www.Endbook.net

درسنامه مکانیک کوانتومی

وحید کریمی پور
دانشگاه صنعتی شریف
دانشکده فیزیک

این یادداشت ها بیشتر فهرست مطالب درس هایی است (بدون هیچ گونه تفصیلی) که برای درس مکانیک کوانتومی درنیمسال تحصیلی دوم درسال تحصیلی (۸۵ – ۱۳۸۴) تهیه کرده ام. این یادداشت هادرشکل فعلی بسیار ناقص اند وبه هیچ وجه دانشجویان این کلاس را از مراجعه به کتاب درسی ویاکتاب های دیگر بی نیازنمی کنند. هدف من ازانتشارآن هاروی سایت شخصی ام آن است که به دانشجویان کمک کنم بتوانند خط سیر کلی درس را دنبال کنند. درسال آینده که بازهم این درس را ارایه خواهم کرد این یادداشت هاراتکمیل خواهم کرد. لازم می دانم دراینجا از یاری یکی از دانشجویان خوب کلاس، آقای شاهین کاوه قدردانی کنم. ایشان با دقت ستودنی تمام اشکالاتی را که در نسخه اولیه این درسنامه ها وجود داشت بانظم و ترتیب یادداشت کرده و به من یادآوری کردند. سعی کرده ام که تمام این اشکالات را برطرف کنم.

www.Endbook.net

درس اول : مروری بر مکانیک کلاسیک

۱ مقدمه

هدف مادراین درس آن است که به طور خلاصه مبانی مکانیک کلاسیک را مرورکنیم. فهم دقیق این مبانی بخصوص صورتبندی هامیلتونی مکانیک کلاسیک برای فهم مکانیک کوانتومی اهمیت فوق العاده دارد، زیرا بسیاری از مفاهیمی که درآینده با آنها آشنا خواهیم شد، تعمیم مفاهیم مربوطه در مکانیک کلاسیک هستند. دراین فصل نخست صورت بندی لاگرانژ و سپس صورت بندی هامیلتون را از مکانیک کلاسیک مطالعه خواهیم کرد.

۲ صورت بندی لاگرانژ ازمکانیک

دستگاهی درنظربگیرید که برای توصیف حالت آن احتیاج به مختصات $(q_1, q_2, \cdots q_N)$ دارید. این مختصات لزوماً مختصات دکارتی نیستند و می توانند طول، زاویه یا هرچیز دیگری باشند که برای توصیف موقعیت دستگاه لازم است. سرعت های تعمیم یافته را با $(\dot{q}_1, \dot{q}_2, \cdots \dot{q}_N)$ نشان می دهیم. مجموعه $(q, \dot{q})$ را که درآن منظور از q تمامی مختصه هاست یک پیکربندی یا $Configuration$ ازدستگاه می خوانیم و $2N$ را تعداد درجات آزادی دستگاه می گوییم. ازاین به بعد نماد خلاصه‌ی $(q, \dot{q})$ را بجای $(q_1, q_2, \cdots q_N, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \cdots \dot{q}_N)$ بکار خواهیم برد. مجموعه تمام هیئت های قابل تصور برای یک دستگاه را فضای پیکر بندی یا $Configuration\ Space$ می خوانیم. خاصیت مهم ِطبیعت آن است که که مختصات q_i و سرعت های q_i از یک دستگاه دریک لحظه شتاب های آن دستگاه یعنی $\ddot{q}_i$ ها را در همان لحظه تعیین خواهد کرد. این امر به این معناست که در یک لحظه بی نهایت کوچک ِبعد به فاصله ϵ، می توان مختصات و سرعت ها را بدست آورد، زیرا:

$$\begin{aligned} q_i(t+\epsilon) &= q_i(t) + \epsilon \dot{q}_i(t) \\ \dot{q}_i(t+\epsilon) &= \dot{q}_i(t) + \epsilon \ddot{q}_i(t). \end{aligned} \tag{1}$$

بنابراین هرگاه هیئت یک دستگاه فیزیکی در یک لحظه از زمان معلوم شود، می توان هیئت این دستگاه را در همه لحظات آینده به طور یکتا تعیین کرد. بنابراین دانستن هیئتِ $(q(0), \dot{q}(0))$، هیئت های $(q(t), \dot{q}(t))$ را درهمه لحظات آینده یا به عبارت دیگر مسیر حرکت را به طور یکتا تعیین خواهد کرد.
توجه به این مسئله مهم است که آنچه که دربالا گفتیم یک خاصیت مهم از طبیعت و دنیای ماست و نمی توان آن را براساس بنیادی تری توضیح داد. مثلا می شد دنیا چنان باشد که درآن تنها مختصات یک دستگاه در هرلحظه می توانست سرعت ها را درهمان لحظه تعیین کند. ولی جهانی که ما درآن زندگی می کنیم چنین نیست و درآن مختصات و سرعت ها در هر لحظه مستقل از یکدیگرند و نمی توان با دانستن مختصات در یک لحظه سرعت ها را درهمان لحظه تعیین کرد. حال سوال اساسی

www.Endbook.net

این است که مسیر یک دستگاه در فضای پیکربندی چگونه تعیین می شود؟ پاسخ این سوال توسط یک اصل مهم مکانیک داده می شود که آن را اصل کمترین عمل می گویند.

۱.۲ اصل کمترین عمل

فرض کنید که درلحظه t_1 دستگاه درپیکربندی $(q_a, \dot{q}_a)$ باشد و دینامیک دستگاه درلحظه t_2 آن را درپیکربندی $(q_b, \dot{q}_b)$ قرارداده باشد. دراین صورت می پرسیم که این دستگاه برای تحول از پیکربندی اولیه به نهایی چه مسیری را درفضای پیکربندی ها طی کرده است. به عبارت ساده تر می پرسیم که مسیرحرکت آن از $(q_a, \dot{q}_a)$ به $(q_b, \dot{q}_b)$ چه بوده است. مطابق با اصل کمترین عمل یا $Principle\ \ of\ \ least\ \ action$ تابعی موسوم به لاگرانژی وجود دارد که آن را با $L(q, \dot{q})$ نشان می دهیم و مسیر حرکت دستگاه چنان است که انتگرال این تابع در طول مسیر که آن را کنش می گوییم و با S نشان می دهیم، در فضای همه مسیرهای ممکن یک اکسترمم موضعی است. معنای این حرف آن است تغییرات درجه اول این کمیت نسبت به تغییرات کوچک دراطراف آن برابر با صفراست.

$Principle\ \ of\ \ least\ action$ مسیر حرکت می بایست چنان باشد که کمیت زیر موسوم به کنش

$$S = \int_{t_1}^{t_2)} L(q(t), \dot{q}(t))dt \tag{2}$$

در ادامه درباره این که تابع لاگرانژی، چه تابعی از مختصات و سرعت هاست صحبت خواهیم کرد. فعلا می خواهیم ببنیم نتایج اصل کمترین عمل چیست. مسیر دلخواهی مثل $q(t)$ رادرنظرمی گیریم که درلحظه t_1 برابربا q_a ودرلحظه t_2 برابربا q_b باشد. به عبارت دیگر مسیری درنظرگرفته ایم که نقطه q_a را به نقطه q_b وصل کند. برای این مسیر، کنش به شکل زیراست:

$$S[q] := \int_{t_1}^{t_2} L(q_i, \dot{q}_i, t)dt \tag{3}$$

اگراین مسیر، واقعاً مسیر حرکت باشد می بایست تغییرات درجه اول کنش حول آن برابرباصفرباشد یعنی

$$\frac{\delta S}{\delta q} = 0. \tag{4}$$

به زبان ساده تراگرمسیردیگری مثل $q'(t) = q(t) + \eta(t)$ درنظربگیریم که درآن $\eta(t)$ بی نهایت کوچک باشد می بایست تغییرات درجه اول کنش برابرباصفرباشد:یعنی تامرتبه اول از η باید داشته باشیم:

$$S[q + \eta] - S[q] = 0. \tag{5}$$

ازاین رابطه بدست می آوریم (در روابط زیر از قرارداد جمع استفاده شده است یعنی روی اندیس های تکراری جمع زده می شود)

$$S[q + \eta] \quad = \quad \int_{t_1}^{t_2} L(q_i + \eta_i, \dot{q}_i + \dot{\eta}_i, t)dt$$

www.Endbook.net

$$
\begin{aligned}
&= \int_{t_1}^{t_2} \left[L(q_i, \dot{q}_i, t) + \frac{\partial L}{\partial q_i}\eta_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\dot{\eta}_i \right] dt \\
&= S + \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\partial L}{\partial q_i}\eta_i + \frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\eta_i) - \eta_i \frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial q_i}) \right] dt \\
&= S + \int_{t_1}^{t_2} \eta_i \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial q_i}) \right] dt \qquad (6)
\end{aligned}
$$

ازآنجا که تغییرات S می بایست برای هرنوع تغییر بی نهایت کوچک مسیر برابرباصفرباشد نتیجه می گیریم که شرط زیرمی بایست برقرارباشد.

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = 0. \qquad (7)$$

این معادلات معادلات اویلر—لاگرانژ نامیده می شوند.
سوالی که در برابر ما قرار دارد آن است که لاگرانژین چه نوع تابعی است. برای یک دستگاه بسته، لاگرانژی عبارت است از تابع زیر:

$$L = T(q, \dot{q}) - V(q_1, q_2, \cdots q_N), \qquad (8)$$

که درآن T انرژی جنبشی ذرات موجود در دستگاه و V تابعی موسوم به تابع پتانسیل است که بستگی به نوع برهم کنش ذرات موجود درآن دستگاه را تعیین می کند.

مثال ۱: ذره ای که در پتانسیل V قرار دارد. مختصات تعمیم یافته را همان مختصات دکارتی ذره می گیریم. بنابراین داریم

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - V(x, y, z). \qquad (9)$$

برای این لاگرانژی، معادلات اویلر و لاگرانژ منجر می شوند به:

$$m\ddot{x} = -\frac{\partial V}{\partial x}, \qquad m\ddot{y} = -\frac{\partial V}{\partial y}, \qquad m\ddot{z} = -\frac{\partial V}{\partial z}, \qquad (10)$$

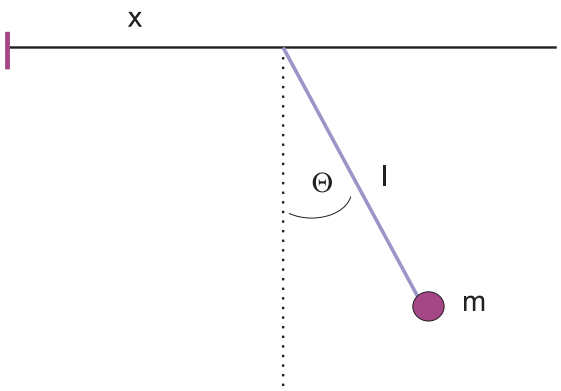
که همان معادلات نیوتن هستند.

مثال ۲: پاندول با نقطه اتکای لغزان : شکل ۱، یک پاندول را نشان می دهد که نقطه اتکای آن روی یک میله بدون اصطکاک می لغزد. برای این پاندول مختصات تعمیم یافته را (x, θ) می گیریم که درآن X فاصله نقطه اتکای پاندول با یک نقطه مرجع و θ زاویه پاندول با راستای قائم است. برای آنکه لاگرانژی را بنویسیم از این مطلب استفاده می کنیم که:

$$x = X + l\sin\theta, \qquad y = -l\cos\theta, \qquad (11)$$

و درنتیجه

www.Endbook.net



شکل ۱: پاندولی که نقطه اتکای آن لغزان است .

شکل ۲: نوسانگرهای هارمونیک جفت شده.

$$\dot{x} = \dot{X} + l\cos\theta\dot{\theta}, \qquad \dot{y} = l\sin\theta\dot{\theta}, \qquad V = -gl\cos\theta. \tag{12}$$

بنابراین لاگرانژی عبارت خواهد بود با:

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{X}^2 + l^2\dot{\theta}^2 + 2l\cos\theta\dot{X}\dot{\theta}) + gl\cos\theta. \tag{13}$$

مثال ۳ : ذره دریک پتانسیل با تقارن کروی: دراین حالت مختصات ذره را با (r,θ,ϕ) نشان می دهیم. داریم $V = V(r)$ و $T = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2\sin^2\theta\dot{\phi}^2)$. بنابراین لاگرانژی عبارت است از:

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2\sin^2\theta\dot{\phi}^2) - V(r). \tag{14}$$

مثال ۴ : دو نوسانگر هارمونیک جفت شده: برای سادگی فرض می کنیم که دو نوسانگر جرم مساوی دارند. این دو نوسانگر با یک فنر با ثابت فنر k به یکدیگر متصل شده ا ند و هرکدام از آنها نیز با فنر مشابهی به دیواره وصل شده اند، شکل (۲).
اگر طول فنرها را درحالت عادی صفر فرض کنیم (فنرهای بسیار کشسان) و اگر انحراف هر جرمِ m_i را از نقطه تعادل آن با x_i نشان دهیم آنگاه داریم

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x_1}^2 + \frac{1}{2}\dot{x_2}^2 - \frac{1}{2}kx_1^2 - \frac{1}{2}kx_2^2 - \frac{1}{2}k(x_1 - x_2)^2. \tag{15}$$

www.Endbook.net

مثال ۵ : ذره باردار درمیدان الکترومغناطیسی: این مثال بدلیل کلیت آن اهمیت دارد زیرا نشان می دهد که چگونه می توان برهم کنش ذره باردار را با میدان الکترومغناطیسی توصیف کرد. می دانیم که یک میدان الکترومغناطیسی را می توان با پتانسیل اسکالرِ ϕ و پتانسیل برداری $\mathbf{A}$ توصیف کرد. میدان الکتریکی و میدان مغناطیسی به ترتیب زیر از این پتانسیل ها بدست می آیند:

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= -\nabla\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \\ \mathbf{B} &= \nabla \times \mathbf{A}. \end{aligned} \tag{16}$$

برای ذره بارداری که با بارالکتریکیِ q درچنین میدانی قرار گرفته است، لاگرانژی عبارت است از:

$$L = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 - q\phi + \frac{q}{c}\mathbf{v}\cdot\mathbf{A}. \tag{17}$$

خواننده خود می تواند با استفاده از معادلات اویلر—لاگرانژ نشان دهد که معادله حرکتی که از این لاگرانژی بدست می آید همان معادله لورنتزاست یعنی

$$\frac{d}{dt}m\mathbf{v} = q\mathbf{E} + \frac{q}{c}\mathbf{v}\times\mathbf{B}. \tag{18}$$

۳ صورت بندی هامیلتون از مکانیک

برای یک دستگاه با N درجه آزادی، درصورتبندی لاگرانژ N معادله دیفرانسیل درجه دوم داریم که این معادلات با دردست داشتن مختصات و سرعت های اولیه یک حل یکتا به عنوان مسیر درفضای پیکربندی ها بدست می دهند. هامیلتون صورت بندی متفاوت زیرراازمکانیک کلاسیک بدست داده است که ازبسیاری جهات بخصوص برای تعمیم نظری مکانیک کلاسیک به چهارچوب کوانتومی مناسب است.
برای توصیف این صورتبندی لازم است که نخست تکانه یاتکانه تعمیم یافته را تعریف کنیم: تکانه مزدوج با مختصه q_i به شکل زیرتعریف می شود:

$$p_i := \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \tag{19}$$

این تکانه با تکانه خطی لزوماً یکی نیست. متغیرهای (q_i, p_i) را یک جفت مختصه مزدوج بایکدیگر می گوییم. هامیلتونی دستگاه به صورت زیرتعریف می شود:

$$H := \sum_{i=1}^{N} \dot{q}_i p_i - L. \tag{20}$$

باید تاکید کنیم که در فرمول بندی هامیلتون متغیرهای مستقل q_i ها و p_i ها هستند. برای فهم این نکته می نویسیم

www.Endbook.net

$$dH = \sum_{i=1}^{N} d\dot{q}_i p_i + \dot{q}_i dp_i - dL = \sum_{i=1}^{N} d\dot{q}_i p_i + \dot{q}_i dp_i - \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i. \tag{21}$$

اما جمله اول و آخر با توجه به تعریف تکانه مزدوج یعنی $p_i := \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ یکدیگر را حذف می کنند و باقی می ماند:

$$dH = \sum_{i=1}^{N} \dot{q}_i dp_i - \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i = \dot{q}_i dp_i - \dot{p}_i dq_i, \tag{22}$$

که درجمله آخر از معادله اویلر—لاگرانژ استفاده کرده ایم. این رابطه نشان می دهد که اولاً متغیرهای مستقل ِH برابرند با q_i و p_i، ثانیاً

$$\begin{aligned} \dot{q}_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial q_i}. \end{aligned} \tag{23}$$

این معادلات که $2N$ معادله دیفرانسیل درجه یک هستند معادلات هامیلتون نامیده می شوند و معادلات حرکت در صورت بندی هامیلتونی نامیده می شوند.
بامشخص کردن شرایط اولیه یعنی $(q(t_0), p(t_0))$ معادلات بالایک حل یکتا بدست می دهند که همان مسیرحرکت کلاسیک است.

حال سوال می کنیم که عبارت هامیلتونی چه ربطی به انرژی جنبشی و پتانسیل دارد. برای پاسخ به این سوال دقت می کنیم که لاگرانژی به صورت زیراست:

$$L(q, \dot{q}) = T(q, \dot{q}) - V(q). \tag{24}$$

بنابراین

$$H = \sum_i \dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - L = \sum_i \dot{q}_i \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} - (T - V). \tag{25}$$

دربسیاری از موارد انرژی جنبشی یک تابع درجه دو از سرعت هاست. یک قضیه ریاضی که اثبات آن را درضمیمه‌ی انتهای این درس می توانید ببنید، بیان می کند که برای چنین تابعی داریم .

$$\sum_i \dot{q}_i \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} = 2T$$

درنتیجه برای این سیستم ها خواهیم داشت:

$$H = T + V. \tag{26}$$

www.Endbook.net

مثال : نوسانگر هارمونیک برای نوسانگرهارمونیک به جرم m و فرکانس ω، هامیلتونی برابراست با:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2. \tag{27}$$

q و p دو مختصه مزدوج هستند. معادلات هامیلتون عبارت خواهند بود از:

$$\frac{dq}{dt} = \frac{p}{m}\ , \qquad \frac{dp}{dt} = -m\omega^2 q. \tag{28}$$

با ترکیب این دو معادله بدست می آوریم

$$\frac{d^2q}{dt^2} + \omega^2 q^2 = 0, \tag{29}$$

که معادله حرکت یک نوسانگر هارمونیک است.

مثال : حرکت یک ذره در میدان الکترو مغناطیسی دیدیم که لاگرانژی یک ذره در میدان الکترومغناطیسی به شکل زیراست:

$$L = \frac{1}{2}mv^2 - q\phi + \frac{q}{c}\mathbf{v}\cdot\mathbf{A}. \tag{30}$$

بنابراین تکانه تعمیم یافته مزدوج با x_i برابرخواهد بود با:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial v_i} = mv_i + \frac{q}{c}A_i, \tag{31}$$

و یا به شکل برداری

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} + \frac{q}{c}\mathbf{A}. \tag{32}$$

بنابراین

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}}{m}, \tag{33}$$

ودر نتیجه

$$H = \mathbf{v}\cdot\mathbf{p} - L = \mathbf{v}\cdot\left(m\mathbf{v} + \frac{q}{c}\mathbf{A}\right) - \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 + q\phi - \frac{q}{c}\mathbf{v}\cdot\mathbf{A} \tag{34}$$

$$= \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 + q\phi. \tag{35}$$

ازآنجا که هامیلتونی می بایست تابعی از مختصات و تکانه ها باشد، شکل نهایی هامیلتونی عبارت خواهد بود از:

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A})^2 + q\phi. \tag{36}$$

www.Endbook.net

۱.۳ فضای فاز، حالت و مشاهده پذیر

فرض فیزیک کلاسیک آن است که علی الاصول می توان مختصات و تکانه های یک دستگاه فیزیکی را باهردقتی تعیین کرد. بنابراین کامل ترین توصیف ازیک دستگاه فیزیکی به معنای مشخص کردن تمام مختصات و تکانه هاست. بنابراین «حالت» یک دستگاه فیزیکی با مشخص کردن تمام مختصه های $\{q_i\}$ وتکانه های مزدوج آنهایعنی p_i ها معین می شود. به ازای هرحالت $(q,p) := (q_1, \cdots q_N, p_1, \cdots p_N)$ می توان یک نقطه‌دریک فضای $2N$ که آن را فضای فازمی گوییم درنظرگرفت. فضای فازمجموعه تمام حالاتی است که یک دستگاه فیزیکی منطقاً می تواند اختیارکند. بامشخص کردن حالت اولیه به عنوان یک نقطه دراین فضا، معادلات حرکت یاهمان معادلات هامیلتون یک مسیریکتادراین فضاتعیین می کنند که مسیرحرکت دستگاه فیزیکی است. ازآنجامطابق بافیزیک کلاسیک، نقطه اولیه را می توانیم با هردقتی تعیین کنیم، مسیرحرکت نیز یک مسیر مشخص ومعین است.
وقتی که دستگاه فیزیکی درحالت (q,p) است علی الاصول می توانیم هرخاصیتی ازآن را اندازه گیری کنیم. این خاصیت به طورکلی کمیتی است که به حالت دستگاه ونه چیز دیگربستگی دارد. بنابراین تابعی است حقیقی از (q,p) مثل $A(q,p)$ یا $B(q,p)$ ونظایرآن. بنابراین به طور کلی می توانیم بگوییم که هرمشاهده پذیرچیزی نیست جزیک تابع حقیقی که روی فضای فازتعریف شده است. این که ازنظرفیزیکی و عملی کدام یک ازاین مشاهده پذیرها راحت تراندازه گیری می شوند یااهمیت بیشتری دارند، موضوع دیگری است.

۲.۳ کروشه پوآسون

برای هردوتابع $f,\ g$ که درروی فضای فاز تعریف می شوند می توان کروشه پواسون را به شکل زیرتعریف کرد:

$$\{f,g\} := \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial g}{\partial q_i}. \tag{37}$$

خواننده می تواند براحتی خواص زیر را برای کروشه پواسون ثابت کند:

$$\begin{aligned}
&\{f,g\} = -\{g,f\}\\
&\{f,g+h\} = \{f,g\} + \{f,h\}\\
&\{f,gh\} = \{f,g\}h + g\{f,h\}\\
&\{\{f,g\},h\} + \{\{g,h\},f\} + \{h,\{f,g\}\} = 0.
\end{aligned} \tag{38}$$

هم چنین داریم

$$\{q_i,q_j\} = \{p_i,p_j\} = 0 \qquad \{q_i,p_j\} = \delta_{ij}. \tag{39}$$

تمرین: درستی روابط زیر را نشان دهید. برای هر تابع $A(q,p)$:

www.Endbook.net

$$\{q_i, A\} = \frac{\partial A}{\partial p_i}, \qquad \{p_i, A\} = -\frac{\partial A}{\partial q_i}. \tag{40}$$

تمرین: مختصات و تکانه های یک ذره در دستگاه مختصات دکارتی را با (x, y, z, p_x, p_y, p_z) نشان می دهیم. هرگاه $L_x,\ L_y,\ L_z$ مولفه های تکانه زاویه ای باشند، نشان دهید که:

$$\{L_i, L_j\} = \epsilon_{i,j,k} L_k, \tag{41}$$

$$\{L_i, x_j\} = \epsilon_{i,j,k} x_k, \tag{42}$$

$$\{L_i, p_j\} = \epsilon_{i,j,k} p_k. \tag{43}$$

بااستفاده ازکروشه پوآسون می توان معادلات حرکت را به شکل زیرنوشت:

$$\begin{aligned} \frac{dq_i}{dt} &= \{q_i, H\} \\ \frac{dp_i}{dt} &= \{p_i, H\}. \end{aligned} \tag{44}$$

هرگاه کمیتی (مشاهده پذیری) مثل $f(q, p, t)$ روی فضای فازتعریف شده باشد می توان تغییرات آن را روی مسیر حرکت بصورت زیربدست آورد:

$$\begin{aligned} \frac{df}{dt} &= \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{dq_i}{dt} + \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{dp_i}{dt} \\ &= \frac{\partial f}{\partial t} + \{f, H\}, \end{aligned} \tag{45}$$

که درخط آخر از معادلات حرکت برحسب کروشه پوآسون استفاده کرده ایم. درصورتی که مشاهده پذیر f بستگی جداگانه ای به زمان نداشته باشد وتغییرات آن تنهابه دلیل تغییرات حالت دستگاه ایجادشود رابطه بالا تبدیل به رابطه زیرمی شود:

$$\frac{df}{dt} = \{f, H\}. \tag{46}$$

تمرین: $\mathbf{r}$ و $\mathbf{p}$ بردارهای مختصه و تکانه یک ذره هستند. نشان دهید که برای هر تابع $A(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ روابط زیر برقرارند:

$$\{\mathbf{p}, A\} = -\nabla_r A =: -\frac{\partial A}{\partial x}\hat{x} - \frac{\partial A}{\partial y}\hat{y} - \frac{\partial A}{\partial z}\hat{z} \tag{47}$$

$$\{\mathbf{r}, A\} = \nabla_p A =: \frac{\partial A}{\partial p_x}\hat{x} + \frac{\partial A}{\partial p_y}\hat{y} + \frac{\partial A}{\partial p_z}\hat{z}. \tag{48}$$

حال فرض کنید که تابع A را یک بار در نقطه $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ و یک بار هم درنقطه $(\mathbf{r} + \mathbf{a}, \mathbf{p})$ حساب کنیم. دراین صورت داریم

www.Endbook.net

$$A(\mathbf{r}+\mathbf{a},\mathbf{p}) = A(\mathbf{r},\mathbf{p}) + \mathbf{a}\cdot\nabla_r A = A(\mathbf{r},\mathbf{p}) - \{\mathbf{a}\cdot\mathbf{p}, A\}. \tag{49}$$

اصطلاحاً می گوییم که $\hat{\mathbf{a}}\cdot\mathbf{p}$ مولد انتقال درمکان درجهت بردار یکه $\hat{\mathbf{a}}$ است.
به طریق مشابه می توانیم بگوییم که $\hat{\mathbf{a}}\cdot\mathbf{r}$ مولد انتقال در تکانه درجهت بردارِ $\hat{\mathbf{a}}$ است.

تمرین: درهمان مسئله قبل اگر $\mathbf{L}=\mathbf{r}\times p$ بردار تکانه زاویه ای باشد نشان دهید که

$$\{\mathbf{L}, A\} = -(\mathbf{r}\times\nabla_r + \mathbf{p}\times\nabla_p)A. \tag{50}$$

حال فرض کنید که تابع A را یک بار در نقطه $(\mathbf{r},\mathbf{p})$ و یک بار هم درنقطه ای که نسبت به آن به اندازه کوچکی چرخیده است حساب می کنیم. فرض می کنیم که که دوران حول محور $\mathbf{n}$ به اندازه زاویه کوچک θ چرخیده است. دراین صورت نقطه ای که چرخیده است دارای مختصاتِ $(\mathbf{r}+\theta\mathbf{n}\times\mathbf{r}, \mathbf{p}+\theta\mathbf{n}\times\mathbf{p})$ است. بنابراین بدست می آوریم

$$\begin{aligned} & A(\mathbf{r}+\theta\mathbf{n}\times\mathbf{r}, \mathbf{p}+\theta\mathbf{n}\times\mathbf{p}) = A(\mathbf{r},\mathbf{p}) + \theta\mathbf{n}\times\mathbf{r}\cdot\nabla_{\mathbf{r}}A + \theta\mathbf{n}\times\mathbf{p}\cdot\nabla_{\mathbf{p}}A \\ = \;& A(\mathbf{r},\mathbf{p}) + \theta\mathbf{n}\cdot(\mathbf{r}\times\nabla_{\mathbf{r}} + \mathbf{p}\times\nabla_{\mathbf{p}})A \\ = \;& A(\mathbf{r},\mathbf{p}) - \theta\mathbf{n}\cdot\{\mathbf{L}, A\}. \end{aligned} \tag{51}$$

بنابراین نشان دادیم که

$$A(\mathbf{r}+\theta\mathbf{n}\times\mathbf{r}, \mathbf{p}+\theta\mathbf{n}\times\mathbf{p}) = A(\mathbf{r},\mathbf{p}) - \theta\mathbf{n}\cdot\{\mathbf{L}, A\}. \tag{52}$$

اصطلاحاً می گوییم $\mathbf{n}\cdot\mathbf{L}$ مولد دوران حول محور $\mathbf{n}$ است.

۴ تقارن و نتایج آن

جهان اطراف ما و پدیده های فیزیکی که درآن اتفاق می افتند، از بعضی جهات متقارن است. به عنوان مثال اگر آزمایشی را امروز انجام دهیم و سپس فردا آن را تکرار کنیم، همان نتیجه ای را به دست خواهیم آورد که امروز بدست می آوریم. این امر ناشی از همگنی زمان است و یک خاصیت مهم طبیعت است. البته فردا با امروز از بسیاری جهات مثل دماو رطوبت، میزان تابش آفتاب و وزش باد متفاوت است، به همین دلیل وقتی که از همگنی زمان سخن می گوییم می بایست توجه خود را به یک آزمایش ایده آل که عوامل فوق درآن موثر نیستند معطوف کنیم و یا اینکه آزمایش را درهمان شرایط دماو رطوبت و غیرآن تکرار کنیم. بنابراین می توانیم بگوییم رفتار یک سیستم تحت انتقال در زمان مطلق و یا رفتار یک سیستم بسته تحت انتقال در زمان متقارن است و تغییر نمی کند. این تقارن آنقدر واضح و بدیهی است که اهمیت آن را کمتر حس می کنیم، بااین وجود این تقارن بسیار مهم است و درواقع دلیل اصلی قانون بقای انرژی است. به همین ترتیب دنیای اطراف ما تحت انتقال در فضای

www.Endbook.net

مطلق متقارن است (می توان فضای بین کهکشان ها را فضای مطلق در نظرگرفت که درآن تقریبا هیچ عاملی روی یک آزمایش که انجام می دهیم اثر ندارد)، یا اینکه بگوییم رفتار یک سیستم بسته تحت انتقال در فضا متقارن است. اگر آزمایشی را در تهران انجام دهیم همان نتیجه ای را بدست می آوریم که درتبریز. خواهیم دید که این تقارن منجر به یک قانون بقای مهم یعنی قانون بقای تکانه خطی می شود. و بالاخره دنیای اطراف ما تحت دوران در فضای مطلق نیز متقارن است یا رفتار یک سیستم بسته تحت دوران در فضا متقارن است. اگر آزمایشی را رو به شمال انجام دهیم همان نتیجه ای را بدست می آوریم که رو به جنوب. البته اگر میدان مغناطیسی زمین دراین آزمایش تاثیر گذار باشد، دو نتیجه متفاوت بدست خواهند آمد، ولی دراین صورت سیستم بسته نیست. این تقارن منجر به قانون بقای اندازه حرکت زاویه ای می شود. این خواص تقارنی هستند که تکرار پذیری آزمایش ها و اساساً قدرت پیش بینی علم فیزیک را امکان پذیر می کنند. دراین بخش هدف ما آن است که ارتباط تقارن و قوانین بقا را بفهمیم . نخست تبدیلاتی را که ازآنها سخن گفتیم با دقت بیشتری معرفی می کنیم، سپس به معرفی مولد های این تبدیلات می پردازیم و دست آخر به رابطه تقارن و قوانین بقا می پردازیم.

۱.۴ همگنی زمان و قانون بقای انرژی

برای یک سیستم بسته هامیلتونی تنها تابع مختصات و تکانه هاست و به طور مستقل به زمان بستگی ندارد. این امر ناشی از همگنی زمان است. بنابراین تغییرات هامیلتونی در طول زمان برابراست با:

$$\frac{dH}{dt} = \{H\ ,\ H\} = 0, \tag{53}$$

یعنی H یا همان انرژی یک ثابت حرکت است. بنابراین بقای انرژی ناشی از همگنی زمان است.

۲.۴ همگنی فضا و قانون بقای اندازه حرکت خطی

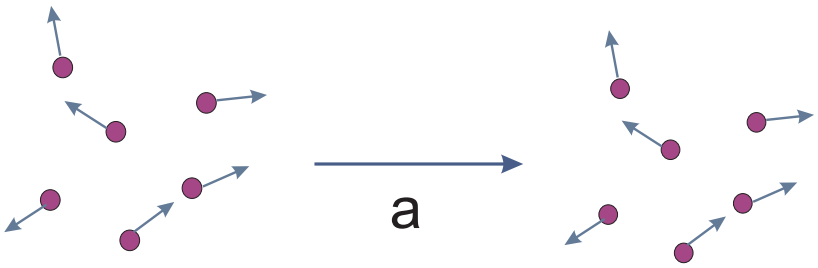
دستگاهی در نظر بگیرید متشکل از N ذره که با مختصات $\mathbf{r}_1, \cdot\mathbf{r}_N$ و تکانه های $\mathbf{p}_1, \cdots \mathbf{p}_N$ توصیف می شود. همگنی فضا به این معناست که اگر مکان همه ذرات را به اندازه بردارِ دلخواهِ $\mathbf{a}$ جابجا کنیم، ولی تکانه های آنها را دست نزنیم، (شکل ۳) هامیلتونی هیچ تغییری نمی کند، یعنی

$$H(\mathbf{r}_1, \cdots \mathbf{r}_N; \mathbf{p}_1, \cdots \mathbf{p}_N) = H(\mathbf{r}_1 + \mathbf{a}, \cdots \mathbf{r}_N + \mathbf{a}; \mathbf{p}_1, \cdots \mathbf{p}_N). \tag{54}$$

ازآنجا که تساوی فوق برای هر بردارِ $\mathbf{a}$ برقراراست، بردار $\mathbf{a}$ را بی نهایت کوچک می گیریم و طرف دوم را تا مرتبه اول برحسب $\mathbf{a}$ بسط می دهیم. بدست می آوریم

$$0 \quad = \quad H(\mathbf{r}_1 + \mathbf{a}, \cdots \mathbf{r}_N + \mathbf{a}; \mathbf{p}_1, \cdots \mathbf{p}_N) - H(\mathbf{r}_1, \cdots \mathbf{r}_N; \mathbf{p}_1, \cdots \mathbf{p}_N) = \mathbf{a} \cdot \sum_{i=1}^{N} \nabla_{\mathbf{r}_i} H$$

www.Endbook.net



شکل ۳: تقارن یک دستگاه تحت انتقال به این معناست که $H(\mathbf{r}+\mathbf{a},\mathbf{p}) = H(\mathbf{r},\mathbf{p})$. دقت کنید که تکانه ها تغییرنمی کنند.

$$= -\mathbf{a}\cdot\sum_{i=1}^{N}\{\mathbf{p}_i, H\} \tag{55}$$

بدلیل آنکه این تقارن برای تمام $\mathbf{a}$ ها برقراراست نتیجه می گیریم که

$$\{P, H\} = 0, \tag{56}$$

که درآن $\mathbf{P} = \sum_{i=1}^{N}\mathbf{p}_i$ تکانه کل است. بنابراین تقارن تحت انتقال در مکان به این معناست که تکانه زاویه ای کل با هامیلتونی جابجا می شود. نتیجه این رابطه این است که

$$\frac{dP}{dt} = \{P, H\} = 0, \tag{57}$$

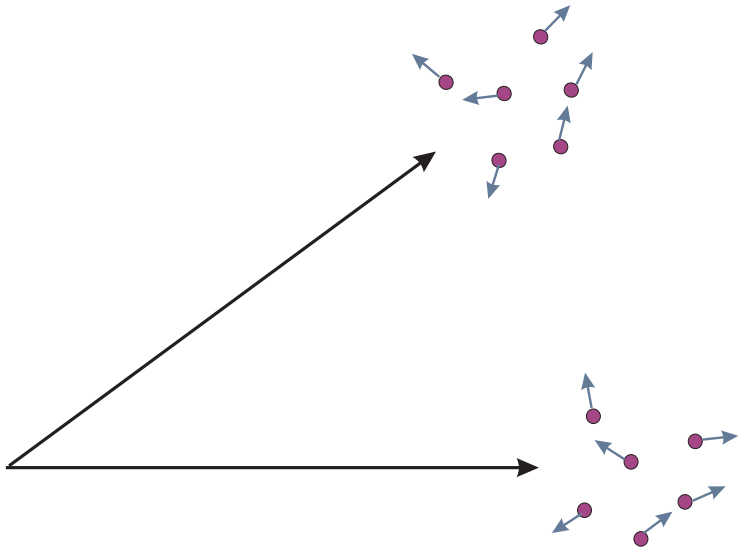
یعنی تکانه خطی کل یک ثابت حرکت است.

۳.۴ همسانگردی فضا و قانون بقای اندازه حرکت زاویه ای

دستگاهی در نظر بگیرید متشکل از N ذره که با مختصات $\mathbf{r}_1,\cdots\mathbf{r}_N$ و تکانه های $\mathbf{p}_1,\cdots\mathbf{p}_N$ توصیف می شود. همسانگردی فضا به این معناست که اگر این دستگاه را به اندازه زاویه θ بچرخانیم، هامیلتونی هیچ تغییری نمی کند. چرخش دستگاه به این معناست که هم بردارهای مکان و هم بردارهای تکانه به اندازه زاویه θ می چرخند. (شکل ۴)

تقارن تحت دوران به این معناست که هامیلتونی تحت دوران مختصات و تکانه ها تغییر نمی کند. یعنی

www.Endbook.net



شکل ۴: تقارن یک دستگاه تحت دوران به این معناست که $H(r,p) = H(r',p')$ که درآن r' و p' دوران یافته r و p است.

$$\begin{aligned} 0 &= H(\mathbf{r}_1 + \theta\mathbf{n}\times\mathbf{r}_1, \cdots \mathbf{r}_N + \theta\mathbf{n}\times\mathbf{r}_N; \mathbf{p}_1 + \theta\mathbf{n}\times\mathbf{p}_1, \cdots \mathbf{p}_N + \theta\mathbf{n}\times\mathbf{p}_N) - H(\mathbf{r}_1, \cdots \mathbf{r}_N; \mathbf{p}_1, \cdots \mathbf{p}_N) \\ &= \theta\hat{\mathbf{n}}\cdot(\sum_i \mathbf{r}_i\times\nabla_{\mathbf{r}_i} + \mathbf{p}_i\times\nabla_{\mathbf{p}_i})H \\ &= -\theta\mathbf{n}\cdot\{\mathbf{L}, H\}. \end{aligned} \tag{58}$$

این امر به این معناست که

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \{\mathbf{L}, H\} = 0. \tag{59}$$

بنابراین بقای تکانه زاویه ای نتیجه مستقیم همسانگردی فضاست.
درپایان بهتراست که آنچه را که آموخته ایم به عنوان اصول موضوع مکانیک کلاسیک بیان کنیم.

۵ اصول موضوع مکانیک کلاسیک

درمکانیک کلاسیک فرض بنیادی آن است که مامی توانیم مکان وتکانه هرذره یا دستگاهی متشکل از ذرات را بادقت دلخواه اندازه گیری کنیم.

www.Endbook.net

می توان برای مقایسه بهتر باساختارمکانیک کوانتومی که درپی خواهد آمد اصول موضوع مکانیک کلاسیک را دراینجا بیان کرد.

اصل موضوع یک – معنای حالت : حالت یک ذره با N درجه آزادی با مختصات مکان و تکانهٔ ذرات آن یعنی $(q,p) := (q_1, q_2, \cdots q_n, p_1, p_2, \cdots p_n)$ مشخص می شود. فرض اساسی مکانیک کلاسیک آن است که علی الاصول می توان باهردقت دلخواهی مختصات مکان و تکانه ذرات را مشخص کرد.
مجموعه تمام حالت ها خمینه ای را تعریف می کند که به آن فضای فاز می گوییم. هرنقطه ازاین فضایک حالت قابل حصول برای دستگاه فیزیکی است . فضای فاز خمینه ای است که به یک کروشه پوآسون باتعریف زیرمجهز شده است:

$$\{q_i,\ p_j\} = \delta_{ij} \qquad \{q_i,\ q_j\} = \{p_i, p_j\} = 0 \tag{60}$$

اصل موضوع دو – معنای مشاهده پذیر: هرگاه دستگاهی درحالت (q,p) باشد می توان هرخاصیتی که کمیت آن به $(q,\ p)$ بستگی دارد تعیین کرد. به این خاصیت یک مشاهده پذیر یا $Observable$ درفضای فاز می گوییم . بنابراین متناظر با هر مشاهده پذیر A (مثل انرژی، تکانه زاویه ای ویاهرچیزدیگر) یک تابع «حقیقی» A وجود دارد که مقدار آن درنقطه (q,p) یعنی $A(q,p)$ مقدارمشاهده پذیر را، وقتی که دستگاه درحالت (q,p) قراردارد، بدست می دهد.

اصل موضوع سه– اندازه گیری : هرگاه دستگاه درحالت (q,p) باشد، اندازه گیری کمیت A مقدار $A(q,p)$ رابادقتی که توسط ابزاراندازه گیری تعیین می شود بدست می دهد و حالت سیستم نیز دست نخورده باقی خواهد ماند.

اصل موضوع چهار– دینامیک: حالت دستگاه مطابق بامعادلات زیردرطول زمان تغییرمی کند:

$$\begin{aligned} \frac{dq_i}{dt} &= \{q_i, H\} \\ \frac{dp_i}{dt} &= \{p_i, H\}, \end{aligned} \tag{61}$$

که درآن $H(q,p)$ هامیلتونی است. برای بسیاری از سیستم ها تابع هامیلتونی عبارت است از $T-V$ که درآن T انرژی جنبشی و V انرژی پتانسیل است.

٦ ضمیمه یک

دراین ضمیمه قضیه ای را که برای استخراج معادلات حرکت در صورتبندی هامیلتونی مورد استفاده قراردادیم ثابت می کنیم.
تعریف : یک تابع چند متغیره $f(x_1, x_2, \cdots x_N)$ یک تابع همگن از درجه n خوانده می شود هرگاه درشرط زیر صدق کند:

$$f(\lambda x_1, \lambda x_2, \cdots \lambda x_N) = \lambda^n f(x_1, x_2, \cdots x_N) \qquad \forall\ \lambda. \tag{62}$$

www.Endbook.net

قضیه: برای یک تابع همگن از درجه n داریم :

$$\sum_{i=1}^{n} x_i \frac{\partial f}{\partial x_i} = n\ f. \tag{63}$$

اثبات: کافی است که از طرفین رابطه 62 نسبت به λ مشتق بگیریم و دست آخر λ را مساوی یک قرار دهیم.

۷ ضمیمه دو

دراین ضمیمه مفهوم مولد تبدیل کانونیک را معرفی می کنیم. دیدیم که برای هرمشاهده پذیر A (که بستگی صریحی به زمان ندارد) رابطه زیر برقراراست:

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\}. \tag{64}$$

این رابطه نشان می دهد که درطول حرکت مقدارمشاهده پذیرA چگونه تغییرمی کند. به عبارت دیگر داریم

$$A(t+\epsilon) = A(t) + \epsilon\{A, H\}. \tag{65}$$

بنابراین H را مولد تبدیل درزمان می خوانیم زیرا به مفهومی که درروابط بالا آمده است تحول یافته هرمساهده پذیری را درزمان بدست می دهد. حال می توانیم سوال کنیم که آیا برای تبدیلات دیگر مثل انتقال یا دوران هم می توانیم مولد تعریف کنیم یاخیر؟ نخست مفهوم مولد رابه طورکلی تعریف می کنیم. تبدیلی را درنظربگیرید که فقط بایک پارامتر مشخص می شود. مقداربی نهایت کوچک این پارامتررا با نماد ϵ نشان می دهیم. فرض کنید که این تبدیل بی نهایت کوچک به صورت زیرعمل می کند:

$$(q_i, p_i) \longrightarrow (q_i', p_i') = (q_i + \delta_\epsilon q_i, p_i + \delta_\epsilon p_i).$$

دراین صورت می گوییم تابع G مولد این تبدیل است هرگاه داشته باشیم

$$\begin{aligned} \delta_\epsilon q_i &= \epsilon\{q_i, G\} \equiv \epsilon \frac{\partial G}{\partial p_i} \\ \delta_\epsilon p_i &= \epsilon\{p_i, G\} \equiv -\epsilon \frac{\partial G}{\partial q_i}. \end{aligned} \tag{66}$$

روابط فوق تضمین می کنند که نقطه جدید بامختصات (q_i', p_i') همچنان نقطه ای است درفضای فاز و روابط کانونیکِ $\{q_i', p_j'\} = \delta_{ij}$ برقرار هستند:

$$\{q_i', p_j'\} = \{q_i + \delta_\epsilon q_i, p_j + \delta_\epsilon p_j\} = \delta_{ij} + \{\delta_\epsilon q_i, p_j\} + \{q_i, \delta_\epsilon p_j\}$$

www.Endbook.net

$$
\begin{aligned}
&= \delta_{ij} + \epsilon\{\{q_i, G\}, p_j\} + \epsilon\{q_i, \{p_j, G\}\} \\
&= \delta_{ij} + \epsilon\{\{q_i, p_j\}, G\} = \delta_{ij} + \epsilon\{\delta_{ij}, G\} = \delta_{ij}, \qquad (67)
\end{aligned}
$$

که درآن ازاتحادجاکوبی استفاده کرده ایم.

حال مشاهده پذیری دلخواه مثل A رادرنظرمی گیریم . تفاوت این مشاهده پذیر رادردونقطه (q,p) و $(q+\delta_\epsilon q, p+\delta_\epsilon p)$ حساب می کنیم. یک محاسبه ساده نشان می دهدکه

$$
\begin{aligned}
&\delta A := A(q+\delta_\epsilon q, p+\delta_\epsilon p) - A(q,p) = \frac{\partial A}{\partial q_i}\delta_\epsilon q_i + \frac{\partial A}{\partial p_i}\delta_\epsilon p_i \\
&= \epsilon\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial G}{\partial p_i} - \epsilon\frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial G}{\partial q_i} = \epsilon\{A, G\}. \qquad (68)
\end{aligned}
$$

قضیه زیر قضیه بسیارمهمی درارتباط با تقارن است:

قضیه: هرگاه H تحت تبدیلی که مولد آن G است تغییرنکند، یعنی دارای تقارن باشد، دراین صورت G یک ثابت حرکت است.
اثبات: چون H تغییرنمی کند داریم $\delta H = 0$. بنابررابطه (68) داریم

$$\{G, H\} = \delta H = 0. \qquad (69)$$

بنابراین

$$\frac{dG}{dt} = 0. \qquad (70)$$

ازاین قضیه دونتیجه مهم می گیریم یکی آنکه مولدهای تقارن با هامیلتونی جابجا می شوند و دوم اینکه ثابت حرکت هستند.

www.Endbook.net

درس نامه مکانیک کوانتومی

درس دوم: آشنایی با ساختمان ریاضی مکانیک کوانتومی

۱ مقدمه

دراین درس با ریاضیات مورد نیاز برای فهم چارچوب نظری مکانیک کوانتومی آشنامی شویم. فرض می کنیم که خواننده با مفهوم میدان اعداد آشناست. دو نمونه مهم از میدان ها عبارت اند از میدان اعداد حقیقی و میدان اعداد مختلط. نخست فضاهای برداری بابعد محدود را بررسی می کنیم و سپس به فضاهای برداری بی نهایت بعدی خواهیم پرداخت. تاکید ما به خصوص بر معرفی نمادگذاری دیراک برای بردارها و عملگرهاست که به طور گسترده ای درمکانیک کوانتومی مورداستفاده قرارمی گیرد. باید تاکید کنیم که

۲ فضای برداری

مجموعه V را یک فضای برداری روی میدان اعداد F می گوییم هرگاه دو عمل زیر تعریف شده

$$+ : V \times V \longrightarrow V \qquad \text{و} \qquad . : F \times V \longrightarrow V \tag{1}$$

ودارای خاصیت های زیر باشند:

$$\begin{aligned}
&A1: && x + y = y + x \\
&A2: && (x + y) + z = x + (y + z) \\
&A3: && \exists 0 \in V \mid && 0 + x = x \\
&A4: && \forall x \in V && \exists - x \in V \mid && -x + x = 0,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&M1: && \alpha(x + y) = \alpha x + \alpha y \\
&M2: && (\alpha + \beta)x = \alpha x + \beta x \\
&M1: && \alpha(\beta x) = (\alpha\beta)x \\
&M1: && 1x = x.
\end{aligned} \tag{2}$$

www.Endbook.net

به ازای هر دو بردار u و v و هر عدد $\alpha \in F$، $u+v$ جمع دو بردار و $\alpha\ u$ ضرب اسکالرِ α در بردارِ v نامیده می شود.
بسته به این که F میدان اعداد حقیقیِ R یامیدان اعداد مختلط ِC باشد، فضای برداری V را فضای برداری حقیقی یا مختلط می گوییم.

مثال ها: مجموعه های زیر هرکدام یک فضای برداری هستند. دراغلب این مثال ها تعریف جمع $+$ و ضرب اسکالر بدیهی است و خواننده می تواند خود تعریف طبیعی مورد نظر را پیشنهاد کند.

۱ — R^n یا مجموعه n تایی های مرتب حقیقی یک فضای برداری حقیقی است.

۲ — C^n یامجموعه n تایی مرتب مختلط ، یک فضای برداری مختلط است.

۳ — $M_{m\times n}(F)$ یامجموعه ماتریس های $m\times n$ که درایه های آن عناصریک میدان F هستند، نیزیک فضای برداری است.

۴ — $P_n([a,b])$ یا مجموعه چندجمله های های حقیقی مرتبه n ازمتغیر x که درفاصله $[a,b]$ تعریف شده‌اند.

۵ — $C^k[a,b]$ یا مجموعه توابع حقیقی یا مختلط k بارمشتق پذیردرفاصله $[a,b]$. دو تابع f و g به صورت زیر با یکدیگر جمع می شوند:

$$(f+g)(x) := f(x)+g(x), \qquad (\alpha : f)(x) = \alpha f(x). \tag{3}$$

ازاین به بعد منحصراً با فضاهای برداری مختلط کارمی کنیم.

تعریف: هرگاه V یک فضای برداری و $W \subset V$ زیرمجموعه ای ازآن باشد، آنگاه W رایک زیرفضای V می گوییم اگر W نسبت به جمع بردارها و ضرب اعداد دربردارها بسته باشد.

مثال ها:

۱ — درفضای ۳ بعدی معمولی، صفحه xy یک زیر فضا از فضای ۳ بعدی است. به طور کلی تر هر خطی که از مبداء بگذرد یک زیر فضای یک بعدی و هرصفحه ای که از مبداء بگذرد یک زیر فضای دو بعدی از فضای سه بعدی است.

۲ — در فضای ماتریس های مربعی، مجموعه ماتریس های بالا مثلثی یک زیر فضا ست.

www.Endbook.net

۳ – در فضای توابع پیوسته $C[a,b]$، مجموعه $P_n([a,b])$ یک زیر فضاست.

۴ – در فضای توابع پیوسته، مجموعه توابع مشتق پذیر یک زیر فضاست.

۳ ضرب داخلی و اندازه

تعریف: دریک فضای برداری V یک عمل دوتایی $\langle , \rangle : V \times V \longrightarrow C$ رایک ضرب داخلی می نامیم هرگاه درشرایط زیرصدق کند:

$$\begin{aligned} &\langle x, y + \alpha z \rangle = \langle x, y \rangle + \alpha \langle x, z \rangle \\ &\langle x, y \rangle = \langle y, x \rangle^* \\ &\langle x, x \rangle \geq 0 \\ &\langle x, x \rangle = 0 \longrightarrow x = 0. \end{aligned} \tag{4}$$

مثالهایی از ضرب داخلی:

الف – در C^n:

$$\langle x, y \rangle := \sum_{i=1}^{n} x_i^* y_i \tag{5}$$

ب – در $M_{n,m}(C)$

$$\langle A, B \rangle := tr(AB^\dagger) \tag{6}$$

ج – در $C^k[a,b]$.

$$\langle f, g \rangle := \int_a^b f^*(x) g(x) dx. \tag{7}$$

فضایی را که به یک ضرب داخلی مجهزشده باشد یک فضای بردای ضرب داخلی یا $Inner \;\; product \;\; space$ می گوییم.

قضیه کوشی–شوارتز: دریک فضای ضرب داخلی داریم:

$$|\langle x, y \rangle|^2 \leq \langle x, x \rangle \langle y, y \rangle. \tag{8}$$

www.Endbook.net

اثبات: بردار $v := \alpha x + y$ را درنظرمی گیریم. داریم

$$f(\alpha, \alpha^*) := \langle v, v \rangle \geq 0 \longrightarrow \langle \alpha x + y, \alpha x + y \rangle \geq 0$$
$$\longrightarrow |\alpha|^2 \langle x, x \rangle + \alpha^* \langle x, y \rangle + \alpha \langle y, x \rangle + \langle y, y \rangle \geq 0. \quad (9)$$

طرف چپ این رابطه یک تابع درجه ۲ از متغیر مختلطِ α است و به ازای هر مقدار از این متغیر، از جمله $\alpha = \frac{-\langle x,y \rangle}{\langle x,x \rangle}$، بازهم بزرگتر از صفر است. هرگاه این مقدارِ α را در طرف چپ قرار دهیم و عبارت بدست آمده را ساده کنیم به نامساوی کوشی شوارتز می رسیم.

اندازه یک بردار:

درهرفضای ضرب داخلی می توان اندازه یک بردار را به شکل زیرتعریف کرد:

$$||x|| := \sqrt{\langle x, x \rangle}. \quad (10)$$

باتوجه به نامساوی کوشی شوارتز می توان نوشت :

$$|\langle x, y \rangle| \leq ||x||\ ||y||. \quad (11)$$

مثال هایی ازاندازه یک بردار:

الف – در C^n:

$$|x|^2 := \sum_{i=1}^{n} x_i^* x_i \quad (12)$$

ب – در $M_{n,m}(C)$

$$|A|^2 := tr(AA^\dagger) \quad (13)$$

ج – در $C^k[a, b]$.

$$|f| := \int_a^b f^*(x) f(x) dx. \quad (14)$$

www.Endbook.net

ازنامساوی کوشی شوارتز دو نتیجه مهم حاصل می شود. یکی تعریف زاویه بین دو بردار به صورت

$$\cos\phi := \frac{|\langle x,y\rangle|}{|x||y|} \tag{15}$$

ودیگری نامساوی مثلث:

$$||x+y||\langle||x||+||y||. \tag{16}$$

فضای نُرم دار یا اندازه دار: یک فضای برداری V که درآن نگاشت $||\ \ ||: V \longrightarrow R$ تعریف شده باشد را فضای اندازه دار یا $Normed\ \ Space$ می گوییم هرگاه شرایط زیربرقرارباشند:

$$\begin{aligned} &||v|| \geq 0 \ \ \forall v \\ &||v|| = 0 \longrightarrow v = 0 \\ &||\alpha v|| = |a|\ ||v|| \\ &||v+w|| \leq ||v|| + ||w||. \end{aligned} \tag{17}$$

هرفضای ضرب داخلی باهمان اندازه ای که ازروی ضرب داخلی تعریف می شود یک فضای اندازه داراست، ولی یک فضای اندازه دار الزاماً یک فضای ضرب داخلی نیست. به عبارت دیگر یک اندازه لزوماً ازروی یک ضرب داخلی تعریف نشده است. به عنوان مثال درفضای توابع $C[a,b]$ نگاشت $||f|| = sup_{x\in[a,b]}|f(x)|$ یک اندازه است که ازروی یک ضرب داخلی تعریف نشده است.

فضای متریک: دریک فضای برداری ِنرم دارِ V می توان فاصله بین دو بردار را به شکل زیر تعریف کرد:

$$d(x,y) := ||x-y||. \tag{18}$$

این فاصله دارای خواص زیر است:

$$\begin{aligned} &d(x,y) \geq 0 \\ &d(x,x) = 0 \qquad d(x,y) = 0 \longrightarrow x = y \\ &d(x,z) \leq d(x,y) + d(y,z). \end{aligned} \tag{19}$$

اما می توان دریک مجموعه‌ی M که الزاماً فضای برداری نیست، فاصله بین دو نقطه را تعریف کرد به این شکل که هر تابع $d: M\times M \longrightarrow R$ را متریک می گوییم هرگاه در خواص بالا صدق کند.

www.Endbook.net

۴ پایه

استقلال خطی: در فضای برداری V، بردارهای $v_1, v_2, \cdots v_n$ مستقل خطی نامیده می شوند اگر تنها حل معادله $\sum_{i=1}^{n} c_i v_i = 0$ برای اعداد حقیقی یا مختلطِ $c_1, c_2, \cdots c_n$ آن باشد که $c_1 = c_2 = \cdots c_n = 0$.
یک مجموعه بردار مستقل خطی $e_1, e_2, \cdots e_n$ یک پایه برای فضای برداری V خوانده می شود هرگاه این مجموعه بردارها مستقل خطی باشند و ثانیا هربردار متعلق به V را بتوان به صورت خطی برحسب این بردارها بسط داد، یعنی

$$\forall\ v \in V, \longrightarrow v = \sum_{i=1}^{n} v_i e_i. \tag{20}$$

v_i ها مولفه های بردارِ v در پایه فوق خوانده می شوند. بدیهی است که وقتی پایه را عوض کنیم، مولفه های یک بردار نیز عوض می شوند.
یک پایه متعامد یکه یا بهنجار خوانده می شود هرگاه شرط زیر را برآورده کند:

$$\langle e_i, e_j \rangle = \delta_{i,j}, \tag{21}$$

که به این معناست که بردارهای پایه دو به دو برهم عمودند و اندازه هرکدام از آنها برابر با یک است.

پایه بهنجار $\{e_i,\ \ i = 1, \cdots N\}$ را برای فضای V درنظرمی گیریم. $x \in V$ را می توان برحسب این بردارهای پایه بسط داد ونوشت:

$$x = \sum_{i=1}^{N} x_i e_i. \tag{22}$$

بدیهی است که

$$x_i = \langle e_i, x \rangle. \tag{23}$$

روش گرام اشمیت $Gram - Schmidt$ برای ساختن پایه بهنجار

دریک فضای ضرب داخلی، ازیک پایه دلخواه مثل $\{v_1, v_2, \cdots v_N\}$ می توان به روش زیر که به روش گرام اشمیت موسوم است یک پایه بهنجارساخت:
قرارمی دهیم:

$$e_1 := \frac{v_1}{|v_1|}, \qquad e_2 := \frac{v_2 - \langle e_1, v_2 \rangle e_1}{|v_2 - \langle e_1, v_2 \rangle e_1|}, \qquad e_3 := \frac{v_3 - \langle e_1, v_3 \rangle e_1 - \langle e_2, v_3 \rangle e_2}{|v_3 - \langle e_1, v_3 \rangle e_1 - \langle e_2, v_3 \rangle e_2|}, \cdots \tag{24}$$

خواننده می تواند براحتی تحقیق کند که پایه جدید بهنجاراست. تعبیر هندسی روش بالا نیز روشن وساده است.

www.Endbook.net

مثالهایی از پایه های بهنجار:

الف — در R^n و C^n:

$$e_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ . \\ 0 \end{pmatrix} \qquad e_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ . \\ 0 \end{pmatrix} \qquad e_n = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ . \\ 1 \end{pmatrix} \tag{25}$$

ب — در $M_{\mu\times n}(C), M_{m\times n}(R)$:

$$E_{ij}, \quad i = 1, \cdots m, \ j = 1 \cdots n, \tag{26}$$

که درآن E_{ij} ماتریسی است که درایه (i,j) آن برابر با ۱ و بقیه درایه های آن برابرباصفراست.

ج — در $C^k[a,b]$ ، مجموعه $\{e_n(x), f_n(x), \quad n = 0 \cdots \infty\}$ با تعریف

$$e_n(x) := \sqrt{\frac{2}{b-a}} \sin(\frac{n\pi}{b-a})x, \qquad f_n := \sqrt{\frac{2}{b-a}} \cos(\frac{n\pi}{b-a})x. \tag{27}$$

د — در $P_n[a,b]$، می توان یک پایه مثل $\{1, x, x^2, \cdots x^n\}$ درنظرگرفت و آن را با فرایند گرام—اشمیت بهنجارکرد. تکمیل این تمرین را به خواننده واگذار می کنیم.

تغییر پایه فرض کنید که $\{e_i, \ i = 1 \cdots n\}$ و $\{e'_i, i = 1 \cdots n\}$ دو پایه بهنجار برای یک فضای برداری V باشند. دراین صورت می توان نوشت

$$e'_i = S_{ij} e_j \tag{28}$$

که درنوشتن این رابطه از قرارداد جمع استفاده کرده‌ایم یعنی روی شاخص های تکراری جمع زده‌ایم. دراین صورت چون هر دو پایه بهنجار هستند داریم

$$\delta_{ij} \equiv \langle e'_i, e'_j \rangle = \langle S_{ik} e_k, S_{jl} e_l \rangle = S^*_{ik} S_{jl} \langle e_k, e_l \rangle = S^*_{il} S_{jk} \delta_{kl} = S^*_{il} S_{jl}. \tag{29}$$

www.Endbook.net

هرگاه این رابطه را به شکل ماتریسی بنویسیم خواهیم داشت:

$$S^{\dagger}S = I, \tag{30}$$

که درآن الحاقی یک ماتریس به شکل زیر تعریف شده است: $(S^{\dagger})_{ij} = S^{*}_{ji}$. ماتریس هایی که دارای خاصیت فوق باشند، یعنی الحاقی آنها با وارون آنها برابر باشد، ماتریس های یکانی خوانده می شوند.
تحت تغییر پایه مولفه های یک بردار تغییر می کنند. داریم

$$x = \sum_{i=1}^{n} x_i e_i = \sum_{j=1}^{n} x'_i e'_i. \tag{31}$$

می خواهیم ببنیم مولفه های این بردار در دو پایه چه ربطی به هم دارند. می نویسیم

$$x'_i = \langle e'_i, x\rangle = \langle S_{ij}e_j, x\rangle = S^{*}_{ij}\langle e_j, x\rangle = S^{*}_{ij}x_j. \tag{32}$$

۵ تبدیلات خطی

دریک فضای برداری V، نگاشت $\hat{T} : V \longrightarrow V$ را یک تبدیل خطی یا عملگر خطی $Linear\ \ operator$ می گوییم هرگاه دارای خاصیت زیرباشد:

$$\hat{T}(x + \alpha y) = \hat{T}(x) + \alpha\hat{T}(y) \qquad \forall\alpha \in F, \quad x, y \in V. \tag{33}$$

بدلیل خطی بودن، یک عملگرخطی تنها با اثرش روی بردارهای پایه مشخص می شود، زیرا

$$\hat{T}x = \hat{T}(\sum_{i=1}^{N} x_i e_i) = \sum_{i=1}^{N} x_i \hat{T}e_i. \tag{34}$$

از آنجا که $\hat{T}e_i$ برداری از فضای V است، می توانیم آن را برحسب بردارهای پایه بسط دهیم. می نویسیم:

$$\hat{T}e_i = \sum_{j=1}^{N} T_{ji}e_j \tag{35}$$

ماتریس T با درایه های T_{mn} را ماتریس مربوط به تبدیل خطی $\hat{T}$ درپایه $\{e_i\}$ می گوییم. هرگاه پایه فوق بهنجارباشد می توانیم بنویسیم

$$\langle e_j, \hat{T}e_i\rangle = T_{ji}. \tag{36}$$

www.Endbook.net

اثر تبدیل خطی $\hat{T}$ روی یک بردار x عبارت خواهد بود از:

$$\hat{T}x = \hat{T}x_i e_i = x_i(\hat{T}e_i) = x_i T_{ji} e_j = (T_{ji}x_i)e_j = (Tx)_j e_j \tag{37}$$

بنابراین اثر تبدیل خطی $\hat{T}$ روی x آن است که ماتریس تبدیل خطی T ازچپ در ماتریس ستونی x ضرب می شود.

هرگاه پایه را عوض کنیم ماتریس تبدیل خطی نیز عوض خواهد شد. اگر به جای پایه $\{e_i\}$ پایه $\{e'_i\}$ را درنظربگیریم که درآن $e'_i = S_{li}e_l$ آنگاه خواهیم داشت

$$T'_{ij} = \langle e'_i, \hat{T}e'_j \rangle = \langle S_{li}e_l, \hat{T}S_{mj}e_m \rangle = S^*_{li}T_{lm}S_{mj}, \tag{38}$$

که به صورت فشرده زیرقابل بازنویسی است:

$$T' = S^\dagger T S, \tag{39}$$

که درآن $S^\dagger$ با الحاقی ماتریس S خوانده می شود و چنین تعریف می شود:

$$S^\dagger = (S^*)^T, \qquad \text{یا} \qquad S^\dagger_{ij} = (S^*)_{ji}. \tag{40}$$

تذکر تبدیل خطی لزومی ندارد که از یک فضای برداری به همان فضا تعریف شود. در حالت کلی تبدیل خطی یک نگاشت $\hat{T} : V \longrightarrow W$ از یک فضای برداری به یک فضای برداری دیگر، تبدیل خطی است اگر در شرط $\hat{T}(\alpha x + y) = \alpha \hat{T}x + \hat{T}y \quad \forall\ \alpha, x, y$ صدق کند. بااین شرط معلوم می شود که میدانی که هردو فضای برداری روی آن تعریف می شوند می بایست یکی باشد تا تبدیل خطی قابل تعریف باشد.

هرگاه $\hat{A}$ و $\hat{B}$ دوتبدیل خطی دلخواه روی V و α عددی دلخواه متعلق به میدان F باشد، آنگاه $\alpha\hat{A} + \hat{B}$ نیز یک تبدیل خطی روی V است. بنابراین مجموعه تبدیلات خطی روی V تشکیل یک فضای برداری می دهد که آن را با $L(V)$ نمایش می دهیم. هم چنین ضرب دو تبدیل خطی با تعریف

$$(\hat{A}\hat{B})x := \hat{A}(\hat{B}x) \tag{41}$$

نیز یک تبدیل خطی است. بنابراین $L(V)$ نه تنهایک فضای برداری است بلکه یک جبراست به این معناکه یک فضای برداری است که درآن یک عمل ضرب شرکت پذیر $(\hat{A}\hat{B})\hat{C} = \hat{A}(\hat{B}\hat{C})$ تعریف شده است. این جبر جابجایی نیست $(\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A})$ اما یکه دار یا یونیتال $(Unital)$ است به این معنا که درآن عنصریکه وجود دارد (دراینجا عملگرهمانی) با خاصیت زیر $\hat{A}\hat{I} = \hat{I}\hat{A} = \hat{A}$.

www.Endbook.net

دیدیم که به یک عملگرخطی می توان یک ماتریس نسبت داد. وقتی که پایه فضارامعین می کنیم بین فضای تبدیلات خطی یعنی $L(V)$ و فضای ماتریس های $M_{n\times n}(C)$ یک یکسانی بوجود می آید. بنابراین می توان ازیک تبدیل خطی ویا ماتریس آن بسته به راحتی سخن گفت. می توان باتعریف زیر، فضای تبدیلات خطی روی V را به یک فضای ضرب داخلی تبدیل کرد:

$$\langle \hat{A}, \hat{B} \rangle = tr(AB^{\dagger}) \tag{42}$$

خواننده می تواند نشان دهد که این تعریف مستقل از پایه ای است که برای فضای برداری درنظرمی گیریم.

مثال هایی از تبدیلات خطی:

الف — در C^n ، هرتبدیل به صورت $x \longrightarrow x' = Ax$ که درآن $A \in M_{n\times n}(C)$ یک تبدیل خطی تعریف می کند. بالعکس هر تبدیل خطی در C^n چیزی نیست جز ضرب یک ماتریس مربعی $n \times n$ در یک بردار ستونی n بعدی.

ب — در $M_{m\times n}(C)$، هرتبدیلی که $x \in M_{m\times n}(C)$ را به صورت زیرتبدیل می کند

$$x \longrightarrow x' = AxB^T, \tag{43}$$

که درآن $A \in M_{m,m}(C)$ و $B \in M_{n,n}(C)$ یک تبدیل خطی است. خواننده با الهام از مثال الف و اینکه هر ماتریس $m \times n$ را می توان به صورت یک بردار mn بعدی در نظر گرفت می تواند ثابت کند که کلی ترین تبدیل خطی روی چنین فضایی عبارت است از جمعی از تبدیلات فوق. یعنی کلی ترین تبدیل روی ماتریس های $M_{m\times n}(C)$ عبارت است از:

$$x \longrightarrow x' := \sum_i A_i x B_i. \tag{44}$$

ج — در $C^k[a,b]$. باالهام از مثال الف می توانیم بگوییم که کلی ترین تبدیل خطی روی چنین فضایی، تبدیلی است که $f \in C^k(a,b)$ را به صورت زیرتبدیل می کند:

$$f(x) \longrightarrow f'(x) := \int_a^b K(x,y) f(y) \tag{45}$$

که درآن $K(x,y)$ تابعی است که نسبت به هردو مختصه خود k بار مشتق پذیراست. این تبدیل را یک تبدیل انتگرال و $K(x,y)$ را هسته آن می خوانند. دربعضی ازموارد می توان تبدیل خطی را به صورت یک عملگر دیفرانسیل نیز نوشت: به عنوان مثال درفضای $C^{\infty}[a,b]$ یعنی فضای توابع بی نهایت مشتق پذیر تبدیلات ازنوع

$$f(x) \longrightarrow \frac{d^r}{dx^r} f(x) \qquad \text{یا} f(x) \longrightarrow x^r f(x) \tag{46}$$

www.Endbook.net

و هرترکیب خطی ازآنها یک عملگرخطی است مثل تبدیل زیر:

$$f(x) \longrightarrow (x^2\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d}{dx} + 1)f(x). \tag{47}$$

یکسانی دو فضای برداری دو فضای برداری V و W یکسان خوانده می شوند هرگاه بتوان بین آنها یک نگاشت خطی وارون پذیر تعریف کرد. به عنوان مثال فضای بردرای ماتریس های $m \times n$ با فضای برداری C^{mn} یکسان است. هم چنین فضای برداری چند جمله ای های مختلط مرتبه n با فضای C^n یکسان است. خواننده خود می تواند مثال های بیشتری از یکسانی بین فضاهای برداری پیدا کند.

٦ فضای کامل، باناخ وهیلبرت

دنباله کوشی: دریک فضای برداری دنباله ای از بردارها مثل $\{x_1, x_2, \cdots x_n \cdots\}$ درنظرمی گیریم. این دنباله یک دنباله کوشی نامیده می شود هرگاه فاصله بین بردارها به تدریج کم شود. به عبارت دقیقتر هرگاه به ازای هر $\epsilon > 0$ عددی مثل N یافت شود به قسمی که

$$\forall \ \ m, n > N \longrightarrow |x_n - x_m| \leq \epsilon. \tag{48}$$

دریک فضای برداری حد یک دنباله کوشی لزوماً درخود فضا قرارندارد. به عنوان مثال هرگاه میدان اعداد گویا را به عنوان یک فضای برداری روی خودش درنظربگیریم دنباله $\{(1 + \frac{1}{n})^n\}$ اگرچه یک دنباله کوشی است، ولی حد آن درداخل میدان اعدادگویا قرارندارد. باافزودن اعداد گنگ به اعداد گویا میدان اعداد حقیقی بدست می آید که کامل است یعنی حد دنباله های کوشی را درخود دارد.

فضای برداری کامل: یک فضای برداری را فضای برداری کامل می گوییم هرگاه حد دنباله های کوشی رادرخود داشته باشد.

فضای باناخ: یک فضای برداری نرم دار را که کامل باشد فضای باناخ می نامیم.

فضای هیلبرت: یک فضای ضرب داخلی را که کامل باشد فضای هیلبرت می نامیم. ازانجا که میدان اعداد حقیقی و مختلط کامل هستند، می توان ثابت کرد که هرفضای محدود بعدی که روی این میدان ها ساخته می شود نیز کامل بوده وبنابراین یک فضای هیلبرت است.

مثال: فضای توابع حقیقی $C[-1, 1]$ را با ضرب داخلی استاندارد $\langle f, g\rangle = \int_{-1}^{2} f(x)g(x)dx$ درنظرمی گیریم. دراین فضا

www.Endbook.net

دنباله توابع زیرراتعریف می کنیم:

$$f_n(x) := \begin{cases} 0 & x \leq -\frac{1}{n} \\ \frac{1}{2}(nx+1) & -\frac{1}{n} \leq x \leq \frac{1}{n} \\ 1 & \frac{1}{n} \leq x \end{cases} \tag{49}$$

خواننده می تواند براحتی نشان دهد که این دنباله یک دنباله کوشی است. اما حداین دنباله تابع ناپیوسته پله است که درفضای $C[-1,1]$ قرارندارد. بنابراین $C[-1,1]$ یک فضای هیلبرت نیست.

فضای $L^2_w[a,b]$: فضای توابع مختلط با ضرب داخلی $\langle f,g\rangle = \int_a^b w(x)f^*(x)g(x)dx$ که درآن w یک تابع دلخواه مثبت است باشرط $||f|| < \infty$، فضای توابع انتگرال مجذور پذیر خوانده می شود. هیلبرت ثابت کرده است که این فضا کامل است و به همین مناسبت این فضا یک فضای هیلبرت نامیده می شود. اهمیت این نوع فضاها دراستفاده وسیع آنها در مکانیک کوانتومی است. برای اثبات این قضیه وقضیه زیر، خواننده می بایست به کتاب های آنالیز یا آنالیزتابعی مراجعه کند.

قضیه: هرفضای هیلبرت ِکه محدود بعد نباشد، بافضای $L^2_w[a,b]$ یکسان است.

۷ مسئله ویژه مقدار

عمگلر $\hat{T} : V \longrightarrow V$ را درنظرمی گیریم. مسئله ویژه مقدار عبارت است ازیافتن بردارهای غیرصفری است که تحت اثر $\hat{T}$ به مضربی از خود تبدیل شوند، یعنی

$$\hat{T}x = \lambda x \tag{50}$$

بردار x غیر صفر خواهد بود هرگاه ماتریس $T - \lambda I$ وارون پذیرنباشد یعنی اینکه

$$det(T - \lambda I) = 0. \tag{51}$$

این معادله یک معادله درجه N است که درحوزه اعداد مختلط حتماً N تا جواب دارد که آنهارابا $\{\lambda_i,\ i = 1, \cdots N\}$ نشان می دهیم وآن هارا ویژه مقدارهای تبدیل $\hat{T}$ می گوییم. این جواب ها لزوماً همه باهم متفاوت نیستند.
بردارمربوط به λ_i را که درمعادله $\hat{T}v_i = \lambda_i v_i$ صدق می کند ویژه بردارمربوط به آن ویژه مقدارمی گوییم.
هرگاه که یک ویژه مقدار مثل λ_i، g_i بارتکرارشود گوییم درجه واگنی آن g_i است.

www.Endbook.net

هرگاه x و y ویژه بردارمربوط به λ باشند بدیهی است که هرترکیب خطی آنهانیز ویژه بردار مربوط به λ است. بنابراین مجموعه بردارهای متعلق به یک ویژه مقدارتشکیل یک زیرفضامی دهند که آن را ویژه فضای مربوط به آن ویژه مقدارمی گویند.

۸ عملگرهای هرمیتی، یکانی و بهنجار

تعریف: دریک فضای ضرب داخلی، الحاقی یا $Adjoint$ یک عملگر T عملگری مثل $\hat{T}^\dagger$ است که درشرط زیرصدق کند:

$$\langle v, \hat{T}w\rangle = \langle \hat{T}^\dagger v, w\rangle \qquad \forall v, w \in V. \tag{52}$$

بااستفاده ازاین تعریف می توان براحتی خواص زیرراثابت کرد.

قضیه:

$$\begin{aligned} (\hat{A}^\dagger)^\dagger &= \hat{A} \\ (c\hat{A})^\dagger &= c^*\hat{A}^\dagger \\ (\hat{A}+\hat{B})^\dagger &= \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger \\ (\hat{A}\hat{B})^\dagger &= \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger. \end{aligned} \tag{53}$$

اثبات: فقط رابطه آخر را ثابت می کنیم. اثبات بقیه روابط مشابه است. داریم

$$\langle x, \hat{A}\hat{B}y\rangle = \langle (\hat{A}\hat{B})^\dagger x, y\rangle \tag{54}$$

از طرفی

$$\langle x, \hat{A}\hat{B}y\rangle = \langle \hat{A}^\dagger, \hat{B}y\rangle = \langle \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger x, y\rangle. \tag{55}$$

با مقایسه این دو رابطه بدست می آوریم

$$\langle [(\hat{A}\hat{B})^\dagger - \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger]x, y\rangle = 0, \qquad \forall x, y. \tag{56}$$

از آنجا که این رابطه برای هر بردار y درست است نتیجه می گیریم

$$[(\hat{A}\hat{B})^\dagger - \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger]x = 0 \quad \forall x, \quad \longrightarrow (\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger. \tag{57}$$

www.Endbook.net

تعریف: عملگرهرمیتی: دریک فضای ضرب داخلی عملگرهرمیتی به عملگری گفته می شود که درشرط $\hat{T}^\dagger = \hat{T}$ صدق کند. عملگر پاد هرمیتی به عملگری گفته می شود که درشرط $\hat{T}^\dagger = -\hat{T}$ صدق کند.

مثال: درفضای $C^\infty[a,b]$ عملگر $\hat{D} := \frac{\partial}{\partial x}$ رادرنظرمی گیریم. این عملگردرزیرفضایی که از توابع تناوبی تشکیل می شود (باشرط $f(a) = f(b)$) پادهرمیتی است . درنتیجه عملگر $\hat{P} := -i\hat{D}$ دراین زیرفضا هرمیتی خواهد بود. هم چنین این تابع در فضای هیلبرت $L^2[-\infty, \infty]$ هرمیتی است.

عملگر یکانی: دریک فضای ضرب داخلی، عملگریکانی $\hat{U}$ به عملگری گفته می شود که ضرب داخلی بردارهارا حفظ کند، یعنی

$$\langle \hat{U}v, \hat{U}w \rangle = \langle v, w \rangle. \tag{58}$$

چنین عملگری درشرط $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = I$ صدق می کند. واضح است که یک عملگر یکانی را وقتی دریک پایه بهنجار نمایش دهیم متناظر با یک ماتریس یکانی خواهد بود.

قضیه: عملگری $\hat{U}$ یکانی است اگروفقط اگر اندازه همه بردارها را حفظ کند.

اثبات: اگر $\hat{U}$ یکانی باشد بااستفاده از 58 معلوم می شود که اندازه بردارهاراحفظ می کند. حال فرض کنید که $\hat{U}$ اندازه همه بردارها را حفظ کند. به ازای هردوبرداردلخواه x, y می دانیم که

$$||\hat{U}x|| = ||x||, \qquad ||\hat{U}y|| = ||y||, \qquad ||\hat{U}(x+y)|| = ||x+y||, \qquad ||\hat{U}(x+iy)|| = ||x+iy||. \tag{59}$$

ازاین روابط نتیجه می گیریم که $\langle \hat{U}x, \hat{U}y \rangle = \langle x, y \rangle$.

تعریف: عملگربهنجاریانرمال: عملگرنرمال عملگری است که باالحاقی خود جابجاشود. طبیعی است که یک عملگرهرمیتی ویکانی نرمال است.

خواننده می تواند ثابت کند که دریک پایه متعامد یکه، ماتریس مربوط به یک عملگرهرمیتی، یکانی یا بهنجار، یک ماتریس هرمیتی، یکانی یا بهنجار است .

قضیه: عملگرِ $\hat{A}$ بهنجاراست اگروفقط اگر به ازای هر بردار x داشته باشیم

$$||\hat{A}x|| = ||\hat{A}^\dagger x||. \tag{60}$$

www.Endbook.net

اثبات: اثبات جهت اول: اگر A بهنجارباشد داریم $\hat{A}\hat{A}^\dagger = \hat{A}^\dagger\hat{A}$. بنابراین

$$\langle \hat{A}x, \hat{A}x\rangle = \langle \hat{A}^\dagger\hat{A}x, x\rangle = \langle \hat{A}\hat{A}^\dagger x, x\rangle = \langle \hat{A}^\dagger x, \hat{A}^\dagger x\rangle. \tag{61}$$

اثبات جهت دوم: از تساوی (60) برای برای $x, y, x+y$ و $x+iy$ که درآن x و y دوبردار دلخواه هستند نتیجه می گیریم

$$\langle \hat{A}x, \hat{A}y\rangle = \langle \hat{A}^\dagger x, \hat{A}^\dagger y\rangle, \qquad \forall x, y. \tag{62}$$

درنتیجه

$$\langle \hat{A}^\dagger\hat{A}x, y\rangle = \langle \hat{A}\hat{A}^\dagger x, y\rangle, \tag{63}$$

ویا

$$\langle (\hat{A}^\dagger\hat{A} - \hat{A}^\dagger\hat{A})x, y\rangle = 0. \tag{64}$$

چون x و y دلخواه هستند نتیجه می گیریم که $\hat{A}^\dagger\hat{A} = \hat{A}\hat{A}^\dagger$ وبنابراین $\hat{A}$ یک عملگربهنجاراست.

قضیه: فرض کنید که $\hat{A}$ یک عملگربهنجاراست. دراین صورت اگر $\hat{A}x = \lambda x$ آنگاه $\hat{A}^\dagger x = \lambda^* x$.
اثبات: اگر $\hat{A}$ بهنجارباشد آنگاه $\hat{A} - \lambda I$ نیزبهنجاراست. حال از قضیه قبل استفاده می کنیم:

$$||(\hat{A} - \lambda I)x|| = 0 \longrightarrow ||(\hat{A} - \lambda I)^\dagger x|| = 0 \longrightarrow ||(\hat{A}^\dagger - \lambda^* I)x|| = 0 \longrightarrow \hat{A}^\dagger x = \lambda^* x. \tag{65}$$

ازاین قضیه دونتیجه ساده بدست می آید:

نتیجه اول: ویژه مقادیریک عملگرهرمیتی حقیقی هستند.

نتیجه دوم؛ ویژه مقادیر یک عملگریکانی فازخالص هستند.

قضیه: ویژه بردارهای یک عملگر نرمال که متناظربا ویژه مقدارهای متمایزهستند برهم عمودند.

اثبات: فرض کنیم $\hat{A}x = \lambda x$ و $\hat{A}y = \mu y$. دراین صورت

$$\langle x, \mu y\rangle = \langle x, \hat{A}y\rangle = \langle \hat{A}^\dagger x, y\rangle = \langle \lambda^* x, y\rangle, \tag{66}$$

www.Endbook.net

وازآنجا

$$\longrightarrow (\mu-\lambda)\langle x,y\rangle = 0 \longrightarrow \langle x,y\rangle = 0. \tag{67}$$

۹ تجزیه طیفی $SpectralDecomposition$

قضیه: دریک فضای برداری محدود بعد ویژه بردارهای یک عملگربهنجاریک پایه برای فضا تشکیل می دهند.

اثبات: عملگر نرمال $\hat{A}$ را روی فضای n بعدی V درنظرمی گیریم. می دانیم که هرعملگر حتماً یک ویژه مقدارو یک ویژه بردارداردد. این ویژه مقدارووِیژه بردارمربوطه را با λ_1 و e_1 نشان می دهیم:

$$\hat{A}e_1 = \lambda_1 e_1. \tag{68}$$

پایه ای برای فضا انتخاب می کنیم که e_1 اولین عضو آن باشد. دراین صورت ماتریس عملگر A به شکل زیردرمی آید:

$$A = \begin{pmatrix} \lambda_1 & b_{n-1} \\ 0 & A_{n-1} \end{pmatrix} \tag{69}$$

که درآن A_{n-1} یک ماتریس $n-1$ بعدی و b_{n-1} یک بردارسطری $n-1$ بعدی است. اماازقضیه های قبل می دانیم که اگر $Ae_1 = \lambda_1 e_1$ آنگاه $A^\dagger e_1 = \lambda_1^* e_1$. دراین جا ازبهنجاربودن عملگر A استفاده کرده ایم. بنابراین ماتریس $A^\dagger$ نیز می بایست به فرم بالامثلثی باشد ودرنتیجه می بایست $b_{n-1} = 0$. پس A به شکل بلوکه قطری ِزیر درمی آید:

$$A = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & A_{n-1} \end{pmatrix}. \tag{70}$$

(یک راه ساده تر آن است که مستقیماً از تساوی $AA^\dagger = A^\dagger A$ استفاده کنیم.) حال A_{n-1} به نوبه خود یک عملگرنرمال است و حداقل یک ویژه مقدارویک ویژه بردارداردد. همین استدلال رادرموردآن تکرارمی کنیم ومی بینیم که درپایه ای که اولین و دومین عنصر آن e_1 و e_2 هستند ماتریس عملگر A به شکل زیردرمی آید:

$$A = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & A_{n-2} \end{pmatrix}. \tag{71}$$

باتکراراین عمل می بینیم که درپایه ویژه بردارهای A یعنی پایه $\{e_1, e_2, \cdots e_n\}$، A به طورکامل قطری می شود.

www.Endbook.net

این موضوع برای عملگرهایا ماتریس های نابهنجار صادق نیست. به عنوان مثال، ماتریس زیر را درنظر می گیریم

$$B = \begin{pmatrix} 1 & c \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad c \neq 0. \tag{72}$$

ویژه مقدارهای این ماتریس هردو برابربایک هستند. اما تنهایک ویژه بردار برای این ماتریس وجود دارد که به شکل $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ است. بنابراین ویژه بردارهای این ماتریس نمی توانند یک پایه برای فضا تشکیل دهند.

۱.۹ قطری کردن

دیدیم که یک عملگرنرمال درپایه ویژه بردارهای خود قطری است. این امربه این معناست که یک تبدیل یکانی وجود دارد که ماتریس عملگر A راقطری می کند. برای پیداکردن فرم صریح این تبدیل یکانی به ترتیب زیرعمل می کنیم. ویژه مقدارها و ویژه بردارهای A را پیدامی کنیم:

$$Ae_i = \lambda_i e_i, \qquad i = 1, \cdots n. \tag{73}$$

می دانیم که ویژه بردارهای متناظر با ویژه مقدارهای متمایز برهم عمودهستند. ویژه بردارهای مربوط به یک ویژه مقداراگن را نیز با روش گرام اشمیت برهم عمود می کنیم. درنتیجه این ویژه بردارها درشرایط $\langle e_i, e_j \rangle = \delta_{ij}$ صدق می کنند. اگر e_i ها را به صورت بردارهای ستونی درنظربگیریم، $e_i^\dagger$ ها به صورت بردارهای سطری درخواهند آمد و رابطه بهنجاربودن آنها به شکل زیربیان می شود $e_i^\dagger e_j = \delta_{ij}$. حال ماتریس S را به شکل زیرمی نویسیم:

$$S = \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & \cdots & e_n \end{pmatrix} \tag{74}$$

که درآن e_i ها به عنوان بردارهای ستونی در S قرارگرفته اند. درنتیجه خواهیم داشت

$$S^\dagger = \begin{pmatrix} e_1^\dagger \\ e_2^\dagger \\ \cdot \\ \cdot \\ e_N^\dagger \end{pmatrix}. \tag{75}$$

بدلیل شرط $e_i^\dagger e_j = \delta_{ij}$ نتیجه می گیریم که

$$S^\dagger S = \begin{pmatrix} e_1^\dagger \\ e_2^\dagger \\ \cdot \\ \cdot \\ e_N^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & \cdots & e_n \end{pmatrix} = I, \tag{76}$$

www.Endbook.net

یعنی S یکانی است.

ازآنجا که $Ae_i = \lambda_i e_i$، بدست می آوریم

$$AS = A\begin{pmatrix} e_1 & e_2 & \cdots & e_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 e_1 & \lambda_2 e_2 & \cdots & \lambda_n e_n \end{pmatrix} \tag{77}$$

ودرنتیجه

$$S^\dagger AS = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix}. \tag{78}$$

بنابراین A بایک تبدیل یکانی قطری شده است. به مجموعه ویژه بردارها و ویژه مقدارهای یک عملگر نرمال اصطلاحاً طیف یا $spectrum$ آن عملگر می گویند. به همین جهت است که قطری کردن یک عملگر تجزیه طیفی نیز نامیده می شود.

قضیه: دوعملگر نرمال A و B بایکدیگر جابجامی شوند اگروفقط اگر بتوان برای آنها یک مجموعه کامل از ویژه بردارهای مشترک یافت.
این قضیه را به شکل دیگری نیز می توان بیان کرد وآن اینکه اگر دو عملگرنرمال بایکدیگر جابجاشوند حتماً می توان پایه ای یافت که درآن هردوعملگرقطری باشند. باید تاکید کنیم که این خاصیت برای هرپایه دلخواهی برقرارنیست وقضیه تنهامی گوید که می توان پایه‌ای یافت که درآن این خاصیت برقراراباشد.

این قضیه هم ازنظرمفهومی و هم از نظرکاربردی اهمیت زیادی درمکانیک کوانتومی دارد و خواننده می بایست به دقت اثبات آنرا فرابگیرد.
اثبات: فرض کنیم که A و B دوعملگرباشند که یک مجموعه ویژه بردارمشترک مثل $\{e_1, e_2, \cdots e_N\}$ داشته باشند. ازآنجا که این دوعملگرهرمیتی هستند این مجموعه را می توان به عنوان پایه فضاانتخاب کرد. دراین پایه داریم

$$Ae_i = \lambda_i e_i, \quad Be_i = \mu_i e_i \tag{79}$$

که ازآن نتیجه می گیریم

$$ABe_i = BAe_i \longrightarrow AB = BA \longrightarrow [A, B] = 0. \tag{80}$$

برعکس فرض کنیم که $[A, B] = 0$.
ویژه بردارهای عملگر A را پیدا می کنیم. واگنی ویژه مقدار λ_i را g_i می نامیم. درپایه ویژه بردارهایش، A شکل زیرراپیدامی کند.

www.Endbook.net

$$A = \begin{pmatrix} \lambda_1 I_{g_1 \times g_1} & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_k I_{g_k \times g_k} \end{pmatrix} \tag{81}$$

حال به ترتیب زیرعمل می کنیم: به ازای هر e_i

$$A(Be_i) = B(Ae_i) = B(\lambda_i e_i) = \lambda_i (Be_i), \tag{82}$$

که درآن از جابجاشدن A و B استفاده کرده ایم. رابطه فوق نشان می دهد که بردار Be_i نیز یک ویژه بردار عملگر A با ویژه مقدار λ_i است. بنابراین Be_i نیز برحسب بردارهای پایه ویژه فضای λ_i قابل بسط است. این امر به این معناست که دراین پایه (همان پایه ای که A درآن قطری است) عملگر B به شکل زیر است:

$$B = \begin{pmatrix} B_{1\,g_1 \times g_1} & & \\ & \ddots & \\ & & B_{k\,g_k \times g_k} \end{pmatrix}. \tag{83}$$

به عبارت دیگر درپایه‌فوق عملگر A قطری و عمگلر B بلوکه قطری شده است. حال می توان با تبدیل

$$S = \begin{pmatrix} S_{1\,g_1 \times g_1} & & \\ & \ddots & \\ & & S_{k\,g_k \times g_k} \end{pmatrix}. \tag{84}$$

که درآن S_i قطری کننده ماتریس B_i است کل ماتریس B راقطری کرد. این تبدیل قطری بودن A را دست نمی زند زیرا $S_i I_i S_i^\dagger = I_i$. پایه جدید پایه ای است که درآن هردوعملگر قطری هستند.

۲.۹ نمادگذاری دیراک

یک فضای برداری N_V بعدی با پایه بهنجار $\{e_1, e_2, \cdots e_N\}$ درنظرمی گیریم. هربردار $v \in V$ بسطی ازبردارهای پایه به شکل زیراست:

$$v = \sum_{i=1}^{N} v_i e_i \tag{85}$$

www.Endbook.net

ضرب داخلی این بردار درخودش به صورت زیرنوشته می شود:

$$\langle v, v\rangle = \sum_{i=1}^{N} v_i^* v_i. \tag{86}$$

می توان به ازای هرچنین برداری یک بردارسطری بانمادِ $\langle v|$ و یک بردارستونی بانمادِ $|v\rangle$ به شکل زیرتعریف کرد:

$$|v\rangle = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ . \\ v_N \end{pmatrix} \tag{87}$$

و

$$\langle v| = \begin{pmatrix} v_1^*, & v_2^*, & \cdots & v_N^* \end{pmatrix}. \tag{88}$$

بردار $|v\rangle$ را یک بردار ket و بردار $\langle v|$ را یک بردار Bra نام می نهیم. حال به این نکته توجه می کنیم که این دو بردار‌را می توانیم دریکدیگر ضرب کنیم:

$$\langle v|v\rangle = \sum_{i=1}^{N} v_i^* v_i = \langle v, v\rangle. \tag{89}$$

طرف راست یک ضرب داخلی است ولی طرف چپ ضرب دو ماتریس است. خوبی نمادگذاری دیراک آن است که انواع عملیاتی را که مامی خواهیم روی بردارهاانجام دهیم به عملیاتی ازنوع ضرب ماتریس هاتقلیل می دهد.

بردارهای پایه $e_1, \cdots e_N$ نیز نمایش کت و برای زیر را پیدامی کنند:

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ . \\ 0 \end{pmatrix} \qquad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ . \\ 0 \end{pmatrix} \qquad |N\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ . \\ 1 \end{pmatrix} \tag{90}$$

$$\langle 1| = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} \qquad \langle 2| = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} \qquad \langle N| = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}. \tag{91}$$

بنابراین داریم :

$$|v\rangle := \sum_{i=1}^{n} v_i |i\rangle. \tag{92}$$

www.Endbook.net

$$\langle v| := \sum_{i=1}^{n} v_i^* \langle i|. \tag{93}$$

ازاین به بعد تمام بردارها را به صورت کت و برا نمایش می دهیم و از نوشتن بردارهابه صورت $v = \sum_{i=1}^{n} e_i$ صرف نظرمی کنیم. می توان یک بردار برا مثل $\langle v|$ و یک بردار کت مثل $|w\rangle$ را به صورت درهم ضرب کرد و یک عدد بدست آورد که به آن براکت می گوییم

$$\langle v|w\rangle := \sum_{i=1}^{n} v_i^* w_i, \tag{94}$$

که درواقع همان ضرب داخلی بین دوبردار w و v است. این براکت دارای خاصیت های زیراست:

$$\begin{aligned}
\langle v|w + w'\rangle &= \langle v|w\rangle + \langle v|w'\rangle \\
\langle v|cw\rangle &= c\langle v|w\rangle \\
\langle cv|w\rangle = c^*\langle v|w\rangle & \\
\langle v|v\rangle &\geq 0 \\
\langle v|v\rangle &= 0 \longrightarrow |v\rangle = \langle v| = 0
\end{aligned} \tag{95}$$

براحتی می توان دید که:

$$|v\rangle = \sum_{i=1}^{N} v_i |i\rangle, \langle i|v\rangle = v_i. \tag{96}$$

می توان یک بردار کت مثل $|v\rangle$ و یک بردار برا مثل $\langle w|$ را به صورت درهم ضرب کرد و یک ماتریس بدست آورد:

$$|v\rangle\langle w| := \begin{pmatrix}
v_1 w_1^* & v_1 w_2^* & v_1 w_3^* & \cdot & v_1 w_n^* \\
v_2 w_1^* & v_2 w_2^* & v_2 w_3^* & \cdot & v_2 w_n^* \\
v_3 w_1^* & v_3 w_2^* & v_3 w_3^* & \cdot & v_3 w_n^* \\
\cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
v_n w_1^* & v_n w_2^* & v_n w_3^* & \cdot & v_n w_n^*
\end{pmatrix} \tag{97}$$

واضح است که :

$$\begin{aligned}
|v\rangle\langle w + w'| &= |v\rangle\langle w| + |v\rangle\langle w'| \\
|v\rangle\langle cw| &= c^*|v\rangle\langle w| \\
|cv\rangle\langle w| &= c|v\rangle\langle w|.
\end{aligned} \tag{98}$$

www.Endbook.net

مهمترین روابطی که درمورد بردارهای کت و برا می بایست به یادداشته باشیم ودائماً ازآنها استفاده کنیم روابط زیراست:

$$\begin{aligned} \langle i|j\rangle &= \delta_{ij} \\ \sum_i |i\rangle\langle i| &= I \end{aligned} \tag{99}$$

نمایش دیراک این حسن بسیارمهم را دارد که بسیاری از روابط دیگر نظیر آنچه را که دربخش های پیشین دیدیم به استفاده ساده ای از این دورابطه تقلیل پیدا می کنند. به عنوان مثال می توانیم بنویسیم:

$$\begin{aligned} |v\rangle &= I|v\rangle = \sum_{i=1}^{N} |i\rangle\langle i|v\rangle = \sum_{i=1}^{N} v_i|i\rangle, \\ T &= \sum_j |j\rangle\langle j|T\sum_i |i\rangle\langle i| = \sum_{i,j} T_{ji}|j\rangle\langle i|, \\ \langle i|AB|j\rangle &= \sum_k \langle i|A|k\rangle\langle k|B|j\rangle \end{aligned} \tag{100}$$

رابطه اول بسط یک بردار برحسب بردارهای پایه را بیان می کند، رابطه دوم بسط یک عملگررا برحسب عملگرهای پایه $|i\rangle\langle j|$ بیان می کند و بالاخره رابطه آخر درواقع بیان می کند که ماتریس حاصلضرب دو تبدیل خطی برابراست با حاصل ضرب ماتریس های آن دو تبدیل خطی.

هرگاه پایه فضای برداری را عوض کنیم مولفه های یک بردار عوض می شوند. نحوه عوض شدن به ترتیب زیراست:

$$v'_i := \langle i'|v\rangle = \sum_{j=1}^{n} \langle i'|j\rangle\langle j|v\rangle \longrightarrow v'_i = \sum_{j=1}^{n} S_{ij}v_j \tag{101}$$

یا به صورت ماتریسی :

$$v' := Sv \tag{102}$$

که درآن ماتریس مربعی S با درایه های $S_{ij} := \langle i'|j\rangle$ ماتریس تبدیل پایه است.

هم چنین تحت تغییر پایه درایه های یک تبدیل خطی نیز عوض می شوند. به شکل زیر:

$$\langle i'|T|j'\rangle = \sum_{i,j} \langle i'|i\rangle\langle i|T|j\rangle\langle j|j'\rangle \longrightarrow T' := STS^{-1}. \tag{103}$$

www.Endbook.net

۱۰ نگاشت بین فضای کت ها و فضای برا ها

بین فضای کت ها و فضای براها می توان نگاشتی به شکل زیرتعریف کرد:

$$^\dagger : |v\rangle \longrightarrow \langle v|, \qquad ^\dagger : \langle v| \longrightarrow |v\rangle. \tag{104}$$

براحتی دیده می شود که این نگاشت که نگاشت الحاقی نامیده می شود خواص زیر را دارد:

$$\begin{aligned} |cv\rangle^\dagger &= c^*\langle v| \\ |v+w\rangle^\dagger &= \langle v+w| \\ (|v\rangle^\dagger)^\dagger &= |v\rangle \end{aligned} \tag{105}$$

با توجه به اینکه عملگر الحاقی هم روی کت ها و هم روی برا ها اثر می کند می توان آن را روی تبدیل های خطی نیز اعمال کرد به این معنا که:

$$^\dagger(A) =^\dagger (\sum_{i,j} A_{ij}|i\rangle\langle j|) = \sum_{i,j} A^*_{ij}|j\rangle\langle i| \tag{106}$$

درنتیجه هرگاه به عملگرها به شکل ماتریس نگاه کنیم خواهیم داشت :

$$A^\dagger = (A^*)^T \tag{107}$$

که درآن نماد ^{T} به معنای ترانهاده ماتریس است.

با استفاده از این تعریف می توان براحتی نشان داد که :

$$|w\rangle = T|v\rangle \longrightarrow \langle w| = \langle v|T^\dagger \tag{108}$$

و بااستفاده از رابطه اخیر می توان صحت روابط زیر رادرمورد عملگرها و الحاقی آنها تحقیق کرد:

$$\begin{aligned} (AB)^\dagger &= B^\dagger A^\dagger, \\ (cA)^\dagger &= c^* A^\dagger, \\ ((A)^\dagger)^\dagger &= A \\ (A+B)^\dagger &= A^\dagger + B^\dagger. \end{aligned} \tag{109}$$

عملگرهای تصویرگر:

فضای برداری V ویک زیرفضای آن مثل W درنظرمی گیریم. برای W یک پایه مثل $\{|i\rangle, \quad i = 1, \cdots m\}$ درنظرمی گیریم. دراین صورت عملگر

$$P_W := \sum_{i=1}^{m} |i\rangle\langle i| \tag{110}$$

www.Endbook.net

عملگرتصویرروی V خوانده می شود. این عملگربردارهای فضا را بروی W تصویرمی کند. این عملگرهرمیتی است و درشرط $P^2 = P$ صدق می کند.

تجزیه طیفی و عملگرهای تصویری فرض کنید که A یک عملگر بهنجار باشد . اگر a_1 یک ویژه مقدار این عملگر با درجه واگنی K باشد، و ویژه بردارهای متعامد ویکه‌ی متناظر با این عملگر را با $|e_1^{(1)}\rangle, |e_1^{(2)}\rangle, \cdots |e_1^{(K)}\rangle$ نشان دهیم دراین صورت ویژه فضای مربوط به a_1 با بردارهای یکه و متعامد فوق جاروب می شود و عملگرِ

$$P_1 = \sum_{i=1}^{K} |e_1^i\rangle\langle e_1^{(i)}|, \tag{111}$$

عملگر تصویر روی این ویژه فضاست. خواننده براحتی می تواند نشان دهد که عملگر A به طور کامل چنین نوشته می شود:

$$A = \sum_m a_m P_m, \tag{112}$$

که درآن جمع روی تمام ویژه مقدار های عملگرِ A است.

توابع عملگرهای نرمال:

درمکانیک کوانتومی اغلب نیازداریم که توابعی ازعملگرهای هرمیتی را تعریف کنیم. فرض کنید که T یک عملگر دلخواه و $f : C \longrightarrow C$ تابعی بابسط زیرباشد:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n x^n \tag{113}$$

دراین صورت تابع $f(T)$ نیز باهمین بسط تعریف می شود.

$$f(T) := \sum_{n=0}^{\infty} f_n T^n. \tag{114}$$

از آنجا که عملگر T نرمال و درنتیجه قطری پذیراست می توان نوشت $T = \Omega D \Omega^{-1}$ که درآن D قطری شدهٔ T و Ω ماتریس قطری کنندهٔ T است. هرگاه به این نکته توجه کنیم که $T^n = \Omega D^n \Omega^{-1}$ آنگاه رابطه بالا به شکل زیر درمی آید:

$$f(T) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n \Omega D^n \Omega^{-1} = \Omega \sum_{n=0}^{\infty} f_n D^n \Omega^{-1} = \Omega f(D) \Omega^{-1}, \tag{115}$$

که درآن

$$f(D) := \sum_{n=0}^{\infty} f_n D^n. \tag{116}$$

www.Endbook.net

دقت کنید که ماتریس $f(D)$ براحتی محاسبه می شود. فرض کنید که که T یک ماتریس N بعدی با مقادیر ویژهٔ $\lambda_1, \cdots \lambda_N$ باشد. دراین صورت

$$D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & & & \\ & \lambda_2 & & & & \\ . & . & . & . & . & \\ . & . & . & . & . & \\ & & & & \lambda_N & \end{pmatrix} \tag{117}$$

و با توجه به تعریف 116

$$f(D) = \begin{pmatrix} f(\lambda_1) & & & & & \\ & f(\lambda_2) & & & & \\ . & . & . & . & . & \\ . & . & . & . & . & \\ & & & & f(\lambda_N) & \end{pmatrix}. \tag{118}$$

رابطه 115 در واقع تعریف کلی تری از تابع یک عملگر بدست می دهد که برای وقتی که تابع بسط تایلور نیز ندارد بکار می رود. این تعریف عبارت است از:

$$f(T) = \Omega f(D) \Omega^{-1}. \tag{119}$$

۱۱ ضرب تانسوری فضاهای برداری

برای سادگی دراین درس ضرب تانسوری دو فضای برداری را به طور مجرد ومستقل ازپایه تعریف نمی کنیم. برای چنین تعریفی خواننده می تواند به هرکتاب جبرخطی مراجعه کند.

