FG|u_j\rangle &= \left\langle u_i|F\left(\sum_n C_n u_n\right)\right\rangle \\ &= \sum_n C_n\langle u_i|F|u_n\rangle \qquad (۱۴\text{ـ}۱۵)\\ &= \sum_n \langle u_i|F|u-N\rangle\langle u_n|G|u_j\rangle\end{aligned}$$

که همان ۱۴ـ۱۲ است به‌شرط اینکه بنویسیم

$$\langle u_i|F|u_n\rangle = F_{in} \qquad (۱۴\text{ـ}۱۶)$$

و غیره. یادآوری می‌کنیم که کاملیت بردارهای پایهٔ $|u_n\rangle$ را می‌توان به‌صورت زیر بیان کرد

$$\sum_n |u_n\rangle\langle u_n| = ۱ \qquad (۱۴\text{ـ}۱۷)$$

با قرار دادن عملگر واحد ۱۴ـ۱۷ بین عملگرهای F و G در $\langle u_i|FG|u_j\rangle$ بلافاصله ۱۴ـ۱۶ به‌دست می‌آید.

توجیه دیگر ارتباط ماتریسی از رابطهٔ زیر به‌دست می‌آید

$$\langle u_m|F|u_n\rangle^* = \langle Fu_n|u_m\rangle = \langle u_n|F^\dagger|u_m\rangle \qquad (۱۴\text{ـ}۱۸)$$

که نشان می‌دهد اگر عملگر F را با یک ماتریس نمایش دهیم عملگر همیوغ هرمیتی $F^\dagger$ با ماتریس همیوغ هرمیتی متناظر نمایش داده می‌شود، زیرا $F^\dagger$ با رابطهٔ زیر تعریف می‌شود

$$(F^\dagger)_{mn} = F^*_{mn} \qquad (۱۴\text{ـ}۱۹)$$

توجه کنید که در این بحث اشاره‌ای به این واقعیت نکردیم که شروع بررسی ما از ویژه‌حالتهای هامیلتونی نوسانگر هماهنگ بود. تنها چیز خاصی که دربارهٔ این ویژه‌حالتها می‌توان گفت این است که آنها ماتریس نمایشگر H را قطری می‌کنند. با هر مجموعهٔ کاملی، H قطری نیست، و تعیین ویژه‌مقدارهای آن، یعنی عناصر ماتریس وقتی که قطری است، آسان نخواهد بود.

www.karnameh.com

نمایش ماتریسی عملگرهای تکانهٔ زاویه‌ای

عناصر ماتریس L_z بین حالتهای مختلف تکانهٔ زاویه‌ای، $\langle l'm'|L_z|lm\rangle$، را در نظر بگیرید. قبل از هر چیز، مشاهده می‌کنیم که رابطهٔ

$$[\mathbf{L}^2, L_z] = 0$$

ایجاب می‌کند که

$$\begin{aligned} 0 &= \langle l'm'|[\mathbf{L}^2, L_z]|lm\rangle \\ &= \langle \mathbf{L}^2 l'm'|L_z|lm\rangle - \langle l'm'|L_z|\mathbf{L}^2 lm\rangle \\ &= \hbar^2\{l'(l'+1) - l(l+1)\}\langle l'm'|L_z|lm\rangle \end{aligned} \qquad (۱۴\text{ـ}۲۰)$$

از اینجا نتیجه می‌گیریم که اگر $l' \neq l$، آنگاه $\langle l'm'|L_z|lm\rangle$ صفر می‌شود. بنابراین، L_z، تنها بین حالتهایی عناصر ماتریسی غیرصفر دارد که اعداد کوانتومی تکانهٔ زاویه‌ای کل آنها یکسان هستند. برای $L_\pm$ نیز همین نتیجه صادق است. بدین‌ترتیب، اگر l را ثابت نگه داریم، یعنی حالتهایی را در نظر بگیریم که برای آنها فقط m تغییر می‌کند، از معادلهٔ دوم ۱۴ـ۱، با یک نمادنگاری فشرده، به‌دست می‌آوریم

$$\langle lm'|L_z|lm\rangle = \hbar m\, \delta_{m'm} \qquad (۱۴\text{ـ}۲۱)$$

علاوه بر این، از ۱۱ـ۳۶ و ۱۱ـ۴۸ به‌رابطهٔ زیر می‌رسیم

$$\langle lm'|L_\pm|lm\rangle = \hbar[l(l+1) - m(m\pm 1)]^{1/2}\delta_{m',m\pm 1} \qquad (۱۴\text{ـ}۲۲)$$

در نتیجه، نمایشهای ماتریسی زیر را برای عملگرهای تکانهٔ زاویه‌ای $l = 1$ به‌دست می‌آوریم

$$L_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad (۱۴\text{ـ}۲۳\text{الف})$$

$$L_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad (۱۴\text{ـ}۲۳\text{ب})$$

www.arsanjan.blogfa.com

و

$$L_- = \hbar \begin{pmatrix} ۰ & ۰ & ۰ \\ \sqrt{۲} & ۰ & ۰ \\ ۰ & \sqrt{۲} & ۰ \end{pmatrix} \qquad (۱۴\text{ـ}۲۳\text{ج})$$

سطرها و ستونها به‌ترتیب از چپ به راست و از بالا به پایین با $m = ۱, ۰, -۱$ نشانگذاری می‌شوند. به‌سادگی می‌توان دید که برای این ماتریسها رابطه‌های جابه‌جایی برقرارند. برای مثال،

$$[L_+, L_-] = \hbar^۲ \begin{pmatrix} ۰ & \sqrt{۲} & ۰ \\ ۰ & ۰ & \sqrt{۲} \\ ۰ & ۰ & ۰ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ۰ & ۰ & ۰ \\ \sqrt{۲} & ۰ & ۰ \\ ۰ & \sqrt{۲} & ۰ \end{pmatrix} - \hbar^۲ \begin{pmatrix} ۰ & ۰ & ۰ \\ \sqrt{۲} & ۰ & ۰ \\ ۰ & \sqrt{۲} & ۰ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ۰ & \sqrt{۲} & ۰ \\ ۰ & ۰ & \sqrt{۲} \\ ۰ & ۰ & ۰ \end{pmatrix} \qquad (۱۴\text{ـ}۲۴)$$

$$= \hbar^۲ \begin{pmatrix} ۲ & ۰ & ۰ \\ ۰ & ۲ & ۰ \\ ۰ & ۰ & ۰ \end{pmatrix} - \hbar^۲ \begin{pmatrix} ۰ & ۰ & ۰ \\ ۰ & ۲ & ۰ \\ ۰ & ۰ & ۲ \end{pmatrix} = ۲\hbar^۲ \begin{pmatrix} ۱ & ۰ & ۰ \\ ۰ & ۰ & ۰ \\ ۰ & ۰ & -۱ \end{pmatrix} = ۲\hbar L_z$$

رابطه‌های کلی میان حالتها را نیز می‌توان در نمایش ماتریسی نوشت. به‌عنوان مثال، رابطهٔ زیر را در نظر بگیرید

$$\psi = A\phi \qquad (۱۴\text{ـ}۲۵)$$

یکی از عضوهای مجموعهٔ کامل u_iها را در این رابطه ضرب نرده‌ای می‌کنیم:

$$\langle u_i|\psi\rangle = \langle u_i|A\phi\rangle \qquad (۱۴\text{ـ}۲۶)$$

با قرار دادن عملگر واحد ۱۴ـ۱۷ بین A و ϕ، به‌دست می‌آوریم

$$\langle u_i|\psi\rangle = \sum_n \langle u_i|A|u_n\rangle\langle u_n|\phi\rangle \qquad (۱۴\text{ـ}۲۷)$$

اگر $\langle u_n|\phi\rangle$ را به‌صورت ماتریس ستونی زیر بنویسیم

$$\langle u_n|\phi\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \langle u_۱|\phi\rangle \\ \langle u_۲|\phi\rangle \\ \langle u_۳|\phi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \alpha_۱ \\ \alpha_۲ \\ \alpha_۳ \\ \vdots \end{pmatrix} \qquad (۱۴\text{ـ}۲۸)$$

www.arsanjan.blogfa.com

و به‌همین ترتیب،

$$\langle u_n|\psi\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \langle u_1|\psi\rangle \\ \langle u_2|\psi\rangle \\ \langle u_3|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \qquad (۲۹_۱۴)$$

آنگاه برای نمایش ماتریسی رابطهٔ ۱۴ـ۲۵ داریم

$$\beta_i = \sum_n A_{in}\alpha_n \qquad (۳۰_۱۴)$$

بنابراین، ماتریسهای مربعی معرف عملگرها هستند و ماتریسهای ستونی حالتها را نمایش می‌دهند. حاصلضرب نرده‌ای $\langle \phi|u_n\rangle = \langle u_n|\phi\rangle^*$ را بنابه قرارداد به‌صورت یک ماتریس سطری می‌نویسیم:

$$\langle \phi|u_n\rangle \rightarrow (\alpha_1^*, \alpha_2^*, \alpha_3^*, \dots) \qquad (۳۱_۱۴)$$

بدین‌ترتیب، به‌عنوان مثال، حاصلضرب نرده‌ای $\langle \phi|\psi\rangle$ را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} \langle \phi|\psi\rangle &= \sum_n \langle \phi|u_n\rangle\langle u_n|\psi\rangle \\ &= \sum_n \alpha_n^*\beta_n \end{aligned} \qquad (۳۲_۱۴)$$

یک معادلهٔ ویژه‌مقداری مورد خاصی از رابطهٔ ۱۴ـ۲۵ است:

$$A\phi = a\phi \qquad (۳۳_۱۴)$$

که صورت ماتریسی آن عبارت است از

$$\sum_n A_{in}\alpha_n = a\alpha_i \qquad (۳۴_۱۴)$$

www.arsanjan.blogfa.com

این رابطه معادل است با

$$\begin{pmatrix} A_{11}-\alpha & A_{12} & A_{13} & \dots \\ A_{21} & A_{22}-a & A_{23} & \dots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33}-a & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = 0 \qquad (۳۵_۱۴)$$

معادلهٔ بالا تنها وقتی جواب غیرصفر دارد که دترمینان ماتریس صفر شود:

$$\det|A_{in} - a\delta_{in}| = 0 \qquad (۳۶_۱۴)$$

این راه مناسبی برای یافتن ویژه‌مقدارها (و ویژه‌بردارها)ی عملگرهایی است که با ماتریسهای متناهی نمایش داده می‌شوند، اما برای ماتریسهای نامتناهی متأسفانه چندان ساده نیست.

عملگر اسپین و نمایش ماتریسی آن

واقعاً جای خوشبختی است که برای نمایش عملگرها راه دیگری، غیر از استفاده از توابع و مشتقات، وجود دارد، زیرا تمام عملگرها را نمی‌توان از این راه نمایش داد. ساده‌ترین مثال در این مورد مربوط به تکانهٔ زاویه‌ای $l = 1/2$ است. معادله‌های ۱۱ـ۵۱ و ۱۱ـ۶۰ نشان می‌دهند که

$$Y_{1/2,\pm 1/2} = C_{\pm}\sqrt{\sin\,\theta}\; e^{\pm i\phi/2} \qquad (۳۷_۱۴)$$

و با استفاده از ۱۱ـ۵۴ می‌توان نوشت

$$L_{-}Y_{1/2,1/2} \propto \frac{\cos\,\theta}{\sqrt{\sin\,\theta}}\; e^{-i\phi/2} \qquad (۳۸_۱۴)$$

اما این نتیجه متناسب با $Y_{1/2,-1/2}$ نیست. بنابراین، گسترش قاعده‌های متداول به $l = 1/2$ با مشکل مواجه می‌شود، و در نتیجه از نمایش ماتریسی استفاده می‌کنیم.[1] به‌جای $l = 1/2$ می‌نویسیم $s = 1/2$، و حرف l را تنها برای تکانهٔ زاویه‌ای مداری وابسته به $\mathbf{r} \times \mathbf{p}$ به‌کار می‌بریم. عملگرهای اسپین عبارت‌اند از S_x، S_y و S_z که با رابطه‌های جابه‌جایی مربوط به مؤلفه‌های تکانه‌های زاویه‌ای تعریف می‌شوند:

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z \qquad (۳۹_۱۴)$$

---

۱. نشان داده شده است که $Y_{1/2,\pm 1/2}$ به جریان احتمال از یک قطب کره ($\theta = 0$) به قطب دیگر ($\theta = \phi$) منجر می‌شود، به‌طوری که دو قطب به‌ترتیب به‌عنوان چشمه‌ها و چاهکهای احتمال عمل می‌کنند.

www.carsanjan.blogfa.com

و غیره. عملگرهای اسپین ۲ را به‌صورت ماتریسی می‌شوند. از ۱۴ـ۲۱ به‌دست می‌آوریم

$$S_z = \hbar \begin{pmatrix} ۱/۲ & ۰ \\ ۰ & -۱/۲ \end{pmatrix} \qquad (۴۰_۱۴)$$

و از ۱۴ـ۲۲ داریم

$$S_+ = \hbar \begin{pmatrix} ۰ & ۱ \\ ۰ & ۰ \end{pmatrix} \qquad S_- = \hbar \begin{pmatrix} ۰ & ۰ \\ ۱ & ۰ \end{pmatrix} \qquad (۴۱_۱۴)$$

این نمایش را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$\mathbf{S} = \frac{۱}{۲}\hbar\boldsymbol{\sigma} \qquad (۴۲_۱۴)$$

که در آن مؤلفه‌های

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} ۰ & ۱ \\ ۱ & ۰ \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} ۰ & -i \\ i & ۰ \end{pmatrix} \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} ۱ & ۰ \\ ۰ & -۱ \end{pmatrix} \qquad (۴۳_۱۴)$$

ماتریسهای پاؤلی هستند. این ماتریسها در رابطه‌های جابه‌جایی زیر صدق می‌کنند

$$[\sigma_x, \sigma_y] = ۲i\sigma_z \qquad (۴۴_۱۴)$$

و غیره، و همچنین برای آنها داریم

$$\sigma_x^۲ = \sigma_y^۲ = \sigma_z^۲ = \begin{pmatrix} ۱ & ۰ \\ ۰ & ۱ \end{pmatrix} \equiv ۱ \qquad (۴۵_۱۴)$$

ماتریسهای پاؤلی پاد جابه‌جاشونده هستند، به این معنی که

$$\begin{aligned} \sigma_x\sigma_y &= -\sigma_y\sigma_x \\ \sigma_z\sigma_x &= -\sigma_x\sigma_z \\ \sigma_y\sigma_z &= -\sigma_z\sigma_y \end{aligned} \qquad (۴۶_۱۴)$$

www.arsanjan.blogfa.com

این رابطه‌ها به نمایشهای اسپین ۱/۲ اختصاص دارند و مثلاً برای ماتریسهای $l = ۱$ صادق نیستند.

ویژه‌حالتهای S_z با بردار ستونی دو مؤلفه‌ای، که آن‌را اسپینور می‌نامند، نمایش داده می‌شوند. برای به‌دست آوردن این ویژه‌اسپینورها، معادلهٔ ویژه‌مقداری زیر را حل می‌کنیم

$$S_z \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \pm \frac{۱}{۲} h \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \qquad (۴۷_۱۴)$$

یا

$$\begin{pmatrix} ۱ & ۰ \\ ۰ & -۱ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

بنابراین،

$$\begin{pmatrix} u \\ -v \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \qquad (۴۸_۱۴)$$

برای ویژه‌جواب با علامت به‌علاوه داریم $v = ۰$، و برای ویژه‌جواب با علامت منها $u = ۰$. بنابراین، می‌نویسیم

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} ۱ \\ ۰ \end{pmatrix} \qquad \chi_- = \begin{pmatrix} ۰ \\ ۱ \end{pmatrix} \qquad (۴۹_۱۴)$$

χ_+ ویژه‌اسپینور مربوط به اسپین بالا $[S_z = +(۱/۲)h]$ و χ_- اسپین پایین $[S_z = -(۱/۲)h]$ است.

یک اسپینور اختیاری را می‌توان برحسب این مجموعهٔ کامل بسط داد:

$$\begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} = \alpha_+ \begin{pmatrix} ۱ \\ ۰ \end{pmatrix} + \alpha_- \begin{pmatrix} ۰ \\ ۱ \end{pmatrix} \qquad (۵۰_۱۴)$$

بنابه قضیهٔ بسط، اگر اسپینور درست بهنجار شده باشد به‌طوری که

$$|\alpha_+|^۲ + |\alpha_-|^۲ = ۱ \qquad (۵۱_۱۴)$$

www.arsanjan.blogfa.com

آنگاه $|\alpha_+|^2$ و $|\alpha_-|^2$ احتمال اندازه‌گیری حالت $\begin{pmatrix}\alpha_+\\ \alpha_-\end{pmatrix}$ به‌ترتیب مقادیر $(1/2)\hbar+$ و $-(1/2)\hbar$ به‌دست آیند.

لازم نیست که S_z را قطری نگه داریم. برای تعیین ویژه‌حالتهای $S_x\cos\ \phi + S_y \sin\ \phi$، باید معادلهٔ زیر را حل کنیم

$$(S_x\ \cos\ \phi + S_y\ \sin\ \phi)\begin{pmatrix}u\\ v\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar\lambda\begin{pmatrix}u\\ v\end{pmatrix} \qquad (۵۲\text{-}۱۴)$$

یا

$$\begin{pmatrix}0 & \cos\ \phi - i\ \sin\ \phi\\ \cos\ \phi + i\ \sin\ \phi & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}u\\ v\end{pmatrix} = \lambda\begin{pmatrix}u\\ v\end{pmatrix}$$

که ایجاب می‌کند

$$\begin{aligned} v\, e^{-i\phi} &= \lambda u\\ u\, e^{i\phi} &= \lambda v\end{aligned} \qquad (۵۳\text{-}۱۴)$$

از ضرب طرفهای راست و همچنین طرفهای چپ این دو معادله در یکدیگر به‌دست می‌آوریم

$$uv(\lambda^2 - 1) = 0 \qquad (۵۴\text{-}۱۴)$$

بنابراین،

$$\lambda = \pm 1 \qquad (۵۵\text{-}۱۴)$$

ویژه‌بردار مربوط به $\lambda = 1$ در رابطهٔ زیر صدق می‌کند

$$v = e^{i\phi}u$$

و در نتیجه صورت بهنجارشده عبارت است از

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ e^{i\phi}\end{pmatrix}$$

www.arsanjan.blogfa.com

با استفاده از این واقعیت که هر حالت دیگر را در یک ضریب فاز اختیاری ضرب کرد، از ضرب بردار بالا در $e^{-i\phi/2}$ به‌دست می‌آوریم

$$u_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} \\ e^{i\phi/2} \end{pmatrix} \qquad (۵۶_۱۴)$$

و به‌همین ترتیب، ویژه‌حالت مربوط به $\lambda = -1$ را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$u_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} \\ -e^{i\phi/2} \end{pmatrix} \qquad (۵۷_۱۴)$$

به‌سادگی می‌توان دید که u_- و u_+ برهم عمودند:

$$u_+^\dagger u_- = \frac{1}{2}(e^{i\phi/2}, e^{-i\phi/2}) \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} \\ -e^{i\phi/2} \end{pmatrix} \qquad (۵۸_۱۴)$$
$$= 0$$

جالب توجه است که اگر ϕ را به $\phi + 2\pi$ تغییر دهیم جوابها تغییر علامت می‌دهند. این نتیجه مشخصهٔ توابع موج اسپین نیم‌فرد (حالتهای فرمیون) است، و مغایرتی با مکانیک کوانتومی ندارد، زیرا -1 تنها یک ضریب فاز است، اما نشان می‌دهد هیچ بستهٔ موج ماکروسکوپیک کلاسیکی را نمی‌توان ساخت که دارای تکانهٔ زاویه‌ای نیم‌فرد باشد.

برای یک حالت اختیاری مانند α، می‌توان مقدار انتظاری $\mathbf{S}$ را محاسبه کرد:

$$\langle\alpha|\mathbf{S}|\alpha\rangle = \sum_i \sum_j \langle\alpha|i\rangle\langle i|\mathbf{S}|j\rangle\langle j|\alpha\rangle$$

که معادل است با

$$(\alpha_+^*, \alpha_-^*)\mathbf{S} \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix}$$

www.arsanjan.blogfa.com

بنابراین،

$$\langle S_x\rangle = (\alpha_+^*, \alpha_-^*)\frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha_+\\ \alpha_-\end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}h(\alpha_+^*, \alpha_-^*)\begin{pmatrix}\alpha_-\\ \alpha_+\end{pmatrix} = \frac{1}{2}h(\alpha_+^*\alpha_- + \alpha_-^*\alpha_+$$

$$\langle S_y\rangle = (\alpha_+^*, \alpha_-^*)\frac{1}{2}h\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha_+\\ \alpha_-\end{pmatrix} \qquad (۵۹\text{-}۱۴)$$

$$= \frac{1}{2}h(\alpha_+^*, \alpha_-^*)\begin{pmatrix}-i\alpha_-\\ i\alpha_+\end{pmatrix} = -\frac{ih}{2}(\alpha_+^*\alpha_- - \alpha_-^*\alpha_+)$$

$$= (\alpha_+^*, \alpha_-^*)\frac{1}{2}h\langle S_z\rangle\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha_+\\ \alpha_-\end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}h(|\alpha_+^*, \alpha_-^*)\begin{pmatrix}\alpha_+\\ -\alpha_-\end{pmatrix} = \frac{1}{2}h(|\alpha_+|^2 - |\alpha_-|^2)$$

توجه کنید که تمام اینها، همان‌طور که برای عملگرهای هرمیتی انتظار می‌رود، حقیقی هستند.

گشتاور مغناطیسی ذاتی ذرات اسپین ۱/۲

بعداً خواهیم دید که اسپین الکترون مثلاً در هامیلتونی اتم هیدروژن به‌صورت جفت‌شده با تکانهٔ زاویه‌ای مداری ظاهر می‌شود. وقتی الکترون، به‌عنوان مثال، در یک جایگاه شبکهٔ بلور جایگزیده باشد اغلب می‌توان اسپین را تنها درجهٔ آزادی الکترون در نظر گرفت. الکترون به واسطهٔ اسپین خود گشتاور دوقطبی مغناطیسی ذاتی دارد، و این گشتاور مغناطیسی[۲] عبارت است از

$$\mathbf{M} = -\frac{eg}{2mc}\mathbf{S} \qquad (۶۰\text{-}۱۴)$$

---

۲. یک الکترون "کلاسیک" که با تکانهٔ زاویه‌ای $\mathbf{L}$ روی یک دایره حرکت می‌کند حلقهٔ جریانی تشکیل می‌دهد که گشتاور مغناطیسی آن برابر است با $\mathbf{M} = -e\mathbf{L}/2mc$. چون اسپین یک متغیر صرفاً کوانتوم‌ـمکانیکی است، ۱۴ـ۶۰ را تنها از روی شباهت می‌توان موجه دانست. برای توجیه این رابطه به معادلهٔ نسبیتی دیراک نیاز داریم، که مقدار $g = 2$ نیز از آن به‌دست می‌آید. الکترودینامیک کوانتومی تصحیحاتی را بر $g = 2$ اعمال می‌کند. جنبه‌های غیرکلاسیک اسپین را کاشفان آن، ساموئل گاتسمیت و گئورگ اولنبک، بیان کرده‌اند (۱۹۲۵).

که در آن g، نسبت ژیرومغناطیسی، بسیار نزدیک به ۲ است:

www.arsanjan.blogfa.com

$$g = ۲\left(۱ + \frac{\alpha}{۲\pi} + \cdots\right) = ۲٫۰۰۲۳۱۹۲ \qquad (۶۱_۱۴)$$

m جرم الکترون، و α ثابت ساختار ریز است. برای چنین الکترون جایگزیده‌ای، هامیلتونی در حضور میدان مغناطیسی خارجی تنها انرژی پتانسیل است:

$$H = -\mathbf{M}\cdot\mathbf{B} = \frac{egh}{۴mc}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B} \qquad (۶۲_۱۴)$$

معادلهٔ شرودینگر برای حالت $\psi(t) = \begin{pmatrix}\alpha_+(t)\\ \alpha_-(t)\end{pmatrix}$ عبارت است از

$$i\hbar\frac{d\psi(t)}{dt} = \frac{egh}{۴mc}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}\psi(t) \qquad (۶۳_۱۴)$$

اگر محور z را در راستای $\mathbf{B}$ بگیریم، و بنویسیم

$$\psi(t) = \begin{pmatrix}\alpha_+(t)\\ \alpha_-(t)\end{pmatrix} = e^{-i\omega t}\begin{pmatrix}\alpha_+\\ \alpha_-\end{pmatrix} \qquad (۶۴_۱۴)$$

آنگاه معادله به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\hbar\omega\begin{pmatrix}\alpha_+\\ \alpha_-\end{pmatrix} = \frac{eg\hbar B}{۴mc}\begin{pmatrix}۱ & ۰\\ ۰ & -۱\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha_+\\ \alpha_-\end{pmatrix} \qquad (۶۵_۱۴)$$

جوابها متناظر با بسامدهای مختلف ω هستند. به‌ازای $\omega = egB/۴mc$ داریم $\binom{\alpha_+}{\alpha_-} = \binom{۱}{۰}$، و به‌ازای $\omega = -(egB/۴mc)$ باید $\binom{\alpha_+}{\alpha_-} = \binom{۰}{۱}$. بنابراین، اگر حالت اولیه به‌صورت زیر باشد

$$\psi(۰) = \begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix} \qquad (۶۶_۱۴)$$

آنگاه حالت در یک زمان بعد عبارت خواهد بود از

$$\psi(t) = \begin{pmatrix}a\,e^{-i\omega t}\\ b\,e^{i\omega t}\end{pmatrix} \qquad \omega = \frac{geB}{۴mc} \qquad (۶۷_۱۴)$$

www.arsanjan.blogfa.com

فرض کنید در $t = ۰$ اسپین یک ذره حالت S_x با ویژه‌مقدار $+(۱/۲)\hbar$ است، یعنی "در جهت مثبت x قرار دارد". بنابراین،

$$\frac{۱}{۲}h\begin{pmatrix}۰ & ۱\\ ۱ & ۰\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix} = \frac{۱}{۲}h\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}$$

یعنی $\binom{a}{b} = ۱/\sqrt{۲}\binom{۱}{۱}$. بدین‌ترتیب، در یک زمان بعد داریم

$$\begin{aligned}\langle S_x\rangle &= \frac{۱}{۲}h\frac{۱}{\sqrt{۲}}(e^{i\omega t}, e^{-i\omega t})\begin{pmatrix}۰ & ۱\\ ۱ & ۰\end{pmatrix}\frac{۱}{\sqrt{۲}}\begin{pmatrix}e^{-i\omega t}\\ e^{i\omega t}\end{pmatrix}\\ &= \frac{\hbar}{۴}(e^{i\omega t}, e^{-i\omega t})\begin{pmatrix}e^{i\omega t}\\ e^{-i\omega t}\end{pmatrix} = \frac{h}{۲}\cos\ ۲\omega t\end{aligned} \qquad (۶۸_۱۴)$$

به‌همین ترتیب، می‌توان نوشت

$$\begin{aligned}\langle S_y\rangle &= \frac{۱}{۲}h\frac{۱}{\sqrt{۲}}(e^{i\omega t}, e^{-i\omega t})\begin{pmatrix}۰ & -i\\ i & ۰\end{pmatrix}\frac{۱}{\sqrt{۲}}\begin{pmatrix}e^{-i\omega t}\\ e^{i\omega t}\end{pmatrix}\\ &= \frac{h}{۴}(-i\ e^{۲i\omega t} + i\ e^{-۲i\omega t})\\ &= \frac{h}{۲}\sin\ ۲\omega t\end{aligned} \qquad (۶۹_۱۴)$$

بنابراین، اسپین با بسامد زیر، که بسامد سیکلوترون نامیده می‌شود، حول راستای B حرکت تقدیمی دارد

$$۲\omega = \frac{egB}{۲mc} \approx \frac{eB}{mc} \equiv \omega_c \qquad (۷۰_۱۴)$$

اگر اسپین ابتدا در یک راستای اختیاری باشد که با محور z زاویهٔ θ می‌سازد این حرکت تقدیمی روی می‌دهد. برای میدان مغناطیسی از مرتبهٔ $(۱T)۱۰^۴\mathrm{G}$ داریم

$$\omega_c = \frac{(۴{,}۸ \times ۱۰^{-۱۰}\mathrm{esu})(۱۰^۴\mathrm{G})}{(۰{,}۹ \times ۱۰^{-۲۷}\mathrm{g})(۳ \times ۱۰^{۱۰}\mathrm{cm/s})} \approx ۱{,}۸ \times ۱۰^{۱۱}\mathrm{rad/s}$$

که بسامد کاملاً بزرگی است.

تشدید پارامغناطیسی

www.arsanjan.blogfa.com

در یک جسم جامد عامل ژیرومغناطیسی g_I الکترون به ماهیت نیروهای فعال در این جسم بستگی دارد. دانستن g_I قیود بسیار مفیدی در این باره که این نیروها چگونه می‌توانند باشند به‌دست می‌دهد و از این‌رو اندازه‌گیری g_I اهمیت پیدا می‌کند. این اندازه‌گیری را می‌توان با روش تشدید پارامغناطیسی انجام داد. اصول این روش را در اینجا بیان می‌کنیم: یک میدان مغناطیسی در راستای z داریم و اسپین الکترون حول این راستا دارای حرکت تقدیمی است. سرعت این حرکت چقدر است؟ اگر بتوان یک میدان مغناطیسی اعمال کرد که بر محور z عمود باشد و با اسپین بچرخد آنگاه این میدان باید اسپین الکترون را ساکن "ببیند". مؤلفهٔ اسپین الکترون که موازی با صفحهٔ xy است ترجیحاً در جهت مخالف میدان مغناطیسی قرار می‌گیرد تا حالت کمترین انرژی به‌دست آید. برای الکترونهایی که قبلاً در این راستای کمترین انرژی قرار ندارند گذار به کمترین انرژی روی می‌دهد، و در این فرایند انرژی به‌صورت تابش آزاد می‌شود. این تابش را باید بتوان آشکارسازی کرد.

ایجاد میدان مغناطیسی که با بسامدی از مرتبهٔ 10^{11} رادیان بر ثانیه بچرخد عملی نیست. اما اگر یک میدان مغناطیسی در راستایی مانند x داشته باشیم که با بسامد ω نوسان کند، می‌توانیم آن‌را برهم‌نهشی از یک میدان چرخان ساعتگرد با بسامد ω و یک میدان چرخان پادساعتگرد با همان بسامد در صفحهٔ xy در نظر بگیریم و فاز را چنان تنظیم کنیم که میدان برایند در راستای x باشد. (این کار مانستهٔ به‌دست آوردن قطبش خطی از جمع دو قطبش دایره‌ای است.) تنها یکی از مؤلفه‌ها در همان جهت حرکت تقدیمی اسپین حرکت می‌کند. حرکت مؤلفهٔ دیگر در جهت مخالف حرکت تقدیمی اسپین خواهد بود و میانگین تأثیر آن روی اسپین الکترون صفر است.

الکترونی را در نظر بگیرید که درجه‌های آزادی آن تنها حالتهای اسپینی هستند، و تحت تأثیر میدان مغناطیسی بزرگ و ثابت B_0 در جهت z و میدان مغناطیسی کوچک و نوسانی $B_1 \cos \omega t$ در راستای x قرار دارد. در اینجا معادلهٔ شرودینگر عبارت است از

$$ih\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} = \frac{egh}{4mc}\begin{pmatrix} B_0 & B_1 \cos \omega t \\ B_1 \cos \omega t & -B_0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} \qquad (۷۱_۱۴)$$

بنابراین، با

$$\omega_0 = \frac{egB_0}{4mc} = \frac{1}{2}\omega_c \qquad \omega_1 = \frac{egB_1}{4mc} \qquad (۷۲_۱۴)$$

داریم

$$\begin{aligned} i\frac{da(t)}{dt} &= \omega_0 a(t) + \omega_1 \cos \omega t\, b(t) \\ i\frac{db(t)}{dt} &= \omega_1 \cos \omega t\, a(t) - \omega_0 b(t) \end{aligned} \qquad (۷۳_۱۴)$$

www.arsanjan.blogfa.com

فرض می‌کنیم

$$A(t) = a(t)e^{i\omega_0 t}$$
$$B(t) = b(t)e^{-i\omega_0 t} \qquad (۷۴_۱۴)$$

این توابع در معادله‌های زیر صدق می‌کنند

$$\begin{aligned} i\frac{dA(t)}{dt} &= \omega_1 \cos \omega t\, B(t)\, e^{i\omega_c t} \\ &\approx \frac{1}{2}\omega_1\, e^{i(\omega_c-\omega)t} B(t) \\ i\frac{dB(t)}{dt} &= \omega_1 \cos \omega t\, A(t) e^{-i\omega_c t} \\ &\approx \frac{1}{2}\omega_1\, e^{-i(\omega_c-\omega)t} A(t) \end{aligned} \qquad (۷۵_۱۴)$$

که در آنها از تقریب زیر استفاده کرده‌ایم

$$\begin{aligned} \cos \omega t\, e^{i\omega_c t} &= \frac{1}{2}[e^{i(\omega_c+\omega)t} + e^{i(\omega_c-\omega)t}] \\ &\approx \frac{1}{2}e^{i(\omega_c-\omega)t} \end{aligned}$$

چون با مقادیر $\omega = \omega_c$ سروکار داریم و هر دو بزرگ هستند، جمله‌ای را که بسیار سریع نوسان می‌کند حذف کرده‌ایم زیرا انتظار داریم میانگین سهم آن صفر باشد. یک بررسی مفصلتر این نتیجه‌گیری را تأیید می‌کند. می‌توان $B(t)$ را برحسب $dA(t)dt$ تعیین کرد:

$$B(t) = \frac{2i}{\omega_1}\frac{dA(t)}{dt}e^{-i(\omega_c-\omega)t} \qquad (۷۶_۱۴)$$

و با استفاده از این رابطه یک معادلهٔ دیفرانسیل مرتبهٔ دوم برای $A(t)$ به‌دست می‌آید:

$$\frac{d^2A(t)}{dt^2} - i(\omega_c-\omega)\frac{dA(t)}{dt} + \frac{\omega_1^2}{4}A(i_) = 0 \qquad (۷۷_۱۴)$$

برای این معادله جوابی به‌صورت زیر در نظر می‌گیریم

$$A(t) = A(0)e^{i\lambda t} \qquad (۷۸_۱۴)$$

www.arsanjan.blogfa.com

با جاگذاری در ۱۴ـ۷۷ به معادلهٔ زیر می‌رسیم

$$-\lambda^2 + (\omega_c - \omega)\lambda + \frac{\omega_1^2}{4} = 0$$

که ریشه‌های آن مقادیر λ را تعیین می‌کنند:

$$\lambda_\pm = \frac{\omega_c - \omega \pm \sqrt{(\omega_c - \omega)^2 + \omega_1^2}}{2} \qquad (۷۹_۱۴)$$

جواب عمومی عبارت است از

$$A(t) = A_+ e^{i\lambda_+ t} + A_- e^{i\lambda_- t} \qquad (۸۰_۱۴)$$

و در نتیجه

$$B(t) = -\frac{2}{\omega_1} e^{-i(\omega_c - \omega)t} \left(\lambda_+ A_+ e^{i\lambda_+ t} + \lambda_- A_- e^{i\lambda_- t}\right) \qquad (۸۱_۱۴)$$

سرانجام به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} a(t) &= e^{-i\omega_c t/2}(A_+ e^{i\lambda_+ t} + A_- e^{i\lambda_- t}) \\ b(t) &= -\frac{2}{\omega_1} e^{-i(\omega_c/2 - \omega)t} \left(\lambda_+ A_+ e^{i\lambda_+ t} + \lambda_- A_- e^{i\lambda_- t}\right) \end{aligned} \qquad (۸۲_۱۴)$$

اگر در $t = 0$ اسپین الکترون در جهت مثبت محور z باشد آنگاه $a(0) = 1$ و $b(0) = 0$، یعنی

$$\begin{aligned} A_+ + A_- &= 1 \\ \lambda_+ A_+ + \lambda_- A_- &= 0 \end{aligned}$$

و در نتیجه

$$\begin{aligned} A_+ &= \frac{\lambda_-}{\lambda_- - \lambda_+} \\ A_- &= -\frac{\lambda_+}{\lambda_- - \lambda_+} \end{aligned} \qquad (۸۳_۱۴)$$

احتمال اینکه در یک زمان [illegible] باشد برابر است با $|b(t)|^2$:

www.arsanjan.blogfa.com

$$|b(t)|^2 = \frac{4}{\omega_1^2}\left|\frac{\lambda_+\lambda_-}{\lambda_- - \lambda_+}e^{i\lambda_+ t} - \frac{\lambda_+\lambda_-}{\lambda_- - \lambda_+}e^{i\lambda_- t}\right|^2$$

$$= \frac{\omega_1^2/4}{(\omega_c - \omega)^2 + \omega_1^2}\left|1 - e^{-i(\lambda_+ - \lambda_-)t}\right|^2 \qquad (۸۴\text{-}۱۴)$$

$$= \frac{\omega_1^2}{(\omega_c - \omega)^2 + \omega_1^2}\,\frac{1 - \cos\sqrt{(\omega_c - \omega)^2 + \omega_1^2}\,t}{2}$$

این کمیت کوچک است، زیرا $\omega_1 \ll \omega_c, \omega$. اگر میدان B_1 را به‌گونه‌ای "تنظیم" کنیم که با ω_c جور شود آنگاه احتمال به‌صورت زیر درمی‌آید

$$|b(t)|^2 \to \frac{1 - \cos\,\omega_1 t}{2} \qquad (۸۵\text{-}۱۴)$$

یعنی به ۱ نزدیک می‌شود. چون انرژی حالت "بالا" با انرژی حالت "پایین" تفاوت دارد، این اختلاف انرژی که از میدان خارجی جذب می‌شود بسامد تشدیدی را مشخص می‌کند، و در نتیجه ω_c و از روی آن g را می‌توان با دقت زیاد اندازه‌گیری کرد.

مسائل

۱۴۰/ ۱-۱۴ اگر بردار حالت پایه برای یک نوسانگر هماهنگ به‌صورت زیر باشد

$$u_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

u_1، u_2 و u_3 را با استفاده از ۱۴-۲ و ۱۴-۱۰ محاسبه کنید. طرح کلی چیست؟ نشان دهید

$$\langle u_m | u_n \rangle = \delta_{mn}$$

www.arsanjan.blogfa.com

۱۴ـ۲ با داشتن بردار

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

کمیتهای زیر را با استفاده از عملگرهای نوسانگر هماهنگ ۱۴ـ۹، ۱۴ـ۱۰ و ۱۴ـ۱۱ محاسبه کنید

(الف) $\langle H \rangle$.

(ب) $\langle x^2 \rangle$، $\langle x \rangle$، $\langle p^2 \rangle$ و $\langle p \rangle$.

(ج) $\Delta p\, \Delta x$.

[تذکر: رابطه‌های p و x برحسب A و $A^\dagger$ را می‌توانید از ۷ـ۴ به‌دست آورید.]

۱۴ـ۳ عناصر چهار سطر و چهار ستون اول نمایش ماتریسی x^4 را برای نوسانگر هماهنگ محاسبه کنید.

۱۴ـ۴ با استفاده از ۴ـ۲۱ و ۱۴ـ۲۲، نمایش ماتریسی L_x، L_y و L_z را برای تکانهٔ زاویه‌ای ۳/۲ به‌دست آورید. وارسی کنید که رابطه‌های جابه‌جایی

$$[L_x, L_y] = i\hbar\, L_z$$

و عیره برقرارند.

۱۴ـ۵ ویژه‌مقدارهای هامیلتونی

$$H = \frac{1}{2I_1} L_x^2 + \frac{1}{2I_2} L_y^2 + \frac{1}{2I_3} L_z^2$$

را با (الف) تکانهٔ زاویه‌ای ۱، و (ب) تکانهٔ زاویه‌ای ۲ به‌دست آورید.

[تذکر: برای تکانهٔ زاویه‌ای ۲، نمایش ماتریسی L_z عبارت است از

$$L_z = \hbar \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}$$

www.arsanjan.blogfa.com

و نمایشهای ماتریسی L_x و L_y را بیابید.

$$L_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad L_- = (L_+)^\dagger$$

به‌دست آورد.]

۱۴ـ۶ ویژه‌مقدارهای ماتریس زیر را محاسبه کنید

$$H = \begin{pmatrix} 8 & 4 & 6 \\ 4 & 14 & 4 \\ 6 & 4 & 8 \end{pmatrix}$$

و ویژه‌بردارهای آن‌را به‌دست آورید

۱۴ـ۷ دستگاهی با اسپین ۱/۲ در نظر بگیرید که بردار حالت بهنجارشدهٔ آن عبارت است از

$$\begin{pmatrix} \cos & \alpha \\ \sin & \alpha e^{i\beta} \end{pmatrix}$$

احتمال این را محاسبه کنید که از اندازه‌گیری S_y مقدار $-h/2$ به‌دست آید.

۱۴ـ۸ نشان دهید که برای حالت تکانهٔ زاویه‌ای ۱ ماتریسهای $\mathbf{L}\cdot\mathbf{n}$، که در آن $\mathbf{n}$ یک بردار یکهٔ اختیاری است، در معادلهٔ چندجمله‌ای زیر صدق می‌کنند

$$\sum \alpha_k (\mathbf{L}\cdot\mathbf{n})^k = 0$$

شکل این چندجمله‌ای را به‌چه صورت است؟ آیا می‌توان این معادله را به هر تکانهٔ زاویه‌ای اختیاری l تعمیم داد؟

۱۴ـ۹ برای تکانهٔ زاویه‌ای ۱، چنانکه در فصل ۱۰ گفتیم، می‌توان از $Y_{lm}(\theta,\phi)$ به‌عنوان ویژه‌حالت و، از عملگرهای دیفرانسیلی برای نمایش $\mathbf{L}$ استفاده کرد. با محاسبهٔ

$$\int \sin\theta \, d\theta \, d\phi \, Y^*_{1k}(\theta,\phi) \; L_+ \; Y_{1m}(\theta,\phi)$$

و مقایسهٔ آن با عنصر ماتریسی $(L_+)_{km}$ یکسان بودن نتایج را نشان دهید.
www.arsanjan.blogfa.com
۱۰ـ۱۴ دستگاهی با تکانهٔ زاویه‌ای ۱ با بردار حالت زیر نمایش داده می‌شود

$$u = \frac{1}{\sqrt{26}} \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ -3 \end{pmatrix}$$

احتمال اینکه از اندازه‌گیری L_x مقدار ۰ به‌دست آید چقدر است؟

۱۱ـ۱۴ ویژه‌تابعها و ویژه‌مقدارهای عملگر $L_xL_y + L_yL_x$ را برای دستگاهی با تکانهٔ زاویه‌ای ۱ به‌دست آورید.

۱۲ـ۱۴ دستگاهی با اسپین ۱/۲ را در نظر بگیرید. ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای عملگر $S_x + S_y$ را به‌دست آورید. فرض کنید این عملگر را اندازه‌گیری کرده‌ایم و دستگاه را در حالت مربوط به ویژه‌مقدار بزرگتر یافته‌ایم. احتمال این را محاسبه کنید که از اندازه‌گیری S_z مقدار $\hbar/2$ به‌دست آید.

۱۳ـ۱۴ معادلهٔ آهنگ تغییر یک عملگر در نمایش هایزنبرگ با ۷ـ۶۲ داده می‌شود. اگر هامیلتونی به‌صورت زیر باشد

$$H = \frac{eg}{2mc}\mathbf{S}(t) \cdot \mathbf{B}$$

و رابطه‌های جابه‌جایی $[S_x(t), S_y(t)] = ihS_z(t)$ و غیره برقرار باشند، معادله‌های حرکت عملگرهای $S_x(t)$، ... را به‌دست آورید. اگر $\mathbf{B} = (0, 0, B)$، $\mathbf{S}(t)$ را برحسب $\mathbf{S}(0)$ تعیین کنید.

۱۴ـ۱۴ جسمی با اسپین ۱/۲ در زمان $t = 0$ در یک ویژه‌حالت S_x با ویژه‌مقدار $+\hbar/2$ است. در این زمان آن‌را در میدان مغناطیسی $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ قرار می‌دهیم و می‌گذاریم برای مدت زمان T به حرکت تقدیمی انجام دهد. در این لحظه میدان را به‌سرعت به جهت y می‌چرخانیم، و در نتیجه مؤلفه‌های آن به‌صورت $(0, B, 0)$ درمی‌آیند. پس از یک بازهٔ زمانی دیگر T، S_x را اندازه می‌گیریم. احتمال اینکه مقدار $\hbar/2$ به‌دست آید چقدر است؟

۱۵ـ۱۴ رفتار ذره‌ای با اسپین ۱ را در میدان مغناطیسی خارجی بررسی کنید. فرض کنید به‌صورت $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ است و حالت اولیه را یک ویژه‌حالت عملگر زیر به‌ترتیب با ویژه‌مقدارهای $\hbar$، 0، $-\hbar$ بگیرید

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{n} = S_x \sin\theta \cos\phi + S_y \sin\theta \sin\phi + S_z \cos\theta$$

[راهنمایی: از نمایشهای ماتریسی ۱۴ـ۲۳ استفاده کنید.]

۱۶ـ۱۴ انرژی الکترونی به جرم μ در میدان مغناطیسی $\mathbf{B} = \mathbf{k}B$، با تکانهٔ صفر در راستای z،

www.arsanjan.blogfa.com

با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$E = \frac{eB\hbar}{۲\mu c}(۲n + ۱ + |m| + m) \quad \text{با} \quad m = ۰, \pm ۱, \pm ۲, \pm ۳, \ldots$$

(الف) با توجه به اینکه الکترون دارای اسپین ۱/۲ است، رابطهٔ انرژی به‌چه صورت در می‌آید؟

(ب) طیف انرژی را با در نظر گرفتن اثر اسپین برای چهار حالت اول انرژی ترسیم کنید. برای هر یک از ترازهایی که ترسیم می‌کنید، مقادیر کوانتومی مربوط به آن انرژی الکترون، یعنی m ،n و S_z، را دقیقاً بنویسید.

مراجع

مباحث مربوط به اسپین را می‌توان در تمام کتابهایی که در آخر این کتاب معرفی کرده‌ایم یافت.

www.arsanjan.blogfa.com

۱۵

جمع تکانه‌های زاویه‌ای

جمع دو اسپین

فرض کنید دو الکترون داریم که اسپینهای آنها با عملگرهای $\mathbf{S}_۱$ و $\mathbf{S}_۲$ توصیف می‌شوند. هر یک از این دو مجموعهٔ عملگرها در رابطه‌های جابه‌جایی مشخصهٔ تکانه‌های زاویه‌ای صدق می‌کنند:

$$[S_{۱x}, S_{۱y}] = i\hbar S_{۱z}$$

و غیره، و

$$[S_{۲x}, S_{۲y}] = i\hbar S_{۲z} \qquad (۱\text{ـ}۱۵)$$

و غیره، اما دو مجموعهٔ عملگر با یکدیگر جابه‌جا می‌شوند زیرا درجه‌های آزادی مربوط به ذرات مختلف مستقل از یکدیگرند، یعنی

$$[\mathbf{S}_۱, \mathbf{S}_۲] = ۰ \qquad (۲\text{ـ}۱۵)$$

www.arsanjan.blogfa.com

اکنون اسپین کل را با رابطهٔ

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 \qquad (۳_۱۵)$$

رابطه‌های جابه‌جایی حاکم بر مؤلفه‌های $\mathbf{S}$ عبارت‌اند از

$$\begin{aligned}[S_x, S_y] &= [S_{1x} + S_{2x}, S_{1y} + S_{2y}] \\ &= [S_{1x}, S_{1y}] + [S_{2x}, S_{2y}] \\ &= i\hbar(S_{1z} + S_{2z}) = i\hbar S_z\end{aligned} \qquad (۴_۱۵)$$

و غیره. بنابراین، اینکه $\mathbf{S}$ را اسپین کل گفتیم موجه است. اکنون می‌خواهیم ویژه‌مقدارها و ویژه‌تابع‌های $\mathbf{S}^2$ و S_z را تعیین کنیم.

دستگاه دو اسپینی عملاً چهار حالت دارد. اگر اسپینورهای الکترون اول را با $\chi^{(1)}_{\pm}$ نشان دهیم، به‌طوری که

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_1^2 \chi^{(1)}_{\pm} &= \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + 1\right)\hbar^2 \chi^{(1)}_{\pm} \\ S_{1z}\chi^{(1)}_{\pm} &= \pm\frac{1}{2}\hbar\chi^{(1)}_{\pm}\end{aligned} \qquad (۵_۱۵)$$

و به‌همین ترتیب اسپینورهای الکترون دوم $\chi^{(2)}_{\pm}$ باشند، این چهار حالت عبارت‌اند از

$$\chi^{(1)}_{+}\chi^{(2)}_{+},\ \chi^{(1)}_{+}\chi^{(2)}_{-},\ \chi^{(1)}_{-}\chi^{(2)}_{+},\ \chi^{(1)}_{-}\chi^{(2)}_{-} \qquad (۶_۱۵)$$

ویژه‌مقدارهای S_z از رابطه‌های زیر تعیین می‌شوند

$$\begin{aligned}S_z\chi^{(1)}_{\pm}\chi^{(2)}_{\pm} &= (S_{1z} + S_{2z})\chi^{(1)}_{\pm}\chi^{(2)}_{\pm} \\ &= (S_{1z}\chi^{(1)}_{\pm})\,\chi^{(2)}_{\pm} + \chi^{(1)}_{\pm}(S_{2z}\chi^{(2)}_{\pm})\end{aligned}$$

یعنی

$$\begin{aligned}S_z\chi^{(1)}_{+}\chi^{(2)}_{+} &= \hbar\chi^{(1)}_{+}\chi^{(2)}_{+} \\ S_z\chi^{(1)}_{+}\chi^{(2)}_{-} &= S_z\chi^{(1)}_{-}\chi^{(2)}_{+} = 0 \\ S_z\chi^{(1)}_{-}\chi^{(2)}_{-} &= -\hbar\chi^{(1)}_{-}\chi^{(2)}_{-}\end{aligned} \qquad (۷_۱۵)$$

www.arsanjan.blogfa.com

به‌ازای $m = ۰$ دو حالت داریم که می‌توان نشان داد که از یک ترکیب خطی این دو حالت یک حالت $S = ۱$ به‌دست می‌آید که با حالتهای $m = ۱$ و $m = -۱$ یک سه‌تایی تشکیل می‌دهد، و از ترکیب متعامد یک حالت تکتایی $S = ۰$ به‌دست می‌آید. برای تحقیق درستی این پیش‌بینی، عملگر کاهندهٔ زیر را می‌سازیم

$$S_- = S_{۱-} + S_{۲-} \qquad (۸\text{-}۱۵)$$

و آن‌را بر حالت $m = ۱$ اعمال می‌کنیم. در نتیجه یک حالت $m = ۰$ به‌دست می‌آید که با تقریب یک ضریب به سه‌تایی $S = ۱$ تعلق دارد. در واقع، با استفاده از

$$S_-^{(i)}\chi_+^{(i)} = h\chi_-^{(i)} \qquad (۹\text{-}۱۵)$$

که می‌توان آن‌را با توجه به رابطهٔ زیر اثبات کرد

$$\frac{۱}{۲}h\left[\begin{pmatrix}۰ & ۱\\ ۱ & ۰\end{pmatrix} - i\begin{pmatrix}۰ & -i\\ i & ۰\end{pmatrix}\right]\begin{pmatrix}۱\\ ۰\end{pmatrix} = h\begin{pmatrix}۰\\ ۱\end{pmatrix} \qquad (۱۰\text{-}۱۵)$$

داریم

$$\begin{aligned} S_-\chi_+^{(۱)}\chi_+^{(۲)} &= (S_۱ - \chi_+^{(۱)})\,\chi_+^{(۲)} + \chi_+^{(۱)}S_{۲-}\chi_+^{(۲)} \\ &= h\chi_-^{(۱)}\chi_+^{(۲)} + h\chi_+^{(۱)}\chi_-^{(۲)} \\ &= \sqrt{۲}\,h\frac{\chi_+^{(۱)}\chi_-^{(۲)} + \chi_-^{(۱)}\chi_+^{(۲)}}{\sqrt{۲}} \end{aligned} \qquad (۱۱\text{-}۱۵)$$

این ترکیب خطی بهنجارشده است، و ضریب جبران‌کنندهٔ $\sqrt{۲}h$ با آنچه از ۱۱ـ۳۶ و ۱۱ـ۴۸ به‌ازای $l = m = ۱$ انتظار داریم توافق دارد. با اعمال S_- بر این ترکیب خطی، و با توجه به اینکه

$$S_-^{(i)}\chi_-^{(i)} = ۰ \qquad (۱۲\text{-}۱۵)$$

به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} S_-\frac{\chi_+^{(۱)}\chi_-^{(۲)} + \chi_-^{(۱)}\chi_+^{(۲)}}{\sqrt{۲}} &= \frac{h}{\sqrt{۲}}(\chi_-^{(۱)}\chi_-^{(۲)} + \chi_-^{(۱)}\chi_-^{(۲)}) \\ &= \sqrt{۲}h\chi_-^{(۱)}\chi_-^{(۲)} \end{aligned} \qquad (۱۳\text{-}۱۵)$$

www.arsanjan.blogfa.com

که همان چیزی است که برای [illegible] آوریم. حالت باقی‌مانده، که طوری ساخته شده است که با ۱۵ـ۱۱ متعامد و درست بهنجارشده باشد، عبارت است از

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)} - \chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)}) \qquad (۱۵\text{ـ}۱۴)$$

و چون همتایی ندارد حدس می‌زنیم که یک حالت $S = 0$ باشد. برای وارسی این حدس، $\mathbf{S}^2$ را برای دو حالت زیر محاسبه می‌کنیم

$$X_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)} \pm \chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)}) \qquad (۱۵\text{ـ}۱۵)$$

داریم

$$\begin{aligned}\mathbf{S}^2 &= (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2 = \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \\ &= \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2S_{1z}S_{2z} + S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}\end{aligned} \qquad (۱۵\text{ـ}۱۶)$$

ابتدا می‌نویسیم

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_1^2 X_\pm &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_-^{(2)}\mathbf{S}_1^2\chi_+^{(1)} \pm \chi_+^{(2)}\mathbf{S}_1^2\chi_-^{(1)}) \\ &= \frac{3}{4}\hbar^2 X_\pm\end{aligned} \qquad (۱۵\text{ـ}۱۷)$$

و به‌همین ترتیب،

$$\mathbf{S}_2^2 X_\pm = \frac{3}{4}\hbar^2 X_\pm \qquad (۱۵\text{ـ}۱۸)$$

سپس، برای جملهٔ سوم ۱۵ـ۱۶ داریم

$$2S_{1z}S_{2z}X_\pm = 2\left(\frac{1}{2}\hbar\right)\left(-\frac{1}{2}\hbar\right)X_\pm = -\frac{1}{2}\hbar^2 X_\pm \qquad (۱۵\text{ـ}۱۹)$$

و سرانجام

$$\begin{aligned}(S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+})X_\pm = &\frac{1}{\sqrt{2}}(S_{1+}\chi_+^{(1)}S_{2-}\chi_-^{(2)} + S_{1-}\chi_+^{(1)}S_{2+}\chi_-^{(2)} \\ &\pm S_{1+}\chi_-^{(1)}S_{2-}\chi_+^{(2)} \pm S_{1-}\chi_-^{(1)}S_{2+}\chi_+^{(2)})\end{aligned}$$

www.arsanjan.blogfa.com

که با توجه به ۱۵ـ۹ و ۱۵ـ۱۰ داریم

$$(S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+})X_{\pm} = \pm\hbar^2 X_{\pm} \qquad (۱۵\text{ـ}۲۰)$$

بنابراین، برای حالتهای $\pm$ متناظر با $S = ۱$، ۰، به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}\mathbf{S}^2 X_{\pm} &= \hbar^2\left(\frac{۳}{۴}+\frac{۳}{۴}-\frac{۱}{۲}\pm ۱\right)X_{\pm} = \begin{pmatrix}۲\\ ۰\end{pmatrix}\hbar^2 X_{\pm} \\ &= \hbar^2 S(S+۱)X_{\pm}\end{aligned} \qquad (۱۵\text{ـ}۲۱)$$

آنچه نشان داده‌ایم این است که تمام چهار حالت ذرات اسپین ۱/۲ را می‌توان به‌صورت حالتهای اسپین کل سه‌تایی و تکتایی بازترکیب کرد. باید توجه کرد که دو توصیف کاملاً هم‌ارز داریم. در یک مورد، مجموعهٔ کامل مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده از $\mathbf{S}_1^2$، $\mathbf{S}_2^2$، S_{1z} و S_{2z} تشکیل می‌شود. در مورد دیگر، مجموعهٔ کامل مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشوندهٔ $\mathbf{S}^2$، S_z، $\mathbf{S}_1^2$ و $\mathbf{S}_2^2$ را داریم. بنابه قضیهٔ بسط، هر تابعی را می‌توان برحسب مجموعهٔ کاملی از ویژه‌حالتها بسط داد. آنچه در اینجا نشان داده‌ایم بسط ویژه‌حالتهای مجموعهٔ دوم مشاهده‌پذیرها برحسب مجموعهٔ کامل حالتهای مجموعهٔ اول مشاهده‌پذیرها است. این کاملاً شبیه به نوشتن ویژه‌حالتهای اتم هیدروژن برحسب ویژه‌حالتهای عملگر تکانه است، که در آن ضرایب بسط (مانسته‌های ضرایب $۱/\sqrt{۲}$ در اینجا) توابع‌موج فضای تکانه هستند. به‌سادگی می‌توان این فرایند را وارونه کرد و حاصلضربهای $\chi^{(۱)}\chi^{(۲)}$ را برحسب ترکیبهای سه‌تایی و تکتایی به‌دست آورد.

در مسائل فیزیکی، اغلب اتفاق می‌افتد که در تقریب اول این دو مجموعهٔ مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشوندهٔ کامل برای ساختن ویژه‌حالتها به یک اندازه مفید هستند. در تقریب بعد، وقتی جمله‌های اضافی در هامیلتونی به‌حساب آورده می‌شوند، تنها یکی از این دو مجموعه مفید خواهد بود. یک مثال ساده در فیزیک هسته‌ای کم انرژی پیش می‌آید.

در مطالعات اولیهٔ پتانسیل $V(r)$ که برهم‌کنش میان نوترونها و پروتونها کم‌انرژی را توصیف می‌کند معلوم شد که شدت برهم‌کنش بستگی به این دارد که دو ذرهٔ برهم‌کنش‌کننده در حالت اسپین کل $S = ۱$ باشند یا در حالت $S = ۰$. به‌عنوان مثال، برای دوترون $S = ۱$، در حالی‌که حالت $S = ۰$ برای یک نوترون و یک پروتون حالت مقید نیست. این وضعیت را می‌توان برحسب یک پتانسیل وابسته به اسپین توصیف کرد. فرض کنید

$$V(r) = V_1(r) + \frac{۱}{\hbar^2}\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2 V_2(\mathbf{r}) \qquad (۱۵\text{ـ}۲۲)$$

به‌سادگی می‌توان دید که S_1 و S_{2z} با جملهٔ دوم جابه‌جا نمی‌شوند، و در نتیجه ویژه‌حالتهای هامیلتونی حاوی این پتانسیل نمی‌توانند صرفاً حاصلضربهای ساده‌ای از ویژه‌حالتهای S_{1z} و S_{2z}

www.arsanjan.blogfa.com

باشند. اما با توجه به اینکه

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \frac{1}{2}(\mathbf{S}^2 - \mathbf{S}_1^2 - \mathbf{S}_2^2) \qquad (۱۵_۲۳)$$

به‌طوری که می‌توان به‌جای این جمله، وقتی روی ویژه‌تابع $\mathbf{S}^2$، $\mathbf{S}_1^2$ و $\mathbf{S}_2^2$ عمل می‌کند، ویژه‌مقدارآن‌را قرار داد، می‌توانیم بنویسیم

$$\begin{aligned} V(r) &= V_1(r) + \frac{1}{2}V_2(r)\left[S(S+1) - \frac{3}{2}\right] \\ &= V_1(r) + \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 \\ -3 \end{pmatrix} V_2(r) \begin{cases} S = 1 \\ S = 0 \end{cases} \end{aligned} \qquad (۱۵_۲۴)$$

این نوع پتانسیل وابسته به اسپین در واقع در دستگاه نوترون-پروتون مشاهده شده است. حالت مقید یک حالت $S = 1$ است ــ یعنی همان دوترون است ــ اما حالت نامقید $S = 0$ نیز وجود دارد. بنابراین، $V_1 - (3/4)V_2$ باید پتانسیلی باشد که جاذبهٔ آن از $V_1 + (1/4)V_2$ کمتر است. تنها اگر $V_2(r) \neq 0$ این وضعیت امکانپذیر است.

تابع‌موج تکتایی اسپین ۱۵ـ۱۴ ایجاب می‌کند که اگر در یک اندازه‌گیری معلوم شد الکترون (۲) حالت اسپین "بالا" است الکترون (۱) باید در حالت اسپین "پایین" باشد. اگرچه الکترونها یکسان هستند می‌توان یک حالت تکتایی در نظر گرفت که در آن الکترونها با تکانه‌های مساوی و مخالف به راست و به چپ حرکت می‌کنند، به‌طوری که دستگاه دو الکترونی باز هم نسبت به مرکز جرم ساکن است. الکترون (۲) می‌تواند الکترونی باشد که به راست حرکت می‌کند و الکترون (۱) الکترونی که به چپ حرکت می‌کند، و این گفته که الکترون سمت راست در حالت "بالا" است معنای کاملاً معینی دارد.

می‌توان پرسش جالبتری را مطرح کرد. فرض کنید S_x را برای الکترون (۲) اندازه گرفته‌ایم و معلوم شده است که ویژه‌مقدار آن $+\hbar/2$ است. یعنی الکترون (۲) در امتداد محور x در حالت "بالا"ست. اندازه‌گیری S_x برای الکترون (۱) چه نتیجه‌ای به‌دست خواهد داد؟ چون فاصلهٔ دو الکترون از یکدیگر بسیار زیاد است، ممکن است فکر کنیم که هر یک از دو مقدار $+\hbar/2$ یا $-\hbar/2$، و شاید با احتمال یکسان، می‌تواند به‌دست آید، زیرا اطلاعات مربوط به نتیجهٔ "تصویر" الکترون (۲) بر یک ویژه‌حالت خاص S_x نمی‌تواند با سرعت نامتناهی منتشر شود تا بر اندازه‌گیری روی الکترون (۱) تأثیر بگذارد. این در واقع چیزی است که باید انتظار داشته باشیم اگر بپذیریم که یک نظریهٔ فیزیکی کامل باید دارای معیارهای مشخصی باشد، چنانکه در یک مقالهٔ آلبرت اینشتین، روزن، و پادولسکی به‌دقت بیان شده است.[۱] از طرف دیگر، بنابه مکانیک کوانتومی دستگاه دو

۱. این موضوع به‌خوبی در کتاب نظریهٔ کوانتومی دیوید بوهم و از یک دیدگاه جدیدتر، در ارتباط با پژوهشهای جی ←

www.arsanjan.blogfa.com

اسپینی با یک تک تابع‌موج توصیف می‌شوند که در آن اعداد بسته‌اند. اندازه‌گیری روی بخشی از دستگاه، در اینجا S_x برای یکی از الکترونها، همراه با این آگاهی که دستگاه در یک حالت اسپینی تکتایی است، در واقع اندازه‌گیری روی تمام تابع‌موج است. بنابراین، اگر از اندازه‌گیری S_x برای الکترون (۲) مقدار $+\hbar/۲$ به‌دست آید، آنگاه نتیجه اندازه‌گیری S_x برای الکترون (۱) باید $-\hbar/۲$ باشد. برای اثبات صوری این نتیجه، توجه کنید که ویژه‌حالتهای $\chi_\pm$ را می‌توان به ویژه‌حالتهای S_x، که آنها را با $\xi_\pm$ نشان می‌دهیم، تجزیه کرد. قبلاً دیدیم (رابطه‌های ۱۴ـ۵۶ و ۱۴ـ۵۷ به‌ازای $\phi = ۰$) که

$$\xi_\pm = \frac{۱}{\sqrt{۲}}(\chi_+ \pm \chi_-)$$

یا معادل آن

$$\chi_\pm = \frac{۱}{\sqrt{۲}}(\xi_+ \pm \xi_-)$$

با جاگذاری در

$$\psi = \frac{۱}{\sqrt{۲}}(\chi_+^{(۱)}\chi_-^{(۲)} - \chi_-^{(۱)}\chi_+^{(۲)})$$

به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}\psi &= (۱/\sqrt{۲})^{(۳)}[(\xi_+^{(۱)} + \xi_-^{(۱)})(\xi_+^{(۲)} - \xi_-^{(۲)}) - (\xi_+^{(۱)} - \xi_-^{(۱)})(\xi_+^{(۲)} + \xi_-^{(۲)})] \\ &= \frac{۱}{\sqrt{۲}}(\xi_+^{(۱)}\xi_-^{(۲)} - \xi_-^{(۱)}\xi_+^{(۲)}) \qquad (۱۵\text{ـ}۲۵)\end{aligned}$$

که به‌روشنی نشان می‌دهد اگر الکترون (۲) در حالت "بالا" باشد آنگاه الکترون (۱) باید در حالت "پایین" باشد.

جمع اسپین ۱/۲ و تکانهٔ زاویه‌ای مداری

آنچه در کاربردهای بعدی اهمیت فراوان دارد ترکیب اسپین با تکانهٔ زاویه‌ای مداری است. چون $\mathbf{L}$ وابسته به مختصات فضایی است و $\mathbf{S}$ نیست، با هم جابه‌جا می‌شوند:

$$[\mathbf{L}, \mathbf{S}] = ۰ \qquad (۱۵\text{ـ}۲۶)$$

آس بل، در مکانیک کوانتومی نوین ساکورایی بررسی شده است. همچنین مراجعه کنید به سخن آخر درکتاب آشنایی با مکانیک کوانتومی دیوید جی گریفیث.

بنابراین، بدیهی است که مؤلفه‌های تکانهٔ زاویه‌ای کل J که با رابطهٔ زیر تعریف می‌شود

www.arsadjan.blogfa.com

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \qquad (۲۷_۱۵)$$

در رابطه‌های جابه‌جایی تکانه‌های زاویه‌ای صدق می‌کنند.
برای یافتن ترکیبهای خطی Y_{lm} و $\chi_{\pm}$ که ویژه‌حالتهای

$$J_z = L_z + S_z \qquad (۲۸_۱۵)$$

و

$$\begin{aligned}\mathbf{J}^2 &= \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} \\ &= \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2L_zS_z + L_+S_- + L_-S_+\end{aligned} \qquad (۲۹_۱۵)$$

هستند، باز هم ضریبهای بسط یک مجموعهٔ کامل از ویژه‌تابعها را برحسب مجموعهٔ کامل ویژه‌تابعهای دیگر به‌دست می‌آوریم
ترکیب خطی زیر را در نظر بگیرید

$$\psi_{j,m+1/2} = \alpha Y_{lm}\chi_+ + \beta Y_{l,m+1}\chi_- \qquad (۳۰_۱۵)$$

این ترکیب، بنابه ساختارش، یک ویژه‌تابع J_z با ویژه‌مقدار $(m+1/2)\hbar$ است. اکنون α و β را چنان تعیین می‌کنیم که ترکیب بالا ویژه‌تابع J^2 هم باشد. با استفاده از رابطه‌های

$$\begin{aligned}L_+Y_{lm} &= [l(l+1) - m(m+1)]^{1/2}\hbar Y_{l,m+1} \\ &= [(l+m+1)(l-m)]^{1/2}\hbar Y_{l,m+1} \\ L_-Y_{lm} &= [(l-m+1)(l+m)]^{1/2}\hbar Y_{l,m-1} \\ S_+\chi_+ &= S_-\chi_- = 0 \qquad S_\pm\chi_\mp = \hbar\chi_\pm\end{aligned} \qquad (۳۱_۱۵)$$

می‌نویسیم

$$\begin{aligned}\mathbf{J}^2\psi_{j,m+1/2} =& \alpha\hbar^2\{l(l+1)Y_{lm}\chi_+ + \frac{3}{4}Y_{lm}\chi_+ + 2m\left(\frac{1}{2}\right)Y_{lm}\chi_+ \\ &+ [(l-m)(l+m+1)]^{1/2}Y_{l,m+1}\chi_-\} + \beta\hbar^2\{l(l+1)Y_{l,m+1}\chi_- \\ &+ \frac{3}{4}Y_{l,m+1}\chi_- + 2(m+1)\left(-\frac{1}{2}\right)Y_{l,m+1}\chi_- \\ &+ [(l-m)(l+m+1)]^{1/2}Y_{lm}\chi_+\}\end{aligned} \qquad (۳۲_۱۵)$$

www.arsanjan.blogfa.com

که به‌صورت

$$\hbar^2 j(j+1)\psi_{j,m+1/2} = \hbar^2 j(j+1)(\alpha Y_{lm}\chi_+ + \beta Y_{l,m+1}\chi_-) \qquad (۱۵\text{-}۳۳)$$

است به شرط اینکه

$$\alpha\left[l(l+1)+\frac{3}{4}+m\right] + \beta[(l-m)(l+m+1)]^{1/2} = j(j+1)\alpha$$
$$\beta\left[l(l+1)+\frac{3}{4}-m-1\right] + \alpha[(l-m)(l+m+1)]^{1/2} = j(j+1)\beta \qquad (۱۵\text{-}۳۴)$$

از اینجا به‌دست می‌آوریم

$$(l-m)(l+m+1) = \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} - m\right] \times \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} + m + 1\right]$$

که به‌وضوح دارای دو جواب زیر است

$$j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} = \begin{cases} -l-1 \\ l \end{cases} \qquad (۱۵\text{-}۳۵)$$

یعنی

$$j = \begin{cases} 1 - \frac{1}{2} \\ l + \frac{1}{2} \end{cases} \qquad (۱۵\text{-}۳۶)$$

به‌ازای $j = l + 1/2$، به‌دست می‌آوریم

$$\alpha = \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}} \qquad \beta = \sqrt{\frac{1-m}{2l+1}} \qquad (۱۵\text{-}۳۷)$$

(در واقع نسبت را به‌دست می‌آوریم؛ اینها مقادیر بهنجارشده هستند.) بنابراین،

$$\psi_{l+1/2,m+1/2} = \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}}Y_{lm}\chi_+ + \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}}Y_{l,m+1}\chi_- \qquad (۱۵\text{-}۳۸)$$

www.arsanjan.blogfa.com

می‌توان حدس زد که جواب مربوط به $j = l - ۱/۲$ نیز برای متعامد بودن با جواب مربوط به $j = l + ۱/۲$، باید به‌صورت زیر باشد

$$\psi_{۱-۱/۲,m+۱/۲} = \sqrt{\frac{l-m}{۲l+۱}}\, Y_{lm}\chi_+ - \sqrt{\frac{l+m+۱}{۲l+۱}}\, Y_{l,m+۱}\chi_- \qquad (۳۹_۱۵)$$

قاعده‌های کلی جمع تکانه‌های زاویه‌ای، و پیامدهای آن برای ذرات یکسان

دو مثال بالا ویژگیهای کلی جمع تکانه‌های زاویه‌ای را نشان می‌دهند: با داشتن ویژه‌حالتهای $Y^{(۱)}_{l_۱m_۱}$، مربوط به $\mathbf{L}^۲_۱$ و $L_{۱z}$، و ویژه‌حالتهای $Y^{(۲)}_{l_۲m_۲}$، مربوط به $\mathbf{L}^۲_۲$ و $L_{۲z}$، می‌توان تعداد $(۲l_۱ + ۱)(۲l_۲ + ۱)$ حاصلضرب توابع زیر را تشکیل داد

$$Y^{(۱)}_{l_۱m_۱} Y^{(۲)}_{l_۲m_۲} \left\{ \begin{matrix} -l_۱ \le m_۱ \le l_۱ \\ -l_۲ \le m_۲ \le l_۲ \end{matrix} \right\} \qquad (۴۰_۱۵)$$

این توابع موج را می‌توان با ویژه‌مقدار عملگر

$$J_z = L_{۱z} + L_{۲z} \qquad (۴۱_۱۵)$$

که $m_۱ + m_۲$ است و از مقدار بیشینهٔ $l_۱ + l_۲$ تا مقدار کمینهٔ $-l_۱ - l_۲$ تغییر می‌کند، رده‌بندی کرد. مانند دو مورد ساده‌ای که قبلاً بررسی کردیم، ترکیبهای خطی مختلف تابعهای مربوط به مقدار یکسان m به مقادیر مختلف j متعلق هستند. در جدول زیر ترکیبهای ممکن مربوط به مثال خاص $l_۱ = ۴$ و $l_۲ = ۲$ را می‌بینید. در این جدول از نماد اختصاری $(m_۱, m_۲)$ به‌جای $Y^{(۱)}_{l_۱m_۱} Y^{(۲)}_{l_۲m_۲}$ استفاده کرده‌ایم. جمعاً ۴۵ ترکیب داریم، که با $(۲l_۱ + ۱)(۲l_۲ + ۱)$ سازگار است.

بالاترین حالت دارای تکانهٔ زاویه‌ای کل $l_۲ + l_۱$ است، چنانکه می‌توان به‌سادگی از اعمال $J^۲$ بر $Y^{(۱)}_{l_۱l_۱} Y^{(۲)}_{l_۲l_۲}$ دید:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^۲ Y^{(۱)}_{l_۱l_۱} Y^{(۲)}_{l_۲l_۲} &= (\mathbf{L}^۲_۱ + \mathbf{L}^۲_۲ + ۲L_{۱z}L_{۲z} + L_{۱+}L_{۲-} + L_{۱-}L_{۲+}) Y^{(۱)}_{l_۱l_۱} Y^{(۲)}_{l_۲l_۲} \\ &= \hbar^۲[l_۱(l_۱+۱) + l_۲(l_۲+۱) + ۲l_۱l_۲] Y^{(۱)}_{l_۱l_۱} Y^{(۲)}_{l_۲l_۲} \\ &= \hbar^۲(l_۱ + l_۲)(l_۱ + l_۲ + ۱) Y^{(۱)}_{l_۱l_۱} Y^{(۲)}_{l_۲l_۲} \end{aligned} \qquad (۴۲_۱۵)$$

www.arsanjan.blogfa.com

تعداد	ترکیبهای m_1, m_2	مقدار m
۱	$(۴,۲)$	۶
۲	$(۴,۱)(۳,۲)$	۵
۳	$(۴,۰)(۳,۱)(۲,۲)$	۴
۴	$(۴,-۱)(۳,۰)(۲,۱)(۱,۲)$	۳
۵	$(۴,-۲)(۳,-۱)(۲,۰)(۱,۱)(۰,۲)$	۲
۵	$(۳,-۲)(۲,-۱)(۱,۰)(۰,۱)(-۱,۲)$	۱
۵	$(۲,-۲)(۱,-۱)(۰,۰)(-۱,۱)(-۲,۲)$	۰
۵	$(۱,-۲)(۰,-۱)(-۱,۰)(-۲,۱)(-۳,۲)$	-۱
۵	$(۰,-۲)(-۱,-۱)(-۲,۰)(-۳,۱)(-۴,۲)$	-۲
۴	$(-۱,-۲)(-۲,-۱)(-۳,۰)(-۴,۱)$	-۳
۳	$(-۲,-۲)(-۳,-۱)(-۴,۰)$	-۴
۲	$(-۳,-۲)(-۴,-۱)$	-۵
۱	$(-۴,-۲)$	-۶

این حالت مربوط به $j = ۶$ در جدول بالا است. با اعمال پی‌درپی عملگر

$$J_- = L_{۱-} + L_{۲-} \qquad (۴۳\text{ـ}۱۵)$$

یک ترکیب خطی از هر سطر جدول به‌دست می‌آید. این ترکیبها ۱۳ حالت تشکیل می‌دهند که متعلق به $j = ۶$ هستند. پس از انجام این کار، یک حالت با $m = ۵$، دو حالت با $m = ۴$، ...، یک حالت با $m = -۵$ باقی می‌ماند. این نتیجه‌گیری موجه است، و در واقع می‌توان وارسی کرد که حالت $m = ۵$ به $j = ۵$ مربوط می‌شود. باز هم با اعمال پی در پی L_- یک ترکیب خطی دیگر از هر سطر جدول به‌دست می‌آوریم، که جمعاً ۱۱ حالت مربوط به $j = ۵$ تشکیل می‌دهند. با ادامهٔ این روند مجموعه‌هایی مربوط به $j = ۴$، $j = ۳$ و سرانجام $j = ۲$ به‌دست می‌آیند. تعداد اینها به ۴۵ می‌رسد:

$$۱۳ + ۱۱ + ۹ + ۷ + ۵ = ۴۵$$

جزئیات این تجزیه را بررسی نمی‌کنیم زیرا این کار فراتر از اهداف این کتاب است. تنها به بیان نتایج می‌پردازیم.

(الف) حاصلضربهای $Y^{(۱)}_{l_۱m_۱} Y^{(۲)}_{l_۲m_۲}$ را می‌توان به ویژه‌حالتهای $\mathbf{J}^۲$ با ویژه‌مقدارهای $j(j+۱)\hbar^۲$ تجزیه کرد؛ j می‌تواند مقادیر زیر را بگیرد

$$j = l_۱ + l'_۲ l_۱ + l_۲ - ۱, \ldots, |l_۱ - l_۲| \qquad (۴۴\text{ـ}۱۵)$$

www.arsanjan.blogfa.com

می‌توان تحقیق کرد که تعداد حالتها از ۱۵_۴۴ تا جمع کنیم اگر تعداد حالتها را جمع بزنیم به‌دست می‌آوریم ($l_1 \geq l_2$)

$$\begin{aligned}[2(l_1+l_2)+1]+[2(l_1+l_2-1)+1]+\cdots+[2(l_1-l_2)+1] \\ = \sum_{n=0}^{2l_2}[2(l_1-l_2+n)+1] \\ = (2l_2+1)(2l_1+1)\end{aligned} \qquad (۱۵_۴۵)$$

(ب) رابطه‌های ۱۵_۳۸ و ۱۵_۳۹ را می‌توان تعمیم داد و رشتهٔ کلبش_گوردان را به‌دست آورد:

$$\psi_{jm} = \sum_{m_1} C(jm; l_1 m_1 l_2 m_2) Y^{(1)}_{l_1 m_1} Y^{(2)}_{l_2 m_2} \qquad (۱۵_۴۶)$$

ضرایب $C(jm; l_1 m_1 l_2 m_2)$ را ضرایب کلبش_گوردان می‌نامند؛ این ضرایب را به‌ازای مقادیر زیادی از شناسه‌ها جدول‌بندی کرده‌اند. در اینجا این ضرایب را به‌ازای $l_2 = 1/2$ محاسبه کرده‌ایم، و خلاصهٔ ۱۵_۳۷ و ۱۵_۳۸ را در جدول زیر نوشته‌ایم. توجه کنید که $m = m_1 + m_2$، و در نتیجه m در این رابطه‌ها همان m_1 در جدول زیر است.

$C(jm; l_1 m_1, 1/2, m_2)$

	$m_2 = 1/2$	$m_2 = -1/2$
$j = l_1 + 1/2$	$\sqrt{\frac{l_1+m+1/2}{2l_1+1}}$	$\sqrt{\frac{l_1-m+1/2}{2l_1+1}}$
$j = l_1 - 1/2$	$-\sqrt{\frac{l_1-m+1/2}{2l_1+1}}$	$\sqrt{\frac{l_1+m+1/2}{2l_1+1}}$

یک جدول مفید دیگر عبارت است از

$C(jm; l_1 m_1, 1, m_2)$

	$m_2 = 1$	$m_2 = 0$	$m_2 = -1$
$j = l_1+1$	$\sqrt{\frac{(l_1+m)(l_1+m+1)}{(2l_1+1)(2l_1+2)}}$	$\sqrt{\frac{(l_1-m+1)(l_1+m+1)}{(2l_1+1)(l_1+1)}}$	$\sqrt{\frac{(l_1-m)(l_1-m+1)}{(2l_1+1)(2l_1+2)}}$
$j = l_1$	$-\sqrt{\frac{(l+m)(l_1-m+1)}{2l_1(l_1+1)}}$	$\frac{m}{\sqrt{l_1(l_1+1)}}$	$\sqrt{\frac{(l_1-m)(l_1+m+1)}{2l_1(2l_1+1)}}$
$j = l_1-1$	$\sqrt{\frac{(l_1-m)(l_1-m+1)}{2l_1(2l_1+1)}}$	$-\sqrt{\frac{(l_1-m)(l_1+m)}{l_1(2l_1+1)}}$	$\sqrt{\frac{(l_1+m)(l_1+m+1)}{2l_1(2l_1+1)}}$

و در پایان باید نکته‌ای را تذکر دهیم در بحث ذرات یکسان گفتیم که دستگاه متشکل از دو الکترون (یا به‌طورکلی دو فرمیون) باید در حالتی باشد که تحت تعویض دو ذره پادمتقارن است. در این تعویض، علاوه بر تبادل مختصات فضایی، تبادل نشانهای اسپینی نیز دخیل است. برای دستگاهی متشکل از دو ذرهٔ یکسان با اسپین ۱/۲، حالتهای سه‌تایی $S = ۱$، یعنی

www.arsanjan.blogfa.com

$$\begin{matrix} \chi_+^{(۱)}\chi_+^{(۲)} \\ \frac{۱}{\sqrt{۲}}(\chi_+^{(۱)}\chi_-^{(۲)} + \chi_-^{(۱)}\chi_+^{(۲)}) \\ \chi_-^{(۱)}\chi_-^{(۲)} \end{matrix} \qquad (۴۷_۱۵)$$

تحت تعویض نشان اسپینی متقارن هستند، در حالی که حالت تکتایی $S = ۰$

$$\frac{۱}{\sqrt{۲}}(\chi_+^{(۱)}\chi_-^{(۲)} - \chi_-^{(۱)}\chi_+^{(۲)}) \qquad (۴۸_۱۵)$$

پادمتقارن است. بنابراین، تابع‌موج فضایی باید برای حالت سه‌تایی پادمتقارن و برای حالت تکتایی متقارن باشد. تابع‌موج فضایی دستگاه دو ذره‌ای در چارچوب مرکز جرم به‌صورت کلی زیر است

$$u(\mathbf{r}) = R_{nlm}(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \qquad (۴۹_۱۵)$$

تعویض مختصات دو ذره هم‌ارز تبدیل زیر است

$$\begin{aligned} r &\rightarrow r \\ \theta &\rightarrow \pi - \theta \\ \phi &\rightarrow \phi + \pi \end{aligned} \qquad (۵۰_۱۵)$$

بنابراین، تابع شعاعی تغییر نمی‌کند. اما تحت این تبدیل داریم

$$\begin{aligned} Y_{lm}(\theta\ \phi) \rightarrow & Y_{lm}(\pi - \theta, \phi + \pi) \\ = & (-۱)^l Y_{lm}(\theta, \phi) \end{aligned} \qquad (۵۱_۱۵)$$

در نتیجه، تکانهٔ زاویه‌ای مداری l باید برای حالتهای سه‌تایی فرد و برای حالتهای تکتایی زوج باشد. در بحث اتم هلیم کاربرد این نتیجه را خواهیم دید.

www.arsanjan.blogfa.com

نکاتی دربارهٔ پاریته

استدلال بالا را می‌توان برای بررسی خواص Y_{lm} تحت وارونی به‌کار برد. تبدیل $x \to -x$، $y \to -y$ و $z \to -z$ با ۱۵ـ۵۰ است. بنابراین، می‌بینیم که ذره‌ای در یک حالت تکانهٔ زاویه‌ای مداری دارای تابع‌موجی است که با $(-1)^l$ تغییر می‌کند. حالتهای مداری با l زوج حالتهای پاریتهٔ زوج نیز هستند، و حالتهای مداری با l فرد حالتهای پاریتهٔ فرد هستند. اما باید توجه داشت که ذرات می‌توانند پاریتهٔ ذاتی هم داشته باشند. می‌توان پاریتهٔ الکترون و نوترون و پروتون را زوج تعریف کرد. آنگاه، به‌عنوان مثال، پاریتهٔ حالت $l = 1$ برای هیدروژن، فرد است، در حالی‌که پاریتهٔ حالت پایهٔ آن زوج است.

در مکانیک کوانتومی نسبیتی می‌توان نشان داد که پاریتهٔ ذاتی پادذرهٔ یک فرمیون مخالف پاریتهٔ ذاتی فرمیون است. مثلاً e^+ دارای پاریتهٔ ذاتی منفی است، و در نتیجه حالت پایهٔ پوزیترونیم که برای آن $l = 0$ پاریتهٔ منفی دارد.

یک کاربرد جالب این نکات را در فیزیک ذرات بنیادی می‌توان دید. یکی از اولین ذرات بنیادی ناپایدار که بنابه پیش‌بینی یوکاوا باید کشف می‌شد مزون π بود. این ذره که دارای سه حالت بار π^+، π^0 و π^- است نقش مهمی در نیروهای هسته‌ای دارد. معلوم شد که این ذره دارای اسپین 0 است، و این سؤال پیش آمد که با فرض اینکه ذرات شناخته‌شدهٔ پروتون و نوترون پاریتهٔ ذاتی مثبت داشته باشند، تابع‌موج مزون پی ــ که بعداً پیون نامیده شد ــ تحت انعکاس زوج است یا فرد؟ آزمایش زیر پیشنهاد شد.

گیراندازی π^- توسط دوترون را در نظر بگیرید. یک پیون کند در دوتریم مایع از راههای مختلفی انرژی از دست می‌دهد تا سرانجام در پایین‌ترین مدار بور حول هستهٔ (pn) قرار گیرد، و سپس تحت تأثیر نیروهای هسته‌ای گیر می‌افتد. در واکنش هسته‌ای

$$\pi^- + d \to n + n$$

تکانهٔ زاویه‌ای برابر با ۱ است؛ اسپین پیون صفر است، و تکانهٔ زاویه‌ای مداری در پایین‌ترین حالت بور صفر است، و در نتیجه تنها تکانهٔ زاویه‌ای دوترون که ۱ است، در این مورد سهیم است. بنابراین، دو نوترون باید در حالت تکانهٔ زاویه‌ای ۱ باشند. اگر اسپین کل دو نوترون 0 باشد، تکانهٔ زاویه‌ای مداری باید ۱ باشد. اگر اسپین کل حالت دو نوترون ۱ باشد، تکانهٔ زاویه‌ای مداری می‌تواند 0، ۱، و ۲ باشد، زیرا جمع دو تکانهٔ زاویه‌ای که هر یک از آنها برابر واحد است می‌تواند 0، ۱، و ۲ باشد، و افزودن یک واحد به دو واحد تکانهٔ زاویه‌ای می‌تواند ۳، ۲، و ۱ را به‌دست دهد. اما حالت تکتایی دو فرمیون یکسان باید تکانهٔ زاویه‌ای زوج داشته باشد، و از این‌رو کنار گذاشته می‌شود. یک حالت سه‌تایی باید تکانهٔ زاویه‌ای مداری فرد داشته باشد، و این در صورتی ممکن است که تکانهٔ زاویه‌ای مداری ۱ باشد. اما این حالت بنابه ۱۵ـ۵۱ دارای پاریتهٔ فرد است، و در نتیجه پیون باید پاریتهٔ

فرد داشته باشد. با نمادنگاری طیف‌نمایی که در آن یک حالت با

www.arsanjan.blogfa.com

$$^{2S+1}L_j \qquad (۵۲\text{ـ}۱۵)$$

نشانگذاری می‌شود، حالتهای دونوترون، از تمام ردهٔ حالتهای $^1S_0$، $^1P_1$، $^1D_2$، $^1F_3$، ...، $^3S_1$، $^3P_2$، $^3P_2$، $^3P_0$، $^3D_3$، $^3D_2$، $^3D_1$، $^3F_4$، $^3F_3$، $^3F_2$، ...، با توجه به آمار فرمی‌ـدیراک به $^1S_0$، $^1D_2$، ...، $^3P_{2,1,0}$، $^3F_{4,3,2}$، ... محدود می‌شوند، و از اینها تنها یک حالت، حالت $^3P_1$، دارای تکانهٔ زاویه‌ای ۱ است.

۴ مسائل

✓ ۱ـ۱۵ تعمیم ۱۵ـ۳۸ و ۱۵ـ۳۹ به جمع تکانهٔ زاویه‌ای مداری با اسپین ۱ را به‌تفصیل بنویسید.
(الف) ویژه‌حالتهای $\mathbf{S}^2$ و S_z را به‌دست آورید. در این مورد،

$$S_z = h\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(ب) اگر این ویژه‌حالتها را با ξ_{+1}، ξ_0 و ξ_{-1} نشان دهیم، نتیجهٔ اعمال S_+ و S_- بر این حالتها را به‌دست آورید.
(ج) تأثیر

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2L_zS_z + L_+S_- + L_-S_+$$

را بر ترکیبهایی مانند

$$\psi_{jm+1} = \alpha Y_{lm}\xi_1 + \beta Y_{l,m+1}\xi_0 + \gamma Y_{l,m+2}\xi_{-1}$$

محاسبه کنید.
(د) رابطه‌های میان α، β و γ را با استفاده از معادلهٔ زیر تعیین کنید

$$\mathbf{J}^2\Psi_{j,m} = h^2 j(j+1)\Psi_{j,m}$$

۲ـ۱۵ مانستهٔ ۱۵ـ۴۷ را برای دو ذره با اسپین ۱، که از ترکیب آنها حالتهای اسپین ۲، ۱ و ۰

www.arsanjan.blogfa.com

به‌دست می‌آیند، محاسبه کنید. از نمادنگاری $\xi^{(i)}_{x}$، $\xi^{(i)}_{y}$ و $\xi^{(i)}_{z}$ برای بردارهای اسپین تک‌ذره‌ای استفاده کنید.

۱۵ـ۳ دوترون دارای اسپین ۱ است. حالتهای ممکن اسپین و تکانهٔ زاویه‌ای کل دو دوترون را در یک حالت تکانهٔ زاویه‌ای اختیاری L به‌دست آورید. قواعد متقارن‌سازی را فراموش نکنید.

۱۵ـ۴ ذره‌ای با اسپین ۱ در پتانسیل مرکزی زیر حرکت می‌کند

$$V(r) = V_1(r) + \frac{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}{\hbar^2}V_2(r) + \frac{(\mathbf{S}\cdot\mathbf{L})^2}{\hbar^4}V_3(r)$$

مقادیر $V(r)$ را در حالتهای $J = L - 1$ و L و $L + 1$ به‌دست آورید.

۱۵ـ۵ بحث تعیین پاریتهٔ π^- را در نظر بگیرید. فرض کنید π^- اسپین ۱ دارد اما باز هم در واکنش

$$\pi^- + d \to 2n$$

در یک حالت مداری $L = 0$ گیر می‌افتد. حالتهای ممکن دو نوترون را به‌دست آورید. اگر پاریتهٔ π^- منفی باشد چه حالتهایی مجاز هستند؟

۱۵ـ۶ فرض کنید π^- اسپین ۰ و پاریتهٔ منفی دارد اما در واکنش

$$\pi^- + d \to 2n$$

از مدار P گیر می‌افتد. نشان دهید که این دو نوترون باید در حالت تکتایی باشند.

۱۵ـ۷ هامیلتونی یک دستگاه اسپین‌دار عبارت است از

$$H = A + \frac{B\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2}{\hbar^2} + \frac{C(S_{1z}+S_{2z})}{\hbar}$$

ویژه‌مقدارها و ویژه‌تابعهای دستگاه دوذره‌ای را به‌دست آورید اگر (الف) هر دو ذره اسپین ۱/۲ داشته باشند؛ (ب) یکی از ذرات اسپین ۱/۲ و دیگری اسپین ۱ داشته باشد. در قسمت (الف) فرض کنید دو ذره یکسان هستند.

۱۵ـ۸ دو ذره با اسپین ۱/۲ را در نظر بگیرید؛ اسپینهای این دو ذره با عملگرهای پاؤلی $\boldsymbol{\sigma}_1$ و $\boldsymbol{\sigma}_2$ توصیف می‌شوند. $\hat{\mathbf{e}}$ را بردار واحد راستایی بگیرید که دو ذره را به هم وصل می‌کند و عملگر زیر را تعریف کنید

$$S_{12} = 3(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\hat{\mathbf{e}})(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\hat{\mathbf{e}}) - \boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$$

نشان دهید اگر این دو ذره در حالت $S = 0$ (تکتایی) باشند، آنگاه

www.arsanjan.blogfa.com

$$S_{12} X_{\text{تکتایی}} = 0$$

برای حالت سه‌تایی داریم

$$(S_{12} - 2)(S_{12} + 4) X_{\text{سه‌تایی}} = 0$$

[راهنمایی: $\hat{\mathbf{e}}$ را در راستای z بگیرید.]

۹ـ۱۵ در یک دستگاه نوترون–پروتون کم‌انرژی (که دارای تکانهٔ زاویه‌ای مداری صفر است) انرژی پتانسیل با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$V(r) = V_1(r) + V_2(r) \left(3 \frac{(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{r})}{r^2} - \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \right) + V_3(r) \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2$$

که در آن $\mathbf{r}$ برداری است که دو ذره را به هم متصل می‌کند. انرژی پتانسیل این دستگاه پروتون–نوترون را در حالتهای زیر محاسبه کنید.

(الف) در حالت تکتایی اسپین.

(ب) در حالت سه‌تایی.

✓ **۱۰ـ۱۵** دو الکترون را در حالت تکتایی اسپین در نظر بگیرید.

الف) اگر اندازه‌گیری اسپین یکی از الکترونها نشان دهد که این الکترون در حالتی با $s_z = 1/2$ است، احتمال این را تعیین کنید که اندازه‌گیری مؤلفهٔ z اسپین الکترون دیگر مقدار $s_z = 1/2$ را به‌دست دهد.

(ب) اگر اندازه‌گیری اسپین یکی از الکترونها نشان دهد که این الکترون در حالتی با $s_y = 1/2$ است، احتمال اینکه از اندازه‌گیری مؤلفهٔ x اسپین مقدار $s_x = -1/2$ برای الکترون دوم به‌دست آید چقدر است؟

(ج) اگر الکترون (۱) در حالتی باشد که با $\cos\alpha_1 \chi_+ + \sin\alpha_1 e^{i\beta_1} \chi_-$ و الکترون (۲) در حالتی باشد که با $\cos\alpha_2 \chi_+ + \sin\alpha_2 e^{i\beta_2} \chi_-$ توصیف می‌شود، احتمال این را به‌دست آورید که حالت دو الکترون یک حالت سه‌تایی باشد.

مراجع

مطالب این فصل، با روشهای مختلفی، در تمام کتابهای درسی مکانیک کوانتومی بیان می‌شوند. بسیاری از جزئیات را می‌توان درکتاب زیر یافت

M E Rose, *Elementary Theory of Angular Momentum*, John Wiley & Sons, New York, 1957.

www.arsanjan.blogfa.com

۱۶

نظریهٔ اختلال مستقل از زمان

نظریهٔ اختلال برای حالتهای ناواگن

تعداد پتانسیلهای $V(r)$ که برای آنها معادلهٔ شرودینگر حل دقیق دارد اندک است، و بیشتر آنها را قبلاً بررسی کردیم. بنابراین، برای معادله‌هایی که حل دقیق ندارند باید از روشهای تقریبی برای تعیین ویژه‌مقدارها و ویژه‌تابعها استفاده کنیم. در این فصل به بررسی نظریهٔ اختلال می‌پردازیم. فرض می‌کنیم ویژه‌مقدارها و مجموعهٔ کامل ویژه‌تابعهای بهنجارشدهٔ هامیلتونی H_0 را داریم:

$$H_0 \phi_n = E_n^0 \phi_n \qquad (۱\text{-}۱۶)$$

و می‌خواهیم ویژه‌مقدارها و ویژه‌تابعهای هامیلتونی زیر را به‌دست آوریم

$$H = H_0 + \lambda H_1 \qquad (۲\text{-}۱۶)$$

یعنی می‌خواهیم، معادلهٔ ویژه‌مقداری زیر را حل کنیم

$$(H_0 + \lambda H_1)\psi_n = E_n \psi_n \qquad (۳\text{-}۱۶)$$

کمیتهای مطلوب را به‌صورت رشته‌های توانی بر حسب λ بیان می‌کنیم. مسئلهٔ همگرایی این رشته‌ها را بررسی نمی‌کنیم. اغلب این رشته‌ها نمی‌توانند همگرا باشند، اما باز هم چند جملهٔ اول آنها، وقتی λ کوچک است، دستگاه فیزیکی را به‌خوبی توصیف می‌کنند. فرض می‌کنیم اگر $\lambda \to 0$، آنگاه $\psi_n \to \phi_n$ و $E_n \to E_n^{(0)}$.

www.arsanjan.blogfa.com

چون ϕ_nها یک مجموعهٔ کامل تشکیل می‌دهند، می‌توان ψ_n را برحسب آنها بسط داد. می‌نویسیم

$$\psi_n = N(\lambda)\left\{\phi_n + \sum_{k\neq n} C_{nk}(\lambda)\phi_k\right\} \qquad (۴\text{-}۱۶)$$

ضریب $N(\lambda)$ برای بهنجارکردن ψ_n است. در انتخاب فاز ψ_n آزادیم، و آن‌را به‌گونه‌ای انتخاب می‌کنیم که ضریب ϕ_n در بسط بالا حقیقی و مثبت باشد. چون وقتی $\lambda \to 0$ می‌خواهیم $\psi_n \to \phi_n$، باید

$$\begin{aligned} N(0) &= 1 \\ C_{nk}(0) &= 0 \end{aligned} \qquad (۵\text{-}۱۶)$$

به‌طور کلی داریم

$$C_{nk}(\lambda) = \lambda C_{nk}^{(1)} + \lambda^2 C_{nk}^{(2)} + \cdots \qquad (۶\text{-}۱۶)$$

و

$$E_n = E_n^0 + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots \qquad (۷\text{-}۱۶)$$

بنابراین، معادلهٔ شرودینگر به‌صورت زیر در می‌آید

$$(H_0 + \lambda H_1)\left\{\phi_n + \sum_{k\neq n} \lambda C_{nk}^{(1)}\phi_k + \sum_{k\neq n} \lambda^2 C_{nk}^{(2)}\phi_k + \cdots\right\} \qquad (۸\text{-}۱۶)$$

$$= (E_n^0 + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots)\left\{\phi_n + \sum_{k\neq n} \lambda C_{nk}^{(1)}\phi_k + \sum_{k\neq n} \lambda^2 C_{nk}^{(2)}\phi_k + \cdots\right\}$$

توجه کنید که ضریب بهنجارش $N(\lambda)$ در این معادلهٔ خطی ظاهر نمی‌شود. با مساوی قرار دادن ضرایب مربوط به توانهای یکسان λ در دو طرف، یک رشته معادله به‌دست می‌آوریم. اولین معادله عبارت است از

www.arsanjan.blogfa.com

$$H_0 \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}\phi_k + H_1\phi_n = E_n^0 \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}\phi_k + E_n^{(1)}\phi_n \qquad (۹\text{-}۱۶)$$

با استفاده از $H_0\phi_k = E_k^0\,\phi_k$ به‌دست می‌آوریم

$$E_n^{(1)}\phi_n = H_1\phi_n + \sum_{k\neq n}(E_k^0 - E_n^0)C_{nk}^{(1)}\phi_k \qquad (۱۰\text{-}۱۶)$$

که اگر آن‌را در ϕ_n ضرب نرده‌ای کنیم، با توجه به شرط راست‌هنجاری

$$\langle\phi_k|\phi_l\rangle = \delta_{kl} \qquad (۱۱\text{-}۱۶)$$

به نتیجهٔ زیر می‌رسیم

$$\lambda E_n^{(1)} = \langle\phi_n|\lambda H_1|\phi_n\rangle \qquad (۱۲\text{-}۱۶)$$

این فرمول بسیار مهم است، و نشان می‌دهد که جابه‌جایی انرژی مرتبهٔ اول برای یک حالت معین همان مقدار انتظاری پتانسیل اختلالی در آن حالت است. اگر تغییر پتانسیل دارای علامت معینی باشد، جابه‌جایی انرژی نیز همان علامت را خواهد داشت. صورت صریح

$$\lambda E_n^{(1)} = \int d^3r\cdot\,\phi_n^*(\mathbf{r})\;\lambda H_1(\mathbf{r})\;\phi_n(\mathbf{r}) \qquad (۱۳\text{-}۱۶)$$

نشان می‌دهد برای اینکه این جابه‌جایی قابل‌ملاحظه باشد باید هم تغییر پتانسیل و هم چگالی احتمال $|\phi_n(\mathbf{r})|^2$ بزرگ باشند.

اگر ϕ_m را، با $m \neq n$، در ۱۶ـ۱۰ ضرب نرده‌ای کنیم به‌دست می‌آوریم

$$\langle\phi_m|H_1|\phi_n\rangle + (E_m^0 - E_n^0)D_{nm}^{(1)} = 0$$

یعنی

$$\lambda C_{nk}^{(1)} = \frac{\langle\phi_k|\lambda H_1|\phi_n\rangle}{E_n^0 - E_k^0} \qquad (۱۴\text{-}۱۶)$$

www.arsanjan.blogfa.com

صورت کسر عنصر ماتریس H_1 در پایهای است که در آن H_0 قطری است. این فرمول در معادلهٔ زیر به‌کار می‌رود، که از تساوی جمله‌های متناسب با λ^2 به‌دست می‌آید:

$$H_0 \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(2)}\phi_k + H_1 \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}\phi_k = E_n^0 \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(2)}\phi_k + E_n^{(1)} \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}\phi_k + E_n^{(2)}\phi_n \qquad (۱۵\text{-}۱۶)$$

از ضرب نرده‌ای در ϕ_n داریم

$$E_n^{(2)} = \sum_{k\neq n} \langle\phi_n|H_1|\phi_k\rangle C_{nk}^{(1)} = \sum_{k\neq n} \frac{\langle\phi_n|H_1|\phi_k\rangle\langle\phi_k|H_1|\phi_n\rangle}{E_n^0 - E_k^0}$$
$$= \sum_{k\neq n} \frac{|\langle\phi_k|H_1|\phi_n\rangle|^2}{E_n^0 - E_k^0} \qquad (۱۶\text{-}۱۶)$$

در سطر آخر از هرمیتی بودن H_1 استفاده کرده‌ایم:

$$\langle\phi_n|H_1|\phi_k\rangle = \langle\phi_k|H_1|\phi_n\rangle^* \qquad (۱۷\text{-}۱۶)$$

فرمول ۱۶ـ۱۶ نیز بسیار مهم است، مخصوصاً از این لحاظ که جابه‌جایی مرتبهٔ اول غالباً به دلیل تقارن صفر می‌شود. این فرمول را می‌توان به‌صورت زیر تعبیر کرد: جابه‌جایی انرژی مرتبهٔ دوم برابر است با مجموع جمله‌هایی که بزرگی آنها با مجذور قدرمطلق عنصر ماتریسی داده می‌شود که حالت معین ϕ_n را توسط پتانسیل اختلالی به تمام حالتهای دیگر مربوط می‌کند، و با معکوس اختلاف انرژی بین حالتها موزون شده است. از این فرمول می‌توان نتایج زیر را به‌دست آورد:

(الف) اگر ϕ_n حالت پایه، یعنی حالت کمترین انرژی، باشد آنگاه مخرج کسر همیشه منفی است، و در نتیجه ۱۶ـ۱۶ همیشه منفی است.

(ب) اگر تمام چیزهای دیگر یکسان باشند، یعنی اگر تمام عناصر ماتریس H_1 تقریباً از یک مرتبهٔ بزرگی باشند (که می‌توان بدون آگاهی خاص بیشتری حدس زد) آنگاه ترازهای نزدیک تأثیر زیادتری بر جابه‌جایی انرژی مرتبهٔ دوم نسبت به ترازهای دور دارند.

(ج) اگر یک تراز مهم "k" ــ مهم از این نظر که در نزدیکی قرار دارد، یا اینکه $\langle\phi_k|H_1|\phi_n\rangle$ بزرگ است ــ بالای تراز معین "n" قرار داشته باشد آنگاه جابه‌جایی مرتبهٔ دوم به طرف پایین است، و اگر پایینتر باشد جابه‌جایی به‌طرف بالا است. در این مورد می‌گوییم ترازها می‌خواهند یکدیگر را دفع کنند.

www.arsanjan.blogfa.com

رابطهٔ $C_{nk}^{(۲)}$ را می‌توان از ... ۱۵ـ۱۶ به‌دست آورد، اما نیازی به این فرمول نداریم. همچنین می‌توان $N(\lambda)$ را از رابطهٔ زیر تعیین کرد

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle = N^۲(\lambda) \left\{ ۱ + \lambda^۲ \sum_{k \neq n} |C_{nk}^{(۱)}|^۲ + \cdots \right\} \qquad (۱۸\text{ـ}۱۶)$$
$$= ۱$$

که نشان می‌دهد $N(\lambda)$ تا مرتبهٔ اول λ برابر با ۱ است. بنابراین، تا مرتبهٔ اول λ، می‌توان نوشت

$$\psi_n = \phi_n + \sum_{k \neq n} \frac{\langle \phi_k | \lambda H_۱ | \phi_n \rangle}{E_n^\circ - D_k^\circ} \phi_k \qquad (۱۹\text{ـ}۱۶)$$

این فرمول گاهی به‌کار می‌آید.

نظریهٔ اختلال واگن

اگر واگنی وجود داشته باشد باید تغییراتی در بررسی قبلی وارد کنیم، زیرا برحسب ظاهر، اختلاف انرژی در مخرج کسرها می‌تواند صفر شود. مشکل به‌این واقعیت مربوط است که به‌جای تنها یک ϕ_n چندین $\phi_n^{(i)}$ وجود دارند که همهٔ آنها دارای انرژی یکسان $E_n^{(\circ)}$ هستند. این ویژه‌تابعها را می‌توان نسبت به نشان i راست‌هنجار کرد، زیرا چنانکه در فصل ۴ دیدیم این نشان i می‌تواند به ویژه‌مقدارهای عملگرهای هرمیتی دیگری، که به‌طور همزمان جابه‌جاشونده هستند، وابسته باشد. بنابراین، مجموعهٔ $\phi_n^{(i)}$ را به‌گونه‌ای انتخاب می‌کنیم که

$$\langle \phi_m^{(j)} | \phi_n^{(i)} \rangle = \delta_{mn} \delta_{ij} \qquad (۲۰\text{ـ}۱۶)$$

روش بدیهی برای به‌حساب آوردن واگنی این است که به‌جای ۱۶ـ۴ رابطه‌ای بگذاریم که در آن ترکیبهای خطی ویژه‌تابعهای واگن $H_\circ$ وارد می‌شوند:

$$\psi_n = N(\lambda) \left\{ \sum_i \alpha_i \phi_n^{(i)} + \lambda \sum_{k \neq n} C_{nk}^{(۱)} \sum_i \beta_i \phi_k^{(i)} + \cdots \right\} \qquad (۲۱\text{ـ}۱۶)$$

www.arsanjan.blogfa.com

ضرایب α_i، β_i، ... را باید طوری برگزید که $\psi_n^{(1)}$ در رابطهٔ ۲۰ـ۱۶ در معادلهٔ شرودینگر ۱۶ـ۳، تا مرتبهٔ اول λ به‌دست می‌آوریم

$$H_0 \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)} \sum_i \beta_i \phi_k^{(i)} + H_1 \sum_i \alpha_i \phi_n^{(i)} = E_n^{(1)} \sum_i \alpha_i \phi_n^{(i)} + E_n^0 \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)} \sum_i \beta_i \phi_k^{(i)} \qquad (۲۲\text{ـ}۱۶)$$

از ضرب نرده‌ای $\phi_n^{(j)}$ در رابطهٔ بالا، به معادلهٔ جابه‌جایی مرتبهٔ اول می‌رسیم:

$$\sum_i \alpha_i \langle \phi_n^{(j)} | \lambda H_1 | \phi_n^{(i)} \rangle = \lambda E_n^{(1)} \alpha_j \qquad (۲۳\text{ـ}۱۶)$$

این یک مسئلهٔ ویژه‌مقداری با بعد متناهی است. برای مثال، اگر واگنی دوگانه باشد، با استفاده از نمادنگاری

$$\langle \phi_n^{(j)} | H_1 | \phi_n^{(i)} \rangle = h_{ji} \qquad (۲۴\text{ـ}۱۶)$$

معادلهٔ ۱۶ـ۲۳ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\begin{aligned} h_{11}\alpha_1 + h_{12}\alpha_2 &= E_n^{(1)} \alpha_1 \\ h_{21}\alpha_1 + h_{22}\alpha_2 &= E_n^{(1)} \alpha_2 \end{aligned} \qquad (۲۵\text{ـ}۱۶)$$

ویژه‌مقدارها و α_iها را می‌توان، با اضافه کردن شرط

$$\sum_i |\alpha_i|^2 = 1 \qquad (۲۶\text{ـ}۱۶)$$

از معادلهٔ ۱۶ـ۲۳ به‌دست آورد. ضرایب β_i را تعیین نمی‌کنیم، زیرا از نظریهٔ اختلال واگن تنها برای ویژه‌مقدارهای انرژی مرتبهٔ اول در کاربردهای آینده استفاده خواهیم کرد. اگر به‌ازای $i \neq j$ داشته باشیم $h_{ij} = 0$، یعنی اگر ماتریس h_{ij} قطری باشد، آنگاه جابه‌جاییهای مرتبهٔ اول همان عناصر قطری این ماتریس خواهند بود. این ماتریس وقتی قطری است که اختلال H_1 با عملگری که ویژه‌مقدارهای آن با نشانهای "i" مشخص می‌شوند جابه‌جا شود. به‌عنوان مثال، در اتم هیدروژن ویژه‌مقدارهای L_z واگن هستند، یعنی تمام مقادیر m انرژی یکسانی دارند. اگر داشته باشیم

$$[H_1, L_z] = 0 \qquad (۲۷\text{ـ}۱۶)$$

و $\phi_n^{(i)}$ها را ویژه‌تابعهای L_z بگیرید. آنگاه با قرار دادن www.arsanjan.blogfa.com برای اثبات، می‌نویسیم

$$L_z\phi_n^{(i)} = hm^{(i)}\phi_n^{(i)} \qquad (۲۸_۱۶)$$

$$\begin{aligned}\langle\phi_n^{(j)}|[H_۱, L_z]|\phi_n^{(i)}\rangle &= \langle\phi_n^{(j)}|H_۱J_z - L_zH_۱|\phi_n^{(i)}\rangle \\ &= h(m^{(i)} - m^{(j)})h_{ji} \\ &= ۰\end{aligned} \qquad (۲۹_۱۶)$$

یعنی ۱۶ـ۲۷ ایجاب می‌کند که

$$h_{ji} = ۰ \qquad \text{به‌ازای} \quad m^{(i)} \neq m^{(j)} \qquad (۳۰_۱۶)$$

بعضی از این ویژگیها را در مثال زیر و بعضی را بعداً در بحث اتم هیدروژن واقعی خواهیم دید.

اثر اشتارک

به‌عنوان مثالی از کاربرد نظریهٔ اختلال در یک مسئلهٔ واقعی، تأثیر میدان الکتریکی خارجی بر ترازهای انرژی اتمهای هیدروژنگونه را بررسی می‌کنیم. این پدیده را اثر اشتارک می‌نامند. هامیلتونی نامختل عبارت است از

$$H_۰ = \frac{\mathbf{p}^۲}{۲\mu} - \frac{Ze^۲}{r} \qquad (۳۱_۱۶)$$

که ویژه‌تابعهای آن‌را با $\phi_{nlm}(\mathbf{r})$ نشان می‌دهیم. پتانسیل اختلالی در اینجا به‌صورت زیر است

$$\lambda H_۱ = e\,\mathscr{E}\cdot\mathbf{r} = e\,\mathscr{E}z \qquad (۳۲_۱۶)$$

که در آن $\mathscr{E}$ میدان الکتریکی است. کمیت $e\mathscr{E}$ همان نقش پارامتر λ را دارد. جابه‌جایی انرژی حالت پایه، که ناواگن است، با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$E_{۱۰۰}^{(۱)} = e\,\mathscr{E}\langle\phi_{۱۰۰}|z|\phi_{۱۰۰}\rangle = e\,\mathscr{E}\int d^۳r|\phi_{۱۰۰}(r)|^۲z \qquad (۳۳_۱۶)$$

این انتگرال صفر می‌شود، زیرا مجذور تابع‌موج تحت پاریته همیشه یک تابع زوج است، و پتانسیل اختلالی تحت انعکاس در اینجا یک تابع فرد است. بنابراین، برای حالت پایه هیچ جابه‌جایی انرژیی وجود ندارد که نسبت به میدان الکتریکی $\mathscr{E}$ خطی باشد. به لحاظ کلاسیک، انرژی دستگاهی که

www.arsanjan.blogfa.com

گشتاور دوقطبی الکتریکی آن $\mathbf{d}$ است به اندازهٔ $-\mathbf{d}\cdot\mathscr{E}$ جابه‌جا می‌شود. بدین‌ترتیب، ۱۶ـ۳۳ نشان می‌دهد که اتم در حالت پایه گشتاور دوقطبی دائمی ندارد. هرگاه هامیلتونی نامختل تحت انعکاس ناوردا باشد می‌توان از استدلال پاریته استفاده کرد، و می‌توان نتیجهٔ بالا را به این حکم تعمیم داد که دستگاهها در حالتهای ناواگن نمی‌توانند گشتاور دوقطبی دائمی داشته باشند. این حکم ناواگنی مهم است: تنها در این وضعیت است که حالتها ویژه‌حالتهای عملگر پاریته نیز هستند، و $|\phi(\mathbf{r})|^2$ زوج است و مقدار انتظاری z صفر می‌شود.

بسیاری از مولکولها گشتاور دوقطبی دائمی ندارند، و غالباً گفته می‌شود که این به دلیل واگن بودن حالتهای پایه است. مقدار انتظاری z در حالتی مانند $\alpha\psi_+ + \beta\psi_-$، که در آن شاخصهای پایین نشاندهندهٔ پاریته هستند، مسلماً صفر نیست، و اگر دو حالت ψ_+ و ψ_- انرژی یکسانی داشته باشند حالت مزبور با حالت وارون فضایی آن $\alpha\psi_+ - \beta\psi_-$ واگن خواهد بود. این توضیح کاملاً درست نیست، به این دلیل که حالتهای پایین هیچگاه کاملاً واگن نیستند. به‌عنوان مثال، مولکولی مانند آمونیم، NH_4، را در نظر بگیرید. ساختار این مولکول یک چهاروجهی است که در آن سه هستهٔ H یک مثلث متساوی‌الاضلاع تشکیل می‌دهند. N می‌تواند (بسته به شرط کمینه بودن انرژی) "بالا" یا "پایین" این مثلث باشد. ترکیبهای خطی زوج و فرد این دو حالت دارای انرژی کاملاً یکسانی نیستند، اگرچه اختلاف انرژی بسیار کوچک ($\sim 10^{-4}\,\mathrm{eV}$) است، و علت آن سد بزرگی است که بین موقعیتهای "بالا" و "پایین" وجود دارد. بنابراین، به بیان دقیق، حالت پایه ناواگن است. اما اگر $\mathscr{E}$، که در آن

$$d = e\int \psi^*_{\text{بالا}}\, z\psi_{\text{بالا}} = -e\int \psi_{\text{پایین}}\, z\psi_{\text{پایین}} \qquad (۱۶\text{ـ}۳۴)$$

بسیار بزرگتر از این اختلاف کوچک باشد آنگاه جابه‌جایی انرژی برحسب میدان الکتریکی خطی خواهد بود، و مولکول به‌گونه‌ای رفتار می‌کند که انگار گشتاور دوقطبی الکتریکی دارد.

اکنون جملهٔ مرتبهٔ دوم را بررسی می‌کنیم، که عبارت است از

$$E_{100} = e^2\mathscr{E}^2\left\{\sum_{nlm}\frac{|\langle\phi_{nlm}|z|\phi_{100}\rangle|^2}{E_1 - E_n} + \sum_k \frac{|\langle\phi_k|z|\phi_{100}\rangle|^2}{E_1 - \hbar^2k^2/2m}\right\} \qquad (۱۶\text{ـ}۳۵)$$

دلیل وجود جملهٔ دوم این است که در ۱۶ـ۱۶ باید روی مجموعهٔ کاملی از ویژه‌حالتهای H_0 جمع بزنیم. برای اتمها، این مجموعه شامل حالتهای مقید ϕ_{nlm} و همچنین حالتهای پیوستاری است که در آنها انرژی الکترون مثبت است. حالتهای پیوستار را با $\mathbf{k}$ نشانگذاری می‌کنیم، که در اینجا k با $E = \hbar^2k^2/2m$ به انرژی جنبشی مثبت مربوط می‌شود. محاسبهٔ مستقیم این جمع بسیار مشکل است، زیرا متضمن انتگرال روی k است که در جوابهای پیوستاری نسبتاً پیچیدهٔ مسئلهٔ کولن ظاهر می‌شود (این انتگرال را می‌توان با یک فن، که در اینجا بیان نمی‌کنیم، محاسبه کرد).

www.arsanjan.blogfa.com

اما کاری که در اینجا می‌توان انجام داد، با یافتن یک کران بالا برای آن براورد کرد. رابطهٔ ۱۶ـ۳۵ را به‌صورت نمادین‌تر زیر می‌نویسیم

$$E_{100} = e^2\mathscr{E}^2 \sum_E \frac{\langle\phi_{100}|z|\phi_E\rangle\langle\phi_E|z|\phi_{100}\rangle}{E_1 - E} \qquad (۳۶_۱۶)$$

که در آن مجموعهٔ کامل را اکنون با ϕ_E نشان داده‌ایم. چون E_1 انرژی حالت پایه است، و تمام انرژیها از آن بیشتر هستند، داریم

$$\frac{1}{E_1 - E} \leq \frac{1}{E_1 - E_2} \qquad (۳۷_۱۶)$$

در نتیجه

$$E_{100} \leq \frac{e^2\mathscr{E}^2}{E_1 - E_2} \sum_E \langle\phi_{100}|z|\phi_E\rangle\langle\phi_E|z|\phi_{100}\rangle \qquad (۳۸_۱۶)$$

با توجه به اینکه برای یک مجموعهٔ کامل

$$\sum_E |\phi_E\rangle\langle\phi_E| = 1 \qquad (۳۹_۱۶)$$

به‌دست می‌آوریم

$$E_{100} < \frac{e^2\mathscr{E}^2}{E_1 - E_2}\langle\phi_{100}|z^2|\phi_{100}\rangle \qquad (۴۰_۱۶)$$

که می‌توان آن‌را به‌سادگی محاسبه کرد. چون حالت پایه تقارن کروی دارد، می‌توان نوشت

$$\begin{aligned}\langle\phi_{100}|z^2|\phi_{100}\rangle &= \langle\phi_{100}|y^2|\phi_{100}\rangle = \langle\phi_{100}|x^2|\phi_{100}\rangle \\ &= \frac{1}{3}\langle\phi_{100}|r^2|\phi_{100}\rangle = a_0^2\end{aligned} \qquad (۴۱_۱۶)$$

که در آن در آخرین مرحله از ۱۲ـ۳۶ استفاده کرده‌ایم. بنابراین

$$E_{100} < \frac{8e^2\mathscr{E}^2a_0^2}{3mc^2\alpha^2} = \frac{8}{3}\mathscr{E}^2a_0^3 \qquad (۴۲_۱۶)$$

www.arsanjan.blogfa.com

توجه کنید که $\int d^۳r\mathscr{E}^۲$ انرژی ... می‌کند که نتیجه باید به‌صورت $\mathscr{E}^۲a_۰^۳\times$ ثابت باشد، زیرا $a_۰$ تنها طول موجود در مسئله است. محاسبهٔ دقیق مرتبهٔ دوم مقدار ۲٫۲۵ را برای ضریب $\mathscr{E}^۲a_۰^۳$ به‌دست می‌دهد. برای اتمهای هیدروژنگونه باید $a_۰/Z$ را به‌جای $a_۰$ قرار دهیم.

اگر از این جابه‌جایی انرژی نسبت به میدان الکتریکی مشتق بگیریم رابطه‌ای برای گشتاور دوقطبی به‌دست می‌آوریم

$$d=-\frac{\partial E_{۱۰۰}}{\partial\mathscr{E}}=-\frac{۹}{۲}\mathscr{E}a_۰^۳ \qquad (۴۳_۱۶)$$

گشتاور دوقطبی با میدان الکتریکی $\mathscr{E}$ متناسب است، یعنی گشتاور دوقطبی القا شده است. قطبش‌پذیری که با رابطهٔ زیر تعریف می‌شود

$$P=\frac{d}{\mathscr{E}} \qquad (۴۴_۱۶)$$

برابر است با $P=۴٫۵a_۰^۳$.

به‌عنوان مثالی از کاربرد نظریهٔ اختلال واگن، اثر اشتارک مرتبهٔ اول (خطی نسبت به $\mathscr{E}$) را برای حالتهای $n=۲$ در اتم هیدروژن محاسبه می‌کنیم. این حالتها عبارت‌اند از

$$\begin{aligned}
\phi_{۲۰۰}&=(۲a_۰)^{-۳/۲}۲\left(۱-\frac{r}{۲a_۰}\right)e^{-r/۲a_۰}Y_{۰۰}\\
\phi_{۲۱۱}&=(۲a_۰)^{-۳/۲}۳^{-۱/۲}\left(\frac{r}{a_۰}\right)e^{-r/۲a_۰}Y_{۱۱}\\
\phi_{۲۱۰}&=(۲a_۰)^{-۳/۲}۳^{-۱/۲}\left(\frac{r}{a_۰}\right)e^{-r/۲a_۰}Y_{۱۰}\\
\phi_{۲,۱,-۱}&=(۲a_۰)^{-۳/۲}۳^{-۱/۲}\left(\frac{r}{a_۰}\right)e^{-r/۲a_۰}Y_{۱,-۱}
\end{aligned} \qquad (۴۵_۱۶)$$

حالت $l=۰$ پاریتهٔ زوج و حالت $l=۱$ پاریتهٔ فرد دارد. می‌خواهیم معادله‌ای مانند ۱۶ـ۲۳ را حل کنیم، و ظاهراً با چهار معادله سروکار داریم. اما اگر توجه کنیم که اولاً پتانسیل اختلالی (یعنی z) با L_z جابه‌جا می‌شود و در نتیجه تنها حالتهایی را به هم مربوط می‌کند که دارای مقدار یکسان m هستند، و ثانیاً ملاحظات پاریته باعث می‌شود تنها جمله‌هایی را در نظر بگیریم که در آنها پتانسیل اختلالی حالت $l=۱$ را به $l=۰$ مربوط می‌کند، یعنی

$$\langle\phi_{۲,۱,\pm۱}|z|\phi_{۲,۱,\pm۱}\rangle=۰ \qquad (۴۶_۱۶)$$

www.arsanjan.blogfa.com

آنگاه می‌بینیم که در ۱۶ـ۳۳ واقع، معادله عبارت است از

$$e\mathscr{E}\begin{pmatrix}\langle\phi_{200}|z|\phi_{200}\rangle & \langle\phi_{200}|z|\phi_{210}\rangle\\ \langle\phi_{210}|z|\phi_{200}\rangle & \langle\phi_{210}|z|\phi_{210}\rangle\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\ a_2\end{pmatrix}=E^{(1)}\begin{pmatrix}a_1\\ a_2\end{pmatrix} \qquad (۴۷\text{ـ}۱۶)$$

عناصر قطری به‌علت پاریته صفر هستند، و عناصر غیرقطری با هم برابرند، زیرا همیوغ مختلط یکدیگر هستند و هر یک از آنها را می‌توان حقیقی گرفت. داریم

$$\begin{aligned}\langle\phi_{200}|z|\phi_{210}\rangle &= \int_0^\infty r^2 dr(2a_0)^{-3}e^{-r/a_0}\frac{2r}{\sqrt{3}a_0}\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)r\\ &\quad\cdot\int d\Omega Y_{00}^*(\sqrt{4\pi/3}\,Y_{10})Y_{10}\\ &= -3a_0\end{aligned} \qquad (۴۸\text{ـ}۱۶)$$

و در نتیجه ۱۶ـ۴۷ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\begin{pmatrix}-E^{(1)} & -3e\mathscr{E}a_0\\ -3e\mathscr{E}a_0 & -E^{(1)}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\ a_2\end{pmatrix}=0 \qquad (۴۹\text{ـ}۱۶)$$

ویژه‌مقدارهای این ماتریس عبارت‌اند از

$$E^{(1)}=\pm 3e\mathscr{E}a_0 \qquad (۵۰\text{ـ}۱۶)$$

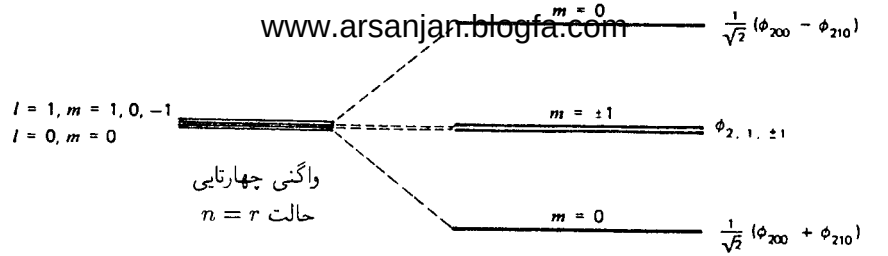
و ویژه‌حالتهای بهنجارشدهٔ مربوط به صورت زیر هستند

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -1\end{pmatrix} \quad \text{و} \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix}$$

بدین‌ترتیب، در اثر اشتارک خطی برای حالتهای $n=2$ ترازهای واگن مطابق شکل ۱۶ـ۱ شکافته می‌شوند.

نقش شکافتگی شکل ۱۶ـ۱ را می‌توان به‌صورت کیفی درک کرد. توزیع بار الکترون برای $\phi_{2,1,\pm1}$ با $e|\phi_{2,1,\pm1}|^2$ داده می‌شود و وابستگی زاویه‌ای به‌صورت $\sin^2\theta$ است. بنابراین، بار به‌صورت پره‌هایی در صفحهٔ xy توزیع شده است که حول محور z تقارن استوانه‌ای دارند. گشتاور دوقطبی وجود ندارد، زیرا بار مثبت در مبدأ است، و در نتیجه جملهٔ $\mathbf{d}\cdot\mathbf{E}$ صفر می‌شود. از طرف

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۱۶ـ۱ نقش شکافتگی اشتارک برای اتم هیدروژن در حالت $n = ۲$. اختلال تا اندازه‌ای واگنی چهارتایی را از میان می‌برد. حالتهای $m = \pm ۱$ واگن باقی می‌مانند و در اثر اشتارک جابه‌جا نمی‌شوند.

دیگر، ترکیبهای خطی $\phi_{۲۰۰} \pm \phi_{۲۱۰}$ توزیعهای باری به‌صورت $A + B\ \cos^۲\theta + C\ \cos\theta$ به‌وجود می‌آورند. جمله‌ای که علامت به‌اضافه دارد توزیع بار الکترون را در جهت مثبت z منتقل می‌کند، و در نتیجه گشتاور دوقطبی در جهت مثبت z، موازی با میدان E ، است. بنابراین، $-\mathbf{d}\cdot\mathbf{E}$ منفی است، و انرژی کم می‌شود. جمله‌ای که علامت منها دارد باعث افزایش انرژی می‌شود، و این با نتیجهٔ محاسبه سازگار است.

نتیجهٔ محاسبات بالا را می‌توان به‌صورت کلی زیر خلاصه کرد.

(الف) در حضور میدان الکتریکی، حالتها دیگر ویژه‌حالتهای $\mathbf{L}^۲$ نیستند. به‌عنوان مثال، برای مورد بالا دیدیم حالتهایی که اختلال را قطری می‌کنند مخلوطهایی مساوی از $l = ۰$ و $l = ۱$ هستند، اگرچه هنوز ویژه‌حالتهای L_z هستند. علت آن است که اختلال هامیلتونی را تغییر می‌دهد، و در نتیجه دیگر با $\mathbf{L}^۲$ جابه‌جا نمی‌شود. این را می‌توان به تفصیل بررسی کرد، اما در واقع آشکار است که میدان خارجی راستای متمایزی را مشخص می‌کند، و از این‌رو دستگاه فیزیکی تحت چرخشهای اختیاری دیگر ناوردا نیست، اما هنوز هم تحت چرخش حول محور متمایز، در اینجا z، ناوردا است؛ بنابراین، L_z باز هم ثابت خوبی برای حرکت است.

(ب) عموماً، هرگاه اختلالی وجود داشته باشد که کمیتی را (به عنوان مثال، در اینجا $\mathbf{L}^۲$ را) پایسته نگه ندارد آنگاه حالتهایی که هامیلتونی جدید را در هر تقریبی "قطری می‌کنند" برهم‌نهش‌هایی از حالتهایی با مقادیر مختلف اعداد کوانتومی هستند که قبلاً پایسته بودند، و در نتیجه ترازهای واگن شکافته می‌شوند.

(ج) نظریهٔ اختلال واگن را می‌توان به زبان ماتریسی به‌صورت زیر خلاصه کرد. اگر $H_۰$ قطری باشد اما $H_۱$ نباشد، آنگاه از آنجا که $H_۰$ و $H_۱$ جابه‌جا نمی‌شوند نمی‌توان $H_۱$ را به‌خودی خود، بدون "غیرقطری کردن" $H_۰$، قطری کرد. باید با تمام هامیلتونی

$$H = H_۰ + H_۱$$

کار کنیم. اگر با زیرمجموعهٔ حالتهای واگن، که ویژه‌حالتهای $H_۰$ با ویژه‌مقدار یکسان هستند، کار

www.arsanjan.blogfa.com

کنیم آنگاه تا آنجا که به این بستگی دارد قطری است بلکه با ماتریس واحد متناسب است. چون H_1 (و هر چیز دیگر) با ماتریس واحد جابه‌جا می‌شود، می‌توان H_1 را به‌خودی خود، بدون تأثیر بر H_0، قطری کرد.

اتمهای هیدروژنگونه‌ای که در اینجا در نظر گرفتیم تا اندازه‌ای ایده‌آلی هستند. چنانکه در فصل ۱۷ خواهیم دید، اثرهای نسبیتی و جفت‌شدگی اسپین-مدار کوچکی وجود دارند که بعضی از واگنیها را عملاً از بین می‌برند. بنابراین، آیا نیازی به استفاده از نظریهٔ اختلال واگن نداریم؟ در واقع، حتی اگر مثلاً ϕ_{200} و ϕ_{210} انرژی کاملاً یکسانی نداشته باشند، باز هم می‌توان ترکیب آنها را در بسط اختلال به‌کاربرد. برای مثال، اگر داشته باشیم

$$\begin{aligned} H_0\phi_{200} &= (E_2^0 - \Delta)\phi_{200} \\ H_0\phi_{210} &= (E_2^0 + \Delta)\phi_{210} \end{aligned} \qquad (۵۱_۱۶)$$

که در آنها Δ کوچک است آنگاه معادلهٔ شرودینگر با ترکیبهای خطی به‌صورت زیر در می‌آید

$$\begin{aligned} &(H_0 + \lambda H_1)\left(\alpha_1\phi_{200} + \alpha_2\phi_{210} + \lambda\sum_{n\neq 2} C_n\phi_n\right) \\ &= E\left(\alpha_1\phi_{200} + \alpha_2\phi_{210} + \lambda\sum_{n\neq 2} C_n\phi_n\right) \end{aligned} \qquad (۵۲_۱۶)$$

از ضرب نرده‌ای ϕ_{200} و ϕ_{210} در این معادله، تا مرتبهٔ λ به معادله زیر می‌رسیم

$$\begin{pmatrix} E_2^0 - \Delta - \langle\phi_{200}|\lambda H_1|\phi_{200}\rangle & \langle\phi_{200}|\lambda H_1|\phi_{210}\rangle \\ \langle\phi_{210}|\lambda H_1|\phi_{200}\rangle & E_2^0 + \Delta - \langle\phi_{210}|\lambda H_1|\phi_{210}\rangle \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{pmatrix} = E\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{pmatrix} \qquad (۵۳_۱۶)$$

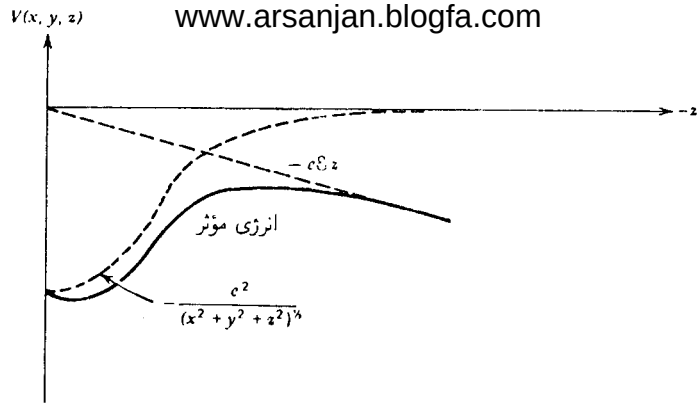
اگر بنویسیم

$$\langle\phi_{200}|\lambda H_1|\phi_{210}\rangle = \langle\phi_{210}|\lambda H_1|\phi_{200}\rangle = a\lambda \qquad (۵۴_۱۶)$$

با توجه به اینکه $\langle\phi_{200}|H_1|\phi_{200}\rangle = \langle\phi_{210}|H_1|\phi_{210}\rangle = 0$، باید ویژه‌مقدارهای ماتریس زیر را به‌دست آوریم

$$\begin{pmatrix} E_2^0 - \Delta & \lambda a \\ \lambda a & E_2^0 + \Delta \end{pmatrix} \qquad (۵۵_۱۶)$$

www.arsanjan.blogfa.com



شکل ۱۶ـ۲ نمودار انرژی پتانسیل برحسب z با مقادیر ثابت x و y. خط نقطه‌چین پتانسیل کولنی، خط‌چین انرژی پتانسیل ناشی از میدان خارجی، و خط پر انرژی کل را نشان می‌دهد.

این ویژه‌مقدارها عبارت‌اند از

$$E = E_2^\circ \pm \sqrt{a^2\lambda^2 + \Delta^2} \qquad (۵۶ـ۱۶)$$

می‌بینیم که وقتی $a\lambda \gg \Delta$، تنها یک اثر "درجهٔ دوم" به‌دست می‌آید. این نتیجه به واگنی مربوط نیست. وقتی $a\lambda \ll \Delta$، نتیجه‌ای به‌صورت ۱۶ـ۵۰ به‌دست می‌آید. در ناحیهٔ میانی، روش دقیقتر بالا ضروری است. به‌علاوه، اگر از ترکیبهای خطی جدید استفاده کنیم آنگاه در نظریهٔ اختلال مرتبهٔ دوم دیگر اختلافهای انرژی بسیار کوچک در مخرج کسرها ظاهر نمی‌شوند. این موضوع را به تفصیل بررسی نمی‌کنیم، اما اثبات آن مشکل نیست.

به‌عنوان آخرین نکته، دو واقعیت ظاهراً متناقض را متذکر می‌شویم. (۱) آزمایش پیش‌بینیهای نظریهٔ اختلال را برای اثر اشتارک کاملاً تأیید می‌کند، و (۲) رشتهٔ اختلال بی‌تردید واگرا است، زیرا پتانسیل اختلالی $ez\mathcal{E}$ هر قدر هم که $e\mathcal{E}$ کوچک باشد وقتی z بسیار بزرگ می‌شود بدون کران افزایش می‌یابد. با توجه به اینکه یک رشتهٔ به لحاظ ریاضی واگرا را می‌توان از نو چنان مرتب کرد که بسطهای کاملاً مختلفی به‌دست آیند، این سؤال پیش می‌آید که آیا می‌توانیم دقت چند جملهٔ اول چنین رشته‌ای را قابل اعتماد بدانیم؟ پاسخ در فیزیک مسئله است نه در ریاضیات آن. علت واگرایی را می‌توان در شکل ۱۶ـ۲ دید، که در آن تصویری تقریبی از پتانسیل کل به‌ازای مقادیر ثابت x و y داده شده است. چنانکه دیده می‌شود، سدی برای الکترون مقید ایجاد شده است. این سد در نهایت نفوذپذیر است، اگرچه به‌ازای مقادیر کوچک $e\mathcal{E}$ بسیار پهن است. آنچه واگرایی ریاضی رشته باعث آن است امکان این است که به‌عنوان مثال الکترون حالت پایه با احتمالی متناهی (اگرچه بسیار بسیار کوچک) به‌اندازهٔ کافی دور از هسته یافت شود، یعنی جایی که میدان

الکتریکی خارجی قویتر از میدان کولنی است و الکترون را جدا می‌کند. بنابراین، ترازهای انرژی "جابه‌جاشدهٔ" جدید اتم هیدروژن دیگر حالتهای پایا نیستند بلکه حالتهای شبه‌پایدار هستند. اما اگر میدان ضعیف باشد این حالتها می‌توانند در یک مقیاس زمانی از مرتبهٔ سن جهان پایدار باشند،[۱] و در نتیجه مشاهدات با آنچه چند جملهٔ اول رشتهٔ اختلال پیش‌بینی می‌کنند توافق کامل دارند.

www.arsanjan.blogfa.com

مسائل

۱ـ۱۶ $C_{nk}^{(۲)}$ را محاسبه کنید و با استفاده از آن رابطه‌ای برای $E_n^{(۳)}$ به‌دست آورید.

۲ـ۱۶ اتم هیدروژن را در نظر بگیرید و فرض کنید پروتون به‌جای اینکه یک چشمهٔ نقطه‌ای برای میدان کولنی باشد یک کرهٔ باردار یکنواخت به شعاع R است، و در نتیجه پتانسیل کولنی اکنون به‌صورت زیر است

$$V(r) = -\frac{۳e^۲}{۲R^۳}\left(R^۲ - \frac{۱}{۳}r^۲\right) \qquad r < R(\ll a_۰)$$

$$= -\frac{e^۲}{r} \qquad r > R$$

جابه‌جایی انرژی ناشی از این تغییر را برای حالت $n = ۱$ و $l = ۰$، و برای حالتهای $n = ۲$ با استفاده از توابع موج ۱۲ـ۳۰ محاسبه کنید.

۳ـ۱۶ اگر به هامیلتونی نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی

$$H = \frac{p^۲}{۲m} + \frac{۱}{۲}m\omega^۲x^۲$$

اختلال

$$V = \lambda x^۴$$

اضافه شود، جابه‌جایی انرژی در حالت پایه را به‌دست آورید.

۴ـ۱۶ کف یک چاه نامتناهی را به‌صورت زیر تغییر داده‌ایم

$$V(x) = \epsilon \sin\frac{\pi x}{b} \qquad ۰ \le x \le b$$

---

۱. در واقع، یک محاسبهٔ سادهٔ نفوذ در سد از نوعی که در فصل ۵ انجام دادیم نشان می‌دهد که این مقیاس زمانی برای میدانهای معمولی چیزی نزدیک به $۱۰^{۱۰۰۰}$ برابر طول عمر جهان است!

www.arsanjan.blogfa.com

جابه‌جایی انرژی تمام حالتهای وانگرفته را تا مرتبهٔ اول برحسب λ محاسبه کنید. توجه کنید که چاه در اصل به‌صورت $V(x) = 0$ برای $0 \leq x \leq b$ و $V = \infty$ در جاهای دیگر است.

۱۶ـ۵ قاعدهٔ جمع توماس-رایشه-کوهن را اثبات کنید:

$$\sum_n (E_n - E_a)|\langle n|x|a\rangle|^2 = \frac{h^2}{2m}$$

[راهنمایی: (الف) رابطهٔ جابه‌جایی $[p, x] = h/i$ را به‌صورت زیر بنویسید

$$\sum_n \left\{ \langle a|p|n\rangle\langle n|x|a\rangle - \langle n|p|a\rangle \right\} = \frac{h}{i}\langle a|a\rangle = \frac{h}{i}$$

(ب) از رابطهٔ

$$\langle a|p|n\rangle = \left\langle a|m\frac{dx}{dt}|n \right\rangle = m\frac{i}{h}\langle a|[H, x]|n\rangle$$

در حل مسئله استفاده کنید.]

۱۶ـ۶ قاعدهٔ جمع مسئلهٔ ۱۶ـ۵ را برای نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی، با فرض اینکه $|a\rangle$ حالت پایه است، وارسی کنید.

۱۶ـ۷ اثر اشتارک مرتبهٔ اول را در حالت $n = 3$ اتم هیدروژن محاسبه کنید. محاسبهٔ همهٔ انتگرالها لازم نیست، بلکه فقط ترکیب خطی درست حالتها را به‌دست آورید. آیا می‌توانید دربارهٔ نقش جابه‌جاییهای انرژی توضیحی کیفی بدهید؟

۱۶ـ۸ الکترونی را در پتانسیل نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی $m\omega^2 x^2/2$ در نظر بگیرید که در یک میدان الکتریکی قرار گرفته است که در جهت x است. جابه‌جاییهای انرژی مرتبهٔ اول و دوم را حساب کنید. جواب خود را با مقدار دقیق جابه‌جایی انرژی، که در این مورد می‌توانید به‌دست آورید، مقایسه کنید.

۱۶ـ۹ یک نوسانگر هماهنگ دوبعدی را در نظر بگیرید که با هامیلتونی زیر توصیف می‌شود

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2)$$

با تعمیم رهیافت فصل ۷ جوابهای این مسئله را برحسب عملگرهای افزاینده که بر حالت پایه اثر می‌کنند تعیین کنید. جابه‌جایی انرژی حاصل از اختلال

$$V = 2\lambda xy$$

www.arsanjan.blogfa.com

را در حالت پایه و در اولین حالتهای برانگیخته واگن با استفاده از نظریهٔ اختلال مرتبهٔ اول به‌دست آورید. آیا می‌توانید این نتیجه را بسیار ساده تعبیر کنید؟ جواب دقیق مسئله را به‌دست آورید، و آن‌را با جابه‌جایی حاصل از محاسبهٔ اختلال مرتبهٔ دوم مقایسه کنید.

۱۰ـ۱۶ هامیلتونی زیر را در نظر بگیرید

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & -E_0 \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} \alpha & U \\ U^* & \beta \end{pmatrix}$$

(الف) جابه‌جایی انرژی را تا مرتبهٔ اول و دوم λ محاسبه کنید. نتیجه‌های خود را با ویژه‌مقدارهای دقیق مقایسه کنید.

(ب) فرض کنید $V \neq U^*$ جانشین U^* شود. نشان دهید ویژه‌حالتهای هامیلتونی جدید ناهرمیتی که متناظر با ویژه‌مقدارهای متفاوت‌اند دیگرمتعامد نیستند. (در این قسمت از مسئله برای ساده شدن کار می‌توانید فرض کنید $\alpha = \beta = 0$.)

۱۱ـ۱۶ ذره‌ای با بار q و پادذرهٔ آن (با بار $-q$ و همان جرم) را در نظر بگیرید که از طریق یک پتانسیل کولنی برهم‌کنش می‌کنند. اگر پتانسیل با افزودن جملهٔ $V_1 = Kr$ تغییر کند، ترازهای انرژی پایین چقدر جابه‌جا می‌شوند.

[راهنمایی: از رابطهٔ ۱۲ـ۳۰ استفاده کنید.]

۱۲ـ۱۶ هامیلتونی الکترون یک اتم هیدروژن در میدان مغناطیسی ثابت $\mathbf{B}$ با نادیده گرفتن اسپین به‌صورت زیر است

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} + \left(\frac{e}{2mc}\right) \mathbf{L} \cdot \mathbf{B}$$

که در آن $\mathbf{L}$ عملگر تکانهٔ زاویه‌ای است. در غیاب میدان مغناطیسی، تنها یک خط درگذار از تراز $(n = 4, l = 3)$ به تراز $(n = 3, l = 2)$ وجود دارد. میدان مغناطیسی چه تأثیری بر این خط دارد؟ طیف جدید و گذارهای ممکن را با توجه به قید قاعده‌های گزینش $\Delta l_z = \pm 1, 0$ ترسیم کنید. چند خط وجود دارد؟ تأثیر یک میدان الکتریکی ثابت $\mathbf{E}$ موازی با $\mathbf{B}$ چه خواهد بود؟

مراجع

مثالهای بسیاری از کاربرد نظریهٔ اختلال مرتبهٔ اول در کتابهای درسی یافت می‌شوند، و مراجعی که فهرست آنها در پایان این کتاب آمده است می‌توانند منبعی از مثالهای بیشتر باشند. برای بحث دربارهٔ محاسبهٔ اثر اشتارک مرتبهٔ دوم، نگاه کنید به

S Borowitz, *Fundamentals of Quantum Mechanics*, W A Benjamin, New York, 1967.

www.arsanjan.blogfa.com

۱۷

اتم هیدروژن واقعی

بحث اتمهای هیدروژنگونه در فصل ۱۲ مبتنی بر هامیلتونی زیر بود

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r} \qquad (۱\text{-}۱۷)$$

در یک بررسی واقع‌بینانه‌تر، چندین تصحیح را باید به‌حساب آوریم. بررسی حرکت پروتون را کنار می‌گذاریم، و در نتیجه بحث اثرات نسبیتی و اثرات اسپین را با مسائل سینماتیک سادهٔ مربوط به حرکت پروتون مخلوط نمی‌کنیم. در بررسی اولیهٔ فصل ۱۲، با $\mathbf{p} = \mathbf{p}_e = -\mathbf{p}_p$ در چارچوب مرکز جرم داشتیم

$$K = \frac{\mathbf{p}_e^2}{2m_e} + \frac{\mathbf{p}_p^2}{2M_p} = \frac{1}{2}\mathbf{p}^2\left(\frac{1}{m_e} + \frac{1}{M_p}\right) \equiv \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu}$$

جرم کاهیدهٔ μ با جرم الکترون در اتم هیدروژن تفاوت بسیار کمی دارد:

$$\frac{\mu}{m_e} \approx 1 - \frac{m_e}{M_p} \approx 1 - 5{,}4 \times 10^{-4}$$

در بحث تصحیح طیفی که در فصل ۱۲ ذکر شد، جمله جرم-سرعت را بینهایت می‌گیریم و اثر حرکت آن‌را در بخش دیگری بررسی خواهیم کرد.

www.arsanjan.blogfa.com

اثرات انرژی جنبشی نسبیتی

رابطهٔ نسبیتی برای انرژی جنبشی الکترون عبارت است از

$$K = \sqrt{(\mathbf{p}c)^2 + (m_e c^2)^2} - m_e c^2 \approx \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} - \frac{1}{8}\frac{(\mathbf{p}^2)^2}{m_e^3 c^2} + \cdots \qquad (۲_۱۷)$$

جملهٔ دوم،

$$H_1 = -\frac{1}{8}\frac{(\mathbf{p}^2)^2}{m_e^3 c^2} \qquad (۳_۱۷)$$

را با نظریهٔ اختلال بررسی خواهیم کرد. می‌توان تأثیر نسبی آن‌را روی ویژه‌مقدار انرژی براورد کرد، زیرا

$$\frac{\langle H_1 \rangle}{\langle H_0 \rangle} \approx \frac{\mathbf{p}^2}{m_e^2 c^2} \approx (Z\alpha)^2 = (0{,}53 \times 10^{-4})Z^2 \qquad (۴_۱۷)$$

بنابراین، اثر نسبیتی به‌اندازهٔ یک مرتبهٔ بزرگی از اثر جرم کاهیده کوچکتر است. تصحیحهای جرم کاهیده بر جملهٔ نسبیتی برای هیدروژن بسیار کوچک است، و دربارهٔ آنها بعداً بحث خواهیم کرد.

جفت‌شدگی اسپین-مدار

وجود اسپین الکترون موجب تصحیح دیگری از همان مرتبهٔ بزرگی می‌شود. این اثر را می‌توان به لحاظ کیفی به‌صورت زیر بیان کرد: اگر الکترون نسبت به پروتون ساکن بود (این بحث مبتنی بر دیدگاه کلاسیک است) تنها یک میدان الکتریکی ناشی از بار پروتون را "می‌دید". این همان جملهٔ پتانسیل کولنی است که در H_0 ظاهر می‌شود. چون الکترون حرکت می‌کند، اثرهای دیگر نیز وجود دارند. در چارچوب سکون الکترون، پروتون در حرکت است، و در نتیجه یک جریان برقرار است و الکترون یک میدان مغناطیسی "می‌بیند". اگر این حرکت نسبی راستخط بود، میدان مغناطیسی از دیدگاه الکترون $\mathbf{v} \times \mathbf{E}/c$ می‌شد. این میدان مغناطیسی با اسپین الکترون، یا به بیان دقیقتر با گشتاور مغناطیسی الکترون، برهم‌کنش می‌کند.

www.arsanjan.blogfa.com

الکترون دارای گشتاور مغناطیسی $\mathbf{M}$ است که از رابطهٔ زیر به‌دست می‌شود:

$$\mathbf{M} = -\frac{eg}{2m_e c}\mathbf{S}$$

و در نتیجه جملهٔ اضافی مورد نظر باید به‌صورت زیر باشد

$$\begin{aligned} -\mathbf{M}\cdot\mathbf{B} = \frac{eg}{2m_e c}\mathbf{S}\cdot\mathbf{B} &= -\frac{e}{m_e c^2}\mathbf{S}\cdot\mathbf{v}\times\mathbf{E} \\ &= \frac{e}{m_e^2 c^2}\mathbf{S}\cdot\mathbf{p}\times\boldsymbol{\nabla}\phi(r) \\ &= \frac{e}{m_e^2 c^2}\mathbf{S}\cdot\mathbf{p}\times\mathbf{r}\frac{1}{r}\frac{d\phi(r)}{dr} \\ &= -\frac{e}{m_e^2 c^2}\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}\frac{1}{r}\frac{d\phi(r)}{dr} \end{aligned} \qquad (۵_۱۷)$$

که در آن $\phi(r)$ پتانسیل ناشی از بار هسته است، و g را برابر با ۲ گرفته‌ایم. در واقع، نتیجهٔ بالا درست نیست. ثابت می‌شود که اثرات نسبیتی ناشی از این واقعیت که الکترون بر خط راست حرکت نمی‌کند (اثر حرکت تقدیمی توماس) باعث می‌شوند که نتیجهٔ بالا با ضریب ۲ کاهش یابد. بنابراین، اختلال درست عبارت است از

$$H_2 = -\frac{1}{2m_e^2 c^2}\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}\frac{1}{r}\frac{d[e\phi(r)]}{dr} \qquad (۶_۱۷)$$

اکنون با استفاده از نظریهٔ اختلال مرتبهٔ اول تأثیر H_1 و H_2 را بر طیف اتمهای هیدروژنگونه محاسبه می‌کنیم. با چشمپوشی از اثرات جرم کاهیده، می‌توان H_1 را به‌صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} H_1 = -\frac{1}{8}\frac{(\mathbf{p}^2)^2}{m_e^3 c^2} &= -\frac{1}{2m_e c^2}\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m}\right)^2 \\ &= -\frac{1}{2m_e c^2}\left(H_0 + \frac{Ze^2}{r}\right)\left(H_0 + \frac{Ze^2}{r}\right) \end{aligned} \qquad (۷_۱۷)$$

www.arsanjan.blogfa.com

در نتیجه

$$\langle\phi_{nlm}|H_1|\phi_{nlm}\rangle = -\frac{1}{2m_e c^2}\left\langle\phi_{nlm}\left|\left(H_0+\frac{Ze^2}{r}\right)\left(H_0+\frac{Ze^2}{r}\right)\right|\phi_{nlm}\right\rangle$$

$$= -\frac{1}{2m_e c^2}\left[E_n^2 + 2E_n Ze^2\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle_{nl} + (Ze^2)^2\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_{nl}\right]$$

$$= -\frac{1}{2m_e c^2}\left\{\left[\frac{m_e c^2(Z\alpha)^2}{2n^2}\right]^2 - 2Ze^2\frac{m_e c^2(Z\alpha)^2}{2n^2}\left(\frac{Z}{a_0 n^2}\right)\right.$$

$$\left. + (Ze^2)^2\frac{Z^2}{a_0^2 n^3(l+1/2)}\right\} \qquad (۸\text{-}۱۷)$$

$$= -\frac{1}{2}m_e c^2(Z\alpha)^2\left[\frac{(Z\alpha)^2}{n^3(l+1/2)} - \frac{3(Z\alpha)^2}{4n^4}\right]$$

در این محاسبات از ۱۲-۳۶ برای کمیتهای زیر استفاده کرده‌ایم

$$\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle_{nl} \equiv \left\langle\phi_{nlm}\left|\frac{1}{r}\right|\phi_{nlm}\right\rangle \quad \text{و} \quad \left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_{nl} \equiv \left\langle\phi_{nlm}\left|\frac{1}{r^2}\right|\phi_{nlm}\right\rangle$$

اسپین الکترون در این جابه‌جایی انرژی وارد نمی‌شود، زیرا H_1 بستگی به اسپین ندارد؛ اما H_2 به اسپین بستگی دارد، و برای توابع موج نامختل باید توابع موج دو مؤلفه‌ای را در نظر بگیریم، زیرا چیزی که می‌خواهیم محاسبه کنیم مقدار انتظاری کمیت زیر است

$$-\frac{1}{2m^2c^2}\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}\frac{1}{r}\frac{ed\phi(r)}{dr} = \frac{Ze^2}{2m_e^2c^2}\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}\frac{1}{r^3} \qquad (۹\text{-}۱۷)$$

در اینجا باز هم با مثالی از نظریهٔ اختلال واگن روبه‌رو هستیم. به‌ازای یک مقدار معین n و l، با توجه به اینکه دو حالت برای اسپین داریم، $2(2l+1)$ ویژه‌حالت واگن مربوط به H_0 وجود دارند. بنابراین، در محاسبهٔ جابه‌جایی انرژی قطری کردن یک زیرماتریس، همچون ۱۶-۲۳، وارد می‌شود. با توجه به اینکه از

$$\mathbf{S}+\mathbf{L}=\mathbf{J} \qquad (۱۰\text{-}۱۷)$$

www.arsanjan.blogfa.com

داریم

$$\mathbf{S}^2 + 2\mathbf{S}\cdot\mathbf{L} + \mathbf{L}^2 = \mathbf{J}^2$$

یعنی

$$\mathbf{S}\cdot\mathbf{L} = \frac{1}{2}(\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2) \qquad (۱۱_۱۷)$$

می‌توان محاسبه را بسیار ساده‌تر کرد. بنابراین، اگر ویژه‌تابعهای واگن را به‌صورت ترکیبهایی خطی درآوریم که ویژه‌تابعهای $\mathbf{J}^2$ باشند (آنها هم‌اکنون نیز ویژه‌تابعهای $J_z = L_z + S_z$ هستند) آنگاه این ترکیبهای خطی H_2 را قطری می‌کنند. ترکیبهای خطی مناسب را به‌صورت رابطه‌های ۱۵_۳۸ و ۱۵_۳۹ در فصل ۱۵ به‌دست آورده‌ایم. با این ترکیبهای خطی داریم

$$\begin{aligned}\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}\psi_{\substack{j=l+(1/2)\\ mj=m+(1/2)}} &= \frac{1}{2}\left(\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2\right)\psi_{\substack{j=l+(1/2)\\ mj=m+(1/2)}} \\ &= \frac{1}{2}\hbar^2\left[\left(1+\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{3}{2}\right) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right]\psi_{\substack{j=l+(1/2)\\ mj=m+(1/2)}} \\ &= \frac{1}{2}\hbar^2 l\psi_{\substack{j=l+(1/2)\\ mj=m+(1/2)}} \qquad (۱۲_۱۷)\end{aligned}$$

و

$$\begin{aligned}\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}\psi_{\substack{j=l-(1/2)\\ mj=m+(1/2)}} &= \frac{1}{2}\hbar^2\left[\left(l-\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{1}{2}\right) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right]\psi_{\substack{j=l-(1/2)\\ mj=m+(1/2)}} \\ &= -\frac{1}{2}\hbar^2(l+1)\psi_{\substack{j=l-(1/2)\\ mj=m+(1/2)}} \qquad (۱۳_۱۷)\end{aligned}$$

به‌ازای یک مقدار معین l، $[2(l-1/2)+1]+[2(l+1/2)+1]$ حالت وجود دارند. آنچه رخ داده است این است که حالتهای واگن تنها از نو مرتب شده‌اند، اما دو گروه حاصل از این حالتها تحت کنش H_2 رفتاری متفاوت دارند. اگر ترکیبهای خطی را $\phi_{jm_j l}$ بنامیم، آنگاه به‌ازای

www.arsanjan.blogfa.com

$j = l \pm ۱/۲$ به‌دست می‌آوریم

$$\langle \phi_{jm_j l} | H_۲ | \phi_{jm_j l} \rangle = \frac{Ze^۲}{۲m_e^۲c^۲} \frac{\hbar^۲}{۲} \begin{Bmatrix} l & \\ -l & -۱ \end{Bmatrix} \times \int_۰^\infty dr\, r^۲ [R_{nl}(r)]^۲ \frac{۱}{r^۳} \qquad (۱۴\text{-}۱۷)$$

$\langle ۱/r^۳ \rangle_{nl}$ را می‌توان محاسبه کرد، و نتیجه عبارت است از

$$\left\langle \frac{۱}{r^۳} \right\rangle_{nl} = \frac{Z^۳}{a_۰^۳} \frac{۱}{n^۳ l(l+۱/۲)(l+۱)} \qquad (۱۵\text{-}۱۷)$$

که به‌ازای $l \neq ۰$ معتبر است. توجه کنید که در اینجا

$$a_۰ = \frac{\hbar}{\mu c \alpha}$$

زیرا با ویژه‌حالتهایی از $H_۰$ سروکار داریم که در آنها جرم کاهیدهٔ الکترون به‌کار می‌رود. بدین‌ترتیب، برای جابه‌جایی انرژی، به‌ازای $l \neq ۰$، به‌دست می‌آوریم

$$\Delta E = \frac{۱}{۴} m_e c^۲ (Z\alpha)^۴ \frac{\begin{Bmatrix} l & \\ -l & -۱ \end{Bmatrix}}{n^۳ l(l+۱/۲)(l+۱)} \qquad (۱۶\text{-}۱۷)$$

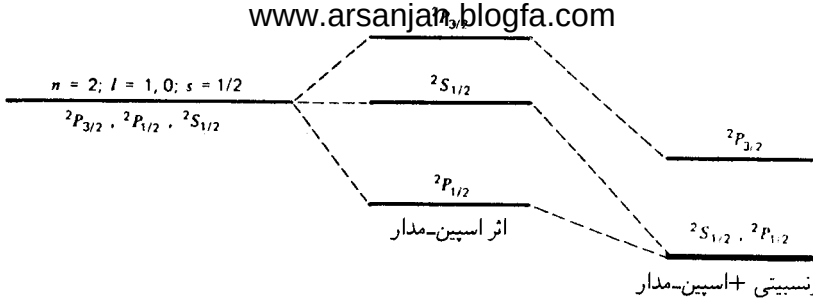
از ترکیب اثرات $H_۱$ و $H_۲$ پس از محاسبه به‌رابطهٔ زیر می‌رسیم

$$\Delta E = -۱/۲ m_e c^۲ (Z\alpha)^۴ \frac{۱}{n^۳} \left[\frac{۱}{j+۱/۲} - \frac{۳}{۴n} \right] \qquad (۱۷\text{-}۱۷)$$

که برای هر دو مقدار $l = j \pm ۱/۲$ برقرار است. با استفاده از معادلهٔ نسبیتی دیراک می‌توان نشان داد که نتیجهٔ بالا به‌ازای $l = ۰$ نیز درست است، اگرچه حاصلضرب در۱۷-۱۴ کاملاً معین نیست.

نمودار شکافتگی حالتها در شکل ۱۷-۱ نشان داده شده است. یک نتیجهٔ بسیار جالب این است که تصحیحها به‌گونه‌ای با هم جمع می‌شوند که حالتهای $^۲P_{۱/۲}$ و $^۲S_{۱/۲}$ واگن باقی می‌مانند. بحث دقیقتر بر اساس معادلهٔ نسبیتی دیراک این نتیجه را تغییر نمی‌دهد. در سال ۱۹۴۷، لمب و

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۱۷ـ۱ شکافتگی ترازهای $n = ۲$ به‌علت (۱) جفت‌شدگی اسپین-مدار (که تأثیری بر حالت S ندارد) و (۲) اثر نسبیتی. واگنی نهایی حالتهای $^۲S_{۱/۲}$ و $^۲P_{۱/۲}$ عملاً با اثرهای الکترودینامیکی کوانتومی از میان می‌رود. جابه‌جایی کوچک حالت $^۲S_{۱/۲}$ به‌سمت بالا را انتقال لمب می‌نامند.

رادرفورد با یک آزمایش بسیار حساس جذب میکروموج نشان دادند که در واقع یک شکافتگی کوچک در این دو تراز وجود دارد. مقدار این شکافتگی را، که از مرتبهٔ $m_e c^۲ (Z\alpha)^۴ \alpha \log \alpha$ است، می‌توان با برهم‌کنش الکترون با میدان الکترومغناطیسی خودش، یعنی یک اثر خود-انرژی، توضیح داد. این بحث خارج از قلمرو این کتاب است.

اثر نابهنجار زیمان

اکنون به بررسی رفتار اتمهای هیدروژنگونه در میدان مغناطیسی خارجی، یعنی اثر نابهنجار زیمان، می‌پردازیم. البته چیز نابهنجاری در این اثر وجود ندارد. واقعیت این است که اثر زیمانی، که می‌توان آن‌را به‌طور کلاسیک توضیح داد، تنها برای حالتهایی روی می‌دهد که اسپین الکترونی کل آنها صفر است. برای سایر حالتها نقش شکافتگی زیمان متفاوت است، و چون این اثر زیمان توضیح کلاسیک ندارد (چرا که در آن اسپین دخیل است) آن‌را "نابهنجار" نامیده بودند.

برای هامیلتونی نامختل، $H_۰$ را همراه با جملهٔ اسپین-مدار در نظر می‌گیریم. دلیل این کار آن است که اختلال خارجی ممکن است در مقایسه با اثر آنچه $H_۲$ نامیدیم کوچک باشد. بنابراین، می‌نویسیم

$$H_۰ = \frac{p^۲}{۲\mu} - \frac{Ze^۲}{r} + \frac{۱}{۲m^۲c^۲}\frac{Ze^۲}{r^۳}\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} \qquad (۱۸_۱۷)$$

اختلال اکنون عبارت است از

$$H_۱ = \frac{e}{۲mc}(\mathbf{L} + ۲\mathbf{S})\cdot\mathbf{B} \qquad (۱۹_۱۷)$$

www.arsanjan.blogfa.com

جملهٔ اول در واقع برهم‌کنش گشتاور دوقطبی مغناطیسی ناشی از دوران بار است، و جملهٔ دوم سهم گشتاور دوقطبی ذاتی یک ذره با اسپین $\mathbf{S}$ است:

$$\mathbf{M} = -\frac{eg}{2m_e c}\mathbf{S} \qquad (۲۰_۱۷)$$

که در آن $g = 2$.

انتخاب H_0 نشان می‌دهد که باید مقدار انتظاری اختلال را در ویژه‌حالتهای $\mathbf{J}^2$ و J_z (با توابع ۱۵ـ۳۸ و ۱۵ـ۳۹) محاسبه کنیم. اگر محور z را در راستای $\mathbf{B}$ بگیریم، داریم

$$\left\langle \phi_{jm_j l} \left| \frac{eB}{2m_e c}(L_z + 2S_z) \right| \phi_{jm_j l} \right\rangle = \left\langle \phi_{jm_j l} \left| \frac{eB}{2m_e c}(J_z + S_z) \right| \phi_{jm_j l} \right\rangle \qquad (۲۱_۱۷)$$

$$= \frac{eB}{2m_e c}(\hbar m_j + \langle \phi_{jm_j l} | S_z | \phi_{jm_j l} \rangle)$$

آخرین عنصر ماتریسی در رابطهٔ بالا را با استفاده از ویژه‌تابعهای ۱۵ـ۳۸ و ۱۵ـ۳۹ صریحاً محاسبه می‌کنیم. به‌ازای $j = l + 1/2$، داریم

$$\left\langle \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}}\, Y_{lm}\chi_+ + \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}}\, Y_{l,m+1}\chi_- | S_z | \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}}\, Y_{lm}\chi_+ \right.$$

$$\left. + \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}}\, Y_{l,m+1}\chi_- \right\rangle = \frac{\hbar}{2}\left(\frac{l+m+1}{2l+1} - \frac{l-m}{2l+1}\right) \qquad (۲۲_۱۷)$$

$$= \frac{\hbar}{2}\,\frac{2m+1}{2l+1} = \frac{\hbar m_j}{2l+1}$$

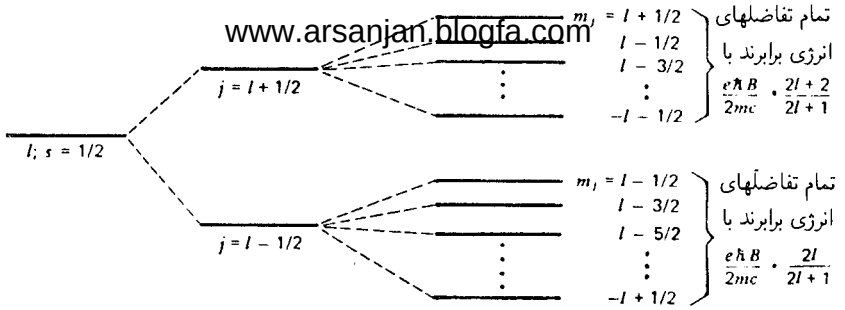
و به‌ازای $j = l - 1/2$،

$$\left\langle \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}}\, Y_{lm}\chi_+ - \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}}\, Y_{l,m+1}\chi_- | S_z | \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}}\, Y_{lm}\chi_+ \right.$$

$$\left. - \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}} Y_{l,m+1}\chi_- \right\rangle = \frac{\hbar}{2}\left(\frac{l-m}{2l+1} - \frac{l+m+1}{2l+1}\right) \qquad (۲۳_۱۷)$$

$$= -\frac{\hbar}{2}\,\frac{2m+1}{2l+1} = -\frac{\hbar m_j}{2l+1}$$

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۱۷ـ۲ نمایش کلی اثر نابهنجار زیمان.

در هر دو رابطهٔ بالا از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که $m_j = m + ۱/۲$. با جاگذاری نتایج ۱۷ـ۲۲ و ۱۷ـ۲۳ در ۱۷ـ۲۱، به‌دست می‌آوریم

$$\Delta E = \frac{e\hbar B}{۲m_e c} m_j \left(۱ \pm \frac{۱}{۲l+۱}\right) \qquad j = l \pm \frac{۱}{۲} \qquad (۱۷\text{ـ}۲۴)$$

شکافتگی در شکل ۱۷ـ۲ نشان داده شده است. قاعدهٔ گزینش[۱] برای گذارها باز هم به‌صورت زیر است

$$\Delta m_j = \pm ۱, ۰ \qquad (۱۷\text{ـ}۲۵)$$

اما چون شکافتگی بین خطها برای تمام چندتاییها یکسان نیست، برخلاف مورد اثر بهنجار زیمان که در فصل ۱۳ بررسی کردیم درست سه خط به‌دست نمی‌آوریم. برای مثال، به‌ازای $n = ۲$، حالت $^۲P_{۳/۲}$ به چهار خط شکافته می‌شود که در آنها شکافتگی دو برابر شکافتگی مربوط به دو حالت در خطهای $^۲P_{۱/۲}$ است (شکل ۱۷ـ۳). اگر میدان خارجی بسیار شدید باشد، که در نتیجه جفت‌شدگی اسپین‌ـمدار قابل چشمپوشی است، می‌توان از توابع موج هیدروژنی معمولی که در اسپینورها ضرب شده‌اند، یعنی ویژه‌حالتهای $\mathbf{L}^۲$، L_z، $\mathbf{S}^۲$ و S_z، استفاده کرد. اگر ویژه‌مقدارهای L_z و S_z را به‌ترتیب با m_l و m_s نشان دهیم، مقدار انتظاری $H_۱$ در ۱۷ـ۱۹، با $\mathbf{B}$ در راستای z، عبارت خواهد بود از

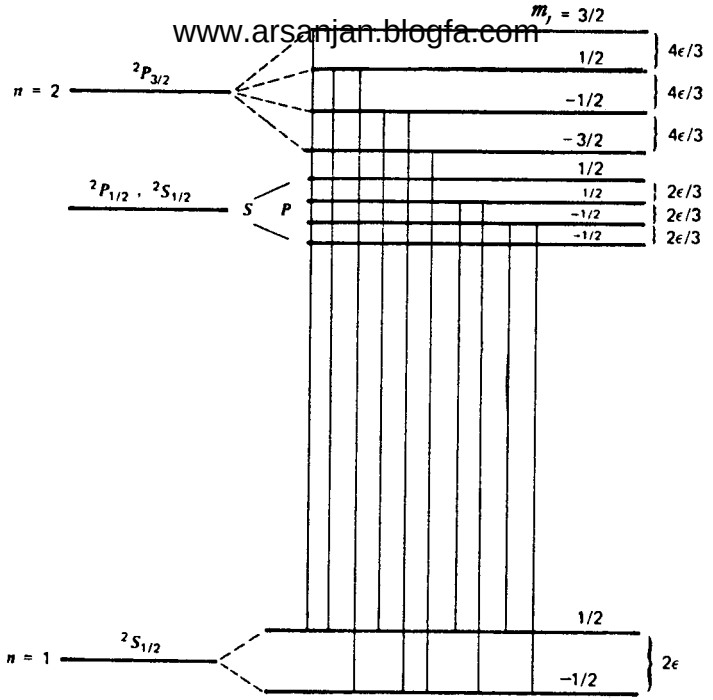
$$\langle H_۱ \rangle = \frac{e\hbar B}{۲mc}(m_l + ۲m_s) \qquad (۱۷\text{ـ}۲۶)$$

بنابراین، حالتهای $n = ۲$، $l = ۱$ به پنج تراز شکافته می‌شوند که به مقادیر $m_l = ۱, ۰, -۱$ و $m_s = ۱/۲, -۱/۲$، مربوط‌اند.

---

۱. محاسبهٔ این قاعدهٔ گزینش (و سایر قاعده‌های گزینش) را در فصل ۲۱ بیان می‌کنیم.

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۱۷ـ۳ اثر زیمان در هیدروژن، ϵ نمایندهٔ انرژی $ehB/2mc$ است. در این شکل گذارهایی نشان داده شده‌اند که برای آنها $l = 1$ و $\Delta m = 1, 0, -1$. جای حالتهای نامختل در شکل ۱۷ـ۱ داده شده است.

ساختار فوق‌ریز

علاوه بر ساختار ریز ترازها که ناشی از جفت‌شدگی اسپین‌ـمدار است، یک شکافتگی فوق‌ریز بسیار کوچک وجود دارد که در واقع یک اثر دائمی زیمان ناشی از میدان مغناطیسی حاصل از گشتاور دوقطبی مغناطیسی هسته است. اگر اسپین هسته را با I نشان دهیم، عملگر گشتاور دوقطبی مغناطیسی به‌صورت زیر است

$$\mathbf{M} = \frac{Zeg_N}{2M_N c}\mathbf{I} \qquad (۲۷_۱۷)$$

که در آن Ze بار هسته، M_N جرم و g_M نسبت ژیرومغناطیسی آن است. پتانسیل برداری ناشی از دوقطبی نقطه‌ای بنابه نظریهٔ الکترومغناطیس عبارت است از

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi}(\mathbf{M} \times \boldsymbol{\nabla})\frac{1}{r} \qquad (۲۸_۱۷)$$

و در نتیجه برای میدان مغناطیسی داریم

www.arsanjan.blogfa.com

$$\mathbf{B} = \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A} = -\frac{\mathbf{M}}{4\pi}\nabla^2\frac{1}{r} + \frac{1}{4\pi}\boldsymbol{\nabla}(\mathbf{M}\cdot\boldsymbol{\nabla})\frac{1}{r} \qquad (۲۹_۱۷)$$

که می‌توان آن‌را به‌صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} B_i &= -M_i\frac{1}{4\pi}\nabla^2\frac{1}{r} + \frac{1}{4\pi}M_j\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j}\frac{1}{r} \\ &= M_i\delta(r) + \frac{1}{4\pi}M_j\frac{\partial^2}{\partial x_i\partial x_j}\frac{1}{r} \end{aligned} \qquad (۳۰_۱۷)$$

در اینجا از رابطهٔ زیراستفاده کرده‌ایم[۲]

$$\nabla^2\frac{1}{r} = -4\pi\,\delta(r) \qquad (۳۱_۱۷)$$

اختلال عبارت است از

$$H_{\rm hf} = -\mathbf{M}_e\cdot\mathbf{B} = -M_{ei}M_i\,\delta(\mathbf{r}) + \frac{1}{4\pi}M_{ei}M_j\frac{\partial^2}{\partial x_i\partial x_j}\frac{1}{r} \qquad (۳۲_۱۷)$$

یک تحلیل سادهٔ ابعادی نشان می‌دهد که این اختلال به‌صورت $\mathbf{M}_e\cdot\mathbf{M}/a_0^3$ است، و در نتیجه

$$\langle H_{hf}\rangle \approx \frac{Ze^2 g_N}{m_e M_N c^2}\hbar^2\left(\frac{Z\alpha m_e c}{\hbar}\right)^3 \approx g_N(Z\alpha)^4 m_e c^2(m_e/M_N)$$

که با ضریب m_e/M_N کوچکتر از شکافتگیهای اسپین‌ـمدار نوعی است.

با شکافتگی حالتهای $l = 0$ در اتم هیدروژن سروکار خواهیم داشت، و از این‌رو باید انتگرال زیر را محاسبه کنیم

$$\int d^3r|\phi_{n0}(\mathbf{r})|^2\left(-M_{ei}M_i\,\delta(\mathbf{r}) + \frac{1}{4\pi}M_{ei}M_j\frac{\partial^2}{\partial x_i\partial x_j}\frac{1}{r}\right)$$

---

۲. تنها با قسمت شعاعی ∇^2 سروکار داریم. برای اثبات، از این واقعیت استفاده می‌کنیم که به‌ازای $r \neq 0$ داریم $(1/r)][r^2(d/dr)][(1/r)^2(d/dr)] = 0$، و اینکه انتگرال $\nabla^2(1/r)$ روی کرهٔ کوچکی به شعاع ϵ برابر است با -4π، که به ϵ بستگی ندارد.

www.arsanjan.blogfa.com

به‌علت تقارن کروی $|\phi_{n\circ}(\mathbf{r})|^2$

$$\int d^3r|\phi_{n\circ}(\mathbf{r})|^2\frac{\partial^2}{\partial x_i\partial x_j}\frac{1}{r}=\frac{1}{3}\delta_{ij}\int d^3r|\phi_{n\circ}(\mathbf{r})|^2\nabla^2\frac{1}{r}$$
$$=\frac{4\pi}{3}\delta_{ij}\int d^3r|\phi_{n\circ}(\mathbf{r})|^2\delta(\mathbf{r}) \qquad (۳۳_۱۷)$$

بنابراین، به‌دست می‌آوریم

$$\langle\phi_{n\circ}|H_{hf}|\phi_{n\circ}\rangle=-\frac{2}{3}\mathbf{M}_e\cdot\mathbf{M}|\phi_{n\circ}(\circ)|^2 \qquad (۳۴_۱۷)$$

از آنجا که[۳]

$$|\phi_{n\circ}(\circ)|^2=R_{n\circ}(\circ)^2=\frac{4}{n^3}\left(\frac{Z\alpha m_e c}{\hbar}\right)^3 \qquad (۳۵_۱۷)$$

نتیجه می‌گیریم که

$$\langle H\rangle=\frac{4}{3}g_N\frac{m_e}{M_N}(Z\alpha)^4mc_ec^2\frac{1}{n^3}\frac{1}{n^3}\left(\frac{\mathbf{S}\cdot\mathbf{I}}{\hbar^2}\right) \qquad (۳۶_۱۷)$$

اگر اسپین کل الکترون و هسته را با F نشان دهیم:

$$\mathbf{F}=\mathbf{S}+\mathbf{I} \qquad (۳۷_۱۷)$$

آنگاه

$$\frac{\mathbf{S}\cdot\mathbf{I}}{\hbar^2}=\frac{\mathbf{F}^2-\mathbf{S}^2-\mathbf{I}^2}{2\hbar^2}=\frac{[F(F+1)-3/4-I(I+1)]}{2}$$
$$=\frac{1}{2}\begin{cases}I & F=I+\frac{1}{2}\\ -I-1 & F=I-\frac{1}{2}\end{cases} \qquad (۳۸_۱۷)$$

برای هیدروژن داریم $g_N=g_p\cong 5{,}56$، و اختلاف انرژی بین حالت برانگیختهٔ $F=1$ و حالت پایهٔ $F=0$ برابر است با

$$\Delta E=\frac{4}{3}(5{,}56)\frac{1}{1840}\frac{1}{(137)^2}(m_ec^2) \qquad (۳۹_۱۷)$$

۳. به‌عنوان مثال به کتاب بته و سالپیتر که در آخر این فصل معرفی شده است مراجعه کنید.

طول‌موج تابش مربوط به گذار بین حالتهای $F=1$ و $F=0$ عبارت است از

www.arsanjan.blogfa.com

$$\lambda \simeq 21{,}1 \text{ cm} \qquad (۴۰\text{-}۱۷)$$

و برای بسامد[۴] داریم

$$\nu = \frac{c}{\lambda} \simeq 1420 \text{ MHz} \qquad (۴۱\text{-}۱۷)$$

تابش ناشی از این گذار نقش مهمی در اخترشناسی دارد. در گازی از اتمهای خنثی، حالت $F=1$ نمی‌تواند با تابش معمولی برانگیخته شود، زیرا قاعدهٔ گزینش قویاً مانع گذارهایی است که در آنها تغییری در تکانهٔ زاویه‌ای مداری وجود ندارد. حالتهای $F=1$ و $F=0$ هر دو دارای تکانهٔ زاویه‌ای صفر هستند. از طرف دیگر، سازوکارهای دیگری وجود دارند که می‌توانند باعث این گذارها شوند. به‌عنوان مثال، حالت $F=1$ می‌تواند به‌علت برخورد برانگیخته شود، و بازگشت به حالت پایهٔ $F=0$ را می‌توان آشکارسازی کرد. اخترشناسان از تحلیل شدت تابش دریافت‌شدهٔ ۲۱ سانتیمتری اطلاعات بسیاری را دربارهٔ توزیع چگالی هیدروژن خنثی در فضای میان ستاره‌ای و همچنین حرکت و دمای ابرهای گازی حاوی هیدروژن به‌دست آورده‌اند. تعداد متوسط اتمهای هیدروژن خنثی در صفحهٔ کهکشانی نزدیک خورشید ظاهراً حدود 1cm^{-3} است، و دما از مرتبهٔ 100K است.

نکاتی دربارهٔ اثرات جرم کاهیده

در محاسبه‌های اختلال از اثرات جرم کاهیده به دلیل کوچکی مقدار m_e/M_p صرفنظر کردیم. در سی سال گذشته، امکان مطالعهٔ طیفهای اتمهای ناپایدار فراهم شده است، مانند اتمی که در آن یک μ^- (الکترون سنگین با جرم $m_\mu = 205{,}8\ m_e$) که عمر کوتاهی دارد با یک پروتون حالت مقیدی تشکیل می‌دهد، یا پوزیترونیم که در آن الکترون e^- با پوزیترون e^+ (ذره‌ای شبیه به الکترون اما با علامت بار و گشتاور مغناطیسی مخالف) یک حالت مقید تشکیل می‌دهد. در این موارد، اثرات جرم کاهیده اهمیت بیشتری دارند و چگونگی تأثیر آنها را بر اثرات نسبیتی به‌اختصار، و برای اتم هیدروژن، بیان می‌کنیم.

اگر انرژی جنبشی نسبیتی پروتون و همچنین الکترون را منظور کنیم آنگاه تصحیحات انرژی

---

۴. این بسامد یکی از دقیقترین کمیتهای اندازه‌گیری‌شدهٔ فیزیک است:
$\nu_{\text{تجربی}} = 1420405751{,}800 \pm 0{,}028\text{Hz}$. در این عدد توزیع مغناطیدگی در پروتون دخیل است، اما نظریه‌ای که بتواند عددی با این دقت را توضیح دهد وجود ندارد.

www.arsanjan.blogfa.com

جنبشی غیرنسبیتی را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$H_1 = -\frac{1}{8}\frac{(\mathbf{p}^2)^2}{c^2}\left(\frac{1}{m_e^3}+\frac{1}{M_p^3}\right)$$

یا، پس از کمی محاسبه،

$$H_1 = \frac{1}{8}\frac{(\mathbf{p}^2)^2}{\mu m_e^2 c^2}\left(1-\frac{m_e}{M_p}+\left(\frac{m_e}{M_p}\right)^2\right) \qquad (۴۲_۱۷)$$

در جملهٔ اسپین‌ـمدار M تغییر نمی‌کند اما $\mathbf{v}=\mathbf{p}/\mu$.

در بحث اثر نابهنجار زیمان، اختلال اکنون عبارت است از

$$H_2 = \left(\frac{e}{2\mu c}\mathbf{L}+\frac{eg}{2m_e c}\mathbf{S}\right)\cdot\mathbf{B} \qquad (۴۳_۱۷)$$

و به‌جای ۱۷ـ۲۱ داریم

$$\begin{aligned}&\left\langle \phi_{jml}\left|\frac{eB}{2\mu c}L_z+\frac{egB}{2m_e c}S_z\right|\phi_{jml}\right\rangle\\ &= B\left\langle \phi_{jml}\left|\frac{e}{2\mu c}J_z+\left(\frac{eg}{2m_e c}-\frac{e}{2\mu c}\right)S_z\right|\phi_{jml}\right\rangle \qquad (۴۴_۱۷)\\ &= \frac{eB}{2\mu c}\left[\hbar m_j+\left(g\frac{\mu}{m_e}-1\right)\langle\phi_{jml}|S_z|\phi_{jml}\rangle\right]\end{aligned}$$

در بحث ساختار فوق‌ریز برای هیدروژن می‌توان از اثرات جرم کاهیده صرفنظر کرد زیرا تمام اثر با ضریب m_e/M_N از اثرات اتمی مورد نظر کوچکتر است.

به‌لحاظ عددی، اثرات جرم کاهیده کوچک هستند. جابه‌جاییهای انرژی برحسب میلی‌الکترون ولت شامل جمله‌های نسبیتی و اسپین‌ـمدار در جدول زیر نشان داده شده‌اند.[۵]

جابه‌جایی انرژی شامل اثرات جرم کاهیده	جابه‌جایی انرژی با $\mu = m_e$	تراز
−۰٫۱۸۰۷۴	−۰٫۱۸۱۱۳	۱ $S_{1/2}$
−۰٫۰۵۶۴۸	−۰٫۰۵۶۶۰	۲ $S_{1/2}$
−۰٫۰۵۶۵۱	−۰٫۰۵۶۶۰	۲ $P_{1/2}$
−۰٫۰۱۱۲۸	−۰٫۰۱۱۳۲	۲ $P_{3/2}$

۵. این جدول را استاد ج س تن تهیه کرده‌اند.

www.arsanjan.blogfa.com

اثرات جرم کاهیده بر جابه‌جایی انرژی در مرتبهٔ $\sim ۱۰^{-۷}\text{eV}$ و اثرات کوانتوم‌ـالکترودینامیکی (انتقال لمب) از مرتبهٔ $۴ \times ۱۰^{-۶}\text{eV}$ هستند. بنابراین، منظورکردن اثرات جرم کاهیده برای هیدروژن ضرورتی ندارد، مگر اینکه بخواهیم محاسبات را با دقت بسیار بسیار زیاد انجام دهیم. از طرف دیگر، برای دستگاهی چون پوزیترونیم، یعنی حالت مقید e^+e^-، اثرات جرم کاهیده بسیار مهم هستند زیرا این دو ذره جرم یکسانی دارند. در اینجا شکافتگی فوق‌ریز نسبت به اثر اسپین‌ـمدار یا نسبیتی کوچک نیست.

مسائل

۱۷ـ۱ اگر جفت‌شدگی اسپین‌ـمدار برای ذره‌ای به جرم m و اسپین $\mathbf{S}$ که در پتانسیل $V(r)$ حرکت می‌کند به‌صورت کلی زیر باشد

$$H_{\text{SO}} = \frac{۱}{۲m^۲c^۲}\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}\frac{۱}{r}\frac{dV(r)}{dr}$$

تأثیر این جفت‌شدگی را بر طیف نوسانگر هماهنگ سه‌بعدی به‌دست آورید.

۱۷ـ۲ حالتهای $n = ۲$ را در اتم هیدروژن واقعی در نظر بگیرید. طیف را در غیاب میدان مغناطیسی بنویسید. اگر اتم را در میدان مغناطیسی ۲۵۰۰۰G قرار دهیم، این طیف (با نادیده گرفتن ساختار فوق‌ریز) چگونه تغییر می‌کند؟

۱۷ـ۳ نشان دهید

$$\nabla^۲\frac{۱}{r} = -۴\pi\delta(\mathbf{r})$$

از روشی که در پانوشت مربوط به معادلهٔ ۱۷ـ۳۱ پیشنهاد شده است استفاده کنید.

۱۷ـ۴ گاز هیدروژن را در حالت پایه در نظر بگیرید. تأثیر میدان مغناطیسی را بر ساختار فوق‌ریز تعیین کنید. طیف را برای $B = ۱\text{G}$ و برای $B = ۱۰^۴\text{G}$ محاسبه کنید.

[راهنمایی: معادلهٔ ویژه‌مقداری را برای برهم‌کنش $A\mathbf{S}\cdot\mathbf{I}/\hbar^۲ + aS_z/\hbar + bI_z/\hbar$ با $a = \hbar B/m_ec$، $b = -eg_N\hbar B/M_Nc$ و $A = g_N(۴m_e/۳M_N)\alpha^۴$ بنویسید. باید یک ماتریس ۲×۲ را قطری کنید.]

۱۷ـ۵ یک نوسانگر هماهنگ سه‌بعدی را در نظر بگیرید. با استفاده از رابطهٔ نسبیتی برای انرژی جنبشی، جابه‌جایی انرژی حالت پایه را به‌دست آورید.

۱۷ـ۶ یک دوترون متشکل از پروتون (با بار $+e$) و نوترون (با بار ۰) را در حالتی با اسپین کل ۱ و

تکانهٔ زاویه‌ای کل $J = ۱$ درwww.arsanjan.blogfa.comوترون عبارت‌اند از

$$g_P = ۲(۲٫۷۸۹۶)$$
$$g_N = ۲(-۱٫۹۱۰۳)$$

(الف) حالتهای تکانهٔ زاویه‌ای مداری ممکن را برای این دستگاه تعیین کنید. اگر بدانیم حالت در ابتدا $^۳S_۱$ است، چه مخلوط مجازی با فرض پایسته بودن پاریته به‌دست می‌آید.
(ب) رابطه‌ای برای برهم‌کنش دوترون با میدان مغناطیسی خارجی بنویسید و شکافتگی زیمان را محاسبه کنید. نشان دهید اگر برهم‌کنش با میدان مغناطیسی را به‌صورت

$$V = -\boldsymbol{\mu}_{\text{eff}} \cdot \mathbf{B}$$

بنویسیم گشتاور مغناطیسی مؤثر دوترون مجموع گشتاورهای مغناطیسی پروتون و نوترون است، و هر انحرافی از این نتیجه ناشی از ترکیب حالت غیر S با تابع‌موج است.
۱۷ـ۷ پوزیترونیم، اتم هیدروژنگونه‌ای متشکل از یک الکترون و یک پوزیترون (با همان جرم اما بار مخالف)، را در نظر بگیرید. (الف) انرژیهای حالت پایه و حالتهای $n = ۲$ را محاسبه کنید. (ب) اثر انرژی جنبشی نسبیتی و جفت‌شدگی اسپین-مدار را به‌دست آورید. (ج) شکافتگی فوق‌ریز حالت پایه را تعیین کنید. نتایج را با نتیجه‌های مربوط به اتم هیدروژن مقایسه کنید و تفاوتهای عمده را توضیح دهید.

مراجع

مفصلترین بحث دربارهٔ فیزیک اتمهای هیدروژنگونه را می‌توان در کتاب زیر یافت

H A Bethe and E E Salpeter. *Quantum Mechanics of One-and Two-Electron Atoms*. Springer Verlag. Berlin. New York, 1957.

حرکت تقدیمی توماس در کتاب زیر بررسی شده است

R M Eisberg. *Fundamentals of Modern Physics*. John Wiley & Sons. New York. 1961.

www.arsanjan.blogfa.com

۱۸

اتم هلیم

اتم هلیم بدون دافعهٔ الکترون‌ـالکترون

اتم هلیم از یک هسته با بار $Z = ۲$ و دو الکترون که آنها را با ۱ و ۲ نشانگذاری می‌کنیم تشکیل شده است. این دو الکترون یکدیگر را دفع می‌کنند و هسته آنها را جذب می‌کند. فرض می‌کنیم (و خواهیم دید که این فرض درست است) که هیچ نیرویی غیر از نیروهای الکترومغناطیسی (کولنی با تقریب بسیار خوب) برای توصیف دینامیک اتم هلیم در مکانیک کوانتومی لازم نیست.

اگر هسته را در مبدأ بگیریم و مختصات الکترونها را با $\mathbf{r}_۱$ و $\mathbf{r}_۲$ نشان دهیم (شکل ۱۸ـ۱) هامیلتونی اتم هلیم را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$H = \frac{۱}{۲m}\mathbf{p}_۱^۲ + \frac{۱}{۲m}\mathbf{p}_۲^۲ - \frac{Ze^۲}{r_۱} - \frac{Ze^۲}{r_۲} + \frac{e^۲}{|\mathbf{r}_۱ - \mathbf{r}_۲|} \qquad (۱\text{ـ}۱۸)$$

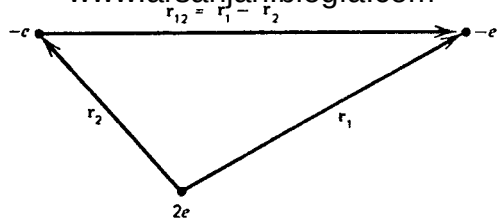
که در آن m جرم الکترون است. اثرات کوچک ناشی از حرکت هسته[۱]، اثرات نسبیتی، اثرات

---

۱. اثر جرم کاهیده شکل نسبتاً متفاوتی پیدا می‌کند زیرا باید یک مسئلهٔ سه‌ذره‌ای را به مسئلهٔ عملاً دوذره‌ای تبدیل کنیم. جزئیات این تبدیل را در کتاب زیر ببینید

D Park, *Introduction to the Quantum Theory*, McGraw-Hill, New York, Third Edition (1992).

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۱۸ـ۱ مختصات مربوط به توصیف اتم هلیم.

اسپین‌ـمدار، و تأثیر جریان ناشی از حرکت یکی از الکترونها بر الکترون دیگر را در نظر نمی‌گیریم. هامیلتونی ۱۸ـ۱ را به‌صورت زیر می‌نویسیم

$$H = H^{(1)} + H^{(2)} + V \qquad (۲\text{ـ}۱۸)$$

که در آن

$$H^{(i)} = \frac{1}{2m}\mathbf{p}_i^2 - \frac{Ze^2}{r_i} \qquad (۳\text{ـ}۱۸)$$

و

$$V = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \qquad (۴\text{ـ}۱۸)$$

از این پس با بار هسته‌ای Z کار خواهیم کرد و هرگاه لازم باشد قرار می‌دهیم $Z = 2$. از بحث اتم هیدروژن مجموعه‌های کامل ویژه‌تابعهای $H^{(1)}$ و $H^{(2)}$ را داریم. بنابراین، اگر در هامیلتونی کل از V صرفنظر کنیم، جواب مسئلهٔ ویژه‌مقداری را برای دستگاه دو الکترونی به‌دست می‌آوریم. ویژه‌تابعها عبارت‌اند از

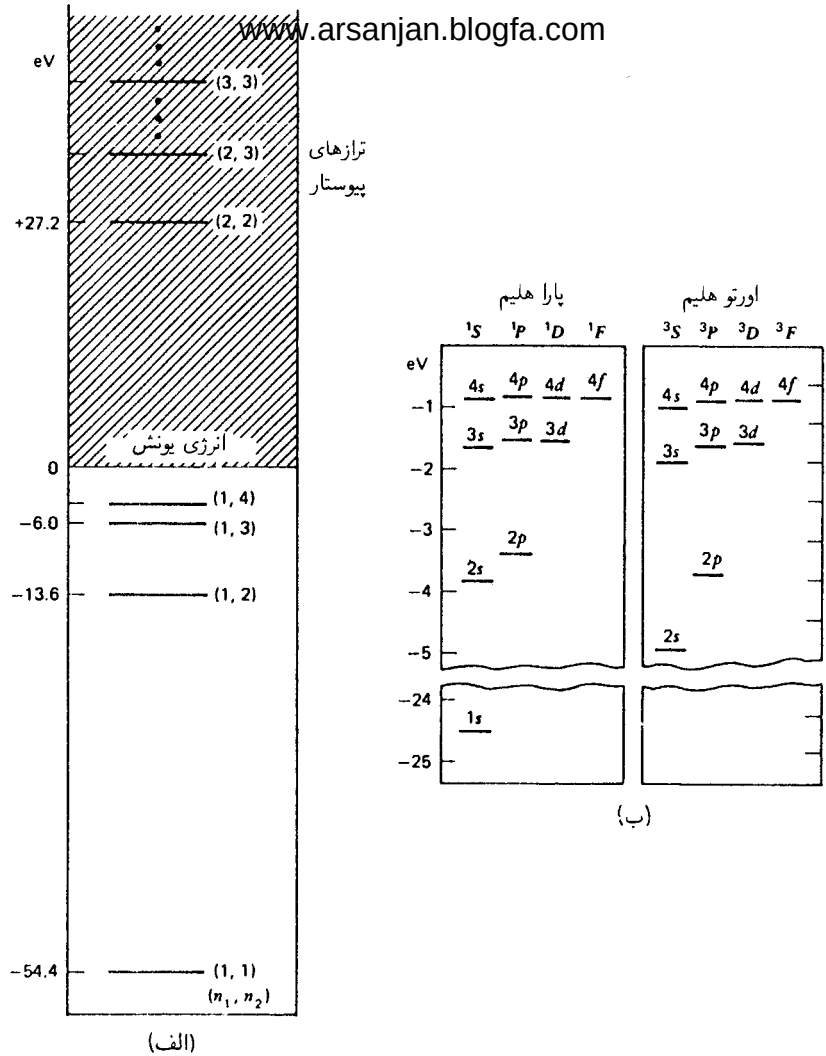
$$u(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \phi_{n_1 l_1 m_1}(\mathbf{r}_1)\phi_{n_2 l_2 m_2}(\mathbf{r}_2) \qquad (۵\text{ـ}۱۸)$$

که در معادلهٔ زیر صدق می‌کنند

$$[H^{(1)} + H^{(2)}]u(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = Eu(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \qquad (۶\text{ـ}۱۸)$$

و انرژی با رابطهٔ زیر داده می‌شود (شکل ۱۸ـ۲الف)

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۱۸ـ۲ (الف) طیف هلیم با چشمپوشی از برهم‌کنش الکترون‌ـالکترون. نقطهٔ انرژی صفر در انرژی یونش انتخاب شده است. (ب) طیف هلیم واقعی برای حالتهای تکتایی (پاراهلیم) و سه‌تایی (اورتوهلیم). در نشانگذاری ترازها یک تراز بازداشتهٔ $(1s)$ وجود دارد، و در نتیجه تراز $(2p)$ تقریباً با اوربیتال $(1s)(2p)$ توصیف می‌شود.

$$E = E_{n_1} + E_{n_2} \qquad (۷_۱۸)$$

که در آن $E_n = -(mc^2/2)(Z\alpha)^2/n^2$. بدین‌ترتیب، در این الگوی ایده‌آلی، که در آن الکترونها

www.arsanjan.blogfa.com

یکدیگر را "نمی‌بینند"، انرژی حالت پایه

$$E = -2E_1 = -mc^2(2\alpha)^2 = -108{,}8\ \text{eV} \qquad (8\text{-}18)$$

توجه کنید که این مقدار ۸ برابر انرژی حالت پایهٔ هیدروژن است: $2 \times Z^2 \times (-13{,}6\ \text{eV})$.

اولین حالت برانگیخته حالتی است که در آن یک الکترون در حالت پایهٔ خود، $n = 1$، است و الکترون دوم به اولین حالت برانگیختهٔ خود، $n = 2$، رفته است. بنابراین،

$$E = E_1 + E_2 = -68{,}0\ \text{eV} \qquad (9\text{-}18)$$

انرژی یونش، یعنی انرژی لازم برای بردن الکترون از حالت پایه به بینهایت، عبارت است از

$$E_{\text{یونش}} = (E_1 + E_\infty) - 2E_1 = 54{,}4\ \text{eV} \qquad (10\text{-}18)$$

و کاملاً جالب است که ابتدای پیوستار پایینتر از حالت برانگیخته‌ای قرار دارد که در آن هر دو الکترون در حالت $n = 2$ هستند. انرژی این حالت برابر است با

$$E = 2E_2 = -27{,}2\ \text{eV} \qquad (11\text{-}18)$$

و پدیدهٔ تازه‌ای نمایان می‌شود: وجود یک حالت گسسته در پیوستار مربوط به هامیلتونی $H^{(1)}+H^{(2)}$. مضامین این پدیده را به اختصار در پایان این فصل بررسی خواهیم کرد.

اثرات اصل طرد

چون این دو الکترون فرمیونهای یکسان هستند، باید تابع‌موج کل را تحت تعویض مختصات فضا و اسپین آنها پادمتقارن کنیم. بنابراین، توصیف درست حالت پایهٔ این دستگاه ایده‌آلی به‌صورت زیر است

$$u_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \phi_{100}(\mathbf{r}_1)\phi_{100}(\mathbf{r}_2)\chi_{\text{تکتایی}} \qquad (12\text{-}18)$$

قسمت فضایی تابع‌موج الزاماً متقارن است و به همین دلیل است که قسمت اسپینی را یک حالت تکتایی گرفته‌ایم:

$$\chi_{\text{تکتایی}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)} - \chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)}) \qquad (13\text{-}18)$$

www.arsanjan-blogfa.com

برای اولین حالت برانگیخته متقارن مرتبهٔ اول داشت که برای $V = 0$ از لحاظ انرژی واگن هستند: یکی تابع متقارن فضایی-پادمتقارن اسپینی

$$u_1^{(s)} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_{100}(\mathbf{r}_1)\phi_{21m}(\mathbf{r}_2) + \phi_{21m}(\mathbf{r}_1)\phi_{100}(\mathbf{r}_2)]\chi_{\text{تکتایی}} \qquad (۱۴\text{-}۱۸)$$

و دیگری تابع پادمتقارن فضایی-متقارن اسپینی

$$u_1^{(t)} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_{100}(\mathbf{r}_1)\phi_{21m}(\mathbf{r}_2) - \phi_{21m}(\mathbf{r}_1)\phi_{100}(\mathbf{r}_2)]\chi_{\text{سه‌تایی}} \qquad (۱۵\text{-}۱۸)$$

که در آن توابع اسپین

$$X_{\text{سه‌تایی}} = \begin{cases} \chi_+^{(1)}\chi_+^{(2)} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)} + \chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)}) \\ \chi_-^{(1)}\chi_-^{(2)} \end{cases} \qquad (۱۶\text{-}۱۸)$$

بر تکتایی χ عمود هستند.

اثر دافعهٔ الکترون-الکترون

در تقریب اول می‌توان برهم‌کنش کولنی الکترون-الکترون V را به‌صورت اختلال در نظر گرفت. ابتدا جابه‌جایی انرژی حالت پایه را تا مرتبهٔ اول برحسب V محاسبه می‌کنیم. داریم

$$\Delta E = \int d^3r_1 d^3r_2 u_0^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}u_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \qquad (۱۷\text{-}۱۸)$$

چون اسپین در این اختلال دخالت ندارد، تنها کافی است بنویسیم

$$\Delta E = \int d^3r_1 d^3r_2 |\phi_{100}(\mathbf{r}_1)|^2 \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}|\phi_{100}(\mathbf{r}_2)|^2 \qquad (۱۸\text{-}۱۸)$$

این انتگرال تعبیر فیزیکی ساده‌ای دارد. چون $|\phi_{100}(\mathbf{r}_1)|^2$ چگالی احتمال یافتن الکترون ۱ در $\mathbf{r}_1$ است، می‌توان $e|\phi_{100}(\mathbf{r}_1)|^2$ را چگالی بار الکترون ۱ تعبیر کرد. در نتیجه کمیت

$$U(\mathbf{r}_2) = -\int d^3r_1 \frac{e|\phi_{100}(\mathbf{r}_1)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \qquad (۱۹\text{-}۱۸)$$

www.arsanjan.blogfa.com

پتانسیل در $\mathbf{r}_2$ ناشی از توزیع

$$\Delta E = -\int d^3 r_2 e|\phi_{100}(\mathbf{r}_2)|^2 U(\mathbf{r}_2) \qquad (۲۰\text{-}۱۸)$$

انرژی الکتروستاتیک برهم‌کنش الکترون ۲ با این پتانسیل است. این انتگرال را می‌توان محاسبه کرد. با $\phi_{100} = (2/\sqrt{4\pi})(Z/a_0)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$ داریم

$$\Delta E = \left[\frac{1}{\pi}(Z/a_0)^3\right]^2 e^2 \int_0^\infty r_1^2 dr_1 e^{-2Zr_1/a_0} \int_0^\infty r_2^2 dr_2 e^{-2Zr_2/a_0}$$
$$\int d\Omega_1 \int d\Omega_2 \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \qquad (۲۱\text{-}۱۸)$$

در نوشتن این رابطه از تفکیک زیر استفاده کرده‌ایم

$$\int d^3 r = \int_0^\infty r^2 dr\, d\Omega$$

و جمله‌ای را که به زاویهٔ میان $\mathbf{r}_1$ و $\mathbf{r}_2$ بستگی دارد جدا کرده‌ایم. در واقع، داریم

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{1}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta)^{1/2}} \qquad (۲۲\text{-}۱۸)$$

که در آن θ زاویهٔ میان $\mathbf{r}_1$ و $\mathbf{r}_2$ است. در اینجا می‌توان به دو روش کار کرد.