هرگاه $(A)_{m\times n}$ و $(B)_{p\times q}$ دو ماتریس با ابعاد داده شده باشند می توان ضرب تانسوری آنهارا که ماتریسی با ابعاد $(mp \times nq)$ است به شکل زیرتعریف کرد:

$$(A \otimes B)_{ij,kl} := A_{ik} B_{jl} \tag{120}$$

به لحاظ عملی ضرب این دو ماتریس به شکل زیر محاسبه می شود:

$$A \otimes B := \begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \cdot & a_{1n}B \\ a_{21}B & a_{22}B & \cdot & a_{2n}B \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{m1}B & a_{m2}B & \cdot & a_{mn}B \end{pmatrix} \tag{121}$$

www.Endbook.net

این ضرب دارای خواص زیراست که خواننده می تواند با استفاده از تعریف صحت آنها را تحقیق کند:

$$\begin{aligned} A\otimes(B+C) &= A\otimes B+A\otimes C \\ A\otimes(\alpha B) &= (\alpha A)\otimes B=\alpha(A\otimes B) \\ (A\otimes B)\otimes C &= A\otimes(B\otimes C) \\ (A\otimes B)(C\otimes D) &= AC\otimes BD \\ (A\otimes B)^{\dagger} &= A^{\dagger}\otimes B^{\dagger} \end{aligned} \tag{122}$$

حال اگر فضای برداری V با بردارهای پایه $\{|i\rangle,\ i=1,\cdots n\}$ و فضای برداری W با بردارهای پایه $\{|j\rangle, j=1\cdot m\}$ را درنظر بگیریم. می توان ضرب تانسوری بردارهای پایه را مطابق با تعریف بالا بدست آوریم. به این ترتیب mn بردار پایه به شکل $|i\rangle\otimes|j\rangle$ بدست می آوریم که آنها را به اختصار با $|i,j\rangle$ نمایش می دهیم:

$$|i,j\rangle := |i\rangle\otimes|j\rangle \qquad i=1\cdots m,\ j=1\cdots n. \tag{123}$$

ضرب داخلی این بردارها را به صورت زیر تعریف می کنیم:

$$\langle i,j|k,l\rangle = \langle i|k\rangle\langle j|l\rangle. \tag{124}$$

بنابراین اگر بردارهای پایه فضاهای اولیه متعامد یکه باشند، بردارهای پایه فضای ضرب تانسوری نیز متعامدِ یکه خواهند بود، یعنی

$$\langle i,j|k,l\rangle = \delta_{i,k}\delta_{j,l}. \tag{125}$$

این بردارهای جدید یک فضای mn بعدی را جاروب می کنند که آن را ضرب تانسوری فضاهای V و W می خوانیم. درحقیقت داریم :

$$V\otimes W := Span\{|i,j\rangle\}. \tag{126}$$

مثال: هرگاه V یک فضای برداری با پایه

$$\{|0\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, |1\rangle=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}\}$$

باشد آنگاه $V\otimes V$ یک فضای برداری ۴ بعدی با پایه های زیراست:

$$|0,0\rangle := \begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix} \qquad |0,1\rangle := \begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix} \qquad |1,0\rangle := \begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix} \qquad |1,1\rangle := \begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix} \tag{127}$$

www.Endbook.net

به ازای هر دو بردار $|v\rangle$ و $|w\rangle$ می توان برداری درفضای $V \otimes W$ به شکل زیرتعریف کرد:

$$|v\rangle \otimes |w\rangle := v_i w_j |i,j\rangle \tag{128}$$

این بردار را ضرب تانسوری بردارهای $|v\rangle$ و $|w\rangle$ می گوییم. این ضرب به طور بدیهی از همان خواصی پیروی می کند که ضرب ماتریسی، یعنی

$$\begin{aligned} |v\rangle \otimes (|w\rangle + |z\rangle) &= |v\rangle \otimes |w\rangle + |v\rangle \otimes |z\rangle \\ |v\rangle \otimes (\alpha|w\rangle) &= (\alpha|v\rangle) \otimes |w\rangle = \alpha(|v\rangle \otimes |w\rangle) \\ (|v\rangle \otimes |w\rangle) \otimes |z\rangle &= |v\rangle \otimes (|w\rangle \otimes |z\rangle) \\ (|v\rangle \otimes |w\rangle)^\dagger &= \langle v| \otimes \langle w|. \end{aligned} \tag{129}$$

یک بردار دلخواه در فضای $V \otimes W$ را الزاما نمی توان به صورت $|v\rangle \otimes |w\rangle$ نوشت مثل بردار زیر

$$|\psi\rangle := |0,0\rangle + |1,1\rangle \tag{130}$$

که خواننده خود می تواند این امر را نشان دهد. چنین بردارهایی را درهم تنیده می گوییم. یکی از مسائل مهم در نظریه اطلاعات کوانتومی و درمکانیک کوانتومی که دامنه آن به ریاضیات خالص نیز کشیده شده است مطالعه این حالت های درهم تنیده است.

هرگاه $A : V \longrightarrow V$ و $B : W \longrightarrow W$ دوعملگر خطی باشند می توان اثر آنها را به شکل زیرروی بردارهای پایه تعریف کرد:

$$(A \otimes B)(|i,j\rangle) := (A|i\rangle) \otimes (B|j\rangle). \tag{131}$$

برای تعیین عناصر ماتریسی این عملگر به طریق معمول عمل می کنیم:

$$(A \otimes B)_{kl,ij} := \langle k,l|A \otimes B|i,j\rangle = \langle k|A|i\rangle\langle l|B|j\rangle = A_{ki}B_{lj} \tag{132}$$

که نشان می دهد ماتریس ضرب تانسوری عملگر ها از ضرب تانسوری ماتریس های دوعملگر بدست می آید.

www.Endbook.net

۱۲ تابع دلتای دیراک

تابع پیوسته زیر را درنظرمی گیریم که درآن $0 < \epsilon << 1$.

$$\delta_\epsilon(x) := \begin{cases} 0 & x \leq -\epsilon \\ \frac{1}{2\epsilon} & -\epsilon \leq x \leq \epsilon \\ 0 & \epsilon \leq x \end{cases} \tag{133}$$

این تابع دارای خاصیت های زیراست:
الف:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta_\epsilon(x)dx = 1, \tag{134}$$

ب: برای هرتابعی که درفاصله $(-\epsilon, \epsilon)$ متناهی باشد،

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta_\epsilon(x)f(x) = f(0) + O(\epsilon) \tag{135}$$

که درآن $O(\epsilon)$ کمیتی از مرتبه ϵ است.
حد تابع $\delta_\epsilon(x)$ را وقتی که $\epsilon \longrightarrow 0$ با تابع $\delta(x)$ نشان می دهیم وقرارمی دهیم

$$\delta(x) := \lim_{\epsilon \longrightarrow 0} \delta_\epsilon(x). \tag{136}$$

و آن را تابع دلتای دیراک می نامیم. به خودی خود $\delta(x)$ یک تابع نیست بلکه می توان به آن به عنوان یک عملگر نگاه کرد که تنها درزیر یک انتگرال معنادارد.
درنتیجه خواهیم داشت:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)dx = 1, \qquad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)f(x) = f(0). \tag{137}$$

می توان تابع $\delta(x-b)$ را به طور مشابه تعریف کرد. این تابع دارای خاصیت های زیراست:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-b)dx = 1, \qquad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-b)f(x)dx = f(b), \tag{138}$$

www.Endbook.net

تابع دلتای دیراک را می توان به عنوان حد دنباله های دیگری ازتوابع نیز گرفت. درزیر چند تااز این دنباله هارا معرفی می کنیم.

دنباله اول : قرارمی دهیم

$$g_\sigma(x) := \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma 2}}, \tag{139}$$

که نشان دهندهٔ تابعی گاووسی باپهنای σ وماکزیمم $\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}$ درنقطه $x = 0$ است. سطح زیرمنحنی آن نیز برابر است با۱. دراینجا داریم

$$\delta(x) := \lim_{\sigma \longrightarrow 0} g_\sigma(x). \tag{140}$$

دنباله دوم: قرارمی دهیم

$$\delta_T(x) := \frac{1}{2\pi} \int_{-T}^{T} e^{ix} dt = \frac{\sin Tx}{\pi x}. \tag{141}$$

داریم

$$\int_{-\infty}^{\infty} D_T(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} D_T(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin y}{y} dy = 1. \tag{142}$$

برای این دنباله داریم

$$\delta(x) := \lim_{T \longrightarrow \infty} D_T(x). \tag{143}$$

وازآنجا به رابطه بسیارمهم زیرمی رسیم:

$$\delta(x) := \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ixt} dt. \tag{144}$$

بعضی دیگرازخواص تابع دلتا به شرح زیرهستند:

$$\begin{aligned} &\delta(x - x') = \delta(x' - x) \\ &\int \delta'(x - x') f(x') dx' = -\frac{df}{dx}(x). \end{aligned} \tag{145}$$

www.Endbook.net

۱۳ توابع دلتا به عنوان پایه ای برای فضای توابع

دراین قسمت می خواهیم نشان دهیم که توابع دلتارامی توان به عنوان یک پایه برای فضای توابع درنظرگرفت. فضای توابع $F[0,1]$ را درنظر می گیریم. هیچ نوع فرض بخصوصی درباره این توابع نظیرپیوستگی یا مشتق پذیری نمی کنیم. این فضایک فضای بی نهایت بعدی است. حال به ازای هر عدد بزرگ N برای این فضا یک پایه درنظرمی گیریم که باتقریب خوبی می تواند فضای توابع را جاروب کند. سپس حد $N \longrightarrow \infty$ را درنظرمی گیریم که درآن توابع فضا با دقت توسط پایه تعریف شده نمایش داده می شوند. فاصله $[0,1]$ رابه N قسمت تقسیم می کنیم. به این ترتیب داریم

$$[0,1] = \Delta_1 \cup \Delta_2 \cup \cdots \Delta_N \tag{146}$$

که درآن

$$\Delta_n := [\frac{n-1}{N}, \frac{n}{N}] \tag{147}$$

توابع زیر را تعریف می کنیم:

$$e_n(x) := \begin{cases} N & x \in \Delta_n \\ 0 & x \notin \Delta_n \end{cases} \tag{148}$$

سطح زیراین توابع مساوی بایک است. این توابع بریکدیگرعمودند اما بهنجارنیستند:

$$\langle e_n, e_m \rangle \equiv \int_0^1 e_n^*(x) e_m(x) dx = N\delta_{m,n}. \tag{149}$$

هم چنین این خاصیت رادارند که به ازای هرتابع $f \in F[0,1]$ داریم :

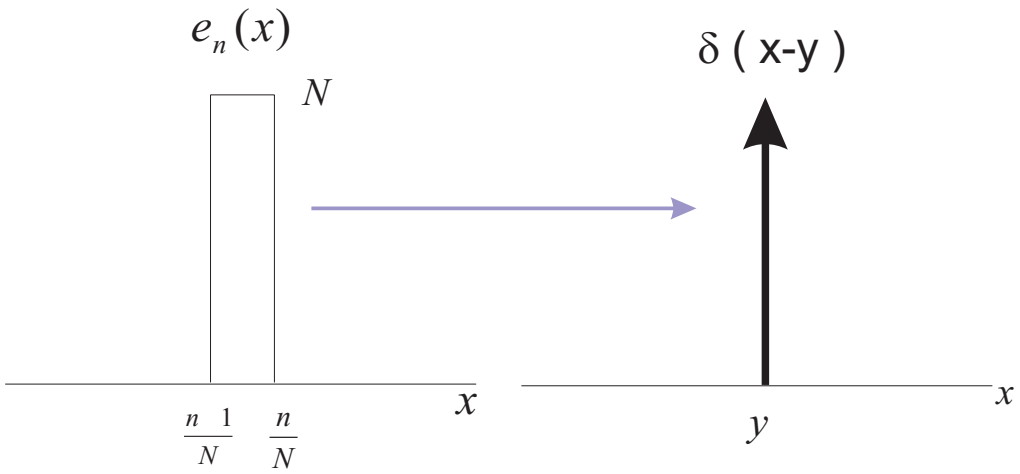
$$\langle e_n, f \rangle \equiv \int_0^1 e_n^*(x) f(x) dx = N \int_{x\in\Delta_n} f(x)dx =: N(\frac{1}{N} f(x_n)) = f(x_n), \tag{150}$$

که درآن $x_n \in \Delta_n$ نقطه ای درون Δ_n است که باتقریب خوبی نشان دهنده مقدارتابع درناحیه Δ_n است، به عبارت دیگر:

$$f(x_n) := \frac{\int_{x\in\Delta_n} f(x)dx}{\frac{1}{N}} \tag{151}$$

حال N را به سمت بی نهایت میل می دهیم. دراین حالت اندیس n نیز جای خود را به یک اندیس پیوسته مثل $y := \frac{n}{N}$ می دهد. تابع $e_n(x)$ نیز مطابق با نمایشی که قبلاً درمورد توابع دیراک دیدیم به تابع دلتای دیراک یعنی $\delta(x-y)$ میل می کند، شکل (۱)

www.Endbook.net



شکل ۱: درحد $N \longrightarrow \infty$، شاخص گسسته $\frac{n}{N}$ به سمت شاخص پیوسته y و تابع $e_n(x)$ به تابع $\delta(x-y)$ میل می کند.

نحوه تبدیل کمیت ها درحد $N \longrightarrow \infty$ به شکل زیراست.

$$\begin{aligned}
\frac{n}{N} &\longrightarrow y \\
e_n(x) &\longrightarrow \delta(x-y) \\
|e_n\rangle &\longrightarrow |y\rangle \\
\langle x|e_n\rangle &\longrightarrow \langle x|y\rangle \\
\langle e_n|e_m\rangle = \delta_{n,m} &\longrightarrow \langle y|y'\rangle = \delta(y-y'). \qquad (152)
\end{aligned}$$

تابع e_n را دراین حالت به صورت برداری $\langle y|$ نشان می دهیم که نمایش برای آن به صورت $|y\rangle$ است. رابطه (150) به شکل زیردرمی آید.

$$\langle y|f\rangle = \int_0^1 \delta(y-x)f(x)dx = f(y), \qquad (153)$$

هرگاه‌دراین حدّ $N\delta_{m,n}$ را به عنوان تابع $K(y,y')$ نشان دهیم که درآن $y = \frac{n}{N}$ و $y' = \frac{m}{N}$ هستند، از تساوی

$$\sum_n N\delta_{m,n}\frac{1}{N} = 1 \qquad (154)$$

www.Endbook.net

نتیجه می گیریم که

$$\int K(y,y')dy' = \lim_{N\longrightarrow\infty}\sum_m N\delta_{m,n}\frac{\Delta y}{\Delta m} = \sum_m N\delta_{m,n}\frac{1}{N} = 1. \tag{155}$$

بنابراین $K(y,y')$ همان تابع دلتای دیراک است ورابطه (149) را می بایست به صورت زیرنوشت:

$$\langle y|y'\rangle = \delta(y-y'). \tag{156}$$

یا

$$\int_0^1 dx\delta(x-y)\delta(x-y')dx = \delta(y-y'). \tag{157}$$

آنچه که می خواهیم درپایان این بخش روی آن تاکید کنیم آن است که یک تابع $f \in F[0,1]$ را به صورت یک بردارکت $\langle f|$ یا بِرای $|f\rangle$ نمایش می دهیم. مقداراین تابع یعنی $f(x)$ تصویرآن روی بردارپایه $|x\rangle$ است ، یعنی

$$f(x) = \langle x|f\rangle. \tag{158}$$

رابطه (157) نیز به شکل زیردرمی آید:

$$\int_0^1 \langle y|x\rangle\langle x|y'\rangle dx = \langle y|y'\rangle, \tag{159}$$

ویابابرداشتن $|y'\rangle$ و $\langle y|$ ازدوطرف

$$\int_0^1 |x\rangle\langle x|dx = I, \tag{160}$$

که درآن I عملگرهمانی است.
باید تاکید کنیم که تنهابرای سادگی فاصله $[0,1]$ رادرنظرگرفتیم. این پایه برای فضای توابع $F[a,b]$ ویا $F(-\infty,\infty)$ نیز برقراراست. هم چنین براحتی این روابط به بیشترازیک بعد نیز تعمیم می یابند.

۱۴ تبدیل فوریه

فضای توابع مختلط درفاصله $[-\frac{L}{2},\frac{L}{2}]$ رادرنظرمی گیریم. این فضارا با $C[\frac{-L}{2},\frac{L}{2}]$ نشان می دهیم. ضرب داخلی روی این فضا به شکل $\langle f,g\rangle = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} f(x)g^*(x)dx$ تعریف شده است. توابع

www.Endbook.net

$$e_n(x) := \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\frac{2\pi i n x}{L}}, \quad n \in Z \tag{161}$$

را درنظرمی گیریم. این توابع بریکدیگر عمود بوده ونرم همه آنهابرابرباواحداست:

$$\langle e_n, e_m \rangle = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e_n^*(x) e_n(x) dx = \frac{1}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{\frac{-2\pi i n x}{L}} e^{\frac{2\pi i m x}{L}} dx = \delta_{n,m}. \tag{162}$$

علاوه براین، هرتابع دلخواه را می توان برحسب این توابع بسط داد:

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_n e_n(x). \tag{163}$$

ضرایب f_n را می توان به ترتیب زیربدست آورد:

$$f_n = \langle e_n, f \rangle = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e_n^*(x) f(x) dx = \frac{1}{\sqrt{L}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{-\frac{2\pi i n x}{L}} f(x) dx. \tag{164}$$

بنابراین مجموعه توابع $\{e_n\}$ تشکیل یک پایه برای این فضا می دهند. باجایگزینی (164) در رابطه (163) بدست می آوریم

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e_n^*(y) f(y) dy e_n(x) = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} (\sum_{-\infty}^{\infty} e_n(y)^* e_n(x)) f(y) dy \tag{165}$$

مقایسه ای بارابطه (145) نشان می دهد که

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e_n(y)^* e_n(x) = \delta(x-y). \tag{166}$$

این رابطه را رابطه کامل بودن پایه های $\{e_n\}$ می گوییم.

حال L را به سمت بی نهایت میل می دهیم. دراین حالت توابع $e_n(x)$ بخاطر عامل $\frac{2\pi i n}{L}$ بسیاربه هم نزدیک می شوند و درنتیجه بهتراست که آنهارا بایک شاخص پیوسته یعنی $k := \frac{2\pi n}{L}$ مشخص کنیم. علاوه برآن اگربه همین شکل دراین توابع حدِ $L \longrightarrow \infty$ رااعمال کنیم، به خاطر عامل $\frac{1}{\sqrt{L}}$ این توابع همگی صفرخواهند شد. بنابراین می بایستی توابع پایه جدیدرا ضمن جایگزینی شاخص گسستهٔ $\frac{2\pi n}{L}$ با شاخص پیوسته k درتوابع اولیه درضریب مشخصی نیز ضرب کنیم. توابع جدید را با $\hat{e}_k(x)$ نشان می دهیم وقرارمی دهیم

$$\hat{e}_k(x) := A e_n(x) \qquad k := \frac{2\pi n}{L} \tag{167}$$

www.Endbook.net

که درآن ضریب A می بایست تعیین شود. بهترین راه برای این کارتوجه به کامل بودن پایه یعنی رابطه (166) است. این رابطه را به صورت زیرمی توانیم بنویسیم:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e_n(y)^* e_n(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} e_n(y)^* e_n(x) \frac{\Delta n}{\Delta k} \Delta k$$
$$= \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{1}{C^2} \hat{e}_k(y)^* \hat{e}_k(x) \frac{L}{2\pi} \Delta k = \delta(x-y). \quad (168)$$

این رابطه به مامی گوید که می بایست C را برابر با $\sqrt{\frac{L}{2\pi}}$ بگیریم. بااین جایگزینی خواهیم داشت:

$$\hat{e}_k(x) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \quad (169)$$

ورابطه (168) به شکل زیردرمی آید:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \hat{e}_k^*(x) \hat{e}_k(y) dk \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik(x-y)} dk = \delta(x-y). \quad (170)$$

بااین جایگزینی روابط قبلی یک به یک تغییرمی کنند. نخست به رابطه (163) نگاه می کنیم: ازآنجا که شاخص n جای خود را به یک شاخص پیوسته $k = \frac{2\pi n}{L}$ داده است این رابطه به صورت زیردرمی آید:

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_n e_n(x) \approx \sum_{k=-\infty}^{\infty} f_n e_n(x) \frac{\Delta n}{\Delta k} \Delta k$$
$$= \sum_{k=-\infty}^{\infty} f_n e_n(x) \frac{L}{2\pi} \Delta k = \int_{-\infty}^{\infty} dk \hat{f}(k) \hat{e}_k(x)$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \hat{f}(k) dk. \quad (171)$$

که درآن $\hat{f}(k) := \sqrt{\frac{L}{2\pi}} f_n$. ازرابطه بالا می توانیم باتوجه به رابطه (164)، $\hat{f}(k)$ را برحسب $f(x)$ بدست آورد:

$$\hat{f}(k) \equiv \sqrt{\frac{L}{2\pi}} f_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} f(x) dx. \quad (172)$$

جفت روابط

$$f(x) \equiv= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \hat{f}(k) dk$$

www.Endbook.net

$$\hat{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} f(x) dx. \tag{173}$$

رایک تبدیل فوریه درفضای توابع یک متغیره می گویند. این روابطه به صورت زیر به فضای n بعدی تعمیم می یابند.

$$\begin{aligned} f(x) \equiv &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}^n} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik\cdot x} \hat{f}(k) d^n k \\ \hat{f}(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}^n} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik\cdot x} f(x) d^n x. \end{aligned} \tag{174}$$

دراین جا مبانی ریاضی لازم برای درک ساختار مکانیک کوانتومی به پایان می رسد. درضمیمه هایی که درصفحات بعد آمده‌اند، خواننده بعضی مطالب اختیاری را خواهد آموخت.

www.Endbook.net

۱۵ ضمیمه یک: جمع مستقیم دو فضا

تعریف : فرض کنید که V و W دوفضای به ترتیب m بعدی و n بعدی باشند جمع مستقیم این دوفضا به شکل زیر تعریف می شود.

$$V \oplus W := \{ \begin{pmatrix} v \\ w \end{pmatrix}, | \, v \in V, \;\; w \in W \}. \tag{175}$$

جمع دوبرداروضرب یک بردارد‌ریک اسکالر به شکل زیرتعریف می شود:

$$\begin{pmatrix} v \\ w \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} v' \\ w' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v+v' \\ w+w' \end{pmatrix},$$
$$\alpha \begin{pmatrix} v \\ w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha v \\ \alpha w \end{pmatrix}. \tag{176}$$

برخواننده است که تحقیق کند $V \oplus W$ با جمع و ضرب تعریف شده دربالا واقعاً یک فضای برداری $m+n$ بعدی است.

به عنوان مثال خواننده می تواند براحتی تحقیق کند که $R^3 = R^2 \oplus R$.

حال دسته ای ازتبدیلات خطی روی $V \oplus W$ وجود دارند که به شکل زیرهستند:

$$T = \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & B \end{pmatrix}. \tag{177}$$

این نوع تبدیلات خطی درواقع روی فضای V مثل تبدیل خطی A وروی فضای W مثل تبدیل خطی B عمل می کنند. به همین جهت بهتراست که آنهارا با $A \oplus B$ نشان دهیم. رابطه (177) نشان می دهد که اگر برای فضای برداری V و W پایه انتخاب کنیم و تبدیلات روی آنهارا با ماتریس نشان دهیم، ماتریس تبدیل T بصورت بلوکه قطری درخواهد آمد. البته همه تبدیلات روی فضای $V \oplus W$ به صورت (177) نیستند.

۱۶ ضمیمه دو: زیرفضاهای ناوردا

تعریف: فرض کنید که V یک فضای برداری، $M \subset V$ یک زیرفضای آن و A یک عملگر خطی روی V باشد. دراین صورت گوییم M زیرفضای ناوردای عملگرA است اگر

$$\forall \;\; m \in M \longrightarrow Am \in M. \tag{178}$$

www.Endbook.net

این رابطه را به طور فشرده چنین می نویسیم $A(M) \subset M$. گوییم M عملگرِ A را کاهش می دهد یاوامی کاهد اگر $V = M \oplus M'$ و $A(M) \subset M$ و $A(M') \subset M'$.

هرگاه $\{e_1, \cdots e_r\}$ پایه M باشد و آن را به پایه $\{e_1, \cdots e_r, e_{r+1} \cdots e_n\}$ برای کل فضا گسترش دهیم، آنگاه عمگلر A قیافه ماتریسی زیرراخواهد داشت:

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ 0 & d \end{pmatrix}. \tag{179}$$

اگر M عملگر A راکاهش دهد قیافه ماتریسی A عبارت خواهد بود از

$$A = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix}. \tag{180}$$

تعریف: هرگاه $M \subset V$ زیرفضایی از V باشد آنگاه $M^\perp$ به صورت زیرتعریف می شود:

$$M^\perp := \{v \in V | \langle v, m \rangle = 0 \ \ \forall\, m \in M\}. \tag{181}$$

براحتی معلوم می شود که $M^\perp$ نیزیک زیرفضای V است.

قضیه: دریک فضای ضرب داخلی اگر M یک زیرفضای ناوردای عملگرِ A باشد آنگاه $M^\perp$ نیزیک زیرفضای ناوردای $A^\dagger$ است.
اثبات: فرض کنید که $x \in M^\perp$، دراین صورت

$$\langle A^\dagger x, m \rangle = \langle x, Am \rangle = \langle x, m' \rangle = 0 \longrightarrow A^\dagger x \in M^\perp \longrightarrow A^\dagger M^\perp \subset M^\perp. \tag{182}$$

قضیه: دریک فضای ضرب داخلیِ V زیرفضای M عملگرِ A راکاهش می دهد اگروفقط اگر M تحت A و تحت $A^\dagger$ هردو ناورداباشد.

اثبات: فرض کنید که M عمگلرِ A راکاهش دهد. V را به صورت $V = M \oplus M^\perp$ تجزیه می کنیم. می دانیم که

$$\langle A(M) \subset M, \qquad A(M^\perp) \subset M^\perp. \tag{183}$$

اما

$$\forall m \in M \longrightarrow \langle A^\dagger m, m^\perp \rangle = \langle m, Am^\perp \rangle = \langle m, m'^\perp \rangle = 0. \tag{184}$$

www.Endbook.net

بنابراین $A^\dagger m \in M$ و یا $A^\dagger(M) \subset M$. پس ثابت کردیم که اگر M عملگر A راکاهش دهد آنگاه هم زیرفضای ناوردای A است وهم زیرفضای ناوردای $A^\dagger$.
حال به قسمت دوم می پردازیم. یعنی فرض می کنیم که M هم زیرفضای ناوردای A است وهم زیرفضای ناوردای $A^\dagger$ وازآن نتیجه می گیریم که M، A راکاهش می دهد. برای این کارکافی است که بازهم ازرابطه $V = M \oplus M^\dagger$ استفاده کنیم. چون M زیرفضای ناوردای A و $A^\dagger$ است نتیجه می گیریم که

$$\forall m \in M, \quad x \in M^\perp \longrightarrow \langle Ax, m\rangle = \langle x, A^\dagger m\rangle = \langle x, m'\rangle = 0 \longrightarrow Ax \in M^\perp \tag{185}$$

ودرنتیجه $A(M^\perp) \subset M^\perp$. بنابراین M ، A راکاهش می دهد.

قضیه: دریک فضای ضرب داخلیِ V زیرفضای M وعملگر تصویرمربوط به آن یعنی P را درنظربگیرید. دراین صورت M A راکاهش می دهد اگروفقط اگر $AP = PA$.

اثبات: فرض کنیم که M، A راکاهش دهد. دراین صورت $V = M \oplus N$ و $A(M) \subset M$ و $A(N) \subset N$. حال به ازای هر $v = m + n$

$$PAv = PA(m+n) = P(m'+n') = m' \longrightarrow PA = AP. \qquad \text{و} \qquad APv = Am = m' \tag{186}$$

برعکس فرض کنید که $AP = PA$. نتیجه می گیریم که $A^\dagger P = PA^\dagger$. دراین صورت

$$Am = APv = PAv = P(v') = m' \longrightarrow A(M) \subset M, \tag{187}$$

و

$$A^\dagger m = A^\dagger Pv = PA^\dagger v = Pv" = m" \longrightarrow A^\dagger M \subset M. \tag{188}$$

بنابرقضایای قبلی نتیجه می گیریم که M عملگرِ A راکاهش می دهد.

۱۷ ضمیمه سه:جمع نیمه مستقیم دو زیرفضا

تعریف: هرگاه V یک فضای برداری و U و W دوزیرفضای آن باشند آنگاه $U + W$ را به عنوان مجموعه زیرتعریف می کنیم:

$$U + W := \{u | v = u + w, \quad u \in U, \quad w \in W\}. \tag{189}$$

www.Endbook.net

براحتی معلوم می شود که $U+W$ یک زیرفضای V است.

مثال: قرارمی دهیم $V=R^3$ (تمام فضای ۳ بعدی) و $U=\{(x,y,0)\}$ و $W=\{(0,y,z)\}$. U و W به ترتیب صفحه xy و yz هستند.

تعریف: فرض کنید که V یک فضای برداری و U و W دو زیرفضای آن باشند به قسمی که

الف: $V=U+W$

ب : تنهابردارمشترک بین U و W بردار صفرباشد.

دراین صورت V جمع مستقیم U و W $(Eirect\ \ Sum)$ می گوییم و می نویسیم

$$V=U\oplus W. \tag{190}$$

هرگاه خواننده درمثال قبلی شکل زیرفضاهای U و W را رسم کند خواهد دید که V جمع مستقیم U و W نیست.

قضیه: $V=U\oplus W$ اگروفقط اگر هر بردار $v\in V$ را بتوان به شکل یکتایی به صورت $u+w$ نوشت که درآن $u\in U$ و $w\in W$.

اثبات جهتِ اول: داریم $V=U\oplus W$. حال فرض کنید که v را به دوصورت زیرتجزیه کرده ایم

$$v=u+w,\quad v=u'+w'. \tag{191}$$

نتیجه می گیریم که

$$u-u'=w'-w. \tag{192}$$

ازآنجا که بنابر فرض، تنهابردارمشترک بین U و W صفراست نتیجه می گیریم $u-u'=0$ و $w'-w=0$. بنابراین نتیجه می گیریم که تجزیه v برحسب u و w یکتاست.

اثبات جهتِ دوم: فرض می کنیم که تجزیه v یکتاست. حال باید نشان دهیم که تنهابرداری که بین U و W مشترک است همان بردار صفراست. بردار x رابرداری می گیریم که بین U و W مشترک است. این بدرارامی توان به دوصورت زیرنوشت:

$$x=(x\in V)+(0\in W),\qquad \text{و}\qquad x=(0\in V)+(x\in W). \tag{193}$$

چون بنابرفرض تجزیه هربرداری یکتاست نتیجه می گیریم که $x=0\in V$ و $x=0\in W$. بنابراین تنهابردارمشترک بین U و W صفراست.

www.Endbook.net

قضیه: اگر $V = U \oplus W$، آنگاه $dim\ V = dim\ U + dim\ W$.
اثبات: پایه $\{e_1, \cdots e_m\}$ را برای U وپایه $\{e_{m+1}, \cdots e_{m+n}\}$ رابرای W درنظرمی گیریم. ازآنجا که هربردار $v \in V$ را می توان به طوریکتا به صورت $v = u + w$ تجزیه کرد خواهیم داشت

$$v = u + w = \sum_{i=1}^{m} u_i e_i + \sum_{j=m+1}^{m+n} w_j e_j. \tag{194}$$

بنابراین $\{e_1, e_2, \cdots e_{m+n}\}$ یک پایه برای V تشکیل می دهد و درنتیجه $dim(V) = dim(U) + dim(W)$.

تعریف: فرض کنید که $V = V_1 \oplus V_2 \oplus \cdots V_r$. دراین صورت هربردار $v \in V$ به صورت یکتای $v = v_1 + v_2 + \cdots v_r$ تجزیه می شود. P_j راعملگری تعریف کنید که کارزیررا انجام می دهد:

$$P_j v = v_j. \tag{195}$$

دراین صورت P_j را عملگرتصویر روی زیرفضای V_j می خوانیم.

قضیه: عملگرهای تصویر خاصیت های زیررادارند:

$$\begin{aligned} P_j P_k &= \delta_{jk} P_j \\ \sum_{j=1}^{r} P_j &= I \end{aligned} \tag{196}$$

اثبات خاصیت اول ساده است. برای تساوی دوم قرارمی دهیم

$$v = \sum_{j=1}^{r} v_j = \sum_{j=1}^{r} P_j v \tag{197}$$

چون این رابطه برای هربردارv صحیح است ، خاصیت دوم را نتیجه می گیریم.

قضیه: هرگاه V یک فضای ضرب داخلی باشد و $V = \bigoplus_{j=1}^{r} V_j$ که درآن V_j ها برهم عمود هستند، آنگاه عملگرهای P_j هرمیتی هستند.
اثبات: به ازای هردوبردار v و w داریم

$$\langle v, P_j w \rangle = \langle v, w_j \rangle \tag{198}$$

اما به خاطر عمود بودن زیرفضاها برهم طرف راست برابراست با $\langle v_j, w_j \rangle$ ویا $\langle P_j v, w_j \rangle$ و یا $\langle P_j v, w \rangle$. بنابراین P_j هرمیتی است.

www.Endbook.net

۱۸ ضمیمه چهار: یک قضیه در مورد توابع عملگرهای بهنجار

در متن درس دیدیم که چگونه می توان یک تابع از یک عملگر نرمال را تعریف کرد. دراین ضمیمه یک قضیه خیلی جالب در مورد توابع این نوع عملگرها ثابت می کنیم که در وهله اول دور از ذهن به نظر می رسد.

قضیه: اگر T یک عملگربهنجارباشد تابع $f(T)$ همواره یک چند جمله ای خواهد بود. (دور از ذهن بودن این قضیه از اینجا معلوم می شود که مثلاً تابع $f(T) = \sin(T)$ یک چند جمله ای برحسب T است و نه آنطور که در مورد اعداد می دانیم یک سری بی نهایت.)
اثبات: چون T بهنجاراست داریم

$$T = \sum_{i=1}^{k} \lambda_i P_i, \tag{199}$$

وازآنجا

$$f(T) = \sum_{i=1}^{k} f(\lambda_i) P_i. \tag{200}$$

حال می توانیم عملگرهای تصویرگر P_i را برحسب T و توان های آن بنویسیم. فرض کنید که $P_j = g_j(T)$ که درآن $g_j(x)$ تابعی است که می خواهیم فرم آن را پیدا کنیم. . دراین صورت خواهیم داشت

$$P_j := g_j(T) = g_j(\sum_i \lambda_i P_i) = \sum_i g_j(\lambda_i) P_i \tag{201}$$

که ازآن نتیجه می گیریم $g_j(\lambda_i) = \delta_{ij}$. بنابراین هرتابع $g_j(x)$ می بایست چنان باشد که‌به ازای $x = \lambda_j$ مقدارآن برابربا ۱ و به ازای $x \neq \lambda_j$ مقدارآن برابرباصفرباشد. چنین تابعی فرم زیررادارد:

$$g_j(x) = \prod_{k \neq j} \frac{x - \lambda_k}{\lambda_j - \lambda_k} \tag{202}$$

درنتیجه

$$P_j \equiv g_j(T) = \prod_{k \neq j} \frac{T - \lambda_k}{\lambda_j - \lambda_k}. \tag{203}$$

این رابطه نشان می دهد که هرعملگرتصویرگر چیزی نیست جزیک چندجمله ای برحسب T ودرنتیجه تابع $f(T)$ نیز چیزی جزیک چند جمله ای برحسب T نخواهد بود. به عبارت بهتر می توانیم بنویسیم

$$f(T) = \sum_{i=1}^{k} f(\lambda_i) \prod_{k \neq i} \frac{T - \lambda_k}{\lambda_i - \lambda_k}. \tag{204}$$

www.Endbook.net

درسنامه مکانیک کوانتومی

وحید کریمی پور
دانشگاه صنعتی شریف
دانشکده فیزیک

درس سوم : تولد مکانیک کوانتومی

۱ مقدمه

در نزدیکی های آخر قرن نوزدهم به نظر می رسید که فیزیک کلاسیک، که شالوده هایش را مکانیک تحلیلی (شامل مکانیک ذرات، شاره ها و محیط های کشسان)، الکترومغناطیس و نظریه حرارت و مکانیک آماری تشکیل می داد، یک ساختمان نظری کامل است که می تواند علی الاصول گستره وسیعی از پدیده های طبیعی و صنعتی را، از ابزار آلات دقیق فنی گرفته تا حرکت کرات در منظومه شمسی، به دقت توصیف کند.
در سال های آخر قرن نوزدهم با کشف الکترون، رادیواکتیویته، اشعه ایکس، تخلیه الکتریکی و طیف نگاری گازها، یکی پس از دیگری پنجره هایی به درون دنیای میکروسکوپی گشوده شد. آیا فیزیک کلاسیک می توانست این دنیای جدید را نیز توصیف کند؟ نخستین مشاهدات باشگفتی این انتظار را برآورده کردند. چنان که رفتار اشعه کاتدی یعنی همان الکترون ها در لوله تخلیه الکتریکی نشان می داد، الکترون درست مثل یک پرتابه در میدان الکتریکی سقوط می کند و حرکت آن تابع قوانین نیوتن است. جی جی تامسون توانست با کاربست معادلات نیوتن، نسبت جرم به بار الکترون را بدست آورد. چند سال بعد در اوایل قرن بیستم، میلیکان توانست بازهم با استفاده از همان قوانین، بار و در نتیجه جرم الکترون را بدست آورد.

با در نظر گرفتن اتم ها و مولکول های گاز به صورت گویهای کوچک و کاربست قوانین نیوتن به همراه فرض های معقولی در مورد توزیع احتمالی سرعت آنها، می شد در چارچوب نظریه جنبشی گازها، کمیت های ماکروسکوپی گاز مثل فشارآن را به درستی محاسبه کرد. بنابراین به نظر می رسید که گستره اعتبارِ فیزیک کلاسیک تمامی پدیده های طبیعی از کرات سماوی تا اتم

www.Endbook.net

ها و الکترون هارا نیز در بر می گیرد.

از نظر فلسفی دستاورد فیزیک کلاسیک، بخصوص مکانیک، ارایه یک بیان دقیق از علیت یا تعین بود به این معنا که اگر مکان و سرعت ذرات یک سیستم را دریک لحظه با دقت تعیین کنیم، مسیر آینده این سیستم در آینده با دقت معین خواهد شد. پیروزی های شگفت انگیز مکانیک کلاسیک و تعیّن نهفته در آن، تصویری از جهان ارایه می کرد درست مثل یک ساعت عظیم، که درآغاز زمان یک بار تنظیم شده و تمامی حرکات آن در آینده تابع همان شرایط اولیه است. اگر برگی از درخت فرو می افتد، یا نسیمی می وزد، نتیجه حرکت جبری همان تنظیم اولیه است و گزیری از آن نیست. اگر انسان را نیز به مثابه دستگاهی عظیم و پیچیده از سلول ها و ارگان ها تصور کنیم که همگی تابع این قوانین هستند، و فکر را نیز تابع فعل و انفعالات شیمیایی و الکتریکی تصور کنیم، تصویر مکانیکی از جهان که حالا شامل موجودات زنده نیز شده است کامل می شود، اگر در یک لحظه عملی خاص را انجام می دهیم یا احساسِ خاصی به ما دست می دهد، همه نتیجه جبری همان شرایط و تنظیمات اولیه است . البته این تصویر جبری از جهان که حتی اراده انسان را نیز در برمی گیرد مورد اجماع نبوده است زیرا دراین که آیا قوانین فیزیک را می توان به حوزه زیست شناسی و شیمی و هم چنین عرصه فکر و روان آدمی گسترش داد تردید وجود داشته است.

اما به تدریج و در آخرین سالهای قرن نوزدهم و اوایل قرن بیستم در بنای معظم فیزیک کلاسیک شکاف ها و تَرَک هایی پیدا شد. معلوم شد که پدیده هایی مثل تابش جسم سیاه، ظرفیت گرمایی ویژه جامدات، اثر فوتوالکتریک، مدل رادرفورد در مورد ساختمان اتم، اثر کامپتون و نظایر آن هیچ کدام در چارچوب فیزیک کلاسیک قابل تبیین نیستند. تمامی تلاشهایی که برای ترمیم شکاف ها و تَرَک ها صورت می گرفت تا این پدیده ها را بتوان توضیح داد شکست خورده و معلوم شد که دنیای میکروسکوپی را می بایست با مفاهیم به کلی جدید و حتی زبان متفاوت و بسیار غریبی توضیح داد. فاصله سالهای ۱۹۰۰ تا ۱۹۲۷ دوره ای طلایی در تاریخ فیزیک قرن بیستم و شاید تمامی تاریخ فیزیک است، دوره ای که شاهد تولد، رشد و بلوغ مکانیک کوانتومی از یک طرف و نسبیت خاص و نسبیت عام از طرف دیگر است. تا آنجا که به مکانیک کوانتومی مربوط می شود، ابتدای این دوره با ایده بسیار انقلابی پلانک درمورد تابش جسم سیاه در ۱۹۰۰ و معرفی کوانتای نور در ۱۹۰۵ توسط انشتین و سپس مدل اتمی بور آغاز می شود. این دوره تا سال ۱۹۲۴ به طول می انجامد و دوره ای است که درآن مدل بور و اصلاحات آن برای توصیف اتم های مختلف و پدیده های مختلف درون اتم به کار رفت. امروزه نظریه کوانتومیِ این سالها به نظریه کوانتومی قدیمی مشهوراست زیرا هنوز اندیشه دوگانگی موج— ذره طرح نشده و درآزمایشها نیز یافت نشده است. دراین درس ما به اختصار زیاد این دوره را بررسی می کنیم. فرض ما آن است که خواننده یک بار این مطالب را در درس فیزیک جدید دیده است. مثلاً می داند که جسم سیاه و یا اثر فوتوالکتریک یعنی چه. بنابراین آنچه که دراین درس می گوییم بیشتر برای یاد آوری و یا احتمالا آموزش بعضی نکات است که فکر می کنیم در یک درس فیزیک جدید به طور بایسته به آنها پرداخته نشده است. سپس در درس بعدی به تولد مکانیک کوانتومی جدید می پردازیم. بررسی ما در هر دو درس بسیار کوتاه خواهد بود. خواننده‌ای که بخواهد تاریخ پیدایش و تحول مکانیک کوانتومی را با تفصیل بیشتری مطالعه کند، می بایست به کتب تخصصی تاریخ نظریه کوانتومی رجوع کند.

www.Endbook.net

۱.۱ یک مقدمه کوتاه در باره مکانیک آماری

اگر چه فیزیک کلاسیک مبتنی بر تعین و یقین است لازمه پیش بینی یقینی از رویدادها دانستن مختصات و تکانه های همه ذرات در یک لحظه از زمان است. برای یک سیستم ماکروسکوپی مثل یک گاز اگر چه این کار در عالم نظر میسراست ، در عمل چنین چیزی امکان ناپذیراست. البته در عمل هیچگاه علاقمند به پیش بینی مسیر حرکت یک مولکول معین در یک گاز نیستیم بلکه هدف ما پیش بینی رفتار کمیت های ماکروسکوپی است و این کمیت ها مثلاً فشاری که گاز به دیواره های ظرف وارد می کند، ناشی از نیروی میلیاردها میلیارد مولکولی است که در گاز وجود دارد. به همین دلیل برای محاسبه کمیت های ماکروسکوپی کافی است که توجه خود را به متوسط کمیت های میکروسکوپی که با یک تابع توزیع احتمال محاسبه می شوند معطوف کنیم. ما نمی توانیم و نیازی هم نداریم که مکان وسرعت تک تک ذرات یک گاز را تعیین کنیم ولی لازم است بدانیم که احتمال این که مولکولی فلان مکان را اشغال کرده باشد و بهمان سرعت را داشته باشد چقدراست. به خصوص می خواهیم بدانیم وقتی که یک سیستم در دمای T با محیط خود به تعادل رسیده است تابع توزیع این سیستم روی هیئت های مختلفی که برایش امکان پذیراست، چگونه است؟ این سوالی است که مکانیک آماری تعادلی با آن روبرو است و پاسخ آن با یک اصل بنیادین داده می شود که تمامی مکانیک آماری بر آن مبتنی است. بر مبنای این اصل که اصل بولتزمن — گیبس نام دارد، یک سیستم که در دمای T با محیط خود به تعادل رسیده است، هر هیئت با انرژی E را با احتمالِ $\frac{1}{Z}e^{-\beta E}$ اختیار می کند که در آن $\beta = \frac{1}{kT}$، k ثابت بولتزمن، T دمای مطلق و Z یک ضریب تناسب است که برای بهنجار کردن احتمالات در نظر گرفته شده است. بنابراین اگر مختصات تعمیم یافته یک سیستم را با (q,p) و هامیلتونی آن را با $H(q,p)$ نشان دهیم چگالی احتمال این که این سیستم هیئت های یک همسایگی به حجم $dqdp$ را در نزدیکی نقطه (q,p) در فضای فاز اختیار کند، برابر است با

$$\mathcal{P}(q,p) = \frac{1}{Z}e^{-\beta H(q,p)}. \tag{1}$$

از آنجا که جمع همه احتمالات می بایست برابر با یک باشد، ثابت Z که آن را تابع پارش سیستم می خوانیم برابر خواهد بود با

$$Z = \int dq\ dp\ e^{-\beta H(q,p)}. \tag{2}$$

باید یادآور شویم که دراینجانمادِ (q,p) برای اشاره به همه مختصات و تکانه های سیستم به کار رفته است، یعنی $(q,p) = (q_1, \cdots q_N, p_1, \cdots p_N)$ که درآن $2N$ تعداد درجات آزادی سیستم است. دوباره تذکر می دهیم که این اصل مبنای تمامی ساختمان مکانیک آماری است و به کمک آن می توانیم تمامی رفتارهای ماکروسکوپی مواد را توضیح دهیم. هرگاه تابع پارش را محاسبه کنیم خواهیم توانست بسیاری از خصوصیات ماکروسکوپی سیستم را تعیین کنیم. به عنوان مثال می توانیم مقدار متوسط انرژی را به ترتیب زیر بدست آوریم:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \frac{1}{Z}\int dqdpH(q,p)e^{-\beta H(q,p)} = \frac{1}{Z}\frac{-\partial}{\partial\beta}\int dqdpe^{-\beta H(q,p)} \\ &= \frac{1}{Z}\frac{-\partial}{\partial\beta}Z = -\frac{\partial}{\partial\beta}ln(Z). \end{aligned} \tag{3}$$

بدنیست دراینجا به چند مثال ساده اشاره کنیم.

www.Endbook.net

مثال ۱: نوسانگر هارمونیک در دمای T:

یک نوسانگر هارمونیک به جرم m و فرکانس ω را در دمای T در نظر می گیریم. این نوسانگر علی الاصول می تواند در هر نقطه ای از فضای فاز قرار داشته باشد یعنی هر مختصه ای و هر تکانه ای را با احتمال معین اختیار کند. تابع پارش برای این نوسانگر عبارت است از

$$\begin{aligned} Z &= \int dq\, dp e^{-\beta(\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2 q^2)} = \int dq e^{-\beta\frac{m\omega^2}{2}q^2}\int dp e^{-\frac{\beta}{2m}p^2} \\ &= \sqrt{\frac{2\pi}{\beta m\omega^2}}\sqrt{\frac{2\pi\ m}{\beta}} = \frac{2\pi}{\beta\omega}. \end{aligned} \tag{4}$$

درنتیجه با استفاده از رابطه 3 بدست می آوریم

$$\langle H\rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta}(\ln\frac{2\pi}{\omega} - \ln\beta) = \frac{1}{\beta} = kT. \tag{5}$$

دیده می شود که متوسط انرژی هیچ گونه بستگی به مشخصات نوسانگر یعنی جرم و فرکانس آن ندارد. دقت در استدلال فوق نشان می دهد که آنچه که در این محاسبه اهمیت داشته است تنها آن بوده است که مختصه q و همینطور مختصه p به صورت مربعی در تابع هامیلتونی وارد شده اند و به ازای هر کدام از این دو مختصه سهمی برابر با $\frac{1}{2}kT$ در انرژی متوسط وارد شده است.

دو نوسانگر هارمونیک جفت شده:

برای این مثال خواننده باید مفهوم وجه یا مُد را برای خود از مکانیک تحلیلی یادآوری کند. دو نوسانگر هارمونیک جفت شده با هامیلتونی زیر توصیف می شوند:

$$H = \frac{1}{2m}(p_1^2+p_2^2) + \frac{k}{2}(q_1^2+q_2^2+(q_1-q_2)^2). \tag{6}$$

این سیستم با تغییر مختصات مناسبی به صورت دو وجه کاملاً جدا از هم درمی آید که با مختصات (Q_1,P_1) و (Q_2,P_2) توصیف می شود و برحسب این مختصات هامیلتونی سیستم به صورت زیر درمی آید:

$$H = \frac{1}{2m}P_1^2 + \frac{m\omega_1^2}{2}Q_1^2 + \frac{1}{2m}P_2^2 + \frac{m\omega_2^2}{2}Q_2^2. \tag{7}$$

ω_1 و ω_2 فرکانس های طبیعی این سیستم نامیده می شوند. اگر وجه ۱ تحریک شود، هردو ذره با فرکانس ω_1 نوسان خواهند کرد و اگر وجه ۲ تحریک شود، هردو ذره با فرکانس ω_2 نوسان خواهند کرد. هرگاه برای چنین سیستمی انرژی متوسط را حساب کنیم با تکرار همان محاسبه قبلی بدست می آوریم

$$\langle H\rangle = \langle\frac{1}{2m}P_1^2 + \frac{m\omega_1^2}{2}Q_1^2\rangle + \langle\frac{1}{2m}P_2^2 + \frac{m\omega_2^2}{2}Q_2^2\rangle = kT + kT = 2kT \tag{8}$$

www.Endbook.net

بنابراین در هر وجه نوسانی مقدار kT انرژی متوسط ذخیره خواهد شد.

قضیه همپاری انرژی:
آنچه که در مثال قبل بیان کردیم نمونه‌ای است از یک قضیه کلی تر موسوم به قضیه همپاری انرژی. فرض کنید که هامیلتونی یک سیستم به شکل زیر باشد:

$$H = \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{N} S_{i,j}p_i p_j + T_{ij}q_i q_j \tag{9}$$

که درآن S و T دو ماتریس متقارن دلخواه باشند که باهم جابجامی شوند. (درحالتی که ماتریسِ S متناسب با واحد باشد، که برای اغلب سیستم ها چنین است، این شرط برقرارمی شود). تحت این شرایط بایک تبدیل کانونیک که روابط جایجایی مختصات و تکانه ها را به هم نمی زند می توان ماتریس های S و T را باهم قطری کرد و هامیلتونی فوق را به شکل زیر نوشت:

$$H = \sum_{\mu=1}^{N} \frac{1}{2}\alpha_\mu P_\mu^2 + \beta_\mu Q_\mu^2, \tag{10}$$

که درآن ضرایب α_μ و β_μ از قطری شدن ماتریس های S و T بدست می آید و دانستن مقدار آنها برای قضیه فعلی اهمیتی ندارد. به هرکدام از جفت مختصه های Q_μ و P_μ یک وجه گفته می شود. حال اگر همان محاسبه قبلی در مورد نوسانگر هارمونیک را برای این هامیلتونی به کار ببریم متوجه می شویم که به ازای هر وجه سهم انرژی متوسط برابر است با kT. این نتیجه به جزییاتِ سیستم مورد نظر و اینکه درجات آزادی اولیه توصیف کننده چه چیزی بوده اند، ربطی ندارد. براساس این قضیه وقتی که یک سیستم با هر نوع برهم کنش مربعی که داشته باشد بامحیط خود در دمای T به تعادل می رسد، هر وجه از آن سهمی برابر با kT درانرژی متوسط دارد. به عبارت بهتر انرژی متوسطِ سیستم به طوریکسان بین همه وجوه آن پخش می شود طوریکه به هر وجه مقدارانرژی kT برسد. به همین دلیل این قضیه نام قضیه همپاری انرژی به خود گرفته است.

۲ تعادل گرمایی ماده و نور

تعادل گرمایی ماده و نورنخستین شکافی بود که در بنای باشکوه فیزیک کلاسیک پدیدارشد. این پدیده در واقع چیزی نیست جز به تعادل حرارتی رسیدن ماده و تابش . وقتی که یک محفظه خالی را گرم می کنیم اتم های تشکیل دهنده دیواره ملتهب شده و شروع به تابش می کنند. این تابش توسط دیگر اتم ها جذب شده و باز تابش می شود. سرانجام بعد از رد و بدل کردن های انرژی بین اتم ها و نور، تعادل گرمایی حاصل می شود. برهم کنش نور با ماده که مبتنی برالکترومغناطیس و مکانیک کلاسیک است با یک هامیلتونی مربعی تعیین می شود که در آن ذرات بارداری که درون دیواره هستند، تحت تاثیرمیدان الکتریکی و مغناطیسی نور قرار گرفته، مرتعش می شوند و از خود نور ساطع می کنند، نوری که اتم های دیگر را به نوبه خود مرتعش کرده و آن هارا به گسیل نور وامی دارد. متغیرهای دینامیکی این هامیلتونی عبارتند از مختصه و تکانه اتم ها و دامنه میدان های الکتریکی و مغناطیسی نور در فرکانس های مختلف .

www.Endbook.net

نکته مهم آن است که این هامیلتونی برحسب همه متغیرهایش مربعی است و درحقیقت معادل است با مجموعه عظیمی از نوسانگرهای هارمونیک که بایکدیگر جفت شده اند. هر وجه از این سیستم عبارت است از وضعیتی که همه اجزای آن یعنی اتم های درون دیواره ها و موج تابشی درون محفظه به صورت هماهنگ نوسان می کنند. بنابراین هر وجه از این سیستم با یک بردار موج (k_x, k_y, k_z) از تابش و هم چنین جهت قطبش نور معین می شود. تعداد کل وجوه عبارت است از تعداد کل بردارهای موج که در عدد ۲ (بخاطر تعداد قطبش های مستقل نور) ضرب شده است.

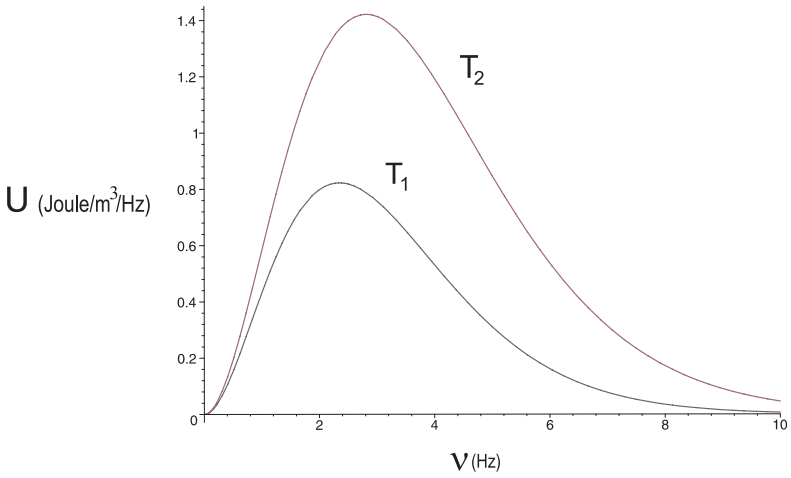
بنابراین برای اینکه ببینیم چه مقدار انرژی تابشی در یک بازه فرکانس وجود دارد تنها کافی است که تعداد وجوه موجود در آن بازه را بشماریم و حاصل را بر مبنای قضیه همپاری در kT ضرب کنیم. اصل هم پاری انرژی به ما می گوید که هر وجه از این سیستم در دمای T به اندازه kT انرژی خواهند داشت. درهمین جا یک تناقض مهم با مبانی فیزیک کلاسیک پیش می آید، زیرا تعداد وجه های چنین سیستمی بی نهایت است و قضیه هم پاری انرژی به ما می گوید که یک چنین سیستمی هرگز نمی تواند به تعادل گرمایی برسد، زیرا یک مقدار محدود انرژی را نمی توان بین بی نهایت وجه آنچنان پخش کرد که به هر وجه مقدارِ kT انرژی برسد. بیان دیگر این تناقض آن است که اگر ماده و تابش به تعادل رسیده باشند می بایست انرژی ذخیره شده در تابش بی نهایت باشد. دراین جا می بایست به تجربه و آزمایشگاه متوسل شد. مشاهدات دقیق به ما می گویند که ماده و تابش به تعادل می رسند و مقدار انرژی ذخیره شده در تابش نیز محدود است و بی نهایت نیست. تا همینجا مشخص است که فیزیک کلاسیک با تابش جسم سیاه ناسازگار است.

برای درک بهترِ این پدیده و اینکه ناسازگاری تجربه ونظریه دقیقاً در کجاست، چه باید کرد؟ می دانیم که تعداد وجوه انرژی تابشی یا نوری که درون محفظه است در تمام بازه فرکانس بی نهایت است. اگر توجه خود را به یک بازه فرکانس معین معطوف کنیم آنگاه تعداد وجوه نور دراین بازه محدود است و ما می توانیم مسئله را ساده تر کنیم و بپرسیم که چه مقدار انرژی در این بازه فرکانس ذخیره شده است. چگالی انرژی موجود درواحد حجم در واحد فرکانس را با $u(\nu, T)$ نشان می دهیم به این معنا که $u(\nu, T)d\nu$ مقدارانرژی تابشی است که در واحد حجم محفظه در فرکانس بین ν و $\nu + d\nu$ وجود دارد. این میزان انرژی رابطه مستقیمی با انرژی تابشی ای که از واحد سطح محفظه به بیرون ساطع می شود، دارد و کمیت اخیر را می توان در آزمایشگاه اندازه گرفت. برمبنای این مشاهدات و اندازه گیری های دقیق، معلوم شد که طیف انرژی تابشی مطابق با شکل ۱ است. نکته بسیار مهم که نشان می دهد چرا مطالعه تابش جسم سیاه تا به این حد مورد علاقه فیزیکدانان در قرن نوزدهم بوده است، آن بود که هم از نظر تجربی وهم نظری ثابت شده بود که این طیف هیچ نوع بستگی به هیچ کدام از خواص جسمی که گرم می شود (نظیر جنس ماده دیواره ها، حجم و شکل محفظه) ندارد و بنابراین در بردارنده یک خصلت اساسی و عام از تعادل ماده و تشعشع است.
آیا می شد این شکل را با فیزیک کلاسیک توضیح داد؟

برای اینکه ببینیم چه مقدار انرژی تابشی در یک بازه فرکانس وجود دارد تنها کافی است که تعداد وجوه موجود در آن بازه را بشماریم و حاصل را بر مبنای قضیه همپاری در kT ضرب کنیم.

تعداد وجوهی را که در یک بازه فرکانس وجود دارند به راحتی می توان شمرد. تعداد وجوه در واحد حجم ربطی به حجم

www.Endbook.net



شکل ۱: طیف تابش جسم سیاه،آنچنان که درتجربه دیده می شود. دمای T_2 از دمای T_1 بیشتر است به همین دلیل طیف تابشی به طرف فرکانس های بالاتر و یا طول موج های پایین تر میل پیدا کرده است.

ظرف و یا شرایط مرزی موج ندارد. به همین دلیل یک ظرف مکعبی شکل با اندازه L و حجم $V = L^3$ در نظر می گیریم. یک موج ایستاده در نظر می گیریم که مقدار آن در دیواره ها برابر با صفر باشد، یعنی

$$\phi(x, y, z) = A \sin \kappa_x x \sin \kappa_y y \sin \kappa_z z. \tag{11}$$

که درآن

$$\kappa_x L = n_x \pi, \quad \kappa_y L = n_y \pi, \quad \kappa_z L = n_z \pi. \tag{12}$$

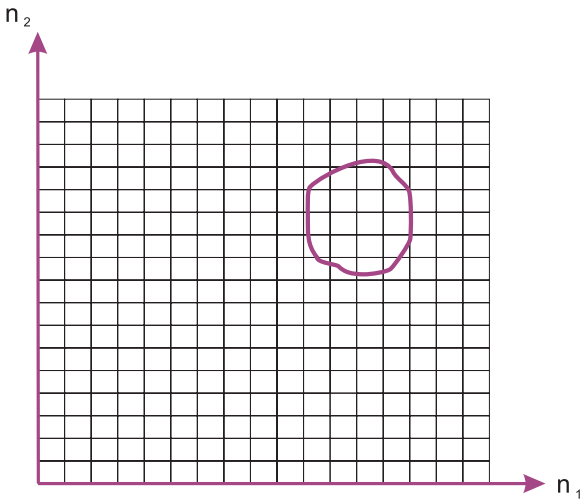
هرسه تایی (n_x, n_y, n_z) که درآن n_x n_y و n_z اعداد صحیح مثبت هستند، دو وجه از تابش ِدرون ظرف را تعریف می کند. بجای اینکه سوال کنیم دریک بازه فرکانس چه تعداد وجه وجود دارد، می توانیم سوال جزیی تری را بپرسیم و آن اینکه در بازه ای که بردار موجِ $\kappa = (\kappa_x, \kappa_y, \kappa_z)$ حجم $\Delta\kappa_x \Delta\kappa_y \Delta\kappa_z$ را جاروب می کند چه تعداد وجه وجود دارد، شکل (۲). برای یافتن این تعداد دقت می کنیم که

$$\Delta\kappa_x \Delta\kappa_y \Delta\kappa_z = \frac{\pi^3}{L^3} \Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z. \tag{13}$$

بنابراین تعداد وجه ها در بازه ای به حجم d^3k عبارت است از:

$$dn = 2\,\frac{V}{\pi^3} d^3\kappa. \tag{14}$$

www.Endbook.net



شکل ۲: برای شمردن تعداد وجوهی که متناظر با یک بازه معین در فضای بردارهای موج هستند، کافی است که حجم ناحیه مزبور را بر تعداد مربع هایی که درون آن حجم وجود دارد تقسیم کنیم و حاصل را در ۲ (بخاطر قطبش نور) ضرب کنیم. دراین فضا حجم هر مکعب برابر است با $\frac{\pi^3}{V}$. هرچه که حجم محفظه V بیشتر باشد حجم یک مکعب دراین نمودار کوچک تر شده و نحوه محاسبه تعداد وجوه دقیق تر می شود.

بنابراین با استفاده از اصل هم پاری انرژی و با توجه به اینکه در حالت تعادل گرمایی به هر وجه به اندازه kT انرژی می رسد، مقدار انرژی تابشی که در موج هایی که بردار موج آنها در بازه d^3k قرار دارد، ذخیره شده است برابراست با

$$dU = kT\ dn = kT\ 2\ \frac{V}{\pi^3} d^3\kappa \tag{15}$$

با توجه به اینکه $d^3\kappa = \kappa^2 d\kappa d\Omega$ و

$$\kappa = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi\nu}{c} \tag{16}$$

نتیجه می گیریم

$$dU = kT\ 2\ \frac{V}{\pi^3}(\frac{2\pi}{c})^3 \nu^2 d\nu. \tag{17}$$

برای آنکه چگالی انرژی ذخیره شده در بازه فرکانس $(\nu, \nu + d\nu)$ را بدست آوریم می بایست روی زاویه‌ی بردارِ $\vec{\kappa}$، آنهم در یک هشتم سطح کره انتگرال بگیریم. دلیل این امر آن است که تنها می بایست κ_x، κ_y و κ_z های مثبت را درنظر بگیریم زیرا منفی این مقادیر با توجه به رابطه‌ی 11 منجر به یک موج ایستاده متفاوت نمی شود. بنابراین نهایتاً چگالی انرژی تابشی در واحد حجم در واحد فرکانس برابر خواهد شد با

$$u(\nu, T) = kT\ \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \tag{18}$$

www.Endbook.net

این رابطه که نخستین بار توسط رایلی و جینز بدست آمد، تنها برای فرکانس های کم بر طیف تجربی تابش گرمایی منطبق است و در فرکانس های بالا به وضوح با منحنی تجربی متفاوت است. بخصوص این رابطه نشان می دهد که کل انرژی تابشی در همه فرکانس ها بی نهایت است که می دانیم چنین نیست.

تا سال ۱۹۰۰ کسی نتوانست هیچ توضیح منطقی برای تابش جسم سیاه بر مبنای فیزیک کلاسیک پیدا کند. دراین سال بود که پلانک باپیشنهاد شجاعانه‌ای نخستین دریچه به سوی دنیای کوانتومی را گشود. وی نخست سعی کرد که یک عبارت تحلیلی برای منحنی تابش جسم سیاه پیدا کند. تا آن موقع کسی چنین کاری نکرده بود و هیچ عبارت تحلیلی برای این منحنی در دست نبود. توجه به این نکته مهم است که ما با یک منحنی واحد سروکار نداریم بلکه به ازای هر دما یک منحنی در پیش رو داریم و از همین جا می توان دشواری و اهمیتِ کار پلانک را برای پیدا کردن یک عبارت تحلیلی که درهمه دما ها و همه فرکانس ها معتبر باشد دریافت.

وی پس از کار طاقت فرسایی که اوج تلاش بیست ساله وی برای درک تابش گرمایی بود، سرانجام توانست این عبارت تحلیلی را پیدا کند. این عبارت تحلیلی به شکل زیراست:

$$u(\nu,T)=\frac{8\pi\nu^2}{c^3}\frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}}-1}, \tag{19}$$

که درآن h یک ثابت جهانی (مثل سرعت نور یا ثابت بولتزمن) است که به افتخار کارِ عظیمِ وی ثابت پلانک نام گرفته است و مقدار عددی آن عبارت است از:

$$h=6.627\times10^{-34}\ Joule\ second. \tag{20}$$

حتی امروزه نیز درک مهارت فنی ای که پلانک به کار برده است تا از مقایسه انبوه مشاهدات تجربی بتواند مقدار این ثابت را تعیین کند، دشواراست.

«... هنگامی که به بیست سال پیش از زمانی می نگرم که اندیشه کوانتوم پیداشد و اندازه گیری آن از طریق واقعیت های تجربی صورت گرفت، و نیز به راه دور و دراز و پرپیچ وخمی می نگرم که به این اکتشاف انجامید، سخت به یاد گوته می افتم که گفته بود، انسانها تا زمانی که درجستجوی چیزی هستند پیوسته اشتباه می کنند و دچار خطا می شوند. دراثنای تلاش و کوشش دراز و دشوار، پژوهنده ممکن است مکرر در مکرر گرفتار این وسوسه بشود که از کوشش خود به عنوان اینکه بیهوده و بی حاصل است دست بردارد، ولی گاه به گاه برقی در راه او می جهد و دلیل شکست ناپذیری برای او می شود برای اینکه، پس از همه خطاهایی که در برداشتن گامی پس از گامی دیگر مرتکب شده است، لااقل به این نتیجه رسیده است که یک گام به حقیقتی که درجستجوی آن است نزدیک تر شده است....» [1]

[1] از خطابه پلانک در فرهنگستان پادشاهی علوم سوئد، هنگام دریافت جایزه نوبل .

www.Endbook.net

مرحله بعدی در کار پلانک آن بود که توضیحی برای وجود این تابع پیدا کند. ما تنها می توانیم به حدس و گمان متوسل شویم تا راه پرپیچ وخمی را که پلانک برای رسیدن به ایده کوانتوم طی کرده است با ساده انگاری فراوان بازسازی کنیم. اگر به رابطه 19 نگاه کنیم متوجه می شویم که عاملِ $\frac{8\pi\nu^2}{c^3}$ که تعداد وجه های تابش را می شمارد و از یک ملاحظه هندسی بدست آمده است در این رابطه نیز وجود دارد. این عبارت متوسط انرژی یک وجه است که تغییر یافته و از مقدارِ kT به مقدارِ $\frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}}-1}$ تغییر یافته است. نکته مهم این است که این انرژی متوسط دیگر مستقل از فرکانس نیست. اگر $h\nu$ خیلی کوچکتر از kT باشد، با استفاده از بسط $e^x \approx 1+x$ نتیجه می گیریم که انرژی متوسط همان مقدار kT است و اگر $h\nu$ خیلی بزرگتر از kT باشد این انرژی متوسط صفراست. در واقع کشف ثابت پلانک باعث شده است که ما بتوانیم برای هر فرکانس ν یک انرژی مشخصه به اندازه $h\nu$ تعریف کنیم تا بتوانیم آن را با انرژی مشخصه دیگری مثل kT مقایسه کنیم. فرض پلانک آن بود که یک وجه تابشی با فرکانس ν مقدار انرژی هایی را که مبادله می کند به صورت پیوسته نیست بلکه به صورت مضاربی از این انرژی مشخصه یعنی $h\nu$ است. با قبول چنین فرضی انرژی متوسط یک وجه در دمای T را حساب می کنیم. بنابر اصل مکانیک آماری احتمال اینکه این وجه انرژی $nh\nu$ داشته باشد برابراست با $\frac{1}{Z}e^{-\beta nh\nu}$ که درآن Z برابر است با:

$$Z := \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta nh\nu} = \frac{1}{1-e^{-\beta h\nu}}. \tag{21}$$

با داشتن این تابع پارش می توان انرژی متوسط ذخیره شده در یک وجه را حساب کرد. به سادگی به دست می آوریم

$$\langle E\rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z = \frac{h\nu}{e^{\beta h\nu}-1} = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}}-1}. \tag{22}$$

با ضرب کردن این انرژی متوسط در تعداد وجه های با فرکانس ν به همان رابطه پلانک می رسیم. به این ترتیب با فرض گسسته بودن انرژی مبادله شده بین تابش و ماده پلانک توانست رابطه صحیح و عمومی طیف تابش گرمایی را توضیح دهد. این فرض در ضمن به معنای آن است که انرژی های مجاز برای یک نوسانگر نیز پیوسته نیستند بلکه این انرژی ها مقادیری گسسته را تشکیل می دهند که تفاوت آنها مضربی از $h\nu$ است. به این ترتیب ایده کوانتوم انرژی، سطوح گسسته انرژی و یک ثابت عمومی و جهانی به نام ثابت پلانک در سال ۱۹۰۰ جایگزین ایده های قدیمی فیزیک کلاسیک شد. به این ترتیب مقاله ای که پلانک در ۱۴ دسامبر ۱۹۰۰ به انجمن فیزیک آلمان عرضه کرد، و درآن نتایج اکتشاف خود را بیان کرد، در واقع علامت پایان دوره مکانیکی و سرآغاز دوره جدیدی در علم است.

پلانک برای این کشف راه بسیار پرپیچ وخمی را پیمود که ماحصل بیش از بیست سال کار مداوم او در باره طیف تابش گرمایی بود. وی با تواضع زیاد در باره کشفش چنین گفته است: « یک نفر معدنچی را تصور کنید که سالها لاینقطع سینه‌ی زمین را درجستجوی ماده معدنی معینی شکافته باشد، اما شبی با رگه‌ای از طلا برخورد کند که اصلاً وجود آن را حدس هم نمی زد. قدر مسلم آن است که اگر او با این رگه برخورد نمی کرد، حتماً دیگری آن را می یافت.» [2]. اما همانطور که پی یر روسو در کتاب تاریخ علم گفته است: « ما مسئولیت آن را می پذیریم که جز او هیچ کس قادر نبود تئوری کوانتا را وضع کند».

[2] تاریخ علوم: نوشته پی یر روسو، ترجمه حسن صفاری، انتشارات امیرکبیر، ۱۳۵۸

www.Endbook.net

برای اینکه عظمت کار پلانک را درک کنیم بد نیست دراین جا بحث خود در باره تابش گرمایی را با نقل قطعه ای از یک کتاب به پایان ببریم. این کتاب « علم به کجا می رود؟ » نام دارد و نوشته پلانک است. در دیباچه ای که جیمز مورفی برآن نوشته است چنین می خوانیم:

«.... روزی از ماه ژوئن ۱۹۳۲ در خانه ییلاقی اینشتین نزدیک پانزده مایلی مغرب برلن، به دیدار او رفتم. خانه اینشتین بربالای تپه کم شیبی ساخته شده و دریاچه زیبایی چشم انداز آن را تشکیل می دهد. طبقه آخر آن ایوانی دارد که به صحنه‌ی وسیع یک رصد خانه شبیه است و بر این ایوان دوربینی است که گاهگاه اینشتین با نگاه کردن از آن به ستارگان خود را مشغول می دارد. هنگامی که تاریکی شامگاهی نزدیک می شد و پرتو درخشان خورشید که سراسر روز به سطح دریاچه می خورد رفته رفته حالت آشفتگی پیدا می کرد، با هم به ایوان رفتیم تا فرورفتن خورشید را تماشا کنیم.... آنگاه که در داخل اتاق بودیم موضوع اصلی گفتگو همه بحران سیاسی بود، ولی دراینجا، درمیان هماهنگی دریاچه و جنگل و خورشیدِ در حال فرو شدن، مطلب عالیتری مرکز بحث را تشکیل می داد. نام ماکس پلانک در ضمن سخن به میان آمد و دنباله بحث به مسائل فلسفی گوناگونی کشید که از فیزیک کوانتومی برخاسته است.... من از اینشتین درخواست کردم که برای کتابی که بناست پلانک بنویسد و در انگلستان منتشر شود، مقدمه ای بنویسد. وی گفت که معرفی پلانک از طرف او به مردم امری است که به نظر وی با جاه طلبی و ادعا همراه است، چرا که کاشف نظریه کوانتومی نیازمند آن نیست که از منبع کم نور تری نورِ منعکس بر او بتابد. این بود وضع اینشتین در برابر پلانک که با لحن صادقانه، روشن و اصیلی بیان می شد....».

۳ مسئله گرمای ویژه جامدات

آزمایشهای گوناگون نشان داده بودند که ظرفیت گرمایی جامدات گوناگون همگی باهم برابر و تقریباً برابر با 6 کالری بر مول بر درجه کلوین است. دولان [3] و پتیت [4] توضیح ساده ای برای این پدیده یافته بودند. در یک مول از یک جامد تعداد N_0 اتم وجود دارد که N_0 عدد آووگادروست. اگر هراتم را به صورت یک نوسانگر درنظربگیریم که دراثر گرما در جای خود مرتعش می شود و این ارتعاش در سه بعد انجام می شود. اصل همپاری انرژی به ما می گوید که در دمای T مقدار انرژی متوسط آن برابر با $3kT$ است. بنابراین انرژی کل جامد برابر با $3NkT$ و درنتیجه ظرفیت گرمایی آن برابر با

$$C_V = \frac{dU}{dT} = 3NK = 3R \approx 6cal/mole\ K^{0-1}, \tag{23}$$

است. بنابراین ظرفیت گرمایی جامدات به همین سادگی توصیف می شود. اما مشاهدات بعدی نشان داد که در دماهای پایین ظرفیت گرمایی جامدات به تدریج کم شده و به صورت تابع T^3 به سمت صفر میل می کند. چنین چیزی را نمی شد با الگوهای فیزیک کلاسیک توضیح داد. نخستین بار اینشتین بود که با کاربست نظریه پلانک و درنظرگرفتن طیف گسسته انرژی برای نوسانگرها توضیح کیفی درستی از ظرفیت گرمایی جامدات به دست داد. وی با ساده سازی مسئله فرض کرد که همه اتم های جامد با یک فرکانس یکسان مثلاً ν نوسان می کنند و انرژی kT را با متوسط انرژی یک نوسانگر کوانتومی یعنی $\frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}}-1}$

---

[3] *Dulong*
[4] *Petit*

www.Endbook.net

جایگزین کرد . این کار انرژی متوسط یک مول از جامد را تبدیل می کند به

$$U = 3N\frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}, \tag{24}$$

که دراثر آن ظرفیت گرمایی ویژه جامد برابر خواهد شد با:

$$C_V = \frac{dU}{dT} = 3R\frac{x^2\, e^x}{(e^x - 1)^2} \tag{25}$$

که درآن $x = \frac{h\nu}{kT}$ است. خواننده براحتی می تواند نشان دهد که طرف راست این رابطه در دماهای کم یعنی دماهایی که $x \gg 1$ به صورت T^3 رفتار می کند، و دردماهای بالا یعنی $x \ll 1$ تبدیل می شود به $3R$.
به این صورت اینشتین توانست با کاربرد نظریه پلانک، به سادگی منحنی ظرفیت گرمایی جامدات را توضیح دهد. البته می دانیم که فرض های او خیلی ساده بودند، به این معنا که اتم های یک جامد مستقل ازهم نیستند و فرکانس یکسان ندارند، بلکه باهم برهم کنش می کنند و کار دقیق آن است که این سیستم را به صورت وجه های مستقل از هم درآوریم که با فرکانس های مختلف نوسان می کنند. این کار سال ها بعد توسط پیتر جِی دیبای [5] انجام شد.

۴ اثر فوتوالکتریک

وقتی که به سطح صیقلی یک فلز نور تکفام تابیده می شود، از خود الکترون ساطع می کند. مهم ترین خصلت های این پدیده که از طریق مشاهده و تجربه بدست می آیند و با الگوهای کلاسیک به هیچ وجه قابل توصیف نیستند آن است که:

الف: همواره یک فرکانس آستانه وجود دارد، به نحوی که اگر فرکانس نور کمتر از این فرکانس آستانه باشد، هرچقدرهم که شدت نور را زیاد کنیم، الکترونی از سطح فلز کنده نخواهد شد.

ب: بعد از آنکه فرکانس نور تابیده از فرکانس آستانه بیشتر شد، انرژی الکترون های کنده شده به صورت خطی با فرکانس افزایش می یابد، شکل ۳.

ج: افزایش شدت نور اثری در انرژی الکترون های کنده شده ندارد و تنها تعداد آنها را زیاد تر خواهد کرد. افزایش تعداد الکترون ها خود را در افزایش شدت جریان خروجی نشان می دهد.
بر اساس الگوهای کلاسیک خصلت های فوق را به هیچ وجه نمی توان توضیح داد زیرا دراین الگوها میدان های الکتریکی و مغناطیسی ای که در نور وجود دارد الکترون های سطح فلز را به نوسان وادار می کنند و دامنه این نوسان بستگی مستقیمی به شدت نور که همان شدت میدان های الکتریکی و مغناطیسی نور است دارد. بنابراین با هر فرکانسی می توان الکترون ها را از سطح فلز کند مشروط برآنکه شدت نور از یک حد آستانه بیشتر باشد. هم چنین با افزایش فرکانس نور انرژی الکترون های

[5] *Peter J. Debye*

www.Endbook.net

کنده شده بیشتر نخواهد شد. هرگاه که شدت نور را افزایش دهیم انرژی الکترون های کنده شده نیز می بایست افزایش یابد، زیرا قسمتی از انرژی نور صرف کندن الکترون شده و مابقی آن می بایست به صورت انرژی جنبشی الکترون ها درآید. اهمیت اثر فوتو الکتریک آن است که از هر جهت که نگاه می کنیم تضاد نتایج تجربی اش با آزمایش با قاطعیت با فیزیک کلاسیک ناسازگار است، و از طرف دیگر کاربرد ایده کوانتای نور، آنچنانکه اینشتین پیشنهاد کرده است، با وضوح و سادگی خیره کننده ای تمام مشاهدات تجربی را توضیح می دهد.

پلانک در کار خود تنها قائل به گسیل و جذب تابش به صورت گسسته شده بود. در نظر وی انتشار نور همچنان مطابق با الگوی کلاسیک به صورت امواج پیوسته صورت می گرفت. مفهوم فوتون و البته نه نام آن به صورت بسته ای از انرژی تابشی نخستین بار در کار اینشتین برای توضیح اثر فوتوالکتریک پدیدارشد. وی نور تکفام با فرکانس ν را به صورت بارانی از بسته های انرژی $h\nu$ در نظر گرفت و توانست توصیف ساده‌ای از اثر فوتوالکتریک ارایه کند. هرگاه انرژی نور تکفام با فرکانس نور را به صورت $h\nu$ در نظر بگیریم و تصور کنیم که قسمتی از این انرژی به اندازه W صرف کندن الکترون می شود، بقیه آن به صورت انرژی جنبشی الکترون هایعنی E پدیدار خواهد شد. بنابراین خواهیم داشت:

$$E = h\nu - W. \tag{26}$$

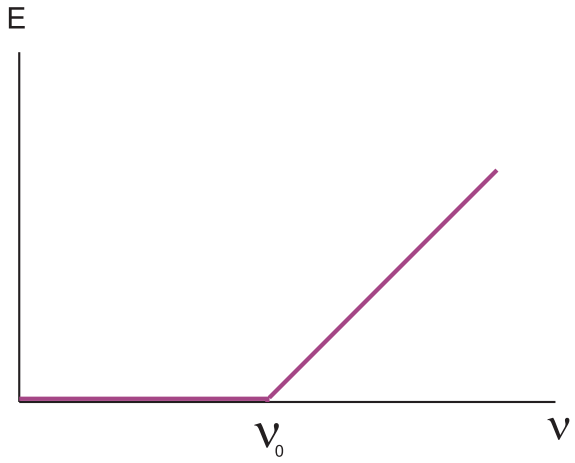
طبیعی است که الکترون وقتی می تواند کنده شود که انرژی فوتون تابیده شده از W بیشتر باشد که به معنای آن است که فرکانس نور می بایست از یک مقدارِ آستانهٔ $\nu_0 := \frac{W}{h}$ بیشتر باشد. بعد از این فرکانس آستانه انرژی الکترون به صورت خطی با فرکانس نور تابیده زیاد خواهد شد. وبالاخره هرچه که شدت نور را زیاد کنیم، یعنی هرچه تعداد فوتون های ورودی را زیاد کنیم، انرژی الکترون های کنده شده بیشتر نخواهد شد، بلکه تعداد آنها بیشتر خواهد شد و این همان چیزی است که به تجربه می بینیم. به این ترتیب هر سه ویژگی عجیب اثر فوتوالکتریک که در چارچوب فیزیک کلاسیک غیرقابل توضیح بودند به سادگی توضیح داده می شوند.

اینشتین مقاله خود درباره اثر فوتوالکتریک را در سال ۱۹۰۵ یعنی همان سالی که سه مقاله بنیادی خود در فیزیک را منتشر کرد، به سالنامه فیزیک فرستاد. اثر وی نه تنها تاییدی بر نظریه پلانک در مورد جذب انرژی تابش به صورت مقادیر گسسته بود بلکه نشان می داد که نور در انتشار خود نیز به صورت بارانی از ذرات منتشر می شود. سالهای بعد بور توانست با استفاده از نظریه پلانک بازهم گام های محکم تری در بسط نظریه کوانتومی بردارد اما قاطعترین تایید از تصویر ذره ای نور و وجود فوتون در سال ۱۹۲۳ یعنی سالها بعد از کار اولیه اینشتین به دست آمد. به جاست که دراین جا کمی از خط سیر تاریخی منحرف شویم و به این کار، یعنی پژوهش کامپتون بپردازیم.

۵ اثر کامپتون

وقتی که نوری با فرکانس کم به سطح یک فلز می تابد نخواهد توانست الکترون های سطح فلز را بکند و تنها از سطح فلز پراکنده می شود. در تصویر کلاسیک میدان الکتریکیِ نور تابیده شده الکترون های سطح فلز را به نوسان درمی آورد. فرکانس

www.Endbook.net



شکل ۳: انرژی الکترون های کنده شده از فلز برحسب فرکانس نورتابیده شده .

این نوسان با فرکانس نورتابیده شده یکسان است. الکترون هایی که نوسان می کنند به نوبه خود نوری را باهمان فرکانس تولید می کنند که ترکیب همه آنها نورپراکنده شده از سطح فلز را تولید می کند. بنابراین در نظریه کلاسیک طول موج نورتابیده شده می بایست با طول موج نورپراکنده شده یکسان باشد. اما مشاهده دقیق نشان می داد که همواره علاوه بر طول موج اولیه یک طول موج کمی بلند تر نیز در نورپراکنده شده وجود دارد و تفاوت این طول موج دوم با طول موج اولیه بستگی به زاویه پراکندگی نور دارد. کامپتون در پژوهش های تجربی خود توانست این بستگی را پیدا کند که به شکل زیراست:

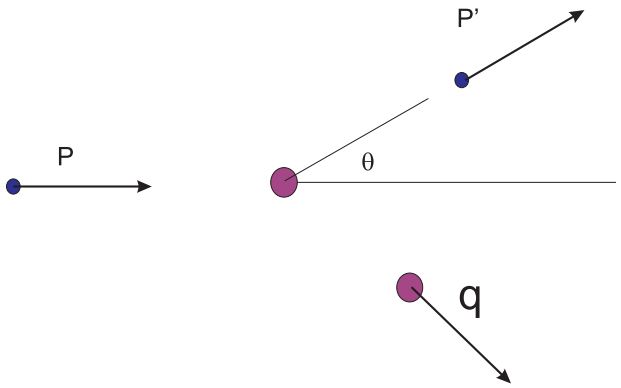
$$\lambda' - \lambda \propto (1 - \cos\theta), \tag{27}$$

که درآن θ زاویه بین پرتو پراکنده شده و پرتوی اولیه است.

کامپتون توانست با کاربست اندیشه پلانک واینشتین، این بار با در نظر گرفتن فوتون به مثابه یک گوی و نسبت دادن انرژیِ $h\nu$ و تکانه‌ی $\frac{h\nu}{c}$ به آن این اثر را به سادگی توضیح دهد. برای این کار وی تنها از قوانین پایستگی انرژی و تکانه و نگاه به مسئله به صورت یک برخورد الاستیک ساده بین فوتون و الکترون سود جست. هیچ چیز به اندازه این نمی توانست ماهیت ذره ای نور را به اثبات برساند. شکل ۴ استدلال کامپتون را نشان می دهد. دراین شکل الکترون ساکن در نظر گرفته می شود و فوتون با انرژی $h\nu$ و تکانه‌ی $\frac{h\nu}{c}$ به آن برخورد می کند. بعد از برخورد فوتون منحرف شده و در زاویه θ با فرکانس ν' یعنی انرژی $h\nu'$ و تکانه $\frac{h\nu'}{c}$ پراکنده می شود. تکانه الکترون بعد از برخورد q است. قانون بقای انرژی به ما می گوید که

$$h\nu + mc^2 = h\nu' + \sqrt{m^2c^4 + q^2c^2} \tag{28}$$

www.Endbook.net



شکل ۴: اثر کامپتون : گوی های کوچک نشان دهنده فوتون و گوی های بزرگ تر نشان دهنده الکترون هستند.

و قانون بقای تکانه می گوید:

$$\vec{P} = \vec{P'} + \vec{q} \tag{29}$$

یا

$$(P - P')^2 = q^2 \longrightarrow P^2 + P'^2 - 2PP' \cos\theta = q^2. \tag{30}$$

با ترکیب رابطه 28 و 30 به نتیجه زیر می رسیم:

$$h\nu\nu'(1 - \cos\theta) = mc^2(\nu - \nu'). \tag{31}$$

ویا

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos\theta). \tag{32}$$

این رابطه درست بیانگر همان چیزی است که در تجربه می بینیم. کمیت $\frac{h}{mc}$ بعدِ طول دارد و طول موج کامپتون برای الکترون نامیده می شود. برای الکترون مقدار عددی آن برابر است با

$$\frac{h}{mc} = \frac{6.626 \times 10^{-34}}{9.11 \times 10^{-31} \times 3 \times 10^{8}} \approx 2.41 \times 10^{-12}\ m = 0.0242\ \ Angstrom. \tag{33}$$

www.Endbook.net

کوچکی این عدد نشان می دهد که تفاوت طول موج های تابیده و پراکنده شده در مقایسه با طول موج نور مرئی بسیار کوچک است و به همین دلیل می بایست برای دیدن اثر کامپتون از طول موج های کوتاه استفاده کرد. درعین حال این عدد نشان می دهد که تا چه حد آشکارساختن این تفاوت در آزمایشهای کامپتون دشوار بوده است. اینکه چرا علاوه بر این طول موج بلند تر همواره طول موج اولیه نیز در هر زاویه ای وجود دارد بخاطر آن است که فوتون ها علاوه بر الکترون ها با هسته ها نیز برخورد می کنند و از آنها نیز پراکنده می شوند و برای هسته ها طول موج کامپتون حدوداً دوهزار بار کوچکتراست.

به این ترتیب تا سال ۱۹۲۳ کمترین شکی باقی نمانده بود که نور از ذراتی به نام فوتون با انرژی و تکانه معین تشکیل یافته است و این ذرات درست مثل گویهای کوچک در برخورد بادیگر ذرات عمل می کنند و برخورد آنها تابع قوانین مکانیک است. تصویر ذره ای نور در این سال کامل شده بود. در این زمان سه قرن از تثبیت تصویر موجی نور می گذشت. دراین مدت طولانی گستره وسیعی از پدیده های مربوط به نور، مثل انعکاس، شکست و تداخل و پراکندگی به کمک تصویر موجی نور توصیف شده بودند. تلسکوپ ها، میکروسکوپ ها، عدسی ها، عینک ها و دوربین ها همه بر همین اساس ساخته و پرداخته شده و رفتار آنها مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفته بود. نورشناخت موجی که توسط هویگنس اولین سنگ بناهای آن گذاشته شده بود، به کمک نظریه الکترومغناطیسی ماکسول مبنای بسیار محکمی پیدا کرده بود که می گفت نور چیزی جز امواج الکترومغناطیسی نیست. به کمک نظریه الکترومغناطیس بود که برهم کنش نور و ماده در بسیاری از موارد نیز توضیح داده می شد. اما اینک به نظر می رسید که که منازعه‌ای که سیصد سال پیش درباره ماهیت موجی یا ذره ای نور به نفع هویگنس حل و فصل شده بود، دوباره و این بار به نفع نیوتن و تصویرش از ذرات نوراحیا شده است.

٦ مدل اتمی بور

درسال ۱۹۱۱ رادرفورد مدل اتمی اش را ارائه داد که بخوبی از عهده توضیح آزمایش های پراکندگی ذرات آلفا از اتم ها برمی آمد. در مدل رادرفورد، یک هسته‌ی بسیار کوچک، تقریباً تمامی جرم اتم را دربردارد والکترون ها مثل سیارات منظومه شمسی در مدارهای دایره ای به دور آن می چرخند. دراین زمان سیصد سال از طرح منظومه خورشید مرکزی کپرنیک می گذشت و مدل او که درآغاز انقلابی و غیر قابل قبول می نمود، برای کلیه دانشمندان حکم طبیعی ترین حرکات را یافته بود. بار دیگر غیرقابل قبول ترین نظریه‌ی یک دوران در طی گذشت زمان به تصویری روزمره و عادی تبدیل گشته بود. با وجود توفیق کم نظیر، مدلِ رادرفورد چیزی کم داشت. اگر قبول کنیم که اتم دنیای کوچک متحرکی است، چگونه می توان این امر را توجیه کرد که هرگز از حرکت بازنمی ایستد و تنها ماشینِ دائم الحرکتی ست که در طبیعت یافت می شود. برمبنای الکترومغناطیس کلاسیک الکترونی که به دور هسته اتم گردش می کند می بایست به دلیل شتابدار بودن پیوسته تابش کند و بدلیل از دست دادن انرژی خیلی زود به روی هسته سقوط کند. معادله ای که بر حرکت الکترون به دور هسته حاکم است عبارت است از:

$$\frac{mv^2}{r} = K\frac{e^2}{r^2} \tag{34}$$

که درآن $K = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$.

www.Endbook.net

نکته مهم آن است که این معادله به خودی خود شعاع یا سرعت الکترون را تعیین نمی کند. بسته به این که الکترون چه انرژی داشته باشد می تواند هر سرعتی و هرشعاعی داشته باشد. درحقیقت می دانیم که انرژی الکترون برابراست با:

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - K\frac{e^2}{r} = -\frac{1}{2}mv^2 \tag{35}$$

که درنوشتن تساوی آخر از معادله قبلی استفاده کرده ایم. بنابراین هرگاه انرژی الکترون معلوم شود، می توان سرعت حرکت آن به دور هسته و سپس با استفاده از معادله قبلی شعاع حرکت آن به دور هسته را تعیین کرد. به عبارت دیگر در مدل رادرفورد هیچ چیزی وجود ندارد که انرژی الکترون و درنتیجه شعاع اتم را به طور طبیعی تعیین کند و ما درواقع نمی دانیم که چرا اتم ها اینقدر کوچکند. این سوال به خودی خود برای دانشمندان اهمیت بنیادین داشته است که چه چیزی اندازه اتم ها را تعیین می کند؟

اگر شعاع اتم ها را حدود یک آنگستروم یعنی 10^{-10} متر بگیریم آنگاه می توان مرتبه سرعت و انرژی الکترون را تخمین زد. سرعت الکترون درحدود یکصدم سرعت نور و انرژی آن حدود چند الکترون ولت است. حال می توان از الکترومغناطیس کلاسیک کمک گرفت که برمبنای آن ذره ای با بار الکتریکی e و شتاب a با نرخِ

$$P = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{2e^2}{3}\frac{a^2}{c^3} \tag{36}$$

از خود انرژی تابشی ساطع می کند. برای الکترونی که درشعاع R باسرعت v دور هسته می چرخد، شتاب برابر است با:

$$a = \frac{v^2}{R} \tag{37}$$

درنتیجه با تقسیم انرژی بر نرخ تابش انرژی می توان دریافت که الکترون بعد از چه مدت می بایست به روی هسته سقوط کند. این مدت تقریباً برابر است با:

$$\tau \approx \frac{\frac{1}{2}mv^2}{P} = \frac{\frac{1}{2}mv^2}{\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{2e^2}{3}\frac{v^4}{R^2c^3}} \approx 4\pi\epsilon_0\frac{3}{4}\frac{mR^2c^3}{e^2v^2} \tag{38}$$

اگر شعاع چرخش الکترون به دور هسته را از مرتبه یک آنگستروم و سرعت حرکت آن را از مرتبه یک صدم سرعت نور بگیریم این مدت زمان برابر خواهد شد با:

$$\tau \approx \frac{3}{4}\frac{1}{9\times10^9}\frac{9\times10^{-31}\times10^{-20}\times3\times10^8}{(1.6\times10^{-19})^2\times10^{-4}} \approx 10^{-10} \text{ ثانیه} \tag{39}$$

اگر چه این زمان در مقایسه با مدت زمان گردش الکترون به دور هسته یعنی $T = \frac{2\pi R}{v} \approx 2\times10^{-16}$ ثانیه، زمانی طولانی است ولی نشان می دهد که الکترون سرانجام بر روی هسته سقوط می کند.

درسال ۱۹۱۱ نیلز بور که به تازگی در ۱۹۱۱ با درجه دکتری از دانشگاه کپنهاگ فارغ التحصیل شده، با اشتیاق زیاد راهی دانشگاه کمبریج در انگلستان شده بود تا تحت نظر جی. جی. تامسون درباره خواص اتم ها مطالعه کند.

www.Endbook.net

«... پدر عزیزم، خوشحالم که یادداشت هایم در باره سخنرانی جینز برایتان جالب بوده است. مجموعه کامل یادداشت هایم را به خانه می آورم تا باهم در باره اش کار کنیم. جینز اخیراً مشغول کار بر روی فشار تشعشع بوده است. ضمناً از یک دانمارکی چیزهای خیلی زیادی یاد گرفتم که وقتی دیده بود من در سخنرانی جینز از او سوال می کنم، بعد از سخنرانی پیش من آمد و درباره سخنرانی با من حرف زد. به نظر می رسید که چیزهای زیادی دراین باره می داند. از همه جالب تر این که اسمش بور بود یا چیزی شبیه به این....» [6]

پس از مدت کمی بور تغییر مکان داد و در ۱۹۱۲ به دانشگاه منچستر رفت تا تحت نظر رادرفورد به کار بپردازد. این درست یک سال بعد از آن بود که رادرفورد مدل اتمی اش را ارایه داده بود و بور می خواست که پاسخی برای معمای ساختمان اتمی پیدا کند.

«... نمی دانی چقدر بودن دراین جا خوب است، جایی که کسان زیادی هستند که می توان با آنها صحبت کرد و یا کسانی که مطالب بسیاری در باره این چیزها می دانند. استاد رادرفورد به هرچیزی که فکر می کند ایده تازه ای در آن است علاقه نشان می دهد. در سالهای اخیر او روی یک مدل اتمی کار کرده است که به نظر می رسد از هر مدل اتمی دیگری که تا کنون عرضه شده است پایه و اساس محکمتری دارد...» [7]

برای دنیای اتمی رادرفورد هیچ واحدِ طبیعی انرژی وجود نداشت و الکترونی که به دور هسته می چرخید می توانست هر مقدار انرژی و در نتیجه هرمقدار شعاع و سرعت داشته باشد. نخستین ابتکار شجاعانه بور آن بود که این واحد طبیعی را به طرز زیبایی وضع کند. فرض اول وی آن بود که

الکترون در مدارهای دایره ای به دور هسته اتم می چرخد و تنها مدارهای مجاز برای آن عبارت اند از مدارهایی که تکانه زاویه‌ای آنها مضربی از $\hbar := \frac{h}{2\pi}$ یعنی ثابت پلانک باشد.

با قبول چنین فرضی یعنی اینکه ثابت $\hbar$ واحد طبیعی تکانه زاویه ای برای اتم است، بلافاصله همه ابعاد، انرژی ها ، سرعت ها و فرکانس های درون اتم تعیین می شوند.

« ... اوضاع به خوبی پیش می رود چون فکر می کنم چیزهای جالبی کشف کرده‌ام. البته هنوز مطمئن نیستم چون آنقدر که در فکر کردن خِنگ هستم در محاسبه جزئیاتش سریع نبوده‌ام. امیدوارم که محاسباتم را تمام کنم و آن را قبل از این که این جا را ترک کنم به رادرفورد نشان دهم....» [8]

استدلال بور چنین بود: فرض کنید که الکترون در مداری دایره ای به شعاع r و با سرعت ثابت v به دور هسته می چرخد. بر

[6] از نامه ویلیام لارنس براگ (درآن موقع دانشجوی کمبریج) به پدرش ویلیام هنری براگ.
[7] از نامه نیلزبور از منچستر به برادرش هارالد بور، ۱۲ ژوئن ۱۹۱۲
[8] از نامه نیلز بور به برادرش هارالد بور، ۱۷ ژوئن ۱۹۱۲.

www.Endbook.net

مبنای فرض نخست داریم:

$$mvr = n\hbar, \tag{40}$$

که درآن n یک عدد صحیحِ غیر صفراست. کابرد قانون نیوتن در مورد الکترون به ما می گوید:

$$K\frac{e^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} \tag{41}$$

که درآن $K = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$.
ترکیب این دو رابطه به دست می دهد:

$$v = \frac{Ke^2}{n\hbar} \tag{42}$$

این رابطه و دیگر روابط مربوط به ساختمان اتم را می توان به شکل بهتری نوشت اگر یک ثابت بدون بعدِ α به صورتِ

$$\alpha := \frac{Ke^2}{\hbar c} \tag{43}$$

تعریف کنیم. این ثابت بدون بعد ثابت ساختار ریز[9] نامیده می شود و مقدار عددی اش برابر است با $\alpha \approx \frac{1}{137}$. درنتیجه رابطه 42 به شکل زیر در می آید:

$$\boxed{v_n = \alpha\frac{c}{n}}. \tag{44}$$

باجایگذاری این مقدار در رابطه 40 می توانیم شعاع را بدست آوریم:

$$\boxed{r_n = \frac{n^2}{\alpha}\frac{\hbar}{mc}} \tag{45}$$

عدد n عدد کوانتومی اصلی نامیده می شود و مقدارهای صحیح غیر صفر اختیار می کند. اولین مدار مربوط به عدد $n = 1$ است. دراین مدار سرعت الکترون برابر با αc یعنی $\frac{1}{137}$ سرعت نورو شعاع آن ۱۳۷ برابر

$$\lambda_c := \frac{\hbar}{mc} = 0.00382 \quad Angstrom$$

است. این شعاع با نماد a_0 نشان داده می شود و به آن شعاع بور می گویند. مقدار آن برابراست با:

$$\boxed{a_0 := \frac{1}{\alpha}\lambda_c = 137 \times \frac{0.024}{2\pi}\ Angstrom = 0.52 \quad Angstrom.} \tag{46}$$

انرژی الکترون از رابطه زیر حساب می شود:

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - K\frac{e^2}{r} \tag{47}$$

[9] Fine Structure Constant

www.Endbook.net

که با توجه به رابطه $m\frac{v^2}{r} = K\frac{e^2}{r^2}$ برابر است با:

$$E = -\frac{1}{2}mv^2 = -\frac{1}{2}K\frac{e^2}{r}. \tag{48}$$

بنابراین وقتی که الکترون در مدارِ n ام است انرژی آن برابراست با:

$$\boxed{E_n = -\tfrac{1}{2}mv_n^2 = -\tfrac{1}{2}m(\tfrac{\alpha}{n}c)^2 = -\tfrac{1}{2}\tfrac{\alpha^2}{n^2}mc^2.} \tag{49}$$

انرژی mc^2، انرژی در حال سکون الکترون است و مقدار آن برابر است با $0.511\ \ Mev$. بنابراین انرژی الکترون در اولین مدارش، یعنی انرژی پایه آن برابر است با:

$$\boxed{E_1 := -\tfrac{1}{2}\alpha^2mc^2 = -\tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{137})^2 \times 0.511\ Mev = -13.6\ \ ev.} \tag{50}$$

به این ترتیب انرژی الکترون در مدار شماره n برابر خواهد بود با:

$$\boxed{E_n = \tfrac{E_1}{n^2}}. \tag{51}$$

به این ترتیب می بینیم که بور با وارد کردن ثابت پلانک به درون دنیای اتمی به یکباره همه ساختارهای آن را تعیین کرده است. اکنون می توانیم بگوییم که شعاع طبیعی برای اتم چقدراست و یا سرعت های طبیعی یا انرژی های طبیعی برای الکترون چقدرهستند.

آیااین مدارها پایدارند و الکترون وقتی که دراین مدارهاست به روی هسته سقوط نمی کند؟ چگونه می توان به معمای سقوط الکترون به روی هسته، یعنی همان مشکل اساسی مدل رادرفورد پاسخ گفت. بور دراین جا یک گام شجاعانه برداشت که به کلی با فیزیک کلاسیک تباین داشت، کاری که بیشتر به پاک کردن صورت سوال شبیه بود. فرض دوم وی آن بود که

هنگامی که الکترون دریک مدار گردش می کند هیچ نوع تابشی از خود گسیل نمی کند وانرژی خود را از دست نمی دهد.

بجای آن وی فرض کرد که

الکترون تنها وقتی که از مداری با انرژی E_1 به مداری با انرژی E_2 سقوط کند، انرژی خود را با گسیل فوتونی با فرکانس $\nu = \frac{E_1-E_2}{h}$ از دست می دهد. برعکس هروقت که الکترون فوتونی را با این انرژی جذب کند از مدار با انرژی E_2 به مدار با انرژی E_1 برانگیخته خواهد شد.

www.Endbook.net

نام سری	محدوده طول موج	رابطه‌ی سری	
$Lyman$	فوق بنفش	$\kappa = R_H(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2})$	$n = 2, 3, 4, \cdots$
$Balmer$	نزدیک فوق بنفش و مرئی	$\kappa = R_H(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2})$	$n = 3, 4, 5, \cdots$
$Paschen$	مادون قرمز	$\kappa = R_H(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2})$	$n = 4, 5, 6, \cdots$
$Brackett$	مادون قرمز	$\kappa = R_H(\frac{1}{4^4} - \frac{1}{n^2})$	$n = 5, 6, 7, \cdots$
$Pfund$	مادون قرمز	$\kappa = R_H(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2})$	$n = 6, 7, 8, \cdots$

1: خط های طیفی برای اتم هیدروژن

آیا این فرض ها و مدل اتمی ای که برمبنای آنها ساخته شد صحیح بودند؟ چگونه می شد این مدل را ردّ یا قبول کرد؟ دراینجا بور به طرز هوشمندانه ای به داده های تجربی ناشی از طیف نگاری اتم ها استناد کرد، یعنی تنها جاییکه ساختمان درونی اتم ها به کسانیکه از بیرون به آن نگاه می کنند آشکار می شود.

درآن زمان سالهابود که طیف تابشی اتمها مورد مطالعه واندازه گیری دقیق قرارگرفته بود. طیف تابشی یا نشری اتم های گوناگون یک طیف پیوسته نیست بلکه از مجموعه ای از خطوط با فرکانس های معین تشکیل شده است. هم چنین وقتی نور سفید به این اتم های می تابانیم و به طیف جذبی آنها نگاه می کنیم، می بینیم که همان خطوط طیف جذبی این بار به صورت تیره درزمینه روشن نورسفید وجود دارند. به این ترتیب یک اتم تنها فرکانس های معینی را تابش و یا جذب می کند. طیف یک اتم را می شد به مثابه اثر انگشت آن در نظر گرفت که در هر شرایطی می توانست برای شناسایی یک اتم به کار رود. تا آن موقع با طیف سنجی های دقیق روابط معینی بین این خطوط یافته شده بود و بعد ها نیز روابط بازهم بیشتری پیدا شد. معلوم شد که می توان خطوط بسیار درهم و برهم طیف را به صورت دسته های جداگانه‌ای دسته بندی کرد و در هر دسته نظم خاصی بین فرکانس ها یا طول موج های این خطوط برقراراست. در مورد اتم هیدروژن چندین سری از این خطوط شناسایی شدند که امروزه به نام کاشفان آنها نامگذاری شده اند. فرکانس خطوط طیفی چند تا از این دسته ها در جدول ٦ نشان داده شده اند. دراین جدول κ عکس طول موج یعنی $\frac{1}{\lambda}$ و R_H کمیتی است با بعد عکس طول که ثابت رایدبرگ برای اتم هیدروژن نامیده می شود. مقدار این ثابت برابر است با:

$$R_H = 10967757.6 \pm 1.2 \ \ m^{-1}. \tag{52}$$

برمبنای مدل بور هرگاه الکترون از مدار n_i به مدار n_f بجهد، انرژی $E_{n_i} - E_{n_f}$ را به صورت فوتون آزاد می کند. فرکانس

www.Endbook.net

این فوتون برابر خواهد بود با:

$$\nu := \frac{E_{n_i} - E_{n_f}}{h} = \frac{E_1}{h}(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2}). \tag{53}$$

برای چنین فوتونی می توان عکس طول موج را بدست آورد که برابر خواهد بود با:

$$\kappa = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = \frac{|E_1|}{hc}(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}). \tag{54}$$

مقدار عددی ثابت $\frac{|E_1|}{hc}$ برابر است با:

$$\frac{|E_1|}{hc} = \frac{1}{2}\alpha^2\frac{mc}{h} = \frac{\alpha^2}{4\pi\lambda_c} \approx 10988150.39 \ \ m^{-1}, \tag{55}$$

که با تقریب بسیارخوبی با ثابت رایدبرگ یعنی R_H مساوی است. بدین ترتیب بور توانست با توصیف دقیقی از طیف مرئی اتم هیدروژن، تایید تجربی استواری برای مدل خود پیدا کند. قدم بعدی آن بود که قسمت های دیگر طیف، ازجمله طیف نامرئی و اشعه ایکس نیز مورد بررسی قرارگیرند. این آزمایش در سال ۱۹۱۳ در آزمایشگاه رادرفورد انجام گرفت و بازهم به تایید نظریه بور انجامید. کسیکه این آزمایش را انجام داد، مرد جوان بیست و هفت ساله ای بود به نام هاری موزلی $(Harry \ \ Mosely)$ که متاسفانه کارنامه علمی اش به همین محدود ماند، زیرا در جریان جنگ اول جهانی به سال ۱۹۱۵ کشته شد.