(الف) در یک روش مستقیم، برای انتگرال‌گیری روی $d\Omega_2$ راستای $\mathbf{r}_1$ را محور z می‌گیریم، و به‌دست می‌آوریم

$$\int d\Omega_2 \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{1} d(\cos\theta) \frac{1}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta)^{1/2}}$$
$$= -2\pi \frac{1}{r_1 r_2} \left[(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta)^{1/2}\right]_{\cos\theta=-1}^{\cos\theta=+1} \qquad (۲۳\text{-}۱۸)$$
$$= \frac{2\pi}{r_1 r_2}(r_1 + r_2 - |r_1 - r_2|)$$

انتگرال‌گیری روی $d\Omega_1$ ساده است، زیرا هیچ چیز به زاویه بستگی ندارد، و در نتیجه

$$\int d\Omega_1 = 4\pi \qquad (۲۴\text{-}۱۸)$$

بنابراین، طرف راست ۱۸ـ۲۱ به صورت زیر درمی‌آید

www.arsanjan.blogfa.com

$$8e^2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^6 \int_0^\infty r_1 dr_1\, e^{-2Zr_1/a_0} \int_0^\infty r_2\, dr_2\, e^{-2Zr_2/a_0} \times (r_1 + r_2 - |r_1 - r_2|) \qquad (۱۸ـ۲۵)$$

(ب) یک بسط بسیار مفید، که وقتی لازم می‌شود که بستگی زاویه‌ای اضافی در صورت کسر وجود داشته باشد، با رابطهٔ زیر داده می‌شود. برای $r_1 > r_2$،

$$(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta)^{1/2} = r_1^{-1}\left(1 + \frac{r_2^2}{r_1^2} - 2\frac{r_2^2}{r_1}\cos\theta\right)^{-1/2}$$

$$= \frac{1}{r_1}\sum_{L=0}^{\infty}\left(\frac{r_2}{r_1}\right)^L P_L(\cos\theta) \qquad (۱۸ـ۲۶)$$

و برای $r_2 > r_1$ کافی است جای r_1 و r_2 را عوض کنیم. بنابراین،

$$\int d\Omega_1 \int d\Omega_2 \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \int d\Omega_1 \int d\Omega_2 \sum_{L=0}^{\infty} \frac{r_<^L}{r_>^{L+1}} P_L(\cos\theta) \qquad (۱۸ـ۲۷)$$

که در آن $r_>$ و $r_<$ به‌ترتیب یکی از r_1 و r_2 است که بزرگتر و کوچکتر است. با استفاده از

$$\frac{1}{2}\int_{-1}^{1} d(\cos\theta) P_L(\cos\theta) = \delta_{L0} \qquad (۱۸ـ۲۸)$$

به‌عنوان مورد خاصی از

$$\frac{1}{2}\int_{-1}^{1} d(\cos\theta) P_L(\cos\theta) P_{L'}(\cos\theta) = \frac{\delta_{LL'}}{2L+1} \qquad (۱۸ـ۲۹)$$

اکنون می‌توان مانند سابق عمل کرد. با هر دو روش، ۱۸ـ۲۵ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\Delta E = 8e^2(Z/a_0)^6 \int_0^\infty r_1 dr_1\, e^{-2Zr_1/a_0} \left\{ 2\int_0^{r_1} r_2^2 dr_2\, e^{-2Zr_2/a_0} + 2r_1 \int_{r_1}^\infty r_2\, dr_2\, e^{-2Zr_2/a_0} \right\} \qquad (۱۸ـ۳۰)$$

www.arsanjan.blogfa.com

انتگرالها محاسبهٔ ساده‌ای دارند و نتیجه عبارت است از

$$\Delta E = \frac{5}{8}\,\frac{Ze^2}{a_0} = \frac{5}{4}Z\left(\frac{1}{2}mc^2\alpha^2\right) \qquad (۳۱_۱۸)$$

که سهم آن مثبت است، زیرا ناشی از نیروی دافعه است، و به‌ازای $Z = 2$ برابر است با 34eV. وقتی این سهم را به نتیجهٔ مرتبهٔ صفر $-108.8\,\text{eV}$ اضافه کنیم، تا مرتبهٔ اول به‌دست می‌آوریم

$$E \simeq -74.8\ \text{eV} \qquad (۳۲_۱۸)$$

که با مقدار تجربی

$$E_{\text{تجربی}} = -78.975\ \text{eV} \qquad (۳۳_۱۸)$$

اختلاف قابل‌ملاحظه‌ای دارد. به لحاظ فیزیکی، می‌توان این اختلاف را به این واقعیت نسبت داد که در محاسبات بالا "استتار" را به‌حساب نیاورده‌ایم، یعنی این اثر را که وجود یکی از الکترونها باعث کاهش‌بار خالصی می‌شود که الکترون دیگر "می‌بیند". با تساهل زیاد، می‌توان گفت که اگر، به‌عنوان مثال، الکترون ۱ نیمی از زمان "بین" الکترون ۲ و هسته باشد آنگاه الکترون ۲ نیمی از زمان بار Z و نیمی از زمان بار $1 - Z$ را می‌بیند، یعنی عملاً در رابطهٔ

$$E + \Delta E = -\frac{1}{2}mc^2\alpha^2\left(2Z^2 - \frac{5}{4}Z\right) \qquad (۳۴_۱۸)$$

باید $(Z - 1/2)$ را به‌جای Z قرار دهیم. در نتیجه، اختلاف کمتر می‌شود اما استدلال خام بالا نمی‌تواند برای توجیه انتخاب ۵۰ درصد احتمال استتار مؤثر کافی باشد. بعداً در این فصل، وقتی دربارهٔ اصل وردشی ریلی-ریتز بحث می‌کنیم، به این موضوع باز خواهیم گشت.

اصل طرد و برهم‌کنش تبادلی

اکنون اولین حالت برانگیخته هلیم را بررسی می‌کنیم. کافی است جابه‌جایی انرژی را با حالتهای تک‌تایی و سه‌تایی $m = 0$ که در ۱۸ـ۱۴ و ۱۸ـ۱۵ داده شده‌اند محاسبه کنیم، زیرا این جابه‌جایی ناشی از اختلالی است که با L_z جابه‌جا می‌شود. برای چنین اختلالی، جابه‌جایی باید مستقل از

مقدار m باشد. باز هم، به دلیل ناوردایی تانسوری اختلال V به اسپین، داریم

www.arsanjan.blogfa.com

$$\begin{aligned}\Delta E_{۱}^{(s,t)} =& \frac{۱}{۲}e^{۲}\int d^{۳}r_{۱}\int d^{۳}r_{۲}[\phi_{۱۰}(\mathbf{r}_{۱})\phi_{۲l۰}(\mathbf{r}_{۲}) \pm \phi_{۲l۰}(\mathbf{r}_{۱})\phi_{۱۰۰}(\mathbf{r}_{۲})]^{*} \\ & \times \frac{۱}{|\mathbf{r}_{۱}-\mathbf{r}_{۲}|}[\phi_{۱۰۰}(\mathbf{r}_{۱})\phi_{۲l۰}(\mathbf{r}_{۲}) \pm \phi_{۲l۰}(\mathbf{r}_{۱})\phi_{۱۰۰}(\mathbf{r}_{۲})] \\ =& e^{۲}\int d^{۳}r_{۱}\int d^{۳}r_{۲}|\phi_{۱۰۰}(\mathbf{r}_{۱})|^{۲}|\phi_{۲l۰}(\mathbf{r}_{۲})|^{۲}\frac{۱}{|\mathbf{r}_{۱}-\mathbf{r}_{۲}|} \qquad (۳۵_۱۸) \\ & \pm e^{۲}\int d^{۳}r_{۱}\int d^{۳}r_{۲}\phi^{*}_{۱۰۰}(\mathbf{r}_{۱})\phi^{*}_{۲l۰}(\mathbf{r}_{۲})\frac{۱}{|\mathbf{r}_{۱}-\mathbf{r}_{۲}|}\phi_{۲l۰}(\mathbf{r}_{۱})\phi_{۱۰۰}(\mathbf{r}_{۲})\end{aligned}$$

در به‌دست آوردن این صورت ساده، از تقارن V تحت تعویض $\mathbf{r}_{۱} \leftrightarrow \mathbf{r}_{۲}$ استفاده کرده‌ایم.

دیده می‌شود که جابه‌جایی انرژی از دو جمله تشکیل شده است: جملهٔ اول دارای شکل آشنای برهم‌کنش الکتروستاتیکی میان دو "ابر الکترونی" است که مطابق با توابع موج دو الکترون توزیع شده‌اند. این جمله صرفاً تعمیم سادهٔ جمله‌ای است که برای جابه‌جایی انرژی حالت پایه به‌دست آوردیم. جملهٔ دوم تعبیر کلاسیک ندارد. منشأ آن در اصل پاؤلی است، و علامت آن بستگی به این دارد که اسپین حالت ۰ است یا ۱. در نتیجه، به علت این سهم تبادلی، جمله‌های سه‌تایی و تکتایی دیگر واگن نیستند. اگرچه در اینجا $n = ۲$ را در نظر گرفته‌ایم، اما به‌طور کلی داریم

$$\begin{aligned}\Delta E_{n,l}^{(t)} &= J_{nl} - K_{nl} \\ \Delta E_{n,l}^{(s)} &= J_{nl} + K_{nl}\end{aligned} \qquad (۳۶_۱۸)$$

انتگرالها را می‌توان به‌دقت محاسبه کرد (۱۸ـ۲۷ همین جا به‌کار می‌آید)، اما این محاسبه را انجام نمی‌دهیم. انتگرال J_{nl} به‌وضوح مثبت است، و معلوم می‌شود که K_{nl} هم مثبت است. این نتیجه به‌ازای $l = n - ۱$ بدیهی است: در این مورد، توابع موجی که در ۱۸ـ۳۵ ظاهر می‌شوند گره ندارند. با استدلال کیفی زیر می‌توان نشان داد که حالت سه‌تایی باید انرژی کمتری از حالت تکتایی داشته باشد، یعنی

$$J_{nl} - K_{nl} < J_{nl} + K_{nl}$$

یا معادل آن

$$K_{nl} > ۰ \qquad (۳۷_۱۸)$$

www.arsanjan.blogfa.com

در واقع، تابع‌موج برای حالت سه‌تایی برابر تقارن است، و در نتیجه الکترونها تا حدی مقیدند دور از یکدیگر قرار گیرند. این باعث تضعیف اثر استتار می‌شود، یعنی هر الکترون مقدار بیشتری از بار هسته را "می‌بیند"، و همچنین باعث می‌شود دافعهٔ میان الکترونها نسبت به حالت متقارن فضایی تکتایی کمتر شود. یک جنبهٔ جالب توجه این نتیجه آن است که، اگرچه پتانسیل اختلالی $e^2/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ به اسپینهای الکترونها بستگی ندارد، تقارن تابع موج باعث می‌شود پتانسیل به‌گونه‌ای رفتار کند که انگار وابسته به اسپین است. می‌توان ۱۸ـ۳۶ را به‌صورتی نوشت که این وابستگی را نشان دهد. اگر اسپینهای الکترونها را با $\mathbf{s}_1$ و $\mathbf{s}_2$ نشان دهیم، اسپین کل عبارت خواهد بود از $\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$، و

$$\mathbf{S}^2 = \mathbf{s}_1^2 + \mathbf{s}_2^2 + 2\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 \qquad (۱۸ـ۳۸)$$

با اعمال این عملگر روی حالتهای تکتایی و سه‌تایی ۱۸ـ۱۳ و ۱۸ـ۱۶، که ویژه‌حالتهای $\mathbf{s}_1^2$ و $\mathbf{s}_2^2$ نیز هستند، به‌دست می‌آوریم

$$S(S+1)\hbar^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + 2\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2$$

بنابراین،

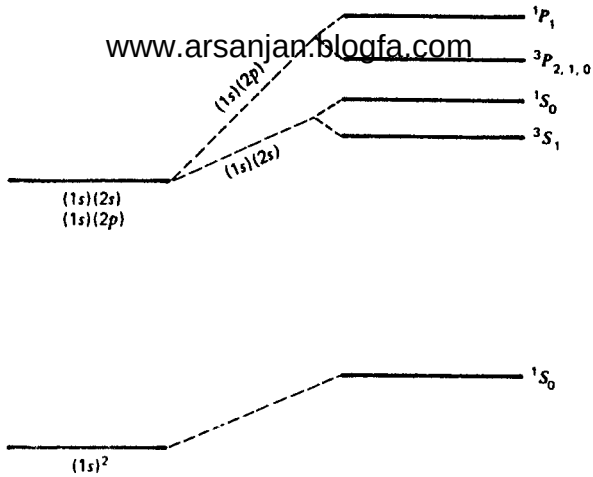
$$2\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2/\hbar^2 = S(S+1) - \frac{3}{2} = \begin{cases} \frac{1}{4} & \text{سه‌تایی} \\ -\frac{3}{4} & \text{تکتایی} \end{cases} \qquad (۱۸ـ۳۹)$$

بدین‌ترتیب، برحسب $\boldsymbol{\sigma}$ها که در $\mathbf{s}_i = (1/2)\hbar\boldsymbol{\sigma}_i$ صدق می‌کنند، می‌توان نوشت

$$\Delta E_{n,l} = J_{n,l} - \frac{1}{2}(1 + \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2)K_{nl} \qquad (۱۸ـ۴۰)$$

در بحث مولکول H_2 باز هم این رابطه را خواهیم دید. معمولاً نیروهای وابسته به اسپین بین اتمها کاملاً ضعیف هستند. چنانکه در مثال جفت‌شدگی اسپین‌ـمدار دیدیم، نیروهای وابسته به اسپین اغلب ناشی از تصحیحات نسبیتی روی نیروهای استاتیک هستند. در مثال اسپین‌ـمدار، این نیروها به‌نسبت ضریب α^2، که همان $(v/c)^2$ است، کاهش می‌یابند. این نیروها به‌اندازهٔ کافی قوی نیستند که بتوانند اسپینهای الکترونها را در یک فرومغناطیس همراستا نگه دارند، بجز در دماهای کمی که غیرواقعی‌اند. وابستگی اسپینی ناشی از تبادل بسیار قویتر از آن است: این نیرو از همان مرتبهٔ بزرگی نیروی الکتروستاتیک است و، چنانکه هایزنبرگ برای نخستین بار متوجه شد، باعث پدیدهٔ فرومغناطیس است.

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۱۸ـ۳ نمودار شکافتگی چند حالت اول برانگیخته در هلیم.

طیف چند حالت اول برانگیخته در هلیم در شکل ۱۸ـ۳ نشان داده شده است. نمادنگاری به‌کار برده شده برای حالتهای نامختل به اوربیتالها، یعنی اعداد کوانتومی الکترونهای نامختل، مربوط می‌شود. بنابراین، هر دو الکترون در حالت پایه در حالتهای $n = ۱$، $l = ۰$ هستند، و این را با $(۱s, ۱s)$، و در واقع به‌صورت فشرده‌تر $(۱s)^۲$، نشان داده‌ایم. باید توجه کرد که وقتی مثلاً برای اولین حالت برانگیخته می‌نویسیم $(۱s)(۲p)$، منظور این نیست که یک الکترون در یک حالت است و الکترون دیگر در حالت دیگر، زیرا برای الکترونها باید توابع موج کاملاً پادمتقارن باشند. راه دیگر نشانگذاری حالت استفاده از نمادنگاری $^{۲S+۱}L_J$ است، که برای حالتهای مختل در شکل به‌کار برده‌ایم. می‌بینیم، در یک چندتایی معین حالتهای تکتایی بالاتر از حالتهای سه‌تایی قرار می‌گیرند. این پیامد تقارن است (به استدلال مربوط به $K_{nl} > ۰$ مراجعه کنید) و مثال خاصی از یکی از قاعده‌های هوند است: اگر تمام چیزهای دیگر یکسان باشند، حالتهای مربوط به بیشترین اسپین کمترین انرژی را دارند.[۲]

اگر هلیم را با تاباندن نور فرابنفش به آن از حالت پایه برانگیخته کنیم، قاعدهٔ گزینش $\Delta L = ۱$، که بعداً آن‌را به‌دست می‌آوریم، برانگیختگی به حالتهای P را ایجاب می‌کند. علاوه بر آن، یک قاعدهٔ گزینش $\Delta S = ۰$ وجود دارد که نشان می‌دهد تنها گذارهای تکتایی←و سه‌تایی←سه‌تایی غالب هستند.[۳] بنابراین، قویترین حالت برانگیخته از حالت پایه حالت $^۱P_۱$ است. ترازهای دیگر نیز می‌توانند با سازوکارهای دیگری، مانند برانگیختگی برخوردی، اشغال شوند. اگر حالت پایه اشغال باشد، احتمال گذارهای تابشی به‌حالت پایه بسیار کم می‌شود. حالت ^۳P، که در برخورد اتمها در حالت $^۱P_۱$ با اتمهای دیگر گاز ممکن است اشغال شود، تنها می‌تواند به حالت $^۳S_۱$ افت کند، و

۲. دربارهٔ قاعده‌های هوند با تفصیل بیشتری در فصل ۱۹ بحث خواهیم کرد.

۳. قاعده‌های گزینش را در فصل ۲۱ بررسی می‌کنیم.

www.arsanjan.blogfa.com

این حالت را شبه‌پایدار می‌نامند زیرا گسیل تابش هم‌آنان به حالت پایه افت کند. این واقعیت که با تقریب خوب، بین حالتهای سه‌تایی و حالتهای تکتایی گذاری روی نمی‌دهد زمانی موجب این باور شد که دو نوع هلیم وجود دارند: اورتوهلیم (سه‌تایی) و پاراهلیم (تکتایی).

طیف هلیم در شکل ۱۸ـ۲ب نشان می‌دهد که انرژی حالتهای برانگیختهٔ $(1s)(nl)$ اختلاف چندانی با انرژیهای ترازهای اتم هیدروژن ندارند. برای مثال، انرژی بستگی یک الکترون در اتم هلیم $24{,}6\text{eV}$ است:

$$24{,}6\text{eV} = 54{,}4 - 79{,}0 = (\text{انرژی بستگی هلیم یک بار یونیده}) - (\text{انرژی بستگی کل})$$

در حالی که انرژی لازم برای آزاد شدن یک الکترون از حالت $2s$ از مرتبهٔ ۴ تا ۵ الکترون ولت است، که با انرژی $3{,}4\text{eV}(= 13{,}6/n^2\text{eV})$ برای هیدروژن قابل مقایسه است. دلیل این اثر آن است که الکترون "خارجی" تنها یک بار مثبت واحد را می‌بیند، زیرا الکترون "داخلی" در اوربیتال $(1s)$ هسته را استتار می‌کند، و بارکل مؤثر برابر با $Z - 1$ باقی می‌ماند. این وضعیت برای حالت پایه وجود ندارد، زیرا هر دو الکترون به هسته دسترسی دارند. بنابراین، حالت پایه در عمق اندکی بیشتر از حالت پایهٔ هیدروژن قرار دارد.

در بحث مربوط به محاسبهٔ مرتبهٔ اول انرژی حالت پایهٔ هلیم اختلافی درحدود $2\,\text{eV}$ با مقدار تجربی به‌دست آوردیم. به‌جای براورد نتیجهٔ مرتبهٔ دوم، که کار بسیار پرزحمتی است، از روش کاملا متفاوتی برای محاسبهٔ انرژی حالت پایه ــ روش وردشی ریتز ــ استفاده می‌کنیم.

اصل وردشی

یک هامیلتونی H و یک تابع انتگرال‌پذیر مجذوری Ψ را در نظر بگیرید. فرض کنید Ψ به ۱ بهنجار شده است:

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = 1 \qquad (۴۱\text{ـ}۱۸)$$

ویژه‌حالتهای H را با ψ_n نشان می‌دهیم:

$$H\psi_n = E_n\psi_n \qquad (۴۲\text{ـ}۱۸)$$

تابع Ψ را می‌توان برحسب مجموعهٔ کامل ویژه‌تابعهای ψ_n بسط داد:

$$\Psi = \sum_n C_n\psi_n \qquad (۴۳\text{ـ}۱۸)$$

بنابراین، داریم

www.arsanjan.blogfa.com

$$\begin{aligned}\langle\Psi|H|\Psi\rangle &= \sum_n \sum_m C_n^* \langle\psi_n|H|\psi_m\rangle C_m \\ &= \sum_n \sum_m C_n^* C_m E_m \langle\psi_n|\psi_m\rangle \\ &= \sum_n |C_n|^2 E_n \\ &\geq E_0 \sum_n |C_n|^2\end{aligned} \qquad (۴۴_۱۸)$$

چون ۱۸ـ۴۱ ایجاب می‌کند که

$$\sum_n |C_n|^2 = 1 \qquad (۴۵_۱۸)$$

نتیجه می‌گیریم که

$$E_0 \leq \langle\Psi|H|\Psi\rangle \qquad (۴۶_۱۸)$$

با استفاده از این نتیجه می‌توان یک کران بالا برای E_0 محاسبه کرد. این کار را می‌توان با انتخاب یک Ψ که به تعدادی پارامتر (α_1، α_2، ...) بستگی دارد، محاسبهٔ $\langle\Psi|H|\Psi\rangle$، و کمینه کردن این کمیت نسبت به پارامترهای مزبور انجام داد.

کارایی این روش را با محاسبهٔ انرژی حالت پایهٔ هلیم نشان می‌دهیم، و بدین منظور Ψ را به‌صورت حاصلضرب توابع موج هیدروژنگونه در اوربیتالهای (۱s) اما با بار اختیاری Z^* انتخاب می‌کنیم. می‌نویسیم

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{100}(\mathbf{r}_1)\psi_{100}(\mathbf{r}_2) \qquad (۴۷_۱۸)$$

به‌طوری که توابع موج $\psi_{100}(\mathbf{r})$ در معادلهٔ ویژه‌مقداری زیر صدق می‌کنند

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{Z^* e^2}{r}\right)\psi_{100}(\mathbf{r}) = \epsilon\psi_{100}(\mathbf{r}) \qquad (۴۸_۱۸)$$

که در آن $E_0 = (1/2)mc^2(Z^*\alpha)^2$ به‌دست می‌آوریم

www.arsanjan.blogfa.com

$$\int d^3r_1 \int d^3r_2\, \psi^*_{100}(\mathbf{r}_1)\psi^*_{100}(\mathbf{r}_2)\left(\frac{\mathbf{p}_1^2}{2m}+\frac{\mathbf{p}_2^2}{2m}-\frac{Ze^2}{r_1}-\frac{Ze^2}{r_2}+\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}\right)\psi_{100}(\mathbf{r}_1)\psi_{100}(\mathbf{r}_2) \tag{۴۹_۱۸}$$

داریم

$$\begin{aligned}
&\int d^3r_1 \int d^3r_2 \psi^*_{100}(\mathbf{r}_1)\psi^*_{100}(\mathbf{r}_2)\left(\frac{\mathbf{p}_1^2}{2m}-\frac{Ze^2}{r_1}\right)\psi_{100}(\mathbf{r}_1)\psi_{100}(\mathbf{r}_2)\\
&\quad=\int d^3r_1\psi^*_{100}(\mathbf{r}_1)\left(\frac{\mathbf{p}_1^2}{2m}-\frac{Z^*e^2}{r_1}+\frac{(Z^*-Z)e^2}{r_1}\right)\psi_{100}(\mathbf{r}_1)\\
&\quad=\epsilon+(Z^*-Z)e^2\int d^3r_1|\psi_{100}(\mathbf{r}_1)|^2\frac{1}{r_1} \qquad (۵۰_۱۸)\\
&\quad=\epsilon+(Z^*-Z)e^2\frac{Z^*}{a_0}\\
&\quad=\epsilon+Z^*(Z^*-Z)mc^2\alpha^2
\end{aligned}$$

جملهٔ یکسانی برای الکترون ۲ به‌دست می‌آوریم، و مقدار انتظاری دافعهٔ الکترون‌ـالکترون را قبلاً در ۱۸ـ۳۱ محاسبه کرده‌ایم، با این تفاوت که به‌جای Z اکنون باید Z^* را قرار دهیم. از جمع این جمله‌ها به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}
\langle\Psi|H|\Psi\rangle&=-\frac{1}{2}mc^2\alpha^2\left(2Z^{*2}+4Z^*(Z-Z^*)-\frac{5}{4}Z^*\right)\\
&=-\frac{1}{2}mc^2\alpha^2\left(4ZZ^*-2Z^{*2}-\frac{5}{4}Z^*\right)
\end{aligned} \tag{۵۱_۱۸}$$

از کمینه کردن این کمیت نسبت به Z^* نتیجه می‌گیریم که

$$Z^*=Z-\frac{5}{16} \tag{۵۲_۱۸}$$

که بهتر از حدس قبلی $(Z-1/2)$ است. بدین ترتیب به‌ازای $Z=2$ به‌دست می‌آوریم

www.arsanjan.blogfa.com

$$E_0 \leq -\frac{1}{2}mc^2\alpha^2\left[2\left(Z-\frac{5}{16}\right)^2\right] = -77{,}38\ \text{eV} \qquad (53_18)$$

این نتیجه بسیار بهتر از نتیجهٔ اختلال مرتبهٔ اول است.

محاسبهٔ وردشی را می‌توان با توابع موج آزمونی پیچیده‌تری انجام داد. پکریس[۴] با استفاده از یک تابع موج ۱۰۷۵ جمله‌ای $\langle\Psi|H|\Psi\rangle$ را با کامپیوتر کمینه کرد. کران به‌دست آمده، با توجه به خطاهای آزمایش، با مقدار اندازه‌گیری شده توافق دارد. بدیهی است که چنین تابع موج پیچیده‌ای به‌صورتی نیست که مانند ۱۸ـ۴۷، با اثرات استتاری جزئی‌اش، به‌آسانی قابل تعبیر باشد. اما این تابع موج تأیید محکمی بر صحت مکانیک کوانتومی و بر این فرض است که برای توضیح ساختار اتمها نیروهای الکترومغناطیسی کفایت می‌کنند.

خودیونش

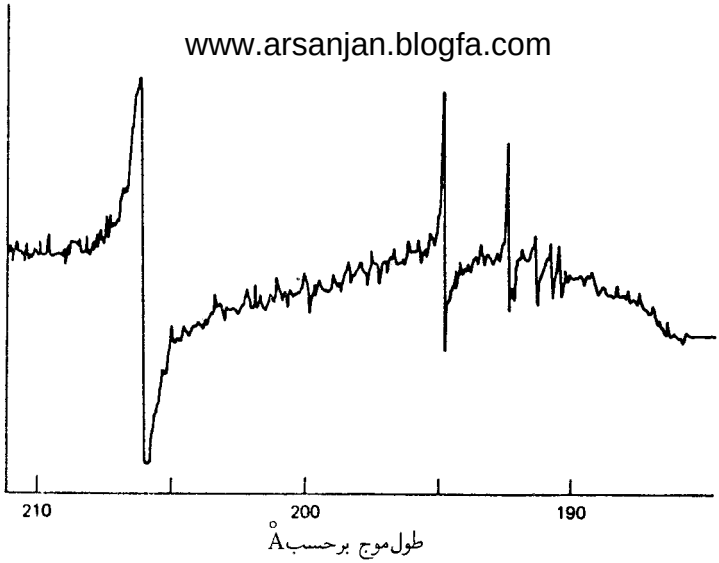
در پایان، به‌اختصار به بررسی این مشاهدهٔ قبلی خود می‌پردازیم که ویژه‌مقدارهایی از $H^{(1)}+H^{(2)}$ بالاتر از آستانهٔ یونش قرار می‌گیرند و در عین حال گسسته هستند. به‌عنوان مثال، حالتهایی که با اوربیتالهای $(2s)^2$ و $(2s)(2p)$ مشخص می‌شوند کاملاً بالاتر از انرژی یونش قرار دارند. این پدیده پیامدهای فیزیکی جالب توجهی دارد. برای مثال، حالت $(2s)(2p)$ را در نظر بگیرید. اگر الکترونها یک حالت اسپین تکتایی تشکیل دهند، این حالت یک $^1P_1$ خواهد بود، و الکترونها می‌توانند از حالت پایه با جذب تابش به این حالت برانگیخته شوند، زیرا قاعده‌های گزینش $\Delta l = 1$ و $\Delta S = 0$ نقض نمی‌شوند. پس از برانگیختگی، لازم نیست که این حالت به حالت پایه ($^1S_0$) یا به هر حالت دیگری که بنابه قاعده‌های گزینش مجاز است (مثلاً حالت $^1D_2$) افت کند، زیرا می‌تواند در مجرای دیگری قرار گیرد: این حالت می‌تواند به یک الکترون و هلیم یک بار یونیده، He^+، واپاشد. انرژی الکترون از پایستگی انرژی تعیین می‌شود. این فرایند را خودیونش می‌نامند.

حالت $(2s)(2p)$ در پیوستار به‌وضوح در پراکندگی الکترونها از یونهای He^+ مشاهده می‌شود. وقتی انرژی الکترون به اندازه‌ای است که حالت مرکب می‌تواند تشکیل شود، یک قلهٔ بسیار بارز در آهنگ پراکندگی ظاهر می‌شود. همچنین، در جذب تابش توسط هلیم، در نزدیکی انرژی حالت مرکب $(e^- - He^+)$ یک قلهٔ تیز در جذب رخ می‌دهد (شکل ۱۸ـ۴). جذب در انرژیهای دیگر نیز صورت می‌گیرد، زیرا فرایند

$$\text{تابش} + He \rightarrow e^- + He^+$$

۴. به کتاب بته و جکیو که در آخر همین فصل معرفی شده است مراجعه کنید.

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۱۸ـ۴ تشدید در طیف جذبی هلیم بالاتر از آستانهٔ پیوستار: اولین قله در انرژی متناظر با محل تراز $(2p)(2s)$ واقع می‌شود.[۵]

می‌تواند روی دهد، اما تغییرات جذب برحسب انرژی در انرژیهای دور از انرژی حالت مرکب بسیار هموار است. این حالت را می‌توان به‌گونهٔ دیگری به‌عنوان حالت تشدیدی نیز توصیف کرد. چون این حالت به اجزاء تشکیل‌دهنده‌اش $e^- + \mathrm{He}^+$ وامی‌پاشد نمی‌تواند برای همیشه پایدار بماند. در نتیجه، بنابه رابطهٔ عدم قطعیت $\Delta E \gtrsim \hbar/\Delta t$، انرژی آن دقیقاً معین نیست، که به نظر می‌رسد با این واقعیت که حالت $(2p)(2s)$ انرژی کاملاً معینی دارد ناسازگار است. اگر جفت‌شدگی حالت گسسته به حالت پیوستار را به‌حساب آوریم، آن حالت دیگر گسسته نخواهد بود، و انرژی آن می‌تواند در هر جایی از یک گسترهٔ باریک حول انرژی محاسبه شدهٔ بدون جفت‌شدگی قرار داشته باشد. در فصل ۲۳ و در مبحث خاص ۴، "طول‌عمر، پهنای خط، و تشدید"، به این موضوع باز خواهیم گشت.

مسائل

۱ـ۱۸ اتم هلیم را در تقریبی در نظر بگیرید که در آن از برهم‌کنش الکترون‌ـالکترون صرفنظر شده است. پایینترین حالت اورتوهلیم (اسپین ۱) را به‌دست آورید. واگنی آن‌را در این تقریب تعیین کنید. رابطهٔ شکافتگی ناشی از دافعهٔ الکترون‌ـالکترون را در نظریهٔ اختلال مرتبهٔ اول بنویسید و بزرگی آن‌را براورد کنید.

---

۵. اقتباس مجاز از

R P Madden and K Codling, *Phys Rev lett*, **10**, 516 (1963)

۲ـ۱۸ جابه‌جایی انرژی پایینترین مرتبهٔ $E^{(l)}$ $(l = ۰, ۱, ۲)$ را محاسبه کنید.
www.arsanjan.blogfa.com
۳ـ۱۸ گشتاور مغناطیسی پایینترین حالت اورتو هلیم را به‌دست آورید، یعنی برهم‌کنش با میدان مغناطیسی خارجی را محاسبه کنید.
۴ـ۱۸ کمیت

$$"E" = \langle \Psi | H | \Psi \rangle$$

را در نظر بگیرید که در آن Ψ یک تابع موج آزمونی اختیاری است. نشان دهید اگر Ψ با تابع موج صحیح حالت پایهٔ $\psi_۰$ با جمله‌هایی از مرتبهٔ ϵ اختلاف داشته باشد آنگاه "E" با انرژی حالت پایه با جمله‌هایی از مرتبهٔ $\epsilon^۲$ تفاوت خواهد داشت.
[تذکر: شرط بهنجارش $\langle \Psi | \Psi \rangle = ۱$ را فراموش نکنید.]
۵ـ۱۸ با استفاده از اصل وردشی، انرژی حالت پایهٔ نوسانگر هماهنگ سه‌بعدی را با به‌کار بردن تابع‌موج آزمونی زیر براورد کنید

$$\Psi = N e^{-\alpha r}$$

۶ـ۱۸ بستگی یک پروتون و یک نوترون (هر دو تقریباً با $mc^۲ = ۹۳۸\text{MeV}$) با پتانسیل

$$V(r) = V_۰ \frac{e^{-r/r_۰}}{r/r_۰}$$

را وقتی دستگاه در حالت $l = ۰$ است در نظر بگیرید. $r_۰$ گسترهٔ پتانسیل است. با استفاده از روش زیر، عمق پتانسیل لازم برای تعیین انرژی بستگی E_B را محاسبه کنید. (الف) مقدار تقریبی انرژی بستگی را با استفاده از اصل وردشی به‌دست آورید. (ب) در رابطهٔ میان مقدار تقریبی و $r_۰$ و عمق پتانسیل، مقدار تجربی E_B را قرار دهید. در محاسبات عددی از $r_۰ = ۲٫۸ \times ۱۰^{-۱۳}\text{cm}$ و $E_B = -۲٫۲۳\text{MeV}$ استفاده کنید. (جرم کاهیده را فراموش نکنید.)
۷ـ۱۸ ماتریس H_{ij} با بعد متناهی را در نظر بگیرید. نشان دهید شرط کمینه کردن

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = \sum_{i,j=۱}^{n} a_i^* H_{ij} a_j$$

تحت شرط

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \sum_{i=۱}^{n} a_i^* a_i = ۱$$

www.arsanjan.blogfa.com

ویژه‌مقدارهای ماتریس H را بیابید.

[راهنمایی: از روش ضرایب لاگرانژ استفاده کنید.]

۱۸ـ۸ با استفاده از اصل وردشی نشان دهید که پتانسیل جاذبهٔ یک‌بعدی همیشه دارای حالت مقید است.

[راهنمایی: $\langle\Psi|H|\Psi\rangle$ را با یک تابع آزمونی مناسب، مانند $Ne^{-\beta^2 x^2}$، محاسبه کنید و نشان دهید این مقدار انتظاری را همیشه می‌توان منفی کرد.]

۱۸ـ۹ با استفاده از داده‌های شکل ۱۸ـ۴، محل تراز $(2p)(2s)$ را در بالای حالت پایهٔ هلیم محاسبه کنید و سرعت الکترون گسیل‌شده در خودیونش را، اگر یون He^+ سرانجام در پایین‌ترین حالت خود باشد، به‌دست آورید. اگر یون He^+ در اولین حالت برانگیختهٔ خود باشد این سرعت را تعیین کنید.

۱۸ـ۱۰ تابع‌موج $\psi(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n)$ را در نظر بگیرید، که در آن تنها وابستگی به چند پارامتر نشان داده شده است. این تابع‌موج بهنجار شده است:

$$\langle\psi(\alpha_1, \alpha_2, \ldots \alpha_n)|\psi(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n)\rangle = 1$$

و وابستگی به پارامترها به‌گونه‌ای انتخاب شده است که کمیت زیر کمینه باشد

$$\mathcal{E} = \langle\psi(\alpha_1, \ldots)|H|\psi(\alpha_1, \ldots)\rangle$$

نشان دهید پارامترها از مجموعهٔ معادله‌های زیر به‌دست می‌آیند

$$\left\langle\psi(\alpha_1, \ldots)|H|\frac{\partial\psi}{\partial\alpha_i}\right\rangle - \mu\left\langle\psi(\alpha_1, \ldots)\left|\frac{\partial\psi}{\partial\alpha_i}\right.\right\rangle = 0 \qquad i = 1, 2, \ldots, n$$

که در آنها μ ضریب لاگرانژ است. فرض کنید H به پارامتر λ بستگی دارد (که می‌تواند، به‌عنوان مثال، بار هسته یا یک فاصله، مانند فاصلهٔ بین هسته‌ای در یک مولکول، باشد). آنگاه پارامترهای α_i به λ بستگی خواهند داشت. ثابت کنید

$$\frac{d\mathcal{E}}{d\lambda} = \left\langle\psi(\alpha_1, \ldots)\left|\frac{\partial H}{\partial\lambda}\right|\psi(\alpha_1, \ldots)\right\rangle$$

که آن‌را قضیهٔ فاینمن‌ـهلمن می‌نامند و در محاسبات فیزیک مولکولی بسیار مفید است.

۱۸ـ۱۱ با استفاده از اصل وردشی، انرژی حالت پایهٔ نوسانگر ناهماهنگی را براورد کنید که برای آن

$$H = \frac{p^2}{2m} + \lambda x^4$$

www.arsanjan.blogfa.com

نتیجهٔ خود را با نتیجهٔ دقیق مقابله کنید.

$$E_0 = 1.060\lambda^{1/3}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{2/3}$$

[راهنمایی: از تابع آزمونی گاؤسی استفاده کنید.]

۱۸ـ۱۲ با توجه به اینکه در قسمت شعاعی هامیلتونی اتم هیدروژن پتانسیل با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$V_{\text{eff}} = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$$

و ویژه‌مقدارها عبارت‌اند از

$$E(n_r, l) = -\frac{1}{2}\mu c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{(n_r + l + 1)^2}$$

با استفاده از قضیهٔ فاینمن‌ـهلمن کمیتهای $\langle 1/r\rangle_{nl}$ و $\langle 1/r^2\rangle_{nl}$ را با انتخاب مناسب پارامتر λ محاسبه کنید.

۱۸ـ۱۳ با استفاده از نتیجهٔ دقیقی که در مسئلهٔ ۱۸ـ۱۱ داده شده است و قضیهٔ فاینمن‌ـهلمن، $\langle p^2\rangle$ و $\langle r^2\rangle$ را برای حالت پایهٔ نوسانگر ناهماهنگ به‌دست آورید.

۱۸ـ۱۴ بنابه اصل وردشی ریتز، مقدار انتظاری هامیلتونی H در یک حالت بهنجارشدهٔ اختیاری ψ از رابطهٔ زیر پیروی می‌کند

$$\langle\psi|H|\psi\rangle > E_0$$

که در آن E_0 کمترین ویژه‌مقدار H است. فرض کنید H یک ماتریس هرمیتی $N \times N$ با عناصر H_{ij} $(i, j = 1, 2, 3, \ldots, N)$ است و E_0 کمترین ویژه‌مقدار آن است. با انتخاب مناسب ψ، ثابت کنید E_0 از هر یک از عناصر قطری H_{ii} کوچکتر است.

۱۸ـ۱۵ دو ذرهٔ یکسان با اسپین ۱/۲ را در پتانسیل نوسانگر هماهنگ در نظر بگیرید، به‌طوری که هامیلتونی این دستگاه به‌صورت زیر است

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{4}m\omega^2(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2$$

فرض کنید تکانهٔ مرکز جرم این دستگاه دوذره‌ای صفر است و دو ذره در حالتهای $l = 0$ هستند.

www.arsanjan.blogfa.com

(الف) تابع موج حالت پایه حالت اسپین سه‌تایی را بنویسید.

(ب) اولین حالتهای برانگیخته را برحسب حالتهای اسپین تکتایی و سه‌تایی بنویسید.

(ج) فرض کنید برهم‌کنش کوتاه‌بردی میان این ذرات وجود دارد که می‌توان آن‌را در حالت $l = 0$ با $C[\delta(r)/r^2]$ تقریب گرفت. تأثیر این اختلال را روی حالتهای به‌دست آمده در قسمت (ب) محاسبه کنید.

مراجع

یک بحث بسیار جالب دربارهٔ طیف هلیم را می‌توان درکتاب زیر یافت

H A Bethe ane R W Jackiw, *Intermediate Quantum Mechanics*, W, A Benjamin, New York, 1968.

www.arsanjan.blogfa.com

۱۹

ساختار اتمها

تقریب هارتری

مسئلهٔ ویژه‌مقداری انرژی برای اتمی با Z الکترون به‌صورت زیر است

$$\left(\sum_{i=1}^{Z}\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m}-\frac{Ze^2}{r_i}+\sum_{i>j}\frac{e^2}{|\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j|}\right)\psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\ldots,r_Z)=E\psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\ldots,\mathbf{r}_Z) \quad (۱\text{-}۱۹)$$

که یک معادلهٔ دیفرانسیل جزئی در $3Z$ بعد است. برای اتمهای سبک می‌توان این معادله را با کامپیوتر حل کرد، اما این نوع راه‌حلها تنها برای متخصصان مفید است. بحث ما دربارهٔ ساختار اتمی در اینجا مبتنی بر رهیافت دیگری است. مانند مثال هلیم ($Z=2$)، در نظرگرفتن این مسئله به‌صورت مسئله‌ای شامل Z الکترون مستقل در یک پتانسیل منفرد، و منظور کردن برهم‌کنش الکترون-الکترون در مرحلهٔ بعد، هم عملی است و هم روشنگر. چنانکه دیدیم، نظریهٔ اختلال برای $Z=2$ مناسب است، اما با افزایش تعداد الکترونها اثرات استتار، که در نظریهٔ اختلال مرتبهٔ اول منظور نمی‌شوند، اهمیت بیشتری می‌یابند. اصل وردشی، که آن‌را در اواخر فصل ۱۸ بررسی کردیم، این حسن را دارد که تصویر تک‌ذره‌ای را حفظ می‌کند، و در عین حال توابع تک‌ذره‌ای را با در نظرگرفتن تصحیحات استتار به‌دست می‌دهد.

www.arsanjan.blogfa.com

برای به‌کار بردن اصل وردشی، فرض می‌کنیم تابع آزمون به‌صورت زیر است

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_Z) = \phi_1(\mathbf{r}_1)\phi_2(\mathbf{r}_2)\cdots\phi_Z(\mathbf{r}_Z) \qquad (۲_۱۹)$$

هر یک از توابع $\phi_i(\mathbf{r}_i)$ به ۱ بهنجار شده‌اند. اگر مقدار انتظاری H را در این حالت محاسبه کنیم، به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}\langle H\rangle = &\sum_{i=1}^{Z}\int d^3\mathbf{r}_i\phi_i^*(\mathbf{r}_i)\left(-\frac{h^2}{2m}\nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{r_i}\right)\phi_i(\mathbf{r}_i)\\ &+ e^2\sum_{i>j}\sum_j\int\int d^3\mathbf{r}_i d^3\mathbf{r}_j\frac{|\phi_i(\mathbf{r}_i)|^2|\phi_j(\mathbf{r}_j)|^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}\end{aligned} \qquad (۳_۱۹)$$

در روش وردشی $\phi_i(\mathbf{r}_i)$ها را به‌گونه‌ای انتخاب می‌کنیم که $\langle H\rangle$ کمینه شود. اگر بخواهیم $\phi_i(\mathbf{r}_i)$ها را توابع موج هیدروژنگونه، با مقادیرمختلف Z_i برای هر الکترون (و با هر الکترون در یک حالت کوانتومی متفاوت برای رعایت اصل طرد پاؤلی) بگیریم، مجموعه‌ای از معادله‌هایی مانند ۱۸ـ۵۱ و ۱۸ـ۵۲ به‌دست می‌آوریم. یک رهیافت کلی‌تر تقریب هارتری است. اگر $\phi_i(\mathbf{r}_i)$ها توابع موج تک‌ذره‌ایی باشند که $\langle H\rangle$ را کمینه می‌کنند، آنگاه یک وردش بینهایت کوچک در این توابع،

$$\phi_i(\mathbf{r}_i) \to \phi_i(\mathbf{r}_i) + \lambda f_i(\mathbf{r}_i) \qquad (۴_۱۹)$$

$\langle H\rangle$ را تنها به‌اندازهٔ جمله‌ای از مرتبهٔ λ^2 تغییر خواهد داد. این وردشها باید به‌گونه‌ای باشند که

$$\int d^3\mathbf{r}_i|\phi_i(\mathbf{r}_i) + \lambda f_i(\mathbf{r}_i)|^2 = 1 \qquad (۵_۱۹)$$

یعنی تا مرتبهٔ اول برحسب λ داریم

$$\int d^3\mathbf{r}_i[\phi_i^*(\mathbf{r}_i)f_i(\mathbf{r}_i) + \phi_i(\mathbf{r}_i)f_i^*(\mathbf{r}_i)] = 0 \qquad (۶_۱۹)$$

اکنون جمله‌های خطی برحسب λ ناشی از جاگذاری ۱۹ـ۴ در ۱۹ـ۳ را محاسبه می‌کنیم. جمله

به جمله، به‌دست می‌آوریم www.arsanjan.blogfa.com

$$\sum_i \int d^3r_i \left[\phi_i^*(\mathbf{r}_i)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2\right)\lambda f_i(\mathbf{r}_i) + \lambda f_i^*(\mathbf{r}_i)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2\right)\phi_i(\mathbf{r}_i)\right] \tag{۷ـ۱۹}$$

$$= \lambda \sum_i d^3\mathbf{r}_i \left\{ f_i(\mathbf{r}_i)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2\phi_i^*(\mathbf{r}_i)\right] + f_i^*(\mathbf{r}_i)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2\phi_i(\mathbf{r}_i)\right]\right\}$$

برای به‌دست آوردن این نتیجه، دوبار انتگرال جزء به جزء گرفته‌ایم و از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که $f_i(\mathbf{r}_i)$ باید در بینهایت صفر شود تا وردش قابل‌قبولی برای تابع انتگرال‌پذیر مجذوری باشد. سپس داریم

$$-\lambda \sum_i \int d^3\mathbf{r}_i \left[f_i^*(\mathbf{r}_i)\frac{Ze^2}{r_i}\phi_i(\mathbf{r}_i) + \phi_i^*(\mathbf{r}_i)\frac{Ze^2}{r-i}f_i(\mathbf{r}_i)\right] \tag{۸ـ۱۹}$$

و سرانجام،

$$\lambda e^2 \sum_{i>j}\sum_j \int d^3\mathbf{r}_i \int d^3\mathbf{r}_j \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}\{[f_i^*(\mathbf{r}_i)\phi_i(\mathbf{r}_i) + f_i(\mathbf{r}_i)\phi_i^*(\mathbf{r}_i)]|\phi_j(\mathbf{r}_j)|^2$$
$$+ [f_j^*(\mathbf{r}_j)\,\phi_j(\mathbf{r}_j) + f_j(\mathbf{r}_j)\,\phi_j^*(\mathbf{r}_j)]\phi_i(\mathbf{r}_i)|^2\} \tag{۹ـ۱۹}$$

نمی‌توان این سه جمله را صرفاً با هم جمع کرد و این مجموع را برابر با صفر قرار داد، زیرا $f_i(\mathbf{r}_i)$ها تحت قید ۱۹ـ۶ هستند. راه مناسب برای منظور کردن این قید استفاده از ضرایب لاگرانژ است، یعنی هر یک از رابطه‌های قیدی ۱۹ـ۶ را در یک ثابت ("ضریب") ضرب می‌کنیم و مجموع اینها را به سه جملهٔ قبل اضافه می‌کنیم. اکنون می‌توان این مجموع جدید را برابر صفر قرار داد، زیرا قیدهای روی $f_i(\mathbf{r}_i)$ها به‌حساب آمده‌اند. با کمی آینده‌نگری در نمادنگاری، ضرایب را با $-\epsilon_i$ نشان می‌دهیم، و در نتیجه به‌دست می‌آوریم

$$\sum_i \int d^3\mathbf{r}_i \left\{ f_i^*(\mathbf{r}_i)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2\phi_i(\mathbf{r}_i)\right] - f_i^*(\mathbf{r}_i)\frac{Ze^2}{r_i}\phi_i(\mathbf{r}_i)\right\}$$
$$+ e^2 \sum_{i\neq j}\sum_j \int\int d^3\mathbf{r}_i d\ \mathbf{r}_j f_i^*(\mathbf{r}_i)\frac{|\phi_j(\mathbf{r}_j)|^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}\phi_i(\mathbf{r}_i) \tag{۱۰ـ۱۹}$$
$$- \epsilon_i \int d^3r_i f_i^*(\mathbf{r}_i)\,\phi_i(\mathbf{r}_i) + (\text{جملهٔ همیوغ مختلط}) = 0$$

در به دست آوردن سطر دوم، ابتدا جمع دوگانهٔ $\sum_{i}\sum_{j}$ را به $\sum_{i\neq j}\sum_{j}$ (۱/۲) تبدیل کرده‌ایم، که قیدی روی آن نیست مگر این شرط که باید $i \neq j$، و سپس از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که جملهٔ زیر انتگرال در ۱۹ـ۹ نسبت به i و j متقارن است. اکنون $f_i(\mathbf{r}_i)$ها کاملاً بدون قید هستند، و در نتیجه می‌توان $f_i(\mathbf{r}_i)$ و $f_i^*(\mathbf{r}_i)$ را کاملاً مستقل از یکدیگر در نظر گرفت (هر یک از آنها یک قسمت حقیقی و یک قسمت انگاری دارد). علاوه بر این، آنها کاملاً اختیاری هستند بجز اینکه باید انتگرالپذیر مجذوری باشند، و در نتیجه برای اینکه ۱۹ـ۱۰ برقرار باشد باید ضرایب مربوط به $f_i(\mathbf{r}_i)$ و $f_i^*(\mathbf{r}_i)$ جداگانه در هر نقطهٔ $\mathbf{r}_i$ صفر شوند، زیرا می‌توان وردشهای موضعی در توابع $f_i(\mathbf{r}_i)$ و $f_i^*(\mathbf{r}_i)$ ایجاد کرد. بدین‌ترتیب، به رابطهٔ زیر می‌رسیم

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{r_i} + e^2\sum_{j\neq i}\int d^3\mathbf{r}_j\frac{|\phi_j(\mathbf{r}_j)|^2}{|\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j|}\right]\phi_i(\mathbf{r}_i) = \epsilon_i\phi_i(\mathbf{r}_i) \qquad (۱۹ـ۱۱)$$

و رابطهٔ همیوغ مختلط آن.

معادلهٔ ۱۹ـ۱۱ تعبیر روشنی دارد: این معادله عبارت است از یک معادلهٔ ویژه‌مقداری انرژی برای الکترون "i" واقع در $\mathbf{r}_i$ که در پتانسیل زیر حرکت می‌کند

$$V_i(\mathbf{r}_i) = -\frac{Ze^2}{r_i} + e^2\sum_{j\neq i}\int d^3\mathbf{r}_j\frac{|\phi_j(\mathbf{r}_j)|^2}{|\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j|} \qquad (۱۹ـ۱۲)$$

که تشکیل شده است از یک پتانسیل جاذبهٔ کولنی ناشی از هسته‌ای با بار Z و یک پتانسیل دافعه ناشی از چگالی بار تمام الکترونهای دیگر. البته چگالیهای بار

$$\rho_j(\mathbf{r}_j) = -e|\phi_j(\mathbf{r}_j)|^2 \qquad (۱۹ـ۱۳)$$

مربوط به تمام الکترونهای دیگر را نمی‌دانیم، و از این‌رو باید یک مجموعهٔ خودسازگار از $\phi_i(\mathbf{r}_i)$ها به‌دست آوریم که با جاگذاری آنها در پتانسیل بالا به ویژه‌تابعهایی برسیم که خودشان را باز تولید می‌کنند. معادلهٔ ۱۹ـ۱۱ معادلهٔ انتگرالی نسبتاً پیچیده‌ای است، اما هر چه باشد دست‌کم یک معادلهٔ سه‌بعدی است (و می‌توان در آن متغیر $\mathbf{r}_i$ را با $\mathbf{r}$ تعویض کرد) و این محاسبهٔ عددی را بسیار ساده‌تر می‌کند، و حتی از این هم ساده‌تر خواهد شد اگر به‌جای $V_i(\mathbf{r})$ متوسط زاویه‌ای آن‌را قرار دهیم:

$$V_i(r) = \int\frac{d\Omega}{4\pi}V_i(\mathbf{r}) \qquad (۱۹ـ۱۴)$$

زیرا پتانسیل خودسازگار با این تعویض مرکزی می‌شود، و می‌توان جوابهای خودسازگار را به توابع

www.arsanjan.blogfa.com

www.arsanjan.blogfa.com

زاویه‌ای و شعاعی تجزیه کرد، یعنی توابعی که می‌توان با n_i، l_i، m_i و σ_i، که این یکی به حالت اسپینی (با $s_{iz} = \pm 1/2$) مربوط می‌شود، مشخص کرد.

در تابع‌موج آزمونی ۱۹ـ۲ اصل طرد منظور نشده است. این اصل نقش مهمی دارد، زیرا اگر تمام الکترونها می‌توانستند در حالت کوانتومی یکسان باشند انرژی وقتی کمینه می‌شد که تمام الکترونها در "اوربیتال" $n = 1$، $l = 0$ باشند. اتمها چنین ساختار ساده‌ای ندارند. برای به‌حساب آوردن اصل طرد، به توابع موج آزمونی ۱۹ـ۲ قاعدهٔ زیر را اضافه می‌کنیم: اگر حالتهای اسپینی در نشانگذاری دخالت داشته باشند، هر الکترون باید در حالت متفاوتی باشد. یک راه پیچیده‌تر برای منظور کردن خودبه‌خود اصل طرد این است که به‌جای ۱۹ـ۲ از یک تابع‌موج آزمونی به‌صورت دترمینان اسلیتر (رابطهٔ ۸ـ۶۰) استفاده کنیم. تفاوت معادله‌های حاصل با ۱۹ـ۱۱ در اضافه شدن یک جملهٔ تبادلی است. معادله‌های جدید هارتری‌ـفوک دارای ویژه‌مقدارهایی هستند که، به دلیل وضعیت ناشی از اصل طرد، ۱۰ تا ۲۰ درصد با ویژه‌مقدارهای حاصل از معادله‌های هارتری تفاوت دارند. بحث دربارهٔ فیزیک ساختار اتمی با استفاده از دیدگاه هارتری کمی آسانتر است، و از این‌رو معادله‌های هارتری‌ـفوک را بررسی نخواهیم کرد.

پتانسیل ۱۹ـ۱۴ دیگر به‌صورت $1/r$ نیست، و در نتیجه برای هیچ یک از حالتها با یک مقدار معین n و $l \leq n - 1$ دیگر واگنی نخواهیم داشت. اما می‌توان پیش‌بینی کرد، دست‌کم برای Zهای کوچک، که شکافتگی به‌ازای مقادیر مختلف l با یک مقدار معین n کوچکتر از شکافتگی به‌ازای مقادیر مختلف n خواهد بود، و در نتیجه الکترونهای واقع در اوربیتالهای $1s$، $2s$، $2p$، $3s$، $3p$، $3d$، $4s$، $4p$، $4d$، $4f$، ... متوالیاً بستگی ضعیفتری خواهند داشت.[۱] اثرات استتار این وضعیت را تشدید می‌کنند: در حالی‌که اوربیتالهای s به‌طور قابل‌ملاحظه‌ای در ناحیهٔ rهای کوچک واقع می‌شوند، و از این‌رو تحت جاذبهٔ هسته‌ای کامل قرار دارند، اوربیتالهای p، d، ... را سد مرکزگریزی به‌خارج می‌راند، و تحت جاذبه‌ای کمتر از جاذبهٔ کامل هستند. این اثر چنان شدید است که سبب می‌شود انرژی الکترونهای $3d$ بسیار نزدیک به انرژی الکترونهای $4s$ باشد، و در نتیجه ترتیب پیش‌بینی شده گاهی به‌هم می‌خورد. همین وضعیت برای الکترونهای $4d$ و $5s$، الکترونهای $4f$ و $6s$، و غیره نیز صادق است. چنانکه در بحث جدول تناوبی خواهیم دید، وقتی به مقادیر بزرگتر Z می‌رسیم غلبهٔ وابستگی به l بر وابستگی به n اهمیت بیشتری می‌یابد.

تعداد الکترونهایی که می‌توانند در اوربیتالهای مربوط به یک زوج معین (n, l) قرار گیرند $2(2l + 1)$ است، زیرا به‌ازای یک مقدار معین m هر الکترون می‌تواند دو حالت اسپینی داشته باشد. وقتی تمام این $2(2l + 1)$ حالت پر شدند، می‌گوییم یک پوستهٔ بسته داریم. چگالی بار

---

۱. این نمادنگاری همان است که برای هیدروژن به‌کار می‌رود. یک نمادنگاری گویاتر، که فیزیکدانهای هسته‌ای ساختار پوسته‌ای به‌کارمی‌برند، قرار دادن $n - l$ به‌جای n است که دقیقاً شاخصی است که ترتیب مربوط به یک حالت معین l را نشان می‌دهد. بنابراین، به‌جای شروع از حالتهای $3d$، برای مثال، بهتر است که پایینترین حالت d را حالت $1d$ بنامیم، و غیره. با این همه، باز هم از همان نمادنگاری مرسوم استفاده خواهیم کرد، اگرچه مقدار n کار چندانی با ترتیب ترازهای اتمهای بزرگ‌ـZ ندارد.

www.arsanjan.blogfa.com

برای یک پوستهٔ بسته به‌صورت

$$-e\sum_{m=-l}^{l}|R_{nl}(r)|^2|Y_{lm}(\theta,\phi)|^2 \qquad (۱۵_۱۹)$$

است که تقارن کروی دارد، زیرا هماهنگهای کروی دارای این خاصیت‌اند که

$$\sum_{m=-l}^{l}|Y_{lm}(\theta,\phi)|^2=\frac{2l+1}{4\pi} \qquad (۱۶_۱۹)$$

اصل تشکیل

در این بخش دربارهٔ تشکیل اتمها با افزودن تدریجی الکترونها به هسته بحث، که نقش آن با تقریب خوب تنها فراهم آوردن بار مثبت Ze است، بحث می‌کنیم

هیدروژن ($Z=1$). در اینجا فقط یک الکترون داریم، و پیکربندی حالت پایه ($1s$) است. انرژی یونش برابر است با ۱۳٫۶eV، و انرژی لازم برای برانگیختن به اولین حالت بالای حالت پایه ۱۰٫۲eV است. شعاع اتم ۰٫۵Å است، و توصیف طیف نمایی آن $^2S_{1/2}$ است.

هلیم ($Z=2$). پایینترین حالت دو الکترونی، چنانکه در فصل ۱۸ دیدیم، حالتی است که در آن هر دو الکترون در اوربیتال ($1s$) هستند. این پیکربندی را با $(1s)^2$ نشان می‌دهیم. در نمادنگاری طیف نمایی، حالت پایه یک حالت تکتایی اسپینی $l=0$، یعنی $^1S_0$، است زیرا با اثر تبادل سازگار است. انرژی بستگی کل برابر است با 79eV. پس از جدا شدن یک الکترون، الکترون باقی‌مانده در اوربیتال ($1s$) حول هستهٔ $Z=2$ خواهد بود. بنابراین، انرژی بستگی آن برابر است با $13.6Z^2\text{eV}=54.4\text{eV}$. بدین‌ترتیب، انرژی لازم برای جدا کردن اولین الکترون، انرژی یونش، برابر است با $24.6\text{eV}-54.4=-0.79$. یک براورد تقریبی از انرژی اولین حالت برانگیخته، با پیکربندی $(1s)(2s)$، از رابطهٔ زیر به‌ازای $Z=2$ و $n=2$ به‌دست می‌آید

$$-13.6Z^2-13.6(Z-1)^2/n^2\approx-58\text{ eV}$$

در این رابطه استتار در جملهٔ دوم منظور شده است. بنابراین، انرژی برانگیختگی عبارت است از $21\text{eV}\approx 58\text{eV}-79\text{eV}$.[۲] بدین‌ترتیب، در هر واکنشی با یک مادهٔ دیگر، حدود 20eV برای بازآرایی الکترونها لازم می‌شود، و از این‌رو هلیم به لحاظ شیمیایی بسیار غیرفعال است. تمام اتمهایی که الکترونهای آنها پوسته‌های بسته می‌سازند همین ویژگی را دارند، اما انرژی لازم

---

۲. این یک براورد خام است که در آن از دافعهٔ الکترون-الکترون و اثرات تبادل صرفنظر شده‌اند. اختلاف 21eV و 24.6eV بین ۴ تا ۵ الکترون ولت است که وقتی اتم برانگیخته به حالت پایهٔ خود افت می‌کند آزاد می‌شود (شکل ۱۸_۲ب).

www.arsanjan.blogfa.com

مخصوصاً برای هلیم زیاد است.

لیتیم ($Z = ۳$). اصل طرد پیکربندی $(۱s)^۲$ را ممنوع می‌کند، و پیکربندی الکترونی با کمترین انرژی $(۱s)^۲(۲s)$ است. بنابراین، به پوستهٔ بسته یک الکترون می‌افزاییم، و چون این پوسته در حالت ${}^۱S_۰$ است، توصیف طیف نمایی حالت پایه، درست مانند مورد هیدروژن، ${}^۲S_{۱/۲}$ است. اگر استتار کامل بود، انرژی بستگی $-۳٫۴\text{eV}$ می‌شد (زیرا $n = ۲$). استتار کامل نیست، و مخصوصاً چون الکترون ظرفیت خارجی در حالت s است، تابع‌موج آن همپوشی قابل‌ملاحظه‌ای با هسته در $r = ۰$ دارد. می‌توان بار مؤثر را از انرژی یونش اندازه‌گیری شدهٔ $۵٫۴\text{eV}$ براورد کرد، و نتیجه عبارت است از $Z^* = ۱٫۳$. برای برانگیختن اتم لیتیم به انرژی بسیار کمی نیاز داریم. شش حالت الکترونی $(۲p)$ درست کمی بالاتر از حالت $(۲s)$ قرار می‌گیرند، و این حالتهای $(۲p)$ وقتی اشغال شوند اتم را از لحاظ شیمیایی فعال می‌کنند (بحث گسترده‌تر مربوط به کربن را ببینید). لیتیم، مانند هر عنصر دیگری که یک الکترون در خارج از پوستهٔ بسته دارد، عنصر بسیار فعالی است.

بریلیم ($Z = ۴$). مکان طبیعی برای الکترون چهارم فضای خالی در اوربیتال $(۲s)$ است، و در نتیجه پیکربندی به‌صورت $(۱s)^۲(۲s)^۲$ خواهد بود. باز هم یک پوستهٔ بسته داریم و نمادنگاری طیف نمایی ${}^۱S_۰$ است. تا آنجا که به انرژی مربوط می‌شود، وضعیت بسیار شبیه به مورد هلیم است. اگر استتار کامل بود، انتظار یک انرژی بستگی مانند انرژی بستگی هلیم را داشتیم، زیرا الکترونهای داخلی بار مؤثر را به‌مقداری مانند $Z = ۲$ کاهش می‌دهند. چون $n = ۲$، انرژی یونش $۲۴٫۶n^۲ = ۶٫۲\text{eV}$ را باید پیش‌بینی کنیم. وضعیت استتار تا اندازه‌ای مانند مورد لیتیم است، و اگر برای انرژی بستگی افزایشی حدود ۵۰ درصد حدس بزنیم تقریباً مقدار ۹eV به‌دست می‌آوریم. مقدار تجربی $۹٫۳\text{eV}$ است. اگرچه پوسته بسته است، برانگیزش یکی از الکترونها به اوربیتال $(۲p)$ به انرژی چندان زیادی احتیاج ندارد. بنابراین، در حضور یک عنصر دیگر بازآرایی الکترونها می‌تواند انرژی کافی برای شکستن پوستهٔ بسته فراهم کند. در نتیجه، پیش‌بینی می‌کنیم که بریلیم به‌اندازهٔ هلیم خنثی نباشد. واقعیت این است که به‌طور کلی اتمهایی که در آنها اسپینهای الکترونهای خارجی در حالتهای تکتایی "جفت‌شده"اند کمتر واکنش‌پذیر هستند.

بور ($Z = ۵$). پس از بسته شده پوستهٔ $(۲s)$، الکترون پنجم می‌تواند یا به اوربیتال $(۳s)$ برود یا به اوربیتال $(۲p)$. اوربیتال $(۲p)$ از لحاظ انرژی پایینتر است، و در نتیجه پوستهٔ $(۲p)$ از بور به بعد شروع به پر شدن می‌کند. پیکربندی به‌صورت $(۱s)^۲(۲s)^۲(۲p)$ و نمادنگاری طیف نمایی این حالت ${}^۲P_{۱/۲}$ است. این مورد نیاز به توضیح دارد: اگر اسپین ۱/۲ را به حالت مداری $l = ۱$ اضافه کنیم، مقدار J می‌تواند ۳/۲ یا ۱/۲ باشد. این حالتها با برهم‌کنش اسپین-مدار زیر شکافته شده‌اند

$$\frac{۱}{۲m^۲c^۲}\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}\frac{۱}{r}\frac{dV(r)}{dr} = \frac{۱}{۴m^۲c^۲}[J(J+۱) - L(L+۱) - S(S+۱)]\frac{۱}{r}\frac{۱dV}{dr} \qquad (۱۷\text{-}۱۹)$$

www.arsanjan.blogfa.com

که نتیجهٔ آن انرژی بیشتر l است تا مقدار انتظاری $(1/r)(dV/dr)$ باز هم مثبت است، اگرچه دیگر با مقدار رابطهٔ ۱۷ـ۱۶ برابر نیست. این نتیجه بستگی به این دارد که پوسته تا چه حد پر شده باشد، که مشخصاً با قاعده‌های هوند داده می‌شود. این قاعده‌ها را در بخش بعد بررسی می‌کنیم. انرژی یونش برابر است با ۸٫۳eV، که با این پیش‌بینی که این انرژی باید اندکی کمتر از انرژی یونش بریلیم باشد، زیرا انرژی حالت $2p$ تا اندازه‌ای بیشتر از انرژی اوربیتال $2s$ است، توافق دارد.

کربن $(Z = 6)$. پیکربندی برای کربن به‌صورت $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$ است. دو الکترون آخر می‌توانستند در یک حالت p، با یک زوج اسپین بالاـپایین، باشند. اما برای این الکترونها بهتر این است که سر راه یکدیگر قرار نگیرند و در نتیجه دافعهٔ بین آنها کاهش یابد. این کار شدنی است زیرا حالتهای ممکن $l = 1$ (یعنی Y_{11}، Y_{10} و Y_{1-1}) ترکیبهای خطی $\sin\theta\ \cos\phi$، $\sin\theta\ \sin\phi$ و $\cos\theta$ را، که به‌ترتیب با محورهای x، y و z همراستا هستند، امکانپذیر می‌سازند. وقتی دو الکترون در بازوهای متعامد قرار می‌گیرند، همپوشی کمینه می‌شود و دافعه کاهش می‌یابد. این الکترونها در حالتهای فضایی مختلفی هستند، و در نتیجه لازم نیست اسپینهای آنها پادموازی باشند. شاید انتظار داشته باشیم که کربن دوظرفیتی باشد. اما به دلیل ظرافتهای ناشی از ترازهای انرژی کم‌فاصله چنین نیست. برای بردن یکی از الکترونهای $(2s)$ به سومین حالت اشغال‌نشدهٔ $l = 1$ انرژی بسیار کمی لازم است. پیکربندی $(1s)^2(2s)^2(2p)^3$ چهار الکترون "جفت‌نشده" دارد، و انرژی حاصل از تشکیل چهار پیوند با اتمهای دیگر بیش از انرژی لازم برای برانگیختن الکترون $(2s)$ است. کاهش دافعه باعث انرژی یونش بیشتری نسبت به بور می‌شود: ۱۱٫۳eV. توصیف طیف نمایی حالت پایه $^3P_0$ است. اسپین کل دو الکترون $2p$ می‌تواند ۰ یا ۱ باشد، و چون دو حالت $l = 1$ را جمع می‌کنیم تکانهٔ زاویه‌ای مداری کل می‌تواند ۰، ۱ یا ۲ باشد. از حالتهای مختلف، $^1S_0$، $^3P_{2,1,0}$ و $^1D_2$، حالتی که اسپین بزرگتری دارد دارای انرژی کمتری است (به بحث مربوط به هلیم مراجعه کنید) و بنابه یکی دیگر از قاعده‌های هوند انرژی حالت $^3P_0$ از همه کمتر است.

نیتروژن $(Z = 7)$. در اینجا پیکربندی $(1s)^2(2s)^2(2p)^3$ است، که گاهی برای اختصار با $(2p)^3$ توصیف می‌شود (پوسته‌ها و زیرپوسته‌های بسته حذف می‌شوند). سه الکترون آخر می‌توانند همگی در حالتهای ناهمپوش p باشند، و از این‌رو انتظار داریم افزایش انرژی یونش برابر با افزایش از بور به کربن باشد، و این با مقدار اندازه‌گیری شدهٔ ۱۴٫۵eV توافق دارد.

اکسیژن $(Z = 8)$. پیکربندی را می‌توان به‌صورت مختصر $(2p)^4$ نوشت، و بیشتر از نصف پوسته پر است. چون در اینجا چهار الکترون وجود دارند، به نظر می‌رسد که تعیین وضعیت طیف نمایی حالت پایه بسیار مشکل باشد. اما می‌توان به‌صورت دیگر به این پوسته نگریست. می‌دانیم که اگر دو الکترون دیگر اضافه کنیم تا یک پیکربندی $(2p)^6$ به‌وجود آید پوسته پر می‌شود، و برای حالت کل داریم $L = S = 0$. بنابراین، می‌توان اکسیژن را به صورت یک پوستهٔ بستهٔ $2p$ با دو

www.arsanjan.blogfa.com

حفره در آن در نظر گرفت. این حفره‌ها رفتاری مانند الکترون دارند، و می‌توان پیکربندیهای دوحفره‌ای را بررسی کرد. این پیکربندی همان پیکربندی دوالکترونی است زیرا اسپین حفره‌ها نیز ۱/۲ است. بنابراین، مانند مورد کربن، حالتهای ممکن که با پادتقارن تابع‌موج دو فرمیونی (دوحفره‌ای) سازگار هستند عبارت‌اند از ^1S، ^3P و ^1D، و آن چهار الکترون باید در حالتهای یکسان باشند، زیرا همراه با دستگاه دوحفره‌ای مقادیر $S = 0$ و $L = 0$ را می‌دهند. بیشترین اسپین عبارت است از $S = 1$، و از این‌رو باید یک حالت ^3P داشته باشیم. قاعدهٔ هوند، که در بخش بعد به آن می‌پردازیم حالت $^3P_2$ را می‌دهد. وقتی الکترون چهارم به پیکربندی نیتروژن اضافه شد باید به اوربیتالی با یک مقدار m برود که قبلاً اشغال شده است. در نتیجه دو تا از توابع موج الکترونی روی هم می‌افتند، و این به واسطهٔ دافعه باعث زیاد شدن انرژی می‌شود. بنابراین، تعجب‌آور نیست که انرژی یونش به ۱۳٫۶eV کاهش می‌یابد.

فلوئور ($Z = 9$). در اینجا پیکربندی به‌صورت $(2p)^5$ است. افزایش یکنوای انرژی یونش از سر گرفته می‌شود: مقدار تجربی ۱۷٫۴eV است. فلوئور به لحاظ شیمیایی بسیار فعال است، زیرا می‌تواند یک الکترون "بگیرد" و یک پوستهٔ بسته، $(2p)^6$، تشکیل دهد که بسیار پایدار است. چون اضافه کردن یک الکترون با $s = 1/2$ و $l = 1$ یک حالت $^1S_0$ می‌سازد، پوسته با حفرهٔ موجود در آن باید دارای $s = 1/2$ و $l = 1$ باشد. بنابراین، یک حالت ^2P داریم و بنابه قاعدهٔ هوند، چنانکه خواهیم دید، این حالت $^2P_{3/2}$ است.

نئون ($Z = 10$). با $Z = 10$ پوستهٔ $(2p)$ پر است، و تمام الکترونها جفت‌شده هستند. انرژی یونش برابراست با ۲۱٫۶eV، که نشان می‌هد روند یکنوا ادامه دارد. در اینجا، همچون در هلیم، اولین حالت اشغال‌نشده‌ای که یک الکترون می‌تواند به آن برانگیخته شود حالتی است که n بزرگتری داشته باشد، و از این‌رو انرژی بسیارزیادی برای مختل کردن اتم لازم است. نئون، مانند هلیم، یک گاز بی‌اثر است.

در این مرحله، برای اضافه کردن یک الکترون دیگر باید به مداری با یک n بزرگتر ($n = 3$) برویم. بنابراین، نئون نیز مانند هلیم نشانهٔ پایان یک دوره در جدول تناوبی است. دورهٔ بعد نیز هشت عنصر دارد. ابتدا پوستهٔ $(3s)$، با سدیم ($Z = 11$) و منیزیم ($Z = 12$)، پر می‌شود و سپس پوستهٔ $3p$، که به‌ترتیب آلومینیم ($Z = 13$)، سیلیسیم ($Z = 14$)، فسفر ($Z = 15$)، گوگرد ($Z = 16$)، کلر ($Z = 17$) و آرگون ($Z = 18$)، با پوستهٔ بسته، را دربردارد. این عناصر به لحاظ شیمیایی بسیار شبیه به رشتهٔ لیتیم، ...، نئون هستند و حالتهای پایهٔ آنها همان توصیف طیف نمایی را دارند. تنها تفاوت در این است که، چون $n = 3$، انرژیهای یونش آنها با توجه به جدول تناوبی در آخر این فصل تا اندازه‌ای کمترند.

ممکن است کمی عجیب به‌نظر برسد که این دوره به آرگون ختم می‌شود، زیرا پوستهٔ $(3d)$، شامل ده عنصر، هنوز پر نشده است. واقعیت این است که پتانسیل خودسازگار به‌صورت $1/r$ نیست، و شکافتگی درون‌پوسته‌ای در اینجا به‌اندازهٔ کافی بزرگ است که بتواند حالت $(4s)$ را، هر چند به مقدار کم، پایینتر از حالت $(3d)$ قرار دهد. بنابراین، رقابتی به‌وجود می‌آید، و در دورهٔ

www.arsanjan.blogfa.com

بعد به‌ترتیب داریم $(4s)$، $(4s)^2$، $(4s)^2(3d)$، $(4s)^2(3d)^2$، $(4s)^2(3d)^3$، $(4s)(3d)^5$، $(4s)^2(3d)^5$، $(4s)^2(3d)^6$، $(4s)^2(3d)^7$، $(4s)^2(3d)^8$، $(4s)(3d)^{10}$، $(4s)^2(3d)^{10}$ و آنگاه پوستهٔ $4p$ شروع به پر شدن می‌کند تا اینکه دوره با کریپتون ($Z = 36$) به پایان می‌رسد. خواص شیمیایی عناصر در شروع و پایان این دوره شبیه به خواص عناصر در شروع و پایان دوره‌های دیگر است. برای مثال، پتاسیم با تک الکترون $(4s)$ مانند سدیم با تک‌الکترون $(3s)$ در خارج از یک پوستهٔ بسته، فلزات قلیایی هستند. برم با پیکربندی $(4s)^2(3s)^{10}(4p)^5$ یک حفره در پوستهٔ p دارد و در نتیجه به لحاظ شیمیایی مانند کلر و فلوئور است. رشتهٔ عناصری که در آنها حالتهای $(3d)$ در حال پرشدن هستند همگی خواص شیمیایی نسبتاً مشابهی دارند، و علت آن باز هم به جزئیات پتانسیل خودسازگار مربوط می‌شود. شعاع این مدارها[۳] اندکی کوچکتر از شعاع مدار الکترونهای $(4s)$ است، و در نتیجه وقتی پوستهٔ $(4s)^2$ پر است این الکترونها الکترونهای $(3d)$ را، به هر تعداد هم که باشند، در برابر تأثیرات خارجی محافظت می‌کنند. وقتی پوستهٔ $(4f)$، درست پس از اینکه پوستهٔ $(6s)$ پر شد، در حال پر شدن است، همین اثر روی می‌دهد. عناصر مربوط به این مورد را خاکهای کمیاب می‌نامند.

توصیف طیف نمایی حالتهای پایه

در بررسی اتمهای سبک غالباً توصیف طیف نمایی حالتهای پایه، به‌عنوان مثال $^3P_2$ برای اکسیژن، $^2P_{3/2}$ برای فلوئور، و غیره را بیان کردیم. دانستن S، L و J برای حالتهای پایه اهمیت دارد، زیرا قاعده‌های گزینش تعیین این کمیتها را برای حالتهای برانگیختهٔ اتمها امکانپذیر می‌سازند. در تعیین این حالتها از قاعده‌های هوند نام بردیم، و این قاعده‌ها موضوع بحث این بخش هستند.

آنچه اعداد کوانتومی حالت پایه را تعیین می‌کند تأثیر متقابل جفت‌شدگی اسپین-مدار و اثر تبادل است که در ارتباط با هلیم در فصل ۱۸ بیان کردیم. برای اتمهای سبکتر ($Z < 40$)، که در آنها حرکت الکترونها غیرنسبیتی است، اثرات دافعهٔ الکترون-الکترون مهمتر از جفت‌شدگی اسپین-مدار هستند. بنابراین، با تقریب بسیار خوب می‌توان L و S را جداگانه اعداد کوانتومی خوب در نظر گرفت: تمام اسپینها را با هم جمع می‌کنیم تا یک S به‌دست آید و تمام تکانه‌های زاویه‌ای مداری الکترونها را با هم جمع می‌کنیم تا یک L به‌دست آید و آنگاه از جفت‌شدن این دو یک J کل به‌دست می‌آید. برای اتمهای سنگینتر، تقریب بهتر این است که ابتدا اسپین و تکانهٔ زاویه‌ای مداری یک الکترون را با هم جفت کنیم تا یک تکانهٔ زاویه‌ای کل برای آن الکترون به‌دست آید، و سپس تمام این Jها را با هم جفت می‌کنیم. مورد اول را جفت‌شدگی راسل-ساندرز و مورد دوم را جفت‌شدگی j-j می‌نامند. فریدریش هوند برای جفت‌شدگی راسل-ساندرز نتایج محاسبات

---

۳. بدیهی است که منظور از مدار صرفاً جایی است که توزیع بار دارای قله است.

www.arsanjan.blogfa.com

مختلف را در مجموعه‌ای از قاعده‌های ساده یکی کرد که اعداد کوانتومی کل را برای پایینترین حالتها تعیین می‌کنند. این قاعده‌ها عبارت‌اند از

۱. حالتی که دارای بزرگترین S است از همه پایینتر قرار می‌گیرد.

۲. برای یک مقدار معین S، حالتی که بزرگترین L را دارد از همه پایینتر است.

۳. به‌ازای مقادیر معین S و L، اگر پوستهٔ ناکامل بیش از نیمه پر نباشد پایینترین حالت دارای مقدار کمینهٔ $J = |L - S|$ است؛ اگر این پوسته بیشتر از نیمه پر باشد حالت کمترین انرژی دارای $J = L + S$ است.

در به کار بردن این قاعده‌ها، اصل پاؤلی نباید نقض شود.

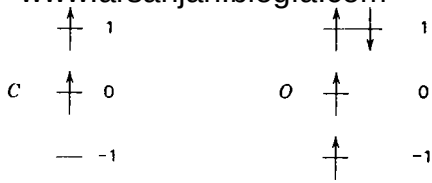
اولین قاعدهٔ هوند به‌آسانی قابل درک است: حالت مربوط به بزرگترین S نسبت به تمام اسپینها متقارن است (زیرا شامل حالت $S_z = S_{\max}$ می‌شود که برای آن تمام اسپینها موازی هستند) و در نتیجه تابع موج فضایی پادمتقارن است، که همپوشی الکترونی و از این‌رو مقدار انتظاری پتانسیلهای دافعه را کمینه می‌کند.

قاعدهٔ دوم به‌طور کیفی ناشی از این واقعیت است که هر چه مقدار L بزرگتر باشد تابع‌موج، چنانکه در شکل ۱۲ـ۳ نشان داده شده است، از قطعه‌های بیشتری تشکیل می‌شود. این به الکترونها امکان می‌دهد که دور از یکدیگر قرار گیرند، و اثر دافعهٔ کولنی را کاهش می‌دهد.

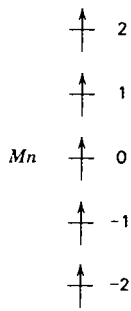
قاعدهٔ سوم پیامد جفت‌شدگی اسپین‌ـمدار است. چون مقدار انتظاری $[(1/r)dV(r)/dr]$ مثبت است، اختلال ناشی از جفت‌شدگی اسپین‌ـمدار باعث می‌شود حالتهای واگن J (به‌ازای مقادیر معین L و S) تفکیک شوند، و از ۱۹ـ۱۷ واضح است که کمترین مقدار J پایینترین حالت را تعیین می‌کند. وقتی به مرحله‌ای برسیم که پوسته‌ای داشته باشیم که بیشتر از نصف پر باشد، بهتر است اتم را دارای یک پوستهٔ پر با تعدادی حفره درنظر بگیریم، چنانکه در توصیف اکسیژن گفتیم. این حفره‌ها به‌گونه‌ای رفتار می‌کنند که انگار بار مثبت دارند، و برای برهم‌کنش اسپین‌ـمدارِ حفره‌ها علامت $[(1/r)dV(r)/dr]$ عوض می‌شود. بنابراین، چندتایی وارون می‌شود، یعنی در اینجا بزرگترین مقدار J پایینترین حالت را به‌دست می‌دهد.

کاربرد قاعده‌های هوند در اتمها، و لزوم رعایت اصل پاؤلی، را با مثال توضیح می‌دهیم. اعداد کوانتومی کربن $^{۲}(۲p)$، اکسیژن $^{۴}(۲p)$ و منگنز $^{۵}(۳d)$ را بررسی می‌کنیم. در دو مورد اول با حالتهای p سروکار داریم؛ بنابراین، می‌توان یک رشته "تاقچه" متناظر با $L_z = ۱, ۰, -۱$ ترسیم کرد. الکترونها را تا جایی که ممکن است، برای کمینه کردن دافعه، در ردیفهای مختلف قرار می‌دهیم. برای کربن، آنها را در ردیفهای مربوط به حالتهای $L_z = ۱$ و $L_z = ۰$ می‌گذاریم. بنابه قاعدهٔ اول هوند، اسپینها موازی خواهند بود (شکل ۱۹ـ۱) ــ به‌بیان دقیق، آنها در یک حالت سه‌تایی هستند. بنابراین، بزرگترین مقدار ممکن S_z برابر با ۱ است، و یک حالت سه‌تایی به‌دست می‌آوریم. بزرگترین مقدار ممکن L_z مقدار L را تعیین می‌کند، که ۱ است. آنگاه از قاعدهٔ سوم معلوم می‌شود که $J = |L - S| = ۰$، و یک حالت $^{۳}P_{۰}$ به‌دست می‌آوریم. برای مورد $^{۴}(۲p)$، در هر ردیف یک الکترون قرار می‌دهیم و سپس ردیف مربوط به یکی از حالتها مثلاً $L_z = ۱$ را با الکترون

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۱۹ـ۱



شکل۱۹ـ۲

چهارم پر می‌کنیم. اصل پاؤلی ایجاب می‌کند که این دو الکترون در حالت $L_z = ۱$ یک تکتایی تشکیل دهند. بنابراین، تنها با دو الکترون دیگر سروکار داریم، و چون $S_z = ۱$ پس $S = ۱$. مقدار بیشینهٔ L_z عبارت است از $L_z = [۲ + ۰ + (-۱)] = ۱$، و در نتیجه $L = ۱$. اما اکنون پوسته‌ای داریم که نصف بیشتر آن پر است، و از این‌رو بنابه قاعدهٔ سوم هوند $J = L + S = ۲$، و اکسیژن دارای حالت پایهٔ $^۳P_۲$ است.

برای منگنز "تاقچه‌ها" متناظر با $L_z = ۲, ۱, ۰, -۱, -۲$ هستند (شکل ۱۹ـ۲). پنج الکترون وجود دارند، و در نتیجه هر الکترون در یک ردیف قرار می‌گیرد. با اسپینهای موازی، به‌دست می‌آوریم $S_z = ۵/۲$، که ایجاب می‌کند $S = ۵/۲$. مقدار کل L_z برابر با صفر است، و از این‌رو یک حالت S داریم. بنابراین، حالت پایه $^۶S_{۵/۲}$ است.

محدودیت حجم کتاب مانع از بررسی مفصلتر جدول تناوبی می‌شود، اما تذکر چند نکتهٔ دیگر ضرورت دارد.

(الف) در ساختار اتمی چیزی که تعداد عنصرها را محدود کند وجود ندارد. دلیل اینکه در طبیعت اتمهایی با $Z \gtrsim ۱۰۰$ یافت نمی‌شوند این است که برای هسته‌های سنگین شکافت خودبه‌خود روی می‌دهد. اگر هسته‌های (شبه)پایدار فوق‌سنگین جدیدی کشف شوند اتمهای مربوط به آنها نیز به احتمال زیاد وجود خواهند داشت و ساختار آنها باید با پیش‌بینی رهیافت تشکیل اتمها که در این فصل بیان کردیم مطابقت داشته باشد.

www.arsanjan.blogfa.com

(ب) انرژیهای یونش اتمها و مولکولها معمولاً از ۵ تا ۱۵ الکترون ولت هستند. دلیل این وضعیت این است که با وجود افزایش تعداد الکترونها، خارجی‌ترین الکترونها باری را "می‌بینند" که در گسترهٔ $Z = ۱$ تا $Z = ۲$ قرار دارد. علاوه بر این، به‌علت انحراف از توزیع بار نقطه‌ای، وابستگی انرژی دیگر به‌صورت $۱/n^۲$ نیست. در نتیجه، توابع موج خارجی‌ترین الکترونها از تابع‌موج الکترون اتم هیدروژن چندان فراتر نمی‌روند. اتمها کم‌وبیش اندازهٔ یکسانی دارند!

(ج) تعیین اعداد کوانتومی S، L و J برای حالتهای پایهٔ عناصر مختلف، چنانکه دیدید، کار پردردسری است. علت توجه به این اعداد کوانتومی آن است که در طیف نمایی به دلیل قاعده‌های گزینش

$$\Delta S = ۰$$

$$\Delta L = \pm ۱ \qquad (۱۸\text{ـ}۱۹)$$

$$\Delta J = ۰, \pm ۱ \quad (\text{no } ۰ - ۰)$$

که بعداً آنها را به‌دست می‌آوریم، این اعداد دارای اهمیت خاصی هستند، و به‌علاوه برای تعیین اعداد کوانتومی حالتهای برانگیخته به‌کار می‌آیند. طیف نمایی اتمها، از هیدروژن و هلیم که بگذریم، بسیار پیچیده است. به‌عنوان یک مثال نسبتاً ساده، چند حالت اول کربن را در نظر بگیرید که تشکیل شده‌اند از پیکربندیهای مختلف دو الکترون که خارج از پوستهٔ بسته در اوربیتالهای $(۲p)^۲$ قرار دارند. چنانکه قبلاً گفتیم، حالتهای ممکن عبارت‌اند از $^۱S_۰$، $^۳P_{۲,۱,۰}$ و $^۱D_۲$. حالت $^۳P_۰$ از همه پایینتر است، اما حالتهای دیگر نیز وجود دارند. اولین حالت برانگیخته را می‌توان با اوربیتالهای $(۲p)(۳s)$ توصیف کرد. در اینجا S برابر است با ۰ یا ۱، اما L تنها برابر با ۱ است. چون مقادیر n مختلف‌اند، اصل طرد حالتها را به‌هیچ وجه محدود نمی‌کند، و تمام حالتهای $^۱P_۱$ و $^۳P_{۲,۱,۰}$ ممکن هستند، اما حالتهای برانگیخته‌ای که از اوربیتالهای $(۲p)(۳s)$ ناشی می‌شوند می‌توانند دارای $S = ۰, ۱$ و $L = ۲, ۱, ۰$ باشند، که تمام حالتهای $^۱D_۲$، $^۱P_۱$، $^۱S_۰$، $^۳D_{۲,۲,۱}$، $^۳P_{۲,۱,۰}$ و $^۳S_۱$ را به‌وجود می‌آورند. حتی با محدودیتهای ناشی از قاعده‌های گزینش، تعداد زیادی گذار وجود دارند. احتیاجی به گفتن ندارد که مرتب کردن این ترازها موازنهٔ ظریفی را بین اثرات رقیب گوناگون نشان می‌دهد، و پیش‌بینی طیفهای پیچیده‌تر بسیار دشوار است. این کار واقعاً مورد توجه ما نیست، زیرا هدف عمدهٔ ما این است که نشان دهیم مکانیک کوانتومی توضیح کیفی و کمی مفصلی از خواص شیمیایی اتمها و طیفهای آنها را، بدون در نظر گرفتن برهم‌کنشی غیر از برهم‌کنش الکترومغناطیسی بین ذرات باردار، فراهم می‌آورد. در مواردی باز هم به مبحث طیفها باز می‌گردیم.

www.arsanjan.blogfa.com

جدول تناوبی

z	عنصر	پیکربندی	جملهٔ طیفی*	پتانسیل یونش (eV)	شعاع **(Å)
۱	H	$(1s)$	$^2S_{1/2}$	۱۳٫۶	۰٫۵۳
۲	He	$(1s)^2$	$^1S_0$	۲۴٫۶	۰٫۲۹
۳	Li	$(\mathrm{He})(2s)$	$^2S_{1/2}$	۵٫۴	۱٫۵۹
۴	Be	$(\mathrm{He})(2s)^2$	$^1S_0$	۹٫۳	۱٫۰۴
۵	B	$(\mathrm{He}(2s)^2(2p)$	$^2P_{1/2}$	۸٫۳	۰٫۷۸
۶	C	$(\mathrm{He})(2s)^2(2p)^2$	$^3P_0$	۱۱٫۳	۰٫۶۲
۷	N	$(\mathrm{He})(2s)^2(2p)^3$	$^4S_{3/2}$	۱۴٫۵	۰٫۵۲
۸	O	$(\mathrm{He})(2s)^2(2p)^4$	$^3P_2$	۱۳٫۶	۰٫۴۵
۹	F	$(\mathrm{He})(2s)^2(2p)^5$	$^2P_{3/2}$	۱۷٫۴	۰٫۴۰
۱۰	Ne	$(\mathrm{He})(2s)^2(2p)^6$	$^1S_0$	۲۱٫۶	۰٫۳۵
۱۱	Na	$(\mathrm{Ne})(3s)^2(3p)$	$^2S_{1/2}$	۶٫۰	۱٫۷۱
۱۲	Mg	$(\mathrm{Ne})(3s)^2$	$^1S_0$	۷٫۶	۱٫۲۸
۱۳	Al	$(\mathrm{Ne})(3s)^2(3p)$	$^2P_{1/2}$	۶٫۰	۱٫۳۱
۱۴	Si	$(\mathrm{Ne})(3s)^2(3p)^2$	$^3P_0$	۸٫۱	۱٫۰۷
۱۵	P	$(\mathrm{Ne})(3s)^2(3p)^3$	$^4S_{3/2}$	۱۱٫۰	۰٫۹۲
۱۶	S	$(\mathrm{Ne})(3s)^2(3p)^4$	$^3P_2$	۱۰٫۴	۰٫۸۱
۱۷	Cl	$(\mathrm{Ne})(3s)^2(3p)^5$	$^2P_{3/2}$	۱۳٫۰	۰٫۷۳
۱۸	Ar	$(\mathrm{Ne})(3s)^2(3p)^6$	$^1S_0$	۱۵٫۸	۰٫۶۶
۱۹	K	$(\mathrm{Ar})(4s)$	$^2S_{1/2}$	۴٫۳	۲٫۱۶
۲۰	Ca	$(\mathrm{Ar})(4s)^2$	$^1S_0$	۶٫۱	۱٫۶۹
۲۱	Sc	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)$	$^2D_{3/2}$	۶٫۵	۱٫۵۷
۲۲	Ti	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^2$	$^3F_2$	۶٫۸	۱٫۴۸
۲۳	V	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^3$	$^4F_{3/2}$	۶٫۷	۱٫۴۰
۲۴	Cr	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^5$	$^7S_3$	۶٫۷	۱٫۴۵
۲۵	Mn	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^5$	$^6S_{3/2}$	۷٫۴	۱٫۲۸
۲۶	Fe	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^6$	$^5D_4$	۷٫۹	۱٫۲۳
۲۷	Co	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^7$	$^4F_{9/2}$	۷٫۸	۱٫۱۸
۲۸	Ni	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^8$	$^3F_4$	۷٫۶	۱٫۱۴
۲۹	Cu	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^{10}$	$^2S_{1/2}$	۷٫۷	۱٫۱۹
۳۰	Zn	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^{10}$	$^1S_0$	۹٫۴	۱٫۰۷
۳۱	Ga	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^{10})(4p)$	$^2P_{1/2}$	۶٫۰	۱٫۲۵
۳۲	Ge	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^{10})(4p)^2$	$^3P_0$	۸٫۱	۱٫۰۹
۳۳	As	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^{10})(4p)^3$	$^4S_{3/2}$	۱۰٫۰	۱٫۰۰
۳۴	Se	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^{10})(4p)^4$	$^3P_2$	۹٫۸	۰٫۹۲
۳۵	Br	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^{10})(4p)^5$	$^2P_{3/2}$	۱۱٫۸	۰٫۸۵
۳۶	Kr	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^{10})(4p)^6$	$^1S_0$	۱۴٫۰	۰٫۸۰

www.arsanjan.blogfa.com

جدول تناوبی

z	عنصر	پیکربندی	جملهٔ طیفی*	پتانسیل یونش (eV)	شعاع **(Å)
۳۷	Rb	$(Kr)(5s)$	$^2S_{1/2}$	۴٫۲	۲٫۲۹
۳۸	Sr	$(Kr)(5s)^2$	$^1S_0$	۵٫۷	۱٫۸۴
۳۹	Y	$(Kr)(5s)^2(4d)$	$^2D_{3/2}$	۶٫۶	۱٫۶۹
۴۰	Zr	$(Kr)(5s)^2(4d)^2$	$^3F_2$	۷٫۰	۱٫۵۹
۴۱	Nb	$(Kr)(5s)^2(4d)^4$	$^6D_{1/2}$	۶٫۸	۱٫۵۹
۴۲	Mo	$(Kr)(5s)^2(4d)^5$	$^7S_3$	۷٫۲	۱٫۵۲
۴۳	Tc	$(Kr)(5s)^2(4d)^5$	$^6S_{5/2}$	نامعلوم	۱٫۳۹
۴۴	Ru	$(Kr)(5s)^2(4d)^7$	$^5F_5$	۷٫۵	۱٫۴۱
۴۵	Rh	$(Kr)(5s)^2(4d)^8$	$^4F_{9/2}$	۷٫۷	۱٫۳۶
۴۶	Pd	$(Kr)(4d)^{10}$	$^1S_0$	۸٫۳	۰٫۵۷
۴۷	Ag	$(Kr)(5s)(4d)^{10}$	$^2S_{1/2}$	۷٫۶	۱٫۲۹
۴۸	Cd	$(Kr)(5s)^2(4d)^{10}$	$^1S_0$	۹٫۰	۱٫۱۸
۴۹	In	$(Kr)(5s)^2(4d)^{10}(5p)$	$^2P_{1/2}$	۵٫۸	۱٫۳۸
۵۰	Sn	$(Kr)(5s)^2(4d)^{10}(5p)^2$	$^3P_0$	۷٫۳	۱٫۲۴
۵۱	Sb	$(Kr)(5s)^2(4d)^{10}(5p)^3$	$^4S_{3/2}$	۸٫۶	۱٫۱۹
۵۲	Te	$(Kr)(5s)^2(4d)^{10}(5p)^4$	$^3P_2$	۹٫۰	۱٫۱۱
۵۳	I	$(Kr)(5s)^2(4d)^{10}(5p)^5$	$^2P_{3/2}$	۱۰٫۴	۱٫۰۴
۵۴	Xe	$(Kr)(5s)^2(4d)^{10}(5p)^6$	$^1S_0$	۱۲٫۱	۰٫۹۹
۵۵	Cs	$(Xe)(6s)$	$^2S_{1/2}$	۳٫۹	۲٫۵۲
۵۶	Ba	$(Xe)(6s)^2$	$^1S_0$	۵٫۲	۲٫۰۶
۵۷	La	$(Xe)(6s)^2(5d)$	$^2D_{3/2}$	۵٫۶	۱٫۹۲
۵۸	Ce	$(Xe)(6s)^2(4f)(5d)$	$^3H_5$	۶٫۹	۱٫۹۸
۵۹	Pr	$(Xe)(6s)^2(4f)^3$	$^4I_{9/2}$	۵٫۸	۱٫۹۴
۶۰	Nd	$(Xe)(6s)^2(4f)^4$	$^5I_4$	۶٫۳	۱٫۹۲
۶۱	Pm	$(Xe)(6s)^2(4f)^5$	$^6H_{5/2}$	نامعلوم	۱٫۸۸
۶۲	Sm	$(Xe)(6s)^2(4f)^6$	$^7F_0$	۵٫۶	۱٫۸۴
۶۳	Eu	$(Xe)(6s)^2(4f)^7$	$^8S_{7/2}$	۵٫۷	۱٫۸۳
۶۴	Gd	$(Xe)(6s)^2(4f)^7(5d)$	$^9D_2$	۶٫۲	۱٫۷۱
۶۵	Tb	$(Xe)(6s)^2(4f)^9$	$^6H_{15/2}$	۶٫۷	۱٫۷۸
۶۶	Dy	$(Xe)(6s)^2(4f)^{10}$	$^5I_8$	۶٫۸	۱٫۷۵
۶۷	He	$(Xe)(6s)^2(4f)^{11}$	$^4I_{15/2}$	نامعلوم	۱٫۷۳
۶۸	Er	$(Xe)(6s)^2(4f)^{12}$	$^3H_6$	نامعلوم	۱٫۷۰
۶۸	Er	$(Xe)(6s)^2(4f)^{12}$	$^3H_6$	نامعلوم	۱٫۷۰
۶۹	Tm	$(Xe)(6s)^2(4f)^{13}$	$^2F_{7/2}$	نامعلوم	۱٫۶۸
۷۰	Yb	$(Xe)(6s)^2(4f)^{14}$	$^1S_0$	۶٫۲	۱٫۶۶
۷۱	Lu	$(Xe)(6s)^2(4f)^{14}(5d)$	$^2D_{3/2}$	۵٫۰	۱٫۵۵
۷۲	Hf	$(Xe)(6s)^2(4f)^{14}(5d)^2$	$^3F_2$	۵٫۵	۱٫۴۸
۷۳	Ta	$(Xe)(6s)^2(4f)^{14}(5d)^3$	$^4F_{3/2}$	۷٫۹	۱٫۴۱
۷۴	W	$(Xe)(6s)^2(4f)^{14}(5d)^4$	$^5D_0$	۸٫۰	۱٫۳۶

لانتانیدها

جدول تناوبی

www.arsanjan.blogfa.com

z	عنصر	پیکربندی	جملهٔ طیفی*	پتانسیل یونش (eV)	شعاع (Å)**
۷۵	Re	$(Xe)(6s)^2(4f)^{14}(5d)^5$	$^6S_{5/2}$	۷٫۹	۱٫۳۱
۷۶	Os	$(Xe)(6s)^2(4f)^{14}(5d)^6$	$^5D_4$	۸٫۷	۱٫۲۷
۷۷	Ir	$(Xe)(6s)^2(4f)^{14}(5d)^7$	$^4F_{9/2}$	۹٫۲	۱٫۲۳
۷۸	Pt	$(Xe)(6s)(4f)^{14}(5d)^9$	$^3D_3$	۹٫۰	۱٫۲۲
۷۹	Au	$(Xe)(6s)(4f)^{14}(5d)^{10}$	$^2S_{1/2}$	۹٫۲	۱٫۱۹
۸۰	Hg	$(Xe)(6s)^2(4f)^{14}(5d)^{10}$	$^1S_0$	۱۰٫۴	۱٫۱۳
۸۱	Tl	$(Xe)(6s)^2(4f)^{14}(5d)^{10}(6p)$	$^2P_{1/2}$	۶٫۱	۱٫۳۲
۸۲	Pb	$(Xe)(6s)^2(4f)^{14}(5d)^{10}(6p)^2$	$^3P_0$	۷٫۴	۱٫۳۳
۸۳	Bi	$(Xe)(6s)^2(4f)^{14}(5d)^{10}(6p)^3$	$^4S_{3/2}$	۷٫۳	۱٫۳۰
۸۴	Po	$(Xe)(6s)^2(4f)^{14}(5d)^{10}(6p)^4$	$^3P_2$	۸٫۴	۱٫۲۱
۸۵	At	$(Xe)(6s)^2(4f)^{14}(5d)^{10}(6p)^5$	$^3P_2$	نامعلوم	۱٫۱۵
۸۶	Rn	$(Xe)(6s)^2(4f)^{14}(5d)^{10}(6p)^6$	$^1S_0$	۱۰٫۷	۱٫۰۹
۸۷	Fr	$(Rn)(7s)$		نامعلوم	۲٫۴۸
۸۸	Ra	$(Rn)(7s)^2$	$^1S_0$	۵٫۳	۲٫۰۴
۸۹	Ac	$(Rn)(7s)^2(6d)$	$^2D_{3/2}$	۶٫۹	۱٫۹۰
۹۰	Th	$(Rn)(7s)^2(6d)^2$	$^3F_2$		
۹۱	Pa	$(Rn)(7s)^2(5f)^2(6d)$	$^4K_{11/2}$		
۹۲	U	$(Rn)(7s)^2(5f)^3(6d)$	$^5L_6$		
۹۳	Np	$(Rn)(7s)^2(5f)^4(6d)$	$^6L_{11/2}$		
۹۴	Pu	$(Rn)(7s)^2(5f)^6$	$^7F_0$		
۹۵	Am	$(Rn)(7s)^2(5f)^7$	$^8S_{7/2}$		
۹۶	Cm	$(Rn)(7s)^2(5f)^7(6d)$	$^9D_2$		
۹۷	Bk	$(Rn)(7s)^2(5f)^9$	$^6H_{15/2}$		
۹۸	Cf	$(Rn)(7s)^2(5f)^{10}$	$^5I_8$		
۹۹	Es	$(Rn)(7s)^2(5f)^{11}$	$^4I_{15/2}$		
۱۰۰	Fm	$(Rn)(7s)^2(5f)^{12}$	$^3H_6$		
۱۰۱	Md	$(Rn)(7s)^2(5f)^{13}$	$^2F_{7/2}$		
۱۰۲	No	$(Rn)(7s)^2(5f)^{14}$	$^1S_0$		

اکتینیدها

* جملهٔ طیفی مترادف با نمادنگاری طیف‌نمایی است.

** شعاع با قلهٔ توزیع بار محاسبه شده برای خارجی‌ترین اوربیتال تعریف می‌شود.

مسائل

۱۹ـ۱ حالتهای طیف نمایی (به‌صورت $^{2S+1}L_J$) حاصل از ترکیبهای زیر را بنویسید

$$S = ۱/۲, L = ۳$$

$S = ۲, L = ۱$

www.arsanjan.blogfa.com

$S_۱ = ۱/۲, S_۲ = ۱, L = ۴$

$S_۱ = ۱, S_۲ = ۱, L = ۳$

$S_۱ = ۱/۲, S_۲ = ۱/۲, L = ۲$

اگر ذرات یکسان باشند، از موارد دو اسپینی چه حالتهایی طرد می‌شوند؟

۱۹ـ۲ مقادیر مختلف J مربوط به هر یک از حالتهای زیر را تعیین کنید.

$$^۱D,\ ^۲P,\ ^۴F,\ ^۳G,\ ^۲D,\ ^۳H$$

۱۹ـ۳ حالتهای ^۱D، ^۳P، ^۳S، ^۵G، ^۵P و ^۵S را در نظر بگیرید. با فرض اینکه هر یک از این حالتها به دو ذره با بزرگترین اسپین ممکن آنها مربوط می‌شود، حالتهایی را تعیین کنید که بنابه اصل طرد مجاز نیستند.

۱۹ـ۴ با استفاده از قاعده‌های هوند، توصیف طیف نمایی حالتهای پایهٔ اتمهای زیر را به‌دست آورید

$$\mathrm{N}(\mathrm{Z}=۷), \mathrm{K}(\mathrm{Z}=۱۹), \mathrm{Sc}(\mathrm{Z}=۲۱), \mathrm{Co}(\mathrm{Z}=۲۷)$$

پیکربندیهای الکترونی را تا جایی که می‌توانید تعیین کنید.

۱۹ـ۵ با استفاده از قاعده‌های هوند، اعداد کوانتومی (S, L, J) را برای عناصر $Z = ۱۴, ۱۵, ۲۴, ۳۰, ۳۴$ وارسی کنید.

۱۹ـ۶ با استفاده از رابطهٔ

$$\text{پتانسیل یونش} = \frac{۱۳٫۶ Z_{\text{eff}}^۲}{n^۲}\text{eV}$$

Z_{eff} را برای الکترونهای ظرفیت تعریف کنید، و آن‌را برای $Z = ۱$ تا $Z = ۴۰$ بنویسید و دربارهٔ نقشهایی که می‌بینید بحث کنید.

۱۹ـ۷ عنصر $Z = ۱۱$ را در نظر بگیرید. انتظار دارید L، Z و J برای اولین حالت برانگیخته چه مقادیری داشته باشند؟ مقادیر ممکن این اعداد کوانتومی را تعیین کنید. با استفاده از براوردهای سد مرکزگریزی و مقدار Z_{eff} که در مسئلهٔ ۱۹ـ۶ به‌دست آورده‌اید، انرژی برانگیختگی را براورد کنید.

[راهنمایی: توجه کنید که شکستن پوستهٔ بستهٔ $Z = ۱۰$ به‌انرژی زیادی احتیاج دارد.]

۱۹ـ۸ پتانسیلهای یونش را که در جدول تناوبی داده شده‌اند برحسب Z ترسیم کنید. قله‌هایی را که نشاندهندهٔ ساختار پوسته‌ای اتمها هستند در نظر بگیرید.

www.arsanjan.blogfa.com

مقادیری داشته باشند؟ مقادیر ممکن این اعداد کوانتومی را تعیین کنید. با استفاده از براوردهای سد مرکزگریزی و مقدار Z_{eff} که در مسئلهٔ ۱۹ـ۶ به‌دست آورده‌اید، انرژی برانگیختگی را براورد کنید.

[راهنمایی: توجه کنید که شکستن پوستهٔ بستهٔ $Z = ۱۰$ به‌انرژی زیادی احتیاج دارد.]

۱۹ـ۸ پتانسیلهای یونش را که در جدول تناوبی داده شده‌اند برحسب Z ترسیم کنید. قله‌هایی را که نشاندهندهٔ ساختار پوسته‌ای اتمها هستند در نظر بگیرید.

مراجع

یک بررسی مقدماتی عالی دربارهٔ ساختار اتمی را می‌توانید درکتاب زیر ببینید

G Herzberg, *Atomic Spectra and Atomic Structure*, Dover, New York, 1944.

برای یک بررسی پیشرفته و قاطع به کتاب زیر مراجعه کنید

I I Sobelman, *Introduction to the Theory of Atomic Spectra*, Pergamon Press, New York, 1972.

این کتاب بسیار پیشرفته است.

www.arsanjan.blogfa.com

۲۰

مولکولها

همچنانکه هر اتم تجمعی از الکترونها و یک هسته است، مولکولها نیز از الکترونها و چند هسته تشکیل شده‌اند. مولکولها در پایینترین حالت انرژی خود پایدار هستند، یعنی برای تجزیهٔ آنها به مؤلفه‌هایشان باید مقداری انرژی صرف شود. چون وقتی انرژی کافی به مولکول داده شود مولکول بیش از هر چیز به اتمهای تشکیل‌دهندهٔ خود تجزیه می‌شود، می‌توان مولکولها را حالتهای مقید اتمها نامید، اگرچه خواهیم دید که این توصیف بسیاری از ویژگیهای ساختار مولکولها را پنهان می‌کند. هدف این فصل آن است که نشان دهد مکانیک کوانتومی در توصیف خواص و رفتار مولکولها موفق است.

ساده‌ترین مولکولها آنهایی هستند که شامل دو هسته‌اند، یعنی از دو اتم تشکیل شده‌اند. حتی اینها نیز نسبت به اتمها دستگاههای پیچیده‌تری هستند، زیرا پس از تثبیت مرکز جرم در فضا هسته‌ها هنوز می‌توانند حرکت کنند، و این به معنای افزایش تعداد درجات آزادی است. به‌عنوان مثال، برای ساده‌ترین مولکول، یعنی H_2^+ که از دو پروتون و یک الکترون تشکیل شده است، باز هم شش درجهٔ آزادی باقی می‌ماند که سه تا به الکترون و سه تا به حرکت نسبی دو پروتون مربوط‌اند. همچون مورد اتمها، بررسی مسئلهٔ دینامیک مولکولها به روش مستقیم، یعنی حل عددی معادلهٔ شرودینگر چندبعدی، امکانپذیر است. برای اهداف ما، رهیافتهای ابتدایی اما فیزیکی‌تر آموزنده‌تر هستند.

www.arsanjan.blogfa.com

با استفاده از این واقعیت که هسته‌ها بسیار سنگینتر از الکترونها هستند ($M/m_e \gg ۱۰^۳$) و در نتیجه حرکت آنها بسیار کندتر است، می‌توان بینشی دربارهٔ دینامیک مولکولها به‌دست آورد. برای بررسی حرکت الکترونها می‌توان هسته‌ها را در فضا ثابت فرض کرد. از طرف دیگر، حرکت هسته‌ها در یک میدان متوسط ناشی از الکترونها صورت می‌گیرد. به‌ازای یک مجموعهٔ معین از مختصات هسته‌ای، یک هامیلتونی برای الکترونها خواهیم داشت. کمترین ویژه‌مقدار این هامیلتونی تابع این مختصات است، و مقدار کمینهٔ آن مکان هسته‌ها را تعیین می‌کند. این تصویر را باید برای هسته‌هایی که جرم چندانی ندارند کمی تغییر داد، زیرا اینها هم می‌توانند حرکت کنند. حرکت این هسته‌ها به الکترونها وابسته است، اما آنها تنها یک توزیع بار متوسط ناشی از حرکت سریع الکترونها را "می‌بینند"، و در تقریب اول در یک پتانسیل سهموی حول مکانهایی حرکت می‌کنند که از کمینهٔ انرژی الکترونها به‌دست می‌آیند.

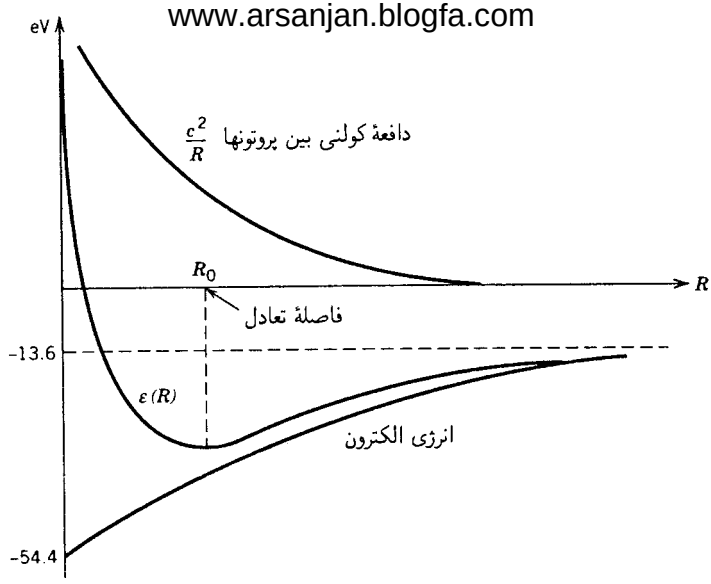
مولکول H_2^+

بررسی مولکولها را از ساده‌ترین آنها، که یون H_2^+ است و از دو پروتون و یک الکترون تشکیل شده است، شروع می‌کنیم. در دستگاه مرکز جرم دو هسته، هسته‌ها در $\mathbf{R}/۲$ و $-\mathbf{R}/۲$ قرار دارند، و انرژی جنبشی هسته‌ای با $-(\hbar^۲/۲M^*)\boldsymbol{\nabla}^۲_{\mathbf{R}}$ توصیف می‌شود که در آن M^* جرم کاهیدهٔ دو پروتون است ($M^* = M/۲$). مکان الکترون را با $\mathbf{r}$ نشان می‌دهیم. معادلهٔ ویژه‌مقداری انرژی به‌صورت زیر است

$$\left(-\frac{\hbar^۲}{۲M^*}\boldsymbol{\nabla}^۲_{\mathbf{R}} - \frac{\hbar^۲}{۲m}\boldsymbol{\nabla}^۲_{\mathbf{r}} - \frac{e^۲}{|\mathbf{r}-\mathbf{R}/۲|} - \frac{e^۲}{|\mathbf{r}+\mathbf{R}/۲|} + \frac{e^۲}{R}\right)\Psi(\mathbf{r},\mathbf{R}) = E\,\Psi(\mathbf{r},\mathbf{R}) \quad (۱\text{-}۲۰)$$

اولین جمله انرژی جنبشی پروتونها و دومین جمله انرژی جنبشی الکترون است. دو جملهٔ بعد نشاندهندهٔ جاذبهٔ میان الکترون واقع در $\mathbf{r}$ و دو پروتون واقع در $\pm\mathbf{R}/۲$ هستند، و آخرین جمله معرف دافعهٔ بین دو پروتون است که به فاصلهٔ $R = |\mathbf{R}|$ از یکدیگر قرار دارند. شکل ۲۰-۱ ویژگیهای کیفی پتانسیل را نشان می‌دهد. به‌ازای مقادیر بزرگ R، الکترون به یکی از پروتونها وابسته است، و انرژی دستگاه $-۱۳٫۶\text{eV}$ یعنی انرژی یک اتم هیدروژن است. وقتی $R \to ۰$، و دافعهٔ پروتون-پروتون را کنار بگذاریم، الکترون به یک هستهٔ $Z = ۲$ وابسته خواهد بود، و انرژی بستگی برابر است با $-۱۳٫۶Z^۲\text{eV} = -۵۴٫۴\text{eV}$. انرژی الکترون برحسب R بین این دو مقدار به‌صورت هموار تغییر می‌کند. اگر این انرژی را با انرژی دافعهٔ $e^۲/R$ جمع کنیم منحنی $E(R)$ به‌دست می‌آید. این منحنی از انرژی بستگی یک الکترون به یک پروتون پایین‌تر می‌رود، و این نشان می‌دهد انرژی دستگاه متشکل از دو پروتون و یک الکترون از انرژی یک پروتون و یک اتم

www.arsanjan.blogfa.com



شکل ۲۰ـ۱ اجزاء "پتانسیل هسته‌ای". از ترکیب دافعهٔ کولنی و انرژی الکترون یک منحنی به‌دست می‌آید که در R_0 کمینه است.

هیدروژن جدا از آن کمتر است. این فرورفتگی همیشه وجود ندارد، و از این‌رو چنانکه به‌زودی خواهیم دید بعضی از اتمها مولکول تشکیل نمی‌دهند.

برای به‌دست آوردن $E(R)$ باید معادلهٔ ویژه‌مقداری انرژی الکترون را حل کنیم:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{\mathbf{r}}^2 - \frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{R}/2|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}+\mathbf{R}/2|} + \frac{e^2}{R}\right) u(\mathbf{r},\mathbf{R}) = E(R)u(\mathbf{r},\mathbf{R}) \qquad (۲\text{ـ}۲۰)$$

این معادله را می‌توان در مختصات بیضوی حل کرد، اما با استفاده از اصل وردشی با توابع موج آزمونی که از شهود فیزیکی نسبت به دستگاه ناشی می‌شوند می‌توان بینش بیشتری به‌دست آورد.

اوربیتالهای مولکولی

یک تابع موج آزمونی مناسب عبارت است از یک ترکیب خطی از $u_{100}(r_1, \mathbf{R})$ و $u_{100}(r_2, \mathbf{R})$ که توابع موج حالت پایهٔ الکترون وابسته به هر یک از پروتونها هستند، و در نتیجه $r_1 = |\mathbf{r}-\mathbf{R}/2|$ و $r_2 = |\mathbf{r}+\mathbf{R}/2|$. چون هسته‌ها یکسان‌اند، هامیلتونی نسبت به انعکاس در صفحهٔ عمودمنصف خط واصل آنها متقارن است، یعنی تحت تبدیلهای $\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$ و $\mathbf{R} \to -\mathbf{R}$ ناوردا است. بنابراین، می‌توان ترکیبهایی را انتخاب کرد که ویژه‌تابعهای پاریته هم باشند. اینها ترکیبهای زوج و فرد از توابع

www.arsanjan.blogfa.com

زیر هستند

$$u_{100}(r_1, \mathbf{R}) \equiv \psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{1/2} e^{-|\mathbf{r}-\mathbf{R}/2|/a_0} \qquad (۳_۲۰)$$

و

$$u_{100}(r_2, \mathbf{R}) \equiv \psi_2(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{1/2} e^{-|\mathbf{r}+\mathbf{R}/2|/a_0} \qquad (۴_۲۰)$$

توابع موج آزمونی ما الکترون را به هر یک از پروتونها وابسته می‌کنند، و آنها را اوربیتالهای مولکولی (MO) می‌نامند.

می‌نویسیم[1]

$$\begin{aligned}\psi_g(\mathbf{r}, \mathbf{R}) &= C_+(R)[\psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R}) + \psi_2(\mathbf{r}, \mathbf{R})] \\ \psi_u(\mathbf{r}, \mathbf{R}) &= C_-(R)[\psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R}) + \psi_2(\mathbf{r}, \mathbf{R})]\end{aligned} \qquad (۵_۲۰)$$

ضرایب بهنجارش با رابطه‌های زیر داده می‌شوند

$$\begin{aligned}\frac{1}{C_\pm^2} &= \langle \psi_1 \pm \psi_2 | \psi_1 \pm \psi_2 \rangle \\ &= 2 \pm 2 \int d^3r\ \psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \psi_2(\mathbf{r}, \mathbf{R})\end{aligned} \qquad (۶_۲۰)$$

انتگرال بالا را انتگرال همپوشی می‌نامند، و می‌توان آن‌را محاسبه کرد. محاسبهٔ

$$\begin{aligned}S(R) &= \int d^3\mathbf{r}\ \psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \psi_2(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \\ &= \frac{1}{\pi a_0^3} \int d^3r\ e^{-|\mathbf{r}-\mathbf{R}/2|/a_0} e^{-|\mathbf{r}+\mathbf{R}/2|a_0} \\ &= \frac{1}{\pi a_0^3} \int d^3r'\ e^{-|\mathbf{r}'-\mathbf{R}/2|/a_0} e^{-r'/a_0}\end{aligned} \qquad (۷_۲۰)$$

سرراست اما پرزحمت است. نتیجه عبارت است از

$$S(R) = \left(1 + \frac{R}{a_0} + \frac{R^2}{3a_0^2}\right) e^{-R/a_0} \qquad (۸_۲۰)$$

---

۱. این نشانگذاری جنبهٔ تاریخی دارد: g از واژهٔ آلمانی "gerade" به‌معنای زوج گرفته شده است و u از "ungerade" به‌معنای فرد.

www.arsanjan.blogfa.com

برای مقدار انتظاری $H_۰$ در دو حالت داریم

$$\begin{aligned}\langle H\rangle_{g,u} =& \frac{۱}{۲[۱ \pm S(R)]}\langle \psi_۱ \pm \psi_۲|H_۰|\psi_۱ \pm \psi_۲\rangle \\ =& \frac{۱}{۲[۱ \pm S(R)]}\{\langle \psi_۱|H_۰|\psi_۱\rangle + \langle \psi_۲|H_۰|\psi_۲\rangle \\ & \pm \langle \psi_۱|H_۰|\psi_۲\rangle \pm \langle \psi_۲|H_۰|\psi_۱\rangle\} \\ =& \frac{\langle \psi_۱|H_۰|\psi_۱\rangle \pm \langle \psi_۱|H_۰|\psi_۲\rangle}{۱ \pm S(R)}\end{aligned} \qquad (۹_۲۰)$$

که در آن از تقارن تحت $\mathbf{R} \to -\mathbf{R}$ استفاده کرده‌ایم. صورت کسر را می‌توان محاسبه کرد:

$$\begin{aligned}\langle \psi_۱|H_۰|\psi_۱\rangle =& \int d^۳r \psi_۱^*(\mathbf{r},\mathbf{R})\left(\frac{p_e^۲}{۲m} - \frac{e^۲}{|\mathbf{r}-\mathbf{R}/۲|} - \frac{e^۲}{|\mathbf{r}+\mathbf{R}/۲|} + \frac{e^۲}{R}\right) \\ & \times \psi_۱(\mathbf{r},\mathbf{R}) \\ =& E_۱ + \frac{e^۲}{R} - e^۲\int d^۳r \frac{|\psi_۱(\mathbf{r},\mathbf{R})|^۲}{|\mathbf{r}+\mathbf{R}/۲|}\end{aligned} \qquad (۱۰_۲۰)$$

جملهٔ اول درست انرژی اتم هیدروژن منفرد است: $E_۱ = -۱۳٫۶\text{eV}$؛ جملهٔ دوم دافعهٔ پروتون-پروتون است، و جملهٔ سوم انرژی پتانسیل الکتروستاتیکی مربوط به توزیع بار الکترون حول یک پروتون است که به پروتون دیگر نیز جذب شده است. این انتگرال را می‌توان محاسبه کرد، و در نهایت داریم

$$\langle \psi_۱|H_۰|\psi_۱\rangle = E_۱ + \frac{e^۲}{R}\left(۱ + \frac{R}{a_۰}\right)e^{-۲R/a_۰} \qquad (۱۱_۲۰)$$

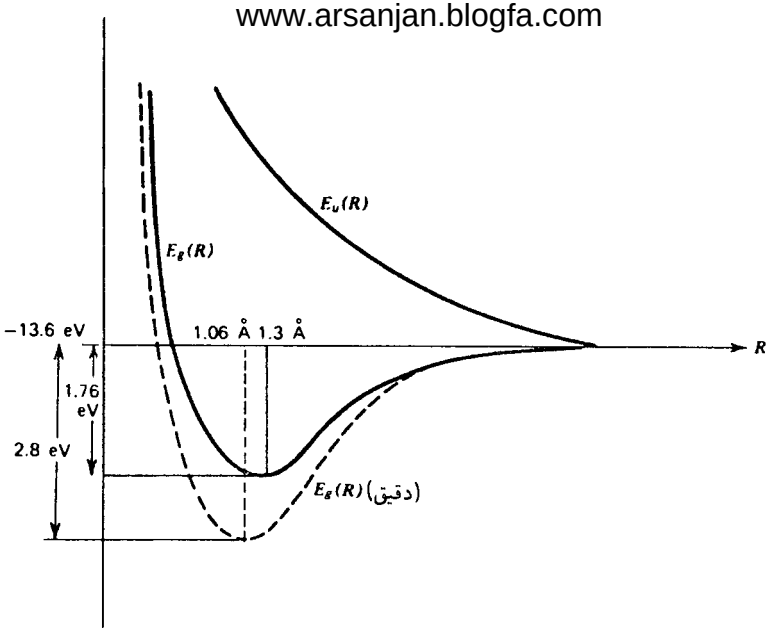
به‌همین ترتیب، می‌نویسیم

$$\begin{aligned}\langle \psi_۱|H_۰|\psi_۲\rangle =& \int d^۳r_۱ \psi_۱^*(\mathbf{r},\mathbf{R})\left(E_۱ + \frac{e^۲}{R} - \frac{e^۲}{|\mathbf{r}+\mathbf{R}/۲|}\right)\psi_۲(\mathbf{r},\mathbf{R}) \\ =& \left(E_۱ + \frac{e^۲}{R}\right)S(R) - e^۲\int d^۳r \frac{\psi_۱^*(\mathbf{r},\mathbf{R})\psi_۲(\mathbf{r},\mathbf{R})}{|\mathbf{r}+\mathbf{R}/۲|}\end{aligned} \qquad (۱۲_۲۰)$$

آخرین جمله انتگرال تبادلی است، که آن‌را نیز می‌توان محاسبه کرد:

$$e^۲\int d^۳r \frac{\psi_۱^*(\mathbf{r},\mathbf{R})\psi_۲(\mathbf{r},\mathbf{R})}{|\mathbf{r}+\mathbf{R}/۲|} = \frac{e^۲}{a_۰}\left(۱ + \frac{R}{a_۰}\right)e^{-R/a_۰} \qquad (۱۳_۲۰)$$

www.arsanjan.blogfa.com



شکل ۲۰ـ۲ نتایج محاسبهٔ وردشی برای H_2^+.

از مجموع نتایج بالا، با استفاده از $R/a_0 = y$ و $e^2/a_0 = -2E_1$، به‌دست می‌آوریم

$$\langle H\rangle_{g,u} = E_1 \frac{1-(2/y)(1+y)e^{-2y} \pm \{(1-2/y)(1+y+y^2/3)e^{-y} - 2(1+y)e^{-y}\}}{1 \pm (1+y+y^2/3)e^{-y}} \qquad (۱۴ـ۲۰)$$

شکل ۲۰ـ۲ این انرژیها را برحسب $R = a_0 y$ نشان می‌دهد.

جواب دقیق، که بنابه اصل وردشی باید پایینتر از منحنیهای به‌دست آمده قرار گیرد، تفاوت اندکی با کمینه دارد. در این تقریب می‌بینیم که جواب زوج مقید است، اما جواب فرد مقید نیست. تفاوت میان جوابهای زوج و فرد این است که برای جواب زوج الکترون به احتمال زیاد بین دو پروتون، جایی که سهم جاذبه بیشینه است، قرار دارد؛ برای جواب فرد، که یک گره در فاصلهٔ میان دو پروتون دارد، الکترون می‌خواهد از این ناحیه دور باشد.

فاصلهٔ بین پروتونها که از آزمایش به‌دست آمده است ۱٫۰۶Å است، و انرژی بستگی تجربی $-2{,}8\text{eV}$ است. محاسبات مبتنی بر ۱۴ـ۲۰ فاصله ۱٫۳Å و انرژی بستگی $-1{,}76\text{eV}$ را به‌دست می‌دهند. بنابراین، تابع موج ما به اندازه‌ای که باید دقیق نبوده است. دلیل آن این است که وقتی R کوچک است، این تابع موج باید به تابع موج یون He^+ نزدیک شود و ۵ـ۲۰ چنین

www.arsanjan.blogfa.com

نیست. می‌توان با معرفی یک بار موثر برای پروتون و تعیین کردن $\langle H_{\circ}/\gamma_g \rangle$ نسبت به این پارامتر، علاوه بر R، مانند آنچه در بررسی اتم هلیم انجام دادیم، محاسبه را بهتر کرد. چون بیشتر به درک کیفی مسئله توجه داریم تا به اصلاح محاسبهٔ وردشی، این نظر را دنبال نمی‌کنیم.

اوربیتالهایی که در نظر گرفته‌ایم به زاویهٔ سمتی حول محور مولکول بستگی ندارند. چون هامیلتونی تحت چرخشهای حول این محور ناوردا است، می‌توان جوابها را از روی مؤلفهٔ تکانهٔ زاویه‌ای در راستای این محور دسته‌بندی کرد. اگر راستای $\mathbf{R}$ را محور z بگیریم، ویژه‌حالتهای ما ویژه‌حالتهای همزمان L_z خواهند بود. جوابها به‌طورکلی دارای وابستگی $e^{im\phi}$، با $m = \circ, \pm 1, \pm 2 \ldots$ هستند. اینها را، نظیر S، P، D، ...، با σ، π، δ، ... نشانگذاری می‌کنیم. نشانهای "g" و "u" نیز هستند، که برای تمام مولکولهای دواتمی با اتمهای یکسان (مولکولهای هم‌هسته) به‌کار می‌روند. بنابراین، در مثال کنونی، می‌توان حالت پایه را با $1s\sigma_g$ و حالت پادمتقارن را با $1s\sigma_u^*$ نشان داد، که در آن ستاره به‌معنای نامقید بودن حالت است. حالتهای برانگیختهٔ مولکول H_2^+ را می‌توان با اوربیتالهای بالاتر تشکیل داد.

مولکول H_2

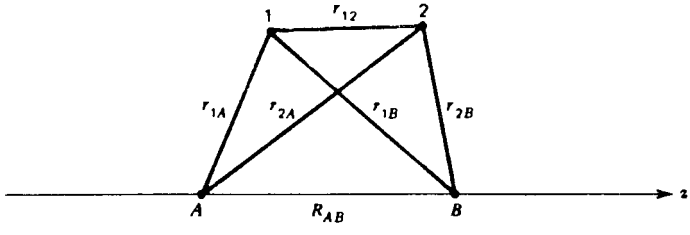
اکنون مولکول H_2 را به تفصیل بررسی می‌کنیم، زیرا در اینجا (برخلاف مولکول H_2^+) دو الکترون داریم و ملاحظات اصل طرد و اسپین الکترون برای نخستین بار ظاهر می‌شوند. مانند مورد مولکول H_2^+، هسته‌ها را ثابت می‌گیریم.

هسته‌ها (پروتونها) را با A و B و الکترونها را با "۱" و "۲" نشان می‌دهیم (شکل ۲۰ـ۳) هامیلتونی به‌صورت زیر است

$$H = H_1 + H_2 + \frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{R_{AB}} \qquad (۱۵\text{ـ}۲۰)$$

که در آن جمله‌های

$$H_i = \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} - \frac{e^2}{r_{Ai}} - \frac{e^2}{r_{Bi}} \qquad (i = 1, 2) \qquad (۱۶\text{ـ}۲۰)$$



شکل ۲۰ـ۳ نشانهای مختصاتی در بررسی مولکول H_2.

www.ansarian.blogfa.com

تنها به مختصات الکترون i نسبت به هسته‌ها بستگی دارد. در اینجا نیز با محاسبهٔ مقدار انتظاری H با استفاده از یک تابع موج آزمونی، یک کران بالا برای $E(R_{AB})$ به‌دست می‌آوریم. از اینکه هامیلتونیهای

$$\tilde{H}_i = H_i + \frac{e^2}{R_{AB}} \qquad (۲۰\text{ـ}۱۷)$$

درست هامیلتونی مولکول H_2^+ هستند (معادلهٔ ۲۰ـ۲) پی می‌بریم که تابع موج آزمونی را به‌صورت حاصلضرب دو تابع $1s\sigma_g$ (معادلهٔ ۲۰ـ۵) برای مولکول H_2^+ انتخاب کنیم:

$$\psi_g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{2[1 + S(R_{AB})]}[\psi_A(\mathbf{r}_1) + \psi_B(\mathbf{r}_1)][\psi_A(\mathbf{r}_2) + \psi_B(\mathbf{r}_2)]\chi_{\text{تکتایی}} \qquad (۲۰\text{ـ}۱۸)$$

حالت اسپینی الکترون تکتایی است زیرا قسمت فضایی تابع موج را متقارن گرفته‌ایم. در این تابع موج آزمونی، هر الکترون وابسته به دو پروتون است، یعنی تابع موج آزمونی حاصلضرب اوربیتالهای مولکولی است. توصیف برحسب اوربیتالهای مولکولی را گاهی روش MO می‌نامند.

از محاسبهٔ $\langle\psi_g|H|\psi_g\rangle$ به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}
&\left\langle \psi_g \left| \left(\tilde{H}_1 - \frac{e^2}{R_{AB}}\right) + \left(\tilde{H}_2 - \frac{e^2}{R_{AB}}\right) + \frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{R_{AB}} \right| \psi_g \right\rangle \\
&\quad = E(R_{AB}) + E(R_{AB}) + \left\langle \psi_g \left| \frac{e^2}{r_{12}} \right| \psi_g \right\rangle - \frac{e^2}{R_{AB}} \\
&\quad = 2E(R_{AB}) - \frac{e^2}{R_{AB}} + \left\langle \psi_g \left| \frac{e^2}{r_{12}} \right| \psi_g \right\rangle
\end{aligned} \qquad (۲۰\text{ـ}۱۹)$$

که در آن $E(R_{AB})$ انرژی مولکول H_2^+ است که در ۲۰ـ۱۴ محاسبه شد. جملهٔ دافعهٔ الکترون‌ـالکترون مرتبهٔ اول را نیز می‌توان محاسبه کرد، و هنگامی که انرژی کل حاصل را نسبت به فاصلهٔ R_{AB} کمینه کنیم، برای انرژی بستگی و فاصلهٔ بین مولکولی به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}
E_b &= -2{,}68 \text{ eV} \\
R &= 0{,}85 \text{ Å}
\end{aligned} \qquad (۲۰\text{ـ}۲۰)$$

مقادیر تجربی عبارت‌اند از www.arsanjan.blogfa.com

$$E_b = -۴٫۷۵ \text{ eV}$$
$$R = ۰٫۷۴ \text{ Å} \qquad (۲۰_۲۱)$$

بدیهی است که این تقریب زیاد خوب نیست. در بحث مولکول $H_۲^+$ متذکر شدیم که آن توابع موج آزمونی (MOها) برای فاصله‌های کوچک پروتون-پروتون دقت ندارند، و گستردگی بیش از حد فضایی اوربیتالهای مولکولی اثر خود را در اعداد بالا نشان می‌دهد. این تابع موج آزمونی همچنین ویژگیهای نامطلوبی برای مقادیر بزرگ R_{AB} دارد. قسمت فضایی ۲۰ـ۱۸ را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$[\psi_A(\mathbf{r}_۱) + \psi_B(\mathbf{r}_۱)][\psi_A(\mathbf{r}_۲) + \psi_B(\mathbf{r}_۲)]$$
$$= [\psi_A(\mathbf{r}_۱)\psi_A(\mathbf{r}_۲) + \psi_B(\mathbf{r}_۱)\psi_B(\mathbf{r}_۲)] + [\psi_A(\mathbf{r}_۱)\psi_B(\mathbf{r}_۲) + \psi_A(\mathbf{r}_۲)\psi_B(\mathbf{r}_۱)] \qquad (۲۰_۲۲)$$

جملهٔ اول را جملهٔ "یونی" می‌نامند زیرا دو الکترون وابسته به این یا آن پروتون را توصیف می‌کند. جملهٔ دوم، که جملهٔ "کووالانسی" نامیده می‌شود، توصیفی برحسب ترکیبهای خطی اوربیتالهای اتمی (LCAO) است. این تابع موج آزمونی ایجاب می‌کند که، چون دو جمله با وزن مساوی ظاهر می‌شوند، برای مقادیر بزرگ R_{AB} احتمال اینکه مولکول به یونهای H^+ و H^- یا به دو اتم هیدروژن تجزیه شود یکسان است و این پیش‌بینی به وضوح غلط است.

روش پیوند والانسی

مشکل بالا را می‌توان با استفاده از روش پیوند والانسی (یا هایتلر-لندن) که در آن ترکیبهای خطی اوربیتالهای اتمی به‌کار برده می‌شوند، برطرف کرد. تابع موج تکتایی را که در محاسبهٔ وردشی به‌عنوان تابع موج آزمونی به‌کار می‌رود به‌صورت زیر انتخاب می‌کنیم

$$\psi(\mathbf{r}_۱, \mathbf{r}_۲) = \left\{\frac{۱}{۲[۱ + S^۲(R_{AB})]}\right\}^{۱/۲} [\psi_A(\mathbf{r}_۱)\psi_B(\mathbf{r}_۲) + \psi_A(\mathbf{r}_۲)\psi_B(\mathbf{r}_۱)]\chi_{\text{تکتایی}} \qquad (۲۰_۲۳)$$

که در آن، مانند قبل، $\psi_A(\mathbf{r}_i)$ها توابع موج هیدروژنی برای iامین الکترون حول پروتون A هستند. اصولاً می‌توان یک جملهٔ سه‌تایی به این تابع موج آزمونی وردشی اضافه کرد. اما تابع موج سه‌تایی باید از لحاظ فضایی پادمتقارن باشد و احتمال اندکی برای اینکه الکترونها در ناحیهٔ بین پروتونها واقع شوند به‌دست می‌دهد. در بحث مولکول $H_۲^+$ دیدیم که درست همین پیکربندی به کمترین

www.arsanjan.blogfa.com

انرژی منجر شد. اگرچه بلافاصله واضح نیست که چگونه دو اتم هیدروژن پیوند بندی با دو الکترون که یکدیگر را دفع می‌کنند باز هم از همه بزرگتر باشد، اما در واقع چنین است. نتایج محاسبهٔ وردشی با تابع موج آزمونی پیوند والانسی (VB) عبارت‌اند از

$$\begin{aligned} E_b &= -۳٫۱۴ \text{ eV} \\ R &= ۰٫۸۷ \text{ Å} \end{aligned} \qquad (۲۴\text{-}۲۰)$$

این پیشرفت قابل‌ملاحظه‌ای نسبت به نتایج اوربیتالهای مولکولی (MO) نیست، به این دلیل ساده که نارسایی توابع موج آزمونی برای مقادیر کوچک R_{AB} تأثیر بیشتری دارد. نباید تردیدی دربارهٔ موفقیتهای کمی مکانیک کوانتومی در فیزیک مولکولی وجود داشته باشد. باید از توابع موج آزمونی پیچیده‌تری استفاده کنیم. به عنوان مثال، یک تابع موج آزمونی ۵۰ جمله‌ای باعث سازگاری کامل با مشاهدات مربوط به مولکول H_2 می‌شود، اما این تابع، برخلاف MO و VB، درکی کیفی دربارهٔ آنچه بین اتمها می‌گذرد به‌دست نمی‌دهد. در زیر، به جستجوی ارتباط این رهیافتها با درک کیفی بعضی از جنبه‌های شیمی می‌پردازیم.

مقدار انتظاری H برای مولکول H_2 در رهیافت VB با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$\begin{aligned} \langle\psi|H|\psi\rangle &= \frac{۱}{۲(۱+S^۲)}\langle\psi_{A۱}\psi_{B۲}+\psi_{A۲}\psi_{B۱}|H|\psi_{A۱}\psi_{B۲}+\psi_{A۲}\psi_{B۱}\rangle \\ &= \frac{۱}{۱+S^۲}\left\langle\psi_{A۱}\psi_{B۲}\right|\left(T_۱+T_۲-\frac{e^۲}{r_{A۱}}-\frac{e^۲}{r_{A۲}}-\frac{e^۲}{r_{B۱}}-\frac{e^۲}{r_{B۲}}+\frac{e^۲}{r_{۱۲}}\right. \\ &\qquad \left.+\frac{e^۲}{R_{AB}}\right)\left|\psi_{A۱}\psi_{B۲}+\psi_{A۲}\psi_{B۱}\right\rangle \end{aligned} \qquad (۲۵\text{-}۲۰)$$

که در آن T_i انرژی جنبشی الکترون iام است، و چون

$$\left(T_۱-\frac{e^۲}{r_{A۱}}\right)\psi_{A۱}=E_۱\psi_{A۱}$$

و غیره، می‌توان آن‌را به‌صورت ساده‌تر زیر درآورد

$$\begin{aligned} &\frac{۱}{۱+S^۲}\left(\left\langle\psi_{A۱}\psi_{B۲}\right|۲E_۱-\frac{e^۲}{r_{B۱}}-\frac{e^۲}{r_{A۲}}+\frac{e^۲}{r_{۱۲}}+\frac{e^۲}{R_{AB}}\left|\psi_{A۱}\psi_{B۲}\right\rangle\right. \\ &\quad\left.+\left\langle\psi_{A۱}\psi_{B۲}\right|۲E_۱-\frac{e^۲}{r_{B۲}}-\frac{e^۲}{r_{A۱}}+\frac{e^۲}{r_{۱۲}}+\frac{e^۲}{R_{AB}}\left|\psi_{A۲}\psi_{B۱}\right\rangle\right. \end{aligned}$$

www.arsanjan.blogfa.com

$$= \frac{1}{1+S^2}\left\{\left(2E_1 + \frac{2}{R_{AB}}\right)(1+S^2) - 2e^2\left\langle \psi_{A1}\left|\frac{1}{r_{B1}}\right|\psi_{A1}\right\rangle \right.$$
$$- 2e^2 S\left\langle \psi_{A1}\left|\frac{1}{r_{A1}}\right|\psi_{B1}\right\rangle + e^2\int\int \frac{|\psi_{A1}|^2|\psi_{B2}|^2}{r_{12}}$$
$$\left. + e^2\int\int \frac{\psi^*_{A1}\psi_{B1}\psi^*_{B2}\psi_{A2}}{r_{12}}\right. \qquad (۲۶_۲۰)$$

در به‌دست آوردن این رابطه از تقارن نیز استفاده کرده‌ایم. جمله‌هایی که می‌توانند این رابطه را منفی‌تر کنند عبارت‌اند از

$$\left\langle \psi_{A1}\left|\frac{1}{r_{B1}}\right|\psi_{A1}\right\rangle \quad \text{و} \quad \frac{S}{1+S^2}\left\langle \psi_{A1}\left|\frac{1}{r_{A1}}\right|\psi_{B1}\right\rangle$$

اولی صرفاً جذب ابرالکترونی حول یک پروتون به پروتون دیگر است؛ دومی همپوشی دو الکترون (با وزن $1/r_{A1}$) است. اگر این جمله بزرگ باشد بستگی وجود خواهد داشت. اما این دو الکترون تنها وقتی می‌توانند همپوشی قابل‌ملاحظه‌ای داشته باشند که اسپینهای آنها پادموازی باشند؛ این پیامدی است از اصل طرد. ناحیهٔ همپوشی بین دو هسته قرار دارد، و در این ناحیه جذب به هسته‌ها به‌طور کلی بر دافعهٔ الکتروستاتیک بین الکترونها غلبه دارد.

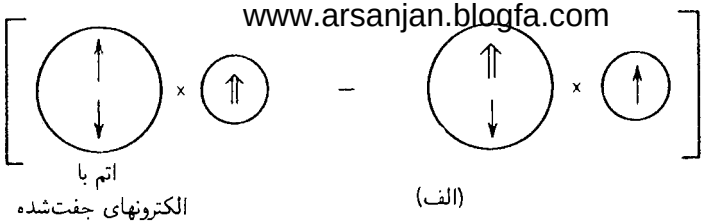
در روش MO نیز یک جملهٔ همپوشی وجود دارد ــ آخرین جمله در ۲۰ـ۱۲ــ که برای پیوند بسیار مهم است، و باز هم پیوند به این دلیل روی می‌دهد که توزیع بار الکترون بین هسته‌ها بزرگ است. بنابراین، اگرچه در اینجا اوربیتالها به تمام مولکول تعلق دارند و نه به اتمهای منفرد، اما دلیل فیزیکی برای پیوند یکی است.

باید توجه کرد که به‌طور کلی هسته‌ها می‌توانند چندین حالت مقید، متناظر با پیکربندیهای مختلف الکترونی، داشته باشند. به‌عنوان مثال، اگر در ۲۰ـ۲۳ تابع موج $\psi(\mathbf{r}_2)$ را ویژه‌تابع u_{200} بگیریم، در حالی‌که $\psi(\mathbf{r}_1)$ باز هم ویژه‌تابع u_{100} است، همپوشی می‌تواند چنان باشد که یک حالت مقید دوم با پیوند ضعیفتر برای پروتونها ایجاد کند. این بحث را ادامه نمی‌دهیم، و تنها این واقعیت مهم را متذکر می‌شویم که $E(R)$ برای هر حالت الکترونی تفاوت دارد.

اهمیت الکترونهای ظرفیت جفت‌نشده

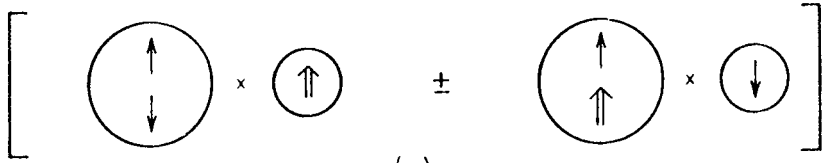
بعضی از مولکولها را با استفاده از این دو رهیافت برای توصیف توزیع بار الکترون بررسی می‌کنیم. این بررسی بسیار ساده است زیرا لازم نیست تمام الکترونها را عملاً به‌حساب آوریم. در ساختن اوربیتالها، خواه ظرفیتی باشند خواه مولکولی، تنها خارجی‌ترین الکترونهایی که در پوسته‌های

www.arsanjan.blogfa.com



اتم با
الکترونهای جفت‌شده

(الف)



(ب)

شکل ۲۰ـ۴ نمایش اینکه چرا الکترونهای جفت‌شده باعث پیوند نمی‌شوند. (الف) اگر الکترونهای موازی تبادل کنند، تابع موج به لحاظ فضایی پادمتقارن است. (ب) اگر الکترونهای پادموازی تبادل کنند، یک جمله در تابع موج دارای الکترونهایی در حالت اسپینی یکسان است، و می‌تواند به مداری با انرژی زیادتر برود.

بسته نیستند، یعنی الکترونهای ظرفیت، می‌توانند در پیوند مؤثر باشند. الکترونهای داخلی، که به هسته نزدیکترند، کمتر تحت تأثیر وجود اتم مجاور قرار می‌گیرند.[۲] علاوه بر این، تمام الکترونهای ظرفیت سهم مساوی ندارند: اگر دو الکترون در حالت اسپینی ۰ باشند ــ آنها را الکترون جفت‌شده می‌نامیم ــ باعث پیوند نمی‌شوند. برای اینکه ببینیم چرا در این مورد پیوند نداریم، بررسی می‌کنیم که وقتی اتمی با یک الکترون ظرفیت به اتمی با دو الکترون جفت‌شده نزدیک می‌شود چه پیش می‌آید. در اینجا دو وضعیت را باید در نظر گرفت (شکل ۲۰ـ۴).

(الف) اگر الکترونهایی که موازی هستند تحت تبادل قرارگیرند (یعنی به‌صورتی مانند ۲۰ـ۲۳ با علامت ± بین جمله‌ها درآیند) باید در یک حالت سه‌تایی باشند، و در نتیجه تابع موج فضایی این زوج باید پادمتقارن باشد. این باعث کاهش همپوشی می‌شود، و معلوم می‌شود که انتگرال تبادل یک سهم دافعه در انرژی دارد.

(ب) اگر الکترونهایی که پادموازی هستند تبادل کنند، یکی از اتمها برای مدتی دارای دو الکترون است که در یک حالت اسپینی هستند. این حالت اولیهٔ اتم غالباً نمی‌تواند تداوم داشته باشد، و یکی از الکترونها باید به یک اوربیتال اتمی دیگر صعود کند. گاهی این کار به انرژی بسیار کمی نیاز دارد،

---

۲. ممکن است در اتمها حتی الکترونهای ظرفیت نسبتاً به هسته نزدیک باشند. این وضعیت برای خاکهای کمیاب صدق می‌کند. نتیجهٔ این واقعیت که الکترونهای خارجی‌تر در پوسته‌های $5d$ و $4f$ نزدیک به هسته قرار دارند آن است که خاکهای کمیاب به لحاظ شیمیایی کمتر از فلزات واسطه ($Z \simeq ۲۰$ تا ۳۰) فعال هستند.

www.arsanjan.blogfa.com

اما معمولاً این‌طور نیست و باز هم پیوندی حاصل نمی‌شود. فعالیت شیمیایی به وجود الکترونهای خارجی جفت‌نشده بستگی دارد. مثالی در این مورد، یافت نشدن مولکول $H - He$ است. هلیم دو الکترون در حالت $1s$ دارد؛ صعود یکی از آنها به یک حالت $2s$ به مقدار زیادی انرژی نیاز دارد. به همین دلیل است که اتمهایی که پوستهٔ خارجی آنها بسته است بی‌اثر هستند. تمام الکترونهای جفت‌نشده اهمیت یکسانی ندارند. چنانکه قبلاً گفتیم، الکترونهای جفت‌نشدهٔ d و f در عناصر واسطه می‌خواهند به هسته نزدیک باشند، و در نتیجه غیرفعال هستند. بنابراین، عمدتاً الکترونهای s و p در پوسته‌های خارجی در فعالیت شیمیایی شرکت می‌کنند. اثر جفت‌شدگی همچنین مسبب چیزی است که "اشباع نیروهای بستگی شیمیایی" نامیده می‌شود: وقتی دو الکترون جفت‌نشده از اتمهای مختلف یک حالت تکتایی تشکیل می‌دهند (و پیوند به‌وجود می‌آورند) جفت می‌شوند؛ الکترون اتم سوم باید یک الکترون جفت‌نشده در جای دیگر پیدا کند، یعنی در پیوند دیگری شرکت کند. یک پیامد دیگر این است که مولکولها در اکثر موارد اسپین ۰ دارند.

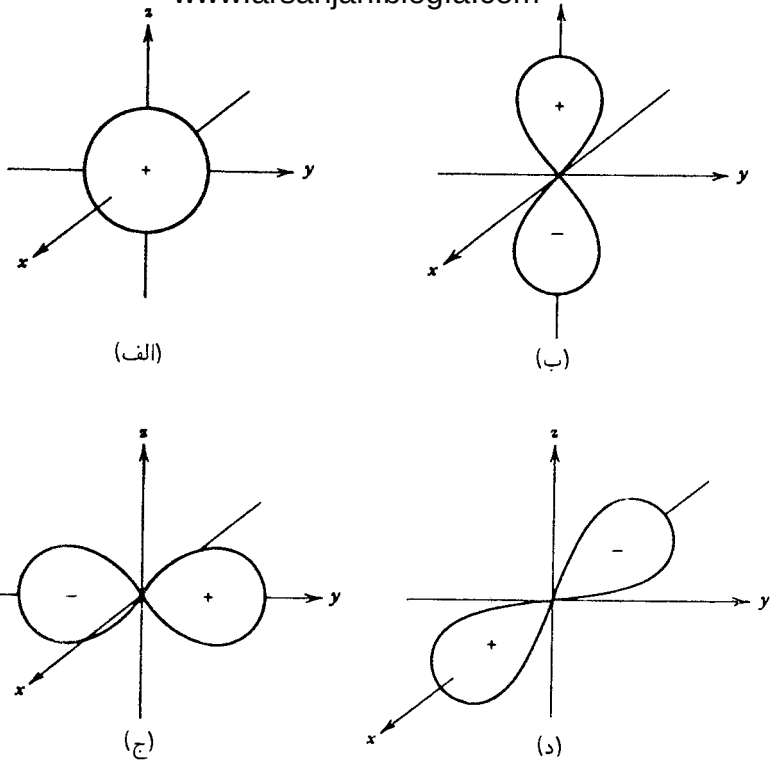
بررسی چند مولکول ساده

اکنون به بررسی فرایندی شبیه تشکیل پوسته‌های الکترونی در اتمها می‌پردازیم. در شکل ۲۰ـ۵ تصویر اوربیتالهای اتمی، مشخصاً اوربیتال s (Y_{00}) و اوربیتالهای p، نشان داده شده‌اند. برای اوربیتالهای p ترکیبهای خطی p_x ($Y_{11} + Y_{1,-1}$) و p_y ($Y_{11} - Y_{1,-1}$) علاوه بر p_z (Y_{10}) ترسیم شده‌اند. نمودارهای مربوط به اوربیتالهای d، یعنی نمودارهای d_{xy}، d_{xz}، d_{yz}، d_{zz} و $d_{xx} - d_{yy}$ نشان داده نشده‌اند، زیرا الکترونهای d نقشی در این بحث ندارند. شکل ۲۰ـ۶ نشان می‌دهد که وقتی اوربیتالهای اتمی به هم نزدیک شوند و تبادل روی دهد چه پیش می‌آید. به‌عنوان مثال، دو اوربیتال اتمی $1s$ می‌توانند در یک اوربیتال مولکولی متقارن فضایی (و از این‌رو با اسپین ۰) یا در یک اوربیتال مولکولی پادمتقارن فضایی، که ضد پیوندی است، زیرا تابع موج بین هسته‌ها کوچک است، ترکیب شوند. به‌همین ترتیب، تشکیل اوربیتالهای مولکولی پیوندی و ضد پیوندی از اوربیتالهای p در شکل نمایش داده شده‌اند. توجه کنید که (۱) پاریته‌های "g" و "u" را می‌توان از روی نمودارها تشخیص داد، زیرا علامت تابع موج در این نمودارها نشان داده شده است؛ توزیعهایی که تحت انعکاس در صفحهٔ xy، که با خط قائم نمایش داده شده است، تغییر علامت می‌دهند فرد هستند؛ (۲) چون اوربیتالهای p_x و p_y دارای $m_l = \pm 1$ هستند، اوربیتال مولکولی حاصل از آنها یک اوربیتال π است. باید تأکید کنیم که در این شکل تنها دو توزیع بار را گرد هم نمی‌آوریم بلکه دامنهٔ احتمال حاصل از ترکیب توابع موج یعنی اوربیتالهای مولکولی مانند $\psi_{1s}(\mathbf{r}_A) \pm \psi_{1s}(\mathbf{r}_B)$ و $\psi_{2p_y}(\mathbf{r}_A) \pm \psi_{2p_y}(\mathbf{r}_B)$، را به‌ازای مقادیر کوچک و بزرگ R_{AB} نشان می‌دهیم.

با استفاده از این اوربیتالهای مولکولی می‌توان خواص چند مولکول دو اتمی هم هسته را بررسی کرد.

H_2 دربارهٔ این مولکول نسبتاً به‌تفصیل بحث کردیم. تنها تکرار می‌کنیم که دو الکترون می‌توانند

www.arsanjan.blogfa.com



شکل ۲۰ـ۵ نمایش نمودار (الف) اوربیتال s، و اوربیتالهای (ب) $(Y_{1,0})p_z$، (ج) $(Y_{1,1} - Y_{1,-1})p_y$، و (د) $(Y_{1,1} + Y_{1,-1})p_x$. علامت تابع موج در ناحیه‌های مربوط نیز مشخص شده است.

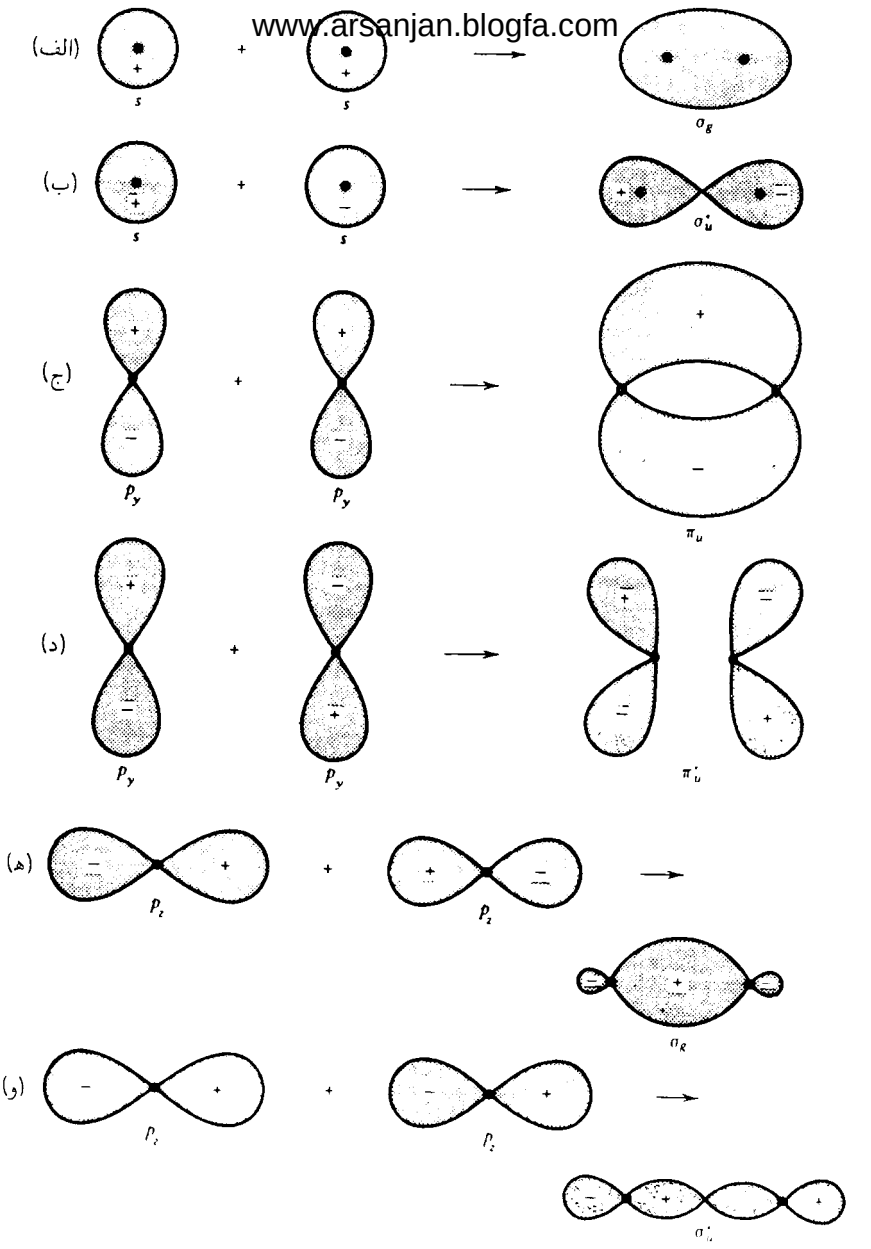
به یک اوربیتال مولکولی $1s\sigma_g$ بروند، و چون انرژی این اوربیتال از انرژی اوربیتالهای اتمی جداگانهٔ $1s$ کمتر است پایداری وجود دارد.

He_2 از چهار الکترون، تنها دو الکترون می‌توانند به اوربیتال پیوندی $1s\sigma_g$ بروند؛ دو الکترون دیگر باید یک اوربیتال ضد پیوندی $1s\sigma_u^*$ تشکیل دهند. انرژی کل از انرژی اتمهای جداگانهٔ He بیشتر است، و در نتیجه این مولکول تشکیل نمی‌شود. بنابه دیدگاه پیوند ظرفیتی، هر دو اتم الکترونهای جفت‌شده دارند، و نتیجه یکسان است. به‌طور کلی، الکترونها در اوربیتالهای پیوندی و اوربیتالهای ضد پیوندی می‌خواهند یکدیگر را خنثی کنند. چون در یک پیوند کامل دو الکترون دخیل‌اند، می‌توان یک عدد پیوند به‌صورت زیر تعریف کرد

$$\text{(عدد پیوند)} = \frac{1}{2}\left[\text{(الکترونهای اوربیتال پیوندی)} - \text{(الکترونهای اوربیتال ضد پیوندی)}\right]$$

این عدد برای He_2 صفر است.

www.arsanjan.blogfa.com



شکل ۲۰ـ۶ اوربیتالهای مولکولی حاصل از گردآمدن دو اوربیتال اتمی. (الف) از ترکیب دو اوربیتال s اوربیتال مولکولی متقارن فضایی σ_g به‌وجود می‌آید که باعث پیوند می‌شود. (ب) از ترکیب دو اوربیتال s اوربیتال مولکولی پادمتقارن فضایی ضدپیوندی σ_u^* تشکیل می‌شود. (ج) و (د) نمایش پیوند و ضد پیوند از اوربیتالهای اتمی p_y. (ه) و (و) نمایش پیوند و ضد پیوند از اوربیتالهای p_z. محور z در امتداد خط واصل هسته‌ها، که با نقطه‌های سیاه نشان داده شده‌اند، قرار دارد.

www.arsanjan.blogfa.com

Li_2 ساختار اتمی Li به‌صورت $(1s)^2(2s)$ است. بنابراین، الکترونهای $2s$ جفت‌نشده هستند، و می‌توانند اوربیتالهای پیوندی $2s\sigma_g$ تشکیل دهند. در نتیجه انتظار داریم این مولکول وجود داشته باشد، اما به دلیل مقدار $n = 2$ برای این اوربیتال انتظار داریم که انرژی بستگی به‌طور قابل‌ملاحظه‌ای کمتر از مورد مولکول H_2 باشد.

Be_2 ساختار اتمی در اینجا $(1s)^2(2s)^2$ است؛ الکترون جفت‌نشده‌ای وجود ندارد، و از این‌رو انتظار داریم مولکولی وجود نداشته باشد. در واقع همین‌طور است.

B_2 ساختار اتمی نشان می‌دهد که در هر اتم یک الکترون جفت‌نشده وجود دارد. این الکترون می‌تواند در هر یک از حالتهای $2p_x$، $2p_y$ یا $2p_z$ باشد. این حالتها می‌توانند در یک اوربیتال مولکولی $2p\pi_u$ یا $2p\sigma_g$ ترکیب شوند. اولی انرژی کمتری دارد، و از این‌رو در اینجا حالت پایه یک سه‌تایی است. این نتیجه با قاعدهٔ هوند توافق دارد: حالتی که بیشترین چندگانگی را دارد دارای کمترین انرژی است.

دلیل اینکه چرا $2p\sigma_g$ انرژی بیشتری دارد وجود اوربیتالهای $2s\sigma_g$ است. هرگاه حالتهایی با اعداد کوانتومی یکسان داشته باشیم، "آمیختگی "صورت می‌گیرد، و حالتهای تقریباً واگن می‌خواهند یکدیگر را دفع کنند. حالتی که عمدتاً $2p\sigma_g$ است صعود می‌کند. می‌بینیم پیچیدگیهایی نظیر آنچه در بحث ساختار اتمی دیدیم ظاهر می‌شوند.

C_2 ساختار اتمی $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$ است، یعنی هر اتم دو الکترون جفت‌نشده دارد. چون هر الکترون می‌تواند در یکی از سه حالت p باشد، دو اوربیتال مولکولی پیوندی می‌توانند تشکیل شوند. توصیف اوربیتال مولکولی به‌صورت $(2p\pi_u)(2p\sigma_g)$ است.

N_2 در اینجا وضعیت بسیار شبیه به مورد C_2 است بجز اینکه سه اوربیتال مولکولی پیوندی می‌توانند تشکیل شوند. توصیف اوربیتال مولکولی به‌صورت $(2p\pi_u)^2(2p\sigma_g)$ است.

O_2 در اینجا وضعیت تا اندازه‌ای جالبتر است، زیرا ساختار اتمی به‌صورت $(1s)^2(2s)^2(2p)^4$ است، یعنی چهار الکترون ظرفیت وجود دارند. برحسب اوربیتالهای مولکولی، همچون در N_2، سه پیوند می‌توانند تشکیل شوند، و در نتیجه دو الکترون باقی می‌مانند که نمی‌توانند اوربیتال پیوندی تشکیل دهند. کم‌ضررترین اوربیتال ضد پیوندی کدام است؟ این دو الکترون باید تا جایی که ممکن است از یکدیگر دوری کنند، و این را می‌توان با یک حالت سه‌تایی انجام داد که در آن الکترونها در اوربیتالهای متعامد، برای مثال یکی در یک حالت p_x و دیگری در یک حالت p_y با قسمتهای فضایی پادمتقارن شده، قرار دارند. در این مورد، اسپین O_2 برابر با ۱ است، و این یک استثنا بر تمایل قوی به اسپین صفر است که قبلاً متذکر شدیم.

در تصویر پیوند ظرفیتی، دو الکترون از چهار الکترون ظرفیت باید جفت‌شده باشند، و در نتیجه دو پیوند وجود دارند که بر هم عمودند، مانند p_x و p_z. می‌توان تأثیر این راستایی بودن را در مولکولی مانند H_2O دید. هر H یک پیوند را به‌کار می‌برد، و باید انتظار داشت که مولکول به شکل یک L، با زاویهٔ ۹۰° بین بازوهای مساوی، باشد. در عمل، هسته‌های دو هیدروژن یکدیگر را دفع می‌کنند، و می‌توان پیش‌بینی کرد که این زاویه اندکی بزرگتر از ۹۰° است. مقدار تجربی آن در

www.arsanjan.blogfa.com

حدود ۱۰۵° است. این راستایی بودن اوربیتالهای p است که شکل مولکولهای ساده را توضیح می‌دهد. با وجود بزرگتر بودن گسترهٔ امکانات در ساختار مولکولها،ما آن‌را حتی کمتر از مورد اتمها بررسی کرده‌ایم.

چرخش مولکولها

مولکولها را باز هم در تقریب استاتیک در نظر می‌گیریم. این ساختار صلب، که در آن توزیع الکترونی هسته‌ها را ثابت نگه می‌دارد، می‌تواند بچرخد. برای مثال، توزیع جرمی مولکول H_2 مانند یک دمبل است، با دو جرم نقطه‌ای که به فاصلهٔ R_{AB} از یکدیگر قرار گرفته‌اند. این دستگاه دو درجهٔ آزادی چرخشی دارد: اگر خط واصل هسته‌ها را محور z بگیریم، دستگاه می‌تواند حول محورهای x و y بچرخد. تکانهٔ زاویه‌ای حول محور z وجود ندارد، یعنی $L_z = 0$. نوعاً می‌توان نوشت

$$E_{\text{چرخشی}} = \frac{L_x^2 + L_y^2}{2\mathscr{I}} = \frac{\mathbf{L}^2 - L_z^2}{2\mathscr{I}} = \frac{L(L+1)\hbar^2}{2\mathscr{I}} \qquad (۲۰\text{-}۲۷)$$

که در آن $\mathscr{I}$ گشتاور لختی مولکول است. برای مولکولهای همقطب داریم $\mathscr{I} = MR^2/2$. چون $R \approx 2a_0$، به‌دست می‌آوریم

$$E_{\text{چرخشی}} \simeq (m/M) E_{\text{الکترونی}} \qquad (۲۰\text{-}۲۸)$$

یعنی شکافتگی چرخشی حدود سه مرتبهٔ بزرگی کوچکتر از شکافتگی الکترونی و نوعاً در حدود چند میلی الکترون ولت است. بنابراین، طول‌موج تابش گسیل‌شده در گذارهای میان ترازهای چرخشی از مرتبهٔ $1\text{mm} = 10^7\text{Å}$ است.

بیش از این به جزئیات طیفهای چرخشی مولکولها نمی‌پردازیم، و تنها متذکر می‌شویم که اصل پاؤلی نقش مهمی در مولکولهای همقطب دارد. برای مثال، مولکول H_2 را در نظر بگیرید که در آن دو هسته یکسان هستند و هر یک اسپین ۱/۲ دارند. بنابراین، تابع موج کل باید تحت تعویض دو هسته پادمتقارن باشد. دو پروتون در این مثال می‌توانند در حالت اسپینی پادمتقارن تکتایی ($S = 0$) باشند، که در نتیجه حالت چرخشی باید با یک تابع متقارن توصیف شود، و از این‌رو تکانهٔ زاویه‌ای زوج است. اگر دو پروتون در حالت اسپینی متقارن سه‌تایی ($S = 1$) باشند، تکانهٔ زاویه‌ای چرخش باید فرد باشد. برخوردهای میان مولکولهای H_2 در گاز هیدروژن توزیع حالتهای اسپینی را کاتوره‌ای می‌کنند، و با فرض اینکه آنها دارای احتمالهای مساوی هستند تعداد مولکولها در یک حالت اسپینی معین متناسب با مرتبهٔ واگنی $(2S+1)$ است. بنابراین، تعداد مولکولهای H_2 که برای آنها L فرد است سه برابر تعداد مولکولهایی

www.arsanjan.blogfa.com

است که برای آنها L زوج است. این نسبت در حالات تقارن خلاف طبیعی مربوط به گذارهای بین ترازهای چرخشی ظاهر می‌شود. به‌طور کلی، اگر اسپین هر هسته I باشد، حالتهای اسپینی $2I$، $2I-1$، $2I-2$، $2I-3$، ... و حالتهای اسپینی I، $I-1$، $I-2$، ... تقارن مخالف خواهند داشت. برای مثال، اگر I عدد درست باشد، رشتهٔ اولِ حالتهای اسپینی به تکانهٔ زاویه‌ای مداری زوج مربوط می‌شود، زیرا هسته‌ها در این مورد بوزون هستند. تعداد کل آنها برابر است با

$$\sum_{k=0}^{I}[2(2I-2k)+1] = (4I+1)(I+1) - \frac{4I(I+1)}{2} \qquad (20\text{-}29)$$
$$= (2I+1)(I+1)$$

در حالی‌که بقیهٔ حالتها با تعداد

$$(2I+1)^2 - (2I+1)(I+1) = (2I+1)I \qquad (20\text{-}30)$$

به تکانهٔ زاویه‌ای مداری فرد مربوط می‌شوند. بنابراین، به‌ازای مقادیر درست I، نسبت شدتهای L زوج به L فرد برای یک مقدار معین L برابر با $I/(I+1)$ است. برای فرمیونها این نسبت برعکس است.

انرژی حالتهای چرخشی با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$E_L = \frac{\hbar^2 L(L+1)}{2\mathscr{I}} \qquad (20\text{-}31)$$

که در آن $\mathscr{I}$ گشتاور لختی مولکول هم‌هسته است. گذارهای بین مقادیر مجاور L (برای سازگاری با قاعدهٔ گزینش $\Delta L = \pm 1$، که به‌دست خواهیم آورد) تابشهایی با بسامدهای زیر تولید می‌کنند

$$\omega(L+1 \to L) = \frac{\hbar}{2\mathscr{I}}[(L+1)(L+2) - L(L+1)] \qquad (20\text{-}32)$$
$$= \frac{\hbar}{\mathscr{I}}(L+1)$$

ارتعاش هسته‌ها در مولکولها

تا کنون هسته‌ها را در مولکولها ثابت در نظر گرفته‌ایم. این توزیع ثابت بارهای مثبت باعث یک توزیع الکترونی می‌شود که تابع موقعیت هسته‌ها است. الکترونها بسیار سریعتر از هسته‌ها حرکت می‌کنند، $v_e/v_N \approx M/m$، و توزیع الکترونی می‌تواند خود را با هر حرکت هسته‌ها به‌صورت

www.arsanjan.blogfa.com

بی‌دررو تطبیق دهد. بنابراین، $E(R)$ تغییر کند، اگرچه هسته‌ها مکان خود را حول کمینهٔ منحنی $E(R)$ به‌کندی تغییر می‌دهند. مخصوصاً، یک تغییر کند در موقعیت هسته‌ها حالت الکترونی را تغییر نخواهد داد. بسامد مربوط به تغییر ΔR در مکان هسته‌ها از مرتبهٔ $\nu \approx v_N/\Delta R$ است، در حالی‌که بسامد مربوط به تغییر در انرژی الکترونی از مرتبهٔ $\nu_e \approx \alpha c/a_\circ$ است. چون ΔR از همان مرتبهٔ بزرگی $a_\circ$ است و $v_N/\alpha c \approx ۱۰^{-۴}$، تغییر حرکت هسته برحسب زمان نمی‌تواند سبب گذار بین حالتهای الکترونی شود. درک جامعتر این نکات از مطالعهٔ فصل ۲۱ به‌دست می‌آید.

در تقریب بی‌دررو، می‌توان $E(R)$ را به‌صورت یک پتانسیل ثابت در نظر گرفت که هسته‌ها در آن حرکت می‌کنند. مخصوصاً، حرکت دور از $R_\circ$ که مکان کمینهٔ $E(R)$ است هماهنگ ساده خواهد بود:

$$E(R) \approx E(R_\circ) + \frac{۱}{۲}(R - R_\circ)^۲ \left(\frac{\partial^۲ E(R)}{\partial R^۲}\right)_\circ \qquad (۳۳_۲۰)$$

زیرا در $R = R_\circ$ داریم $\partial E(R)/\partial R = \circ$. بنابراین، برای جابه‌جاییهای کوچک، هسته‌ها به‌صورت یک نوسانگر هماهنگ حرکت می‌کنند که بسامد زاویه‌ای آن عبارت است از

$$\omega = \sqrt{\frac{۱}{M}\left(\frac{\partial^۲ E}{\partial R^۲}\right)_\circ} \qquad (۳۴_۲۰)$$

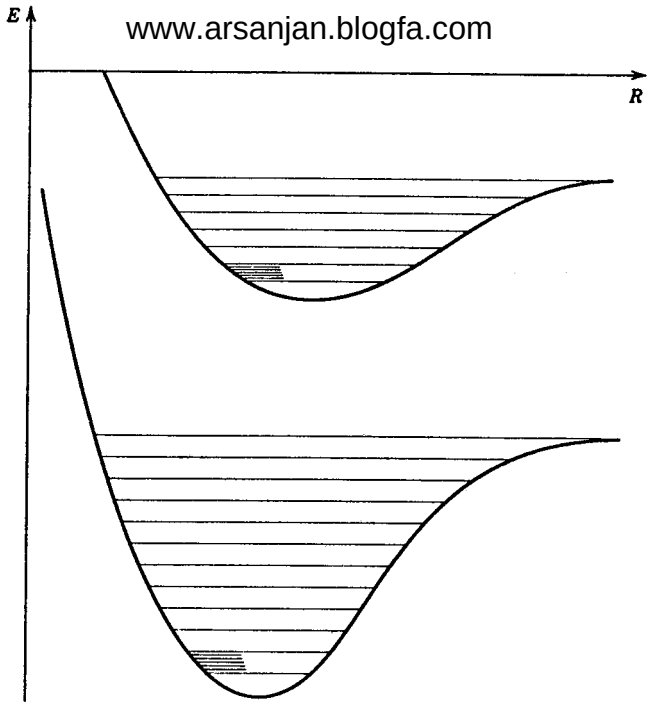
برای مولکولهای همقطب، این حرکت یک‌بعدی است و در راستای خط واصل دو هسته صورت می‌گیرد، و ویژه‌مقدارهای انرژی برای این حرکت عبارت‌اند از

$$E_{\text{ارتعاشی}} = \left(n_v + \frac{۱}{۲}\right)\hbar\omega \qquad (۳۵_۲۰)$$

که در آن $n_v = \circ, ۱, ۲, ۳, \ldots$. از روی شکل ۲۰ـ۱ می‌توان این انرژی را براورد کرد. در حوالی کمینه، $E(R)$ عبارت است از مجموع $e^۲/R$ و انرژی الکترونی کند تغییر که می‌توان آن‌را در نزدیکی کمینه به‌صورت $\kappa(R = R_\circ)$ در نظر گرفت. بنابراین، مشتق دوم عمدتاً ناشی از جملهٔ $e^۲/R$ است، و از این‌رو

$$\left(\frac{\partial^۲ E(R)}{\partial R^۲}\right)_\circ \approx \frac{۲e^۲}{R_\circ^۳} \qquad (۳۶_۲۰)$$

www.arsanjan.blogfa.com



شکل ۲۰ـ۷ ترازهای ارتعاشی که بر روی دو تراز الکترونی یک مولکول دو اتمی نهاده شده‌اند. ترازهای چرخشی مربوط به پایینترین تراز ارتعاشی نیز ترسیم شده‌اند. توجه کنید که هیچ یک از اینها به مقیاس نیستند.

چون $R_0 \approx 2a_0$، به‌دست می‌آوریم

$$\hbar\omega \approx \sqrt{\frac{\hbar^2 e^2}{4Ma_0^3}} \approx \sqrt{\frac{m}{M}} \qquad (۲۰_۳۷)$$

که نشان می‌دهد طول‌موج تابش ناشی از گذار میان ترازهای ارتعاشی از مرتبهٔ 10^5 Å است.

طیفهای مولکولی سلسله مراتب ترازها را نشان می‌دهند. فاصلهٔ ترازهای انرژی الکترونی از مرتبهٔ الکترون‌ولت است. بر روی هر تراز انرژی الکترونی یک رشته ترازهای ارتعاشی وجود دارند که با انرژیهایی از مرتبهٔ چند ده میلی‌الکترون‌ولت از هم جدا شده‌اند، و به هر تراز الکترونی مجموعه‌ای از ترازهای انرژی چرخشی وابسته است. شکل ۲۰ـ۷ ساختار مرکب طیف انرژی مولکولی را نشان می‌دهد.

در بحث بالا، این ترازها را کاملاً جدا از هم گرفته‌ایم، اما در واقع یک جفت‌شدگی ضعیف بین تمام آنها وجود دارد. برای مثال، حرکت چرخشی باعث یک واپیچش مرکزگریزی (مشابه با برآمدگی استوایی در چرخش زمین) می‌شود که عملاً روی ترازهای انرژی چرخشی تأثیر می‌گذارد، زیرا R_0 تغییر می‌کند (مسئلهٔ ۲۰ـ۴). شکل $E(R)$ برای هر تراز الکترونی تفاوت می‌کند، و از این‌رو نقش

www.arsanjan.blogfa.com

خطوط طیفی (که تنها با قاعده‌های گزینش $\Delta J = \pm 1$ و $\Delta \ell = \pm 1$ ساده شده است) واقعاً پیچیده است. از تقریب بی‌دررو که در اینجا به‌کار بردیم فراتر نخواهیم رفت. راهکار بورن-اپنهایمر روش منظمی برای بهتر کردن تقریبها فراهم می‌آورد، اما این روش فراتر از اهداف این کتاب است.

مسائل

۲۰-۱ در HCl تعدادی خط جذبی با اعداد موج ۸۳٫۰۳، ۱۰۳٫۷۳، ۱۲۴٫۳۰، ۱۴۵٫۰۳، ۱۶۵٫۵۱، ۱۸۵٫۸۶ (cm^{-1}) (برحسب) مشاهده شده‌اند. این خطها گذارهای ارتعاشی هستند یا چرخشی؟ اگر ارتعاشی هستند، بسامد مشخصه را تعیین کنید. اگر چرخشی هستند، به چه مقادیری از J مربوط می‌شوند؟ در این مورد، گشتاور لختی HCl را به‌دست آورید، و فاصلهٔ بین هسته‌ها را براورد کنید. (در تابش، اعداد کوانتومی به‌اندازهٔ یک واحد تغییر می‌کنند).

۲۰-۲ گازی از مولکولهای HCl در دمای $300\,\text{K}$ است. نسبت تعداد مولکولها در حالت $J = 10$ به تعداد مولکولها در حالت $J = 0$ را به‌دست آورید.

۲۰-۳ بسامد ارتعاش مولکول CO در پایینترین حالت برابر است با $\nu_0 = 2 \times 10^{13}\,\text{Hz}$. طول‌موج تابشی ناشی از پایینترین برانگیختگی ارتعاشی را تعیین کنید. اگر دما $300\,\text{K}$ باشد، احتمال اینکه CO در اولین حالت برانگیختهٔ ارتعاشی باشد نسبت به احتمال اینکه در حالت پایهٔ ارتعاشی باشد چقدر است؟

۲۰-۴ انرژی ارتعاشی و چرخشی یک مولکول را در تقریب زیر در نظر بگیرید

$$E_J(R) = \frac{1}{2}m\omega^2(R - R_0)^2 + \frac{J(J+1)\hbar^2}{2mR^2}$$

مکانی را که در آن انرژی کمینه است به‌دست آورید. اگر گشتاور لختی این مولکول را با استفاده از فاصلهٔ میان-هسته‌ای جدید محاسبه کنیم، نشان دهید انرژی چرخشی را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$E_J = AJ(J+1) + B[J(J+1)]^2 + \cdots$$

ضرایب A و B را تعیین کنید (B معرف تأثیر واپیچش مرکزگریزی است).

مراجع

این فصل تا اندازهٔ زیادی براساس بحث مولکولها درکتاب زیر نوشته شده است

G Baym, *Lectures on Quantum Mechanics*, W A Benjamin. New York, 1969.

www.arsanjan.blogfa.com
خوانندهٔ علاقه‌مند می‌تواند برای اطلاعات بیشتر به کتابهای زیر مراجعه کند

M Karplus and R N Porter, *Atoms and Molecules*, W A Benjamin New York, 1970.

M W Hanna, *Quantum Mechanics in Chemistry*, W A Benjamin, New York, 1969.

U Fano and L Fano, *Physics of Atoms and Molecules*, Chicago University Press, Chicago, 1972.

G W King, *Spectroscopy and Molecular Structure*, Holt, Rinehart & Winston, New York, 1964.

البته دهها کتاب دربارهٔ شیمی کوانتومی، ساختار مولکولی و طیف نمایی مولکولی وجود دارند، و کتابهای بالا صرفاً آنهایی هستند که مؤلف می‌شناسد. برای مراجع مناسبتر، بهتر است با شیمی‌ـفیزیکدانها مشورت کنید.

www.arsanjan.blogfa.com

۲۱

تابش اتمی

در مطالعهٔ طیفها، یعنی مطالعهٔ گذارهای بین ترازهای اتمی که با گسیل یا جذب تابش همراه است، با برهم‌کنش بین اتمها و میدان الکترومغناطیسی سروکار داریم. چون میدان تابش نوسان می‌کند وابسته به زمان است. بنابراین، لازم است اثر اختلالهای وابسته به زمان را بررسی کنیم.

نظریهٔ اختلال وابسته به زمان

مسئله این است که با داشتن مجموعهٔ کامل جوابهای معادلهٔ

$$H_{\circ}\,\phi_n = E_n^{\circ}\,\phi_n \qquad (۱\text{-}۲۱)$$

$\psi(t)$ را که در معادلهٔ زیر صدق می‌کند به‌دست آوریم

$$i\hbar\frac{\partial\psi(t)}{\partial t} = [H_{\circ} + \lambda V(t)]\psi(t) \qquad (۲\text{-}۲۱)$$

www.arsanjan1.blogfa.com

راهکار متعارف عبارت است از بسط برحسب مجموعهٔ کامل حالتها:

$$\psi(t) = \sum_n c_n(t) e^{-iE_n^\circ t/\hbar} \phi_n \qquad (۳_۲۱)$$

وابستگی زمانی مربوط به ϕ_n به‌صراحت در این بسط گنجانده شده است، به‌طوری که اگر $V(t) = \circ$ آنگاه $c_n(t)$ها باید ثابت باشند. ضرایب بسط $c_n(t)$ در مجموعه‌ای از معادله‌هایی صدق می‌کنند که می‌توان آنها را با قراردادن ۲۱ـ۳ در معادلهٔ شرودینگر وابسته به زمان ۲۱ـ۲ به‌دست آورد. در نتیجه داریم

$$\sum_n \left[i\hbar \frac{dc_n(t)}{dt} + E_n^\circ c_n(t) \right] e^{-iE_n^\circ t/\hbar} \phi_n = H\psi(t)$$

$$= \sum_n [E_n^\circ + \lambda V(t) c_n(t) e^{-iE_n^\circ t/\hbar} \phi_n$$

یا

$$ih \sum_n \frac{dc_n(t)}{dt} e^{-iE_n^\circ t/h} \phi_n = \lambda \sum_n V(t) c_n(t) e^{-iE_n^\circ t/\hbar} \phi_n \qquad (۴_۲۱)$$

از ضرب نرده‌ای با ϕ_m و با استفاده از راست‌هنجاری ϕ_m، یعنی

$$\langle \phi_m | \phi_n \rangle = \delta_{mn} \qquad (۵_۲۱)$$

پس از حذف عامل $e^{-iE_m^{(\circ)} t/\hbar}$ به مجموعهٔ معادله‌های زیر می‌رسیم

$$ih \frac{dc_m(t)}{dt} = \lambda \sum_n c_n(t) e^{i(E_m^\circ - E_n^\circ)t/\hbar} \langle \phi_m | V(t) | \phi_n \rangle \qquad (۶_۲۱)$$

این معادله‌ها را تا مرتبهٔ اول برحسب پارامتر λ حل خواهیم کرد. به‌عنوان یک شرط اولیه در $t = \circ$، دستگاه را در یک حالت خاص ϕ_k می‌گیریم، و در نتیجه $\psi(\circ) = \phi_k$، یعنی

$$c_n(\circ) = \delta_{nk} \qquad (۷_۲۱)$$

گاهی حالت اولیه درگذشتهٔ دور مشخص می‌شود. در این مورد، ۲۱ـ۷ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\lim_{t_\circ \to -\infty} c_n(t_\circ) = \delta_{nk}$$

www.arsanjan.blogfa.com

چون هر انحرافی از این مقادیر در زمانهای بعد به λ بستگی دارد، برای یک محاسبهٔ مرتبهٔ اول می‌توان ۲۱ـ۷ را در طرف راست ۲۱ـ۶ قرار داد. در نتیجه معادلهٔ دیفرانسیل زیر (با $m \neq k$) به‌دست می‌آید

$$i\hbar \frac{dc_m(t)}{dt} = \lambda\, e^{i(E_m^\circ - E_k^\circ)t/\hbar} \langle \phi_m | V(t) | \phi_k \rangle \qquad (۸ـ۲۱)$$

که به‌آسانی حل می‌شود:

$$c_m(t) = \frac{\lambda}{i\hbar} \int_\circ^t dt' e^{i(E_m^\circ - E_k^\circ)t'/\hbar} \langle \phi_m | V(t') | \phi_k \rangle \qquad (۹ـ۲۱)$$

احتمال اینکه در زمان بعدی t حالت $\psi(t)$ یک ویژه‌حالت $H_\circ$ با انرژی E_n°، یعنی ϕ_n، باشد بنابه قضیه بسط برابر است با

$$P_n(t) = |\langle \phi_n | \psi(t) \rangle|^2 = |c_n(t)|^2 \qquad (۱۰ـ۲۱)$$

این نتیجهٔ کلی را تنها در صورتی می‌توان مشخص‌تر کرد که $V(t)$ معلوم باشد.

مثال: یک اتم هیدروژن در حالت پایه در میدان الکتریکی زیر که قطع و وصل می‌شود قرار دارد

$$\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_\circ\, e^{-t^2/\tau^2}$$

احتمال این را به‌دست آورید که اتم هیدروژن پس از یک مدت طولانی ($t \gg \tau$) در حالت $n = 2$، $l = 1$، $m = \circ$ باشد.

حل: از ۱۶ـ۳۲ می‌بینیم که اختلال به‌صورت زیر است

$$\lambda V(t) = eE_\circ z\, e^{-t^2/\tau^2}$$

چون $t \gg \tau$، می‌توان حدود بالا و پایین انتگرال زمانی در ۲۱ـ۹ را به‌ترتیب ∞ و $-\infty$ گرفت. بنابراین

$$\begin{aligned} c_{21\circ}(\infty) &= \frac{eE_\circ}{i\hbar} \langle \phi_{21\circ} | z | \phi_{1\circ\circ} \rangle \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{i(E_{21\circ} - E_{1\circ\circ})t'/\hbar} e^{-t'^2/\tau^2} \\ &= \frac{eE_\circ}{i\hbar} \langle \phi_{21\circ} | z | \phi_{1\circ\circ} \rangle \tau \sqrt{\pi} e^{-\omega^2\tau^2/4} \end{aligned}$$

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن کمیت $(E_{۲۱۰} - E_{۱۰۰})/\hbar$ بسامد زاویه‌ای فوتونی که در گذار $(۱,۰,۰) \to (۲,۱,۰)$ گسیل می‌شود. احتمال عبارت است از مجذور قدرمطلق نتیجهٔ بالا:

$$P = \frac{e^۲ E_۰^۲ \tau^۲ \pi}{\hbar^۲} |\langle \phi_{۲۱۰} | z | \phi_{۱۰۰} \rangle|^۲ e^{-\omega^۲ \tau^۲ / ۲}$$

توجه کنید که به‌ازای $\tau \to \infty$ داریم $P \to ۰$. وقتی میدان الکتریکی به آرامی برقرار شود، احتمال گذار به صفر میل می‌کند، یعنی اتم خود را به‌طور بی‌دررو با میدان الکتریکی برقرار شده سازگار می‌کند، بدون اینکه برای انجام دادن گذار "تکان" بخورد.

تغییر زمانی هماهنگ پتانسیل

در بسیاری از مثالها، وابستگی زمانی پتانسیل به‌صورت زیر است

$$V(t) = V e^{-i\omega t} + V^\dagger e^{i\omega t} \qquad (۱۱_۲۱)$$

که در آن V و $V^\dagger$ عملگرهایی هستند که وابستگی صریح به زمان ندارند. در این مورد،

$$c_m(t) = \frac{\lambda}{i\hbar} \int_۰^t dt' e^{i\omega_{mk} t'} [e^{-i\omega t'} \langle \phi_m | V | \phi_k \rangle + e^{i\omega t'} \langle \phi_m | V^\dagger | \phi_k \rangle] \qquad (۱۲_۲۱)$$

که در آن $\omega_{mk} = (E_m^۰ - E_k^۰)/\hbar$. در اکثر موارد با $t \to \infty$ سروکار داریم. انتگرالهای زمانی را محاسبه می‌کنیم:

$$\int_۰^t dt' e^{i(\omega_{mk} - \omega)t'} = \frac{e^{i(\omega_{mk}-\omega)t} - ۱}{i(\omega_{mk} - \omega)} = e^{i(\omega_{mk}-\omega)t/۲} \frac{\sin(\omega_{mk} - \omega)t/۲}{(\omega_{mk} - \omega)/۲} \qquad (۱۳_۲۱)$$

انتگرال دوم را می‌توان با تعویض $\omega \to -\omega$ به‌دست آورد. اکنون باید کمیت زیر را محاسبه کنیم

$$\begin{aligned} &|e^{i(\omega_{mk}-\omega)t/۲} \frac{\sin(\omega_{mk} - \omega)t/۲}{(\omega_{mk} - \omega)/۲} \langle \phi_m | V | \phi_k \rangle \\ &+ e^{i(\omega_{mk}-\omega)t/۲} \frac{\sin(\omega_{mk} + \omega)t/۲}{(\omega_{mk} + \omega)/۲} \langle \phi_m | V^\dagger | \phi_k \rangle|^۲ \end{aligned} \qquad (۱۴_۲۱)$$

از محتوای این کمیت می‌توان استنباط کرد که تنها وقتی $\omega = \pm\omega_{mk}$ جمله‌ها مهم خواهند بود. سه جمله داریم: یکی از آنها عبارت است از

$$\left(\frac{\sin(\omega_{mk} - \omega)t/۲}{(\omega_{mk} - \omega)/۲} \right)^۲ |\langle \phi_m | V | \phi_k \rangle|^۲ \qquad (۱۵_۲۱)$$

و جملهٔ دوم برابر است با جملهٔ بالا که در آن $\omega \to -\omega$؛ جملهٔ سوم دارای وابستگی زمانی به‌صورت زیر است

www.arsanjan.blogfa.com

$$e^{i\omega t}\frac{\sin(\omega_{mk}-\omega)t/۲}{(\omega_{mk}-\omega)/۲}\ \frac{\sin(\omega_{mk}+\omega)t/۲}{(\omega_{mk}+\omega)/۲} + \text{همیوغ مختلط} \qquad (۱۶_۲۱)$$

با استفاده از یک قضیهٔ ریاضی که لم‌ریمن- لبگ نامیده می‌شود، می‌توان نشان داد وقتی $t \to \infty$ آنگاه $t^n \sin \alpha t$ سریعتر از هر توان t به صفر میل می‌کند، و همچنین است برای $t^n \cos \alpha t$. وقتی این نتیجه را برای جمله‌های ۲۱ـ۱۶ به‌کار ببریم، می‌بینیم تنها یک جملهٔ مستقل از t باقی می‌ماند (مسئلهٔ ۲۱ـ۹)، اما این جمله نسبت به جمله‌هایی مانند آنچه در ۲۱ـ۱۵ ظاهر می‌شوند و چنانکه نشان خواهیم داد به‌طور خطی با t افزایش می‌یابند قابل چشمپوشی است.

این جمله‌ها به‌صورت زیر هستند

$$F(t) = \frac{۴}{\Delta^۲}\sin^۲\frac{t\Delta}{۲} \qquad (۱۷_۲۱)$$

که در آن

$$\Delta = \frac{E_m^\circ - E_k^\circ \mp \hbar\omega}{\hbar} \qquad (۱۸_۲۱)$$

شکل ۲۱ـ۱ رفتار این تابع را نشان می‌دهد. به‌ازای مقادیر بزرگ t، این تابع در $\Delta = ۰$ یک قلهٔ تیز دارد، و دور از $\Delta = ۰$ به‌سرعت نوسان می‌کند. این نوع رفتار را به تابع دلتا نسبت می‌دهیم. در واقع، اگر $f(\Delta)$ تابع همواری از Δ باشد، به‌ازای مقادیر بزرگ t داریم

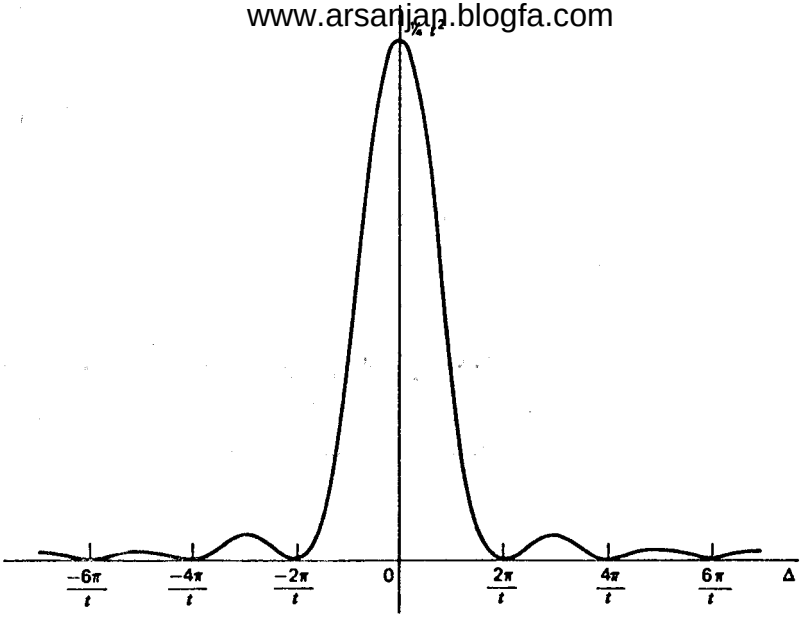
$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} f(\Delta)\frac{۴}{\Delta^۲}\sin^۲\frac{t\Delta}{۲}d\Delta &\approx f(۰)\int_{-\infty}^{\infty} d\Delta\frac{۴}{\Delta^۲}\sin^۲\frac{t\Delta}{۲}\\ &= ۲tf(۰)\int_{-\infty}^{\infty} dy\frac{۱}{y^۲}\sin^۲ y = ۲\pi t f(۰)\end{aligned} \qquad (۱۹_۲۱)$$

یعنی به‌ازای مقادیر بزرگ t،

$$\frac{۴}{\Delta^۲}\sin^۲\frac{t\Delta}{۲} \to ۲\pi t\ \delta(\Delta) = ۲\pi\hbar t\delta(E_m^\circ - E_k^\circ \mp \hbar\omega) \qquad (۲۰_۲۱)$$

بنابراین، احتمال گذار در ۲۱ـ۱۴ به‌طور خطی با زمان زیاد می‌شود، و جملهٔ تداخلی که مستقل از t است در زمانهای طولانی اهمیت کمتری می‌یابد. بدین‌ترتیب، برای احتمال گذار در واحد زمان

www.arsanjan.blogfa.com



شکل ۲۱ـ۱ نمودار تابع $(1/\Delta^2)\sin^2 t\Delta/2$ برحسب Δ.

به‌دست می‌آوریم

$$\Gamma_{k\to m} = \frac{2\pi}{h}|\langle\phi_m|V|\phi_k\rangle|^2\delta(E_m^\circ - E_k^\circ - h\omega) + \frac{2\pi}{h}|\langle\phi_m|V^\dagger|\phi_k\rangle|^2\delta(E_m^\circ - E_k^\circ + h\omega) \qquad (21\text{ـ}21)$$

چون $E_m^\circ - E_k^\circ$ ثابت است، تنها یکی از دو جمله می‌تواند به‌ازای یک مقدار ثابت ω مؤثر باشد. توابع دلتا تضمین می‌کنند که اگر $E_k^\circ > E_m^\circ$، یعنی اگر اتم‌گذاری از یک حالت انرژی بیشتر به یک حالت انرژی کمتر داشته باشد، آنگاه تنها جملهٔ دوم مؤثر خواهد بود، و این تنها به شرطی است که $h\omega = E_k^\circ - E_m^\circ$. اگر جملهٔ پتانسیل مربوط در ۲۱ـ۱۱ به‌صورت زیر بود

$$\lambda V(t) = \int_\circ^\infty d\omega'\, V(\omega')e^{-i\omega' t} + \int_\circ^\infty d\omega' V^\dagger(\omega')e^{i\omega' t}$$

آنگاه تابع دلتا جملهٔ دوم را، که برای آن $h\omega'$ برابر است با $\Delta E = E_k^\circ - E_m^\circ$، انتخاب می‌کرد.

معادلهٔ ۶ـ۶۷ با $A = H$ نشان می‌دهد که

www.arsanjan.blogfa.com

$$\left\langle \frac{dH}{dt} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial H}{\partial t} \right\rangle \qquad (۲۱_۲۲)$$

و در نتیجه با پتانسیل وابسته به زمان، انرژی یک ثابت حرکت نیست. در اینجا با صراحت بیشتری می‌بینیم که پتانسیل وابسته به زمان چه مقدار انرژی می‌تواند جذب یا گسیل کند.

جفت‌شدگی اتمها به میدان الکترومغناطیسی

هامیلتونی توصیف‌کنندهٔ برهم‌کنش الکترون در پتانسیل استاتیک $V(r)$ با یک میدان الکترومغناطیسی که با پتانسیل برداری $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ توصیف می‌شود، چنانکه در فصل ۱۳ دیدیم، به‌صورت زیر است

$$H = \frac{[\mathbf{p} + (e/c)\mathbf{A}(\mathbf{r},t)]^2}{2m} + V(r) \qquad (۲۱_۲۳)$$

بنابراین، با

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r) \qquad (۲۱_۲۴)$$

نتیجه می‌گیریم که

$$\lambda V(t) = \frac{e}{mc}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\cdot\mathbf{p} \qquad (۲۱_۲۵)$$

در به‌دست آوردن رابطهٔ بالا پیمانه را به‌گونه‌ای مشخص کرده‌ایم که

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = 0 \qquad (۲۱_۲۶)$$

در این شرایط، $\mathbf{p}\cdot\mathbf{A} = \mathbf{A}\cdot\mathbf{p}$، و جملهٔ درجهٔ دوم برحسب $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ را حذف کرده‌ایم. اگر بار الکترون e را به‌عنوان پارامتر کوچکی λ در نظر بگیریم، جملهٔ $\mathbf{A}^2$ یک جملهٔ مرتبهٔ دوم خواهد بود. خواهیم دید که جملهٔ $\mathbf{A}^2$ در پراکندگی نور توسط اتم و درگذار همراه با گسیل دو فوتون مؤثر است، اما درگذار همراه با گسیل (یا جذب) یک فوتون تأثیری ندارد. در احتمال گذار دو فوتونی عامل $(e^2)^2$ دخیل است، در حالی‌که احتمال گذار تک‌فوتونی متناسب با e^2 است. با یادآوری اینکه عدد بدون بعد مناسبی که شامل e^2 باشد عبارت است از $\alpha = e^2/\hbar c \cong 1/137$، توجه به گذارهایی که با گسیل تنها یک فوتون همراه هستند موجه است.

www.arsanjanfloyfa.com

برای توجیه واقعی ارتباط $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ با فوتون ــ به‌طوری که توانهای بالاتر $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ وجود فوتونهای بیشتری را ایجاب کند ــ باید میدان الکترومغناطیسی را به زبان مکانیک کوانتومی بیان کرد، یعنی میدان در هر نقطهٔ $\mathbf{r}$ را عملگر در نظر گرفت. این کار اصولاً چندان پیچیده نیست، اما خارج از اهداف این کتاب است. بنابراین، حکمهای زیر را بدون استدلال می‌پذیریم.

اگر بنویسیم

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = \mathbf{A}_{\circ}^{*}(\mathbf{r})\, e^{i\omega t} + \mathbf{A}_{\circ}(\mathbf{r})\, e^{-i\omega t} \qquad (۲۷_۲۱)$$

آنگاه در گسیل فوتون تنها جملهٔ اول، با وابستگی زمانی $e^{i\omega t}$، را باید در $\lambda V(t)$ دخالت داد، در حالی‌که در جذب فوتون فقط جملهٔ دوم، با وابستگی زمانی $e^{-i\omega t}$، ظاهر می‌شود. این پیامدی است از ارتباط کلی $\mathbf{A}_{\circ}^{*}(\mathbf{r})$ با ایجاد فوتون و $\mathbf{A}_{\circ}(\mathbf{r})$ با نابودی فوتون، و وابستگی زمانی دقیقاً همان است که باید از نوسانگر هماهنگ ۷ـ۶۷ انتظار داشت. شباهت با مسئلهٔ نوسانگر هماهنگ اتفاقی نیست، زیرا در کوانتش میدان الکترومغناطیسی آنچه انجام می‌شود تجزیهٔ مد بهنجار است که بنابر آن درمی‌یابیم میدان واقعاً مجموعه‌ای از نوسانگرهای هماهنگ ساده است؛ و اینها نیز کوانتیده هستند. "عدد اشغال" n، که نشان بردار حالت نوسانگر هماهنگ است، را می‌توان به تعداد فوتونها مربوط کرد، و در نتیجه $\mathbf{A}_{\circ}^{*}$ تعداد فوتونها را یکی زیاد می‌کند و $\mathbf{A}_{\circ}$ تعداد فوتونها را یکی کم می‌کند.

در توصیف کمی‌تر $\mathbf{A}_{\circ}^{*}(\mathbf{r})$ و $\mathbf{A}_{\circ}(\mathbf{r})$، خوشبختانه به ابزارهای کامل الکترودینامیک کوانتومی نیازی نیست. بنابراین می‌توان با استدلالهای مبتنی بر اصل تطابق این کمیتها را به‌دست آورد، و سپس تنها تغییرات کوانتوم مکانیکی را منظور کرد. میدان الکترومغناطیسی در نقاط دور از چشمه رفتار فضایی بسیار ساده‌ای دارد. با جاگذاری ۲۱ـ۲۷ در ۱۳ـ۱۴، به‌دست می‌آوریم

$$-\boldsymbol{\nabla}^{۲}\mathbf{A}_{\circ}(\mathbf{r}) - \frac{\omega^{۲}}{c^{۲}}\mathbf{A}_{\circ}(\mathbf{r}) = \circ \qquad (۲۸_۲۱)$$

که جواب آن به‌صورت زیر است

$$\mathbf{A}_{\circ}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}_{\circ}\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \qquad (۲۹_۲۱)$$

که در آن

$$\mathbf{k}^{۲} = \frac{\omega^{۲}}{c^{۲}} \qquad (۳۰_۲۱)$$

انتخاب پیمانهٔ ۲۱ـ۲۶ ایجاب می‌کند که

www.arsanjan.blogfa.com

$$\mathbf{k}\cdot\mathbf{A}_{\circ}=\circ \qquad (۳۱_۲۱)$$

میدانهای الکتریکی و مغناطیسی مربوط به این پتانسیل برداری عبارت‌اند از

$$\begin{aligned}\mathbf{E}&=-\frac{۱}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}=\frac{i\omega}{c}\mathbf{A}_{\circ}e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}+\text{همیوغ مختلط}\\ \mathbf{B}&=\boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{A}=i\mathbf{k}\times\mathbf{A}_{\circ}e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}+\text{همیوغ مختلط}\end{aligned} \qquad (۳۲_۲۱)$$

چگالی انرژی این میدان الکترومغناطیسی با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$\frac{۱}{۸\pi}(\mathbf{E}^{۲}+\mathbf{B}^{۲})=\frac{۱}{۸\pi}\Big[۲\frac{\omega^{۲}}{c^{۲}}\mathbf{A}_{\circ}\cdot\mathbf{A}_{\circ}^{*}+۲(\mathbf{k}\times\mathbf{A}_{\circ})\cdot(\mathbf{k}\times\mathbf{A}_{\circ}^{*})+\text{جمله‌های نوسانی}\Big] \qquad (۳۳_۲۱)$$

اگر نسبت به زمان میانگین بگیریم، که در نتیجه جمله‌های نوسانی حذف می‌شوند، و از این واقعیت استفاده کنیم که با توجه به ۲۱ـ۳۱

$$(\mathbf{k}\times\mathbf{A}_{\circ})\cdot(\mathbf{k}\times\mathbf{A}_{\circ}^{*})=k^{۲}\mathbf{A}_{\circ}\cdot\mathbf{A}_{\circ}^{*} \qquad (۳۴_۲۱)$$

و همچنین $k^{۲}=\omega^{۲}/c^{۲}$، به‌دست می‌آوریم

$$\frac{۱}{۸\pi}(\mathbf{E}^{۲}+\mathbf{B}^{۲})=\frac{\omega^{۲}}{۲\pi c^{۲}}\mathbf{A}_{\circ}\cdot\mathbf{A}_{\circ}^{*} \qquad (۳۵_۲۱)$$

اگر دستگاه در جعبه‌ای به حجم V محبوس باشد، انرژی کل در میدان الکترومغناطیسی برابر است با

$$\int d^{۳}r\frac{۱}{۸\pi}(\mathbf{E}^{۲}+\mathbf{B}^{۲})=\frac{\omega^{۲}V}{۲\pi c^{۲}}|\mathbf{A}_{\circ}|^{۲} \qquad (۳۶_۲۱)$$

با فرض اینکه این انرژی توسط N فوتون، هر یک با انرژی $\hbar\omega$، حمل می‌شود، داریم

$$\frac{\omega^{۲}V}{۲\pi c^{۲}}|\mathbf{A}_{\circ}|^{۲}=N\hbar\omega \qquad (۳۷_۲۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com

جهت $\mathbf{A}_0$ را قطبش میدان می‌نامیم و بردار یکهٔ ϵ نشان می‌دهیم. این بردار یکه در رابطه‌های زیر صدق می‌کند

$$\begin{aligned}\epsilon \cdot \epsilon &= 1 \\ \epsilon \cdot \mathbf{k} &= 0\end{aligned} \qquad (۳۸_۲۱)$$

بنابراین، به‌دست می‌آوریم

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = \left(\frac{2\pi c^2 N\hbar}{\omega V}\right)^{1/2} \epsilon\, e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \qquad (۳۹_۲۱)$$

تغییر کوانتوم‌ـالکترودینامیکی به‌صورت زیر است: برای اینکه ذرهٔ باردار یک کوانتوم نور از حالت اولیه‌ای که N فوتون با بسامد زاویه‌ای ω دارد جذب کند، می‌نویسیم

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = \left(\frac{2\pi c^2 N\hbar}{\omega V}\right)^{1/2} \epsilon\, e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \qquad (۴۰_۲۱)$$

و برای گسیل یک کوانتوم نور توسط یک ذرهٔ باردار به یک حالت نهایی با $N+1$ کوانتوم، یعنی از حالت اولیه‌ای با N کوانتوم با بسامد زاویه‌ای ω، می‌نویسیم

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = \left[\frac{2\pi c^2 (N+1)\hbar}{\omega V}\right]^{1/2} \epsilon\, e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \qquad (۴۱_۲۱)$$

در نتیجه، برای گسیل یک فوتون با بسامد ω از حالتی که هیچ فوتونی ندارد، بنابه ۲۱ـ۲۵ به‌دست می‌آوریم

$$\lambda V(t) = \frac{e}{mc}\left(\frac{2\pi c^2\hbar}{\omega V}\right)^{1/2} \epsilon\cdot\mathbf{p}\, e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \qquad (۴۲_۲۱)$$

اکنون آهنگ گذار در واحد زمان ۲۱ـ۲۱ را در نظر می‌گیریم و فرض می‌کنیم $E_k^0 > E_m^0$، یعنی گذار مورد نظر به گسیل یک فوتون با انرژی $\hbar\omega$ مربوط می‌شود. آهنگ گذار به‌صورت زیر است

$$\Gamma_{k\to m} = 2\pi\hbar\frac{2\pi e^2}{m^2\hbar\omega V}|\langle\phi_m|e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\epsilon\cdot\mathbf{p}|\phi_k\rangle|^2\delta(E_k^0 - E_m^0 - \hbar\omega) \qquad (۴۳_۲۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com

در این وضعیت، خواننده بدون شک احساس بی‌اعتمادی می‌کند. عملیاتی که به ۲۱ـ۲۱ منجر شدند مسلماً سرراست نیستند. اولاً، در آنها مفاهیم مبهمی مانند "مقادیر بزرگ t" دخیل‌اند که نمی‌توان آنها را چندان جدی گرفت، زیرا احتمال گذاری که به‌طور خطی با زمان زیاد می‌شود دیر یا زود از ۱ می‌گذرد. ثانیاً، به یک فرمول بی‌معنی می‌رسیم که بنابه آن یک کمیت کاملاً منطقی مانند آهنگ گذار با یک تابع دلتا متناسب است. بحث رضایت‌بخش‌تری را می‌توانید در مبحث ویژهٔ طول عمر، پهنای خط و تشدید ببینید. در اینجا تنها نشان می‌دهیم که ۲۱ـ۴۳ اگر به‌صورت مناسب به‌کار رود درست است.