در تاریخ تحول نظریه کوانتومی کار بور اهمیت بسیار زیادی دارد، زیرا وی توانست با کاربست ایده پلانک و با درهم شکستن قوانین فیزیکی که تا دوقرن بعد از نیوتن دوام آورده بودند، برای اولین بارپرده از ساختمان پیچیده‌ی اتم بردارد. تا آن هنگام ایده های کوانتومی به صورت جداگانه هرکدام برای توصیف آزمایشی خاص به کار گرفته شده بودند، اما کار بور سنتز کامل و موفقی از همه اینها بود آن هم برای توصیف ساختمان اتم. اکنون ساختمان اتم نیز چون جهان ِنیوتن دارای پایه‌ای ریاضی شده بود. طی یک دهه بعد بور و همکارانش در موسسه فیزیک نظری ای که در دانمارک برای بسط پژوهش های وی ساخته شده بود، نظریه اتمی و مدل بور را توسعه دادند. نخست زومرفلد و ویلسون اصل کوانتش بور را بر مبنای محکم تر و عام تری استوار ساختند.

> «... همکار عزیز، از این که کار بسیار جالب تان را برایم فرستاده‌اید سپاسگزارم. باید بگویم که قبلاً آن را در مجله فلسفی مطالعه کرده بودم. مسئله امکان ِمحاسبه ثابت رایدبرگ و ربط دادن آن به ثابت پلانک مدتی بود که به ذهن من نیز رسیده بود. چند سال قبل من دراین باره گفتگویی با دیبای داشتم. اگر چه در حال حاضر من هنوز نسبت به هر نوع مدل اتمی شکّاک هستم، با این وجود محاسبه ثابت رایدبرگ بدون هیچ گفت و گویی یک موفقیت بزرگ است... آیا قصد دارید که مدل اتمی خود را برای اثر زیمان نیز به کار ببرید؟ من میل دارم که روی این مسئله کار کنم. شاید بتوانم وقتی که در ماه اکتبر آقای رادرفورد را می بینم از برنامه‌ی شما باخبر شوم..» [10]

[10] از نامه آرنولد زومرفلد به نیلز بور، ۴ سپتامبر ۱۹۱۳.

www.Endbook.net

بر مبنای این اصل کوانتشی که بعد ها اصل کوانتش بور–زومرفلد نام گرفت در هر حرکت تناوبی به ازای هر زوج مختصه‌ی مزدوجِ (q,p) یک اصل کوانتش به صورت زیر وجود دارد

$$\oint pdq = n_q h, \tag{56}$$

که درآن n_q یک عدد صحیح است. به کمک این اصل کوانتش انرژی نوسانگر هارمونیک چنانکه در کار اولیه پلانک مطرح شده بود و کوانتش انرژی یک سیستم بسیار متفاوت مثل اتم هیدروژن هردو ناشی از یک اصل کلی تر بودند که به آن کوانتشِ کنش $(Quantization\ of\ Action)$ می گفتند، زیرا در مکانیک کلاسیک کمیتی مثل $\oint pdq$ کنش خوانده می شد. به عنوان مثال در تم هیدروژن کوانتش کنش برای دو مختصه‌ی (θ, P_θ) به شکل زیر درمی آید:

$$\oint p_\theta d\theta = nh, \tag{57}$$

اما از آنجا که در حرکت دایره ای $p_\theta = mr^2\dot{\theta} = mr^2\omega$ مقدار ثابتی است رابطه بالا به شکل زیر درمی آید:

$$\oint mr^2\omega d\theta = mr^2\omega 2\pi = nh, \tag{58}$$

ویا

$$mvr = n\hbar$$

که همان اصل کوانتش بوراست که منجر به کوانتش انرژی اتم هیدروژن مطابق رابطه 49 می شود.

درنوسانگر هارمونیک کوانتش عمل برای دو مختصه‌ی (x,p) به صورت زیر است

$$\oint pdx = nh. \tag{59}$$

می توان طرف چپ این انتگرال را برای یک نوسانگر هارمونیک براحتی محاسبه کرد. می نویسیم

$$\oint pdx = \oint m\dot{x}dx = \oint m\dot{x}^2 dt = \int_0^T mv^2 dt \tag{60}$$

دریک نوسانگر هارمونیک می دانیم که

$$x = A\sin\omega t, \qquad v = A\omega\cos\omega t, \qquad E = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2. \tag{61}$$

بنابراین

$$\oint pdx = \int_0^T mA^2\omega^2\cos^2\omega t dt = mA^2\omega^2\int_0^T \cos^2\omega t dt, \tag{62}$$

www.Endbook.net

با توجه به اینکه $\frac{1}{T}\int_0^T \cos^2 \omega t dt = \frac{1}{2}$ مقدار انتگرال بالا خواهد شد

$$\oint pdx = \frac{1}{2}mA^2\omega^2 T = nh, \tag{63}$$

ویا

$$E = \frac{nh}{T} = n\hbar\omega. \tag{64}$$

به این ترتیب می بینیم که ایده کوانتوم عمل، چنانکه در سالهای اولیه نظریه کوانتومی نامیده می شد، به طوریکنواخت هم به کوانتش سطوح انرژی نوسانگر هارمونیک و هم به کوانتش سطوح انرژی اتم هیدروژن می انجامد.
سپس با استفاده از مفهوم کوانتش عمل آرنولد زومرفلد توانست مدل اتمی بور برای اتم هیدروژن راتعمیم داده به طوریکه مدارهای بیضی را نیز شامل شود. در مدل بور فرض می شد که مدارهای الکترون دایره ای اند و می دانیم که در یک مسئله نیروی مرکزی مدارها عموماً بیضی شکل هستند. برای چنین مدارهایی اصل کوانتش عمل به شکل زیر در می آید:

$$\begin{aligned} \oint p_\theta d\theta &= n_\theta h \\ \oint p_r dr &= n_r h. \end{aligned} \tag{65}$$

برای مدارهای دایره ای رابطه دوم وجود ندارد یا به عبارت بهتر هردو طرف تساوی برابر صفر هستند. به عبارت دیگر یک مدار بیضی با دو عدد کوانتومی (n_θ, n_r) توصیف می شود و مدار دایره ای حالت خاصی است که با زوج $(n_\theta, 0)$ مشخص می شود. از آنجا که درحرکت تحت نیروی مرکزی p_θ برابر با تکانه زاویه‌ای L و یک ثابت حرکت است، شرط کوانتش اول به صورت زیر درمی آید:

$$L = n_\theta \hbar, \tag{66}$$

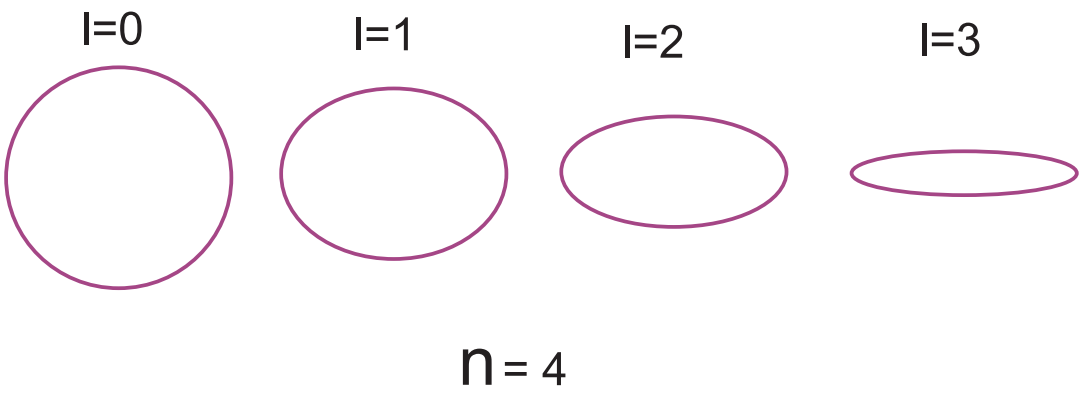
که تفاوتی با شرط کوانتش بور ندارد. اما زومر فلد نشان داد که شرط کوانتش دوم به صورت زیر درمی آید:

$$L(\frac{a-b}{b}) = n_r h, \quad n_r = 0, 1, 2, \cdots. \tag{67}$$

که درآن a قطر بزرگ بیضی و b قطر کوچک آن است. با حل معادلات حرکت برای مدارهای بیضی زومرفلد توانست روابط زیر را برای اندازه قطرهای بزرگ و کوچک و هم چنین انرژی مدارها بدست آورد:

$$a = n^2 a_0$$

www.Endbook.net



شکل ۵: مدارهای الکترون در مدل زومرفلد برای اتم هیدروژن

$$\begin{aligned} b &= n n_\theta a_0 \\ E &= \frac{E_1}{n^2}, \end{aligned} \tag{68}$$

که درآن $n := n_r + n_\theta$، a_0 شعاع بور (رابطه $a_0 = \frac{\lambda_c}{\alpha^2}$) و E_1 انرژی حالت پایه اتم بور یعنی $E_1 = -\frac{1}{2}mc^2\alpha^2$ است. از آنجا که عدد کوانتومی n_r مقادیر صحیح مثبت و شامل صفر و n_θ مقادیر صحیح مثبت را اختیار می کند، عدد کوانتومی n مقادیر صحیح مثبت را اختیار می کند. به این ترتیب بهتراست دراینجا نامگذاری خود را اندکی تغییر دهیم تابا آنچه که بعد ها درمکانیک کوانتومی جدید یاد خواهیم گرفت مطابقت کند. ازاین به جای (n_r, n_θ) از دو عدد کوانتومی $(n := n_r + n_\theta, l := n_r)$ استفاده می کنیم. به این ترتیب روابط پیشین به صورت زیر در می آیند:

$$\begin{aligned} a &= n^2 a_0 \\ b &= n(n-l)a_0 \\ E &= \frac{E_1}{n^2} \\ , L &= (n-l)h. \end{aligned} \tag{69}$$

که درآن عدد کوانتومی n موسوم به عدد کوانتومی اصلی مقادیر زیر را اختیار می کند:

$$n = 1,\ 2,\ 3,\ \cdots \tag{70}$$

و به ازای هر عدد کوانتومی اصلی n عدد کوانتومی l مقادیر زیر را اختیار می کند:

$$l = 0,\ 2,\ 3, \cdots n-1. \tag{71}$$

به این ترتیب مدارهای با $l = 0$ مدارهای دایره ای و مدارهای با $l = n-1$ کشیده ترین بیضی ها هستند. ولی به ازای یک n همه این مدارها دارای یک انرژی هستند. شکل (۵) مدارهای الکترون را برای $n = 4$ نشان می دهد. انرژی الکترون دراین مدارها یکسان است.

کار مهم دیگر زومرفلد آن بود که اثرات نسبیتی ِناشی از سرعت زیاد الکترون را نیز در نظر گرفت و نشان داد که بخاطر این اثرات، واگنی سطوح انرژی از بین می رود، به این معنا که انرژی به هردو عدد کوانتومی n و l بستگی پیدا می کند. رابطه وی

www.Endbook.net

برای انرژی الکترون در یک تراز (n,l) به صورت زیراست:

$$E_{n,l} = -\frac{E_1}{n^2}\left[1 + \frac{\alpha^2}{n}\left(\frac{1}{n-l} - \frac{3}{4n}\right)\right]. \qquad (72)$$

بعد از آن به مدت چندین سال انیستیتوی بور در کپنهاگ محل آمد و شد و تبادل نظر کسانی بود که در مراکز علمی دنیا بر روی جنبه های گوناگون نظریه کوانتومی کار می کردند.

> آن سالها که یک همکاری بی نظیر بین یک نسل ِکامل از فیزیکدانان از کشورهای مختلف قدم به قدم و مرحله به مرحله به تعمیم منطقی نظریه مکانیک و الکترومغناطیس انجامید، سالهای قهرمانی فیزیک کوانتومی نامیده شده است. برای هرکسی که دراین تجربه سهیم بوده است این یک امر فراموش نشدنی خواهد بود که چگونه با ترکیبی از راه های مختلف و معرفی اسلوب های مناسب ریاضی، شیوه جدیدی برای توصیف جهان فیزیکی تدوین یافت. برای چنین کاری موانع بسیاری می بایست از پیش رو برداشته شود، و بسیاری اوقات این کار توسط جوانترین همکاران ما صورت گرفت...» [11]

> روزهای اول، کار من در انستیتوی بور آسان نبود. یکباره خود را مواجه با عده زیادی جوان با استعداد از چهارگوشه جهان دیدم که همگی در زباندانی و زبان آوری و حسن معاشرت و هم در آشنایی با فیزیک از من بسیار برتر بودند. بور را زیاد نمی دیدم. ظاهراً سرش به کار اداره انستیتو گرم بود و بدیهی بود که من حق نداشتم بیش از دیگر اعضای انستیتو مزاحم وقت او شوم. اما چند روز بعد به اتاق من آمد و از من خواست که چند روزی برای پیاده گردی در جزیره زیلند با او همراه شوم. گفت که در خود انستیتو فرصت چندانی برای گفتگوهای طولانی نیست و می خواهد مرا بهتر بشناسد. این بود که دو نفری کوله بر پشت به راه افتادیم.... [12]

دراین سالها بود که جنبه های مختلف مدل اتمی بور مورد مطالعه وسیع قرار گرفت ، به عنوان مثال سعی می شد که الگوی اتمی بور برای توضیح رفتار اتم در میدان الکتریکی (شکافت خطوط طیفی موسوم به اثر اشتارک) ، یا میدان مغناطیسی (شکافت خطوط طیفی موسوم به اثر زیمان) ، و نظایر آن بکار برده شود. هم چنین سعی می شد که مدل اتمی بور به اتم های چند الکترونی تعمیم داده شود. برای درک دشواری هایی که دراین راه وجود داشته است بهتراست ساده ترین اتم یعنی اتم هلیوم را درچارچوب نظریه کوانتومی قدیمی مطالعه کنیم. فرض می کنیم که هر دو الکترون اتم ِهلیوم در مدارهای دایره ای به شعاع های r_1 و r_2 به دور هسته هلیوم می چرخند. دراین صورت اگر بخواهیم اصل کوانتش بور را برای این دو مدار به کار ببریم باید بنویسیم

$$mv_1r_1 = n_1\hbar \qquad mv_2r_2 = n_2\hbar. \qquad (73)$$

[11] نیلزبور، خطا به یاد بود رادرفورد، ۱۹۵۸.
[12] جزء و کل: ورنر هایزنبرگ، ترجمه علی معصومی همدانی

www.Endbook.net

معادلات حرکت الکترون ها عبارتند از:

$$\begin{aligned} m\frac{d\vec{v}_1}{dt} &= -K\frac{2e^2}{{r_1}^3}\vec{r}_1 + K\frac{e^2}{|\vec{r_1}-\vec{r_2}|}(\vec{r}_1-\vec{r}_2) \\ m\frac{d\vec{v}_2}{dt} &= -K\frac{2e^2}{{r_2}^3}\vec{r}_2 + K\frac{e^2}{|\vec{r_1}-\vec{r_2}|}(\vec{r}_2-\vec{r}_1). \end{aligned} \tag{74}$$

حال آیا می توان با استفاده از این روابط مقادیر گسسته‌ای برای انرژی اتم که به صورت زیر است بدست آورد؟

$$E = \frac{1}{2}m{v_1}^2 + \frac{1}{2}m{v_2}^2 - K\frac{2e^2}{r_1} - K\frac{2e^2}{r_2} + K\frac{e^2}{|\vec{r_1}-\vec{r_2}|}. \tag{75}$$

پاسخ این سوال منفی است. به عبارت دیگر نظریه قدیمی کوانتومی نمی توانست طیف ساده ترین اتم ها مثل اتم هلیوم را از نظر کمّی به دقت توصیف کند. هم چنین در مورد اتم هیدروژن اگر چه می شد فرکانس خطوط تابشی را از مدل بوراستخراج کرد، ولی شدت این خطوط را به هیچ وجه نمی شد از مدل قدیمی کوانتومی محاسبه کرد. با این وجود پیشرفت های پدیده شناسی و کیفی بسیاری در این سالها صورت گرفت، که می توانست به تقریب از پس توصیف بعضی چیزها برآید.

۱.۶ اصل تناظر $(Correspondence\ \ Principle\ )$

یکی از اصولی که توسط بور وضع شده بود و اغلب مورد استفاده قرار می گرفت، اصلی بود موسوم به اصل تناظر یا *Correspondence Principle*. برای فهم این اصل به مدل اتمی بور برای اتم هیدروژن توجه می کنیم. می دانیم که برای مدار n ام، شعاع، سرعت و انرژی به ترتیب برابرند با:

$$r_n = \frac{n^2}{\alpha}\frac{\hbar}{mc}, \qquad v_n = \alpha\frac{c}{n} \qquad E_n = -\frac{1}{2n^2}\alpha^2 mc^2. \tag{76}$$

بنابر اصل دوم بور وقتی که الکترون از لایه n ام به لایه $n-1$ ام جهش می کند، فوتونی صادر می کند با فرکانسِ

$$\omega = \frac{E_n - E_{n-1}}{\hbar} = \frac{1}{2\hbar}\alpha^2 mc^2\left(\frac{1}{(n-1)^2} - \frac{1}{n^2}\right). \tag{77}$$

حال برای n های بزرگ می توان طرف راست را با تقریب بسیار خوب به صورت زیر نوشت:

$$\omega \approx \alpha^2 mc^2\frac{1}{\hbar n^3} \tag{78}$$

اما از رابطه 76 می توانیم فرکانس گردش الکترون به دور هسته را بدست آوریم که برابر است با

$$\frac{v_n}{r_n} = \alpha^2 mc^2\frac{1}{n^3\hbar}. \tag{79}$$

که با فرکانس فوتون تابش شده یکسان است. بر مبنای فیزیک کلاسیک، انتظار داریم که وقتی الکترون یک حرکت دایره ای انجام می دهد نوری با همان فرکانس چرخش اش تابش کند. بنابراین وقتی که مدارهای با اعداد کوانتومی بزرگ را در نظر می

www.Endbook.net

گیریم نتایج ما با نتایج فیزیک کلاسیک مطابق یا متناظراست و آثار کوانتومی تنها وقتی ظاهر می شود که مدارهای با اعداد کوانتومی کوچک یعنی مدارهای درونی اتم را مطالعه کنیم.
این اصل به اصل تناظر مشهوراست. آیا می توان از این تناظر استفاده بیشتری کرد و برای سوالاتی که با اصول اولیه بور نمی توان به طور دقیق به آنها پاسخ گفت، پاسخ های تقریبی فراهم کرد؟ برای پاسخ گویی به این سوال و برای آشنایی با نمونه ای از استفاده هایی که در دوران نظریه کوانتومی قدیمی از این اصل می شده است یک مثال ساده را بررسی می کنیم. مثلاً آیا می توان با استفاده از اصل تناظر چیزی راجع به شدت خطوط طیفی فهمید؟ از فیزیک کلاسیک می دانیم که اگر ذره ای با بار الکتریکی e شتاب a داشته باشد توان تابشی اش برابر است با:

$$P = K\frac{2}{3}\frac{a^2}{c^3}. \tag{80}$$

حال اگر الکترونی در مداری با عدد کوانتومی n باشد شتاب اش برابر است با

$$a_n = \frac{v_n^2}{r_n},. \tag{81}$$

و فرکانس دورانی اش برابر است با $\omega_n = \frac{v_n}{r_n}$. بنابراصل تناظر، اگر n های بزرگ را در نظر بگیریم فوتون تابش شده دارای همین فرکانس و درنتیجه دارای انرژی $\mathcal{E}_n = \hbar\omega_n = \hbar\frac{v_n}{r_n}$است. بنابراین می توانیم از تقسیم توان تابشی بر انرژی یک فوتون می توان نرخ ِفوتون هایی را که در واحد زمان تابش می شوند (یعنی احتمال تابش فوتون در واحد زمان) را پیدا کنیم. این نرخ برابر است با:

$$\begin{aligned} R_n &= \frac{P}{\mathcal{E}_n} = K\frac{2e^2}{3}\frac{1}{c^3}\frac{\frac{v_n^4}{r_n^2}}{\frac{\hbar v_n}{r_n}} \\ &= K\frac{2}{3}\frac{e^2}{\hbar r_n}\frac{v_n^3}{c^3}. \end{aligned} \tag{82}$$

با استفاده از رابطه 76 طرف راست این رابطه ساده خواهد شد. عبارت نهایی برابر خواهد بود با:

$$R_n = \frac{2}{3}\frac{\alpha^5}{n^5}\frac{mc^2}{\hbar}. \tag{83}$$

جالب است که بدانیم، مشاهدات تجربی و همچنین محاسبات دقیقی که با مکانیک کوانتمی جدید نیز انجام می دهیم این عبارت را صرف نظر از ضریب عددی آن تایید می کنند. آنچه که بدست آمد، برای مدارهای با عدد کوانتومی بزرگ معتبر است. برای مدارهای باعدد کوانتومی کوچک، یعنی مدارهای درونی چه باید کرد؟ دراین جا اگر بخواهیم از اصل تناظر استفاده کنیم تنها می توانیم به حدس و گمان متوسل شویم. مثلاً می توانیم بگوییم که احتمالاً عامل $\frac{1}{n^5}$ ناشی از تفاضل دو عامل $\frac{1}{(n-1)^4}$ و $\frac{1}{n^4}$ بوده است که برای n های بزرگ به آن صورت درآمده است. به عبارت دقیق تر می توانیم جایگزینی زیر را انجام دهیم:

$$\frac{1}{n^5} \longrightarrow \frac{1}{4}(\frac{1}{(n-1)^4} - \frac{1}{n^4}). \tag{84}$$

www.Endbook.net

بنابراین می توان حدس زد که نرخ گذار از حالت n به $n-1$ (برای همه n ها) چیزی شبیه به این است

$$R_{n\longrightarrow n-1}=\frac{2}{3}\alpha^5\frac{mc^2}{\hbar}\frac{1}{4}(\frac{1}{(n-1)^4}-\frac{1}{n^4}), \tag{85}$$

و یا درحالتِ کلی تر، نرخ گذار از حالت n_1 به حالتِ n_2 عبارت است از:

$$R_{n_1\longrightarrow n_2}=\frac{2}{3}\alpha^5\frac{mc^2}{\hbar}\frac{1}{4}(\frac{1}{{n_2}^4}-\frac{1}{{n_1}^4}), \tag{86}$$

و درنتیجه با دانستن انرژی فوتون های تابشی که می بایست به صورت $\frac{E_{n_1}-E_{n_2}}{\hbar}$ درنظر گرفته شوند، می توان عبارتی برای شدت خطوط طیفی بعضی از خطوط طیفی بدست آورد (زیرا مدارهای بیضی را مطالعه نکرده‌ایم). ولی اندازه گیری شدت خطوط طیفی نشان می داد که این عبارت ها فقط با تقریب درست هستند.

با این محاسبه می خواستیم بگوییم که چگونه در آن سالها بور و همکارانش و دیگر فیزیکدانان سعی می کردند که الگوی بور را برای حل مسائل پیچیده تر بکار ببرند و از چه مفاهیم و ابزاری استفاده می کردند.

درهمین سال ها بود که با ترکیبی از استدلال های از نوعِ فوق بعلاوه تقارن همراه با داده های ناشی از شیمی و طیف نگاری اتمی ، مدل لایه ای برای اتم های چند الکترونی نیز عمدتاً توسط خودِ بور شکل گرفت. هر لایه که چیزی شبیه به گروهی از مدارها با شعاع های نزدیک به هم است ظرفیت معینی برای پذیرش الکترون دارد و الکترون های آخرین لایه خواص شیمیایی اتم را تعیین می کنند. به این ترتیب مبنای کیفی خوبی برای خواص تناوبی عناصر، چنانکه در جدول مندلیف می بینیم فراهم آمد. شکلی که هنوز هم به عنوان سمبل اتم به کار می رود و در آن هسته اتم در احاطه مدارهای بیضوی گوناگون و متقاطع نشان داده می شود، در واقع حاصل فعالیت های بور در آن دوران است. بور با قدرت بی نظیری که در ترکیب استدلالات فیزیکی و داده های مشاهداتی شیمی و طیف نگاری داشت تلاش زیادی در توصیف ساختمان اتم های چند الکترونی انجام داد، که با موفقیت های نسبی نیز همراه بود. وی در سخنرانی هایش در این دوران شکل مدارهای مختلف را در اتم های چند الکترونی روی تابلو هایی بزرگ به رنگ های سیاه و سرخ می کشید تا بتواند تصویر واضح تری از ساختمان اتم بدست دهد. متاسفانه از تابلوهای اولیه امروزه اثری باقی نمانده است. رویهمرفته اگرچه پیشرفت های درخشانی در این دوران حاصل شد، معلوم بود که مدل اتمی بور و اصل تناظر نمی تواند مدل دقیق و محکمی برای توصیف پدیده‌های اتمی باشد.

> «... کارهای پژوهشی اولیه من در اوایل سالهای ۱۹۲۰ که مبتنی بر مدارهای اتمی بور بود، کاملاً ناموفق از آب درآمد. من قصد داشتم مدارهای بور را واقعی تلقی کنم و برای آنها یک صورت بندی ریاضی درست کنم. هرمدارِ بور به یک الکترون تعلق داشت و برای این که اتم های چند الکترونی را توصیف کنم نیاز داشتم که یک نظریه برای مدارهای بور در برهم کنش با یکدیگر بسازم. من مثل خیلی های دیگر به شدت روی این مسئله کار کردم که البته حاصلی در بر نداشت و نمی توانست داشته باشد.» [13]

[13] پاول دیراک: مبانی ریاضی نظریه کوانتومی، ۱۹۷۸.

www.Endbook.net

بتدریج معلوم شد که نارسایی های مدل اتمی قدیمی با اصلاحات جزیی در مدارهای بور و یا اصول اولیه او رفع نخواهند شد و عبور از موانع پیش رو جز به کمک یک تغییر بنیادین در نظریه های فیزیکی امکان پذیر نیست. دراین سالها مکاتب مهم دیگری در برلین و هم چنین گوتینگن در زمینه فیزیک اتمی فعال شده بودند. مکتب گوتینگن به خصوص به لحاظ اتکا بر ریاضیات دقیقی که ناشی از حضور ریاضیدانان بزرگی مثل دیوید هلیبرت و ریچارد کورانت بود، تاثیر جدی در تولد مکانیک کوانتومی جدید داشته است. در برابر این مکتب بور نمی توانست از ساختمان اتمهای چند الکترونی خود دفاع بایسته ای انجام دهد.

شهرهای کوچک دانشگاهی بطرز دل انگیزی به یکدیگر شبیه‌اند. گوتینگن[14] نیز با کمبریج‌انگلستان یا ییلِ[15] تفاوت چندانی ندارد: شهرستانی کوچک که از شهرهای بزرگ دور است و کسی جز برای ملاقات استادان دانشگاه به آنجا نمی آید در صورتیکه استادان دراینکه مقرشان مرکز جهان است کوچکترین شک و تردیدی به خود راه نمی دهند. روی سردر ساختمان ِراتسکلر[16] به لاتین این جمله حک گشته است : « خارج از گوتینگن زندگی نیست »[17].

منظره شهر گوتینگن نیز چون دیگر شهرهای دانشگاهی مستور از جاده های بیشماری است که استادان پس از صرف ناهار در آن قدم می زنند و اگر دانشجویی را در جرگه خود بپذیرند، از خوشحالی در پوست خود نخواهد گنجید. احتمالاً قبل از قرن نوزدهم گوتینگن شهر آرام و بی سروصدایی بوده است . راهی که گوتینگن را به دنیای خارج مرتبط می ساخت راه آهنی بود که بازدیدکنندگان را از برلین و کشورهای خارج به آنجا می آورد. آنها با شور و هیجان هر چه تمام تر در انتظار آن بودند که درباره آخرین پیشرفت های علم فیزیک با استادان این دانشگاه به گفتگو بنشینند. اهالی گوتینگن عقیده داشتند در قطار برلین علم و دانش همواره در حال پیشرفت است زیرا دراینجا بود که مردم درباره افکار جدید بحث و تبادل نظر می کردند.

درسال ۱۹۲۱ کرسی فیزیک این دانشگاه به ماکس بورن داده شد . بورن در این زمان چهل سال داشت و دراین جا بود که کنفرانسهای متعددی ترتیب داد تا کلیه علاقمندان به فیزیک اتمی را در این شهر کوچک دانشگاهی گرد هم جمع کند. [18]

یکی از کسانی که به گوتینگن آمد تا تحت نظر ماکس بورن کار کند ورنر هایزنبرگ بود که دکترایش را به تازگی تحت نظر آرنولد زومرفلد به پایان رسانده بود. در اواخر ۱۹۲۴ وی به کار روی نظریه طیفی پرداخت. ایده انقلابی ای که می بایست سرانجام نقطه پایانی بر مدل اتمی بور و یا بسیار مهم تر از آن نقطه پایانی بر درک و تصور کلاسیک ما از الکترون و دنیای میکروسکوپی به مثابه یک دنیای مانوس باشد که با زبان رایج در زندگی روزمره قابل توصیف اند، توسط هایزنبرگ ارایه شد. وی نشان داد که برای درک و توصیف دقیق دنیای میکروسکوپی مجبوریم که تمامی تصورات خود را که از دنیای ماکروسکوپی وام گرفته ایم بدور بریزیم. مسیر الکترون چیزی نبود که هرگز بلافاصله بر ما آشکار شده باشد، ما تنها به کمک واسطه های تجربی وجود چنین چیزی را استنتاج می کنیم، چون عادت کرده ایم که به الکترون نیز مثل یک گوی بیلیارد و یا توپ فکر کنیم.

[14] Gottingen
[15] Yale
[16] Rathskeller
[17] Extra Gottingen non est vita
[18] عروج انسان: ژاکوب برونوفسکی

www.Endbook.net

مثل همیشه ایده انقلابی ای که راهگشا شده بود از شک و تردید در مفاهیمی حاصل شده بود که طی سالیان دراز و بدون هیچ دلیل منطقی در ذهن ما رسوب کرده بود. همانگونه که اینشتین چند سال از آن در نظریه نسبیت خاص نشان داده بود مفهوم همزمانی مطلق یک مفهوم به غلط جاافتاده است، هایزنبرگ نیز بعد از ارایه مکانیک جدیدش با آزمایش های فکری ساده ای نشان داد که این ایده که ما می توانیم چیزی مثل مسیریک الکترون را به تصور خود درآوریم، یک مفهوم بدیهی نیست و اگر چنین کنیم خیلی زود به تناقض دچار می شویم. ولی قبل از آنکه به آزمایش های فکری ای از این نوع بپردازیم لازم است که اساس مکانیک جدیدی که هایزنبرگ معرفی کرد و طی چند ماه توسط ماکس بورن و پاسکال ژوردن توسعه یافت و به مکانیک ماتریسی [19] معروف شد را بیان کنیم.

« وقتی می خواهم حالت نظریه اتمی را در آن ماه ها مجسم کنم، همیشه به یاد یک کوه‌پیمایی می افتم که با برخی از دوستانم در جنبش جوانان، احتمالاً در اواخر پاییز ۱۹۲۴ داشتم. این بار از کرویت [20] راه افتادیم و به دریاچه آخن رسیدیم. هوای درّه تعریفی نداشت و کوه‌ها در پرده ابر پوشیده‌بود. هنگام صعود، مه کم کم ما را در خود گرفت و چیزی نگذشت که خود را در دل انبوهی از صخره‌ها و بوته‌ها یافتیم، بی آنکه نشانی از راه دیده شود. تصمیم گرفتیم که صعود را ادامه دهیم، گرچه دلمان می خواست که اگر حادثه‌ی ناگواری روی داد، به پایین برگردیم. اما یکباره مه چنان غلیظ شد که چشم چشم را نمی دید و ما فقط با فریاد زدن می توانستیم با هم ارتباط داشته باشیم، و در همان هنگام بالای سر ما روشن تر شد و نور یکباره رنگ عوض کرد، ظاهراً یک پارچه مه داشت از بالای سرِ ما رد می شد. بعد یک مرتبه، لبه یک دیواره‌ی پرشیب درست روبرویمان ظاهر شد که در نور خورشید غرق بود. لحظه‌ای بعد دوباره مه پایین آمد، اما آنقدر دیده بودیم که بتوانیم راهمان را از روی نقشه پیدا کنیم. پس از ده دقیقه کوهنوردی دشوار، در نور خورشید قرار گرفتیم— در بلند ترین نقطه بر فرازِ دریای مه. در طرف جنوب قله های جبال زون وند [21] و آن سو تر ارتفاعات برف پوشِ آلپ مرکزی دیده می شد، و همه نفس راحتی کشیدیم.
درفیزیک اتمی هم ظاهراً زمستان ۱۹۲۴—۱۹۲۵ ما را به قلمرو مه آلودی کشانیده بود اما در همانجا نور از پشت مه کورسویی می زد و نوید چشم اندازهای جدید را می داد.

هایزنبرگ می خواست موقعیت بغرنج فیزیک اتمی را از نو بازاندیشی کند و نقطه شروع خود را تنها و تنها کمیت های مشاهده پذیر قرار دهد و از اصرار بر وجود مسیر و مدار برای الکترون دست بردارد. بنابر نظر وی ما از درون اتم تنها مجموعه‌ای از خطوط طیفی با شدت های گوناگون می بینیم. دربین این فرکانس ها نظمی برقراراست، به این معنا که می توان فرکانس های خطوط طیفی را با دو شاخص مثل $\nu_{n,m}$ نشان داد به طوری که بین آنها رابطه زیر برقرار باشد:

$$\nu_{n,m} + \nu_{m,p} = \nu_{n,p}. \tag{87}$$

[19] Matrix Mechanics
[20] Kreuth
[21] Sonnwend

www.Endbook.net

این رابطه بلافاصله به ما می گوید که همه فرکانس ها را می توان بر اساس یک سلسله فرکانس اصلی نوشت، یعنی

$$\nu_{n,m} = \nu_n - \nu_m. \tag{88}$$

از آنجا فوتونی با فرکانس $\nu_{m,n}$ انرژی $\hbar\nu_{m,n}$ دارد، نتیجه می گیریم که انرژی فوتون برابراست با:

$$\hbar\nu_{n,m} = \hbar\nu_n - \hbar\nu_m =: E_n - E_m, \tag{89}$$

این امر به این معناست که الکترون در درون اتم یک رشته از انرژی های مجازِ $\{E_m\}$ دارد که گذار بین این لایه های انرژی منجر به صدور یا جذب فوتون می شود. بنابراین مسئله ساختن مدلی از سینماتیک و دینامیک درون اتم است به نحوی که این فرکانس های اصلی را تولید کند.

> دراواخر ماه مه ۱۹۲۵ به تب یونجه دچار شدم و چنان بیمار شدم که از بورن دو هفته مرخصی گرفتم. فوراً راه افتادم و به هِلی گولند [22] رفتم، امید داشتم که درآنجا در آغوش هوای دریا و دور از شکوفه ها و چمنزار ها بسرعت شفا یابم. ظاهراً هنگامی که به آنجا رسیدم قیافه‌ای تماشایی داشتم، چون بانوی میزبانم نگاهی به من انداخت و پیش خودش گفت که حتماً کتک کاری کرده‌ام و قول داد که در دوران نقاهت از من پرستاری کند. اتاقم در طبقه دوم بود، و چون خانه در ارتفاعات حد جنوبی آن جزیره صخره‌ای بنا شده بود، چشم انداز با شکوه دهکده و تپه های شنی و دریا زیر پایم بود. وقتی روی بالکن نشستم فرصتی یافتم تا به این حرف بور بیندیشم که وقتی انسان به دریا می نگرد انگار بخشی از بی نهایت را در دسترس خود دارد.
> بجز گردشهای طولانی، چیزی در هلی گولند نبود که توجه مرا از مسئله‌ای که داشتم منحرف کند. بنابراین سرعت پیشرفتم بسیار بیش از گوتینگن بود. ظرف چند روز همه موانع ریاضی را که معمولاً در شروع این نوع کارها راه پیشرفت را سد می کند از سر راه کنار زدم و توانستم مسئله را به صورت ساده‌ای در آورم. و با چند روزِ دیگر کار، برایم روشن شد که در یک فیزیک اتمی که نخواهد چیزی جز کمیت های مشاهده پذیر را به خود راه بدهد، چه چیزی باید جای شرایط ِکوانتومی بور— زومرفلد را بگیرد.....

آنچه که هایزنبرگ یافته بود آن بود که سینماتیک و دینامیک الکترون در درون اتم می بایست به زبان کاملاً متفاوتی از زبان کلاسیک و نیوتنی توصیف شود. دراین جا فرصت آن را نداریم که گام های هایزنبرگ را به همراه او دوباره طی کنیم. خواننده‌ای که به این کار علاقه دارد می بایست به مقاله اولیه هایزنبرگ و یا بیان ساده ترآن [23] رجوع کند. دراین جا تنها به شکل نهایی فرض های او می پردازیم. به بیان امروزی مکانیک جدید او را می توان چنین توصیف کرد. به هر متغیر دینامیکی مثل x و یا p و یا h (هامیلتونی) یک ماتریس مربعی نسبت می دهیم، مثل X، P و h. (فعلاً مساله را برای سادگی یک بعدی در نظر گرفته‌ایم.) این ماتریس ها در رابطه های جابجایی ای صدق می کنند که متناظر با رابطه کروشه‌ی پوآسون هستند: یعنی بجای

$$\{x, p\} = 1$$

[22] Heligoland

[23] تولد کوانتوم مکانیک جدید به زبان امروزی: محمد خرّمی، مجله گاما، شماره‌ی ۲، بهار ۱۳۸۳.

www.Endbook.net

$$\frac{dx}{dt} = \{x, h\}$$
$$\frac{dp}{dt} = \{p, h\}. \tag{90}$$

بین متغیرهای دینامیکی کلاسیک می بایست روابط زیر را بین ماتریس ها برقرار کنیم:

$$[X, P] = i\hbar$$
$$i\hbar\frac{dX}{dt} = [X, H]$$
$$i\hbar\frac{dP}{dt} = [P, H]. \tag{91}$$

رابطه بین کمیت ها کمابیش همان رابطه بین آنها در حالت کلاسیک است، به این معنا که اگر درحالت کلاسیک داریم $h = \frac{p^2}{2m} + V(x)$، درحالت کوانتومی هم داریم

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(X). \tag{92}$$

بنابر مکانیک ماتریسی هایزنبرگ ، از این ماتریس ها می توان مقادیر مشاهده پذیر را بدست آورد به این معنا که برای هر ماتریس مقادیر مشاهده پذیر همان ویژه مقادیر آن ماتریس هستند. بنابراین ویژه مقادیر هامیلتونی H لایه های مجاز انرژی سیستم را بدست می دهند، یا مقادیر مشاهده پذیر تکانه ویژه مقدارهای ماتریس ِP هستند. از آنجا که مقادیر مشاهده پذیر می بایست حقیقی باشند، ماتریس های مربوطه می بایست هرمیتی باشند. هایزنبرگ خود توانست در اولین مقاله خود از این طریق سطوح انرژی نوسانگر هارمونیک یعنی ویژه مقدارهای ماتریس ِ

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2, \tag{93}$$

را بدست آورد و نشان دهد که این سطوح انرژی نوسانگر هارمونیک چیزی نیستند جز $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$.

> وقتی نتایج نهایی محاسبات را پیش رویم دیدم ساعت سه بعد از نیمه شب بود: اصل بقای انرژی برای همه جمله ها صادق از کار درآمده بود و من دیگر در انسجام و سازگاری ریاضی مکانیک کوانتومی که محاسباتم نویدش را می داد، تردیدی نداشتم. در آغاز بیم زده شدم، حس می کردم که از پشت پرده پدیده‌های اتمی به دنیای درون این پدیده‌ها، با آن زیبایی عجیبش، نگاه می کنم و از اینکه باید این ساخت غنی ریاضی را که طبیعت با این دست و دلبازی پیش رویم گستره است بکاوم، تقریباً گیج بودم. از فرط هیجان خوابم نبرد، و وقتی که سپیده زد به طرف کناره جنوبی جزیره راه افتادم. مدتها بود که دلم می خواست از صخره‌ای که بر دریا سایه افکن بود صعود کنم. آن روز این کار را بدون زحمت انجام دادم و درآنجا به انتظار طلوع خورشید نشستم..... [24]

[24] جزء و کل، ورنر هایزنبرگ، ترجمه علی معصومی همدانی

www.Endbook.net

بعد از انتشار مقاله هایزنبرگ به فاصله کوتاهی بورن و ژوردان در مقاله ای و سپس هر سه باهم در مقاله سومی مکانیک کوانتومی جدید یا مکانیک ماتریسی را مدون کردند. به فاصله کوتاهی ولفگانگ پاوولی مکانیک ماتریسی را برای اتم هیدروژن بکاربرد. برای این مسئله‌ی سه بعدی بنابرمکانیک ماتریسی روابط جابجایی بین ماتریس ها به شکل زیراست:

$$[X_i, X_j] = 0 \quad [P_i, P_j] = 0, \quad [X_i, P_j] = i\hbar\delta_{i,j}, \qquad i,\ j = \ x,\ y,\ z, \tag{94}$$

و تراز های انرژی عبارتند از ویژه مقادیر ماتریس هامیلتونی که به شکل زیر است:

$$H = \frac{P.P}{2m} - K\frac{e^2}{R}, \tag{95}$$

که درآن $P.P = P_x^2 + P_y^2 + P_z^2$ و $R = \sqrt{X^2 + Y^2 + Z^2}$. به این ترتیب پاوولی اولین کسی بود که در چارچوب مکانیک کوانتومی جدید، ترازهای انرژی اتم هیدروژن را محاسبه کرد و نشان داد که دقیقاً همان مقادیری را دارند که در مدل اتمی بور بدست آمده بود.

۷ مکانیک موجی

مقارن همین زمان اروین شرودینگر مشغول بسط مکانیک موجی و استفاده از آن برای حل مسئله ساختمان اتمی بود. وی توانست به فاصله ۵ روز بعد از انتشار مقاله پاوولی طیف اتم هیدروژن را با استفاده از مکانیک موجی بدست آورد. برای آنکه داستان پیدایش مکانیک موجی را باز گو کنیم می بایست چند ماهی به عقب بازگردیم ، یعنی به زمانی که لویی دوبروی در فرانسه با استفاده از نسبیت خاص به این نتیجه رسیده بود که همچنان که نور خاصیت ذره ای دارد ممکن است که ذرات مادی نیز خواص موجی داشته باشند. وی پیشنهاد کرده بود که به ذره ای با انرژی E و تکانه‌ی P می توان موجی با فرکانس ω و بردار موج k نسبت داد و رابطه خصلت های موجی و ذره‌ای به شکل زیراست:[25]

$$E = \hbar\omega, \qquad P = \hbar k. \tag{96}$$

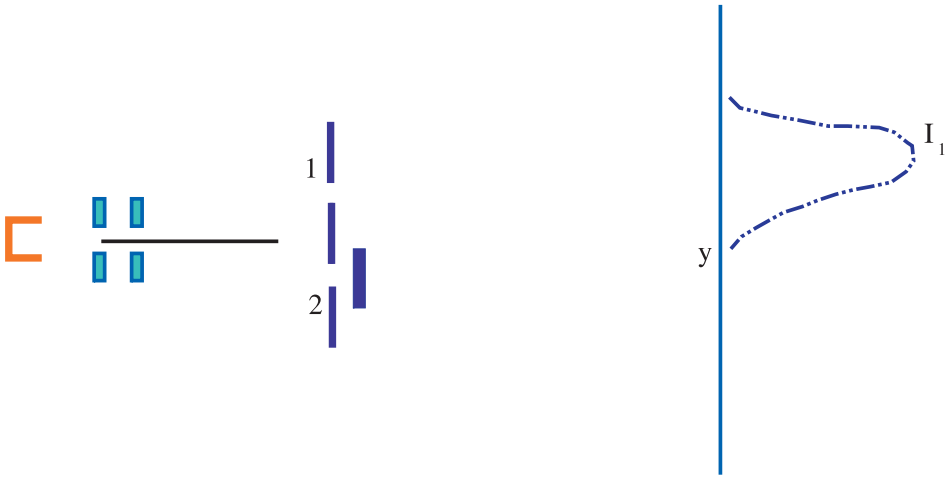
به فاصله کوتاهی دیویسون و گرمر [26] و سپس مستقلاً جی. پی. تامسون [27] توانستند نشان دهند که الکترون ها در برخورد از شبکه های بلوری طوری پراکنده می شوند که انگار امواجی با طول موج دوبروی به آنها وابسته است و این امواج الکترونی هستند که با هم تداخل می کنند و تعداد الکترون های ثبت شده روی اشکارسازها را تعیین می کنند. شکل ساده شده این آزمایش ها به آزمایش دو شکاف مشهور است و می توان مفهوم موج الکترونی را در آن به سادگی فهمید.

[25] برای درک عمیق تری از پیشنهاد دوبروی و چگونگی استدلال وی رجوع کنید به ترجمه مقاله او « تابش — موج ها و کوانتوم ها»، لویی دوبروی ، مجله گاما، شماره‌ی ۵، زمستان ۱۳۸۳، یا شرح ساده ای از آن « یادداشتی بر مقاله‌ی دوبروی: تابش — موج ها و کوانتوم ها» امیرحسین فتح اللهی، همان شماره از مجله گاما.

[26] Davisson and Gremmer

[27] G. P. Thompson

www.Endbook.net



شکل ٦: آزمایش دو شکاف : تنها شکاف بالایی باز است و طرح I_1 روی پرده مشاهد ه می شود.

۱.۷ آزمایش دو شکاف

شکل ٦ طرح ساده آزمایش دو شکاف را نشان می دهد. درسمت چپ این شکل یک فیلامان حرارتی وجود دارد که بخاری از ذرات بار دار یونیزه را از خود متصاعد می کند. میدان های الکتریکی به همراه مجموعه ای از یکسوکننده ها ذرات با تکانه مشخص را جدا می کنند. شکاف پایینی مسدود شده است. مکان هر ذره که روی پرده می نشیند (توسط یک آشکارساز) ثبت می شود. هرگاه این آزمایش را برای مدت طولانی انجام دهیم دراثر نشستن ذرات روی یک پرده مثلاً یک پرده فلوئورسانس یک طرح I_1 بوجود خواهد آمد. $I_1(y)$ درواقع متناسب با تعداد ذرات نشسته شده روی نقطه y است.

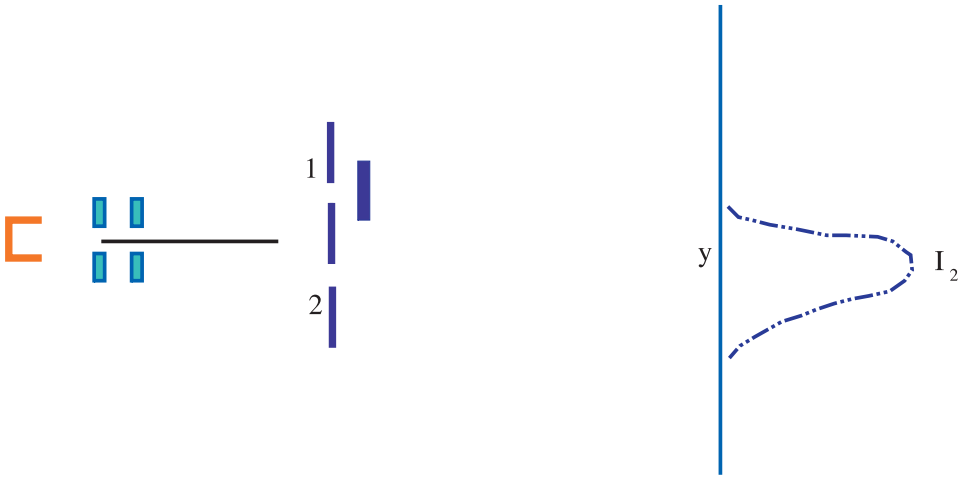
شکل (۷) همان آزمایش را نشان می دهد با این تفاوت که این بار شکاف بالایی بسته است. طرحی که می بینیم برابر است با I_2 . در شکل (۸) هردوشکاف بازهستند. انتظارداریم که این باررابطه زیر برقرارباشد:

$$I_{1+2}(y) = I_1(y) + I_2(y). \tag{97}$$

اما آنچه که درآزمایش می بینیم آن است که ذرات مطابق با طرح I_{12} که یک طرح تداخلی است روی پرده می نشینند. این طرح درست مثل طرح تداخلی دو موج است که که طول موج آنها از رابطه $\lambda = \frac{h}{p}$ بدست آمده باشد، شکل ۱۰ . دراین شکل فاصله شکاف یک تا نقطه مورد نظر درپرده را با r_1 و فاصله شکاف دو را تا آن نقطه با r_2 نشان می دهیم. طرح روی پرده را تنها به این صورت می توانیم تبیین کنیم که انگار دو موج همفاز از شکاف های ۱ و ۲ با هم تداخل کرده اند و تعداد الکترون های ثبت شده روی پرده متناسب با شدت این موج است. هیچ طرح و الگوی ریاضی دیگری نمی تواند طرح روی پرده را توصیف کند. هرچقدر هم که عجیب به نظر برسد این تنها الگویی است که به طور دقیق نتایج آزمایش های بیشمار پراکندگی الکترون ها و دیگر ذرات را در موقعیت های گوناگون می تواند توصیف کند. در آزمایش دو شکاف تنها می توانیم بگوییم که هرگاه طرح I_1 را برابر با شدت موجی بگیریم که از شکاف 1 به پرده می رسد یعنی

$$I_1 = |\psi_1|^2 \tag{98}$$

www.Endbook.net



شکل ۷: آزمایش دو شکاف : تنها شکاف پایینی باز است و طرح I_2 روی پرده مشاهد ه می شود.

و هم چنین هرگاه طرح I_2 را برابر با شدت موجی بگیریم که از شکاف 2 به پرده می رسد یعنی

$$I_2 = |\psi_2|^2, \tag{99}$$

آنگاه طرح I_{12} برابر است با شدت موجی که از تداخل این دو موج بدست می آید یعنی

$$I_{12} = |\psi_1 + \psi_2|^2. \tag{100}$$

هرگاه قرار دهیم

$$\psi_1(r,t) = Ae^{ikr_1-\omega t} = Ae^{ik(r-\frac{a}{2}\theta)-\omega t}, \qquad \psi_2(r,t) = Ae^{ikr_2-\omega t} = Ae^{ik(r+\frac{a}{2}\theta)-\omega t}, \tag{101}$$

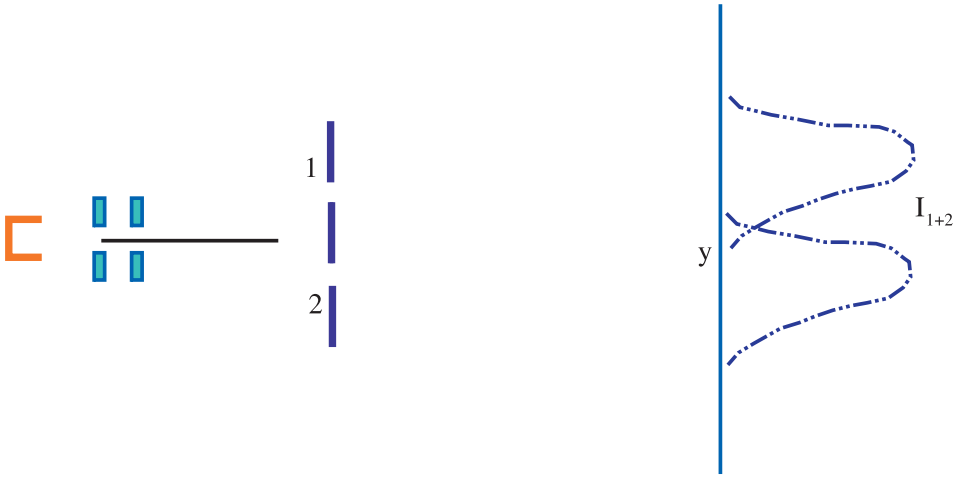
که در آن فرض کرده ایم فاصله پرده تا شکاف ها نسبت به فاصله دو شکاف از هم بسیار بزرگ است، آنگاه

$$I_{12} = |\psi_1(r,t) + \psi_2(r,t)|^2 = 4I\cos^2\frac{ak}{2}\theta. \tag{102}$$

از آنجا که برای θ های کوچک، $y \approx D\theta$ شدت ورود الکترون ها را روی پرده می توانیم به عنوان تابعی از y بنویسیم. این تابع برابر خواهد بود با

$$I_{12} = 4I\cos^2\frac{ak}{2}\frac{y}{D}. \tag{103}$$

www.Endbook.net



شکل ۸: آزمایش دو شکاف : هردو شکاف باز هستند . طرح روی پرده یعنی طرح I_{1+2} طرح ای است که انتظار داریم ببینیم.

این طرح تموجی یا نوار های روشن و تاریک درست همان چیزی است که در آزمایش می بینیم، یعنی اینکه وقتی هر دو شکاف باز هستند، در نقطه مرکزی $y = 0$ شدت طرح برابر با صفر است و اولین نوار تاریک در نقطه

$$y = \frac{\pi D}{ak} = \frac{\lambda D}{2a}$$

قرار دارد. از روی محل این نوار تاریک می تواند با استفاده از این رابطه k و درنتیجه طول موج الکترون ها را بدست آورد. عملاً این همان کاری بود که دیویسون و گرمر و هم چنین تامسون انجام دادند و در دوران جدید نیز با دقت خیلی بیشتری انجام شده است. فعلاً به این بسنده می کنیم که به الکترون ها موجی وابسته است که شدت آن تعداد آنها را در هر نقطه از زمان و فضا نشان می دهد. در ادامه این درس به این آزمایش باز خواهیم گشت.

۲.۷ معادله شرودینگر

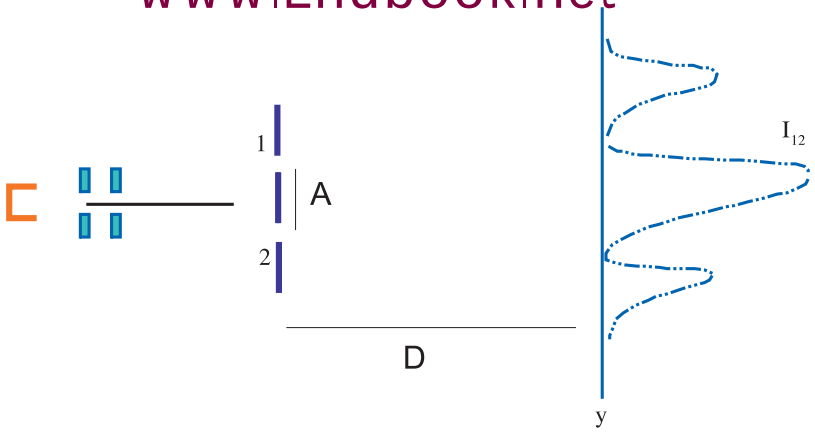
یک موج تخت به شکل زیراست،

$$\psi = Ae^{-i(\omega t - kx)} = Ae^{\frac{-i}{\hbar}(Et - Px)} \tag{104}$$

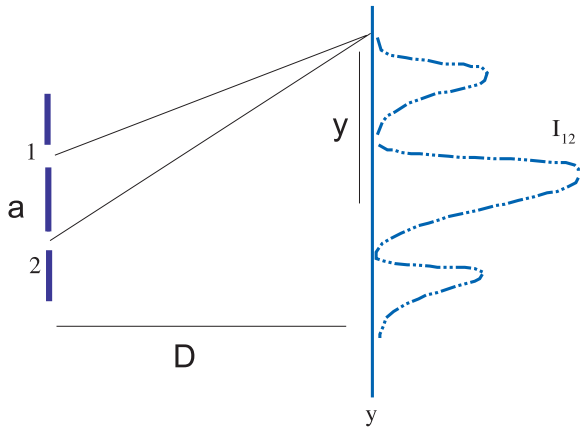
و یک بسته موج دلخواه که برای سادگی فرض می کنیم در راستای x حرکت می کند، ترکیبی خطی از امواج ِتخت است که می توان آن را به شکل زیر نشان داد:

$$\psi(x,t) = \int \phi(P) e^{\frac{-i}{\hbar}(Et - Px)} dP. \tag{105}$$

www.Endbook.net



شکل ۹: آزمایش دو شکاف : هردو شکاف باز هستند . طرح روی پرده یعنی طرح I_{12} طرح ای است که واقعاً روی پرده می بینیم.



شکل ۱۰: تداخل دو موج.

نخستین کاری که شرودینگر کرد، آن بود که معادله‌ای را که چنین موجی در آن صدق می کند بدست آورد. برای این کار مشتقات $\psi(x,t)$ را محاسبه می کنیم و تعیین می کنیم که چه رابطه بین آنها برقرار است. از رابطه فوق بدست می آوریم

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \int \phi(P)Ee^{\frac{-i}{\hbar}(Et-Px)}dP. \qquad (106)$$

چنانچه ذره در پتانسیل $V(x)$ قرار داشته باشد انرژی و تکانه آن در رابطه زیر صدق می کنند:

$$E = \frac{P^2}{2m} + V(x). \qquad (107)$$

بنابراین در رابطه 106 مقدارِ E را از این رابطه جایگذاری می کنیم و بدست می آوریم

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} &= \int \phi(P)(\frac{P^2}{2m} + V(x))e^{\frac{-i}{\hbar}(Et-Px)}dP \\ &= \int \phi(P)(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x))e^{\frac{-i}{\hbar}(Et-Px)}dP \end{aligned}$$

www.Endbook.net

$$= \quad (\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x))\psi(x,t), \tag{108}$$

ویا

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = (\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x))\psi(x,t). \tag{109}$$

برای سادگی امواج مادی را در یک بعد در نظر گرفتیم. در سه بعد این امواج به شکل زیر هستند:

$$\psi(r,t) = \int \phi(P)e^{\frac{-i}{\hbar}(Et - P\cdot r)}dP. \tag{110}$$

و تکرار همان استدلال قبلی نشان می دهد که این امواج در معادله زیر که معادله شرودینگر نامیده می شود صدق می کنند.

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) = (\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}))\psi(\mathbf{r},t).} \tag{111}$$

چگونه چنین معادله‌ای منجر به تراز های انرژی گسسته‌می شود. در تجربه ای که با امواج از هرنوع داشته‌ایم می دانیم که وقتی یک موج به یک ناحیه بسته یا متناهی مقید می شود، فرکانس ها و طول موج های آن مقادیر معینی را اختیار می کنند و از آنجا که برای امواج مادی فرکانس چیزی جزانرژی نیست، می توانیم انتظار داشته باشیم که امواج مادی وقتی به یک ناحیه بسته مقید شوند حتماً انرژی ذرات وابسته به آنها مقادیر گسسته‌ای را اختیار خواهند کرد. برای درک بهتراین خاصیت به یک مثال ساده توجه می کنیم. برای پاسخ به این سوال کافی است یک مثال ساده یک بعدی در نظر بگیریم. ذره‌ای را در نظر می گیریم که کاملاً آزاد است دریک ناحیه $0 \le x \le L$ حرکت کند. اندازه انرژی این ذره را E می گیریم. بنابر فیزیک کلاسیک، انرژی E هرمقداری می تواند اختیار کند. اما در مکانیک موجی، این ذره با یک موج با انرژی E توصیف می شود یعنی با موجِ

$$\psi(x,t) = Ae^{\frac{-i}{\hbar}(Et - Px)} + Be^{\frac{-i}{\hbar}(Et + Px)}. \tag{112}$$

اما این موج می بایست چنان باشد که در شرایط مرزی $\psi(0,t) = \psi(L,t) = 0$ صدق کند. این شرایط مرزی منجر به روابط زیر خواهند شد:

$$B = -A, \qquad PL = n\hbar\pi, \quad n = 1,\ 2,\ 3,\ \cdots \tag{113}$$

که از آن نتیجه می گیریم

$$E = \frac{P^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2mL^2}. \tag{114}$$

یعنی ترازهای انرژی معین برای ذره وجود خواهد داشت.

پس از استخراج معادله‌اش، مهم ترین مسئله پیش روی شرودینگر آن بود که به همان ترتیب بالا نشان دهد که سطوح انرژی الکترون در اتم هیدروژن را می توان از حل معادله زیر بدست آورد

$$H\psi(x) \equiv [-\frac{1}{2m}\nabla^2 - K\frac{e^2}{r}]\psi(x) = E\psi(x). \tag{115}$$

www.Endbook.net

وی این کار را با موفقیت انجام داد و همان مقادیری را برای انرژی بدست آورد که قبلاً بور در مدل کوانتومی قدیمی و پاوولی در مکانیک ماتریسی بدست آورده بود.

« انستیتوی کهن‌وین که به تازگی با از دست دادن لودویگ بولتزمان سوگوار شده است، ساختمانی که در آن فریتز هازنورل و فرانتز اکسنر کار خود را دنبال می کردند و درآن بسیاری از شاگردان دیگر بولتزمان را در حالِ آمد و شُد می دیدم، چشم مرا به اندیشه هایی که توسط آن متفکر بزرگ صورتبندی شده بود باز کرد. خطّ فکری او را می توان نخستین عشق علمی من نامید. هیچ چیز دیگری به این اندازه مرا به وجد و شوق نیاورده و هرگز نیز چنین نخواهد شد. بسیار آهسته به نظریه اتمی جدید نزدیک شدم. در مورد نظریه اتمی چیزهای فراوانی را آزمودم و طرد کردم (بعضی از خودم و بعضی از دیگران) تا اینکه لااقل روشنی فکر را حتی اگر به خرج شدیدترین تغییر انقلابی هم بوده باشد، حفظ کنم. نخستین چیزی که تاحدی مایه آرامش خاطرم شد، اندیشه امواج الکترونی دوبروی بود، که آن را کامل کردم و به صورت نظریه مکانیک موجی درآوردم. ولی هنوز از اینکه بتوانیم راه جدید فهم طبیعت را که از یک سو با مکانیک موجی و از سوی دیگر با مکانیک ماتریسی هایزنبرگ آغاز شده است، چنانکه باید دریابیم، بسیار دوریم. [28]

در نگاه اول شرودینگر گمان داشت که مسئله آزار دهنده جهش های الکترونی را که هیچ توضیحی برای آن وجود نداشت نیز حل کرده‌است. دیگر نیازی نبود که فرض کنیم الکترون از یک مدار به یک مدار (یا از یک لایه انرژی به یک لایه انرژی دیگر) می جهد، و تفاوت انرژی اش را به صورت فوتون گسیل می کند. در تصویر شرودینگر موج درون اتم یک مجموعه نوسانات طبیعی با فرکانس های $\nu_n, \quad n = 1,\ 2,\ 3 \cdots$ دارد. وقتی که چنین اتمی را تحریک کنیم، درست مثل وقتی که لوله صوتی را تحریک می کنیم و پدیده تشدید اتفاق می افتد و صداهایی با فرکانس های $\nu_m - \nu_n$ از لوله صوتی بیرون می آید، اتم نیز امواجی با فرکانس های $\nu_m - \nu_n$ به بیرون می فرستد که همان فوتون ها هستند. به نظر می رسد که به طور خیلی طبیعی شرودینگر توانسته است هم مسئله سطوح گسسته‌ی انرژی و هم مسئله جهش الکترون ها را حل کند! درضمن به نظر می رسید که راه شرودینگر راهی برای حل معمای ساختمان اتمی بدست آورده است که که از مکانیک ماتریسیِ مجرد و غیرشهودی هایزنبرگ بسیار ساده تراست.

«...تقریباً با ناراحتی به خانه رفتم. همان شب به بور نامه نوشتم و او را از سمینار شرودینگر که به دعوت زومرفلد در مونیخ ارایه کرده بود و بحث های بعد از آن مطلع کردم. شاید به خاطر همین نامه بود که بور از شرودینگر دعوت کرد تا قسمتی از سپتامبر را در کپهناگ بگذراند. شرودینگر موافقت کرد و من هم به دانمارک برگشتم.
مباحثه بور و شرودینگر از همان ایستگاه قطار شروع شد و هر روز از صبح تا پاسی از شب گذشته در خانه بور ادامه می یافت. برای من بسیار دشوار است که شدت و حرارت این بحث ها و میزان اعتقاد عمیقی که این دو به کارهای خود داشتند و شور و هیجانی را که در دفاع از آن ها به کار می بردند، بازگو کنم. تنها می توانم امیدوار باشم که

[28] از خطابه اروین شرودینگر به مناسبت عضویت در فرهنگستان علوم پروس — ۴ ژوئیه ۱۹۲۹

www.Endbook.net

نسخه خیلی کمرنگی از مکالمات آنها را یاد آوری کنم:

شرودینگر: « مطمئناً با من موافقید که تمام ایده پرش کوانتومی سرانجام به یک چیز خیلی بی معنی منتهی خواهد شد. شما اول ادعا می کنید که اگر اتم در یک حالت پایا باشد، الکترون حرکت تناوبی انجام می دهد ولی از خود تشعشع نمی کند، درحالیکه بر اساس نظریه ماکسول باید تابش کند. بعد می گویید که الکترون می باید از یک مدار به مدار دیگر بجهد تا تابش کند. آیا این جهش پیوسته است یا ناگهانی؟ اگر پیوسته است، فرکانس حرکت و انرژی آن می بایست پیوسته تغییر کند، دراین صورت چگونه می توان خطوط گسسته و تیز را در طیف اتم توضیح داد؟ اگر هم ناگهانی است می توان پرسید که چگونه و با چه قانون حرکتی دقیقاً از یک مدار به یک مدارِ دیگر می جهد؟ در واقع ایده جهش کوانتومی جز فانتزی و خیال چیزِ دیگری نیست؟

بور: « تمام این ها درست. اما این ثابت نمی کند که جهش ها واقعاً وجود ندارند. تنها می توان گفت که ما نمی توانیم آنها را تصور کنیم، زیرا مفاهیمی که از زندگی روزمره و تجربیات فیزیک کلاسیک به عاریت گرفته‌ایم برای بیان جهش های کوانتومی کافی نیستند. این هم چیز عجیبی نیست، چون در این جا با فرایند هایی سر و کار داریم که مستقیماً توسط حواس ما ادراک نمی شوند. »

شرودینگر: « نمی خواهم به بحث های طولانی درباره شکل گرفتن مفاهیم وارد شوم و ترجیح می دهم که این کار را به فیلسوفان واگذار کنم. تنها می خواهم بدانم که درون اتم واقعاً چه اتفاقی می افتد. برای من اهمیتی ندارد که چه زبانی برای توصیف آن به کار می برید. اگر الکترون ها درون اتم هستند و اگر الکترون ها ذره هستند، چنانچه همه ما اعتقاد داریم، دراین صورت می بایست به طریقی حرکت کنند. باید بتوان لااقل در اصول تعیین کرد که در یک حالت پایا چگونه حرکت می کنند و چگونه از یک حالت پایا به یک حالت پایای دیگر می جهند؟ ... »

و به این ترتیب بحث ها شب ها و روز ها ادامه می یافت تا اینکه سرانجام شرودینگر شاید بدلیل کار طاقت فرسا، با حالت تب دار به بستر بیماری افتاد. درحالیکه همسر بور وظیفه پرستاری او را بر عهده گرفته بود و برایش چای و کیک می آورد، بور بر لبه تختش می نشست و ادامه می داد: « ولی خوب باید قبول کنی که در مکانیک موجی تناقضات حل نمی شوند بلکه به گوشه ای رانده می شوند....» در پایان اقامت شرودینگر در کپنهاگ هیچ کدام از طرفین قانع نشده بودند زیرا هیچکدام قادر نبودند تصویر کامل و جامعی از مکانیک کوانتومی ارایه دهند.....»[29]

اگر چه ساختمان ریاضی مکانیک موجی شرودینگر می توانست بخوبی از عهده توصیف طیف اتم هیدروژن برآید اما تعبیر وی از الکترون به عنوان یک موج پیوسته که دچار تشدید می شود ابهاماتی داشت. مسئله این بود که در پدیده تشدید فرکانس هایی مثل $\nu_m + \nu_n$ نیز وجود دارند درحالیکه هیچ فوتونی با این فرکانس ها تابش نمی شد. هم چنین برخلاف تصور شرودینگر که برای الکترون ماهیتی گسترده و موجی قائل بود، آزمایش نشان می داد که الکترون یک ذره است و بنابراین تنها راه برای

[29] خاطرات سالهای ۱۹۲۶ – ۱۹۲۷، ورنر هایزنبرگ

www.Endbook.net

تعبیر تابع موج $\psi(x,t)$ آن بود که فرض کنیم مربع این تابع احتمال یافتن ذره در نقطه x در زمان t است. این تعبیر از آن ماکس بورن بود که در آن زمان استاد دانشگاه گوتینگن در آلمان بود. چرا خود ψ را نمی شد به عنوان موج در نظر گرفت. دلیل اش این بود که تابع ψ برخلاف تابع $|\psi|^2$ دریک معادله پیوستگی صدق نمی کرد و هر تابعی که بخواهد نقش چگالی احتمال را بازی کند حتماً می بایست در چنین معادله‌ای صدق کند. برای این که این تعبیر درست باشد می بایست یک معادله پیوستگی احتمال به شکل

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \nabla \cdot J = 0 \tag{116}$$

برقرارباشد که رابطه ای بین این چگالی احتمال یعنی $\rho = |\psi|^2$ و بردار جریان احتمال یعنی J بدست دهد. معادله شرودینگر عبارت است از:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(r)\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi. \tag{117}$$

هرگاه مزدوج مختلط طرفین این معادله را بنویسیم (برای پتانسیل حقیقی) خواهیم داشت:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* + V(r)\psi^* = -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*. \tag{118}$$

باضرب کردن ψ^* در رابطه اول و ψ دررابطه دوم و کم کردن دو رابطه ازهم به نتیجه زیرمی رسیم

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\psi. \tag{119}$$

با استفاده از اتحاد های برداری می توان این معادله را به شکل زیربازنویسی کرد:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\psi. \tag{120}$$

و نهایتاً

$$\nabla \cdot J + \frac{\partial}{\partial t}\rho = 0, \tag{121}$$

که درآن

$$\rho = \psi^*\psi, \qquad J = \frac{\hbar}{2im}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*), \tag{122}$$

چگالی احتمال و بردارجریان احتمال هستند. هرگاه برای یک موج تخت ازنوع $\psi = Ae^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)}$ چگالی و جریان احتمال را حساب کنیم بدست می آوریم

$$\rho = A^2, \qquad \vec{J} = A^2\frac{\hbar\vec{k}}{m}, \tag{123}$$

www.Endbook.net

که نشان می دهد جریان احتمال برابراست با چگالی احتمال ضرب در سرعت ذرات. این رابطه به این شکل با تعبیرشهودی ما از جریان نیز سازگاری دارد.

بالاخره کدام یک از دو تصویر هایزنبرگ و شرودینگر بیانگر مکانیک کوانتومی جدید بودند؟ مکانیک موجی شرودینگر نشان می داد که کمیت اصلی یعنی تابع موج $\psi(x)$ دریک معادله خطی صدق می کند و اگر ψ_1 و ψ_2 هردو جواب معادله شرودینگر باشند، ترکیب خطی آنها نیز یک جواب معادله شرودینگر خواهد بود. بنابراین مجموعه تمام این توابع موج یک فضای برداری تعریف می کنند که می توانیم آن را با $\mathcal{H}$ نشان دهیم. از آنجا که این توابع موج نشان دهنده چگالی احتمال هستند، می بایست بردارهای فضای $\mathcal{H}$ بهنجارپذیر باشند به این معنا که $\int dx\psi^*\psi$ می بایست محدود باشد یعنی فضای $\mathcal{H}$ فضای توابع انتگرال مجذورپذیر است که آن را فضای هیلبرت می نامیم. حال می توانیم از خود بپرسیم که متوسط مکان یک ذره که آن را با $\langle X\rangle$ نشان می دهیم چقدراست. این متوسط برابراست با:

$$\langle X\rangle = \int dxx|\psi(x)|^2 = \int dxx\psi^*(x)x\psi(x), \tag{124}$$

که می توان آن را به عنوان عنصر ماتریسی یک عملگر X در فضای برداری توابع انتگرال مجذورپذیر تلقی کرد. اثر این عملگر روی توابع موج به صورت زیراست:

$$X : \psi(x) :\longrightarrow x\psi(x). \tag{125}$$

برای محاسبه متوسط تکانه به صورت زیر عمل می کنیم:

$$\langle P\rangle \quad = \quad m\frac{d\langle X\rangle}{dt} = m\frac{d}{dt}\int \psi^* x\psi = m\int x\frac{\partial\rho}{\partial t} = -m\int x\frac{\partial J}{\partial x} \tag{126}$$

که درآن $J = \frac{\hbar}{2im}(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x})$. با استفاده از انتگرال جزء به جزء می توان با کمی محاسبه به نتیجه زیر رسید:

$$\langle P\rangle = \int \psi^*(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x})\psi dx \tag{127}$$

که می توان آن را به عنوان عنصر ماتریسی یک عملگر $P \equiv \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ در فضای توابع انتگرال پذیر تلقی کرد. اثر این عملگر روی این توابع به شکل زیراست:

$$P : \psi(x) \longrightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x). \tag{128}$$

نکته جالب آن است که این دو عملگر در همان رابطه ای صدق می کنند که هایزنبرگ پیشنهاد کرده بود، یعنی

$$[P, X] = [\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, x] = i\hbar. \tag{129}$$

www.Endbook.net

طی چند ماه نشان داده شد که مکانیک موجی و مکانیک ماتریسی هردو جنبه های متفاوت از یک ساختار واحد هستند. دراین سنتز نهایی پاوول دیراک نقش برجسته‌ای داشت. وی بیش از هر چیز بر زیبایی و انسجام ریاضی تکیه داشت.

«... کارهای پژوهشی اولیه من در اوایل سالهای ۱۹۲۰ که مبتنی بر مدارهای اتمی بور بود، کاملاً ناموفق از آب درآمد. من قصد داشتم مدارهای بور را واقعی تلقی کنم و برای آنها یک صورت بندی ریاضی درست کنم. هرمدارِ بور به یک الکترون تعلق داشت و برای این که اتم های چند الکترونی را توصیف کنم نیاز داشتم که یک نظریه برای مدارهای بور در برهم کنش با یکدیگر بسازم. من مثل خیلی های دیگر به شدت روی این مسئله کار کردم که البته حاصلی در بر نداشت و نمی توانست داشته باشد. هایزنبرگ نشان داده بود که برای حل این مسئله می بایست از یک ریاضیات کاملاً جدید که مبتنی بر کمیت های جابجا نشونده است استفاده کرد. اگر چه مدارهای بور مفاهیم فیزیکی قابل لمسی بودند ولی به درد چنین نظریه ای نمی خورند.
در آن هنگام بود که من آنچه را که باید، آموختم. یاد گرفتم که به عنوان اساس یک نظریه جدید به هیچ روی به مفاهیم قابل لمس فیزیکی اعتماد نکنم و تنها در جستجوی یک طرح منسجم ریاضی باشم، حتی اگر درنگاه اول هیچ نوع ارتباطی به فیزیک نداشته باشد. می بایست توجه خود را به یافتن یک طرح ریاضی زیبا معطوف می کردم....» [30]

در فصل آینده اصول موضوع مکانیک کوانتومی را چنان که کمابیش در آن دوران تدوین شده است بیان می کنیم و از این به بعد مکانیک کوانتومی را بر این اصول موضوع بنا می کنیم. اما قبل از آن می بایست به مفهوم دوگانگی موج و ذره بپردازیم.

۸ اصل عدم قطعیت

اگر چه تلاش برای درک ساختمان اتمی و توضیح داده های طیفی به مکانیک ماتریسی جدید منجر شده بود ولی همچنان این سوال اساسی پیش روی هایزنبرگ وجود داشت که چرا می بایست تصویر کلاسیک خود از الکترون و مسیر آن را بدور بیندازیم. چرا نمی توان حتی به صورت ذهنی تصور کرد که الکترون در درون اتم مسیر معینی را که سلسله ای از نقاط پیوسته به هم در فضاست می پیماید؟ مگر این نیست که مسیر الکترون را بالاخره در اتاقک ابر می بینیم؟ چرا نباید برای الکترون در اتم مسیری درست مثل یک گوی قائل شد؟

« .... درخلال آخرین ماه های سال ۱۹۲۶ تفسیر فیزیکی مکانیک کوانتومی محور اصلی بحث های بور و من بود. من درآن موقع در یک اتاقک زیر شیروانی در طبقه بالای انیستیتوی کپنهاگ که از پنجره هایش می شد درختان فالِد پارک [31] را دید، زندگی می کردم. بور اغلب شب هادیروقت به اتاق من می آمد و ما ساعت ها روی انواع واقسام آزمایش های ذهنی کار می کردیم تا تعبیر صحیح مکانیک جدید را بفهمیم..... بااین وجود بعد از بحث های فراوان هیچ کدام از ما نمی توانستیم پدیده بسیار ساده ای مثل

[30] پاول دیراک: مبانی ریاضی نظریه کوانتومی، ۱۹۷۸.
[31] Falled Park

www.Endbook.net

مسیر الکترون در اتاقک ابر را توضیح دهیم. از یک سو در صورتبندی مکانیک کوانتومی هیچ جایی برای مسیر الکترون وجود نداشت، از سوی دیگر مسیر الکترون را در اتاقک ابر می شد به وضوح مشاهده کرد....» [32]

«.... پاسی از شب گذشته بود که یک مرتبه به یاد گفتگویی با اینشتین افتادم که گفته بود: « این نظریه است که تعیین می کند چه چیزی را می توان مشاهده کرد.» بلافاصله قانع شدم که کلید درِ بسته‌ای را که این همه مدت پشت آن مانده‌ام می توانم در این جا پیدا کنم. تصمیم گرفتم که برای یک پیاده روی بعد از نیمه شب به پارک بروم و در باره این موضوع فکر کنم. همیشه براحتی گفته بودیم که واقعاً مسیر الکترون را در اتاقک ابر می توان مشاهده کرد. اما شاید واقعاً آنچه را که در اتاقک ابر می دیدیم چیزی جز مجموعه ای گسسته از لکه‌های تقریبی و نامعینی که نشان می داد الکترون از آنجا عبور کرده است نبود. درواقع هم آنچه را که در اتاقک ابر می دیدیم چیزی جز قطرات آبی که خیلی بزرگ تر از اندازه الکترون هستند نبود. بعداز بازگشت، با یک محاسبه کوتاه نشان دادم که در چارچوب مکانیک ماتریسی می توان قائل به مسیرهای تقریبی برای ذرات شد، ولی این تقریب حدی داشت به این معنا که نمی توان مکان و تکانه یک ذره را با دقتهایی که حاصل ضرب شان از ثابت پلانک کمتر باشد تعیین کرد، چیزی که بعد ها به نام اصل عدم یقین شناخته شد...»

میکروسکوپ هایزنبرگ:

فرض کنید که بخواهیم مکان ذره ای را با دقت خیلی زیاد تعیین کنیم. برای این کار از یک میکروسکوپ خیلی دقیق استفاده می کنیم، شکل ۱۱. از اپتیک کلاسیک می دانیم که با چنین میکروسکوپی تنها می توان مکان الکترون را با دقت

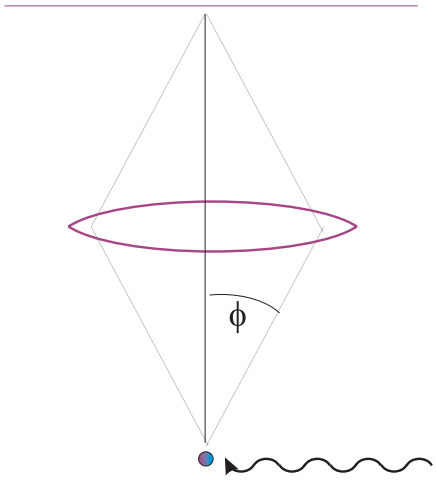
$$\Delta x \sim \frac{\lambda}{\sin\phi} \tag{130}$$

تعیین کرد. به همین دلیل برای آنکه دقت خود را بالا ببریم از طول موج های کوتاه استفاده می کنیم و زاویه ϕ را نیز هرچه بزرگ تر می گیریم (یا از طریق گرفتن عدسی پهن تر یا از طریق نزدیک بردن عدسی). امامی دانیم که « مشاهده »الکترون درمیکروسکوپ یعنی اینکه فوتونی از منبع نور به آن برخورد کرده و پراکنده شده و از طریق عدسی به چشم (یا دستگاه حساسی که فوتون ها را ثبت می کند) می رسد. هرگاه چنین فوتونی به الکترون اصابت کرده و از طریق عدسی به چشم ما برسد، اندازه تکانه اش در راستای x به مقدار زیر نامعین است

$$\Delta p_x \sim 2p\sin\phi = 2\frac{h}{\lambda}\sin\phi, \tag{131}$$

[32] خاطرات سالهای ۱۹۲۶ – ۱۹۲۷، ورنر هایزنبرگ

www.Endbook.net



شکل ۱۱: میکروسکوپ هایزنبرگ برای مشاهده مکان الکترون

زیرا ما نمی دانیم که دقیقاً چه مسیری را پیموده و به چشم یا دستگاه ما رسیده است. حال اگر از قانون بقای تکانه استفاده کنیم نتیجه می گیریم که مولفه P_x تکانه الکترون نیز به همین اندازه نامعین است. بنابراین

$$\Delta x \Delta p_x \sim \frac{\lambda}{\sin\phi} 2\frac{h}{\lambda}\sin\phi = 2h = 4\pi\hbar. \tag{132}$$

یعنی عمل مشاهده مکان الکترون تکانه آن را حداقل به میزان بالا آشفته می کند و بنابراین مسیر الکترون حتی به صورت ذهنی چیزی نیست که ما بتوانیم بدون مختل کردن اش آن را مشاهده کنیم زیرا به محض اینکه در یک لحظه مکان الکترون را مشاهده می کنیم دیگر سرعت اش آن چیزی نیست که قبلاً داشت و سرعت جدید و تصادفی ای پیدا می کند و به راه دیگری می رود.

اکنون می توانیم بفهمیم که چرا چرا مدارهای بور برای الکترون نمی توانند واقعی باشند؟ چرا هایزنبرگ در شک کردن به واقعی بودن چنین مدارهایی محق بوده است؟ بازهم ملاک هایزنبرگ آن است که تنها چیزهایی واقعی هستند که بتوان آنها را با آزمایش و مشاهده سنجید. بقیه تصویرهای ذهنی ما هستند و ربطی به واقعیت فیزیکی ندارند.

آیا مدارهای الکترون در اتم بور واقعیت دارند؟

برای آنکه یک مدار الکترون مثلاً مدار شماره n را مشاهده کنیم می بایست آن را بادقتی اندازه گیری کنیم که با مدار نزدیکی مثل مدار شماره $n-1$ اشتباه نشود. بنابراین می بایست دقت ما چنان باشد که

$$\Delta r \ll R_n - R_{n-1} = \frac{\hbar n^2}{\alpha mc} - \frac{\hbar(n-1)^2}{\alpha mc} \approx \frac{2\hbar n}{\alpha mc} \tag{133}$$

www.Endbook.net

اما این دقت در اندازه گیری مکان باعث منتقل کردن تکانه ای از مرتبه $p \approx \frac{\hbar}{\Delta r} \gg \frac{\alpha mc}{2n}$ به الکترون می شود. چنین تکانه ای باعث تغییر انرژی الکترون به مقدار زیر می شود

$$\Delta E \approx \frac{p^2}{2m} \gg \frac{1}{2}\frac{mc^2\alpha^2}{n^2} = E_n, \tag{134}$$

که از انرژی الکترون در مدارِ n ام بسیار بیشتر است و همین باعث پرتاب شدن الکترون از مدارش می شود، یعنی اینکه نمی توان الکترون را هنگامی که در مدارش می چرخد، مشاهده کرد.

نگاهی دو باره به آزمایش دو شکاف:

برای فهم بیشتر اصل عدم قطعیت و هم چنین فهم بهتر دو گانگی موج و ذره آزمایش دو شکاف را در نظر می گیریم. در بخش های پیشین تنها به توصیف ریاضی طرحی که تعداد الکترون ها را روی پرده نشان می داد اکتفا کردیم. اکنون وقت آن رسیده است که به سوالات گوناگونی که این آزمایش ما را با آن مواجه می کند باز گردیم. در طرح تداخلی الکترون ها روی پرده چند ین نکته جالب و شگفت انگیز وجود دارد:

الف : درجاهایی از پرده بازکردن هردوشکاف باهم باعث شده است که تعداد حتی کمتری ذرات نسبت به وقتی که تنها یک شکاف بازبود به آن نقطه برسد. درجاهایی نیز مثل وسط پرده تعداد ذرات دوبرابر آن مجموع تعداد ذراتی است که درصورت بازبودن هرکدام از شکاف ها به تنهایی به پرده می رسید.

ب : برعکس درجاهای دیگری از ذرات بازکردن هردوشکاف باعث شده است که تعداد ذراتی که به آن نقطه می رسد بیشتر از مجموع ذراتی شود که درصورتی که هردوشکاف بازمی بود به آن نقطه می رسید.

ج : شکل این طرح تداخلی با رقیق کردن چشمه ذرات بطوریکه درهر آن فقط و فقط یکی از ذرات از شکاف ها عبور کند، تغییر نمی کند. بنابراین نمی توان گفت که ذرات هنگام بازبودن هردوشکاف بایکدیگر طوری برهم کنش می کنند که اثرات بالا دیده شود.

د : هرکدام از ذرات را روی پرده نهایی به طور کامل توسط آشکارساز ثبت می کنیم و آشکارساز ما ماهیت ذره ای آن را بخوبی تایید می کند. بنابراین نمی توان گفت که ذره دراین آزمایش مثل یک موجود پیوستار عمل کرده است و بخشی از آن از یک شکاف و بخشی دیگر از یک شکاف دیگر عبورکرده است.

هـ: البته می توان درگزاره (د) شک کرد. ممکن است که ذره درحین عبور از دو شکاف به صورت یک پیوستار(چیزی شبیه یک ابر) رفتار می کند وسپس درانتها موقع نشستن روی پرده تمامی این ابر دوباره به صورت یک ذره کوچک متمرکز می شود. برای پی بردن به راز رفتار ذره می توان درست پشت شکاف ها آشکارسازهایی گذاشت تا بفهمیم که ذره درست موقع عبور از شکاف ها چگونه رفتار می کند. اگر چنین کاری بکنیم متوجه می شویم که درآنجا هم ذره به صورت یک ابر یا ژله یا چیزی شبیه به آن رفتار نمی کند بلکه به تمامی (باتمام جرم و بار و دیگر خصوصیات خود) درآشکار ساز ثبت می شود. ولی دراین جا

www.Endbook.net

متوجه یک اتفاق مهم می شویم و آن این است که تلاش ما برای پی بردن به راز رفتار ذره باعث شده است که طرح تداخلی I_{12} از بین رفته است و جای خود را به طرح معمولی I_{1+2} داده است. ظاهراً ذره از تلاشی که برای پی بردن به رفتار اسرارآمیزش انجام داده ایم عصبانی شده است و دیگر آن کار شگفت انگیز را نمی کند.

و : حال که ذره تن به مشاهده ظریف خود را نمی دهد ما می توانیم به منطق ساده روی آوریم . بالاخره هر ذره ای که روی پرده می نشیند یا از شکاف ۱ آمده است یا از شکاف ۲.
تعداد ذراتی که روی پرده نشسته اند برابرند با تعداد ذراتی که از شکاف ۱ آمده اند + تعداد ذراتی که از شکاف ۲ آمده اند.
اما تعداد ذراتی که از شکاف ۱ عبور کرده وروی پرده نشسته اند برابراست با I_1 و تعداد ذراتی که از شکاف ۲ عبور کرده وروی پرده نشسته اند برابر است با I_2. پس حتی بدون مشاهده نزدیکی شکاف ها می توانیم حکم کنیم که طرحی که سرنجام روی پرده ثبت می شود می بایست برابر با $I_1 + I_2$ باشد.
درصورتی که اتم ها درست مثل اشیایی که ما با آنها آشنا هستیم مثل توپ فوتبال عمل کرده باشند استدلال بالا صحیح است. بالاخره هراتم یا از شکاف بالایی عبور کرده و به پرده رسیده است و یا از شکاف پایینی و می بایست طرح مشاهده شده همان طرح بدون تداخل یعنی طرح I_{1+2} باشد. درحال حاضر ما نمی توانیم بفهمیم که الکترون ها یا ذرات میکروسکوپی دیگر چرا چنین رفتاری از خود بروز می دهند. مسئله حتی از این هم بدتراست. مانه تنها نمی توانیم چرایی رفتار الکترون ها را توضیح دهیم حتی چگونگی رفتار آن را بهتر از این نمی توانیم توضیح دهیم. درمقابل ایراداتی از این نوع که « بالاخره الکترون یا از این شکاف عبور می کند و یا از آن شکاف و دراین صورت نمی بایست طرح تداخلی داشته باشیم » تنها می توانیم به این بسنده کنیم که بگوییم وقتی سوال عبور الکترون از شکاف ها را به صورت عملی و تجربی می خواهیم بپرسیم می بینیم که طرح تداخلی واقعا از بین می رود و ما به تناقضی برنمی خوریم!. برای آنکه بتوانیم واقعاً تعیین کنیم که الکترون از کدام یک از شکاف ها عبور کرده است می بایست بتوانیم مکان آن را روی پرده ای که شکاف ها در آن قرار دارد با دقتی بیش از فاصله دو شکاف تعیین کنیم، یعنی اینکه $\Delta y' \ll a$. (دراین جا y' را برای مختصه مکان در روی پرده اول و y را برای مختصه مکان روی پرده ای که الکترون ها روی آن می نشینند بکار می بریم.) اما چنین دقتی نیازمند آن است که به تکانه آن یعنی p_y عدم دقتی معادل Δp_y وارد کنیم به نحوی که $\Delta p_y \approx \frac{\hbar}{\Delta y'} \gg \frac{\hbar}{a}$. اما چنین ضربه ای به الکترون ها باعث می شود که زاویه نشستن الکترون روی پرده به ترتیب زیر مختل شود:

$$\Delta\theta \sim \frac{\Delta p_y}{p_x} \gg \frac{\frac{\hbar}{a}}{\frac{\hbar}{\lambda}} = \frac{\lambda}{a} \tag{135}$$

این امر به معنای آن است که مکان الکترون ها روی پرده نهایی دچار عدم قطعیتی به صورت زیر شود

$$\Delta y \gg D\Delta\theta = \frac{\lambda D}{2a}, \tag{136}$$

و این به معنای از بین رفتن طرح تداخلی است زیرا فاصله نوار های روشن و تاریک از مرتبه $\frac{\lambda D}{2a}$ است. بنابراین نمی توانیم هم طرح تداخلی را ببینیم و هم تعیین کنیم که الکترون از کدام شکاف عبور کرده است.
اغلب در تاریخ علم اتفاق افتاده است که در برهه هایی از زمان فهمیده ایم که آنچه را که قرن ها بدیهی می پنداشته‌ایم اصلاً بدیهی نیستند بلکه رسوبات ذهنی ماهستند که هیچ گاه بداهت آنها را مورد شک قرار نداده‌ایم. زمان مطلق و این که همزمانی دو رویداد از دیدگاه همه ناظران برقرار است یکی از این مفاهیم بود که با پیدایش نسبیت مورد بازنگری قرار گرفت.

www.Endbook.net

تقریباً درهمه موارد شک و تردید در این امور به ظاهر بدیهی از همان ابتدا آغاز نمی شود، و این هم طبیعی است چرا که این مفاهیم طی قرن ها در ذهن ما جا خوش کرده‌اند، بلکه معمولاً برای رفع ناسازگاریهای جدّی ای که بین نظریه های قبلی و جهان تجربی و مشاهدات واقعی ظهور کرده است ما مجبور می شویم که ساختار ریاضی نظریه هایمان را متحول کنیم تا با مشاهدات تجربی جور دربیایند. اما این ساختار های جدید چنان اند که با آن امور به ظاهر بدیهی تناقض دارند و دراین هنگام است که به فکر می افتیم در باره بداهت آن امور بازنگری کنیم. همزمانی مطلق که تا سال ۱۹۰۵ یعنی سال پیدایش نسبیت بدیهی تصور می شد یکی از این مفاهیم بود. ایده وجود یک مسیر واقعی برای ذرات میکروسکوپی نیز یکی دیگر از این امور است . به همان نوع استدلالات متکی بر آزمایش های ذهنی که اینشتین نشان داده بود همزمانی مطلق امری بدیهی نیست، بور و هایزنبرگ نشان دادند که تصور یک مسیر برای الکترون امری تناقض آمیز است. البته این استدلالات متکی بر قبول دوگانگی موج و ذره است، یعنی اینکه با استدلالات و شواهد تجربی ای بیرون از مکانیک کوانتومی هنوز نمی توانیم نشان دهیم که مسیر الکترون و تعین همزمان مکان و سرعت آن اموری هستند که تصورشان باطل است. بنابراین آنچه که هایزنبرگ و سپس بعد ها بور و دیگران نشان دادند آن است که مکانیک کوانتومی از نظر مفهومی نیز یک نظریه بدون تناقض است.

بررسی ما از چگونگی تولد مکانیک کوانتومی در این جا به پایان می رسد. در درس آینده ما نقطه شروع خود را اصول موضوع مکانیک کوانتومی قرار خواهیم دید و سعی می کنیم که همه بنای مکانیک کوانتومی را بر اساس آنها استوار کنیم. بعد از نشیب و فراز فراوان طی مدت بیش از یک ربع قرن سر انجام اصول مکانیک کوانتومی کمابیش مثل اصول موضوعه هندسه اقلیدسی به طور کامل تدوین شده بود.

> تاریخ فیزیک در قرن بیستم تاریخ موفقیتی ابدی است. قوه تصورِ اجتماعی بشر هرگز نتیجه ای که از نظر اهمیت با این موفقیت قابل مقایسه باشد عرضه نداشته است. اهرام مصر، حماسه ایلیاد، اشعار و کلیساهای عظیم تاریخ بشریت، هیچکدام را تاب مقابله با این غول عظیم نیست. مردانیکه با قدرت تصور خویش مدارج مختلف این راه را پیموده‌اند قهرمانان پیشتاز عصر ما را تشکیل می دهند. مندلیف با ورقهای گوناگونش از عناصر شیمیایی، جی. جی. تامسون که اعتقاد یونانی کهن را مبنی بر تقسیم ناپذیری اتم ریشه کن ساخت، رادرفورد که به آن شکل یک منظومه شمسی داد، نیلز بور که موجب شد صحت این تصویر به اثبات برسد، و بالاخره اروین شرودینگر، ورنر هایزنبرگ، ماکس بورن و پاوول دیراک.... [33].

۹ قدردانی

در تصحیح متن این درسنامه آقای محمد صادق فیض به من کمک بسیاری کرده‌اند، زیرا با صبر و حوصله تمام متن را خوانده و اشکالات ویرایشی آن را به من یادآوری کرده اند. به این وسیله از ایشان تشکر می کنم.

[33] عروج انسان، ژاکوب برونوفسکی،

www.Endbook.net

درس چهارم: اصول موضوع مکانیک کوانتومی

۱ مقدمه

در درس گذشته روند تاریخی تکوین مکانیک کوانتومی را بیان کردیم. دیدیم که چگونه تلاش برای رفع نارسایی های مدل اتمی بوهر، هایزنبرگ را به مکانیک ماتریسی رهنمون شد و و در همان هنگام نیز تلاش برای تلفیق تصویر موجی و ذره ای، شرودینگر را به مکانیک موجی رهنمون شد. در هردو تصویر از مکانیک کوانتومی جدید نشانه هایی از تصویر دیگر نیز دیده می شد. مدتی بعد معلوم شد که مکانیک موجی و مکانیک ماتریسی دو جنبه متفاوت از یک صورت بندی واحد هستند. این صورت بندی واحد سرانجام توسط پاوول دیراک ارایه شد. دراین صورت بندی مکانیک کوانتومی از مجموعه ای از اصول موضوعه آغاز می شود و همه ساختمان مکانیک کوانتومی با استدلال ریاضی و منطقی از این اصول موضوعه استنتاج می شود. با توجه به پیچیده بودن مکانیک کوانتومی چه از نظر ساختمانی و چه از نظر تعبیرات آن و به خصوص با توجه به دوگانگی موج و ذره، این که همه مفاهیم و روش های مکانیک کوانتومی مثل هندسه از مجموعه‌ای از اصول موضوع قابل استنتاج است موضوعی بسیار جالب و عمیق است. دراین درس این اصول موضوعه را بیان می کنیم و با ذکر مثال ساده ای آنها را توضیح می دهیم.

۲ اصول موضوع مکانیک کوانتومی

اصل موضوع اول: فضای هیلبرت به هر سیستم فیزیکی یک فضای هیلبرت نسبت داده می شود. وضعیتِ سیستم فیزیکی با یک بردار از این فضای هیلبرت مشخص می شود. معمولاً فضای هیلبرت را با $\mathcal{H}$ و بردارِ حالت یک سیستم فیزیکی را با $|\psi\rangle$ نشان می دهیم.

اصل موضوع دوم: مشاهده پذیرها به هر کمیت مشاهده پذیرِ A از سیستم، یک عملگر هرمیتیِ $\hat{A}$ نسبت داده می شود. هرگاه این مشاهده پذیرها متناظر کلاسیکی داشته باشند، قاعده زیر برای رابطه بین آنها می بایست رعایت شود: اگر کروشه پوآسون آنها به شکل زیر باشد،

$$\{A, B\} = C \tag{1}$$

آنگاه رابطه تعویضگری که بین عملگرهای مربوطه می بایست برقرار باشد عبارت است از:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hbar\hat{C}. \tag{2}$$

www.Endbook.net

فضای هیلبرت می بایست چنان باشد که بتوان این عملگرها را در آن تعریف کرد. این امر چنانکه در درس های آینده خواهیم دید انتخاب فضای هیلبرت را بشدت مقید می کند.

ازآنجا که عملگرهای هرمیتی جابجاشونده را می توان دریک پایه قطری کرد، فضای هیلبرت $\mathcal{H}$ توسط بردارهایی که که ویژه بردارمشترک همزمان یک مجموعه ماکزیمال از مشاهده پذیرها هستند جاروب می شود. بنابراین اگر مشاهده پذیرهای A و B و $C, \cdots$ یک مجموعه ماکزیمال باشند (یعنی همه با هم جابجا شوند)، یک پایه برای فضای هیلبرت عبارت است از بردارهای $|a_i,\ b_j,\ c_k, \cdots\rangle$ که درآن

$$\begin{aligned} A|a_i, b_j, c_k\rangle &= a_i|a_i, b_j, c_k\rangle \\ B|a_i, b_j, c_k\rangle &= b_j|a_i, b_j, c_k\rangle \\ C|a_i, b_j, c_k\rangle &= c_k|a_i, b_j, c_k\rangle. \end{aligned} \tag{3}$$

ازآنجا که مجموعه مشاهده پذیرهای ماکزیمال یکتا نیستند، چنین پایه هایی نیز یکتانیستند.
هرگاه $|\psi\rangle$ یک بردار حالت باشد می توان آن را برحسب بردارهای یک پایه بسط داد. برای سادگی فرض می کنیم که مجموعه های ماکزیمال یک عضوی هستند. بنابراین می توان نوشت

$$|\Psi\rangle = \sum_i |a_i\rangle\langle a_i|\psi\rangle \tag{4}$$

وقتی که فضای هیلبرت محدود بعد باشد و یا یک پایه شمارش پذیر برای آن انتخاب کرده باشیم، یا

$$|\Psi\rangle = \int da|a\rangle\langle a|\psi\rangle \tag{5}$$

وقتی که فضای هیلبرت بعد نامحدود داشته باشد و یک پایه پیوسته برای آن انتخاب کرده باشیم.

توضیح: در دنیای میکروسکوپی ممکن است مشاهده پذیرهایی وجود داشته باشند که نتوان مشابهی برای آنها در دنیای ماکروسکوپی و کلاسیک یافت. نمونه ای از این مشاهده پذیرها اسپین است که تکانه زاویه ای ذاتی ذرات را نشان می دهد، اما نمی توان آن را به معنای چرخش وضعی این ذرات به دور خود گرفت. درچنین حالت هایی عملگرهای مربوط به این مشاهده پذیر ها را می توان از مجموعه‌ای از آزمایشها استنتاج کرد. نمونه ای از این نحوه استنتاج را در ضمیمه این درس خواهید دید.

اصل موضوع سه، اندازه گیری: وقتی که سیستم فیزیکی در حالت $|\psi\rangle$ است اگر مشاهده پذیری مثل A را اندازه بگیریم، به طور تصادفی یکی از ویژه مقادیر عملگر $\hat{A}$ مثل a بدست می آید و حالت دستگاه نیز به ویژه بردار متناظر با a تقلیل پیدامی کند. دامنه احتمال این که مقدار a بدست آید برابراست با $\langle a|\psi\rangle$ ودرنتیجه خود احتمال برابراست با $P(a) = |\langle a|\psi\rangle|^2$. در صورتی که

www.Endbook.net

ویژه مقادیر $\hat{A}$ پیوسته باشند $|\langle a|\psi\rangle|^2$ چگالی احتمال را بدست می دهد به این معنی که $|\langle a|\psi\rangle|^2\ da$ احتمال این را به دست می دهد که مقداری بین a و $a+da$ بدست آید.

توضیح: دربیان این اصل موضوع فرض کرده ایم که طیف A واگنی ندارد. برای بیان کامل این اصل موضوع آنچنان که عملگرهای با طیف واگن را نیز در بر بگیرید نخست به یک مثال ساده می پردازیم. فرض کنید که فضای هیلبرت سه بعدی است و مشاهده پذیرِ A را که با عملگر $\hat{A}$ توصیف می شود اندازه گیری می کنیم:

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}. \tag{6}$$

حالتی را در نظر بگیرید مثل

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = \alpha|1\rangle + \beta|2\rangle + \gamma|3\rangle. \tag{7}$$

در اندازه گیری A فقط دو مقدار ۱ و ۲ بدست خواهد آمد زیرا ویژه مقادیرِ A این دو مقدار هستند.
احتمال اینکه مقدار 1 را بدست بیاوریم برابر است با $P(1) = |\alpha|^2$ و احتمال اینکه مقدارِ 2 را بدست آوریم (=احتمال اینکه ۱ بدست نیاوریم) برابر است با $P(2) = |\beta|^2 + |\gamma|^2$. در صورت بدست آمدن مقدار ۱، حالت ذره به $|\psi_1'\rangle = |1\rangle$ کاهش خواهد یافت. اما اگر مقدار ۲ را بدست بیاوریم حالت ذره به $|2\rangle$ یا $|3\rangle$ تصویر نخواهد شد بلکه به صفحه(یازیرفضایی) که توسط $|2\rangle$ و $|3\rangle$ جاروب می شود تصویرخواهد شد. یعنی حالت ذره دراین صورت تبدیل می شود به

$$|\psi_2'\rangle = \frac{1}{\sqrt{\beta^2+\gamma^2}}(\beta|2\rangle + \gamma|3\rangle). \tag{8}$$

با معرفی عملگر تصویر برای این زیر فضایعنی

$$P_2 := |2\rangle\langle 2| + |3\rangle\langle 3|, \tag{9}$$

می توان نوشت:

$$P(2) = |\beta|^2 + |\gamma|^2 = \langle\psi|P_2|\psi\rangle. \tag{10}$$

این مطالب را به صورت زیر جمع بندی می کنیم:

به ازای هر ویژه مقدار α از عملگرِ A، یک عملگر تصویرگر مثل P_α وجود دارد که به صورت زیر تعریف می شود

$$P_\alpha := \sum_i |\alpha^{(i)}\rangle\langle\alpha^{(i)}|, \tag{11}$$

www.Endbook.net

که درآن $|\alpha^{(i)}\rangle$ ها ویژه بردارهای متعامد و متناظر با ویژه مقدارِ α هستند و درنتیجه

$$\hat{A} = \sum_{\alpha} \alpha P_{\alpha}. \tag{12}$$

اگر روی حالت $|\psi\rangle$، مشاهده پذیر A را اندازه گیری کنیم آنگاه احتمال بدست آوردن مقدار α برابر است با

$$P(\alpha) = |\langle\psi|P_{\alpha}|\psi\rangle|^2, \tag{13}$$

و بعد از آن نیز حالت جدید عبارت خواهد بود از

$$|\psi'_{\alpha}\rangle = \frac{P_{\alpha}|\psi\rangle}{\sqrt{\psi|P_{\alpha}|\psi\rangle}}. \tag{14}$$

اصل موضوع چهار، دینامیک: تحول حالت سیستم فیزیکی با معادله زیر که معادله شرودینگر نام دارد تعیین می شود

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi\rangle = H|\psi\rangle, \tag{15}$$

که درآن H عملگر هامیلتونی سیستم فیزیکی نامیده می شود که متناظر کوانتومی همان هامیلتونی کلاسیک است.
معادله شرودینگر برای وقتی که H بازمان ثابت است، حل ساده ای دارد. دراین حالت عملگرتحول به شکل $U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$ است. هرگاه حالت سیستم درلحظه 0، $|\psi(0)\rangle$ باشد، حالت سیستم درلحظه t برابرخواهد بود با

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= U(t)|\psi(0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\psi(0)\rangle = \sum_{n} e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|n\rangle\langle n|\psi(0)\rangle \\ &= \sum_{n} e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|n\rangle\langle n|\psi(0)\rangle. \end{aligned} \tag{16}$$

بنابراین با دانستن بسط حالت اولیه برحسب ویژه حالت های هامیلتونی یعنی

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{n} c_n|n\rangle \tag{17}$$

می توانیم حالت در لحظه t را نیز تعیین کنیم.