بدین‌منظور، متذکر می‌شویم که $\Gamma_{k\to m}$ در واقع احتمال گذار اتم در واحد زمان از حالت ϕ_k به حالت ϕ_m همراه با گسیل یک فوتون با انرژی $\hbar\omega$ است. تابع دلتا، با وجود ناخوشایند بودنش، می‌گوید که انرژی باید پایسته باشد، یعنی

$$\hbar\omega = E_k^\circ - E_m^\circ \qquad (۴۴\text{ـ}۲۱)$$

در واقع روی تابع دلتا انتگرال گرفته می‌شود، زیرا انرژی فوتون $\hbar\omega$ به‌تنهایی حالت فوتون را مشخص نمی‌کند. فوتون به‌طور کلی در یک بازهٔ تکانهٔ $(\mathbf{k}, \mathbf{k}+\Delta\mathbf{k})$ در حوالی $|\mathbf{k}| = \omega/c$ آشکارسازی می‌شود، و آهنگ گذاری که اندازه‌گیری می‌شود عملاً به‌صورت زیر است

$$R_{k\to m} = \sum_{\Delta\mathbf{k}} \Gamma_{k\to m} \qquad (۴۵\text{ـ}۲۱)$$

که در آن روی تمام حالتهای ممکن فوتون در این بازه جمع زده می‌شود. توجه کنید که حالتهای نهایی مختلف در بازهٔ $\Delta\mathbf{k}$ اصولاً تمایزپذیرند، و در نتیجه این احتمالها هستند که جمع زده می‌شوند. خواهیم دید که مجموع ۲۱ـ۴۵ کاملاً معین است، زیرا در واقع شامل انتگرال روی یک تابع دلتا و یک تابع هموار است. این جمع را در بخش بعد محاسبه می‌کنیم.

فضای فاز

اکنون تعداد حالتهای فوتون در بازهٔ تکانهٔ $(\mathbf{k}, \mathbf{k}+\Delta\mathbf{k})$، یعنی چگالی حالتهای فوتون، را محاسبه می‌کنیم. برای این منظور، پتانسیل برداری $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ را به‌صورت زیر می‌نویسیم

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}}\,\mathbf{a}\, e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} + \text{همیوغ مختلط} \qquad (۴۶\text{ـ}۲۱)$$

که در آن V حجم محفظه‌ای است که محاسبه در آن انجام می‌شود. این "جعبه" صرفاً وسیله‌ای است برای رهایی از زحمت کار با بسته‌های موج برای ذرات آزاد (در اینجا فوتونها ــ به فصل ۴

www.arsanjan.blogfa.com

مراجعه کنید). شکل آن و شرایط مرزی دوره‌ای را می‌توان به‌کار گرفت، اما جعبه باید بزرگ باشد. در پایان، حد $V \to \infty$ را می‌گیریم. بهتر است جعبه را مکعبی به ضلع L بگیریم، و شرایط مرزی دوره‌ای را تحمیل کنیم، یعنی

$$\mathbf{A}(x+L,y,z,t) = \mathbf{A}(x,y,z,t) \qquad (۴۷_۲۱)$$

و غیره. در نتیجه، اعداد موج و تکانه‌ها، همچون مسئلهٔ ذره در جعبهٔ یک‌بعدی، کوانتیده خواهند بود. رابطهٔ ۲۱ـ۴۶ ایجاب می‌کند که

$$e^{ik_x L} = e^{ik_y L} = e^{ik_z L} = ۱ \qquad (۴۸_۲۱)$$

یعنی اعداد موج باید به‌صورت زیر باشند

$$k_x = \frac{۲\pi}{L} n_x \qquad k_y = \frac{۲\pi}{L} n_y \qquad k_z = \frac{۲\pi}{L} n_z \qquad (۴۹_۲۱)$$

که در آنها n_x، n_y و n_z اعداد درست هستند. همچنین داریم

$$\Delta \mathbf{k} = \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z = \left(\frac{۲\pi}{L}\right)^{۳} \Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z \qquad (۵۰_۲۱)$$

و

$$\omega = |\mathbf{k}| c = \frac{۲\pi c}{L} (n_x^{۲} + n_y^{۲} + n_z^{۲})^{۱/۲} \qquad (۵۱_۲۱)$$

در رابطه‌ای مانند ۲۱ـ۴۵، روی تمام مقادیر (n_x, n_y, n_z) در گستره‌ای که با ۲۱ـ۵۰ مشخص می‌شود و با قید تابع دلتا سازگار است جمع می‌زنیم. بنابراین،

$$R_{k\to m} = \sum_{\Delta \mathbf{k}} \Gamma_{k\to m} \qquad (۵۲_۲۱)$$

در این فصل حجم V را بسیار بزرگ می‌گیریم، و در نتیجه حالتها بسیار چگال می‌شوند و جمع در ۲۱ـ۵۰ را می‌توان به انتگرال تبدیل کرد. در این مورد داریم

$$\begin{aligned} R_{k\to m} = \int d^{۳}\mathbf{n}\, \mathbf{\Gamma}_{k\to m} &= \int \frac{L^{۳} d^{۳}\mathbf{k}}{(۲\pi)^{۳}} \Gamma_{k\to m} \\ &= \int \frac{V d^{۳}\mathbf{p}}{(۲\pi\hbar^{۳})} \Gamma_{k\to m} \end{aligned} \qquad (۵۳_۲۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com

در آخرین مرحله از رابطهٔ $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ استفاده کرده‌ایم.

انتگرال‌گیری روی حجمی در فضای تکانه صورت می‌گیرد که با آرایش تجربی مشخص می‌شود. اگر بنویسیم

$$d^3\mathbf{p} = d\Omega_{\mathbf{p}} p^2 dp = d\Omega_{\mathbf{p}} \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 d\left(\frac{\omega}{c}\right)\hbar^3 \qquad (۵۴_۲۱)$$

که در آن $d\Omega_{\mathbf{p}}$ جزء زاویهٔ فضایی است، می‌بینیم که روی تابع دلتایی که انرژی را پایسته می‌دارد انتگرال گرفته می‌شود، و نتیجه عبارت است از

$$R_{k\to m} = \int \frac{4\pi^2 e^2}{m^2\omega V} |\langle\phi_m| e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \boldsymbol{\epsilon}\cdot\mathbf{p}|\phi_k\rangle|^2 d\Omega_{\mathbf{p}} \frac{V}{(2\pi\hbar)^3}$$

$$\times \hbar^2 \frac{\omega^3}{c^3} \frac{d(\hbar\omega)}{h} \delta(E_k^\circ - E_m^\circ - \hbar\omega) \qquad (۵۵_۲۱)$$

$$= \int d\Omega_{\mathbf{p}} \frac{\alpha}{2\pi} \omega_{km} \left| \frac{1}{mc} \langle\phi_m| e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \boldsymbol{\epsilon}\cdot\mathbf{p}|\omega_k\rangle \right|^2$$

که در آن

$$\omega_{km} = \frac{E_k^\circ - E_m^\circ}{\hbar} \qquad (۵۶_۲۱)$$

اگر دستگاه تجربی حالتهای قطبش فوتون را از هم تمیز ندهد، محاسبهٔ آهنگ باید شامل یک جمع روی این دو حالت نهایی مستقل باشد. به‌علاوه، اگر حالتهای نهایی اتم واگن باشند این جمع باید شامل تمام آنها باشد. دربارهٔ این مورد در یک بخش دیگر بحث خواهیم کرد.

فضای فاز

$$d^3\mathbf{n} = \frac{V d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \qquad (۵۷_۲۱)$$

تنها منحصر به فوتونها نیست. الکترون آزاد با تابع موج تخت $(1/\sqrt{V})e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}$ توصیف می‌شود و دارای همان چگالی حالتها است. تنها تفاوت در این است که رابطهٔ میان انرژی (که در تابع دلتا ظاهر می‌شود) و تکانه به جای اینکه $E = pc$ باشد به‌صورت $E = \mathbf{p}^2/2m$ [یا به‌صورت نسبیتی $E = (\mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4)^{1/2}$] است.

www.arsanjan.blogfa.com

اگر چند ذرهٔ آزاد در حالت نهایی داشته باشیم چگالی حالتها به‌صورت حاصلضرب زیر است

$$\prod_k \frac{V d^3\mathbf{p}_k}{(2\pi\hbar)^3} \qquad (۵۸_۲۱)$$

رابطهٔ ۲۱ـ۵۳ در ترکیب با ۲۱ـ۲۱ به‌رابطهٔ زیر تعمیم می‌یابد

$$R_{i\to f} = \frac{2\pi}{\hbar} \int_{\text{تکانه‌های مستقل}} \prod_k \frac{V d^3\mathbf{p}_k}{(2\pi\hbar)^3} |M_{fi}|^2 \delta\left(E_f^\circ + \sum_k E_k - E_i^\circ\right) \qquad (۵۹_۲۱)$$

که در آن M_{fi} عنصر ماتریس اختلال بین حالتهای اولیه و نهایی دستگاه نامختل است. تابع دلتا باز هم پایستگی انرژی را نشان می‌دهد: انرژیی که ذرات آزاد همراه خود می‌برند برابر است با تغییر انرژی دستگاه؛ و انتگرال روی تکانه‌های مستقل گرفته می‌شود. برای مثال، اگر دستگاه به سه ذره وابپاشد، تنها دو تکانهٔ مستقل وجود دارند، زیرا تکانهٔ سوم از پایستگی انرژی تعیین می‌شود. اما توجه کنید که ضرب عاملها در ۲۱ـ۵۸ روی تمام ذرات در حالت نهایی انجام می‌شود، یعنی اگر n ذره در حالت نهایی وجود داشته باشند حاصلضرب شامل V^n خواهد بود. همچنین می‌توان ۲۱ـ۵۹ را به‌صورت یک انتگرال روی تمام تکانه‌ها، با یک تابع دلتا که متضمن بیان پایستگی تکانه است، نوشت. دلیل اینکه چنین تابع دلتایی در محاسبه ظاهر نمی‌شود این است که هستهٔ اتم را در فضا ثابت گرفته‌ایم، که موجه است زیرا اتم از الکترونها بسیار سنگین‌تر است. در این شرایط، تکانهٔ اتم یک متغیر دینامیکی نیست. در هر صورت، نتیجهٔ کلی

$$R_{i\to f} = \frac{2\pi}{\hbar} \int \prod_k \frac{V d^3\mathbf{p}_k}{(2\pi\hbar)^3} \times |M_{fi}|^2 \delta\left(E_i^\circ - E_f^\circ - \sum E_k\right) \delta\left(\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_f - \sum \mathbf{p}_k\right) \qquad (۶۰_۲۱)$$

یک نتیجهٔ اساسی است و می‌توان آن‌را به‌صورت زیر، که فرمی آن‌را قاعدهٔ طلایی نامیده است، خلاصه کرد

$$R_{i\to f} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{fi}|^2 \rho(E) \qquad (۶۱_۲۱)$$

که در آن $\rho(E)$ چگالی حالتها است.

توجه کنید که حجم جعبه همیشه حذف می‌شود. برای n ذره در حالت نهایی، یک V^n از چگالی حالتها (فضای فاز) و یک $1/\sqrt{V}$ برای هر ذرهٔ آزاد در عنصر ماتریسی داریم، که از

تابع موج آنها

www.arsanjan.blogfa.com

$$\prod_k \frac{e^{i\mathbf{p}_k\cdot\mathbf{r}/\hbar}}{\sqrt{V}} \qquad (۶۲_۲۱)$$

ناشی می‌شود. تعداد این عاملها n است، و در نتیجه وابستگی مجذور عنصر ماتریس به V با V^n از فضای فاز حذف می‌شود. در آینده باز هم از قاعدهٔ طلایی استفاده خواهیم کرد، اما اکنون به محاسبهٔ عنصر ماتریس برای گذار تابشی می‌پردازیم.

عنصر ماتریس و قاعده‌های گزینش

می‌خواهیم کمیت زیر را محاسبه کنیم

$$\langle\phi_m|e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\boldsymbol{\epsilon}\cdot\mathbf{p}|\phi_k\rangle \qquad (۶۳_۲۱)$$

ابتدا مرتبهٔ بزرگی آن‌را براورد می‌کنیم. برای یک گذار اتمی نوعی داریم

$$\boldsymbol{\epsilon}\cdot\mathbf{p}\sim|\mathbf{p}|\sim Zmc\alpha \qquad (۶۴_۲۱)$$

باید نما را نیز براورد کنیم، زیرا در اینجا یک عامل نوسانی داریم که می‌تواند نتیجه را به‌طور قابل ملاحظه‌ای تغییر دهد. با

$$r\sim\frac{\hbar}{mcZ\alpha} \qquad (۶۵_۲۱)$$

و

$$|k|\sim\frac{\hbar\omega}{\hbar c}\sim\frac{\frac{1}{2}mc^2(Z\alpha)^2}{\hbar c}\sim\frac{mc}{2\hbar}(Z\alpha)^2 \qquad (۶۶_۲۱)$$

به‌دست می‌آوریم

$$kr\sim\frac{1}{2}Z\alpha \qquad (۶۷_۲۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com

در نتیجه، به‌ازای $Z\alpha \ll 1$ و $Zmc\alpha$ است، و از این‌رو

$$R_{k\to m} \sim 2\alpha\omega(Z\alpha)^2 \sim \alpha(Z\alpha)^2\frac{mc^2(Z\alpha)^2}{\hbar} \sim \alpha(Z\alpha)^4\frac{mc^2}{\hbar} \sim 2\times 10^{10}Z^4\,\mathrm{s}^{-1} \qquad (۶۸_۲۱)$$

چون در بسط

$$e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-i)^n}{n!}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})^n \qquad (۶۹_۲۱)$$

جمله‌های متوالی بنابه براورد بالا به‌صورت $Z\alpha$ کاهش می‌یابند محاسبه ساده می‌شود. بنابراین، تا مرتبهٔ $Z\alpha$ داریم

$$\langle\phi_m|e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\boldsymbol{\epsilon}\cdot\mathbf{p}|\phi_k\rangle \simeq \langle\phi_m|\boldsymbol{\epsilon}\cdot\mathbf{p}|\phi_k\rangle \qquad (۷۰_۲۱)$$

این نتیجه را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\epsilon}\cdot\langle\phi_m|\mathbf{p}|\phi_k\rangle &= m\boldsymbol{\epsilon}\cdot\langle\phi_m|d\mathbf{r}/dt|\phi_k\rangle\\ &= \frac{im}{\hbar}\boldsymbol{\epsilon}\cdot\langle\phi_m|[H,\mathbf{r}]|\phi_k\rangle\\ &= im\frac{(E_m^0-E_k^0)}{\hbar}\boldsymbol{\epsilon}\cdot\langle\phi_m|\mathbf{r}|\phi_k\rangle\\ &= im\omega\boldsymbol{\epsilon}\cdot\langle\phi_m|\mathbf{r}|\phi_k\rangle\end{aligned} \qquad (۷۱_۲۱)$$

بدین‌ترتیب، با محاسبهٔ عنصر ماتریس عملگر $\mathbf{r}$ سروکار داریم، و این دلیلی است برای اینکه تقریب ۲۱ـ۷۰ را تقریب دوقطبی بنامیم.

شایان تذکر است که در تقریب دوقطبی، اختلال ۲۱ـ۲۵، یعنی

$$\lambda V(t) = \frac{e}{mc}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\cdot\mathbf{p}$$

را می‌توان با استفاده از ۲۱ـ۳۲ و ۲۱ـ۷۱ به‌صورت زیر نوشت

$$\lambda V(t) = e\mathbf{E}(\mathbf{r},t)\cdot\mathbf{r} \qquad (۷۲_۲۱)$$

که در واقع انرژی پتانسیل برهمکنش یک دوقطبی با گشتاور $\mathbf{d} = -e\mathbf{r}$ در میدان الکتریکی $\mathbf{E}$ است.

www.arsanjan.blogfa.com

اگر ϕ_k یک حالت اولیهٔ هیدروژنگونه باشد که با اعداد کوانتومی n_i و l_i m_i مشخص می‌شود، و ϕ_m حالت نهایی با اعداد کوانتومی m_f و l_f n_f باشد، آنچه باید محاسبه کرد عبارت است از

$$\begin{aligned}\langle\phi_m|\epsilon\cdot\mathbf{r}|\phi_k\rangle &= \int_0^\infty r^2 dr \int d\Omega R^*_{n_f l_f}(r) Y^*_{l_f m_f}(\theta,\phi)\epsilon\cdot\mathbf{r} R_{n_i l_i}(r) Y_{l_i m_i}(\theta,\phi)\\ &= \int_0^\infty r^2 dr R^*_{n_f l_f}(r)\, r\, R_{n_i l_i}(r)\\ &\quad\times\int d\Omega Y^*_{l_f l_f}(\theta,\phi)\epsilon\cdot\hat{\mathbf{r}} Y_{l_i m_i}(\theta,\phi)\end{aligned} \qquad (۷۳_۲۱)$$

دربارهٔ انتگرال شعاعی برای یک مورد خاص در بخش بعد بحث خواهیم کرد. در اینجا انتگرال زاویه‌ای را بررسی می‌کنیم. داریم

$$\epsilon\cdot\hat{\mathbf{r}} = \epsilon_x \sin\theta\cos\phi + \epsilon_y \sin\theta\sin\phi + \epsilon_z\cos\theta$$

با توجه به اینکه

$$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}Y_{1,0}(\theta,\phi) = \cos\theta \qquad \sqrt{\frac{3}{8\pi}}Y_{1,\pm1}(\theta,\phi) = \mp\sin\theta\, e^{\pm i\phi} \qquad (۷۴_۲۱)$$

به‌دست می‌آوریم

$$\epsilon\cdot\hat{\mathbf{r}} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\left(\epsilon_z Y_{1,0} + \frac{-\epsilon_x + i\epsilon_y}{\sqrt{2}}Y_{1,1} + \frac{\epsilon_x + i\epsilon_y}{\sqrt{2}}Y_{1,-1}\right) \qquad (۷۵_۲۱)$$

بنابراین، انتگرال زاویه‌ای در ۲۱_۷۳ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\int d\Omega Y^*_{l_f m_f}(\theta,\phi) Y_{1,m}(\theta,\phi) Y_{l_i m_i}(\theta,\phi) \qquad (۷۶_۲۱)$$

ابتدا روی زاویهٔ سمتی انتگرال می‌گیریم:

$$\int_0^{2\pi} d\phi\, e^{-im_f\phi} e^{im\phi} e^{im_i\phi} = 2\pi\,\delta_{m,m_f-m_i} \qquad (۷۷_۲۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com

بدین‌ترتیب، اولین قاعدهٔ گزینش به‌صورت زیر درمی‌آید

$$m_f - m_i = m = ۱, ۰, -۱ \qquad (۷۸_۲۱)$$

این قاعدهٔ گزینشی است که در بحث اثر زیمان متذکر شدیم. مخصوصاً، اگر محور z را در راستای تکانهٔ فوتون $\mathbf{k}$ بگیریم آنگاه شرط ۲۱ـ۳۸ ایجاب می‌کند که $\epsilon_z = ۰$ و در نتیجه $m = \pm ۱$ به‌دست می‌آید. بنابراین،

$$m_f - m_i = \pm ۱ \qquad (۷۹_۲۱)$$

به‌عنوان یک مورد خاص، متذکر می‌شویم که اگر حالت نهایی یک حالت پایه با $l_f = m_f = ۰$ باشد آنگاه $m = -m_i$. برای مثال، اگر $m_i = ۱$ آنگاه $m = -۱$ و در نتیجه بردار قطبش فوتون عبارت است از $(\epsilon_x + i\epsilon_y)/\sqrt{۲}$. مضمون این نتیجه این است که اگر اتم در حالت اولیه با $m_i = ۱$ در راستای محور z قطبیده باشد، آنگاه در یک واپاشی به حالتی با تکانهٔ زاویه‌ای صفر پایستگی مؤلفهٔ z تکانهٔ زاویه‌ای ایجاب می‌کند که فوتون حامل این مقدار باشد. بنابراین، اسپین فوتون باید در جهت مثبت محور z باشد، یعنی باید پیچیدگی مثبت $(+۱)$ داشته باشد، یا، معادل آن، باید قطبش دایره‌ای چپگرد داشته باشد. این درست همان چیزی است که جملهٔ $(\epsilon_x + i\epsilon_y)/\sqrt{۲}$ نشان می‌دهد.

از انتگرال‌گیری روی θ قاعدهٔ گزینش دیگری به‌دست می‌آید. ابتدا مورد خاص $l_f = ۰$ را در نظر می‌گیریم. چون $Y_{۰,۰} = ۱/\sqrt{۴\pi}$، انتگرال‌گیری زاویه‌ای ۲۱ـ۷۶ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{۱}{\sqrt{۴\pi}} \int d\Omega Y_{l,m}(\theta,\phi) Y_{l,m_i}(\theta,\phi) = \frac{۱}{\sqrt{۴\pi}} \delta_{l,i} \delta_{m_i,-m} \qquad (۸۰_۲۱)$$

که نشان می‌دهد حالت اولیه باید دارای $l_i = ۱$ باشد. در هیدروژن، گذارهای غالب به‌حالت پایه عبارت‌اند از $np \to ۱s$.

به‌طور کلی، وقتی l_i و l_f صفر نیستند، باز هم یک قاعدهٔ گزینش به‌دست می‌آوریم. در به‌دست آوردن این قاعده، که فراتر از سطح اطلاعات ریاضی دربارهٔ توابع خاص است که در این کتاب فرض شده است، از قضیهٔ جمع برای هماهنگهای کروی استفاده می‌شود که عبارت است از

$$Y_{l_۱ m_۱}(\theta,\phi) Y_{l_۲ m_۲}(\theta,\phi) = \sum_{L=|l_۱-l_۲|}^{l_۱+l_۲} C(L, m_۱+m_۲; l_۱, l_۲, m_۱, m_۲) Y_{L,m_۱+m_۲}(\theta,\phi) \qquad (۸۱_۲۱)$$

ضرایب $C(L, m_۱ + m_۲; l_۱, l_۲, m_۱, m_۲)$ همان ضرایب کلبش‌ـگوردان هستند که در ۱۵ـ۴۶ دیده می‌شوند. تکانه‌های زاویه‌ای ممکن در طرف راست درست همانهایی هستند که از

جمع تکانه‌های زاویه‌ای l_1 و l_2 می‌توان به‌دست آورد. با جاگذاری در ۲۱ـ۷۶ به نتیجهٔ زیر
www.arsanjan.blogfa.com
می‌رسیم

$$\int d\Omega Y^*_{l_f m_f}(\theta,\phi) \sum_{L=|l_i-1|}^{l_i+1} C(L, m_i+m_i, 1, l_i, m_i, m_i) Y_{L,m+m_i}(\theta,\phi) = 0$$

مگر اینکه

$$l_f = l_i + 1, l_i, |l_i - 1| \qquad (۲۱ـ۸۲)$$

از اینجا صورت کلی قاعدهٔ گزینش برای تابش دوقطبی الکتریکی به‌دست می‌آید:

$$\Delta l = 1, 0, -1 \qquad (۲۱ـ۸۳)$$

که با این قید، چنانکه رابطهٔ ۲۱ـ۸۰ به‌روشنی نشان می‌دهد، همراه است که گذارهای صفر-صفر روی نمی‌دهند. قید دیگری نیز وجود دارد که ناشی از پایستگی پاریته است. چون $\mathbf{r}$ تحت انعکاس فرد است، یک قاعدهٔ گزینش اضافی برای گذارهای دوقطبی الکتریکی وجود دارد:

$$\text{حالت اتمی باید تغییر پاریته دهد} \qquad (۲۱ـ۸۴)$$

چون پاریته از $(-1)^l$ به‌دست می‌آید، این قاعده ایجاب می‌کند که مقدار l باید عملاً تغییر کند. بنابراین، برای مثال گذارهای $3p \to 2p$ تا مرتبهٔ $Z\alpha$ مجاز نیستند.

تا جایی که اختلال منحصر به‌جفت‌شدگی زیر باشد

$$\frac{e}{mc}\mathbf{p}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r},t) \qquad (۲۱ـ۸۵)$$

وابستگی به اسپین در آن وجود ندارد، و از این‌رو اسپینها نمی‌توانند در گذار تغییر جهت دهند. بنابراین، به یک قاعدهٔ گزینش اضافی می‌رسیم:

$$\Delta S = 0 \qquad (۲۱ـ۸۶)$$

که قبلاً در بحث طیف هلیم متذکر شدیم.

قاعده‌های گزینشی که در بالا بیان کردیم مطلق نیستند. قوانین پایستگی تکانهٔ زاویه‌ای و پاریته (برای فرایندهای الکترومغناطیسی) مطلق هستند، اما ۲۱ـ۸۳ فقط تقریباً درست است. گذارهای

www.arsanjan.blogfa.com

بین حالتها که در آنها l بیشتر یا کمتر از یک واحد تغییر می‌کند از طریق سازوکار دوقطبی الکتریکی روی دهند. این گذارها در صورتی انجام می‌شوند که عنصر ماتریس

$$\langle \phi_f | e^{-ik\cdot r} \epsilon \cdot p | \phi_i \rangle \qquad (۸۷_۲۱)$$

مخالف صفر باشد. برای $\Delta l = ۲$، توان اول $k \cdot r$ سهمی مخالف صفر دارد. می‌توان نوشت

$$\begin{aligned} k \cdot r \epsilon \cdot p &= \frac{۱}{۲}(\epsilon \cdot p k \cdot r + \epsilon \cdot r p \cdot k) + \frac{۱}{۲}(\epsilon \cdot p k \cdot r - \epsilon \cdot r p \cdot k) \\ &= \frac{۱}{۲}(\epsilon \cdot p k \cdot r + \epsilon \cdot r p \cdot k) + \frac{۱}{۲}(k \times \epsilon) \cdot (r \times p) \qquad (۸۸_۲۱) \end{aligned}$$

جملهٔ اول را جملهٔ چارقطبی الکتریکی می‌نامند، و جملهٔ دوم را که به $L \cdot B$ مربوط است جملهٔ دوقطبی مغناطیسی می‌نامند. برای این گذارها، که عنصر ماتریس آنها را $Z\alpha$ بارکوچکتر از جملهٔ اصلی براورد کردیم، به‌ترتیب داریم $\Delta l = ۲$ و $\Delta l = ۰$. چون عملگرهای رابطهٔ ۲۱ـ۸۸ زوج هستند، بین حالتهای اتمی تغییر پاریته نخواهیم داشت. برای مثال، گذارهای $۳d \to ۱s$ نمی‌توانند از طریق سازوکار دوقطبی الکتریکی روی دهند اما با سازوکار چارقطبی الکتریکی مجاز هستند. در واقع، معلوم می‌شود که به احتمال زیاد حالت $۳d$ ابتدا به حالت $۲p$ افت می‌کند و سپس از حالت اخیر گذار مطلوب $۲p \to ۱s$ صورت می‌گیرد، یعنی دو فوتون متوالی گسیل می‌شوند.

قاعدهٔ گزینش اسپین $\Delta S = ۰$ نیز چندان خدشه‌ناپذیر نیست. علاوه بر جفت‌شدگی ۲۱ـ۸۵، جفت‌شدگی زیر، که در اثر نابهنجار زیمان بررسی شد، نیز وجود دارد

$$\lambda V(t) = \frac{ge}{۲mc} S \cdot B(r, t) \qquad (۸۹_۲۱)$$

عنصر ماتریس برای جملهٔ القاکنندهٔ گذار $\Delta S \neq ۰$ را می‌توان از مقایسهٔ آن با عنصر ماتریس دوقطبی الکتریکی براورد کرد:

$$\frac{(eg/۲mc)\hbar|k \times \epsilon|}{(۲e/mc)|p \cdot \epsilon|} \simeq \frac{\hbar|k|}{|p|} \simeq \frac{\hbar\omega}{|p|c} \simeq \frac{mc^۲(Z\alpha)^۲}{mc^۲(Z\alpha)} \simeq Z\alpha \qquad (۹۰_۲۱)$$

و می‌بینیم که بازداشته می‌شود، درست مانند عنصر ماتریس دوقطبی مغناطیسی که شباهت صوری زیادی با آن دارد. به‌عنوان یک مثال از وضعیتی که در آن جفت‌شدگی ۲۱ـ۸۹ نقش مهمی دارد، فرایند هسته‌ای فروپاشی فوتونی دوترون را در نظر می‌گیریم

$$\gamma + d \to n + p \qquad (۹۱_۲۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com

دوترون با تقریب بسیار خوب یک حالت $^3S_1$ است. درگذار دوقطبی الکتریکی، دستگاه نهایی $(n-p)$ باید در حالت ^3P باشد زیرا $\Delta l = 1$ و $\Delta S = 0$. اما معلوم می‌شود که، درست بالاتر از آستانهٔ واکنش، بعید است دو نوکلئون در یک حالت نسبی P باشند. به‌طور کلی، ذرات تنها به‌شرطی می‌توانند با احتمال محسوس در یک حالت نسبی تکانهٔ زاویه‌ای L باشند که

$$|\mathbf{p}|a \gtrsim hL \qquad (۹۲_۲۱)$$

که در آن $\mathbf{p}$ تکانهٔ نسبی و a اندازهٔ دستگاه است. در مورد دوترون، وقتی انرژی γ کمتر از $10\,\mathrm{MeV}$ است، بعید است که دستگاه $(n-p)$ در یک حالت P باشد. اما جفت‌شدگی اضافی

$$-\frac{e}{2Mc}(g_p\mathbf{s}_p + g_n\mathbf{s}_n)\cdot\mathbf{B} \qquad (۹۳_۲۱)$$

می‌تواند باعث گذار بین حالت $^3S_1$ و حالت نامقید $^1S_0$ شود. برهم‌کنش را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$-\frac{e}{2Mc}\left[\frac{1}{2}(g_p+g_n)(\mathbf{s}_p+\mathbf{s}_n)+\frac{1}{2}(g_p-g_n)(\mathbf{s}_p-\mathbf{s}_n)\right]\cdot\mathbf{B} \qquad (۹۴_۲۱)$$

جملهٔ اول تحت تبادل $p \leftrightarrow n$ متقارن است، و در نتیجه نمی‌تواند درگذار بین حالت اسپینی متقارن و حالت اسپینی پادمتقارن سهمی داشته باشد، اما جملهٔ دوم سهیم است. ضرایب در واقع بسیار بزرگ هستند، زیرا $g_p \cong 5{,}56$ و $g_n = -3{,}81$.

یک قاعدهٔ گزینش وجود دارد که خدشه‌ناپذیر است، و آن قاعده‌ای است که گذارهای صفر-صفر (مربوط به تکانهٔ زاویه‌ای کل $j = 0$) را در فرایندهای تک‌فوتونی ممنوع می‌کند. روش کلی اثبات مطلق بودن این قاعدهٔ گزینش به‌صورت زیر است: عنصر ماتریس، که یک کمیت نرده‌ای است باید به‌طور خطی شامل قطبش فوتون باشد، و از این‌رو باید به‌صورت $\boldsymbol{\epsilon}\cdot\mathbf{V}$ باشد که در آن $\mathbf{V}$ برداری است که در مسئله وارد می‌شود. اگر حالتهای اولیه و نهایی حالتهای $j = 0$ باشند، یعنی وابسته به هیچ راستایی نباشند، آنگاه تنها برداری که داریم تکانهٔ فوتون $\mathbf{k}$ است. اما $\boldsymbol{\epsilon}\cdot\mathbf{k} = 0$، و در نتیجه راهی برای ساختن عنصر ماتریس در دست نیست. بنابراین، چنین عنصری نباید وجود داشته باشد.[1]

---

۱. رابطهٔ $\boldsymbol{\epsilon}\cdot\mathbf{k} = 0$ مستقل از انتخاب پیمانه است، و بیان عرضی بودن میدان الکترومغناطیسی است. این نوع استدلالها "بنابر شمارش" در فیزیک ذرات بنیادی، که در آن برهم‌کنش واقعا شناخته نیست، فراوان به‌کار می‌رود.

www.arsanjan.blogfa.com

گذار $2p \to 1s$

اکنون رابطهٔ ۲۱ـ۷۳ را اخصاصاً برای گذار $2p \to 1s$ بررسی می‌کنیم. باید انتگرال شعاعی را محاسبه کنیم:

$$\begin{aligned}
&\int_0^\infty dr\, r^3 R_{10}^*(r) R_{21}(r) \\
&\quad = \int_0^\infty dr\, r^3 \left[2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}\right]\left[\frac{1}{\sqrt{24}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} r\, e^{-Zr/2a_0}\right] \\
&\quad = \frac{1}{\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^4 \int_0^\infty dr\, r^4 e^{-3Zr/2a_0} \qquad (۹۵_۲۱) \\
&\quad = \frac{1}{\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^4 \left(\frac{2a_0}{3Z}\right)^5 \int_0^\infty dx\, x^4 e^{-x} = \frac{24}{\sqrt{6}}\left(\frac{2}{3}\right)^5 Z^{-1} a_0
\end{aligned}$$

انتگرال زاویه‌ای به‌صورت زیر است

$$\begin{aligned}
\int d\Omega Y_{0,0}^* \boldsymbol{\epsilon}\cdot\hat{\mathbf{r}} Y_{1,m} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int d\Omega \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \left(\epsilon_z Y_{1,0} + \frac{-\epsilon_x + i\epsilon_y}{\sqrt{2}} Y_{1,1}\right. \\
&\quad \left. + \frac{\epsilon_x + i\epsilon_y}{\sqrt{2}} Y_{1,-1}\right) Y_{1,m} \qquad (۹۶_۲۱) \\
&= \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\epsilon_z \delta_{m,0} + \frac{-\epsilon_x + i\epsilon_y}{\sqrt{2}}\delta_{m,-1} + \frac{\epsilon_x + i\epsilon_y}{\sqrt{2}}\delta_{m,1}\right)
\end{aligned}$$

مجذور قدرمطلق حاصلضرب ۲۱ـ۹۵ و ۲۱ـ۹۶ عبارت است از

$$96\left(\frac{2}{3}\right)^{10}\left(\frac{a_0}{Z}\right)^2 \frac{1}{3}\left[\delta_{m0}\epsilon_z^2 + \frac{1}{2}(\delta_{m,1} + \delta_{m,-1})(\epsilon_x^2 + \epsilon_y^2)\right] \qquad (۹۷_۲۱)$$

و آهنگ گذار به‌ازای یک مقدار معین m برای اتم برانگیخته به‌صورت زیر است

$$\begin{aligned}
R_{2p\to 1s} &= \int d\Omega_{\mathbf{p}} \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right) \frac{\omega}{m^2 c^2} m^2 \omega^2 \frac{2^{15}}{3^{10}} \left(\frac{a_0}{Z}\right)^2 \\
&\quad \times \left[\delta_{m,0}\epsilon_z^2 + \frac{1}{2}(\delta_{m,1} + \delta_{m,-1})(\epsilon_x^2 + \epsilon_y^2)\right] \qquad (۹۸_۲۱)
\end{aligned}$$

که در آن کمیت

www.arsanjan.blogfa.com

$$\omega = \frac{1}{\hbar}\left[\frac{1}{2}mc^2(Z\alpha)^2\left(1-\frac{1}{4}\right)\right] = \frac{3}{8}\frac{mc^2}{\hbar}(Z\alpha)^2 \qquad (۹۹_۲۱)$$

بسامد تابش گسیل‌شده در گذار است.

انتگرال زاویه‌ای در ۲۱ـ۹۸ روی راستاهای فوتون گرفته می‌شود، و ساده نیست زیرا ϵ مقید است که بر راستای تکانهٔ فوتون عمود باشد. انتگرال‌گیری بسیار ساده خواهد بود اگر حالت اولیهٔ p سمتگیری نداشته باشد، یعنی در سه حالت ممکن $m(m = 1, 0, -1)$ با احتمال برابر روی دهد. آنگاه آهنگ گذار به‌صورت زیر است

$$R_{2p\to 1s} = \frac{1}{3}\sum_{m=-1}^{1} R_{2p\to 1s}(m) \qquad (۱۰۰_۲۱)$$

چون

$$\sum_{m=-1}^{1}\left[\delta_{m0}\,\epsilon_z^2 + \frac{1}{2}(\delta_{m1}+\delta_{m,-1})(\epsilon_x^2+\epsilon_y^2)\right] = \epsilon_x^2+\epsilon_y^2+\epsilon_z^2 = 1 \qquad (۱۰۱_۲۱)$$

تابع زیر انتگرال مستقل از راستای فوتون می‌شود. نتیجه را باید در ۲ نیز ضرب کنیم، زیرا دو حالت قطبش ممکن برای فوتون داریم و هر دو را آشکارسازی می‌کنیم. بهتر است طرف راست رابطهٔ ۲۱ـ۵۵ را به‌صورت دقیقتر زیر بنویسیم

$$\int d\Omega_{\mathbf{p}}\frac{\alpha}{2\pi}\frac{\omega_{km}}{m^2c^2}\sum_{\lambda=1}^{2}|\langle\phi_m|e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\boldsymbol{\epsilon}^{(\lambda)}\cdot\mathbf{p}|\phi_k\rangle|^2 \qquad (۱۰۲_۲۱)$$

که در آن λ قطبشها را نشان می‌دهد. دو حالت قطبش برهم عمود هستند، و در نتیجه داریم

$$\boldsymbol{\epsilon}^{(\lambda)}\cdot\boldsymbol{\epsilon}^{(\lambda')} = \delta_{\lambda\lambda'} \qquad (۱۰۳_۲۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com

از ترکیب تمام اینها، به‌دست می‌آوریم

$$R_{۲p\to ۱s} = ۲\cdot ۴\pi\frac{\alpha}{۲\pi}\frac{۱}{c^۲}\left(\frac{۳}{۸}\frac{mc^۲}{\hbar}Z^۲\alpha^۲\right)^۳\frac{۲^{۱۵}}{۳^{۱۰}}\left(\frac{\hbar}{mcZ\alpha}\right)^۲\frac{۱}{۳}$$

$$= \frac{۲^۸}{۳^۸}\frac{mc^۲}{\hbar}\alpha(Z\alpha)^۴ \cong ۰{,}۶\times ۱۰^۹ Z^۴ \mathrm{s}^{-۱} \qquad (۱۰۴_۲۱)$$

این نتیجه حدود ۳۰ بار کوچکتر از براورد ۲۱ـ۶۸ است. بنابراین، جزئیات عوامل در عنصرهای ماتریس اهمیت دارند و حدس نمی‌تواند جای محاسبه را بگیرد. با این همه، از ملاحظات ابعادی و احتساب مناسب توانهای α می‌توان به‌عنوان راهنما برای تعیین مرتبهٔ بزرگی کمیتهای فیزیکی در فیزیک اتمی استفاده کرد.

رابطهٔ آهنگ گذار

$$R_{fi} = \frac{d\Omega_{\mathbf{p}}}{۲\pi}\frac{e^۲}{\hbar c}\frac{\omega^۲}{c^۲}\sum_{\lambda=۱}^{۲}|\langle f|\mathbf{r}|i\rangle\cdot\epsilon^{(\lambda)}|^۲ \qquad (۱۰۵_۲۱)$$

را می‌توان با ضرب کردن انرژی کوانتوم نور $\hbar\omega$ در آن به فرمولی برای شدت تابش تبدیل کرد:

$$I_{fi} = d\Omega_{\mathbf{p}}\frac{e^۲}{۲\pi c^۲}\omega^۴\sum_{\lambda=۱}^{۲}|\langle f|\mathbf{r}|i\rangle\cdot\epsilon^{(\lambda)}|^۲ \qquad (۱۰۶_۲۱)$$

اما این درست فرمول کلاسیک برای شدت نوری است که یک دوقطبی نوسانی با گشتاور زیر گسیل می‌کند

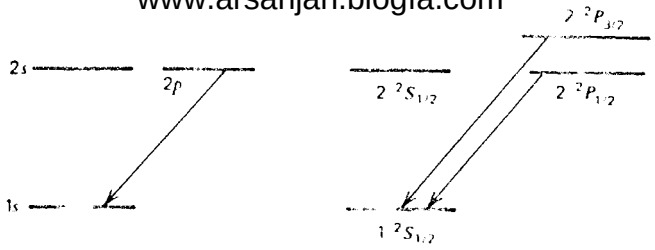
$$\mathbf{d} = e\langle f|\mathbf{r}|i\rangle\, e^{-i\omega t} \qquad (۱۰۷_۲۱)$$

و مثال دیگری از اصل تطابق را به‌دست می‌دهد.

اسپین و قاعده‌های شدت

منظورکردن اسپین اوضاع را زیاد تغییر نمی‌دهد. البته هر یک از حالتهای اولیه و نهایی می‌توانند در حالتهای اسپین "بالا" یا "پایین" باشند، اما چون برهم‌کنش درگذارهای اتمی وابسته به اسپین نیست تنها گذارهای "بالا" ← "بالا" و "پایین" ← "پایین" مجاز هستند. بنابراین، آهنگهای گذار نه تنها از ml مستقل‌اند (چنانکه در بخش قبل دیدیم) بلکه به m_s، و در نتیجه m_j، نیز وابسته نیستند. با وارد کردن جفت‌شدگی اسپین-مدار، شکافتگیهای تراز کوچکی (بر مقیاس اختلاف

www.arsanjan.blogfa.com



شکل ۲۱ـ۲ شکافتگی خط طیفی $1s - 2p$ به‌علت جفت‌شدگی اسپین-مدار

انرژی $1s - 2p$) به‌دست می‌آوریم. برای مثال، ساختار ترازی $n = 1$ و $n = 2$، چنانکه در شکل ۲۱ـ۲ نشان داده شده است، تغییر می‌کند. خط طیفی مربوط به گذار $2p \rightarrow 1s$ به دو خط، $^2P_{3/2} - {}^2S_{1/2}$ و $^2P_{1/2} - {}^2S_{1/2}$، شکافته می‌شود. برای حالتهای شکافته، انتگرال شعاعی و فضای فاز تقریبا بدون تغییر می‌مانند، و در نتیجه نسبت شدت دو خط را می‌توان تنها از قسمتهای زاویه‌ای انتگرال، یعنی صرفا از بررسیهای تکانهٔ زاویه‌ای تعیین کرد.

جدول زیر توابع موج حالتهای مورد بحث را نشان می‌دهد.

J	m_j	پاریته‌فرد $l = 1$	پاریته‌زوج $l = 0$
۳/۲	۳/۲	$Y_{11}\uparrow$	—
۳/۲	۱/۲	$\sqrt{2/3}\, Y_{10}\uparrow + \sqrt{1/3}\, Y_{11}\downarrow$	—
۳/۲	−۱/۲	$\sqrt{1/3}\, Y_{1,-1}\uparrow + \sqrt{2/3}\, Y_{10}\downarrow$	—
۳/۲	−۳/۲	$\sqrt{2/3}\, Y_{1,-1}\downarrow$	—
۱/۲	۱/۲	$\sqrt{1/3}\, Y_{10}\uparrow - \sqrt{2/3}\, Y_{11}\downarrow$	$Y_{00}\uparrow$
۱/۲	−۱/۲	$\sqrt{2/3}\, Y_{1,-1}\uparrow - \sqrt{1/3}\, Y_{10}\downarrow$	$Y_{00}\downarrow$

در مجذور عناصر ماتریس، قسمتهای شعاعی یکسان هستند. بنابراین، در بررسی آهنگهای مربوط به $P_{3/2} \rightarrow S_{1/2}$ باید مجذور عناصر ماتریس گذار برای $m_j = 3/2 \rightarrow m_j = 1/2$، ... ، $m_j = 3/2 \rightarrow m_j = -1/2$، $m_j = -3/2 \rightarrow m_j = -1/2$ را اضافه کنیم، در حالی‌که آهنگ مربوط به $P_{1/2} \rightarrow S_{1/2}$ شامل مجموع مجذورهای عناصر ماتریس برای $m_j = 1/2 \rightarrow m_j = 1/2$، ... ، $m_j = 1/2 \rightarrow m_j = -1/2$ است. این کار را می‌توان مستقیماً با استفاده از فنونی که کاملا پیچیده و فراتر از حد این کتاب هستند انجام داد. اما می‌توان این کمیتها را به‌تفصیل، با استفاده از این واقعیت که توابع موج متعامدند، محاسبه کرد.

www.arsanjan.blogfa.com

$P_{3/2} \to S_{1/2}$		
$m_j = 3/2 \to m_j = 1/2$	$\lvert\langle Y_{11}\lvert \mathbf{r}\cdot\epsilon\rvert Y_{00}\rangle\rvert^2 = C$	
$3/2 \to -1/2$	$0 \quad 1+1- = 0$ زیرا	
$1/2 \to 1/2$	$\lvert\langle\sqrt{2/3}\, Y_{10}\lvert \mathbf{r}\cdot\epsilon\rvert Y_{00}\rangle\rvert^2 = 0$	$(\Delta m = 0)$
$1/2 \to -1/2$	$\lvert\langle\sqrt{1/3}\, Y_{11}\lvert \mathbf{r}\cdot\epsilon\rvert Y_{00}\rangle\rvert^2 = C/3$	
$-1/2 \to 1/2$	$\lvert\langle\sqrt{1/3}\, Y_{1,-1}\lvert \mathbf{r}\cdot\epsilon\rvert Y_{00}\rangle\rvert^2 = C/3$	
$-1/2 \to -1/2$	$\lvert\langle\sqrt{2/3}\, Y_{10}\lvert \mathbf{r}\cdot\epsilon\rvert Y_{00}\rangle\rvert^2 = 0$	$(\Delta m = 0)$
$-3/2 \to 1/2$	0	
$-3/2 \to -1/2$	$\lvert\langle Y_{1,-1}\lvert \mathbf{r}\cdot\epsilon\rvert Y_{00}\rangle\rvert^2 = C$	

از جمع جمله‌ها به‌دست می‌آوریم

$$\sum R = \frac{8C}{3} \qquad (۱۰۸_۲۱)$$

همچنین داریم

$P_{1/2} \to S_{1/2}$	
$m_j = 1/2 \to m_j = 1/2$	$\lvert\langle\sqrt{1/3}\, Y_{10}\lvert \epsilon\cdot\mathbf{r}\rvert Y_{00}\rangle\rvert^2 = 0$
$1/2 \to -1/2$	$\lvert\langle-\sqrt{2/3}\, Y_{11}\lvert \epsilon\cdot\mathbf{r}\rvert Y_{00}\rangle\rvert^2 = 2C/3$
$-1/2 \to 1/2$	$\lvert\langle\sqrt{2/3}\, Y_{1,-1}\lvert \epsilon\cdot\mathbf{r}\rvert Y_{00}\rangle\rvert^2 = 2C/3$
$-1/2 \to -1/2$	$\lvert\langle-\sqrt{1/3}\, Y_{10}\lvert \epsilon\cdot\mathbf{r}\rvert Y_{00}\rangle\rvert^2 = 0$

و

$$\sum R = \frac{4C}{3} \qquad (۱۰۹_۲۱)$$

بنابراین، نسبت شدتها برابر است با

$$\frac{R(P_{3/2} \to S_{1/2})}{R(P_{1/2} \to S_{1/2})} = \frac{8C/3}{4C/3} = 2 \qquad (۱۱۰_۲۱)$$

دلیل جمع‌زدن روی تمام حالتهای اولیه این است که وقتی اتم برانگیخته است تمام ترازهای p به‌طور یکسان اشغال شده‌اند، زیرا اختلاف انرژی آنها در مقایسه با اختلاف انرژی $1s - 2p$ بسیار کوچک است. همچنین اگر آزمایشی انجام دهیم که بین حالتهای نهایی تفاوت نگذارد، مانند اندازه‌گیری طیف نمایی، روی تمام آنها جمع می‌زنیم. در محاسبهٔ آهنگ گذار $2p \to 1s$، روی حالتهای اولیهٔ m میانگین گرفتیم. در آنجا این سؤال مطرح بود: "اگر N اتم در حالتهای $2p$ داشته باشیم، در هر

www.arsanjan.blogfa.com

ثانیه چند اتم وامی‌پاشد" میانگین‌گیری را انجام داده‌ایم که در بیشتر موارد، وقتی N اتم برانگیخته شده باشند، حدود $N/3$ در هر یک از حالتهای $m = 1, 0, -1$ هستند. در اینجا، این واقعیت دخیل است که تعداد ترازها در حالت $P_{3/2}$ از حالت $P_{1/2}$ بیشتر است. مجموعاً شش تراز (چهار تراز با $j = 3/2$ و دو تراز با $j = 1/2$) و به‌طور متوسط $N/6$ اتم در هر حالت داریم. این واقعیت که در زیرمجموعهٔ ترازهای $j = 3/2$ اتمهای بیشتری وجود دارند صرفاً به‌معنای واپاشی بیشتری است، و از این‌رو شدت نیز بیشتر خواهد بود.

طول عمر و پهنای خط

عدد $R(i \to f)$ که محاسبهٔ آن‌را در این فصل آموختیم احتمال گذار $i \to f$ تقسیم بر مدت زمان اعمال اختلال را نشان می‌دهد. این مدت زمان باید در مقایسه با $h/(E_m^0 - E_k^0 + \hbar\omega)$ بزرگ باشد تا احتمال گذار متناسب با t شود، اما بدیهی است که نمی‌تواند زیاد بزرگ باشد. احتمال اینکه حالت اولیه دست‌نخورده باقی بماند برابر است با

$$P_i(t) = 1 - \left[\sum_{f \neq i} R(i \to f)\right] t \qquad (۱۱۱_۲۱)$$

که در آن جمع روی تمام حالتهای نهایی قابل حصول زده می‌شود. بدیهی است که این رابطه برای زمانهای به‌اندازهٔ کافی طولانی بی‌معنی است، زیرا احتمالها باید مثبت باشند. اگر تحول زمانی دستگاه را دقیقتر محاسبه کنیم[۲]، خواهیم دید که طرف راست ۲۱ـ۱۱۱ صرفاً یک تقریب (با پایینترین مرتبهٔ اختلال) از رابطهٔ صحیح زیر است ــ که این هم تنها برای زمانهای طولانی اعتبار دارد

$$P_i(t) = e^{-t\sum_{f \neq i} R(i \to f)} \qquad (۱۱۲_۲۱)$$

بنابراین، می‌توان برای حالت اولیه طول عمر تعریف کرد:

$$\tau = \frac{1}{R} = \frac{1}{\sum\limits_{f \neq i} R(i \to f)} \qquad (۱۱۳_۲۱)$$

آهنگ گذار کل R مجموع آهنگهای گذار جزئی به مجراهای ممکن f است. در مثالی که به‌تفصیل بررسی کردیم، گذار $1s \to 2p$ در اتمهای هیدروژنگونه، مجرای دیگری وجود ندارد، و از این‌رو

۲. این محاسبه در مبحث ویژه، بخش "طول عمر پهنای خط و تشدید" انجام شده است.

www.arsanjan.blogfa.com

طول عمر حالت $2p$ برابر است با

$$\tau = 1.6 \times 10^{-9} Z^{-4} \mathrm{s} \qquad (۱۱۴_۲۱)$$

که توافق آن با آزمایش عالی است. این نتیجه را (به‌ازای $Z = 1$) با زمانی که طول می‌کشد تا الکترون "یک‌بار دور هسته بگردد" مقایسه می‌کنیم. سرعت αc است و فاصله از مرتبهٔ $3 \times 10^{-8} \mathrm{cm}$ است؛ بنابراین، زمان مشخصه از مرتبهٔ $1.4 \times 10^{-16} \mathrm{s}$ است. برحسب این زمان، عمر حالت $2p$ بسیار طولانی است.

چون طول عمر حالت $2p$ متناهی است، انرژی آن بنابه اصل عدم قطعیت باید عدم قطعیتی با بزرگی زیر داشته باشد

$$\Delta E \sim \frac{h}{\tau} \qquad (۱۱۵_۲۱)$$

این عدم قطعیت باعث می‌شود شدت خط به‌عنوان تابعی از بسامد در $\omega_0 = (E_{2p} - E_{1s})/h$ کاملاً تیز نباشد، بلکه توزیعی به‌صورت زیر داشته باشد

$$I(\omega) \propto \frac{(R/2)^2}{(\omega - \omega_0)^2 + R^2/4} \qquad (۱۱۶_۲۱)$$

توجه کنید که در حد $R \to 0$، یعنی در حدی که نظریهٔ اختلال دقیقاً کاربرد دارد، از فرمول بالا به‌دست می‌آوریم

$$\lim_{\epsilon \to 0} \frac{\epsilon}{(\omega - \omega_0)^2 + \epsilon^2} = \pi\, \delta(\omega - \omega_0) \qquad (۱۱۷_۲۱)$$

شکل خط با تابع دلتای پایستگی انرژی نشان داده شده است. پهنای خط ۲۱ـ۱۱۶ برابر است با R، و این معیاری از عدم قطعیت در انرژی است. این شکل خط را شکل خط لورنتسی می‌نامند.

مسائل

۲۱ـ۱ یک اتم هیدروژن در میدان الکتریکی یکنواخت $\mathbf{E}(t)$ با وابستگی زمانی

$$\mathbf{E}(t) = 0 \qquad t < 0$$
$$= \mathbf{E}_0 e^{-\gamma t} \qquad t > 0$$

قرار دارد. اگر این اتم ابتدا در حالت پایه ناشد، احتمال این را به‌دست آورید که در $t \to \infty$ اتم به حالت $2p$ گذار کند.

www.arsanjan.blogfa.com

۲۱ـ۲ رابطه‌ای برای $c_n(t)$ تا مرتبهٔ دوم λ به‌دست آورید. بنویسید

$$c_n(t) = \delta_{nk} + \lambda c_n^{(1)}(t) + \lambda^2 c_n^{(2)}(t) + \cdots$$

نشان دهید که معادلهٔ مرتبهٔ اول برای $c_n^{(1)}(t)$ تغییر نمی‌کند، و $c_n^{(2)}(t)$ از معادلهٔ زیر پیروی می‌کند

$$c_m^{(2)}(t) = \frac{1}{i\hbar\lambda} \int_0^t dt' \sum_n c_n^{(1)}(t') e^{i(E_m^0 - E_n^0)t'/\hbar} \langle \phi_m | V(t') | \phi_n \rangle$$

جواب $c_n^{(1)}(t')$ را جاگذاری کنید و رابطهٔ خود را تا جایی که امکان دارد ساده کنید.

۲۱ـ۳ یک نوسانگر هماهنگ را در نظر بگیرید که با هامیلتونی زیرتوصیف می‌شود

$$H = \frac{1}{2m} p_x^2 + \frac{1}{2} m\omega^2(t) x^2$$

که در آن

$$\omega(t) = \omega_0 + \delta\omega \cos ft$$

و $\delta\omega \ll \omega_0$. با فرض اینکه دستگاه در $t = 0$ در حالت پایه است، احتمال گذار از حالت پایه را برحسب زمان به‌دست آورید. از نظریهٔ اختلال استفاده کنید. توجه کنید که اگر $n \neq 0$

$$\begin{aligned} \langle n|x^2|0\rangle &= \hbar/\sqrt{2}m\omega \qquad n = 2 \\ &= 0 \qquad\qquad\quad n \neq 2 \end{aligned}$$

۲۱ـ۴ فرض کنید ذره‌ای با جرم سکون M به دو ذره با جرمهای سکون m_1 و m_2 وامی‌پاشد. با استفاده از رابطهٔ نسبیتی میان انرژی و تکانه، چگالی حالتهای ρ را که در ۲۱ـ۶۱ آمده است محاسبه کنید.

[راهنمایی: تنها یک تکانهٔ مستقل $\mathbf{p}$ وجود دارد، و به

$$\int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^6} \delta\Big(E_{\text{اولیه}} - \sum_{\text{حالتهای نهایی}} E\Big)$$

احتیاج دارید.]

www.arsanjan.blogfa.com

۵ـ۲۱ محاسبهٔ مسئلهٔ قبل را برای واپاشی زیر انجام دهید.

$$A \to B + C + D$$

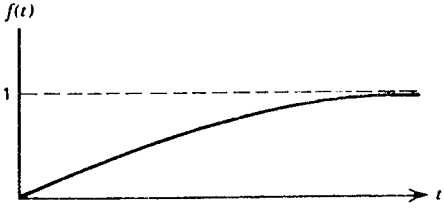
که در آن ذرات C و D بی‌جرم هستند.

[راهنمایی: در اینجا دو تکانهٔ مستقل دارید.]

۶ـ۲۱ این مسئله مثالی از قضیهٔ بی‌دررو است. بنابه این قضیه اگر تغییر هامیلتونی از H_0 به H بسیار کند باشد، دستگاهی که در یک ویژه‌حالت معین H_0 است به ویژه‌حالت متناظر H می‌رود بدون اینکه هیچ گذاری صورت گیرد. به‌عنوان یک مورد مشخص، حالت پایه را در نظر بگیرید، به‌طوری که

$$H_0 \phi_0 = E_0 \phi_0$$

فرض کنید $V(t) = f(t)V$، که در آن $f(t)$ یک تابع کند تغییر است که در نمودار زیر نشان داده شده است



اگر ω_0 حالت پایهٔ مربوط به $H = H_0 + V$ باشد، بنابه قضیهٔ بی‌دررو کارهای زیر را باید انجام دهید

$$|\langle \omega_0 | \psi(t) \rangle| \to 1$$

(الف) نشان دهید برای زمانهایی که $f(t) = 1$

$$\frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i(E_m^0 - E_0^0)t'/\hbar} f(t') \to \frac{e^{i(E_m^0 - E_0^0)t/\hbar}}{E_m^0 - E_0^0}$$

از رابطهٔ زیر استفاده کنید.

$$\frac{df(t')}{dt'} \ll \frac{E_m^0 - E_0^0}{\hbar} f(t')$$

www.arsanjan.blogfa.com

$$\frac{1}{i\omega}\frac{d}{dt}e^{i\omega t'}$$

می‌توانید تابع $f(t)$ را با یک مثال مشخص کنید، یا اینکه انتگرال جزء به جزء بگیرید، یعنی در انتگرال بالا بنویسید

(ب) با استفاده از ۲۱ـ۳ و ۲۱ـ۹، تابع $\psi(t)$ را محاسبه کنید. نتیجه را با فرمول ۱۶ـ۱۹، که در این مورد به‌صورت

$$w_0 = \phi_0 + \sum_{m\neq 0} \frac{\langle \phi_m|V|\phi_0\rangle}{E_0^0 - E_m^0}\phi_m$$

است مقایسه کنید و از اینجا نشان دهید

$$|\langle w_0|\psi(t)\rangle| \to 1$$

۲۱ـ۷ آهنگ گذار $1s \to 2p$ را برای نوسانگر سه‌بعدی، براساس طرحی که در این فصل ارائه شد، محاسبه کنید.

۲۱ـ۸ هسته‌ها گاهی با فرایندی که تبدیل داخلی نامیده می‌شود، و در آن یکی از الکترونهای $1s$ به‌جای فوتون گسیل می‌شود، از حالت برانگیخته به حالت پایه وامی‌پاشند. فرض کنید توابع موج اولیه و نهایی هسته عبارت باشند از

$$\phi_I(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_A) \quad \text{و} \quad \phi_F(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_A)$$

که در آن $\mathbf{r}_i (i = 1, 2, \ldots, Z)$ به پروتونها و $\mathbf{r}_{Z+1}$، ...، $\mathbf{r}_A$ به نوترونها مربوط می‌شوند. اختلالی که باعث این گذار می‌شود برهم‌کنش هسته‌ـالکترون است:

$$V = -\sum_{i=1}^{Z} \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|}$$

که در آن $\mathbf{r}$ بردار مکان الکترون است. بنابراین، عنصر ماتریس عبارت است از

$$-\int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}_1 \cdots d^3\mathbf{r}_A \phi_F^* \frac{e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}}{\sqrt{V}} \sum_{i=1}^{Z} \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|}\phi_I \psi_{100}(\mathbf{r})$$

www.arsanjan.blogfa.com

(الف) اندازهٔ تکانهٔ الکترون آلفا
(ب) با استفاده از بسط

$$\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|} \simeq \frac{1}{r} + \frac{\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}_i}{r^3}$$

آهنگ مربوط به فرایند گذار دوقطبی را برحسب

$$\mathbf{d} = \sum \int d^3\mathbf{r}_1 \cdots d^3\mathbf{r}_A \phi_F^* \mathbf{r}_i \phi_I$$

محاسبه کنید.

۹ـ۲۱ نشان دهید وقتی $t \to \infty$

$$e^{i\omega t} \sin(\omega_0 - \omega)t \ \sin(\omega_0 + \omega)t \to -\frac{1}{2}$$

[راهنمایی: از رابطهٔ $\lim_{t\to\infty} \sin At = \lim_{t\to\infty} \cos At = 0$ استفاده کنید.]

مراجع

قضیهٔ جمع که به محاسبهٔ عمومی‌تر قاعده‌های گزینش به‌کار می‌آید در تمام کتابهای پیشرفته‌تری که در آخر این کتاب معرفی شده‌اند و همچنین درکتاب زیر بررسی شده است

M E Rose, *Elementary Theory of Angular Momentum*, John Wiley & Sons, New York, 1957.

انتگرالهای شعاعی برای موارد کلی‌تر درکتابهای زیر بررسی شده‌اند

H A Bethe and R W Jackiw, *Intermediate Quantum Mechanics*, W A Benjamin, New York, 1968.

H A Bethe and E E Salpeter, *Quantum Mechanics of One-and Two-Electron Atoms*, Springer Verlag, Berlin/ New York, 1957.

E U Condon and G H Shortley, *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge University Press, Cambridge, England, 1959.

www.arsanjan.blogfa.com

۲۲

مباحث برگزیده در نظریهٔ تابش

در فصل ۲۱ (روابط ۲۱ـ۴۰ و ۲۱ـ۴۱) گفتیم که برای جذب یک کوانتوم نور از حالت اولیه‌ای که n فوتون با بسامد زاویه‌ای ω و قطبش λ دارد پتانسیل برداری به‌صورت زیر است

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t)=\sqrt{\frac{2\pi c^2\hbar}{\omega V}}\,\sqrt{n}\;\epsilon^{(\lambda)}e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \qquad (۱_۲۲)$$

و برای گسیل یک کوانتوم نور به حالت اولیه‌ای با n فوتون با بسامد زاویه‌ای ω و قطبش λ داریم

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t)=\sqrt{\frac{2\pi c^2\hbar}{\omega V}}\sqrt{n+1}\epsilon^{(\lambda)}e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \qquad (۲_۲۲)$$

که در آنها حالتهای قطبش نیز منظور شده‌اند. به بیان دقیق، تعداد فوتونها به تکانه و قطبش فوتون نیز بستگی دارد، و در واقع برای جذب باید بنویسیم

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t)=\sqrt{\frac{2\pi c^2\hbar}{\omega V}}\sqrt{n_\lambda(\mathbf{k})}\;\epsilon^{(\lambda)}e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \qquad (۳_۲۲)$$

www.arsanjan.blogfa.com

و برای گسیل

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t)=\sqrt{\frac{2\pi c^2\hbar}{\omega V}}\sqrt{n_\lambda(\mathbf{k})+1}\;\epsilon^{(\lambda)}e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \qquad (۴_۲۲)$$

به لحاظ فیزیکی، این عوامل ایجاب می‌کنند که حضور فوتونهایی با یک بسامد خاص احتمال گسیل فوتون دیگری با همان بسامد را تقویت کند. می‌گوییم این فوتونها گسیل تابش را القا می‌کنند یا برمی‌انگیزند.

در فرایند "کوانتیده کردن" میدان الکترومغناطیسی یعنی وقتی میدانهای الکتریکی و مغناطیسی را، مانند $p(t)$ و $x(t)$ در حرکت یک‌بعدی ذره، متغیرهای دینامیکی در نظر می‌گیریم پیدایش این عوامل وابسته به n امری کاملاً عادی به‌نظر می‌رسد. این روش فراتر از سطح این کتاب است. به‌جای آن، عوامل $\sqrt{n}$ و $\sqrt{n+1}$ را به روش جالب اینشتین، که در سال ۱۹۱۷ یعنی قبل از کشف مکانیک کوانتومی ارائه شد، محاسبه می‌کنیم.

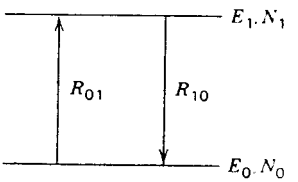
ضرایب A و B اینشتین

اینشتین با استفاده از نظریهٔ پلانک، نظریهٔ بور و مکانیک آماری به روش زیر استدلال کرد.

گازی متشکل از مولکولهایی را در نظر بگیرید که در یک کاواک در دمای T با تابش برهم‌کنش می‌کنند. بنابه نظریهٔ بور، این مولکولها می‌توانند در حالتهای پایای مختلفی باشند. در حالت تعادل، نسبت تعداد مولکولها در یک حالت m به تعداد مولکولها در یک حالت n با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$\frac{N_m}{N_n}=\frac{g_m}{g_n}\,\frac{e^{-E_m/kT}}{e^{-E_n/kT}}=\frac{g_m}{g_n}e^{-(E_m-E_n)/kT} \qquad (۵_۲۲)$$

که در آن g_m مرتبهٔ واگنی است، یعنی تعداد ترازهایی که انرژی E_m دارند. (از مکانیک کوانتومی اکنون می‌دانیم که $g_m=2J_m+1$ که در آن J_m تکانهٔ زاویه‌ای کل حالتی است که انرژی E_m دارد، اما در آنچه در زیر می‌آید به این رابطه احتیاج نداریم.) اکنون یک زوج تراز E_1 و E_0 با



شکل۲۲ـ۱ نمایش نموداری دستگاه دوترازی.

www.arsanjan.blogfa.com

$E_1 > E_0$ در نظر بگیرید (شکل ۲۲ـ۱). آهنگ گسیل القایی R_{21} از ترازِ انرژی پایینتر به تراز انرژی بالاتر باید با تعداد مولکولهای N_2 که انرژی E_2 دارند و با شدت تابش در کاواک که نور جذب‌شده از آن بسامد ν دارد متناسب باشد. بنابراین

$$R_{21} = N_2 u(\nu, T) B_{21} \qquad (۶\text{ـ}۲۲)$$

که در آن B_{21} ضریبی است که جذب تابش توسط مولکولهای دارای انرژی E_2 را توصیف می‌کند و ضریب جذب القایی نامیده می‌شود، زیرا تابش موجود باعث این فرایند می‌شود. برای آهنگ گذار از حالت بالاتر به حالت پایینتر، اینشتین از این اصل بور استفاده کرد که گسیل خودبه‌خود می‌تواند با آهنگی مستقل از تابش موجود روی دهد، اما در اینجا باید گسیل القایی نیز وجود داشته باشد. اگر N_1 تعداد مولکولها در حالت ۱ باشد، داریم

$$R_{12} = N_1 (u(\nu, T) B_{12} + A_{12}) \qquad (۷\text{ـ}۲۲)$$

B_{12} گسیل القایی و A_{12} گسیل‌خودبه‌خود را توصیف می‌کند. در وضعیت تعادل، تعداد گذارهای $2 \to 1$ باید برابر با تعداد گذارهای $1 \to 2$ باشد، و در نتیجه

$$N_2 u(\nu, T) B_{21} = N_1 (u(\nu, T) B_{12} + A_{12}) \qquad (۸\text{ـ}۲۲)$$

از ترکیب این رابطه با ۲۲ـ۶ به‌دست می‌آوریم

$$\frac{u(\nu, T) B_{12} + A_{12}}{u(\nu, T) B_{21}} = \frac{N_2}{N_1} = \frac{g_2}{g_1} e^{-(E_2 - E_1)/kT}$$

که می‌توان آن‌را به‌صورت زیر نوشت

$$g_1 A_{12} = u(\nu, T)(g_2 B_{21} e^{(E_1 - E_2)/kT} - g_1 B_{12}) \qquad (۹\text{ـ}۲۲)$$

پیامدهای این رابطه عبارت‌اند از

(الف) به‌ازای مقدار ثابت $E_1 - E_2$، اگر $T \to \infty$ آنگاه $e^{(E_1 - E_2)/kT} \to 1$، و از قانون ریلی‌ـجینز (فصل ۱) به‌دست می‌آوریم $u(\nu, T) \to (8\pi\nu^2/c^3)kT$. چون طرف چپ معادلهٔ ۲۲ـ۹ مستقل از T است، نتیجه می‌گیریم

$$g_2 B_{21} = g_1 B_{12} \qquad (۱۰\text{ـ}۲۲)$$

www.arsanjan.blogfa.com

که نشان می‌دهد به‌ازای هر مولکول آهنگ گسیل القایی با آهنگ جذب القایی برابر است.

(ب) از جاگذاری نتیجهٔ بالا در ۲۲ـ۹ به‌دست می‌آوریم

$$g_1 A_{10} = u(\nu, T)(g_1 B_{10})(e^{(E_1 - E_0)/kT} - 1)$$

یا

$$u(\nu, T) = \frac{A_{10}/B_{10}}{e^{(E_1 - E_0)/kT} - 1} \qquad (11\text{ـ}22)$$

طرف چپ از قانون وین ۱ـ۴ پیروی می‌کند، و در نتیجه

$$\nu^3 g\left(\frac{\nu}{T}\right) = \frac{A_{10}/B_{10}}{e^{(E_1 - E_0)/kT} - 1} \qquad (12\text{ـ}22)$$

چون طرف چپ این معادله یک تابع عام است، و A_{10}/B_{10} نمی‌تواند تابع دما باشد، نتیجه می‌گیریم که باید A_{10}/B_{10} با ν^3 و $(E_1 - E_0)$ با ν متناسب باشد. بنابراین، $E_1 - E_0 = h\nu$ که در آن h یک ثابت است، و می‌توان نوشت

$$u(\nu, T) = \frac{A_{10}/B_{10}}{\nu^3} \frac{\nu^3}{e^{h\nu/kT} - 1} \qquad (13\text{ـ}22)$$

از مقایسهٔ این رابطه با فرمول پلانک می‌بینیم که

$$\frac{A_{10}}{B_{10}} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \qquad (14\text{ـ}22)$$

برای محاسبهٔ A_{10} چنانکه در فصل ۲۱ دیدیم به مکانیک کوانتومی نیاز داریم.

آهنگ گسیل به‌ازای هر مولکول R_{10}/N_1 را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} R_{10}/N_1 = u(\nu, T)B_{10} + A_{10} &= A_{10}\left(1 + \frac{B_{10}}{A_{10}} u(\nu, T)\right) \\ &= A_{10}\left(1 + \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}\right) \end{aligned} \qquad (15\text{ـ}22)$$

www.arsanjan.blogfa.com

اما میانگین تعداد فوتونها در واحد T با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$\langle n\rangle = \frac{\sum_n n e^{-nh\nu/kT}}{\sum_n e^{-nh\nu/kT}} = \left.\frac{d/dx \sum_n e^{-nx}}{\sum_n e^{-nx}}\right|_{x=h\nu/kT} = \frac{1}{e^{h\nu/kT}-1} \qquad (۱۶_۲۲)$$

و در نتیجه که آهنگ گسیل به‌ازای هر مولکول به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{R_{10}}{N_1} = A_{10}(1+\langle n(\nu,T)\rangle) \qquad (۱۷_۲۲)$$

بنابراین، آهنگ گسیل به‌ازای هر مولکول با $(\langle n\rangle + 1)$ متناسب است که در آن $\langle n\rangle$ میانگین تعداد فوتونهای موجود است. به‌همین ترتیب، R_{01}/N_0 با میانگین تعداد فوتونهای موجود $\langle n\rangle$ متناسب است. اگرچه آهنگهای جذب و گسیل به‌ترتیب با $\langle n(\nu,T)\rangle$ و $\langle n(\nu,T)+1\rangle$ متناسب هستند، که در آنها $\langle n(\nu,T)\rangle$ تعداد متوسط فوتونها با بسامد مناسب در تابش جسم سیاه است، این عوامل از توزیع بسامد خاص تابش مستقل‌اند. در هر رویداد جذب یا گسیل تنها یک فوتون دخیل است، و از این‌رو دامنه‌های $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ به‌ترتیب شامل عوامل $\sqrt{n(\nu)}$ و $\sqrt{n(\nu)+1}$ هستند.

حیرت‌انگیز است که اینشتین چگونه توانسته است از ترکیب استدلال قوی آماری و آگاهی ابتدایی از اثرات کوانتومی تا این اندازه پیش برود.

لیزرها

چشمگیرترین کاربرد فنی گسیل القایی در تولید تابش الکترومغناطیسی تکفام همدوس و بسیار جهتدار با استفاده از تقویت نور از طریق گسیل القایی در وسیله‌ای است که لیزر نامیده می‌شود.[۱] مؤلفه‌های اساسی یک لیزر عبارت‌اند از

۱. یک محیط لیزری با دست‌کم دو تراز انرژی، که با یک گاف انرژی از هم جدا شده‌اند، به‌طوری که اتمهای تراز بالاتر بتوانند در حضور فوتونهای با بسامد مناسب گذار انجام دهند.

۲. سازوکاری برای پرجمعیت کردن مجدد تراز بالاتر برای تداوم عمل.

۳. یک کاواک مناسب که حاوی فوتونهای القاگر و همچنین محیط لیزری است.

---

۱. این پدیده برای تابش در تمام بسامدها معتبر است، و در واقع ابتدا در ناحیهٔ میکروموج مطالعه شد. وسیلهٔ مربوط را میزر می‌نامند.

www.arsanjan.blogfa.com

شرایط کار لیزر

ماده‌ای را در نظر بگیرید که در آن توجه خود را به دو تراز انرژی E_1 و E_0، با $E_1 > E_0$، معطوف می‌کنیم. آهنگ تغییر $n(\nu)$، تعداد فوتونها با بسامد $\nu = (E - E_0)/h$، را می‌توان با استفاده از آهنگ افزایش ناشی از گسیل القایی و خودبه‌خود توسط N_1 اتم در حالت E_1، آهنگ کاهش ناشی از جذب القایی توسط N_0 اتم در حالت E_0، و آهنگ اتلاف فوتونها ناشی از نشت از کاواک، که متناسب با $n(\nu)$ است، حساب کرد. معادلهٔ مربوط عبارت است از

$$\frac{dn(\nu)}{dt} = N_1(u(\nu)B_{10} + A_{10}) - N_0\,u(\nu)B_{01} - \frac{n(\nu)}{\tau_0} \qquad (۱۸_۲۲)$$

τ_0 بعد زمان دارد، و کاواک باید به‌گونه‌ای طراحی شود که τ_0 در مقایسه با زمانی که فوتونها طول کاواک را می‌پیمایند کوچک باشد. رابطه‌ای میان چگالی انرژی فوتون و تعداد فوتونها برقرار است. فرمول

$$u(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} h\nu n(\nu) \qquad (۱۹_۲۲)$$

که برای تابش جسم سیاه صادق است یک رابطهٔ کلی است، زیرا چگالی را به‌صورت حاصلضرب تعداد مدها در واحد بازهٔ بسامد، انرژی در این بسامد و تعداد فوتونهای دارای این انرژی توصیف می‌کند. بنابراین،

$$\frac{dn(\nu)}{dt} = n(\nu)\left[\left(N_1 - \frac{g_1}{g_0}N_0\right)A_{10} - \frac{1}{\tau_0}\right] + N_1 A_{10} \qquad (۲۰_۲۲)$$

که نشان می‌دهد تعداد فوتونها با زمان افزایش می‌یابد مگر اینکه

$$N_1 - \frac{g_1}{g_0}N_0 > \frac{1}{A_{10}\tau} \qquad (۲۱_۲۲)$$

چون در تعادل گرمایی داریم

$$N_1 - \frac{g_1}{g_0}N_0 = N_1\left(1 - \frac{N_0/g_0}{N_1/g_1}\right) = N_1(1 - e^{-(E_0 - E_1)/kT}) \qquad (۲۲_۲۲)$$
$$= N_1(1 - e^{h\nu/kT}) < 0$$

www.arsanjan.blogfa.com

می‌بینیم که لیزر باید در مد عادی کار کند. این نکته نشان می‌دهد که باید یک جمعیت اضافی در اتمها در تراز E_1 ایجاد کنیم، یعنی باید وارونی جمعیت به‌وجود آوریم. یک راه انجام این کار را در زیر توصیف می‌کنیم

پمپاژ اپتیکی

یک راه ایجاد وارونی جمعیت استفاده از ماده‌ای است که در آن فرایند شامل گذارهایی بین سه تراز است. شکل ۲۲ـ۲ یک دستگاه سه‌ترازی را نشان می‌دهد. معادله‌ها آهنگ تغییر N_2، N_1 و N_0 را در حضور یک باریکهٔ نور با چگالی انرژی u_p در بسامدی توصیف می‌کنند که اتمها را از حالت پایهٔ "۰" به یکی از دو حالت برانگیخته که بالاتر است، حالت "۲"، پمپ می‌کند. عواملی که در تغییر N_2 دخیل هستند عبارت‌اند از واپاشی خودبه‌خود و القایی به حالتهای "۱" و "۰" که عدد اشغال تراز "۲" را کاهش می‌دهد و برانگیزش القایی از حالتهای "۱" و "۰" که N_2 را افزایش می‌دهد:

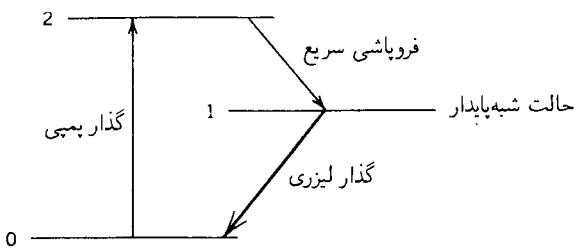
$$\begin{aligned}\frac{dN_2}{dt} =& N_2A_{21} - N_2A_{20} - N_2B_{21}u(\nu_{12}) - N_2B_{20}u_p(\nu_{02}) \\ &+ N_1B_{12}u(\nu_{12}) + N_0B_{02}u_p(V_{02})\end{aligned} \qquad (۲۳_۲۲)$$

به‌همین ترتیب، داریم

$$\frac{dN_1}{dt} = -N_1A_{10} - N_1B_{12}u(\nu_{12}) - N_1u(\nu_{01})B_{10} + N_2A_{21} + N_2B_{21}u(\nu_{12}) \qquad (۲۴_۲۲)$$

در وضعیت پایا هر دو مشتق زمانی صفر می‌شوند.

فرض کنید ماده به‌گونه‌ای است که $R_{21} \gg R_{10}$. در این مورد، تجمع اتمها در حالت "۲" و افزایش چگالی تابش در ν_{12} روی نخواهد داد. می‌توان به‌آسانی نشان داد که از معادله‌های



شکل۲۲ـ۲ نمایش نموداری گذار پمپ‌شده، که به دنبال آن افت سریع به حالت شبه‌پایدار و از آنجا گذار لیزری روی می‌دهد.

www.arsanjan.blogfa.com

وضعیت پایا، با $u(\nu_{۱۲}) = ۰$، به‌دست می‌آوریم

$$\frac{N_۱}{N_۰} = \frac{R_{۲۱}}{R_{۱۰}} \frac{B_{۰۲}u_p}{A_{۲۱} + A_{۲۰} + B_{۰۲}u_p} \qquad (۲۵_۲۲)$$

وقتی چگالی انرژی پمپاژ u_p بزرگ است عامل دوم از مرتبهٔ ۱ است، و $N_۱ \gg N_۲$، که وارونی جمعیت را نشان می‌دهد.

به لحاظ فیزیکی، اتمها به حالت برانگیختهٔ بالاتر "۲" پمپ می‌شوند و به‌سرعت به‌حالت شبه‌پایدار "۱" که در آن وارونی جمعیت ایجاد می‌شود افت می‌کنند، و گذارهای لیزری به حالت پایه روی می‌دهند. این دستگاه سه‌ترازی در لیزر یاقوت به کار می‌رود. البته انواع دیگر لیزر نیز وجود دارند، و بحث بالا تنها به منظور نشان دادن راهی برای ایجاد وارونی جمعیت است. بدین‌ترتیب، سازوکارهای مختلف پمپاژ و مواد لیزری مختلف امکان لیزرهایی را فراهم می‌آورند که می‌توانند در قسمتهای مختلف طیف الکترومغناطیسی کار کنند. همچنین امکان دارد از موادی استفاده کنیم که در آنها تابش لیزری به ترازهای (کم‌فاصلهٔ) ارتعاشی نهایی مختلفی منتهی می‌شود، و در نتیجه می‌توان لیزرهای کوکپذیر ساخت.

کاواک

تولید باریکهٔ کم‌عرض موازی احتیاج به کاواکی با ساختار استوانه‌ای دارد که در دو سر آن آینه‌هایی با شفافیت کم تعبیه شده‌اند. این آینه‌ها برای نگه‌داشتن فوتونها در داخل کاواک هستند تا چگالی انرژی $u(\nu_{۱۰})$ افزایش یابد. یادآوری می‌کنیم که آهنگ تغییر تعداد فوتونها عبارت است از

$$\frac{dn(\nu)}{dt} = N_۱(u(\nu)B_{۱۰} + A_{۱۰}) - N_۰\,u(\nu)B_{۰۱} - \frac{n(\nu)}{\tau_۰}$$

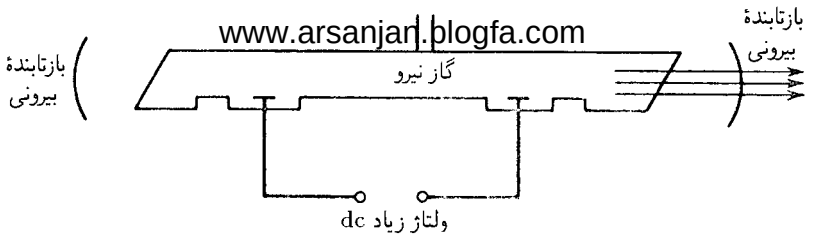
که در آن $N_۱ \gg N_۰$. می‌توان $\tau_۰$، "طول عمر فوتونها در کاواک"، را به روش زیر براورد کرد: فرض کنید تابش در کاواک استوانه‌ای به طول L فقط جلو و عقب می‌رود. اگر n^* ضریب شکست محیط باشد، زمان پیمایش برابر با n^*L/c است. اگر ضریب بازتاب آینه $r(\approx ۰ر۹۹)$ باشد، شدت نور پس از k پیمایش به r^k کاهش می‌یابد، و در نتیجه با $r = ۱ - \epsilon$ داریم

$$I_k/I_۰ = (۱ - \epsilon)^k \approx e^{-k\epsilon} \qquad (۲۶_۲۲)$$

پس از $k = ۱/\epsilon = ۱/(۱ - r)$ بار پیمایش، شدت به $۱/e$ مقدار اولیهٔ خود کاهش می‌یابد. بنابراین، طول عمر تابش در کاواک برابر است با

$$\tau_۰ \approx km^*L/c = n^*L/c(۱ - r) \qquad (۲۷_۲۲)$$

www.arsanjan.blogfa.com



شکل ۲۲ـ۳ تصویر نموداری لیزر.

اگر کاواک به دریچه‌هایی با زاویهٔ بروستر (که تقریباً به‌طور کامل حاوی یک حالت قطبش تابش هستند) منتهی شود، که در پشت آنها آینه‌های کروی یکسان قرار دارند که فاصلهٔ میانشان برابر با شعاع خمیدگی مشترک آنها است (شکل ۲۲ـ۳)، ضریب بازتاب را می‌توان به ۱ نزدیک کرد. توجه کنید که پهنای خط تابش برابر است با

$$\Delta\nu = 1/\tau_0 = c(1-r)n^{-1}L \qquad (۲۲_۲۸)$$

که در مقایسه با $c/2n^{-1}L$، یعنی فاصلهٔ بسامدی دو مد مجاور در کاواکی به‌اندازهٔ L، بسیار کوچک است. بنابراین، یک باریکهٔ تقریباً تکفام تولید می‌شود.

سرد کردن اتمها

در این بخش یک کاربرد لیزرها را بیان می‌کنیم که با مطالعهٔ اتمها ارتباط مستقیم دارد، یعنی استفاده از آنها برای کند کردن اتمها و در نتیجه کاهش پهن‌شدگی دوپلری خطهای طیفی که از آنچه ۲۱ـ۱۱۶ توصیف می‌کند بیشتر است.

خطهای طیفی از چند راه پهن می‌شوند. اتمها به‌طور کلی به تنهایی مشاهده نمی‌شوند. در گازی از اتمها عموماً برخوردهایی روی می‌دهد، و زمان بین این برخوردها، τ_c، اگر از عمر متوسط حالت مورد بررسی کمتر باشد، پهنای خط طیفی را تعیین می‌کند، زیرا τ_c عملاً طول‌عمر حالت است، و در نتیجه h/τ_c بزرگتر از پهنای طبیعی خط است. پهن‌شدگی برخوردی را می‌توان با کاهش چگالی (یا فشار) گاز اتمهای مورد بررسی کم کرد. پهن‌شدگی دوپلری نیز وجود دارد. وقتی اتمی با سرعت v حرکت می‌کند، بسامد تابش گسیل‌شده از اتم به‌اندازهٔ $\Delta\omega = (v/c)\omega$ تغییر می‌کند. اگر سرعت اتم را برابر با $v_{\text{rms}} = \sqrt{3kT/M_{\text{اتم}}}$ ، یعنی سرعت ریشهٔ میانگین مجذوری اتمها در گازی با دمای T، بگیریم آنگاه به‌عنوان مثال برای هیدروژن داریم $\Delta\omega/\omega \approx 3/0 \times 10^{-6}\sqrt{T}$. این نتیجه بسیار بیشتر از مقدار طبیعی $\Delta\omega/\omega$ است، که برای خط $2p \rightarrow 1s$ تقریباً برابر با 3×10^{-8} است. بنابراین، برای غلبه بر پهن‌شدگی دوپلری باید اتمها را سرد کرد. این کار با قرار دادن اتم در باریکهٔ لیزر انجام می‌شود. اتمی را در نظر بگیرید که در جهت مثبت z با سرعت

www.arsanjan.blogfa.com

v حرکت می‌کند. فرض کنید اختلاف انرژی بین دو تراز که بین آنها گذار انجام می‌شود $\hbar\omega_\circ$ و بسامد باریکهٔ لیزر (تکفام) ω باشد. ω را کمی متفاوت با $\omega_\circ$ می‌گیریم، و پارامتر واکوکی را به‌صورت $\delta = \omega - \omega_\circ < \circ$ تعریف می‌کنیم. اگر باریکهٔ لیزر در جهت مثبت z منتشر شود، اتم یک باریکه "می‌بیند" که به سرخ منتقل شده است زیرا به‌نظر می‌رسد که منشأ باریکه از اتم دور می‌شود. بنابراین، بسامدی که اتم می‌بیند $\omega(\mathrm{۱} - v/c)$ است. در نتیجه، مقدار واکوکی باریکهٔ لیزر از بسامد تشدید برابر است با $\omega(\mathrm{۱} - v/c) - \omega_\circ = \delta - \omega v/c$. چون $\delta < \circ$، مقدار این واکوکی بزرگتر از مقدار δ است، و احتمال جذب فوتونها کاهش می‌یابد، زیرا بسامد نوری که باید جذب شود روی منحنی تشدید در نقاط دورتر واقع می‌شود. از طرف دیگر، با یک باریکهٔ لیزر دیگر که در جهت منفی z منتشر می‌شود، واکوکی برابر است با $\omega(\mathrm{۱} + v/c) - \omega_\circ = \delta + \omega v/c$، و در نتیجه بسامد نوری که باید جذب شود به قلهٔ تشدید نزدیکتر است (تشدید در $\omega v/c = |\delta|$ روی می‌دهد). بنابراین، احتمال جذب فوتون بزرگتر است. این نشان می‌دهد نیرویی در جهت منفی z بر اتم وارد می‌شود. اتم فوتون را بازگسیل می‌کند چون وامی‌پاشد، اما این گسیل در راستای خاصی صورت نمی‌گیرد و به‌طور متوسط تقارن کروی دارد.[۲] بدین‌ترتیب، اتم در راستای z تکانه از دست می‌دهد. اگر سه جفت لیزر با شدت یکسان در راستای محورهای x، y و z در جهتهای مخالف داشته باشیم، تمام درجات آزادی به‌حساب آورده می‌شوند.

برای اینکه بحث بالا را بیش از این کمی کنیم، نیروی فشار تابشی را که باریکه بر اتم وارد می‌کند محاسبه می‌کنیم. فرض می‌کنیم تنها با دو تراز اتم سروکار داریم. این تقریب خوبی است اگر بسامد میدان الکتریکی نوسانی به بسامد مربوط به برانگیزش از حالت پایه نزدیک باشد. آهنگ جذب تکانه‌ای با بزرگی $\hbar\omega/c$ عبارت است از

$$\begin{aligned} R &= \frac{\mathrm{۲}\pi}{\hbar}|\langle \mathrm{۱}|e\mathbf{r}\cdot\mathbf{E}|\circ\rangle|^{\mathrm{۲}}\delta(E_{\mathrm{۱}} - E_\circ - \hbar\omega) \\ &= \frac{\mathrm{۲}\pi}{\hbar^{\mathrm{۲}}}|\langle \mathrm{۱}|e\mathbf{r}\cdot\mathbf{E}|\circ\rangle|^{\mathrm{۲}}\delta(\omega_\circ - \omega) \end{aligned} \qquad (\mathrm{۲۹_۲۲})$$

که در آن عملگر گشتاور دوقطبی $e\mathbf{r}$ باعث گذار می‌شود. اکنون باید تابع دلتا را برای منظور کردن پهنای خط حالت برانگیختهٔ $|\mathrm{۱}\rangle$ تغییر دهیم، و بدین منظور از جانشانی زیر استفاده می‌کنیم (برای توجیه این کار به مبحث ویژهٔ ۴ مراجعه کنید)

$$\pi\delta(\omega_\circ - \omega) \to \frac{R/\mathrm{۲}}{(\omega_\circ - \omega)^{\mathrm{۲}} + R^{\mathrm{۲}}/\mathrm{۴}} \qquad (\mathrm{۳۰_۲۲})$$

---

۲. فرض می‌کنیم شدت باریکهٔ لیزر چندان زیاد نیست، به‌طوری که برانگیختگی و واپاشی پسین رویدادهایی هستند که کاملاً از هم فاصله دارند. بعداً در این فصل مواردی را خواهیم دید که در آنها دستگاه بین حالت پایه و حالت برانگیخته به سرعت نوسان می‌کند. در این مورد، گسیل با برانگیزش همدوس است، و اطلاعات راستایی از بین نمی‌رود.

که در آن R آهنگ واپاشی خودبه‌خود تراز بالایی در غیاب تابش به‌صورت زیر است

www.arsanjan.blogfa.com

$$F = \frac{\hbar\omega}{c}\,\frac{۲}{\hbar^۲}|\langle ۱|e\mathbf{r}\cdot\mathbf{E}|۰\rangle|^۲\frac{R/۲}{(\omega_۰-\omega)^۲+R^۲/۴} \qquad (۳۱_۲۲)$$

اکنون کمیت بی‌بعد زیر را معرفی می‌کنیم

$$I = \frac{|\langle ۱|e\mathbf{r}\cdot\mathbf{E}|۰\rangle|^۲}{(\hbar R/۲)^۲} \qquad (۳۲_۲۲)$$

که برحسب آن

$$F = \frac{\hbar\omega}{c}IR\frac{R^۲/۴}{(\omega_۰-\omega)^۲+R^۲/۴} \qquad (۳۳_۲۲)$$

برای یک میدان ضعیف، یعنی برای مقادیر کوچک I، این نیرو بسیار کوچک است. برای میدانهای بسیار شدید، یعنی برای مقادیر بزرگ I، واپاشیهای‌القایی واپاشیهای‌خودبه‌خود را تحت‌الشعاع قرار می‌دهند، و در این شرایط اتم بین حالت پایه و حالت برانگیخته به‌سرعت نوسان می‌کند.[۳] مخصوصاً، فوتونهای گسیل‌شده با فوتونهای جذب شده همدوس هستند، و از این‌رو اتم در مجموع هیچ تکانه‌ای جذب نمی‌کند. معلوم می‌شود که شدت بهینهٔ لیزر به‌گونه‌ای است که $I \approx ۱$.

برای اتمی که در همان جهت باریکه حرکت می‌کند یک واکوکی انتقال دوپلری اضافی وجود دارد به‌طوری که

$$F = \frac{\hbar\omega}{c}IR\left[\frac{R^۲/۴}{(\omega-\omega_۰-\omega v/c)^۲+R^۲/۴}\right] \qquad (۳۴_۲۲)$$

اکنون اگر یک باریکهٔ موج ایستاده در نظر بگیریم، یا معادل آن یک باریکهٔ لیزر با همان بسامد ω که در جهت منفی z انتشار می‌یابد اضافه کنیم، نیرویی در جهت مخالف، با بسامدی که به آبی منتقل شده است یعنی $\omega(۱+v/c)$، به‌دست می‌آوریم. بنابراین، نیروی برایند وارد بر باریکه عبارت است از

$$F_{\text{برایند}} = \frac{\hbar\omega IR}{c}\left[\frac{R^۲/۴}{(\omega-\omega_۰-\omega v/c)^۲+R^۲/۴}-\frac{R^۲/۴}{(\omega-\omega_۰+\omega v/c)^۲+R^۲/۴}\right]$$

۳. به‌بخش بعد مراجعه کنید.

www.arsanjan.blogfa.com

تا کمترین مرتبه برحسب v/c، به‌دست می‌آوریم

$$F_{\text{برایند}} = \hbar\omega IR/c^2 \frac{R^2/4}{(\omega-\omega_0)^2+R^2/4}\ \frac{4\omega(\omega-\omega_0)^2}{(\omega-\omega_0)^2+R^2/4} v$$
$$= \frac{\hbar\omega IR}{c^2}\ \frac{R^2/4}{\delta^2+R^2/4}\ \frac{4\omega\delta}{\delta^2+R^2/4} v \qquad (۳۵_۲۲)$$

از آنجا که $\delta < 0$، یعنی بسامد لیزر اندکی پایین‌تر از قلهٔ تشدید ω_0 انتخاب شده است، این نیرو در جهت مخالف v است، یعنی یک نیروی مالشی به‌صورت $F_{\text{برایند}} = -\beta v$ است. این نیرو تابع مقدار واکوکی است، و بیشترین مقدار آن وقتی است که $dF/d\delta = 0$، یعنی وقتی که $|\delta| = \omega_0 - \omega = R/2\sqrt{3}$. حرکت اتم در هر سه بعد باید کند شود، و برای این منظور از سه جفت لیزر استفاده می‌شود تا محیطی به‌وجود آید که معمولاً آن‌را ملاس نوری می‌نامند.

بنابراین، بیشینهٔ نیروی مالشی به‌ازای $I \approx 1$ عبارت است از

$$F \approx -\sqrt{\frac{27}{4}}\ \frac{\hbar\omega_0^2}{c^2} v \qquad (۳۶_۲۲)$$

به اتمها همچنین یک نیروی کاتوره‌ای نیز وارد می‌شود که ناشی از برخوردهای کاتوره‌ای با فوتونهایی است که باریکهٔ لیزر را می‌سازند. بنابراین، اتمها مانند ذراتی رفتار می‌کنند که در یک شاره دارای حرکت براونی هستند. تفصیل فرایند سرد کردن فراتر از اهداف این بحث است، اما پیش‌بینی استدلال نیمه‌کلاسیک بالا این است که اتمها تا دمایی که با رابطهٔ زیر داده می‌شود سرد می‌شوند

$$T = \frac{\hbar\omega}{kc}$$

که در آن k ثابت بولتزمن است. به‌طورکلی، این دما درگسترهٔ $2 \times 10^{-4}\,\text{K}$ است. بررسی عمیقتر جزئیات فرایند، که در آن واگنش ترازهای برانگیخته و قطبش فوتونها به‌حساب آورده می‌شوند، نشان می‌دهد که باید بتوان اتمها را تا دمایی از مرتبهٔ $4 \times 10^{-5}\,\text{K}$ سرد کرد، که با آنچه از آزمایش به‌دست آمده است توافق دارد.[۴] در واقع، با پیشرفتهای اخیر در تکنولوژی سرد کردن لیزری اتمها، دماهای اتمی $7 \times 10^{-7}\,\text{K}$ حاصل شده‌اند. وقتی اتمها تا چنین دماهایی سرد می‌شوند، اندازه‌گیری پهنای خط طبیعی امکانپذیر می‌شود، و این تأثیر زیادی بر آزمون پیش‌بینیهای الکترودینامیک کوانتومی دارد.