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n} e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} c_n|n\rangle. \tag{18}$$

بنابراین دراین حالت کافی است که ویژه حالت های هامیلتونی را بدست آوریم تا بتوانیم مسئله دینامیک را به طور کامل حل کنیم. در ادامه نحوه استفاده از این اصول موضوع را با مثال ساده ای توضیح می دهیم.

www.Endbook.net

۳ مثال : اسپین

برای آنکه در ساده ترین مثال ممکن اصول موضوع مکانیک کوانتومی را بفهمیم، درجات آزادی مربوط به مکان و تکانه ذره را دراین جا فراموش می کنیم و فقط به یک خصیصه ذره یعنی اسپین آن توجه می کنیم. اسپین ذرات، که به یک معنا نشان دهنده تکانه زاویه ای ذاتی این ذرات است، مشاهده پذیری است که مثل تکانه زاویه ای با سه مولفه $\mathbf{S} := (S_x, S_y, S_z)$ توصیف می شود. همچنانکه در فیزیک کلاسیک داریم

$$\{S_x, S_y\} = S_z, \qquad \{S_y, S_z\} = S_x, \qquad \{S_z, S_x\} = S_y, \tag{19}$$

درفیزیک کوانتومی این خاصیت با سه عملگرِ $\hat{\mathbf{S}} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$ توصیف می شود که رابطه جابجایی زیر را دارند:

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z, \qquad [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x, \qquad [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y. \tag{20}$$

همانطور که در بیان اصول موضوع گفتیم، بعد فضای هیلبرت می بایست چنان باشد که بتوان عملگرها و روابط جابجایی بین آنها را در آن نمایش داد. بنابراین در این جا می بایست از خود سوال کنیم که چنین روابطی را می بایست در چه فضای هیلبرتی نشان داد. ساده ترین حالتِ غیر بدیهی آن است که فرض کنیم فضای هیلبرت دو بعدی است. خواننده می تواند تحقیق کند که ماتریس های زیر در چنین فضایی نمایشی از عملگرهای فوق هستند:

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x, \qquad S_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y, \qquad S_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z, \tag{21}$$

که در آن σ ها ماتریس های پاوولی هستند. ذراتی که اسپین آنها با یک فضای هیلبرت دو بعدی توصیف می شود ذرات اسپین $1/2$ خوانده می شوند. این که آیا چنین ذراتی در طبیعت وجود دارند یا خیر سوالی است که می بایست پاسخ ان را در آزمایشگاه جستجو کرد و پاسخ آن به شرحی که درپایان این درس خواهیم دید مثبت است. در درس های آینده خواهیم دید که ذرات با اسپین های بالاتر نیز وجود دارند که برای آنها می بایست بعد فضای هیلبرت بزرگ تر ولی همچنان محدود است.
حال به شرح اصول موضوع مکانیک کوانتومی برای این مثال می پردازیم.
از آنجا که فضای هیلبرت دو بعدی است هر بردار در این فضا را می توانیم به شکل زیر بنویسیم:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \tag{22}$$

از آنجا که عملگرهای S_x و S_y و S_z باهم جابجا نمی شوند، یک مجموعه ماکزیمال تنها از یکی از این عملگرها تشکیل می شود که می توانیم آن را S_x S_y یا S_z بگیریم. خواننده می تواند براحتی تحقیق کند که هیچ ماتریس دو بعدی بجز ماتریس واحد وجود ندارد که با بتوان به این مجموعه ماکزیمال یک عضوی اضافه کرد. ویژه مقادیر این سه عملگر عبارتند از $\frac{\hbar}{2}$ یا $-\frac{\hbar}{2}$. ویژه بردارهای این سه عملگر را به ترتیب زیر نشان می دهیم:

www.Endbook.net

الف : برای S_x

$$|x,+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}, \qquad |x,-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}. \tag{23}$$

ب : برای S_y

$$|y,+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\i\end{pmatrix}, \qquad |y,-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-i\end{pmatrix}. \tag{24}$$

ج: برای S_z

$$|z,+\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \qquad |z,-\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}. \tag{25}$$

اگر ذره ای در حالت $|\psi\rangle$ باشد، مطابق با اصول موضوع اگر هرکدام از مشاهده پذیرهای S_y S_x یا S_z را از آن اندازه گیری کنیم فقط دو مقدار $\frac{\hbar}{2}$ و $\frac{-\hbar}{2}$ را بدست می آوریم. فرض کنید که حالت اولیه $|z,+\rangle$ باشد. دراین صورت اگر اندازه گیری S_z را روی این حالت انجام دهیم احتمال بدست آوردن مقدار $\frac{\hbar}{2}$ برابر با یک و احتمال بدست آوردن مقدار $-\frac{\hbar}{2}$ برابر با صفر خواهد بود. به همین دلیل حالت $|z,+\rangle$ را حالتی می گوییم که اسپین آن در راستای z مثبت است. متشابهاً حالت $|z,-\rangle$ را حالتی می گوییم که اسپین آن در راستای z منفی است. این تعبیر برای دیگر حالت ها مثل $|x,\pm\rangle$ و $|y,\pm\rangle$ نیز صادق است.

ممکن است فکر کنیم که حالت $|z+\rangle$ حالتی است که در آن مولفه اسپین در راستای x و y صفراست. ولی این تصور درست نیست چون هرگاه بخواهیم این مولفه ها را تعیین کنیم می بایست این خصلت ها را«اندازه گیری» کنیم. اما با اندازه گیری S_x روی حالت $|z,+\rangle$ بازهم تنها به دو نتیجه‌ی $\frac{\hbar}{2}$ و $-\frac{\hbar}{2}$ خواهیم رسید و اگر بخواهیم S_y روی حالت این حالت اندازه گیری کنیم بازهم تنها به دو نتیجه‌ی $\frac{\hbar}{2}$ و $-\frac{\hbar}{2}$ خواهیم رسید.
دیدیم که عملگری که متناظر با اندازه گیری اسپین درجهت z است، $S_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$ است. همچنین عملگرهایی که متناظر با اندازه گیری های اسپین درجهات x و y بودند متناظربودند با $S_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x$ و $S_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y$. به طور طبیعی عملگری که متناظرباندازه گیری اسپین درجهت دلخواه $\hat{n} = (n_1, n_2, n_3)$ است عبارت است از $S_n = \frac{\hbar}{2}\hat{n}\cdot\sigma$ که درآن

$$n\cdot\sigma = \begin{pmatrix} n_3 & n_1 - in_2 \\ n_1 + in_2 & -n_3 \end{pmatrix}. \tag{26}$$

این عملگردرخاصیت $(\nu\cdot\sigma)^2 = I$ صدق می کند. بنابراین ویژه مقادیر آن برابرند با 1 و -1. این ویژه بردارها را با $|n,+\rangle$ و $|n,-\rangle$ نشان می دهیم:

$$(n\cdot\sigma)|n,+\rangle = |n,+\rangle$$

www.Endbook.net

$$(n \cdot \sigma)|n,-\rangle = -|n,-\rangle \tag{27}$$

کمی محاسبه نشان می دهد که شکل صریح این ویژه بردارها عبارت است از:

$$|n,+\rangle = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi} \end{pmatrix}, \tag{28}$$

و

$$|n,-\rangle = \begin{pmatrix} \sin\frac{\theta}{2} \\ -\cos\frac{\theta}{2}e^{i\phi} \end{pmatrix}. \tag{29}$$

حال می پرسیم وقتی که ذره درحالت $|n,+\rangle$ است اندازه گیری اسپین آن درجهت z باچه احتمالی مقدار $+\frac{\hbar}{2}$ و با چه احتمالی مقدار $-\frac{\hbar}{2}$ را بدست خواهد داد. برای این کار کافی است که عملگرهای مصور $P_z(+)$ و $P_z(-)$ را بدست بیاوریم. داریم

$$P_{z,+} = |z,+\rangle\langle z,+| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad P_{z,-} = |z,-\rangle\langle z,-| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{30}$$

درنتیجه بدست می آوریم:

$$\begin{aligned} Pr(z+,n) &= \langle n,+|P_{z,+}|n,+\rangle = \cos^2\frac{\theta}{2}, \\ Pr(z-,n) &= \langle n,+|P_{z,-}|n,+\rangle = \sin^2\frac{\theta}{2}. \end{aligned} \tag{31}$$

به همین ترتیب خواهیم داشت:

$$P_{x,+} = |x,+\rangle\langle x,+| = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \qquad P_{x,-} = |x,-\rangle\langle x,-| = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \tag{32}$$

$$\begin{aligned} Pr(x+,n) &= \langle n,+|P_{x,+}|n,+\rangle = \frac{1}{2}(1+\sin\theta\cos\phi), \\ Pr(x-,n) &= \langle n,+|P_{x,-}|n,+\rangle = \frac{1}{2}(1-\sin\theta\cos\phi). \end{aligned} \tag{33}$$

www.Endbook.net

و بالاخره

$$P_{y,+} = |y,+\rangle\langle y,+| = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} \qquad P_{y,-} = |y,-\rangle\langle y,-| = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix} \tag{34}$$

$$\begin{aligned} Pr(y+,n) &= \langle n,+|P_{y,+}|n,+\rangle = \frac{1}{2}(1+\sin\theta\sin\phi), \\ Pr(y-,n) &= \langle n,+|P_{y,-}|n,+\rangle = \frac{1}{2}(1-\sin\theta\sin\phi). \end{aligned} \tag{35}$$

دقت کنید که وقتی یک ذره در حالت $|\mathbf{n},+\rangle$ است اندازه گیری مولفه آن در هر کدام از جهت های y, x و z فقط و فقط دو مقدارِ $\frac{\hbar}{2}$ و $-\frac{\hbar}{2}$ را بدست می دهد، زیرا ویژه مقادیر مشاهده پذیرهای S_x و S_y و S_z فقط همین دو مقدار هستند. پس مشخصات بردارِ $\mathbf{n}$ یعنی زاویه و امتداد آن در کجا خود را نشان می دهند؟ پاسخ این است که این مشخصات در احتمالات اندازه گیری ها خود را ظاهر می کنند.

می توان متوسط مقادیر اسپین را دراندازه گیری های مختلف بدست آورد.

$$\begin{aligned} \langle S_x\rangle &= \frac{\hbar}{2}\langle\sigma_x\rangle = \frac{\hbar}{2}\langle\sigma_x\rangle = \frac{\hbar}{2}\sin\theta\cos\phi \\ \langle S_y\rangle &= \frac{\hbar}{2}\langle\sigma_y\rangle = \frac{\hbar}{2}\langle\sigma_y\rangle = \frac{\hbar}{2}\sin\theta\sin\phi \\ \langle S_z\rangle &= \frac{\hbar}{2}\langle\sigma_z\rangle = \frac{\hbar}{2}\langle\sigma_z\rangle = \frac{\hbar}{2}\cos\theta. \end{aligned} \tag{36}$$

به یاد بیاوریم که برای ذره ای که در حالت $|\mathbf{n},+\rangle$ قرار داشت نمی توانستیم بگوییم که بردار تکانه زاویه ای اش در راستای $\mathbf{n}$ است ، زیرا قایل شدن به چنین تصویری بلافاصله منجر به تناقض می شد. اما روابط بالا نشان می دهند که چنین تصویری برای مقادیر متوسط درست است. یعنی اگر تعداد بسیارزیادی اندازه گیری روی حالت های یکسانی از ذرات که همگی در حالت $|\mathbf{n},+\rangle$ قرار دارند انجام دهیم، نتایج آن را می توانیم به این صورت تعبیر کنیم که انگار همگی این ذرات تکانه زاویه‌ای شان در راستای بردارِ $\mathbf{n}$ قرار گرفته است.

حال می توانیم دینامیک اسپین را دریک میدان مغناطیسی ثابت حول محور z مطالعه کنیم. هامیلتونی چنین سیستمی را باالهام از فیزیک کلاسیک به شکل زیرمی نویسیم که درآن μ گشتاورمغناطیسی ذره است.

$$H = \mu B S_z = \mu B\frac{\hbar}{2}\sigma_z. \tag{37}$$

درنتیجه عملگرتحول به شکل زیردرمی آید:

www.Endbook.net

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} = e^{-\frac{\mu Bt}{2}\sigma_z} = \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} & 0 \\ 0 & e^{i\omega t} \end{pmatrix}. \tag{38}$$

که درآن

$$\omega := \frac{\mu B}{2}, \tag{39}$$

فرکانس لارمور خوانده می شود. فرض کنید که حالت اولیه حالت $|n,+\rangle$ باشد که درآن $n = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$ یک بردار یکه است. این بردارحالت را به اختصار با $|\theta,\phi\rangle$ نشان می دهیم:

$$|\psi(0)\rangle = |\theta,\phi\rangle. \tag{40}$$

درنتیجه معلوم می شود که منهای یک فاز کلی که در حالت ضرب می شود،

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle = |\theta,\phi+\omega t\rangle. \tag{41}$$

که به معنای آن است که بردارحالت اسپین باسرعت زاویه ای ω حول میدان مغناطیسی می چرخد. برای این بردارحالت خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} \langle S_x(t)\rangle &= \sin\theta\cos(\phi+\omega t) \\ \langle S_y(t)\rangle &= \sin\theta\sin(\phi+\omega t) \\ \langle S_x(t)\rangle &= \cos\theta. \end{aligned} \tag{42}$$

این روابط نشان می دهند که اگر برداری به شکل

$$\langle\vec{S}\rangle(t) := (\langle S_x(t)\rangle, \langle S_y(t)\rangle, \langle S_z(t)\rangle) \tag{43}$$

تعریف کنیم که نشان دهنده متوسط مولفه های اسپین است، آنگاه بردار $\langle\vec{S}\rangle$ همان دینامیکی را دارد که‌یک گشتاورمغناطیسی کلاسیک درمیدان مغناطیسی خواهد داشت.

۴ آزمایش اشترن گرلاخ

آیا این خصلت های شگفت انگیز که از اصول موضوع مکانیک کوانتومی نتیجه می شوند، در طبیعت واقعاً وجود دارند؟ برای پاسخ به این سوال می بایست به آزمایشگاه رفت و ترتیبی داد که در آن بتوان گشتاورزاویه‌ای یک ذره را تعیین کرد. آزمایشی که نخستین بار اشترن و گرلاخ در دهه ۱۹۳۰ انجام دادند، نتایج بالا را تایید می کند.

www.Endbook.net

شکل (۱) بطور شماتیک آزمایشی را نشان می دهد که درآن اتم های یک عنصر مثل نقره از درون یک میدان مغناطیسی که گرادیان آن درراستای z است عبور داده می شوند. این نوع آزمایش را آزمایش اشترن گرلاخ درراستای z می خوانیم و به طور اختصار این اندازه گیری یا آزمایش را با SG_z نمایش می دهیم. توزیع بار الکتریکی ای که در اتم های نقره وجود دارد باعث می شود که یک گشتاور مغناطیسی μ در امتداد گشتاور زاویه ای شان یعنی $\mathbf{S}$ پیدا کنند. از الکترومغناطیس می توان نشان داد که این نسبت چنین نوشته می شود:

$$\mu = g\frac{e}{2m}S, \tag{44}$$

که درآن g یک ثابت است که بستگی به ساختمان ذره دارد.

می دانیم که یک گشتاور مغناطیسی در میدان مغناطیسی تنها دچار چرخش می شود و نیرویی به آن وارد نمی شود. بنابراین اگر باریکه ای از این ذرات را از یک میدان مغناطیسی ثابت عبور دهیم هیچ نیرویی بر آنها وارد نمی شود و نمی توانیم ذرات را برحسب مقدارِ گشتاور مغناطیسی شان یا همان اسپین شان از هم جدا کنیم. امااگر میدان مغناطیسی چنان باشد که در امتداد محور z دارای یک گرادیان باشد، (یعنی جهت آن درجهت z باشد ولی اندازه اش ثابت نباشد و تابعی از z باشد) آنگاه نیرویی درجهت z به این ذرات وارد خواهد شد. برای بدست آوردن نیرو دقت می کنیم که انرژی چنین ذره ای در میدان مغناطیسی برابر است با

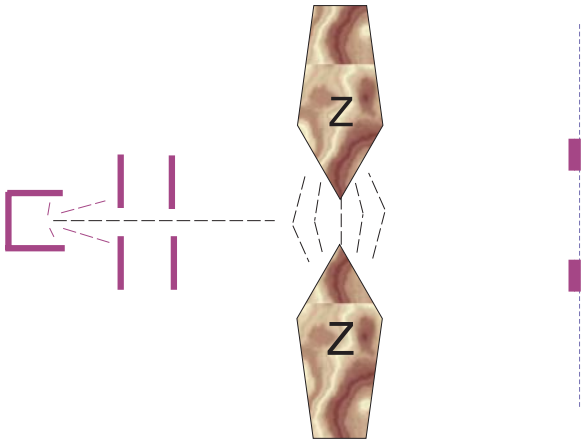
$$U = -\mu \cdot B = -\mu_z B(z) = -g\frac{e}{2m}S_z B(z). \tag{45}$$

نیروی وارد براین ذره در امتداد z برابر خواهد بود با:

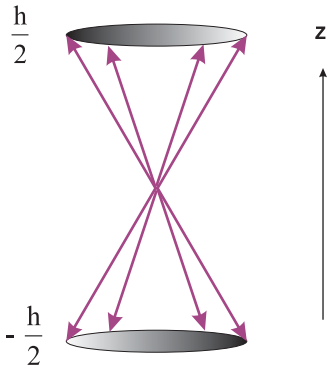
$$F_z = -\frac{\partial}{\partial z}U = g\frac{e}{2m}S_z\frac{\partial B_z}{\partial z}. \tag{46}$$

درنتیجه دراین آزمایش هر ذره ای بسته به اینکه S_z اش چقدر باشد، نیرویی را تجربه می کند و در خروج از دستگاه بدلیل انحرافی که پیدا کرده است به روی نقطه متفاوتی از پرده مقابل می نشیند. اگر S_z چنانچه که از دنیای کلاسیک انتظار داریم هر مقدار پیوسته ای داشته باشد می بایست روی پرده مقابل یک لکه پیوسته از ذرات ببینیم، ولی در آزمایش تنها دو نقطه سیاه می بینیم که نشان می دهد S_z تنها دو مقدارِ $\frac{\hbar}{2}$ و $-\frac{\hbar}{2}$ را داشته است.
ممکن است بگوییم که توزیع گشتاور زاویه ای و درنتیجه مغناطیسی ذراتی که وارد دستگاه SGz در شکل ۱ شده‌اند، به دلیلی چیزی شبیه به شکل ?? بوده است و این توزیع مسلماً نتایج آزمایش بالا را توضیح می دهد.
می توانیم این فرضیه را محک بزنیم. می گوییم ذراتی که روی نقطه بالایی در پرده می نشینند ذراتی هستند که درحالت $|z,+\rangle$ هستند. می توانیم چنین ذراتی را از بقیه ذرات جدا کنیم (به اصطلاح ذراتی را دراین حالت تهیه کنیم) به این ترتیب که دریک آزمایش اشترن گرلاخ SGz جلوی ذراتی را که روی نقطه پایینی می نشینند سد کنیم. این کار به طور شماتیک در شکل ۳ نشان داده شده است.

www.Endbook.net



شکل ۱: آزمایش اشترن گرلاخ : میدان مغناطیسی نایکنواخت درجهت z باریکه ذرات را دو پاره می کند.



شکل ۲: توزیعی کلاسیک از جهات اسپین ها که نتایج آزمایش اشترن گرلاخ SGz را توضیح می دهد.

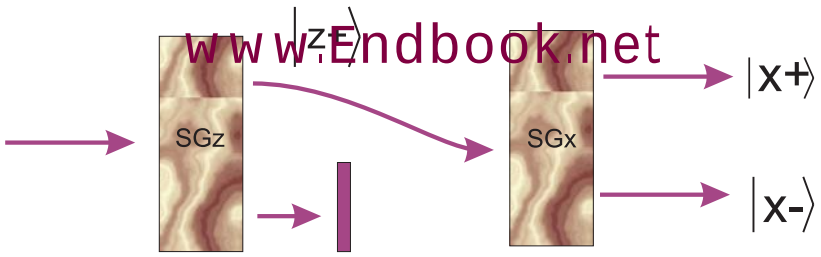
حال می توانیم ذراتی که در حالت $|z+\rangle$ هستند جدا کرده و مولفه اسپین آنها را در راستای x اندازه بگیریم. اگر اسپین یک خصلت کلاسیک بود می بایست مقدار صفر بدست می آوردیم. ولی آزمایشی که شمای آن در شکل ۴ نشان داده شده است، خلاف این را نشان می دهد. دراین آزمایش بازهم می بینیم که اندازه گیری مولفه اسپین S_x روی حالت $|z,+\rangle$ تنها دو مقدار $\frac{\hbar}{2}$ و $-\frac{\hbar}{2}$ بدست می دهد.

در دفاع از فرضیه کلاسیک خود ممکن است بگوییم که در شکل ۴ ذراتی که نهایتاً از خروجی بالای سمت راست خارج می شوند، آن دسته از ذراتی هستند که مولفه اسپین آنها هم در راستای z و هم در راستای x برابر با $\frac{\hbar}{2}$ است. تصور برداری که دارای چنین مولفه هایی باشد آسان است: شکل ۵ .

اگر این فرضیه درست باشد می بایست ذراتی که از خروجی بالای دستگاه ۴ بیرون می آیند دارای مقدار مشخصی (یعنی $\frac{\hbar}{2}$) از مولفه اسپین در جهت z باشند. این موضوع را با یک اندازه گیری تحقیق می کنیم. نتیجه عجیب این اندازه گیری در شکل ٦ نشان داده شده است.

ذراتی که یک بار مولفه S_z آنها تعیین شده و سپس مولفه S_x تعیین شده، این موضوع را که مولفه اسپین آنها قبلا $\frac{\hbar}{2}$ بوده از

www.Endbook.net

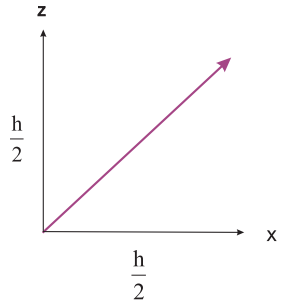


شکل ۴: دو آزمایش اشترن گرلاخ پشت سرِ هم.

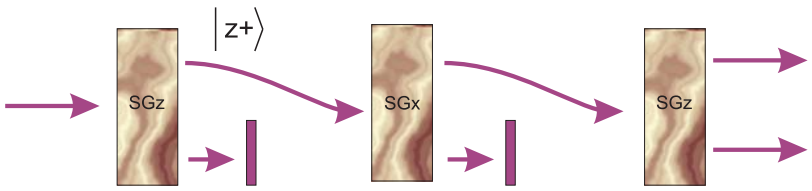
یاد می برند. بنابراین آزمایش مقادیر اندازه گیری را کشف نمی کند بلکه آنها را خلق می کند. به بیان دیگر کمیت های S_x و S_z باهم ناسازگارند و نمی توان آنها را باهم تعیین کرد.

دراین فصل اصول موضوع کوانتومی را بیان کرده ایم و با ساده ترین مثال یعنی ذره اسپین یک دوم، معنای آنها را شرح داده ایم. در فصل آینده این اصول موضوع را برای توصیف حرکت ذرات بکار می بریم.

www.Endbook.net



شکل ۵: ممکن است که فکر کنیم ذراتی که از خروجی بالای آزمایش شکل (۴) بیرون می آیند ذراتی هستند که هم مولفه x و هم مولفه z اسپین آنها معین است.



شکل ٦: سه آزمایش اشترن گرلاخ پشت سرهم.

www.Endbook.net

درس پنجم: کوانتش فضای فاز

۱ مقدمه

هرآنچه را که درباره رفتار موجی و ذره‌ای گفته‌ایم، از پیشنهاد دوبروی گرفته تا اصل عدم قطعیت و معادله شرودینگر همه را می توان به فراموشی سپرد یا به کناری نهاد. همه این نتایج را می توان از اصول موضوع استنتاج کرد. این کاری است که در این درس انجام می دهیم.

۲ عملگرهای مکان و مختصات

مطابق با اصول موضوع برای ذره ای که دریک بعد حرکت می کند، دو عملگر هرمیتی X و P خواهیم داشت که در رابطه جابجایی زیر صدق می کنند:

$$[X, P] = i\hbar I. \tag{1}$$

خواننده ممکن است از غنای این رابطه و نتایجی که از آن گرفته خواهد شد شگفت زده شود. نخستین نتیجه ای که بدست می آید آن است که فضای هیلبرتی که بخواهد درجات آزادی مکان و تکانه را توصیف کند می بایست بی نهایت بعد باشد، زیرا در یک فضای محدود بعد به ازای هردوعملگر داریم

$$tr([A, B]) = tr(AB) - tr(BA) = 0, \tag{2}$$

واین با رابطه$[X, P] = i\hbar$ مباینت دارد. فضای هیلبرت را با $\mathcal{H}$ نمایش می دهیم. از آنجا که X یک عملگر هرمیتی است، ویژه بردارهای آن فضای هیلبرت را جاروب می کنند. ویژه بردارهای این عملگر را $|x\rangle$ و ویژه مقادیر آن را با x نشان می دهیم. (از این به بعد علامت $\hat{}$ را بر روی عملگرها نخواهیم نوشت.)

$$X|x\rangle = x|x\rangle. \tag{3}$$

اگر بخواهیم این حالت ها را مطابق با اصول مکانیک کوانتومی تعبیر کنیم باید بگوییم که حالت $|x\rangle$ حالتی است که درآن ذره درست درمکان x قراردارد. زیرا$|x\rangle$ ویژه بردارِ عملگر هرمیتیِ X است که به مشاهده پذیر مکان نسبت داده شده است و

www.Endbook.net

مطابق با اصل موضوع اندازه گیری هرگاه این مشاهده پذیر را اندازه بگیریم مقدار x را بدست می آوریم.

از کجا معلوم است که ویژه مقدارهای x مقادیر پیوسته‌ای اختیار می کنند. برای پاسخ گویی به این سوال رابطه‌ای را استنتاج می کنیم که در آینده فواید فراوان دیگری نیز در بر دارد.
مطابق با لم هاسدورف می توانیم از رابطه $[X,P]=i\hbar$ نتیجه بگیریم که

$$e^{\frac{i}{\hbar}a\ P}Xe^{-\frac{i}{\hbar}a\ P}=X+a. \tag{4}$$

حال فرض کنید که $X|x\rangle=x|x\rangle$. و قرار دهید $|\phi\rangle=e^{-\frac{i}{\hbar}a\ P}$ که درآن a یک عدد حقیقی دلخواه است. از رابطه فوق نتیجه می گیریم که

$$X|\phi\rangle=Xe^{-\frac{i}{\hbar}a\ P}|x\rangle=e^{-\frac{i}{\hbar}a\ P}(X+a)|x\rangle=(x+a)|\phi\rangle. \tag{5}$$

بنابراین هرگاه $|x\rangle$ یک ویژه مقدارِ X باشد، $e^{-\frac{i}{\hbar}a\ P}|x\rangle$ نیز یک ویژه بردار با ویژه مقدارِ $x+a$ است. این رابطه را به شکل زیر می نویسیم:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}a\ P}|x\rangle=|x+a\rangle. \tag{6}$$

بنابراین x مقادیر پیوسته ای از $-\infty$ تا ∞ رااختیارمی کند. این رابطه بیان می کند که عملگر $e^{-\frac{i}{\hbar}a\ P}$ عمل انتقال را در پایه مختصات انجام می دهد. X یک عملگرهرمیتی است، مقادیر ویژه یعنی x ها حقیقی بوده‌و بردارهای ویژه متناظر با مقادیر ویژه متفاوت آن بریکدیگر عمود هستند، یعنی

$$\langle x|x'\rangle=0 \qquad \text{اگر} \qquad x\neq x'. \tag{7}$$

هم چنین این ویژه بردارهایک پایه کامل برای فضا تشکیل می دهند یعنی

$$\int dx|x\rangle\langle x|=I. \tag{8}$$

باید دقت کنیم که حالت $|x\rangle$ یک حالت فیزیکی نیست زیرا هرنوع وسیله اندازه گیری که برای اندازه گیری مکان یک ذره بکاربریم، مثل وقتی که ازیک پرده فلورسانس برای تعیین مکان یک ا لکترون استفاده می کنیم، حتماً دارای قدرت تفکیک محدودی است و تنها می تواند مکان یک ذره را دریک بازه مثل $(x-a,x+a)$ تعیین کند. حالت چنین ذره ای را می توان با $|x-a,x+a\rangle$ نشان داد که یک حالت فیزیکی بهنجاراست یعنی نرم آن یک است. ولی کارکردن با این حالت ها ساده نیست (زیرا بایکدیگر همپوشانی دارند و نمی توان ازآنها به عنوان یک پایه استفاده کرد) و بناکردن ساختمان مکانیک کوانتومی برروی

www.Endbook.net

آنها دشوار و بی حاصل است. بنابراین بجای این حالت ها ازحالت های ایده آل $|x\rangle$ استفاده می کنیم که اگرچه فیزیکی نیستند ولی دارای خواص جالب و مهمی هستند. می توان این حالت ها به عنوان یک پایه مناسب برای بسط بردارهای حالت استفاده کرد.

حالتی مثل $|\psi\rangle$ تصورکنید. باتوجه به رابطه کامل بودن پایه یعنی رابطه 8 این حالت را می توان به صورت زیربسط داد:

$$|\psi\rangle = \int dx|x\rangle\langle x|\psi\rangle =: \int dx|x\rangle\psi(x). \tag{9}$$

دررابطه آخر نماد $\psi(x)$ را بجای $\langle x|\psi\rangle$ بکاربرده ایم. $\psi(x)$ تابع موج حالت $|\psi\rangle$ درفضای مختصات خوانده می شود. این تابع درواقع مولفه بردار حالت $|\psi\rangle$ درپایه $|x\rangle$ است.

این رابطه بیان می کند که ضریب بسط، یعنی $\psi(x) := \langle x|\psi\rangle$ دامنه احتمال یافتن ذره در نقطه x است، به عبارت دیگر $|\langle x|\psi\rangle|^2$ چگالی احتمال یافتن ذره درنقطه x است و $|\psi(x)|^2\ dx$ احتمال یافتن ذره دربازه‌ای به پهنای dx حول نقطه x است.

دیدیم که هرگاه $x \neq x'$ باشد آنگاه $\langle x|x'\rangle = 0$. می خواهیم ببینیم که درحالتِ $x = x'$، این ضرب داخلی چقدراست. برای این کار کافی است که طرفین رابطه 9 را در $\langle x'|$ ضرب کنیم. خواهیم داشت:

$$\langle x'|\psi\rangle = \int dx\langle x'|x\rangle\langle x|\psi\rangle, \tag{10}$$

ویا

$$\psi(x') = \int dx\langle x|x'\rangle\psi(x). \tag{11}$$

حال اگر این رابطه را با آنچه که دردرس دوم دیده ایم مقایسه کنیم درمی یابیم که $\langle x'|x\rangle$ چیزی نیست جز تابع دلتای دیراک یعنی

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x'). \tag{12}$$

آنچه که تا کنون گفتیم به طور کامل برای عملگر P نیز صادق است. بنابراین تنها به نوشتن رابطه ها و تفسیر تابع موج می پردازیم.
می توان ویژه بردارهای عملگر P را به عنوان پایه ای برای فضای هیلبرت درنظرگرفت:

$$\begin{aligned} &P|p\rangle = p|p\rangle \\ &\langle p|p'\rangle = \delta(p - p') \\ &\int dp|p\rangle\langle p| = I. \end{aligned} \tag{13}$$

www.Endbook.net

حالت $|p\rangle$ حالت ایده آلی است که ازآن به حالتی تعبیرمی کنیم که ذره دقیقاً تکانه p دارد.

خواننده به همان ترتیب می تواند ثابت کند که

$$e^{\frac{i}{\hbar}q\ X}|p\rangle = |p+q\rangle. \tag{14}$$

بنابراین ویژه مقدارهای عملگرِ P نیز مقادیر حقیقی از $-\infty$ تا ∞ را اختیار می کنند .

هربردار حالت ِدلخواهِ $|\psi\rangle$ را می توان برحسب این پایه نیز بسط داد:

$$|\psi\rangle = \int dp|p\rangle\langle p|\psi\rangle = \int dp\tilde{\psi}(p)|p\rangle. \tag{15}$$

که درآن $\tilde{\psi}(p)$ تابع موج درفضای تکانه خوانده می شوند.
$\tilde{\psi}(p)$ دامنه احتمال این است که دراندازه گیری تکانه ذره ای که درحالت $|\psi\rangle$ قرار دارد مقدار p ظاهرشود. به عبارت ساده تر چگالی احتمال یافتن ذره مورد نظر با تکانه p با تابع $|\tilde{\psi}(p)|^2$ داده می شود. داریم

$$\langle p|P|p'\rangle = p'\delta(p-p') = p\delta(p-p'). \tag{16}$$

هم چنین اثر عملگر P روی توابع موج درفضای تکانه آن است که $\tilde{\psi}(p)$ را به $p\tilde{\psi}(p)$ تبدیل می کند یعنی

$$P: \quad \tilde{\psi}(p) \longrightarrow p\tilde{\psi}(p). \tag{17}$$

به عبارت دیگر وقتی که درپایه تکانه کارمی کنیم می توانیم براحتی به جای عملگرِ P، مقدارِ p را قراردهیم.

۳ رابطه بین پایه های مختصات و تکانه

اکنون سوال می کنیم که چه رابطه ای بین پایه‌ی تکانه و $\{|p\rangle\}$ پایه مختصات $\{|x\rangle\}$ وجود دارد؟ دیدیم که

$$e^{\frac{-i}{\hbar}aP}|x\rangle = |x+a\rangle. \tag{18}$$

حال ازرابطه 18 می توانیم ضرب داخلی $\langle p|x\rangle$ را بدست آوریم. برای این کارطرفین رابطه 18 را در $\langle p|$ ضرب می کنیم و بدست می آوریم

$$\langle p|e^{\frac{-i}{\hbar}aP}|x\rangle = \langle p|x+a\rangle, \tag{19}$$

www.Endbook.net

ویا

$$e^{\frac{-i}{\hbar}ap}\langle p|x\rangle = \langle p|x+a\rangle, \tag{20}$$

که حل آن به فرم زیراست:

$$\langle p|x\rangle = A\, e^{\frac{-i}{\hbar}xp}, \tag{21}$$

ویا

$$\langle x|p\rangle = Ae^{\frac{i}{\hbar}px}, \tag{22}$$

که درآن A یک ثابت است که می بایست تعیین شود.
برای تعیین A به رابطه زیرتوجه می کنیم:

$$\begin{aligned}\delta(x-x') &= \langle x|x'\rangle = \int dp\langle x|p\rangle\langle p|x'\rangle = \int dpAe^{\frac{i}{\hbar}xp}Ae^{\frac{-i}{\hbar}x'p} \\ &= A^2\int dpe^{\frac{i}{\hbar}(x-x')p} = A^2 2\pi\hbar\delta(x-x').\end{aligned} \tag{23}$$

بنابراین خواهیم داشت $A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ و درنتیجه

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}xp}. \tag{24}$$

هرگاه بخواهیم این رابطه را براساس اصول موضوع مکانیک کوانتومی تفسیرکنیم باید بگوییم که ذره ای که دقیقاً با تکانه p درحرکت است دامنه احتمال یافتن آن درنقطه ای مثل x برابراست با $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}xp}$. این تابع نشان دهنده یک موج تخت است که که طول موج آن از رابطه $\lambda = \frac{h}{p}$ بدست می آید. بنابراین توانسته ایم دوگانگی موج و ذره و اصل دوبرویی را از اصول موضوع خود استخراج کنیم و نیازی نیست که آن ها رابه عنوان یافته های تجربی جداگانه ای درزیربنای مکانیک کوانتومی بکاربریم. یک بارکه اصول موضوع مکانیک کوانتومی را بپذیریم همه نتایج نظری و تجربی را باید بتوانیم ازآن اصول استخراج کنیم. نکته دیگری که درباره این رابطه اهمیت دارد آن است که احتمال (ونه دامنه احتمال) یافتن یک ذره که درحالت $|p\rangle$ قراردارد برابراست با مقدارثابت $\frac{1}{2\pi\hbar}$. یعنی احتمال یافتن ذره درتمام نقاط فضا یکسان و درنتیجه احتمال کل برابر با بی نهایت است. این امر ناشی از ایده آل بودن حالت $|p\rangle$ است، زیرا این حالت نشان دهنده آن است که با یک اندازه گیری توانسته ایم تکانه یک ذره را با دقت بی نهایت و با تفکیک صفر دقیقاً تعیین کنیم ومی دانیم که هرنوع اندازه گیری قدرت تفکیک محدودی دارد. درعمل تنهامی توانیم حالت هایی تهیه کنیم که تکانه آن ها تقریباً معین باشد. چنین حالت هایی را می توان به شکل زیرنشان داد:

$$|\phi\rangle = \int dp\phi(p)|p\rangle \tag{25}$$

www.Endbook.net

که درآن $\phi(p)$ تابعی است که دراطراف یک تکانه مثل $\overline{p}$ مقدار غیرصفردارد.
حال که ضرب داخلی $\langle x|p\rangle$ معلوم شده است می توانیم رابطه بین تابع موج درفضای مختصات و تابع موج درفضای تکانه را پیداکنیم: داریم

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle = \int dx\langle p|x\rangle\langle x|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dx e^{-i\frac{px}{\hbar}}\psi(x),$$
$$\tilde{\psi}(x) = \langle x|\psi\rangle = \int dp\langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dp e^{i\frac{px}{\hbar}}\tilde{\psi}(p). \quad (26)$$

بنابراین تابع موج درفضای تکانه یعنی $\tilde{\psi}(p)$ و تابع موج درفضای مختصات یعنی $\psi(x)$ تبدیل فوریه یکدیگر هستند.

۱.۳ عنصرماتریسی عملگرها درپایه های مختصات و تکانه

واضح است که هرکدام از عملگرهای X و P درپایه مربوط به خود قطری هستند به این معنا که

$$\langle x'|X|x\rangle = x\delta(x-x') \qquad \langle p'|P|p\rangle = p\delta(p-p'). \quad (27)$$

برای اینکه عملگر X را درپایه $\{|p\rangle\}$ بنویسیم به ترتیب زیرعمل می کنیم:

$$\begin{aligned}\langle p'|X|p\rangle &= \langle p'|X(\int dx|x\rangle\langle x|p\rangle) = \int dx x\langle p'|x\rangle\langle x|p\rangle \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int dx x e^{ix\frac{p-p'}{\hbar}} = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dx(i\hbar\frac{\partial}{\partial p})e^{ix\frac{p'-p}{\hbar}} \\ &= i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\delta(p-p'). \end{aligned} \quad (28)$$

هم چنین می توان عملگر P را درپایه $\{|x\rangle\}$ نوشت. برای این کارتوجه می کنیم که

$$\begin{aligned}\langle x'|P|x\rangle &= \langle x'|P(\int dp|p\rangle\langle p|x\rangle) = \int dp p\langle x'|p\rangle\langle p|x\rangle \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int dp p e^{-ip\frac{x-x'}{\hbar}} = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dp(i\hbar\frac{\partial}{\partial x})e^{-ip\frac{x-x'}{\hbar}} \\ &= i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x'), \end{aligned} \quad (29)$$

www.Endbook.net

ویا

$$\langle x|P|x'\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x'). \tag{30}$$

به کمک این روابط می توانیم اثر عملگرهای X و P را روی توابع موج چه درنمایش مختصات و چه درنمایش تکانه بدست بیاوریم. می نویسیم:

$$X|\psi\rangle = \int dx X|x\rangle\langle x|\psi\rangle = \int dx x\psi(x)|x\rangle. \tag{31}$$

این رابطه نشان می دهد که اثر عملگر X روی تابع موج $\psi(x)$ به صورت زیراست:

$$X : \psi(x) \longrightarrow x\psi(x). \tag{32}$$

امااثر عملگر تکانه روی تابع موج $\psi(x)$ غیربدیهی است. زیرا

$$\begin{aligned}\langle x|P|\psi\rangle &= \int dx'\langle x|P|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle = \int dx'(\frac{\hbar\partial}{i\partial x}\delta(x-x'))\psi(x') \\ &= \frac{\hbar\partial}{i\partial x}\int dx'\delta(x-x'))\psi(x') = \frac{\hbar\partial}{i\partial x}\psi(x).\end{aligned} \tag{33}$$

که نشان می دهد اثرعملگر P روی تابع موج $\psi(x)$ به صورت مشتق است :

$$P : \psi(x) \longrightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x). \tag{34}$$

به طور مشابه می توان اثر عملگرهای X و P را روی تابع موج درفضای تکانه یعنی $\tilde{\psi}(p)$ بدست آورد. بامحاسبات مشابه بدست می آوریم:

$$\begin{aligned}\langle p|P|\psi\rangle &= p\langle p|\psi\rangle \\ \langle p|X|\psi\rangle &= i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\tilde{\psi}(p).\end{aligned} \tag{35}$$

که به طور خلاصه نشان دهنده اثرات زیرروی تابع موج درفضای تکانه است:

$$\begin{aligned}P &: \tilde{\psi}(p) \longrightarrow p\tilde{\psi}(p) \\ X &: \tilde{\psi}(p) \longrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\tilde{\psi}(p).\end{aligned} \tag{36}$$

www.Endbook.net

بالاخره می توان اثر عملگر $T_a := e^{\frac{i}{\hbar}aP}$ را روی تابع موج درفضای مختصات بدست آورد: باتوجه به اینکه $T_a := e^{-\frac{i}{\hbar}aP}|x\rangle = |x+a\rangle$ خواهیم داشت

$$\langle x|e^{-\frac{i}{\hbar}aP}|\psi\rangle = \langle x-a|\psi\rangle. \tag{37}$$

درنتیجه اثر عملگر T_a روی تابع موج $\psi(x)$ چنین است:

$$(T_a := e^{-\frac{i}{\hbar}aP}) : \psi(x) \longrightarrow \psi(x-a). \tag{38}$$

۴ رابطه عدم قطعیت

در درس های پیشین به طور کیفی رابطه عدم قطعیت هایزنبرگ را بیان کردیم. اکنون وقت آن است که شکل دقیق این رابطه را بیان کنیم و آن را از اصول موضوع نتیجه بگیریم. هرگاه روی حالت $|\psi\rangle$ اندازه گیری مختصه X یا تکانه P انجام دهیم، میزان عدم یقینی را که در این اندازه گیری ها بدست می آوریم می توانیم به صورت زیر بنویسیم:

$$\Delta X = \sqrt{\langle X^2\rangle - \langle X\rangle^2}, \qquad \Delta P = \sqrt{\langle P^2\rangle - \langle P\rangle^2}. \tag{39}$$

باید توجه کنیم که تمام این عناصر ماتریسی روی حالت $|\psi\rangle$ محاسبه شده‌اند، یعنی $\langle X\rangle = \langle\psi|\hat{X}|\psi\rangle$ و الی آخر. رابطه عدم قطعیت بیان می کند که

$$\Delta X \Delta P \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{40}$$

برای اثبات این رابطه دو عملگر زیر را تعریف می کنیم:

$$A := \hat{X} - \langle\hat{X}\rangle, \qquad B := \hat{P} - \langle\hat{P}\rangle. \tag{41}$$

براحتی معلوم می شود که

$$[A, B] = i\hbar. \tag{42}$$

حال حالت های زیر را تعریف می کنیم:

$$|\alpha\rangle = A|\psi\rangle, \qquad |\beta\rangle = B|\psi\rangle. \tag{43}$$

www.Endbook.net

داریم

$$(\Delta X)^2 = \langle\psi|(\hat{X} - \langle\hat{X}\rangle)^2|\psi\rangle = \langle\alpha|\alpha\rangle, \qquad (\Delta P)^2 = \langle\psi|(\hat{P} - \langle\hat{P}\rangle)^2|\psi\rangle = \langle\beta|\beta\rangle. \tag{44}$$

می دانیم که به ازای هر عدد حقیقی λ

$$|| \ |\alpha\rangle - i\lambda|\beta\rangle \ || \geq 0 \tag{45}$$

با باز کردن سمت چپ خواهیم داشت و استفاده از 63 بدست می آوریم:

$$\langle\alpha|\alpha\rangle + \lambda^2\langle\beta|\beta\rangle + \lambda\hbar \geq 0. \tag{46}$$

این رابطه به ازای هر مقدارِ λ برقرار است. از جمله به ازای مقداری از λ که طرف چپ را کمینه می کند. هرگاه این مقدار کمینه یعنی $\lambda = -2\frac{\langle\alpha|\alpha\rangle}{\langle\beta|\beta\rangle}$ را درسمت چپ قرار دهیم به رابطه عدم قطعیت می رسیم.

۵ معادله شرودینگر در پایه های مختصات و تکانه

بنابراصل موضوع چهارم دیدیم که دینامیک حالت های کوانتومی به صورت زیر داده می شود:

$$H|\psi(t)\rangle = i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle. \tag{47}$$

که درآن $H = \frac{P^2}{2m} + V(X)$ هامیلتونی نامیده می شود. دراین بخش می خواهیم این معادله را درپایه مختصات وتکانه تصویرکنیم:
باتصویرکردن این رابطه درپایه مختصات بدست می آوریم:

$$\langle x|\left[\frac{P^2}{2m} + V(X)\right]|\psi(t)\rangle = i\hbar\langle x|\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t). \tag{48}$$

ویا

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial_x^2}\psi(x,t) + V(x)\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t). \tag{49}$$

این معادله دیفرانسیل، معادله شرودینگرنامیده می شود و درواقع چیزی نیست جزتصویر معادله $H|\psi(t)\rangle = i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle$ درپایه مختصات. می توان همین معادله را درپایه تکانه نیز تصویرکرد که دراین صورت به شکل زیرمی آید.

$$\frac{p^2}{2m}\tilde{\psi}(p,t) + V(i\hbar\frac{\partial}{\partial p})\tilde{\psi}(p,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\psi}(p,t). \tag{50}$$

www.Endbook.net

ازآنجا که برای پتانسیل های پیچیده کارکردن با عملگر $V(i\hbar\frac{\partial}{\partial p})$ بسیاردشواراست همیشه معادله دینامیک را درپایه مختصات تصویرمی کنیم .

٦ کوانتش ذره ای که درسه بعد حرکت می کند.

تاکنون برای سادگی به مطالعه ذره ای پرداختیم که دریک بعد حرکت می کند. روابط کوانتش بسادگی برای ذره ای که درسه بعد حرکت می کند درمکانیک کلاسیک حالت این ذره با مختصات $x_1 = x, \quad x_2 = y, \quad x_3 = z$ و تکانه های $p_1 = p_x, \quad p_2 = p_y, \quad p_3 = p_z$ مشخص می شود. بین این مختصات و تکانه ها روابط کروشه پواسون زیر برقرارند.

$$\{x_i, x_j\} = 0 \qquad \{p_i, p_j\} = 0, \qquad \{x_i, p_j\} = \delta_{ij}. \tag{51}$$

درمکانیک کوانتومی روابط کروشه پواسون فوق به تعویضگرهای زیرتبدیل می شوند.

$$[X_i, X_j] = 0, \qquad [P_i, P_j] = 0, \qquad [X_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}. \tag{52}$$

ازآنجا که همه عملگرهای X_i باهم جابجامی شوند می توان ویژه بردارهای مشترک همه آنها را تعیین کرد. این ویژه بردارها را با $|\vec{x}\rangle$ نشان می دهیم:

$$X_i|\vec{x}\rangle = x_i|\vec{x}\rangle. \tag{53}$$

روابط تعامد این ویژه بردارها به صورتِ

$$\langle\vec{x}|\vec{x'}\rangle = \delta^3(\vec{x} - \vec{x'}) \equiv \delta(x - x')\delta(y - y')\delta(z - z'), \tag{54}$$

و روابط تعامد آنها به فرم زیراست:

$$\int d\vec{x}|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}| = I, \qquad d\vec{x} := d^3x = dxdydz. \tag{55}$$

به همین سیاق می توانیم ویژه بردارهای مشترک تکانه هارا تعیین کنیم:

$$P_i|\vec{p}\rangle = p_i|\vec{p}\rangle, \tag{56}$$

www.Endbook.net

باروابط تعامدِ

$$\langle \vec{p}|\vec{p'}\rangle = \delta^3(\vec{p}-\vec{p'}), \tag{57}$$

ورابطه کامل بودنِ

$$\int d\vec{p}|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}| = I. \tag{58}$$

هم چنین داریم

$$\langle \vec{x}|\vec{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{x}\cdot\vec{p}}. \tag{59}$$

عملگرِ $\frac{-i}{\hbar}\vec{a}\cdot\vec{P}$ نقش انتقال دهنده به اندازه بردار $\vec{a}$ را به عهده دارد.

$$e^{\frac{-i}{\hbar}\vec{a}\cdot\vec{P}}|\vec{x}\rangle = |\vec{x}+\vec{a}\rangle. \tag{60}$$

ازاین رابطه می توان نتیجه گرفت

$$\langle \vec{x}|e^{\frac{i}{\hbar}\vec{a}\cdot\vec{P}}|\psi\rangle = \langle \vec{x}+\vec{a}|\psi\rangle. \tag{61}$$

۷ کوانتش بیش ازیک ذره

تاکنون خود رابه کوانتش یک ذره مقید کردیم. دراین بخش می خواهیم کوانتش سیستمی بابیش ازیک ذره را بررسی کنیم. برای سادگی خود رامقید می کنیم به یک سیستم دوذره ای که دریک بعد حرکت می کنند. تمامی مفاهیم دراین سیستم نیز قابل بیان هستند و تعمیم به بیش از دوذره کاملاً سرراست است . درمکانیک کلاسیک حالت این سیستم با چهارمختصه $x_1,\ x_2,\ p_1,\ p_2$ و باکروشه های پوآسون زیرمشخص می شود:

$$\{x_i, x_j\} = \{p_i, p_j\} = 0, \qquad \{x_i, p_j\} = \delta_{ij}. \tag{62}$$

درمکانیک کوانتومی این مشاهده پذیرها با عملگرهای هرمیتی $X_1,\ X_2,\ P_1,\ P_2$ و روابط تعویضگری زیر نمایش داده می شوند:

$$[X_i, X_j] = [P_i, P_j] = 0, \qquad [X_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}. \tag{63}$$

www.Endbook.net

نخستین کاری که باید انجام دهیم آن است که فضای هیلبرتی بسازیم که این روابط درآن نمایش داده شوند. فضای هیلبرت یک ذره راقبلاً ساخته ایم و دیده ایم که چگونه دراین فضا عملگرهای X و P عمل می کنند به نحوی که رابطهٔ $[X,P]=i\hbar\, I$ برقرارمی شود. ازاین موضوع و خواصی که برای ضرب تانسوری فضاهای برداری می شناسیم کمک می گیریم و فضای هیلبرتی می سازیم که روابط 63 درآن برقرارشوند. اگر فضای هیلبرت یک ذره را با $\mathcal{V}$ نمایش دهیم فضای هیلبرت دوذره را $\mathcal{V}\otimes\mathcal{V}$ می گیریم وقرارمی دهیم

$$X_1 := X\otimes I, \qquad X_2 := I\otimes X, \qquad P_1 := P\otimes I, \qquad P_2 := I\otimes P. \tag{64}$$

بنابراین عملگر X_1 روی فضای اول مثل X وروی فضای دوم مثل عملگرواحد عمل می کند باتوصیف مشابهی برای بقیه عملگرها. بنابه خواص ضرب تانسوری عملگرها بدیهی است که بااین تعریف روابط تعویضگری 63 برقرارمی شوند.
تمامی روابطی که احتیاج داریم بدون نیازبه اثبات مستقل از خواصی که برای فضای ضرب تانسوری می شناسیم حاصل می شوند.

برای $\mathcal{V}\otimes\mathcal{V}$ می توانیم پایه‌ای انتخاب کنیم که درآن مکان هردو ذره معلوم است مثل پایهٔ

$$\{|x_1,x_2\rangle := |x_1\rangle\otimes|x_2\rangle\}, \qquad X_1|x_1,x_2\rangle = x_1|x_1,x_2\rangle, \qquad X_2|x_1,x_2\rangle = x_2|x_1,x_2\rangle, \tag{65}$$

ویاپایه‌ای که درآن تکانه هردوذره معلوم است مثل پایهٔ

$$\{|p_1,p_2\rangle := |p_1\rangle\otimes|p_2\rangle\}, \qquad P_1|p_1,p_2\rangle = p_1|p_1,p_2\rangle, \qquad P_2|p_1,p_2\rangle = p_2|p_1,p_2\rangle. \tag{66}$$

هرکدام ازاین پایه های متعامد وکامل هستند. برای پایه مختصاتی داریم

$$\langle x_1,x_2|x_1',x_2'\rangle = \langle x_1|x_1'\rangle\langle x_2|x_2'\rangle = \delta(x_1-x_1')\delta(x_2-x_2'), \tag{67}$$

و

$$\begin{aligned}\int dx_1dx_2|x_1,x_2\rangle\langle x_1,x_2| &= \int dx_1dx_2(|x_1\rangle\otimes|x_2\rangle)(\langle x_1|\otimes\langle x_2|)\\ = \int dx_1|x_1\rangle\langle x_1|\otimes\int dx_2|x_2\rangle\langle x_2 &= I\otimes I = I.\end{aligned} \tag{68}$$

عین روابط برای پایه تکانه نیزبرقراراست:

$$\langle p_1,p_2|p_1',p_2'\rangle = \langle p_1|p_1'\rangle\langle p_2|p_2'\rangle = \delta(p_1-p_1')\delta(p_2-p_2'), \tag{69}$$

www.Endbook.net

و

$$\int dp_1 dp_2 |p_1, p_2\rangle\langle p_1, p_2| = I. \tag{70}$$

هرگاه $|\psi\rangle$ حالت سیستم دوذره ای داده شود توابع موج آن آن درفضای مختصات وتکانه عبارت خواهند بوداز

$$\psi(x_1, x_2) = \langle x_1, x_2|\psi\rangle \qquad \tilde{\psi}(p_1, p_2) = \langle p_1, p_2|\psi\rangle. \tag{71}$$

بالاخره هرگاه دوذره بایکدیگربرهم کنش نداشته باشند هامیلتونی آنهابه شکل زیرخواهد بود:

$$H = H_1(X_1, P_1) + H_2(X_2, P_2) = H_1(X, P) \otimes I + I \otimes H_2(X, P). \tag{72}$$

تحت این شرایط ویژه توابع H بااستفاده از ویژه توابعِ H_1 و H_2 بدست می آیند. فرض کنید

$$H_1|\phi_n\rangle = E_n^{(1)}|\phi_n\rangle, \qquad H_2|\chi_m\rangle = E_m^{(2)}|\chi_m\rangle. \tag{73}$$

دراین صورت به ازای هردوویژه حالت ازنوع فوق یک ویژه حالت $|\Psi_{n,m}\rangle := |\phi_n\rangle \otimes |\chi_m\rangle$ خواهیم داشت که انرژی آن برابراست با $E_{n,m} := E_n^{(1)} + E_m^{(2)}$:

$$\begin{aligned} & H|\Psi_{n,m}\rangle = (H_1 \otimes I + I \otimes H_2)(|\phi_n\rangle \otimes |\chi_m\rangle) \\ = \;& (H_1|\phi_n\rangle) \otimes |\chi_m\rangle + |\phi_n\rangle) \otimes H_2|\chi_m\rangle \\ = \;& E^{(1)}|\phi_n\rangle \otimes |\chi_m\rangle + E_m^{(2)}|\phi_n\rangle \otimes |\chi_m\rangle = E_{n,m}|\Psi_{n,m}\rangle. \end{aligned} \tag{74}$$

www.Endbook.net

درس ششم: یافتن طیف انرژی برای چند پتانسیل ساده

۱ مقدمه

دراین درس می خواهیم طیف انرژی یک ذره را که در پتانسیل ساده ای قرار دارد تعیین کنیم. اغلب مسایلی که حل می کنیم یک بعدی اند و به نظر خیلی ساده به نظر می رسند، آنقدر ساده که به نظر نمی رسد هیچ مسئله واقعی را بتوان با آنها بررسی کرد. ولی این دریافت درست نیست زیرا خصلت های اصلی بسیاری از مسایل واقعی را درهمین مثال های ساده می توان دید. مسئله‌اصلی ای که درمکانیک کوانتومی با آن روبرو هستیم آن است که طیف انرژی هامیلتونی یک سیستم را پیدا کنیم. این سیستم می تواند بسیارساده مثل یک ذره دریک چاه پتانسیل یک بعدی و یا یک نوسانگر هارمونیک یک بعدی باشد ویا یک سیستم بس ذره‌ای بسیار پیچیده مثل یک جامد. چرا یافتن طیف انرژی تا این اندازه مهم است ؟ نخستین دلیل اش آن است که اگر یک سیستم را به حال خود رها کنیم این سیستم در حالت پایه یعنی حالتی که کمترین انرژی را دارد قرار خواهد داشت، بنابراین دانست حالت پایه یک سیستم اهمیت بسیار دارد. در دمای غیرصفر یک سیستم با احتمال $P = \frac{1}{Z}e^{-\beta E}$ که درآن Z یک ثابت است در حالتی با انرژی E قرار می گیرد. و بالاخره هر گاه ویژه حالت های انرژی را تعیین کنیم آنگاه می توانیم دینامیک سیستم را در طول زمان به طور کامل تعیین کنیم. بنابراین نخستین مسئله ای که با آن روبرو هستیم آن است که طیف انرژی هامیلتونی را پیدا کنیم، که به معنای حل مسئله ویژه مقداری زیراست:

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle. \tag{1}$$

برای یک ذره که در یک بعد و تحت پتانسیل $V(X)$ حرکت می کند این معادله به شکل زیراست:

$$\left(\frac{P^2}{2m} + V(X)\right)|\psi\rangle = E|\psi\rangle. \tag{2}$$

هرگاه این رابطه را در پایه مختصات تصویر کنیم به شکل زیر در می آید:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial_x^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \tag{3}$$

دراین حالت E را انرژی یا تراز انرژی و $\psi(x)$ را ویژه تابع می گویند. گاهی اوقات به این معادله معادله شرودینگرِ مستقل از زمان نیز می گویند اگر چه این نامگذاری ِخوبی نیست. ماهم دراین درس از این معادله با نام معادله شرودینگر یاد می کنیم.

www.Endbook.net

۲ چاه پتانسیل یک بعدی با عمق بی نهایت

ساده ترین مسئله‌ای که می توانیم معادله شرودینگر را برای آن حل کنیم، چاه پتانسیل یک بعدی با عمق بی نهایت است. شکل پتانسیل عبارت است از:

$$V(x) = \begin{cases} \infty x \leq 0, \\ 0 \qquad\qquad 0 \leq x \leq L, \\ \infty \qquad\qquad L \leq x \end{cases} \tag{4}$$

بنابراین ذره در ناحیه‌ی $[0, L]$ کاملاً آزاد است ولی در نقاط 0 و L یعنی در دیواره های پتانسیل با یک نیروی بی نهایت مواجه شده و برمی گردد. احتمال وجود ذره در بیرون از پتانسیل برابر باصفراست. برای حل معادله شرودینگر کافی است که در ناحیه‌ی $[0, L]$ معادله شرودینگر را حل کنیم. دراین ناحیه داریم

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x). \tag{5}$$

با تعریف

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \longrightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{6}$$

این معادله به شکل زیر درمی آید

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\psi(x), \tag{7}$$

که حل عمومی آن به شکل زیراست

$$\psi(x) = A\cos kx + B\sin kx. \tag{8}$$

اما می دانیم که تابع موج می بایست در دیواره ها برابر با صفر باشد و این تنها وقتی امکان پذیراست که داشته باشیم

$$A = 0, \qquad kL = n\pi. \tag{9}$$

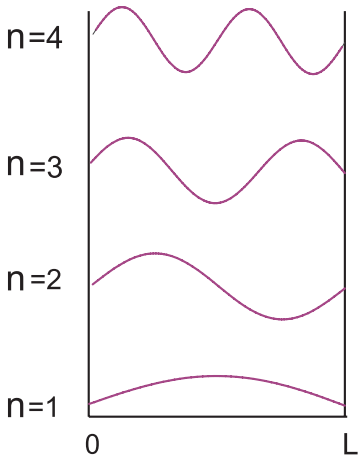
بنابراین تراز های انرژی و ویژه توابع مربوط به آنها عبارت خواهند بود از:

$$E_n = \frac{\hbar^2\ n^2\pi^2}{2mL^2}, \tag{10}$$

و

$$\psi_n(x) = A\sin\frac{n\pi}{L}x, \tag{11}$$

www.Endbook.net



شکل ۱: چند تابع موج اولیه (حالت پایه و چند حالت برانگیخته) در چاه پتانسیل بی نهایت عمیق یک بعدی. فاصله سطوح انرژی به مقیاس رسم نشده‌است.

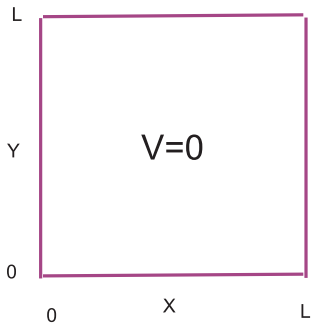
که درآن A یک ثابت است که توسط بهنجارش تابع موج تعیین می شود. شکل ۱ چند تابع موج اولیه را نشان می دهد.
چاه پتانسیل یک بعدی بیشتر ارزش آموزشی دارد. تعمیم این پتانسیل به دو بعد و سه بعد جالب تر است زیرا موقعیت های واقعی تری را می توان باتقریب خوب توسط آنها نشان داد. در فصل بعد معادله شرودینگر را برای چاه پتانسیل دوبعدی حل می کنیم.

۳ چاه پتانسیل مربعی

ذره‌ای را در نظر بگیرید که توسط یک پتانسیل جاذبه بسیارقوی در جایی گیر افتاده است و نمی تواند از آن ناحیه فرار کند. در بعضی از موارد شکل پتانسیل چنان است که ذره درون این ناحیه تقریباً احساس آزادی می کند مثل این که نیرویی به آن وارد نمی شود. به عنوان مثال با ساده سازی بسیار زیاد می توان گفت که در هسته های سنگین هستک ها یعنی پروتون و نوترون هایی که باهم جفت می شوند و تشکیل یک هسته‌ی آلفا می دهند چنین وضعی دارند. مثال دیگری از این دست الکترونی است که در یک فلز قرار دارد و درون فلز تقریباً آزاد است و فقط نمی تواند از سطح فلز بیرون بیایند. به عنوان اولین تقریب چنین پتانسیل هایی را به صورت یک چاه بی نهایت عمیق در نظر می گیریم که دیواره های آن مانع خروج ذره از چاه می شوند. حل کردن معادله شرودینگر برای چاه های بی نهایت عمیق یک بعدی و یا چاه های بی نهایت عمیق مربعی و مکعبی در بعد دلخواه آسان است. این کاری است که در این بخش انجام می دهیم. حل مسئله چاه پتانسیل برای وقتی که چاه شکل دایره ای یا کروی دارد زحمت بیشتری دارد. این کار را در درس های آینده انجام می دهیم.

چاه پتانسیل مربعی با عمق بی نهایت را درنظرمی گیریم. ابعاد چاه را در هردو راستا برابر با L می گیریم. دردرون چاه ذره درمعادله شرودینگر آزاد با پتانسیل $V = 0$ صدق می کند و تابع موج دردیواره ها می بایست برابر باصفرباشد، شکل ۲.

www.Endbook.net



شکل ۲: چاه پتانسیل مربعی.

بنابراین دردرون چاه معادله زیربرقراراست:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial_x{}^2}+\frac{\partial^2}{\partial_y{}^2})\psi(x,y)=E\psi(x,y). \tag{12}$$

با تعریفِ $k^2:=\frac{2mE}{\hbar^2}$ این معادله به شکل زیردرمی آید:

$$(\partial_x^2+\partial_y^2)\psi(x,y)=-k^2\psi(x,y), \tag{13}$$

که درآن $\partial_x:=\frac{\partial}{\partial_x}$ و $\partial_y:=\frac{\partial}{\partial_y}$.
می توان به روش جداکردن متغیرها معادله فوق را حل کرد. قرارمی دهیم

$$\psi(x,y)=\phi(x)\chi(y) \tag{14}$$

وباجایگذاری آن درمعادله شرودینگر و تقسیم طرفین بر $\phi(x)\chi(y)$ به رابطه زیرمی رسیم

$$\frac{\phi''(x)}{\phi(x)}+\frac{\chi(y)''}{\chi(y)}=-k^2. \tag{15}$$

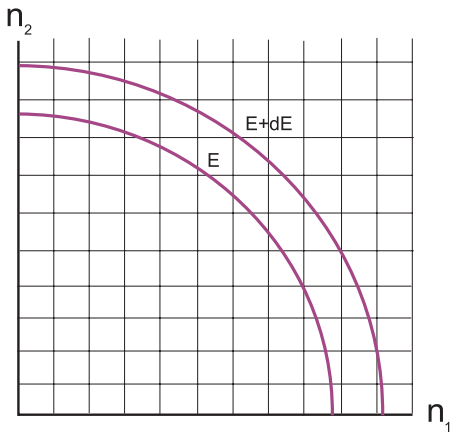
این معادله الزام می کند که $\frac{\phi''(x)}{\phi(x)}$ و $\frac{\chi''(y)}{\chi(y)}$ هردو ثابت باشند. بنابراین

$$\phi''(x)=-k_x^2\phi(x),\qquad \chi''(y)=-k_y^2\chi(y),\qquad k^2=k_x^2+k_y^2. \tag{16}$$

شرایط مرزی آن است که تابع موج دردیواره های پتانسیل برابرباصفرباشد. بنابراین حل این معادلات عبارت خواهند بوداز:

$$\phi(x)=A\sin k_x x,\qquad \chi(y)=B\sin k_y y,\qquad k_xL=n_1\phi,\quad k_yL=n_2\pi. \tag{17}$$

www.Endbook.net



شکل ۳: تعداد حالت هایی که انرژی آنها بین E و $E+dE$ است، به تعداد نقاطی است که بین دو ربع دایره قراردارند.

درنتیجه ویژه تابع موج بهنجارعبارت خواهد بوداز:

$$\psi(x,y) = \frac{2}{L}\sin\frac{n_1\pi}{L}x\sin\frac{n_2\pi}{L}y, \tag{18}$$

باانرژی

$$E_{n_1,n_2} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2+k_y^2) = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{L^2}(n_1^2+n_2^2)$$

. بنابراین هرتراز انرژی با دوعدد کوانتومی $0 < n_1,\ \ n_2$ مشخص می شود. می توانیم دریک دیاگرام دوبعدی به ازای هر جفت عدد کوانتومی (n_1,n_2) یک نقطه با مختصات صحیح در یک دیاگرام دوبعدی رسم کنیم.
حال تمام نقاطی که دریک ربع دایره بامعادله

$$n_1^2+n_2^2 = \frac{2mEL^2}{\pi^2\hbar^2}$$

قراردارند تقریباً یک انرژی دارند. شعاع این دایره برابراست با $R = \frac{L}{\pi\hbar}\sqrt{2mE}$. می گوییم تقریباً زیرا همه نقاط روی این ربع دایره مختصات صحیح ندارند. امابرای انرژی های زیاد می توان باتقریب خوبی تعداد نقاطی را که بین دو ربع دایره مربوط به انرژی های E و $E+\Delta E$ وجود دارند بدست آورد، شکل ۳.
ازآنجا که برای هر مربع کوچک یک نقطه وجود دارد تعداد نقاط برابراست با تفاوت مساحت های دو ربع دایره . بنابراین

$$dn = \frac{1}{4}d(\pi R^2) = \frac{1}{4}2\pi RdR = \frac{1}{4}2\pi R\frac{dR}{dE}dE = (\frac{L}{\pi\hbar})^2 mdE. \tag{19}$$

www.Endbook.net

به این ترتیب تابعی بدست می آوریم که به آن چگالی حالات می گوییم. این تابع که آن را معمولاً با $g(E)$ نشان می دهیم به مامی گوید که درهربازه انرژی چه تعداد حالت وجود دارد. برای چاه پتانسیل مربعی دو بعدی داریم

$$dn = g_2(E)dE, \qquad g_2(E) = \frac{\pi}{4}(\frac{L}{\pi\hbar})^2(2m)^{\frac{2}{2}}. \tag{20}$$

برای چاه پتانسیل سه بعدی ویژه حالت های انرژی سه عدد کوانتومی دارند و انرژی هرحالت برابراست با

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{L^2}(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2), \qquad 0 < n_1,\ n_2,\ n_3 \tag{21}$$

دراین جا حالت های هم انرژی روی یک هشتم ازکره ای قرارگرفته اند که شعاع آن بازهم برابراست با $R = \frac{L}{\pi\hbar}\sqrt{2mE}$. امااین بار چگالی حالت ها از رابطه زیربدست می آید:

$$dn = \frac{1}{8}d(\frac{4}{3}\pi R^3) = (\frac{\pi R^2}{2}\frac{dR}{dE})dE. \tag{22}$$

درنتیجه برای چاه مکعبی سه بعدی خواهیم داشت

$$g_3(E) = \frac{\pi}{4}(\frac{L}{\pi\hbar})^3(2m)^{\frac{3}{2}}E^{\frac{1}{2}}. \tag{23}$$

به همین ترتیب می توان چاه پتانسیل را در d بعد حل کرد. خواننده را تشویق می کنیم که محاسبه مربوط به چگالی حالت ها را برای d بعد انجام دهد.

۴ قضایای کلی درباره پتانسیل های یک بعدی

تا کنون پتانسیل های بسیارساده را بررسی کردیم. پتانسیل هایی که می توان معادله شرودینگر را برای آنها به طور دقیق حل کرد بسیارکمیاب اند. این امر حتی برای پتانسیل های یک بعدی نیز صادق است. با این وجود خوب است که بعضی خصلت های عمومی معادله شرودینگر را بررسی کنیم. این خصلت ها را در قضایایی که دراین بخش آورده‌ایم بیان می کنیم.

قضیه ۱ : هرگاه پتانسیل زوج باشد یعنی $V(x) = V(-x)$ آنگاه ویژه حالت های انرژی را می توان باپاریته مشخص گرفت یعنی می توان ویژه حالت ها را طوری گرفت که یا زوج باشند یا فرد.

اثبات: برای پتانسیل زوج براحتی دیده می شود که اگر $\psi(x)$ یک ویژه حالت باانرژی E باشد، آنگاه $\psi(-x)$ نیز یک ویژه حالت باانرژی E است. بنابراین همواره می توان ویژه حالت را به صورت $\psi_e(x) = \psi(x) + \psi(-x)$ ویا

www.Endbook.net

$\psi_o(x) = \psi(x) - \psi(-x)$ گرفت که اولی زوج و دومی فرداست.

قضیه ۲: هرگاه پتانسیل حقیقی باشد آنگاه ویژه حالت های انرژی را می توان حقیقی گرفت.

اثبات: برای پتانسیل حقیقی براحتی دیده می شود که اگر ψ یک ویژه حالت باانرژی E باشد، آنگاه ψ^* نیز یک ویژه حالت باانرژی E است. بنابراین همواره می توان ویژه حالت را به صورت $\psi + \psi^*$ یا $i(\psi - \psi^*)$ گرفت که هردو حقیقی اند.

قضیه ۳: ویژه حالت های انرژی دریک بعد واگنی ندارند.

اثبات: فرض کنید که ψ_1 و ψ_2 دوویژه حالت انرژی متناظر با انرژی E باشند. دراین صورت

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_1 + V(x)\psi_1 &= E\psi_1 \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_2 + V(x)\psi_2 &= E\psi_2. \end{aligned} \tag{24}$$

با ضرب کردن اولین معادله در ψ_2 و دومین معادله در ψ_1 و کم کردن دومعادله از هم بدست می آوریم:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi_2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_1 - \psi_1\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_2) = 0, \tag{25}$$

و یا

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi_2\frac{\partial}{\partial x}\psi_1 - \psi_1\frac{\partial}{\partial x}\psi_2\right) = 0, \tag{26}$$

که ازآن نتیجه می گیریم

$$\psi_2\frac{\partial}{\partial x}\psi_1 - \psi_1\frac{\partial}{\partial x}\psi_2 = Const. \tag{27}$$

با درنظرگرفتن حد $x \longrightarrow \infty$ می فهمیم که مقدار ثابت برابراست با صفر. درنتیجه

$$\psi_1\frac{d}{dx}\psi_1 - \psi_1\frac{d}{dx}\psi_2 = 0. \tag{28}$$

www.Endbook.net

امااین رابطه آخر به این معناست که ψ_1 و ψ_2 باهم متناسبند وبنابراین هیچ نوع واگنی وجود ندارد.

نتیجه‌یک: درقضیه ۱ ثابت کردیم که برای یک پتانسیل حقیقی می توان ویژه توابع را حقیقی گرفت. حال بااستفاده از قضیه ۳ نشان می دهیم که دریک بعد این ویژه توابع منهای یک فازسرتاسری حتماً حقیقی هستند. برای این منظور فرض کنید که $\psi(x) = \alpha(x) + i\beta(x)$ یک ویژه تابع باشد. دراین صورت برای پتانسیل حقیقی $\psi^*(x) = \alpha(x) - i\beta(x)$، نیز یک ویژه تابع با همان انرژی است. بنابراین نتیجه می گیریم که $\alpha = \frac{1}{2}(\psi(x) + \psi^*(x))$ و هم چنین $\beta(x) = \frac{1}{2i}(\psi(x) - \psi^*(x))$ نیز ویژه تابع هایی باهمان انرژی هستند. اما چون دریک بعد واگنی نداریم پس باید این دو ویژه تابع با هم متناسب باشند یعنی $\beta = \kappa\alpha$. بدلیل اینکه هردو ویژه تابع α و β می بایست بهنجارباشند، ثابت κ می بایست برابربایکی ازمقادیرِ $0,\ \infty$ ویا ± 1 باشد. اما این امر به این معناست کهیا یکی از توابع α و یا β برابر باصفراست ویااینکه $\psi(x) = \alpha(x)(1 \pm i)$. درهر صورت تابع $\psi(x)$ چیزی نیست جزیک فاز عمومی دریک تابع حقیقی.

نتیجه دو: درقضیه ۲ ثابت کردیم که برای یک پتانسیل زوج می توان ویژه توابع را با پاریته مشخص گرفت یعنی ویژه توابع را می توان زوج و یا فرد گرفت. حال بااستفاده از قضیه ۳ نشان می دهیم که دریک بعد این ویژه توابع حتماً یا فرد هستند و یا زوج . برای این منظور فرض کنید که $\psi(x)$ یک ویژه تابع باشد. دراین صورت برای پتانسیل زوج $\psi(-x)$، نیز یک ویژه تابع با همان انرژی است. بنابراین نتیجه می گیریم که $\psi_e = \psi(x) + \psi(-x)$ و هم چنین $\psi_o(x) = \psi(x) - \psi(-x)$ نیز ویژه تابع هایی باهمان انرژی هستند. اما چون دریک بعد واگنی نداریم پس باید این دو ویژه تابع با هم متناسب باشند یعنی $\psi_e(x) = \kappa\psi_o(x)$. بدلیل اینکه هردو ویژه تابع ψ_e و ψ_o می بایست بهنجارباشند، ثابت κ می بایست برابربا یکی از مقادیر $0,\ \infty\ 1\pm$ باشد. درحالت اول ($\kappa = 0,\ \infty$) تابع یاحتماً فرداست و یا حتماً زوج. درحالت دوم نیز نتیجه می شود که تابع $\psi(x)$ یا $\psi(-x)$ متحد با صفرهستند که قابل قبول نیست.
بنابراین ثابت کرده ایم که ویژه توابع می بایست حتماً زوج و یافردباشند.

قضیه ۴: مقادیر ویژه انرژی همواره از مقدارمی نیمم پتانسیل بیشترند.

اثبات: فرض کنید که یک ویژه حالت انرژی باانرژی E وجود داشته باشد به قسمی که

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \qquad E < V(x) \qquad \forall x. \tag{29}$$

دراین صورت باتوجه به اینکه $H = \frac{P^2}{2m} + V(X)$ می نویسیم:

$$\langle\psi|\frac{P^2}{2m}|\psi\rangle = \langle\psi|(H - V(X))|\psi\rangle = \int \psi^*(x)(E - V(x))\psi(x)dx < 0, \tag{30}$$

وحال آنکه عملگر $\frac{P^2}{2m}$ یک عملگر مثبت است و مقدارمتوسط آن روی هیچ حالتی نمی بایست منفی باشد. بنابراین فرض 29 نمی تواند صحیح باشد.

قضیه ۵: اگر تابع پتانسیل متناهی باشد هم ویژه توابع انرژی وهم مشتقات آنها می بایست پیوسته باشند.

www.Endbook.net

اثبات: معادله شرودینگرمستقل اززمان را درنظرمی گیریم.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi + V(x)\psi = E\psi. \tag{31}$$

نخست دقت می کنیم که تابع ψ نمی تواند دریک نقطه مثل x_0 شامل تابع دلتا باشد زیرادراین صورت بهنجارنخواهد بود. بنابراین تنها می تواند دراین نقطه یک ناپیوستگی متناهی داشته باشد به این شکل که $\psi(x_0+) - \psi(x_0-) = C$ که درآن C یک ثابت است. دراین صورت درنزدیکی نقطه x_0 خواهیم داشت

$$\frac{d}{dx}\psi(x) \equiv C\delta(x - x_0), \tag{32}$$

و درنتیجه درنزدیکی همان نقطه

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) \equiv C\frac{d}{dx}\delta(x - x_0). \tag{33}$$

چون در طرف راست معادله شرودینگر هم E و هم ψ محدود هستند، نتیجه می گیریم که چنین ناپیوستگی ای نمی تواند درتابع ψ وجود داشته باشد.
هم چنین مشتق تابع ψ نیز نمی تواند ناپیوسته باشد. زیرادراین صورت خواهیم داشت $\psi'(x_0+) - \psi'(x_0-) = C$ و ازآنجا

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) \equiv C\delta(x - x_0) \tag{34}$$

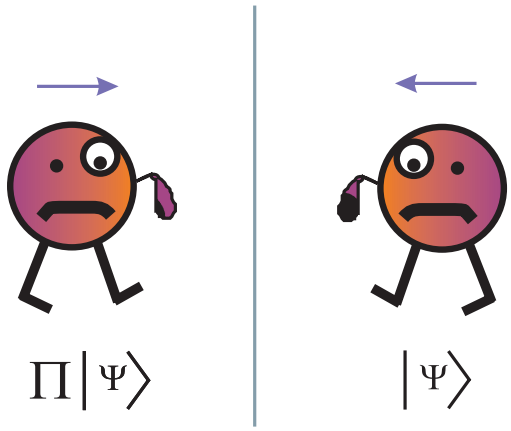
وچنین جمله‌ای درطرف راست معادله شرودینگر وجود ندارد.

باید دقت کرد که اگرپتانسیل داری یک ناپیوستگی به صورت $V(x_0+) - V(x_0-) \propto \infty$ باشد آنگاه مشتق تابع موج می تواند یک ناپیوستگی به صورت

$$\psi'(x_0+) - \psi'(x_0-) = C \tag{35}$$

داشته باشد ولی خود تابع موج هم چنان می بایست پیوسته باشد زیرا ناپیوسته بودن تابع موج درطرف چپ معادله شرودینگر تولید مشتق تابع دلتای دیراک می کند که درطرف راست وجود ندارد.

www.Endbook.net



شکل ۴: اثر عملگر پاریته روی حالتِ یک شئ همان اثری است که آینه روی شئ دارد. دقت کنید که جهت تکانه نیز عوض می شود.

۵ عملگرپاریته

می توان بامعرفی عملگرپاریته می توان قضیه ای را که در بخش پیشین دیدیم به شکل ظریف تری بیان کرد. عملگرپاریته را در یک بعد به شکل زیرتعریف تعریف می کنیم:

$$\Pi|x\rangle = |-x\rangle. \tag{36}$$

بنابراین تحت این عملگر هر شی به تصویرآینه ای خودش نگاشته می شود. ازتعریف فوق می توان نتیجه گرفت که این عملگر با عملگر مکان پادجابجامی شود یعنی

$$\Pi X + X\Pi = 0. \tag{37}$$

هم چنین باتوجه به اینکه $|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{\frac{ixp}{\hbar}} |x\rangle$ می توان نتیجه گرفت

$$\Pi|p\rangle = |-p\rangle. \tag{38}$$

بنابراین عملگرپاریته نه تنها اشیا را به تصویر آینه ای آنها تبدیل می کند،بلکه جهت همه سرعت ها را نیز معکوس می کند یعنی همان چیزی که موقع نگاه کردن به تصویریک شی متحرک درآینه می بینیم. شکل ۴ اثر عملگر پاریته راروی یک حالت نشان می دهد.

www.Endbook.net

به همان ترتیب می توان نتیجه گرفت که

$$\Pi P + P\Pi = 0. \tag{39}$$

ازتعریف این عملگرمی توان فهمید که $\Pi^2 = I$. درنتیجه ویژه مقدارهای آن عبارتند از ± 1. باتوجه به روابط 37 و 39 می توان نتیجه گرفت که برای هرپتانسیل $V(X)$ رابطه زیربرقراراست:

$$\Pi V(X)\Pi = V(-X). \tag{40}$$

بنابراین اگر پتانسیل زوج باشد آنگاه

$$[\Pi, H] = 0. \tag{41}$$

درنتیجه برای این پتانسیل ها می توان ویژه بردارهای مشترک H و Π را یافت. این امر به این معناست که اگر $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ آنگاه $\Pi|\psi\rangle = \pm|\psi\rangle$. برای این بردارها داریم

$$\langle x|\Pi|\psi\rangle = \pm\langle x|\psi\rangle \longrightarrow \langle -x|\psi\rangle = \pm\langle x|\psi\rangle, \tag{42}$$

ویا

$$\psi(-x) = \pm\psi(x), \tag{43}$$

که به این معناست که ویژه توابع هامیلتونی دارای پاریته مشخص هستند یعنی یا فرد هستند و یازوج.
مثل هرتقارن دیگری، تقارن پاریته اثر خود را بردینامیک نیز می گذراد. فرض کنید که تقارن پاریته داشته باشیم، یعنی $[H, \Pi] = 0$. دراین صورت عملگرتحول نیز با پاریته جابجاخواهد شد یعنی $[U(t), \Pi] = 0$. حال اگر حالت اولیه ای مثل $|\psi(0)\rangle$ داشته باشیم بعدازگذشت زمان t این حالت به حالتِ $|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle$ متحول خواهد شد. یعنی

$$|\psi(0)\rangle \longrightarrow U(t)|\psi(0)\rangle. \tag{44}$$

حالت $|\psi(0)\rangle$ را می توانید حالت آدمک سمت راست درشکل ۴ تصور کنید. حال سوال این است که اگر حالت اولیه بجای $|\psi(0)\rangle$، حالتِ $\Pi|\psi(0)\rangle$ باشد حالت نهایی چیست؟ دقت کنیم که حالتِ $\Pi|\psi(0)\rangle$ نشان دهنده تصویر آدمک نخست درآینه یعنی آدمک سمت چپ درشکل ِ۴ است. پاسخ این سوال این است که

$$\Pi|\psi(0)\rangle \longrightarrow U(t)\Pi|\psi(0)\rangle = \Pi U(t)|\psi(0)\rangle = \Pi|\psi(t)\rangle. \tag{45}$$

معنای این رابطه این است که هرکاری را که هرتحولی که برای آدمک قابل تصور باشد، برای تصویرآینه ای آن نیز قابل تصوراست. به عنوان مثال اگر آدمک به سمت راست برود، تصویرآن به سمت چپ خواهد رفت . به نظرمی رسد که همه اینها توضیح واضحات است. ولی چنین نیست زیرا مادرزندگی روزانه خود به این تقارن خو گرفته ایم و آن را بدیهی می پنداریم، ولی این تقارن بدیهی نیست.

www.Endbook.net

۱.۵ نقض تقارن آینه ای :آیا دنیای ما نسبت به انعکاس در آینه متقارن است؟

آیابرهم کنش های بنیادی طبیعت تقارن پاریته دارند؟ اگر چنین باشد هرفرایندمیکروسکو پی را که درآزمایشگاه مشاهده کنیم می بایست تصویرآینه ای آن نیز قابل مشاهده و تصورباشد. اگرچه برهم کنش های گرانشی، الکترومغناطیسی و هسته ای قوی چنین تقارنی دارند ولی یکی از برهم کنش های بنیادی طبیعت به نام برهم کنش هسته ای ضعیف بدلیلی که نمی دانیم فاقد این تقارن است. این برهم کنش همان چیزی است که باعث واپاشی هسته هاازطریق واپاشی نوترون ها می شود. دراین واپاشی یک نوترون به یک پروتون و یک الکترون و یک پادنوترینو واپاشیده می شود:

$$n \longrightarrow p^{+} + e^{-} + \overline{\nu}. \tag{46}$$

این واپاشی باعث تبدیل یک هسته ${}^{Z}N^{A}$ به یک هسته ${}^{Z+1}N^{A}$ می شود. درآزمایشی که دردهه ۱۹۵۰ توسط Wu وهمکارانش انجام شد هسته های کبالت به نیکل واپاشیده می شند

$${}^{27}Co^{60} \longrightarrow {}^{28}Ni^{60} + e^{-} + \overline{\nu}. \tag{47}$$

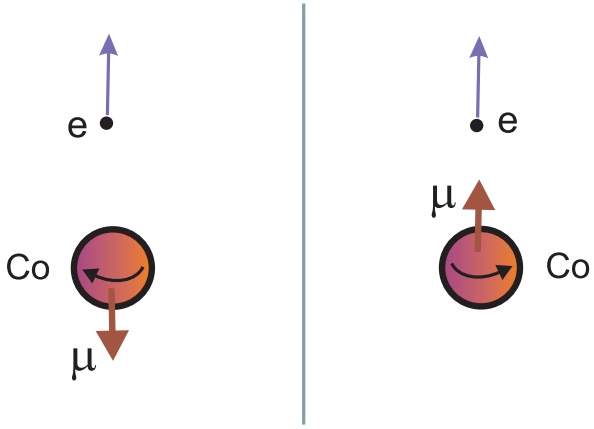
هسته های کبالت دارای گشتاورمغناطیسی ذاتی هستند که می توان با اعمال یک میدان مغناطیسی قوی و پایین آوردن دما به حد کافی آنها را با هم همراستاکرد. حال می توان پرسید که الکترون ها نسبت به این جهت تعریف شده درکدام جهت گسیل می شوند؟ آیا درهمان جهت ممان مغناطیسی واپاشیده می شوند ویا درخلاف جهت آن ویا اینکه کاملاً به طور متقارن درهردو جهت. درآزمایش Wu معلوم شد که الکترون ها درجهت ممان مغناطیسی گسیل می شوند. این نتیجه به نحو آشکاری نقض پاریته رانشان می دهد، زیرا هرگاه درآینه ی که به موازات ممان مغناطیسی قرارگرفته است به هسته های کبالت و الکترون های گسیل شده نگاه کنیم جهت ممان مغناطیسی کبالت را درخلاف جهت قبلی می بینیم ولی جهت گسیل الکترون ها را همان جهت قبلی می بینیم. شکل ۵.

اگر تقارن پاریته وجود می داشت می بایست تصویرآینه ای واپاشی کبالت نیز مشاهده می شد که درآن الکترونها درخلاف جهت ممان مغناطیسی کبالت ها گسیل می شدند. به عبارت دیگر می بایست دریک آزمایش واپاشی کبالت الکترونها درهردو جهت گسیل می شدند که چنین چیزی را آزمایش نشان نمی دهد. نقض تقارن پاریته دربرهم کنش های هسته ای ضعیف که اینقدر در زندگی روزمره به آن خو گرفته ایم و توسط همه برهم کنش های دیگر رعایت می شود یکی از مهمترین کشفیات فیزیک ذرات بنیادی بوده است.

۲.۵ پاریته در سه بعد

ممکن است خواننده سوال کند که چه ربطی بین تقارن آینه ای و تقارن تحت پاریته است؟ هم چنین ممکن است سوال کند چرا در شکل ۵ آنچنانکه از عمل پاریته انتظار داشتیم جهت تکانه الکترون ها را وارونه نکرده ایم. در پاسخ باید گفت که شکل ۵ و آزمایش مربوط به آن در واقع نقض تقارن آینه ای را نشان می دهند و تقارن آینه ای به پاریته مربوط است .

www.Endbook.net



شکل ۵: واپاشی بتا برای هسته های کبالت. تصویر سمت راست آنچیزی است که درطبیعت مشاهده می شود. تصویرآینه ای آن هرگز دیده نشده است.

عملگر پاریته در سه بعد به شکل زیر تعریف می شود:

$$\Pi|\vec{r}\rangle = |-\vec{r}\rangle. \tag{48}$$

که از آن به همان شکل بالا می توان نتایج زیر را گرفت:

$$\Pi|\vec{p}\rangle = |-\vec{p}\rangle, \tag{49}$$

و

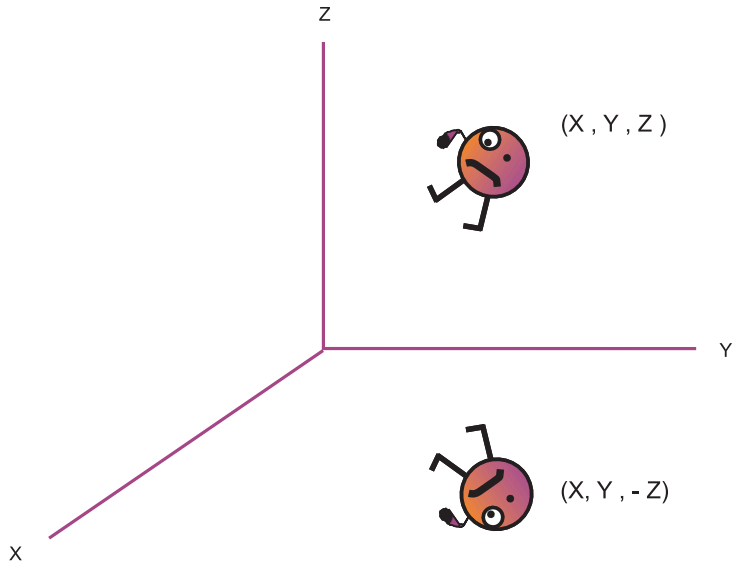
$$\Pi X_i + X_i\Pi = 0, \qquad \Pi P_i + P_i\Pi = 0, \qquad i = 1,\ 2,\ 3. \tag{50}$$

تصور عملگر پاریته و کاری که انجام می دهد در یک بعد آسان است ولی در سه بعد این کار چندان ساده نیست و ما به آن عادت نکرده ایم. اما می توان پاریته را به عملگر دیگری مرتبط کرد که تصورش بسیار آسان است و ما هر روز با آن مواجه می شویم، این عمل انعکاس نسبت به یک آینه است.

تصور کنید که می خواهیم تصویر هر چیزی را در آینه بی نهایت بزرگی که در صفحه xy قرار گرفته است ببینیم. این کار را نگاشت I_{xy} می نامیم و در مکانیک کوانتومی با عملگر $\hat{R}_{xy}$ نشان می دهیم. این نگاشت روی مختصات فضا چه اثری دارد؟ براحتی می توانید خود را قانع کنید که مختصه هر نقطه را به شکل زیر تغییر می کند:

$$I_{xy} : (x, y, z) \longrightarrow (x, y, -z). \tag{51}$$

www.Endbook.net



شکل ٦: تبدیل یک شی تحت انعکاس در آینه. چنین انعکاسی ناشی از دوران حول محور z به اندازه ۱۸۰ درجه و سپس انعکاس حول مبدا (عمل پاریته) است.

هم چنین در یک آینه تکانه های ذرات نیز به شکل زیر تغییر می کنند:

$$I_{xy} : (p_x, p_y, p_z) \longrightarrow (p_x, p_y, -p_z). \tag{52}$$

آیا این عمل به عمل پاریته ربطی دارد یا آنکه کاملاً مستقل است؟ دراین جا می خواهیم نشان دهیم که این عمل که آن را انعکاس نسبت به صفحه xy می نامیم، ترکیبی است از عمل پاریته و دوران . هرگاه دوران حول محورِ z به اندازه زاویه π را با $R_z(\pi)$ نشان دهیم خواهیم داشت:

$$R_z(\pi) : (x, y, z) \longrightarrow (-x, -y, z). \tag{53}$$

اگر این عمل را با پاریته ترکیب کنیم آنگاه خواهیم داشت:

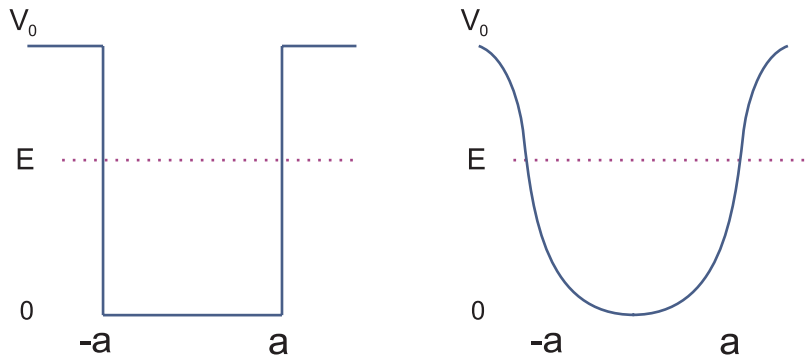
$$\Pi R_z(\pi) : (x, y, z) \longrightarrow (-x, -y, z) \longrightarrow (x, y, -z). \tag{54}$$

بنابراین بدست می آوریم

$$I_{xy} = \Pi \; R_z(\pi). \tag{55}$$

می دانیم که دنیای ما تحت دوران متقارن است. بنابراین هرگاه تقارن پاریته وجود داشته باشد، تقارن آینه ای نیز وجود دارد و نقض تقارن پاریته نیز به معنای نقض تقارن آینه‌ای است.

www.Endbook.net



شکل ۷: چاه پتانسیل با پهنای $2a$ و عمق V_0. تصویر سمت چپ نخستین تقریب به پتانسیل واقعی سمت راست است.

٦ چاه پتانسیل یک بعدی با عمق محدود

در بخش های گذشته چاه های پتانسیل مربعی با عمق محدود را مطالعه کردیم. دراین بخش چاه پتانسیل یک بعدی با عمق محدود را مطالعه می کنیم. این چاه نخستین تقریب به یک پتانسیل با برد و عمق محدود است، شکل ??. حل کردن چاه پتانسیل مربعی با عمق محدود به روش تحلیلی نه ساده است و نه مفید. به جای آن در فصل های آینده چاه پتانسیل دایره‌ای و کروی با عمق محدود را مطالعه می کنیم.

نخستین پتانسیلی که به آن توجه می کنیم یک چاه پتانسیل با عمق محدوداست. این پتانسیل درشکل (۷) نشان داده شده است و به صورت زیراست:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x \leq -a, \\ 0 & -a \leq x \leq a, \\ V_0 & a \leq x \end{cases} \tag{56}$$

۱.٦ ویژه حالت های مقید

نخست حالت های مقید را بررسی می کنیم. این حالت ها حالت هایی هستند که انرژی آنهاکمتراز V_0 است . خواهیم دید که این جواب ها در$\pm\infty$ به سمت صفر میل می کنند و فقط درناحیه محدودی ازفضا غیرصفر هستند. به همین دلیل است که آنهارا جواب های مقید می گوییم.

www.Endbook.net

$$
\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}\psi + V_0\psi(x) = E\psi \qquad & |x| > a \\
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}\psi = E\psi(x) \qquad & -a \leq x \leq a.
\end{aligned} \tag{57}
$$

این معادلات را می توان به شکل ساده ترزیر بازنویسی کرد:

$$
\begin{aligned}
\frac{d^2\psi}{dx^2}\psi = q^2\psi \qquad & q = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \\
\frac{d^2\psi}{dx^2}\psi = -\kappa^2\psi \qquad & k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}
\end{aligned} \tag{58}
$$

ازآنجا که این پتانسیل زوج است ویژه توابع انرژی دارای پاریته مشخص هستند یعنی می توانیم آنها را به ویژه توابع زوج و یافرد تقسیم کنیم. جواب های زوج را با $\psi_e(x)$ و جواب های فرد را با ψ_o نشان می دهیم. جواب های زوج به شکل زیرهستند:

$$
\psi_e(x) = \begin{cases} e^{qx} & x \leq -a, \\ A\cos kx & -a \leq x \leq a, \\ e^{-qx} & a \leq x. \end{cases} \tag{59}
$$

شرط پیوستگی تابع موج و مشتق آن درنقطه a منجر به روابط زیرمی شود:

$$
\begin{aligned}
e^{-qa} &= A\cos ka \\
qe^{-qa} &= Ak\sin ka
\end{aligned} \tag{60}
$$

که ازتقسیم این دو برهم رابطه زیر بدست می آید:

$$
\boxed{\cot ka = \tfrac{k}{q}.} \tag{61}
$$

جواب های فرد به شکل زیرهستند:

$$
\psi_o(x) = \begin{cases} e^{qx} & x \leq -a, \\ B\sin kx & -a \leq x \leq a, \\ -e^{-qx} & a \leq x. \end{cases} \tag{62}
$$

www.Endbook.net

شرط پیوستگی تابع موج و مشتق آن درنقطه a منجر به روابط زیر می شود:

$$\begin{aligned} -e^{-qa} &= B\sin ka \\ qe^{-qa} &= Bk\cos ka \end{aligned} \tag{63}$$

که ازتقسیم آن دوبرهم رابطه زیربدست می آید:

$$\boxed{\cot ka = \frac{-q}{k}}. \tag{64}$$

با حل روابط 61 و 64 می توانیم مقادیر ویژه انرژی را برای چاه پتانسیل بدست آوریم. این معادلات را می بایست به روش ترسیمی حل کنیم. اماقبل ازآن می بایست طرفین معادله را برحسب یک متغیر بنویسیم. دراین جا مناسب است که با تعریف متغیر $y := \sqrt{\frac{2|E|a^2}{\hbar^2}}$ و پارامتر $\lambda := \sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}}$ این معادلات را به شکل زیربازنویسی کنیم:

برای جواب های زوج :

$$\cot y = \sqrt{\frac{y^2}{\lambda^2 - y^2}}, \tag{65}$$

و برای جواب های فرد

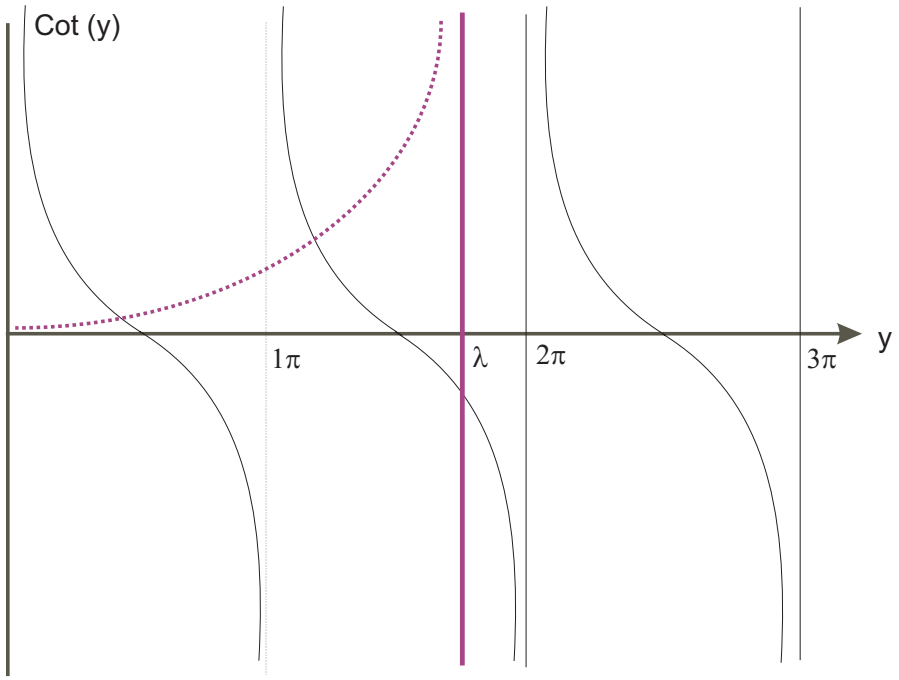
$$\cot y = -\sqrt{\frac{\lambda^2 - y^2}{y^2}}. \tag{66}$$

شکل های ۸ و ۹ حل ترسیمی این معادلات رانشان می دهند.
ازاین شکل ها به چند خاصیت مهم جواب ها پی می بریم:

۱ — با افزایش λ تعداد حالت های مقید نیزافزایش می یابد. بنابراین هرچه که عمق چاه ویا پهنای آن زیاد شود ویااینکه جرم ذره زیاد ترباشد تعداد حالت های مقید نیز بیشتر می شود.

۲ — حالت پایه یعنی حالتی که کمترین انرژی رادارد یک حالت زوج است و بعدازآن حالت های فرد و زوج یک درمیان قرارمی گیرند.

www.Endbook.net



شکل ۸: حل ترسیمی معادله انرژی برای جواب های زوج

۳ – هرگاه عمق و پهنای پتانسیل چنان باشد که ثابت λ از $\frac{\pi}{2}$ کمترباشد، جواب فرد وجود ندارد. دراین حالت تنها یک جواب زوج وجود دارد.

۴ – هرچه که مقدارانرژی بیشترمی شود، ضریب k بیشتر و ضریب q کمترمی شود، و درنتیجه طول موج جواب های سینوسی داخل چاه کمترشده و عمق نفوذ آنها به درون ناحیه $V_0 \geq E$ یعنی ناحیه ای که ازنظرکلاسیک ناحیه ممنوعه است نیز کمترمی شود.