---

۴. برای یک بحث مفصل غیرفنی به مقالهٔ زیر، که مراجع بسیاری در آن معرفی شده‌اند، مراجعه کنید
C N Cohen-Tannoudji and W D Phillips in *Phys Today*, 43(10), 33(1990).

www.arsanjan.blogfa.com

اتم دوترازی در میدان الکتریکی تکفام

دو حالت اتم مورد نظر را ویژه‌حالتهای یک هامیلتونی H_0 می‌گیریم:

$$H_0|\phi_1\rangle = E_1|\phi_1\rangle$$
$$H_0|\phi_0\rangle = E_0|\phi_0\rangle \qquad (۳۷_۲۲)$$

فرض می‌کنیم $E_1 > E_0$، و از نمادنگاری

$$\omega_a = (E_1 - E_0)/\hbar \qquad (۳۸_۲۲)$$

و $|\phi_1\rangle = |1\rangle$ و $|\phi_0\rangle = |0\rangle$ استفاده خواهیم کرد. اکنون این دستگاه دوترازی را در یک میدان الکتریکی قرار می‌دهیم. فرض کنید این میدان الکتریکی به‌اندازه‌ای قوی است که اثرات مرتبهٔ اول و دوم برحسب $\mathbf{E}$، برخلاف آنچه در بحث اثر اشتارک در فصل ۱۶ دیدیم، برای بررسی دستگاه کافی نیستند. بنابراین، از نظریهٔ اختلال استفاده نخواهیم کرد. در اینجا هامیلتونی به‌صورت زیر است

$$H = H_0 + V(t) \qquad (۳۹_۲۲)$$

که در آن، مانند سابق، داریم

$$V(t) = \frac{e}{mc}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\cdot\mathbf{p} \qquad (۴۰_۲۲)$$

$\mathbf{p}$ عملگر تکانهٔ الکترون است، و در نتیجه

$$\mathbf{p} = \frac{im}{\hbar}[H_0, \mathbf{r}] \qquad (۴۱_۲۲)$$

همچنین، از تقریب دوقطبی استفاده می‌کنیم، به‌طوری که

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = \mathbf{A}_0 e^{-i\omega t} + \mathbf{A}_0^* e^{i\omega t} \qquad (۴۲_۲۲)$$

یعنی پتانسیل برداری در پهنای اتم ثابت است. این پتانسیل را برحسب میدان الکتریکی می‌نویسیم. از رابطهٔ

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \equiv \mathbf{E}_0 e^{-i\omega t} + \mathbf{E}_0^* e^{i\omega t}$$

www.arsanjan.blogfa.com

نتیجه می‌گیریم که $\mathbf{E}_0 = -(i\omega/c)\mathbf{A}_0$ و $\mathbf{E}_0^* = (i\omega/c)\mathbf{A}_0^*$. بنابراین،

$$V(t) = \frac{e}{\hbar\omega}(\mathbf{E}_0 e^{-i\omega t} - \mathbf{E}_0^* e^{i\omega t}) \cdot [H_0, \mathbf{r}] \qquad (۴۳_۲۲)$$

بدین‌ترتیب، هر عنصر ماتریس عملگر $V(t)$ به‌صورت زیر خواهد بود

$$\langle 0|V(t)|1\rangle = \frac{e}{\hbar\omega}(\langle 0|\mathbf{E}_0 E_0 - E_1)\{\cdot\mathbf{r}|1\rangle e^{-i\omega t} - \langle 0|\mathbf{E}_0^* \cdot \mathbf{r}|1\rangle e^{i\omega t}\} \qquad (۴۴_۲۲)$$

اکنون جواب معادلهٔ شرودینگر وابسته به زمان را $|\psi(t)\rangle$ می‌گیریم. با استفاده از قضیهٔ بسط، مانند فصل ۲۱، می‌نویسیم

$$|\psi(t)\rangle = C_0(t)e^{-iE_0 t/\hbar}|0\rangle + C_1(t)e^{-iE_1 t/\hbar}|1\rangle \qquad (۴۵_۲۲)$$

بنابراین، از

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = (H_0 + V(t))|\psi(t)\rangle$$

و ۲۲_۴۵، به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} &i\hbar\frac{d}{dt}C_0(t)e^{-iE_0 t/\hbar}|0\rangle + i\hbar\frac{d}{dt}C_1(t)e^{-iE_1 t/\hbar}|1\rangle \\ &= V(t)C_0(t)e^{-iE_0 t/\hbar}|0\rangle + V(t)C_1(t)e^{-iE_1 t/\hbar}|1\rangle \end{aligned}$$

اگر عناصر ماتریس این معادله را به‌ترتیب با ضرب کردن در $|0\rangle$ و $|1\rangle$ به‌دست آوریم، و با توجه به

$$\langle 0|\mathbf{r}|0\rangle = \langle 1|\mathbf{r}|1\rangle = 0 \qquad (۴۶_۲۲)$$

به دو معادلهٔ زیر می‌رسیم

$$i\hbar\frac{d}{dt}C_0(t) = C_1(t)e^{-i\omega_{ad}t}\langle 0|V(t)|1\rangle \qquad (۴۷_۲۲)$$

و

$$i\hbar\frac{d}{dt}C_1(t) = C_0(t)e^{i\omega_{ad}t}\langle 1|V(t)|0\rangle \qquad (۴۸_۲۲)$$

www.arsanjan.blogfa.com

صورت گستردهٔ معادلهٔ ۲۲ـ۴۷

$$i\hbar\frac{d}{dt}C_0(t)=\frac{\omega_d}{\omega}C_1(t)\{-\langle 0|e\mathbf{E}_0\cdot\mathbf{r}|1\rangle e^{-i(\omega+\omega_d)t}+\langle 0|e\mathbf{E}_0^*\cdot\mathbf{r}|1\rangle e^{-i(\omega_d-\omega)t}\}$$

ما با وضعیتهای فیزیکیی کار خواهیم داشت که در آنها ω نزدیک به ω_d یا برابر با آن است. جملهٔ شامل $e^{-i(\omega_d+\omega)t}$ بسیار سریع نوسان می‌کند، و با میانگین‌گیری روی زمان سهمی به‌دست نمی‌دهد. مانند بحث تشدید پارامغناطیسی در فصل ۱۴، این‌گونه جمله‌ها را حذف می‌کنیم. این تقریب را غالباً تقریب موج چرخان می‌نامند. پس از حذف، به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{d}{dt}C_0(t)&=\frac{\omega_d}{\omega}C_1(t)\langle 0|e\mathbf{E}_0^*\cdot\mathbf{r}|1\rangle e^{-i(\omega_d-\omega)t}\\&\equiv\hbar\gamma C_1(t)e^{-i(\omega_d-\omega)t}\end{aligned}\qquad(۴۹_۲۲)$$

که برحسب پارامتر واکوکی

$$\delta=\omega-\omega_d\qquad(۵۰_۲۲)$$

به‌صورت زیر درمی‌آید

$$i\hbar\frac{d}{dt}C_0(t)=\hbar\gamma C_1\,e^{i\delta t}\qquad(۵۱_۲۲)$$

با همین تقریب، داریم

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{d}{dt}C_1(t)&=\frac{\omega_d}{\omega}C_0(t)\langle 1|e\mathbf{E}_0\cdot\mathbf{r})|0\rangle\;e^{i(\omega_d-\omega)t}\\&=\hbar\gamma C_0(t)e^{-i\delta t}\end{aligned}\qquad(۵۲_۲۲)$$

که در آن جملهٔ

$$\gamma=\frac{\omega_d}{\hbar\omega}\langle 0|e\mathbf{E}_0^*\cdot\mathbf{r}|1\rangle\qquad(۵۳_۲۲)$$

را می‌توان حقیقی گرفت. با مشتق‌گیری از ۲۲ـ۴۹ نسبت به زمان، به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dt^2}C_0(t)&=\gamma\delta C_1e^{i\delta t}-i\gamma\frac{d}{dt}C_1(t)e^{i\delta t}\\&=i\delta\frac{d}{dt}C_0(t)-\gamma^2C_0(t)\end{aligned}\qquad(۵۴_۲۲)$$

www.arsanjan.blogfa.com

با یک جواب آزمونی به‌صورت

$$C_i(t) = e^{-i\Omega t} \qquad (۵۵_۲۲)$$

نتیجه می‌گیریم که

$$\Omega^۲ + \delta\Omega - \gamma^۲ = ۰ \qquad (۵۶_۲۲)$$

یا

$$\Omega = \Omega_\pm = -\frac{۱}{۲}\delta \pm \sqrt{\frac{۱}{۴}\delta^۲ + \gamma^۲} \qquad (۵۷_۲۲)$$

بنابراین، جواب عمومی به‌صورت زیر است

$$C_۰(t) = e^{i\delta t/۲}(A\ \cos\ \sqrt{\delta^۲/۴ + \gamma^۲}t + B\ \sin\ \sqrt{\delta^۲/۴ + \gamma^۲}t) \qquad (۵۸_۲۲)$$

و

$$\begin{aligned} C_۱(t) =& \frac{۱}{\gamma}e^{-i\delta t}\frac{d}{dt}C_۰(t) \\ =& -e^{-i\delta t/۲}\left\{\frac{\delta}{۲\gamma}(A\ \cos\ \sqrt{\delta^۲/۴ + \gamma^۲}t + B\ \sin\ \sqrt{\delta^۲/۴ + \gamma^۲}t)\right. \\ & \left. - i\frac{\sqrt{\delta^۲/۴ + \gamma^۲}}{\gamma}(A\ \sin\ \sqrt{\delta^۲/۴ + \gamma^۲}t - B\ \cos\ \sqrt{\delta^۲/۴ + \gamma^۲}t)\right\} \end{aligned} \qquad (۵۹_۲۲)$$

اگر دستگاه در $t = ۰$ در حالت $|۰\rangle$ باشد، $C_۰(۰) = ۱$ و $C_۱(۰) = ۰$، و در نتیجه $A = ۱$ و $B = ۰$ $i\delta/۲\sqrt{\delta^۲/۴ + \gamma^۲}$، یعنی $(\delta/۲)A + i\sqrt{\delta^۲/۴ + \gamma^۲}\ B = ۰$. بنابراین، در یک زمان بعد داریم

$$\begin{aligned} |C_۰(t)|^۲ &= \cos^۲\sqrt{\delta^۲/۴ + \gamma^۲}\ t + \frac{\delta^۲}{\delta^۲ + ۴\gamma^۲}\sin^۲\sqrt{\delta^۲/۴ + \gamma^۲}\ t \\ &= ۱ - \frac{۴\gamma^۲}{\delta^۲ + ۴\gamma^۲}\sin^۲\sqrt{\delta^۲/۴ + \gamma^۲}\ t \end{aligned} \qquad (۶۰_۲۲)$$

www.arsanjan.blogfa.com

در مورد کوک کامل، $\delta = 0$، احتمال

$$|C_0(t)|^2 = \cos^2 \gamma t \qquad (۶۱_۲۲)$$

دستگاه با بسامد γ بین دو حالت نوسان می‌کند، و به‌طور متوسط نیمی از زمان را در حالت بالاتر و نیمی از زمان را در حالت پایینتر می‌گذراند. این بسامد در $\delta = 0$، یعنی وقتی $\omega = \omega_0$، برابر است با

$$\gamma = \frac{1}{\hbar}\langle 0|e\mathbf{E}_0^* \cdot \mathbf{r}|1\rangle \qquad (۶۲_۲۲)$$

که بسامد رابی نامیده می‌شود. متذکر می‌شویم که $\mathbf{E}_0^+$ متناسب با $\mathbf{A}_0^+$ است، و از این‌رو هنگامی که حالت پایینتر $|0\rangle$ نیز n فوتون با بسامد ω داشته باشد آنگاه، بنابه ۲۲ـ۲، $\mathbf{E}_0^+$ متناسب با $\sqrt{n+1}$ است. بنابراین، می‌توان نوشت

$$\gamma = \sqrt{n+1}\,\gamma_0 \qquad (۶۳_۲۲)$$

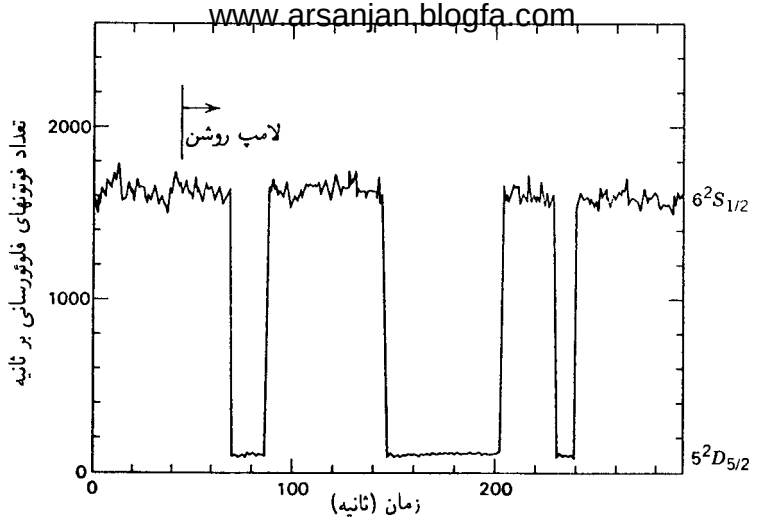
به‌آسانی می‌توان نشان داد که اگر حالت اولیهٔ دستگاه $|1\rangle$ باشد، و این حالت n فوتون با بسامد ω داشته باشد، آنگاه بسامد γ برابر است با $\sqrt{n}\gamma_0$.

بررسی اتمهای تک در یک کاواک که در آن تنها یک مد از میدان الکتریکی نوسانی موجود است با اختراع و ساخت دامهای بسامد رادیویی توسط ه دامله و همکارانش امکانپذیر شده است. نوسانهایی که معادلهٔ ۲۲ـ۶۱ پیش‌بینی می‌کند با آزمایش تأیید شده‌اند.

مشاهدهٔ جهشهای کوانتومی

اختراع دامهایی که در آنها یونهای تک را بتوان مطالعه کرد روشهای مختلف جدیدی را برای بررسی اتمها فراهم می‌آورد. یک نظر ابتکاری را ابتدا ه دامله مطرح کرد و چند گروه تجربی در دههٔ گذشته آن‌را مشاهده کردند. اصول آزمایش را در اینجا بیان می‌کنیم. یک دستگاه سه‌ترازی شامل حالت پایهٔ $|0\rangle$ و حالتهای برانگیختهٔ $|1\rangle$ و $|2\rangle$ را در نظر بگیرید. گذار بین حالتهای $|0\rangle$ و $|1\rangle$ مجاز است اما گذار بین حالتهای $|2\rangle$ و $|0\rangle$ ممنوع است (البته نه مطلقاً)، و در نتیجه حالت $|2\rangle$ شبه‌پایدار است. با یک چشمهٔ شدید نور (لیزر) که برای بسامد زاویه‌ای $\omega_{10} = (E_1 - E_0)/\hbar$ کوک شده است و همچنین یک چشمهٔ ضعیف نور که برای بسامد زاویه‌ای $\omega_{20} = (E_2 - E_0)/\hbar$ کوک شده است اتم را در معرض تابش قرار می‌دهیم. تعداد گذارهای میان حالت پایه و حالت برانگیختهٔ مجاز بسیار زیاد است. عملاً میدان قوی لیزری الکترون را با آهنگی بسیار تند به حالت $|1\rangle$ برانگیخته می‌کند، و الکترون نیز با آهنگی بسیار تند به حالت پایه افت می‌کند. بنابراین، یک علامت

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۲۲ـ۴ رد فلوئورسانی نوعی که جهشهای کوانتومی را نشان می‌دهد. در دوره‌های فلوئورسانی کم، اتم قطعاً در تراز شبه‌پایدار است.[۵]

پیوستهٔ نور گسیلیده از اتم مشاهده می‌شود. این دقیقاً نمود نوسان رابی است که در بخش قبل بررسی شد. گاهی لیزر ضعیف الکترون را به حالت $|۲\rangle$ برانگیخته می‌کند. چون الکترون اکنون در یک حالت شبه‌پایدار است، افت آن به حالت پایه ممکن است چند ثانیه طول بکشد. در این مدت فلوئورسانی روی نمی‌دهد، یعنی اتم تاریک است. وقتی الکترون سرانجام به حالت پایه فرو افتاد، میدان لیزری قوی بلافاصله آن‌را به حالت برانگیختهٔ مجاز برمی‌انگیزد، و الکترون به سرعت فرو می‌افتد، و بدین‌ترتیب باعث تداوم تابش فلوئورسان می‌شود. فلوئورسانی عملاً جهشهای کوانتومی بین حالت پایه و حالت شبه‌پایدار را دیدبانی می‌کند (شکل ۲۲ـ۴).

تحلیل سادهٔ این فرایند به‌صورت زیر است. فرض کنید $A_{۱۰}$، $B_{۱۰}$ و $A_{۲۰}$ و $B_{۲۰}$ به‌ترتیب ضرایب اینشتین برای گذارهایی باشند که $(۰,۱)$ و $(۲,۰)$ را به هم مربوط می‌کنند. شرایط مربوط به گذارها ایجاب می‌کنند که $A_{۲۰} \gg A_{۱۰}$. اگر چگالیهای انرژی باریکه‌های لیزر به‌ترتیب $U_۱$ و $U_۲$ باشند، معادلهٔ آهنگ احتمال اینکه اتم در حالت برانگیختهٔ $|۱\rangle$ باشد با فرض ناواگنی (و در نتیجه $g_i = ۱$) عبارت است از

$$\frac{dP_۱}{dt} = -P_۱(A_{۱۰} + B_{۱۰}U_۱) + B_{۱۰}U_۱P_۰ \qquad (۶۴ـ۲۲)$$

این معادله ائتلاف احتمال ناشی از گسیل خودبه‌خود و القایی و افزایش احتمال به واسطهٔ جذب

۵. اقتباس مجاز از
W Nagourney, J Sandberg and H Dehmelt, *Phys Rev Lett*, **56**, 2797, 1986.

www.arsanjan.blogfa.com

القایی از حالت پایه را توصیف می‌کند. احتمال اینکه اتم با P_0 یعنی احتمال اینکه الکترون در حالت پایه باشد. به‌همین ترتیب، معادلهٔ آهنگ احتمال اینکه اتم در حالت شبه‌پایدار $|2\rangle$ باشد به‌صورت زیر است

$$\frac{dP_2}{dt} = -(A_{20} + B_{20}U_2)P_2 + B_{20}U_2P_0 \qquad (۶۵_۲۲)$$

مجموع احتمالها برابر با ۱ است: $P_0 + P_1 + P_2 = 1$. اگر باریکهٔ لیزری که حالت پایه را به حالت برانگیختهٔ $|1\rangle$ جفت می‌کند شدید باشد آنگاه $U_1 \to \infty$ و $P_0 = P_1$. بنابراین، اگر احتمال برانگیختگی به‌حالت شبه‌پایدار را با P_+ نشان دهیم $(P_+ = P_2)$ و احتمال عدم برانگیختگی به این حالت را با P_- نشان دهیم $(P_- = 1 - P_2 = P_0 + P_1)$، این معادله‌ها منجر می‌شوند به

$$\frac{dP_+}{dt} = -R_-P_+ + R_+P_- \qquad (۶۶_۲۲)$$

که در آن

$$\begin{aligned} R_+ &= \frac{1}{2}B_{20}U_2 \\ R_- &= A_{20} + B_{20}U_2 \end{aligned} \qquad (۶۷_۲۲)$$

معادلهٔ

$$\frac{dP_-}{dt} = R_-P_+ - R_+P_- \qquad (۶۸_۲۲)$$

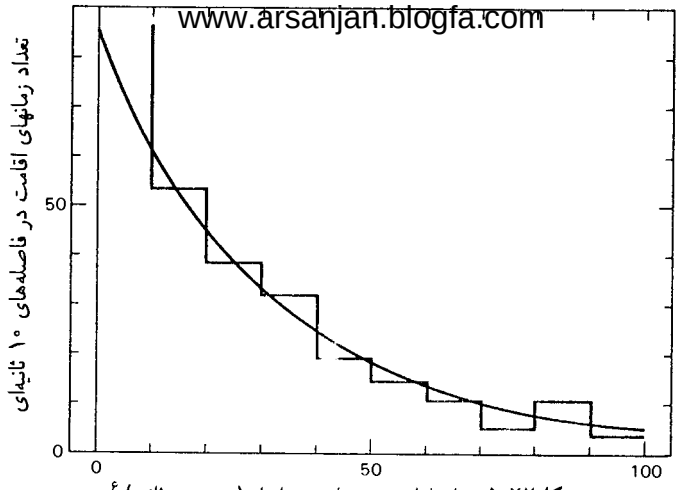
خودبه‌خود با توجه به $P_+ + P_- = 1$ به‌دست می‌آید. می‌توان این معادله‌ها را نمایشگر یک دستگاه دوترازی دانست که در آن آهنگ گذار به بالا R_+ و آهنگ گذار به پایین R_- است.

کمیتهایی که به لحاظ تجربی اهمیت دارند این احتمالها هستند که در بازهٔ زمانی t تا $t+T$ هیچ گذاری روی ندهد و در انتهای این بازه الکترون به حالت برانگیخته برود (P_{0+}) یا به حالت پایه(P_{0-}) . با کمی اندیشه می‌توان نتیجه گرفت که اگر آزمایش شروع شود و شدت باریکهٔ لیزر مستقل از زمان باشد، این احتمالها فقط تابع طول بازهٔ زمانی T هستند. معادله‌های آهنگ این احتمالها را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$\frac{dP_{0+}}{dT} = -R_-P_{0+} \qquad (۶۹_۲۲)$$

$$\frac{dP_{0-}}{dT} = -R_+P_{0-} \qquad (۷۰_۲۲)$$

www.arsanjan.blogfa.com



شکل ۲۲ـ۵ زمان اقامت در تراز شبه‌پایدار (برحسب ثانیه).[۶]

"شرایط اولیه" برای این معادله‌ها ایجاب می‌کنند که $P_{0\pm}(T=0)$ را بدانیم. فرض کنید شدت فلوئورسانی در زمانی مانند t قطع شود. این زمان را به‌گونه‌ای انتخاب می‌کنیم که $T=0$، و در نتیجه $P_{0+}(T=0)=1$. جواب معادله با این شرط اولیه به‌صورت زیر است

$$P_{0+}(T)=e^{-R_- T} \qquad (۷۱_۲۲)$$

این احتمال آن است که پس از زمان T علامت هنوز "قطع" باشد. به‌همین ترتیب، می‌توان نشان داد که پس از برقرار شدن فلوئورسانی احتمال اینکه پس از بازهٔ زمان T هنوز برقرار باشد به‌صورت زیر است

$$P_{0-}(T)=e^{-R_+ T} \qquad (۷۲_۲۲)$$

از تحلیل آماری توزیع زمانهای برقراری و قطع، مانند آنچه در شکل ۲۲ـ۵ نشان داده شده است، می‌توان برای اندازه‌گیری A_2 استفاده کرد. برای حالتهایی که عمر بسیار درازی دارند، اندازه‌گیری مستقیم A_2 بسیار مشکل است، زیرا آهنگ گسیل فوتونها بسیارکوچک است، و فوتونها می‌توانند در همهٔ راستاها گسیل شوند، و در نتیجه شمارش آنها فرایند بسیارکندی است.

باید توجه کرد که در مکانیک کوانتومی معمولاً با مجموعهٔ آماری بزرگی از دستگاههای یکسان سروکار داریم. در این مورد، یک اتم منفرد را بررسی می‌کنیم و به‌جای مجموعهٔ آماری این عضو

---

۶. اقتباس مجاز از
W Nagourney, J Sandberg, and H Dehmelt, *Phys Rev Lett*, **56**, 2297(1986), by permission.

www.arsanjan.blogfa.com

مجموعهٔ آماری را با شرایط اولیهٔ یکسان آماده می‌کنیم. وقتی تابش به پیوستاری از حالتها گسیل می‌شود به‌طور کلی این کار امکانپذیر نیست، اما برای مورد خاص میدان الکتریکی تک‌مد امکانپذیر است.

اثر موسباؤر

یک اتم (یا هر دستگاه کوانتومی دیگر) می‌تواند مانند یک ساعت دقیق کار کند، زیرا گذارهای آن‌را تابشهایی اعلام می‌کنند که بسامدهای کاملاً معینی دارند. اگر پهنای طبیعی خط تنها محدودیت موجود بود، می‌توانستیم به دقت بسیار زیادی دست یابیم.

متأسفانه، چنانکه در بحث سرد کردن اتمها گفته شد، حرکت اتمها باعث پهن‌شدگی دوپلری خط می‌شود. شاید فکر کنید استفاده از یک چشمهٔ مایع یا جامد می‌تواند این اثر را حذف کند، اما آنگاه پهن‌شدگی ناشی از تأثیر اتمهای مجاور به همان اندازه مضر خواهد بود. گذارهای هسته‌ای را در نظر می‌گیریم. هسته‌ای مانند $_{۷۷}Ir^{۱۹۱}$ یک پرتو γ با انرژیی از مرتبهٔ $۱۰۰keV$، با طول عمر $۱۰^{-۱۰}s$، گسیل می‌کند. در این مورد،

$$\frac{\Delta\omega}{\omega}=\frac{\Delta E}{E}=\frac{\hbar/\tau}{E}\cong\frac{۱۰^{-۲۷}/۱۰^{-۱۰}}{۱۰^{۵}\times ۱٫۶\times ۱۰^{-۱۲}}\simeq ۰٫۶\times ۱۰^{-۱۰} \qquad (۷۳_۲۲)$$

متأسفانه یک جابه‌جایی خط ناشی از پس‌زنی وجود دارد. پرتو γ حامل تکانهٔ $\hbar\omega/c$ است، و هسته برای پایستگی تکانه باید با همین تکانه پس بزند. این پس‌زدن با انرژی پس‌زنی

$$\Delta E=\frac{P_{\text{پس‌زنی}}^{۲}}{۲M}=\frac{۱}{۲M}\left(\frac{\hbar\omega}{c}\right)^{۲} \qquad (۷۴_۲۲)$$

و در نتیجه با کاهش انرژی تابش‌شده همراه است. تغییر نسبی بسامد برابر است با

$$\frac{\Delta E}{\hbar\omega}\simeq\frac{\hbar\omega}{۲Mc^{۲}}\simeq\frac{۱۰^{-۱}(\text{MeV})}{۲\times ۹۴۰\times ۱۹۱(\text{MeV})}\simeq ۳\times ۱۰^{-۷} \qquad (۷۵_۲۲)$$

مشاهدهٔ تابشی با این انرژی را نمی‌توان با روشهای مرسوم، اگرچه بسیار دقیق‌اند، انجام داد بلکه باید از آشکارسازی استفاده کرد که دقیقاً برای این تابش "کوک" شده باشد. این کار به بهترین نحو با استفاده از همان مادهٔ گسیلنده (مثلاً $_{۷۷}Ir^{۱۹۱}$) به‌عنوان جاذب تابش صورت می‌گیرد. جذب در بسامد "تشدید" که در آن تابش گسیل شده است به مقدار بسیار زیادی تقویت می‌شود، اما در اینجا نیز جابه‌جایی پس‌زنی وجود خواهد داشت. بنابراین، جابه‌جایی کل برابر است با $\Delta\omega/\omega\simeq ۶\times ۱۰^{-۷}$. بدین‌ترتیب، این "کوک دقیق" کارایی ندارد، زیرا خط به‌اندازه‌ای بیشتر

www.arsanjan.blogfa.com

از پهنای خود، که از مرتبهٔ $\omega \sim ۱۰^{۱۰}$ است، جابه‌جا می‌شود. می‌توان این پس‌زدن را با حرکت دادن گسیلنده با سرعت پس‌زنی جبران کرد. این سرعت از رابطهٔ زیر به‌دست می‌آید

$$\frac{v}{c} = \frac{P_{\text{پس‌زنی}}}{Mc} = \frac{\hbar\omega/c}{Mc} = ۲\frac{\hbar\omega}{۲Mc^۲} \simeq ۶ \times ۱۰^{-۷} \qquad (۷۶_۲۲)$$

یعنی $v = ۱٫۶ \times ۱۰^۴ \text{cm/s}$. این مقدار نشاندهندهٔ مشکلات فنی است، اما با یک دستگاه فرامرکزگریز تحقق یافته است.

یک پیشرفت بزرگ با کشف موسباؤر در سال ۱۹۵۸ روی داد: در شرایط خاصی احتمال زیادی برای گسیل بدون پس‌زنی وجود دارد. البته گسیل همیشه با پس‌زدن همراه است، اما به‌جای هسته قسمت بزرگی از بلور که هسته در آن قرار دارد پس می‌زند. چون جرم بلور $۱۰^{۲۲}$ بار بیشتر از جرم هسته است، انرژی پس‌زنی کاملاً قابل چشمپوشی است. برای اینکه درکی شهودی از آنچه روی می‌دهد به‌دست آوریم، فرض می‌کنیم هسته در یک چاه نوسانگر هماهنگ، با بسامد مشخصهٔ $\omega_۰$، حرکت می‌کند. ترازهای نوسانگر عبارت‌اند از

$$E_n = \hbar\omega_۰ \left(n_x + n_y + n_z + \frac{۳}{۲}\right) \qquad (۷۷_۲۲)$$

این چاه هماهنگ در واقع یک توصیف تقریبی از نیروهای بلوریی است که خواص شبکه را تعیین می‌کنند. اگر نیروهایی که هسته را به همسایه‌هایش می‌پیوندد قوی باشند ــ اگر "فنرها" سفت باشندــ آنگاه $\omega_۰$ بزرگ است؛ اگر "فنرها "نرم باشند، $\omega_۰$ کوچک است. فاصلهٔ ترازها برای "فنر سفت "زیاد است، یعنی چگالی حالتهای آن کوچک است، در حالی‌که چگالی حالت برای "فنر نرم "بزرگ است. اکنون به بررسی عنصر ماتریس مربوط به گذار از حالت هسته‌ای $\Psi_i(\mathbf{r}_۱, \mathbf{r}_۲, \ldots, \mathbf{r}_N)$ به‌حالت هسته‌ای $\Psi_f(\mathbf{r}_۱, \mathbf{r}_۲, \ldots, \mathbf{r}_N)$ می‌پردازیم، و برهم‌کنش را به‌صورت

$$-\frac{e}{Mc}\sum_{\text{پروتونها}} \mathbf{p}_k \cdot \mathbf{A}_k(\mathbf{r}_k, t) \qquad (۷۸_۲۲)$$

می‌گیریم. عنصر ماتریس مزبور متناسب است با

$$-\frac{e}{Mc}\int\cdots\int d^۳\mathbf{r}_۱, \ldots, d^۳\mathbf{r}_N \Psi_f^*(\mathbf{r}_۱, \ldots, \mathbf{r}_N)\sum_k \boldsymbol{\epsilon}\cdot\mathbf{p}_k\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_k}\Psi_i(\mathbf{r}_۱, \ldots, \mathbf{r}_N) \qquad (۷۹_۲۲)$$

اگر مختصهٔ مرکز جرم $\mathbf{R} = (۱/N)\sum_i \mathbf{r}_i$ را وارد کنیم آنگاه (الف) جملهٔ برهم‌کنش به‌صورت

www.arsanjan.blogfa.com

زیر درمی‌آید

$$-\frac{e}{Mc}e^{-i\mathbf{k}.\mathbf{R}}\sum_{\text{پروتونها}}\epsilon\cdot\mathbf{p}_k e^{-i\mathbf{k}\cdot\rho_k} \qquad (۸۰_۲۲)$$

که در آن $\boldsymbol{\rho}_i=\mathbf{r}_i-\mathbf{R}$، و (ب) تابع موج هسته به حاصلضربی که حرکت داخلی و حرکت مرکز جرم هسته را در پتانسیل هماهنگ توصیف می‌کند تجزیه می‌شود:

$$\Psi(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N)=\psi_{n_xn_yn_z}(\mathbf{R})\phi(\boldsymbol{\rho}_1,\ldots,\boldsymbol{\rho}_{N-1}) \qquad (۸۱_۲۲)$$

با جاگذاری در ۲۲ـ۷۹ به‌دست می‌آوریم

$$-\frac{e}{Mc}\int d^3\mathbf{R}\psi^*_{nf}(\mathbf{R})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi_{ni}(\mathbf{R}) \qquad (۸۲_۲۲)$$

$$\times\int d^3\boldsymbol{\rho}_1,\ldots,d^3\boldsymbol{\rho}_{N-1}\phi^*_f(\boldsymbol{\rho}_1,\ldots,\boldsymbol{\rho}_{N-1})\sum_{\text{پروتونها}}\epsilon\cdot\mathbf{p}_k e^{-i\mathbf{k}\cdot\rho_k}\phi_i(\boldsymbol{\rho}_1,\ldots,\boldsymbol{\rho}_{N-1})$$

بنابراین، می‌توان عنصر ماتریس را به‌صورت زیر نوشت

$$M=M_{\text{داخلی}}\int d^3\mathbf{R}\psi^*_{nf}(\mathbf{R})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi_0(\mathbf{R}) \qquad (۸۳_۲۲)$$

که در آن قرار داده‌ایم $n_i=0$، زیرا هسته در ابتدا در حالت پایهٔ شبکه است. احتمال اینکه گذار تابشی هسته را در حالت پایهٔ شبکه باقی بگذارد عبارت است از

$$P_0(k)=\frac{|M_{\text{داخلی}}|^2\left|\int d^3\mathbf{R}\psi^*_0(\mathbf{R})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi_0(\mathbf{R})\right|^2}{|M_{\text{داخلی}}|^2\sigma_{nf}\left|\int d^3\mathbf{R}\psi^*_{nf}(\mathbf{R})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi_0(\mathbf{R})\right|^2} \qquad (۸۴_۲۲)$$

$$=\left|\int d^3\mathbf{R}\psi^*_0(\mathbf{R})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi_0(\mathbf{R})\right|^2$$

که در آن حاصل‌جمع در مخرج کسر را، با استفاده از رابطهٔ کاملیت، برابر با ۱ قرار داده‌ایم.[۷] برای

---

۷. اثبات صوری از همه سریعتر است. داریم

$$\sum_{nf}|\langle n_f|e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}|0\rangle|^2=\sum_{nf}\langle 0|e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}|n_f\rangle\langle n_f|e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}|0\rangle$$

با توجه به $\sum|n_f\rangle\langle n_f|=1$. به‌دست می‌آوریم $\langle 0|e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}|0\rangle=1$.

www.arsanjan.blogfa.com

محاسبهٔ این احتمال، از تابع موج حالت پایهٔ بهنجارشدهٔ نوسانگر استفاده می‌کنیم. در فصل ۷ برای تابع موج حالت پایهٔ یک‌بعدی به‌دست آوردیم

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-m\omega_0 x^2/2\hbar}$$

بنابراین، در سه بعد داریم

$$\psi_0(R) = \psi_0(x)\psi_0(y)\psi_0(z) = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{3/4} e^{-m\omega_0 \mathbf{R}^2/2\hbar} \qquad (۸۵_۲۲)$$

پس باید کمیت زیر را محاسبه کنیم

$$\left|\left(\frac{M_N\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{3/2} \int d^3\mathbf{R}\, e^{-M_N\omega_0 \mathbf{R}^2/\hbar} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\right|^2$$

که در آن M_N جرم هسته است. می‌نویسیم

$$\begin{aligned} P_0 &= \left(\frac{M_N\omega_0}{\pi\hbar}\right)^3 \left|\int d^3\mathbf{R}\, e^{-(M_N\omega_0/\hbar)[\mathbf{R}+i\mathbf{k}(\hbar/2M_N\omega_0]^2} e^{-k^2\hbar/4M_N\omega_0}\right|^2 \\ &= e^{-\hbar k^2/2M_N\hbar\omega_0} \\ &= e^{-(\text{فاصلهٔ تراز})/(\text{انرژی پس‌زنی})} \end{aligned} \qquad (۸۶_۲۲)$$

زیرا $\hbar k = P_{\text{پس‌زنی}}$، و $\hbar\omega_0$ فاصلهٔ تراز در شبکه است. بنابراین، اگر فاصلهٔ تراز بزرگ باشد، یعنی یک فنر سفت داشته باشیم، گسیل بدون پس‌زنی محتمل‌تر می‌شود. الگویی که در اینجا برای شبکه به‌کار بردیم، که در آن هر هسته در پتانسیل هماهنگ خودش حرکت می‌کند، الگوی شبکهٔ اینشتین است، و بسامد ω_0 بسامد دبی است، و از این‌رو باید به‌جای ω_0 در واقع ω_D را به‌کار می‌بردیم، که رابطهٔ آن با دمای دبی T_D به‌صورت زیر است

$$\hbar\omega_D = kT_D \qquad (۸۷_۲۲)$$

یک بررسی دقیقتر با استفاده از الگوی دبی برای توصیف شبکه تنها نما را به‌اندازهٔ ضریب ۳/۲ تغییر می‌دهد.

www.arsanjan.blogfa.com

کاملاً درست نیست که بگوییم ... این است که در یک زمان τ برابر با طول عمر گذار ($\tau \simeq ۱٫۴ \times ۱۰^{-۷}$s برای $Fe^{۵۷}$) تنها یک ناحیه از بلور با اندازهٔ زیر پس‌زنی را جذب می‌کند

$$L = v_s \tau$$

که در آن v_s سرعت انتشار آشفتگی (یعنی سرعت صوت) در شبکه است. اما براورد درستی از v_s از رابطهٔ زیر به‌دست می‌آید

$$v_s \simeq \frac{a\omega_D}{۲\pi}$$

که در آن a ثابت شبکه است. بنابراین،

$$\frac{L}{a} \simeq \frac{\omega_D \tau}{۲\pi}$$

و با $\omega_D \simeq ۱۰^{۱۳}$s، تعداد هسته‌های جذب‌کنندهٔ پس‌زنی، که از مرتبهٔ $(L/a)^۳$ است، باز هم بسیار زیاد است.

با استفاده از براوردهای بالا، همراه با رابطهٔ عدم قطعیت، می‌توان نشان داد که نمی‌توان تعیین کرد که این یک هستهٔ منفرد است که "واقعاً" پس می‌زند یا نه؟ برای اندازه‌گیری انرژی پس‌زنی $\hbar k^۲/۲M_N$ به زمانی از مرتبهٔ زیر احتیاج داریم

$$\Delta t \gg \frac{\hbar}{(\hbar^۲ k^۲/۲M_N)}$$

شرط روی دادن اثر موسباؤر این است که

$$\frac{\hbar^۲ k^۲}{۲M_N} < \hbar\omega_D$$

در نتیجه، به‌دست می‌آوریم

$$\Delta t \gg \frac{۱}{\omega_D}$$

www.arsanjan.blogfa.com

در این مدت، آشفتگی فاصلهٔ زیر را طی می‌کند

$$d \simeq v_s \Delta t \sim \frac{a\omega_D}{2\pi} \Delta t \gg \frac{a}{2\pi}$$

که چندین هسته را دربرمی‌گیرد.

این سؤال پیش می‌آید که چگونه با استفاده از حالتهای انرژی هسته در شبکهٔ بلور می‌توان مسئلهٔ پس‌زنی و پایستگی تکانه را حل کرد؟ درکجای این رهیافت گفته می‌شود که بلور تکانه را جذب می‌کند؟ جواب کوانتوم‌ـمکانیکی این است که اگر بخواهیم دربارهٔ تکانه صحبت کنیم باید در نمایش تکانه کارکنیم. اما این روش پیچیده است، زیرا توصیف نیروهای بلور در این نمایش مشکل است. آنچه باید انجام داد تجزیهٔ حرکت بلور ــ بلور در واقع تعدادی نوسانگر است که "فنرهای" هر یک از آنها همسایگان مجاورش هستند ــ به مدهای بهنجار و کوانتیده کردن اینهاست. کوانتومهای حرکت شبکه، مانسته‌های فوتون، را فونون می‌نامند. بنابراین، گسیل بدون پس‌زنی به‌معنای گذاری است که در آن فونون گسیل نمی‌شود. فرمول حاصل بسیار شبیه به ۲۲ـ۸۶ است. در این شرایط، پهن‌شدگی ناشی از پس‌زنی در مقایسه با پهنای طبیعی خط بینهایت کوچک است. باز هم یک پهن‌شدگی دوپلری ناشی از حرکت گرمایی وجود خواهد داشت، اما این مشکل را می‌توان با سرد کردن گسیلنده و جاذب چاره کرد.

گسیلنده‌های بدون پس‌زنی یک ساعت عالی در اختیار ما می‌گذارند، و تحقیقات با استفاده از اثر موسباؤر در بسیاری از زمینه‌ها، مانند فیزیک حالت جامد و شیمی، صورت می‌گیرند. در اینجا تنها یک کاربرد، اندازه‌گیری زمینی انتقال به سرخ گرانشی، را بیان می‌کنیم. بنابه اصل هم‌ارزی، اگر فوتونی به‌اندازهٔ x سقوط کند، انتقال بسامد آن عبارت است از

$$\frac{\Delta\omega}{\omega} = \frac{gx}{c^2} \qquad (۲۲ـ۸۸)$$

این انتقال را می‌توان با پس‌زنی جاذب با سرعت v، که از رابطهٔ زیر تعیین می‌شود، جبران کرد

$$v^2 = 2gx \qquad (۲۲ـ۸۹)$$

(اگر فوتون و جاذب با هم سقوط آزاد می‌کردند، جذب تشدیدی روی می‌داد.) اگر جاذب یا چشمه را به نوسان سریع درآوریم ــ با استفاده از یک مبدل ــ و منحنی جذب را به این نوسانها ارتباط دهیم، می‌توانیم انتقال گرانشی را وارسی کنیم. چون سرعت، برای فاصلهٔ $x = 20\,\mathrm{m}$، از مرتبهٔ $20\,\mathrm{m/s}$ است، این آزمایش شدنی است، و چندین گروه آن‌را انجام داده‌اند. با توجه به خطاهای آزمایش، این اثر تأیید شده است. به‌عنوان مثال، برای Fe^{57} انتقال پیش‌بینی شده برابر است با $\Delta\omega/\omega = 4{,}92 \times 10^{-15}$، و مقدار تجربی که پوند و ربکا به‌دست آورده‌اند

www.arsanjan.blogfa.com

$(۵٫۱۳ \pm ۰٫۵۱) \times ۱۰^{-۱۵}$ ثانیه برای انرژی پرتو γی گسیل‌شده از $Fe^{۵۷}$ واقع بر یک میزچهٔ چرخان اندازه‌گیری شده است باز هم نتایجی در تأیید اصل هم‌ارزی به‌دست داده است.

مراجع

بحث مناسبی دربارهٔ نظریهٔ کوانتومی نور، با کاربرد آن در لیزرها، را می‌توان در کتاب زیر یافت

R Loudon, *The Quantum Theory of Light*, Clarendon Press, Oxford, 1986.

برای مبحث اثر موسباؤر مراجعه کنید به

H Lipkin, *Quantum Mechanics-New Approaches to Selected Topics*, North-Holland, Amsterdam, 1973.

www.arsanjan.blogfa.com

۲۳

نظریهٔ برخورد

کاوش در ساختار اتمی و مولکولی تا حد زیادی از طریق طیف نمایی انجام شده است. اگر بخواهیم نیروهای هسته‌ای و قانونهای حاکم بر برهم‌کنشهای ذرات بنیادی را درک کنیم، تنها روش موجود استفاده از پراکندگی ذرات گوناگون از هدفهای مختلف است. به‌یک معنا، طیف نمایی نیز صورتی از "پراکندگی" است. اتم در حالت پایه با پرتابه‌ای (که می‌تواند الکترون در لامپ تخلیه باشد) یا با برخورد با ذرات دیگر هدف (مثلاً در گرم کردن گاز) برانگیخته می‌شود، و سپس با بازگشت اتم به حالت پایه یا افت آن به یک حالت برانگیختهٔ دیگر یک فوتون خروجی مشاهده می‌شود. معمولاً این فرایندها را "برخورد "نمی‌نامیم زیرا اتم ترازهای انرژی کاملاً معینی دارد که برای زمانهای بسیار طولانیتر از زمان برخورد در آنها توقف می‌کند،[۱] و در نتیجه می‌توان "واپاشی" را از فرایند برانگیزش متمایز کرد. مخصوصاً، مشخصه‌های واپاشی به مد خاص برانگیختگی حساس نیستند. هسته و ذرات بنیادی نیز دارای ترازهای انرژی هستند، اما معمولاً طول عمر آنها به‌اندازهٔ کافی زیاد نیست که بتوان تفکیک به برانگیختگی و واپاشی را تضمین کرد، به‌خصوص چون همراه با پراکندگی "تشدیدی" یک پراکندگی غیرتشدیدی "زمینه" نیز وجود دارد، و جدا کردن این دو از هم گاهی پیچیده است. بنابراین، در این فصل فرایند را به‌طور کلی بررسی خواهیم کرد.

---

۱. یادآوری می‌کنیم که طول عمر حالت $2p$ در هیدروژن $۱٫۶ \times ۱۰^{-۹}\,s$ است، که در مقایسه با زمان مشخصهٔ $a_۰/\alpha c \simeq ۲ \times ۱۰^{-۱۷}\,s$ بسیار بزرگ است.

سطح مقطع برخورد

www.arsanjan.blogfa.com

بهترین راه بررسی پراکندگی فرمولبندی کردن معادله‌هایی است که آنچه را روی می‌دهد به‌دقت توصیف کنند: یک ذرهٔ فرودی که با یک بستهٔ موج توصیف می‌شود به هدف نزدیک می‌شود. این بستهٔ موج باید از لحاظ فضایی بزرگ باشد، و از این‌رو در طی آزمایش به‌طور محسوسی پخش نمی‌شود، و باید در مقایسه با ذرهٔ هدف بزرگ اما در مقایسه با ابعاد آزمایشگاه کوچک باشد، یعنی نباید هدف و آشکارساز را به‌طور همزمان بپوشاند. در واقع، اندازه‌های جانبی را پهنای باریکه در شتابدهنده تعیین می‌کند. سپس برهم‌کنش با هدف روی می‌دهد، و در نهایت دو بستهٔ موج خواهیم دید: یکی همچنان در جهت جلو حرکت می‌کند و قسمت ناپراکندهٔ باریکه را نشان می‌دهد، و دیگری که تحت یک زاویه دور می‌شود نمایشگر ذرات پراکنده است. تعداد ذراتی که به‌ازای واحد شار فرودی در واحد زمان به درون یک زاویهٔ فضایی پراکنده می‌شوند بنابه تعریف سطح مقطع دیفرانسیلی پراکندگی است. این رهیافت را مستقیماً به‌کارنمی‌بریم[۲] ، و به‌جای آن از بعضی از مطالب فصل ۱۰ برای تعیین سطح مقطع دیفرانسیلی استفاده خواهیم کرد. اما به هنگام تعبیر نتایج صوری مفهوم بستهٔ موج را در نظر خواهیم داشت.

در بحث جوابهای پیوستاری معادلهٔ شرودینگر در فصل ۱۰ نتیجه گرفتیم که (الف) جواب معادلهٔ شرودینگر در غیاب پتانسیل به‌صورت موج تخت $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ است که شار زیر را توصیف می‌کند

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2im}(\psi^*\boldsymbol{\nabla}\psi - \psi\boldsymbol{\nabla}\psi^*) = \frac{\hbar k}{m} \qquad (۱_۲۳)$$

اگر راستای $\mathbf{k}$ را محور z بگیریم، می‌توانیم رفتار این جواب به‌ازای مقادیر بزرگ r را به‌صورت مجموعی از امواج کروی ورودی و خروجی بنویسیم (به ۱۰ـ۷۲ مراجعه کنید):

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \Rightarrow \frac{i}{2k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l\left[\frac{e^{-i(kr-l\pi/2)}}{r} - \frac{e^{i(kr-l\pi/2)}}{r}\right]P_l(\cos\theta) \qquad (۲_۲۳)$$

(ب) پایستگی ذرات به این نتیجه منجر می‌شود که وجود یک پتانسیل شعاعی تنها می‌تواند $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ را به تابعی تغییر دهد که صورت مجانبی آن عبارت است از

$$\psi(\mathbf{r}) \Rightarrow \frac{i}{2k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l\left[\frac{e^{-i(kr-l\pi/2)}}{r} - S_l(k)\frac{e^{i(kr-l\pi/2)}}{r}\right]P_l(\cos\theta) \qquad (۳_۲۳)$$

---

۲. برای ملاحظهٔ بحث جالبی با استفاده از این رهیافت به مقالهٔ زیر، که از لحاظ ریاضی در سطح این کتاب است، مراجعه کنید:

R Hobbie, *American Journal of Physics*, **30**, 857, 1962.

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن[۳]

$$|S_l(k)| = ۱ \qquad (۴_۲۳)$$

صورت مجانبی ۲۳ـ۳ را می‌توان با استفاده از ۲۳ـ۲ تبدیل کرد به

$$\psi(\mathbf{r}) \Rightarrow e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \left[\sum_{l=۰}^{\infty}(۲l+۱)\frac{S_l(k)-۱}{۲ik}P_l(\cos\,\theta)\right]\frac{e^{ikr}}{r} \qquad (۵_۲۳)$$

که یک موج تخت به علاوهٔ یک موج کروی خروجی را نان می‌دهد. توجه کنید که با معادلهٔ عملاً تک‌ذره‌ای شرودینگر کارمی‌کنیم، و در نتیجه m جرم کاهیده است و θ عبارت است از زاویه، در دستگاه مرکز جرم، میان راستای $\mathbf{k}$ (محور z) و نقطهٔ مجانبی $\mathbf{r}$ که شمارشگر احتمالاً در آنجا قرار داده می‌شود. وقتی هدف بسیار سنگینتر از پرتابه است، تفاوتی میان زاویهٔ آزمایشگاه و زاویهٔ مرکز جرم وجود ندارد. همچنین توجه کنید که می‌توانستیم جوابی به‌صورت یک موج تخت به‌علاوهٔ یک موج کروی ورودی بسازیم، زیرا می‌توان جملهٔ اول در ۲۳ـ۳ را با ضریبی که در ۲۳ـ۴ صدق کند تغییر داد. اما جوابی که پراکندگی را توصیف می‌کند باید شامل موج خروجی باشد. اکنون شار مربوط به جواب مجانبی ۲۳ـ۵ را محاسبه می‌کنیم. می‌نویسیم

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{۲im}\left\{\left[e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}\right]^{*}\boldsymbol{\nabla}\left[e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}\right] - \text{همیوغ مختلط}\right\} \qquad (۶_۲۳)$$

$f(\theta)$ در این رابطه عبارت است از

$$f(\theta) = \sum_{l=۰}^{\infty}(۲l+۱)f_l(k)P_l(\cos\,\theta) \qquad (۷_۲۳)$$

که در آن

$$f_l(k) = [S_l(k)-۱]/۲ik \qquad (۸_۲۳)$$

---

۳. بحث پس از ۱۰ـ۸۹ را ببینید. $S_l(k)$ نمادنگاری متعارف برای $e^{۲i\beta_l(k)}$ است که در ۱۰ـ۸۸ تعریف شده است.

www.arsanjan.blogfa.com

با محاسبهٔ گرادیان به‌دست می‌آوریم

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2im}\left\{\left[e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f^*(\theta)\frac{e^{-ikr}}{r}\right]\left[i\mathbf{k}\,e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \hat{\imath}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial f(\theta)}{\partial\theta}\frac{e^{ikr}}{r}\right.\right.$$
$$\left.\left. + \hat{\imath}_r f(\theta)\left(ik\frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{ikr}}{r^2}\right)\right] - \text{همیوغ مختلط}\right\}$$
$$= \frac{\hbar}{2im}\left[i\mathbf{k} + i\mathbf{k}f^*(\theta)\frac{e^{-ikr(1-\cos\theta)}}{r} + ik\hat{\imath}_r f(\theta)\frac{e^{ikr(1-\cos\theta)}}{r} + ik\hat{\imath}_r|f(\theta)|^2\frac{1}{r^2}\right.$$
$$\left. - \hat{\imath}_r f(\theta)\frac{e^{ikr(1-\cos\theta)}}{r^2} + \hat{\imath}_\theta\frac{\partial f(\theta)}{\partial\theta}\frac{e^{ikr(1-\cos\theta)}}{r^2} - \text{همیوغ مختلط}\right\}$$

در عوامل نمایی از $\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} = kr\cos\theta$ استفاده کرده‌ایم. $\hat{\imath}_r$ بردار یکه در راستای $\mathbf{r}$ است.

در محاسبهٔ بالا، جمله‌های $1/r^3$ را کنار گذاشته‌ایم زیرا به‌ازای مقادیر بزرگ r تحت‌الشعاع جمله‌های $1/r^2$ قرار می‌گیرند. باید شار را در مکان آشکارساز یعنی در فاصلهٔ r از مبدأ، که در آن پتانسیلی که باعث پراکندگی می‌شود جایگزیده است، به‌دست آورد و از این‌رو مقادیر بزرگ r را در نظر می‌گیریم. در نتیجه، این‌شار برابر است با

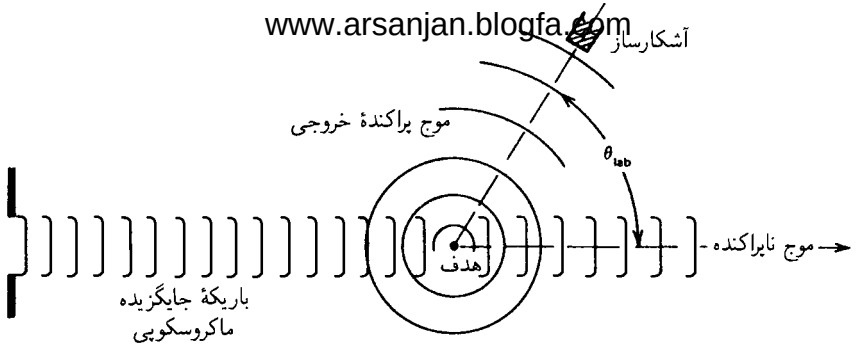
$$\mathbf{j} = \frac{\hbar k}{m} + \frac{\hbar k}{m}\hat{\imath}_r|f(\theta)|^2\frac{1}{r^2}$$
$$+ \frac{\hbar\mathbf{k}}{2m}\frac{1}{r}\left[f^*(\theta)e^{-ikr(1-\cos\theta)} + f(\theta)\,e^{ikr(1-\cos\theta)}\right]$$
$$+ \frac{\hbar k}{2m}\frac{\hat{\imath}_r}{r}\left[f^*(\theta)e^{-ikr(1-\cos\theta)} + f(\theta)\,e^{ikr(1-\cos\theta)}\right] \qquad (۹_۲۳)$$
$$- \frac{\hbar}{2m}\frac{\hat{\imath}_r}{r^2}\left[f(\theta)e^{ikr(1-\cos\theta)} - f^*(\theta)\,e^{-ikr(1-\cos\theta)}\right]$$
$$+ \frac{\hbar}{2m}\frac{\hat{\imath}_\theta}{r^2}\left[\frac{\partial f(\theta)}{\partial\theta}e^{ikr(1-\cos\theta)} - \frac{\partial f^*(\theta)}{\partial\theta}e^{-ikr(1-\cos\theta)}\right]$$

با توجه به اینکه $\theta \neq 0$، زیرا هیچگاه آزمایش پراکندگی را مستقیماً در جهت جلو انجام نمی‌دهیم،[۴] و اینکه در یک اندازه‌گیری همیشه از شار روی یک زاویهٔ فضایی کوچک اما متناهی انتگرال می‌گیریم، رابطهٔ نسبتاً پیچیدهٔ بالا به‌طور قابل‌ملاحظه‌ای ساده می‌شود. بنابراین، در چهار جملهٔ آخر

---

۴. چگونه می‌توان پراکندگی را با ذرات ناپراکنده بررسی کرد؟

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۲۳ـ۱ تصویر نموداری آزمایش پراکندگی. زاویهٔ پراکندگی زاویه در آزمایشگاه است.

این رابطه باید به‌جای $e^{ikr(1-\cos\theta)}$ انتگرال زیر را گذاشت

$$\int \sin\,\theta\, d\theta\, d\phi\, g(\theta,\phi)e^{ikr(1-\cos\theta)} \qquad (۱۰_۲۳)$$

که در آن $g(\theta,\phi)$ یک نوع تابع پذیرش جایگزیدهٔ هموار برای شمارشگر است. اکنون وقتی $r\to\infty$، یک انتگرال روی حاصلضرب یک تابع هموار و تابعی که بسیار سریع تغییر می‌کند داریم، و این انتگرال سریعتر از هر توان $1/r$ به‌صفر میل می‌کند. این چیزی است که در متون ریاضی لم ریمان‌ـلبگ نامیده می‌شود، و در مسئلهٔ ۲۳ـ۷ نشان داده شده است. بدین‌ترتیب، تنها دو جملهٔ اول باقی می‌مانند، و در نتیجه

$$\mathbf{j}=\frac{\hbar\mathbf{k}}{m}+\frac{\hbar k}{m}\hat{\imath}_r\frac{|f(\theta)|^2}{r^2} \qquad (۱۱_۲۳)$$

در غیاب پتانسیل تنها جملهٔ اول باقی می‌ماند. این جمله شار فرودی را نشان می‌دهد. در رهیافت بستهٔ موجی، باید $\hbar\mathbf{k}/m$ را در تابعی ضرب کنیم که ابعاد جانبی باریکه را تعیین می‌کند. بنابراین، اگر بخواهیم شار شعاعی $\mathbf{j}\cdot\hat{\imath}_r$ را به‌دست آوریم، جملهٔ مزبور مقدار $\hbar\mathbf{k}\cdot\hat{\imath}_r/m=\hbar k(\cos\theta)/m$ را تنها در ناحیهٔ محدودی از محور z به‌دست می‌دهد (شکل ۲۳ـ۱). چون شمارشگر خارج از این ناحیه قرار دارد، این جملهٔ اول در ناحیهٔ مجانبی هیچ سهمی در شار شعاعی ندارد، و از این‌رو تنها جملهٔ دوم در ۲۳ـ۱۱ مؤثر است، و داریم

$$\mathbf{j}\cdot\hat{\imath}_r=\frac{\hbar k}{m}\cdot\frac{|f(\theta)|^2}{r^2} \qquad (۱۲_۲۳)$$

بنابراین، تعداد ذراتی که از سطحی می‌گذرند که در مبدأ (هدف) زاویهٔ فضایی $d\Omega$ را می‌سازد برابر

www.arsanjan.blogfa.com

است با

$$\mathbf{j}\cdot\hat{\imath}_r dA=\frac{\hbar k}{m}\cdot\frac{|f(\theta)|^2}{r^2}r^2 d\Omega \qquad (۱۳\text{ـ}۲۳)$$

توجه کنید که r^2 حذف می‌شود، و از این‌رو حذف جمله‌های $1/r^3$ در ۲۳ـ۹ توجیه می‌شود، زیرا این جمله‌ها باعث می‌شوند جمله‌هایی از مرتبهٔ $1/kr$ در تعداد ذرات دخالت داشته باشند. سطح مقطع دیفرانسیلی عبارت است از این تعداد تقسیم بر شار فرودی $\hbar k/m$، یعنی

$$d\sigma=|f(\theta)|^2 d\Omega \qquad (۱۴\text{ـ}۲۳)$$

اگر پتانسیل به‌اسپین وابسته باشد، یک وابستگی سمتی نیز ظاهر می‌شود، و در نتیجه به‌طور کلی داریم

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=|f(\theta,\phi)|^2 \qquad (۱۵\text{ـ}۲۳)$$

سطح مقطع کل از رابطهٔ زیر به‌دست می‌آید

$$\sigma_{\text{کل}}(k)=\int d\Omega\frac{d\sigma}{d\Omega} \qquad (۱۶\text{ـ}۲۳)$$

اکنون اگر از $f(\theta)$ که برحسب $S_l(k)$ بیان شده است استفاده کنیم و $S_l(k)$ را برحسب تغییر فاز بیان کنیم، یعنی $S_l(k)=e^{2i\delta_l(k)}$ (به ۱۰ـ۸۶ تا ۱۰ـ۸۹ مراجعه کنید) به‌طوری که

$$f(\theta)=\frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l(k)}\sin\ \delta_l(k)P_l(\cos\theta) \qquad (۱۷\text{ـ}۲۳)$$

آنگاه

$$\sigma_{\text{کل}}=\int d\Omega\left[\frac{1}{k}\sum_l(2l+1)e^{i\delta_l(k)}\sin\delta_l(k)P_l(\cos\ \theta)\right]\left[\frac{1}{k}\sum_{l'}(2l'+1)e^{-i\delta l'(k)}\sin\ \delta_{l'}(k)P_{l'}(\cos\ \theta)\right]$$

و با استفاده از

$$\int d\Omega P_l(\cos\ \theta)P_{l'}(\cos\ \theta)=\frac{4\pi}{2l+1}\delta_{ll'} \qquad (۱۸\text{ـ}۲۳)$$

www.arsanjan.blogfa.com

به‌دست می‌آوریم

$$\sigma_{\text{کل}} = \frac{۴\pi}{k^۲}\sum_{l=۰}^{\infty}(۲l+۱)\sin^۲\delta_l(k) \qquad (۱۹_۲۳)$$

جالب توجه است که

$$\begin{aligned}\mathrm{Im}f(۰) &= \frac{۱}{k}\sum_{l=۰}^{\infty}(۲l+۱)\mathrm{Im}[e^{i\delta_l(k)}\sin\ \delta_l(k)]P_l(۱) \\ &= \frac{۱}{k}\sum_{l=۰}^{\infty}(۲l+۱)\sin^۲\delta_l(k) = \frac{k}{۴\pi}\sigma_{\text{کل}}\end{aligned} \qquad (۲۰_۲۳)$$

این رابطه را قضیهٔ اپتیکی می‌نامند، و برای فرایندهای ناکشسان، مانند فرایندهای پراکندگی که در فیزیک هسته‌ای و ذره‌ای روی می‌دهند، نیز صادق است. این رابطه بسیار مفید است و به زبان موجی بیان‌کنندهٔ این واقعیت است که سطح مقطع کل نمایشگر حذف شار از باریکهٔ فرودی است. این حذف تنها می‌تواند پیامد تداخل ویرانگر باشد، و این تداخل تنها می‌تواند بین موج فرودی و موجی روی دهد که به‌طور کشسان در جهت جلو پراکنده شده است. به‌همین دلیل است که $f(۰)$ به‌صورت خطی ظاهر می‌شود.

این نوع استدلال سست توضیح نمی‌دهد که چرا قسمت انگاری باید دخیل باشد، اما می‌توان نشان داد که این مطلب عموماً درست است.[۵]

پراکندگی کشسان و ناکشسان

شرط $|S_l(k)| = ۱$ پیامد پایستگی شار است. عملاً در بسیاری از آزمایشهای پراکندگی جذب باریکهٔ فرودی صورت می‌گیرد؛ هدف ممکن است صرفاً برانگیخته شود، یا تغییر حالت دهد، یا ممکن است ذرهٔ دیگری ظاهر شود. در این شرایط، بحث بالا تغییر نمی‌کند بجز اینکه باید از رابطهٔ زیر استفاده کنیم

$$S_l(k) = \eta_l(k)e^{۲i\delta_l(k)} \qquad (۲۱_۲۳)$$

که در آن

$$۰ \le \eta_l(k) \le ۱ \qquad (۲۲_۲۳)$$

---

۵. مراجعه کنید به

L I Schiff, *progr Theor Phys* (Kyoto) **11**, 288(1954).

www.arsanjan.blogfa.com

زیرا با جذب سروکار داریم. دامنهٔ پراکندگی را می‌توان عبارت است از

$$f_l(k) = \frac{S_l(k) - ۱}{۲ik} = \frac{\eta_l(k)e^{۲i\delta_l(k)} - ۱}{۲ik} = \frac{\eta_l \sin ۲\delta_l}{۲k} + i\frac{۱ - \eta_l \cos ۲\delta_l}{۲k} \qquad (۲۳_۲۳)$$

و سطح مقطع کل کشسان به‌صورت زیر است

$$\begin{aligned}\sigma_{e۱} &= ۴\pi \sum_l (۲l + ۱)|f_l(k)|^۲ \\ &= ۴\pi \sum_l (۲l + ۱)\frac{۱ + \eta_l^۲ - ۲\eta_l \cos ۲\delta_l}{۴k^۲}\end{aligned} \qquad (۲۴_۲۳)$$

برای فرایندهای ناکشسان نیز سطح مقطع کل داریم. چون جزئیات فرایندهای ناکشسان را مشخص نمی‌کنیم، تنها می‌توان دربارهٔ سطح مقطع کل ناکشسان که اتلاف شار را توصیف می‌کند صحبت کرد. اگر یک جملهٔ خاص را در ۲۳ـ۳ در نظر بگیریم، شار شعاعی درونسو که با

$$\frac{i}{۲k}\,\frac{e^{-ikr}}{r}P_l(\cos\,\theta)$$

حمل می‌شود عبارت است از

$$\left(\frac{\hbar k}{m}\right)\left[\frac{۴\pi}{(۲k)^۲}\right]$$

(یادآوری می‌کنیم که $Y_{l۰} = P_l(\cos\,\theta)/\sqrt{۴\pi}$). شار شعاعی برونسو

$$(\hbar k/m)|S_l(k)|^۲ ۴\pi/۴k^۲$$

است، و در نتیجه اتلاف کل شار به‌ازای هر مقدار l برابر است با

$$(\hbar k/m)(\pi/k^۲)[۱ - \eta_l^۲(k)]$$

بنابراین، با تقسیم بر شار فرودی به‌دست می‌آوریم

$$\sigma_{\text{ناکشسان}} = \frac{\pi}{k^۲}\sum_l (۲l + ۱)[۱ - \eta_l^۲(k)] \qquad (۲۵_۲۳)$$

www.arsanjan.blogfa.com

بدین‌ترتیب، سطح مقطع کل عبارت است از

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{کل}} &= \sigma_{\text{کشسان}} + \sigma_{\text{ناکشسان}} \\ &= \frac{\pi}{k^2}\sum_l (2l+1)(1+\eta_l^2 - 2\eta_l \cos 2\delta_l + 1 - \eta_l^2) \\ &= \frac{2\pi}{k^2}\sum_l (2l+1)(1-\eta_l \cos 2\delta_l)\end{aligned} \qquad (۲۳_۲۶)$$

همچنین از ۲۳_۲۳ نتیجه می‌گیریم که

$$\begin{aligned}\mathrm{Im} f(0) &= \sum_l (2l+1)\mathrm{Im} f_l(k) \\ &= \sum_l (2l+1)\frac{1-\eta_l \cos 2\delta_l}{2k} = \frac{k}{4\pi}\sigma_{\text{کل}}\end{aligned} \qquad (۲۳_۲۷)$$

که نشان می‌دهد قضیهٔ اپتیکی واقعاً صادق است.

اگر $\eta_l(k) = 1$ جذب صورت نمی‌گیرد، و سطح مقطع ناکشسان صفر می‌شود. وقتی $\eta_l(k) = 0$ جذب کامل داریم. با این همه، باز هم پراکندگی کشسان برای پاره موج روی می‌دهد. این پدیده در پراکندگی از قرص سیاه مشاهده می‌شود. قرص سیاه به این صورت توصیف می‌شود که (الف) دارای لبهٔ معین است و (ب) کاملاً جاذب است. چون پراکندگی در طول‌موجهای کوتاه را بررسی خواهیم کرد، یعنی وقتی مقادیر k بزرگ هستند، شرط (الف) ایجاب می‌کند که تنها پاره‌موجهای $l \lesssim L$ را در نظر بگیریم. L در رابطهٔ زیر صدق می‌کند

$$L = ka \qquad (۲۳_۲۸)$$

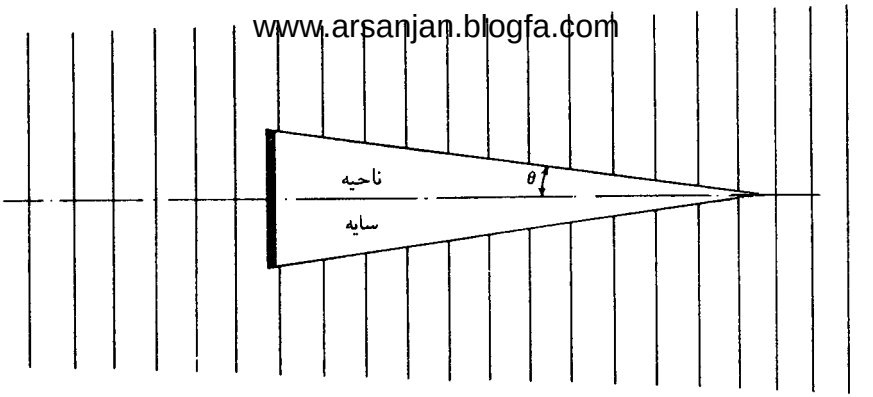
که در آن a شعاع قرص است. شرط (ب) نشان می‌دهد که برای مقادیر مربوط $l \leq L$ داریم $\eta_l(k) = 0$. بنابراین،

$$\sigma_{\text{ناکشسان}} = \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{L}(2l+1) = \frac{\pi}{k^2}L^2 = \pi a^2 \qquad (۲۳_۲۹)$$

و

$$\sigma_{\text{کشسان}} = \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{L}(2l+1) = \pi a^2 \qquad (۲۳_۳۰)$$

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۲۳ـ۲ پراکندگی قرص سیاه و اثر سایه.

بدین‌ترتیب، سطح مقطع کل برابر است با

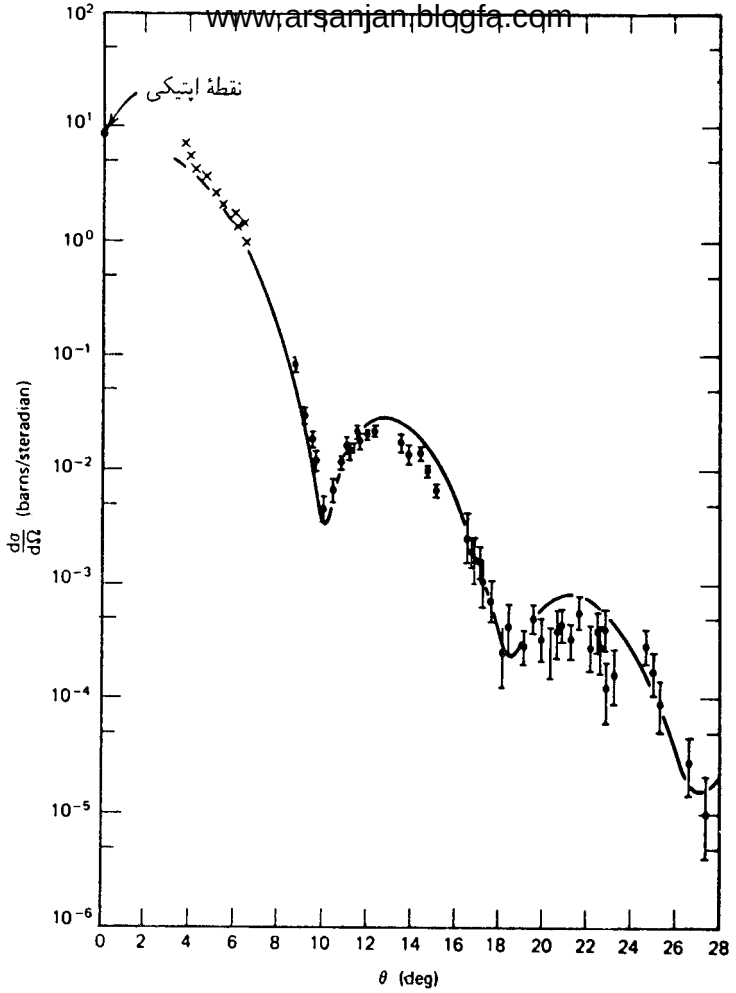
$$\sigma_{\text{کل}} = \sigma_{\text{کشسان}} + \sigma_{\text{ناکشسان}} = ۲\pi a^۲ \qquad (۳۱_۲۳)$$

این نتیجه عجیب به‌نظر می‌رسد؛ به دلایل صرفاً کلاسیک شاید انتظار داشته باشیم که سطح مقطع کل نتواند بزرگتر از مساحت قرص باشد؛ همچنین ممکن است انتظار داشته باشیم وقتی جذب کامل داریم پراکندگی کشسان روی ندهد. اما این نتیجه‌گیری اشتباه است؛ قرص جاذب شاری متناسب با $\pi a^۲$ را از باریکهٔ فرودی حذف می‌کند (شکل ۲۳ـ۲) و این باعث ایجاد سایه در پشت قرص می‌شود. اما در نقاط دور از قرص سایه پر می‌شود ــ در نقاط به اندازهٔ کافی دور نمی‌توان قرص را "دید" ــ و این محو شدن سایه تنها با پراش قسمتی از موج فرودی در لبهٔ قرص می‌تواند روی دهد. مقداری از موج فرودی که باید پراشیده شود به همان اندازه است که برای ایجاد سایه از باریکه حذف شده است. بنابراین، شاری که به‌طور کشسان پراکنده می‌شود نیز باید متناسب با $\pi a^۲$ باشد. پراکندگی کشسانی که با جذب همراه است به دلیل بالا پراکندگی سایه نامیده می‌شود. این پراکندگی قلهٔ تیزی در جهت جلو دارد. زاویهٔ محدودکنندهٔ آن‌را می‌توان از اصل عدم قطعیت براورد کرد: عدم قطعیت در جهت جانبی به‌اندازهٔ a باعث انتقال تکانهٔ جانبی مهارناپذیری به‌اندازهٔ $p_\perp \sim \hbar/a$ می‌شود. اما این مقدار برابر است با $p\theta$، و در نتیجه

$$\theta \sim \frac{\hbar}{ap} \sim \frac{۱}{ak} \qquad (۳۲_۲۳)$$

این نتیجه با نتیجهٔ اپتیکی $\theta \sim \lambda/a$ توافق دارد. این ویژگیها هم در پراکندگی هسته‌ای و هم در پراکندگی ذره در انرژیهای زیاد مشاهده می‌شوند، زیرا ناحیهٔ مرکزی هسته‌ها و پروتونها شدیداً

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۲۳ـ۳ توزیع زاویه‌ای پراکندگی پروتونهای ۱۰۰۰MeV(۱GeV) از هسته‌های O^{16}. در این توزیع زاویه‌ای فرورفتگیهایی دیده می‌شوند که مشخصهٔ پراش هستند. انحراف از نقش پراش فرانهوفر (در اپتیک) به علت این است که هسته‌ها لبهٔ تیز ندارند و جاذب کامل هم نیستند. این منحنی حاصل یک محاسبهٔ نظری است که این اثرات را به‌حساب آورده است.[۶]

جاذب هستند، و لبه‌های آنها کم و بیش تیز هستند (شکل ۲۳ـ۳).

---

۶. اقتباس مجاز از

H Palevsky et al, *Phys Rev Lett*, **18**, 1200, 1967.

www.arsanjan.blogfa.com

پراکندگی در انرژیهای کم

با استفاده از بسط تغییر فاز ۲۳ـ۱۷ می‌توان سطح مقطع دیفرانسیلی را برحسب تغییر فازها بیان کرد:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2}\left|\sum_l (2l+1)\, e^{i\delta_l(k)} \sin\delta_l(k) P_l(\cos\,\theta)\right|^2 \qquad (۲۳\text{ـ}۳۳)$$

بر اساس تطابق با نظریهٔ کلاسیک، انتظار داریم که تکانهٔ زاویه‌ای دخیل در پراکندگی دارای کران pa باشد که در آن p تکانهٔ مرکز جرم و a برد نیروها است. بنابراین، انتظار داریم که

$$l \lesssim \frac{pa}{\hbar} = ka \qquad (۲۳\text{ـ}۳۴)$$

با محدود کردن مجموع در ۲۳ـ۳۳، می‌توان با برازش سطح مقطع دیفرانسیلی اندازه‌گیری شده در چند زاویه به صورتی مانند

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_{n=0}^{N} A_n(\cos\,\theta)^n \qquad (۲۳\text{ـ}۳۵)$$

تغییر فازها را برای تعداد محدودی از مقادیر l تعیین کرد. ابهاماتی وجود دارند، از جمله اینکه اگر علامت تمام تغییر فازها را عوض کنیم سطح مقطع تغییر نمی‌کند. اما اینها را می‌توان با استفاده از نظریه، پیوستگی از انرژیهای کم، و شگردهای دیگر رفع کرد. امید می‌رود که از تغییر فازها، که داده‌های تجربی مربوط به آنها از داده‌های مربوط به سطح مقطعها به نظریه نزدیکترند، بتوان اطلاعاتی دربارهٔ برهم‌کنش به‌دست آورد.

تغییر فازهای، $\delta_l(k)$ و پتانسیل $V(r)$ از طریق معادلهٔ شرودینگر به هم مربوط می‌شوند؛ معادلهٔ شعاعی جوابی دارد که با تقریب یک ضریب دامنه دارای رفتار مجانبی زیر است

$$R_l(r) \sim \frac{1}{r}\sin\left[kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l(k)\right] \qquad (۲۳\text{ـ}۳۶)$$

بنابراین، با داشتن $V(r)$، روش سرراست تعیین $\delta_l(k)$ انتگرال‌گیری عددی معادلهٔ شعاعی تا مقادیر r که دورتر از برد پتانسیل هستند و بررسی رفتار مجانبی است. در واقع، این کاری است که عملاً انجام می‌شود، اما از این راه تصویر روشنی دربارهٔ خواص تغییر فازها به‌دست نمی‌آید. برای کسب اطلاعات بیشتر دربارهٔ تغییر فازها، چاه پتانسیل مربعی را در نظر می‌گیریم. در فصل ۱۰ دیدیم که

$$\tan\delta_l(k) = -\frac{C}{B} \qquad (۲۳\text{ـ}۳۷)$$

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن نسبت طرف راست از جور کردن تابع موج شعاعی داخلی و خارجی (رابطهٔ ۱۰ـ۸۵) به‌دست می‌آید:

$$\kappa \frac{j_l'(\kappa a)}{j - l(\kappa a)} = k \frac{j_l'(ka) + (C/B) n_l'(ka)}{j_l(ka) + (C/B) n_l(ka)} \qquad (۲۳ـ۳۸)$$

در این معادله

$$\kappa^۲ = \frac{۲m}{\hbar^۲}(E + V_۰) \qquad k^۲ = \frac{۲mE}{\hbar^۲} \qquad (۲۳ـ۳۹)$$

و علامت $'$ به‌معنای مشتق‌گیری نسبت به شناسه است. برای پتانسیل جاذبه داریم $V_۰ > ۰$. بنابراین

$$\tan \delta_l(k) = \frac{k j_l'(ka)\, j_l(\kappa a) - \kappa j_l(ka)\, j_l'(\kappa a)}{k n_l'(ka)\, j_l(\kappa a) - \kappa n_l(ka)\, j_l'(\kappa a)} \qquad (۲۳ـ۴۰)$$

این رابطه چندان گویا نیست، اما می‌توان آن‌را در بعضی موارد حدی ساده کرد.
(الف) موردی را در نظر بگیرید که

$$ka \ll l \qquad (۲۳ـ۴۱)$$

لزومی ندارد که $\kappa a \ll l$. با استفاده از فرمولهای ۱۰ـ۶۶ و ۱۰ـ۶۷ به‌دست می‌آوریم

$$\tan \delta_l(k) \simeq \frac{۲l + ۱}{[۱ \times ۳ \times ۵ \cdots (۲l + ۱)]^۲} (ka)^{۲l+۱} \frac{l j_l(\kappa a) - \kappa a j_l'(\kappa a)}{(l + ۱) j_l(\kappa a) + \kappa a j_l'(\kappa a)} \qquad (۲۳ـ۴۲)$$

که به‌ازای مقادیر بزرگ l سریعتر از e^{-l} افت می‌کند حتی اگر $ka \ll l$. رفتار

$$\tan \delta_l(k) \sim k^{۲l+۱} \qquad (۲۳ـ۴۳)$$

به‌ازای $ka \to ۰$ منحصر به چاه پتانسیل مربعی نیست بلکه برای تمام پتانسیلهای به‌اندازهٔ کافی هموار صادق است، و این یک پیامد سد مرکزگریزی است که نمی‌گذارد امواجی که انرژی آنها خیلی کمتر از ارتفاع سد است تحت تأثیر پتانسیل قرار گیرند.

www.arsanjan.blogfa.com

(ب) به‌ازای مقادیر مشخصی از انرژی، تحریج کمتر از $\pi/2$ می‌شود، و در نتیجه در این انرژیها تغییر فاز از $\pi/2$، یا به‌طور کلی از $(n+1/2)\pi$، می‌گذرد. وقتی تغییر فاز $\pi/2$ است، سطح مقطع پاره‌موج

$$\sigma_l(k) = \frac{4\pi(2l+1)}{k^2}\sin^2\delta_l(k) \qquad (۴۴_۲۳)$$

بیشترین مقدار ممکن را دارد. وقتی $\tan\delta_l(k)$ به‌سرعت بینهایت شود و از $-\infty$ به افزایش ادامه دهد پراکندگی تشدیدی داریم. برای توجیه این نامگذاری، و توضیح اینکه چه موقع پراکندگی تشدیدی روی می‌دهد، چاه پتانسیل را بسیار عمیق و همچنین l را بزرگ می‌گیریم، به‌طوری که

$$\kappa a \gg l \gg ka \qquad (۴۵_۲۳)$$

بنابراین، می‌توان از ۲۳ـ۴۲ برای $\tan\delta_l(k)$ استفاده کرد، و این وقتی بینهایت می‌شود که

$$(l+1)\,j_l(\kappa a) + \kappa a j_l'(\kappa a) = 0 \qquad (۴۶_۲۳)$$

چون $\kappa a \gg l$، شرط بالا تقریباً معادل است با

$$\frac{(l+1)}{\kappa a}\cos\left(\kappa a - \frac{1}{2}\pi\right) - \sin\left(\kappa a - \frac{1}{2}\pi\right) = 0$$

یعنی

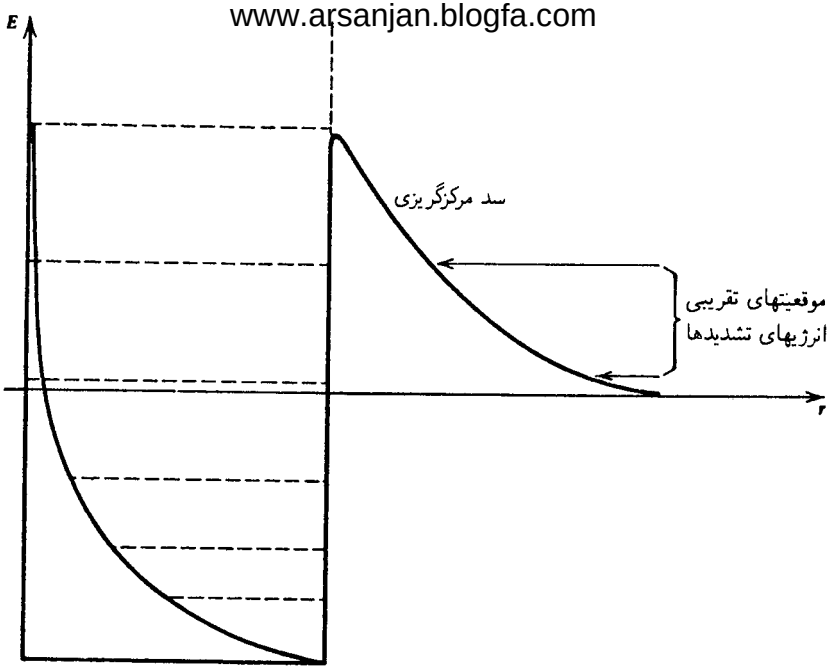
$$\tan\left(\kappa a - \frac{1}{2}\pi\right) \simeq \frac{l+1}{\kappa a} \qquad (۴۷_۲۳)$$

چون طرف راست بسیار کوچک است، شرط تشدید عبارت است از

$$\kappa a - \frac{1}{2}\pi \cong n\pi + \frac{l+1}{\kappa a} \qquad (۴۸_۲۳)$$

اما این همان شرط ۱۰ـ۷۶ برای وجود ترازهای گسسته در جعبهٔ سه‌بعدی است، و در نتیجه پراکندگی تشدیدی وقتی روی می‌دهد که انرژی فرودی درست به اندازه‌ای باشد که با یک تراز انرژی تطبیق کند. چون $E > 0$، این ترازها واقعاً حالتهای مقید نیستند، بلکه چنانکه شکل ۲۳ـ۴ نشان می‌دهد ترازهایی هستند که اگر سد بینهایت ضخیم می‌بود مقید می‌شدند. ضخامت سد بینهایت

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۲۳ـ۴ نمودار نمایشگر چاه پتانسیل مربعی با سد مرکزگریزی. خط‌چینها ترازهای انرژی را در یک چاه مربعی نامتناهی به عرض a نشان می‌دهند، و موقعیتهای تقریبی انرژیهای پراکندگی تشدیدی در سمت راست نشان داده شده‌اند. موقعیت پایین بسیار مشخصتر از موقعیت بالا است.

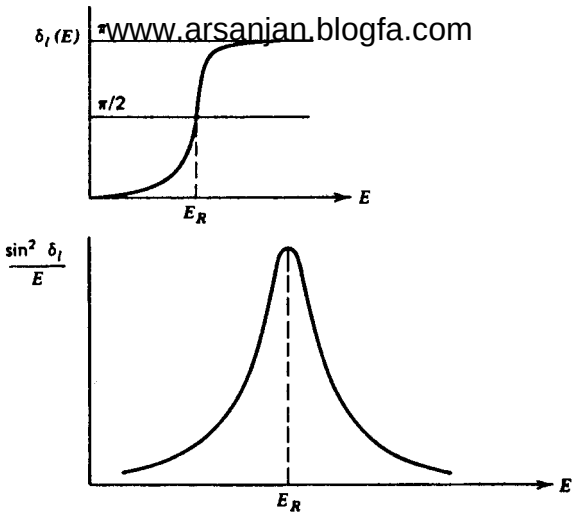
نیست، اما ذره‌ای که دقیقاً با انرژی مناسب پراکنده می‌شود باز هم "می‌داند" که یک تراز مجاز وجود دارد.

در مبحث ویژهٔ ۴، پراکندگی فوتون در انرژی متناظر با حالتی را بررسی می‌کنیم که باید در غیاب جفت‌شدگی به میدان تابش پایا باشد. در آنجا همین وضعیت، و همچنین یک رفتار تشدیدی، را خواهیم دید.

فرمول برایت-ویگنر

چنانکه ۲۳ـ۴۲ نشان می‌دهد، تغییر فاز به‌ازای مقادیر کوچک ka بسیار کوچک است. با وجود این، وقتی ka تغییرمی‌کند و از تشدید می‌گذرد، δ_l به‌سرعت زیاد می‌شود و به‌اندازهٔ π افزایش می‌یابد؛ در نتیجه، سطح مقطع پاره‌موج ۲۳ـ۴۴ یک قلهٔ بسیار تیز در انرژی تشدید پیدا می‌کند (شکل ۲۳ـ۵). این رفتار بسیار شبیه به سطح مقطع پراکندگی الکترونها از He^+ در انرژی مربوط به حالت برانگیختهٔ $(2s)^2$ است (شکل ۱۸ـ۴). در نزدیکی‌انرژی تشدید، تغییر فاز به‌سرعت از

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۲۳ـ۵ سطح مقطع پاره‌موج مربوط به تغییر فازی که در قسمت بالا رسم شده است.

$\pi/2$ می‌گذرد. این رفتار را می‌توان با رابطهٔ زیر نشان داد

$$\tan \delta_l \approx \frac{\gamma(ka)^{2l+1}}{E - E_{\text{تشدید}}} \qquad (۴۹_۲۳)$$

این رابطه به سطح مقطع پاره‌موج زیر می‌رسد

$$\sigma_l = \frac{4\pi(2l+1)}{k^2} \frac{\tan^2 \delta_l}{1 + \tan^2 \delta_l} = \frac{4\pi(2l+1)}{k^2} \frac{[\gamma(ka)^{2l+1}]^2}{(E - E_{\text{تشدید}})^2 + [\gamma(ka)^{2l+1}]^2} \qquad (۵۰_۲۳)$$

که فرمول برایت‌ـویگنر برای سطح مقطعهای تشدیدی است. باز هم این رفتار منحصر به چاه پتانسیل مربعی نیست بلکه مشخصهٔ تمام پتانسیلهایی است که برای آنها حالتهای شبه‌پایدار می‌توانند حالتهای مقیدی را در بیش از $E = 0$ به‌وجود آورند. صرفاً برای کامل بودن بحث متذکر می‌شویم که

$$f_l(k) = \frac{e^{2i\delta_l(k)} - 1}{2ik} = \frac{\dfrac{1 + i \tan \delta_l}{1 - i \tan \delta_l} - 1}{2ik} = \frac{\tan \delta_l}{k(1 - i \tan \delta_l)} = \frac{\gamma(ka)^{2l+1}/k}{E - E_{\text{تشدید}} - i\gamma(ka)^{2l+1}} \qquad (۵۱_۲۳)$$

www.arsanjan.blogfa.com

اگر پراکندگی غیرتشدیدی قابل ملاحظه باشد، دامنهٔ پراکندگی به صورت زیر خواهد بود

$$f_l(k) = f_l^{\text{تشدیدی}}(k) + f_l^{\text{غیرتشدیدی}}(k) \qquad (۵۲_۲۳)$$

پراکندگی موج S برای چاه مربعی

در انرژیهای کم، پراکندگی عمدتاً در حالتهای S است، و در نتیجه می‌توان تنها $l = ۰$ را در نظر گرفت. ساده‌تر این است که به‌جای استفاده از ۲۳ـ۴۰ تغییر فاز را مستقیماً محاسبه کنیم. جواب داخل چاه که در $r = ۰$ منظم است عبارت است از

$$u(r) = rR(r) = C \sin \kappa r \qquad (۵۳_۲۳)$$

و این را باید با جواب خارج چاه یعنی

$$u(r) = \sin(kr + \delta) \qquad (۵۴_۲۳)$$

جور کنیم. از پیوستگی $(۱/u)(du/dr)$ در $r = a$ داریم

$$\kappa \cot \kappa a = k \cot(ka + \delta)$$

یعنی

$$\tan \delta = \frac{(k/\kappa)\tan \kappa a - \tan ka}{۱ + (k/\kappa)\tan \kappa a \tan ka} \qquad (۵۵_۲۳)$$

اگر تعریف کنیم

$$\tan qa = \frac{k}{\kappa}\tan \kappa a$$

آنگاه

$$\tan \delta = \frac{\tan qa - \tan ka}{۱ + \tan qa \tan ka} = \tan (qa - ka)$$

یعنی

$$\delta = \tan^{-۱}\left(\frac{k}{\kappa}\tan \kappa a\right) - ka \qquad (۵۶_۲۳)$$

www.arsanjan.blogfa.com

با توجه به ۳۳ـ۳۹ می‌توان نوشت

$$(\kappa a)^2 = (ka)^2 + \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} \qquad (۵۷_۲۳)$$

که در آن برای پتانسیل جاذبه داریم $V_0 > 0$. بنابراین، در انرژیهای بسیار کم، با استفاده از $\tan x \simeq x$ به‌ازای $x \ll 1$، به‌دست می‌آوریم

$$\tan\delta \approx \delta \approx ka\left(\frac{\tan\kappa a}{\kappa a} - 1\right) \qquad (۵۸_۲۳)$$

وقتی κa از $\pi/2$ می‌گذرد (فرض کنید چاه پتانسیل را به‌تدریج عمیق می‌کنیم)، که درست این شرط است که چاه برای به‌وجود آمدن یک حالت مقید به‌اندازهٔ کافی عمیق باشد (معادلهٔ ۵ـ۶۹)، آنگاه $\tan\kappa a \to \infty$ و ۲۳ـ۵۵ نشان می‌دهد که

$$\tan\delta = \frac{1}{\tan ka} \to \infty \qquad (۵۹_۲۳)$$

یعنی δ از $\pi/2$ می‌گذرد. به یک معنا، حالت مقید در انرژی صفر مانند تشدید است.

وقتی چاه کمی عمیقتر می‌شود، باز هم داریم $\tan\delta \sim O(ka)$، و پیوستگی ایجاب می‌کند در شاخه‌ای باشیم که

$$\begin{aligned} \delta &\approx ka\left(\frac{\tan\kappa a}{\kappa a} - 1\right) \qquad \text{(بدون حالت مقید)} \\ \delta &\approx \pi + ka\left(\frac{\tan\kappa a}{\kappa a} - 1\right) \qquad \text{(با حالت مقید)} \end{aligned} \qquad (۶۰_۲۳)$$

اگر پتانسیل باز هم عمیقتر شود، دومین حالت مقید به‌وجود می‌آید، κa از $3\pi/2$ می‌گذرد، و داریم $\delta \approx 2\pi + ka[(\tan\kappa a/\kappa a) - 1]$، و غیره. یک نتیجهٔ کلی، به‌نام قضیهٔ لوینسون، وجود دارد که بنابه آن

$$\delta(0) - \delta(\infty) = N_B\pi \qquad (۶۱_۲۳)$$

که در آن N_B تعداد حالتهای مقید است، و ۲۳ـ۶۰ مثالی از آن است.

www.arsanjan.blogfa.com

رابطهٔ میان دامنهٔ پراکندگی و انرژی بستگی

در انرژیهای بسیار کم فقط $l = 0$ در سطح مقطع سهیم است، و این سهم عبارت است از

$$\sigma \cong \frac{4\pi}{k^2}(ka)^2 \left(\frac{\tan \kappa a}{\kappa a} - 1\right)^2 = 4\pi a^2 \left(\frac{\tan \kappa a}{\kappa a} - 1\right)^2 \quad (۶۲_۲۳)$$

که مقداری ثابت است. البته یک تصحیح از مرتبهٔ $(ka)^2$ روی این نتیجه خواهیم داشت. اگر پراکندگی نوترون-پروتون را در نظر بگیریم، می‌دانیم که پتانسیل باید به‌گونه‌ای باشد که انرژی بستگی درست دوترون را به‌دست دهد. اگر بنویسیم

$$E = -\frac{h^2\alpha^2}{2m}$$

و

$$\kappa = \sqrt{-\alpha^2 + \frac{2mV_0}{h^2}}$$

(عملاً برای مسئلهٔ حالت مقید $k^2 = -\alpha^2$) از جورکردن تابع موج خارج از پتانسیل $u(r) = Ae^{-\alpha r}$ به جواب داخل آن $B \sin \kappa r$ در مرز به‌دست می‌آوریم

$$\kappa \cot \kappa a = -\alpha \quad (۶۳_۲۳)$$

به‌ازای $k \ll \kappa$ داریم

$$\left(\frac{\tan \kappa a}{\kappa a}\right)_{\text{پراکندگی}} \cong \left(\frac{\tan \kappa a}{\kappa a}\right)_{\text{دوترون}} = -\frac{1}{a\alpha} \quad (۶۴_۲۳)$$

بنابراین

$$\sigma \cong 4\pi a^2 \left(1 + \frac{1}{a\alpha}\right)^2 \cong \frac{4\pi}{\alpha^2}(1 + 2a\alpha) \quad (۶۵_۲۳)$$

بدین‌ترتیب، در تقریب انرژی کم ۲۳ـ۶۴ می‌توان از مسئلهٔ تعیین پتانسیل و سپس محاسبهٔ سطح مقطع اجتناب کرد. این تقریب تنها وقتی به‌کار می‌آید که انرژی بستگی کوچک باشد. کمیت $1/\alpha$ فاصله‌ای است که تابع‌موج دوترون در آن امتداد دارد، و این فاصله بسیار بیشتر از برد پتانسیل a برای دستگاه مقید سست است. در انرژیهای کم، سطح مقطع پراکندگی را $1/\alpha$ تعیین می‌کند نه برد پتانسیل.

www.arsanjan.blogfa.com

پراکندگی وابسته به اسپین

در دههٔ ۱۹۳۰ شکل پتانسیل نوترون-پروتون توجه بسیاری را به‌خود جلب کرده بود، زیرا امید می‌رفت که این پتانسیل اطلاعاتی اساسی دربارهٔ ویژگیهای کلی نیروهای هسته‌ای به‌دست دهد. آزمایشهای اولیه در انرژیهای کم با پتانسیلهای مختلفی جور درمی‌آمدند. پس از مدتی معلوم شد که تقریباً هر پتانسیلی با شکل معقول کارساز است به شرط اینکه عمق و برد مناسب انتخاب شوند. در سال ۱۹۴۷ شووینگر نشان داد (و بعداً بته به روش ساده‌تری محاسبه کرد) که در انرژیهای کم همیشه با تقریب خوب می‌توان نوشت

$$k \cot \delta = -\frac{1}{A} + \frac{1}{2} r_0 k^2 \qquad (۶۶_۲۳)$$

که در آن A طول پراکندگی نامیده می‌شود، و r_0 برد مؤثر است. سطح مقطع در آستانه طول پراکندگی را تعیین می‌کند:

$$\sigma \cong 4\pi A^2 \qquad (۶۷_۲۳)$$

و برد مؤثر را وابستگی انرژی تعیین می‌کند. رابطهٔ میان این پارامترها و پارامترهای توصیف‌کنندهٔ پتانسیل با شکل پتانسیل تغییر می‌کند، اما برازش دو پارامتری به داده‌ها همیشه امکانپذیر است. این فرمول برد مؤثر نشان می‌دهد که برای کاوش شکل پتانسیل باید به انرژیهای زیادتر برویم.

انرژی بستگی دوترون ۲٫۲۳MeV است. بنابراین، با توجه به اینکه m در بحث ما جرم کاهیده یعنی $M_p/2$ است، به‌دست می‌آوریم

$$\frac{1}{\alpha} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mE}} = \frac{\hbar c}{\sqrt{M_p c^2 E}} = \frac{\hbar}{M_p c}\sqrt{\frac{M_p c^2}{E}}$$
$$\cong \frac{10^{-27}}{1{,}6 \times 10^{-22} \times 3 \times 10^{10}}\sqrt{\frac{940}{2{,}23}} = 4{,}3 \times 10^{-13}\text{cm}$$

و در نتیجه

$$\frac{4\pi}{\alpha^2} \simeq 2{,}5 \times 10^{-24}\text{cm}^2 = 2{,}5\text{b}$$

یک محاسبهٔ دقیقتر به این پیش‌بینی می‌رسد که سطح مقطع در آستانه چهار بارن است. اندازه‌گیری با نوترونهای گرمایی نتیجهٔ ۲۱ بارن را می‌دهد!

دلیل این اختلاف به‌حساب نیاوردن اسپین نوترون و پروتون است. اگر پتانسیل مستقل از اسپین بود آنگاه تمام حالتهای اسپینی به‌صورت یکسان پراکنده می‌شدند، یعنی اهمیتی نداشت

www.arsanjan.blogfa.com

که اسپین ذرات "بالا" باشد یا "پایین". اگر پتانسیل وابسته به اسپین باشد، یک شکل ممکن این پتانسیل عبارت است از

$$V(r) = V_1(r) + \boldsymbol{\sigma}_p \cdot \boldsymbol{\sigma}_n V_2(r) \qquad (۶۸_۲۳)$$

در این مورد، اسپین دیگر یک عدد کوانتومی خوب نیست، و باید حالتها را با توجه به اسپین کل و تکانهٔ زاویه‌ای کل دسته‌بندی کرد، یعنی با $l = 0$ چهار حالت به یک سه‌تایی $^3S_1$ و یک تکتایی $^1S_0$ تقسیم می‌شوند. لزومی ندارد که این دو حالت به‌صورت یکسان پراکنده شوند، و از این‌رو در واقع دو تغییر فاز داریم: δ_t برای سه‌تایی و δ_s برای تکتایی. گذار سه‌تایی-تکتایی روی نمی‌دهد، زیرا تکانهٔ زاویه‌ای کل J باید در حالتهای اولیه و نهایی یکسان باشد. سطح مقطع کل در هر مورد با تعداد حالتهای نهایی موزون می‌شود (سطح مقطع شامل یک جمع روی حالتهای نهایی است و به مقدار مؤلفهٔ z تکانهٔ زاویه‌ای بستگی ندارد)، و در نتیجه

$$\sigma = \frac{3}{4}\sigma_t + \frac{1}{4}\sigma_s \qquad (۶۹_۲۳)$$

برای نیروهای مستقل از اسپین داریم $\sigma = \sigma_t = \sigma_s$.

دوترون یک حالت $^3S_1$ است، و از این‌رو چهار بارن در واقع برای σ_t پیش‌بینی شده است. از اینجا نتیجه می‌گیریم که

$$\sigma_s = 4\sigma - 3\sigma_t = 72\,\text{b} \qquad (۷۰_۲۳)$$

چون در آستانه هستیم، به‌دست می‌آوریم

$$|A_s| = \sqrt{\frac{72 \times 10^{-24}}{4\pi}} \cong 2.4 \times 10^{-12}\,\text{cm} \qquad (۷۱_۲۳)$$

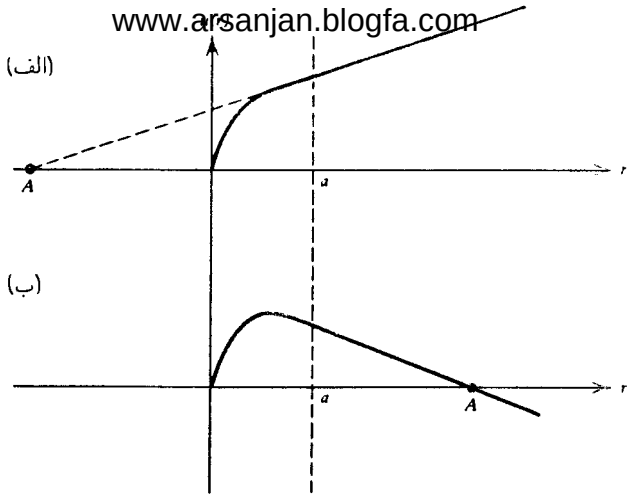
نتیجهٔ قبلی ایجاب می‌کند که

$$|A_t| = \sqrt{\frac{4 \times 10^{-24}}{4\pi}} \cong 4.7 \times 10^{-13}\,\text{cm} \qquad (۷۲_۲۳)$$

اکنون باید علامت A_t و A_s را تعیین کنیم. در آستانه داریم $k \cot\delta \approx k/\delta \simeq -1/A$. بنابراین، $\delta_s = -A_s k$ و $\delta_t = -A_t k$. بدین‌ترتیب، توابع موج مجانبی به‌صورت زیر هستند

$$\sin(kr + \delta_{t,s}) \simeq \sin\, k(r - A_{t,s}) \simeq k(r - A_{t,s}) \qquad (۷۳_۲۳)$$

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۲۳ـ۶ نمودار $u(r)$ برای جواب موج s در نزدیکی آستانه. خارج از برد شعاع $r = a$ تابع‌موج به‌صورت $(r - A)'$ است. [این صورت با ۲۳ـ۷۳، که بسط $\sin(kr + \delta)$ است، تعارضی ندارد. می‌توانستیم $u(r)$ را به‌صورت $(r'/k)\sin(kr + \delta)$ هم بگیریم، زیرا بهنجارش اختیاری است. در واقع، شیب خط را تابع‌موج داخلی و مکان A تعیین می‌کنند.] علامت A بستگی به این دارد که تابع‌موج داخلی به طرف محور r برگردد، (مورد ب)، یا برنگردد، (مورد الف). چون اگر یک حالت مقید ضعیف داشته باشیم تابع‌موج باید برگردد (تا بتواند با یک نمایی که به‌کندی کاهش می‌یابد جور شود) و چون انتظار نداریم که تابع‌موج در داخل پتانسیل به تغییرات E حول صفر حساسیت زیادی داشته باشد، نتیجه می‌گیریم که برای پتانسیلی که یک حالت مقید با مقدار کوچک E_B دارد باید $A > 0$.

دو مورد ممکن در شکل ۲۳ـ۶ نشان داده شده‌اند. می‌دانیم که تابع موج برای حالت سه‌تایی درست قبل از لبهٔ چاه به‌طرف محور طول برمی‌گردد (زیرا یک حالت مقید داریم) و در نتیجه برای این حالت باید $A_1 > 0$.

اگر A_0 نیز مثبت بود، یک حالت مقید تکتایی با بستگی بسیار ضعیفتر به‌دست می‌آوردیم، زیرا تابع‌موج داخلی به یک تابع مجانبی بسیار پهنتر متصل می‌شود. در واقع، انرژی بستگی برای این وضعیت باید $70\ \text{keV}$ باشد. اما چنین حالت مقیدی مشاهده نشده است، که نشان می‌دهد $A_0 < 0$.

این انتخاب علامت عملا با پراکندگی نوترون از مولکول H_2 تأیید شده است. چنانکه می‌دانیم، مولکول H_2 می‌تواند به‌صورت اورتو-H_2، با اسپینهایی که در حالت سه‌تایی هستند، و پارا-H_2، با دو اسپین پروتون در حالت تکتایی، وجود داشته باشد. برای نوترونهای بسیار کم‌انرژی، به‌طوری که طول‌موج آنها بسیار بزرگتر از فاصلهٔ پروتون-پروتون در مولکول باشد، دامنهٔ پراکندگی برای پراکندگی H_2-نوترون درست برابر است با مجموع دامنه‌های هر پراکندگی. می‌توان نشان داد که دامنهٔ پراکندگی

www.arsanjan.blogfa.com

از پارا-H_2 با دامنهٔ پراکندگی از اورتو-H_2 متفاوت است و در هر یک از آنها ترکیبهای خطی A_0 و A_1 دخالت دارند. این واقعیت که $\sigma_{\text{پارا}} \cong ۳٫۹۱ \times ۱۰$ و $\sigma_{\text{اورتو}} \cong ۱۲۵ \times ۱۰$ را می‌توان به این طریق توضیح داد. محاسبه به علت وجود چندین اثر که باید آنها را به‌حساب آورد پیچیده است، از جمله اینکه جرم مؤثر پروتون در یک مولکول با جرم پروتون آزاد تفاوت دارد، و اینکه مولکولها واقعاً ساکن نیستند بلکه با توزیعی مربوط به دما (از مرتبهٔ ۲۰K) حرکت می‌کنند. اختلاف زیاد بین دو سطح مقطع با این تصحیحات تغییر چندانی نمی‌کند، و از این‌رو تنها توضیح آن می‌تواند منفی بودن A_0 باشد.

تقریب بورن

در انرژیهای زیادتر، پاره‌موجهای بسیاری در پراکندگی مؤثرند و از این‌رو بهتر است از تجزیهٔ تکانهٔ زاویه‌ای صرفنظر کنیم. روشی که هم برای پتانسیل ضعیف و هم برای انرژی زیاد به یک تقریب بسیار خوب می‌رسد تقریب بورن است که در آن فرایند پراکندگی را همچون یک گذار، درست مانند گذارهایی که در فصل ۲۱ بیان کردیم، در نظر می‌گیریم، با این تفاوت که در اینجا گذارهای

پیوستار ← پیوستار

را در نظر می‌گیریم.