۵ – واضح است که درحد $V_0 \longrightarrow \infty$ بی نهایت ویژه حالت انرژی وجود دارد. دراین حالت ها بدلیل اینکه $\lambda \longrightarrow \infty$، معادلات بالا را می توان به شکل تحلیلی نیز حل کرد. دراین حد معادلات بالا به شکل زیردرمی آیند:

برای جواب های زوج:

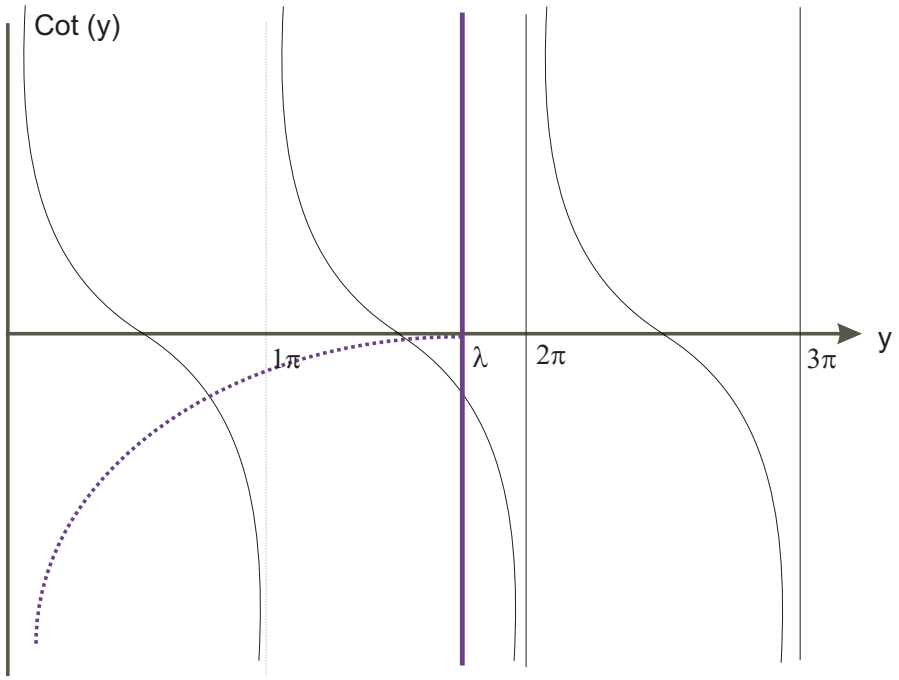
$$\cot y = 0 \quad \longrightarrow \quad y = (n + \frac{1}{2})\pi \quad \longrightarrow \quad E_n = \frac{\hbar^2}{2ma^2}(n + \frac{1}{2})^2\pi^2. \tag{67}$$

برای جواب های فرد:

$$\tan y = 0 \quad \longrightarrow \quad y = (n + \frac{1}{2})\pi \quad \longrightarrow \quad E_n = \frac{\hbar^2}{2ma^2}^{\ 2} n\pi^2. \tag{68}$$

دراین حد عمق نفوذ به ناحیه ممنوعه دقیقاً برابربا صفرمی شود و مقدار تابع موج در دیواره های چاه پتانسیل برابر با صفرمی شود.

www.Endbook.net



شکل ۹: حل ترسیمی معادله انرژی برای جواب های فرد

۲.۶ ویژه حالت های نامقید

این ویژه حالت ها، حالت هایی هستند که انرژی آنها بیشتر از V_0 است. دراین حالت جواب های زوج به شکل زیردرمی آیند:

$$\psi_e(x) = \begin{cases} e^{iqx} + Ce^{-iqx} & x \le -a, \\ A\cos kx & -a \le x \le a, \\ e^{-iqx} + Ce^{iqx} & a \le x. \end{cases} \tag{69}$$

که درآن

$$q = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}. \tag{70}$$

دراین جواب دیگر جملهٔ e^{-iqx} در$-\infty$ واگرانمی شود و می بایست آن رانگاه داشت. درنتیجه وقتی که شرایط پیوستگی تابع موج و مشتق آن را درنقطه $x = a$ می نویسیم با دومعادله و سه مجهول مواجهیم که عبارتند از $(E,\ A,\ C)$. این موضوع یعنی زیادتربودن تعداد مجهولات نسبت به معادلات باعث می شود که دیگر انرژی مقادیر گسسته نداشته باشد و به ازای هرمقدار پیوستهٔ E بتوانیم مقادیر ضرایب (A, C) بدست بیاوریم. به طور صریح تر شرایط مرزی در نقطه a عبارتند از:

www.Endbook.net

$$e^{-iqa} + Ce^{iqa} = A\cos ka$$
$$iq(e^{-iqa} - Ce^{iqa}) = Ak\sin ka \tag{71}$$

که باکمی محاسبه منجر به روابط زیرمی شود:

$$C = e^{-2iqa}\frac{iq\cos ka + k\sin ka}{iq\cos ka - k\sin ka}, \tag{72}$$

و

$$A = e^{-iqa}\frac{2iq}{iq\cos ka - k\sin ka}. \tag{73}$$

دراین حالت به ازای هرمقدارانرژی $E \geq V_0$ یک تابع موج ψ_e با ضرایب فوق وجود دارد که از$-\infty$ تا ∞ درفضا گسترده است. این تابع موج درهرناحیه به صورت ترکیبی از دوموج تخت است و درناحیه پتانسیل به صورت یک موج ایستاده است. باتوجه به اینکه $k \geq q$، طول موج این امواج درناحیه درون پتانسیل کمتراز خارج پتانسیل است که ناشی از زیادتربودن تکانه ویاانرژی جنبشی ذرات درناحیه درون پتانسیل است.

دراین حالت جواب های فرد به شکل زیردرمی آیند

$$\psi_o(x) = \begin{cases} e^{iqx} + De^{-iqx} & x \leq -a, \\ B\sin kx & -a \leq x \leq a, \\ -e^{-iqx} - Ce^{iqx} & a \leq x. \end{cases} \tag{74}$$

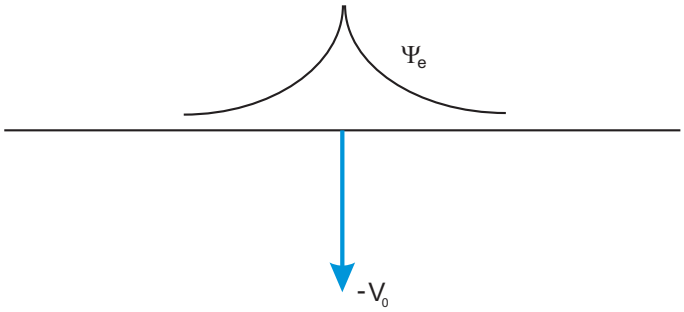
شرایط مرزی درنقطه $x = a$ عبارت خواهند بوداز:

$$e^{-iqa} + De^{iqa} = -B\sin ka$$
$$iq(e^{-iqa} - De^{iqa}) = kB\cos ka \tag{75}$$

که باکمی محاسبه منجر به مقادیر زیر برای B و D می شود:

$$B = e^{-iqa}\frac{2iq}{k\cos ka - iq\sin ka}, \tag{76}$$

www.Endbook.net



شکل ۱۰: چاه پتانسیل دلتا تنها یک جواب مقید زوج دارد.

و

$$D = e^{-2iqa}\frac{iq\sin ka + k\cos ka}{iq\sin ka - k\cos ka}. \tag{77}$$

۷ چاه پتانسیل دلتا

دراین بخش یک چاه بسیار عمیق باپهنای کم را درنظرمی گیریم و آن را با تابع پتانسیل $V(x) = -V_0\delta(x)$ نشان می دهیم. این چاه نشان دهنده یک نیروی جاذبه خیلی بزرگ با برد خیلی کوتاه است. شکل ۱۰ این چاه رانشان می دهد. ازآنجا که پتانسیل زوج است می توانیم جواب های آن را به زوج و فرد تقسیم کنیم. جواب های زوج به شکل زیرهستند که ازحل کردن معادله آزاد شرودینگر دردوسوی پتانسیل بدست آمده اند

$$\psi_e(x) = \begin{cases} e^{qx} & x \le 0, \\ e^{-qx} & 0 \le x, \end{cases} \tag{78}$$

که درآن $q = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$.

مطابق با آنچه که درقضایای اول فصل گفتیم درمورد پتانسیل دلتا مشتق تابع موج نمی تواند پیوسته باشد ولی همچنان خود تابع موج می بایست پیوسته باشد. برای آنکه تفاوت مشتق را دردوطرف نقطه صفر بدست بیاوریم ازمعادله شرودینگر از نقطه $-\epsilon$ تا نقطه ϵ انتگرال می گیریم.

برای این جواب ها داریم

$$\frac{-\hbar^2}{2m}(\psi_e'(0+) - \psi_e'(0-)) + V(0)\psi_e(0) = 0. \tag{79}$$

www.Endbook.net

شکل ۱۱: چاه پتانسیل دوتایی، مدلی ساده برای یک مولکول دو اتمی.

ازاین معادله نتیجه می گیریم $q = \frac{mV_0}{\hbar^2}$. بنابراین فقط یک حالت مقیدِ زوج وجود دارد. انرژی این حالت مقید برابراست با

$$E = -\frac{\hbar^2 q^2}{2m} = -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}. \tag{80}$$

جواب های فرد به صورت زیرهستند:

$$\psi_o(x) = \begin{cases} e^{qx} & x \leq 0, \\ -e^{-qx} & 0 \leq x. \end{cases} \tag{81}$$

برای این جواب ها شرط مرزی به صورت زیردرمی آید:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}(\psi_o'(0+) - \psi_o'(0-)) + V(0)\psi_o(0) = 0. \tag{82}$$

که ازآن نتیجه می گیریم $V_0\psi_o = 0$ که به معنای این است که $\psi_o = 0$. بنابراین هیچ حالت مقید فردی وجود ندارد. پس نشان داده ایم که چاه پتانسیل $V(x) = -V_0\delta(x)$ تنها یک حالت مقید زوج را درخود نگاه می دارد که انرژی آن برابراست با $E = -\frac{\hbar^2 q^2}{2m} = -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}$.

۸ چاه پتانسیل دوگانه، مدلی برای یک مولکول دواتمی

دراین بخش یک چاه پتانسیلی دلتای دوگانه را که مدل ساده ای برای یک مولکول دواتمی است مطابعه می کنیم. این پتانسیل می تواند نشان دهنده برهم کنش جاذبه ای است که یون های مثبت یک مولکول دواتمی برای یک الکترون دارند. تابع پتانسیل به شکل زیراست:

$$V(x) = -V_0\delta(x-a) - V_0\delta(x+a). \tag{83}$$

www.Endbook.net

باید دقت کنیم که V_0 دراینجا دیمانسیون انرژی درطول دارد یعنی

$$[V_0] = [E][L]. \tag{84}$$

درنواحی بین تابع های دلتا پتانسیل صفراست و تابع موج حل معادله شرودینگر آزاد است. باتوجه به زوج بودن پتانسیل جواب ها به فرد و زوج تقسیم می شوند. جواب های زوج به شکل زیرهستند:

$$\psi_e(x) = \begin{cases} e^q & x \leq -a, \\ A\cosh qx & -a \leq x \leq a, \\ e^{qx} & a \leq x. \end{cases} \tag{85}$$

پیوستگی تابع موج درنقطه $x = a$ منجر به شرط زیر می شود:

$$A\cosh qa = e^{-qa} \tag{86}$$

و ناپیوستگی مشتق نیز از رابطه زیربدست می آید:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi'_e(a+) - \psi'_e(a-)) - V_0\psi_e(a) = 0 \tag{87}$$

و بااستفاده از معادله قبلی بدست می آوریم:

$$\frac{\hbar^2 q}{2m}(1 + \tanh qa) = V_0, \tag{88}$$

و یا

$$\tanh qa = \frac{2mV_0}{\hbar^2 q} - 1. \tag{89}$$

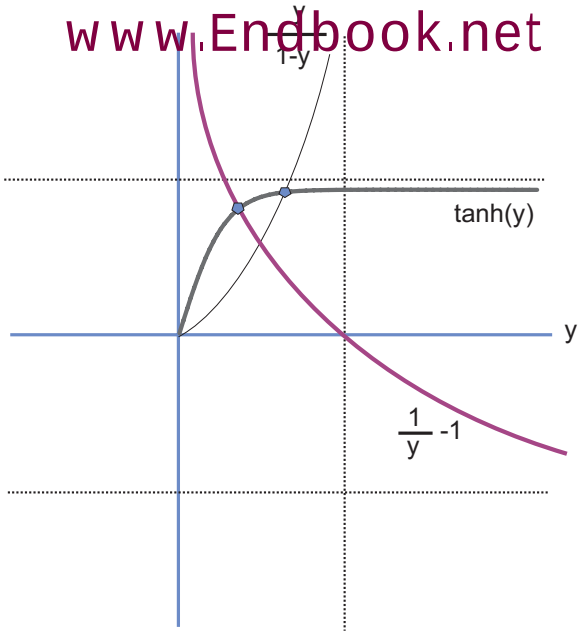
با تعریف پارامترهای بدون بعدِ $y = \frac{\hbar^2 q}{2mV_0}$ و $\lambda = \frac{2mV_0 a}{\hbar^2}$ این معادله را به شکل زیربازنویسی می کنیم:

$$\tanh \lambda y = \frac{1}{y} - 1. \tag{90}$$

برای بدست آوردن حل های این معادله بازهم ازروش ترسیمی استفاده می کنیم ولی قبل از حل آن سعی می کنیم حل های فرد را نیز بدست آوریم. برای حل های فرد داریم

$$\psi_o(x) = \begin{cases} e^q & x \leq -a, \\ B\sinh qx & -a \leq x \leq a, \\ -e^{qx} & a \leq x. \end{cases} \tag{91}$$

www.Endbook.net



شکل ۲۱: حل ترسیمی معادلات ویژه مقداری چاه پتانسیل دوتایی

شرط پیوستگی تابع موج منجر به معادله زیرمی شود:

$$B \sinh qa = -e^{-qa}, \tag{92}$$

و ناپیوستگی مشتق نیز به همراه شرط بالا منجر به رابطه زیرمی شود:

$$\tanh \lambda y = \frac{y}{1-y}. \tag{93}$$

شکل ۲۱ حل ترسیمی معادلات 90 و 93 را نشان می دهد. شکل های ۳۱ و ۴۱ توابع موج زوج و فرد را برای چاه پتانسیل دوتایی دلتا نشان می دهند.
ازاین حل ترسیمی نکات زیر را می توان آموخت:

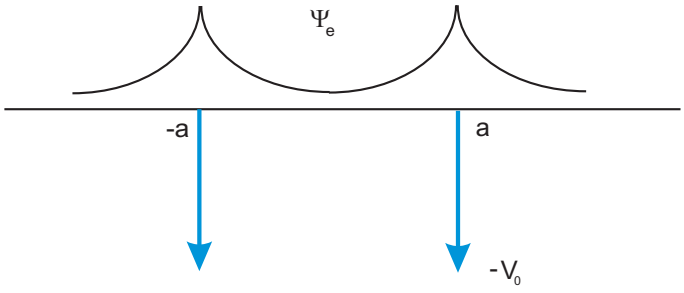
۱ – حداکثر دو حالت مقید وجود دارد. برای این دوحالت $y_{even} \geq y_{odd}$ که به معنای آن است که $q_{even} \geq q_{odd}$، و یا $E_{odd} \geq E_{even}$.

۲ – جواب زوج همواره وجود دارد ولی جواب فرد تنها وقتی وجود دارد که شیب منحنی تانژانت درنقطه صفر از یک بیشتر باشد. ازآنجا که این شیب برابر با λ است، بنابراین جواب فرد تنهاوقتی وجود دارد که شرط $\frac{2mV_0a}{\hbar^2} > 1$. بنابراین جواب فرد تنها وقتی وجود دارد که عمق پتانسیل و یا فاصله دو چاه ازیکدیگر به ا ندازه کافی بزرگ باشد.

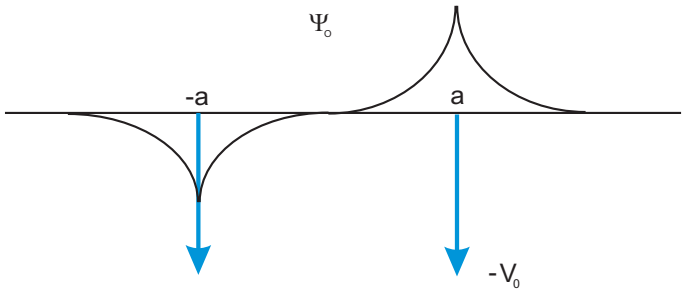
۳ – حال فرض کنید که حالت اولیه ذره ترکیبی خطی از دو حالت زوج و فرد باشد به این صورت که

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_e(x) + \psi_o(x)). \tag{94}$$

www.Endbook.net



شکل ۳۱: تابع موج زوج برای چاه پتانسیل دوتایی دلتا



شکل ۴۱: تابع موج فرد برای چاه پتانسیل دوتایی دلتا

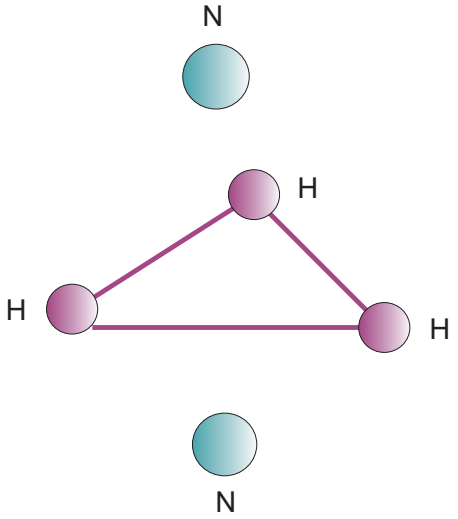
دراین حالت ذره بیشتر دراطراف چاه پتانسیل طرف راست قرار دارد.
دراین صورت تابع موج درلحظه t عبارت است از

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-i\frac{E_e}{\hbar}t}\psi_e(x)+e^{-i\frac{E_o}{\hbar}t}\psi_o(x)) \\ &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_e(x)+e^{-i\frac{E_o-E_e}{\hbar}t}\psi_o(x)).\end{aligned} \tag{95}$$

حال پس از گذشت زمان T که برابر است با

$$T=\frac{2\pi\hbar}{E_o-E_e} \tag{96}$$

www.Endbook.net



شکل ۵۱: مولکول آمونیاک، و دووضعیت تعادل اتم نیتروژن درآن

تابع موج به صورت زیردرمی آید:

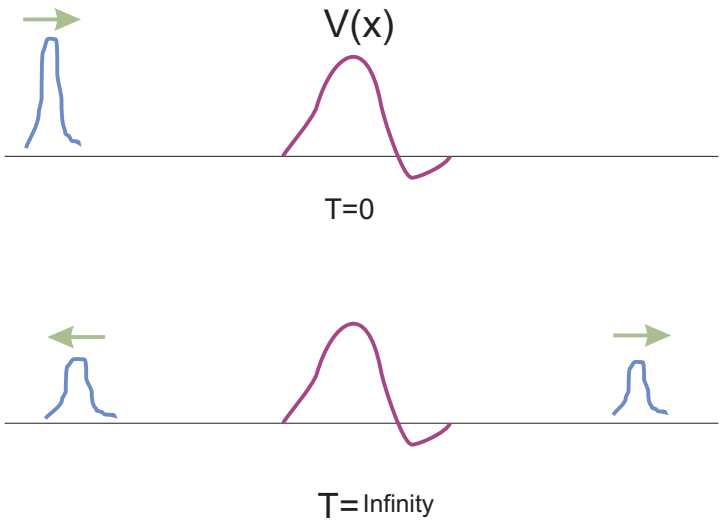
$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_e(x) - \psi_o(x)). \tag{97}$$

که نشان دهنده آن است که ذره بیشتر دراطراف چاه پتانسیل طرف چپ قراردارد. به این ترتیب می بینیم که ذره بین دو حالت فوق نوسان می کند واین نوسان را باپریودِ T انجام می دهد.
مولکول آمونیاک یک سیستم فیزیکی است که دراولین تقریب توسط مدل بالا توصیف می شود. درمولکول آمونیاک با فرمول NH_3، اتم های هیدروژن به شکل رئوس یک مثلث دریک صفحه قرارگرفته اند. مطابق شکلِ ۵۱ ، اتم نیتروژن دو وضعیت تعادلی دارد که دردوطرف این صفحه قرارگرفته اند. این دووضعیت تعادلی را می توان با دو چاه پتانسیل نشان داد. مطابق با آنچه که دراین بخش دیده‌ایم، ویژه حالت های مولکول آمونیاک حالت هایی نیستند که درآن اتم نیتروژن دریکی از این چاه ها قرارگرفته باشد بلکه حالت هایی هستند که دارای پاریته زوج و یا فردهستند و درآنها احتمال یافتن اتم نیتروژن درطرفین صفحه هیدروژن ها یکسان است.

۹ مسئله پراکندگی دریک بعد

دراین بخش موقتاً حالت های مقید را رها می کنیم و به مسئله پراکندگی می پردازیم. این مسئله به صورت کلاسیک به شکل زیراست. ذره ای را باتکانه یا انرژی معین به یک پتانسیل شبیه به آنچه که درشکل ۶۱ نشان داده شده است می تابانیم. این ذره مطابق به طرف پتانسیل حرکت کرده و درصورتی که انرژی آن از ارتفاع پتانسیل بیشترباشد از آن عبورمی کند و درغیراین صورت در نقطه‌ای مثل نقطه a متوقف می شود و برمی گردد. نقطه a نقطه بازگشت ذره یا $Turning\ Point$ نامیده می شود.
البته پراکندگی به ندرت دریک بعد صورت می گیرد و معمولاً برای حل مسئله پراکندگی می بایست صورت سه بعدی آن را درنظرگرفت. این کاری است که بامعلومات کنونی ما امکان پذیرنیست و بعداً آن را به تفصیل بررسی می کنیم. دراین فصل

www.Endbook.net



شکل ٦١: پراکندگی از یک پتانسیل

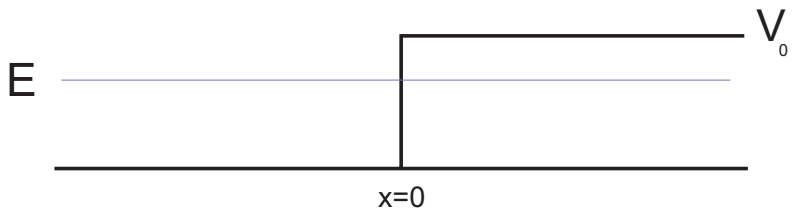
خود را به مسئله پراکندگی دریک بعد محدود می کنیم.
هرگاه بخواهیم درچارچوب مکانیک کوانتومی مسئله پراکندگی دریک بعد را حل کنیم باید دقت کنیم که ذره تابنده هیچگاه بایک تکانه کاملاً دقیق مشخص نمی شود، بلکه تابع موج آن ترکیبی است از امواج تخت با طول موج های و یاتکانه های مختلف. به عبارت بهتر می بایست بسته موجی با پهنای کم و تکانه متوسط p درنظرگرفت و معادله وابسته به زمان شرودینگر را برای آن به طورکامل حل کرد. اگر این کاررا به طورتحلیلی (البته بازحمت زیاد) و یا به طور عددی انجام دهیم خواهیم دید که بسته موج به طرف پتانسیل حرکت کرده ضمن حرکت پخش می شود، و پس از اصابت به پتانسیل کج و معوج شده و لی سرانجام بعدازگذشت زمان به شکل دو بسته موج کوچکتردرمی آید که یکی درهمان راستای قبلی به حرکت خود ادامه می دهد و دیگری بازمی گردد. علی الاصول می توان با حل معادله شرودینگر، شکل دقیق توابع موج تابیده شده و یا عبورکرده و بازتابیده را پیداکرد. ازنظرفیزیکی به این علاقمندیم که نسبت ذراتی که از سد پتانسیل عبور می کنند و هم چنین نسبت ذراتی که ازپتانسیل بازتابیده می شوند را به کل ذرات تابیده شده پیداکنیم. آنچه که کارماراساده می کند این است که این نسبت هارا می توان با محاسبه بسیارساده تری درمقایسه با آنچه که دربالاگفته شد نیز یافت به این معنا که بجای بسته های موج از امواج تخت نیز می توانیم استفاده کنیم. می توان ثابت کرد که این نسبت ها را با یافتن ویژه توابع معادله مستقل از زمان شرودینگر نیز یافت. این ویژه توابع را چنان باید گرفت که مطابق با تصویرفیزیکی ما ازمسئله پراکندگی باشد. دراین بخش این کار را برای چند پتانسیل ساده انجام می دهیم.

١٠ پتانسیل پله

شکل ٧١ یک پله پتانسیل را نشان می دهد.
معادله شرودینگر در دوناحیه کوچکتراز $x = 0$ و بزرگتر از $x = 0$ برای این پتانسیل به شکل زیراست:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \qquad x < 0$$

www.Endbook.net



شکل ۷۱: پتانسیل پله

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+V_0\psi=E\psi \qquad 0\le x. \tag{98}$$

حالت اول: $E\ge V_0$.

برای این حالت پارامتر های زیر را معرفی می کنیم:

$$k:=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \qquad q:=\sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}. \tag{99}$$

درنتیجه معادلات بالا به شکل زیردرمی آیند:

$$\begin{aligned} -\frac{d^2\psi}{dx^2}&=k^2 \qquad x<0\\ -\frac{d^2\psi}{dx^2}&=q^2 \qquad 0\le x. \end{aligned} \tag{100}$$

با حل زیر:

$$\psi=\begin{cases} e^{ikx}+Re^{-ikx} & x\le 0,\\ Te^{iqx} \end{cases} \tag{101}$$

شرط پیوستگی تابع موج و مشتق آن درنقطه $x=0$ منجر به روابط زیرمی شود:

$$1+R=T$$

www.Endbook.net

$$ik(1-R) = iqT, \tag{102}$$

و درنتیجه

$$T = \frac{2k}{k+q}, \qquad R = \frac{k-q}{k+q}. \tag{103}$$

دقت کنید که دراین حالت موج تخت بازگشتی هیچ اختلاف فازی با موج تابیده ندارد زیرا ضریب R حقیقی است. این امر ناشی از این است که انرژی ذره بیشتراز ارتفاع پتانسیل است و پتانسیل برای ذره مثل یک مانع نرم عمل می کند.

جریان های احتمال برابرند با:

$$\begin{aligned} J_{in} &= \frac{\hbar k}{m} \\ J_{ref} &= \frac{\hbar k}{m} R^2 = \frac{\hbar k}{m}(\frac{k-q}{k+q})^2 \\ J_{tr} &= \frac{\hbar q}{m} T^2 = \frac{\hbar q}{m}(\frac{2k}{k+q})^2. \end{aligned} \tag{104}$$

هرگاه این جریان ها را درتعداد کل ذرات تابیده یعنی N ضرب کنیم، کمیت های بدست آمده یعنی NJ_{in}، NJ_{ref} و NJ_{tr} به ترتیب تعداد ذرات تابیده، تعداد ذرات بازتابیده و تعداد ذرات عبورکرده را درواحد زمان نشان می دهند.
نتایج بالا نشان می دهند که

$$J_{in} = J_{ref} + J_{tr}. \tag{105}$$

این معادله نشان دهنده پایسته بودن تعداد ذرات یا پایسته بودن احتمال است.

هم چنین دیده می شود که هرچه انرژی ورودی ذرات بیشتر شود، نسبت $\frac{k}{q}$ به سمت یک میل می کند ودرنتیجه $T \longrightarrow 1$ و $R \longrightarrow 0$. این نتیجه باشهود فیزیکی ما نیز سازگاراست زیرا دراین حالت ذرات پرانرژی، حضور پتانسیل را حس نمی کنند.
درحدی که انرژی E به V_0 نزدیک می شود، یعنی درحد برخورد خراشی، داریم $q \longrightarrow 0$، $T \longrightarrow 2$ و $R \longrightarrow 1$. این امر به این معناست که همه ذرات پس ازبرخورد خراشی با پتانسیل برمی گردند، اما اینکه $|T|^2$ برابربا 4 است به این معنانیست که جریان عبورکننده ذرات نیز زیاد شده است زیرااین جریان متناسب با q و درنتیجه برابر با صفراست.

حالت دوم: $E \leq V_0$.

برای این حالت پارامتر های زیر را معرفی می کنیم:

$$k := \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \qquad q := \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}. \tag{106}$$

www.Endbook.net

درنتیجه معادلات بالا به شکل زیردرمی آیند:

$$\begin{aligned} -\frac{d^2\psi}{dx^2} &= k^2 \qquad x<0 \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} &= q^2 \qquad 0\le x. \end{aligned} \tag{107}$$

با حل زیر:

$$\psi = \begin{cases} e^{ikx}+Re^{-ikx} & x\le 0, \\ Te^{-qx} \end{cases} \tag{108}$$

شرط پیوستگی تابع موج و مشتق آن درنقطه $x=0$ منجر به روابط زیرمی شود:

$$\begin{aligned} 1+R &= T \\ ik(1-R) &= -qT, \end{aligned} \tag{109}$$

و درنتیجه

$$T=\frac{2ik}{ik-q}, \qquad R=\frac{ik+q}{ik-q}. \tag{110}$$

دراین حالت داریم $|R|^2=1$ و $|T|^2=\frac{4k^2}{k^2+q^2}$ و جریان های مختلف به شکل زیردرمی آیند:

$$\begin{aligned} J_{in} &= \frac{\hbar k}{m} \\ J_{ref} &= \frac{\hbar k}{m}R^2 = J_{in} \\ J_{tr} &= 0. \end{aligned} \tag{111}$$

دراین حالت موج بازگشتی نسبت به موج تابیده دارای یک اختلاف فازاست . درواقع داریم

$$\psi_{in}=e^{ikx}, \qquad \psi_{ref}=Re^{-ikx}=e^{-ikx-i\phi} \tag{112}$$

که درآن

$$\phi = tan^{-1}(\frac{2kq}{k^2-q^2}) = tan^{-1}(\frac{2\sqrt{E(V-E)}}{2E-V}). \tag{113}$$

www.Endbook.net

بنابراین ذره پس از برخورد با پتانسیل حتماً برمی گردد و هیچگاه از پتانسیل نمی تواند عبورکند. بااین وجود دامنه احتمال آن درناحیه ای که ازنظرکلاسیک ممنوع بود، برابربا صفرنیست. دراین ناحیه ممنوعه انرژی کل ذره از انرژی پتانسیل آن کمتراست و به نظرمی رسد که انرژی جنبشی ذره منفی است . می توان پرسید که اگر چنین ذره ای را مشاهده کنیم چگونه می توانیم انرژی جنبشی منفی آن را توضیح دهیم. پاسخ این است که هرگاه بخواهیم چنین ذره ای را مشاهده کنیم مجبوریم آنقدربه آن انرژی بدهیم که انرژی جنبشی آن مثبت شود. برای فهم این موضوع به این نکته توجه می کنیم که مشاهده کردن این ذره درناحیه ای به طول تقریبی $\frac{1}{q}$، نیازمندن تاباندن نوری به آن است که طول موج آن بمراتب کمتراز $\frac{1}{q}$ باشد زیرادرغیراین صورت نورتابیده شده نمی تواند ذره را آشکارکند. بنابراین اگر طول موج فوتون های تابیده شده به این ذره را λ بگیریم می بایست داشته باشیم

$$\lambda < \frac{1}{q}. \tag{114}$$

اگر تکانه فوتون را با P نشان دهیم این رابطه به این معناست که

$$P = \frac{h}{\lambda} > hq. \tag{115}$$

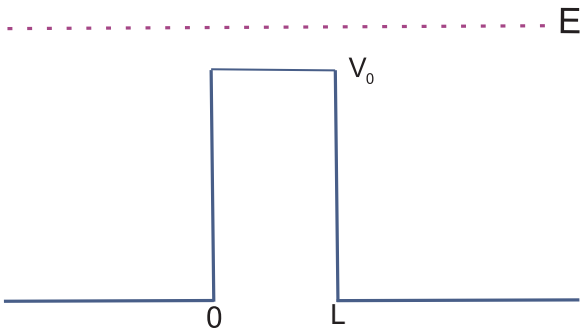
بنابراین انرژی داده شده به ذره ازمرتبه $\Delta E \approx \frac{(hq)^2}{2m} = V_0 - E$ خواهد بود. درنتیجه انرژی ذره پس ازبرخورد ازمقدار $E + \Delta E \approx V_0$ بیشترخواهد بود. این امر به این معناست که هرگاه بخواهیم ذره را درناحیه ممنوعه مشاهده کنیم ناگزیر می بایست آن را به بالای پتانسیل بیاوریم و مشاهده کنیم که دراین صورت انرژی جنبشی آن مثبت خواهد بود.

۱۱ سد پتانسیل مربعی

شکل ۸۱ یک سد پتانسیل مربعی را نشان می دهد. این پتانسیل را می توان تقریبی از یک پتانسیل دافعه واقعی با برد تقریبی $\frac{L}{2}$ درنظرگرفت. هدف ما مطالعه مسئله پراکندگی از این سد پتانسیل است. می خواهیم ضرایب عبور و انعکاس را برحسب انرژی ذرات تابیده و مشخصات پتانسیل بدست آوریم.

حالت اول: $E > V_0$:

www.Endbook.net



شکل ۸۱: سد پتانسیل

نخست حالتی را بررسی می کنیم که انرژی ذرات از ارتفاع سد بیشتراست. دراین حالت داریم

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx} & x \leq 0, \\ Ae^{iqx} + Be^{-iqx} & 0 \leq x \leq L, \\ Te^{ikx} & L \leq x. \end{cases} \tag{116}$$

شرایط مرزی درنقطه $x = 0$ عبارتنداز:

$$\begin{aligned} 1 + R &= A + B \\ ik(1 - R) &= iq(A - B). \end{aligned} \tag{117}$$

شرایط مرزی در نقطه $x = L$ نیز برابرند با:

$$\begin{aligned} Ae^{iqL} + Be^{-iqL} &= Te^{ikL} \\ iq(Ae^{iqL} - Be^{-iqL}) &= ikTe^{ikL}. \end{aligned} \tag{118}$$

باحذف R از معادلات 117 و هم چنین T از معادلات 170 به دو معادله زیر برای ضرایب A و B می رسیم:

$$(k + q)A + (k - q)B = 2$$

www.Endbook.net

$$e^{iqL}(k-q)A + e^{-iqL}(k+q)B = 0. \tag{119}$$

باحل این دو معادله ضرایب A و B بدست می آیند:

$$\begin{aligned} A &= 2e^{-iqL}\frac{k+q}{4q\cos qL - 2ik(1+\frac{q^2}{k^2})\sin qL} \\ B &= -2e^{iqL}\frac{k-q}{4q\cos qL - 2ik(1+\frac{q^2}{k^2})\sin qL}. \end{aligned} \tag{120}$$

با جایگذاری این ضرایب درمعادلات 119،170 ضرایب R و T بدست می آیند. خواهیم داشت:

$$R = \frac{(k^2-q^2)\sin qL}{(k^2+q^2)\sin qL + 2iqk\cos qL}, \tag{121}$$

و

$$T = e^{-ikL}\frac{2iqk}{(k^2+q^2)\sin qL + 2iqk\cos qL}. \tag{122}$$

درنتیجه ضرایب انعکاس و عبور به ترتیب زیربدست می آیند:

$$|R|^2 = \frac{(k^2-q^2)^2\sin^2 qL}{(k^2+q^2)^2\sin^2 qL + 4q^2k^2\cos^2 qL}, \tag{123}$$

$$|T|^2 = \frac{4q^2k^2}{(k^2+q^2)^2\sin^2 qL + 4q^2k^2\cos^2 qL}. \tag{124}$$

کمیت $|R|^2$ درواقع نسبت تعداد ذرات منعکس شده به ذرات تابیده و کمیت $|T|^2$ نسبت ذرات عبورکرده به ذرات تابیده را نشان می دهند. نخست به مطالب زیر توجه می کنیم:

۱ – یک محاسبه ساده نشان می دهد که شرط زیرهمواره برقراراست

$$|R|^2 + |T|^2 = 1, \tag{125}$$

که به معنای بقای تعداد ذرات است.

۲ – هرگاه $E >> V_0$ ، آنگاه $q \approx k$ و درنتیجه $|R|^2 \approx 0$ و $|T|^2 \approx 1$. این نتیجه ازنظرفیزیکی نیز مورد انتظاراست زیرا ذرات پرانرژی سد پتانسیل را حس نمی کنند.

www.Endbook.net

۳ – هرگاه $E = V_0$، آنگاه $q = 0$. دراین حالت یعنی درحد برخوردهای خراشی ضرایب بالا به صورت زیردرمی آیند:

$$|R|^2 = \frac{k^2L^2}{4 + k^2L^2} = \frac{1}{1 + (\frac{\lambda}{\pi L})^2}$$
$$|T|^2 = 1 - |R|^2 = \frac{(\frac{\lambda}{\pi L})^2}{1 + (\frac{\lambda}{\pi L})^2}, \qquad (126)$$

که درآن از تعریف $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ استفاده کرده ایم و بجای تکانه ذرات ورودی نیز از رابطه $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$ استفاده کرده ایم.

۴ – ضرایب عبور وانعکاس هردو توابعی تناوبی از پهنای چاه هستند. به این معناکه

$$|T|^2(L + \frac{2\pi}{q}) = |T|^2(L), \qquad |R|^2(L + \frac{2\pi}{q}) = |R|^2(L). \qquad (127)$$

هرگاه شرط $qL = n\pi$ برقرار باشد بدست می آوریم:

$$|R|^2 = 0, \qquad |T|^2 = 1. \qquad (128)$$

هرگاه شرط $qL = (n + \frac{1}{2})\pi$ برقرارباشد بدست می آوریم:

$$|R|^2 = (\frac{k^2 - q^2}{k^2 + q^2})^2 = (\frac{V_0}{2E - V_0})^2$$
$$|T|^2 = \frac{4q^2k^2}{(k^2 + q^2)^2} = \frac{4E(E - V_0)}{(2E - V_0)^2}. \qquad (129)$$

این نتایج از نظر فیزیکی نیز قابل توضیح هستند.

حالت دوم: $0 \leq E \leq V_0$ دراین حالت کافی است که درروابط 122 ،121 جایگزینی زیر را انجام دهیم:

$$q \longrightarrow iq, \qquad q = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}. \qquad (130)$$

بااین جایگزینی خواهیم داشت:

$$R = \frac{(k^2 + q^2)\sinh qL}{(k^2 - q^2)\sinh qL + 2iqk\cosh qL}, \qquad (131)$$

و

www.Endbook.net

$$T = e^{-ikL}\frac{2iqk}{(k^2-q^2)\sinh qL + 2iqk\cosh qL}. \tag{132}$$

دراین حالت ضرایب انعکاس و عبور برابرخواهند بود با:

$$|R|^2 = \frac{(k^2+q^2)^2\sinh^2 qL}{(k^2-q^2)^2\sinh^2 qL + 4q^2k^2\cosh^2 qL}, \tag{133}$$

و

$$|T|^2 = \frac{4q^2k^2}{(k^2-q^2)^2\sinh^2 qL + 4q^2k^2\cosh^2 qL}. \tag{134}$$

غیر صفر بودن ضریب عبور به این معنی است که ذره بااحتمالی می تواند علیرغم کمتربودن انرژی اش از سد پتانسیل، ازاین ناحیه ممنوعه عبور کند. این پدیده را تونل زنی می گویند و شواهد متعددی برای درستی آن از نظرتجربی وجود دارد.
چند نکته درمورد ضرایب عبور وبازگشت جالب توجه اند:
۱ — دراین حالت هیچ کدام از ضرایب عبود و یا انتقال تابع تناوبی برحسب پهنای پتانسیل نیستند، بلکه با افزایش پهنای پتانسیل ضریب عبور به سمت صفر میل کرده و ضریب بازگشت به سمت یک میل می کند.

۲ — درحد انرژی های بسیارکم یعنی $E \longrightarrow 0$، یا $k \longrightarrow 0$ ، خواهیم داشت $|R|^2 \longrightarrow 1$, $|T|^2 \longrightarrow 0,$ که این نتیجه با شهود فیزیکی مانیز سازگاراست.

۳ — درحدی که ارتفاع سد نسبت به انرژی ذره خیلی زیاد باشد، به عبارت دقیق تر وقتی که شرطِ $qL = \sqrt{\frac{2m(v_0-E)}{\hbar^2}}L >> 1$، برآورده شود، می توان ضریب عبور را به صورت زیر تقریب زد:

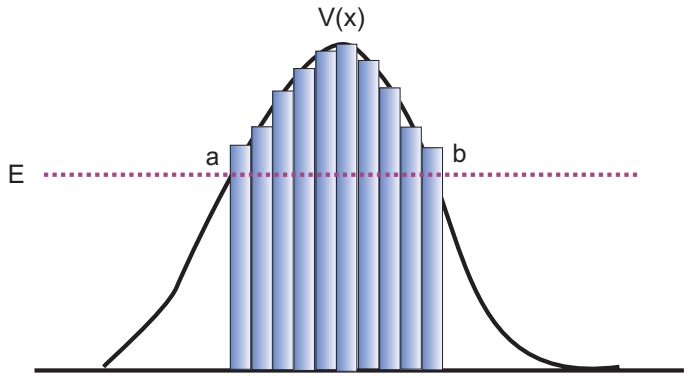
$$|T|^2 \approx \frac{16q^2k^2}{(k^2+q^2)^2}e^{-2qL} = (\frac{4qk}{k^2+q^2})^2 e^{-2qL}. \tag{135}$$

در نتیجه

$$\log|T|^2 = 2\log(\frac{4qk}{^2+q^2}) - 2qL \approx -2qL = -2\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}L. \tag{136}$$

این نتیجه برای یک سد پتانسیل مربعی بدست آمده است. حال اگر یک سد پتانسیل دلخواه داشته باشیم که ذرات کم انرژی به آن می تابند می توانیم سد پتانسیل را به صورت دنباله ای ازسد های پتانسیل مربعی با ارتفاع های متفاوت و پهناهای

www.Endbook.net



شکل ۹۱: محاسبه تونل زنی از یک پتانسیل دلخواه

یکسان Δx درنظرگرفته و باضرب کردن ضرایب عبورازهرکدام ازاین سدهای مربعی ضریب عبود کلی را بدست آوریم. درنتیجه

$$\log|T|^2 \approx -2\sum_x q(x)\Delta x = -2\int\sqrt{\frac{2m(V(x)-E)}{\hbar^2}}dx, \tag{137}$$

و درنتیجه

$$\boxed{|T|^2 \approx e^{-2\int_a^b dx\sqrt{\frac{2m(V(x)-E)}{\hbar^2}}}.} \tag{138}$$

که درآن حدودانتگرال یعنی a و b نقاطی هستند که شرط $V(a)=V(b)=E$ برآورده می شود. این نقاط درشکل (۹۱) نشان داده شده اند. عبارت بالا تقریب خوبی برای محاسبه احتمال تونل زنی ازیک سد پتانسیل دلخواه است.

درزیربخش بعدی مثال هایی از پدیده تونل زنی را مطالعه می کنیم.

۱۲ مثالهایی از پدیده تونل زنی

۱.۱۲ کندن الکترون از فلز

یک قطعه فلزازکنارهم قرارگرفتن تعداد زیادی بلورهای خالص باابعاد کوچک درحدود میکرون یا میلی متر تشکیل شده است. هرمیکرو بلورساختمان هندسی کاملاً منظمی دارد که از تکرار یک سلول درفضای سه بعدی تشکیل شده است. شکل هندسی سلول بستگی به نوع فلز دارد. میکروبلورها ازیکدیگر با صفحاتی که نظم بلوری را به هم می زنند جدا می شوند. هرقطعه بلور خالص از یون های مثبتی تشکیل شده است که درآرایه ای سه بعدی مرتب شده اند. هرکدام ازاین یون ها یک یا چند الکترون آزاد کرده اند. این الکترون ها درمحیط سه بعدی تقریباً آزاد هستند و به هیچ یون خاصی وابسته نیستند. دراولین تقریب می

www.Endbook.net

توان ازبرهم کنش الکترون ها بایکدیگر نیز صرف نظرکرد. تنهاچیزی که الکترون ها رامقید می کند دیواره های فلزاست والکترون ها باوجودی که آزاد هستند نمی توانند ازمحیط فلز فرارکنند. بنابراین درساده ترین تقریب می توان محیط فلز را مثل یک چاه پتانسیل سه بعدی و عمیق درنظرگرفت که ابعاد آن با ابعاد فلز برابراست. دردرس فیزیک حالت جامد خواننده می تواند توصیف دقیق تری از ساختمان فلز و حرکت الکترون ها درون آن را دنبال کند. بااین وجود بسیاری از خواص مهم فلز را باهمین تصویر ساده نیز می توان فهمید. دراین جا بازهم برای تطابق با عنوان این درس و برای سادگی فلز را یک بعدی درنظرمی گیریم و آن را با یک چاه پتانسیل به عمق V_0 و پهنای L نشان می دهیم. سطوح انرژی یک الکترون به جرم $m = 9.11 \times 10^{-11}$ دراین چاه که ابعاد آن برای یک بلور خالص ازمرتبه $L \approx 10^{-3}\ m$ می گیریم از مرتبه

$$\epsilon \approx \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{L^2} \approx \frac{10^{-68}}{10^{-30}} \times 10^6 \approx 10^{-32} Joule \approx 10^{-13}\ electron\ volt \tag{139}$$

است. برای کندن یک الکترون ازسطح فلز به اشعه x یا فرابنفش حتیاج داریم که طول موج آن ازمرتبه چند ده آنگستروم است. انرژی این فوتون هاازمرتبه زیراست

$$h\nu \approx \hbar\frac{c}{\lambda} \approx \frac{10^{-34} \times 10^8}{10 \times 10^{-10}} \approx 10^{-17}\ Joule \approx 100\ \ electron\ volt \tag{140}$$

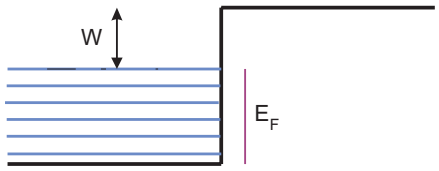
است. بنابراین درمقایسه باترازهای انرژی یک الکترون عمق چاه بسیاربسیاربزرگ است و مامی توانیم برای محاسبه سطوح انرژی الکترون درچاه، عمق چاه را عملاً بی نهایت بگیریم. برای چنین چاهی می دانیم که سطوح انرژی تنهابایک عدد کوانتومی مشخص می شوند و عبارتنداز:

$$\epsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m}(\frac{n\pi}{L})^2. \tag{141}$$

برای ادامه بحث می بایست به اصل طرد پاوولی اشاره کنیم. این اصل که ناشی از تلفیق مکانیک کوانتومی و نسبیت خاص است بیان می کند که ذراتی که اسپین آنها نیمه صحیح است مثل الکترون که اسپین آن $\frac{1}{2}$ است نمی توانند ترازهای انرژی یکسانی اشغال کنند وهرکدام ازآنها می بایست دریک ترازانرژی قراربگیرد. این خاصیت را اصل طرد پاوولی می خوانیم. شکل دقیق این اصل را دردرس های آینده خواهیم آموخت. بنابراین دردرون چاه درهرسطح انرژی ϵ_n تنها یک الکترون قرارخواهدگرفت. ازآنجا که درحالت تعادل بلور فلزی مثل هرسیستم دیگری تمایل دارد که به کمترین انرژی خود برسد، الکترون ها سطوح انرژی را از پایین به بالا اشغال می کنند (شکل ۰۲). بالاترین سطح انرژی که اشغال می شود سطح فرمی نام دارد و با E_F نشان داده می شود. دریک بعد انرژی فرمی را براحتی می توان بدست آورد. ازآنجا که سطح انرژی فرمیِ E_F توسط N اُمین الکترون اشغال شده است داریم

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\pi}{L})^2 N^2. \tag{142}$$

www.Endbook.net



شکل ۰۲: سطوح انرژی الکترون ها درغیاب میدان الکتریکی — تمام سطوح انرژی تازیرتراز فرمی پرهستند.

بنابراین سطح انرژی فرمی توسط چگالی الکترون ها درفلز تعیین می شود. بهتراست تخمینی از سطح انرژی فرمی داشته باشیم.
هرگاه یون ها که به فاصله ای ازمرتبه یک آنگستروم ازیکدیگر جداشده اند هرکدام یک الکترون به محیط فلز واگذارکنند چگالی الکترون ها برابر با $10^{10}\ m^{-1}$ خواهد بود. بنابراین برای یک فلز انرژی فرمی از مرتبه زیراست

$$E_F \approx \frac{10^{-68}}{10^{-30}} 10^{20} \approx 10^{-18}\ Joule \approx 10\ \ electron\ \ volt. \tag{143}$$

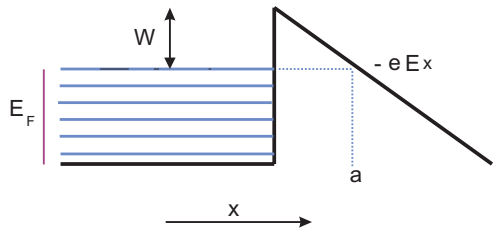
آیا ممکن است که بعضی از ترازهای زیرسطح فرمی خالی باشند و درعوض الکترون ها بعضی از ترازهای بالاتراز سطح فرمی را اشغال کرده باشند؟ الکترون هامی توانند دراثر برهم کنش با یکدیگر و یا برخورد با یون ها و یا تابش اشعه خارجی و هم چنین دراثراختلالات گرمایی به سطوح خالی بالاتراز سطح فرمی صعود کنند. دردمای معمولی اتاق که آن را درحدود $300\ K^\circ$ می گیریم
میزان انرژی گرمایی ازمرتبه

$$kT \approx 1.38 \times 10^{-23} \times 300 \approx 4 \times 10^{-21}\ Joule \approx 3 \times 10^{-2}\ \ electron\ volt \tag{144}$$

است که یکهزارم انرژی فرمی است. به همین دلیل الکترون ها ی سطوح زیرین دراثراختلالات گرمایی معمول نمی توانند به بالای سطح فرمی صعود کنند. دردمای معمولی اتاق تنها تعداد کمی از الکترون های نزدیک سطح فرمی به سطوح بالاتر تحریک می شوند.
هرگاه عمق چاه را V_0 و سطح انرژی فرمی را E_f بگیریم تفاوت این دو یعنی $V_0 - E_f$ عبارت است از مقدارانرژی که برای کندن الکترون های نزدیک سطح فرمی ازفلز لازم است. این مقدارانرژی همان چیزی است که به آن تابع کارمی گوییم و آن را با W نشان می دهیم. بنابراین $W = V_0 - E_F \approx 100\ \ ev.$.

حال نشان می دهیم که چگونه دراثراعمال یک میدان الکتریکی درنزدیکی یک فلز می توان امکان تونل زنی برای الکترون های نزدیک سطح فرمی را فراهم کرده و آن هارا از چاهی که درآن گیرافتاده اند آزادکرد. شکل ۱۲ انرژی پتانسیل را درحضورمیدان الکتریکی درنزدیکی فلز نشان می دهد. لبه سمت راست چاه درنقطه $x = 0$ قرار دارد. میدان الکتریکی درناحیه

www.Endbook.net



شکل ۱۲: سطوح انرژی الکترون ها درحضور میدان الکتریکی – الکترون های نزدیک تراز فرمی به خارج ازفلز تونل می زنند.

$x > 0$ تعریف شده است وجهت آن نیز روبه طرف چپ است. پتانسیل الکتریکی که این میدان ایجادمی کند برابراست با $\phi(x) = Ex$. E را اندازه میدان گرفته ایم. بنابراین انرژی یک الکترون دراین میدان برابراست با $V(x) = -eEx$. درنتیجه چاه پتانسیل به صورت زیرتغییرشکل می دهد:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x \leq 0, \\ 0 & 0 \leq x \leq L, \\ V_0 - eEx & L \leq x. \end{cases} \tag{145}$$

حال الکترون های نزدیک سطح فرمی می توانند ازاین پتانسیل به سمت راست تونل بزنند و ازفلز رها شوند. ازروی شکل معلوم است که $V_0 - eEa = E_F$ و یا $a = \frac{W}{eE}$.

احتمال تونل زنی الکترونی که انرژی آن برابر با E_F است، یعنی الکترونی که درنزدیکی سطح فرمی است برابراست با

$$|T|^2 = e^{-2\int_0^a dx \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E_F)}} = e^{-2\int_0^a dx \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-eEx-E_F)}} = e^{-2\int_0^a dx \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(W-eEx)}}. \tag{146}$$

بامحاسبه این انتگرال احتمال تونل زنی برابرمی شود با:

$$|T|^2 = e^{-\frac{4}{3}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\frac{W^{\frac{3}{2}}}{eE}}. \tag{147}$$

این رابطه به رابطه $Fowler - Nordheim$ مشهوراست.

بیایید تخمین بزنیم که برای یک میدان الکتریکی متعارف از قبیل $100\ volt\ m^{-1}$ احتمال تونل زنی چقدراست ؟ برای این محاسبه تابع کار را برابر با $100\ ev$ می گیریم. درنتیجه باجایگذاری مقادیر عددی و صرف نظرکردن از ضرایبی که ازمرتبه ۱

www.Endbook.net

هستند خواهیم داشت:

$$|T|^2 \approx exp(-\frac{4}{3}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\frac{W^{\frac{3}{2}}}{eE}) \approx exp(-\sqrt{\frac{10^{-30}}{10^{-68}}}\frac{(100\times 10^{-19})^{3/2}}{10^{-19}\times 100}) \approx exp(-10^{11}). \quad (148)$$

این عدد به اندازه غیرقابل تصوری کوچک است. درواقع عددی است که حدود ۱۰۰ میلیارد صفر بعدازممیزدارد. البته باید دقت کرد که یک الکترون دریک ثانیه بارها و بارها به دیواره پتانسیل برخورد می کند . هم چنین دردرون فلزالکترون های بسیاری درنزدیک سطح فرمی وجود دارند که می توانند این تونل زنی را انجام دهند. این دو کمیت را تخمین می زنیم. سرعت الکترون درون فلزازمرتبه $v \approx \sqrt{\frac{2E_F}{m}} \approx \sqrt{\frac{10\times 10^{-19}}{10^{-30}}} \approx 10^6$ متربرثانیه است. هرگاه ابعاد میکرو بلور را یک میلی متر یا 10^{-3} متر بگیریم، می توانیم تخمین بزنیم که دریک ثانیه یک الکترون چند بار به دیواره چاه پتانسیل برخورد می کند. این تعداد ازمرتبه زیراست:

$$n \approx \frac{v}{2L} \approx \frac{10^6}{10^{-3}} \approx 10^9. \quad (149)$$

حتی اگر تعداد الکترون هایی را که درنزدیک سطح فرمی قرار دارند وامکان تونل زنی دارند عددی از مرتبه 10^{10} هم بگیریم بازباتوجه به کوچکی بی اندازهٔ $|T|^2$ جریانی که بدست می آید تقریباً برابر باصفراست. برای یک جریان قابل ملاحظه می بایست یامیدان الکتریکی فوق العاده بزرگ باشد و یا اینکه فاصله a خیلی کم باشد. اگرچه نمی توان میدان های فوق العاده قوی ای آنچنان ایجادکرد که ضریب احتمال $|T|^2$ قابل ملاحظه شود، ولی می توان شرایطی ایجاد کرد که درآن فاصله تونل زنی یعنی a بسیارکم شود. برای این کارمی توان سطح صیقلی دوفلز را بالایه ای ازاکسید به هم چسپاند. ضخامت لایه اکسید درآزمایشی از این نوع بالایه های $Ni - NiO - Pb$ درحدود ۵۰ آنگستروم است. قبل از اعمال میدان الکتریکی سطوح انرژی دوفلز به ترتیب نشان داده شده درشکلِ ۲۲ هستند. ازآنجا که سطوح فرمی درهردوفلز هم تراز هستند درغیاب میدان الکتریکی هیچ نوع تونل زنی اتفاق نمی افتد. بعدازاعمال میدان الکتریکی سطوح انرژی به صورت نشان داده شده درشکل ۳۲ درمی آیند.

درنتیجه احتمال تونل زنی برابراست با:

$$\begin{aligned} |T|^2 &\approx e^{-2\int_0^a dx\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E_F)}} = e^{-2\int_0^a dx\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(W-eEx)}} \\ &= e^{-2\sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2}}\int_0^a dx\sqrt{1-\frac{eE}{W}x}} = e^{-2\sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2}}\int_0^a dx\sqrt{1-\frac{x}{a_0}}} = e^{-\frac{4}{3}\sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2}}a_0(1-(1-\frac{a}{a_0})^{\frac{3}{2}})}. \end{aligned} \quad (150)$$

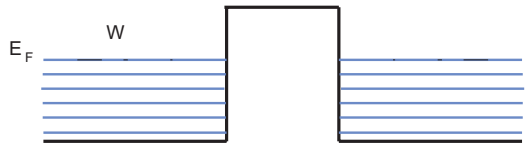
که درآن $a_0 := \frac{W}{eE}$. ازآنجا که برای یک میدان الکتریکی متعارف، $a << a_0$، می توانیم بنویسیم

$$|T|^2 \approx e^{-2\sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2}}a} \quad (151)$$

برای مقادیر

$$W \approx 10\ ev \approx 10^{-17}\ Joule, \qquad a \approx 50A^\circ = 5\times 10^{-9}\ meter, \qquad m \approx 10^{-30}\ Kg, \quad (152)$$

www.Endbook.net



شکل ۲۲: سطوح انرژی الکترون ها ی دو فلز درغیاب میدان الکتریکی – سطوح فرمی دردوفلز هم تراز هستند.

بدست می آوریم

$$|T|^2 \approx e^{-40}. \tag{153}$$

حال می توانیم جریانی را که ازاین تونل زنی حاصل می شود حساب کنیم. اگر تعداد دفعاتی را که الکترون به دیواره پتانسیل برخورد می کند را مطابق با محاسبات قبلی برابر با $n \approx 10^9\ s^{-1}$ قرار دهیم و تعداد الکترون هایی را که تونل زنی انجام می دهند برابر با $r = 10^{10}$ قرار دهیم، جریانی که بدست می آید برابرخواهد بود با

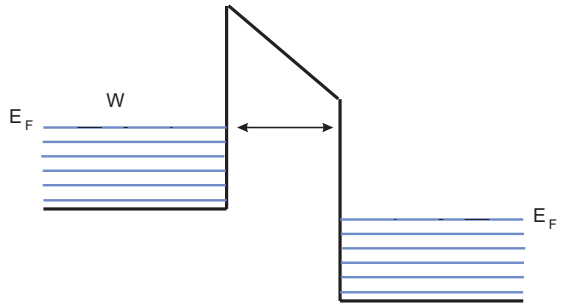
$$I \approx |T|^2 ner \approx e^{-40} \times 10^9 \times 10^{10} \approx 10^{-17} \times 10^{-19} \times 10^{19} = 10^{-17}\ Amp = 10^{-11}\ \mu Amp. \tag{154}$$

همانطورکه مشاهده می شود مقداراین جریان بسیارکوچک است.

۲.۱۲ واپاشی آلفا

یکی دیگر ازپدیده هایی که تونل زنی درآنها نقش ایفامی کند واپاشی هسته های سنگین رادیواکتیو ازطریق گسیل خودبخودی ذرات آلفاست. یک ذره آلفا یا هسته هلیوم از دونوترون و دو پروتون تشکیل شده است. بدون اینکه بخواهیم به جزییات نیروهای بین اجزای هسته بپردازیم می خواهیم بایک مدل ساده گسیل خودبخود ذرات آلفا را ازهسته های سنگین مطالعه کنیم. می خواهیم بدانیم احتمال گسیل یک ذره آلفا دریک مدت زمان معین ازیک هسته چقدراست؟ براساس پاسخ به این سوال می خواهیم نیمه عمرآن هسته را تخمین بزنیم. می دانیم که نیروی هسته ای فوق العاده قوی و درعین حال بسیارکوتاه برداست. بنابراین می توانیم تصورکنیم که ذره آلفا دردرون یک چاه بسیارعمیق وپهنای کم گیرافتاده است. ازآنجا که عمق چاه بی

www.Endbook.net



شکل ۳۲: سطوح انرژی الکترون ها ی دوفلز درحضور میدان الکتریکی – الکترون های نزدیک سطح فرمی ازیک فلز به فلز دیگر تونل می زنند.

نهایت نیست این ذره می تواند بااحتمالی از دیواره های چاه به بیرون تونل بزند و از چاه بگریزد. البته به محض بیرون آمدن ازچاه این ذره گرفتار نیروی جاذبه الکترومغناطیسی می شود که با نیروی $F = \frac{2(Z-2)e^2}{r^2}$ آن را به درون چاه جذب می کند. این نیرو برخلاف نیروی هسته ای بلند برداست. شکل کامل پتانسیل به صورت نشان داده شده درشکل ۴۲ است. دراین شکل و در محاسبات زیر بار ذرهٔ آلفا را با Z_1 وهسته سنگین باقیمانده را با Z_2 نشان می دهیم.

ذره آلفامی تواند از سد پتانسیلی که دربرابرآن است تونل بزند. احتمال تونل زنی برابراست با

$$|T|^2 = e^{-G} \qquad G = \int_R^b 2\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)}. \tag{155}$$

پتانسیل $V(x)$ را به شکل نشان داده شده در ۵۲ تقریب می زنیم.

درنتیجه خواهیم داشت

$$G = 2\int_R^b 2\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} - E)} = 2\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}Z_1 Z_2 e^2}\int_R^b \sqrt{\frac{1}{r} - \frac{1}{b}}dr \tag{156}$$

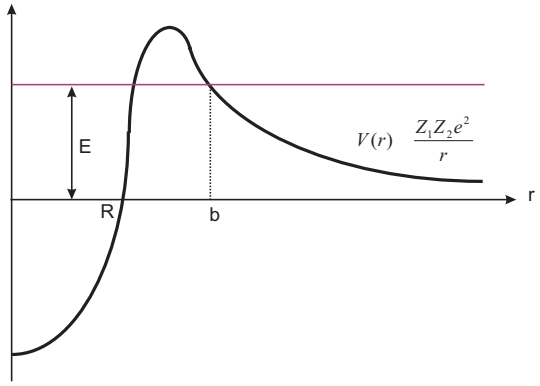
با محاسبه انتگرال بدست می آوریم:

$$\begin{aligned} I &= \int_R^b \sqrt{\frac{1}{r} - \frac{1}{b}}dr = \frac{1}{\sqrt{b}}\int_R^b \sqrt{b-r}\frac{dr}{r^{\frac{1}{2}}} \\ &= 2\sqrt{b}\int_{\theta_0}^{\frac{\pi}{2}} \cos^2\theta d\theta = \sqrt{b}\left(\frac{\pi}{2} - \sin^{-1}\sqrt{\frac{R}{b}} - \sqrt{\frac{R}{b}(1-\frac{R}{b})}\right). \end{aligned} \tag{157}$$

ودرنتیجه

$$G = 2\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}Z_1 Z_2 e^2}\sqrt{b}\left(\cos^{-1}\sqrt{\frac{R}{b}} - \sqrt{\frac{R}{b}(1-\frac{R}{b})}\right). \tag{158}$$

www.Endbook.net



شکل ۴۲: پتانسیلی که ذره آلفا می بیند.

درانرژی های پایین داریم $b >> R$ و بنابراین G را می توان به شکل زیرتقریب زد:

$$G \approx \sqrt{\frac{2mZ_1Z_2e^2b}{\hbar^2}}\pi. \tag{159}$$

ازآنجاکه انرژی ذره آلفا برابراست با E وباهمین انرژی نیز آزاد می شود و به بی نهایت می رود می توان بااستفاده ازقانون بقای انرژی مقدار b را برحسب انرژی نهایی ذره آلفا حساب کرد. درواقع داریم

$$E = \frac{Z_1Z_2e^2}{b} \qquad \longrightarrow \qquad b = \frac{Z_1Z_2e^2}{E}, \tag{160}$$

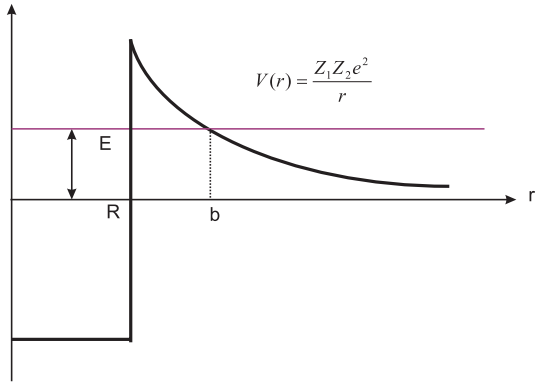
وباجایگذاری این مقدار درعبارت G نهایتاً خواهیم داشت،

$$G \approx \frac{\pi Z_1Z_2e^2}{\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}}. \tag{161}$$

احتمال عبور از یک سد دریک برخورد برابراست با e^{-G}. بنابراین تعداد برخوردهای لازم برای یک بارعبور برابراست با $n = e^G$. زمان بین هر دو برخورد تقریباً برابر است با فاصله زمانی که ذره آلفا یک بارفاصله R را طی می کند یعنی $\tau \approx \frac{R}{v}$ که درآن v سرعت ذره آلفا درون هسته اتم است. بنابراین مدت زمان لازم برای صدور یک ذره آلفا برابر است با

$$T \approx \frac{R}{v}e^G = \frac{R}{\sqrt{2E/m}}e^{\frac{\pi Z_1Z_2e^2}{\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}}}.$$

www.Endbook.net



شکل ۵۲: تقریب ساده ا ی از پتانسیلی که ذره آلفا می بیند.

پس یک هسته اتم بعداززمان T ثانیه بطورتقریبی تبدیل به یک هسته سبک ترمی شود، و فرایندی شبیه به فرایند زیررا طی می کند:

$$\cdots \quad N_z^A \longrightarrow N_{z-2}^{A-4} \longrightarrow N_{z-4}^{A-8} \longrightarrow \cdots. \tag{162}$$

مدت زمان T همان نیمه عمر هسته مادر با عدداتمی Z است. برای ذره α ، داریم $Z_2 = 2$ ، $Z_1 = Z - 2$. بنابراین نیمه عمر هسته هایی که ازطریق گسیل ذره α واپاشی می کنند ازرابطه نیز بدست می آید:

$$T \approx \frac{R}{\sqrt{2E/m}} e^{\frac{2\pi(Z-2)e^2}{\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}}}. \tag{163}$$

می توانیم مدت زمان T را تخمین بزنیم. ازآنجاکه‌پتانسیل الکتریکی را به صورت $\frac{Z_1Z_2e^2}{r}$ نوشته ایم می بایست واحد های دستگاه گاووسی را به کاربریم.

برای ذره α ، داریم $Z_2 = 2$ ، $Z_1 = Z - 2$ و $m \approx 4 \times 2 \times 10^{-24}\ g$. هرگاه هسته مادر را اورانیوم بگیریم داریم $Z = 92$. انرژی ذرات آلفا را درحدود ϵ میلیون الکترون ولت می گیریم که انرژی نمونه هسته ای است. بنابراین $E \approx \epsilon \times 10^6 \times 10^{-12} = \epsilon \times 10^{-4}\ erg$. شعاع هسته یا R نیز درحدود یک فرمی یا $10^{-13}\ cm$ فرمی است. هم چنین داریم $e = 4.8 \times 10^{-10}\ esu$ بنابراین خواهیم داشت

$$G \approx e^{37/\sqrt{\epsilon}} \approx 10^{16/\sqrt{\epsilon}}. \tag{164}$$

و

$$\frac{R}{v} = \frac{10^{-13}}{\sqrt{\frac{2\times\epsilon\times10^{-4}}{8\times10^{-24}}}} \approx \frac{2}{\sqrt{\epsilon}} \times 10^{-23}\ sec \approx \frac{0.6}{\sqrt{\epsilon}} \times 10^{-30} \text{ سال}. \tag{165}$$

www.Endbook.net

درنتیجه نیمه عمر برحسب سال به ترتیب زیر بدست می آید:

$$T \approx \frac{0.6}{\sqrt{\epsilon}} 10^{16/\sqrt{\epsilon}} \times 10^{-30} \text{ سال.} \tag{166}$$

۱۳ پتانسیل پریودیک

دراین زیر بخش یک پتانسیل پریودیک را مطالعه می کنیم. دریک بلوریون ها دریک آرایه سه بعدی که ازتکرار یک سلول بنیادی ایجاد شده است جای گرفته اند. هریون یک یاچند الکترون درمحیط جامد آزاد کرده است و این الکترون ها تحت تاثیر جاذبه تمام یون های جامد هستند. درساده ترین تقریب می توان ازبرهم کنش الکترون ها بایکدیگر صرف نظرکرد و تنها برهم کنش یک الکترون را با شبکه یون ها درنظرگرفت. چنین شبکه ای یک پتانسیل پریودیک درتمام فضا ایجادمی کند. هدف ما دراین بخش آن است که ساده ترین مدل ازیک پتانسیل پریودیک را مطالعه کنیم و ببینیم که دریک پتانسیل پریودیک طیف انرژی چه ویژگی های متمایزی پیدامی کند. برای سادگی پتانسیلی به شکل زیردرنظرمی گیریم که از چاه های پتانسیل دلتا درفواصل a ازیکدیگر تشکیل شده است و این چاه ها از $-\infty$ تا ∞ گسترده شده اند:

$$V(x) = -\sum_{n=0}^{N-1} V_0 \delta(x - na). \tag{167}$$

خصلت ممتازاین پتانسیل وجود تقارن انتقالی است یعنی

$$V(x + a) = V(x). \tag{168}$$

می دانیم که عملگر انتقال به شکل زیرتعریف می شود:

$$T_a := e^{i\frac{a}{\hbar}P} \tag{169}$$

این عملگر دارای خواص زیراست:

$$T_a X T_a^{-1} = X + a, \qquad T_a|x\rangle = |x - a\rangle, \qquad \langle x|T_a = \langle x + a|. \tag{170}$$

www.Endbook.net

ازاین رابطه می توان نتیجه گرفت که برای هر پتانسیل $V(X)$

$$T_a V(X) T_a^\dagger = V(X+a) \tag{171}$$

ازآنجا که پتانسیل ما متقارن است بنابراین نتیجه می گیریم

$$[T_a, H] = 0. \tag{172}$$

بنابراین می توانیم ویژه حالت های مشترک این دوعملگر را پیداکنیم یعنی ویژه حالت های انرژی را ویژه حالت های T_a نیز بگیریم. برای این کار بهتراست ویژه حالت های T_a را مطالعه کنیم. ازآنجا که T_a یک عملگر یکانی است ویژه مقدارهای آن فازهای خالص هستند. هم چنین باتوجه به رابطه 170 می دانیم که

$$\langle x|T_a|\psi\rangle = \langle x+a|\psi\rangle, \longrightarrow T_a\psi(x) = \psi(x+a). \tag{173}$$

بنابراین ویژه توابع مشترک انرژی و عملگر T_a دارای خاصیت اضافی زیرهستند:

$$\psi(x+a) = e^{i\theta}\psi(x). \tag{174}$$

حال برای حل معادله شرودینگر مطابق معمول معادله را درفاصله بین چاه های دلتا حل می کنیم و سپس شرایط مرزی را درمحل چاه ها بکارمی بریم. می نویسیم

$$\Psi(x) = \begin{cases} \cdots \\ \psi_n(x) = A_n e^{-qx} + B_n e^{qx} \qquad na \le x \le (n+1)a, \\ \cdots. \end{cases} \tag{175}$$

که درآن $q = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}$. یادآوری می کنیم که E منفی است بنابراین q حقیقی است.
شرط پیوستگی تابع موج درنقطه na منجر به رابطه زیرمی شود:

$$\psi_{n-1}(na) = \psi_n(na), \tag{176}$$

ویا

$$A_{n-1}e^{-qna} + B_{n-1}e^{-qna} = A_n e^{-qna} + B_n e^{qna}, \tag{177}$$

www.Endbook.net

ویا

$$(A_{n-1} - A_n)e^{-qna} = (B_n - B_{n-1})e^{qna}. \tag{178}$$

حال مشتق تابع موج را درمحل چاه های پتانسیل بررسی می کنیم. درنقطه $x = na$ داریم:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi'_n(na) - \psi'_{n-1}(na)) - V_0\psi_n(na) = 0. \tag{179}$$

باجایگذاری توابع ψ_n و ψ_{n-1} دراین رابطه بدست می آوریم

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[-qA_ne^{-qna} + qB_ne^{qna} - (-qA_{n-1}e^{-qna} + qB_{n-1}e^{qna})\right] - V_0[A_ne^{-qna} + B_ne^{qna}] = 0 \tag{180}$$

که پس ازمرتب کردن به صورت زیردرمی آید:

$$\left[(q - \frac{2mV_0}{\hbar^2})A_n - qA_{n-1}\right]e^{-qna} + \left[qB_{n-1} - (q + \frac{2mV_0}{\hbar^2})B_n\right]e^{qna} = 0. \tag{181}$$

حال شرط 174 را اعمال می کنیم که براساس آن باید داشته باشیم:

$$\psi_{n+1}(x + a) = e^{i\theta}\psi_n(x), \tag{182}$$

ویا

$$A_{n+1}e^{-q(x+a)} + B_{n+1}e^{q(x+a)} = e^{i\theta}(A_ne^{-qx} + B_ne^{qx}) \qquad \forall\, x \in (na, (n+1)a). \tag{183}$$

ازآنجا که این شرط می بایست برای تمام x های درون بازه فوق برقرارباشد نتیجه می گیریم که بین ضرایب A_n و B_n می بایست رابطه زیربرقرارباشد:

$$A_{n+1}e^{-qa} = e^{i\theta}A_n \qquad B_{n+1}e^{qa} = e^{i\theta}B_n. \tag{184}$$

باتوجه به این شرط رابطه 178 به شکل زیردرمی آید:

$$(e^{-i\theta}e^{-qa} - 1)e^{-qna}A_n = (1 - e^{-i\theta}e^{qa})e^{qna}B_n. \tag{185}$$

www.Endbook.net

هم چنین باتوجه به همین شرط رابطه 186 به شکل زیردرمی آید:

$$e^{-qna}\left[q(1-e^{-qa-i\theta})-\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right]A_n=e^{qna}\left[q(1-e^{qa-i\theta})+\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right]B_n. \tag{186}$$

این دورابطه تنهاوقتی منجر به یک مقدار غیرصفر برای A_n و B_n و درنتیجه یک تابع موج غیرصفر می شوند که دترمینان ماتریس ضرایب برابر با صفرباشد، یعنی :

$$\frac{e^{-qa}-e^{i\theta}}{q(1-e^{-qa-i\theta})-\frac{2mV_0}{\hbar^2}}=-\frac{e^{qa}-e^{i\theta}}{q(1-e^{qa-i\theta})+\frac{2mV_0}{\hbar^2}}. \tag{187}$$

این رابطه پس ازکمی مرتب کردن به صورت ساده زیردرمی آید

$$\cosh qa-\cos\theta=\frac{mV_0}{\hbar^2 q}\sinh qa, \tag{188}$$

ویا

$$\cos\theta=\cosh qa-\frac{mV_0}{\hbar^2 q}\sinh qa. \tag{189}$$

به ازای هرمقدار θ این رابطه مقدار q و درنتیجه انرژی ویژه حالت Ψ را مشخص می کند. برای مطالعه این رابطه بهتراست که متغیر بدون بعدِ y را به صورت $y:=qa$ تعریف کنیم. درنتیجه رابطه فوق به صورت زیردرمی آید:

$$\cosh y-\frac{\lambda}{y}\sinh y=\cos\theta. \tag{190}$$

که درآن $\lambda:=\frac{mV_0a}{\hbar^2}$.

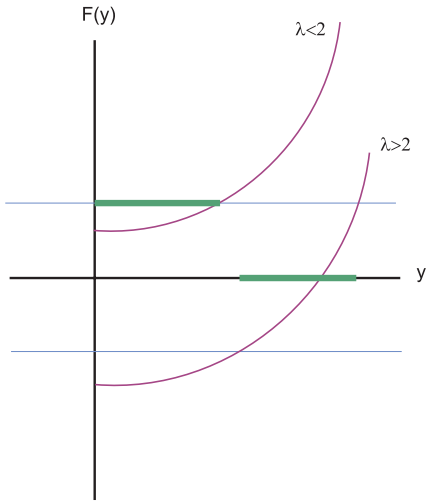
باید به یادداشته باشیم که قدرمطلق طرف راست همواره ازیک کوچکتراست. بنابراین قدرمطلق طرف چپ نیز می بایست بین -1 و 1 باشد،یعنی

$$-1\leq\cosh y-\frac{\lambda}{y}\sinh y\leq 1. \tag{191}$$

این رابطه مقادیر مجاز y و درنتیجه مقادیر مجاز q ویاانرژی را تعیین می کند. برای این کارازروش ترسیمی استفاده می کنیم. تعریف می کنیم

$$f(y):=\cosh y-\frac{\lambda}{y}\sinh y. \tag{192}$$

www.Endbook.net



شکل ٦٢: روش ترسیمی برای بدست آوردن نوارهای انرژی درمدل کرونیگ پنی، توضیح شکل درمتن داده شده است.

با کمی محاسبه معلوم می شود که

$$f(0) = 1 - \lambda, \qquad f(+\infty) = +\infty \qquad f'(0) = 0, \qquad f"(0) = 1 - \lambda. \tag{193}$$

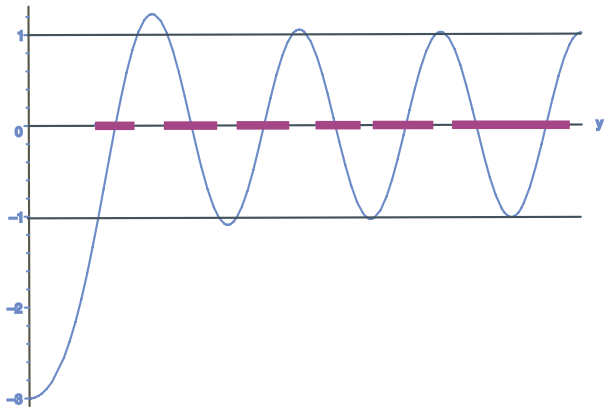
باتوجه به این اطلاعات می توان حل ترسیمی رابطه 196 را مطابق شکل ٦٢ بدست آورد.
درشکل دیده می شود که برای $\lambda = \frac{mV_0\ a}{\hbar^2} < 2$، یعنی وقتی که عمق ویا پهنای چاه ازیک حد بحرانی کمترباشد، سطوح انرژی از لبه چاه شروع می شوند وبرای $\lambda = \frac{mV_0\ a}{\hbar^2} > 2$، یعنی وقتی که عمق یا پهنای چاه ازیک حدبحرانی بیشتر باشد، سطوح انرژی لبه چاه را پرنمی کنند بلکه از پایین ترازلبه شروع می شوند. درهردوحالت نکته مهم آن است که سطوح انرژی یک نوارتشکیل می شوند. تشکیل نوار مشخصه همه پتانسیل های پریودیک است. درواقع یک مسئله مهم درفیزیک حالت جامد تعیین ساختارنواری یا $Band\ Structure$ِسطوح انرژی الکترون ها درجامدات است.

حال فرض کنید که پتانسیل به صورت زیرباشد:

$$V(x) = \sum_{n=0}^{N-1} V_0 \delta(x - na). \tag{194}$$

فرق این پتانسیل با پتانسیل قبلی آن است که V_0 را به $-V_0$ تبدیل کرده ایم. می بایست انرژی را نیز مثبت درنظربگیریم. هدف ما یافتن ساختار نواری برای این پتانسیل است. لازم نیست محاسبه جدیدی انجام دهیم کافی است که تبدیل $V_0 \longrightarrow -V_0$ و $E \longrightarrow -E$ ویا $q \longrightarrow iq$ را درمحاسبات قبلی اعمال کنیم. توابع موج درفاصله چاه ها به شکل امواج ایستاده خواهند بود:

www.Endbook.net



شکل ۷۲: روش ترسیمی برای بدست آوردن نوارهای انرژی درمدل کرونیگ پنی، برای وقتی که انرژی مثبت است و بجای چاه پتانسیل سد پتانسیل داریم.

$$\Psi(x) = \begin{cases} \cdots \\ \psi_n(x) = A_n e^{-iqx} + B_n e^{iqx} \qquad na \le x \le (n+1)a, \\ \cdots. \end{cases} \tag{195}$$

نوارهای انرژی نیزازمعادلات زیربدست می آیند:

$$-1 \le \cos y - \frac{\lambda}{y} \sin y \le 1. \tag{196}$$

حل ترسیمی این معادلات درشکل ۷۲ نشان داده شده است. دیده می شود که دراین حالت تعداد محدودی نوارانرژی وجود دارد که باافزایش انرژی پهنای آنها زیادتر شده و فاصله آنها بایکدیگر کمتر می شود تاسرانجام طیف به صورت پیوسته درمی آید.

www.Endbook.net

درس هفتم : نوسانگر هماهنگ

۱ مقدمه

نوسانگر هماهنگ یکی ازمهمترین مسائلی است که درمکانیک کلاسیک و هم چنین مکانیک کوانتومی به آن برمی خوریم. ذره ای به جرم m که دریک پتانسیل دلخواهی مثل $V(x)$ قرار دارد درنزدیکی نقطه تعادل یا مینیمم اش که آن را با x_0 نشان می دهیم پتانسیلی به شکل زیرمی بیند که از بسط $V(x)$ حول x_0 بدست آمده است

$$V(x) \approx V(x_0) + \frac{1}{2}V"(x_0)(x-x_0)^2 + \cdots \tag{1}$$

باقراردادن $m\omega^2 := V"(x_0)$ و انتقال نقطه صفر پتانسیل به $V(x_0)$ و سنجش مختصه مکان نسبت به نقطه x_0 به پتانسیل $V = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ می رسیم که همان پتانسیل نوسانگر هماهنگ است. بنابراین مادام که انرژی ذره آنقدرکم است که ازنقطه تعادل خیلی دور نمی شود می توان گفت که ذره تنها پتانسیل نوسانگر هماهنگ را می بیند و به همین دلیل حول نقطه تعادل نوسان می کند.
این موضوع برای هر سیستم دلخواهی با هرتعداد درجه آزادی صادق است. به عنوان مثال اتم های یک مولکول دواتمی حول وضعیت تعادلشان نوسان می کنند، یون های یک شبکه جامد نیز درنزدیکی نقطه تعادلشان نوسان می کنند. یک ساختمان بزرگ نیز همین کار را می کند ولی برای این سیستم فیزیکی برخلاف دو سیستم قبلی نیازی به کاربرد مکانیک کوانتومی نیست.
دراین بخش هدف ما آن است که به تفصیل نوسانگر هماهنگ را مطالعه کنیم. علاوه برحل دقیق نوسانگر هماهنگ و مطالعه جنبه های مختلف آن به کاربردهای مختلف آن خواهیم پرداخت و خواهیم دید که دامنه این کاربردها شامل حوزه وسیعی از پدیده ها از ساختمان مولکول ها و کریستال ها گرفته تا الکترودینامیک و اپتیک کوانتومی است.
جمع آوری بعضی از داده های واقعی راجع به نوسانگرهای میکروسکوپی

۲ روش جبری برای مطالعه نوسانگر هماهنگ

هامیلتونی یک نوسانگرهماهنگ به جرم m و فرکانس طبیعی ω دریک بعد به شکل زیراست

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2X^2. \tag{2}$$

www.Endbook.net

نوع کمیت	ضریب
طول	$\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$
جرم	m
زمان	ω^{-1}
انرژی	$\hbar\omega$
تکانه	$\hbar$

جدول ۱: ضرایب تبدیل کمیت ها

هدف مادراین بخش آن است که طیف انرژی این هامیلتونی را بدست بیاوریم. نخستین کاری که انجام می دهیم آن است که واحدهای جرم و زمان و هم چنین تکانه زاویه ای را آنچنان انتخاب می کنیم که دراین واحد ها m برابر با 1 و ω و $\hbar$ نیز برابر با 1 شوند. دراین صورت هامیلتونی فوق به شکل زیردرمی آید:

$$H = \frac{1}{2}P^2 + \frac{1}{2}X^2 \tag{3}$$

می دانیم که $\frac{1}{\omega}$ دیمانسیون زمان، m دیمانسیون جرم و هم چنین $\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ دیمانسیون طول دارد. بنابراین هرگاه درواحد های جدیدی که انتخاب کرده ایم مقدار عددی کمیتی را بدست بیاوریم می توانیم با ضرب کردن یک ضریب مناسب مطابق جدول ۲ مقدار آن کمیت را در واحد های استاندارد بدست آوریم.

حال می توانیم دو عملگر به شکل زیر تعریف کنیم.

$$\begin{aligned} a &:= \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iP) \\ a^\dagger &:= \frac{1}{\sqrt{2}}(X - iP). \end{aligned} \tag{4}$$

برحسب این دو عملگر می توان هامیلتونی نوسانگر را به شکل زیر نوشت:

$$H = a^\dagger a + \frac{1}{2}. \tag{5}$$

عملگر $N := a^\dagger a$ یک عملگر هرمیتی و مثبت است. اگر طیف این عملگر را پیدا کنیم طیف H نیزپیدا خواهد شد. برای این کار بهتر است که خواص این عملگر و هم چنین عملگرهای a و $a^\dagger$ را بدست آوریم: با یک محاسبه ساده روابط زیر را بدست می آوریم:

www.Endbook.net

$$[a, a^\dagger] = 1 \qquad [N, a] = -a \qquad [N, a^\dagger] = a^\dagger. \tag{6}$$

نخست توجه می کنیم که عملگر $N = a^\dagger a$ یک عملگرمثبت است. بنابراین تمام ویژه مقدارهای آن می بایست مثبت باشند. ضمناً براحتی می توان نشان داد که اگر

$$N|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle, \tag{7}$$

آنگاه

$$N(a|\psi\rangle) = (\lambda - 1)(a|\psi\rangle), \qquad N(a^\dagger|\psi\rangle) = (\lambda + 1)(a^\dagger|\psi\rangle). \tag{8}$$

بنابراین عملگر a دائماً ویژه مقدارهارا پایین می آورد. درنتیجه می بایست یک ویژه بردارپایینی وجود داشته باشد که اثر a آن را به صفربرد. این ویژه بردار را با $|\psi_0\rangle$ نشان می دهیم

$$a|\psi_0\rangle = 0 \longrightarrow N|\psi\rangle = 0. \tag{9}$$

بقیه ویژه بردارها بااثر $a^\dagger$ روی این حالت ساخته می شوند:

$$|\psi_n\rangle := (a^\dagger)^n|\psi_0\rangle, n = 1,\ 2,\ \cdots. \tag{10}$$

بااستفاده از رابطه 8 معلوم می شود که ویژه مقدار حالتِ $|\psi_n\rangle$ برابر با n است، یعنی

$$N|\psi_n\rangle = n|\psi_n\rangle. \tag{11}$$

باتوجه به رابطه 8 واضح است که

$$a^\dagger|\psi_n\rangle = |\psi_{n+1}\rangle. \tag{12}$$

حال می پرسیم که اثر عملگر a روی $|\psi_n\rangle$ چیست؟ انتظار داریم که حالتی که بوجود می آید متناسب با $|\psi_{n-1}\rangle$ باشد. برای آنکه ضریب تناسب را بدست آوریم از رابطه زیر استفاده می کنیم که خواننده می تواند براحتی درستی آن را نشان دهد:

$$[a, {a^\dagger}^n] = n{a^\dagger}^{n-1}. \tag{13}$$

www.Endbook.net

بااستفاده از این رابطه می توان نشان داد که:

$$a|\psi_n\rangle = aa^{\dagger n}|\psi_0\rangle = (a^{\dagger n}a + na^{\dagger n-1})|\psi_0\rangle = n|\psi_{n-1}\rangle. \tag{14}$$

حال می توانیم اندازه هرکدام از بردارهای $|\psi_n\rangle$ را حساب کنیم:

$$\begin{aligned}&\langle\psi_n|\psi_n\rangle = \langle\psi_0|a^n a^{\dagger n}|\psi_0\rangle = \langle\psi_0|a^{n-1}(aa^{\dagger n})|\psi_0\rangle \\ &\langle\psi_0|a^{n-1}(a^{\dagger n}a + na^{\dagger n-1})|\psi_0\rangle = n\langle\psi_{n-1}|\psi_{n-1}\rangle.\end{aligned} \tag{15}$$

درنتیجه $\langle\psi_n|\psi_n\rangle = n!$.
بنابراین اگر بردارهای حالت بهنجار شدهٔ $|\psi_n\rangle$ را بانماد $|n\rangle$ نشان دهیم آنچه را که بدست آورده ایم می توانیم به شکل زیربازنویسی کنیم

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \qquad a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \tag{16}$$

و

$$\hat{H}|n\rangle = (n+\frac{1}{2})|n\rangle \longrightarrow H|n\rangle = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})|n\rangle. \tag{17}$$

تساوی دوم دردستگاه واحد های استاندارد نوشته شده است.
ازرابطه 16 می توانیم عناصر ماتریسی عملگرهای a و $a^\dagger$ را بدست آوریم:

$$\langle n|a|m\rangle = \sqrt{m}\langle n|m-1\rangle = \sqrt{m}\delta_{n,m-1}, \qquad \langle n|a^\dagger|m\rangle = \sqrt{m+1}\langle n|m+1\rangle = \sqrt{m+1}\delta_{n,m+1}. \tag{18}$$

شکل صریح ماتریس های بی نهایت بعدی a و $a^\dagger$ به صورت زیراست:

$$a = \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & & & \\ & 0 & \sqrt{2} & & & & \\ & & 0 & \sqrt{3} & & & \\ & & & 0 & \sqrt{4} & & \\ & & & & 0 & \cdot & \\ & & & & & 0 & \cdot \\ & & & & & & 0 \quad \cdot \end{pmatrix} \tag{19}$$

www.Endbook.net

$$a^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & & & & & \\ 1 & 0 & & & & & \\ & \sqrt{2} & 0 & & & & \\ & & \sqrt{3} & 0 & & & \\ & & & \sqrt{4} & 0 & & \\ & & & & \cdot & 0 & \\ & & & & & \cdot & 0 \\ & & & & & & \end{pmatrix} \tag{20}$$

۱.۲ عناصر ماتریسی مختصات و تکانه

می توانیم عناصرماتریسی X و P و درنتیجه هر مشاهده پذیردیگری را درپایه انرژی بدست آوریم. برای این کارتوجه می کنیم که ازتعریف عملگرهای a و $a^\dagger$ داریم

$$\begin{aligned} X &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger) \\ P &= \frac{1}{\sqrt{2}i}(a - a^\dagger). \end{aligned} \tag{21}$$

درنتیجه خواهیم داشت

$$\begin{aligned} \langle n|X|n\rangle &= \langle n|\frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger)|n\rangle = 0 \\ \langle n|P|n\rangle &= \langle n|\frac{1}{\sqrt{2}i}(a - a^\dagger)|n\rangle = 0. \end{aligned} \tag{22}$$

هم چنین

$$\begin{aligned} \langle n|X^2|n\rangle &= \langle n|\frac{1}{2}(a + a^\dagger)^2|n\rangle = n + \frac{1}{2} \\ \langle n|P^2|n\rangle &= \langle n|\frac{-1}{2}(a - a^\dagger)^2|n\rangle = n + \frac{1}{2}. \end{aligned} \tag{23}$$

دردستگاه واحدهای استاندارد خواهیم داشت

$$\begin{aligned} \langle n|X^2|n\rangle &= \frac{\hbar}{m\omega}(n + \frac{1}{2}) \\ \langle n|P^2|n\rangle &= \hbar m\omega(n + \frac{1}{2}). \end{aligned} \tag{24}$$

www.Endbook.net

اگر انرژی جنبشی را با T و انرژی پتانسیل را با V نشان دهیم خواهیم داشت:

$$\begin{aligned}\langle n|T|n\rangle &= \frac{1}{2m}\langle n|P^2|n\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}(n+\frac{1}{2}) \\ \langle n|V|n\rangle &= \frac{1}{2}m\omega^2\langle n|X^2|n\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}(n+\frac{1}{2}).\end{aligned} \tag{25}$$

بنابراین متوسط انرژی جنبشی و متوسط انرژی پتانسیل بایکدیگر مساوی هستند.

این رابطه هم چنین نشان می دهد که میزان عدم قطعیت مکان و تکانه درهر ویژه حالت انرژی برابراست با:

$$\Delta X \Delta P = \hbar(n+\frac{1}{2}). \tag{26}$$

بنابراین میزان عدم قطعیت درحالت پایه به کمترین مقدار خود یعنی $\frac{1}{2}\hbar$ می رسد. می توانیم ماتریس های مربوط به عملگرهای X و P را به طور کامل درپایه انرژی بنویسیم. بنابراین

$$\begin{aligned}\langle n|X|m\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\langle n|a+a^\dagger|m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(m\delta_{n,m-1}+(m+1)\delta_{n,m+1}) \\ \langle n|P|m\rangle &= \frac{1}{i\sqrt{2}}\langle n|a-a^\dagger|m\rangle = \frac{1}{i\sqrt{2}}(m\delta_{n,m-1}-(m+1)\delta_{n,m+1}).\end{aligned} \tag{27}$$

۲.۲ شکل ویژه حالت های انرژی در فضای مختصات

دراین زیربخش می خواهیم شکل ویژه توابع انرژی را درپایه مختصات پیداکنیم. قرارمی دهیم

$$\psi_n(x) := \langle x|n\rangle. \tag{28}$$

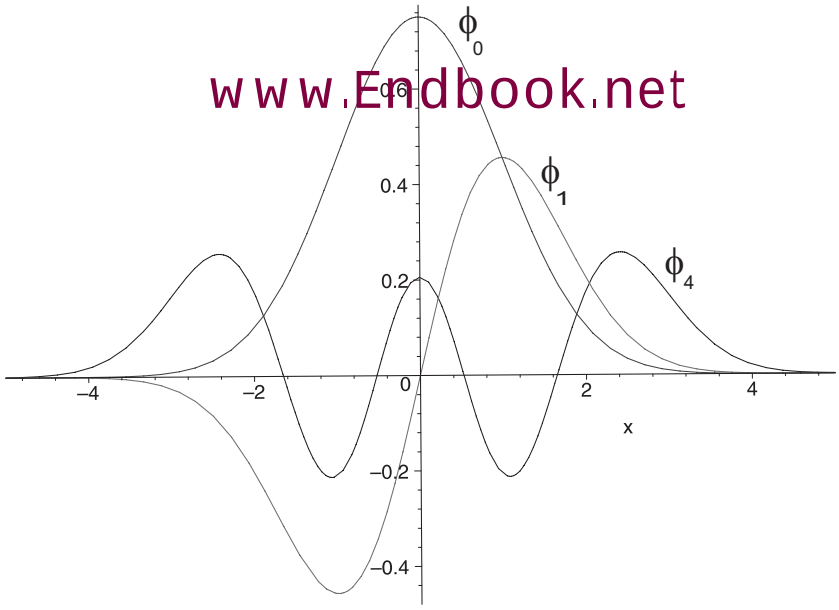
از این که $a|0\rangle = 0$ و $a = \frac{1}{\sqrt{2}}(X+iP)$ نتیجه می گیریم که

$$\langle x|X+iP|0\rangle = 0 \tag{29}$$

و یا

$$(x+\frac{d}{dx})\psi_0(x) = 0 \tag{30}$$

www.Endbook.net



شکل ۱: ویژه حالت های ϕ_0 ϕ_1 و ϕ_4 برای نوسانگر هارمونیک.

حل این معادله کاملاً آسان است. براحتی معلوم می شود که

$$\phi_0(x) = Ae^{-\frac{x^2}{2}}. \tag{31}$$

که درآن A یک ثابت بهنجارش است. این ثابت بهنجارش از تقاضای $\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0(x)^2dx = 1$ بدست می آید و مقدار آن برابر است با $A = \pi^{-\frac{1}{4}}$.
حال بقیه توابع موج را نیز می توانیم بدست آوریم. می دانیم که $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}a^{\dagger n}|0\rangle$ و $a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(X - iP)$ بنابراین خواهیم داشت

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}}[\frac{1}{\sqrt{2}}(x - \frac{d}{dx})]^n\phi_0 = \frac{1}{\sqrt{n!}\sqrt{\pi}}\frac{1}{2^{\frac{n}{2}}}(x - \frac{d}{dx})^n e^{-\frac{x^2}{2}}. \tag{32}$$

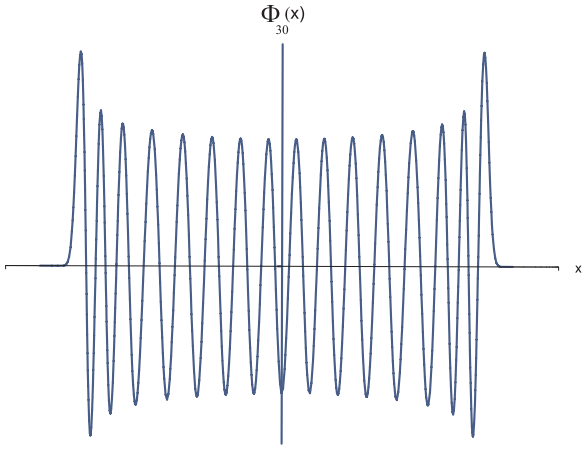
شکل توابع موج چند حالت برانگیخته اول عبارتند از:

$$\begin{aligned}
\phi_1(x) &= \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}}xe^{-\frac{x^2}{2}} \\
\phi_2(x) &= \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}}\frac{2x^2-1}{\sqrt{6}}e^{-\frac{x^2}{2}} \\
\phi_3(x) &= \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}}\frac{1}{6}x\sqrt{3}(2x^2-3)e^{-\frac{x^2}{2}} \\
&\cdots.
\end{aligned} \tag{33}$$

درشکل ۱ چند تابع موج اولیه نوسانگرهارمونیک رسم شده اند. شکل های ۲ و ۳ نیز به ترتیب یک تابع موج با عدد کوانتومی بالا و مربع آن را که چگالی احتمال است نشان می دهند.
بااثردادن متوالی ِعملگر $(x - \frac{d}{dx})$ و جداکردن ضرایب ثابت می بینیم که شکل کلی این توابع به صورت زیراست:

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}H_n(x)e^{-\frac{x^2}{2}}, \tag{34}$$

www.Endbook.net



شکل ۲: ویژه حالت ϕ_{30} برای نوسانگر هارمونیک.

که درآن $H_n(x)$ یک چند جمله ای درجه n از x است. این چند جمله ای به چند جمله ای های هرمیت معروف هستند و خواص بسیارجالبی دارند. درزیر این خواص را مطالعه می کنیم. اماقبل ازآن لازم است شکل ویژه توابع انرژی را دردستگاه واحد های استاندارد بنویسیم. برای این منظور می بایست هرجا که متغیر x داریم آن رابریک پارامتر با بعد طول تقسیم کنیم یعنی جایگزینی $x \longrightarrow \xi x$ را که درآن $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$، انجام دهیم. هم چنین توجه می کنیم که تابع موج می بایست دارای بعد عکس جذر طول باشد بنابراین ϕ_n را می بایست در $\xi^{\frac{1}{2}}$ ضرب کنیم. درنتیجه شکل نهایی تابع موج عبارت خواهد بود از:

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \xi^{\frac{1}{2}} H_n(\xi\ x) e^{-\frac{(\xi x)^2}{2}}. \tag{35}$$

باتوجه به روابط بالا می توانیم بینیم این چند جمله ای ها به صورت زیرتعریف می شوند:

$$(x - \frac{d}{dx})^n e^{-\frac{x^2}{2}} = H_n(x) e^{-\frac{x^2}{2}}. \tag{36}$$

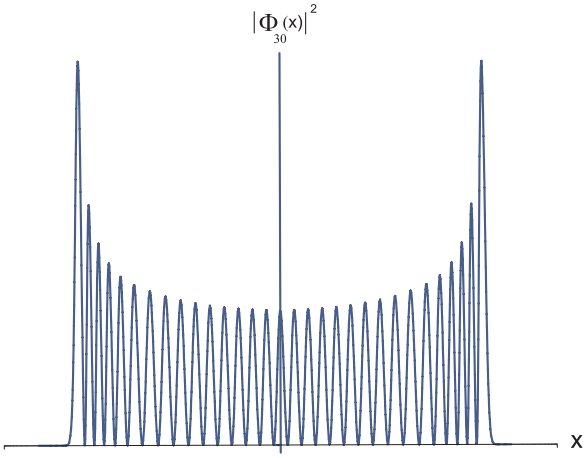
و یا

$$H_n(x) = e^{\frac{x^2}{2}} (x - \frac{d}{dx})^n e^{-\frac{x^2}{2}}. \tag{37}$$

بااعمال عملگر $(x - \frac{d}{dx})$ به طرفین رابطه 36 و کمی ساده کردن به رابطه زیرمی رسیم

$$H_{n+1} = 2xH_n(x) - H'_n(x) \tag{38}$$

www.Endbook.net



شکل ۳: چگالی احتمال برای ویژه حالت ϕ_{30} برای نوسانگر هارمونیک.

ویا

$$H_{n+1} = (2x - \frac{d}{dx})H_n(x). \tag{39}$$

بنابراین باتوجه به این که $H_0(x) = 1$، چند جمله ای های هرمیت به صورت زیر بدست می آیند:

$$H_n(x) = (2x - \frac{d}{dx})^n\ 1. \tag{40}$$

با استفاده از این رابطه می توانیم بسرعت چند جمله ای های هرمیت را به صورت زیربدست آوریم:

$$\begin{aligned} H_0 &= 1, \\ H_1 &= 2x, \\ H_2 &= 4x^2 - 2 \\ H_3 &= 8x^3 - 12x, \\ H_4 &= 16x^4 - 48x^2 + 12, \\ &\cdots. \end{aligned} \tag{41}$$

ازآنجاکه حالت های $|n\rangle$ متعامدیکه هستند نتیجه می گیریم که

$$\langle m|n\rangle \equiv \int dx \langle m|x\rangle\langle x|n\rangle = \int dx \phi_n(x)\phi_m(x) \tag{42}$$

www.Endbook.net

و باجایگذاری عبارت های 34 دراین رابطه

$$\int dx H_n(x) H_m(x) e^{-x^2} = \delta_{m,n} \sqrt{\pi} 2^n n!. \tag{43}$$

می توانیم برای این چند جمله ای ها یک تابع مولد مثل $g(t,x)$ تعریف کنیم به قسمی که

$$g(t,x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} H_n(x). \tag{44}$$

برای اینکه فرم تابع مولد را پیداکنیم از رابطه 37 استفاده می کنیم و می نویسیم

$$g(t,x) = e^{\frac{x^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} (x - \frac{d}{dx})^n e^{-\frac{x^2}{2}} = e^{\frac{x^2}{2}} e^{t(x-\frac{d}{dx})} e^{-\frac{x^2}{2}}. \tag{45}$$

اما ازاتحاد $e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]}$ برای عملگرهایی که $[A,B]$ متناسب با واحد است استفاده می کنیم و می نویسیم

$$e^{t(x-\frac{d}{dx})} = e^{\frac{t^2}{2}} e^{tx} e^{-t\frac{d}{dx}}. \tag{46}$$

درنتیجه تابع مولد به شکل زیردرمی آید:

$$\begin{aligned} g(t,x) &= e^{\frac{x^2}{2}} e^{\frac{t^2}{2}} e^{tx} e^{-t\frac{d}{dx}} e^{-\frac{x^2}{2}} \\ &= e^{\frac{x^2}{2}} e^{\frac{t^2}{2}} e^{tx} e^{-\frac{1}{2}(x-t)^2} = e^{-t^2+tx}. \end{aligned} \tag{47}$$

بنابراین نشان داده ایم که

$$e^{-t^2+tx} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} H_n(x). \tag{48}$$

ازاین رابطه خواص بیشتری از چندجمله ای های هرمیت را می توان نتیجه گرفت. بعضی از این خواص ممکن است بطور مستقیم در محاسبات مربوط به درس مکانیک کوانتومی کاربرد نداشته باشند ولی دانستن آنها خالی از فایده نیست. درضمیمه این درس بعضی از این خواص را بررسی خواهیم کرد.

۳ نوسانگر هماهنگ درمیدان الکتریکی

ذره ای به جرم m و بارالکتریکی q که حول نقطه تعادلش با فرکانس ω نوسان می کند درنظرمی گیریم. این ذره را درمیدان الکتریکی E قرار می دهیم. هدف ما یافتن ویژه توابع انرژی و مقادیر انرژی است. هامیلتونی این ذره به شکل زیراست:

www.Endbook.net

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 - qEX. \tag{49}$$

این هامیلتونی را می توان به شکل زیرنوشت:

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 (X - \frac{qE}{m\omega^2})^2 - \frac{q^2E^2}{2m\omega^2}, \tag{50}$$

که چیزی نیست جز هامیلتونی یک نوسانگر هارمونیک که نقطه تعادل آن به اندازه $\frac{qE}{m\omega^2}$ به سمت راست جابجا شده و و انرژی کل آن نیز به اندازه مقدارثابتی کم شده است. باتعریف پارامترهای ξ و E_0 به شکل زیر

$$\xi := \frac{qE}{m\omega^2}, \qquad E_0 := \frac{q^2E^2}{2m\omega^2}, \tag{51}$$

هامیلتونی به این شکل درمی آید:

$$H = \frac{P2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 (X - \xi)^2 - E_0. \tag{52}$$

عملگر زیر را درنظرمی گیریم:

$$T_\xi := e^{\frac{-i}{\hbar}\xi P}. \tag{53}$$

این عملگر دارای خاصیت های زیراست:

$$T_\xi |x\rangle = |x + \xi\rangle \quad , \quad T_\xi X T_\xi^{-1} = X - \xi. \tag{54}$$

بنابراین هرگاه هامیلتونی نوسانگردرغیاب میدان الکتریکی را با H_0 نشان دهیم، معلوم می شود که $H = T_\xi H_0 T_\xi^{-1} - E_0$. درنتیجه هرگاه طیف $T_\xi H_0 T_\xi^{-1}$ که به اختصار آن را با H_1 نشان می دهیم معلوم شود، طیفِ H تنهاباکم کردن مقدار E_0 ازانرژی های H_1 یافته خواهدشد. پیداکردن طیف H_1 آسان است. داریم

$$H_1 = T_\xi H_0 T_\xi^{-1}. \tag{55}$$

دراین صورت هرگاه $|n\rangle$ یک ویژه حالتِ H_0 باشد، یعنی هرگاه $H_0|n\rangle = E_n|n\rangle$ ، آنگاه باتعریف

$$|\phi_n\rangle = T_\xi |n\rangle, \tag{56}$$

www.Endbook.net

خواهیم داشت

$$H_1|\phi_n\rangle = T_\xi H_0 T_\xi^{-1}(T_\xi|n\rangle) = T_\xi H_0|n\rangle = E_n|\phi_n\rangle. \tag{57}$$

یعنی $|\phi_n\rangle$ نیزیک ویژه حالتِ H_1 باهمان انرژی خواهد بود. این تناظریک به یک است. باتوجه به اینکه $E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$، نهایتاً خواهیم داشت:

$$H|\phi_n\rangle = [\hbar\omega(n+\frac{1}{2}) - E_0]|\phi_n\rangle. \tag{58}$$

برای آنکه شکل تابع موجِ $|\phi_n\rangle$ را درفضای مختصات تعیین کنیم به رابطه زیرتوجه می کنیم:

$$\phi_n(x) = \langle x|\phi_n\rangle = \langle x|T_\xi|n\rangle = \langle x-\xi|n\rangle = \psi_n(x-\xi), \tag{59}$$

یعنی هرویژه تابع H چیزی نیست جزویژه تابع متناظر H_0 که به اندازه ξ به سمت راست جابجاشده است.