اگر در دستگاه مرکز جرم کار کنیم، عملاً یک مسئلهٔ تک‌ذره‌ای داریم، و این ذره از یک حالت اولیه که با ویژه‌تابع زیر توصیف می‌شود

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{r}/\hbar} \qquad (۷۴\text{-}۲۳)$$

به‌حالت نهایی که با

$$\psi_f(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}_f \cdot \mathbf{r}/\hbar} \qquad (۷۵\text{-}۲۳)$$

توصیف می‌شود گذاری انجام می‌دهد؛ $\mathbf{p}_i$ و $\mathbf{p}_f$ به‌ترتیب تکانه‌های اولیه و نهایی هستند. آهنگ گذار، بنابه قاعدهٔ طلایی ۲۱-۵۹، عبارت است از

$$R_{i\to f} = \frac{2\pi}{\hbar} \int \frac{V\, d^3\mathbf{p}_f}{(2\pi\hbar)^3} |M_{fi}|^2 \delta\left(\frac{p_f^2}{2m} - \frac{p_i^2}{2m}\right) \qquad (۷۶\text{-}۲۳)$$

www.arsanjan.blogfa.com

تابع دلتا بیانگر پایستگی انرژی است. اگر ذرات ورودی تفاوت داشته باشد، یا اگر هدف برانگیخته شود، تابع دلتا شکل متفاوتی پیدا می‌کند، اما همیشه به‌صورت $\delta[(p_f^2/2m) - E]$ است که در آن E انرژی جنبشی موجود برای ذرهٔ نهایی است. عنصر ماتریس M_{fi} از رابطهٔ زیر به‌دست می‌آید

$$M_{fi} = \langle \psi_f | V | \psi_i \rangle = \int d^3\mathbf{r} \frac{e^{-i\mathbf{p}_f \cdot \mathbf{r}/\hbar}}{\sqrt{V}} V(\mathbf{r}) \frac{e^{i\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{r}/\hbar}}{\sqrt{V}} \qquad (۷۷_۲۳)$$
$$= \frac{1}{V} \int d^3\mathbf{r}\, e^{-i\Delta \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r})$$

که در آن $\Delta = 1/\hbar(\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i)$. این عنصر ماتریس را به‌صورت زیر می‌نویسیم

$$M_{fi} = \frac{1}{V} \tilde{V}(\Delta) \qquad (۷۸_۲۳)$$

با جاگذاری در ۲۳ـ۷۶ به‌دست می‌آوریم

$$R_{i-f} = \frac{2\pi}{\hbar} \int d\Omega \frac{V p_f^2 dp_f}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{V^2} |\tilde{V}(\Delta)|^2 \, \delta\left(\frac{p_f^2}{2m} - E\right)$$
$$= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{V} \int d\Omega p_f m \frac{p_f dp_f}{m} \delta\left(\frac{p_f^2}{2m} - E\right) |\tilde{V}(\Delta)|^2 \qquad (۷۹_۲۳)$$
$$= \frac{1}{4\pi^2\hbar^4} \frac{1}{V} \int d\Omega p_f m |\tilde{V}(\Delta)|^2$$

که در آن از $p_f dp_f/m = d(p_f^2/2m)$ استفاده کرده‌ایم و روی تابع دلتا انتگرال گرفته‌ایم. بنابراین، باید p_f را برابر با $p_f = (2mE)^{1/2}$ بگیریم، و فراموش نکنیم که m در اینجا جرم کاهیدهٔ ذرهٔ نهایی است.

این رابطه وابستگی ناخواسته‌ای به حجم جعبهٔ کوانتش دارد، اما این واقعاً دور از انتظار نیست. توابع موج بالا به یک ذره در جعبه‌ای به حجم V بهنجار شده‌اند، و در نتیجه با افزایش V تعداد گذارها مسلماً کاهش می‌یابد. مشکل از اینجا ناشی می‌شود که مسئله‌ای را مطرح می‌کنیم که مطابقتی با آزمایش ما ندارد. آنچه انجام می‌دهیم عبارت است از فرستادن شاری از ذرات فرودی بر یکدیگر (البته این در چارچوب مرکز جرم است؛ در چارچوب آزمایشگاه یکی از ذرات ساکن است). اگر بخواهیم شار یک ذره در سانتیمتر مربع در ثانیه داشته باشیم، باید شار بالا را در V ضرب و بر حجم استوانه‌ای با قاعدهٔ 1cm^2 و بر سرعت نسبی ذرات در چارچوب مرکز جرم در

www.arsanjan.blogfa.com

حالت اولیه تقسیم کنیم. تعداد گذارها به‌ازای شار واحد درست برابر با سطح مقطع است. بنابراین، داریم

$$d\sigma = \frac{1}{4\pi^2\hbar^4}\frac{1}{|v_{\text{نسبی}}|}d\Omega p_f m|\tilde{V}(\Delta)|^2 \qquad (۸۰_۲۳)$$

در چارچوب مرکز جرم، چون دو ذرهٔ فرودی با تکانه‌های مساوی و با علامت مخالف p_i به طرف یکدیگر حرکت می‌کنند سرعت نسبی برابر است با

$$|v_{\text{نسبی}}| = \frac{p_i}{m_1} + \frac{p_i}{m_2} = p_i\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right) = \frac{p_i}{m^{(i)}_{\text{کاهیده}}} \qquad (۸۱_۲۳)$$

که در آن m_1 و m_2 جرم ذرات هستند. بدین‌ترتیب، اگر جرمهای کاهیده و تکانه‌های اولیه و نهایی یکسان نباشند، داریم

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4\pi^2}\frac{p_f}{p_i}m^{(f)}_{\text{کاهیده}}\,m^{(i)}_{\text{کاهیده}}\left|\frac{1}{\hbar^2}\tilde{V}(\Delta)\right|^2 \qquad (۸۲_۲۳)$$

اگر ذرات اولیه و نهایی یکی باشند، به‌دست می‌آوریم

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2_{\text{کاهیده}}}{4\pi^2}\left|\frac{1}{\hbar^2}\tilde{V}(\Delta)\right|^2 \qquad (۸۳_۲۳)$$

اگر جرم یکی از ذرات بسیار بیشتر از جرم ذرهٔ دیگر باشد آنگاه $m \to m_{\text{کاهیده}}$، که در آن m جرم ذرهٔ سبکتر است. از مقایسهٔ رابطهٔ بالا با ۲۳ـ۱۵ می‌بینیم که

$$f(\theta,\phi) = -\frac{m_{\text{کاهیده}}}{2\pi\hbar^2}\tilde{V}(\Delta) \qquad (۸۴_۲۳)$$

در واقع، برای تعیین علامت باید مقایسهٔ مفصلتری با بسط پاره‌موجی انجام دهیم. در اینجا به این کار نمی‌پردازیم.

به‌عنوان مثالی از کاربرد تقریب بورن، سطح مقطع پراکندگی ذره‌ای به جرم m و بار Z_1 از یک پتانسیل کولنی با بار Z_2 را محاسبه می‌کنیم. چشمهٔ میدان کولنی را بینهایت سنگین می‌گیریم، و از این‌رو جرم در ۲۳ـ۸۳ جرم ذرهٔ فرودی است. برای عمومیت بحث (و چنانکه خواهیم دید، به دلایل فنی) میدان کولنی را استتار شده می‌گیریم، به‌طوری که

$$V(\mathbf{r}) = Z_1 Z_e e^2\frac{e^{-r/a}}{r} \qquad (۸۵_۲۳)$$

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن a شعاع استتار است. داریم

$$\tilde{V}(\Delta) = Z_1 Z_2 e^2 \int d^3\mathbf{r}\, e^{-i\Delta\cdot\mathbf{r}} \frac{e^{-r/a}}{r} \qquad (۸۶_۲۳)$$

اگر راستای Δ را محور z بگیریم به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}
\int d^3\mathbf{r}\, e^{-i\Delta\cdot\mathbf{r}} \frac{e^{-r/a}}{r} &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta \int_0^{\infty} r^2 dr\, e^{-i\Delta r\cos\theta} \frac{e^{-r/a}}{r} \\
&= 2\pi \int_0^{\infty} r dr\, e^{-r/a} \int_{-1}^{1} d(\cos\theta) e^{-i\Delta r\cos\theta} \\
&= \frac{2\pi}{i\Delta} \int_0^{\infty} dr\, e^{-r/a}(e^{i\Delta r} - e^{-i\Delta r}) \qquad (۸۷_۲۳) \\
&= \frac{2\pi}{i\Delta}\left(\frac{1}{(1/a) - i\Delta} - \frac{1}{(1/a) + i\Delta}\right) = \frac{4\pi}{(1/a^2) + \Delta^2}
\end{aligned}$$

اما

$$\Delta^2 = \frac{1}{\hbar^2}(\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i)^2 = \frac{1}{\hbar^2}(2p^2 - 2\mathbf{p}_f\cdot\mathbf{p}_i) = \frac{2p^2}{\hbar^2}(1 - \cos\theta) \qquad (۸۸_۲۳)$$

و در نتیجه سطح مقطع عبارت است از

$$\begin{aligned}
\frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{m^2}{4\pi^2}\,\frac{1}{\hbar^4}(Z_1 Z_2 e^2)^2 \frac{16\pi^2}{[(2p^2/\hbar^2)(1 - \cos\theta) + (1/a^2)]^2} \\
&= \left(\frac{2mZ_1 Z_2 e^2}{4p^2\sin^2(\theta/2) + (\hbar^2/a^2)}\right)^2 \qquad (۸۹_۲۳) \\
&= \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E\,\sin^2(\theta/2) + (\hbar^2/2ma^2)}\right)^2
\end{aligned}$$

که در آن E را به‌جای $p^2/2m$ گذاشته‌ایم و از $(1 - \cos\theta)/2 = \sin^2(\theta/2)$ استفاده کرده‌ایم. زاویهٔ θ که در ۲۳ـ۸۸ وارد شده است زاویهٔ پراکندگی در چارچوب مرکز جرم است. در غیاب استتار ($a \to \infty$) رابطهٔ بالا به فرمول رادرفورد تبدیل می‌شود. در این مورد، $\hbar$ وجود ندارد، و نسخه با فرمول کلاسیک یکی است. اگر عامل استتار را در ۲۳ـ۸۶ در نظر نمی‌گرفتیم یک انتگرال همگرایی به‌دست می‌آمد. انتگرالهای مبهم را اغلب با استفاده از این نوع عاملهای همگرایی محاسبه می‌کنند.

www.arsanjan.blogfa.com

تقریب بورن محدودیتهای خاص خود را دارد. به‌عنوان مثال، دیدیم که $\tilde{V}(\Delta)$ حقیقی است، و در نتیجه $f(\theta)$ نیز در این تقریب حقیقی است. این نتیجه با توجه به قضیهٔ اپتیکی ایجاب می‌کند که سطح مقطع صفر باشد. در واقع، تقریب بورن تنها وقتی خوب است که یا (الف) پتانسیل ضعیف باشد، که در نتیجه سطح مقطع برحسب یک پارامتر کوچک از مرتبهٔ دوم است؛ این مورد باعث سازگاری تقریب بورن با قضیهٔ اپتیکی می‌شود، یا (ب) انرژی پتانسیل چنان زیاد باشد که سطح مقطع به صفر میل کند. این وضعیت برای اکثر پتانسیلهای هموار صادق است، اما برای ذرات واقعی صدق نمی‌کند؛ در اینجا به نظر می‌رسد که سطح مقطع در انرژیهای بسیار زیاد ثابت می‌ماند، و نمی‌توان انتظار داشت که تقریب بورن چیزی بیشتر از یک راهنما برای رفتار دامنهٔ پراکندگی باشد.

به‌عنوان آخرین نکته، متذکر می‌شویم که اگر پتانسیل وابسته به اسپین باشد بدیهی است که حالتهای ابتدایی و نهایی در ۲۳ـ۷۷ باید علاوه بر توابع موج فضایی متضمن توابع موج اسپینی نیز باشند. بنابراین، به عنوان مثال، اگر پتانسیل نوترون-پروتون به‌صورت زیر باشد

$$V(r) = V_1(r) + \boldsymbol{\sigma}_P \cdot \boldsymbol{\sigma}_N V_2(r)$$

آنگاه تقریب بورن به‌صورت زیر درمی‌آید

$$M_{fi} = \frac{1}{V} \int d^3r \, e^{-i\Delta \cdot \mathbf{r}} \xi_f^+ V(r) \xi_i$$

که در آن ξ_i و ξ_f حالتهای اسپینی ابتدایی و نهایی دستگاه نوترون-پروتون را نشان می‌دهند.

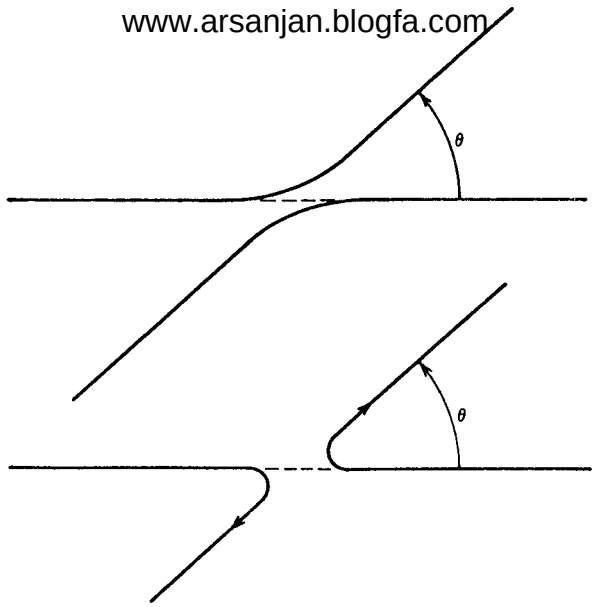
پراکندگی ذرات یکسان

وقتی دو ذرهٔ یکسان پراکنده می‌شوند، راهی برای تشخیص انحراف یک ذره در زاویهٔ θ و انحراف آن در زاویهٔ $\pi - \theta$ در چارچوب مرکز جرم وجود ندارد، زیرا پایستگی تکانه ایجاب می‌کند که اگر یکی از ذرات در زاویهٔ θ پراکنده شد ذرهٔ دیگر در راستای $\pi - \theta$ حرکت کند (شکل ۲۳ـ۷). به‌لحاظ کلاسیک نیز یکسانی ذرات روی سطح مقطع پراکندگی تأثیر دارد، زیرا تعداد شمارشها در یک شمارشگر معین مجموع شمارشهای مربوط به دو ذره است. بنابراین

$$\sigma_{\text{cl}}(\theta) = \sigma(\theta) + \sigma(\pi - \theta) \qquad (۹۰\text{ـ}۲۳)$$

در مکانیک کوانتومی راهی برای تشخیص دو حالت نهایی از یکدیگر وجود ندارد، و در نتیجه دو دامنهٔ $f(\theta)$ و $f(\pi - \theta)$ می‌توانند با هم تداخل کنند. بنابراین، سطح مقطع پراکندگی برای دو ذ

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۲۳ـ۷ راستاهای مجانبی در پراکندگی دو ذرهٔ یکسان در زاویهٔ مرکز جرمی θ.

یکسان با اسپین صفر (بوزون)، مثلاً ذرات α، برابر است با

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \qquad (۹۱_۲۳)$$

یا

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 + [f^*(\theta)f(\pi - \theta) + f(\theta)f^*(\pi - \theta)] \qquad (۹۲_۲۳)$$

که تفاوت آن با نتیجهٔ کلاسیک در جملهٔ تداخلی است، و این به‌عنوان مثال سبب تقویت در $\pi/2$ می‌شود:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\pi/2} = 4\left|f\left(\frac{\pi}{2}\right)\right|^2 \qquad (۹۳_۲۳)$$

در حالی‌که نتیجهٔ بدون تداخل برابر است با

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\pi/2} = 2\left|f\left(\frac{\pi}{2}\right)\right|^2 \qquad (۹۴_۲۳)$$

www.arsanjan.blogfa.com

وقتی پراکندگی دو ذره با اسپین ۱/۲، مثلاً پراکندگی پروتون-پروتون یا الکترون-الکترون، را بررسی می‌کنیم، دامنه باید نشاندهندهٔ پادتقارن اساسی تابع موج کل تحت تعویض دو ذره باشد. اگر دو ذره در یک حالت تکتایی اسپینی باشند، تابع موج فضایی باید متقارن باشد، و

$$\frac{d\sigma_s}{d\Omega} = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \qquad (۹۵_۲۳)$$

اگر دو ذره در یک حالت سه‌تایی اسپینی باشند، تابع موج فضایی باید پادمتقارن باشد، و

$$\frac{d\sigma_t}{d\Omega} = |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 \qquad (۹۶_۲۳)$$

در پراکندگی دو پروتون ناقطبیده، تمام حالتهای اسپینی به یک اندازه محتمل‌اند، و از این‌رو احتمال یافتن این دو پروتون در یک حالت سه‌تایی سه برابر احتمال یافتن آنها در یک حالت تکتایی است، به‌طوری که

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{3}{4}\frac{d\sigma_t}{d\Omega} + \frac{1}{4}\frac{d\sigma_s}{d\Omega} \\ &= \frac{3}{4}|f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 + \frac{1}{4}|f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \qquad (۹۷_۲۳) \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 - \frac{1}{2}[f(\theta)f^*(\pi - \theta) + f^*(\theta)f(\pi - \theta)]\end{aligned}$$

برای پراکندگی پروتون-پروتون و همچنین پراکندگی α-α، دامنهٔ اصلی $f(\theta)$ مجموع یک جملهٔ هسته‌ای (اگر انرژیها بیش از اندازه کم نباشند) و یک جملهٔ کولنی است. ذرات یکسان چه بوزون باشند چه فرمیون، تحت تعویض $\theta \to \pi - \theta$ تقارن داریم.

پراکندگی از اتمهای شبکه

ملاحظات تقارن در پراکندگی ذرات از شبکهٔ بلور نیز به‌کار می‌آیند. اگر از اسپین صرفنظر کنیم، که در نتیجه وارونه شدن اسپین الکترون ("بالا" ← "پایین"، یا برعکس) اهمیت نخواهد داشت، دامنهٔ پراکندگی $f(\theta)$ در انرژیهای کم مستقل از زاویه می‌شود (پراکندگی موج S) و جواب معادلهٔ شرودینگر برای یک اتم در نقطهٔ شبکهٔ $\mathbf{a}_i$ دارای صورت مجانبی زیر است

$$\psi(\mathbf{r}) \sim e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{a}_i)} + f\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{a}_i|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{a}_i|} \qquad (۹۸_۲۳)$$

www.arsanjan.blogfa.com

اما

$$k|\mathbf{r}-\mathbf{a}_i| = k(\mathbf{r}^2 - 2\mathbf{r}\cdot\mathbf{a}_i + a_i^2)^{1/2}$$
$$\cong kr\left(1 - \frac{2\mathbf{r}\cdot\mathbf{a}_i}{r^2}\right)^{1/2} \qquad (۹۹_۲۳)$$
$$\cong kr - k\hat{\imath}_r\cdot\mathbf{a}_i$$

که در آن $k\hat{\imath}_r$ تکانهٔ نهایی $\mathbf{k}'$ زیرا برداری است با بزرگی k که هم‌جهت با $\mathbf{r}$ (نقطهٔ مشاهده) است. با تقسیم بر ضریب فاز $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i}$، صورت مجانبی زیر را برای تابع موج به‌دست می‌آوریم

$$\psi \sim e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f\, e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{a}_i} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i}\frac{e^{ikr}}{r} + 0\left(\frac{1}{r^2}\right) \qquad (۱۰۰_۲۳)$$

و در نتیجه دامنهٔ پراکندگی عبارت است از

$$f(\theta) = f\, e^{-i\Delta\cdot\mathbf{a}_i} \qquad \Delta = \mathbf{k}' - \mathbf{k} \qquad (۱۰۱_۲۳)$$

در وضعیتی که نمی‌توان گفت کدام اتم در بلور باعث پراکندگی شده است، دامنهٔ کل با مجموع تمام دامنه‌های پراکندگی انفرادی برابر است. این مورد در واقع مربوط به پراکندگی کشسان کم انرژی است که در آن پس‌زنی مشاهده نمی‌شود و اسپین اندازه‌گیری نمی‌شود. بدین‌ترتیب، برای فرایند همدوس داریم

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| f \sum_{\text{اتمها}} e^{-i\Delta\cdot\mathbf{a}_i} \right|^2 \qquad (۱۰۲_۲۳)$$

اگر یک آرایهٔ مکعبی ساده از نقطه‌های شبکه داشته باشیم، به‌طوری که

$$\mathbf{a}_i = a(n_x\hat{\imath}_x + n_y\hat{\imath}_y + n_z\hat{\imath}_z) \qquad -N \le n_x, n_y, n_z \le N \qquad (۱۰۳_۲۳)$$

(فاصله‌ها در تمام راستاها مضارب درستی از a هستند)، آنگاه

$$\sum e^{-i\Delta\cdot\mathbf{a}_i} = \sum_{n_x=-N}^{N}\sum_{n_y=-N}^{N}\sum_{n_z=-N}^{N} e^{-ia\Delta_x n_x} e^{-ia\Delta_y n_y} e^{-ia\Delta_z n_z}$$

www.arsanjan.blogfa.com

با استفاده از

$$\sum_{n=-N}^{N} e^{i\alpha n} = e^{-i\alpha N}(1 + e^{i\alpha} + e^{2i\alpha} + \cdots + e^{2i\alpha N})$$

$$= e^{i\alpha N}\frac{e^{i\alpha(2N+1)} - 1}{e^{i\alpha} - 1} = \frac{e^{i\alpha(N+1)} - e^{i\alpha N}}{e^{i\alpha} - 1} \qquad (۱۰۴_۲۳)$$

$$= \frac{e^{i\alpha(N+1/2)} - e^{-i\alpha(N+1/2)}}{e^{i\alpha/2} - e^{-i\alpha/2}} = \frac{\sin\ \alpha\ \left(N + \frac{1}{2}\right)}{\sin\ \alpha/2}$$

به نتیجهٔ زیر می‌رسیم

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 \frac{\sin^2 \alpha_x \left(N + \frac{1}{2}\right)}{\sin^2 \alpha_x/2} \cdot \frac{\sin^2 \alpha_y \left(N + \frac{1}{2}\right)}{\sin^2 \alpha_y/2} \cdot \frac{\sin^2 \alpha_z \left(N + \frac{1}{2}\right)}{\sin^2 \alpha_z/2}$$

(۱۰۵_۲۳)

که در آن

$$\alpha_x = a\ \Delta_x - 2\pi\nu_x \qquad (\nu_x = \text{عدد درست}), \qquad (۱۰۶_۲۳)$$

و غیره. تعمیمی که قبلاً گفتیم در اینجا نیز صدق می‌کند، زیرا تبدیل $\alpha \to \alpha - 2\pi\nu$، که در آن ν یک عدد درست است، ۱۰۵_۲۳ را تغییر نمی‌دهد. رابطهٔ ۱۰۵_۲۳ چندان گویا نیست. اما اگر N بزرگ باشد، هر یک از عوامل آن وقتی α_x، ... به‌صفر نزدیک هستند قلهٔ تیزی پیدا می‌کنند. در واقع، با استفاده از

$$\frac{\sin^2 Nu}{u^2/4} \to 4\pi N\ \delta(u) \qquad (۱۰۷_۲۳)$$

که با یک تعویض متغیر ساده از ۲۱_۲۰ نتیجه می‌شود، به‌دست می‌آوریم

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2(2\pi)^3(2N)^3\delta(a\Delta - 2\pi\nu) \qquad (۱۰۸_۲۳)$$

تعداد کل اتمها $(2N)^3$ است، و از این‌رو سطح مقطع به‌ازای هر اتم عبارت است از

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2\frac{(2\pi)^3}{a^3}\delta\left(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \frac{2\pi\nu}{a}\right) \qquad (۱۰۹_۲۳)$$

www.arsanjan.blogfa.com

بنابراین، سطح مقطع دیفرانسیلی پراکندگی بیشینه‌ای که از رابطهٔ زیر به‌دست می‌آیند

$$\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \frac{2\pi}{a}\boldsymbol{\nu} \qquad (۱۱۰\text{ـ}۲۳)$$

که در آنها سطح مقطع دیفرانسیلی به‌شدت زیاد می‌شود. شرایط بالا را شرایط براگ می‌نامند، و اعداد درست ν_x، ν_y و ν_z شاخصهای میلر برای صفحه‌های براگ هستند.

روابطی را که هم‌اکنون به‌دست آوردیم می‌توان به بلورهای پیچیده‌تر تعمیم داد. این رابطه‌ها برای مطالعهٔ ساختار بلور، با استفاده از نوترونها یا پرتوهای x به عنوان ذرات فرودی، یا استفاده از بلور شناخته شده برای مطالعهٔ پرتوهای x که در گذارهای اتمی به‌صورت فوتونهای پرانرژی گسیل می‌شوند، نیز مورد استفاده قرار می‌گیرند.

مسائل

۱ـ۲۳ نشان دهید که برای پتانسیل مرکزی $V(\mathbf{r}) = V(r)$ می‌توان عنصر ماتریس M_{fi} در ۷۷ـ۲۳ را به‌صورت زیر نوشت

$$M_{fi} = \frac{1}{V}\,\frac{4\pi\hbar}{\Delta}\int_0^\infty r\,dr V(r)\sin\,r\Delta$$

توجه کنید که این عنصر ماتریس تابع زوجی از Δ است، یعنی تابعی است از

$$\Delta^2 = (\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i)^2/\hbar^2$$

۲ـ۲۳ پتانسیل زیر را در نظر بگیرید

$$V(r) = V_G e^{-r^2/a^2}$$

با استفاده از تقریب بورن، سطح مقطع دیفرانسیلی $d\sigma/d\Omega$ را برحسب زاویهٔ پراکندگی مرکز جرمی θ به‌دست آورید. نتیجه را با سطح مقطع دیفرانسیلی برای پتانسیل یوکاوا

$$V(r) = V_0 b\frac{e^{-r/b}}{r}$$

www.arsanjan.blogfa.com

مقایسه کنید (به ۲۳ـ۸۵ تا ۲۳ـ۸۹ مراجعه کنید). برای این سیستم پارامترهای مربوط به دو مورد را به‌گونه‌ای تنظیم کنید که دو سطح مقطع دیفرانسیلی و شیبهای آنها در جهت جلو در $\Delta = 0$ یکسان شوند. شاید بهتر باشد چند مقدار عددی معین برای V_G، V_0، a و b انتخاب کنید و مقایسه را به‌صورت نموداری انجام دهید. با یک استدلال کیفی علت اختلاف زیاد بین پیش‌بینیهای مربوط به انتقالهای تکانهٔ بزرگ را بیان کنید.

۲۳ـ۳ پتانسیل زیر را در نظر بگیرید

$$V(r) = V_0 a \frac{e^{-r/a}}{r}$$

اگر پارامتر برد a برابر با $1.2 \times 10^{-13}\text{cm} = 1.2\text{fm}$ باشد و بزرگی V_0 برابر با ۱۰۰MeV، سطح مقطع کل پراکندگی پروتون-پروتون را با انرژی مرکز جرمی ۱۰۰MeV در تقریب بورن محاسبه کنید. پراکندگی کولنی را نادیده بگیرید، اما یکسان بودن پروتونها را در نظر داشته باشید.

[تذکر: با استفاده از رابطهٔ $\hbar^2\Delta^2 = (\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i)^2 = 2p^2(1 - \cos\theta)$ می‌توان نوشت $d\Omega = 2\pi\, d(\cos\theta) = \frac{\hbar^2\pi}{p^2} d(\Delta^2)$.]

۲۳ـ۴ فرض کنید دامنهٔ پراکندگی برای پراکندگی نوترون-پروتون به‌صورت زیر است

$$f(\theta) = \xi_f^\dagger (A + B\sigma_P \cdot \sigma_N)\xi_i$$

که در آن ξ_i و ξ_f حالتهای اسپینی اولیه و نهایی دستگاه نوترون-پروتون هستند. حالتهای ممکن عبارت‌اند از

$$\xi_i = \chi_\uparrow^{(P)}\chi_\uparrow^{(N)} \qquad \xi_f = \chi_\uparrow^{(P)}\chi_\uparrow^{(N)}$$
$$\chi_\uparrow^{(P)}\chi_\downarrow^{(N)} \qquad \chi_\uparrow^{(P)}\chi_\downarrow^{(N)}$$
$$\chi_\downarrow^{(P)}\chi_\uparrow^{(N)} \qquad \chi_\downarrow^{(P)}\chi_\uparrow^{(N)}$$
$$\chi_\downarrow^{(P)}\chi_\downarrow^{(N)} \qquad \chi_\downarrow^{(P)}\chi_\downarrow^{(N)}$$

تمام ۱۶ دامنهٔ پراکندگی را با استفاده از رابطهٔ زیر محاسبه کنید

$$\boldsymbol{\sigma}_P \cdot \boldsymbol{\sigma}_N = \sigma_z^{(P)}\sigma_z^{(N)} + 2(\sigma_+^{(P)}\sigma_-^{(N)} + \sigma_-^{(P)}\sigma_+^{(N)})$$

که در آن، در نمایشی که $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ و $\chi_\uparrow = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ و $\chi_\downarrow = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$، داریم

$$\sigma_+ = \frac{\sigma_z + i\sigma_y}{2} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_- = \frac{\sigma_x - i\sigma_y}{2} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

www.arsanjan.blogfa.com

نتایج و سطح مقطعها را در حد سرعتهای زیاد بیابید.

۲۳ـ۵ اگر یکی از حالتهای اسپینی (مثلاً پروتون اولیه، یا نوترون اولیه) را اندازه‌گیری نکنیم، برای تعیین سطح مقطع باید روی حالتهای اسپینی اندازه‌گیری نشده جمع بزنیم. فرض کنید اسپینهای پروتون اولیه و نهایی را اندازه نگرفته‌ایم. با فرض اینکه حالت نوترون اولیه "بالا" است، رابطهٔ سطح مقطعهای مربوط به نوترون نهایی "بالا" و نوترون نهایی "پایین" را بنویسید. قطبش P را که با رابطهٔ زیر تعریف می‌شود به‌دست آورید

$$P = \frac{\sigma\uparrow - \sigma\downarrow}{\sigma\uparrow + \sigma\downarrow}$$

که در آن $\sigma\uparrow$ سطح مقطع مربوط به نوترون نهایی بالا و $\sigma\downarrow$ سطح مقطع مربوط به نوترون نهایی پایین است.

۲۳ـ۶ با استفاده از جدولی که در مسئلهٔ ۲۳ـ۴ به‌دست آورده‌اید، سطح مقطعهای پراکندگی سه‌تایی←سه‌تایی و تکتایی ←تکتایی را محاسبه کنید. نشان دهید پراکندگی تکتایی←سه‌تایی صفر است. چون (برحسب h)

$$\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_P + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_N = \mathbf{S}$$

به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma}_P \cdot \boldsymbol{\sigma}_N &= 2\mathbf{S}^2 - 3 \\ &= \begin{cases} 1 & \text{وقتی روی حالت سه‌تایی عمل می‌کند} \\ -3 & \text{وقتی روی حالت تکتایی عمل می‌کند} \end{cases}\end{aligned}$$

با استفاده از رابطهٔ بالا، نتایجی را که به‌دست آورده‌اید وارسی کنید. توجه کنید که دامنه مستقل از m_S است و از این‌رو m_S باید در حالتهای اسپینی اولیه و نهایی یکی باشد. سه حالت در سه‌تایی وجود دارند که همگی به یک اندازه در سطح مقطع سهیم هستند، و تنها یک حالت در سطح مقطع تکتایی سهم دارد.

[تذکر: در محاسبهٔ دامنه‌هایی مانند

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_1^{(P)}\chi_1^{(N)} - \chi_1^{(P)}\chi_1^{(N)})(A + B\boldsymbol{\sigma}_P \cdot \boldsymbol{\sigma}_N)\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_1^{(P)}\chi_1^{(N)} - \chi_1^{(P)}\chi_1^{(N)})$$

دامنه‌های چهار جمله قبل از مجذورکردن جمع می‌شوند. آیا می‌توانید دلیل آن‌را توضیح دهید؟]

www.arsanjan.blogfa.com

۷ـ۲۳ انتگرال زیر را در نظر بگیرید

$$I(kr) = \int_0^\infty d\theta \ \sin\ \theta\ g(\cos\ \theta) e^{-ikr\cos\theta} = \int_{-1}^{1} du\ g(u) e^{-ikru}$$

که در آن $g(\cos\theta)$ حول $\theta = \theta_0$ به‌شدت جایگزیده است، و بینهایت مشتق‌پذیر است. برای مثال، این تابع می‌تواند به‌صورت زیر باشد

$$g = e^{-\alpha^2(\cos\theta - \cos\theta_0)^2}$$

که در آن α بزرگ است. بنابراین، می‌توان فرض کرد $g(u)$ و تمام مشتقهای آن در $u = \pm 1$ صفر هستند. نشان دهید که در این مورد وقتی $kr \to \infty$ تابع $I(kr)$ سریعتر از هر توان kr صفر می‌شود.

[راهنمایی: بنویسید $e^{-ikru} = (i/kr)(d/du)e^{-ikru}$ و انتگرال جزء به جزء بگیرید.]

مراجع

نظریهٔ پراکندگی در تمام کتابهای درسی که در آخر این کتاب معرفی شده‌اند بررسی شده است. علاوه بر آن، کتابهای پیشرفته‌ای نیز یافت می‌شوند که تنها به این موضوع اختصاص دارند. مناسبترین آنها برای دانشجو عبارت است از

N F Mott and H S W Massey, *The Theory of Atomic Collisions* (3rd edition), Oxford University Press (Clarendon), Oxford, 1965.

یک رهیافت صوری‌تر در کتاب زیر ارائه شده است

L S Rodberg and R M Thaler, *Introduction to the Quantum Theory of Scattering*, Academic Press, New York, 1967.

کتابهای پیشرفته‌تر عبارت‌اند از

M L Goldberger and K M Watson, *Collision Theory*,, John Wiley & Sons, New York, 1965.

R Newton, *Scattering Theory of Waves and Particles*, McGraw-Hill, New York, 1966.

www.arsanjan.blogfa.com

۲۴

جذب تابش در ماده

فرایند وارون واپاشی تابشی اتمها، یعنی گیراندازی فوتونها همراه با برانگیخته شدن اتمها، نیز می‌تواند روی دهد. اگر انرژی فوتون بیشتر از انرژی یونش باشد الکترون به پیوستار برانگیخته می‌شود. این پدیده را اثر فوتوالکتریک می‌نامند و سازوکار مهمی در جذب تابش در ماده است.

بنابه قاعدهٔ طلایی ۲۱ـ۵۹، آهنگ گذار برای فرایند

$$\gamma + (\text{اتم}) \rightarrow (\text{اتم})' + e \qquad (۱\text{ـ}۲۴)$$

عبارت است از

$$\begin{aligned} R &= \frac{۲\pi}{\hbar} \int \frac{V\, d^۳\mathbf{p}_e}{(۲\pi\hbar)^۳} |M_{fi}|^۲ \delta \left(\hbar\omega - E_B - \frac{p_e^۲}{۲m} \right) \\ &= \frac{۲\pi}{\hbar} \int \frac{d\Omega V}{(۲\pi\hbar)^۳} \int m p_e d \left(\frac{p_e^۲}{۲m} \right) |M_{fi}|^۲ \delta \left(\hbar\omega - E_B - \frac{p_e^۲}{۲m} \right) \qquad (۲\text{ـ}۲۴) \\ &= \frac{۲\pi V}{\hbar} \int d\Omega \frac{m p_e}{(۲\pi\hbar)^۳} |M_{fi}|^۲ \end{aligned}$$

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن m جرم الکترون است، تابع دلتا پایستگی انرژی را نشان می‌دهد، E_B انرژی بستگی الکترون در اتم است، و p_e در آخرین سطر مقداری است که شناسهٔ تابع دلتا را صفر می‌کند.

عنصر ماتریس عبارت است از

$$\frac{e}{mc}\left(\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V}\right)^{1/2}\int d^3\mathbf{r}\psi_f^*(\mathbf{r})\boldsymbol{\epsilon}\cdot\mathbf{p}\,e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\psi_i(\mathbf{r}) \qquad (۳_۲۴)$$

پتانسیل برداری، همچون در فصل ۲۱، به یک فوتون در حجم V بهنجار شده است، و $\psi_i(\mathbf{r})$ و $\psi_f(\mathbf{r})$ توابع موج الکترون در حالتهای اولیه و نهایی هستند. برای یک اتم هیدروژنگونه، با فرض اینکه الکترون در حالت پایه است، داریم

$$\psi_i(\mathbf{r})=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}e^{-Zr/a_0} \qquad (۴_۲۴)$$

تابع موج حالت نهایی را باید جواب معادلهٔ شرودینگر با پتانسیل کولنی برای $E>0$ بگیریم. در بررسی اتم هیدروژن دربارهٔ این جواب بحث نکردیم. این جواب را می‌توان به‌صورت دقیق نوشت اما مانند انتگرال ۲۴ـ۳ کاملاً پیچیده است. اگر انرژی فوتون بسیار بیشتر از انرژی یونش باشد، برهم‌کنش ماندهٔ الکترون گسیل شده با یونی که از خود به‌جا می‌گذارد اهمیت کمتری می‌یابد، و می‌توانیم $\psi_f(\mathbf{r})$ را با یک موج تخت تقریب بگیریم. چون فرض می‌کنیم تنها یک اتم در حجم V داریم، تنها یک الکترون دراین حجم خواهیم داشت، و در نتیجه بهنجارش به‌گونه‌ای است که

$$\psi_f(\mathbf{r})=\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\mathbf{p}_e\cdot\mathbf{r}/\hbar} \qquad (۵_۲۴)$$

عامل V که در فضای فاز ظاهر می‌شود $[Vd^3\mathbf{p}/(2\pi\hbar)^3]$ به همین بهنجارش مربوط است، یعنی این دو عامل مستقل از یکدیگر نیستند. مجذور عنصر ماتریس تا اندازه‌ای ساده است زیرا حالت نهایی یک ویژه‌حالت تکانه است، و در نتیجه

$$\langle f|\boldsymbol{\epsilon}\cdot\mathbf{p}_{op}\,e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|i\rangle=\boldsymbol{\epsilon}\cdot\mathbf{p}_e\langle f|e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|i\rangle \qquad (۶_۲۴)$$

بنابراین، مجذور عنصر ماتریس عبارت است از

$$|M_{fi}|^2\simeq\left(\frac{e}{mc}\right)^2\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V}\cdot\frac{1}{V}\,\frac{1}{\pi}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\mathbf{p}_e)^2 \times\left|\int d^3\mathbf{r}e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{p}_e/\hbar)\cdot\mathbf{r}}\,e^{-Zr/a_0}\right|^2 \qquad (۷_۲۴)$$

www.arsanjan.blogfa.com

این انتگرال را بعداً محاسبه خواهیم کرد. آهنگ گذار به این دلیل دارای عامل $1/L^3$ است که در حجم V با تنها یک فوتون سروکار داریم. اکنون به بررسی سطح مقطع اثر فوتوالکتریک می‌پردازیم. برای اینکه شار یک فوتون بر سانتیمتر مربع داشته باشیم، چگالی فوتونها باید $1/c$ بر سانتیمترمکعب باشد (و در نتیجه استوانه‌ای با مساحت قاعدهٔ واحد و با طول c مربوط به بازهٔ زمان ۱ ثانیه حاوی یک فوتون خواهد بود)، یعنی باید آهنگ گذار را در V/c ضرب کنیم. از ترکیب ۲۴ـ۲ و ۲۴ـ۷، سطح مقطع دیفرانسیلی زیر را به‌دست می‌آوریم

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar}\,\frac{mp_e}{(2\pi\hbar)^3}\left(\frac{e}{mc}\right)^2 \frac{2\pi\hbar c^2}{\omega}\,\frac{1}{\pi}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 (\boldsymbol{\epsilon}\cdot\mathbf{p}_e)^2 \times \frac{1}{c}\left|\int d^3\mathbf{r}\; e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{p}e/\hbar)\cdot\mathbf{r}}\; e^{-r/a_0}\right|^2 \qquad (۸_۲۴)$$

در این رابطه $d\Omega$ زاویهٔ فضایی حول $\mathbf{p}_e$ است. انتگرال روی تمام راستاهای الکترون سطح مقطع کل σ برای اثر فوتوالکتریک را به‌دست می‌دهد. اگر اتمهای هدف با چگالی N اتم در سانتیمترمکعب توزیع شده باشند آنگاه قطعه‌ای از مادهٔ هدف با مساحت A و ضخامت dx حاوی $NA\,dx$ اتم خواهد بود. هر اتم دارای سطح مقطع σ برای واکنش تحت بررسی است، و در نتیجه مساحت مؤثر کل که باریکه با آن مواجه می‌شود $NA\sigma\,dx$ است. اگر n ذره در باریکهٔ فرودی داشته باشیم، تعداد ذراتی که در ضخامت dx در هدف برهم‌کنش می‌کنند با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$\frac{\text{ذرات برهم‌کنش‌کننده}}{\text{ذرات فرودی}} = \frac{\text{سطح مقطع}}{\text{مساحت کل}}$$

یا

$$\frac{dn}{n} = -\frac{NA\,\sigma\,dx}{A} = -N\sigma\,dx \qquad (۹_۲۴)$$

علامت منفی نشان می‌دهد که ذرات از باریکه حذف می‌شوند. با انتگرال‌گیری به‌دست می‌آوریم

$$n(x) = n_0 e^{-N\sigma x} \qquad (۱۰_۲۴)$$

که در آن n_0 تعداد ذرات فرودی و $n(x)$ تعداد ذراتی است که پس از پیمودن ضخامت x در باریکه باقی مانده‌اند. کمیت $\lambda = 1/N\sigma$ بعد طول دارد و مسافت آزاد میانگین نامیده می‌شود. اگرچه گاهی مسافت آزاد میانگین را برای اثر فوتوالکتریک، تولید جفت و غیره به‌کار می‌بریم، اما آنچه اندازه‌گیری می‌شود سطح مقطع است.

www.arsanjani.blogfa.com

برای به‌دست آوردن مرتبهٔ بزرگی سطح مقطع، از رابطهٔ $N = N_0 \rho/A$ که در آن N_0 عدد آووگادرو ($۶٫۰۲ \times ۱۰^{۲۳}$)، ρ چگالی برحسب گرم بر سانتیمترمکعب، و A وزن اتمی است. سطح مقطع برخوردهای مولکولی را می‌توان از خواص گازها براورد کرد، و معلوم می‌شود که مرتبهٔ بزرگی آن $۱۰^{-۱۶}\text{cm}^۲$ است، که با اندازه‌های اتمی که از مرتبهٔ $۱۰^{-۸}\text{cm}$ هستند سازگار است.[۱] به‌زودی خواهیم دید که این تخمین برای مقطع فوتوالکتریک معقول نیست. بنابه تعریف مسافت آزاد میانگین λ، در ماده‌ای با چگالی ρ و وزن اتمی A، اگر سطح مقطع را برحسب بارن ($۱۰^{-۲۴}\text{cm}^۲$) بیان کنیم، به‌دست می‌آوریم

$$\lambda = \frac{۱}{N\sigma} = \frac{A}{\rho}\,\frac{۱}{۶٫۰۲ \times ۱۰^{۲۳}\sigma} = \frac{A}{\rho}\,\frac{۱٫۶۷}{\sigma(\text{بارن})} \qquad (۱۱\text{-}۲۴)$$

برای محاسبهٔ سطح مقطع ۲۴ـ۸ باید انتگرال زیر را به‌دست آوریم

$$\int d^۳\mathbf{r}\, e^{i(\hbar\mathbf{k}-\mathbf{p}_e)\cdot\mathbf{r}/\hbar} e^{-Zr/a_0} \qquad (۱۲\text{-}۲۴)$$

با توجه به ۲۳ـ۸۷، و تغییر جزئی نمادنگاری، داریم

$$\int d^۳\mathbf{r}\, e^{i\Delta\cdot\mathbf{r}}\frac{e^{-\mu r}}{r} = \frac{۴\pi}{\mu^۲ + \Delta^۲} \qquad (۱۳\text{-}۲۴)$$

با مشتق‌گیری نسبت به μ به‌دست می‌آوریم

$$\int d^۳r\, e^{-i\Delta\cdot\mathbf{r}} e^{-\mu r} = \frac{۸\pi\mu}{(\mu^۲ + \Delta^۲)^۲} \qquad (۱۴\text{-}۲۴)$$

اکنون می‌توان سطح مقطع را محاسبه کرد. با ترکیب مناسبی از عوامل، سرانجام به رابطهٔ زیر می‌رسیم

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = ۳۲Z^۵a_0^۲\left(\frac{p_e c}{\hbar\omega}\right)\left(\frac{\boldsymbol{\epsilon}\cdot\mathbf{p}_e}{mc}\right)^۲\frac{۱}{(Z^۲ + a_0^۲\Delta^۲)^۴} \qquad (۱۵\text{-}۲۴)$$

---

۱. به همین ترتیب، سطح مقطع در فیزیک هسته‌ای از مرتبهٔ $۱۰^{-۲۴}\text{cm}^۲$ (یک بارن) است، و سطح مقطعهایی که در فیزیک ذرات مشاهده می‌شوند از مرتبهٔ $۱۰^{-۲۷}\text{cm}^۲$ (میلی بارن) هستند که تا میکروبارن برای واکنشهای نادر و حتی $۱۰^{-۴۴}\text{cm}^۲$ برای واکنشهای بسیار نادر نوترینو در انرژیهای کم نزول می‌کنند.

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن

$$\Delta = \frac{(\hbar\mathbf{k} - \mathbf{p}_e)}{\hbar} = \frac{(\mathbf{p}_\gamma - \mathbf{p}_e)}{\hbar}$$

چون رابطهٔ میان انرژی الکترون و انرژی فوتون به‌صورت زیر است

$$\hbar\omega = E_B + \frac{p_e^2}{2m} \qquad (۱۶_۲۴)$$

می‌بینیم که برای انرژیهای بسیار بیشتر از انرژی بستگی می‌توان نوشت $\hbar\omega \cong p_e^2/2m$. بنابراین

$$\frac{p_e c}{\hbar\omega}\left(\frac{\boldsymbol{\epsilon}\cdot\mathbf{p}_e}{mc}\right) \cong \frac{2p_e}{mc}(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\hat{\mathbf{p}}_e)^2$$

$$\Delta^2 = \frac{1}{\hbar^2}(\mathbf{p}_\gamma - \mathbf{p}_e)^2 = \frac{1}{\hbar^2}\left[\left(\frac{\hbar\omega}{c}\right)^2 - 2\frac{\hbar\omega}{c}p_e\hat{\mathbf{p}}_\gamma\cdot\hat{\mathbf{p}}_e + p_e^2\right] \qquad (۱۷_۲۴)$$

$$\cong \frac{1}{\hbar^2}\left[p_e^2 - \left(\frac{p_e^3}{mc}\right)\hat{\mathbf{p}}_\gamma\cdot\hat{\mathbf{p}}_e\right]$$

$$\cong \frac{p_e^2}{\hbar^2}\left(1 - \frac{v_e}{c}\hat{\mathbf{p}}_\gamma\cdot\hat{\mathbf{p}}_e\right)$$

که برای الکترونهای غیرنسبیتی، $p_e \ll mc$، برقرار است.[۲] تکانهٔ فوتون $\hbar\mathbf{k}$ را با $\mathbf{p}_\gamma$ نشان داده‌ایم، و علامت $\hat{}$ را مطابق معمول برای بردار یکه به‌کار برده‌ایم. با جاگذاری در ۲۴ـ۱۵ به‌دست می‌آوریم

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 64Z^5 a_0^2\left(\frac{p_e}{mc}\right)\frac{(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\hat{\mathbf{p}}_e)^2}{\left[Z^2 + \frac{p_e^2}{\alpha^2 m^2 c^2}\left(1 - \frac{v_e}{c}\hat{\mathbf{p}}_e\cdot\hat{\mathbf{p}}_\gamma\right)\right]^4} \qquad (۱۸_۲۴)$$

$$= \frac{64Z^5\alpha^8 a_0^2\left(\frac{p_e}{mc}\right)(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\hat{\mathbf{p}}_e)^2}{\left[(\alpha Z)^2 + \frac{p_e^2}{m^2c^2}\left(1 - \frac{v_e}{c}\hat{\mathbf{p}}_e\cdot\hat{\mathbf{p}}_\gamma\right)\right]^4}$$

۲. برای الکترونهای نسبیتی باید از معادلهٔ دیراک برای توصیف فرایند استفاده کنیم. اثراتی غیر از اثر فوتوالکتریک وقتی مهم می‌شوند که $E_e \simeq 1\text{MeV}$.

www.arsanjan.blogfa.com

اگر راستای تکانهٔ فوتون را محور z و دو راستای قطبش فوتون $\epsilon^{(1)}$ و $\epsilon^{(2)}$ را به‌ترتیب در راستاهای x و y بگیریم، آنگاه با نوشتن

$$\hat{\mathbf{p}}_e = (\sin\ \theta\ \cos\ \phi, \sin\ \theta\ \sin\ \phi, \cos\ \theta) \qquad (۱۹_۲۴)$$

داریم $(\mathbf{p}_e \cdot \epsilon^{(1)})^2 = \sin^2\theta\ \cos^2\phi$ و $(\mathbf{p}_e \cdot \epsilon^{(2)})^2 = \sin^2\theta\ \cos^2\phi$، و در نتیجه میانگین صورت‌کسر روی دو راستای قطبش ــ سطح مقطع اثر فوتوالکتریک را با فوتونهای ناقطبیده محاسبه می‌کنیم ــ عبارت است از

$$\overline{(\hat{\mathbf{p}}_e \cdot \epsilon)^2} = \frac{1}{2}(\sin^2\theta\ \sin^2\phi + \sin^2\theta\ \cos^2\phi) = \frac{1}{2}\sin^2\theta \qquad (۲۰_۲۴)$$

همچنین داریم

$$\hat{\mathbf{p}}_e \cdot \hat{\mathbf{p}}_\gamma = \cos\ \theta \qquad (۲۱_۲۴)$$

و از این‌رو، با نوشتن $p_e^2/2m = E$، به‌دست می‌آوریم

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{32\sqrt{2}\ Z^5\alpha^8 a_0^2\,(E/mc^2)^{1/2}\sin^2\theta}{\left[(\alpha Z)^2 + \dfrac{2E}{mc^2}\left(1 - \dfrac{v_e}{c}\cos\ \theta\right)\right]^4} \qquad (۲۲_۲۴)$$

برای عناصر سبک، شرطی که قبلاً اعمال کردیم، یعنی $\hbar\omega \gg E_B$ که معادل است با

$$E \gg \frac{1}{2}mc^2(Z\alpha)^2 \qquad (۲۳_۲۴)$$

در گسترهٔ وسیع معقولی از انرژیها صادق است. با جاگذاری ۲۴ـ۲۳ در ۲۴ـ۲۲، می‌بینیم که مخرج کسر ساده می‌شود و سطح مقطع به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 2\sqrt{2}Z^5\alpha^8 a_0^2\left(\frac{E}{mc^2}\right)^{-7/2}\frac{\sin^2\theta}{\left(1 - \dfrac{v_e}{c}\cos\ \theta\right)^4} \qquad (۲۴_۲۴)$$

اکنون به بررسی جنبه‌های مختلف این فرمول می‌پردازیم:

www.arsanjan.blogfa.com

۱. اولاً، این حدس مبهم که r_0 باید از مرتبهٔ 10^{-8}cm باشد سطح مقطع باید از مرتبهٔ 10^{-16}cm باشد غلط است! البته عامل a_0^2 از همین مرتبهٔ بزرگی است، اما در عدد بی‌بعد $1/137)^8$ که به‌سختی می‌توان از آن صرفنظر کرد ضرب می‌شود. باید جستجو کنیم چه چیز باعث شده است که در برآوردهای خود تا این حد اشتباه کنیم. اگر آخرین عامل زاویه‌ای در ۲۴ـ۲۴ را، که بعداً دربارهٔ آن بحث می‌کنیم، نادیده بگیریم می‌بینیم که با استفاده از

$$E = \frac{1}{2}mv_e^2$$

می‌توان ضریب جلوکسر را به‌صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} 2\sqrt{2}\, a_0^2 Z^5 \alpha^8 \left(\frac{mc^2}{E}\right)^{7/2} &= 32 a_0^2 Z^5 \alpha^8 \left(\frac{c}{v_e}\right)^7 \\ &= 32 \left(\frac{a_0}{Z}\right)^2 \alpha \left(\frac{\alpha Z c}{v_e}\right)^7 \end{aligned} \qquad (25\text{ـ}24)$$

که مفیدتر است. مهمتر از همه، یک عامل منفرد α در این صورت ظاهر شده است، که وقتی تنها یک فوتون گسیل یا جذب می‌شود باید همیشه ظاهر شود. جفت‌شدگی پتانسیل برداری به بار الکتریکی متناسب با بار e است، و مجذور e متناسب با α است. عامل $(a_0/Z)^2$، در مقایسه با a_0^2، معیار بهتری برای مساحت اتم است، زیرا اتم هیدروژنگونه با بار Z را بررسی می‌کنیم. آنچه باقی می‌ماند در واقع توان بزرگ V برای نسبت سرعت "مداری" الکترون در اتم به سرعت الکترون آزاد خروجی است.

نسبت $(\alpha Zc/v_e)$ [و نه صرفاً (c/v_e) که این هم بی‌بعد است] به این دلیل ظاهر می‌شود که همپوشی میان تابع موج الکترون آزاد و تابع موج الکترون مقید در عنصر ماتریس دخیل است، یعنی مجذور عنصر ماتریس به این احتمال مربوط می‌شود که از اندازه‌گیری تکانهٔ الکترون مقید مقدار p_e به‌دست آید. وابستگی تابعی $f(\alpha Zc/v_e)$، در این مورد توان هشتم،[۳] را نمی‌توان با استدلال کیفی و کلی حدس زد. برای مثال، اگر تابع موج الکترون گاؤسی بود $[\psi_i(\mathbf{r}) \propto e^{-r^2/a^2}]$، افت f با افزایش سرعت بسیار سریعتر از توان هشتم بود. دلیل مشکل حدس زدن این است که توزیع تکانهٔ الکترون در ناحیه‌ای با پهنای

$$\Delta p \sim \frac{\hbar}{a_0/Z} \sim \frac{\hbar Z}{\hbar/mc\alpha} \sim Z\alpha mc \qquad (26\text{ـ}24)$$

---

۳. یک عامل p_e در فضای فاز وجود دارد، و در نتیجه مجذور عنصر ماتریس به توان هشتم $(\alpha Zc/v_e)$ منجر می‌شود.

www.arsanjan.blogfa.com

جایگزیده است و به‌ازای $p_e \gg Zcme$ به نقاط دور این توزیع می‌رسیم. این وضعیت، باز هم بنابه رابطهٔ عدم قطعیت، به توزیع شعاعی تابع موج در مقادیر کوچک r و به‌طور حساسی به‌حالت، مخصوصاً به‌تکانهٔ زاویه‌ای، وابسته است. این وابستگی از فروپاشی فوتونی در فیزیک هسته‌ای یک ابزار بسیار مفید ساخته است.

۲. توزیع زاویه‌ای در $d\sigma/d\Omega$ عبارت است از

$$F(\theta) = \frac{\sin^2\theta}{[1-(v_e/c)\cos\theta]^2} \qquad (۲۴_۲۷)$$

ابتدا توجه کنید که سطح مقطع در جهت جلو صفر می‌شود. این پیامد عرضی بودن قطبش فوتونها است. عنصر ماتریس متناسب با $\mathbf{p}_e \cdot \boldsymbol{\epsilon}$ است، و وقتی $\mathbf{p}_e$ با تکانهٔ فوتون موازی باشد این عامل صفر می‌شود. مخرج کسر، به علت توان چهارم، تأثیر شدیدی بر توزیع زاویه‌ای دارد. وقتی v_e/c به یک نزدیک شود این تأثیر بسیار بارز می‌شود، اما حتی برای مقادیر میانهٔ v_e/c یک قلهٔ قابل توجه در نزدیکی جهت جلو، که در آن مخرج کمترین مقدار خود را دارد، وجود خواهد داشت. این متناظر با مقدار کمینهٔ انتقال تکانه بین فوتون و الکترون، $(\mathbf{p}_\gamma - \mathbf{p}_e)^2$، است.

برای بحث در ناحیهٔ نسبیتی، باید محاسبات مفصلتری انجام داد. فرمولی که هم اکنون به‌دست آوردیم در قلمرو اعتبار خود کارایی خوبی دارد.[۴] در انرژیهای بسیار کم، تابع‌موج دقیقتری برای الکترون خروجی باید به‌کار ببریم. این تابع موج باید برهم‌کنش کولنی بین هسته و الکترون را نشان دهد. بدیهی است که پایینتر از آستانهٔ یونش مربوط به سست‌ترین الکترون در یک پوستهٔ خارجی اثر فوتوالکتریک روی نمی‌دهد. با افزایش انرژی در بالای آستانه الکترونها از پوسته‌های درونی‌تر فوتو تولید می‌شوند. با ترسیم سطح مقطع کل یا بهتر از آن ضریب جذب جرمی $N\sigma/\rho$[۵] برحسب طول‌موج فوتون، نموداری مانند شکل ۲۴ـ۱ به‌دست می‌آید. "دندانهٔ K " به خروج الکترونهای $n=1$ مربوط می‌شود؛ دندانه‌های L متناظر با الکترونهای مختلف در حالتهای $n=2$ هستند. این دندانه‌ها در انرژیهای بستگی الکترونهای مختلف روی می‌دهند. بنابه قانون تجربی موزلی، دندانه‌ها در انرژیهای زیر واقع‌اند

$$E = 13.6\frac{(Z-\sigma_n)^2}{n^2}\text{eV} \qquad (۲۴_۲۸)$$

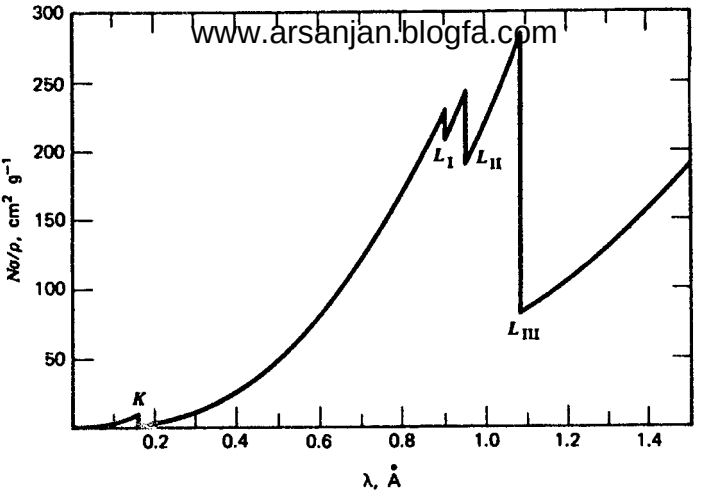
که در آن "ثابت استتار" σ_n تقریباً برابر است با $2n+1$. این فرمول درست همان چیزی است که برای اوربیتالهای ns انتظار داریم، و استتار از تمام الکترونهای دیگر s ناشی می‌شود.

---

۴. در محاسبهٔ جذب تابش نتیجه‌ای را که به دست آوردیم باید در ۲ ضرب کنیم، زیرا دو الکترون در حالت پایه، البته به‌استثنای هیدروژن، وجود دارند.

۵. این کمیت برابر است با $N_0\sigma/A$ که در آن N_0 عدد آووگادرو و A وزن اتمی است.

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۲۴ـ۱ ضریب جذب جرمی $N\sigma/\rho$ برای پلاتین برحسب طول‌موج فوتون.

در انرژیهای نسبیتی، سطح مقطع با سرعت کمتری، به‌صورت $(E/m)^{-1}$ و نه $(E/m)^{-7/2}$، افت می‌کند، اما در انرژیهای حدود ۰٫۵MeV اثر فوتوالکتریک تا جایی که به جذب تابش مربوط می‌شود اهمیت خود را از دست می‌دهد. در ناحیهٔ انرژی ۰٫۵ تا 5MeV، اثر کامپتون اثر جذبی غالب می‌شود.

در اینجا الکترونهای آزاد فوتونها را پراکنده می‌کنند. در بسامدهای کم، این اثر یک توضیح کلاسیک دارد: تابش الکترومغناطیسی در برخورد با الکترون به آن شتاب می‌دهد، و تابشی که بار شتابدار گسیل می‌کند تابش پراکنده است. سطح مقطع کلاسیک تامسون به‌صورت زیر است

$$\sigma_T = \frac{8\pi}{3}\left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 \qquad (۲۹_۲۴)$$

در مکانیک کوانتومی، دامنهٔ پراکندگی (عنصر ماتریس) باید متناسب با e^2 باشد، زیرا دو فوتون دخالت دارند. وقتی در بسط ۲۱ـ۲۳ هر دو جمله را نگه داریم، چون اختلال در هامیلتونی عبارت است از

$$\frac{e}{mc}\mathbf{p}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r},t) + \frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2(\mathbf{r},t) \qquad (۳۰_۲۴)$$

می‌بینیم که سهم e^2 در دامنهٔ پراکندگی می‌تواند دو منشأ داشته باشد:

۱. منشأ اول یک سهم مرتبهٔ اول از جملهٔ $e^2\mathbf{A}^2(\mathbf{r},t)/2mc^2$ است.

www.arsanjan.blogfa.com

۲. منشأ دوم یک جملهٔ اختلال مرتبهٔ دوم از جفت‌سازی $e\mathbf{p}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r},t)/mc$ است. چون صورتبندی اختلال مرتبهٔ دوم را شرح ندادیم، به بیان نتایج بسنده می‌کنیم.

(الف) در آستانه، با پیمانهٔ $\nabla\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r},t)=0$ که از آن استفاده کرده‌ایم، تمام دامنه ناشی از جملهٔ شامل $e^2\mathbf{A}^2(\mathbf{r},t)/2mc^2$ است.

(ب) عنصر ماتریس مرتبهٔ دوم به‌صورت زیر است

$$-\sum_n \frac{\langle f|e\mathbf{p}\cdot\mathbf{A}/mc|n\rangle\langle n|e\mathbf{p}\cdot\mathbf{A}/mc|i\rangle}{E_n-E_i} \qquad (۳۱_۲۴)$$

که در آن "جمع" روی حالتهای میانی " n " وقتی n شامل حالتهای پیوستار باشد به‌معنای انتگرال روی تمام تکانه‌ها نیز هست. کافی نیست که حالتهای میانی تک الکترون مربوط به دنبالهٔ

$$\gamma_i+e_i\to e'\to\gamma_f+e_f$$

و حالتهای میانی با یک الکترون و دو فوتون مربوط به فرایند

$$e_i+\gamma_i\to\gamma_i+\gamma_f+e'\to\gamma_f+e_f$$

را درنظر بگیریم. معلوم شده است که امکان ایجاد یک زوج الکترون-پوزیترون "مجازی "توسط فوتون فرودی، که نابودی پوزیترون توسط الکترون فرودی را به دنبال دارد، با گسیل فوتون نهایی همچون در

$$e_i+\gamma_i\to e_i+e_f+e^{+'}\to\gamma_f+e_f$$

و فرایند

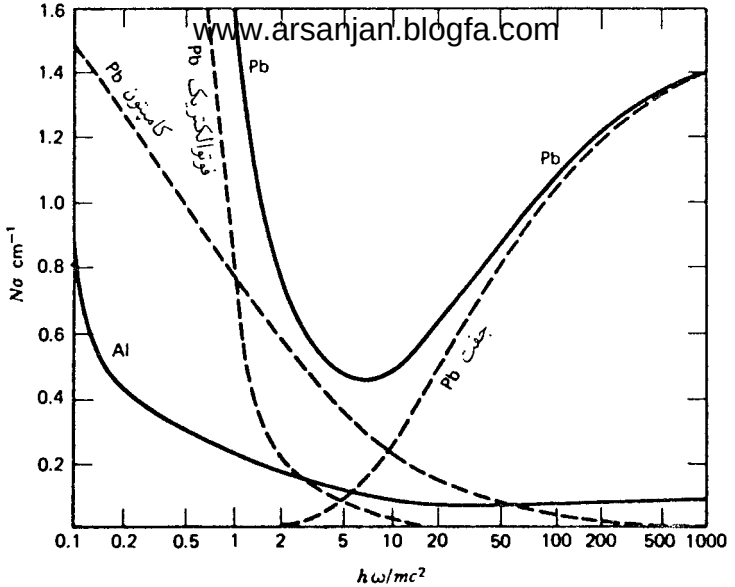
$$e_i+\gamma_i\to e_i+\gamma_i+\gamma_f+e_f+e^{+'}\to\gamma_f+e_f$$

را نیز باید در نظر گرفت. محاسبه به فرمول کلاین- نیشینا می‌رسد

$$\sigma=2\pi\left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2\left\{\frac{1+x}{x^2}\left[\frac{2(1+x)}{1+2x}-\frac{1}{x}\log(1+2x)\right]+\frac{1}{2x}\log(1+2x)-\frac{1+3x}{(1+2x)^2}\right\} \qquad (۳۲_۲۴)$$

$$x=\frac{\hbar\omega}{mc^2}$$

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۲۴ـ۲ ضریب جذب کل برای سرب و آلومینیم نسبت به انرژی (برحسب جرم سکون الکترون، ۰٫۵۱MeV). سطح مقطع فوتوالکتریک برای Al در مقیاسی که در اینجا نشان داده شده است قابل چشمپوشی است.

که با آزمایش کاملاً توافق دارد. این فرمول در بسامدهای کم به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\sigma = \frac{8\pi}{3}\left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 (1 - 2x) \qquad (۳۳_۲۴)$$

و در بسامدهای زیاد ($x \gg 1$) تبدیل می‌شود به

$$\sigma = \pi\left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 \frac{1}{x}\left(\log 2x + \frac{1}{2}\right) \qquad (۳۴_۲۴)$$

بنابراین، سطح مقطع کامپتون نیز در انرژیهای زیاد کاهش می‌یابد. در انرژیهای بیشتر از چند MeV، فرایند جذبی غالب تولید زوج است.

جالب توجه است که فوتون در انرژیهای به‌اندازهٔ کافی زیاد، $\hbar\omega > 2mc^2$، می‌تواند به یک الکترون و یک پوزیترون تبدیل شود (شکل ۲۴ـ۲). پوزیترون را می‌توان واقعاً "پادالکترون" نامید؛ پوزیترون و الکترون دارای جرم و اسپین یکسان هستند، و همچنین بار و گشتاور مغناطیسی آنها دارای مقدار یکسان اما با علامت مخالف هستند، و جفت‌شدگی غیرنسبیتی با میدان الکترومغناطیسی از تعویض $\mathbf{p}$ با $\mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{r},t)/c$ به‌دست می‌آید. این تبدیل به ماده تنها در حضور یک ذرهٔ

www.arsanjan.blogfa.com

سوم، مثلاً یک هسته، می‌تواند روی دهد، زیرا برای فرایند

$$\gamma \to e + e^+$$

پایستگی انرژی و تکانه نمی‌تواند برقرار باشد. برای اثبات بدون محاسبات سینماتیکی طولانی، فرایند وارون یعنی $e + e^+ \to \gamma$ را در چارچوب مرکز جرم در نظر می‌گیریم. الکترون و پوزیترون دارای تکانه‌های مساوی و مخالف هستند، و در نتیجه حالت نهایی دارای انرژی $۲(m^۲c^۴ + p^۲c^۲)^{۱/۲}$ و تکانهٔ ۰ است. فوتونی با انرژی E حامل تکانهٔ E/c است. اگر یک هسته حضور داشته باشد می‌تواند انرژی و تکانه را جذب کند (برای هستهٔ سنگین این انرژی بسیار کوچک است، $p^۲/۲M$)، و در نتیجه موازنهٔ انرژی و تکانه امکانپذیر می‌شود.

محاسبهٔ

$$\gamma + \text{هسته} \to e + e^+ + \text{هسته}$$

فراتر از سطح این کتاب است. نظریهٔ الکترودینامیک کوانتومی که در این محاسبات به‌کارمی‌رود نیز نشان می‌دهد که می‌توان ذرات را از یک طرف رابطه به طرف دیگر منتقل کرد با این شرط که ذرات منتقل شده را با پادذره‌های آنها عوض کنیم. بنابراین، پیش‌بینی می‌کنیم که فرایند

$$e^\pm + \text{هسته} \to \text{هسته} + e^\pm + \gamma$$

نیز می‌تواند روی دهد، و عنصر ماتریس آن رابطهٔ بسیار نزدیکی با عنصر ماتریس تولید زوج دارد. این پیش‌بینی با آزمایش تأیید شده است، و فرایند بالا منشأ رگبار پرتو کیهانی است.

یک پرتو فرودی γ با انرژی بسیار زیاد (که می‌تواند ناشی از واپاشی $\pi^\circ \to ۲\gamma$ باشد، که در آن π° از برخورد یک پروتون پرتو کیهانی اولیه با یک هسته در جو بالا تولید شده است) یک زوج به‌وجود می‌آورد، به‌طوری که هر عضو آن حامل تقریباً نیمی از انرژی اولیه است. هر عضو، چنانکه قبلاً نشان داده شد، می‌تواند یک فوتون تولید کند،[۶] و محصولات نهایی می‌توانند فوتونها و زوجهای دیگری تولید کنند. رگبارهای حاصل از رویدادهای بسیار پرانرژی در قسمت بالایی جو می‌توانند ناحیه‌هایی با مساحت چندین کیلومترمربع را بپوشانند! رگبارهایی که در شمارنده‌ها تولید می‌شوند برای تشخیص فوتونها یا الکترونها به‌کار می‌روند. ذرات باردار سنگینتر انحراف کمتری پیدا می‌کنند، و از این‌رو تابش کمتری خواهند داشت.

---

۶. این فرایند را تابش ترمزی می‌نامند، و می‌توان آن‌را از دیدگاه کلاسیک توضیح داد: باری که در میدان کولنی هسته منحرف می‌شود شتاب می‌گیرد، و در نتیجه تابش می‌کند.

www.arsanjan.blogfa.com

محاسبات تفصیلی نشان می‌دهد که اتلاف انرژی بر طریق این فرایندها از قانون زیر پیروی می‌کند

$$E(x) = E_{\text{فرودی}} e^{-x/L} \qquad (۳۵_۲۴)$$

که در آن "طول تابش" از رابطهٔ زیر به‌دست می‌آید

$$L = \frac{(m^۲c^۲/\hbar^۲)A}{۴Z^۲\alpha^۳N_۰\rho\log(۱۸۳/Z^{۱/۳})} \qquad (۳۶_۲۴)$$

که در آن $N_۰$ عدد آووگادرو ($۶{,}۰۲ \times ۱۰^{۲۳}$)، m جرم الکترون، A وزن اتمی، Z بار هسته، و ρ چگالی ماده (برحسب گرم بر سانتیمترمکعب) است. "طول تولید زوج" از رابطهٔ زیر به‌دست می‌آید

$$L_{\text{زوج}} = \frac{۹}{۷}L \qquad (۳۷_۲۴)$$

این فرمول برای Zهای بسیارکم مناسب نیست. مقادیر نوعی L عبارت‌اند از

هوا	$۳۳۰\,\text{m}$
آلومینیم	$۹{,}۷\,\text{cm}$
سرب	$۰{,}۵۳\,\text{cm}$

تابش ترمزی سازوکار اتلاف انرژی غالب برای الکترونها در انرژیهای زیاد است. در انرژیهای کمتر، یونش غالب است. کمبود جا اجازه نمی‌دهد که دربارهٔ این اثر اساساً کلاسیک بحث کنیم.

مسائل

۲۴ـ۱ سطح مقطع فرایند زیر را محاسبه کنید

$$\gamma + \text{دوترون} \rightarrow N + P$$

نحوهٔ کار با مورد اثر فوتوالکتریک یکسان است. در محاسبهٔ عنصر ماتریس، تابع موج حالت نهایی باز هم به‌صورت زیر است

$$\psi_f(\mathbf{r}) = \frac{۱}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}$$

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن $\mathbf{p}$ تکانهٔ فوتون است. در انرژیهای کم، طول‌موج تابش بسیار بزرگتر از "اندازهٔ" دوترون است، و از این‌رو $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \approx ۱$. برای محاسبهٔ

$$\int d^۳r\, e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}\psi_t(\mathbf{r})$$

از تابع بهنجارشدهٔ زیر استفاده کنید

$$\begin{aligned}\psi_t(\mathbf{r}) &= \frac{N}{\sqrt{۴\pi}}e^{-\alpha(r-r_۰)} && r > r_۰\\ &= ۰ && r < r_۰\end{aligned}$$

برای چه انرژیهایی انتظار دارید که طول‌موج فوتون بسیار بزرگتر از برد پتانسیل $r_۰ \cong ۱٫۲\text{fm}$ باشد؟

۲۴ـ۲ اصل توازن تفصیلی عنصرهای ماتریس فرایندهای زیر را به هم مربوط می‌کند

$$A + a \rightarrow B + b \qquad (۱)$$

و

$$B + b \rightarrow A + a \qquad (۲)$$

بنابراین

$$\sum |M_{(۱)}|^۲ = \sum |M_{(۲)}|^۲$$

که در آن جمع روی حالتهای اسپینی اولیه و نهایی زده می‌شود. با توجه به اینکه در محاسبهٔ آهنگ گذار یا سطح مقطع روی حالتهای اسپینی اولیه میانگین می‌گیریم و روی حالتهای اسپینی نهایی جمع می‌زنیم، نشان دهید که برای آهنگهای گذار داریم

$$\frac{(۲J_A + ۱)(۲J_a + ۱)}{p_a^۲(dp_b/dE_b)}\frac{dR_{(۱)}}{d\Omega_b} = \frac{(۲J_B + ۱)(۲J_b + ۱)}{p_a^۲(dp_a/dE_a)}\frac{dR_{(۲)}}{d\Omega_a}$$

که در آن J_a، J_A، J_b و J_B اسپینهای ذرات، p_a و p_b تکانه‌های مرکز جرمی ذرات a و b (فرایندهای (۱) و (۲) باید در یک انرژی کل روی دهند)، E_a و E_b انرژیهای مربوط ذرات، و

www.arsanjan.blogfa.com

$d\Omega_n$ و $d\Omega_p$ زاویه‌های فضایی‌ای که ذرات نوترون و پروتون در آن مشاهده می‌شوند. با استفاده از این نتیجه، سطح مقطع فرایند گیراندازی تابشی

$$N + P \rightarrow D + \gamma$$

را بر حسب سطح مقطعی که در مسئلهٔ ۲۴ـ۱ محاسبه کرده‌اید بیان کنید. توجه کنید که عامل $(2J + 1)$ برای فوتونها ۲ است زیرا تنها دو حالت قطبش وجود دارند، و اسپین دوترون نیز ۱ است.

۲۴ـ۳ سطح مقطع واکنش

$$\pi^+ + D \rightarrow P + P$$

را که در آن π^+ فرودی دارای انرژی جنبشی آزمایشگاهی ۲۴MeV است اندازه‌گیری کرده‌ایم و مقدار آن‌را $0.3 \times 10^{-27}\,\mathrm{cm}^2$ به‌دست آورده‌ایم.

(الف) در چه انرژی آزمایشگاهی می‌توان با اندازه‌گیری سطح مقطع فرایند

$$P + P \rightarrow \pi^+ + D$$

توازن تفصیلی را آزمود؟ (جرم پیون برابر است با $m_\pi c^2 = 140\,\mathrm{MeV}$؛ $M_p c^2 = 940\,\mathrm{MeV}$؛ $M_D \cong 2M_p$.)

(ب) با توجه به اینکه اسپین π^+ صفر است، چه سطح مقطعی برای این واکنش پیش‌بینی می‌شود؟

۲۴ـ۴ طول تابش در زنون مایع را به‌دست آورید ($Z = 54$، $A = 131$، و $\rho = 3.09\,\mathrm{g/cm^{-3}}$)

۲۴ـ۵ فرض کنید الکترون با یک پتانسیل مربعی به هسته وابسته است. تغییرات سطح مقطع اثر فوتوالکتریک را برحسب انرژی به‌دست آورید. فرض کنید انرژی فوتون بسیار بیشتر از انرژی بستگی الکترون است و پتانسیل کوتاه برد است.

[راهنمایی: به مسئلهٔ ۲۴ـ۱ مراجعه کنید.]

مراجع

سازوکارهای جذب تابش در ماده در اکثر کتابهای درسی فیزیک جدید بررسی شده‌اند (مراجع آخر این کتاب را ببینید). برای بحث کاملی دربارهٔ روشهای تجربی اندازه‌گیری اثرات مختلف، مراجعه کنید به

E Segre, *Nuclei and Particles*, W A Benjamin, New York, 1964.

www.arsanjan.blogfa.com

پیوست الف

انتگرال فوریه و توابع دلتا

فرض کنید تابع $f(x)$ دوره‌ای است و دورهٔ آن $2L$ است:

$$f(x) = f(x + 2L) \qquad \text{(الف-۱)}$$

این نوع تابع را می‌توان به یک رشتهٔ فوریه در بازهٔ $(-L, L)$ بسط داد که عبارت است از

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \cos \frac{n\pi x}{L} + \sum_{n=1}^{\infty} B_n \sin \frac{n\pi x}{L} \qquad \text{(الف-۲)}$$

این رشته را می‌توان به‌صورت زیر درآورد

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n e^{in\pi x/L} \qquad \text{(الف-۳)}$$

که مسلماً ممکن است، زیرا

$$\cos \frac{n\pi x}{L} = \frac{1}{2}(e^{in\pi x/L} + e^{-in\pi x/L})$$
$$\sin \frac{n\pi x}{L} = \frac{1}{2i}(e^{in\pi x/L} - e^{-in\pi x/L})$$

www.arsanjan.blogfa.com

ضرایب بسط با استفاده از رابطهٔ

$$\frac{1}{2L}\int_{-L}^{L} dx\, e^{in\pi x/L}e^{-im\pi x/L} = \delta_{mn} = \begin{cases} 1 & m = n \\ 0 & m \neq n \end{cases} \qquad \text{(الف-۴)}$$

به‌دست می‌آیند:

$$a_n = \frac{1}{2L}\int_{-L}^{L} dx f(x) e^{-in\pi x/L} \qquad \text{(الف-۵)}$$

اکنون الف-۳ را با وارد کردن Δn، که تفاضل دو عدد درست متوالی است، می‌نویسیم. چون $\Delta n = 1$، داریم

$$\begin{aligned} f(x) &= \sum_n a_n e^{in\pi x/L}\Delta n \\ &= \frac{L}{\pi}\sum_n a_n e^{in\pi x/L}\frac{\pi\,\Delta n}{L} \end{aligned} \qquad \text{(الف-۶)}$$

با تغییری در نمادنگاری به‌صورت

$$\frac{\pi n}{L} = k \qquad \text{(الف-۷)}$$

به‌دست می‌آوریم

$$\frac{\pi\,\Delta n}{L} = \Delta k \qquad \text{(الف-۸)}$$

همچنین می‌نویسیم

$$\frac{La_n}{\pi} = \frac{A(k)}{\sqrt{2\pi}} \qquad \text{(الف-۹)}$$

بدین‌ترتیب، الف-۶ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$f(x) = \sum \frac{A(k)}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}\Delta k \qquad \text{(الف-۱۰)}$$

www.arsanjan.blogfa.com

اگر $L \to \infty$ آنگاه متغیر k پیوسته خواهد شد زیرا Δk بینهایت کوچک می‌شود. با توجه به تعریف انتگرال ریمان، می‌بینیم که می‌توان الف‌ـ۱۰ را در حد به‌صورت زیر نوشت

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk\ A(k) e^{ikx} \qquad \text{(الف‌ـ۱۱)}$$

ضریب $A(k)$ با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$\begin{aligned} A(k) &= \sqrt{2\pi}\frac{1}{\pi} \cdot \frac{1}{2L} \int_{-L}^{L} dx f(x) e^{-in\pi x/L} \\ &\to \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-ikx} \end{aligned} \qquad \text{(الف‌ـ۱۲)}$$

معادله‌های الف‌ـ۱۱ و الف‌ـ۱۲ را تبدیلهای انتگرالی فوریه می‌نامند. اگر معادلهٔ دوم را در اولی قرار دهیم به‌دست می‌آوریم

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk\ e^{ikx} \int_{-\infty}^{\infty} dy f(y) e^{-iky} \qquad \text{(الف‌ـ۱۳)}$$

اکنون فرض می‌کنیم ترتیب انتگرالها را می‌توان عوض کرد. بنابراین، می‌نویسیم

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dy f(y) \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk\ e^{ik(x-y)} \right] \qquad \text{(الف‌ـ۱۴)}$$

برای آنکه این رابطه صادق باشد، کمیت داخل کروشه که آن‌را با $\delta(x-y)$ نشان می‌دهیم

$$\delta(x-y) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk\ e^{ik(x-y)} \qquad \text{(الف‌ـ۱۵)}$$

و تابع دلتای دیراک می‌نامیم باید یک نوع تابع کاملاً خاص باشد. این تابع باید به‌ازای $x \neq y$ صفر شود و وقتی $x - y = 0$ باید به نحوی مناسب به بینهایت میل کند، زیرا گسترهٔ انتگرال‌گیری بینهایت کوچک است. بنابراین، دلتای دیراک یک تابع به‌معنای متداول ریاضی نیست، بلکه "تابع تعمیم‌یافته" یا "توزیع" است.[۱] تابع دلتای دیراک به‌خودی‌خود معنا ندارد، و تنها به شرطی می‌تواند

۱. نظریهٔ توزیعات را ریاضیدان فرانسوی لوران شوارتز توسعه داد. برای یک بررسی مقدماتی می‌توانید به کتاب زیر مراجعه کنید:

M G Lighthill, *Introduction to Fourier Analysis and Generalized Functions*, Cambridge University Press, Cambridge, England, 1958.

www.arsanjan.blogfa.com

معنا داشته باشد که همیشه به‌صورت زیر ظاهر شود

$$\int dx f(x)\ \delta(x-a)$$

که در آن تابع $f(x)$ در گسترهٔ مقادیر شناسهٔ تابع دلتا به‌اندازهٔ کافی هموار است. با وجود این، می‌توان عملیات را مستقیماً روی تابع دلتا انجام داد، اما باید در نظر داشت که تمام روابطی که می‌نویسیم تنها زیر علامت انتگرال می‌توانند روی دهند.

خواص زیر را می‌توان برای تابع دلتا اثبات کرد:

۱.

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x) \qquad \text{(الف-۱۶)}$$

که پیامد رابطهٔ زیر است

$$f(x) = \int dy f(y)\ \delta(x-y) \qquad \text{(الف-۱۷)}$$

اگر بنویسیم $x = a\xi$ و $y = a\eta$ به‌دست می‌آوریم

$$f(a\xi) = |a| \int d\eta f(a\eta)\ \delta[a(\xi-\eta)]$$

از طرف دیگر،

$$f(a\xi) = \int d\eta f(a\eta)\ \delta(\xi-\eta)$$

از مقایسه به الف-۱۶ می‌رسیم.

۲. رابطه‌ای که از الف-۱۶ نتیجه می‌شود عبارت است از

$$\delta(x^2-a^2) = \frac{1}{2|a|}[\delta(x-a)+\delta(x+a)] \qquad \text{(الف-۱۸)}$$

این رابطه از اینجا به‌دست می‌آید که شناسهٔ تابع دلتا در $x=a$ و $x=-a$ صفر می‌شود. بنابراین،

www.arsanjan.blogfa.com

دو سهم وجود دارند:

$$\begin{aligned}\delta(x^2 - a^2) &= \delta[(x-a)(x+a)] \\ &= \frac{1}{|x+a|}\delta(x-a) + \frac{1}{|x-a|}\delta(x+a) \\ &= \frac{1}{2|a|}[\delta(x-a) + \delta(x+a)]\end{aligned}$$

از این کلی‌تر، می‌توان نشان داد

$$\delta[f(x)] = \sum_i \frac{\delta(x - x_i)}{|df/dx|_{x=x_i}} \qquad \text{(الف-۱۹)}$$

که در آن x_iها ریشه‌های $f(x)$ در بازهٔ انتگرال‌گیری هستند.

علاوه بر نمایش الف-۱۵ برای تابع دلتا، نمایشهای دیگری نیز وجود دارند که می‌توانند مفید باشند. چند نمایش تابع دلتا را در زیر بررسی می‌کنیم.

(الف) نمایش الف-۱۵ را به‌صورت زیر می‌نویسیم

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\lim_{L\to\infty}\int_{-L}^{L} dk\; e^{ikx} \qquad \text{(الف-۲۰)}$$

انتگرال را می‌توان محاسبه کرد، و به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}\delta(x) &= \lim_{L\to\infty}\frac{1}{2\pi}\frac{e^{iLx} - e^{-iLx}}{ix} \\ &= \lim_{L\to\infty}\frac{\sin Lx}{\pi x}\end{aligned} \qquad \text{(الف-۲۱)}$$

(ب) تابع $\Delta(x,a)$ را که به صورت زیر تعریف می‌شود در نظر می‌گیریم

$$\begin{aligned}\Delta(x,a) &= 0 && x < -a \\ &= \frac{1}{2a} && -a < x < a \\ &= 0 && a < x\end{aligned} \qquad \text{(الف-۲۲)}$$

بنابراین،

www.arsanjan.blogfa.com

$$\delta(x) = \lim_{a \to 0} \Delta(x, a) \qquad \text{(الف-۲۳)}$$

واضح است که انتگرال حاصلضرب $\Delta(x, a)$ و یک تابع $f(x)$ که در نزدیکی مبدأ هموار است تنها در مبدأ سهم خواهد داشت:

$$\lim_{a \to 0} \int dx f(x)\Delta(x, a) = f(0) \lim_{a \to 0} \int dx \Delta(x, a)$$
$$= f(0)$$

(ج) به‌همین ترتیب، هر تابع قله‌دار، که مساحت زیر آن به ۱ بهنجار شده باشد، در حدی که پهنای قله به صفر میل می‌کند به یک تابع دلتا نزدیک می‌شود. می‌توان نشان داد که دو رابطهٔ زیر نمایشهای تابع دلتا هستند

$$\delta(x) = \lim_{a \to 0} \frac{1}{\pi} \frac{a}{x^2 + a^2} \qquad \text{(الف-۲۴)}$$

و

$$\delta(x) = \lim_{\alpha \to \infty} \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha^2 x^2}$$

(د) گاهی با چندجمله‌ایهای راست‌هنجار سروکار داریم، که آنها را با نماد کلی $P_n(x)$ نشان می‌دهیم. این چندجمله‌ایها دارای خاصیت زیر هستند

$$\int dx P_m(x)\, P_n(x)\, w(x) = \delta_{mn} \qquad \text{(الف-۲۶)}$$

که در آن $w(x)$ ممکن است واحد یا یک تابع ساده باشد، که آن‌را تابع وزن می‌نامند. برای توابعی که می‌توان آنها را برحسب این چندجمله‌ایهای متعامد بسط داد می‌توان نوشت

$$f(x) = \sum_n a_n P_n(x) \qquad \text{(الف-۲۷)}$$

اگر دو طرف این رابطه را در $w(x)P_m(x)$ ضرب کنیم و روی x انتگرال بگیریم به‌دست می‌آوریم

$$a_m = \int dy w(y)\, f(y)\, P_m(y) \qquad \text{(الف-۲۸)}$$

www.arsanjan.blogfa.com

با جاگذاری در الف-۲۷، و با آمادگی برای کار با توابع تعمیم‌یافته، جای جمع و انتگرال را بدون هیچ قید و شرطی عوض می‌کنیم:

$$\begin{aligned} f(x) &= \sum_n P_n(x) \int dy w(y)\, f(y)\, P_n(y) \\ &= \int dy f(y) \left(\sum_n P_n(x)\, w(y)\, P_n(y) \right) \end{aligned} \qquad \text{(الف-۲۹)}$$

بدین‌ترتیب، به نمایش دیگری از تابع دلتا می‌رسیم. مثالهای $P_n(x)$ عبارت‌اند از چندجمله‌ایهای لژاندر، چندجمله‌ایهای هرمیت و چندجمله‌ایهای لاگر، که تمام اینها در مسائل مکانیک کوانتومی ظاهر می‌شوند.

چون تابع دلتا همیشه به‌صورت حاصلضرب با یک تابع هموار زیر علامت انتگرال ظاهر می‌شود، می‌توان برای آن مشتق تعریف کرد. به‌عنوان مثال،

$$\begin{aligned} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx f(x) \frac{d}{dx}\delta(x) &= \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \frac{d}{dx}[f(x)\delta(x)] - \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \frac{df(x)}{dx}\delta(x) \\ &= -\int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \frac{df(x)}{dx}\delta(x) \\ &= -\left(\frac{df}{dx}\right)_{x=0} \end{aligned} \qquad \text{(الف-۳۰)}$$

و غیره. تابع دلتا ابزار بسیار مفیدی است که در هر بخشی از ریاضی فیزیک با آن روبه‌رو می‌شویم.

انتگرال تابع دلتا عبارت است از

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{x} dy\, \delta(y-a) &= 0 \qquad x < a \\ &= 1 \qquad x > a \\ &\equiv \theta(x-a) \end{aligned} \qquad \text{(الف-۳۱)}$$

که نمادنگاری متعارف برای این تابع ناپیوسته است که تابع پله‌ای نامیده می‌شود. برعکس، مشتق تابع پله‌ای $\theta(x-a)$ تابع دلتای دیراک است:

$$\frac{d}{dx}\theta(x-a) = \delta(x-a) \qquad \text{(الف-۳۲)}$$

www.arsanjan.blogfa.com

پیوست ب

عملگرها

در این پیوست بعضی از مباحث مربوط به عملگرهای خطی را بررسی می‌کنیم. توابع انتگرال‌پذیر مجذوری مجموعهٔ توابع موج قابل قبول را تشکیل می‌دهند. اگر $\psi_1(x)$ و $\psi_2(x)$ انتگرال‌پذیر مجذوری و α و β اعداد مختلط اختیاری باشند، چون تابع

$$\psi(x) = \alpha\psi_1(x) + \beta\psi_2(x) \qquad (ب-۱)$$

انتگرال‌پذیر مجذوری است، می‌گوییم ψها یک فضای خطی تشکیل می‌دهند. عملگر A در این فضا یک نگاشت است:

$$A\psi(x) = \phi(x)$$

$\phi(x)$ نیز انتگرال‌پذیر مجذوری است. در میان تمام عملگرها یک زیر مجموعه وجود دارد [illegible] می‌شوند، و این خاصیت را دارند که

$$A\alpha\psi(x) = \alpha A\psi(x)$$

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن α یک ثابت مختلط اختیاری است، و همچنین

$$A[\alpha\psi_1(x) + \beta\psi_2(x)] = \alpha A\psi_1(x) + \beta A\psi_2(x) \qquad (ب-۴)$$

که در آن α و β اعداد مختلط‌اند. یک زیرمجموعهٔ دیگر عبارت است از عملگرهای هرمیتی که برای آنها مقدار انتظاری به‌ازای تمام توابع قابل قبول $\psi(x)$، یعنی

$$\langle A\rangle_\psi = \int dx\psi^*(x)\, A\psi(x) \qquad (ب-۵)$$

حقیقی است. ابتدا ثابت می‌کنیم که برای تمام توابع قابل قبول ψ_1 و ψ_2 رابطهٔ زیر برقرار است

$$\int \psi_2^*(x)\, A\psi_1(x)\, dx = \int [A\psi_2(x)]^*\psi_1(x)\, dx \qquad (ب-۶)$$

حقیقی بودن $\langle A\rangle$ ایجاب می‌کند که

$$\int dx\psi^*(x)\, A\psi(x) = \int dx[A\psi(x)]^*\psi(x) \qquad (ب-۷)$$

اکنون به‌جای $\psi(x)$ قرار می‌دهیم

$$\psi(x) = \psi_1(x) + \lambda\psi_2(x) \qquad (ب-۸)$$

و در نتیجه

$$\int dx(\psi_1^* + \lambda^*\psi_2)A(\psi_1 + \lambda\psi_2) = \int dx(\psi_1 + \lambda\psi_2)(A\psi_1 + \lambda A\psi_2)^* \qquad (ب-۹)$$

با استفاده از هرمیتی بودن A، یعنی

$$\int dx\psi_i^* A\psi_i = \int dx\psi_i(A\psi_i)^* \qquad i = ۱, ۲ \qquad (ب-۱۰)$$

به‌دست می‌آوریم

$$\lambda^* \int \psi_2^* A\psi_1 + \lambda \int \psi_1^* A\psi_2 = \lambda \int \psi_2(A\psi_1)^* + \lambda^* \int \psi_1(A\psi_2)^* \qquad (ب-۱۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com

چون λ یک عدد مختلط دلخواه است، می‌توانیم ضرایب λ^* در دو طرف باید جداگانه با هم برابر باشند. بنابراین،

$$\int dx\psi_2^\dagger A\psi_1 = \int dx(A\psi_2)^\dagger \psi_1 \qquad (ب-۱۲)$$

نتیجهٔ دیگری که می‌خواهیم اثبات کنیم این است که ویژه‌تابعهای یک عملگر هرمیتی، مربوط به ویژه‌مقدارهای مختلف، متعامدند. دو معادلهٔ زیر را در نظر بگیرید

$$A\psi_1(x) = a_1\psi_1(x)$$

و

$$[A\psi_2(x)]^* = a_2\psi_2^\dagger(x) \qquad (ب-۱۳)$$

توجه کنید که a_2 حقیقی است زیرا ویژه‌مقدارهای عملگرهای هرمیتی حقیقی هستند. ψ_2^* را در معادلهٔ اول و ψ_1 را در معادلهٔ دوم ضرب نرده‌ای می‌کنیم:

$$\begin{aligned}\int dx\psi_2^* A\psi_1(x) &= a_1\int \psi_2^\dagger(x)\psi_1(x)dx \\ \int dx(A\psi_2)^*\psi_1(x) &= a_2\int \psi_2^\dagger(x)\psi_1(x)dx\end{aligned} \qquad (ب-۱۴)$$

از تفریق این دو به‌دست می‌آوریم

$$(a_1-a_2)\int \psi_2^\dagger(x)\psi_1(x)dx = \int dx\psi_2^* A\psi_1 - \int dx(A\psi_2)^*\psi_1 = 0 \qquad (ب-۱۵)$$

بنابراین، اگر $a_1 \neq a_2$ داریم

$$\int \psi_2^\dagger(x)\psi_1(x)dx = 0 \qquad (ب-۱۶)$$

اگر همیوغ هرمیتی عملگر A را با $A^\dagger$ نشان دهیم به‌طوری که

$$\int dx(A\psi_2)^*\psi_1 \equiv \int dx\psi_2^* A^\dagger\psi_1 \qquad (ب-۱۷)$$

www.arsanjan.blogfa.com

آنگاه برای عملگر هرمیتی داریم

$$A = A^\dagger \qquad (ب-۱۸)$$

می‌توان نشان داد

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger \qquad (ب-۱۹)$$

برای این کار، می‌نویسیم

$$\begin{aligned} \int \psi_2^*(AB)^\dagger\psi_1 &= \int (AB\psi_2)^*\psi_1 \\ &= \int (B\psi_2)^*(A^\dagger\psi_1) \\ &= \int \psi_2^* B^\dagger(A^\dagger\psi_1) \\ &= \int \psi_2^* B^\dagger A^\dagger\psi_1 \end{aligned} \qquad (ب-۲۰)$$

تعمیم این رابطه به‌صورت زیر است

$$(ABC\cdots Z)^\dagger = A^\dagger\cdots C^\dagger B^\dagger A^\dagger \qquad (ب-۲۱)$$

شرط لازم و کافی برای هرمیتی بودن حاصلضرب دو عملگر هرمیتی این است که این دو عملگر با هم جابه‌جا شوند:

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger = BA = AB + [B, A] \qquad (ب-۲۲)$$

نتیجهٔ دیگر این است که برای هر عملگر A عملگرهای زیر هرمیتی هستند

$$\begin{gathered} A + A^\dagger \\ i(A - A^\dagger) \\ AA^\dagger \end{gathered} \qquad (ب-۲۳)$$

اکنون "روابط عدم قطعیت" را اثبات می‌کنیم. بنابه تعریف داریم

$$(\Delta A)^2 = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2 = \langle (A - \langle A\rangle)^2\rangle \qquad (ب-۲۴)$$

www.arsanjan.blogfa.com

قرار می‌دهیم

$$U = A - \langle A \rangle$$
$$V = B - \langle B \rangle \qquad (ب-۲۵)$$

و می‌نویسیم

$$\phi = U\psi + i\lambda V\psi \qquad (ب-۲۶)$$

که در آن λ یک پارامتر حقیقی است. ϕ را در خودش ضرب نرده‌ای می‌کنیم:

$$I(\lambda) = \int dx \phi^* \phi \geq 0 \qquad (ب-۲۷)$$

اگر A و B هرمیتی باشند U و V نیز هرمیتی هستند. در نتیجه، می‌توان نوشت

$$\begin{aligned} I(\lambda) &= \int dx (U\psi + i\lambda V\psi)^* (U\psi + i\lambda V\psi) \\ &= \int dx (U\psi)^* (U\psi) + \lambda^2 \int dx (V\psi)^* (V\psi) \\ &\quad + i\lambda \int dx [(U\psi)^* (V\psi) - (V\psi)^* (U\psi)] \\ &= \int dx \psi^* (U^2 + \lambda^2 V^2 + i\lambda [U, V]) \psi \\ &= (\Delta A)^2 + \lambda^2 (\Delta B)^2 + i\lambda \int dx \psi^* [U, V]) \psi \\ &= (\Delta A)^2 + \lambda^2 (\Delta B)^2 + i\lambda \langle [A, B] \rangle \end{aligned} \qquad (ب-۲۸)$$

این کمیت وقتی کمینه است که

$$2\lambda (\Delta B)^2 + i\langle [A, B] \rangle = 0 \qquad (ب-۲۹)$$

یا

$$\lambda = -i \frac{\langle [A, B] \rangle}{2(\Delta B)^2} \qquad (ب-۳۰)$$

www.arsanjan.blogfa.com

با جاگذاری در $I(\lambda)$ به‌دست می‌آوریم

$$(\Delta A)^2 - \frac{\langle [A,B] \rangle^2}{4(\Delta B)^2} + \frac{\langle [A,B] \rangle^2}{2(\Delta B)^2} \geq 0$$

یعنی

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4} \langle i[A,B] \rangle^2 \qquad (ب-۳۱)$$

در ضمن، طرف چپ رابطهٔ بالا وقتی کمترین مقدار خود را دارد که $U\psi$ و $V\psi$ با یکدیگر متناسب باشند. بنابراین، برای عملگرهای x و p در این مورد داریم

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d\psi(x)}{dx} + i\beta x \psi(x) = 0 \qquad (ب-۳۲)$$

جواب این معادله عبارت است از

$$\psi(x) = C\, e^{-\beta(x^2/2\hbar)} \qquad (ب-۳۳)$$

که ویژه تابع حالت پایهٔ نوسانگر هماهنگ است. شایان توجه است که رابطهٔ عدم قطعیت

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4} (\langle i[A,B] \rangle)^2 \qquad (ب-۳۴)$$

بدون هیچ استفاده‌ای از مفاهیم موجی یا دوجانبگی بین یک موج و تبدیل فوریهٔ آن به‌دست آمده است. این نتیجه صرفاً مبتنی بر خواص عملگری مشاهده‌پذیرهای A و B است.

این پیوست را با بیان چند خاصیت از جابه‌جاگرها به‌پایان می‌بریم.

(الف)

$$[A,B] = -[B,A] \qquad (ب-۳۵)$$

(ب)

$$\begin{aligned} [A,B]^\dagger &= (AB)^\dagger - (BA)^\dagger \\ &= B^\dagger A^\dagger - A^\dagger B^\dagger \\ &= [B^\dagger, A^\dagger] \end{aligned} \qquad (ب-۳۶)$$

www.arsanjan.blogfa.com

(ج) اگر A و B هرمیتی باشند $[A,B]$ نیز هرمیتی است. این نتیجه مستقیماً از خواص بالا به‌دست می‌آید.

(د)

$$\begin{aligned}[AB,C] &= ABC - CAB \\ &= ABC - ACB + ACB - CAB \\ &= A[B,C] + [A,C]B\end{aligned} \qquad (ب-۳۷)$$

(ه) جمله به جمله می‌توان نشان داد که

$$e^{A}Be^{-A} = B + [A,B] + \frac{۱}{۲!}[A,[A,B]] + \frac{۱}{۳!}[A,[A,[A,B]]] + \cdots \qquad (ب-۳۸)$$

که لم بیکر-هاوسدورف نامیده می‌شود و کاربردهایی در محاسبات با عملگرها دارد.

(و) به‌سادگی می‌توان نشان داد

$$[A,[B,C]] + [B,[C,A]] + [C,[A,B]] = ۰ \qquad (ب-۳۹)$$

که اتحاد یاکوبی نامیده می‌شود.

برای بحث گسترده‌تر دربارهٔ عملگرها و فضاهای خطیِ قلمرو آنها می‌توانید به کتاب زیر مراجعه کنید

J D Jackson, *Mathematics for Quantum Mechanics*, W A Benjamin, New York, 1962.

www.arsanjan.blogfa.com

مبحث ویژهٔ ۱
سینماتیک نسبیتی

در این بخش چند فرمول را که در ساده کردن اثرات تبدیلهای نسبیتی از یک چارچوب مرجع به دیگری مفیدند به‌اختصار بیان می‌کنیم. یک کاربرد نمونه در پراکندگی پیش می‌آید: نظریه با چارچوب مرکز جرم و آزمایش با چارچوب آزمایشگاه سروکار دارد، و نتایج این دو را باید با هم مقایسه کرد. روش ساده‌سازی که باید از آن استفاده شود بر مبنای دو نتیجه از نظریهٔ نسبیت خاص است:

(الف) حاصلضرب نرده‌ای چاربردارهای $A_\mu = (A_0, \mathbf{A})$ و $B_\mu = (B_0, \mathbf{B})$ که با رابطهٔ زیر تعریف می‌شود

$$A \cdot B = A_\mu B_\mu \equiv (A_0 B_0 - \mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) \qquad (م۱-۱)$$

تحت تبدیلات لورنتس ناوردا است.

(ب) انرژی و تکانهٔ یک ذره به‌صورت چاربردار زیر تبدیل می‌شوند

$$p_\mu = \left(\frac{E}{c}, \mathbf{p}\right) \qquad (م۱-۲)$$

که مجذور "طول" آن برحسب جرم سکون ذره عبارت است از

$$p^2 = p_\mu p_\mu = \frac{E^2}{c^2} - \mathbf{p}^2 = m^2 c^2 \qquad (م۱-۳)$$

به‌طور کلی، برخورد بین دو ذره که به دو ذره در حالت نهایی منجر می‌شود، مانند

$$A(p_A) + B(p_B) \rightarrow C(p_C) + D(p_D)$$

www.arsanjan.blogfa.com

فقط با دو عدد مشخص می‌شود. بنابراین، برای تکانه‌ها $۴ \times ۴ = ۱۶$ مؤلفهٔ مختلف داریم؛ این ۱۶ مؤلفه با چهار شرط جرم (م۱ـ۳) و چهار شرط پایستگی انرژی‌ـتکانه محدود می‌شوند؛ علاوه بر این، ناوردایی تحت انتقال و چرخش ایجاب می‌کند که شش مختصهٔ دیگر، یعنی تکانهٔ مرکز جرم، سمتگیری صفحهٔ پراکندگی در فضا، و انتخاب محورها در این صفحه، بی‌تأثیر باشند.