۴ حالت های همدوس

ازنظر ریاضی حالت همدوس یا $Coherent\ State$ به حالتی گفته می شود که ویژه بردار عملگرپایین برندهٔ a باشد. ازآنجا که عملگرa هرمیتی نیست ویژه مقدارآن نیزالزاماً حقیقی نیست به همین جهت ویژه مقدار آن را با z یعنی یک عدد مختلط و ویژه بردارآن را با $|z\rangle$ نشان می دهیم و می نویسیم

$$a|z\rangle = z|z\rangle. \tag{60}$$

یک راه برای آنکه این ویژه بردارراپیداکنیم آن است که $|z\rangle$ را برحسب حالت های پایه بسط دهیم وبامقایسه ضرایب بسط دردوطرف رابطه بالا آنهارابدست آوریم. راه بهتر استفاده از اتحاد زیراست:

$$e^{-za^\dagger} a e^{za^\dagger} = a + z. \tag{61}$$

این اتحاد براحتی با استفاده از لم هاسدورف ثابت می شود. حال بردارِ $|z\rangle$ را به صورت زیرتعریف می کنیم:

$$|z\rangle := Ae^{za^\dagger}|0\rangle. \tag{62}$$

www.Endbook.net

که درآن A یک ضریب بهنجارش است. روی دوطرف عملگر a رااثرداده واز رابطه 61 استفاده می کنیم. بدست می آوریم

$$a|z\rangle = Aae^{za^\dagger}|0\rangle = Ae^{za^\dagger}(a+z)|0\rangle = z|z\rangle. \tag{63}$$

بنابراین $|z\rangle$ یک حالت همدوس است. واضح است که $|z\rangle$ بسط زیر را برحسب حالت های پایه انرژی دارد.

$$|z\rangle := A\sum_{n=0}^{\infty}\frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle. \tag{64}$$

بااستفاده ازاین بسط می فهمیم که

$$1 = \langle z|z\rangle = A^2\sum_{n=0}^{\infty}|z|^{2n}\frac{1}{n!} = A^2e^{|z|^2}. \tag{65}$$

بنابراین برای آنکه حالت همدوس بهنجارباشد A را برابر با $e^{-\frac{|z|^2}{2}}$ انتخاب می کنیم:

$$|z\rangle = e^{-\frac{|z|^2}{2}}e^{za^\dagger}|0\rangle. \tag{66}$$

نکته مهمی که باید به آن توجه کنیم آن است که حالت های همدوس بریکدیگر عمود نیستند. درواقع تکرارِ همان محاسبه ای که برای تعیین ثابت بهنجارش انجام دادیم نشان می دهد که

$$\langle z|w\rangle = e^{-\frac{|z|^2}{2}}e^{-\frac{|w|^2}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(\overline{z}w)^n = e^{-\frac{|z|^2}{2}-\frac{|w|^2}{2}+\overline{z}w}. \tag{67}$$

حال ازخود می پرسیم که دراین حالت هامتوسط مکان و تکانه ذره چقدراست. براحتی معلوم می شود:

$$\langle z|X|z\rangle = \langle z|\frac{1}{\sqrt{2}}(a+a^\dagger)|z\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(z+\overline{z}), \langle z|P|z\rangle = \langle z|\frac{1}{i\sqrt{2}}(a+a^\dagger)|z\rangle = \frac{1}{i\sqrt{2}}(z-\overline{z}). \tag{68}$$

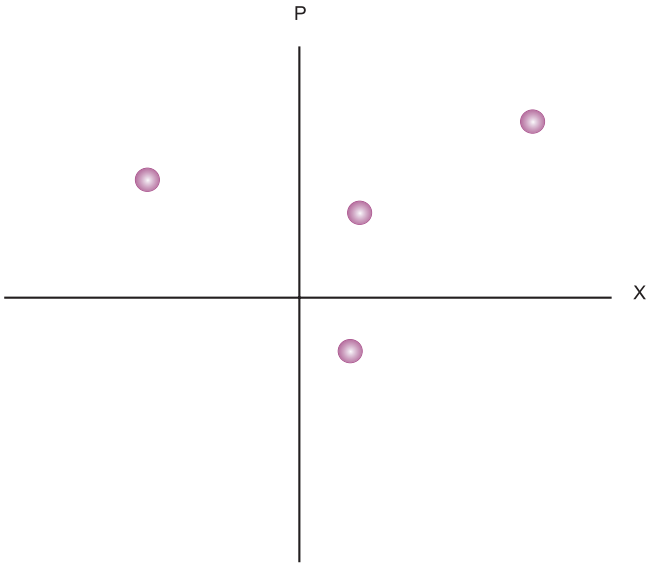
بنابراین اگر z را به صورت زیربنویسیم

$$z = \frac{1}{\sqrt{2}}(x+ip) \tag{69}$$

آنگاه خواهیم داشت

$$\langle z|X|z\rangle = x, \qquad \langle z|P|z\rangle = p. \tag{70}$$

www.Endbook.net



شکل ۴: چند حالت همدوس درصفحه مختلط.

بنابراین هرحالت $|z\rangle = |\frac{1}{\sqrt{2}}(x+ip)\rangle$ حالتی است که متوسط مکان و تکانه آن به ترتیب برابرند با x و p.
حال میزان عدم یقین در مکان وتکانه را حساب می کنیم. داریم

$$\begin{aligned}\langle z|X^2|z\rangle &= \frac{1}{2}\langle z|(a+a^\dagger)^2|z\rangle = \frac{1}{2}(z+\overline{z})^2 + \frac{1}{2} = \langle z|X|z\rangle^2 + \frac{1}{2}\\ \langle z|P^2|z\rangle &= \frac{-1}{2}\langle z|(a-a^\dagger)^2|z\rangle = \frac{-1}{2}(z-\overline{z})^2 + \frac{1}{2} = \langle z|P|z\rangle^2 + \frac{1}{2}.\end{aligned} \tag{71}$$

پس پیداکردیم که برای یک حالت همدوس همواره روابط زیربرقرارند:

$$(\Delta X)^2 = \frac{1}{2}, \qquad (\Delta P)^2 = \frac{1}{2}, \qquad \Delta X \Delta P = \frac{1}{2}. \tag{72}$$

بنابراین حالت های همدوس حالت هایی هستند که کمترین میزان عدم یقین را دارند ومستقل ازاینکه تکانه متوسط ویامکان متوسط آنها چقدراست همواره میزان عدم یقین آنها درکمترین مقدارخود یعنی $\frac{1}{2}$ یا درواحد های استاندارد برابر با $\frac{\hbar}{2}$ قراردارد. شکل ۴ به طور شماتیک چند حالت همدوس رانشان می دهد. فاصله هردایره ازمرکز مقدارمتوسط X و P آن حالت رانشان می دهد. شعاع تمام دایره ها یکسان است و نشان دهنده آن است که عدم یقین همه این حالت ها باهم برابراست مستقل ازاینکه مقدار متوسط مکان وتکانه آنها چقدراست.

حال سوال می کنیم تابع موج یک حالت همدوس $|z\rangle$ درفضای مختصات یا تکانه چیست. برای این کاربازهم به تعریف مراجعه می کنیم. مطابق تعریف داریم

$$\psi_z(x) := \langle x|z\rangle. \tag{73}$$

www.Endbook.net

باتوجه به اینکه $a|z\rangle = z|z\rangle$ و این موضوع که $a = \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iP)$ و رابطه فوق می فهمیم که

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(x + \partial_x)\psi_z(x) = z\psi_z(x). \tag{74}$$

این معادله دیفرانسیل بسادگی حل می شود. بدست می آوریم

$$\psi_z(x) = Ae^{\sqrt{2}zx - \frac{1}{2}x^2}, \tag{75}$$

که درآن A یک ثابت است. هرگاه z را به صورت $z = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_0 + ip_0)$ بنویسیم این تابع موج شکل گویایی پیدامی کند:

$$\psi_z(x) = A'e^{ip_0x - \frac{1}{2}(x-x_0)^2}, \tag{76}$$

که نشان دهنده یک بسته موج گاووسی بامرکز x_0 و پهنای ۱ است که باتکانه p_0 درحال حرکت است.
هم چنین می توانیم شکل تابع موج را درفضای تکانه بدست بیاوریم (یا بااستفاده از تبدیل فوریه و یا دوباره بااستفاده ازتعریف). نتیجه به صورت زیراست:

$$\tilde{\psi}_z(p) = A'e^{-ix_0p - \frac{1}{2}(p-p_0)^2}, \tag{77}$$

که بازهم نشان دهنده یک تابع گاووسی به مرکز p_0 باپنهای ۱ است.

باگذشت زمان وتحت هامیلتونی نوسانگرهارمونیک، یک حالت همدوس چگونه تحول پیدامی کند؟ فرض کنید که درلحظه صفر ذره دریک حالت همدوس مثل $|z\rangle$ قرارگرفته باشد. دراین صورت بعدازمان t حالت ذره عبارت خواهد بوداز:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt}|\psi(0)\rangle = e^{-iHt}|z\rangle. \tag{78}$$

برای محاسبه طرف راست حالت همدوس را برحسب ویژه های هامیلتونی بسط می دهیم

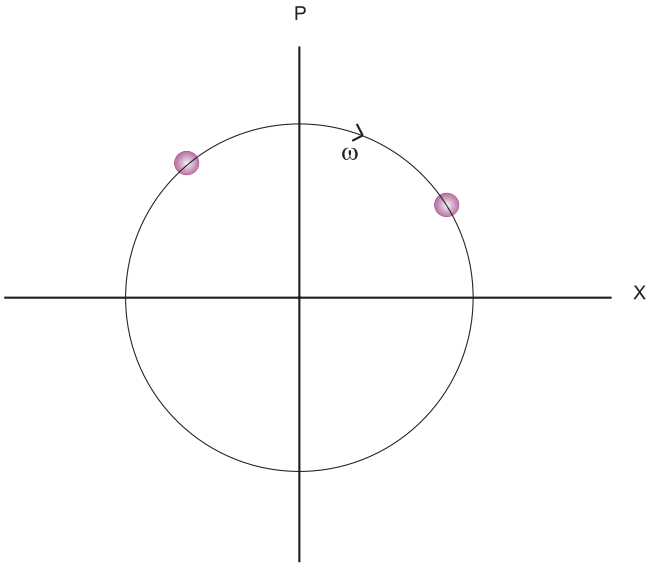
$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt}A\sum_{n=0}^{\infty}\frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle = A\sum_{n=0}^{\infty}\frac{z^n}{\sqrt{n!}}e^{-i(\omega(n+\frac{1}{2}))t}|n\rangle \tag{79}$$

حال اگر به بسط یک حالت همدوس یعنی رابطه 64 دقت کنیم، درمی یابیم که طرف راست یک حال همدوس است:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-i(\frac{\omega t}{2}}A\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(ze^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle \\ &= e^{-i(\frac{\omega t}{2}}|ze^{-i\omega t}\rangle. \end{aligned} \tag{80}$$

بنابراین یک حالت همدوس درطول زمان حول مبدأ باسرعت زاویه ای ω می چرخد. خاصیت بسیارمهم این تحول آن است که میزان پاشندگی مکان وتکانه آن نیزتغییر نمی کند. این خاصیت کاملاً جالب توجه است زیرامعمولاً یک توابع موج چه

www.Endbook.net



شکل ۵: تحول یک حالت همدوس تحت هامیلتونی نوسانگرهارمونیک.

درفضای تکانه، چه درفضای مختصات باگذشت زمان پهن می شوند. درمورد ذره آزاد وپهن شدگی تابع موج آن درفضای مختصات، خواننده این خاصیت را قبلاً درتمرین ها دیده است.

شکل ۵ تحول یک حالت همدوس را نشان می دهد.

۱.۴ رابطه کامل بودن حالت های همدوس

درپایان این بخش می بایست رابطه کامل بودن حالت های همدوس را مطالعه کنیم.
دیدیم که حالت های همدوس بریکدیگر عمود نبودند. آیا حالت های همدوس کامل هستند؟ آیا رابطه ای مثل رابطه $\int d^2z|z\rangle\langle z| = I$ برقراراست؟ برای تحقیق درستی این رابطه، عملگرطرف چپ را روی حالت پایه $|n\rangle$ اثرمی دهیم. جزییات این محاسبه را به عهده تمرین ها می گذاریم. نتیجه آن است که رابطه کامل بودن به شکل زیربرقراراست:

$$\frac{1}{\pi}\int d^2z|z\rangle\langle z| = I. \tag{81}$$

حقیقت آن است که حالت های همدوس یک پایه فوق کامل تشکیل می دهند، به این معنا که می توان زیرمجموعه هایی ازآنها انتخاب کرد وهنوزهم بتوان هرحالت دلخواهی را برحسب آنهابسط داد.

دیدیم که برای یک حالت های همدوس، عدم یقین درمکان و درتکانه به طور متقارن درکمینه خود قرارگرفته است به طوریکه رابطه $\Delta X\Delta P = \frac{\hbar}{2}$ برقراراست. متقارن بودن این عدم یقین دردایره‌هایی که برای نشان دادن این حالت هادرشکلِ ۴ بکاربرده ایم نشان داده شده است. حالت های فشرده حالت هایی هستند که این تقارن درآنهاازبین رفته است و عدم یقین دریک مختصه به بهای افزایش درعدم یقین مختصه دیگر کاهش یافته است. به همین دلیل به آنها حالت های فشرده می گوییم.

www.Endbook.net

۵ دو نوسانگر جفت شده به هم

هسته های یک مولکول دواتمی مثل هیدروژن هرکدام حول نقطه تعادل خود نوسان می کنند. علاوه براین، این دوهسته می توانند به یکدیگرنیز یک نیروی ارتعاشی وارد کنند. هامیلتونی چنین سیستمی به شکل زیرخواهد بود:

$$H = \frac{1}{2}P_1^2 + \frac{1}{2}X_1^2 + \frac{1}{2}P_2^2 + \frac{1}{2}X_2^2 + \frac{1}{2}\omega^2(X_1 - X_2)^2. \tag{82}$$

می خواهیم طیف این هامیلتونی را پیداکنیم. روشی که برای این سیستم ساده به کارمی بریم درمورد تمام سیستم های چند ذره‌ای که با پتانسیل های مربعی بایکدیگر برهم کنش می کنند نیز به کارمی رود. نخست هامیلتونی را به شکل ماتریسی زیرمی نویسیم:

$$H = \frac{1}{2}P^T P + \frac{1}{2}X^T A X \tag{83}$$

که درآن A ماتریس متقارن زیراست

$$A = \begin{pmatrix} 1+\omega_1^2 & -\omega^2 \\ -\omega^2 & 1+\omega^2 \end{pmatrix}. \tag{84}$$

می دانیم که ماتریس متقارن A بایک تبدیل متعامد قطری می شود، یعنی ماتریس متعامدی مثل S وجود دارد به قسمی که $SAS^T = D$ که درآن D یک ماتریس قطری است.
باتوجه به متعامد بودن S یعنی این خاصیت که $S^TS = I$ می توان نوشت $A = S^TDS$. درنتیجه هامیلتونی را می توانیم به شکل زیربازنویسی کنیم

$$H = \frac{1}{2}P^T S^T S P + \frac{1}{2}X^T S^T D S X \tag{85}$$

باتغییر متغیری به صورت

$$\tilde{P} = SP, \qquad \tilde{X} = SX, \tag{86}$$

وتوجه به قطری بودن D این هامیلتونی به شکل ماتریسی زیرنوشته می شود:

$$H = \frac{1}{2}\tilde{P}^T\tilde{P} + \frac{1}{2}\tilde{X}^T D\tilde{X}, \tag{87}$$

ویا

www.Endbook.net

$$H = \frac{1}{2}\tilde{P}_1^2 + \frac{1}{2}\tilde{P}_2^2 + \frac{1}{2}\omega_1^2\tilde{X}_1^2 + \frac{1}{2}\omega_2^2\tilde{X}_2^2, \tag{88}$$

که درآن ω_1^2 و ω_2^2 عناصرروی قطری ماتریس D هستند. می بایست به دونکته مهم توجه کنیم. اول اینکه متغیرهای جدید درهمان روابط تعویضگری کانونیک صدق می کنند، یعنی

$$[\tilde{X}_i, \tilde{X}_j] = [\tilde{P}_i, \tilde{P}_j] = 0 \qquad [\tilde{X}_i, \tilde{P}_j] = i\hbar\delta_{ij}. \tag{89}$$

دلیل این امر متعامد بودن ماتریس S است.
دوم اینکه ماتریسِ A یک ماتریس مثبت است بنابراین ویژه مقدارهای آن یعنی عناصرروی قطرِ D می بایست مثبت باشند. درمثال فعلی خواننده می توان مثبت بودن ماتریس A را با یک محاسبه ساده بیازماید. درحالت کلی مثبت بودن این ماتریس برای آنکه انرژی سیستم ازپایین محدود باشد لازم است.

رابطه 88 نشان می دهد که برحسب متغیرهای جدید هامیلتونی نشان دهنده دونوسانگر مستقل ازهم است که طیف آن را براحتی می توانیم بدست بیاوریم. کافی است که عملگرهای زیررا تعریف کنیم:

$$\begin{aligned} a_1 &:= \frac{1}{\sqrt{2\omega_1}}(\omega_1\tilde{X}_1 + i\tilde{P}_1) \qquad & a_2 &:= \frac{1}{\sqrt{2\omega_2}}(\omega_2\tilde{X}_2 + i\tilde{P}_2) \\ a_1^\dagger &:= \frac{1}{\sqrt{2\omega_1}}(\omega_1\tilde{X}_1 - i\tilde{P}_1) \qquad & a_2^\dagger &:= \frac{1}{\sqrt{2\omega_2}}(\omega_2\tilde{X}_2 - i\tilde{P}_2). \end{aligned} \tag{90}$$

باتوجه به روابط 89 این عملگرها درروابط زیرصدق می کنند:

$$[a_1, a_1^\dagger] = [a_2, a_2\dagger] = 1 \tag{91}$$

ضمناً هردوعملگری بااندیس متفاوت با یکدیگرجابجامی شوند که تاییدی است برمستقل بودن دو نوسانگری که برحسب متغیرهای جدید تعریف شده اند.
برحسب این عملگرها هامیلتونی عبارت خواهد بود از

$$H \equiv H_1 + H_2 = \omega_1(a_1^\dagger a_1 + \frac{1}{2}) + \omega_2(a_2^\dagger a_2 + \frac{1}{2}). \tag{92}$$

طیف این هامیلتونی به صورت زیراست:

$$H|n_1, n_2\rangle = E_{n_1,n_2}|n_1, n_2\rangle, \qquad E_{n_1,n_2} = \omega_1(n_1 + \frac{1}{2}) + \omega_2(n_2 + \frac{1}{2}). \tag{93}$$

www.Endbook.net

دراین رابطه حالت $|n_1, n_2\rangle$، حالت ِزیراست

$$|n_1, n_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2!}} a_1^{\dagger n_1} a_2^{\dagger n_2} |0, 0\rangle, \tag{94}$$

که درآن

$$a_1|0, 0\rangle = a_2|0, 0\rangle = 0. \tag{95}$$

یادآوری می کنیم که حالت $|n_1, n_2\rangle$ چیزی نیست جزضرب تانسوری دو حالتِ $|n_1\rangle$ و $|n_2\rangle$ که درابتدای درس باآنهاآشناشده ایم.
تابع موج دوذره وقتی که سیستم دریک ویژه حالت انرژی مثل $|n_1, n_2\rangle$ قراردارد برحسب مختصات کلاه دار به صورت زیرخواهد بود:

$$\begin{aligned} \psi_{n_1,n_2}(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2) &= \langle \tilde{x}_1, \tilde{x}_2 | n_1, n_2 \rangle = \langle \tilde{x}_1 | n_1 \rangle \langle \tilde{x}_2 | n_2 \rangle \\ &= H_{n_1}(\tilde{x}_1) e^{-\frac{\tilde{x}_1^2}{2}} H_{n_2}(\tilde{x}_2) e^{-\frac{\tilde{x}_2^2}{2}} \end{aligned} \tag{96}$$

بررسی بقیه این موضوع را به تمرین ها واگذارمی کنیم.

٦ ضمیمه:خواص چند جمله ای هرمیت

درمتن درس دیدیم که چند جمله ای های هرمیت با تابع مولد زیرتعریف می شوند:

$$g(x, t) = e^{-t^2+tx} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)}{n!} t^n. \tag{97}$$

ازاین تعریف می توان بسیاری از خواص چند جمله ای های هرمیت را نتیجه گرفت. بعضی ازاین خواص به شرح زیرهستند:

الف: $H_0(x) = 1$

کافی است که دردوطرف رابطه 48، قرار دهیم $t = 0$.

ب : توابع هرمیت دارای پاریته مشخص هستند. به عبارت بهتر

$$H_n(-x) = (-1)^n H_n(x). \tag{98}$$

www.Endbook.net

برای اثبات این کافی است که درتابع مولد t و x را به $-t$ و $-x$ تبدیل کنیم و با بسط اولیه مقایسه کنیم.

ج : درنقطه صفر چند جمله ای های هرمیت مقادیر زیر را دارند:

$$H_{2n+1} = 0, \qquad H_{2n}(0) = (-1)^n \frac{(2n)!}{n!}. \tag{99}$$

برای اثبات این رابطه کافی است که درتابع مولد مقدار x را مساوی صفر قرارداد و بسط دو طرف را در رابطه 48 بایکدیگر مقایسه کرد.

د: به ازای تمام توابع هرمیت رابطه زیربرقراراست:

$$H'_n(x) = 2nH_{n-1}(x). \tag{100}$$

کافی است که ازطرفین 48 نسبت به x مشتق بگیریم و طرفین را باهم مقایسه کنیم.

ه: به ازای تمام توابع هرمیت رابطه تکرار زیربرقراراست:

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x). \tag{101}$$

کافی است که ازطرفین 48 نسبت به t مشتق بگیریم و طرفین را باهم مقایسه کنیم.

د: چند جمله ای های هرمیت درمعادله دیفرانسیل زیر صدق می کنند:

$$(\frac{d^2}{dx^2} - 2x\frac{d}{dx} + 2n)H_n(x) = 0 \tag{102}$$

برای اثبات این رابطه بااستفاده از 100 رابطه تکرارِ 101 را به شکل زیرمی نویسیم

$$H_{n+1} = 2xH_n - H'_n \longrightarrow H_n = 2xH_{n-1} - H'_{n-1}. \tag{103}$$

حال به جای توابع طرف راست از رابطه تکرارِ 100 جایگذاری می کنیم وبدست می آوریم

$$H_n = x\frac{1}{n}H'_n - \frac{1}{2n}H''_n \tag{104}$$

که پس ازمرتب کردن به شکل معادله دیفرانسیل یاد شده درمی آید.

www.Endbook.net

درس نهم: اندازه حرکت زاویه ای وتقارن دورانی دردوبعد

در درس گذشته با سه مفهوم مرتبط با تقارن آشنا شدیم، اول اینکه تبدیل تقارنی چیست؟ دوم اینکه تبدیل تقارنی در فضای هیلبرت چگونه نمایش داده می شود، و بالاخره اینکه متقارن بودن یک سیستم فیزیکی به چه معناست و چه نتایجی در بردارد. دراین درس می خواهیم به یکی از مهمترین تقارن هایعنی تقارن دوران در دو بعد بپردازیم. نخست ذره ای در نظر می گیریم که در یک صفحه دوبعدی حرکت می کند و هامیلتونی آن تحت دوران حول یک محور عمود براین صفحه متقارن است. هرگاه محوری که تقارن دورانی حول آن وجود دارد محور z باشد، مولفه سوم تکانه زاوی ای مولد دوران خواهد بود. بنابراین مطابق با آنچه که در فصل پیشین دیدیم رابطه زیر برقراراست:

$$[L_z, H] = 0, \tag{1}$$

به عبارت دیگر هامیلتونی با مولفه سوم تکانه زاویه ای که مولد دوران است جابجامی شود. (به عنوان یک تمرین خواننده می تواند صحت تساوی بالا را تحقیق کند.) دراینجا بهتراست بیشتر با خواص تکانه زاویه ای در دو بعد آشنا شویم.

۱ تکانه زاویه ای دردوبعد

برای ذره ای که دردوبعد حرکت می کند یک مشاهده پذیرمهم اندازه حرکت زاویه ای است. این مشاهده پذیر با عملگرهرمیتی زیر تعریف می شود:

$$L_z := XP_y - YP_x. \tag{2}$$

درپایه مختصات این عملگر به صورت زیر درمی آید

$$L_z = XP_y - YP_x = -i(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) = -i\frac{\partial}{\partial \theta}, \tag{3}$$

که درتساوی آخر مختصات قطبی به کاررفته است .

www.Endbook.net

خوب است که تعویض گرتکانه زاویه ای را با مولفه های مکان و تکانه پیداکنیم. محاسبه ساده ای نشان می دهد که روابط زیربرقرارند:

$$[L_z, X] = i\hbar Y, \qquad [L_z, Y] = -i\hbar X, \tag{4}$$

و

$$[L_z, P_x] = i\hbar P_y, \qquad [L_z, P_y] = -i\hbar P_x. \tag{5}$$

هم چنین یک محاسبه ساده نشان می دهد که:

$$[L_z, \vec{r}\cdot\vec{r}] = [L_z, r^2] = 0, \qquad [L_z, \vec{P}\cdot\vec{P}] = [L_z, P^2] = 0. \tag{6}$$

علاوه براین براحتی می توان نشان داد که رابطه زیربرقراراست:

$$L_z^2 = r^2P^2 - (\vec{r}\cdot\vec{P})^2, \tag{7}$$

که درآن $r^2 = X^2 + Y^2$ و $P^2 = P_x^2 + P_y^2$.

۱.۱ طیف تکانه زاویه ای

دراین بخش می خواهیم ویژه مقدارها و ویژه توابع تکانه زاویه ای راپیداکنیم. می دانیم که درپایه مختصات و برحسب مختصات قطبی تکانه زاویه ای به صورت $L_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\theta}$ درمی آید. بنابراین معادله ویژه مقداری برای این عملگر به صورت زیرنوشته می شود:

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\theta}\phi(r,\theta) = \lambda\phi(r,\theta). \tag{8}$$

ازآنجا که عملگر به r بستگی ندارد نتیجه می گیریم که اگر $\chi(\theta)$ یک ویژه تابع L باشد، آنگاه $\phi(r,\theta) = f(r)\chi(\theta)$ برای f دلخواه نیز یک ویژه تابع تکانه زاویه ای است. بنابراین طیف تکانه زاویه ای یک واگنی بی نهایت بعدی دارد. توجه خود را به تابع $\chi(\theta)$ معطوف می کنیم. معادله دیفرانسیل مربوطه به صورت ساده زیردرمی آید

$$\frac{\hbar}{i}\frac{d}{d\theta}\chi(\theta) = \lambda\chi(\theta), \tag{9}$$

www.Endbook.net

که حل آن بسادگی تعیین می شود: $\chi(\theta) = Ae^{\frac{i\lambda}{\hbar}\theta}$ که درآن A یک ثابت است. ازآنجا که تابع $\chi(\theta)$ می بایست تک مقداری باشد یعنی درشرط $\chi(\theta) = \chi(\theta + 2\pi)$ صدق کند معلوم می شود که λ تنها مقادیر مشخصی را می بایست اختیارکند. درواقع می بایست داشته باشیم

$$\lambda = \hbar\, m, \qquad \chi_m(\theta) = Ae^{im\theta}, \longrightarrow \phi(r,\theta) = f(r)e^{im\theta}. \tag{10}$$

رابطه اخیرنشان می دهد که مقادیرتکانه زاویه ای یک ذره دردوبعد تنها می توانند مضرب صحیحی از $\hbar$ باشند. هم چنین درفضای توابع روی صفحه دوبعدی (r,θ) این ویژه مقدار واگنی بی نهایت بعدی دارد، اما درفضای توابع روی یک دایره واگنی وجود ندارد.

دراینجا برای اولین بار با کوانتش تکانه زاویه ای مواجه می شویم که بطور تاریخی نخستین بار به صورت اصل موضوع درمدل اتمی بوهر پیشنهاد شد.

حال که با تکانه زاویه‌ای و طیف آن آشنا شده‌ایم می خواهیم ببینیم چگونه وجود تقارن دورانی در دوبعدی می تواند به حل معادله شرودینگر کمک کند.

۲ حل معادله شرودینگر برای پتانسیل هایی که دارای تقارن دورانی دو بعدی هستند

هرگاه پتانسیل فقط به اندازه r از مبدأ بستگی داشته باشد، هامیلتونی دارای تقارن کروی است. چنین هامیلتونی دارای فرم زیراست

$$\frac{P^2}{2m} + V(r). \tag{11}$$

دقت کنید که جرم ذره را با m نشان داده ایم.

بنابر روابط 6 داریم

$$[L_z, H] = 0, \tag{12}$$

به عبارت دیگر هامیلتونی با عملگری که مولد دوران است جابجامی شود. حال می بایست ازاین تقارن استفاده کنیم. نخستین استفاده ای که می کنیم آن است که می توانیم طیف مشترک هامیلتونی و عملگردوران را پیداکنیم. می دانیم که

www.Endbook.net

طیف L ساده است، هرتابعی به صورت $f(r)e^{in\theta}$ یک ویژه تابع L با مقدار ویژه $n\ \hbar$ است. ازرابطهٔ 7 نیز استفاده می کنیم و درهامیلتونی P^2 را برحسب تکانه زاویه ای می نویسیم. نتیجه به صورت زیردرمی آید:

$$H = \frac{1}{2m}\left(\frac{L_z^2 + (\vec{r}\cdot\vec{P})^2}{r^2}\right) + V(r) \tag{13}$$

ویا درپایه مختصات و باتوجه به اینکه $\vec{r}\cdot\vec{P} = \frac{\hbar}{i}r\partial_r$ و باقراردادن $\hbar = 1$ ،

$$H = \frac{1}{2m}\left(\frac{-\partial_\theta^2 - (r\partial_r)^2}{r^2}\right) + V(r) \tag{14}$$

حال اثر H روی هر ویژه تابع تکانه زاویه ای به فرم $\phi(r,\theta) = f(r)e^{in\theta}$ به صورت زیردرمی آید:

$$H\ f(r)e^{in\theta} = \left[\frac{1}{2m}\left(\frac{(n^2 - (r\partial_r)^2}{r^2}\right) + V(r)\right] f(r)e^{i\ n\theta} \tag{15}$$

بنابراین تابع $\phi_{E,n}(r,\theta) = f_{E,n}(r)e^{i\ n\theta}$ ویژه تابع هامیلتونی با ویژه مقدار E نیزهست اگر $f_{E,n}(r)$ درمعادله زیرصدق کند:

$$-\frac{1}{2m}\left(\frac{d^2f}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{df}{dr}\right) + V_{eff}(r)f_{E,n}(r) = Ef_{E,n}(r) \tag{16}$$

که درآن

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{n^2}{2mr^2}, \tag{17}$$

پتانسیل موثرخوانده می شود که درآن جمله $\frac{n^2}{2mr^2}$ نشان دهندهٔ تمایل حالت هایی بااندازه حرکت غیرصفر به دورشدن از مرکز است. این معادله معادله شعاعی شرودینگرنامیده می شود.

تذکر: دقت کنید که این موضوع که تابع موج به صورت $f_{E,n}(r)e^{in\theta}$ نوشته شده است این امر را انعکاس می دهد که ما توانسته ایم ویژه حالت های مشترک انرژی و تکانه‌ی زاویه‌ای را معین کنیم. از این به بعد تنها برای سادگی نوشتاری از نوشتن شاخص های E,n برای f مگر در مواقع ضروری اجتناب می کنیم.

می توانیم این معادله را به شکل دیگری نیزبنویسیم که شباهت آن به معادله شرودینگر یک بعدی بیشترشود. برای این کار تابع $f(r)$ را به شکل $f(r) =: \frac{u(r)}{\frac{1}{r^2}}$ می گیریم. یک محاسبه ساده نشان می دهد که برحسب $u(r)$ معادله شعاعی به شکل زیردرمی آید:

$$[\frac{-1}{2m}\partial_r^2 + \tilde{V}_{eff}(r)]u(r) = Eu(r). \tag{18}$$

www.Endbook.net

که درآن پتانسیل موثراین باربه شکل زیردرمی آید

$$\tilde{V}_{eff}(r) = V(r) + \frac{n^2 - \frac{1}{4}}{2mr^2}. \tag{19}$$

۳ ذره آزاد در دوبعد

نخستین و مهمترین مثالی را که باید بررسی کنیم، ذره آزاد است. در درسهای گذشته دیدیم که هامیلتونی یک ذره آزاد به صورت $H = \frac{P^2}{2m}$ است. دراین بخش ویژه حالت های این هامیلتونی را بدست می آوریم. نوع این ویژه حالت ها بستگی دارد به این که ما ویژه حالت های هامیلتونی را با کدام یک ازمشاهده پذیرهای دیگری که با آن جابجا می شوند پیدا می کنیم.

۱.۳ امواج تخت

هامیلتونی ذره آزاد را در نظر می گیریم.

$$H = \frac{1}{2m}P^2 = \frac{1}{2m}(P_x^2 + P_y^2). \tag{20}$$

این هامیلتونی با مشاهده پذیرهای P_x و P_y یا به عبارت بهتر با مشاهده پذیر تکانه $\mathbf{P}$ جابجامی شود. حالت های $|\vec{p}\rangle = |p_x, p_y\rangle$ که تابع موج فضایی آنهابه شکل امواج تختِ

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{x}) = \frac{1}{2\pi\hbar}e^{i\frac{1}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} \tag{21}$$

است ویژه حالت مشترک مشاهده پذیرهای P_x و P_y ودرنتیجه H است. یادآوری می کنیم که H یک مشاهده پذیرمستقل از P_x و P_y نیست وبرحسب آنها نوشته می شود.
این ویژه حالت ها یک پایه برای فضای هیلبرت یک ذره تشکیل می دهند و ما می توانیم هر حالت دیگری از این فضای هیلبرت را برحسب آنها بسط دهیم.

۲.۳ امواج دایره‌ای

دربعضی مواقع ترجیح مثلاً وقتی که پراکندگی ذرات راازپتانسیل های باتقارن دایره ای بررسی می کنیم، ترجیح می دهیم که حالت های ذره آزاد را چنان بنویسیم که اندازه حرکت زاویه‌ای آنها مشخص باشد. ازنظرفیزیکی توابع موج این حالت ها امواج دایره‌ای است که ازمبدأ مختصات دورمی شوند و یا به آن نزدیک می شوند. برای این کار بجای مشاهده پذیرهای P_x و P_y،

www.Endbook.net

مشاهده پذیرهای L^2 و H را که باهم جابجامی شوند قطری می کنیم. حالت های حاصل که با $|E,n\rangle$ مشخص می شوند دارای انرژی مشخص و تکانه زاویه ای مشخص هستند. اگرتابع موج آنهارا با

$$\psi(r,\theta)=\frac{u(r)}{r^{\frac{1}{2}}}e^{i\ n\theta} \tag{22}$$

نشان دهیم همانطورکه درابتدای این بخش نشان دادیم تابع $u_{E,n}(r)$ درمعادله شعاعی شرودینگر زیرصدق می کند: مشاهده پذیراست زیرا:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dr^2}+\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n^2-\frac{1}{4}}{r^2}\right)u=Eu, \tag{23}$$

که با تعریف $k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$ و $x=kr$ به شکل زیردرمی آید:

$$\frac{d^2u}{dx^2}-\left(\frac{n^2-\frac{1}{4}}{x^2}\right)u=-u. \tag{24}$$

برای حل این معادله نخست به رفتارمجانبی آن 24 در x های بزرگ نگاه می کنیم. دراین حد معادله فوق به شکل زیر در می آید:

$$\frac{d^2}{dx^2}u+u\approx 0, \tag{25}$$

که جواب های آن به شکل $u=e^{ix}$ و $u=e^{-ix}$ هستند. بنابراین جواب های این معادله در فواصل بزرگ به صورت امواج دورشونده e^{ikx} و نزدیک شونده e^{-ikx} به مرکز هستند. حال جواب های کامل را به شکل زیر می نویسیم:

$$\begin{aligned}u^+(x)&=e^{ikx}\sum_{n=0}^{\infty}a_k^+x^{-k},\\ u^-(x)&=e^{-ikx}\sum_{n=0}^{\infty}a_k^-x^{-k}.\end{aligned} \tag{26}$$

جایگذاری این بسط ها درمعادله 24 منجربه روابط تکرارزیرمی شود:

$$\begin{aligned}a_{k+1}^+ &= \frac{k(k+1)+\frac{1}{4}-n^2}{2i(k+1)}a_k^+,\\ a_{k+1}^- &= -\frac{k(k+1)+\frac{1}{4}-n^2}{2i(k+1)}a_k^-.\end{aligned} \tag{27}$$

www.Endbook.net

چند جمله اول بسط به ترتیب زیرهستند:

$$u^{+}(x)=\left(1+\frac{(\frac{1}{2})^{2}-n^{2}}{2i}\frac{1}{x}+\cdots\right)e^{ix} \tag{28}$$

و

$$u^{-}(x)=\left(1-\frac{(\frac{1}{2})^{2}-n^{2}}{2i}\frac{1}{x}+\cdots\right)e^{-ix} \tag{29}$$

که درآنهاازنوشتن ضریب بهنجارش صرف نظرکرده ایم. درنتیجه شکل نهایی توابع موج به صورت زیرخواهد بود:

$$\psi^{+}_{E,n}(r,\theta)=\frac{A}{\sqrt{r}}(1+\frac{\frac{1}{4}-n^{2}}{2ikr}+\cdots)e^{ikr}e^{in\theta}, \qquad n\in Z, \tag{30}$$

و

$$\psi^{-}_{E,n}(r,\theta)=\frac{A}{\sqrt{r}}(1-\frac{\frac{1}{4}-n^{2}}{2ikr}+\cdots)e^{-ikr}e^{in\theta} \qquad n\in Z. \tag{31}$$

که درآن $E=\frac{\hbar^{2}k^{2}}{2m}$ انرژی این حالت ها و $\hbar n$ تکانه زاویه آنهاست. تابع ψ^{+} نشان دهنده یک موج دایره ای دورشونده ازمرکز و تابع ψ^{-} نشان دهنده یک موج دایره ای نزدیک شونده به مرکزاست. دقت کنید که عددکوانتومی n تکانه زاویه‌ای جواب ها را مشخص می کند که مثبت بودن آن به معنای تکانه زاویه‌ای پادساعت گرد و منفی بودن آن به معنای تکانه زاویه‌ای ساعت گرد است. هرکدام از جواب های فوق دارای انرژی مشخص E و تکانه زاویه‌ای $n\hbar$ است.

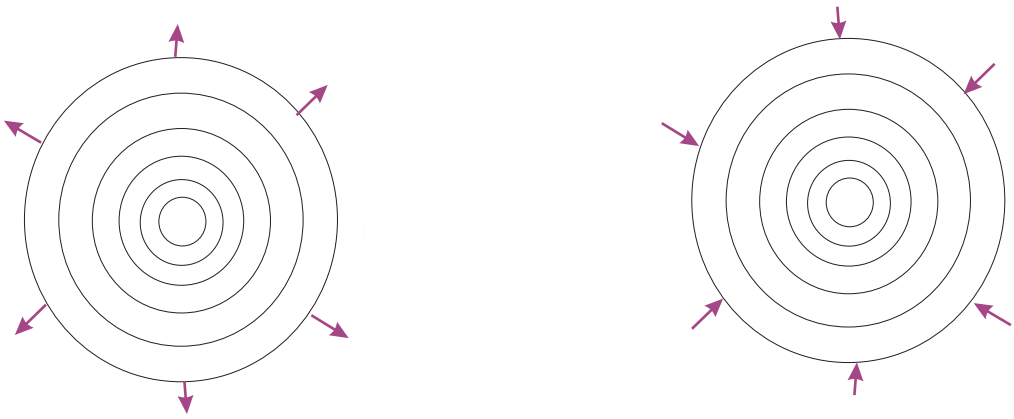
۳.۳ توابع بسل

دراینجا یک بار دیگر به معادله شرودینگر برای ذره آزاد نگاه می کنیم. از آنجا که پتانسیل برابر با صفراست این معادله به شکل زیر در می آید:

$$\frac{d^{2}f(x)}{dx^{2}}+\frac{1}{x}\frac{df(x)}{dx}+(1-\frac{n^{2}}{x^{2}})f(x)=0 \tag{32}$$

که درآن $x=kr$ و $E=\frac{\hbar^{2}k^{2}}{2m}$. این معادله یک معادله آشنا موسوم به معادله دیفرانسیل بسل از مرتبه‌ی n است و در قرن نوزدهم به وسعت مورد مطالعه قرار گرفته است. درضمیمه این فصل می توانید با خواص این توابع بیشتر آشنا شوید. دو جواب

www.Endbook.net



شکل ۱: شکل سمت راست یک موج دایره‌ای درون رو و شکل سمت چپ یک موج دایره‌ای برون رو را نشان می دهد.

مستقل از معادله فوق را با $J_n(x)$ و $N_n(x)$ نشان می دهیم . بنابراین جواب های معادله شرودینگر با انرژی $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ و تکانه زاویه‌ای $\hbar n$ به صورت زیر نوشته می شوند:

$$\psi^{(1)}(r,\theta) = J_n(kr)e^{in\theta}, \qquad \text{و,} \qquad \psi^{(2)}(kr) = N_n(kr)e^{in\theta}. \tag{33}$$

می توان نشان داد که برای kr های بزرگ شکل این توابع به صورت زیر است:

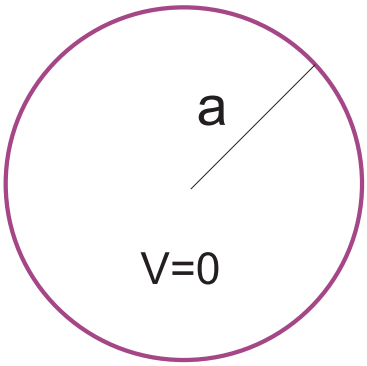
$$\begin{aligned} J_n(kr) &\sim \sqrt{\frac{2}{\pi kr}}\cos\left[kr - (\nu + \frac{1}{2})\frac{\pi}{2}\right] \\ N_n(kr) &\sim \sqrt{\frac{2}{\pi kr}}\sin\left[kr - (\nu + \frac{1}{2})\frac{\pi}{2}\right]. \end{aligned} \tag{34}$$

می توان بجای این دو جواب مستقل از معادله بسل ترکیب های خطی زیر را از این دو تابع که به توابع هنکل $HankelFunctions$ موسومند در نظر گرفت:

$$\begin{aligned} H_n^1(kr) &:= J_n(kr) + iN_n(kr) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} exp\, i\left[kr - (\nu + \frac{1}{2})\frac{\pi}{2}\right] \\ H_n^1(kr) &:= J_n(kr) - iN_n(kr) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} exp - i\left[kr - (\nu + \frac{1}{2})\frac{\pi}{2}\right]. \end{aligned} \tag{35}$$

بااین حساب توابع موجی که بدست می‌آوریم نشان دهنده موج های بیرون رو و درون رو خواهند بود، شکل (۱)

www.Endbook.net



شکل ۲: چاه پتانسیل دایره‌ای. در درون چاه پتانسیل برابر با صفر و روی دیواره ها بی نهایت است. تابع موج روی دیواره ها می بایست برابر با صفرباشد.

۴ چاه پتانسیل دایره ای

در درس های پیشین چاه دایره‌ای مربعی را بررسی کردیم. دراین درس یک
چاه پتانسیل دایره ای (۲) را به شکل زیردرنظرمی گیریم:

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r \leq a \\ \\ \infty & r > a \end{cases} \tag{36}$$

درداخل چاه می بایست معادله شرودینگررابرای ذره آزاد حل کنیم بااین شرط مرزی که دردیواره های پتانسیل تابع موج برابرباصفرباشد.

برای ذره آزاد پتانسیل V برابرباصفراست ودرنتیجه معادله شعاعی شرودینگر برای داخل چاه به صورت زیردرمی آید:

$$-\frac{1}{2m}\left(\frac{d^2f}{dr^2}+\frac{1}{r}\frac{df}{dr}\right)+\frac{n^2}{2mr^2}f(r)=Ef(r). \tag{37}$$

با تعریف $k := \sqrt{2mE}$ و پس ازمرتب کردن به صورت زیردرمی آید:

$$\frac{d^2f}{dr^2}+\frac{1}{r}\frac{df}{dr}+(k^2-\frac{n^2}{r^2})f(r)=0. \tag{38}$$

باتعریف متغیربدون بعد $x := kr$ این معادله به شکل نهایی زیردرمی آید که چیزی نیست جزمعادله بسل از مرتبه صحیحِ n:

$$\frac{d^2f}{dx^2}+\frac{1}{x}\frac{df}{dx}+(1-\frac{n^2}{x^2})f(x)=0. \tag{39}$$

www.Endbook.net

خواننده می تواند بعضی از خواص جواب های این معادله را درضمیمه این فصل مطالعه کند. این معادله دوجواب عمومی دارد که آن ها را با $J_n(x)$ و $N_n(x)$ نشان می دهیم. تابع $N_n(x)$ موسوم به تابع نیومان در $x \longrightarrow 0$ واگراست و واگرایی آن به صورت زیراست:

$$N_0(x) = \frac{2}{\pi}(\ln x + \gamma - \ln 2) + O(x^2), \tag{40}$$

و

$$N_n(x) = -\frac{(n-1)!}{\pi}(\frac{2}{x})^n(1 + \frac{1}{n-1}(\frac{x}{2})^2 + \cdots). \tag{41}$$

دراینجا γ ثابت اویلراست.
کلی ترین جواب 39 به صورت $A_nJ_n(x) + B_nN_n(x)$ است. ازآنجا که $N_n(x)$ منجربه تابع نابنهجارپذیرمی شود می بایست این جواب هاراکنارگذاشت. شرط مرزی در $r = a$ الزام می کند که تابع باقیمانده یعنی $J_n(x)$ درشرط زیرصدق کند:

$$J_n(ka) = 0. \tag{42}$$

هرگاه صفر s ام تابع بسل J_n را با β_s^n نشان دهیم خواهیم داشت

$$ka = \beta_s^n \longrightarrow k \equiv k_{n,s} = \frac{\beta_s^n}{a}. \tag{43}$$

درنتیجه انرژی های کوانتیده به ترتیب زیربدست می آیند:

$$E_{n,s} = \frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\beta_s^n}{a})^2, \qquad n = 0, 1, 2, 3, \cdots, \quad s = 1, 2, 3, \cdots. \tag{44}$$

این انرژی ها مربوط به ویژه توابع زیرهستند:

$$\psi_{n,s}(r, \theta) = J_n(\frac{\beta_s^n\, r}{a})e^{i\, n\theta}, \qquad n = 1, 2, 3, \cdots, \quad s = 1, 2, 3, \cdots. \tag{45}$$

درنوشتن این توابع ضریب بهنجارش رانانوشته ایم.

www.Endbook.net

۵ نوسانگر هارمونیک دو بعدی

نوسانگر هارمونیک دوبعدی همسانگرد با هامیلتونی زیر توصیف می‌شود:

$$H = \frac{1}{2m}(P_x^2 + P_y^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(X^2 + Y^2). \tag{46}$$

در دستگاه واحدهای طبیعی می توان قرار داد $m = 1, \omega = 1, \hbar = 1$ و درنتیجه هامیلتونی به شکل زیر در می آید:

$$H = \frac{1}{2}(P_x^2 + P_y^2) + \frac{1}{2}(X^2 + Y^2). \tag{47}$$

یک راه برای بدست آوردن طیف این نوسانگر آن است که از تعریف عملگرهای بالابرنده و پایین برنده به صورت زیر شروع کنیم:

$$\begin{aligned} a_x &:= \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iP_x), \qquad & a_x^\dagger &:= \frac{1}{\sqrt{2}}(X - iP_x), \\ a_y &:= \frac{1}{\sqrt{2}}(Y + iP_y), \qquad & a_y^\dagger &:= \frac{1}{\sqrt{2}}(Y - iP_y). \end{aligned} \tag{48}$$

تنها روابط جابجایی غیرصفر بین این عملگرها عبارت است از:

$$[a_x, a_x^\dagger] = 1, \qquad [a_y, a_y^\dagger] = 1. \tag{49}$$

هم چنین معلوم می شود که

$$H = (a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y + 1) \tag{50}$$

با توجه به آنچه که در مطالعه نوسانگر هارمونیک یک بعدی دیده‌ایم خواهیم داشت:

$$H|n_x, n_y\rangle = (n_x + n_y + 1)|n_x, n_y\rangle, \qquad n_x, n_y = 0,\ 1,\ 2, \cdots, \tag{51}$$

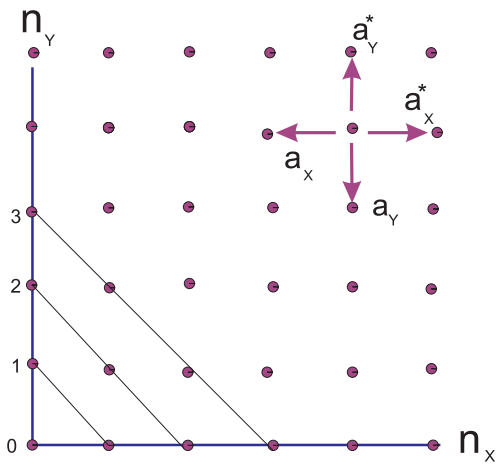
که درآن

$$|n_x, n_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_x! n_y!}} {a_x^\dagger}^{n_x} {a_y^\dagger}^{n_y} |0, 0\rangle, \tag{52}$$

و

$$a_x|0, 0\rangle = a_y|0, 0\rangle = 0. \tag{53}$$

www.Endbook.net



شکل ۳: ویژه حالت های انرژی برای نوسانگر هارمونیک دوبعدی. هرنقطه نشان دهنده یک حالت با اعداد کوانتومی (n_x, n_y) است. این حالت ها ویژه حالت تکانه زاویه‌ای L_z نیستند.

بنابراین هر ویژه حالت هامیلتونی با دو عدد کوانتومی n_x و n_y مشخص می شود. حالت پایه عبارت است از $|0,0\rangle$. اولین حالت برانگیخته واگنی درجه دو دارد زیرا هر دو حالت $|1,0\rangle$ و $|0,1\rangle$ یک انرژی دارند. حالت بعدی واگنی درجه سه دارد زیرا حالت های $|2,0\rangle,\ |1,1\rangle,\ |0,2\rangle$ انرژی برابر دارند. درشکل (۳) هر حالت با اعداد کوانتومی (n_x, n_y) یک نقطه در یک شبکه دو بعدی با مختصات (n_x, n_y) نشان داده شده است.

اثر عملگرهای $a_x,\ a_x^\dagger,\ a_y,\ a_y^\dagger$ روی شکل نشان داده شده اند. تمام نقاطی که روی خط $n_x + n_y = constant$ قرار دارند انرژی یکسان دارند و بنابراین واگن هستند.

هم چنین تابع موج این نوسانگر به شرح زیر بدست می آید:

$$\begin{aligned}
\psi_{n_x,n_y}(x,y) &:= \langle x,y|n_x,n_y\rangle = \langle x|n_x\rangle\langle y|n_y\rangle = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y) \\
&= \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}}\frac{1}{\sqrt{2^{n_x}n_x!}}H_{n_x}(x)e^{-\frac{x^2}{2}}\frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}}\frac{1}{\sqrt{2^{n_y}n_y!}}H_{n_y}(n_y)e^{-\frac{y^2}{2}} \\
&= \frac{1}{\pi^{\frac{1}{2}}}\frac{1}{\sqrt{2^{n_x+n_y}n_x!n_y!}}H_{n_x}(x)H_{n_y}(y)e^{-\frac{r^2}{2}}. \qquad (54)
\end{aligned}$$

تا کنون هیچ استفاده‌ای از اینکه نوسانگر هارمونیک همسانگرد است و تقارن دوارنی دارد نکرده‌ایم. می دانیم که چنین تقارنی به معنای آن است که می توانیم ویژه حالت های مشترک انرژی و تکانه‌زاویه‌ای را پیدا کنیم. آیا حالت های $|n_x, n_y\rangle$ چنین حالت هایی هستند؟ برای پاسخ به این سوال اثر تکانه‌زاویه‌ای را روی این حالت ها محاسبه می کنیم. نخست تکانه زاویه ای را برحسب عملگرهای بالابر و پایین بر می نویسیم. با استفاده از روابط (48) براحتی معلوم می شود که

$$L_z \equiv XP_y - YP_x = i\left(a_x^\dagger a_y - a_x a_y^\dagger\right). \qquad (55)$$

واضح است که این عملگر حالت های $|n_x, n_y\rangle$ را به ترکیبی خطی از حالت های $|n_x+1, n_y-1\rangle$ و $|n_x+1, n_y-1\rangle$ تبدیل می کند و بنابراین پایه فوق پایه‌ای نیست که بردارهای آن ویژه حالت مشترک هامیلتونی و تکانه زاویه‌ای باشند.

این نتیجه طبیعی هم هست زیرا از همان ابتدا عملگرهای بالابر و پایین بر براساس متغیرهای دکارتی x و y ساخته شده‌اند و حال آنکه به نظر می رسد که می بایست عملگرهای فوق را با توجه به مختصات قطبی می نوشتیم. برای این کار دقت می

www.Endbook.net

کنیم که به جای دو مختصه $(x,y)=(r\cos\theta, r\sin\theta)$ می توانیم از دو مختصه‌ی $(z,\overline{z})=(r\ e^{i\theta}, r\ e^{-i\theta})$ استفاده کنیم. این مختصات برای مطالعه چنین مسئله ای مناسب ترهستند. درواقع تحت یک عمل دوران می دانیم که متغیرهای (x,y) به ترکیبی خطی از هم تبدیل می شوند یعنی

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \longrightarrow \tag{56}$$

و حال آنکه متغیرهای $(z,\overline{z})$ تحت دوران تبدیل خیلی ساده ای دارند:

$$z \longrightarrow ze^{i\theta}, \qquad \overline{z} \longrightarrow \overline{z}e^{-i\theta}. \tag{57}$$

باالهام ازاین تغییر متغیر عملگرهای بالابر و پایین برجدیدی را به شکل زیر تعریف می کنیم:

$$\begin{aligned} a_R &:= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x + ia_y), & a_L &:= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x - ia_y), \\ a_R^\dagger &:= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x^\dagger - ia_y^\dagger), & a_L^\dagger &:= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x^\dagger + ia_y^\dagger). \end{aligned} \tag{58}$$

براحتی معلوم می‌شود که تنها روابط جابجایی غیرصفر بین این عملگرها عبارت است از:

$$[a_R\ ,\ a_R^\dagger] = 1, \qquad [a_L\ ,\ a_L^\dagger] = 1. \tag{59}$$

هم چنین معلوم می شود که

$$H = a_R^\dagger a_R + a_L^\dagger a_L + 1, \qquad L_z = a_R^\dagger a_R - a_L^\dagger a_L. \tag{60}$$

بنابراین هرگاه حالت های زیر را تعریف کنیم:

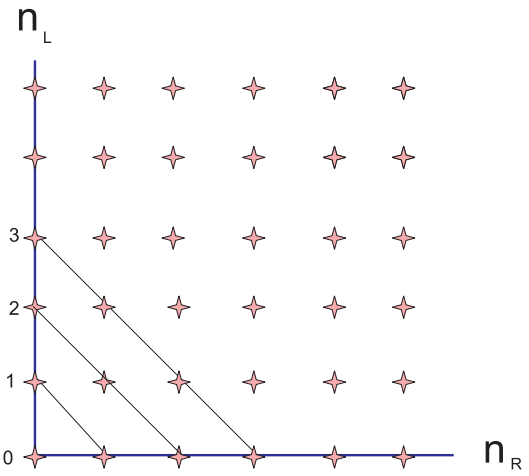
$$|n_R, n_L\rangle := \frac{1}{\sqrt{n_R! n_L!}} {a_R^\dagger}^{n_R} {a_L^\dagger}^{n_L} |0,0\rangle, \tag{61}$$

خواهیم داشت

$$\begin{aligned} H|n_R,n_L\rangle &= (n_R + n_L + 1)|n_R,n_L\rangle \\ L_z|n_R,n_L\rangle &= (n_R - n_L)|n_R,n_L\rangle. \end{aligned} \tag{62}$$

نتیجه آن است که حالت های $|n_R,n_L\rangle$ ویژه حالت مشترک هامیلتونی و تکانه زاویه ای هستند. درشکل (۴) این ویژه حالت ها با نقاط یک شبکه دوبعدی نشان داده شده‌اند.

www.Endbook.net



شکل ۴: ویژه حالت های انرژی برای نوسانگر هارمونیک دوبعدی. هرنقطه نشان دهنده یک حالت با اعداد کوانتومی (n_R, n_L) است. این حالت ها ویژه حالت تکانه زاویه‌ای L_z نیز هستند.

دقت کنید که یک حالت $|n,m\rangle_{R,L}$ و یک حالت $|n,m\rangle_{X,Y}$ (حتی اگر اعدادِ (m,n) آنها با هم یکسان باشند) کاملاً باهم فرق دارند زیرا از تاثیر عملگرهای متفاوتی بر روی حالت $|0,0\rangle_{X,Y} = |0,0\rangle_{R,L}$ بدست می آیند. دراین جا توجه به این تساوی اخیر یعنی تساوی حالت های پایه اهمیت اساسی دارد. خواننده‌می تواند خود تساوی این دو حالت را ثابت کند.

می توانیم شکل فضایی توابع موج جدید را نیز به راحتی بدست آوریم. برای این کار بهتراست از مختصات $(z,\overline{z})$ بجای (x,y) استفاده‌کنیم. باید کمی درباره این مختصات توضیح دهیم. قرار می دهیم:

$$z := x + iy, \qquad \overline{z} = x - iy \tag{63}$$

معکوس این روابط به شکل زیراست:

$$x := \frac{z+\overline{z}}{2}, \qquad y := \frac{z-\overline{z}}{2i}, \tag{64}$$

بنابراین هر تابع $f := f(x,y)$ را می توان به صورت $f := f(z,\overline{z})$ نیز نوشت. مثلاً تابع $f(x,y) = x^2 + y^2$ را می توان به صورت $f(z,\overline{z}) = z\overline{z}$ نوشت. حال می توانیم مشتقات جزئی نسبت به z و $\overline{z}$ را با استفاده از روابط بالا و استفاده از قاعده زنجیره‌ای برای ترکیب مشتقات تعریف کنیم:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial z} &= \frac{\partial x}{\partial z}\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial z}\frac{\partial f}{\partial y} \\ \frac{\partial f}{\partial \overline{z}} &= \frac{\partial x}{\partial \overline{z}}\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \overline{z}}\frac{\partial f}{\partial y} \end{aligned} \tag{65}$$

ویا به طور کلی:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} &= \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x} - \frac{1}{2}i\frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial \overline{z}} &= \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{2}i\frac{\partial}{\partial y}. \end{aligned} \tag{66}$$

www.Endbook.net

معکوس این روابط به شکل زیراست:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial z}+\frac{\partial}{\partial \overline{z}}\\ \frac{\partial}{\partial y} &= i\frac{\partial}{\partial z}-i\frac{\partial}{\partial \overline{z}}.\end{aligned} \tag{67}$$

حال می‌توانیم نمایش عملگرهای بالا بر a_R و a_L را درنمایش مختصات بنویسیم:

$$\begin{aligned}a_R &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x+ia_y)=\frac{1}{2}(x+\frac{\partial}{\partial x}+iy+i\frac{\partial}{\partial y})=\frac{1}{2}z+\frac{\partial}{\partial \overline{z}}\\ a_L &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x-ia_y)=\frac{1}{2}(x+\frac{\partial}{\partial x}-iy-i\frac{\partial}{\partial y})=\frac{1}{2}\overline{z}+\frac{\partial}{\partial z}\\ a_R^\dagger &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x^\dagger-ia_y^\dagger)=\frac{1}{2}(x-\frac{\partial}{\partial x}-iy+i\frac{\partial}{\partial y})=\frac{1}{2}\overline{z}-\frac{\partial}{\partial z}\\ a_L^\dagger &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x^\dagger+ia_y^\dagger)=\frac{1}{2}(x-\frac{\partial}{\partial x}+iy-i\frac{\partial}{\partial y})=\frac{1}{2}z-\frac{\partial}{\partial \overline{z}}.\end{aligned} \tag{68}$$

بعدازاین مقدمات می توانیم تمام توابع موج را براحتی بدست آوریم. نخست حالت پایه را بررسی می کنیم. می دانیم که تابع موج از رابطه زیر بدست می آید.

$$\psi_{n_R,n_L}(z,\overline{z}) := \langle z,\overline{z}|n_R,n_L\rangle. \tag{69}$$

هم چنین می دانیم که حالت پایه توسط هر دو عملگر a_R و a_L نابود می شود. بنابراین داریم

$$\begin{aligned}(\frac{1}{2}z+\frac{\partial}{\partial \overline{z}})\psi_{0,0}(z,\overline{z})=0,\\ (\frac{1}{2}\overline{z}+\frac{\partial}{\partial z})\psi_{0,0}(z,\overline{z})=0.\end{aligned} \tag{70}$$

از حل معادلات دیفرانسیل بالا که بسیارساده هم هستند تابع موج حالت پایه براحتی بدست می آید:

$$\psi_{0,0}(z,\overline{z})=\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-\frac{1}{2}z\overline{z}}, \tag{71}$$

که درآن $\sqrt{\pi}$ یک ثابت بهنجارش است. حال بقیه توابع موج از اثر عملگرهای بالا بر و پایین بر بدست خواهند آمد: یعنی

$$\psi_{n_R,n_L}(z,\overline{z})=\frac{1}{\sqrt{\pi n_R!n_L!}}(\frac{1}{2}\overline{z}-\frac{\partial}{\partial z})^{n_R}(\frac{1}{2}z-\frac{\partial}{\partial \overline{z}})^{n_L}e^{-\frac{1}{2}z\overline{z}}. \tag{72}$$

www.Endbook.net

٦ ذره باردار درمیدان مغناطیسی یکنواخت

درفیزیک کلاسیک حرکت ذره بارداری به جرم m و بارالکتریکی e را در میدان مغناطیسی یکنواخت B مطالعه کرده‌ایم. هرگاه میدان مغناطیسی بر یک صفحه مثلا صفحه‌ی xy عمود باشد و هرگاه میدان مغناطیسی یک نواخت نیز باشد، و سرعت اولیه ذره نیز در صفحه xy باشد، ذره تحت تاثیر نیروی جانب به مرکز $F = evB$ حرکت دایره‌ای طی می کند. اگر شعاع این دایره را r بگیریم آنگاه معادله نیوتن برای چنین ذره‌ای برابر خواهد بود با:

$$m\frac{v^2}{r} = evB = e\omega rB, \tag{73}$$

و ازآنجابدست می آوریم که

$$\omega = \frac{eB}{m}. \tag{74}$$

این فرکانس، فرکانس لارمور خوانده می شود و تنها به مشخصات ذره باردار و میدان مغناطیسی بستگی دارد. یک ذره می تواند در میدان مغناطیسی انرژی های متفاوت داشته باشد اما همواره فرکانس چرخش آن برابر با فرکانس لارموراست. درواقع هرگاه ذره دایره‌ای به شعاع R را طی کند، آنگاه انرژی و تکانه زاویه ای آن به ترتیب برابرخواهند بود با:

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m\omega^2R^2, \\ L_z &= mvR = m\omega R^2. \end{aligned} \tag{75}$$

بنابراین بین انرژی و تکانه‌ی زاویه‌ای این ذره همواره رابطه زیر برقراراست:

$$E = \frac{1}{2}\omega L_z. \tag{76}$$

حال می خواهیم حرکت این ذره را دراین میدان درچارچوب مکانیک کوانتومی بررسی کنیم. می دانیم که هامیلتونی یک ذره باردار درمیدان الکترومغناطیسی به شکل زیراست:

$$H = \frac{1}{2m}(\vec{P} - e\vec{A})^2 + e\phi \tag{77}$$

که درآن e بارالکتریکی ذره، ϕ پتانسیل اسکالر و $\vec{A}$ پتانسیل برداری است. میدان الکتریکی و مغناطیسی به ترتیب زیر از این پتانسیل هابدست می آیند:

$$\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \nabla\phi, \qquad \vec{B} = \nabla \times \vec{A}. \tag{78}$$

www.Endbook.net

ازآنجا که میدان الکتریکی صفراست نتیجه می گیریم که ϕ یک عدد ثابت و $\vec{A}$ مستقل اززمان است. می توانیم ϕ را مساوی صفربگیریم. درنتیجه تنهانیازبه پتانسیل برداری داریم واین پتانسیل می بایست چنان باشد که درشرط زیرصدق کند:

$$\nabla \times \vec{A} = B\hat{z}. \tag{79}$$

بنابرآزادی پیمانه ای می دانیم که $\vec{A}$ به طوریکتا انتخاب نمی شود. درواقع اگرپتانسیل برداری را به صورت $\vec{A} = A_x(x,y)\hat{x} + A_y(x,y)\hat{y}$ بگیریم آنگاه معادله بالا تبدیل می شود به

$$\frac{\partial}{\partial x}A_y - \frac{\partial}{\partial y}A_x = B \tag{80}$$

که حل های متعددی دارد. این حل ها متناظربا پیمانه های مختلف هستند. دریک پیمانه می توانیم قراردهیم

$$A_x = -\frac{B}{2}y, \qquad A_y = \frac{B}{2}x. \tag{81}$$

این پیمانه دارای تقارن دایره است زیراخطوط میدان $\vec{A}$ دایره های هم مرکز به مبدأ مختصات هستند. درپیمانه های دیگری می توانیم قراردهیم

$$A_x = -B\ y, \qquad A_y = 0, \qquad \text{یا,} \qquad A_x = 0, \qquad A_y = Bx. \tag{82}$$

پیمانه 81 را درنظرمی گیریم که دارای تقارن دایره است . دراین پیمانه هامیلتونی عبارت است از

$$H = \frac{(P_x + \frac{eB}{2}Y)^2}{2m} + \frac{(P_y - \frac{eB}{2}X)^2}{2m}. \tag{83}$$

آیا این هامیلتونی دارای تقارن دورانی است ؟ پاسخ این سوال را می توانیم با محاسبه جابجاگر $[H,L]$ پیداکنیم. یک محاسبه ساده نشان می دهد که $[H,L]=0$ ودرنتیجه تقارن دایره ای برقراراست. حال دو عملگرزیر را تعریف می کنیم:

$$Q := \frac{1}{\sqrt{eB}}(P_x + \frac{eB}{2}Y), \qquad P := \frac{1}{\sqrt{eB}}(P_y - \frac{eB}{2}X). \tag{84}$$

این دومتغیر کانونیک هستند به این معناکه

$$[Q,P] = i\hbar. \tag{85}$$

برحسب این دومتغیر هامیلتونی ذره درمیدان مغناطیسی به شکل زیردرمی آید

$$H = \frac{eB}{2m}(Q^2 + P^2) =: \frac{\omega}{2}(Q^2 + P^2), \tag{86}$$

www.Endbook.net

که درآن $\omega = \frac{eB}{m}$ فرکانس لارمور نامیده می شود. این هامیلتونی نشانگریک نوسانگرهارمونیک است ومی توانیم بااستفاده از روشی که درمورد نوسانگرهارمونیک بکاربردیم طیف آن را به روش جبری تعیین کنیم. کافی است که عملگرهای بالابرنده وپایین برنده زیر را تعریف کنیم

$$a := \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(Q + iP), \qquad a^\dagger := \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(Q - iP), \tag{87}$$

که درنتیجه آن بدست می آوریم

$$[a, a^\dagger] = 1, \qquad H = \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2}). \tag{88}$$

حال کافی است که حالت های $|n\rangle := \frac{1}{\sqrt{n!}}{a^\dagger}^n|0\rangle$ را تعریف کنیم که درآن حالت $|0\rangle$ حالتی است که توسط a نابود می شود. این حالت ها همگی ویژه حالت انرژی هستند به این معنا که

$$H|n\rangle = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})|n\rangle. \tag{89}$$

اما می دانیم که عملگردوران با هامیلتونی جابجامی شود و بنابراین حالت های باتکانه زاویه ای متفاوت می توانند یک انرژی داشته باشند. به عبارت دیگر طیف هامیلتونی واگنی دارد. درنتیجه نماد $|n\rangle$ به تنهایی نشان دهنده یک ویژه حالت هامیلتونی نیست بلکه نشان دهنده یک ویژه فضا یا $eigenspace$ است. درواقع حالت های فضای هیلبرت توسط ویژه بردارهای مشترک هامیلتونی و تکانه زاویه ای جاروب می شوند. این ویژه بردارهامی بایست یک عددکوانتومی اضافه داشته باشند که نشان دهنده ویژه مقدار L باشد. حال سوال می کنیم که اگر L باهامیلتونی جابجا می شود،آیا می توان L ر برحسب عملگرهای بالابرنده و پایین برنده یک نوسانگردیگرنوشت؟ برای پاسخ به این سوال عملگرهای زیر را تعریف می کنیم:

$$\tilde{P} := \frac{1}{\sqrt{eB}}(P_x - \frac{eB}{2}Y), \qquad \tilde{Q} := \frac{1}{\sqrt{eB}}(P_y + \frac{eB}{2}X). \tag{90}$$

یک محاسبه ساده نشان می دهد که $[\tilde{Q}, \tilde{P}] = 1$ یعنی این دوعملگرنیز کانونیک هستند. علاوه برآن براحتی معلوم می شود که روابط زیربرقرارهستند

$$[Q, \tilde{Q}] = [Q, \tilde{P}] = 0, \qquad [P, \tilde{Q}] = [P, \tilde{P}] = 0. \tag{91}$$

درنتیجه جفت متغیرهای (Q, P) و $(\tilde{Q}, \tilde{P})$ هرکدام کانونیک بوده وازهم مستقل هستند. درواقع کاری که انجام داده ایم آن است که بجای مشاهده پذیرهای کانونیک ومستقل (X, P_x) و (Y, P_y) جفت جدیدی ازمتغیرهای کانونیک ومستقل برای توصیف این سیستم بکاربرده ایم. بدنیست که روابط معکوس را نیزبنویسیم. باتوجه به روابط 84 و 90 براحتی معلوم می شود:

$$X = \frac{1}{\sqrt{eB}}(\tilde{Q} - P), \qquad Y = \frac{1}{\sqrt{eB}}(Q - \tilde{P}),$$

www.Endbook.net

$$P_x = \frac{\sqrt{eB}}{2}(Q + \tilde{P}), \qquad P_y = \frac{\sqrt{eB}}{2}(\tilde{Q} + P). \tag{92}$$

درنتیجه بدست می آوریم

$$L = XP_y - YP_x = \frac{1}{2}(\tilde{Q}^2 - P^2) - \frac{1}{2}(Q^2 - \tilde{P}^2) \tag{93}$$

$$= \frac{1}{2}(\tilde{Q}^2 + \tilde{P}^2) - \frac{1}{2}(Q^2 + P^2). \tag{94}$$

بنابراین با تعریفِ

$$b := \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\tilde{Q} + i\tilde{P}), \qquad b^\dagger := \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\tilde{Q} - i\tilde{P}), \tag{95}$$

بدست می آوریم

$$[b, b^\dagger] = 1, \qquad L = b^\dagger b - a^\dagger a. \tag{96}$$

حال می توانیم طیف هامیلتونی و تکانه زاویه ای را به طورهمزمان پیداکنیم زیرپیداکردن طیف این دو چیزی نیست جز پیداکردن طیف همزمان دو عملگر مستقل و مثبتِ $a^\dagger a$ و $b^\dagger b$ که می دانیم این طیف چیزی نیست جزضرب تانسوری حالت های یک نوسانگرهارمونیک. این طیف را به شکل زیرنشان می دهیم:

$$|n, m\rangle := \frac{1}{\sqrt{m!n!}} a^{\dagger n} b^{\dagger m} |0, 0\rangle,$$

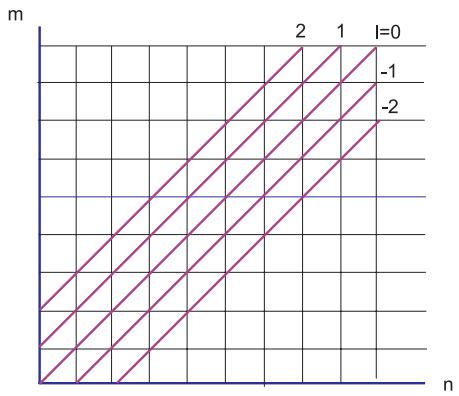
$$H|n, m\rangle = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})|n, m\rangle, \qquad L|n, m\rangle = (m - n)|n, m\rangle, \tag{97}$$

که درآن حالت $|0, 0\rangle$ با رابطه زیرتعریف می شود.

$$a|0, 0\rangle = b|0, 0\rangle = 0. \tag{98}$$

به ازای هر جفت عدد صحیح نامنفی (n, m) یک حالتِ $|m, n\rangle$ با تکانه زاویه $l = (m - n)\hbar$ و انرژی $\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ داریم. این حالت ها درشکل ۵ نشان داده شده اند. هر گروه از حالت های $|n, m\rangle$ با n ثابت، یک تراز لانداو خوانده می شود. این حالت ها همه یک انرژی ولی تکانه زاویه ای های مختلف دارند.

www.Endbook.net



شکل ۵: هر حالت (m,n) یک ویژه حالت مشترک انرژی و اندازه حرکت زاویه‌ای است.

۷ ضمیمه: بعضی از خواص توابع بسل

دراین ضمیمه به اختصار به معرفی توابع بسل می پردازیم. شناختن این توابع و خواص آنها برای درک روابط تحلیلی این درس و درس های آینده اهمیت دارند. اگر خواننده از ابتدای این ضمیمه شروع به اثبات روابط کند تقریبا تمامی خواص این توابع را می تواند یک به یک استخراج کند.

۱.۷ مولد توابع بسل

توابع بسل را مثل بسیاری دیگر از توابع خاص می توان با تابع مولدشان تعریف کرد.
توابع بسل مرتبه n که آنها را با $J_n(x)$ نشان می دهیم با تابع مولد زیرتعریف می شوند:

$$g(x,t) := e^{\frac{x}{2}(t-\frac{1}{2})} =: \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x)t^n. \tag{99}$$

ازاین تعریف می توان بسیاری از خواص توابع بسل را به ترتیب زیربدست آورد.

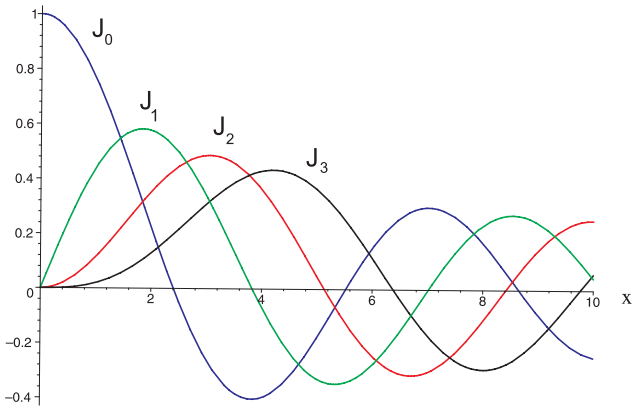
۱: با تبدیل $t \longrightarrow -t$ و مقایسه دوطرف خواهیم دید که

$$J_n(-x) = (-1)^n J_n(x). \tag{100}$$

۲: با قراردادن $t = 1$ و مقایسه دوطرف معلوم می شود که

$$J_0(x) + \sum_{n=1}^{\infty} J_{2n}(x) = 1 \qquad \forall x. \tag{101}$$

www.Endbook.net



شکل ٦: چند تابع اولیه بسل.

۳: باقراردادن $x=0$ دردوطرف و مقایسه آنها بدست می آوریم $\sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(0)t^n = 1$. ازآنجا که t متغیراست این رابطه فقط وقتی برقراراست که داشته باشیم

$$J_0(0) = 1, \qquad J_{n\neq 0}(0) = 0. \tag{102}$$

۴: با قراردادن $t = e^{i\theta}$ ومقایسه قسمت های حقیقی و موهومی دو طرف واستفاده ازرابطه 100 بدست می آوریم

$$\begin{aligned}\cos(x\sin\theta) &= J_0(x) + 2\sum_{n=0}^{\infty} J_{2n}\cos 2n\theta,\\ \sin(x\sin\theta) &= 2\sum_{n=0}^{\infty} J_{2n+1}\sin(2n+1)\theta.\end{aligned} \tag{103}$$

۵: بابسط طرف چپ به‌صورت $g(x,t) = e^{\frac{xt}{2}}e^{\frac{-x}{2t}}$ ومقایسه دوطرف، بدست می آوریم:

$$J_n(x) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s}{(n+s)!s!}(\frac{x}{2})^{n+2s}. \tag{104}$$

شکل توابع بسل تقریبا مثل توابع سینوسی ولی با دامنه‌ی میرا هستند. چند تابع اولیه بسل درشکل ٦ رسم شده اند.
اما برخلاف توابع سینوسی که صفرهای آنها درفواصل منظم رخ می دهند صفرهای توابع بسل مضاربی از یک مقدار معین نیستند. با این وجود دربسیاری از کاربردهای این توابع مهم است که بدانیم این توابع دقیقاً درچه مقادیری رخ می دهند. اهمیت صفرهای تابع بسل تا آنجاست که جدول های بسیاری درکتاب ها به فهرست کردن موقعیت دقیق این صفرها پرداخته‌اند. جدول ۱.۷ صفرهای چند تابع اولیه بسل رانشان می دهد.
٦: روابط تکرار: با مشتق گرفتن از دوطرف نسبت به x و نسبت به t ومقایسه طرفین به روابط تکرارزیرمی رسیم:

$$\begin{aligned}J_{n-1} - J_{n+1} &= 2J_n',\\ J_{n-1} + J_{n+1} &= \frac{2n}{x}J_n,\end{aligned} \tag{105}$$

www.Endbook.net

14.9309	11.7915	8.6537	5.5201	2.4048	J_0
13.3237	10.1735	7.0156	3.8317	0	J_1
14.7960	11.6198	8.4172	5.1356	0	J_2
16.2235	13.015	9.7610	6.3802	0	J_3

جدول ۱: صفرهای اولیه از چند تابع اولیه بسل

که درآن منظور از J'_n مشتق J_n نسبت به x است.

۷: معادله دیفرانسیل: با ترکیب این دومعادله تکرار به معادله دیفرانسیل زیر که همان معادله دیفرانسیل بسل است می رسیم (انجام ترکیب به عهده خواننده‌است):

$$\frac{d^2}{dx^2}J_n + \frac{d}{dx}J_n + (1 - \frac{n^2}{x^2})J_n = 0. \tag{106}$$

۲.۷ توابع بسل از مرتبه غیر صحیح

هر دنباله ای ازتوابع که درروابط تکرارِ 105 صدق کنند به طوربدیهی درمعادله دیفرانسیل فوق نیز صدق می کنند. بنابراین می توان معادله بسل از مرتبه غیرصحیح ِν را به شکل زیرتعریف کرد:

$$\frac{d^2}{dx^2}J_\nu + \frac{d}{dx}J_\nu + (1 - \frac{\nu^2}{x^2})J_\nu = 0. \tag{107}$$

دو جواب ِاین معادله به شکل زیرخواهند بود:

$$\begin{aligned} J_\nu(x) &= \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s}{(\nu+s)!s!}(\frac{x}{2})^{\nu+2s} \\ J_{-\nu}(x) &= \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s}{(-\nu+s)!s!}(\frac{x}{2})^{-\nu+2s}. \end{aligned} \tag{108}$$

دراین جا منظور از $\nu!$ فاکتوریل اعداد حقیقی است که به صورت زیر تعریف می شود:

$$\nu! = \int_0^\infty t^\nu e^{-t} dt. \tag{109}$$

www.Endbook.net

خواننده می تواند براحتی ثابت کند (مثلاً با استفاده از انتگرال گیری جزء به جزء) که این تعریف ضمن نگاه داشتن خاصیت اصلی فاکتوریل یعنی رابطه $\nu! = \nu(\nu-1)!$ در مقادیر صحیح مثبت بر تعریف استاندارد فاکتوریل منطبق است.

برای وقتی که ν عدد صحیح نباشد، این دوجواب مستقل ازهم اند، ولی برای وقتی که ν عدد صحیح است، این دوجواب، باهم متناسب اند ومستقل نیستند. دراین حالت می بایست یک جواب مستقل پیداکنیم. یک راه برای پیداکردن این جواب این است که حد $\nu \longrightarrow n$ را درجواب زیرمطالعه کنیم:

$$N_\nu(x) := \frac{\cos \pi\nu J_\nu(x) - J_{-\nu}(x)}{\sin \nu\pi}. \tag{110}$$

محاسبه دقیق حد منجربه یک بسط برای تابع بسل ازنوع دوم ویاتابع نویمان ازمرتبه n می شود. شکل این بسط طولانی است و خواننده می تواند درصورت نیاز شکل کامل آن را درکتاب زیرپیداکند:

G. Arfken, Metheds of Mathematical Physics, 2nd edition, Chapter 11, *page* 498.

آنچه که برای مامهم است رفتاراین توابع درنزدیکی $x \longrightarrow 0$ است. می توان ثابت کرد که برای x های کوچک روابط حدی زیربرقرارهستند:

$$N_0(x) = \frac{2}{\pi}(\ln x + \gamma - \ln 2) + O(x^2), \tag{111}$$

و

$$N_n(x) = -\frac{(n-1)!}{\pi}(\frac{2}{x})^n(1 + \frac{1}{n-1}(\frac{x}{2})^2 + \cdots). \tag{112}$$

۳.۷ تعامد توابع بسل

می توان ثابت کرد که توابع بسل برهم متعامدند. برای وقتی که این توابع درفاصله صفر تا بی نهایت تعریف می شوند رابطه تعامد آنها به شکل زیراست:

$$\int_0^\infty J_\nu(kr)J_\nu(k'r)rdr = \frac{1}{k}\delta(k-k'). \tag{113}$$

www.Endbook.net

خواننده می تواند از این رابطه استفاده کند و نشان دهد که توابع موج ذره آزاد بر یکدیگر عمودند. هم چنین وقتی که این توابع را محدود به یک فاصله محدود مثلاً 0 تا a کنیم، رابطه تعامد به شکل زیر درمی آید:

$$\int_0^a J_\nu(\beta_{\nu,m}\frac{r}{a})J_\nu(\beta_{\nu,n}\frac{r}{a})rdr = 0 \qquad if \qquad m \neq n. \tag{114}$$

دراین رابطه $\beta_{\nu,m}$ صفر شماره‌ی m از تابع J_ν است. بنابراین تابع $J_\nu(\beta_{\nu,m}\frac{r}{a})$ تابعی است که در $r = a$ برابر با صفراست.

۴.۷ توابع هنکل

توابع هنکل $HankelFunctions$ ترکیبی خطی از توابع بسل و نویمان هستند که به شکل زیر تعریف می شوند:

$$\begin{aligned} H_\nu^1(x) &= J_\nu(x) + iN_\nu(x) \\ H_\nu^2(x) &= J_\nu(x) - iN_\nu(x). \end{aligned} \tag{115}$$

بسط مجانبی این توابع از روابط زیر بدست می آید:

$$\begin{aligned} H_\nu^1(x) &= \sqrt{\frac{2}{\pi x}} exp\, i\left[x - (\nu + \frac{1}{2})\frac{\pi}{2}\right].[P_\nu(x) + iQ_\nu(x)] \\ H_\nu^2(x) &= \sqrt{\frac{2}{\pi x}} exp - i\left[x - (\nu + \frac{1}{2})\frac{\pi}{2}\right].[P_\nu(x) - iQ_\nu(x)], \end{aligned} \tag{116}$$

که درآن توابع P_ν و Q_ν بسط های مجانبی زیر را دارند:

$$\begin{aligned} P_\nu(x) &\sim 1 - \frac{(\mu-1)(\mu-9)}{2!(8x)^2} + \frac{(\mu-1)(\mu-9)(\mu-25)(\mu-49)}{4!(8x)^4} - \cdots \\ Q_\nu(x) &\sim \frac{\mu-1}{1!(8x)^2} - \frac{(\mu-1)(\mu-9)(\mu-25)}{3!(8x)^3} + \cdots \end{aligned} \tag{117}$$

و

$$\mu = 4\nu^2. \tag{118}$$

www.Endbook.net

درس دهم: اندازه حرکت زاویه ای و تقارن دورانی در سه بعد

۱ مقدمه

در درس گذشته تقارن دورانی در دو بعد و رابطه آن با تکانه زاویه‌ای را مطالعه کردیم. دیدیم که بدلیل تقارن دورانی مولد این تقارن یعنی عملگر L_z با هامیلتونی جابجا می شود، یعنی

$$[H, L_z] = 0. \tag{1}$$

این رابطه به ما اجازه داد که ویژه حالت های مشترک هامیلتونی و تکانه‌ی زاویه‌ای را مشخص کنیم. درپایه مختصات این امر به این معنابود که توانستیم جواب های معادله شرودینگر را به صورت $\psi_{E,n}(r,\theta) = \frac{U_{E,n}(r)}{\sqrt{r}} e^{in\theta}$ بنویسیم که درآن تابع $U_{E,n}(r)$ درمعادله شعاعی شرودینگر با یک پتانسیل موثر صدق می کرد. در درس کنونی می خواهیم مطالعات خود را در باره تقارن دورانی و رابطه آن با تکانه زاویه‌ای به سه بعد تعمیم دهیم. تقارن دورانی در سه بعد اهمیت ویژه‌ای دارد هم به این جهت که دنیای واقعی و فیزیکی پیرامون ما سه بعدی است و تقارن دورانی یکی از مهم ترین تقارن های این دنیاست، و هم به این دلیل که تقارن دورانی در سه بعد و مولدهای آن یعنی مولفه‌های سه گانه‌ی تکانه زاویه‌ای بسیارغنی تر از دو بعد هستند. آنچه که در طول این درس خواهیم آموخت برای مطالعه اتم هیدروژن که ساده ترین اتم ها ست اهمیت اساسی دارد. هم چنین در سرتاسر درس های آینده یعنی هنگامی که به مطالعه‌ی اتم های چند الکترونی و جدول تناوبی و هم چنین مولکولهامی پردازیم یا حتی وقتی که پدیده‌های پراکندگی را مطالعه می کنیم اهمیت خواهند داشت.

بهتراست قبل از درگیرشدن با روابط ریاضی نخست به نتیجه‌نهایی تقارن دورانی در سه بعد اشاره کنیم. از درس مربوط به تقارن می دانیم که مولفه‌های تکانه‌ی زاویه‌ای مولدهای تقارن حول محورهای مختصات مختلف هستند. بنابراین وجود تقارن دورانی در سه بعد باعث می شود که این سه مولفه با هامیلتونی جابجا شوند، یعنی اینکه

$$[H, L_x] = [H, L_y] = [H, L_z] = 0. \tag{2}$$

درادامه ثابت می کنیم که اندازه کل تکانه‌ی زاویه‌ای (یابه بیان دقیق تر مربع این اندازه یعنی $L^2 := L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$) با همه مولفه‌های تکانه زاویه ای جابجا می شود، یعنی اینکه

$$[L^2, L_a] = 0, \quad a = x, y, z. \tag{3}$$

www.Endbook.net

بنابراین برای پتانسیلی که داری تقارن دوارنی است می توانیم ویژه حالت های مشترک سه عملگر یعنی H , L^2 و L_z را تعیین کنیم. (انتخاب L_z دراین مجموعه تنها یک قرارداداست می توانستیم هرکدام از مولفه‌های دیگر را نیز انتخاب کنیم بدون این که هیچ تفاوتی در تحلیل ما ایجاد شود. در حقیقت همواره می توانیم دستگاه مختصات را طوری انتخاب کنیم که آن مولفه‌ای که برای گنجاندن در مجموعه‌ی سه تایی بالا انتخاب کرده‌ایم، مولفه‌ی L_z باشد.) ویژه حالت های فوق را می توانیم با $\psi_{E,l,m}(r,\theta,\phi)$ نشان دهیم. درآینده نشان خواهیم داد که عملگرهای L^2 و L_z تنها روی زاویه‌های θ و ϕ اثر می کنند و بنابراین تابع موج بالا را می توان به شکل زیر نوشت :

$$\psi_{E,l,m}(r,\theta,\phi) = f(r)Y_{l,m}(\theta,\phi), \tag{4}$$

که درآن $Y_{l,m}(\theta,\phi)$ ویژه حالت مشترکِ L^2 و L_z هستند:

$$\begin{aligned} L^2 Y_{l,m} &= \lambda_l Y_{l,m}, \\ L_z Y_{l,m} &= \lambda_m Y_{l,m}, \end{aligned} \tag{5}$$

λ_l و λ_m ویژه مقادیر این دو عملگر هستند، و $f(r) := \frac{R(r)}{r}$ دریک معادله شعاعی شرودینگر صدق می کند، یعنی

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + V_{eff}(r)\right] R(r) = ER(r), \tag{6}$$

که درآن

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m} \tag{7}$$

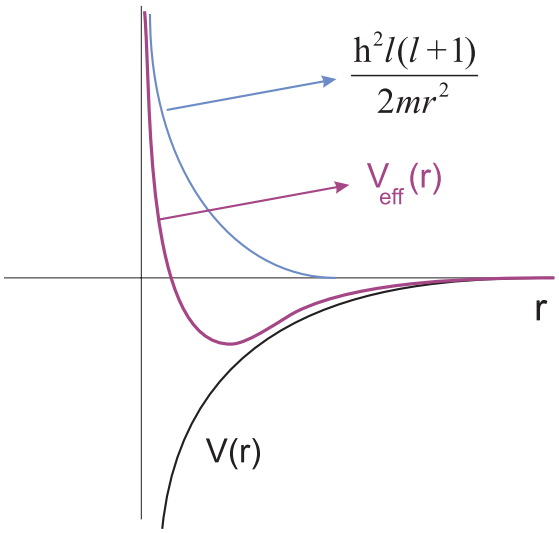
یک پتانسیل موثراست. قسمت اضافه شده به پتانسیل در واقع ناشی از تکانه‌ی زاویه‌ای است که در حالت کلاسیک باعث می شود ذره روی مرکز پتانسیل سقوط نکند. درمکانیک کوانتومی این پتانسیل منجر به این می شود که ذره احتمال کمی برای حضور در نزدیکی های پتانسیل داشته باشد و هر چه که تکانه‌ی زاویه‌ای بیشتر باشد این احتمال حضور کم تر خواهد شد، شکل (??).

دقت کنید که توابع $Y_{l,m}$ توابعی روی کره هستند و مستقل از اینکه نوع پتانسیل $V(r)$ چیست، همواره بخشی از تابع موج هستند و شکل آنها مستقل از نوع پتانسیل مرکزی است که ذره درآن قرار دارد. شکل خاص پتانسیل تنها قسمت شعاعی تابع موج را تعیین می کند و برای هر پتانسیل خاص می بایست معادله شعاعی شرودینگر را مستقلاً حل کرد.

بقیه این درس صرف این می شود که جزئیات روابط بالا را بفهمیم.

نخستین کاری که می کنیم آن است که عملگرهای مربوط به تکانه زاویه ای را به دقت مطالعه می کنیم. سپس ویژه بردارهای L^2 و L_z را تعیین می کنیم و این قسمت به دلیل اهمیت روش های بکار برده شده درآن قسمت زیادی از این درس را به خود اختصاص خواهد داد. بعد از آن خواص کلی معادله شعاعی را بررسی می کنیم.

www.Endbook.net



شکل ۱: پتانسیل موثر در سه بعد وقتی که تقارن دورانی داریم.

۲ تکانه زاویه ای در سه بعد

در سه بعد عملگر تکانه زاویه ای به صورت زیرتعریف می شود:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{P}, \tag{8}$$

که مولفه های سه گانه اش به ترتیب زیرهستند:

$$L_x := YP_z - ZP_y, \qquad L_y := ZP_x - XP_z, \qquad L_z := XP_y - YP_x. \tag{9}$$

براحتی می توان نشان داد که روابط زیربرقرارهستند:

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z \qquad [L_y, L_z] = i\hbar L_x, \qquad [L_z, L_x] = i\hbar L_y, \tag{10}$$

یا بطور فشرده

$$[L_a, L_b] = i\hbar \epsilon_{abc} L_c. \tag{11}$$

دراین رابطه و همه رابطه های آینده روی شاخص های تکراری جمع می زنیم.
باتعریف مربع اندازه کل تکانه زاویه ای به صورت

$$L^2 := L_a L_a = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2, \tag{12}$$

www.Endbook.net

معلوم می شود که

$$[L^2, L_a] = 0, \qquad \forall\ a. \tag{13}$$

بنابراین روابط، هرگز نمی توان هر سه مولفه‌ی تکانه‌ی زاویه‌ای را باهم مشخص کرد و تنها کاری که می توان کرد آن است که اندازه‌ی کل تکانه‌ی زاویه و یکی از مولفه ها را مشخص کرد.

دربعضی از مواقع بجای عملگرهای L_x وL_y ازعملگرهای $L_+ := L_x + iL_y$ و $L_- := L_x - iL_y$ استفاده می کنیم. خواننده براحتی می تواند صحت روابط زیر را تحقیق کند:

$$\begin{aligned} [L_z, L_+] &= L_+, \\ [L_z, L_-] &= -L_-, \\ [L_+, L_-] &= 2L_z, \end{aligned} \tag{14}$$

و

$$L^2 = L_+L_- + L_z^2 - L_z, \qquad L^2 = L_-L_+ + L_z^2 + L_z. \tag{15}$$

هم چنین می توان روابط جابجایی بین مولفه های اندازه حرکت زاویه ای و مولفه های مکان ویاتکانه را پیداکرد:

$$[L_a, X_b] = i\hbar\epsilon_{abc}X_c, \qquad [L_a, P_b] = i\hbar\epsilon_{abc}P_c. \tag{16}$$

هم چنین دیده می شود که

$$[L_a, R^2] \equiv [L_a, X_bX_b] = 0, \qquad [L_a, P^2] = [L_a, P_aP_a] = 0, \qquad \forall\ a. \tag{17}$$

می دانیم که برای کمیت های کلاسیک که عملگرنیستند رابطه

$$L^2 = (\vec{R} \times \vec{P})^2 = R^2P^2 - (\vec{R} \cdot \vec{P})^2. \tag{18}$$

به عنوان آخرین رابطه‌ی جبری بین مولفه‌های تکانه‌ی زاویه‌ای سعی می کنیم که L^2 را برحسب اندازه حرکت خطی بنویسیم. اگر این کمیت ها کلاسیک بودند می دانیم که رابطه‌ی آنها به شکل زیر می‌شد:

$$L^2 = R^2P^2 - (\mathbf{R} \cdot P^2)$$

www.Endbook.net

. بدلیل اینکه درمکانیک کوانتومی بجای کمیت های کلاسیک عملگرهایی داریم که باهم جابجا نمی‌شوند، این رابطه اندکی تغییرمی کند. یادآوری می کنیم که دردوبعد این رابطه به همین شکل برای عملگرتکانه زاویه ای که یک مولفه بیشترنداشت برقرار است. درسه بعد می نویسیم

$$\begin{aligned} L^2 &= L_jL_j = \epsilon_{jkm}X_kP_m\epsilon_{jln}X_lP_n = \epsilon_{jkm}\epsilon_{jln}X_kP_mX_lP_n \\ &= (\delta_{kl}\delta_{mn} - \delta_{kn}\delta_{ml})X_kP_mX_lP_n \\ &= X_kP_mX_kP_m - X_kP_mX_mP_k = X_k(X_kP_m - i\hbar\delta_{k,m})P_m - X_kP_m(P_kX_m + i\hbar\delta_{k,m}) \\ &= R^2P^2 - i\hbar\vec{R}\cdot\vec{P} - (\vec{R}\cdot\vec{P})(\vec{R}\cdot\vec{P}) - i\hbar\vec{R}\cdot\vec{P}. \end{aligned} \tag{19}$$

حال ازاین مطلب استفاده می کنیم که $\vec{P}\cdot\vec{R} = \vec{R}\cdot\vec{P} - 3i\hbar$ و به نتیجه زیرمی رسیم

$$L^2 = R^2P^2 - (\vec{R}\cdot\vec{P})^2 + i\hbar(\vec{R}\cdot\vec{P}). \tag{20}$$

جمله آخر درمکانیک کلاسیک و هم چنین درمکانیک کوانتومی دو بعدی غایب است. در بخش های آینده از این رابطه استفاده خواهیم کرد. در بخش بعدی شکل عملگرهای تکانه‌ی زاویه ای را در پایه مختصات بدست می آوریم. دانستن این شکل‌ها چه در مختصات دکارتی و چه در مختصات کروی اهمیت دارد.

۱.۲ اندازه حرکت زاویه ای درپایه مختصات

درپایه مختصات عملگرهای تکانه زاویه ای به شکل زیردرمی آیند:

$$L_x := \frac{\hbar}{i}(y\partial_z - z\partial_y), \qquad L_y := \frac{\hbar}{i}(z\partial_x - x\partial_z), \qquad L_z := \frac{\hbar}{i}(x\partial_y - y\partial_x). \tag{21}$$

هرگاه بخواهیم این عملگرها را دردستگاه مختصات کروی بنویسیم می توانیم از تغییرمختصات زیراستفاده کنیم

$$\begin{aligned} x &= r\sin\theta\cos\phi \\ y &= r\sin\theta\sin\phi \\ z &= r\cos\theta. \end{aligned} \tag{22}$$

انجام این تغییر مختصات و هم چنین استفاده از مشتق های زنجیره‌ای برای نوشتن مشتق ها در مختصات کروی بعد از محاسباتی نسبتاً طولانی شکل عملگرهای تکانه‌ی زاویه‌ای را در مختصات کروی بدست خواهد داد. اما راه ساده ترآن است که ازهمان ابتدا تکانه زاویه ای را دردستگاه مختصات کروی به شکل زیربنویسیم

$$\vec{L} = \vec{R}\times P = \frac{\hbar}{i}\vec{R}\times\vec{\nabla}$$

www.Endbook.net

$$
\begin{aligned}
&= \frac{\hbar}{i} r\hat{r} \times \left(\hat{r}\frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\phi}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\
&= \frac{\hbar}{i}\left(\hat{\phi}\frac{\partial}{\partial \theta} - \hat{\theta}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi} \right). \qquad (23)
\end{aligned}
$$

بااستفاده ازاین که بردارهای یکه دردستگاه مختصات کروی به شکل زیرهستند

$$
\begin{aligned}
\hat{\theta} &= \cos\theta\cos\phi\hat{x} + \cos\theta\sin\phi\hat{y} - \sin\theta\hat{z} \\
\hat{\phi} &= -\sin\phi\hat{x} + \cos\phi\hat{y}, \qquad (24)
\end{aligned}
$$

بدست می آوریم

$$
\begin{aligned}
L_x &= \frac{\hbar}{i}\left(-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi} \right) \\
L_y &= \frac{\hbar}{i}\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi} \right) \\
L_z &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}. \qquad (25)
\end{aligned}
$$

بااستفاده ازروابط فوق شکل این عملگرها درپایه مختصات عبارت خواهد بوداز:

$$
\begin{aligned}
L_+ &= \hbar e^{i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi} \right) \\
L_- &= \hbar e^{-i\phi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi} \right) \\
L_z &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}. \qquad (26)
\end{aligned}
$$

هم چنین می توان با کمی محاسبه دریافت که:

$$
L^2 = -\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} - \cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \qquad (27)
$$

۳ هارمونیک های کروی : معادله دیفرانسیل لژاندر

دراین بخش می خواهیم ویژه بردارهای عملگرتکانه‌ی زاویه‌ای را پیدا کنیم. برای این کارتوجه می کنیم که عملگرهای $L_y,\ L_x$ و L_z همه با هم جابجا نمی شوند، بنابراین نمی توان ویژه حالت مشترک آنها را پیدا کرد. اما عملگر L^2 با هر سه این عملگرها جابجا می شود، بنابراین می توان ویژه حالت مشترک L^2 و یکی از آنها مثلاً L_z را پیدا کرد. بهترین و آموزنده ترین روش برای

www.Endbook.net

این کار آن است که به روش جبری این طیف را پیدا کنیم. این کاری است که در ادامه‌ی این بخش انجام خواهیم داد. اما بد نیست در همین ابتدا به یک روش دیگر که قدیمی تر است اشاره کنیم. دراین روش مستقیماً معادلات دیفرانسیل ویژه مقداری مربوط به عملگرهای L^2 و L_z را حل می کنیم. با توجه به فرم دیفرانسیلی این عملگرها که در بالا بدست آوردیم این معادلات شکل زیر را پیدا می‌کنند:

$$\begin{aligned} L_z Y_{l,m}(\theta,\phi) &= \lambda_m Y_{l,m}(\theta,\phi), \\ L^2 Y_{l,m}(\theta,\phi) &= \lambda_l Y_{l,m}(\theta,\phi), \end{aligned} \tag{28}$$

ویا

$$\begin{aligned} &-i\frac{\partial}{\partial\phi}Y_{l,m}(\theta,\phi) = \lambda_m Y_{l,m}(\theta,\phi), \\ &\left[-\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} - \cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] Y_{l,m}(\theta,\phi) = \lambda_l Y_{l,m}(\theta,\phi). \end{aligned} \tag{29}$$

که درآن λ_m و λ_l ویژه مقدارهای مربوط به L_z و L^2 و $Y_{l,m}$ ها ویژه توابع مربوطه هستند. واضح است که جواب معادله دیفرانسیل اول به صورت $P_l^m(\theta)e^{im\phi}$ است که در نتیجه‌ی آن ویژه مقدارِ λ_m نیز برابر با m می شود. علاوه برآن به خاطر تک مقداری بودن تابع $Y_{l,m}$ که می بایست روی کره تک مقدار باشد، نتیجه می گیریم که m می بایست یک عدد صحیح باشد. با قرار دادن تابع $P_l^m(\theta)e^{i\ m\phi}$ در معادله دوم به یک معادله دیفرانسیل تنها برحسب θ می رسیم که شکل آن چنین است:

$$\left[-\frac{d^2}{d\theta^2} - \cot\theta\frac{d}{d\theta} + \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right] P_l^m(\theta) = \lambda_l P_l^m(\theta). \tag{30}$$

با تغییر متغیرِ $x = \cos\theta$ این معادله برای تابع $P_l^m(\cos\theta) := P_l^m(x)$ به شکل زیر در می آید:

$$(x^2-1)\frac{d^2P_l^m}{dx^2} + 2x\frac{dP_l^m}{dx} + \frac{m^2}{1-x^2}P_l^m = \lambda_l P_l^m. \tag{31}$$

به روش های مختلفی می توان جواب های این معادله را پیدا کرد. (خواننده می تواند به یک کتاب ریاضی فیزیک و یا به ضمیمه‌ی این فصل رجوع کند). نشان داده می شود که این معادله تنها وقتی جواب های هنجارپذیر دارد که ویژه مقدار λ_l برابر باشد با $l(l+1)$ که درآن l یک عدد صحیح نامنفی باشد و درشرط زیر نیز صدق کند:

$$|m| \le l. \tag{32}$$

جواب های این معادله توابع وابسته لژاندر نامیده می شوند. بنابراین توابع وابسته لژاندر پاسخ های معادله دیفرانسیل زیرهستند:

$$(x^2-1)\frac{d^2P_l^m}{dx^2} + 2x\frac{dP_l^m}{dx} + \frac{m^2}{1-x^2}P_l^m = l(l+1)P_l^m. \tag{33}$$

www.Endbook.net

$P_1^1(x) = (1-x^2)^{1/2} = \sin\theta$
$P_2^1(x) = 3x(1-x^2)^{1/2} = 3\cos\theta\sin\theta$
$P_2^2(x) = 3(1-x^2) = 3\sin^2\theta$
$P_3^1(x) = \frac{3}{2}(5x^2-1)(1-x^2)^{1/2} = \frac{3}{2}(5\cos^2\theta - 1)\sin\theta$
$P_3^2(x) = 15x(1-x^2) = 15\cos\theta\sin^2\theta$
$P_3^3(x) = 15(1-x^2)^{3/2} = 15\sin^3\theta$

چند تابع اول وابسته لژاندر :1

درجدول (۳) چند تا از توابع وابسته لژاندر نوشته شده‌اند.
در ضمیمه این درس با تفصیل بیشتری با توابع لژاندر آشنا خواهیم شد.

با در دست داشتن این توابع فرم کامل توابع $Y_{l,m}(\theta,\phi)$ که به هارمونیک های کروی معروفند، تعیین می شوند. چندتا هارمونیک اول کروی در جدول (۳) نشان داده شده‌اند. این هارمونیک ها توابعی هستند که به عنوان توابع روی کره دوبعدی، اولاً متعامدند، ثانیاً یک پایه کامل تشکیل می دهند. بنابراین داریم

$$\int d\Omega Y^*_{l',m'}(\theta,\phi)Y_{l,m}(\theta,\phi) = \delta_{l,l'}\delta_{m,m'},$$
$$\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} Y^*_{l,m}(\theta,\phi)Y_{l,m}(\theta',\phi') = \delta(\cos\theta - \cos\theta')\delta(\phi-\phi'). \quad (34)$$

۴ هارمونیک های کروی : طیف تکانه ی زاویه ای

در بخش گذشته به روش سنتی یعنی حل معادله دیفرانسیل هارمونیک های کروی را پیدا کردیم. دراین بخش این کار را به روش جبری انجام می دهیم. خواهیم دید که این روش از عمق و غنای بیشتری برخورداراست و از طریق آن مطالب خیلی زیادتری در باره این هارمونیک ها یاد خواهیم گرفت. ازاین به بعد عملگرهای تکانه زاویه ای را به جای L_x ، L_y و L_z با J_x، J_y و J_z نشان می دهیم. حکمت این تغییرنام درانتهای درس معلوم خواهد شد. می دانیم که عملگرهای تکانه زاویه ای درروابط جبری زیرصدق می کنند:

$$[J_x, J_y] = i\ J_z,$$

www.Endbook.net

$Y_{0,0}$	$\sqrt{\frac{1}{4\pi}}$
$Y_{1,0}$	$-\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\theta e^{i\phi}$
$Y_{1,0}$	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\cos\theta$
$Y_{2,2}$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin^2\theta e^{2i\phi}$
$Y_{2,1}$	$-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{i\phi}$
$Y_{2,0}$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}(3\cos^2\theta-1)$
$Y_{3,3}$	$-\frac{1}{8}\sqrt{\frac{35}{\pi}}\sin^3\theta e^{3i\phi}$
$Y_{3,2}$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{105}{2\pi}}\sin^2\theta\cos\theta e^{2i\phi}$
$Y_{3,1}$	$-\frac{1}{8}\sqrt{\frac{21}{\pi}}\sin\theta(5\cos^2\theta-1)e^{i\phi}$
$Y_{3,0}$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{7}{\pi}}(5\cos^3\theta-3\cos\theta)$

2: چند تا ازهماهنگ های کروی

www.Endbook.net

$$[J_y, J_z] = i\ J_x,$$
$$[J_z, J_x] = i\ J_y, \tag{35}$$

ویا

$$[J_z, J_+] = J_+,$$
$$[J_z, J_-] = -J_-,$$
$$[J_+, J_-] = 2J_z. \tag{36}$$

دراین روابط $J_\pm = J_x \pm iJ_y$. دقت کنید که ثابت $\hbar$ را دراین روابط ننوشته ایم . درانتها می توان این ثابت را اضافه کرد. دراین بخش مسئله یافتن ویژه مقدارهای عملگر J_z و J^2 را در یک چارچوب کلی تر انجام می دهیم. این مسئله عبارت است از پیدا کردن تمام ماتریس هایی که در روابط جابجایی 49 صدق می کنند. هرگاه چنین ماتریس هایی پیدا کنیم، در اصطلاح ریاضی گفته می شود که یک نمایش برای این روابط جبری پیدا کرده‌ایم. به بعد ماتریس ها بعد نمایش گفته می شود. درواقع اگر بعد ماتریس ها برابر با n باشد به این معناست که ما یک فضای برداری n بعدی V یافته ایم و توانسته‌ایم J_+, J_- و J_z را به عنوان ماتریس هایی در آن فضا نمایش دهیم. به همین جهت بعد نمایش همان بعد فضای برداری V نیز هست. به یک نکته درباره نماد گذاری نیز باید دقت کنیم. به عنوان مثال یک نمایش یک بعدی برای این جبر می توان یافت و آن این است که قرار دهیم $J_z = J_+ = J_- = 0$. واضح است که این ماتریس های یک بعدی در روابط جابجایی فوق صدق می کنند. یک نمایش دو بعدی به صورت زیراست:

$$J_z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad J_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad J_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{37}$$

به بیان دیگر این نمایش دو بعدی عبارت است از:

$$J_x = \frac{1}{2}\sigma_x, \qquad J_y = \frac{1}{2}\sigma_y, \qquad J_z = \frac{1}{2}\sigma_z. \tag{38}$$

خواننده می تواند تحقیق کند که این ماتریس ها در روابط 49 صدق می کنند. دراین نمایش، ویژه بردارهای J_z عبارتند از

$$|\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad |\frac{-1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{39}$$

اثر عملگرهای دیگر روی این حالت ها عبارتند از:

$$J_+|\frac{1}{2}\rangle = 0, \qquad J_+|\frac{-1}{2}\rangle = |\frac{1}{2}\rangle,$$
$$J_-|\frac{1}{2}\rangle = |-\frac{1}{2}\rangle, \qquad J_-|\frac{-1}{2}\rangle = 0. \tag{40}$$

www.Endbook.net

هم چنین می توان تحقیق کرد که حالت های $|\frac{1}{2}\rangle$ و $|-\frac{1}{2}\rangle$ ویژه حالتِ عملگر $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ نیز هستند یعنی

$$J^2|\frac{1}{2}\rangle = \frac{3}{4}|\frac{1}{2}\rangle, \qquad J^2|\frac{-1}{2}\rangle = \frac{3}{4}|\frac{-1}{2}\rangle. \tag{41}$$

به عبارت دیگر حالت های $|\frac{1}{2}\rangle$ و $|-\frac{1}{2}\rangle$ ویژه حالت های مشترک J_z و J^2 دراین فضای دو بعدی هستند.

به یک مثال دیگر توجه می کنیم. یک نمایش سه بعدی نیز به صورت زیراست:

$$J_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad J_+ = \sqrt{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad J_- = \sqrt{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{42}$$

خواننده می تواند براحتی تحقیق کند که دراین نمایش:

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad |0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad |-1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{43}$$

به این معنا که

$$J_z|m\rangle = m|m\rangle, \qquad m = 1,\ 0,\ -1. \tag{44}$$

هم چنین خواننده می تواند تحقیق کند که

$$J^2|1\rangle = 2|1\rangle, \qquad J^2|0\rangle = 2|0\rangle, \qquad J^2|-1\rangle = 2|-1\rangle. \tag{45}$$

بنابراین حالت های فوق ویژه حالت های مشترک J_z و J^2 هستند.

آیا نمایش های دیگری نیز از روابط جبری تکانه‌ی زاویه‌ای وجود دارند؟ آیا می توان در هر بعد دلخواه نمایشی از روابط جبری 49 بدست آورد؟ درنگاه اول به نظر می رسد که براحتی می توانیم نمایش های با بعد بالاتر بسازیم مثل نمایش چهاربعدی زیر:

$$J_x = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\sigma_x & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}\sigma_x \end{pmatrix}, \qquad J_y = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\sigma_y & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}\sigma_y \end{pmatrix}, \qquad J_z = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\sigma_z & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}\sigma_z \end{pmatrix}. \tag{46}$$

اما واضح است که این نمایش واقعاً یک نمایش جدید نیست و بدلیل ساختار بلوکه قطری ماتریس های آن چیزی جز برهم نهادن دو نمایش دوبعدی نیست. چنین نمایشی را یک نمایش کاهش پذیر می گوییم. هم چنین باید دقت کنیم که اگر J_a ها

www.Endbook.net

یک نمایش از روابط (49) باشند، و S یک ماتریس دلخواه وارون پذیر باشد، آنگاه $J'_a = SJ_aS^{-1}$ ها نیز یک نمایش از همان روابط جبری هستند که اساساً فرقی با همان نمایش اولیه ندارند. در حقیقت مثل این است در فضای برداری یک تغییر پایه داده ایم و درنتیجه ماتریس های نمایش با یک تبدیل تشابهی عوض شده‌اند. به همین جهت این دو نمایش را دو نمایش معادل می گوییم. هم چنین برای کاربرد در مکانیک کوانتومی مهم است که ماتریس هایی که پیدا می کنیم هرمیتی باشند. به چنین نمایش هایی نمایش های یکانی می گوییم. دلیل این نامگذاری آن است که هرگاه ماتریس هایی که پیدا می کنیم هرمیتی باشند، آنگاه ماتریس های $U_{\hat{n}}(\theta) = e^{i\theta \mathbf{n}.\mathbf{J}}$ که نمایش دهنده دوران هستند یکانی خواهند بود. باتوجه به این ملاحظات، آنچه که اهمیت دارد آن است که نمایش های، یکانی، کاهش ناپذیر و غیر معادل را پیدا کنیم.

نخستین کاری که می کنیم آن است که عملگرهرمیتی J_z راقطری می کنیم. ویژه مقادیر این عملگررا با m وویژه بردارهای آن را با $|m\rangle$ نمایش می دهیم:

$$J_z|m\rangle = m|m\rangle. \tag{47}$$

هنوزراجع به مقادیرممکن m وهم چنین بعد فضای V_j چیزی نمی دانیم. تنهاچیزی که می دانیم آن است که این ویژه مقدارهاحقیقی هستند و ویژه بردارهای $\{|m\rangle\}$ یک پایه‌بهنجارویکه برای فضای V_j تشکیل می دهند. حال ازروابط جبرمی توانیم نتیجه بگیریم که

$$\begin{aligned} J_+|m\rangle &= C_+(m)|m+1\rangle \\ J_-|m\rangle &= C_-(m)|m-1\rangle. \end{aligned} \tag{48}$$

که درآن $C_\pm(m)$ ضرایبی هستند که می بایست تعیین شوند. برای آنکه خود رابرای نامگذاری آینده آماده کنیم به هر ویژه مقدار m یک وزنه می گوییم و به رشته $\cdots m-2,\ m-1,\ m,\ m+1,\ m+2, \cdots$ یک نردبان از وزنه ها می گوییم. ازآنجا که نمایش محدود بعد است این نردبان می بایست حتماً یک بالاترین پله مثل j و یک پایین ترین پله مثل $j-g$ داشته باشد که درآن تعداد پله هایعنی $g+1$ می بایست یک عدد صحیح باشد.

حال دقت می کنیم که ضرایب $C_-(m)$ را می توان حقیقی گرفت زیراهرفازی را که چنین ضریبی داشته باشند می توان بابازتعریف حالت $|m-1\rangle$ ازبین برد.

قدم بعدی آن است که ازرابطه (49) روابط زیر را نتیجه بگیریم :

$$\begin{aligned} \langle m|J_- &= C_+^*(m)\langle m+1| \\ \langle m|J_+ &= C_-(m)|m-1\rangle. \end{aligned} \tag{49}$$

حال عنصر ماتریسی $\langle m+1|J_+|m\rangle$ را ازدوطریق حساب می کنیم و به رابطه می رسیم:

$$C_+(m) = C_-(m+1), \tag{50}$$

www.Endbook.net

که درضمن نشان می دهد ضرایب $C_+(m)$ نیز حقیقی هستند.
حال به عنصرماتریسی زیرتوجه می کنیم

$$\langle m|J_+J_-|m\rangle = \langle m|J_-J_+ + 2J_z|m\rangle, \tag{51}$$

که ازآن نتیجه می گیریم

$$(C_-(m))^2 = (C_+(m))^2 + 2m, \tag{52}$$

ویا

$$(C_+(m-1))^2 = (C_+(m))^2 + 2m, \tag{53}$$

باتوجه به اینکه بالاترین پله نردبان j وپایین ترین پله آن $j-g$ است می دانیم که

$$C_+(j) = 0, \qquad C_-(j-g) = 0, \tag{54}$$

ویاباتوجه به رابطه (50)،

$$C_+(j) = 0, \qquad C_+(j-g-1) = 0. \tag{55}$$

اگر برای سادگی $(C_+(m))^2$ را با λ_m نشان دهیم روابط تکرارفوق به شکل زیرهستند:

$$\begin{aligned}
&\lambda_{j-1} = 2j,\\
&\lambda_{j-2} = \lambda_{j-1} + 2(j-1),\\
&\cdots,\\
&\lambda_{m-1} = \lambda_m + 2m\\
&\cdots
\end{aligned} \tag{56}$$

حال می توان طرفین رابطه تکرار (53) را برای تمام پله ها جمع زد و به رابطه زیررسید

$$\sum_{m=j-g}^{j} \lambda_{m-1} = \sum_{m=j-g}^{j} \lambda_m + 2\sum_{m=j-g}^{j} m, \tag{57}$$

www.Endbook.net

ویا باتوجه به شرط مرزی (55)،

$$0 = 2\sum_{m=j-g}^{j} m \longrightarrow (2j-g)(g+1) = 0. \tag{58}$$

ازآنجا که g نمی تواند برابربا -1 باشد این رابطه به این معناست که

$$2j = g. \tag{59}$$

این رابطه به این معناست که برچسب نمایش یعنی j که تاکنون نامعلوم بود یک عدد نیمه صحیح است. بنابراین بالاترین پله نردبان j و پایین ترین پله آن $-j$ است.
هم چنین از روابط (56) نشان می توان مقدار λ_m ها ونتیجتاً ضرایب $C_{\pm}(m)$ را بدست آورد. یک محاسبه ساده نشان می دهد که

$$C_+(m) = \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \qquad C_-(m) = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}. \tag{60}$$

به این ترتیب نمایش های یکانی جبر $su(2)$ ساخته می شوند. هرنمایش با یک عدد نیمه صحیح j مشخص می شود وبعد آن برابراست با $2j+1$. بردارهای پایه نمایش عبارتند از $\{|-j\rangle,\ |-j+1\rangle, \cdots |j-1\rangle, |j\rangle\}$.
ماتریس های نمایش نیز توسط روابط زیرتعیین می شوند:

$$\begin{aligned} J_z|m\rangle &= m|m\rangle \\ J_+|m\rangle &= \sqrt{(j-m)(j+m+1)}|m+1\rangle \\ J_-|m\rangle &= \sqrt{(j+m)(j-m+1)}|m-1\rangle. \end{aligned} \tag{61}$$

اگر در این نمایش اثر عملگر $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = J_+J_- + J_z^2 - J_z$ را روی بردارها حساب کنیم نتیجه خیلی ساده ای بدست می آید. خواننده می تواند تحقیق کند که

$$J^2|m\rangle = j)j+1)|m\rangle. \tag{62}$$

بنابراین اثر این عملگر روی تمام بردار یکسان و برابر با $2j+1$ است. این امر به این معناست که اثر این عملگر تنها به عدد j یعنی نوع نمایش بستگی دارد. برای تاکید براین امر و هم چنین برای آنکه بین حالت های نمایش های گوناگون تمایز قائل شویم از این به بعد بجای $|m\rangle$ از نماد گویاترِ $|j,m\rangle$ استفاده می کنیم. این نماد درعین حال نشان می دهد که این حالت ویژه بردار همزمان عملگر J^2 و J_z است.

www.Endbook.net

درنتیجه ماتریس های نمایش j برابرندبا:

$$\begin{aligned}\langle j,m'|J_z|j,m\rangle &= m\delta_{m,m'}\\ \langle j,m'|J_+|j,m\rangle &= \sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\delta_{m',m+1}\\ \langle j,m'|J_-|j,m\rangle &= \sqrt{j(j+1)-m(m-1)}\delta_{m',m-1}.\end{aligned} \tag{63}$$

مثال ۱: نمایش اسپین $\frac{1}{2}$

این نمایش دوبعدی است و بردارهای پایه آن عبارتنداز $\{|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle,|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle\}$. دراین نمایش داریم

$$J_z=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\qquad J_x=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\qquad J_y=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}. \tag{64}$$

مثال ۲: نمایش اسپین 1

این نمایش سه بعدی است و بردارهای پایه آن عبارتنداز $\{|1,1\rangle,|1,0\rangle,|1,-1\rangle\}$. دراین نمایش داریم

$$J_z=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}\qquad J_x=\sqrt{2}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}\qquad J_y=i\sqrt{2}\begin{pmatrix}0&-1&0\\1&0&-1\\0&1&0\end{pmatrix}. \tag{65}$$

۵ شکل فضایی ویژه حالت های تکانه زاویه ای : توابع هماهنگ کروی

دراین بخش می خواهیم شکل ویژه توابع تکانه زاویه ای را درفضای مختصات پیداکنیم. می دانیم که

$$\begin{aligned}J^2|j,m\rangle &= j(j+1)|j,m\rangle\\ J_z|j,m\rangle &= m|j,m\rangle.\end{aligned} \tag{66}$$

درپایه مختصات قرارمی دهیم

$$f_{j,m}(r,\theta,\phi):=\langle\vec{r}|j,m\rangle. \tag{67}$$

دراین پایه عملگرهای J_z و J^2 به صورت دوعملگر دیفرانسیل و روابط بالا به صورت دو معادله دیفرانسیل درمی آیند. نگاهی به روابط شکل این عملگرها نشان می دهد که تنها به θ و ϕ بستگی دارند. بنابراین نتیجه می گیریم که

$$f_{j,m}(r,\theta,\phi)=f(r)\langle\theta,\phi|j,m\rangle, \tag{68}$$

www.Endbook.net

که درآن $f(r)$ هرتابع دلخواهی از r و تابع

$$Q_{j,m}(\theta,\phi) := \langle \theta,\phi|j,m\rangle \tag{69}$$

تابعی روی کره است که د معادلات دیفرانسیل بالا صدق می کند. حال دقت می کنیم که بجای حل معادلات دیفرانسیل فوق می توانیم ازنمایش هایی که بدست آورده ایم استفاده کنیم. اولاً هرگاه $Q_{j,j}(\theta,\phi) := \langle \theta,\phi|j,j\rangle$ را پیداکنیم بقیه توابع به ترتیب زیر بدست می آیند:

$$Q_{j,m}(\theta,\phi) = AJ_-^{j-m}Q_{j,j}(\theta,\phi), \tag{70}$$

که درآن A یک ثابت بهنجارش و J_- عملگردیفرانسیل زیراست:

$$J_- := e^{-i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right). \tag{71}$$

ثانیاً $Q_{j,j}(\theta,\phi)$ تابعی است که دردورابطه زیرصدق می کند:

$$\begin{aligned} J_zQ_{j,j}(\theta,\phi) &= jQ_{j,j}(\theta,\phi), \\ J_+Q_{j,j}(\theta,\phi) &= 0, \end{aligned} \tag{72}$$

که درآن J_z و J_+ عملگرهای دیفرانسیل زیرهستند:

$$\begin{aligned} J_z &= -i\frac{\partial}{\partial\phi} \\ J_+ &= e^{i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right). \end{aligned} \tag{73}$$

بنابراین برای یافتن $Q_{j,j}(\theta,\phi)$ می بایست دو معادله دیفرانسیل زیر را حل کنیم:

$$\begin{aligned} -i\frac{\partial}{\partial\phi}Q_{j,j} &= 0, \\ \left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)Q_{j,j} &= 0. \end{aligned} \tag{74}$$

این معادلات یک جواب یکتا دارند که منهای یک ضریب بهنجارش عبارت است از:

$$Q_{j,j}(\theta,\phi) = (\sin\theta)^j e^{ij\phi}. \tag{75}$$

اما برای j های نیمه صحیح این توابع پیوسته نیستند زیرا به ازای ϕ و $\phi+2\pi$ دو مقدارمتفاوت می گیرند. پیوسته نبودن تابع به این معناست که مشتق $\frac{\partial}{\partial\phi}$ روی این توابع تولید بی نهایت می کند که مانع صدق کردن این توابع درمعادلات بالا می شود.

www.Endbook.net

بنابراین حالت های $|j,j\rangle$ و درنتیجه $|j,m\rangle$ برای j های نیمه صحیح توصیفی درفضای مختصات ندارند. تنهاحالت های با j ی صحیح چنین توصیفی دارند. برای تمیزاین حالت ها ازاین به بعد آن هارا با $|l,m\rangle$ نشان می دهیم و شکل تابع موج آنها را روی کره نیز با $Y_{l,m}(\theta,\phi)$ نشان می دهیم، یعنی قرارمی دهیم

$$Y_{l,m}(\theta,\phi) := \langle\theta,\phi|l,m\rangle. \tag{76}$$

توابع $Y_{l,m}(\theta,\phi)$ هارمونیک های کروی خوانده می شوند. l عدد کوانتومی مربوط به اندازه تکانه زاویه ای و m عدد کوانتومی مربوط به مولفه سوم تکانه زاویه ای است. اندازه تکانه زاویه ای حالت $|l,m\rangle$ با تابع موج $Y_{l,m}(\theta,\phi)$ برابراست با $\hbar^2 l(l+1)$ ومولفه سوم تکانه زاویه ای برابراست با $\hbar m$. بحث فوق به مانشان می دهد که

$$Y_{l,l}(\theta,\phi) = A_l \sin^l\theta e^{il\phi}, \tag{77}$$

که درآن A_l یک ضریب بهنجارش است. این ضریب بهنجارش را می توان به ترتیب زیربدست آورد. باید داشته باشیم

$$\int_0^\pi \sin\theta \int_0^{2\pi} d\phi |Y_{l,l}|^2 = A_l^2 2\pi \int_0^\pi \sin^{2l+1}\theta = 1. \tag{78}$$

اما می دانیم که

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \cos^{2m+1}\theta \sin^{2n+1}\theta = \frac{m!n!}{2(m+n+1)!}, \tag{79}$$

و $n! = n(n-1)!$ و $\frac{1}{2}! = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$. بنابراین بعدازکمی محاسبه بدست می آوریم

$$A_l = \sqrt{\frac{(2l+1)!!}{2\pi 2^{l+1}} l!} \tag{80}$$

و درنتیجه

$$Y_{l,l}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{(2l+1)!!}{2\pi 2^{l+1}} l!}\sin^l\theta e^{il\phi}. \tag{81}$$

بقیه هارمونیک های کروی را بااثر عملگرهای پایین آورنده یعنی عملگر $L_- = e^{-i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$ روی $Y_{l.l}$ بدست می آوریم. درزیرهارمونیک های کروی را برای $l=0$ و $l=1$ بدست می آوریم.

الف: هارمونیک های کروی با $l=0$

دراین حالت فقط یک هارمونیک کروی داریم که عبارت است از

$$Y_{0,0}(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}. \tag{82}$$

www.Endbook.net

الف: هارمونیک های کروی با $l = 1$

دراین حالت سه هارمونیک کروی داریم که عبارت اند از $Y_{1,-1}$ $Y_{1,0}$, $Y_{1,1}$,. باتوجه به رابطه 81 داریم

$$Y_{1,1}(\theta,\phi) = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\theta e^{i\phi}. \tag{83}$$

دقت کنید که علامت – ناشی از قراردادهای رایج است. ازنمایش اسپین یک داریم

$$\begin{aligned} |1,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}L_-|1,1\rangle, \\ |1,-1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}L_-|1,0\rangle. \end{aligned} \tag{84}$$

بنابراین بدست می آوریم

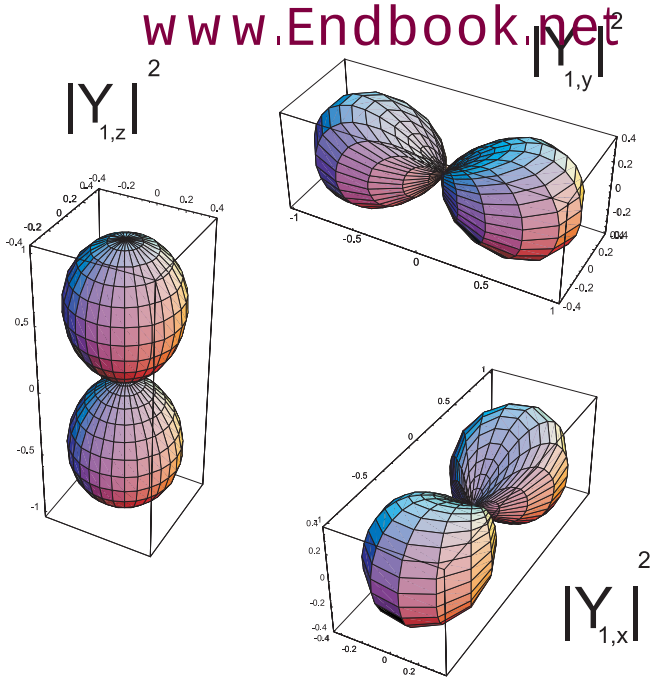
$$\begin{aligned} Y_{1,0}(\theta,\phi) &= \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)Y_{1,1}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{2\pi}}\cos\theta, \\ Y_{1,-1}(\theta,\phi) &= \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)Y_{1,0}(\theta,\phi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\theta e^{-i\phi}. \end{aligned} \tag{85}$$

برای آنکه با شکل فضایی این هارمونیک ها و ارتباط آنها با مفهوم اوربیتال ها بیشترآشنا شویم هارمونیک های مربوط به $l = 1$ را رسم می کنیم. دقت کنید که شکل کامل تابع موج عبارت است از

$$\psi_{E,l,m}(r,\theta,\phi) = f(r)Y_{l,m}(\theta,\phi) \tag{86}$$

این تابع موج نشان دهنده حالتی است که انرژی ذره برابر با E ، تکانه‌ی زاویه‌ای کل آن برابر با $\hbar^2 l(l+1)$ و مولفه سوم تکانه‌ی زاویه‌ای آن برابر با $\hbar m$ است. چگالی احتمال ذره به صورت $|f_E(r)|^2|Y_{l,m}|^2$ نوشته می شود که به صورت حاصل ضرب یک تابع از شعاع دریک تابع از زاویه‌های روی کره است. هرگاه دریک شعاع ثابت به چگالی ابرالکترونی نگاه کنیم یعنی روی یک کره حرکت کرده و به چگالی این ابر نگاه کنیم، تغییرات غلظت آن مطابق با تابع $|Y_{l,m}(\theta,\phi)|^2$ داده می شود. برای تجسم بهتر می توانیم این تابع را روی کره رسم کنیم به این معنا که به ازای هر نقطه با مختصات (θ,ϕ) روی کره شعاعی به اندازه‌ی $r := |Y_{l,m}(\theta,\phi)|^2$ روی همان نقطه رسم می کنیم. به این ترتیب شکل هارمونیک $|Y_{0,0}|^2$ یک کره خواهد شد و شکل هارمونیک $|Y_{1,0}|^2$ به صورت تابع $r = \frac{3}{2\pi}\cos^2\theta$ داده خواهد شد، شکل (). این همان اوربیتال دامبل شکلی است که در راستای محور z قرار گرفته است، به همین دلیل یک اسم مناسب برای هارمونیک کروی $Y_{1,0}$، $Y_{1,z}$ است، شکل (۲). توجه کنید که معنای این شکل این نیست که غلظت ابرالکترونی منحصر به درون این اوربیتال است بلکه فقط و فقط نشان می دهد که غلظت این ابر نسبت به زوایای مختلف چگونه است. چگالی احتمال کل به عنوان تابعی از نقاط فضا فقط وقتی بدست می آید

www.Endbook.net



شکل ۲: اوربیتال های $Y_{1,z}, Y_{1,x}, Y_{1,y}$

که تابع شعاعی را نیز معین کرده باشیم.

ممکن است از خود بپرسیم که اوربیتال های دامبل شکلی که محورِ آنها در راستای محورهای x یا y هستند، کدام ها هستند؟ این سوال از آن جهت جالب است که اگر شکل فضایی هارمونیک های $|Y_{1,1}|^2$ و $|Y_{1,-1}|^2$ را تصور کنیم به وضوح با آن اوربیتال ها متفاوتند. برای بدست آوردن شکل چنین اوربیتالهایی کافی است که بجای $Y1,1$ و $Y_{1,-1}$ اوربیتال های زیر را تعریف کنیم:

$$Y_{1,x} := Y_{1,1} - Y_{1,-1} = -\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\theta\cos\phi,$$
$$Y_{1,y} := Y_{1,1} + Y_{1,-1} = i\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\theta\sin\phi. \qquad (87)$$

شکل فضایی این اوربیتال ها همان هایی است که در درس های شیمی باآن آشنا شده ایم یعنی دامبل هایی که محورهای آنها در راستای x یا y قرار گرفته‌اند، شکل (۲)

۱.۵ پاریته هماهنگ های کروی

عملگرپاریته درسه بعد به صورت زیر تعریف می شود:

$$\Pi|\vec{r}\rangle = |-\vec{r}\rangle. \qquad (88)$$

به همان ترتیبی که دردرس های پیشین نشان دادیم می توان روابط زیر را ازتعریف فوق نتیجه گرفت:

$$\Pi|\vec{p}\rangle = |-\vec{p}\rangle,$$

www.Endbook.net

$$\{\Pi, X\} = \{\Pi, Y\} = \{\Pi, Z\} = 0,$$
$$\{\Pi, P_x\} = \{\Pi, P_y\} = \{\Pi, P_z\} = 0. \tag{89}$$

ازدو رابطه اخیربدست می آید که

$$[\Pi, L_x] = [\Pi, L_y] = [\Pi, L_z] = 0, \quad \longrightarrow \quad [\Pi, L^2] = 0. \tag{90}$$

بنابراین ویژه حالت های مشترک L^2 و L_z ویژه حالت پاریته هم هستند. برای آنکه پاریته حالت های $|l, m\rangle$ راپیداکنیم آنها را درپایه مختصات مطالعه می کنیم. می دانیم که اثر پاریته درمختصات کروی به شکل زیراست:

$$\Pi|r, \theta, \phi\rangle = |r, \pi - \theta, \phi + \pi\rangle. \tag{91}$$

فرض کنید که پاریته حالت $|l, l\rangle$ برابر با α باشد. دراین صورت بادرنظرنگرفتن مختصه شعاعی خواهیم داشت

$$\langle\theta, \phi|\Pi|l, l\rangle = \langle\pi - \theta, \phi + \pi|l, l\rangle, \tag{92}$$

ویا

$$\alpha Y_{l,l}(\theta, \phi) = Y_{l,l}(\pi - \theta, \phi + \pi). \tag{93}$$

نگاهی به شکل تابع $Y_{l,l}(\theta, \phi)$ نشان می دهد که $\alpha = (-1)^l$. ازآنجا که عملگر L_- با پاریته جابجامی شود نتیجه می گیریم که دیگرحالت های یک چند تایی با l ثابت همگی یک پاریته دارند. بنابراین

$$\Pi|l, m\rangle = (-1)^l|\lambda, m\rangle. \tag{94}$$

درپایان بهتراست فرم کلی هماهنگ های کروی را برای استفاده درآینده بنویسیم. صحت روابط زیر را خواننده می تواند یا با محاسبه به روشی که گفته شد تحقیق کند. روابط بیشتر را خواننده می تواند با مراجعه به کتاب های ریاضی فیزیک پیداکند.

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = (-1)^m \left[\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right]^{1/2} P_l^m(\cos\theta)e^{im\phi} \qquad m \geq 0. \tag{95}$$

$$Y_{l\ -m} = (-1)^m Y_{lm}^*. \tag{96}$$

www.Endbook.net

دراین روابط $P_l^m(x)$ چند جمله ای های وابسته لژاندر هستند که یک پایه متعامد برای فضای چند جمله ای ها تشکیل داده‌وبرای $m \geq 0$ به طریق زیر تعریف می شوند:

$$P_l^m(x) = (-1)^{l+m} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \frac{1}{2^l l!} (1-x^2)^{-m/2} \frac{d}{dx}^{l-m} (1-x^2)^l, \tag{97}$$

و برای $m < 0$ به طریق زیر:

$$P_l^{-m}(x) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(x). \tag{98}$$

٦ معادله شعاعی

برای ذره ای که دریک پتانسیل مرکزی حرکت می کند هامیلتونی به شکل زیراست

$$H = \frac{1}{2\mu} \vec{P} \cdot \vec{P} + V(r), \tag{99}$$

که درآن $r = (\vec{R} \cdot \vec{R})^{\frac{1}{2}}$ و جرم ذره را با μ نشان داده ایم. این پتانسیل بوضوح تقارن دورانی دارد و بامولفه های تکانه زاویه ای جابجامی شود. بنابراین می توانیم طیف مشترک H, L_z و L^2 را پیداکنیم. برای این کار ازرابطه $L^2 = R^2 P^2 - (\vec{R} \cdot \vec{P}^2 + i\hbar(\vec{R} \cdot \vec{P}))$ استفاده می کنیم ومعادله شرودینگر را به شکل زیربازنویسی می کنیم

$$\left[\frac{L^2 + (\vec{r} \cdot \vec{P})^2 - i\vec{r} \cdot \vec{P}}{2\mu r^2} + V(r) \right] \psi(r, \theta, \phi) = E\psi(r, \theta, \phi), \tag{100}$$

که درآن $\vec{P} = -i\vec{\nabla}$ عملگرتکانه درپایه مختصات است. حال ویژه تابع را به شکل زیردرنظرمی گیریم

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) Y_{l,m}(\theta, \phi), \tag{101}$$

و پس ازجایگذاری درمعادله فوق به رابطه زیرمی رسیم

$$\left[-\frac{1}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{\mu r} \frac{d}{dr} + V_{eff}(r) \right] f(r) = Ef(r), \tag{102}$$

که درآن V_{eff} پتانسیل موثراست و شکل آن برابراست با

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{l(l+1)}{2\mu r^2}. \tag{103}$$

www.Endbook.net

به معادله فوق معادله شعاعی شرودینگر گفته می شود. دقت کنید که دراین معادله ثابت پلانک را برابربا ۱ گرفته ایم. هرجا که لازم باشد می توانیم مقدارواقعی این ثابت را درروابط قراردهیم. هرگاه قراردهیم

$$f(r) = \frac{R(r)}{r}$$

آنگاه معادله حاکم بر R به شکل ساده تر زیردرمی آید که کاملا با معادله یک بعدی شرودینگر برای یک پتانسیل موثریکسان است:

$$\left[-\frac{1}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \frac{l(l+1)}{2\mu r^2}\right] R(r) = E\ R(r), \tag{104}$$

۱.۶ ملاحظاتی کلی درباره معادله شعاعی

نخست بهتراست به چندنکته مهم دقت کنیم.

۱ – می دانیم که حالت های مقید یعنی حالت هایی که در بی نهایت به سمت صفر میل می کنند وانرژی آنها منفی است انرژی های گسسته‌ای دارند. گسسته‌بودن این انرژی را باید با یک عدد گسسته مثل n نشان دهیم. به‌ازای هر عدد l که در معادله بالا قرار می دهیم مجموعه‌ای از انرژی های گسسته وجود خواهد داشت. بنابراین این انرژی ها را با $E_{n,l}$ نشان می دهیم. درنتیجه تابع شعاعی $R(r)$ را نیز با $R_{n,l}$ نشان می دهیم.
حل معادله کامل شرودینگر عبارت است از

$$\psi_{n,l,m}(r,\theta,\phi) = \frac{R_{n,l}(r)}{r} Y_{l,m}(\theta,\phi), \qquad H\psi_{n,l,m} = E_{n,l}\psi_{n,l,m}. \tag{105}$$

بنابراین هر تابع موج با سه عدد کوانتومی n,l,m مشخص می شود ولی هر انرژی تنها با دوعدد کوانتومی n,l مشخص می شود و به عدد کوانتومی سوم یعنی m بستگی ندارد. این امر نتیجه تقارن دورانی است. برای فهمیدن بهتر این خاصیت به این به این نکته توجه می کنیم که $[H, L+] = 0$ و اینکه

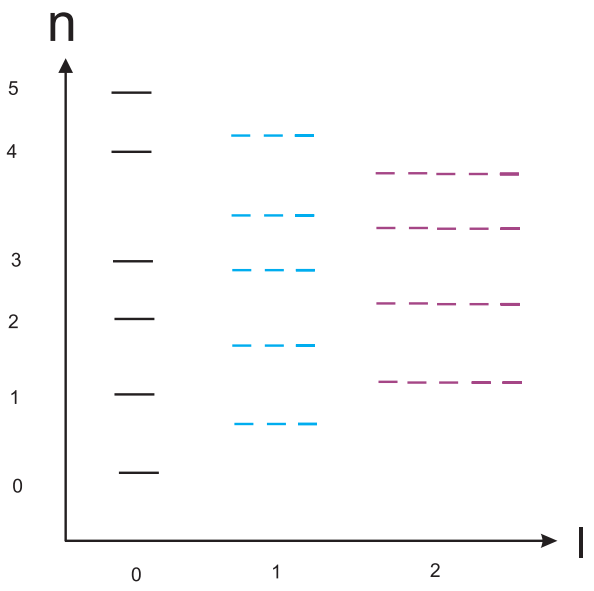
$$L_+\psi_{n,l,m} = \sqrt{l(l+1) - m(m+1)}\psi_{n,l,m+1}. \tag{106}$$

درنتیجه اگر $H\psi_{n,l,m} = E\psi_{n,l,m}$ آنگاه

$$H\psi_{n,l,m+1} \propto HL_+\psi_{n,l,m} = L_+H\psi_{n,l,m} = L_+E\psi_{n,l,m} = E\psi_{n,l,m+1}. \tag{107}$$

یعنی اینکه هردو تابع موج $\psi_{n,l,m+1}$ و $\psi_{n,l,m}$ یک انرژی دارند.

www.Endbook.net



شکل ۳: نمونه طیف انرژی برای پتانسیلی که دارای تقارن کروی است.

بنابراین برای هر پتانسیلی که دارای تقارن دورانی است می توانیم سطوح انرژی را در یک شبکه دو بعدی مطابق با شکل شکلِ ۳ رسم کنیم. اما برای دو پتانسیل خاص یعنی برای پتانسیل کپلری $V(r) = \frac{K}{r}$ و پتانسیل نوسانگریعنی $V(r) = Kr^2$ مقایر انرژی E به مقدار l نیز بستگی نخواهند داشت و تنها به یک عدد کوانتومی یعنی عدد n بستگی خواهند داشت. طیف این پتانسیل ها شبیه به شکل نشان داده شده درشکلِ ۴ خواهد شد. این عدم وابستگی ناشی ازیک تقارن اضافی علاوه برتقارن دورانی است که درمورد این دو پتانسیل وجود دارد و درآینده به آن خواهیم پرداخت.

۴ – برای r های کوچک وبه شرط آنکه پتانسیل سریعتراز $\frac{1}{r^2}$ به سمت بی نهایت میل نکند، که برای تمام پتانسیل های متعارف چنین است، معادله شعاعی به شکل زیردرمی آید:

$$\left[-\frac{1}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2\mu r^2}\right]\tilde{R}(r) \approx 0, \tag{108}$$

حل این معادله به شکل $\tilde{R}(r) = r^s$ است به شرط آنکه s درمعادله زیرصدق کند:

$$s(s-1) = l(l+1) \tag{109}$$

که نشان می دهد $s = l+1$ ویا$s = -l$. بنابراین تابع موج شعاعی برای r های کوچک به یکی ازدو صورت زیررفتارمی کند:

$$\tilde{R}(r) \longrightarrow r^l \tag{110}$$

www.Endbook.net

ویا

$$\tilde{R}(r) \longrightarrow r^{-l-1} \tag{111}$$

جوابی که برای r های کوچک به صورت 110 رفتارمی کند جواب منظم یا $regular$ و جوابی که به صورت 111 رفتارمی کند جواب نامنظم یا $irregular$ نامیده می شود.

۵ – برای r های بزرگ، و به شرط آنکه پتانسیل در ناحیه محدودی ازفضا حضورداشته باشد که همواره چنین است، معادله شعاعی شرودینگر به صورت زیردرمی آید

$$\frac{d^2}{dr^2}\tilde{R} + 2\mu E\tilde{R} \approx 0. \tag{112}$$

اگربه دنبال جواب های بهنجارهستیم می بایست شرط زیربرقارباشد

$$\int r^2 dr \int d\Omega |R(r)|^2 |Y_{l,m}(\theta,\phi)|^2 = \int dr |\tilde{R}(r)|^2 = 1. \tag{113}$$

درنتیجه جواب های شعاعی بهنجارپذیرآنهایی هستند که دربی نهایت به سمت صفرمیل می کنند. برای وقتی که r خیلی بزرگ باشد، جواب این معادله برابر است با

$$\tilde{R}(r) \approx e^{-\kappa\, r} \tag{114}$$

ویا

$$R(r) \approx \frac{e^{-\kappa\, r}}{r} \tag{115}$$

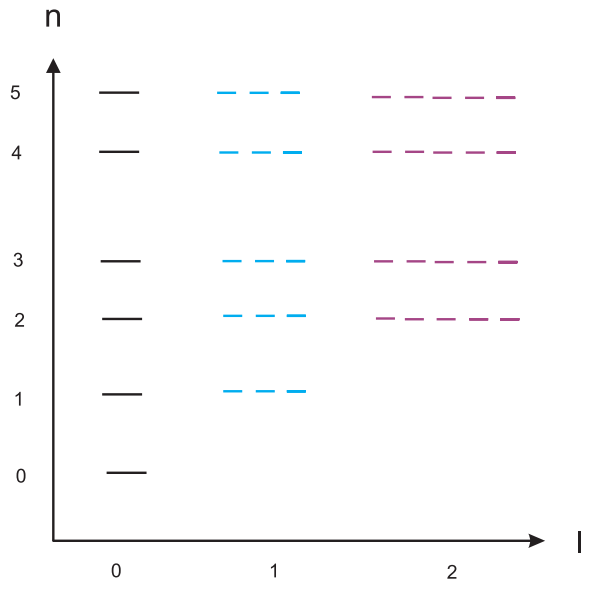
که درآن $\kappa = \sqrt{2\mu|E|}$. برای انرژی های مثبت $E > 0$ که حالت ها مقید نیستند بدنبال جواب های بهنجارنیستیم. دراین صورت تابع موج درr های بزرگ به صورت زیررفتارمی کند

$$\tilde{R}(r) \approx e^{ikr} + Ae^{-ikr}, \tag{116}$$

ویا

$$R(r) \approx \frac{e^{ikr} + Ae^{-ikr}}{r}, \tag{117}$$

www.Endbook.net



شکل ۴: نمونه طیف انرژی برای پتانسیل های $V = Kr^2$ و $V = \frac{K}{r^2}$.

که درآن $k = \sqrt{2\mu E}$.

پس ازاین ملاحظات کلی در درس های آینده به مطالعه مثال های خاص می پردازیم.

۷ ضمیمه

دراین قسمت می خواهیم با چندجمله‌ای های لژاندر و توابع وابسته‌ی لژاندر آشناشویم. خواننده می بایست ضمن خواندن متن تمرین های کوچکی را که طرح کرده‌ایم حل کند تا بتواند متن را بخوبی دنبال کند. مثل همیشه این توابع را با مولد آنها معرفی می کنیم که به صورت زیر تعریف می شود:

$$g(t,x) = (1 - 2xt + t^2)^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x)t^n, \qquad |t| < 1. \tag{118}$$

توابع $P_n(x)$ چند جمله‌ای هایی از درجه‌ی n هستند و چندجمله‌ای های لژاندر خوانده می شوند.
تمرین: نشان دهید که چند جلمه‌ای های لژاندر خاصیت های زیر را دارند:

$$P_n(1) = 1, \qquad P_n(-1) = (-1)^n, \tag{119}$$

www.Endbook.net

$$P_{2n}(0) = (-1)^n \frac{(2n-1)!!}{(2n)!!} \qquad P_{2n+1}(0) = 0. \tag{120}$$

تمرین: با بسط طرف چپ رابطه (118) و مقایسه عبارت زیر را برای چند جمله‌ای های لژاندر بدست آورید:

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{[n/2]} (-1)^k \frac{(2n-2k)!}{2^n k!(n-k)!(n-2k)!} x^{n-2k}. \tag{121}$$

تمرین: روابط تکرار: با مشتق گیری از طرفین رابطه‌ی (118) نسبت به متغیر t و مقایسه طرفین نشان دهید که:

$$(2n+1)xP_n(x) = (n+1)P_{n+1}(x) + nP_{n-1}(x), \qquad n = 1,\ 2,\ 3,\ \cdots \tag{122}$$

هم چنین با مشتق گیری از طرفین نسبت به متغیر x و مقایسه طرفین نشان دهید که

$$P'_{n+1}(x) - P'_{n-1}(x) = (2n+1)P_n(x). \tag{123}$$

تمرین: معادله دیفرانسیل با ترکیب روابط تکرار بالا نشان دهید که $P_n(x)$ در معادله دیفرانسیل زیر صدق می کند:

$$(1-x^2)P_n" - 2xP'_n + n(n+1)P_n(x) = 0. \tag{124}$$

تمرین: تعامد: با نوشتن معادله دیفرانسیل لژاندر، معادله‌ای که درتمرین قبل بدست آوردید، یک بار برای پارامترِ m و یک بار برای n و انجام عملیات مناسب نشان دهید که

$$\int_{-1}^{1} P_n(x)P_m(x)dx = 0 \qquad m \neq 0. \tag{125}$$

حال با استفاده از این مطلب می توانید چند جمله‌ای های لژاندر را بهنجار کنید. برای این کار دو طرف رابطه‌ی (118) را مربع کرده و روی متغیر x از -1 تا 1 انتگرال بگیرید. برای این کار می بایست نخست انتگرال طرف چپ را به عنوان تابعی از متغیر t حساب کرده و آن را به عنوان تابعی از t بسط دهید. دراین صورت ثابت خواهید کرد که

$$\int_{-1}^{1} [P_n(x)]^2 dx = \frac{2}{2n+1}. \tag{126}$$

www.Endbook.net

$$P_0(x) = 1$$

$$P_1(x) = x$$

$$P_2(x) = \tfrac{1}{2}(3x^2 - 1)$$

$$P_3(x) = \tfrac{1}{2}(5x^3 - 3x)$$

$$P_4(x) = \tfrac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3)$$

$$P_5(x) = \tfrac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x)$$

چند جمله‌ای های اول لژاندر :3

تمرین: فرمول رودریگز نشان دهید که $P_n(x)$ را می توان به صورت زیر نوشت:

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!}\left(\frac{d}{dx}\right)^n (x^2 - 1)^n. \tag{127}$$

یک راه برای حل این تمرین آن است که نشان دهید این عبارت در معادله دیفرانسیل لژاندر صدق می کند. راه بهتر آن است که از عبارت (121) شروع کنید واز اتحاد دوجمله‌ای وهم چنین دو اتحاد زیر استفاده کنید:

$$\frac{d^n}{dx^n}x^m = \frac{m!}{(m-n)!}x^{m-n} \tag{128}$$

و

$$\frac{d^n}{dx^n}(fg) = \sum_{k=0}^{n} \frac{n!}{k!(n-k)!} f^k(x) g^{n-k}(x), \tag{129}$$

که درآن معنای $f^k(x)$ مشتق مرتبه‌ی k از تابع f است.

تمرین: نشان دهید که چند جمله‌ای های اولیه لژاندر مطابق با جدول (۷) هستند.

تمرین: توابع وابسته لژاندر معادله دیفرانسیل لژاندر را در نظر بگیرید:

$$(1 - x^2)P_n{}'' - 2xP_n'(x) + n(n+1)P_n(x) = 0 \tag{130}$$

حال قرار دهید

$$u := \frac{d^m}{dx^m}P_n(x) \tag{131}$$

www.Endbook.net

و معادله دیفرانسیل حاکم بر u را بدست آورید. سپس قرار دهید

$$v = (1 - x^2)^{m/2} u \tag{132}$$

و نشان دهید که v در معادله دیفرانسیل زیر صدق می‌کند:

$$(1 - x^2)v" - 2xv' + [n(n + 1) - \frac{m^2}{1 - x^2}]v = 0. \tag{133}$$

این معادله، همان معادله دیفرانسیل وابسته لژاندراست. با استفاده از روابطی که بدست آورده اید، چند تابع اولیه لژاندر را بدست آورید و نشان دهید که مطابق با جدول (۳) هستند.

www.Endbook.net

درس دوازدهم : اسپین

دردرس گذشته جبر زیر را مطالعه کردیم و تمام نمایش های یکانی آن را بدست آوردیم

$$[L_a, L_b] = i\epsilon_{abc}L_c. \tag{1}$$

به عبارت دیگر تمام ماتریس های هرمیتی ممکن را که در روابط فوق صدق می کنند بدست آوردیم. دیدیم که هرنمایش با یک عدد صحیح یا نیمه صحیح j مشخص می شود که بعد آن برابراست با $2j+1$. هرماتریس روی بردارهای $|j,m\rangle$ $(m=-j,\cdots j)$ به صورت زیر عمل می کند:

$$L_z|j,m\rangle = m|j,m\rangle, \tag{2}$$

$$L_+|j,m\rangle = \sqrt{j(j+1)-m(m+1)}|j,m+1\rangle \quad L_-|j,m\rangle = \sqrt{j(j+1)-m(m-1)}|j,m-1\rangle. \tag{3}$$

هم چنین دیدیم که تصویر فضایی چنین حالت هایی فقط برای وقتی که j یک عدد صحیح باشد وجود دارد . هرگاه این اعداد صحیح را با l نشان دهیم، آنگاه نمایش فضایی این حالت ها همان هماهنگ های کروی خواهند بود به این معنا که

$$Y_{l,m}(\theta,\phi) = \langle\theta,\phi|l,m\rangle. \tag{4}$$

هماهنگ های کروی هرگاه دریک پایه برای توابع شعاعی ضرب شوند یک پایه برای کل توابع موج درفضای سه بعدی بدست می دهند.
نمایش های با اسپین نیمه صحیح بخصوص نمایش اسپین $1/2$ هیچ گونه تصویر فضایی ندارند. بد نیست نمایش اسپین $1/2$ را به یاد بیاوریم. این نمایش باماتریس های دو بعدی $S_x,\ \ S_y,\ \ S_z$ مشخص می شود که عبارتند از:

$$S_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad S_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad S_z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{5}$$

این نمایش ها روی حالت های

$$|+\rangle := |\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad |-\rangle := |\frac{1}{2},\frac{-1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{6}$$

www.Endbook.net

به صورت زیر عمل می کنند:

$$S_x|\pm\rangle = \frac{1}{2}|\mp\rangle, \qquad S_y|\pm\rangle = \frac{\pm i}{2}|\mp\rangle, \qquad S_z|\pm\rangle = \frac{\pm 1}{2}|\pm\rangle, \tag{7}$$

و طبیعی است که در روابط جابجایی زیر صدق می کنند.

$$[S_a, S_b] = i\hbar\epsilon_{abc}S_c, \tag{8}$$

دراین جا ثابت پلانک را که تا کنون برابر با یک گرفته بودیم دوباره درجای خود قرارداده ایم.

حال از خود می پرسیم که آیا یک ذره کوانتومی می تواند درحالتی مثل $|+\rangle$ و یا $|-\rangle$ و یا ترکیبی از آن دو باشد؟ اگر چنین چیزی وجود داشته باشد آنگاه می توان به این ذره مشاهده پذیرهایی مثل S_x، S_y و S_z نسبت داد که درست همان روابط جابجایی و درنتیجه همان خواص تکانه زاویه ای را دارند؟ آنچه که مسلم است این حالت ها نمی توانند مربوط به حرکت الکترون باشند زیرا همانطور که دیدیم این حالت ها تصویری درفضای مختصات ندارند و فضای هیلبرت یک ذره درفضای سه بعدی توسط توابع $Y_{l,m}f_n(r)$ که درآن $f_n(r)$ یک پایه برای توابع شعاعی است به طور کامل پوشانده می شود. بنابراین اگر دریابیم که الکترون یا هرذره دیگری می تواند در چنین حالت هایی قراربگیرد ناگزیریم که آن را به یک خصلت غیرفضایی یا درونی و ذاتی آن ذره نسبت دهیم. حال به سوال اولیه بازمی گردیم. آیا یک ذره درچنین حالت هایی قرارمی گیرد؟ پاسخ مثبت این سوال درهمان سالهای ابتدایی تکوین مکانیک کوانتومی با آزمایش های اشترن گرلاخ داده شده است که شرح آن دردرس دوم با تفصیل نسبی آورده شد. اکنون می دانیم که الکترون و بعضی از ذرات یا اتم های دیگر می توانند یک خصلت ذاتی ازخود بروز دهند که تمام خواص مربوط به آن را می توان با درنظرگرفتن یک فضای هیلبرت دو بعدی مختلط توضیح داد. مشاهده پذیرهای مناسبی که رفتارالکترون را دراین فضا توصیف می کنند به عملگرهای S_x، S_y و S_z مرتبط هستند. هرگاه ذره درحالتی مثل $|z,+\rangle$ قرارمی گیرد می گوییم که اسپین آن درجهت z روبه بالا ست و هرگاه درحالت $|z,-\rangle$ قرار می گیرد می گوییم اسپین آن درجهت z رو به پایین است. این حالت ها ویژه بردارهای مشترک S^2 و S_z هستند یعنی

$$\begin{aligned} S_z|z,\pm\rangle &= \frac{\pm\hbar}{2}|z,\pm\rangle \\ S^2|z,\pm\rangle &= \frac{3}{4}\hbar^2|z,\pm\rangle. \end{aligned} \tag{9}$$

۱ عملگرهای اسپین و ماتریس های پاوولی

عملگرهای اسپین را می توان به صورت $S_a = \frac{\hbar}{2}\sigma_a$ نوشت که درآن σ_a ها ماتریس های پاوولی نامیده می شوند و عبارتند از:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{10}$$

www.Endbook.net

این ماتریس ها خواص جالبی دارند که در مطالعه روابط مربوط به اسپین و هم چنین انجام محاسبات مربوط به آن بسیار مفیدند. خواننده می تواند به راحتی صحت روابط زیر را تحقیق کند:

الف:

$$\sigma_a^\dagger = \sigma_a, \qquad \sigma_a^2 = I, \qquad \{\sigma_a, \sigma_b\} = 2\delta_{ab} I, \qquad Tr(\sigma_a \sigma_b) = 2\delta_{ab}. \tag{11}$$

که درآن $\{a, b\} := ab + ba$.

ب:

$$[\sigma_a, \sigma_b] = 2i\epsilon_{abc}\sigma_c, \qquad \sigma_a \sigma_b = \delta_{ab} I + i\epsilon_{abc}\sigma_c. \tag{12}$$

ازاین روابط بدست می آید:

$$\{a \cdot \sigma, b \cdot \sigma\} = 2a \cdot b, \qquad (a \cdot \sigma)(b \cdot \sigma) = a \cdot bI + (a \times b) \cdot \sigma \tag{13}$$

ج:

$$e^{-i\theta n \cdot S} = \cos\frac{\theta}{2} - i \sin\frac{\theta}{2} n \cdot S. \tag{14}$$

د: ویژه بردارهای عملگرپاوولی در راستای $\hat{\mathbf{n}}$

عملگر پاوولی در راستای $\mathbf{n}$ به صورت $\hat{\mathbf{n}} \cdot \sigma$ تعریف می شود. داریم

$$\hat{n} \cdot \sigma = \begin{pmatrix} n_3 & n_1 - in_2 \\ n_1 + in_2 & -n_3 \end{pmatrix}. \tag{15}$$

ازآنجا که $(\hat{\mathbf{n}} \cdot \sigma)^2 = I$، بنابراین ویژه مقدارهای این عملگر برابر با ± 1 است ، ویژه بردارهای متناظر را با $|\hat{\mathbf{n}}, +\rangle$ و $|\hat{\mathbf{n}}, -\rangle$ نشان می دهیم. یک محاسبه ساده نشان می دهد که

$$|\hat{n}, +\rangle = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{pmatrix} \qquad |\hat{n}, -\rangle = \begin{pmatrix} \sin\frac{\theta}{2} \\ -\cos\frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{pmatrix} \tag{16}$$

www.Endbook.net

براحتی می توان تحقیق کرد که وقتی ذره درحالت $|\hat{\mathbf{n}},+\rangle$ است مشاهده پذیرهای S_x، S_y و S_z مقادیر زیر را دارند:

$$\langle \hat{n},+|S_x|\hat{n},+\rangle = \sin\theta\cos\phi, \qquad \langle \hat{n},+|S_y|\hat{n},+\rangle = \sin\theta\sin\phi, \qquad \langle \hat{n},+|S_z|\hat{n},+\rangle = \cos\theta. \tag{17}$$

به عبارت دیگر درست مثل این است که حالت ذره با برداریکه کلاسیکی در راستای n مشخص می شود.

۲ فضای هیلبرت کامل

حال که مشخص شده است الکترون هم خصلت های فضایی دارد که با مختصات و تکانه مشخص می شوند و هم خصلت های درونی که بااسپین، می توان پرسید که حالت کامل آن را چگونه باید توصیف کرد؟ برای این کار بازهم باید به آزمایش بازگردیم. تجربه های بسیار نشان داده اند که اسپین الکترون را می توان به همراه تکانه و یا مختصات آن اندازه گیری کرد. به عبارت دیگر اسپین و مختصه الکترون یا اسپین و تکانه الکترون مشاهده پذیرهای سازگار باهم هستند. این امر به این معناست که عملگرهای مربوط به این مشاهده پذیرها باهم جابجا می شوند، یعنی

$$[P_i,S_j]=0 \qquad [X_i,S_j]=0, \qquad [X_i,P_j]=i\hbar\delta_{ij}, \qquad [S_i,S_j]=i\hbar\epsilon_{ijk}S_k. \tag{18}$$

اما ازآنجا که دیدیم حالت های اسپینی الکترون نمایش فضایی ندارند. این امر به این معناست که روابط جابجایی مربوط به اسپین را نمی توان درهمان فضای هیلبرتی که تاکنون برای توصیف الکترون بکارمی رفت نمایش داد و ما ناچاریم که برای نمایش تمام روابط بالا فضای هیلبرت بزرگ تری اختیارکنیم. برای این کار فضای هیلبرت کامل را از ضرب دو فضای هیلبرت بی نهایت بعدی و دو بعدی می سازیم. فضای هیلبرتی که تاکنون با آن سروکار داشتیم با V_0 نشان می دهیم. این فضای هیلبرت بی نهایت بعدی است و با بردارهای $|x\rangle$ یا $|p\rangle$ جاروب می شود. فضای هیلبرت اسپین را که دو بعدی است با V_s نشان می دهیم. فضای هیلبرت کامل را به صورت زیر درنظر می گیریم:

$$V = V_0 \otimes V_s. \tag{19}$$

دراین فضا عملگر های مختصات، تکانه، واسپین به صورت زیر عمل خواهند کرد:

$$\begin{aligned} &\mathcal{P}_i = P_i \otimes I, \qquad \mathcal{X}_i = X_i \otimes I \\ &\mathcal{S}_a = I \otimes \mathcal{S}_a, \end{aligned} \tag{20}$$

و بدیهی است که روابط جابجایی آنها مطابق با (18) است. بنابراین فضایی ساخته ایم که تمام روابط بین مشاهده پذیرها را می توان درآن نمایش داد. بردارهای پایه این فضا به شکل زیر

www.Endbook.net

$$\begin{aligned} |x,+\rangle &= |x\rangle \otimes |+\rangle = \begin{pmatrix} |x\rangle \\ 0 \end{pmatrix} \\ |x,-\rangle &= |x\rangle \otimes |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ |x\rangle \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{21}$$

وروابط تعامد آنها به شکل زیر خواهد بود

$$\langle x,\alpha|x',\beta\rangle = \delta_{\alpha,\beta}\delta(x-x'). \tag{22}$$

هم چنین این بردارها یک پایه کامل برای فضای V تشکیل می دهند:

$$\begin{aligned} \sum_\alpha \int dx|x,\alpha\rangle\langle x,\alpha| &= \int dx|x,+\rangle\langle x,+| + \int dx|x,-\rangle\langle x,-| \\ &= \int dx \begin{pmatrix} |x\rangle \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle x| & 0 \end{pmatrix} + \int dx \begin{pmatrix} 0 \\ |x\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \langle x| \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \int dx|x\rangle\langle x| & 0 \\ 0 & \int dx|x\rangle\langle x| \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} = I \end{aligned} \tag{23}$$

$$\sum_\alpha \int dx|x,\alpha\rangle\langle x,\alpha| = I \otimes I. \tag{24}$$

حالت کامل یک ذره رامی توان برحسب این بردارهای پایه بسط داد:

$$|\Psi\rangle = \sum_\alpha \int dx|x,\alpha\rangle\langle x,\alpha|\Psi\rangle = \sum_\alpha \int dx\psi_\alpha(x)|x,\alpha\rangle \tag{25}$$

که درآن

$$\psi_+(x) = \langle x,+|\Psi\rangle, \qquad \psi_-(x) = \langle x,-|\Psi\rangle. \tag{26}$$

توابع موج ذره با مولفه مثبت و منفی اسپین هستند. به عبارت دیگر $|\psi_+(x)|^2$ چکالی احتمال یافتن ذره با اسپین بالا در نقطه x است و $|\psi_-(x)|^2$ نیز چگالی احتمال یافتن ذره با اسپین پایین در نقطه x است.
مناسب است که شکل صریح عملگرهای $\mathcal{X}$، $\mathcal{P}$ و $\mathcal{S}_a$ را درنظرآوریم. درپایه مختصات داریم

www.Endbook.net

$$\vec{X} = \begin{pmatrix} X & 0 \\ 0 & X \end{pmatrix} \tag{27}$$

و

$$\vec{P} = \begin{pmatrix} -i\hbar\vec{\nabla} & 0 \\ 0 & -i\hbar\vec{\nabla} \end{pmatrix}. \tag{28}$$

هم چنین عملگرهای اسپین در فضای هیلبرت کل به شکل زیر هستند

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_x &= I \otimes S_x = I \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix} \\ \mathcal{S}_y &= I \otimes S_y = I \otimes \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -iI \\ iI & 0 \end{pmatrix} \\ \mathcal{S}_z &= I \otimes S_z = I \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{29}$$

که درآن ها عملگر I عملگری است که روی قسمت فضایی فضای هیلبرت یعنی V_0 اثر می کند. به عبارت دیگر $I = \int dx|x\rangle\langle x|$.

قیافه هامیلتونی یک ذره که درپتانسیل V قرار دارد و اسپین در آن دخالتی ندارد به شکل زیر خواهد بود

$$\mathcal{H} = \frac{\mathcal{P}^2}{2m} + V(\mathcal{X}) = \begin{pmatrix} \frac{P^2}{2m} + V(X) & 0 \\ 0 & \frac{P^2}{2m} + V(X) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H & 0 \\ 0 & H \end{pmatrix}. \tag{30}$$

هرگاه ویژه بردارهای H را تعیین کرده باشیم ویژه بردارهای $\mathcal{H}$ به شکل زیر خواهند بود که نشان دهنده یک واگنی است. این واگنی ناشی از یک تقارن است و آن اینکه عملگرهای اسپین با هامیلتونی جابجا می شوند:

$$\mathcal{H}|\psi_n, \alpha\rangle = E_n|\psi_n, \alpha\rangle. \tag{31}$$

برای یک چنین هامیلتونی عملگرتحول عبارت است از

$$\mathcal{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t} = \begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \end{pmatrix} \tag{32}$$

که نشان می دهد درطول زمان قسمت اسپینی یک حالت اولیه دچار تغییرنمی شود.

www.Endbook.net

۳ برهم کنش یک ذره باردار با میدان الکترومغناطیسی

می دانیم که هامیلتونی ذره ای با بارالکتریکی q که دریک میدان الکترومغناطیسی با پتانسیل اسکالر ϕ و پتانسیل برداری $\mathbf{A}$ قرارمی گیرد به شکل زیراست:

$$H = \frac{(P + \frac{q}{c}A)^2}{2m} + q\phi = \frac{1}{2m}(P^2 + \frac{q^2}{c^2}A^2 + \frac{q}{c}\vec{P}\cdot\vec{A} + \frac{q}{c}\vec{A}\cdot\vec{P}) + q\phi(r). \tag{33}$$

دقت کنید که این رابطه در دستگاه واحدهای گاووسی نوشته شده است که درآن بارالکتریکی یک الکترون برابربا $4.8 \times 10^{-10}\ esu$ است. دراین دستگاه میدان مغناطیسی برحسب واحد گاووس سنجیده می شود.

هرگاه هامیلتونی بالا را درپایه مختصات بنویسیم بدست می آوریم

$$H = \frac{1}{2m}(-\hbar^2\nabla^2 + \frac{q^2}{c^2}A^2 - \frac{q}{c}i\hbar\vec{\nabla}\cdot\vec{A} - \frac{q}{c}i\hbar\vec{A}\cdot\vec{\nabla}) + q\phi(r) \tag{34}$$

ازطرفی می دانیم که

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{A}\psi = (\vec{\nabla}\cdot\vec{A})\psi + \vec{A}\cdot\vec{\nabla}\psi. \tag{35}$$

همیشه می توانیم پیمانه ای را انتخاب کنیم که درآن شرط $(\nabla\cdot\mathbf{A}) = 0$ برقرارباشد. دراین پیمانه هامیلتونی به شکل زیردرمی آید:

$$H = \frac{1}{2m}(-\hbar^2\nabla^2 + \frac{q^2}{c^2}A^2 - 2i\frac{q}{c}\hbar\vec{A}\cdot\vec{\nabla}) + q\phi(r). \tag{36}$$

هرگاه ذره تنهادریک میدان مغناطیسی یکنواخت $\mathbf{B}$ قرارگرفته باشد آنگاه $\phi(\mathbf{r}) = 0$ و

$$\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B}\times\vec{r}. \tag{37}$$

دراین شرایط هامیلتونی به شکل زیر درمی آید:

$$H = \frac{1}{2m}(-\hbar^2\nabla^2 + \frac{q^2}{c^2}(r^2B^2 - (\vec{r}\cdot\vec{B})^2 - i\frac{q}{c}\hbar(\vec{B}\times\vec{r})\cdot\vec{\nabla}) \tag{38}$$

اما تقریبا همواره می توانیم ازجمله های متناسب با B^2 بدلیل کوچکی شان صرف نظر ککنیم. درحقیقت دانشجو می تواند با یک محاسبه ساده نشان دهد که این جملات برای میدان های مغناطیسی ای که درآزمایشگاه قابل حصول باشد

www.Endbook.net

$(B < 10^5 \quad Gauss)$ درمقابل جملات دیگر همواره قابل چشم پوشی هستند. تحت این شرایط هامیلتونی به شکل زیردرمی آید:

$$H = \frac{1}{2m}(-\hbar^2\nabla^2 - \frac{q}{c}\vec{B}\cdot\vec{L}) = H_0 - \mu\cdot B, \tag{39}$$

که درآن $\mu = \frac{q}{2mc}\mathbf{L}$ آن قسمت از گشتاور مغناطیسی ذره است که ناشی از حرکت دورانی آن و یا تکانه زاویه ای اربیتالی آن است. درفضای هیلبرت کامل این هامیلتونی به شکل زیراست:

$$H = \begin{pmatrix} H_0 - \mu_l\cdot B & 0 \\ 0 & H_0 - \mu\cdot B \end{pmatrix}, \tag{40}$$

که درآن $H_0 = \frac{P^2}{2m}$.
دراین محاسبه از گشتاور مغناطیسی ناشی از اسپین ذره صرف نظرکرده ایم. به همین دلیل این هامیلتونی به شکل بلوکه قطری درآمده است. هرگاه بخواهیم گشتاورمغناطیسی ناشی از اسپین را نیز درنظربگیریم می بایست هامیلتونی را به شکل زیرتغییر دهیم:

$$H = H_0 - \mu_l\cdot B - \mu_s\cdot B = \begin{pmatrix} H_0 - \mu\cdot B & 0 \\ 0 & H_0 - \mu\cdot B \end{pmatrix} - \frac{q}{mc}\begin{pmatrix} B_z & B_x - iB_y \\ B_x + iB_y & -B_z \end{pmatrix}. \tag{41}$$

دراین جا ذکر یک نکته لازم است . جمله $\mathbf{S}\cdot\mathbf{B}$ را مثل جمله $\mathbf{B}\cdot\mathbf{L}$ ازاصول اولیه بدست نیاورده ایم. بلکه آن را باتوجه به تشابه گشتاور مغناطیسی اسپینی و مداری اضافه کرده ایم. این که آیا چنین کاری صحیح است یا نه بستگی به تطبیق نهایی نتایج این هامیلتونی با تجربه دارد و تجربه نشان داده است که چنین جایگزینی ای صحیح است، با یک تفاوت و آن اینکه بجای ضریب $\frac{q}{2mc}$ می بایست ضریب $\frac{q}{mc}$ در کنار $\mathbf{S}$ قراربگیرد تا گشتاور مغناطیسی اسپینی بدست آید. درمکانیک کوانتومی نسبیتی جمله مربوط به برهم کنش اسپین باهمان ضریب صحیح یعنی $\frac{q}{mc}$ به طور طبیعی و ازاصول اولیه بدست می آید.

www.Endbook.net

درس سیزدهم: معادله شعاعی شرودینگر برای ذره آزاد و برای نوسانگر هارمونیک همسانگرد

دراین درس معادله شعاعی شرودینگر را در سه بعد برای ذره‌ی آزاد و نوسانگر هارمونیک حل می کنیم. حل ذره‌ی آزاد به خصوص اهمیت دارد زیرا منجر به امواج کروی می شود. امواج کروی بر خلاف امواج تخت که تکانه خطی مشخص دارند، ویژه حالت هایی از انرژی هستند که تکانه زاویه‌ای مشخص دارند و در درسهای آینده به خصوص در مسائل مربوط به پراکندگی از پتانسیل های کروی کاربرد دارند. ممکن است که خواننده سوال کند چرا با وجود سادگی این دو مسئله که حل های آنها را به خوبی می شناسیم، بازهم دراین فصل به این دو مسئله می پردازیم. پاسخ این سوال در همین عبارت بالا نهفته است یعنی اینکه هامیلتونی را همزمان با چه عملگرهای دیگری قطری می کنیم. دراین درس هامیلتونی را همزمان با عملگرهای تکانه زاویه‌ای L_z و L^2 قطری می کنیم.

۱ ذره آزاد

دردرسهای گذشته معادله شرودینگر را برای ذرات آزاد در دستگاه مختصات دکارتی یعنی معادله

$$\frac{P^2}{2\mu}\psi = \frac{-\hbar^2\nabla^2}{2\mu}\psi = E\psi \tag{1}$$

حل کرده ایم. می دانیم که این حل ها به شکل زیرهستند:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \tag{2}$$

که درآن $E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2$. هرحلی ازاین نوع درواقع ویژه بردارمشترک سه عملگر P_x ، P_y و P_z است. درواقع تابع موج فوق چیزی نیست جز تصویر ویژه حالت $|\vec{k}\rangle$ در فضای مختصات، یعنی

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \langle\vec{r}|\vec{k}\rangle. \tag{3}$$

ازآنجایی که H برحسب P_x، P_y و P_z نوشته می شود حالتِ $|\vec{k}\rangle$ و یا تابع موج آن در فضا یعنی $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ انرژی مشخصی دارند. تابع موجِ $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ درواقع نشان دهنده یک موج تخت است که با بردار موج $\vec{k}$ مشخص می شود.

www.Endbook.net

از طرفی می دانیم که هامیلتونی یک ذره آزاد یک عملگر اسکالر است و بنابراین با عملگرهای تکانه زاویه ای یعنی L^2 و L_z جابجا می شود. بنابراین می توانیم بجای ویژه حالت های مشترک تکانه های خطی حالت هایی را بیابیم که ویژه حالت مشترک H، L^2 و L_z باشند. این ویژه حالت ها را با $|E,l,m\rangle$ و توابع موج آنها را درفضای مختصات با $\psi_{E,l,m}(\vec{r}) = \psi_{E,l,m}(r,\theta,\phi)$ نشان می دهیم. هم ویژه حالت های $|\vec{k}\rangle$ و هم ویژه حالت های $|E,l,m\rangle$ تشکیل پایه برای فضای هیلبرت یک ذره آزاد می دهند و هردو به یکسان معتبر هستندو پیدایش و استفاده از آنها بستگی به شرایط بیرونی دارد، همچنانکه دریک استخر یا برکه آب هم امواج تخت می توان ایجاد کرد و هم امواج دایره ای که به صورت دایره های هم مرکز به یک نقطه نزدیک و یا ازآن دورمی شوند. هرگاه قراردهیم $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$ آن گاه می توانیم حالت های $|\vec{k}\rangle$ را برحسب حالت های $|E,l,m\rangle$ بسط دهیم و بنویسیم

$$|\vec{k}\rangle = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} |E,l,m\rangle\langle E,l,m|\vec{k}\rangle \tag{4}$$

ویا با تصویر کردن این رابطه درفضای مختصات

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} C(\vec{k},l,m)\psi_{E,l,m}(r,\theta,\phi) \tag{5}$$

که درآن

$$C(\vec{k},l,m) := \langle E,l,m|\vec{k}\rangle. \tag{6}$$

درآینده به این رابطه بازخواهیم گشت ولی حالا بهتراست توابع موج $\psi_{E,l,m}(r,\theta,\phi)$ را بدست بیاوریم. اکنون دیگرمی دانیم که این توابع به شکل کلی زیر هستند

$$\psi_{E,l,m}(r,\theta,\phi) = f(r)Y_{l,m}(\theta,\phi) \equiv \frac{R_l(r)}{r}Y_{l.m}(\theta,\phi), \tag{7}$$

که تابع شعاعی $R(r)$ در معادله زیر صدق می کند:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\,R_l}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}R_l = ER_l. \tag{8}$$

با انتخاب متغیر بدون بعدِ x با تعریف $x = kr$ که درآن $k = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2\mu E}}$ به رابطه زیر می رسیم:

$$\frac{d^2\,R_l}{dx^2} - \frac{l(l+1)}{x^2}R_l = -R_l. \tag{9}$$

www.Endbook.net

حل منظم این معادله را می توان با نوشتن تابع R_l به صورت $R_l(x) = x^l \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n$ و حل نامنظم آن را با نوشتن تابع R به صورت $R(x) = x^{-l-1} \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n$ وجایگذاری آنها درمعادله بالا بدست آورد. اما برای ذره آزاد می توان ازیک روش جبری ساده وزیبانیزکمک گرفت که آموزنده است. درزیراین روش را توضیح می دهیم.
نخست دقت می کنیم که معادله 9 را می توان به صورت زیرنیزنوشت:

$$D_l R_l = -R_l, \tag{10}$$

که درآن D_l عملگردیفرانسیل زیراست

$$D_l := \frac{d^2}{dx^2} - \frac{l(l+1)}{x^2} \tag{11}$$

این عملگر یادآور هامیلتونی نوسانگر هارمونیک است و بنابراین شاید بتوانیم با روشی شبیه به نوسانگر این مسئله را نیز به طریق جبری حل کنیم: برای این کار عملگرهای زیر را تعریف می کنیم:

$$d_l := \frac{d}{dx} + \frac{l+1}{x}, \qquad d_l^\dagger = -\frac{d}{dx} + \frac{l+1}{x}. \tag{12}$$

دراین صورت محاسبات ساده ای نشان می دهد که

$$d_l d_l^\dagger = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{l(l+1)}{x^2} = D_l, \qquad d_l^\dagger d_l = d_{l+1} d_{l+1}^\dagger = D_{l+1}. \tag{13}$$

حال فرض کنید که R_l جوابی از معادله شرودینگر برای تکانه زاویه ای l باشد یعنی

$$D_l R_l = -R_l \qquad \text{یا} \qquad d_l d_l^\dagger R_l = -R_l. \tag{14}$$

دراین صورت عملگر $d_l^\dagger$ را روی طرفین ازچپ اثرمی دهیم:

$$d_l^\dagger (d_l d_l^\dagger) R_l = -d_l^\dagger R_l \longrightarrow D_{l+1}(d_l^\dagger) = -d_l^\dagger R_l \tag{15}$$

بنابراین $d_l^\dagger R_l$ جواب معادله شرودینگر برای تکانه زاویه ای $l+1$ خواهد بود. این رابطه را به شکل زیرمی نویسیم

$$R_{l+1} = d_l^\dagger R_l. \tag{16}$$

www.Endbook.net

هم چنین اگرروی طرفین رابطه‌بالا عملگر d_l را اثردهیم وازرابطه 14 استفاده کنیم بدست می آوریم

$$d_l R_{l+1} = d_l d_l^\dagger R_l = D_l R_l = -R_l, \tag{17}$$

بنابراین مشابه با رابطه 16 رابطه زیر را داریم

$$R_l = -d_l R_{l+1}. \tag{18}$$

روابط 16 و 18 نشان می دهند که باداشتن یک جواب برای تکانه زاویه ای $l = 0$ می توان همه جواب های دیگر را برای تکانه های زاویه ای دلخواه بدست آورد. بنابراین دراین جا جواب برای تکانه زاویه ای صفر را بدست می آوریم. برای $l = 0$ دو جواب داریم که عبارتند از

$$R_0 = \sin x \qquad \longrightarrow \qquad f_0(x) = j_0(x) = \frac{\sin x}{x}$$

یا

$$R_0 = -\cos x \qquad \longrightarrow \qquad f_0(x) = n_0(x) = -\frac{\cos x}{x}$$

. علامت – صرفاً ازروی قرارداد نوشته شده است. بااثر متوالی عملگرهای $d_0^\dagger$ $d_1^\dagger$ ، $d_2^\dagger$ و $\cdots$ می توان تمام توابع u_l را بدست آورد. برای این که این کاررا به طریق فشرده ای انجام دهیم به رابطه زیردقت می کنیم

$$R_{l+1} = \left(-\frac{d}{dx} + \frac{l+1}{x}\right) R_l \tag{19}$$

شاید بتوان بابازتعریف تابع R کاری کرد که عملگردیفرانسیل طرف راست بستگی به l نداشته باشد. اگر موفق به این کارشویم می توانیم براحتی تمام توابع را به صورت توانی از یک عملگر که روی یک تابع اثرمی کند بنویسیم. برای بازتعریف تابع R قرارمی دهیم $R_l(x) = x^{\alpha_l} F_l(x)$.
یک محاسبه ساده نشان می دهد که اگر α_l را برابر با $l+1$ بگیریم، یعنی اگر قرار دهیم

$$R_l(x) = x^{l+1} F_l(x), \tag{20}$$

آنگاه معادله تکرار برای F_l شکل ساده زیر را به خود می گیرد:

$$F_{l+1} = \left(-\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right) F_l. \tag{21}$$

درنتیجه خواهیم داشت

$$F_l = \left(-\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l F_0, \tag{22}$$

www.Endbook.net

ویا

$$R_l = x^{l+1}\left(-\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l \frac{R_0}{x}. \tag{23}$$

با توجه به رابطه 7 بدست می آوریم

$$f_l(x) = x^l\left(-\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l f_0. \tag{24}$$

بسته به اینکه f_0 را کدام جواب بگیریم دو دسته جواب برای تابع موج شعاعی $f_l(x)$ به دست می آید که عبارتند از

$$\begin{aligned} f_l(x) &= x^l\left(-\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l \frac{\sin x}{x} =: j_l(x) \\ f_l(x) &= x^l\left(-\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l \frac{-\cos x}{x} =: n_l(x). \end{aligned} \tag{25}$$

این جواب ها توابع بسل کروی از نوع اول و دوم نامیده می شوند. چند تابع اولیه به شکل زیرهستند:

$$\begin{aligned} j_0(x) &= \frac{\sin x}{x} & n_0(x) &= -\frac{\cos x}{x} \\ j_1(x) &= \frac{\sin(x)}{x^2} - \frac{\cos x}{x} & n_1(x) &= -\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\cos x}{x} \\ j_2(x) &= (\frac{3}{x^2} - \frac{1}{x})\sin x - 3\frac{\cos x}{x^2}, & n_2(x) &= -(\frac{3}{x^2} - \frac{1}{x})\cos x - \frac{3\sin x}{x^2}. \end{aligned} \tag{26}$$

برای بعضی از کاربردها به ترکیبی از توابع بسل علاقه داریم که توابع هنکل $Hankel$ نامیده می شود و عبارتند از

$$\begin{aligned} h_l^{(+)}(x) &= j_l(x) + in_l(x), \\ h_l^{(-)}(x) &= j_l(x) - in_l(x). \end{aligned} \tag{27}$$

چند تابع اولیه هنکل به شکل زیرهستند:

$$\begin{aligned} h_0^{(+)}(x) &= \frac{e^{ix}}{ix} \\ h_1^{(-)}(x) &= -\frac{e^{ix}}{x}(1 + \frac{i}{x}) \end{aligned}$$

www.Endbook.net

$$h_2^{(+)}(x) = \frac{ie^{ix}}{x}\left(1+\frac{3i}{x}-\frac{3}{x^2}\right). \tag{28}$$

برای x های کوچک می توان بااستفاده از روابط 25 رفتار توابع بسل را درنزدیکی مرکز به دست آورد:

$$j_l(x) \approx \frac{x^l}{(2l+1)!!} \tag{29}$$

و

$$n_l(x) \approx -\frac{(2l-1)!!}{x^l}. \tag{30}$$

می توان ثابت کرد که برای x های بزرگ توابع بسل رفتارمجانبی زیر را دارند:

$$j_l(x) \approx \frac{1}{x}\sin(x-\frac{l\pi}{2})$$

$$n_l(x) \approx -\frac{1}{x}\cos(x-\frac{l\pi}{2}). \tag{31}$$

درنتیجه تابع هنکل کروی برای x های بزرگ به شکل زیررفتارمی کند:

$$h_l^{(+)}(x) \approx \frac{1}{x}e^{ix} \qquad h_l^{(-)}(x) \approx \frac{-1}{x}e^{-ix}. \tag{32}$$

بنابراین ویژه توابع انرژی ذره آزاد که دارای تکانه زاویه ای مشخص نیز باشند به شکل زیر هستند:

$$\psi^{(1)}_{E,l,m}(r,\theta,\phi) = j_l(kr)Y_{l,m}(\theta,\phi),$$

$$\psi^{(2)}_{E,l,m}(r,\theta,\phi) = n_l(kr)Y_{l,m}(\theta,\phi). \tag{33}$$

ویا به شکل زیر:

$$\psi^{+}_{E,l,m}(r,\theta,\phi) = h_l^{(+)}(kr)Y_{l,m}(\theta,\phi),$$

$$\psi^{-}_{E,l,m}(r,\theta,\phi) = h_l^{(-)}(kr)Y_{l,m}(\theta,\phi). \tag{34}$$

www.Endbook.net

دقت کنید که تابع $\psi^{(2)}_{E,l,m}$ در $r=0$ واگراست . با توجه به بسط مجانبی 32، برای r های بزرگ توابع $\psi^{+}_{E,l,m}$ و $\psi^{-}_{E,l,m}$ به شکل زیر رفتار می کنند: برای r های بزرگ این تابع به شکل زیررفتارمی کند

$$\psi^{(+)}_{E,l,m}(r,\theta,\phi) = \frac{e^{ikr}}{kr}Y_{l,m}(\theta,\phi)$$
$$\psi^{(1)}_{E,l,m}(r,\theta,\phi) = \frac{-e^{-ikr}}{kr}Y_{l,m}(\theta,\phi). \tag{35}$$

هرگاه تحول زمانی این توابع موج را نیز درنظربگیریم که با ضرب کردن جمله e^{-iEt} درآن ها بدست می آید، درمی یابیم که تابع موج $\psi^{(+)}_{E,l,m}$ نشان دهنده یک موج کروی است که از مرکز دور می شود و تابع موج $\psi^{(-)}_{E,l,m}$ نشان دهنده یک موج کروی است که به مرکز نزدیک می شود.

۱.۱ رابطه امواج تخت و امواج کروی

حال که شکل صریح توابع موج کروی را بدست آورده ایم می توانیم به بحث خود درباره بسط امواج تخت بر حسب امواج کروی بازگردیم. بنابر رابطه (7) داریم

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} C(\vec{k},l,m)\psi_{E,l,m}(r,\theta,\phi) \tag{36}$$

که درآن

$$C(\vec{k},l,m) := \langle E,l,m|\vec{k}\rangle. \tag{37}$$

فرض کنید که موج تخت در راستای محور z حرکت می کند، یعنی $\vec{k}=k\hat{z}$، درحقیقت همواره می توانیم با انتخاب محورهای مختصات کاری کنیم که محور z بر بردار موج $\vec{k}$ منطبق شود. دراین صورت می توانیم نشان دهیم که ضرایب $C(k\hat{z},l,m)$ تنها برای m های برابر با صفر مقدار دارند و برای بقیه m ها مساوی با صفر هستند. برای درک این نکته عنصر ماتریسی $\langle E,l,m|L_z|k\hat{z}\rangle$ را از دو طریق حساب می کنیم. با اثر L_z روی بردار سمت چپ بدست می آوریم که

$$\langle E,l,m|L_z|k\hat{z}\rangle = m\langle E,l,m|L_z|k\hat{z}\rangle, \tag{38}$$

و با اثر $L_z = xP_y - yP_x$ روی بردار سمت راست که مولفه‌های تکانه‌اش در راستاهای x و y صفر هستند، بدست می آوریم که

$$\langle E,l,m|L_z|k\hat{z}\rangle = 0. \tag{39}$$

www.Endbook.net

بنابراین بسط به شکل زیر درمی آید:

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} C_l j_l(kr) Y_{l,0}(\theta, \phi), \tag{40}$$

دقت کنید که $\langle \mathbf{r}|k\mathbf{z}\rangle$ را به صورت e^{ikz} نوشته‌ایم و برای سادگی از ضریب $\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}$ صرف نظر کرده‌ایم.

دراین جا به دو نکته باید اشاره کنیم. اول آنکه درطرف راست فقط جواب های منظم دربسط آورده شده اند. دلیل این امر آن است که طرف چپ در $r = 0$ مقدارمتناهی دارد و درطرف راست نمی بایست توابعی که در $r = 0$ نامتناهی اند وجود داشته باشند. دوم آنکه ضرایب را به جای $C(k\vec{z}, l, 0)$ به شکل ساده تر C_l نوشته ایم که درآن پارامتر k که درهردو طرف بسط یکسان است دیگر وجود ندارد. در تمرین های این درس نشان می دهید که ضرایب بسط عبارت اند از:

$$C_l = i^l \sqrt{4\pi(2l+1)}. \tag{41}$$

هرگاه به این مسئله دقت کنیم که

$$Y_{l,0}(\theta, \phi) = \left(\frac{2l+1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} P_l(\cos\theta), \tag{42}$$

که درآن $P_l(\cos\theta)$ تابع لژانداراست، به بسط زیر می رسیم که دردرس های آینده ازآن استفاده خواهیم کرد:

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) p_l(\cos\theta). \tag{43}$$

۲ چاه پتانسیل کروی

ذره ای تصور کنیم که درپتانسیل زیر گیر افتاده است:

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r \leq a, \\ \infty & a \leq r, \end{cases} \tag{44}$$

هرگاه بخواهیم ترازهای انرژی یک ذره درچنین پتانسیلی را بدست آوریم می بایست معادله شرودینگر را برای ذره آزاد درون چاه حل کنیم و سپس شرط مرزی $\psi_{E,l,m}(r = a) = 0$

www.Endbook.net

را اعمال کنیم. می دانیم که تابع موج شعاعی در درون چاه عبارت است از:

$$R(r) = j_l(kr) \tag{45}$$

یادآوری می کنیم که تابع موج $n_l(kr)$ در مبدأ نامنظم است و بنابراین یک جواب مجازنیست. حال شرط صفربودن تابع موج منجر به شرط زیر می شود

$$j_l(ka) = 0. \tag{46}$$

هرگاه n ام این صفر تابع بسل j_l را با $x_{l,n}$ نمایش دهیم خواهیم داشت :

$$ka = x_{l,n} \tag{47}$$

ودرنتیجه ترازهای انرژی به شکل زیرخواهند بود:

$$E_{n,l} = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2 x_{l,n}^2}{2\mu a^2}. \tag{48}$$

همانطور که ازتقارن انتقالی انتظار داریم ترازهای انرژی واگن هستند و انرژی تنها به دو عدد کوانتومی l و n بستگی دارند و مستقل از m هستند.

۳ نوسانگر هارمونیک همسانگرد

پتانسیل موثر برای نوسانگر هارمونیک همسانگرد به شکل زیراست:

$$V_{eff} = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 + \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} \tag{49}$$

مطابق معمول ویژه حالت های انرژی به شکل زیر خواهند بود:

$$\psi_{E,l,m} = \frac{R_{E,l}(r)}{r} Y_{l,m}(\theta, \phi). \tag{50}$$

www.Endbook.net

که درآن $R_{E,l}$ یعنی تابع موج شعاعی در معادله شعاعی شرودینگرِ یعنی معادله زیر صدق می کند

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2+\frac{\hbar^2l(l+1)}{2\mu r^2}\right]R(r)=ER(r). \tag{51}$$

جزییات حل این معادله دیفرانسیل را به عهده خواننده می گذاریم. دراینجا تنها به مراحل کلی حل آن که برای مسائل دیگر نیز صادق است اشاره می کنیم:

مرحله اول: پارامترهای مسئله را با پارامترهای بدون بعد جایگزین می کنیم. برای این کار می توانیم از تجزیه تحلیل ابعادی استفاده کنیم. بنابراین قرار می دهیم

$$r=(\frac{\hbar}{\mu\omega})^{\frac{1}{2}}x \tag{52}$$

و

$$E=\hbar\omega\lambda. \tag{53}$$

این انتخاب ها کاملاً طبیعی هستند زیرا $\hbar\omega$ و $\sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}$ تنها کمیت هایی هستند با بعد انرژی و طول که درمسئله نوسانگر هارمونیک وجود دارند. دقت کنید که x و λ بدون بعد هستند. با این انتخاب ها معادله شعاعی به شکل زیردرمی آید:

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2}+x^2+\frac{l(l+1)}{x^2}\right]R(x)=2\lambda R(x). \tag{54}$$

مرحله دوم: به رفتار معادله برای x های بزرگ نگاه می کنیم. دراین حد داریم

$$-\frac{d^2R}{dx^2}+x^2R(x)\approx 0 \tag{55}$$

که یک حل بهنجار ازآن به شکل زیر است:

$$R(x)\approx e^{-\frac{1}{2}x^2} \tag{56}$$

مرحله سوم: قرار می دهیم $R(x)=e^{-\frac{1}{2}x^2}u(x)$ و معادله حاکم بر u را بدست می آوریم که به شکل زیراست:

$$u''-2xu'+(2\lambda-1-\frac{l(l+1)}{x^2})u=0. \tag{57}$$

www.Endbook.net

مرحله چهارم: حال $u(x)$ را به صورت زیر بسط می دهیم

$$u(x) = x^{l+1} \sum_{k=0}^{\infty} C_k x^k \tag{58}$$

و یک رابطه تکرار برای C_k ها بدست می آوریم. این رابطه تکرار را برای k های بزرگ نگاه می کنیم تا رفتار مجانبی تابع u را بفهمیم. نتیجه‌ای که می گیریم آن است که اگر این سری درجایی قطع نشود رفتار مجانبی تابع $u(x)$ چنان خواهد بود که تابع $R(x) = e^{-\frac{1}{2}x^2} u(x)$ دربی نهایت به سمت صفر میل نخواهد کرد. بنابراین سری مربوطه می بایست درجایی قطع شود. قطع شدن سری به رابطه زیر منجر می شود:

$$\lambda = (2k + l + \frac{3}{2}), \qquad k = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots. \tag{59}$$

ویا

$$E = (2k + l + \frac{3}{2})\hbar\omega, \qquad k = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots. \tag{60}$$

با تعریف n به صورت زیر

$$n = 2k + l, \tag{61}$$

نتیجه می گیریم که انرژی به صورت زیر خواهد بود:

$$E = (n + \frac{3}{2})\hbar\omega. \tag{62}$$

به این ترتیب انرژی نوسانگر هارمونیک تنها به یک عدد کوانتومی یعنی n که آن را عدد کوانتومی اصلی می خوانیم بستگی پیدامی کند. با توجه به روابط 59 و 61 نتیجه می گیریم که به ازای هرعدد کوانتومی اصلی n یک مجموعه از تراز های واگن با l های مختلف وجود دارند که همگی یک انرژی دارند. عدد کوانتومی l برای هرترازِ n مقادیر زیر را اختیار می کند:

$$l = n,\ n-2,\ n-4, \cdots 1, \quad \text{یا} \quad 0. \tag{63}$$

www.Endbook.net

درس سیزدهم: اتم هیدروژن

۱ مقدمه

این فصل سرآغازی برای آشنایی ما با مکانیک کوانتومی اتم‌ها، مولکول ها و جامدات است. دراین درس یادمی گیریم که چگونه معادله شرودینگر را برای اتم هیدروژن که ساده ترین اتم درطبیعت است حل کنیم و طیف آن را بدست آوریم. برای سادگی نخست یک اتم هیدروژن ایده‌آل را بررسی می کنیم، یعنی فرض می کنیم که هسته ساکن است و تنها الکترون انرژی جنبشی دارد. این فرض از آنجا که هسته بسیارسنگین تر از اتم است فرض خوبی است. در انتهای این درس یادمی گیریم که چگونه تاثیر جرم محدود هسته را محاسبه کنیم. هم چنین در مطالعه اتم هیدروژن از اثرات نسبیتی و برهم کنش ممان مغاطیسی الکترون با ممان مغناطیسی ای که ناشی از حرکت مداری آن است صرف نظر می کنیم. هم چنین برهم کنش ممان مغناطیسی الکترون با ممان مغناطیسی هسته را نادیده می نگاریم. در فصل های بعدی است که این اثرات را به صورت اختلالی در نظر می گیریم. بنابراین فعلا در این فصل یک اتم هیدروژن ساده را بررسی می کنیم.

۲ تجزیه تحلیل ابعادی برای اتم هیدروژن

کمیت های مربوط در اتم هیدروژن عبارتند از e و m یعنی بار و جرم الکترون بعلاوهٔ $\hbar$ یعنی ثابت پلانک. می بایست ازاین سه کمیت ها مرتبه همه کمیت های دیگر نظیر انرژی، طول، سرعت و فرکانس را بدست بیاوریم. درساختن این کمیت ها c سرعت نور وارد نخواهد شد زیرا مسئله نسبیتی نیست اگر چه ممکن است برای استخراج این کمیت ها زیباتر باشد که از این ثابت استفاده کنیم. می دانیم که طول موج کامپتون الکترون برابراست با

$$\lambda_c = \frac{\hbar}{mc} \tag{1}$$

هم چنین می دانیم که ثابت ساختارریز که کمیت بدون بعدی است برابراست با

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}. \tag{2}$$

تنها راهی که بتوانیم کمیتی بابعد طول بدون c بسازیم آن است که قراردهیم

www.Endbook.net

$$a_0 := \frac{\lambda_c}{\alpha} = \frac{\hbar^2}{me^2} \approx \quad \text{آنگستروم} \quad 0.5. \tag{3}$$

می دانیم که انرژی درحال سکون الکترون برابراست با

$$E_0 = mc^2. \tag{4}$$

تنهاراهی که بتوانیم کمیتی با بعد انرژی ولی بدون سرعت نوربسازیم آن است که این کمیت را در مجذور ثابت ساختار ریز ضرب کنیم. نصف این کمیت چیزی است که به طور سنتی آن را یک رایدبرگ $Rydberg$ می خوانیم و با نماد Ry نشان می دهیم. راید برگ واحدی است برای سنجش انرژی الکترون ها دراتم ها و برابراست با 13.6 الکترون ولت.

$$Ry := \frac{1}{2}\alpha^2 \times mc^2 = \frac{1}{2}m(\frac{e^2}{\hbar})^2. \tag{5}$$

هم چنین اگربخواهیم کمیتی بابعد سرعت بسازیم که درآن سرعت نورنقشی نداشته باشد آن است که قراردهیم

$$v := \alpha c = \frac{e^2}{\hbar} \approx \quad \text{سرعت نور} \quad \frac{1}{137}. \tag{6}$$

a، v و Ry طول، سرعت و انرژی مشخصه الکترون دراتم هیدروژن هستند. این مقادیر به ترتیب تخمینی هستند از شعاع ، سرعت وانرژی الکترون دراتم هیدروژن. و بالاخره می توانیم تخمینی از فرکانس های تشعشعی ازاتم هیدروژن بدست آوریم. کافی است که قرار دهیم

$$\omega = \frac{Ry}{\hbar} \approx 10^{15} \quad Hz. \tag{7}$$

برای اتم های شبه هیدروژن یعنی اتم هایی که یک الکترون بدورهسته ای با بارمثبت Ze می چرخد، می بایست درکمیت های فوق e^2 را با Ze^2 جایگزین کرد. همانطور که از روابط بالا پیداست، درنتیجه این جایگزینی انرژی و فرکانس Z^2 برابر، طول مشخصه $\frac{1}{Z}$ و سرعت Z برابرمی شود.
بعدازاین مقدمات به حل معادله شعاعی شرودینگرمی پردازیم. از درس گذشته دیدیم که ویژه توابع هامیلتونی برای یک پتانسیل که دارای تقارن دوارنی است حتماً به صورت زیر نوشته می شوند:

$$\psi_{E,l,m}(r,\theta,\phi) = f_E(r)Y_{l,m}(\theta,\phi) \tag{8}$$

و هرگاه تابع شعاعی را به صورت $f_E(r) = \frac{R(r)}{r}$ بنویسیم آنگاه تابع $R(r)$ دریک معادله شرودینگر یک بعدی صدق می کنند که درآن پتانسیل اولیه با یک پتانسیل موثر جایگزین شده است. برای اتم هیدروژن معادله شعاعی شرودینگربه شکل زیردرمی آید. دراین معادله ثابت $\hbar$ را صریحاً نوشته ایم. ازآنجا که انرژی E منفی است آن را به صورت $-|E|$ نوشته ایم.

www.Endbook.net

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2R}{dr^2}-\frac{e^2}{r}R+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}R=-|E|R(r), \tag{9}$$

نخستین کاری که می کنیم پارامتر r را بایک پارامتربدون بعد مثل x که با رابطه $r=a_0\ x$ تعریف می شود جایگزین می کنیم، دراینجا a_0 یک واحد طول طبیعی یعنی همان شعاع بوهراست. دراین صورت رابطه بالا به شکل زیر درمی آید:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu\ a_0^2}\frac{d^2R}{dx^2}-\frac{e^2}{a_0 x}R+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu a_0^2 x^2}R=-|E|R, \tag{10}$$

ویا

$$-\frac{d^2R}{dx^2}-\frac{2\mu\xi e^2}{\hbar^2 x}R+\frac{l(l+1)}{x^2}R=-\frac{2\mu a_0^2}{\hbar^2}|E|R, \tag{11}$$

حال اگر قرار دهیم

$$R(r)=R(a_0x)\equiv\tilde{R}(x), \tag{12}$$

معادله به شکل زیر درمی آید:

$$-\frac{d^2}{dx^2}\tilde{R}(x)-\frac{2}{x}\tilde{R}(x)+\frac{l(l+1)}{x^2}\tilde{R}(x)=-\lambda^2\ \tilde{R}(x), \tag{13}$$

که درآن λ یک پارامتر بدون بعد و برابر است با $\lambda^2=\frac{|E|}{R_y}$.

برای حل معادله 13 نخست به رفتارمجانبی آن برای x های بزرگ نگاه می کنیم. برای x های بزرگ این معادله به شکل زیردرمی آید

$$\frac{d^2\tilde{R}}{dx^2}\approx\lambda^2\ \tilde{R}, \tag{14}$$

که حل آن عبارت است از $\tilde{R}(x)\sim e^{-\lambda x}$. بنابراین حل کامل معادله شعاعی را به صورت

$$\tilde{R}(x)=f(x)e^{-\lambda x} \tag{15}$$

می نویسیم و باجایگذاری آن در 13 به معادله زیرمی رسیم

$$-\frac{d^2f(x)}{dx^2}+2\lambda\frac{d}{dx}f(x)+\left(\frac{l(l+1)}{x^2}-\frac{2}{x}\right)f(x)=0. \tag{16}$$

www.Endbook.net

دراین مرحله می توان بانوشتن $f(x)$ به صورت یک سری به شکل $f(x)=\sum_{k=0}^{\infty}c_k x^{r+k}$ حل کرد که هم مقدار r را بدست خواهد داد و هم یک رابطه تکرار برای ضرایب بسط تولید خواهد کرد. برای r دو جواب بدست می آید که عبارتند از $r=l+1$ و $r=-l$ که دومی منجر به یک تابع موج نابهنجار خواهد شد. بنابراین جواب صحیح برای r برابر با $l+1$ است ورابطه تکرار به شکل زیر خواهد بود:

$$c_{k+1}=\frac{2[\lambda(k+l+1)-1]}{(k+1)[k+2(l+1)]}c_k. \tag{17}$$

رفتار مجانبی این سری با نگاه کردن به این رابطه تکرار برای k های بزرگ بدست می آید که نشان می دهد برای k های بزرگ

$$c_{k+1}\sim\frac{2\lambda}{k}c_k. \tag{18}$$

اما این رابطه بیان می کند که تابع $f(x)$ چنانچه سری ادامه پیدا کند به صورت $e^{2\lambda x}$ رفتار می کند و درنتیجه تابع موج $\tilde{R}(x)$ دربی نهایت واگرا خواهد شد. بنابراین سری $f(x)$ می بایست درجایی قطع شود. برای این کار لازم است که داشته باشیم

$$\lambda=\frac{1}{k_0+l+1}, \tag{19}$$

که درآن $k_0=0,\ 1,\ 2,\ \cdots$ یک عدد صحیح است که بعد از آن چند جمله‌ای قطع می شود. تحت این شرایط سری $f(x)$ تبدیل به یک چند جمله ای

$$f(x)=\sum_{k=0}^{k_0}c_k x^{k+l+1}=x^{l+1}(c_0+c_1x+c_2x^2+\cdots c_{k_0}x^{k_0}) \tag{20}$$

می شود. درنتیجه خواهیم داشت

$$\lambda=\frac{1}{k_0+l+1},\qquad k_0=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots \tag{21}$$

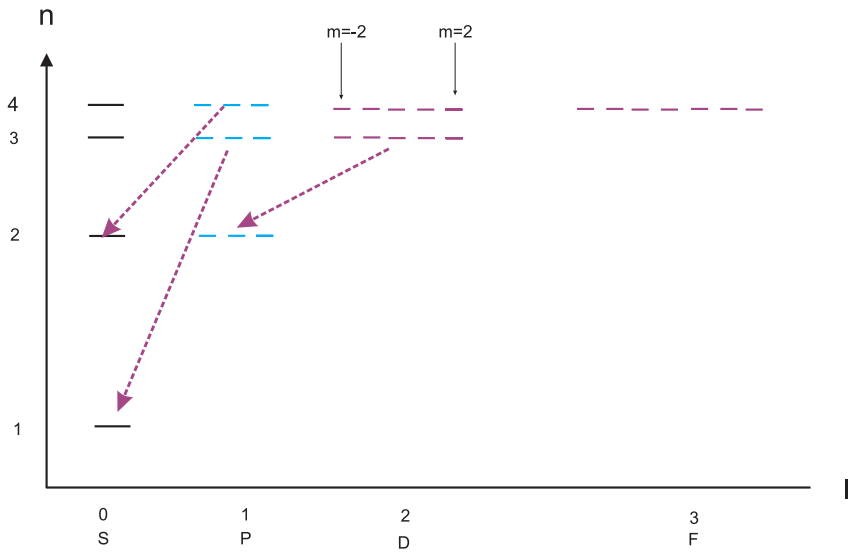
بهتر است که نام k_0+l+1 را به یک عدد صحیح دیگر مثل n که آن را عدد کوانتومی اصلی می نامیم تغییر دهیم. دراین صورت خواهیم داشت

$$\lambda=\frac{1}{n},\qquad n=1,\ 2,\ 3,\ \cdots \tag{22}$$

این رابطه مهمترین رابطه ای است که ازحل معادله دیفرانسیل شعاعی بدست می آوریم و نحوه کوانتش انرژی را دراتم هیدروژن بیان می کند. هرگاه تعریف λ را به یاد بیاوریم به این نتیجه می رسیم که سطوح انرژی الکترون دراتم هیدروژن به صورت زیر هستند:

$$E_n=\frac{-R_y}{n^2},\qquad n=1,\ 2,\ 3,\cdots. \tag{23}$$

www.Endbook.net



شکل ۱: طیف اتم هیدروژن.

ازآنجا که داریم $l = n - 1 - k_0$ و $0 \leq k_0$ بنابراین به ازای هر عدد صحیح n عدد l مقادیر زیر را اختیار می کند:

$$l = 0,\ 1,\ 2,\ \cdot\, n - 1. \tag{24}$$

بنابراین مقدار انرژی تنها به یک عدد کوانتومی یعنی n که عدد کوانتومی اصلی است وابسته است و مستقل از عدد کوانتومی l است. این واگنی ناشی ازیک تقارن اضافی است که برای پتانسیل های $V(r) = \frac{k}{r}$ و $V(r) = kr^2$ برقرار است. شکل ۱ طیف اتم هیدروژن را نشان می دهد. دقت کنید که دراین طیف سه عدد کوانتومی هرحالت را مشخص می کنند. این سه عدد عبارتند از n، l و m، اما انرژی تنها به یکی از این سه عدد یعنی n که آن را عدد کوانتومی اصلی می گوییم بستگی دارد. دراین شکل چند تا از ترازها و هم چنین گذارهایی که بین آنها انجام می شود و باعث ساطع شدن فوتون می شود، رسم شده‌اند. هم چنین برای لایه‌های با l های مختلف از نمادگذاری طیفی که درشیمی و فیزیک اتمی مرسوم است استفاده کرده ایم. دراین نمادگذاری به جای اعداد $l = 0,\ 1,\ 2,\ 3, \cdots$ از حروف $S,\ P,\ D,\ F$ استفاده می شود. در درس های آینده بازهم در باره این نمادگذاری و جزییات آن بیشتر خواهیم گفت.