از دو ناوردای مشخص‌کنندهٔ برخورد، یکی را به‌صورت

$$s = (p_A + p_B)^۲ = (p_C + p_D)^۲ \qquad (م۱ـ۴)$$

که جملهٔ دوم آن از پایستگی چارتکانه ناشی می‌شود، و دیگری را به‌صورت زیر انتخاب می‌کنیم

$$t = (p_C - p_A)^۲ = (p_D - p_B)^۲ \qquad (م۱ـ۵)$$

یک انتخاب ممکن دیگر عبارت است از

$$u = (p_D - p_A)^۲ = (p_C - p_B)^۲ \qquad (م۱ـ۶)$$

این سه ناوردا مستقل از یکدیگر نیستند زیرا، با توجه به رابطهٔ $p_{A\mu} + p_{B\mu} = p_{C\mu} + p_{D\mu}$ که می‌توان آن‌را به‌سادگی اثبات کرد، قانون پایستگی انرژی‌ـتکانه ایجاب می‌کند که

$$s + t + u = m_A^۲c^۲ + m_B^۲c^۲ + m_c^۲c^۲ + m_D^۲c^۲ \qquad (م۱ـ۷)$$

مفهوم این ناورداها را در زیر بیان می‌کنیم:

s: در چارچوب مرکز جرم، که در آن کمیتها را با ستاره نشان می‌دهیم، داریم

$$\mathbf{p}_A^* + \mathbf{p}_B^* = ۰ \qquad (م۱ـ۸)$$

بنابراین،

$$\begin{aligned} s &= (p_{۰A}^* + p_{۰B}^*)^۲ - (\mathbf{p}_A^* + \mathbf{p}_B^*)^۲ \\ &= \left(\frac{E_A^*}{c} + \frac{E_B^*}{c}\right)^۲ \\ &= \frac{۱}{c^۲}(E_A^* + E_B^*)^۲ \end{aligned} \qquad (م۱ـ۹)$$

www.arsanjan.blogfa.com

که، با تقریب ضریب c^2، مجدور انرژی کل در چارچوب مرکز جرم است.

t: معنی t در یک مورد خاص (اما بسیار متداول) که در آن ذرات A و C و همچنین B و D یکسان هستند، مثلاً در واکنشهای

$$\pi + P \to \pi + P$$

و

$$\gamma + e \to \gamma + e$$

تا اندازه‌ای روشنتر است. در این مورد، در چارچوب مرکز جرم، از

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_B^* = -\mathbf{p}_A^* \qquad \mathbf{p}_D^* = -\mathbf{p}_C^* \\ E_A^* + E_B^* = E_C^* + E_D^* \end{aligned} \tag{م۱ـ۱۰}$$

و

$$m_A = m_C \qquad m_B = m_D \tag{م۱ـ۱۱}$$

نتیجه می‌گیریم که

$$\begin{aligned} (\mathbf{p}_A^{*2}c^2 + m_A^2c^4)^{1/2} + (\mathbf{p}_A^{*2}c^2 + m_B^2c^4)^{1/2} = &(\mathbf{p}_C^{*2}c^2 + m_A^2c^4)^{1/2} \\ &+ (\mathbf{p}_C^{*2}c^2 + m_B^2c^4)^{1/2} \end{aligned}$$

یعنی

$$E_A^* = E_C^* \qquad E_B^* = E_D^* \tag{م۱ـ۱۲}$$

بنابراین،

$$\begin{aligned} t = (p_A - p_C)^2 &= \left(\frac{E_A^*}{c} - \frac{E_C^*}{c}\right)^2 - (\mathbf{p}_A^* - \mathbf{p}_C^*)^2 \\ &= -(\mathbf{p}_A^* - \mathbf{p}_C^*)^2 \end{aligned} \tag{م۱ـ۱۳}$$

www.arsanjan.blogfa.com

یعنی t منفی مجذور انتقال تکانه کنید که t به زاویهٔ پراکندگی مرکز جرمی مربوط می‌شود. از رابطهٔ بالا داریم

$$\begin{aligned} t &= -\mathbf{p}_A^{*2} - \mathbf{p}_C^{*2} + 2\mathbf{p}_A^* \cdot \mathbf{p}_C^* \\ &= -\mathbf{p}_A^{*2} - \mathbf{p}_C^{*2} + 2|\mathbf{p}_A^*||\mathbf{p}_C^*| \cos\ \theta^* \end{aligned} \qquad (۱۴\text{ـ}۱م)$$

چارچوب آزمایشگاه با $\mathbf{p}_B^L = 0$ مشخص می‌شود، و در آن

$$p_{B\mu} = (m_B c, 0) \qquad (۱۵\text{ـ}۱م)$$

بنابراین،

$$\begin{aligned} s = (p_A + p_B)^2 &= p_A^2 + p_B^2 + 2p_A p_B \\ &= m_A^2 c^2 + m_B^2 c^2 + 2m_B E_A^L \end{aligned} \qquad (۱۶\text{ـ}۱م)$$

و

$$\begin{aligned} t &= (p_D - p_B)^2 \\ &= m_D^2 c^2 + m_B^2 c^2 - 2m_B E_D^L \\ &= (p_A - p_C)^2 \\ &= m_A^2 c^2 + m_C^2 c^2 - 2E_A^L E_C^L / c^2 + 2\mathbf{p}_A^L \cdot \mathbf{p}_c^L \\ &= m_A^2 c^2 + m_C^2 c^2 - 2E_A^L E_C^L / c^2 + 2|\mathbf{p}_A^L|\ |\mathbf{p}_C^L| \cos\ \theta^L \end{aligned} \qquad (۱۷\text{ـ}۱م)$$

از این نتیجه، و با استفاده از

$$E_A^L + m_B c^2 = E_C^L + E_D^L \qquad (۱۸\text{ـ}۱م)$$

و ناوردایی s و t، یعنی اینکه s و t در چارچوبهای مرکز جرم و آزمایشگاه (یا هر چارچوب دیگری) مقادیر یکسانی دارند، می‌توان رابطهٔ میان زاویهٔ پراکندگی مرکز جرمی و زاویهٔ پراکندگی آزمایشگاهی و همچنین رابطهٔ میان انرژیها در دو چارچوب را به‌دست آورد.

ویژگیهای تبدیل سطح مقطع دیفرانسیلی $d\sigma/d(\cos\ \theta)$ از ناوردایی $d\sigma$، که می‌توان آن‌را با فرمولبندی نسبیتی نظریهٔ پراکندگی اثبات کرد، به‌دست می‌آید. بنابراین،

$$\frac{d\sigma}{dt} \qquad (۱۹\text{ـ}۱م)$$

www.arsanjan.blogfa.com

ناوردا است، و برای نمایش سطح مقطع به‌صورتی که تبدیلها از یک چارچوب به چارچوب دیگر از همه آسانتر انجام شوند، بهتر است آن‌را برحسب s و t بنویسیم. این کار را در اینجا انجام نمی‌دهیم. به عنوان یک نکتهٔ حاشیه‌ای بهایی، متذکر می‌شویم که رابطهٔ مربوط به

$$\int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}$$

ناوردای نسبیتی نیست. اما ناوردایی آشکار

$$\begin{aligned} &\int \cdot\cdot \int d^4p\ \delta(p^2 - m^2c^2) \\ &= \int d^3\mathbf{p} \int_{p_0>0} dp_0\ \delta(p_0^2 - \mathbf{p}^2 - m^2c^2) \\ &= \int d^3\mathbf{p} \frac{1}{2\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2c^2}} = \frac{c}{2} \frac{d^3\mathbf{p}}{(\mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4)^{1/2}} \end{aligned} \qquad (م۱-۲۰)$$

نشان می‌دهد که

$$\int \frac{d^3\mathbf{p}}{E} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \qquad (م۱-۲۱)$$

ناوردا است. عناصر ماتریس در نظریه‌های نسبیتی همیشه به ذراتی مربوط می‌شوند که نه مطابق با

$$\frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}$$

بلکه مطابق با

$$\frac{1}{\sqrt{V}} \frac{1}{\sqrt{E}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}$$

بهنجار می‌شوند، و در نتیجه عوامل لازم از مجذور عنصر ماتریس به‌دست می‌آیند.

www.arsanjan.blogfa.com

مبحث ویژهٔ ۲

عملگر چگالی

در بحثهای خود همیشه با تحول زمانی دستگاههای فیزیکیی سروکار داشتیم که حالتهای اولیهٔ آنها به‌صورت زیر بودند

$$|\psi\rangle = \sum_n C_n |u_n\rangle \qquad (م۲ـ۱)$$

این نوع آنهایی اولیه غالباً آنهایی نیستند که با روش آماده‌سازی حالتها فراهم می‌شوند. به‌جای یک مجموعهٔ آماری متشکل از حالتهای یکسان $|\psi\rangle$، ممکن است تعدادی مجموعهٔ آماری مختلف داشته باشیم که اندازه‌گیریها باید روی آنها انجام شوند. این مجموعه‌های آماری می‌توانند به‌صورت زیر باشند

$$|\psi^{(i)}\rangle = \sum_n C_n^{(i)} |u_n\rangle \qquad (م۲ـ۲)$$

و همهٔ آنچه می‌دانیم این است که احتمال یافتن یک مجموعهٔ آماری که با (i) مشخص شده است p_i است و

$$\sum_i p_i = ۱ \qquad (م۲ـ۳)$$

برای مثال، ممکن است باریکه‌ای از اتمهای هیدروژن در یک حالت برانگیخته، با انرژی معین و تکانهٔ زاویه‌ای مداری l، و کاملاً ناقطبیده داشته باشیم، و از این‌رو تمام مقادیر m، با $-l \leq m \leq l$،

www.arsanjan.blogfa.com

به یک اندازه محتمل هستند. در این مورد، $p_m = ۱/(۲l+۱)$ که مستقل از m است. صحیح نیست بگوییم این باریکه با تابع موج

$$|\psi\rangle = \sum_m C_m |Y_{lm}\rangle \qquad (م۲ـ۴)$$

که در آن $|C_m|^۲ = ۱/(۲m+۱)$، توصیف می‌شود، زیرا وضعیت فیزیکی $۲m+۱$ باریکهٔ مستقل را نشان می‌دهد، و در نتیجه هیچ رابطهٔ فازی بین مقادیر مختلف m وجود ندارد.

با استفاده از عملگر چگالی می‌توان هر دو مورد را بررسی کرد.

حالت ناب

ابتدا حالت ناب را در نظر می‌گیریم. عملگر چگالی ρ با رابطهٔ زیر تعریف می‌شود

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| \qquad (م۲ـ۵)$$

که می‌توان آن‌را به‌صورت زیر نوشت

$$\rho = \sum_{m,n} C_n C_m^* |u_n\rangle\langle u_m| \qquad (م۲ـ۶)$$

عناصر ماتریس ρ در پایهٔ u_n عبارت‌اند از

$$\begin{aligned}\rho_{kl} = \langle u_k|\rho|u_l\rangle &= \langle u_k \sum_{m,n} C_n C_m^* |u_n\rangle\langle u_m|u_l\rangle \\ &= C_k C_l^*\end{aligned} \qquad (م۲ـ۷)$$

مشاهده می‌کنیم که

(الف)

$$\rho^۲ = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = \rho \qquad (م۲ـ۸)$$

(ب)

$$\mathrm{Tr}\,\rho = \sum_k \rho_{kk} = \sum_k |C_k|^۲ = ۱ \qquad (م۲ـ۹)$$

www.arsanjan.blogfa.com

(ج) همچنین، مقدار انتظار A را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned}\langle A\rangle &= \langle\psi|A|\psi\rangle = \sum_{m,n} C_m^* \langle u_m|A|u_n\rangle C_n \\ &= \sum_{m,n} C_m^* C_n A_{mn} = \sum_{m,n} A_{mn}\rho_{nm} \\ &= \mathrm{Tr}(A\rho)\end{aligned} \qquad (م۲ـ۱۰)$$

نتایج م۲ـ۸ تا م۲ـ۱۰ از انتخاب مجموعهٔ کامل بردارهای پایهٔ $|u_n\rangle$ مستقل هستند. برای اثبات، مجموعهٔ $|v_n\rangle$ را در نظر می‌گیریم. بنابه قضیهٔ کلی بسط، می‌توان نوشت

$$|v_n\rangle = \sum_m T_m^{(n)} |u_m\rangle$$

که در آن

$$T_m^{(n)} = \langle u_m|v_n\rangle \equiv T_{mn}$$

توجه کنید که

$$\begin{aligned}\sum_n T_{mn}(T^+)_{nk} &= \sum_n T_{mn}T_{kn}^* = \sum_n \langle u_m|v_n\rangle\langle u_k|v_n\rangle^* \\ &= \sum_n \langle u_m|v_n\rangle\langle v_n|u_k\rangle = \delta_{mk}\end{aligned}$$

که نشان می‌دهد ماتریس T یکانی است. بنابراین،

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &= \sum_k D_k|v_k\rangle \\ &= \sum_k D_k T_{kl}|u_l\rangle\end{aligned}$$

و در نتیجه

$$C_l = D_k T_{kl} = (T^{\mathrm{tr}})_{lk} D_k \equiv U_{lk} D_k$$

چون T یکانی است، ترانهاد آن یعنی $U \equiv T^{\mathrm{tr}}$ نیز یکانی است. بنابراین،

$$\rho_{kl} = C_k C_l^* = (U)_{km} D_m (U)_{ln}^* D_n^*$$

www.arsanjan.blogfa.com

یا

$$= U\ \rho_D (U)^+$$

که در آن ρ_D عملگر چگالی در پایهٔ v است. بدین‌ترتیب، داریم

$$\rho_D = U^+ \rho U$$

از یکانی بودن U نتیجه می‌شود که خواص ρ برای ρ_D نیز صدق می‌کنند.

چون $\rho = \rho^+$، می‌توان ρ را با یک تبدیل یکانی قطری کرد. این نشان می‌دهد که می‌توان پایه‌ای مانند $|v_n\rangle$ انتخاب کرد که در آن ρ قطری باشد. چون $\rho = \rho^۲$، ویژه‌مقدارهای آن تنها می‌توانند ۱ یا ۰ باشند، و چون $\mathrm{tr}\rho = ۱$، تنها یکی از ویژه‌مقدارها می‌تواند ۱ باشد و بقیه باید صفر باشند. بنابراین، تنها یکی از D_kها می‌تواند مخالف صفر باشد. این نشان می‌دهد که در یک پایهٔ مناسب، حالت ناب حالتی است که ویژه‌حالت بزرگترین مجموعهٔ مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده‌ای باشد که ویژه‌تابعهای آنها مجموعهٔ $|v_n\rangle$ هستند.

حالت آمیخته

برای حالت آمیخته عملگر چگالی را با رابطهٔ زیر تعریف می‌کنیم

$$\rho = \sum_i |\psi^{(i)}\rangle p_i \langle\psi^{(i)}| \qquad (م۲ـ۱۱)$$

که در پایهٔ $|u_n\rangle$ به‌صورت زیر نوشته می‌شود

$$\rho = \sum_i \sum_{m,n} C_n^{(i)} C_m^{(i)*} p_i |u_n\rangle\langle u_m|$$

و از این‌رو

$$\rho_{kl} = \langle u_k|\rho|ul\rangle = \sum_i\ p_i\ C_k^{(i)} C_l^{(i)*} \qquad (م۲ـ۱۲)$$

توجه کنید که $\rho_{kl} = \rho_{lk}^*$، و این نشان می‌دهد که ρ هرمیتی است. چون

$$\sum_n |C_n^{(i)}|^۲ = ۱$$

www.arsanjan.blogfa.com

نتیجه می‌گیریم، مانند سابق، که

$$\mathrm{Tr}\ \rho = \sum_k \rho_{kk} = \sum_i p_i = ۱ \qquad (م۲ـ۱۳)$$

همچنین، مانند مورد حالت ناب، داریم

$$\begin{aligned}\langle A\rangle &= \sum_i p_i \langle \psi^{(i)}|A|\psi^{(i)}\rangle \\ &= \sum_i \sum_{mn} p_i \langle \psi^{(i)}|u_n\rangle\langle u_n|A|u_m\rangle\langle u_m|\psi^{(i)}\rangle \\ &= \sum_i \sum_{mn} p_i\, C_m^{(i)} C_n^{(i)*} A_{nm} \\ &= \sum_{mn} \rho_{mn} A_{nm} = \mathrm{Tr}\,(\rho A)\end{aligned} \qquad (م۲ـ۱۴)$$

اما رابطهٔ $\rho = \rho^۲$ دیگر صادق نیست. در واقع

$$\rho^۲ = \sum_j \sum_i |\psi^{(i)}\rangle p_i \langle \psi^{(i)}|\psi^{(j)}\rangle p_j \langle \psi^{(i)}| = \sum_i |\psi^{(i)}\rangle p_i^۲ \langle \psi^{(i)}|$$

و چون $\sum_i p_i = ۱$، برای حالت آمیخته به‌دست می‌آوریم

$$\mathrm{Tr}\ \rho^۲ = \sum_i p_i^۲ < ۱ \qquad (م۲ـ۱۵)$$

از معادلهٔ شرودینگر

$$\frac{d}{dt}|\psi^{(i)}\rangle = -\frac{i}{\hbar} H|\psi^{(i)}\rangle$$

و (چون $H = H^\dagger$)

$$\frac{d}{dt}\langle \psi^{(i)}| = \frac{i}{\hbar}\langle \psi^{(i)}|H$$

نتیجه می‌گیریم که

$$\frac{d}{dt}\rho = -\frac{i}{\hbar} H\rho + \frac{i}{\hbar}\rho H = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho] \qquad (م۲ـ۱۶)$$

www.arsanjan.blogfa.com

توجه کنید که علامت در اینجا مخالف علامت رابطهٔ آهنگ تغییر زمانی عملگرهای دیگر است:

$$\frac{d}{dt}A = \frac{i}{h}[H, A]$$

ساده‌ترین کاربرد صورتبندی بالا در توصیف باریکه‌ای از الکترونها یا ذرات دیگر با اسپین ۱/۲ است. در اینجا ρ یک ماتریس هرمیتی ۲ × ۲ است. کلی‌ترین شکل این ماتریس عبارت است از

$$\rho = \frac{1}{2}(a\mathbf{1} + \mathbf{b}\cdot\boldsymbol{\sigma}) \qquad (م۲\text{ـ}۱۷)$$

که در آن a و $\mathbf{b}$ حقیقی هستند. شرط $\mathrm{Tr}\rho = 1$ ایجاب می‌کند که $a = 1$. می‌توان ρ^2 را به‌صورت زیرمحاسبه کرد:

$$\rho^2 = \frac{1}{4}(1 + \mathbf{b}\cdot\boldsymbol{\sigma})(1 + \mathbf{b}\cdot\boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{4}(1 + \mathbf{b}^2 + 2\mathbf{b}\cdot\boldsymbol{\sigma})$$
$$= \frac{1}{2}\left(\frac{1 + \mathbf{b}^2}{2} + \mathbf{b}\cdot\boldsymbol{\sigma}\right) \qquad (م۲\text{ـ}۱۸)$$

ماتریس چگالی ρ تنها به شرطی یک حالت ناب را توصیف می‌کند که $\rho^2 = \rho$، یعنی اگر $\mathbf{b}^2 = 1$. برای حالت آمیخته، از م۲ـ۱۵ نتیجه می‌گیریم که $\mathbf{b}^2 < 1$.

اکنون می‌خواهیم یک تعبیر فیزیکی برای $\mathbf{b}$ به‌دست آوریم. مخلوطی از باریکه‌هایی با اسپین ۱/۲ را در نظر بگیرید. هر یک از باریکه‌ها الکترونهایی در راستای محور z یا x یا y دارند. کسری از ذرات را که در یک ویژه‌حالت σ_z با ویژه‌مقدار $+1$ هستند با $f_z^{(+)}$ نشان می‌دهیم؛ کسری را که در ویژه‌حالت σ_z با ویژه‌مقدار -1 هستند با $f_z^{(-)}$ نشان می‌دهیم، و غیره، به‌طوری که

$$f_z^{(+)} + f_z^{(-)} + f_x^{(+)} + f_x^{(-)} + f_y^{(+)} + f_y^{(-)} = 1 \qquad (م۲\text{ـ}۱۹)$$

ویژه‌حالتهای σ_z، σ_x و σ_y با ویژه‌مقدارهای ± 1 عبارت‌اند از

$$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\1/\sqrt{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\-1/\sqrt{2}\end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\i/\sqrt{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\-i/\sqrt{2}\end{pmatrix}$$

www.arsanjan.blogfa.com

بنابراین، ماتریس چگالی به‌صورت

$$\rho = f_3^{(+)} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1\ 0) + f_3^{(-)} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (0\ 1) + f_1^{(+)} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} (1/\sqrt{2}\ \ 1/\sqrt{2})$$
$$+ f_1^{(-)} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} (1/\sqrt{2}\ \ -1/\sqrt{2}) + f_2^{(+)} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} \end{pmatrix} (1/\sqrt{2}\ \ -i/\sqrt{2})$$
$$+ f_2^{(-)} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} \end{pmatrix} (1/\sqrt{2}\ \ i/\sqrt{2})$$

با کمی محاسبه، و با استفاده از م۲ـ۱۹، این ρ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\rho = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P} \qquad (\text{م۲ـ۲۰})$$

که در آن $P_i = f_i^{(+)} - f_i^{(-)}$. کسری از ذرات در یک مخلوط که در جهت $z+$ هستند منهای کسری که در جهت $z-$ هستند قطبش در راستای z نامیده می‌شود، و آن‌را با P_3 نشان می‌دهیم. برای سایر راستاها نیز به همین ترتیب است. بنابراین، از مقایسهٔ م۲ـ۲۰ با م۲ـ۱۸، می‌توان $\mathbf{b}$ را بردار قطبش برایند باریکهٔ $\mathbf{P}$ تعبیر کرد. در مورد باریکه‌های اتمها با تکانهٔ زاویه‌ای l، کلی‌ترین صورت ρ یک ماتریس هرمیتی $(2l+1) \times (2l+1)$ است، و تعبیر عناصر آن پیچیده‌تر است. بحث بیشتر دربارهٔ ماتریس چگالی فراتر از مجال این کتاب است.

www.arsanjan.blogfa.com

مبحث ویژهٔ ۳

تقریب ونتزل-کرامرز-بریلوئن

این روش تقریبی مخصوصاً وقتی مفید است که با پتانسیلهای کند تغییر سروکار داریم. معنای دقیق این بعداً روشن خواهد شد. هدف حل معادلهٔ زیر است

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\psi(x) = 0 \qquad (م۳-۱)$$

و برای این کار، مفید است که بنویسیم

$$\psi(x) = R(x)e^{iS(x)/\hbar} \qquad (م۳-۲)$$

آنگاه

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \left[\frac{d^2R}{dx^2} + \frac{2i}{\hbar}\frac{dR}{dx}\frac{dS}{dx} + \frac{i}{\hbar}R\frac{d^2S}{dx^2} - \frac{1}{\hbar^2}R\left(\frac{dS}{dx}\right)^2\right]e^{iS(x)/\hbar} \qquad (م۳-۳)$$

پس از جاگذاری در م۳ـ۱ و تفکیک قسمتهای انگاری و حقیقی، این معادلهٔ دیفرانسیل به دو قسمت تقسیم می‌شود. از قسمت انگاری به‌دست می‌آوریم

$$R\frac{d^2S}{dx^2} + 2\frac{dR}{dx}\frac{dS}{dx} = 0 \qquad (م۳-۴)$$

www.arsanjan.blogfa.com

یعنی

$$\frac{d}{dx}\left(\log\frac{dS}{dx}+۲\log R\right)=۰$$

که جواب آن عبارت است از

$$\frac{dS}{dx}=\frac{C}{R^۲} \qquad (م۳ـ۵)$$

از قسمت حقیقی داریم

$$\frac{d^۲R}{dx^۲}-\frac{۱}{h^۲}R\left(\frac{dS}{dx}\right)^۲+\frac{۲m[E-V(x)]}{h^۲}R=۰$$

که پس از جاگذاری م۳ـ۵ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{d^۲R}{dx^۲}-\frac{C^۲}{h^۲}\frac{۱}{R^۳}+\frac{۲m[E-V(x)]}{h^۲}R=۰ \qquad (م۳ـ۶)$$

در اینجا تقریب زیر را به‌کار می‌بریم

$$\frac{۱}{R}\frac{d^۲R}{dx^۲}\ll\frac{C^۲}{h^۲}\frac{۱}{R^۴}=\frac{۱}{h^۲}\left(\frac{dS}{dx}\right)^۲ \qquad (م۳ـ۷)$$

و در نتیجه، با حذف جملهٔ اول در م۳ـ۶، به‌دست می‌آوریم

$$\frac{C^۲}{R^۴}=۲m[E-V(x)] \qquad (م۳ـ۸)$$

بنابراین

$$\frac{C}{R^۲}=\frac{dS}{dx}=\sqrt{۲m[E-V(x)]} \qquad (م۳ـ۹)$$

و سرانجام

$$S(x)=\int_{x_۱}^{x}dy\sqrt{۲m[E-V(x)]} \qquad (م۳ـ۱۰)$$

www.arsanjan.blogfa.com

شرط اعتبار را می‌توان به گزاره‌ای دربارهٔ تغییر $V(x)$ تبدیل کرد. این شرط در صورتی برقرار است که $V(x)$ در یک طول‌موج به‌کندی تغییر کند؛ طول موج از یک نقطه به نقطهٔ دیگر تغییر می‌کند، اما برای پتانسیل کند تغییر $V(x)$ با رابطهٔ زیر تعریف می‌شود

$$\lambda(x) = \frac{\hbar}{p(x)} = \frac{\hbar}{\{2m[E - V(x)]\}^{1/2}} \qquad (م۳\text{ـ}۱۱)$$

نقاطی که در آنها

$$E - V(x) = 0 \qquad (م۳\text{ـ}۱۲)$$

نیاز به بررسی خاص دارد، زیرا چنانکه دیده می‌شود $R(x)$ در معادلهٔ تقریبی م۳ـ۸ در این نقاط تکین است. چون تابع‌موج و در نتیجه $R(x)$ نمی‌تواند تکین باشد، تکینگی $R(x)$ به‌معنای این است که تقریب م۳ـ۷ در این نقاط ضعیف است. این نقاط ویژه را نقاط برگشت می‌نامند، زیرا در این نقاط است که ذرهٔ کلاسیک برمی‌گردد: ذرهٔ کلاسیک تنها در ناحیهٔ $E - V(x)$ می‌تواند حرکت کند. روش بررسی جوابها در نزدیکی نقاط برگشت تا اندازه‌ای فنی‌تر از آن است که در اینجا بیان کنیم. اساس کار این است که یک جواب در طرف چپ نقطهٔ برگشت [جایی که در آن $E > V(x)$] به‌صورت زیر داریم

$$\psi(x) = R\, e^{i \int_{x_1}^{x} dy \sqrt{(2m/\hbar^2)[E - V(y)]}} \qquad (م۳\text{ـ}۱۳)$$

و جوابی در طرف راست نقطهٔ برگشت [که در آن $E < V(x)$] داریم، و فرمولی لازم داریم که بین آنها درونیابی کند. در حوالی نقطهٔ برگشت می‌توان $\sqrt{(2m/\hbar^2)[E - V(x)]}$ را با یک خط راست در یک بازهٔ کوچک تقریب گرفت، و معادلهٔ شرودینگر را به‌طور دقیق حل کرد. چون این یک معادلهٔ مرتبهٔ دوم است دو ثابت قابل تنظیم خواهیم داشت که یکی از آنها با برازش جواب به م۳ـ۱۳ تعیین می‌شود و دیگری با برازش آن به

$$\psi(x) = R\, e^{-\int_{x_1}^{x} dy \sqrt{(2m/\hbar^2)[V(y) - E]}} \qquad (م۳\text{ـ}۱۴)$$

که جواب در طرف راست نقطهٔ برگشت است.[۱] وقتی x افزایش می‌یابد دامنهٔ جواب بالا کاهش

---

۱. برای تفصیل بیشتر می‌توانید به هر کتاب پیشرفته‌تری دربارهٔ مکانیک کوانتومی، از جمله دو کتاب زیر، مراجعه کنید.
پاول، ج ل و کریسمن، ب، مکانیک کوانتومی، ترجمهٔ پاشایی‌راد و سعادت، تهران مرکز نشر دانشگاهی، ۱۳۶۸؛
L. I Schiff, *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, New York, 1968.

www.arsanjan.blogfa.com

می‌یابد. تضعیف کل در نقطهٔ x_{II}، که $E \geq V(x)$ برقرار است، عبارت است از

$$\frac{\psi(x_{\mathrm{II}})}{\psi(x_{\mathrm{I}})} \simeq e^{-\int_{x_{\mathrm{I}}}^{x_{\mathrm{II}}} dy \sqrt{(2m/\hbar^2)[V(y)-E]}} \qquad (م۳_۱۵)$$

که دقیقاً جذر احتمال تراگسیل است که در فصل ۵ به‌دست آوردیم.

www.arsanjan.blogfa.com

مبحث ویژهٔ ۴

طول عمر، پهنای خط، و تشدید

در این بخش سه کار انجام می‌دهیم:

(الف) با استفاده از رهیافت کلی وایسکوف و ویگنر، روش نسبتاً دقیقتری برای بررسی آهنگهای گذار بیان می‌کنیم که نشان می‌دهد چگونه افت نمایی به‌وجود می‌آید.

(ب) نشان می‌دهیم که چگونه شکل لورنتسی برای پهنای خط به‌وجود می‌آید.

(ج) نشان می‌دهیم که دامنهٔ پراکندگی فوتون از اتم در حالت پایه، وقتی انرژی فوتون فرودی برابر با انرژی (جابه‌جا شده) مربوط به حالت برانگیخته است، به‌شدت قله‌دار می‌شود.

برای اینکه مسئله تا حد امکان ساده شود، اتمی را تنها با دو تراز، یکی حالت پایه با انرژی صفر و دیگری یک حالت برانگیخته با انرژی E، در نظر می‌گیریم. این دو حالت به میدان الکترومغناطیسی، که آن‌را نرده‌ای می‌گیریم، جفت می‌شوند، و در نتیجه هیچ بردار قطبشی ظاهر نمی‌شود. تنها یک زیرمجموعه از ویژه‌حالتهای H_0 را انتخاب می‌کنیم که متشکل است از حالت برانگیختهٔ ϕ_1 که برای آن

$$H_0\phi_1 = E\phi_1 \qquad (م۴-۱)$$

و حالت پایه به علاوهٔ یک فوتون، $\phi(\mathbf{k})$، که برای آن

$$H_0\phi(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k})\phi(\mathbf{k}) \qquad (م۴-۲)$$

و در بسط یک تابع اختیاری به این زیرمجموعه بسنده می‌کنیم. این کار مسلماً وقتی موجه است که جفت‌شدگی میان دو حالت ϕ_1 و $\phi(\mathbf{k})$ از طریق پتانسیل V، مانند جفت‌شدگی الکترومغناطیسی،

www.arsanjan.blogfa.com

کوچک باشد زیرا آنگاه تأثیر حالتهای دو فوتونی ... قابل چشمپوشی است. توجه کنید که حتی وقتی $\mathbf{k}$ به‌گونه‌ای است که انرژیهای $\varepsilon(\mathbf{k})$ و E با هم برابرند، داریم

$$\langle \phi_1 | \phi(\mathbf{k}) \rangle = 0 \qquad (م۴ـ۳)$$

این حالتها به این دلیل متعامدند که در یکی از آنها فوتون داریم و در دیگری نداریم، و نیز برای یکی از آنها اتم برانگیخته است و برای دیگری نیست.

جواب معادلهٔ

$$i\hbar \frac{d\psi(t)}{dt} = (H_0 + V)\psi(t) \qquad (م۴ـ۴)$$

را می‌توان برحسب مجموعهٔ کامل بسط داد:

$$\psi(t) = a(t)\phi_1 \, e^{-iEt/\hbar} + \int d^3\mathbf{k} b(\mathbf{k}, t)\phi(\mathbf{k}) e^{-i\varepsilon(\mathbf{k})t/\hbar} \qquad (م۴ـ۵)$$

با جاگذاری در م۴ـ۴، به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} & i\hbar \frac{da}{dt} e^{-iEt/\hbar}\phi_1 + Ea \, e^{-iEt/\hbar}\phi_1 \\ & \quad + i\hbar \int d^3\mathbf{k} \frac{db(\mathbf{k}, t)}{dt} e^{-i\varepsilon(\mathbf{k})t/\hbar}\phi(\mathbf{k}) + \int d^3\mathbf{k}\varepsilon(\mathbf{k}) b(\mathbf{k}, t) e^{-i\varepsilon(\mathbf{k})t/\hbar}\phi(\mathbf{k}) \\ & \quad = Ea(t)e^{-iEt/\hbar}\phi_1 + \int d^3\mathbf{k}\varepsilon(\mathbf{k}) b(\mathbf{k}, t) e^{-i\varepsilon(\mathbf{k})t/\hbar}\phi(\mathbf{k}) \\ & \quad + a(t)e^{iEt/\hbar} V\phi_1 + \int d^3\mathbf{k} b(\mathbf{k}, t) e^{-i\varepsilon(\mathbf{k})t/\hbar} V\phi(\mathbf{k}) \end{aligned}$$

حاصلضرب نرده‌ای با ϕ_1 را محاسبه می‌کنیم:

$$i\hbar \frac{da}{dt} = a(t)\langle \phi_1 | V | \phi_1 \rangle + \int d^3\mathbf{k} b(\mathbf{k}, t) e^{-i[\varepsilon(\mathbf{k}) - E]t/\hbar} \langle \phi_1 | V | \phi(\mathbf{k}) \rangle$$

چون V وقتی روی یک حالت عمل می‌کند تعداد فوتونها را بنابه فرض به‌اندازهٔ ۱ تغییر می‌دهد، باید $\langle \phi_1 | V | \phi_1 \rangle = 0$. با نمادنگاری

$$\begin{aligned} \varepsilon(\mathbf{k}) - E &= \hbar\omega(\mathbf{k}) \\ \langle \phi_1 | V | \phi(\mathbf{k}) \rangle &= M(\mathbf{k}) \rangle \end{aligned} \qquad (م۴ـ۶)$$

www.arsanjan.blogfa.com

معادله به‌صورت زیر درمی‌آید

$$i\hbar\frac{da(t)}{dt} = \int d^3\mathbf{k} b(\mathbf{k},t) e^{-i\omega(\mathbf{k})t} M(\mathbf{k}) \qquad (م۴ـ۷)$$

اگر ضرب نرده‌ای در $\phi(\mathbf{q})$ را انجام دهیم، و مجدداً با استفاده از شمارش تعداد فوتونها قرار دهیم $\langle\phi(\mathbf{q})|V|\phi(\mathbf{k})\rangle = 0$، با توجه به رابطهٔ بهنجارش

$$\langle\phi(\mathbf{q})|\phi(\mathbf{k})\rangle = \delta(\mathbf{k}-\mathbf{q}) \qquad (م۴ـ۸)$$

معادلهٔ زیر را به‌دست می‌آوریم

$$i\hbar\frac{db(\mathbf{q},t)}{dt} = a(t)\, e^{i\omega(\mathbf{q})t} M^*(\mathbf{q}) \qquad (م۴ـ۹)$$

چون اگر حالت برانگیخته در $t = 0$ اشغال شده باشد $b(\mathbf{k},0) = 0$، جواب این معادله عبارت است از

$$b(\mathbf{k},t) = \frac{1}{i\hbar} M^*(\mathbf{k}) \int_0^t dt' e^{i\omega(\mathbf{k})t'} a(t') \qquad (م۴ـ۱۰)$$

با جاگذاری در م۴ـ۷ به معادلهٔ زیر می‌رسیم

$$\frac{da(t)}{dt} = -\frac{1}{\hbar^2}\int d^3\mathbf{k}|M(\mathbf{k})|^2 e^{-i\omega(\mathbf{k})t}\int_0^t dt' a(t') e^{i\omega(\mathbf{k})t'} \qquad (م۴ـ۱۱)$$

اکنون فرض می‌کنیم جواب این معادله به‌ازای مقادیر بزرگ t به‌صورت زیر است

$$a(t) = a_0\, e^{-zt} \qquad (م۴ـ۱۲)$$

با جاگذاری در م۴ـ۱۱ به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} -ze^{-zt} &= -\frac{1}{\hbar^2}\int d^3\mathbf{k}|M(\mathbf{k})|^2 \frac{e^{-i\omega(\mathbf{k})t}}{i\omega(\mathbf{k})-z}(e^{i\omega(\mathbf{k})t}e^{-zt}-1) \\ &= -\frac{1}{\hbar^2}\int d^3\mathbf{k}|M(\mathbf{k})|^2 \frac{1}{i\omega(\mathbf{k})-z}(e^{-zt}-e^{-i\omega(\mathbf{k})t}) \end{aligned} \qquad (م۴ـ۱۳)$$

www.arsanjan.blogfa.com

جملهٔ دوم به‌ازای مقادیر بزرگ t صفر می‌شود، زیرا تابع زیر انتگرال حاصلضرب تابعی از $\mathbf{k}$ با تغییرات هموار و تابع کرانداری است که به‌سرعت تغییر می‌کند، و می‌توان نشان داد که انتگرال بنابه لم ریمان‌ـلبگ سریعتر از هر توان $1/t$ صفر می‌شود. بنابراین، آنچه باقی می‌ماند عبارت است از

$$z = \frac{1}{\hbar^2} \int d^3\mathbf{k} |M(\mathbf{k})|^2 \frac{1}{i\omega(\mathbf{k}) - z} \qquad (م۴ـ۱۴)$$

اکنون می‌نویسیم

$$z = \frac{\gamma}{2} + \frac{i\Delta}{\hbar} \qquad (م۴ـ۱۵)$$

و چون $|M(\mathbf{k})|^2$ کوچک‌اند، γ و $\Delta/\hbar$ نیزکوچک‌اند. با جاگذاری در م۴ـ۱۴ و حذف حاصلضرب کوچکتر $\Delta/\hbar$ و $|M(\mathbf{k})|^2$، به‌دست می‌آوریم

$$\frac{\gamma}{2} + \frac{i\Delta}{\hbar} = \frac{1}{\hbar^2} \int d^3\mathbf{k} |M(\mathbf{k})|^2 \frac{-i\omega(\mathbf{k}) + \gamma/2}{(\gamma/2)^2 + (\omega(\mathbf{k}) - \Delta/\hbar)^2} \qquad (م۴ـ۱۶)$$

با استفاده از رابطهٔ

$$\lim_{\lambda = 0^+} \frac{\lambda}{\sigma^2 + \lambda^2} = \pi\delta(\sigma) \qquad (م۴ـ۱۷)$$

معادلهٔ م۴ـ۱۶ به دو معادلهٔ زیر تفکیک می‌شود

$$\begin{aligned} \gamma &= \frac{2\pi}{\hbar} \int d^3\mathbf{k} |M(\mathbf{k})|^2 \delta(\hbar\omega(\mathbf{k}) - \Delta) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \int d^3\mathbf{k} |M(\mathbf{k}|^2 \delta(\varepsilon(\mathbf{k}) - (E + \Delta)) \end{aligned} \qquad (م۴ـ۱۸)$$

و

$$\begin{aligned} \Delta &= -\int d^3\mathbf{k} |M(\mathbf{k})|^2 \frac{1}{\hbar\omega(\mathbf{k}) - \Delta} \\ &= \int d^3\mathbf{k} |M(\mathbf{k})|^2 \frac{1}{E + \Delta - \epsilon(\mathbf{k})} \end{aligned} \qquad (م۴ـ۱۹)$$

در هر دو انتگرال، می‌توان Δ را در شناسهٔ تابع دلتا و در مخرج کسر، با توجه به‌دقت محاسبه، حذف کرد، اما آن‌را نگه می‌داریم تا بر این نکته تأکید کنیم که این $E + \Delta$ است که همه جا ظاهر

www.arsanjan.blogfa.com

می‌شود، یعنی انرژی حالت برانگیخته به اندازهٔ Δ جابه‌جا شده است. بدین‌ترتیب، ضریب ϕ_1 در $\psi(t)$، با شرط اولیهٔ

$$a(0) = a_0 = 1 \qquad (م۴-۲۰)$$

عبارت است از

$$a(t) = e^{-\gamma t/2} e^{-i(E+\Delta)t/\hbar} \qquad (م۴-۲۱)$$

و احتمال یافتن $\psi(t)$ در حالت اولیهٔ ϕ_1 پس از زمان (طولانی) t برابر است با

$$|a(t)|^2 = e^{-\gamma t} \qquad (م۴-۲۲)$$

از م۴-۱۸ ملاحظه می‌کنیم که γ آهنگ افت است که در نظریهٔ اختلال محاسبه می‌شود. همچنین ضریب فاز، چنانکه مقایسه با ۱۶-۱۶ نشان می‌دهد، متضمن انرژی جابه‌جاشده به اندازهٔ جابه‌جایی انرژی اختلال مرتبهٔ دوم است. تنها تفاوت آن است که حالتهای میانی که روی آنها جمع زده می‌شود در اینجا یک پیوستار تشکیل می‌دهند. چون مخرج کسر در م۴-۱۰ می‌تواند صفر شود، باید از فرمول زیر استفاده کنیم

$$i\Delta/\hbar = \lim_{\lambda \to 0} \frac{1}{\hbar^2} \int d^3\mathbf{k} |M(\mathbf{k}|^2 \frac{-i\omega(\mathbf{k})}{\lambda^2 + (\omega(\mathbf{k}) - \Delta/\hbar)^2} \qquad (م۴-۲۳)$$

کمیت قابل توجه دیگر احتمال تحول حالت $\psi(t)$ به $\phi(\mathbf{k})$ در $t = \infty$ است. این احتمال برابر است با $|b(\mathbf{k}, \infty)|^2$، که در آن بنابه م۴-۱۰ و م۴-۱۲ داریم

$$\begin{aligned} b(\mathbf{k}, \infty) &= \frac{1}{i\hbar} M^*(\mathbf{k}) \int_0^\infty dt' \; e^{-[z - i\omega(\mathbf{k})]t'} \\ &= \frac{M^*(\mathbf{k})}{i\hbar} \frac{1}{z - \omega(\mathbf{k})} \end{aligned}$$

بنابراین،

$$b(\mathbf{k}, \infty) = \frac{M^*(\mathbf{k})}{\varepsilon(\mathbf{k}) - E - \int d^3\mathbf{k}' \frac{|M(\mathbf{k}')|^2}{E - \varepsilon(\mathbf{k}')} + i\hbar\gamma/2} \qquad (م۴-۲۴)$$

www.arsanjan.blogfa.com

و مجذور قدرمطلق آن عبارت است از

$$|b(\mathbf{k},\infty)|^2 = \frac{|M(\mathbf{k})|^2}{[\varepsilon(\mathbf{k}) - E - \Delta]^2 + (\hbar\gamma/2)^2} \qquad (۴م\text{-}۲۵)$$

که شکل لورنتسی پهنای خط را می‌دهد: انرژی فوتون حول انرژی جابه‌جاشدهٔ تراز برانگیخته، با پهنایی که با $\hbar\gamma/2$ توصیف می‌شود، متمرکز شده است.

همین شکل در مسئلهٔ پراکندگی ظاهر می‌شود. پراکندگی یک "فوتون" با تکانهٔ $\mathbf{k}_i$ را از اتمی در حالت پایه در نظر بگیرید. حالت دستگاه باز هم با م۴ـ۱، م۴ـ۲، م۴ـ۷ و م۴ـ۹ توصیف می‌شود، با این استثنا که در ابتدا، که در اینجا به‌معنای در $t = -\infty$ است، حالت با $\phi(\mathbf{k}_i)$ مشخص می‌شود، و از این‌رو

$$b(\mathbf{q},t) = \delta(\mathbf{q} - \mathbf{k}_i) \qquad t = -\infty \text{ در} \qquad (۴م\text{-}۲۶)$$

بنابراین، با انتگرال گرفتن از م۴ـ۹ به‌دست می‌آوریم

$$b(\mathbf{q},t) = \delta(\mathbf{q} - \mathbf{k}_i) + \frac{1}{i\hbar} M^*(\mathbf{q}) \int_{-\infty}^{t} dt' a(t') e^{i\omega(\mathbf{q})t'} \qquad (۴م\text{-}۲۷)$$

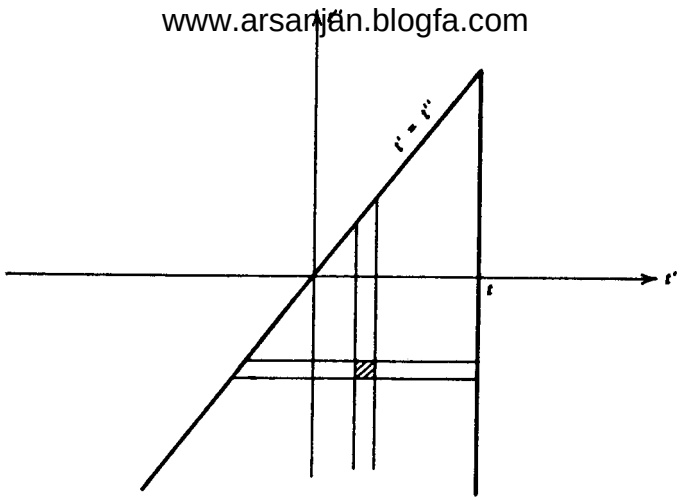
اکنون باید دامنهٔ گذار به یک حالت نهایی را تعیین کنیم که در آن فوتون در $t = +\infty$ دارای تکانهٔ $\mathbf{k}_f$ است. با استفاده از معادلهٔ بالا داریم

$$\begin{aligned} \langle \phi(\mathbf{k}_f) | \psi(+\infty) \rangle &= b(\mathbf{k}_{f'} + \infty) \\ &= \delta(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i) - \frac{i}{\hbar} M^*(\mathbf{k}_f) \int_{-\infty}^{\infty} dt' a(t') e^{i\omega_f t'} \qquad (۴م\text{-}۲۸) \\ (\omega_f &\equiv \omega(\mathbf{k}_f)) \end{aligned}$$

با جاگذاری م۴ـ۲۷ در م۴ـ۷ به معادلهٔ زیر می‌رسیم

$$\frac{da(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} e^{-i\omega_i t} M(\mathbf{k}_i) - \frac{1}{\hbar^2} \int d^3\mathbf{k} |M(\mathbf{k})|^2 e^{-i\omega(\mathbf{k})t} \int_{-\infty}^{t} dt' a(t') e^{i\omega(\mathbf{k})t'} \qquad (۴م\text{-}۲۹)$$

www.arsanjan.blogfa.com



شکل م۴ـ۱ انتگرال در معادلهٔ م۴ـ۳۰ را می‌توان یا به‌صورت "مجموع" نوارهای قائم، مانند این معادله، یا به‌صورت مجموع نوارهای افقی، مانند معادلهٔ م۴ـ۳۲، نوشت. از همین تغییر ترتیب در م۴ـ۳۳ استفاده شده است بجز اینکه خط قائم در t'' به $+\infty$ منتقل شده است.

از این معادله می‌توان انتگرال گرفت، و با توجه به اینکه $a(-\infty) = 0$ به‌دست می‌آوریم

$$a(t) = \frac{M(\mathbf{k}_i)}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt' e^{-i\omega_i t'} - \frac{1}{\hbar^2}\int d^3\mathbf{k}|M(\mathbf{k})|^2 \int_{-\infty}^{t} dt' e^{-i\omega(\mathbf{k})t'} \int_{-\infty}^{t'} dt'' a(t'') e^{i\omega(\mathbf{k})t''} \qquad (م۴ـ۳۰)$$

اما انتگرال $\int_{-\infty}^{t} dt' e^{-i\omega_i t'}$ خوش‌تعریف نیست. روش متعارف این است که آن‌را به‌صورت زیر بنویسیم

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \int_{-\infty}^{t} dt' e^{-i(\omega_i + i\varepsilon)t'} = \lim_{\varepsilon \to 0} i\frac{e^{-i(\omega_i + i\varepsilon)t}}{\omega_i + i\varepsilon} \qquad (م۴ـ۳۱)$$

استفاده از ضریب همگرایی، که می‌توان بعداً آن‌را به صورت مناسبی صفر کرد، تا اندازه‌ای شبیه به در نظر گرفتن پتانسیل کولنی به‌عنوان حد پتانسیل کولنی استتار شده است، که در فصل ۲۳ به آن اشاره شد. اکنون با توجه به شکل م۴ـ۱ می‌توان دید که

www.arsanjan.blogfa.com

$$\int_{-\infty}^{t} dt' e^{-i\omega(\mathbf{k})t'} \int_{-\infty}^{t'} dt'' a(t'') e^{i\omega(\mathbf{k})t''} = \int_{-\infty}^{t} dt'' a(t'') e^{i\omega(\mathbf{k})t''} \int_{t''}^{t} dt' e^{-i\omega(\mathbf{k})t'}$$

$$= \frac{i}{\omega(\mathbf{k})} \int_{-\infty}^{t} dt'' a(t'')[e^{-i\omega(\mathbf{k})(t-t'')} - ۱]$$

و در نتیجه

$$a(t) = \frac{M(\mathbf{k}_i)e^{-i\omega_i t}}{h(\omega_i + i\varepsilon)} - \frac{i}{\hbar^۲} \int d^۳\mathbf{k} \frac{|M(\mathbf{k})|^۲}{\omega(\mathbf{k})} \int_{-\infty}^{t} dt'' a(t'')[e^{-i\omega(\mathbf{k})(t-t'')} - ۱] \qquad (م۴\text{ـ}۳۲)$$

بنا به م۴ـ۲۸، کمیت حائز اهمیت برای پراکندگی در جهتی غیر از جهت جلو (که در نتیجه می‌توان از جملهٔ اول صرفنظر کرد) عبارت است از

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt a(t) e^{i\omega_f t} = \frac{M(\mathbf{k}_i)}{\hbar(\omega_i + i\varepsilon)} \int_{-\infty}^{\infty} dt\ e^{i(\omega_f - \omega_i)t}$$

$$-\frac{i}{\hbar^۲} \int d^۳\mathbf{k} \frac{|M(\mathbf{k})|^۲}{\omega(\mathbf{k})} \int_{-\infty}^{\infty} dt\ e^{i\omega_f t} \int_{-\infty}^{t} dt'' a(t'')[e^{-i\omega(\mathbf{k})(t-t'')} - ۱]$$

$$= \frac{۲\pi M(\mathbf{k}_i)}{\hbar(\omega_i + i\varepsilon)} \delta(\omega_f - \omega_i) \qquad (م۴\text{ـ}۳۳)$$

$$-\frac{i}{\hbar^۲} \int d^۳\mathbf{k} \frac{|M(\mathbf{k})|^۲}{\omega(\mathbf{k})} \int_{-\infty}^{\infty} dt'' a(t'') \int_{t''}^{\infty} dt\ \{e^{i\omega(\mathbf{k})t''} e^{i[\omega_f - \omega(\mathbf{k})t} - e^{i\omega_f t}\}$$

که در آن در سطر آخر باز هم انتگرال را با استفاده از شکل م۴ـ۱ نوشته‌ایم. انتگرال‌گیری روی t را باز هم می‌توان با استفاده از روش ضریب همگرایی انجام داد، و در نتیجه م۴ـ۳۳ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt a(t) e^{i\omega_f t} = \frac{۲\pi M(\mathbf{k}_i)\delta(\omega_f - \omega_i)}{\hbar(\omega_i + i\varepsilon)} + \frac{۱}{\hbar^۲} \int d^۳\mathbf{k} \frac{|M(\mathbf{k})|^۲}{\omega(\mathbf{k})} \int_{-\infty}^{\infty} dt'' a(t'') e^{i\omega_f t''}$$

$$\times \left[\frac{۱}{\omega_f - \omega(\mathbf{k}) + i\varepsilon} - \frac{۱}{\omega_f + i\varepsilon}\right]$$

www.arsanjan.blogfa.com

که در واقع معادله‌ای برای یک مجهول است. از حل این معادله داریم

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt\ a(t)e^{i\omega_f t} = \frac{2\pi M(\mathbf{k}_i)\delta(\omega_f - \omega_i)}{\hbar(\omega_i + i\varepsilon)} \times \frac{1}{1 - \frac{1}{\hbar^2\omega_f}\int d^3\mathbf{k}\frac{|M(\mathbf{k})|^2}{\omega_f - \omega(\mathbf{k}) + i\varepsilon}} \qquad (م۴-۳۴)$$

بنابراین، برای جهت غیر جلو به‌دست می‌آوریم

$$b(\mathbf{k}_f,\infty) = -\frac{i}{\hbar}M^*(\mathbf{k}_f)\cdot 2\pi M(\mathbf{k}_i)\ \delta(\omega_f - \omega_i) \times \frac{1}{\hbar\omega_i + i\varepsilon - \int d^3\mathbf{k}\frac{|M(\mathbf{k})|^2}{\hbar\omega_f - \hbar\omega(\mathbf{k}) + i\varepsilon}}$$

$$= \frac{-2\pi i\,\delta(\hbar\omega_f - \hbar\omega_i)M(\mathbf{k}_i)M^*(\mathbf{k})_f}{\varepsilon(\mathbf{k}_i) - E - \int d^3\mathbf{k}\frac{|M(\mathbf{k}|^2}{\varepsilon(\mathbf{k}_i) - \varepsilon(\mathbf{k})} + i\pi\int d^3\mathbf{k}|M(\mathbf{k})|^2\delta[\varepsilon(\mathbf{k}_i) - \varepsilon(\mathbf{k})]} \qquad (م۴-۳۵)$$

وقتی انرژی فرودی ε_i (مساوی با انرژی نهایی ε_f) نزدیک به انرژی حالت برانگیختهٔ اتم است، که مانند م۴-۲۵ به $E + \Delta E$ جابه‌جا شده است، دامنه قلهٔ تیزی پیدا می‌کند. این نتیجه تفسیرهای آخر فصل ۱۸ را تأیید می‌کند.

ثابتهای فیزیکی[۱]

www.arsanjan.blogfa.com

N_0 (عدد آووگادرو)	$۶٫۰۲۲۱۳۶۷(۳۶) \times ۱۰^{۲۳}\text{mol}^{-۱}$
c (سرعت نور، تعریف)	$۲٫۹۹۷۹۲۴۵۸ \times ۱۰^{۱۰}\text{cms}^{-۱}$
e (بار الکترون)	$۱٫۶۰۲۱۷۷۳۳(۴۹) \times ۱۰^{-۱۹}\text{C}$
	$۴٫۸۰۶۵۳۱۹۹(۱۵) \times ۱۰^{-۱۰}\text{esu}$
۱MeV	$۱٫۶۰۲۱۷۷۳۳(۴۹) \times ۱۰^{-۶}\text{erg}$
$\hbar$ (ثابت پلانک بخش بر ۲π)	$۱٫۰۵۴۵۷۲۶۶(۶۳) \times ۱۰^{-۲۷}\text{erg_s}$
	$۶٫۵۸۲۱۲۲۰(۲۰) \times ۱۰^{-۲۲}\text{MeV_s}$
α (ثابت ساختار ریز $e^۲/\hbar c$)	$۱/۱۳۷٫۰۳۵۹۸۹۵(۶۱)$
k (ثابت بولتزمن)	$۱٫۳۸۰۶۵۸(۱۲) \times ۱۰^{-۱۶}\text{erg_K}^{-۱}$
m_e (جرم الکترون)	$۹٫۱۰۹۳۸۹۷(۵۴) \times ۱۰^{-۲۸}\text{g}$
	$۰٫۵۱۰۹۹۹۰۶(۱۵)\text{MeV}/c^۲$
m_p (جرم پروتون)	$۱٫۶۷۲۶۲۳۱(۱۰) \times ۱۰^{-۲۴}\text{g}$
	$۹۳۸٫۲۷۲۳۱(۲۸)\text{MeV}/c^۲$
m_n (جرم نوترون)	$۱٫۶۷۴۹۲۸۶(۱) \times ۱۰^{-۲۴}\text{g}$
	$۹۳۹٫۵۶۵۶۳(۲۸)\text{MeV}/c^۲$
$(m(C^{۱۲})/۱۲)۱\text{amu}$	$۱٫۶۶۰۵۴۰۲(۱۰) \times ۱۰^{-۲۴}\text{g}$
	$۹۳۱٫۴۹۴۳۲(۲۸)\text{MeV}/c^۲$
$(\hbar/m_e c\alpha)a_0$	$۰٫۵۲۹۱۷۷۲۴۹(۲۴) \times ۱۰^{-۸}\text{cm}$
$(m_e c^۲\alpha^۲/۲)R_\infty$	$۱۳٫۶۰۵۶۹۸(۴۰)\text{eV}$
G (ثابت گرانش)	$۶٫۶۷۲۵۹(۸۵) \times ۱۰^{-۸}\text{cm}^۳\text{g}^{-۱}\text{s}^{-۲}$
μ_B (مگنتون بور $e\hbar/۲m_e c$)	$۰٫۵۷۸۸۳۸۲۶۳(۵۲) \times ۱۰^{-۱۴}\text{MeV G}^{-۱}$

۱. اعداد از مقالهٔ بسیار جالب زیر اقتباس شده‌اند:

E R Cohen and B N Taylor, *Phys Today*, BG 9-14 (August 1994).

www.arsanjan.blogfa.com

مراجع[1]

G Baym, *Lectures on Quantum Mechanics*, W A Benjamin, New York, 1969.

کتابی است بسیار جذاب، با تعادل مناسبی بین صورتبندی، استدلالهای شهودی و کاربرد. این کتاب را باید پیشرفته در نظر گرفت، و قابل فهم برای دانشجویی که مطالب کتاب حاضر را فراگرفته است.[1]

H A Bethe and R W Jackiw, *Intermediate Quantum Mechanics* (2nd edition), W A Benjamin, New York, 1968.

این کتاب حاوی بحثهای مفصلی دربارهٔ روشهای محاسباتی قابل کاربرد در نظریهٔ ساختار اتمی، شکافتگیهای چند تایی، اثر فوتوالکتریک و برخوردهای اتمی است. بسیاری از مطالب در کتابهای درسی دیگر یافت نمی‌شوند، و از این‌رو یک کتاب درسی پیشرفته و همچنین یک مرجع جامع است.

H A Bethe and E E Salpeter, *Quantum Mechanics of One -and Two-Electron Atoms*, Springer-Verlag, Berlin/ New York, 1957.

این تجدید چاپ مقالهٔ مؤلفان در *Handbuch der Physik* یک بررسی دقیق، مفصل و قاطع از مسئلهٔ مورد نظر است. این کتاب دربارهٔ اتمها است نه مکانیک کوانتومی، و سطح آن بالاست. این مقاله یک مرجع عالی است.

D Bohm, *Quantum Theory*, Dover Publ, New York, 1989.

این کتابی است در سطح کتاب حاضر، که با سبکی پراکنده نوشته شده است. مؤلف توجه بسیاری به اصول نظریهٔ کوانتومی دارد و یک بحث عالی دربارهٔ نظریهٔ کوانتومی فرایند اندازه‌گیری ارائه می‌کند. چند کاربرد بیان شده‌اند و تعداد مسائل اندک است.

۱. کتابهای بسیاری در (بارهٔ) مکانیک کوانتومی نوشته شده‌اند. بعضی از آنها را مطالعه کرده‌ام، بعضی را خوانده‌ام، چندتایی را نگاه کرده‌ام، و احتمالاً تعدادی نیز از نظرم دور مانده‌اند. سیاهه‌ای که در اینجا ارائه کرده‌ام جامع نیست، و اگر اسمی از کتابی برده نشده است به معنای انتقاد از آن نیست. مخصوصاً، کتابهای شیمی کوانتومی معرفی نشده‌اند.

www.arsanjan.blogfa.com

S Borowitz, *Fundamentals of Quantum Mechanics*, W A Benjamin, New York, 1967.

این کتابی است که بسیار خوب نوشته شده است و حدود نیمی از آن به نظریهٔ امواج و مکانیک کلاسیک اختصاص یافته است. سطح آن قابل مقایسه با کتاب حاضر است.

J J Brehm and W J Mullin, *Introduction to the Structure of Matter*, John Wiley & Sons, New York, 1989.

این کتابی است پیشرفته و فراگیر که قسمت اعظم فیزیک نوین را با سبکی بسیار خواندنی دربر می‌گیرد. یک مرجع عالی برای هر کس که خواهان تفصیل کیفی‌تری برای مباحثی است که در کتاب حاضر شتابزده به آنها اشاره شده است.

E U Condon and G H Shortley, *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge University Press, Cambridge, England, 1959.

این یک مرجع بسیار مفصل دربارهٔ تمام جوانب طیفهای اتمی است، اگرچه از روشهای جدید مبتنی بر نظریهٔ گروه استفاده نمی‌کند. این کتاب بسیار پیشرفته است، و از این‌رو نارساییهای آن در توسعهٔ روشها برای هیچکس بجز متخصصان اهمیتی ندارد. برای دانشجو بسیار مفید است.

S Brandt and H D Dahmen, *Quantum Mechanics on the Personal Computer* (3rd edition), Springer-Verlag, New York, 1994.

این کتاب که در آن کامپیوترهای شخصی ابزار اصلی آموزش مکانیک کوانتومی است تنها کتابی است از این نوع که من دیده‌ام. چون کامپیوترهای شخصی روز به روز متداولتر می‌شوند و دانشجویان به استفاده از آنها بیشتر عادت می‌کنند، بهره گرفتن از آنها برای یافتن جوابهای معادلهٔ شرودینگر امری اجتناب‌ناپذیر است.

C Cohen-Tannoudji, B Diu, and F Laloe, *Quantum Mechanics*, John Wiley & Sons, New York, 1977.

این کتابی است دانشنامه مانند با بیشتر از هزار صفحه، که در آن بررسی مفصلی از بسیاری از جوانب فیزیک اتمی یافت می‌شود. سطح ریاضی آن تا حد زیادی بالاتر از کتاب حاضر است.

R H Dicke and J P Wittke, *Introduction to Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, Reading, Mass, 1960.

از این کتاب بسیار لذت برده‌ام. سطح آن قابل مقایسه با کتاب حاضر است، و چند مبحث که در اینجا بیان نشده‌اند، مخصوصاً آمار کوانتومی، را بررسی می‌کند. مسائل آن عالی هستند.

www.arsanjan.blogfa.com

P A M Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics* (4th edition), Oxford University Press (Clarendon), Oxford, 1958.

کتابی است بس عالی از یکی از پدیدآورندگان اصلی مکانیک کوانتومی. دانشجویی که مطالب کتاب حاضر را مطالعه کرده است مشکلی با کتاب دیراک نخواهد داشت، و اگر جداً خواهان مهارت در مکانیک کوانتومی باشد باید دیر یا زود به مطالعهٔ آن بپردازد.

R P Feynman and A R Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York, 1965.

در سال ۱۹۴۸، ریچارد فیلیپس فاینمن فرمولبندی متفاوتی برای مکانیک کوانتومی ارائه کرد. در این کتاب هم‌ارزی این فرمولبندی با نظریهٔ متعارف نشان داده شده است، و در چند محاسبه از بیان "انتگرال مسیر" برای دامنهٔ کلی استفاده شده است. انتخاب مطالب بسیار جالب توجه است. دیدگاه کتاب با دیدگاه کتاب حاضر تفاوت دارد، و از این‌رو این کتاب نسبتاً پیشرفته‌تر می‌تواند یک مکمل عالی برای کتاب حاضر باشد.

R P Feynman, R B Leighton, and M Sands, *The Faynman Lectures on Physics*, Vol 3, *Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, Reading, Mass, 1965.

در این مقدمه بر مکانیک کوانتومی، فاینمن انتگرال مسیر را کنار گذاشته است و موضوع را از دیدگاه بردارهای حالت مطرح می‌کند. تعداد زیادی مثال جذاب با حداقل ابزار ریاضی بررسی شده‌اند. یک مکمل عالی که تنها کمبود آن مسائل آخر فصل است.

K Gottfried, *Quantum Mechanics*, Vol 1, *Fundamentals*, W A Benjamin, New York, 1966.

این یک کتاب بسیار پیشرفته است که وجه تمایزش دقتی است که با آن مباحث گوناگون بررسی شده‌اند. بررسی فرایند اندازه‌گیری و اصول ناوردایی عالی است. دانشجویی که به مطالب کتاب حاضر احاطه یافته است باید بتواند کتاب گاتفرید را بخواند، به شرط اینکه ریاضیات مورد نیاز را بداند.

D Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N J 1995.

این کتاب جذاب بسیار خوب نوشته شده است و تقریباً در سطح دیکی و ویتکه یا ساکسون است، با انتخاب خوبی از مباحث، از جمله بحثی دربارهٔ فاز هندسی.

W Heisenberg, *The Physical Principles of the Quantum Theory*, Dover, New York, 1930.

www.arsanjan.blogfa.com

این تجدید چاپ سخنرانیهای هایزنبرگ در سال ۱۹۳۰ درباره مبنای فیزیکی نظریهٔ کوانتومی هنوز هم خواندنی است. بحث روابط عدم قطعیت مخصوصاً مفید است.

H A Kramers, *Quantum Mechanics*, Interscience, New York, 1957.

این کتابی است از یکی از پایه‌گذاران موضوع که بهترین قسمتهای آن بحث اسپین و درآمدی بر نظریهٔ کوانتومی نسبیتی است، که هر دو نسبتاً پیشرفته‌اند. دانشجویی که مشکلی با مکانیک کوانتومی ندارد پراکنده‌خوانی این کتاب را لذت‌بخش و آموزنده خواهد یافت

L D Landau and E M Lifshitz, *Quantum Mechanics (Nonrelativistic Theory)* (2nd edition), Addison-Wesley, Reading, Mass, 1965.

این کتاب لانداؤ و لیف‌شیتز کتابی از یک دورهٔ بس عالی است که تمام فیزیک نظری را در بر می‌گیرد، و به‌سختی می‌توان گفت که یک کتاب درسی برای دانشجویان است مگر پیشرفته‌ترین آنها. اما هر دانشجویی که به سطح عالی رسید در این کتاب چیزهای مفید زیادی خواهد یافت. دانشجو از لحاظ ریاضی با مشکلی روبه‌رو نخواهد شد.

Richard L Liboff, *Introductory Quantum Mechanics*, Holden-Day, San Francisco, 1980.

این کتابی است بسیار جذاب که تقریباً در سطح ریاضی یکسانی با کتاب حاضر نوشته شده است، و بسیاری از مطالب دوسوم اول کتاب حاضر را با تفصیل بیشتری در برمی‌گیرد. این هم یک مرجع عالی است.

Harry J Lipkin, *Quantum Mechanics –New Approaches to Selected Topics*, North- Holland, Amsterdam, 1973.

این کتاب به تعدادی از مباحث پیشرفته در کاربرد مکانیک کوانتومی با بیانی ساده پرداخته است. فیزیک همیشه مهمترین قسمت بحث است، و دانشجویی که بر کتاب حاضر مسلط است از آن لذت و بهرهٔ فراوانی خواهد برد.

A Messiah, *Quantum Mechanics* (in 2 volumes), John Wiley & Sons, New York, 1968.

این کتاب پوشش کاملی از نظریهٔ کوانتومی، از بررسی پتانسیلهای یک‌بعدی تا کوانتش میدان الکترومغناطیسی و معادلهٔ موج نسبیتی دیراک، است. کتابی است پیشرفته، و از لحاظ پیچیدگی ریاضی در حد دانشجویان کارشناسی ارشد است. این کتاب فوق‌العاده با ارزش است.

E Merzbacher, *Quantum Mechanics* (3rd edition), John Wiley & Sons, New York, 1998.

www.arsanjan.blogfa.com

این کتاب همراه با کتاب شیف، به‌حق، کتاب درسی متعارف برای سال اول کارشناسی ارشد است. گسترهٔ کامل مفاهیم و پدیده‌ها با ایجاز و سلیقه بررسی شده است، و برای دانشجویی که مطالب کتاب حاضر را مطالعه کرده است قابل استفاده است.

R Omnes, *The Interpretation of Quantum Mechanics*, Princeton University Press, Princeton, N J, 1994.

یک کتاب مهم که به کارهای اخیر در گسترش تعبیر متعارف مکانیک کوانتومی می‌پردازد.

D Park, *Introduction to the Quantum Theory*, (3rd edition)McGraw-Hill, New York, 1984.

این کتاب جذاب در سطح کتاب حاضر نوشته شده است. از میان مباحث مورد بررسی، موضوع آمار کوانتومی است، که کتاب حاضر فاقد آن است، و با روشنی ارائه شده است.

W Pauli, *Die Allgemeinen Prinzipien der Wellenmechanik Handbuch der Physik*, Vol 5/1, Springer-Verlag, Berlin/New York, 1958.

دانشجوی پیشرفته‌ای که آلمانی می‌داند در این تجدید چاپ مقالهٔ پاؤلی در سال ۱۹۳۰ بحث قاطع و فشرده‌ای از مکانیک کوانتومی خواهد یافت. هیچ کاربردی ذکر نشده است. اما تمام مطالب مهم در آن دیده می‌شود.

P J E Peebles, *Quantum Mechanics*, Princeton University Press, Princeton, N J, 1992.

این کتاب درسی است که با قلمی شیوا در سطح کارشناسی نوشته شده است. تفاوت آن با کتابهای دیگر در این سطح (بجز کتاب بوهم) بحث مفصلی است دربارهٔ اینکه فرایند اندازه‌گیری در مکانیک کوانتومی واقعاً چه معنایی دارد.

A B Pippard, *The Physics of Vibration*, Cambridge University Press, Cambridge, England, 1978.

این کتاب تمام انواع نوسانگرها، کلاسیک و مکانیک کوانتومی، را دربرمی‌گیرد. به‌معنای متداول، کتاب درسی نیست، اما خواندن آن لذت‌بخش است.

J L Powell and B Crasemann, *Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, Reading Mass, 1961.

قوت این کتاب در بررسی موشکافانهٔ تمام جزئیات ریاضی مکانیک موجی و مکانیک ماتریسی است. احتمالاً تمام جنبه‌های ریاضی موضوعاتی که در کتاب حاضر نادیده گرفته شده‌اند در این کتاب یافت می‌شوند. حاوی بحث خوبی دربارهٔ تقریب WKB و خواص عمومی معادلات

www.arsanjani.blogfa.com

دیفرانسیل مرتبهٔ دوم است. تعداد مسائل آن بیشتر از تعداد مسائل [illegible] است.

M E Rose, *Elementary Theory of Angular Momentum*, John Wiley & Sons, New York, 1937.

بررسی پیشرفته‌ای از تکانهٔ زاویه‌ای و کاربردهای فراوان در فیزیک اتمی و هسته‌ای.

J J Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, (S. F. Editor), Addison-Wesley, Reading, Mass, 1994.

این کتاب عالی را ساکورایی فقید در سطح نسبتاً پیشرفته‌تری از کتاب حاضر، مانند کتابهای مرزباخر و شیف، نوشته است. این کتاب درسی سال اول کارشناسی ارشد با انتخاب مباحثی که طبعاً به مکانیک کوانتومی پیشرفتهٔ مورد علاقهٔ فیزیکدانهای ذرات بنیادی کشیده می‌شود سبک نوینی دارد. کتاب حاوی مجموعه‌ای عالی از مسائل است.

D S Saxon, *Elementary Quantum Mechanics*, Holden- Day, San Francisco, 1968.

این کتاب در سطح کتاب حاضر و مرجع مفیدی است، زیرا انتخاب مباحث تنها کمی تفاوت دارد، و همچنین تأکید و انتخاب کاربردها. کتاب حاوی مجموعه‌ای عالی از مسائل است.

L I Schiff, *Quantum Mechanics* (3rd edition), McGraw-Hill, New York, 1968.

این یکی از کتابهای درسی متعارف برای سال اول کارشناسی ارشد است. شاید کمی بیش از حد فشرده باشد، و از این‌رو برای دانشجویی که آمادگی کامل دارد از همه مناسبتر است. پیچیدگی ریاضی آن از سطح کتاب حاضر بالاتر است.

F Schwabl, *Quantum Mechanics*, Springer-Verlag, New York, 1992.

این یک کتاب پیشرفته‌تر با انتخاب جالبی از مباحث است.

R Shankar, *Principles of Quantum Mechanics*, Plenum Press, New York, 1980.

این کتابی است پیچیده‌تر و از لحاظ ریاضی پیشرفته‌تر از کتاب حاضر، که حاوی بررسی جانشینی برای بعضی از مباحث این کتاب است، و مرجع خوبی است.

M P Silverman, *And Yet it Moves; Strange Systems and Subtle Questions in Physics*, Cambridge University Press, New York, 1993.

www.arsanjan.blogfa.com

این کتاب به بررسی کیفی مباحثی می‌پردازد که اصول اساسی نظریهٔ کوانتومی را تشکیل می‌دهند. خواندن این کتاب برای دانشجویی که قسمت بیشتر کتاب حاضر را خوانده باشد کاملاً قابل درک و سرگرم‌کننده است.

www.arsanjan.blogfa.com

فهرست راهنما

آزمایش
~ پراش دیویسون-گرمر ۲۰، ۲۱
~ پراش نوترون ۲۱
~ دوشکافی ۲۹، ۴۵
~ ذهنی ۲۹
آستانهٔ پراکندگی ۵۱۲
آمار
~ بوز-اینشتین ۱۹۶
~ فرمی-دیراک ۱۹۶
آهنگ افت ۵۷۷

اتم
~ بور ۲۲، ۲۸
~ دوترازی در میدان الکتریکی ۴۷۸
~ هلیم ۳۷۴
اثرات اصل طرد در سه ~ ۳۷۷
~ در اثر دافعهٔ الکترون-الکترون ۳۷۸
~ در اورتوهلیم (سه‌تایی) و پاراهلیم (تکتایی) ۳۸۵
~ در برهم‌کنش تبادلی ۳۸۱، ۳۸۲
~ در جابه‌جایی تا مرتبهٔ اول ۳۷۸
~ در حالت پایه ۳۸۸
~ هیدروژن ۲۶۰
الگوی بور در ~ ۲۴، ۲۵
~ در اثرات انرژی جنبشی نسبیتی ۳۵۹
~ در اثرات جرم کاهیده ۳۷۰
~ در جفت‌شدگی اسپین-مدار ۳۵۹
طیف انرژی ~ ۲۶۱
مدار دایره‌ای در نظریهٔ کوانتومی ~ ۲۶۸
معادلهٔ شعاعی ~ ۲۶۰
واگنی طیف ~ ۲۶۴

اثر
~ آهارانوف-بوهم ۲۹۴، ۲۹۷
~ اشتارک ۳۴۷
~ برای حالتهای $n = 2$ ۳۵۰
~ در تکانهٔ دوقطبی دائمی ۳۴۸
~ در دلیل وجود جملهٔ دوم ۳۴۸
قطبش‌پذیری ~ ۳۵۰
~ اصل طرد ۲۰۷
~ انرژی جنبشی نسبیتی ۳۵۹
~ بهنجار زیمان ۲۸۲
~ تبادلی در هلیم ۳۸۲، ۳۸۳
~ حرکت تقدیمی و توماس ۳۶۰
~ رامسائر و تاونزند ۱۰۰
~ فوتوالکتریک ۱۵

www.arsanjan.blogfa.com

عامل زاویه‌ای ~ ۵۳۴
~ کامپتون ۱۷
~ در فرمول کلاین-نیشینا ۵۳۷
طول‌موج ~ ۲۰
~ کوانتومی هال ۲۹۱
~ مایسنر ۲۹۵
~ موسباؤر ۴۸۶
~ برای استفاده در انتقال به سرخ گرانشی ۴۹۱
~ نابهنجار زیمان ۳۶۴
احتمال
~ تراگسیل ۵۷۲
~ گذار ۴۳۸
اختلال واگنی برای اثر اشتارک خطی ۳۵۰
ارتعاش
~ مولکولها ۴۲۹
~ هسته‌ها در مولکولها ۴۲۹
اسپین
~ تکتایی ۳۲۶
~ سه‌تایی ۳۲۶
~ و قاعده‌های شدت ۴۵۷
اسپینورها ۳۱۰
استتار بار هسته‌ای ۳۸۱
اصل
~ بسط و تعبیر ۷۷
ضریب ~ ۷۹، ۱۴۷، ۱۴۸
~ پاؤلی ۱۹۵، ۱۹۶
~ در حالتهای دو اسپینور ۳۳۶، ۳۳۷، ۳۳۸
~ تشکیل ۳۹۹
~ تطابق ۲۸
~ بور ۲۸
~ در آهنگ واپاشی ۳۴
~ عدم قطعیت هایزنبرگ ۳۰
~ مربوط به چگالی دوقطبی تابشی ۴۵۸
~ وردشی ۳۸۵
~ برای ساختار اتمها ۳۹۴
~ برای مولکول H_2 ۴۱۳، ۴۱۴
~ ریتز ۳۸۵، ۳۹۵
~ ریلی-ریتز ۳۸۱، ۳۸۵
اعداد
~ جادویی ۲۳۲
~ کوانتومی ۲۸
الکترون جفت‌شده ۴۲۳
الگو(ی)
~ اتمی رادرفورد ۲۲، ۲۳
~ گرونیک-پنی ۱۲۵
انتشار بسته‌های موج ۳۸
انتقال فاز ۲۳۴، ۴۹۸
~ برای پراکندگی چاه مربعی ۵۰۴، ۵۰۵
انتگرال
~ پذیری مجذوری توابع موج ۵۵
~ فوریه ۳۷، ۵۴۳
~ همپوشی ۲۰۰
انرژی
~ فرمی ۱۰۵، ۲۰۹
~ نقطهٔ صفر ۱۳۷
~ همپاری ۱۰، ۱۱
اوربیتالها ۳۸۴، ۴۱۹، ۴۲۰
اورتوهلیم (سه‌تایی) ۳۸۵
اهمیت فازها ۵۵

بردار پتانسیل ۲۷۶
~ برای ثابت میدان مغناطیسی ۲۸۰، ۲۸۹
~ برای گسیل و جذب فوتون ۴۴۰، ۴۶۶
بسامد
~ دبی ۴۸۹
~ رابی ۴۸۲
~ سیکلوترون ۳۱۵
~ لارمور ۲۸۲

www.arsanjan.blogfa.com

بسته‌های موج ۳۶
انتشار ~ ۳۸
~ پهن ۴۱
پهنای ~ ۳۷، ۳۸
~ گاؤسی ۳۷، ۳۸
~ معادلهٔ شرودینگر ۴۱
~ و قلهٔ نامتناهی ۸۴
بوزون ۱۹۶

پاراهلیم (تکتایی) ۳۸۵
پاریته ۸۶
~ در تابع موج ۳۳۷
~ در یک پیون کند ۳۳۷
پایستگی
~ احتمال ۵۷
~ تکانه ۱۸۶
~ در ناوردایی هامیلتونی ۱۸۸
~ زاویه‌ای انرژی ۷۰
~ زاویه‌ای پاریته ۸۷
~ کل ۱۸۸
~ شار در معادلهٔ شعاعی ۴۹۴
پتانسیل
~ الکترومغناطیسی ۲۷۶
~ بی‌دررو ۴۳۷
~ تابع دلتا ۹۶، ۱۱۸
~ جعبه در جعبهٔ دوار ۲۳۱
~ دوره‌ای ۱۲۵
~ کولنی ۵۱۷
~ وابسته به اسپین ۳۲۸
پدیده
~ پراکندگی از قرص سیاه ۵۰۱
~ تونل‌زنی ۱۰۴
~ در حالت ابررسانایی ۱۰۸
~ میکروسکوپی (STM) ۱۰۶
~ فرومغناطیسی در بسط هایزنبرگ ۳۸۳
آستانهٔ طول ~ ۵۱۲
~ از قرص سیاه ۵۰۱
~ اورتو-H_2و پارا-H_2 ۵۱۴
~ تشدیدی ۵۰۶
~ در فرمول برایت-ویگنر ۵۰۷
~ در اتمهای شبکه ۵۲۱
~ در انرژیهای کم ۵۰۴
~ در تقریب بورن ۵۱۵
~ در چاه مربعی ۵۰۴
~ ذرات یکسان ۵۱۹
~ سایه ۵۰۲
~ کشسان ۴۹۹
~ موج sبرای چاه مربعی ۵۰۹
~ میدان کولنی ۵۱۷
~ ناکشسان ۵۰۲
~ نوترون-فوتون ۵۱۲
~ وابسته به اسپین ۵۱۲
~ همدوس بلور ۵۲۲
پس‌زنی در اثر موسباؤر ۴۹۰
پلهٔ پتانسیل ۹۴
~ بازتابیده ۹۷
پمپاژ اپتیکی ۴۷۲
پوزیترون ۵۳۸
پهن‌شدگی دوپلری ۴۷۴
پیامدهای ناوردایی چرخشی ۲۱۷

تابش
~ اتمی ۴۳۴
~ در تابش چارقطبی الکتریکی ۴۵۳
~ در تابش دوقطبی الکتریکی ۴۵۲
~ در تابش دوقطبی مغناطیسی ۴۵۳
~ در نظریهٔ اختلال ۴۳۴
~ به‌صورت کوانتومی ۱۲
~ جسم سیاه ۶

www.arsanjan.blogfa.com

چگالی انرژی ~ ۴۷۰
قانون ریلی-جینز در ~ ۹
قانون وین در ~ ۹
~ میکروموج کیهانی زمینه ۱۳
تابع
~ بسل ۲۹۹
~ کروی ۲۲۸
~ دلتا ۵۴۳
~ دیراک ۸۱
~ کار ۱۵، ۱۶
~ موج ۱۹۵
~ پادمتقارن ۱۹۵
~ حالتهای پاریته ۴۵۸
~ دامنهٔ مکان ۱۷۳
~ در فضای تکانه ۶۰
~ دوره‌ای ۱۲۶، ۴۴۴
~ فاز ۵۵، ۵۶
~ مستقل از زمان ۷۰
~ نویمان کروی ۲۲۸
~ هنکل کروی ۲۲۹
تبدیل داخلی ۴۶۴
تداخل‌سنج فابری-پرو ۱۰۰
ترازهای لانداؤ ۲۸۹
تشدید پارامغناطیسی ۳۱۶
تعبیر احتمالاتی ۵۳، ۵۴
تغییر
~ در پراکندگی تشدیدی ۵۰۶
~ کوانتوم-الکترودینامیکی ۴۴۳
تقارن هامیلتونی ۸۷، ۸۸
تقریب
~ بورن ۵۱۵
~ در پراکندگی کولن ۵۱۷
محدودیتهای ~ ۵۱۹
~ دوقطبی الکتریکی ۴۴۹
قاعدهٔ گزینش در ~ ۴۵۱
~ موج چرخان ۴۸۰
~ ونتزل-کرامرز-بریلوئن ۱۰۳، ۵۶۹
تکانه
~ دوقطبی دائمی ۳۴۸
~ زاویه‌ای ۲۴۰
~ اسپین ۳۱۰
~ پایستهٔ کل ۱۸۸
توابع ویژهٔ~ ۲۴۹
~ در اصول موضوعهٔ بور ۲۳، ۲۴
رابطهٔ جابه‌جایی ~ ۲۲۰
عملگر ~ ۲۱۸، ۲۱۹، ۲۴۰، ۲۴۱
عملگر افزاینده و کاهنده برای ~ ۲۴۵
~ ماتریس ۳۰۵
~ و ناوردایی پایستگی تحت چرخش ۲۱۸، ۲۱۹
ویژه‌مقدارهای ~ ۲۴۸
~ طیف پیوسته ۸۱
~ فوتون ۱۸
~ موج الکترومغناطیسی ۱۸
~ ویژه‌تابع بهنجار ۱۴۷
توان گسیل ۶
توزیع
~ احتمال بولتزمن ۱۱
~ پلانک ۹، ۱۰
توصیف طیف نمایی حالتهای پایه ۴۰۳
~ در قاعدهٔ هوند ۴۰۳
تونل‌زنی ۱۰۸
~ در ابررساناها ۱۰۸
~ در سد پتانسیل ۱۰۹، ۱۱۰
~ در گسیل سرد ۱۰۵
~ در واپاشی آلفا ۱۰۹

ثابت
~ پلانک ۹، ۱۰، ۲۴، ۲۵
~ حرکت ۸۷

www.arsanjan.blogfa.com

~ ساختار ریز ۲۶
~ های فیزیکی ۵۸۲

جدول تناوبی ۴۰۷
جذب ۶، ۴۹۹، ۵۰۰
~ تابش ۵۳۸
تولید زوج در ~ ۵۳۸
~ در اثر فوتوالکتریک ۵۲۸
~ در اثر کامپتون ۵۳۶
~ در ماده ۵۲۸
جرم
~ ستاره ۲۱۱
~ سکون ذره ۱۸
~ سکون فوتون ۱۸
~ کاهیده ۱۹۲
اثرات هیدروژن در ~ ۳۷۰
معادلهٔ دیفرانسیلی ~ ۲۶۳
جریان احتمال ۵۶
جعبهٔ پتانسیل ۷۳
جفت‌شدگی ۴۴۰
~ اتمها در میدان تابشی ۴۴۰
~ غیرنسبیتی ۵۳۸
جمع
~ اسپین و تکانهٔ زاویه‌ای مداری ۳۳۰
~ تکانه زاویه‌ای در اسپینهای دوتایی ۳۲۴
~ تکانهٔ زاویه‌ای مدار ۳۳۰
جواب منظم تابع بسل کروی ۲۲۸

چاربردار ۵۵۷
چاه
~ پتانسیل ۹۹
حالتهای مقید در ~ ۱۱۳
~ در حالت تابع‌موج-پاریته ۱۱۷
~ نامتناهی ۲۳۰
~ مربعی ۲۳۳
جوابهای پیوستار برای ~ ۲۳۳
~ در حالت سه‌بعدی حالتهای مقید ۲۳۵
چرخش مولکولها ۴۲۸
چرخنده در معادلهٔ ویژه‌مقداری ۲۴۴
چگالی
~ انرژی الکترومغناطیسی ۴۴۲
~ دوقطبی تابشی ۴۵۷، ۴۵۸
~ و اسپین ۴۵۷
چندجمله‌ای
~ لاگر ۲۶۶
اصل وردشی در ~ ۳۹۶
~ لژاندر ۲۵۱
~ هرمیت ۱۳۵

حاصلضرب نرده‌ای ۱۵۰
حالت
~ پادمتقارن ۱۹۵
~ پایا ۲۴، ۳۵۵، ۴۷۲
~ پایه ۲۰۰
~ برای ذرات آزاد در یک جعبه ۲۰۰
~ ذره در جعبه ۷۵
~ شبه‌پایدار ۴۷۲، ۴۷۳
~ مقید در چاه پتانسیل ۱۱۳، ۲۳۵، ۲۳۶
~ مقید در چاه مربعی ۱۱۷
~ همدوس ۱۸۱
حد کلاسیک قضیهٔ اهرنفست ۱۶۱
حرکت
~ اسپین ۳۱۵
~ در میدان مغناطیسی ۳۱۵
~ در میدان مغناطیسی ۲۸۴
~ کلاسیک الکترون در میدان مغناطیسی ثابت ۲۸۸
~ مرکز جرم ۱۹۱، ۲۱۶

www.arsanjan.blogfa.com

خودیونش ۳۸۸
خواص موجی ماده ۵

دترمینان اسلیتر ۳۹۸
~ برای تابع‌موج فرمیون ۱۹۸
دستگاه دو ذره‌ای
~ در معادلهٔ تک‌ذره‌ای ۱۹۳
~ ذرات یکسان ۱۹۳
دستگاه N ذره‌ای ۱۸۶

ذره
~ آزاد در جعبه ۲۰۶
~ شرودینگر ۸۰
ویژه‌تابع ~ ۸۰، ۸۱
~ در جعبه ۷۳، ۷۴، ۲۰۶، ۲۳۰
~ یکسان ۱۹۳
~ و تقارن تابع‌موج ۱۹۳، ۱۹۴

رابطه
~ استفان-بولتزمن ۱۰
~ تامیت ۱۴۹
~ جابه‌جایی ۶۴
~ برای x و p ۶۴
~ عدم قطعیت ۴۳، ۴۴، ۴۶، ۴۷
اثبات ~ ۵۵۳
~ انرژی-زمان ۴۷
تعریف ~ ۱۵۷
برآوردهای مرتبهٔ بزرگی ~ ۴۷
~ کاملیت نمادنگاری دیراک ۱۷۴
رشتهٔ فوریه ۵۴۳
رفتار موجی ۵۶
رگبار پرتو کیهانی ۵۳۹
روش
~ بورن-اپنهایمر ۴۳۲
~ پیوند والانسی مولکول ۴۲۰
~ تقریب هارتری ۳۹۵

ساختار
~ اتمها ۳۹۴
~ برانگیخته ۳۹۹
~ پوسته در هسته ۲۳۲
~ فوق ریز ۳۶۷
~ کلی مکانیک موجی ۱۴۴
~ نوار ۱۲۹
ستارهٔ نوترونی ۲۱۳
سد پتانسیل ۱۰۱
سرد کردن اتمها ۴۷۴
سرعت گروه ۴۰، ۴۱
سطح مقطع ۴۹۴
~ برای اثر فوتوالکتریک ۵۳۰، ۵۳۱
~ برخورد ۴۹۴
~ در سطح دیفرانسیلی پراکندگی ۴۹۴
~ پراکندگی
~ ذرات یکسان ۵۱۹، ۵۲۰
~ کولن ۵۱۸، ۵۱۹
~ تامسون ۵۳۶
تغییر فازها در ~ ۵۰۴
~ در رابطهٔ میان انرژی بستگی ۵۱۱
~ در قضیهٔ اپتیکی ۴۹۹
~ ذرات یکسان ۵۱۹
~ قرص سیاه ۵۰۱
~ کشسان و ناکشسان ۴۹۹، ۵۰۰، ۵۰۱
~ کل ۴۹۸
سیارهٔ رادرفورد ۲۲
سیستم دو ذره‌ای ذرهٔ آزاد ۱۹۰
سینماتیک نسبیتی ۵۵۷

شاخصهای میلر ۵۲۴
شار
جریان ~ ۵۶

www.arsanjan.blogfa.com

~ محصور کوانتیده ۱۹۵
شرط
~ بازتاب براگ ۱۲۹، ۵۲۴
~ راست‌هنجاری ۷۵، ۱۴۶
شکل خط لورنتسی ۴۶۱

ضریب
~ جذب ۶
~ القایی ۴۶۸
~ جرمی ۵۳۵
~ بسط ۷۹
~ مقدار انتظاری ۷۸، ۱۴۷، ۱۴۸
~ بهنجارش اوربیتالهای مولکولی ۴۱۵
~ تراگسیل برای سد پتانسیل ۱۰۲
~ در روش تقریب ونتزل-کرامرز-بریلوئن ۱۰۳
~ کلبش-گوردان ۳۳۵
~ A و B اینشتین ۴۶۷

طول
~ تابشی ۵۴۰
~ تشدید ۵۷۳
~ عمر ۵۷۳
~ پهنای خط ۵۷۳
~ مغناطیسی ۲۹۰، ۲۹۱
~ موج کاهیده ۲۶
طیف
~ اتم هیدروژن ۲۴، ۲۵
~ انرژی نوسانگر هماهنگ ۱۶۶
~ هلیم ۳۷۶، ۳۷۷

عدد پیوند ۴۲۵
عدم قطعیت هایزنبرگ ۴۳، ۴۴، ۴۶، ۴۷
عملگر ۵۹، ۷۰، ۵۵۰
~ افزاینده برای تکانهٔ زاویه‌ای ۲۴۵
~ کاهنده و ۱۷۰
~ انرژی ۶۳
~ پاریته ۸۷
~ تبادل ۱۹۴
~ پاریته ۱۹۵
~ تکانه ۵۹، ۶۰
~ در ثابت حرکت ۱۹۰
ویژه‌تابع ~ ۸۰، ۸۱، ۱۴۶، ۱۴۷
~ هرمیتی ۶۵
~ چگالی ۵۶۲
حالت آمیخته ~ ۵۶۵
حالت ناب در ~ ۵۶۳
~ خطی ۷۰، ۱۵۰، ۵۵۰
~ ماتریسهای خطی ۳۰۷
~ مکان ۱۷۲
ویژه‌حالت و ویژه‌تابع در ~ ۱۷۲
~ هامیلتونی ۶۳، ۶۴، ۱۵۰، ۵۵۰، ۵۵۱
~ هرمیتی ۱۵۰، ۱۵۱، ۵۵۱
~ همیوغ هرمیتی ۱۵۲
عنصر ماتریس برای گذار ۱۶ $\rightarrow 2p$ ۴۵۵

فرمول
~ اثر فوتوالکتریک اینشتین ۱۵، ۱۶
~ برایت-ویگنر ۵۰۷
~ برد مؤثر ۵۱۲
~ رادرفورد برای پراکندگی کولنی ۵۱۸، ۵۱۹
~ فاؤلر-نوردهایم ۱۰۶
~ کلاین-نیشینا ۵۳۷
فرمیون ۱۹۶
انرژی کل از ~ N در یک جعبه ۲۰۸، ۲۰۹
~ در چاه پتانسیل ۱۹۶
فشار
~ گرانشی ۲۱۱

www.arsanjan.blogfa.com

~ واگنی ۲۱۰
فضای فاز
~ برای الکترونها ۴۴۷
~ برای بیشتر حالتهای ویژه ۴۴۷
~ و برای فوتون ۴۴۴
~ فوتونی دوترون ۴۵۳
فرومغناطیس و اثرات تبادلی ۳۸۳، ۳۸۴
فوتون ۱۶، ۱۷

قاعده
~ جمع ۳۳۵
~ برای ضریب کلبش-گوردان ۳۳۵
~ توماس-رایشه-کوهن ۳۵۶
~ طلایی ۴۴۷
~ برای آهنگ گذار ۴۴۷، ۴۴۸
~ کوانتش زومرفلد-ویلسون ۲۸
~ کلی جمع تکانه‌های زاویه‌ای ۳۳۳
~ گزینش ۳۸۴، ۴۵۱
~ گذارهای صفر-صفر ۴۵۴
~ هوند ۳۸۳، ۴۰۳
قانون
~ استفان-بولتزمن ۱۰، ۱۱
~ پایستگی ۵۷
~ تکانهٔ زاویه‌ای ۲۱۸، ۲۱۹
~ تجربی موزلی ۵۳۵
~ ریلی-جینز ۴۶۸
~ در تابش جسم سیاه ۸، ۹
~ کیرشهوف در تابش گرمایی ۶، ۷
~ گرمایی ویژهٔ دولون-پتی ۱۱
~ وین ۴۶۹
~ در تابش جسم سیاه ۶
~ همپاری کلاسیک ۱۰
قضیهٔ
~ اپتیکی ۴۹۹، ۵۰۰، ۵۰۱
~ بسط ۲۵۳
~ برای هماهنگهای کروی ۲۵۴
~ موج تخت ۲۵۴
~ بلوخ ۱۲۷
~ بی‌دررو ۴۶۳
~ پارسوال ۶۰
~ فاینمن-هلمن ۳۹۱
~ فلوکه ۱۲۷
~ لوینسون ۵۱۰
~ ویریال ۲۷۳
قطبش ۵۶۸
قفس دیکی و ویتکه ۳۰

کاواک ۴۷۳
کوانتش
~ تکانهٔ زاویه‌ای ۲۳، ۲۷، ۲۸، ۳۲
~ شار ۲۹۴
~ مغناطیسی ۲۹۴

گاف انرژی ابررسانایی ۱۰۸
گذار
~ چارقطبی الکتریکی ۴۵۳
~ دوقطبی مغناطیسی ۴۵۳
گسیل
~ القایی و جذب ۴۶۷، ۴۶۸
~ در ضرایب A و B اینشتین ۴۶۷
~ سرد ۱۰۵
~ و جذب فوتون ۴۴۰، ۴۶۶، ۴۸۲
گشتاور
~ دوقطبی مغناطیسی ۳۱۳، ۳۱۴
~ لختی مولکول هم‌هسته ۴۲۹

لم
~ بیکر-هاوسدورت ۵۵۶
~ ریمان-لیگ ۴۹۷
لیزرها ۴۷۰

www.arsanjan.blogfa.com

مانستگی فضای بردار ۱۴۹
ماتریس ۳۰۱، ۳۰۲
~ پاؤلی ۳۰۹
~ ستونی ۳۰۸
عملگر اسپین در ~ ۳۰۸
~ همیوغ هرمیتی ۳۰۴
مجموعهٔ کامل
~ مشاهده‌پذیرها ۱۵۶
~ ویژه‌تابعها ۱۴۵، ۱۴۷، ۱۴۸
مختصات استوانه‌ای ۲۸۶
مدار
~ بور ۲۳
~ دایره‌ای در اتم هیدروژن ۲۶۸
~ در میدان مغناطیسی ثابت ۲۸۷، ۲۸۸
مدول کپه‌ای ۲۱۰
واگنی ~ ۲۱۰
مساحت آزاد میانگین ۵۳۰
مسئلهٔ ذره‌ـموج ۲۹
مشاهده‌پذیرها(ی) ۱۵۰
~ عملگر تکانه ۱۴۶
~ همزمان ۱۵۴
مشاهدهٔ جهشهای کوانتومی ۴۸۲
معادلهٔ
~ شرودینگر ۴۲
~ برای الکترون در میدان مغناطیسی ثابت ۲۸۰
~ برای بار ذره‌ای ۲۷۹
~ برای پتانسیل مرکزی ۲۱۵، ۲۱۶
~ برای ذرهٔ N ۱۸۶
جداسازی متغیرها در ~ ۲۲۱
~ در انتگرال‌پذیری نامتناهی ۵۵
~ در جعبهٔ سه‌بعدی ۲۰۶، ۲۱۵
~ در مختصهٔ مرکز جرم ۱۹۱
~ ذرهٔ آزاد ۵۳
ساختار مجرد ~ ۱۷۵
معادلهٔ شعاعی برای پتانسیل مرکزی ~ ۲۲۴
~ و تعبیر احتمالاتی ۵۳
~ شعاعی برای پتانسیل مرکزی ۲۲۴
~ برای اتم هیدروژن ۲۶۶
~ برای جواب منظم و نامنظم ۲۲۶، ۲۲۷
~ ذرهٔ آزاد ۲۲۸
~ کلاسیک حرکت در حد کوانتومی ۱۶۱
~ ماکسول ۲۷۵
~ ویژه‌مقدار ۶۹
~ برای ذره در جعبه ۷۳
~ برای L_z ۲۴۲، ۲۴۳
~ در عملگر خطی ۷۰
~ در نمایش ماتریس ۳۰۸
مقادیر انتظاری ۵۸
~ اتم هیدروژن ۲۷۱
~ انرژی در تعداد گرهها ۷۶
~ حقیقی ۶۵
مکان عملگر ۱۷۷
ملاس نوری ۴۷۷
موج پادمتقارن
دترمینان اسلیتر ~ ۱۹۸
کی پادمتقارن‌سازی لازم است؟ در ۱۹۸
مولکول
انرژی الکترون در ~ ۴۱۴
اوربیتالهای ~ ۴۱۴، ۴۱۹، ۴۲۰
حالتهای برانگیخته ~ ۴۱۸
حرکت چرخشی ~ ۴۲۸
ساختار چند ~ ساده ۴۲۴
~ H_2 ۴۱۹
~ H_2^+ ۴۱۳
مهبانگ ۱۳
میدان مغناطیسی ثابت در الکترون ۲۸۰

www.arsanjan.blogfa.com

میکروسکوپ هایزنبرگ ۴۴

نامساوی شوارتز ۱۶۲
ناوردایی ۱۲۶
~ پیمانه‌ای ۲۷۶
~ برای معادلهٔ شرودینگر ۲۷۹
~ در پیمانهٔ کولن ۲۷۷
~ در پیمانهٔ لورنتس ۲۷۷
~ تحت تبدیلات پیمانه‌ای ۲۷۶
~ تحت چرخش ۲۱۸
جابه‌جایی ~ ۱۸۹
~ چرخشی ۲۱۷
نسبت طول‌موج دوبروی ۲۰، ۲۱
نشان اسپینی ۱۹۳
نظریه
~ اختلال ۳۴۱
~ برای حالتهای واگن ۳۴۱
~ در جابه‌جایی انرژی ۳۴۴، ۵۷۷
~ در حالتهای پایا ۳۰۵
~ در حالتهای واگن ۳۴۵
~ مستقل از زمان ۳۴۱
~ وابسته به زمان ۴۳۴
~ وابسته به زمان در تغییر زمانی هماهنگ پتانسیل ۴۳۷
~ واگن ۳۴۵
~ مزون یوکاوا ۴۹
نقش تداخلی در آزمایش دوشکافی ۴۵، ۴۶
نکاتی دربارهٔ پاریته ۳۳۷
نمادنگاری دیراک ۱۴۴، ۱۵۲
نمایش
~ شرودینگر ۱۷۸
~ ماتریسی عملگرهای تکانهٔ زاویه‌ای ۳۰۵
~ ماتریسی عملگرهای نوسانگر هماهنگ ۳۰۱
~ هایزنبرگ ۱۷۸
نوسانگر هماهنگ ۱۳۰، ۱۳۱
~ در روشهای عملگری ۱۶۵
~ در نمایشهای ماتریسی ۳۰۳
عملگر افزاینده و کاهنده ~ ۱۷۰
نیروی لورنتس ۲۷۶

وابستگی زمانی
~ عملگرها ۱۷۷
~ و حد کلاسیک ۱۵۸
واپاشی آلفا ۱۰۹
وارونی جمعیت ۴۷۲
واقعیت مدارها در اتم بور ۴۶
واگنی
~ در اثر اشتارک ۳۵۰
~ در پتانسیل ۲۶۳
~ در جعبهٔ سه‌بعدی ۲۰۶
~ در ذرهٔ آزاد توابع ویژه ۸۵، ۸۶
~ و مشاهده‌پذیرهای همزمان ۱۵۴
وضعیت تعادل در کاواک ۴۶۸
ویژه‌توابع ۷۳
~ برای ذره در جعبه ۷۳
~ شعاعی ۲۶۶
~ متعامد ۱۵۳، ۵۵۲
~ متناظر ۸۶
~ عملگر تکانه ۸۶
~ واگن ۱۵۵
ویژه‌حالت ۱۶۵
ویژه‌مقدار متعامد ۷۵

هامیلتونی ۶۳
~ برای ذرات یکسان ۱۹۳
~ برای بار ذره‌ای ۲۷۷
هماهنگهای کروی ۲۴۹