همانطور که در درس گذشته دیدیم، وابسته نبودن انرژی به عدد کوانتومی m به دلیل تقارن دورانی است، ولی وابسته نبودن انرژی به عدد کوانتومی l ناشی از یک تقارن اضافی است که اصطلاحاً به آن تقارن $SO(4)$ می گویند و خاص پتانسیل های Kr^2 و $\frac{K}{r}$ است.

به تابع موج شعاعی بازمی گردیم. با انتخاب عدد کوانتومی n بجای k_0 تابع $f(x)$ به شکل زیر درمی آید:

$$f(x) = x^{l+1} \sum_{k=0}^{n-l-1} c_k x^k. \tag{25}$$

www.Endbook.net

و رابطه تکرار به صورت زیر خواهد بود:

$$c_{k+1} = \frac{2}{n}\frac{k+l+1-n}{(k+1)(k+2(l+1)}c_k. \tag{26}$$

این رابطه تکرار به عدد کوانتومی l نیز بستگی دارد. بنابراین توابع شعاعی را باید به صورت $f_{n,l}(r) = \frac{R_{n,l}(r)}{r}$ نوشت و درنتیجه شکل کامل توابع موج اتم هیدروژن به صورت زیر خواهد بود:

$$\psi_{n,l,m}(r,\theta,\phi) = \frac{R_{n,l}(r)}{r}Y_{l,m}(\theta,\phi), \qquad E_n = -\frac{R_y}{n^2}. \tag{27}$$

برای آنکه شکل دقیق تابع موج شعاعی را بدست آوریم می بایست رابطه تکرارِ 26 را به کار ببریم. از این رابطه می توان شکل کلی ضرایب را بدست آورد:

$$c_k = \frac{1}{k!}(\frac{2}{n})^k\frac{(l+k-n)!(2l+1)!}{(l-n)!(2l+k+1)!}c_0. \tag{28}$$

ضریب c_0 چنان تعیین می شود که تابع موج شعاعی بهنجارباشد. ازآنجا که تابع موج شعاعی به n و l هردو وابسته است نماد $R_{n,l}$ را برای آن بکار می بریم.

$$\tilde{R}_{n,l}(x) = x^{l+1}f_{n,l}(x)e^{-\frac{x}{n}} \tag{29}$$

و یا

$$\tilde{R}_{n,l}(x) = c_0 e^{-\frac{x}{n}}x^{l+1}\sum_{k=0}^{n-l-1}(\frac{2}{n})^k\frac{1}{k!}\frac{(l+k-n)!(2l+1)!}{(l-n)!(2l+k+1)!}x^k \tag{30}$$

ثابت c_0 را چنان می بایست تعیین کنیم که تابع موج شعاعی بهنجار باشد. این انتخاب را بعداً انجام می دهیم.

بااستفاده از رابطه 12، خواهیم داشت

$$R_{n,l}(r) = (\frac{r}{a_0})^{l+1}f_{n,l}(\frac{r}{a_0})e^{-\frac{r}{na_0}}, \tag{31}$$

www.Endbook.net

و تابع موج کامل عبارت خواهد بود از:

$$\psi_{n,l,m}(r,\theta,\phi) = \frac{1}{r}R_{n,l}(\frac{r}{a_0})Y_{l,m}(\theta,\phi). \tag{32}$$

دراینجا می بایست راجع به بهنجارش توابع موج شعاعی تصمیم بگیریم. می دانیم که

$$\int_0^\infty R_{n,l}^2(r)dr = 1 \tag{33}$$

که به معنای این است که

$$\int_0^\infty \tilde{R}_{n,l}^2(x)a_0 dx = 1, \quad \longrightarrow \quad \int_0^\infty x^{2(l+1)} f_{n,l}(x)e^{-2\frac{x}{n}}dx = \frac{1}{a_0}. \tag{34}$$

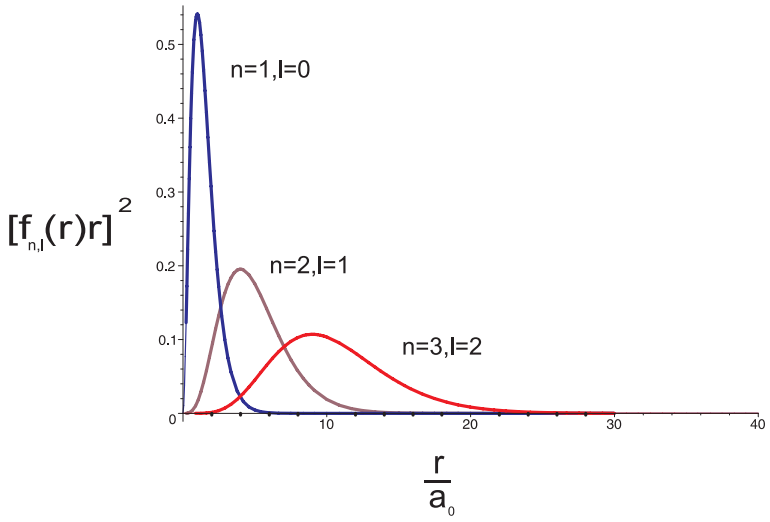
با استفاده از این رابطه می توانیم ضریب c_0 را نیز پیداکنیم. این کار برای توابع موج شعاعی که عدد کوانتومی n آنها کوچک است به سادگی از روی رابطه‌ی 30 انجام می شود. برای اعداد کوانتومی بزرگ تر می بایست از روابطی که برای توابع لاگر می شناسیم کمک بگیریم.

درزیر چند تا از توابع موج شعاعی را می نویسیم.

$$\begin{aligned}
\frac{R_{1,0}}{r} &= 2(\frac{1}{a_0})^{\frac{3}{2}}e^{-r/a_0} \\
\frac{R_{2,0}}{r} &= 2(\frac{1}{2a_0})^{\frac{3}{2}}(1-\frac{r}{2a_0})e^{-r/2a_0} \\
\frac{R_{2,1}}{r} &= \frac{1}{\sqrt{3}}(\frac{1}{2a_0})^{\frac{3}{2}}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0} \\
\frac{R_{3,0}}{r} &= 2(\frac{1}{3a_0})^{\frac{3}{2}}\left[1-\frac{2r}{3a_0}+\frac{2r^2}{27a_0^2}\right]e^{-r/3a_0} \\
\frac{R_{3,1}}{r} &= \frac{4\sqrt{2}}{9}(\frac{1}{3a_0})^{\frac{3}{2}}\frac{r}{a_0}(1-\frac{r}{6a_0})e^{-r/3a_0} \\
\frac{R_{3,2}}{r} &= \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}}(\frac{1}{3a_0})^{\frac{3}{2}}(\frac{r}{a_0})^2e^{-r/3a_0}.
\end{aligned} \tag{35}$$

شکل های ۲ و ۳ چندتا از توابع شعاعی را نشان می دهند. به این نکته دقت کنید که تعداد ماکزیمم های یک تابع شعاعی $R_{n,l}$ برابر است با $n-l$. هم چنین به این نکته دقت کنید که با افزایش n یعنی عدد کوانتومی اصلی، شعاع متوسط افزایش می

www.Endbook.net



شکل ۲: چند تابع موج شعاعی برای اتم هیدروژن .

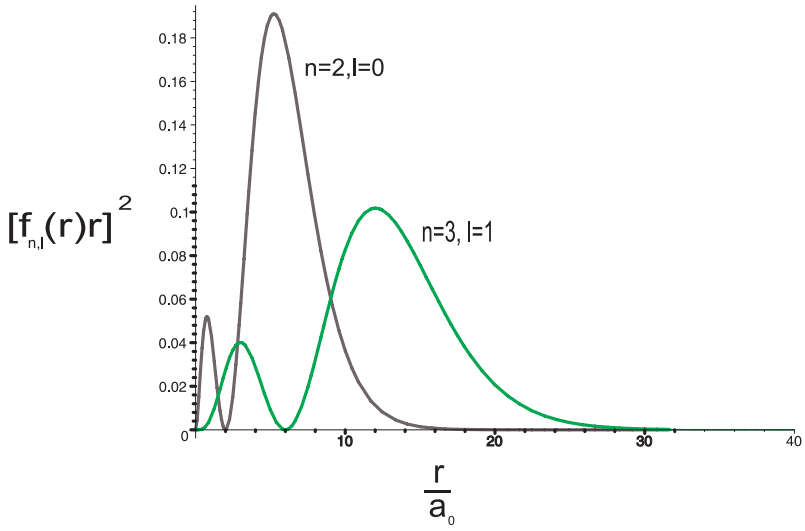
یابد.

توابع $R_{n,l}(r)$ برحسب چند توابع وابسته لاگر $Associated\ \ Laguerre\ \ Laguerre$ که مجموعه ای از توابع متعامد هستند قابل بیان هستند. (برای فهم بهتر خواص این توابع به یک کتاب ریاضی فیزیک رجوع کنید.) بااستفاده از این ارتباط می توان متوسط توان های r را برای توابع موج حساب کرد. (ضمیمه شماره ۱). درزیر چند تاازاین متوسط هارا که درآینده به آنها احتیاج داریم می نویسیم:

$$\begin{aligned}
\langle r\rangle &= \frac{a_0}{2}\left[3n^2 - l(l+1)\right] \\
\langle r^2\rangle &= \frac{a_0^2 n^2}{2}\left[5n^2 + 1 - 3l(l+1)\right] \\
\langle \frac{1}{r}\rangle &= \frac{1}{a_0 n^2} \\
\langle \frac{1}{r^2}\rangle &= \frac{1}{a_0^2 n^3 (l+\frac{1}{2})}.
\end{aligned} \tag{36}$$

به این نکته دقت کنید که متوسط فاصله از مرکزیعنی $\langle r\rangle$ که در مدل اتمی بوهر شعاع یک مدار دایره‌ای بود، بازهم به صورت مجذور عدد کوانتومی اصلی یعنی n افزایش می یابد، ولی این بار عدد کوانتومی l نیز در آن سهیم است.

www.Endbook.net



شکل ۳: چند تابع موج شعاعی برای اتم هیدروژن.

۱.۲ تاثیرجرم محدود هسته

تاکنون فرض کردیم که هسته کاملاً ساکن است ودرواقع جرم آن بی نهایت است. دراین بخش تاثیرجرم محدود هسته را مطالعه می کنیم. درواقع می بایست اتم هیدروژن را به عنوان یک مسئله دوجسمی درنظربگیریم که هامیلتونی آن به شکل زیراست

$$H = \frac{P_1^2}{2M_1} + \frac{P_2^2}{2M_2} - \frac{e^2}{|\vec{R}_2 - \vec{R}_1|} \tag{37}$$

که درآن $\vec{R}_2$ و $\vec{P}_2$ مکان و تکانه هسته و $\vec{R}_1$ و $\vec{P}_1$ مکان و تکانه الکترون را نشان می دهند. M_2 جرم هسته و $M_1 << M_2$ جرم الکترون است. حال متغیرهای جدیدی به شکل زیرتعریف می کنیم:

$$\begin{aligned} \vec{r} &:= \vec{R}_1 - \vec{R}_2, \qquad & \vec{R} &:= \frac{M_1\vec{R}_1 + M_2\vec{R}_2}{M_1 + M_2} \\ \vec{p} &:= \frac{M_2\vec{P}_1 - M_1\vec{P}_2}{M_2 + M_1}, \qquad & \vec{P} &:= \vec{P}_1 + \vec{P}_2. \end{aligned} \tag{38}$$

خواننده می تواند براحتی تحقیق کند که متغیرهای جدید نیزکانونیک هستند یعنی

$$[X_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}, \qquad [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}, \tag{39}$$

وبقیه روابط جابجایی برابرصفرهستند. ازنظرفیزیکی $\vec{r}$ مکان الکترون نسبت به هسته و $\vec{R}$ مکان مرکزجرم الکترون وهسته را نشان می دهد. ازآنجا که هسته خیلی سنگین تراز الکترون است مکان مرکز جرم تفاوت بسیارکمی با مکان هسته دارد. هم

www.Endbook.net

چنین $\vec{P}$ تکانه کل و $\vec{p}$ یک نوع تکانه نسبی الکترون نسبت به هسته رانشان می دهد. درواقع اگربه یاد بیاوریم که $\vec{P_1} = M_1\vec{v_1}$ و $\vec{P_2} = M_2\vec{v_2}$، آنگاه معلوم می شود که $\vec{p} = \mu(\vec{v_1} - \vec{v_2})$ که درآن μ جرم کاهش یافته است که مطابق با تعریف برابراست با

$$\mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}. \tag{40}$$

ازآنجا که $M_1 << M_2$ جرم کاهش یافته تنهااندکی از جرم الکترون یعنی M_1 کمتراست. حال می توانیم هامیلتونی را برحسب متغیرهای جدید بنویسیم. یک محاسبه ساده نشان می دهد که هامیلتونی برحسب متغیرهای جدید برابراست با

$$H = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r} \tag{41}$$

که درآن $M = M_1 + M_2$ جرم کل و μ جرم کاهش یافته است. بدین ترتیب هامیلتونی مجموع دو هامیلتونی است که باهم جابجامی شوند ودردرسهای گذشته دیده ایم که ویژه توابع انرژی دراین حالت برابرند با حاصلضرب ویژه توابع هامیلتونی های جداگانه و ویژه مقادیر انرژی نیز عبارتند ازمجموع ویژه انرژی ها. اما هامیلتونی $\frac{P^2}{2M}$ هامیلتونی یک ذره آزاد است که ویژه توابع آن امواج تخت هستند. بنابراین شکل کامل ویژه حالت ها برای وقتی که جرم واقعی هسته و امکان حرکت آن را نیز در نظر می گیریم به صورت زیراست:

$$\Psi_{P,n,l,m}(R,r) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}P\cdot R}\psi_{n,l,m}(r,\theta,\phi). \tag{42}$$

دراین رابطه R مکان مرکز جرم (که تقریبا بر مکان هسته منطبق است)، P تکانه مرکز جرم و r فاصله الکترون تا هسته است. این رابطه بیان می کند که همچنان که مرکز جرم یا هسته حرکت آزاد خود را ادامه می دهند، مثلاً دریک گاز هیدروژن، الکترون درون اتم در اوربیتال های مجاز و با انرژی های گسسته قرار دارد. این انرژی ها درست همان هایی است که برای یک اتم هیدروژن ایده‌آل بدست آوردیم با این تفاوت که می بایست در روابط مربوطه، مثلاً در ثابت رایدبرگ، جرم الکترون را با جرم کاهش یافته جایگزین کرد.

۳ ضمیمه ۱

دراین ضمیمه بعضی از انتگرال های شعاعی را محاسبه می کنیم. هدف ما محاسبه متوسط عمومی زیراست:

$$\langle R^q \rangle_{n,l,m} = \int_0^\infty r^{q+2} |R_{n,l}(r)|^2 dr. \tag{43}$$

توابع موج شعاعی برای اتم هیدروژن همگی به صورت $P(r)e^{-pr/a_0}$ هستند که درآن $P(r)$ یک چند جمله‌ای و p یک عدد صحیح است. بنابراین کافی است که مقداریک انتگرال کلی به شکل زیر را حساب کنیم:

$$I(k,p) = \int_0^\infty r^k e^{-pr/a_0} dr, \tag{44}$$

www.Endbook.net

که درآن k و p اعداد صحیح هستند. فرض می کنیم که $k \geq 0$، یعنی $q \geq -2$. با انتگرال گیری جزء به جزء رابطه تکرارِ زیر را بدست می آوریم:

$$\begin{aligned} I(k,p) &= \left[-\frac{a_0}{p}e^{-pr/a_0}r^k\right]_0^\infty + \frac{ka_0}{p}\int_0^\infty r^{k-1}e^{-pr/a_0}dr \\ &= \frac{ka_0}{p}I(k-1,p). \end{aligned} \tag{45}$$

اما $I(0,p)$ به سادگی به دست می آید:

$$I(0,p) = \int_0^\infty e^{-pr/a_0}dr = \frac{a_0}{p}. \tag{46}$$

در نتیجه رابطه کلی زیر بدست می آید:

$$I(k,p) = k!\left(\frac{a_0}{p}\right)^{k+1}. \tag{47}$$

با استفاده از این رابطه خواهیم داشت:

$$\langle 1/R\rangle_{1s} = \frac{4}{a_0^3}\int_0^\infty re^{-2r/a_0}dr = \frac{4}{a_0^3}I(1,2) = \frac{1}{a_0}, \tag{48}$$

$$\begin{aligned} \langle 1/R\rangle_{2s} &= \frac{4}{8a_0^3}\int_0^\infty r\left[1-\frac{r}{2a_0}\right]^2 e^{-r/a_0}dr \\ &= \frac{1}{2a_0^3}\left[I(1,1) - \frac{1}{a_0}I(2,1) + \frac{1}{4a_0^2}I(3,1)\right] \\ &= \frac{1}{4a_0}. \end{aligned} \tag{49}$$

چند انتگرال مفید دیگر باهمین روش محاسبه می شوند:

$$\begin{aligned} \langle 1/R\rangle_{2p} &= \frac{1}{4a_0}, \\ \langle 1/R^2\rangle_{1s} &= \frac{2}{a_0^2}, \\ \langle 1/R^2\rangle_{2s} &= \frac{1}{4a_0^2}, \\ \langle 1/R^2\rangle_{2p} &= \frac{1}{12a_0^2}. \end{aligned} \tag{50}$$

www.Endbook.net

درس چهاردهم : جمع اندازه حرکت زاویه ای

۱ مقدمه

فرض کنید که یک ذره اندازه حرکت خطی $\vec{p}_1$ و ذره دیگر اندازه حرکت خطیِ $\vec{p}_2$ دارد. می پرسیم اندازه حرکت خطی کل برای این دوذره چقدراست ؟ پاسخ این سوال درمکانیک کلاسیک ساده است. اندازه حرکت کل جمع برداری اندازه حرکت های تک تک ذرات است یعنی $\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2$. حال سعی می کنیم درچارچوب مکانیک کوانتومی به این سوال پاسخ دهیم. تاکنون ما به مشاهده پذیرهای یک ذره مثل تکانه یا مکان عملگرهای هرمیتی نسبت داده ایم. برای این کارازاصل تناظردیراک استفاده کرده ایم و تقاضاکرده ایم که این عملگرها دررابطه $[X, P] = i\hbar$ صدق کنند. حال می خواهیم به تکانه هاو مکان های دو یا چند ذره عملگرهای هرمیتی نسبت دهیم. برای سادگی خود را به یک بعد و دو ذره محدود می کنیم. تعمیم نتایج به چند ذره و ابعاد دلخواه ساده خواهد بود. مکان این ذرات را با x_1 و x_2 و تکانه های آنها را با p_1 و p_2 نشان می دهیم. ازآنجا که درمکانیک کلاسیک روابط زیربرقرارهستند

$$\begin{aligned} &\{x_1, x_2\} = \{p_1, p_2\} = \{x_1, p_2\} = \{x_2, p_1\} = 0 \\ &\{x_1, p_1\} = \{x_2, p_2\} = 1 \end{aligned} \tag{1}$$

عملگرهایی که به این مشاهده پذیرها نسبت می دهیم می بایست درروابط زیرصدق کنند:

$$\begin{aligned} &[X_1, X_2] = [P_1, P_2] = [X_1, P_2] = [X_2, P_1] = 0 \\ &[X_1, P_1] = [X_2, P_2] = i\hbar. \end{aligned} \tag{2}$$

یک بارکه عملگرهای X و P را با رابطهٔ $[X, P] = i\hbar$ وفضای هیلبرتی که این رابطه درآن نمایش داده می شود ساخته باشیم می توانیم بسادگی عملگرهای بالا و فضای هیلبرتی که روی آن عمل می کنند بسازیم. برای این کارکافی است که ازضرب تانسوری فضاهای برداری استفاده کنیم و تعریف کنیم

$$\begin{aligned} X_1 &= X \otimes I, \qquad & X_2 &= I \otimes X, \\ P_1 &= P \otimes I, \qquad & P_2 &= I \otimes P. \end{aligned} \tag{3}$$

بااستفاده از خواص ضرب تانسوری عملگرهابراحتی دیده می شود که بااین تعریف روابط جابجایی صحیح بین این مشاهده پذیرها برقرارمی شود. عملگرتکانه خطی کل نیز به صورت زیر تعریف می شود:

$$P := P_1 + P_2 = P \otimes I + I \otimes P. \tag{4}$$

www.Endbook.net

ازآنجا که $[P_1, P_2] = 0$ می توان حالت هایی را یافت که ویژه حالت مشترک هردو عملگرباشند که معنای فیزیکی این حالت ها آن است که درآنها تکانه خطی هردوذره معین است. این حالت ها عبارت اند از

$$|p_1, p_2\rangle = |p_1\rangle \otimes |p_2\rangle. \tag{5}$$

باتوجه به روابط 40 واضح است که

$$P_1|p_1, p_2\rangle = p_1|p_1, p_2\rangle, \qquad P_2|p_1, p_2\rangle = p_2|p_1, p_2\rangle, \qquad P|p_1, p_2\rangle = (p_1 + p_2)|p_1, p_2\rangle \tag{6}$$

بنابراین حالت $|p_1, p_2\rangle := |p_1\rangle \otimes |p_2\rangle$، حالتی است که تکانه زاویه ای کل آن برای دو ذره مقدارمشخصی دارد و برابراست با $p_1 + p_2$.
حال همین روش رابرای تکانه زاویه ای به کارمی بریم. نخست عملگرهای تکانه زاویه کل را می بایست تعریف کنیم. می دانیم که تکانه زاویه ای هرکدام از دوذره به شکل زیرتعریف می شود:

$$\vec{J}_1 := \vec{J} \otimes I, \qquad \vec{J}_2 := I \otimes \vec{J}, \tag{7}$$

بنابراین تکانه زاویه ای کل برای دوذره که آن را با نماد $\vec{\mathcal{J}}$ نشان خواهیم داد برابر است با

$$\vec{\mathcal{J}} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2 = \vec{J} \otimes I + I \otimes \vec{J}. \tag{8}$$

این رابطه به این معناست که

$$\mathcal{J}_x = J_{1x} + J_{2x}, \qquad \mathcal{J}_y = J_{1y} + J_{2y}, \qquad \mathcal{J}_z = J_{1z} + J_{2z}, \tag{9}$$

یا

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_x &= J_x \otimes I + I \otimes J_x, \\ \mathcal{J}_y &= J_y \otimes I + I \otimes J_y, \\ \mathcal{J}_z &= J_z \otimes I + I \otimes J_z. \end{aligned} \tag{10}$$

براحتی نشان داده می شود که مولفه های تکانه زاویه ای کل در روابط زیرصدق می کنند:

$$[\mathcal{J}_a, \mathcal{J}_b] = i\hbar\epsilon_{abc}\mathcal{J}_c. \tag{11}$$

www.Endbook.net

این رابطه به این معناست که عملگرهای $\mathcal{J}_x$، $\mathcal{J}_y$ و $\mathcal{J}_z$ واقعاً عملگر تکانه زاویه ای هستند زیرا درروابط جابجایی تعریف کننده مربوط به مشاهده پذیر های تکانه زاویه ای صدق می کنند.

هم چنین اندازه تکانه زاویه ای کل برابراست با

$$\mathcal{J}^2 = \mathcal{J}_a \mathcal{J}_a, \tag{12}$$

که باهمه مولفه های تکانه زاویه ای کل جابجامی شود یعنی $[\mathcal{J}^2, \mathcal{J}_a] = 0$. اما مهم است که دقت کنید

$$\mathcal{J}^2 \neq J_1^2 + J_2^2$$

و همین موضوع است که دردسرساز است. در واقع با توجه به رابطه (10) داریم

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}^2 &= (J_x \otimes I + I \otimes J_x)^2 + (J_y \otimes I + I \otimes J_y)^2 + (J_z \otimes I + I \otimes J_z)^2 \\
&= (J_x^2 + J_y^2 + J_z^2) \otimes I + I \otimes (J_x^2 + J_y^2 + J_z^2) + 2(J_x \otimes J_x + J_y \otimes J_y + J_z \otimes J_z) \\
&= J^2 \otimes I + I \otimes J^2 + 2(J_x \otimes J_x + J_y \otimes J_y + J_z \otimes J_z) \\
&= J_1^2 + J_2^2 + 2J_{1x}J_{2x} + 2J_{1y}J_{2y} + 2J_{1z}J_{2z} \\
&= J_1^2 + J_2^2 + 2\vec{J}_1 \cdot \vec{J}_2.
\end{aligned} \tag{13}$$

برای محاسبات آینده توجه به یک نکته مهم است و آن اینکه عملگر $\vec{J}_1 \cdot \vec{J}_2$ را به دو صورت می توانیم بنویسیم. با توجه به تعاریف $J_+ := J_x + iJ_y$ و $J_- := J_x - iJ_y$ می توانیم بنویسیم:

$$\vec{J}_1 \cdot \vec{J}_2 = J_{1x}J_{2x} + J_{1y}J_{2y} + J_{1z}J_{2z} \tag{14}$$

و یا

$$\vec{J}_1 \cdot \vec{J}_2 = \frac{1}{2}(J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+}) + J_{1z}J_{2z}. \tag{15}$$

در محاسبات آینده از این رابطه‌ها استفاده می کنیم.

حال سوال می کنیم که حالتی که تکانه زاویه ای کل برای دو ذره مشخص باشد کدام حالت است؟ بیایید این کار را برای ساده ترین حالت انجام دهیم. قبل از ادامه بحث بهتراست به نکته ای درباره نمادگذاری اشاره کنیم و آن این است که تکانه زاویه ای کل را با $\vec{J}$ یا $\vec{J}$ نمایش می دهیم ولی معمولاً تکانه زاویه ای مربوط به ذرات اسپین $\frac{1}{2}$ را همواره با $\vec{S}$ نمایش می دهیم.

www.Endbook.net

۲ جمع تکانه زاویه ای برای دو ذره اسپین ۱/۲

دو ذره اسپین ۱/۲ درنظر می گیریم. برای هرکدام ازاین دوذره داریم

$$\begin{aligned} S_z|+\rangle &= \frac{1}{2}|+\rangle, \qquad S_+|+\rangle = 0, \qquad S_-|+\rangle = |-\rangle \\ S_z|-\rangle &= -\frac{1}{2}|-\rangle, \qquad S_+|-\rangle = |+\rangle, \qquad S_-|-\rangle = 0. \end{aligned} \tag{16}$$

حالت های $|+\rangle$ و $|-\rangle$ به ترتیب نمادهای خلاصه‌ای هستند برای $|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle$ و $|\frac{1}{2},\frac{-1}{2}\rangle$. حال حالت های چهارگانه زیر را درنظر می گیریم

$$\begin{aligned} &|+,+\rangle \\ &|+,-\rangle \\ &|-,+\rangle \\ &|-,-\rangle. \end{aligned} \tag{17}$$

ازخود سوال می کنیم که آیاتکانه زاویه ای کل این حالت ها مقدارمشخصی است؟ آیا این حالت ها ویژه بردارهای مشترک J_z و J^2 هستند؟ برای پاسخ به این سوال دقت می کنیم که عملگر تکانه زاویه ای کل برای این دوذره به شکل زیر تعریف می شود:

$$\begin{aligned} J_z &= S_{1z} + S_{2z} \\ J^2 &= (S_1 + S_2)^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2S_1 \cdot S_2. \end{aligned} \tag{18}$$

عملگر $\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$ را برای محاسبات آینده بهتراست به شکل زیربنویسیم:

$$S_1 \cdot S_2 = S_{1z}S_{2z} + 2S_{1+}S_{2-} + 2S_{1-}S_{2+}. \tag{19}$$

درنتیجه خواهیم داشت

$$J^2 = \frac{3}{2} + 2S_{1z}S_{2z} + 4S_{1+}S_{2-} + 4S_{1-}S_{2+}. \tag{20}$$

براحتی معلوم می شود که حالت های چهارگانه 17 مولفه سوم تکانه زاویه ای مشخصی دارند یعنی

$$\begin{aligned} J_z|+,+\rangle &= |+,+\rangle \\ J_z|+,-\rangle &= 0 \end{aligned}$$

www.Endbook.net

$$J_z|-,+\rangle = 0$$
$$J_z|-,-\rangle = -|-,-\rangle. \tag{21}$$

برای اینکه ببینیم آیا اندازه تکانه زاویه ای کل این حالت ها نیز مشخص است یا نه عملگر J^2 را روی آنها اثر می دهیم. با توجه به روابط 18 و 19 بدست می آوریم

$$J^2|+,+\rangle = 2|+,+\rangle$$
$$J^2|+,-\rangle = |+,-\rangle + |-,+\rangle$$
$$J^2|-,+\rangle = |-,+\rangle + |+,-\rangle$$
$$J^2|-,-\rangle = 2|-,-\rangle. \tag{22}$$

بنابراین اگر چه حالت های $|+,+\rangle$ و $|-,-\rangle$ اندازه تکانه زاویه ای مشخصی دارند حالت های $|+,-\rangle$ و $|-,+\rangle$ چنین نیستند. اما می توان ترکیب جدیدی از این دوحالت چنان درست کرد که خاصیت گفته شده را داشته باشند. از روابط بالا این ترکیب جدید مشخص می شود که به صورت دو حالت $\frac{1}{\sqrt{2}}(|+,-\rangle + |-,+\rangle)$ خواهند بود. بنابراین بجای چهارحالت فوق می توان یک دسته سه تایی و یک دسته یک تایی ساخت که ویژه مقدارهای J^2 و J_z آنها مشخص باشد. هرگاه این ویژه بردارهارا با $|j,m\rangle$ نشان دهیم این حالت ها عبارتند از:

$$|1,1\rangle = |+,+\rangle$$
$$|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+,-\rangle + |-,+\rangle)$$
$$|1,-1\rangle = |-,-\rangle \tag{23}$$

و

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+,-\rangle - |-,+\rangle). \tag{24}$$

نکته مهم آن است که دسته سه تایی که آن را اصطلاحاً $Triplet$ می گوییم یک نمایش اسپین 1 از جبر تکانه زاویه ای تشکیل می دهد به این معنا که عمل گر های J_z و $J_\pm$ این حالت ها را درست مثل حالت های یک نمایش اسپین 1 به هم تبدیل می کند. دسته یک تایی نیز که اصطلاحاً آن را $Singlet$ می گوییم یک نمایش اسپین صفر ازجبر تکانه زاویه ای تشکیل می دهد. کاری که انجام داده ایم ازنظر ریاضی تجزیه حاصلضرب تانسوری دو نمایش اسپین $1/2$ به جمع دو نمایش اسپین 1 و 0 نامیده می شود. به همین دلیل است که می نویسیم

$$\frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} = 0 \oplus 1. \tag{25}$$

www.Endbook.net

۳ جمع دو تکانه زاویه ای دلخواه

آنچه را که دربخش گذشته گفتیم می توانیم به جمع دو تکانه زاویه ای دلخواه تعمیم دهیم. حالتی مثل $|j_1, m_1, ; j_2, m_2\rangle := |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$ را درنظربگیرید. وقتی که دو ذره دراین حالت هستند تکانه زاویه ای هرکدام ازآنها به تنهایی معین است. به عبارت دیگر این حالت ویژه حالتِ مشترک چهارعملگر $J_1^2, J_{1,z}, J_2^2, J_{2z}$ است. درنتیجه دراین حالت اندازه تکانه زاویه ای هردو ذره و هم چنین مولفه سوم تکانه زاویه ای هردوی آنها معین است. این حالت ها یک پایه برای حالت های هردو ذره تشکیل می دهند. حال سوال می کنیم که آیا دراین حالت تکانه زاویه ای کل دوذره نیز مقدارمعینی دارد؟ به عبارت دیگر آیا این حالت ویژه بردارِ J^2 و یا J_z نیزهست یا نه ؟ ازآنجا که $J_z = J_{1z} + J_{2z}$ بسادگی می فهمیم که

$$J_z|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle = (m_1 + m_2)|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle, \tag{26}$$

یعنی دراین حالت مولفه سوم تکانه زاویه ای کل نیزمقدارمعینی دارد و برابراست با مجموع مولفه های سوم تکانه های زاویه ای برای تک تک ذرات. اما یک محاسبه ساده واستفاده از رابطه

$$J^2 = J_1^2 + J_2^2 + 2J_{1z}J_{2z} + 4J_{1+}J_{2-} + 4J_{1-}J_{2+} \tag{27}$$

نشان می دهد که این حالت ویژه بردار عملگر J^2 نیست وبنابراین دراین حالت اندازه تکانه زاویه ای کل مقدارمشخصی ندارد. ازخود می پرسیم آیا می توان حالت هایی را یافت که درآنها تکانه زاوایه کل دوذره و مولفه سوم تکانه زاویه ای کل معلوم باشد؟ به عبارت بهترمی پرسیم که ویژه بردارهای دو عملگرِ J^2 و J_z کدامند؟ و چه ربطی به حالت های $|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle$ دارند؟ مسلم است که می توان این دوعملگررا دریک پایه قطری کرد وحالت های مزبور را به صورت یک بسط از پایه قبلی یعنی حالت های $|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle$ نوشت. اما می توانیم مسئله را باسادگی بیشتری حل کنیم اگرتوجه کنیم که دو عملگر دیگروجود دارند که با J^2 و J_z جابجامی شوند. این دوعملگر عبارتند از J_1^2 و J_2^2. تحقیق درستی این مطلب را به خواننده واگذارمی کنیم. این موضوع مثل همیشه باعث می شود که ما بهتربتوانیم طیف عملگرها را پیداکنیم. حال باید به دنبال ویژه حالت های مشترک چهارعملگرباشیم که همه با هم جابجامی شوند که عبارتنداز

$$J^2, \qquad J_z, \qquad J_1^2, \qquad J_2^2. \tag{28}$$

این ویژه حالت ها را به شکل $|j, m; j_1, j_2\rangle$ می نویسیم. این حالت ها چنان اند که روابط زیر برقرارخواهند بود:

$$\begin{aligned}
J^2|j, m; j_1, j_2\rangle &= j(j+1)|j, m; j_1, j_2\rangle, \\
J_z|j, m; j_1, j_2\rangle &= m|j, m; j_1, j_2\rangle, \\
J_1^2|j, m; j_1, j_2\rangle &= j_1(j_1+1)|j, m; j_1, j_2\rangle, \\
J_2^2|j, m; j_1, j_2\rangle &= j_2(j_2+1)|j, m; j_1, j_2\rangle.
\end{aligned} \tag{29}$$

می توان این حالت ها را برحسب حالت های $|j_1, m_2; j_2, m_2\rangle$ بسط داد. این بسط را به شکل کلی زیر می توان نوشت:

$$|j, m; j_1, j_2\rangle = \sum_{m_1, m_2} C(j, m; j_1, j_2, m_1, m_2)|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle. \tag{30}$$

www.Endbook.net

ضرایب $C(j,m;j_1,j_2,m_1,m_2)$ ضرایب $Clebsh-Gordon$ نامیده می شوند.

ازآنجا که پایه $\{|j_1,m_1;j_2,m_2\rangle\}$ و $\{|j,m;j_1,j_2\rangle\}$ هردو کامل و متعامد هستند داریم

$$\sum_{m_1,m_2} |j_1,m_1;j_2,m_2\rangle\langle j_1,m_1;j_2,m_2| = I, \tag{31}$$

و

$$\sum_{j,m} |j,m;j_1,j_2\rangle\langle j,m;j_1,j_2| = I. \tag{32}$$

بنابراین بسط 30 را به شکل زیرنیز می توان نوشت

$$|j,m;j_1,j_2\rangle = \sum_{j_1,j_2,m_1,m_2} |j_1,m_1;j_2,m_2\rangle\langle j_1,m_1;j_2,m_2|j,m;j_1,j_2\rangle, \tag{33}$$

این رابطه درواقع بیان می کند که ضرایب $Glebsh\ Gordon$ عبارتند از ضرایب تغییرپایه، یعنی:

$$C(j,m;j_1,j_2,m_1,m_2) = \langle j_1,m_1;j_2,m_2|j,m;j_1,j_2\rangle. \tag{34}$$

این رابطه به ما اجازه می دهد که قیود معینی را روی این ضرایب بدست آوریم. به عنوان اولین قید بدست می آوریم که یک ضریب ِکلبش—گوردون تنها وقتی غیر صفر است که شرط $m = m_1 + m_2$ برقرار باشد. برای این کار کافی است که عنصر ماتریسی عملگر $J_z = J_{1z} + J_{2z}$ را حساب کنیم. داریم:

$$\langle j_1,m_1;j_2,m_2|J_z - J_{1z} - J_{2z}|j,m;j_1,j_2\rangle = [m-(m_1+m_2)]\langle j_1,m_1;j_2,m_2|J_z - J_{1z} - J_{2z}|j,m;j_1,j_2\rangle \tag{35}$$

بنابراین وقتی که m برابر با $m_1 + m_2$ نباشد، ضریب کلبش — گوردون برابر با صفر می شود. شرط دوم در قضیه زیر بیان می شود. اثبات این قضیه ساده است و در ضمیمه این درس آمده است.

قضیه: هرگاه تکانه زاویه ای j_1 را با تکانه زاویه‌ای j_2 جمع کنیم، تکانه زاویه‌ای کل که آن را با j نمایش می دهیم هرکدام از مقادیر $\{j_1+j_2,\ j_1+j_2-1,\ j_1+j_2-2,\cdots|j_1-j_2|\}$ را اختیار کند.

۴ جمع تکانه زاویه ای از دیدگاه نمایش ها

می دانیم که عملگرهای $J_1,\ J_2,\ J_3$ یا $J_x,\ J_y,\ J_z$ مولدهای گروه دوران هستند. این عملگرها در یک رابطه جابجایی یعنی رابطه

$$[J_a, J_b] = i\epsilon_{abc}J_c \tag{36}$$

www.Endbook.net

صدق می کنند. اصطلاحاً می گوییم که این روابط، یک جبر تعریف می کنند. دراین بخش می خواهیم معنای جمع تکانه زاویه‌ای را از این نقطه نظر بفهمیم.

در درس های گذشته دیدیم که نمایش های یکانی این جبر همگی محدود بعد هستند و هر نمایش با یک عدد صحیح یا نیمه صحیح که آن را با j نمایش می دادیم، مشخص می شود. وقتی می گوییم که یک نمایش محدودبعد و یکانیِ اسپین—j از این جبر پیدا کرده ایم، یعنی این که یک فضای برداری محدود بعد مثل V_j پیدا کرده ایم و توانسته ایم درآن فضا به این مولدها عملگرهایی یا ماتریس هایی نسبت دهیم که همان رابطه جابجایی بالا را بین خود داشته باشند. بنابراین اگر به مولدِ J_a ماتریسِ $D(J_a)$ را نسبت داده باشیم، آنگاه این روابط در یک نمایش برقرارهستند:

$$[D(J_a), D(J_b)] = i\epsilon_{abc}D(J_c). \tag{37}$$

دقت کنید که این ماتریس ها، یا عملگرها روی فضای $2j+1$ بعدی V_j عمل می کنند. هرگاه بردارهای پایه‌ی V_j را با $|j,m\rangle$ نمایش دهیم، آنگاه عملگرهای $D(J_a)$ این بردارهای پایه را طبق قاعده مشخصی به هم تبدیل می کنند. این قاعده مشخص را در درس مربوط به تکانه زاویه‌ای پیدا کردیم به این معنا که:

$$\begin{aligned} D(J_z)|j,m\rangle &= m|j,m\rangle \\ D(J_+)|j,m\rangle &= \sqrt{j(j+1)-m(m+1)}|j,m+1\rangle \\ D(J_-)|j,m\rangle &= \sqrt{j(j+1)-m(m-1)}|j,m-1\rangle. \end{aligned} \tag{38}$$

البته معمولاً با تسامح از نوشتن علامت D صرف نظر کرده‌ایم ولی نوشتن این علامت در بحث های نظری مهم است زیرا باید تاکید کنیم که یک جبر معین وجود دارد که می تواند نمایش های متعدد و باابعاد متفاوت داشته باشد. کاهش ناپذیر بودن یک نمایش به این معناست که حالت های پایه فضای V_j را نمی توان به دو گروه جداگانه تقسیم کرد به قسمی که هر گروه جداگانه تحت تاثیر عملگرها به عناصری از همان گروه تبدیل شوند. به عبارت بهتر وقتی به ماتریس های نمایش نگاه می کنیم، این ماتریس ها بلوکه قطری نیستند. حال فرض کنید که دو نمایش D و D' روی فضاهای V و V' از جبرتکانه‌ی زاویه‌ای دراختیار داریم. از آنجا که D و D' هردو نمایش هستند داریم

$$[D(J_a), D(J_b)] = i\epsilon_{abc}D(J_c), \qquad [D'(J_a), D'(J_b)] = i\epsilon_{abc}D'(J_c), \tag{39}$$

حال می توانیم یک نمایش بزرگ تر روی فضای $V \otimes V'$ به شکل زیر بسازیم:

$$\mathcal{D}(J_a) := D(J_a) \otimes I + I \otimes D'(J_a). \tag{40}$$

دانشجو می تواند براحتی تحقیق کند که $\mathcal{D}$ واقعاً یک نمایش است. این نمایش جدید را ضرب تانسوری دو نمایشِ D و D' می خوانیم. نکته مهم آن است که حتی اگر نمایش های D و D' کاهش ناپذیرباشند، ضرب تانسوری آنها عموماً کاهش پذیراست. حال مطالب گفته شده را که در مورد هر جبر و هر نمایشی صادق بود به جبر تکانه زاویه‌ای و نمایش های کاهش ناپذیر آن تخصیص می دهیم. نمایش اسپین j_1 را با D_{j_1} نمایش می دهیم و نمایش اسپین j_2 را با D_{j_2}. فضاهای این دو نمایش را با V_{j_1} و V_{j_2} نشان می دهیم و پایه های آنها را با $\{|j_1,m_1\rangle\}$ و $\{|j_2,m_2\rangle\}$. دراین صورت حالت های

www.Endbook.net

$\{|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle := |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle\}$ تشکیل یک پایه برای فضای $V_{j_1} \otimes V_{j_2}$ تشکیل می دهند. این پایه نمایش حاصل ضرب که آن را با $\mathcal{D}_{j_1 \otimes j_2}$ نشان می دهیم و ماتریس های آن مطابق با رابطه‌ی 40 تعریف شده‌اند، حمل می کنند، به این معنا که این پایه ها تحت اثر ماتریس های $\mathcal{D}(J_a) := D(J_a) \otimes I + I \otimes D'(J_a)$ به هم تبدیل می شوند. ولی نمایش بدست آمده یک نمایش کاهش پذیراست و می توان با یک تبدیل پایه آن را بلوکه قطری کرد. تبدیل پایه ای که این کار را انجام می دهد همانی است که توسط ضرایب کلبش – گوردون تشکیل می شود. دراین پایه جدید تمام ماتریس های نمایش بلوکه قطری می شوند. این که حاصل ضرب دو نمایش فوق به چه نمایش هایی تجزیه می شود، پاسخ اش توسطقضیه زیر داده می شود. اثبات این قضیه در ضمیمه‌ی این فصل آمده است.

قضیه: حاصلضرب دو نمایش j_1 و j_2 ازتکانه زاویه ای به نمایش های کاهش ناپذیر زیر تجزیه می شود:

$$\mathcal{D}_{j_1 \otimes j_2} = D_{(j_1+j_2)} \oplus D_{(j_1+j_2-1)} \oplus \cdots \oplus D_{|j_1-j_2|}. \tag{41}$$

معمولاً این رابطه را به شکل ساده تر زیر می نویسیم:

$$j_1 \otimes j_2 = (j_1 + j_2) \oplus (j_1 + j_2 - 1) \oplus \cdots \oplus |j_1 - j_2|. \tag{42}$$

این رابطه به صورت نمادین بیان می کند که فضای حاصل ضرب تانسوری $V_{j_1} \otimes V_{j_2}$ به زیر فضاهایی تجزیه می شود که هرکدام یک نمایش کاهش ناپذیر را حمل می کنند. این زیرفضاها به یکدیگر عمود هستند زیرا که هر کدام از آنها ویژه مقدار متفاوتی برای عملگر هرمیتی $J^2 = (L_1 + L_2)^2$ دارند.
درزیربخش بعدی نحوه عملی این تجزیه را شرح خواهیم داد.

۱.۴ روش تجزیه حاصل ضرب دو نمایش

بازهم بهتراست که روش تجزیه را بایک مثال ساده شرح دهیم. فرض کنید که دو ذره با تکانه زاویه ای $1/2$ و 1 داریم. یا اینکه ذره ای داریم که هم تکانه زاویه ای مداری به اندازه یک و هم تکانه زاویه ای اسپینی دارد. می خواهیم ببینیم که تکانه زاویه ای کل چه مقادیری می تواند اختیارکند. حالت های $l = 1$ عبارتند از

$$\begin{aligned} &|1, 1\rangle \\ &|1, 0\rangle \\ &|1, -1\rangle. \end{aligned} \tag{43}$$

وحالت های اسپین یا $s = \frac{1}{2}$ عبارتند از

$$\begin{aligned} &|+\rangle, \\ &|-, \rangle. \end{aligned} \tag{44}$$

www.Endbook.net

نخستین کاری که می کنیم آن است که بالاترین حالت نمایش 1 را در بالاترین حالت نمایش $1/2$ ضرب می کنیم. حالت بدست آمده چیزی نیست جز $|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\rangle$.

$$|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\rangle. \tag{45}$$

دلیل این امر را خواننده با یک محاسبه ساده و اثر دادن J^2 و J_z روی دو طرف می تواند بفهمد. حال با اثر $J_z = L_z + S_z$ روی دو طرف حالت های دیگر این نمایش را بدست می آوریم . بنابراین یک چهارتایی که همان نمایش $\frac{3}{2}$ است بدست می آید:

$$\begin{aligned}
|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\rangle &= |1,1\rangle|+\rangle \\
|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}}|1,0\rangle|+\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}|1,1\rangle|-\rangle \\
|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}}|1,-1\rangle|+\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|1,0\rangle|-\rangle \\
|\frac{3}{2},\frac{-3}{2}\rangle &= |1,-1\rangle|-\rangle.
\end{aligned} \tag{46}$$

به این ترتیب یک دسته چهارتایی حالت بدست می آید که نمایش اسپین $\frac{3}{2}$ از جبر تکانه زاویه ای را می سازند. اما می دانیم که دو حالت دیگر باقی مانده است. رابطه 41 نیز به ما می گوید که $1 \otimes \frac{1}{2} = \frac{3}{2} \oplus \frac{1}{2}$. بنابراین دو حالت دیگر می بایست نمایش اسپین $\frac{1}{2}$ را بسازند. برای یافتن بالاترین حالت این نمایش یعنی $|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle$ ترکیب زیر را می سازیم که درآن α و β می بایست پیدا شوند.

$$|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle = \alpha|1,0\rangle|+\rangle + \beta|1,1\rangle|-\rangle. \tag{47}$$

حال کافی است که α و β را چنان پیدا کنیم که اثر J_+ روی این حالت برابر با صفر باشد، یعنی این حالت واقعاً بالاترین حالت یک نمایش باشد. با استفاده ازاین شرط و شرط بهنجارش این حالت پیدا می شود. سپس با استفاده از اثر J_- روی آن حالت دیگر نمایش نیز یافته خواهد شد. نهایتاً حالت های این نمایش عبارت خواهند بوداز:

$$\begin{aligned}
|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}}|1,0\rangle|+\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}|1,1\rangle|-\rangle \\
|\frac{1}{2},\frac{-1}{2}\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}}|1,-1\rangle|+\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}|1,0\rangle|-\rangle.
\end{aligned} \tag{48}$$

آنچه که نشان داده ایم مثالی است از قضیه کلی ای که در بالا به آن اشاره کردیم، یعنی اینکه نشان داده ایم

$$\frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} = 1 \oplus 0. \tag{49}$$

www.Endbook.net

۵ جمع تکانه زاویه ای مداری و اسپینی

دراین بخش روابط بسته ای برای جمع تکانه های زاویه ای l و $\frac{1}{2}$ بدست می آوریم. این نتیجه ازنظر کابردی نیز اهمیت زیادی دارد زیرا خیلی از اوقات می خواهیم تکانه زاویه ای کل را برای الکترونی که تکانه زاویه ای مداری l و تکانه زاویه ذاتی یا اسپین $\frac{1}{2}$ دارد بدست آوریم. معمولاً عملگر تکانه زاویه ای را با $\mathbf{S}$ ، تکانه زاویه مداری را با $\mathbf{L}$ و تکانه زاویه ای کل را با $\mathbf{J}$ نشان می دهیم. بنابراین $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. می دانیم که

$$l \otimes \frac{1}{2} = (l + \frac{1}{2}) \oplus (l - \frac{1}{2}). \tag{50}$$

با کمی دقت متوجه می شویم که یک حالت با عدد کوانتومی $m + \frac{1}{2}$ را درچند تایی $l + \frac{1}{2}$ تنها می توان به شکل زیر نوشت:

$$|l + \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}\rangle = \alpha_{l,m}|l, m\rangle|+\rangle + \beta_{l,m}|l, m+1\rangle|-\rangle, \tag{51}$$

که درآن $\alpha_{l,m}$ و $\beta_{l,m}$ ضرایبی هستند که می بایست تعیین شوند. هم چنین یک حالت با عدد کوانتومی $m + \frac{1}{2}$ را درچند تایی $l - \frac{1}{2}$ می توان به صورت زیر نوشت:

$$|l - \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}\rangle = \gamma_{l,m}|l, m\rangle|+\rangle + \delta_{l,m}|l, m+1\rangle|-\rangle. \tag{52}$$

تعامد این حالت بر حالت قبلی و هم چنین بهنجاربودن آنها منجر به روابط زیر می شود:

$$\begin{aligned} &\alpha_{l,m}^2 + \beta_{l,m}^2 = 1 \\ &\gamma_{l,m}^2 + \delta_{l,m}^2 = 1 \\ &\alpha_{l,m}\gamma_{l,m} + \beta_{l,m}\delta_{l,m} = 0. \end{aligned} \tag{53}$$

بنابراین کافی است که یکی از ضرایب را پیداکنیم زیرا روابط فوق بقیه ضرایب را بدست خواهند داد. برای بدست آوردن این ضریب کافی است که روی طرفین رابطه 51 عملگر $J_- = L_- + S_-$ را اعمال کنیم. دراین صورت بدست می آوریم

$$C(l + \frac{1}{2}, m+1)|l + \frac{1}{2}, m-1\rangle = \alpha_{l,m}C(l,m)|l, m-1\rangle|+\rangle + \alpha_{l,m}|l, m\rangle|-\rangle + \beta_{l,m}C(l, m+1)|l, m\rangle|-\rangle, \tag{54}$$

که درآن $C(l,m) = \sqrt{l(l+1) - m(m-1)}$.
با مقایسه این رابطه با رابطه a به نتیجه زیر می رسیم:

$$\alpha_{l,m-1} = \frac{C(l,m)}{C(l + \frac{1}{2}, m+1)}\alpha_{l,m} \tag{55}$$

www.Endbook.net

ویا پس از ساده کردن

$$\alpha_{l,m} = \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}}\alpha_{l,m-1}. \tag{56}$$

با تکرار این رابطه و توجه به اینکه $\alpha_{l,l} = 1$ به نتیجه زیر می رسیم:

$$\alpha_{l,m} = \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}}. \tag{57}$$

بااستفاده از روابط 53 بقیه ضرایب نیز بدست می آیند. بنابراین

$$|l+\frac{1}{2}, m+\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}}|l,m\rangle|+\rangle + \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}}|l,m+1\rangle|-\rangle,$$
$$|l-\frac{1}{2}, m+\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}}|l,m\rangle|+\rangle - \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}}|l,m+1\rangle|-\rangle. \tag{58}$$

٦ عملگرهای اسکالر، عملگر های برداری و تانسوری

در بسیاری از محاسباتی که بعداً با آنها سرو کار پیدا خواهیم کرد، می خواهیم عنصرماتریسی بعضی از عملگرها را در ویژه پایه تکانه زاویه ای یعنی حالت های $|j,m\rangle$ پیدا کنیم. هرگاه خواص این عملگرها و رابطه آنها را با تکانه زاویه ای بهتر بدانیم می توانیم حتی بدون محاسبه زیاد این عناصر ماتریسی را مشخص کنیم. عملگرها را می توانیم بسته به این که چه نوع رابطه‌ی جابجایی با عملگرهای تکانه زاویه‌ای دارند، طبقه بندی کنیم. عملگرها را بسته به نوع این رابطه به عملگرهای اسکالر، برداری و تانسوری تقسیم بندی می کنیم. دراین بخش این عملگرها را مطالعه می کنیم و نشان می دهیم که چگونه خواص آنها منجر به بعضی قیود مهم روی عناصر ماتریسی آنها در پایه تکانه زاویه‌ای می شود.

١.٦ عملگرهای اسکالر

در درسهای گذشته عملگر اسکالر را معرفی کردیم. درتمام این بخش فرض ما این است که فضای هیلبرتی که عملگرها در آن تعریف شده اند نمایشی از تکانه زاویه ای و درنتیجه نمایشی از دوران را حمل می کند. نمایش مولفه های تکانه زاویه‌ای را با $J_{x,y,z}$ نشان می دهیم. دراین فضای هیلبرت یک عملگر اسکالر مثل S، عملگری است که تحت دوران تغییر نمی کند، به این معنا که

$$U(R)SU^{\dagger}(R) = S, \tag{59}$$

www.Endbook.net

که در آن $U(R)$، نمایشی از دوران R روی آن فضای هیلبرت است. از آنجا که $U(R) = e^{i\theta \mathbf{n}.\mathbf{J}}$، رابطه بالا به این معناست که

$$[J_i, S] = 0, \tag{60}$$

یعنی اینکه عملگرِ S با مولفه‌های تکانه زاویه‌ای یا به عبارت بهتر با نمایش های آن در آن فضای هیلبرت جابجا می شود. نمونه هایی از عملگرهای اسکالر در فضای هیلبرت یک ذره که در سه بعد حرکت می کند عبارت اند از $\mathbf{P} \cdot \mathbf{P}$ و یا $\mathbf{P} \cdot \mathbf{J}$. هرکدام از روابط 59 یا 60 را می توان به عنوان تعریف عملگراسکالر در نظر گرفت.

قضیه: هرگاه S یک عملگراسکالر باشد آنگاه روی عناصر ماتریسی اش قید زیر برقراراست:

$$\langle j, m|S|j', m'\rangle = A\delta_{j,j'}\delta_{m,m'} \tag{61}$$

که درآن A ثابتی است که بستگی به نوع عملگردارد. این رابطه نمونه ای از آن قواعد انتخابی است که گفتیم به این معنا که از قبل می توان گفت کدام عناصر ماتریسی صفر و کدام یک غیر صفرهستند.

اثبات: از رابطه 60 می بینیم که $[J^2, S] = 0$. بنابراین بدست می آوریم

$$\begin{aligned} 0 &= \langle j, m|[J^z, S_i]|j', m'\rangle = \langle j, m|J_z S_i - S_i J_z|j', m'\rangle = (m' - m)\langle j, m|S|j', m'\rangle, \\ 0 &= \langle j, m|[J^2, S_i]|j', m'\rangle = \langle j, m|J^2 S_i - S_i J^2|j', m'\rangle = [j'(j'+1) - j(j+1)]\langle j, m|S|j', m'\rangle. \end{aligned} \tag{62}$$

این دو رابطه حکم قضیه را ثابت می کنند.

۲.۶ عملگرهای برداری

تعریف: عملگرِ $\mathbf{A} = (A_1, A_2, A_3)$ عملگری است که تحت دوران مثل یک بردار تبدیل شود، به این معنا که:

$$U(R)A_i U^\dagger(R) = R_{ij}A_j. \tag{63}$$

بنابرتعریف این رابطه می بایست برای همه دوران ها از جمله دوران های بی نهایت کوچک نیز برقرار باشد. اما برای دوران های بی نهایت کوچک به اندازه θ حول محورِ $\mathbf{n}$ داریم

$$R_{ij} = \delta_{ij} + \theta\epsilon_{ijk}n_k \tag{64}$$

و

$$U(R) = I + i\theta n_j J_j, \tag{65}$$

www.Endbook.net

که درآن J_j ها نمایش های تکانه‌ی زاویه‌ای در همان فضای هیلبرتی هستند که A_i ها روی آن عمل می کنند. جایگذاری 64 و 65 در 67 و نگاه داشتن جملات تا رتبه θ منجر به رابطه زیر می شود:

$$[J_i, A_j] = i\epsilon_{ijk}A_k. \tag{66}$$

از این به بعد این رابطه را به عنوان رابطه تعریف کننده‌ی عملگرهای برداری به کار می بریم، به این معنا که می گوییم عملگرِ $\mathbf{A}$ یک عملگر برداری است اگر مولفه هایش با تکانه زاویه‌ای یا نمایش های آن چنین رابطه‌ی جابجایی ای داشته باشند. عملگرهای $\mathbf{P} = (P_x, P_y, P_z)$ و $\mathbf{R} = (X, Y, Z)$ نمونه‌هایی از عملگرهای برداری هستند.

۳.۶ عملگرهای تانسوری

تعریف: عملگرِ $\mathbf{T}$ با مولفه های $T_{i,j}, \quad i,j = 1,2,3$ یک عملگر تانسوری رتبه دو است هرگاه تحت دوران مثل یک تانسور رتبه ۲ تبدیل شود، به این معنا که:

$$U(R)T_{ij}U^{\dagger}(R) = R_{ik}R_{jl}T_{kl}. \tag{67}$$

هرگاه رابطه های 64 و 65 را دراین رابطه جایگذاری کنیم و جملات تا رتبه θ رانگاه داریم به رابطه زیر می رسیم:

$$[J_i, T_{jk}] = i\epsilon_{ijl}T_{lk} + i\epsilon_{ikl}T_{jl}. \tag{68}$$

که از این به بعد آن را به عنوان رابطه تعریف کننده تانسورهای رتبه ۲ بکار می بریم. این تعریف به همین صورت تعمیم می یابد، به عنوان مثال تانسورهای رتبه ۳ با رابطه زیر تعریف می شوند:

$$[J_i, T_{jkl}] = i\epsilon_{ijm}T_{mkl} + i\epsilon_{ikm}T_{jml} + \epsilon_{ilm}T_{jkm}. \tag{69}$$

۴.۶ تانسورهای کروی

فرض کنید که $\mathbf{A}$ یک عملگر برداری باشد. دراین صورت قرار می دهیم:

$$\begin{aligned} A_{1,1} &:= -\frac{1}{\sqrt{2}}(A_x + iA_y) \\ A_{1,0} &:= A_z \\ A_{1,-1} &:= \frac{1}{\sqrt{2}}(A_x - iA_y). \end{aligned} \tag{70}$$

www.Endbook.net

خواننده می تواند براحتی تحقیق کند که جابجایی این عملگر ها با مولفه های تکانه زاویه ای درست مثل حالت های نمایش اسپین ۱ است. یعنی اینکه

$$\begin{aligned}
&[J_z, A_{1,1}] = A_{1,1}, && [J_z, A_{1,0}] = 0, && [J_z, A_{1,-1}] = -A_{1,-1} \\
&[J_+, A_{1,1}] = 0, && [J_+, A_{1,0}] = \sqrt{2}A_{1,1}, && [J_+, A_{1,-1}] = \sqrt{2}A_{1,0}, \\
&[J_-, A_{1,1}] = \sqrt{2}A_{1,0}, && [J_-, A_{1,0}] = \sqrt{2}A_{1,-1}, && [J_-, A_{1,-1}] = 0.
\end{aligned} \tag{71}$$

اصطلاحاً می گوییم که این عملگرها تحت جابجاگر با تکانه زوایه ای مثل حالت های اسپین ۱ تبدیل می شوند. می گوییم عملگرهای $A_{1,1},\ A_{1,0},\ A_{1,-1}$ مولفه های یک تانسور کروی رتبه ۱ را تشکیل می دهند. به طور کلی یک تانسور کروی رتبه j، را به شکل زیر تعریف می کنیم:

تعریف: مجموعه‌ای از عملگرهای $A_{j,m},\quad m = -j,\ -j+1,\ \cdots\ j-1,\ j$ که تحت جابجایی با عملگرهای تکانه‌ی زاویه‌ای مثل جالت های نمایش اسپین j رفتار کنند، یعنی

$$\begin{aligned}
&[J_z, A_{j,m}] = mA_{j,m}, \\
&[J_+, A_{j,m}] = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}A_{j,m+1}, \\
&[J_-, A_{j,m}] = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}A_{j,m-1}.
\end{aligned} \tag{72}$$

مولفه‌های یک تانسور کروی رتبه j نامیده می شوند. دقت کنید که با این تعریف یک عملگر اسکالر یک تانسوری کروی رتبه 0 است.

حال می پرسیم که فایده تانسورهای کروی و این تعریف ها چیست؟ فایده مهم آنها این است که می توانیم بدون در نظر گرفتن نوع تانسور و اینکه از چه چیزی ساخته شده است، تنها با دانستن روابط جابجایی اش با مولفه های تکانه زاویه‌ای اطلاعات مهمی درباره عناصر ماتریسی آن روی $Y_{l,m}$ ها بدست بیاوریم، و این فایده بزرگی است زیرا اولا محاسبه این عناصر ماتریسی به طور مستقیم کار بسیار سختی است، ثانیاً چنین روابط ماتریسی ای مرتباً در مطالعات مربوط به ساختمان اتمی به خصوص در مطالعات مربوط به گذارهای بین لایه های مختلف اتمی پیش می آید. به عنوان ساده ترین مثال یک عملگر اسکالر مثل S در نظر بگیرید. این عملگر ممکن است $\mathbf{X}\cdot\mathbf{P}$ یا $\mathbf{P}\cdot\mathbf{P}$ یا چیزی نظیر آن باشد. دیدیم که یک برای یک عملگراسکالر S، قواعد انتخاب ساده‌ای برقراراست. می خواهیم بینیم که آیا برای تانسورهای کروی نیز قواعد انتخاب ساده‌ای برقرارهستند یانه؟ برای پاسخ به این سوال مجموعه حالت های $A_{j,m}|j',m'\rangle$ را که در آن $A_{j,m}$ ها یک تانسور کروی هستند در نظر می گیریم. بیایید اثر عملگرهای J_z، و $J_\pm$ را روی این حالت ها حساب کنیم. با استفاده از تعریف حالت های $|,m\rangle$ و هم چنین تانسور کروی ?? می توان براحتی دریافت که:

$$J_z(A_{j,m}|j',m'\rangle) = (m+m')A_{j,m}|j',m'\rangle, \tag{73}$$

www.Endbook.net

و

$$\begin{aligned} J_+(A_{j,m}|j',m'\rangle) &= \sqrt{j(j+1)-m(m+1)}A_{j,m+1}|j',m'\rangle + \sqrt{j'(j'+1)-m'(m'+1)}A_{j,m}|j',m'+1\rangle \\ J_-(A_{j,m}|j',m'\rangle) &= \sqrt{j(j+1)-m(m-1)}A_{j,m-1}|j',m'\rangle + \sqrt{j'(j'+1)-m'(m'-1)}A_{j,m}|j',m'-1\rangle \end{aligned} \quad (74)$$

به عبارت دیگر حالت های $A_{j,m}|j',m'\rangle$ تاجاییکه که به رفتار آنها تحت اثر مولدهای تکانه زاویه‌ای مربوط است مثل حالت های ضرب تانسوری دو نمایش j و j' رفتار می کنند. اما می دانیم که چنین حالت هایی را می توان به گروه هایی تقسیم کرد که تحت نمایش های کاهش ناپذیرِ $j+j'$ تا $|j-j'|$ تبدیل شوند. بنابراین می توان نوشت:

$$A_{j,m}|j',m'\rangle = \sum_{J=|j-j'|}^{j+j'} C(J;j,m;j',m')|J,m+m';j,j'\rangle. \quad (75)$$

که درآن $C(J;j,m;j',m')$ همان ضرایب کلبش – گوردونی هستند که در تجزیه زیر به کار می روند:

$$|j,m\rangle|j',m'\rangle = \sum_{J=|j-j'|}^{j+j'} C(J;j,m;j',m')|J,m+m';j,j'\rangle. \quad (76)$$

به عبارت بهتر

$$C(J;j,m;j',m') = \langle J,m+m'|j,m;j,m'\rangle. \quad (77)$$

از رابطه 75 بلافاصله یک نتیجه مهم بدست می آید و آن اینکه:

$$\langle j",m"|V_{j,m}|j',m'\rangle = \begin{cases} 0 & if \quad m" \neq m+m', \\ 0 & if \quad j" > j+j' \quad or \quad j" < |j-j'| \end{cases} \quad (78)$$

این یک قاعده انتخاب مهم است که بیان می کند این عنصر ماتریسی درچه مواقعی می تواند غیر صفر باشد. به عنوان مثالهایی از این قاعده انتخاب، خواننده می تواند خود را قانع کند که روابط زیر درست هستند:

$$\int \psi^*_{n,l,m}(r,\theta,\phi)x\psi^*_{n',l',m'}(r,\theta,\phi)r^2d\Omega = 0 \quad if \quad l \neq l',\ l' \pm 1, \quad m \neq m' \pm 1$$

$$\int \psi^*_{n,l,m}(r,\theta,\phi)\frac{\partial}{\partial x}\psi^*_{n',l',m'}(r,\theta,\phi)r^2d\Omega = 0 \ \ if \ \ l \neq l',\ l' \pm 1,\ m \neq m' \pm 1$$

$$\int \psi^*_{n,l,m}(r,\theta,\phi)xy\psi^*_{n',l',m'}(r,\theta,\phi)r^2d\Omega = 0 \quad if \quad l \neq l',\ l' \pm 1, l' \pm 2 \quad m \neq m' \pm 2. \quad (79)$$

www.Endbook.net

۷ ضمیمه شماره ۱

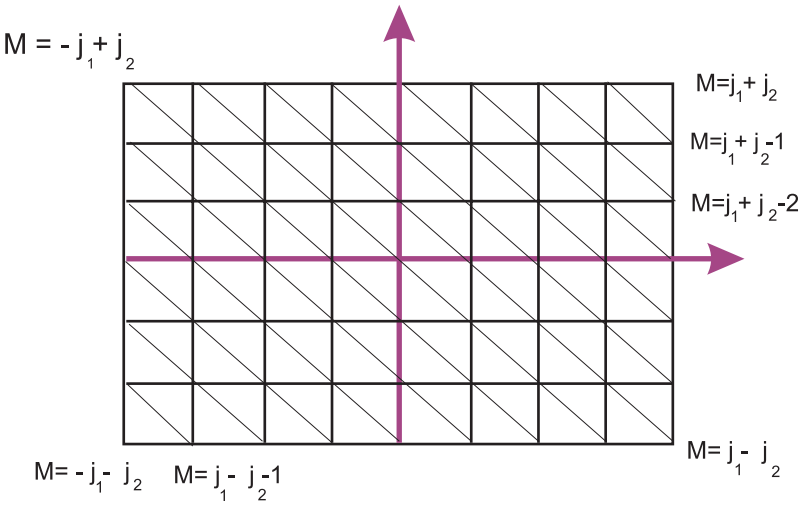
دراین ضمیمه می خواهیم قضیه اصلی مربوط به تجریه نمایش ها(یا جمع تکانه‌ی زاویه‌ای) را ثابت کنیم. نقطه شروع و درواقع مهمترین قسمت این استدلال شمارش واگنی حالت های $|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle$ ای است که $M = m_1 + m_2$ آنها معین است. می دانیم که بیشترین مقدارِ ممکن از M برابر است با $j_1 + j_2$ که مربوط به حالتِ $|j_1, j_1; j_2, j_2\rangle$ است. این حالت توسط یک نقطه در سمت راستِ بالای شکل ۱ مشخص شده است. واگنی این حالت برابراست با۱. مقدار بعدی از M برابر است با $M = j_1 + j_2 - 1$ که همان طور که در شکل ۱ نشان داده شده است دارای واگنی ۲ است. درجه واگنی همین طور با کاهش M یکی یکی زیاد می شود و مقدار ماکزیمم خودر را برای $M = j_1 - j_2$ اختیار می کند (بدون نقض کلیت فرض کرده ایم که $j_2 \leq j_1$). بعدازآن درجه واگنی ثابت می ماند تا وقتی که M به مقدارِ $M = -(j_1 - j_2)$ می رسد و بعد از آن دوباره یکی یکی کاهش می یابد تا به مقدارِ $M = -j_1 - j_2$ می رسد. حال مقدار $M = j_1 + j_2$ را در نظر بگیرید که متعلق به حالت $|j_1, j_1; j_2, j_2\rangle$ است. با اثردادن متوالی عملگرِ J_- روی این حالت یک نمایش کاهش ناپذیر با اسپین $j = j_1 + j_2$ ساخته می شود. این نمایش تنها دارای یک حالت با $M = j_1 + j_2 - 1$ است و حال آنکه مطابق با شکل دو حالت با این ویژه مقدار وجود دارد. پس معنایش این است که حالت دیگر چیزی نیست جز بالاترین حالت نمایشِ $j_1 + j_2 - 1$. احال ویژه مقدارِ $M = j_1 + j_2 - 2$ را در نظر می گیریم. مطابق با جدول می دانیم که واگنی این مقدار برابر است با ۳ و حال آنکه نمایش های قبلی هرکدام یک ویژه حالت با این ویژه مقدار دارند. پس بنابراین حالت دیگر می بایست بالاترین ویژه مقدار نمایش با اسپین $j_1 + j_2 - 2$ باشد. این استدلال تاوقتی که به $M = j_1 - j_2$ می رسیم ادامه پیدا می کند که منجر می شود به این که تمام نمایش های با اسپین های $J = j_1 + j_2$، $J = j_1 + j_2 - 1$ ، $J = j_1 + j_2 - 2$ تا $J = j_1 - j_2$ می بایست الزاماً وجود داشته باشند. اما به این نقطه که می رسیم متوجه می شویم که تمام حالت ها دراین نمایش های مصرف شده اند زیرا هر نمایشِ با اسپینِ J تعداد $2J + 1$ حالت دارد و

$$\sum_{J=j_1-j_2}^{j_1+j_2} J = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1), \tag{80}$$

که برابر است با تعداد کل حالت های $|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle$. بنابراین دیگر حالتی باقی نمانده است و به این نتیجه می رسیم که

$$j_1 \otimes j_2 = (j_1 + j_2) \oplus (j_1 + j_2 - 1) \oplus (j_1 + j_2 - 2) \oplus \cdots (j_1 - j_2). \tag{81}$$

www.Endbook.net



شکل ۱: هرنقطه‌ای این جدول یک حالت $|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle$ با m_1 و m_2 معین را نشان می دهد. نقاط روی حالت های اوریب مقدار $M = m_1 + m_2$ معینی دارند. تعداد نقاط روی یک خط اریب درجه واگنی آن مقدار از M را نشان می دهد.

www.Endbook.net

درس پانزدهم : روش اختلال مستقل از زمان

۱ مقدمه

تاکنون مسایلی را بررسی کرده ایم که به طور دقیق قابل حل بودند، مثل جاه های پتانسیل، نوسانگر هارمونیک، و اتم هیدروژن. اگر چه این مسائل اهمیت فوق العاده ای دارند و حل بسیاری از مسائل مهم دیگر بر آنها مبتنی است ولی ازنظر فیزیکی مسائلی هستند ایده آل و غیرواقعی. مسایل واقعی فیزیک تقریباً هیچگاه به طور دقیق حل پذیرنیستند. به عنوان مثال هرگاه بخواهیم اتم هیدروژن را که پتانسیل آن به نظر ساده می آید بادقت مطالعه کنیم متوجه اثرات بسیارکوچکی خواهیم شد که برای توصیف دقیق طیف می بایست آن ها را درنظر گرفت. به عنوان مثال می دانیم که سرعت الکترون دراتم هیدروژن زیاد است و بنابراین می بایست اثرات نسبیتی را درنظرگرفت. هم چنین میدان مغناطیسی ناشی از گردش الکترون روی گشتاور مغناطیسی آن اثر می گذارد آن اثر می گذارد. همه اینها باعث می شود که ترازهای اتم هیدروژن به میزان بسیارکمی نسبت به اتم هیدروژن ایده‌ال جابجا شوند. مهم ترازاین مسئله وقتی است که به سیستم های بس ذره ای می پردازیم. اتم های چند الکترونی، مولکول ها و جامدات، همه سیستم هایی هستند بس ذره ای که هامیلتونی آنها هیچگاه به طور دقیق قابل حل نیست. بنابراین برای مطالعه این سیستم ها و تقریباً هرسیستم واقعی فیزیکی دیگری می بایست یک روش تقریبی به کار ببریم. نظریه اختلال مهمترین روش تقریبی است که درمکانیک کوانتومی تدوین شده است. اهمیت آن هم این است که به حوزه های متعدد نظیر مکانیک کوانتومی نسبیتی، مکانیک کوانتومی میدان ها و سیستم های بس ذره ای در ماده چگال قابل تعمیم است. بنابراین یادگیری اصول آن اهمیت اساسی دارد.

دراین فصل به معرفی روش های تقریبی برای یافتن طیف انرژی یک هامیلتونی می پردازیم. نخست به روش اختلال مستقل اززمان می پردازیم که دلیل نامگذاری اش آن است که با یک مسئله ایستا که همان یافتن طیف انرژی است سرو کار دارد. درفصل های آینده با روش اختلال وابسته به زمان نیز که برای بررسی اختلالی دینامیک یک سیستم به کار می رود خواهیم پرداخت.

www.Endbook.net

۲ تقریب اختلالی برای حالت های غیرواگن

فرض کنید که طیف هامیلتونی H_0 را به طور دقیق می شناسیم. H_0 هامیلتونی ایده آل یک سیستم است که به نحوی توانسته ایم طیف آن را حساب کنیم. حال می خواهیم طیف هامیلتونی

$$H = H_0 + \lambda V, \tag{1}$$

را که درآن λ یک پارامترکوچک است به تقریب تعیین کنیم.
روش اختلال روشی است که به ماین امکان را می دهد که ویژه مقدارها و ویژه بردارهای H را به صورت یک سری توانی از پارامتر λ پیداکنیم. البته معمولاً پیداکردن جملات اول و دوم این سری به آسانی امکان پذیراست اماهرچه که پیش می رویم محاسباتی که می بایست انجام دهیم دشوارتر وطولانی ترمی شود، خوشبختانه همان جملات اولیه برای بسیاری از مقاصد عملی کفایت می کنند. ازآنجا که طیفِ H_0 را می شناسیم می نویسیم

$$H_0|n^0\rangle = E_n^0|n^0\rangle \tag{2}$$

که درآن شاخص 0 را برای آن بکاربرده ایم که این ویژه مقادیر و ویژه بردارها را ازتصحیحاتی که بعداً پیدامی کنیم متمایزکنیم. حال می خواهیم ویژه بردارها و ویژه مقدارهای H را پیداکنیم. می نویسیم

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \tag{3}$$

نخست فرض می کنیم که حالت ِ$|n^0\rangle$ یک حالت ِغیرواگن است، شکل ۱
دراین صورت می دانیم که اگرپارامترِ λ به سمت صفر میل کند، انرژی E_n به انرژی E_n^0 میل می کند و حالت ِ$|n\rangle$ نیز به $|n^0\rangle$ میل می کند. بنابراین قرار می دهیم:

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \cdots \\ |n\rangle &= |n^0\rangle + \lambda|n^1\rangle + \lambda^2|n^2\rangle + \cdots . \end{aligned} \tag{4}$$

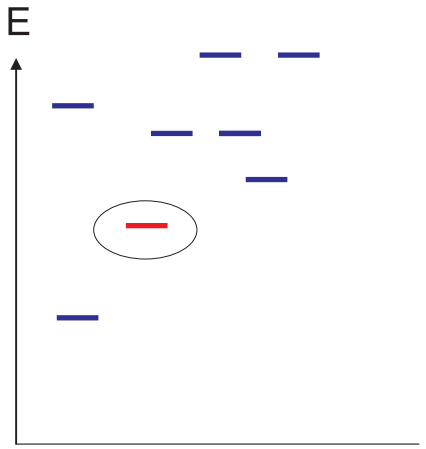
با این کار ویژه مقدار E_n و ویژه بردار مربوط به آن را به صورت یک بسط از پارامتر اختلال یعنی λ نوشته ایم. دراین بسط ها می بایست ضرایب λ را پیداکنیم. باقراردادن 3 در 4 به عبارت زیرمی رسیم:

$$(H_0 + \lambda V)\left(|n^0\rangle + \lambda|n^1\rangle + \lambda^2|n^2\rangle + \cdots\right) = \left(E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \cdots\right)\left(|n^0\rangle + \lambda|n^1\rangle + \lambda^2|n^2\rangle + \cdots\right) \tag{5}$$

اگر این بسط بخواهد برای هرمقدار λ صحیح باشد می بایست جملات هم رتبه از λ را مساوی قراردهیم. بنابراین می رسیم به روابط زیر:

$$H_0|n^0\rangle = E_n^0|n^0\rangle$$

www.Endbook.net



شکل ۱: حالت ای که بابیضی محصورشده‌است، یک حالت غیر واگن است. برای این حالت روش اختلال را می توان به کار برد. واگن بودن یا نبودن دیگرانرژی ها اهمیت ندارد.

$$\begin{aligned} V|n^0\rangle + H_0|n^1\rangle &= E_n^1|n^0\rangle + E_n^0|n^1\rangle \\ V|n^1\rangle + H_0|n^2\rangle &= E_n^2|n^0\rangle + E_n^1|n^1\rangle + E_n^0|n^2\rangle \\ V|n^2\rangle + H_0|n^3\rangle &= E_n^3|n^0\rangle + E_n^2|n^1\rangle + E_n^1|n^2\rangle + E_n^0|n^3\rangle \\ \cdots &\quad \cdots \end{aligned} \tag{6}$$

رابطه اول همان رابطه 2 مربوط به طیف H_0 است.

۱.۲ رتبه اول اختلال

حال طرفین رابطه دوم را می توانیم از چپ در بردار $\langle n^0|$ ضرب کنیم و پس ازساده کردن بدست بیاوریم

$$E_n^1 = \langle n^0|V|n^0\rangle. \tag{7}$$

بنابراین تصحیح مرتبه اول انرژی براحتی معلوم می شود. تارتبه اول داریم

$$E_n^1 = E_n^0 + \lambda\langle n^0|V|n^0\rangle + \cdots \tag{8}$$

برای بدست آوردن تصحیح مرتبه اول ویژه بردار رابطه دوم از 6 را در $\langle m^0|$ ضرب می کنیم که درآن $\langle m^0|$ حالتی است با انرژی $E_m^0 \neq E_n^0$. ازآنجا که فرض کرده ایم طیف هامیلتونی H_0 غیرواگن است می دانیم که $\langle m^0|n^0\rangle = 0$. بعدازساده کردن طرفین بدست می آوریم

$$\langle m^0|n^1\rangle = \frac{\langle m^0|V|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0}, \qquad n \neq m. \tag{9}$$

www.Endbook.net

می دانیم که ویژه بردارهای H_0 یعنی $|n^0\rangle$ ها تشکیل یک پایه می دهند. این رابطه تصویر بردار $|n^1\rangle$ روی تمام بردارهای پایه بجز $|n^0\rangle$ را تعیین می کند. به عبارت دیگر تصویر $|n^1\rangle$ روی $|n^0\rangle$ هرچیزی می تواند باشد وهم چنان معادلات 6 برقراراباشند. برای آنکه بردار$|n\rangle$ تا رتبه اول اختلال بهنجار باشد تصویر $|n^1\rangle$ روی $|n^0\rangle$ را برابر با صفرمی گیریم. برای فهم این نکته بردار $|n\rangle$ را تا رتبه اول به صورت زیر می نویسیم:

$$|n\rangle = |n^0\rangle + \lambda|n^1\rangle + O(\lambda^2) \tag{10}$$

که از آن نتیجه می گیریم

$$\langle n|n\rangle = 1 + \lambda(\langle n^0|n^1\rangle + \langle n^1|n^0\rangle) + O(\lambda^2). \tag{11}$$

بنابراین هرگاه قرار دهیم $\langle n^0|n^1\rangle = 0$، بردار $|n\rangle$ تا رتبه اول بهنجار خواهد بود. بنابراین بردار $|n^1\rangle$ به طور کامل برابراست با

$$|n^1\rangle = \sum_{m\neq n} |m^0\rangle\langle m^0|n^1\rangle = \sum_{m\neq n} \frac{\langle m^0|V|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0}|m^0\rangle, \tag{12}$$

و درنتیجه تا رتبه اول اختلال

$$|n\rangle = |n^0\rangle + \sum_{m\neq n} \frac{\langle m^0|\lambda V|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0}|m^0\rangle, \tag{13}$$

۲.۲ رتبه دوم اختلال

برای بدست آوردن تصحیح انرژی تا رتبه دوم اختلال رابطه سومِ 6 را از چپ در $\langle n^0|$ ضرب می کنیم و از شرط $\langle n^0|n^1\rangle = 0$ که قبلاً بدست آوردیم استفاده می کنیم. پس از ساده کردن بدست می آوریم

$$E_n^2 = \langle n^0|V|n^1\rangle, \tag{14}$$

وبااستفاده از 12

$$E_n^2 = \sum_{m\neq n} \frac{\langle n^0|V|m^0\rangle\langle m^0|V|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} = \sum_{m\neq n} \frac{|\langle n^0|V|m^0\rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0}. \tag{15}$$

ازاین عبارت می توان دو نکته آموخت. نخست آنکه تصحیح مرتبه دوم انرژی برای هرنوع اختلالی برای حالت پایه همواره منفی است زیرا دراین حالت تمام جملات $E_n^0 - E_m^0$ منفی هستند.
دوم آنکه درتصحیح انرژی رتبه دوم حالت هایی مهم هستند که یا انرژی آنها نزدیک انرژی حالت اولیه است و یا

www.Endbook.net

عنصر ماتریسی $\langle n^0|V|m^0\rangle$ برای آنها فوق العاده بزرگ است. درغیاب هرنوع اطلاع خاص درمورد مرتبه عناصر ماتریسی $\langle n^0|V|m^0\rangle$ می توان فرض کرد کرد که اندازه همه آنها از یک مرتبه است و دراین صورت می توان با درنظرگرفتن تنها حالت هایی که انرژی آنها نزدیک حالت اولیه است تقریب خوبی از E_n^2 بدست آورد.

۳.۲ مثال: نوسانگر غیرهارمونیک

دراین بخش نوسانگر غیرهارمونیک را با هامیلتونی

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 + \lambda X^4 = H_0 + \lambda X^4 \tag{16}$$

می دانیم که $H_0|n^0\rangle = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})|n^0\rangle$. تصحیح انرژی تااولین رتبه اختلال برابراست با

$$E_n^1 = \langle n^0|X^4|n^0\rangle. \tag{17}$$

برای محاسبه این عنصرماتریسی از بسط عملگر X برحسب عملگرهای پایین بر و بالا بر استفاده می کنیم. می دانیم که

$$X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger). \tag{18}$$

بنابراین

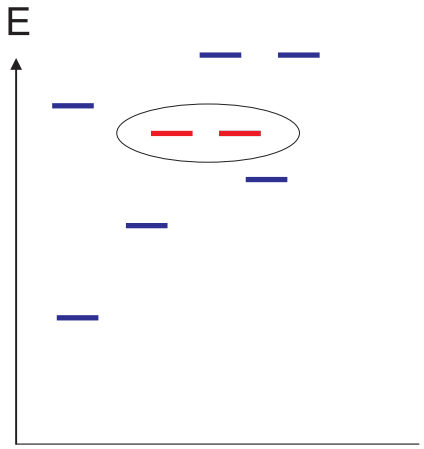
$$\begin{aligned} E_n^1 &= (\frac{\hbar}{m\omega})^2\langle n|(a+a^\dagger)^4|n\rangle \\ &= (\frac{\hbar}{m\omega})^2\langle n|a^2a^{\dagger 2} + a^{\dagger 2}a^2 + aa^\dagger aa^\dagger + a^\dagger aa^\dagger a + aa^\dagger a^\dagger a + a^\dagger aaa^\dagger|n\rangle \\ &= (\frac{\hbar}{m\omega})^2\left(6n^2+6n+3\right). \end{aligned} \tag{19}$$

بنابراین تا رتبه اول اختلال، انرژی حالت n ام به صورت زیر خواهد بود:

$$E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2}) + \lambda(\frac{\hbar}{m\omega})^2\left(6n^2+6n+3\right) + O(\lambda^2). \tag{20}$$

برای پیدا کردن تصحیح انرژی تا رتبه دوم اختلال می توانیم از رابطه 15 استفاده کنیم . جزییات این محاسبه را به عهده خواننده می گزاریم.

www.Endbook.net



شکل ۲: حالت هایی که بابیضی محصورشده‌اند یک ویژه فضای واگن تشکیل می دهند. برای این حالت ها روش اختلال را می توان به کار برد. واگن بودن یا نبودن دیگر حالت ها تاثیری در محاسبه اختلال برای این حالت ها ندارد.

۳ تقریب اختلالی برای حالت های واگن

تا کنون روش اختلال را برای یک حالت غیرواگن بکار برده ایم. به همین دلیل وجود جملات $E_n^0 - E_m^0$ درمخرج عباراتی مثل (12) و (15) نگران کننده نیست. حال فرض می کنیم که قسمتی از طیف هامیلتونی واگن است. حال روش اختلال را برای یک حالت واگن به کار می بریم. فرض کنید که انرژی این حالت برابر با E_n^0 و درجه واگنی آن برابر با g باشد، شکل ۲
دراین صورت داریم

$$H^0|n^0,r\rangle = E_n^0|n^0,r\rangle, \qquad r=1,\cdots g. \tag{21}$$

پارامتر r پارامتری است که حالت های واگن را از هم تمیز می دهد. مثل قبل وقتی که پتانسیل اختلالی وجود دارد می نویسیم

$$H|n,r\rangle = E_{n,r}|n,r\rangle, \qquad r=1,\cdots g. \tag{22}$$

که درآن $E_{n,r}$ دیگر الزاماً مستقل از r نیست. درحالت کلی واگنی یا بخشی از آن ممکن است از بین برود ولی این موضوع، یعنی اینکه آیا اختلال واگنی را از بین می برد یا خیر، اهمیتی ندارد. وقتی که واگنی نداشتیم، مطمئن بودیم که در حد $\lambda \longrightarrow 0$، حالت جدید به همان حالت قبلی میل می کرد، بنابراین می توانستیم از رابطه‌ی 4 شروع کنیم. ولی آیا درحالتی که واگنی داریم آیا بازهم مطمئن هستیم که در حد $\lambda \longrightarrow 0$ یک حالت $|n,r\rangle$ به حالت $|n^0,r\rangle$ میل می کند؟ این سوال از آنجا اهمیت دارد که در حضور واگنی حالت های $|n^0,r\rangle$ به همان اندازه ویژه بردارهای انرژی با ویژه مقدارِ E_n^0 هستند که هر ترکیب دلخواه دیگری از آنها و هیچ پایه ای برای این زیرفضا(زیرفضای با انرژی E_n^0 بر پایه دیگر ترجیح ندارد.) بنابراین از قبل معلوم نیست که وقتی $\lambda \longrightarrow 0$، ویژه حالت های جدید به سمت کدام حالت های زیرفضای واگن میل می کنند. برای روشن تر شدن مطلب

www.Endbook.net

یک مثال ساده می آوریم. **مثال:** هامیلتونی خیلی ساده زیر را در یک فضای دوبعدی در نظر بگیرید.

$$H_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{23}$$

این هامیلتونی دارای دو ویژه حالت برای انرژیِ واگن $E = 1$ است. این دو حالت را به طرق مختلف می توان اختیار کرد، مثل

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{24}$$

یا

$$|1'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad |2'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \tag{25}$$

و یا هر دو حالت مستقل دیگری. حال فرض کنید که جمله اختلالی را به صورت زیر اضافه کنیم:

$$H_1 = H_0 + \lambda V_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1+\lambda & 0 \\ 0 & 1-\lambda \end{pmatrix}. \tag{26}$$

دراین صورت می توان طیف این هامیلتونی را به دقت تعیین کرد. واضح است که ویژه حالت ها عبارتند از:

$$\begin{aligned} |e_1\rangle &= |1\rangle, \qquad E_1 = 1+\lambda, \\ |e_2\rangle &= |2\rangle, \qquad E_2 = 1-\lambda. \end{aligned} \tag{27}$$

بنابراین در حد $\lambda \longrightarrow 0$ حالت های جدید به حالت های $|1\rangle$ و $|2\rangle$ تبدیل می شوند.
اما حالا فرض کنید که اختلال به شکل زیرباشد:

$$H_2 = H_0 + \lambda V_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \lambda \\ \lambda & 1 \end{pmatrix}. \tag{28}$$

دراین صورت بازهم ویژه حالت ها را می توان دقیقاً تعیین کرد:

$$\begin{aligned} |e_1'\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad E_1 = 1+\lambda, \\ |e_2'\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \qquad E_2 = 1-\lambda. \end{aligned} \tag{29}$$

www.Endbook.net

بنابراین در حد $\lambda \longrightarrow 0$ حالت های جدید به حالت های $|1'\rangle$ و $|2'\rangle$ تبدیل می شوند. درسی که از این مثال می گیریم آن است که وقتی بسط اختلالی را برای حالت های واگن می نویسیم، این بسط در حد $\lambda \longrightarrow 0$ به سمت ترکیب خطی معینی از حالت های واگن میل می کند که این ترکیب خطی دلخواه نیست. این ترکیب در واقع چنان است که پتانسیل اختلال در آن قطری است. حال با الهام از این مثال می توانیم مسئله اختلال برای حالت های واگن را به صورت کلی بررسی کنیم. فرض کنید که لایه واگن دارای درجه واگنی g باشد، یعنی

$$H_0|n^0,r\rangle = E_n^0|n^0,r\rangle, \qquad r=1,\cdots g. \tag{30}$$

حالت های $|n^0,r\rangle$ ویژه حالت های واگن هامیلتونی H_0 هستند. حال بسط اختلالی زیر را برای انرژی ها و حالت های جدید می نویسیم:

$$E_{n,r} = E_n^0 + \lambda E_{n,r}^1 + \lambda^2 E_{n,r}^2 + \lambda^3 E_{n,r}^3 + \cdots \tag{31}$$

$$|n,r\rangle = |\hat{n},r\rangle + \lambda|n^1,r\rangle + \lambda^2|n^2,r\rangle + \cdots, \tag{32}$$

که در آن $|\hat{n}^0,r\rangle$ ترکیبی بهنجار از حالت های واگن اولیه یعنی حالت های $|n^0,r\rangle$ هستند که می بایست آنها را پیدا کنیم. دقت کنید که این حالت ها همچنان ویژه حالت H_0 با ویژه مقدارِ E_n^0 هستند، یعنی

$$H_0|\hat{n}^0,r\rangle = E_n^0|\hat{n}^0,r\rangle, \qquad \langle\hat{n}^0,s|\hat{n}^0,r\rangle = \delta_{r,s}. \tag{33}$$

باجایگذاری این دو رابطه در معادله شرودینگر یعنی معادله

$$(H_0+\lambda V)|n,r\rangle = E_{n,r}|n,r\rangle \tag{34}$$

به رابطه زیر می رسیم:

$$(H_0+\lambda V)(|\hat{n}^0,r\rangle+\lambda|n^1,r\rangle+\lambda^2|n^2,r\rangle+\cdots,) = (E_n^0+\lambda E_{n,r}^1+\lambda^2 E_{n,r}^2+\lambda^3 E_{n,r}^3+\cdots)(|\hat{n}^0,r\rangle+\lambda|n^1,r\rangle+\lambda^2|n^2,r\rangle+\cdots)$$

حال توان های مختلف λ را در دو طرف مقایسه می کنیم و به معادلات زیر می رسیم:

$$H_0|\hat{n}^0,r\rangle = E_n^0|\hat{n}^0,r\rangle$$

$$V|\hat{n}^0,r\rangle + H_0|n^1,r\rangle = E_{n,r}^1|\hat{n}^0,r\rangle + E_n^0|n^1,r\rangle$$

www.Endbook.net

$$V|n^1,r\rangle + H_0|n^2,r\rangle = E^2_{n,r}|\hat{n}^0,r\rangle + E^1_n|n^1,r\rangle + E^0_n|n^2,r\rangle \cdots \tag{35}$$

معادله اول همان معادله دقیق مربوط به ویژه حالت های H_0 است. اطلاعات بیشتر را می توان از معادلات دوم به بعد بدست آورد. برای این کار ابتدا معادله دوم را از چپ در $\langle\hat{n}^0,s|$ ضرب می کنیم و از رابطه های ی 33 استفاده می کنیم. پس از ساده کردن بدست می آوریم:

$$\langle\hat{n}^0,s|V|\hat{n}^0,r\rangle = E^1_{n,r}\delta_{r,s}. \tag{36}$$

این رابطه به این معناست که پتانسیل اختلال در پایه $|\hat{n}^0,r\rangle$ ها قطری است یعنی این حالت ها چیزی نیستند جز ویژه حالت های پتانسیل اختلال و تصحیح های رتبه یک هر کدام از این حالت ها نیز چیزی نیست جز ویژه مقدار مربوطه که روی قطر قرار گرفته است. این رابطه تعمیم مستقیم رابطه‌ی 7 است، درست مثل این است که آن رابطه حالت خاص این رابطه است برای وقتی که درجه واگنی برابر با یک باشد. برای پیدا کردن تصحیح مرتبه یک بردارها طرفین رابطه دوم را در یک حالت دیگر که مربوط به این ویژه فضای واگن نیست مثل $\langle m^0|$ ضرب می کنیم. طبیعی است که $E^0_m \neq E^0_n$. دقت کنید که دراینجا دیگر مهم نیست که آیا حالت های دیگر واگن هستند یا نه. از این ضرب کردن و سپس ساده کردن بدست می آوریم:

$$\langle m^0|n^1,r\rangle = \frac{\langle m^0|V|\hat{n}^0,r\rangle}{(E^0_n - E^0_m)}. \tag{37}$$

این رابطه تصویر $|n^1,r\rangle$ را روی تمام حالت های دیگر یعنی روی حالت های $|m^0,r\rangle$ بدست می دهد و درباره‌ی تصویر این حالت روی بردارهای پایه ویژه فضای واگن یعنی $|\hat{n}^0,r\rangle$ چیزی نمی گوید. برای آنکه حالت های جدید همچنان در رتبه یک متعامد و بهنجار باقی بمانند، می بایست مقدار این مولفه‌ها را مثل قبل برابر با صفر قرار دهیم. استدلالی که دراینجا لازم است تعمیم سرراست استدلالی است که برای یک حالت غیر واگن به کار بردیم، به این معنا که فرض کنید

$$|n,r\rangle = |\hat{n}^0,r\rangle + \lambda|n^1,r\rangle + O(\lambda^2), \tag{38}$$

دراین صورت داریم

$$\langle n,s|n,r\rangle = \delta_{r,s} + \lambda(\langle\hat{n}^0,s|n^1,r\rangle + \langle\hat{n}^0,r|n^1,s\rangle) + O(\lambda^2) \tag{39}$$

برای آنکه حالت های جدید تا رتبه اول اختلال همچنان متعامد بهنجار باشند لازم است که $\langle\hat{n}^0,r|n^1,s\rangle = 0$. بنابراین بدست می آوریم:

$$|n^1,r\rangle = \sum_{m\neq n} \frac{\langle m^0|V|\hat{n}^0,r\rangle}{E^0_n - E^0_m}|m^0\rangle. \tag{40}$$

یعنی تا رتبه اول حالت ها برابرند با:

$$|n,r\rangle = |\hat{n}^0,r\rangle + \lambda\sum_{m\neq n} \frac{\langle m^0|V|\hat{n}^0,r\rangle}{E^0_n - E^0_m}|m^0\rangle + \cdots. \tag{41}$$

www.Endbook.net

برای آنکه مقدار تصحیح انرژی را تا رتبه ۲ بدست آوریم، رابطه سوم از 35 را از چپ در $\langle \hat{n}^0, r|$ ضرب می کنیم و بدست می آوریم:

$$E^2_{n,r} = \langle \hat{n}^0, r|V|n^1, r\rangle, \tag{42}$$

و یا پس از جایگذاری 41،

$$E^2_{n,r} = \sum_{m\neq n} \frac{|\langle \hat{n}^0, r|V|m^0\rangle\rangle|^2}{E^0_n - E^0_m}. \tag{43}$$

درسی که از این تجزیه تحلیل می گیریم آن است که یک بار که پتانسیل اختلال را در زیرفضای واگن قطری کردیم و ویژه حالت های آن یعنی $|\hat{n}^0, r\rangle$ را بدست آوردیم، روش اختلال و روابط مربوط به آن کاملاً شبیه به حالت غیرواگن خواهد بود و هیچ چیزی تغییر نخواهد کرد، تنها کافی است که در روابط مربوط از حالت های $|\hat{n}^0, r\rangle$ بجای حالت های اولیه $|n^0, r\rangle$ استفاده کنیم.

۴ مثال ها ی بیشتر از کاربرد نظریه اختلال

دراین بخش مثال های بیشتری از کاربرد نظریه اختلال را مطالعه می کنیم. اهمیت این مثال ها از آن جهت است که پدیده‌های واقعی را در اتم ها بررسی می کنند. ازآنجا که دو مثالی که دراین بخش بررسی می کنیم مربوط به تغییر طیف اتم ها در حضور میدان های مغناطیسی (اثرزیمان) و الکتریکی (اثر اشتارک) است، نخست به بررسی کلی هامیلتونی یک ذره در میدان الکترومغناطیسی می پردازیم.

۱.۴ برهم کنش اتم و میدان الکترومغناطیسی

می دانیم که هامیلتونی یک ذره در حضور میدان الکترومغناطیسی ای که با پتانسیل های اسکالر و برداری (ϕ, A) توصیف می شود عبارت است از:

$$H = \frac{1}{2m}(P - eA)^2 - e\phi(r) \tag{44}$$

پس از بسط جمله مربعی و توجه به این که در مکانیک کوانتومی عملگرتکانه با مختصات و درنتیجه با A جابجا نمی شود خواهیم داشت:

$$H = \frac{1}{2m}(P^2 + e^2A^2 - eP\cdot A - eA\cdot P) - e\phi(r), \tag{45}$$

www.Endbook.net

ویا

$$H = \frac{1}{2m}(-\hbar^2\nabla^2 + e^2A^2 + ie\hbar\nabla\cdot A + ie\hbar A\cdot\nabla) - e\phi(r). \tag{46}$$

اما می دانیم که

$$\nabla\cdot A\psi = (\nabla\cdot A)\psi + A\cdot\nabla\psi \tag{47}$$

هم چنین داریم

$$A = \frac{1}{2}B\times r. \tag{48}$$

با توجه به این رابطه می توان نشان داد که جمله مربعی برای میدان های مغناطیسی متعارف کاملاً ناچیز و قابل صرف نظرکردن است. در واقع از نظر اندازه بزرگی داریم:

$$A^2 \approx \frac{1}{4}B^2\langle r^2\rangle \approx \frac{1}{4}B^2a_0^2, \tag{49}$$

که درآن a_0 شعاع بوهراست خواننده می تواند نشان دهد که از این جمله می توان در برابر جمله خطی برای اندازه های متعارف میدان مغناطیسی صرف نظر کرد. در نتیجه

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m}(-\hbar^2\nabla^2 + 2ie\hbar A\cdot\nabla) - e\phi(r) \\ &= \frac{1}{2m}(-\hbar^2\nabla^2 + ie\hbar(B\times r)\cdot\nabla) - e\phi(r) \\ &= \frac{1}{2m}(-\hbar^2\nabla^2 + ie\hbar(B\cdot r)\times\nabla) - e\phi(r) \\ &= \frac{1}{2m}(-\hbar^2\nabla^2 - eB\cdot L) - e\phi(r), \end{aligned} \tag{50}$$

که درآن L تکانه زاویه‌ای مداری است. دربخش های آینده این درس به مطالعه دو پدیده می پردازیم که کاربرد روش اختلال را به خوبی نشان می دهند. این دو پدیده اثر زیمان $Zeemann\ \ Effect$ واثر اشتارک $Start\ \ \ Effect$ نام دارند.

۲.۴ اثر زیمان

اثر زیمان عبارت است از شکافتگی خطوط طیفی اتم هیدروژن یا هراتم یا مولکول دیگری در میدان مغناطیسی. این شکافتگی ناشی از تغییرانرژی ای است که دراثر برهم کنش گشتاور مغناطیسی مداری الکترون با میدان مغناطیسی ایجاد می شود. الکترون در حرکت مداری خود به دور هسته مثل یک حلقه جریان عمل می کند که یک گشتاور مغناطیسی به اندازه μ دارد. برهم کنش این حلقه با میدان مغناطیسی باعث تغییرانرژی یک الکترون نسبت به حالتی می شود که میدان مغناطیسی وجود

www.Endbook.net

ندارد. می توانیم اندازه این تغییرانرژی را تخمین بزنیم. اگر اندازه حرکت زاویه ای الکترون برابر با $m\hbar$ باشد، انرژی این گشتاور مغناطیسی درمیدان مغناطیسی B برابر است با

$$\Delta E \sim \frac{e}{2\mu c}\hbar m B \tag{51}$$

دریک میدان مغناطیسی به اندازه 10^4 گاووس این تغییرانرژی برای الکترون با جرمِ حدودِ 10^{-27} گرم و بارالکتریکی 4.8×10^{-10} esu حدوداً برابر است با

$$\begin{aligned} \Delta E &\sim \frac{4.8 \times 10^{-10}}{2 \times 10^{-27} \times 3 \times 10^{10}} \times 10^{-27} \times 10^4 \sim 10^{-16}\ erg \\ &\sim 10^{-23}\ Joule \sim 10^{-4} \quad \text{الکترون ولت}. \end{aligned} \tag{52}$$

بنابراین این تغییر در مقایسه با انرژی تراز ها و اختلاف آنها که از مرتبه ۱ الکترون ولت است بسیارکوچک ولی با این وجود قابل مشاهده است. این به این معناست که فرکانس و یا طول موج نورهای ساطع شده از اتم هیدروژن در میدان مغناطیسی به اندازه 10^{-4} برابر مقداراولیه خود جابجا می شوند و این مقداری است که درطیف نگاری های دقیق براحتی قابل تشخیص است.
برای حل دقیق تراین مسئله می بایست از هامیلتونی زیر شروع کنیم

$$H = H_0 - \frac{e}{2\mu}B \cdot L = H_0 - \frac{eB}{2\mu}L_z \tag{53}$$

که درآن H_0 هامیلتونی اتم هیدروژن است. ازآنجا که همه ترازهای انرژی اتم هیدروژن بجز حالت پایه واگن هستند می بایست از روش اختلال واگن استفاده کنیم. خوشبختانه جمله پتانسیل در هرکدام از زیرفضاهای واگن خود بخود قطری است و نیازی به قطری کردن آن نیست. درواقع داریم

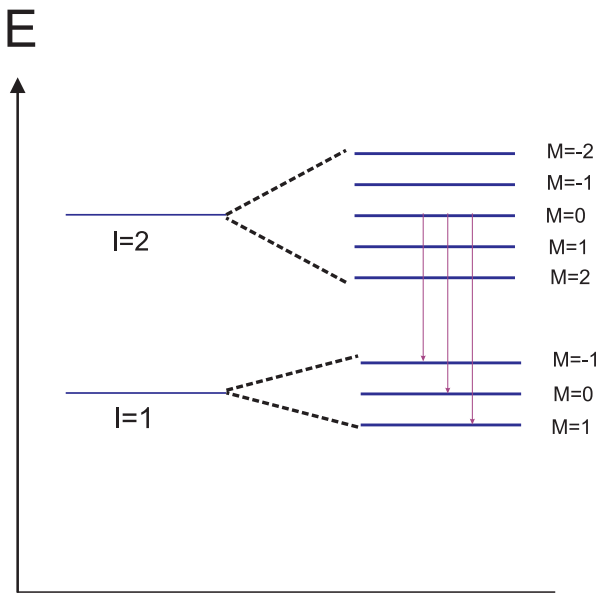
$$\langle n, l', m'|V|n, l, m\rangle = -\frac{eB}{2\mu}\langle l', m'|L_z|l, m\rangle = -\frac{eB}{2\mu}\hbar m \delta_{l',l}\delta_{m',m}. \tag{54}$$

این امر نشان می دهد که ترازهای انرژی جدید برابرند با:

$$E_{n,l,m} = -\frac{Ry}{n^2} - \frac{eB}{2\mu}\hbar m. \tag{55}$$

این که پتانسیل درپایه جدید قطری است ناشی ازآن است که درحضور میدان مغناطیسی درست است که دیگر تقارن کامل دورانی نداریم ولی هنوز تقارن حول محور z (حول میدان مغناطیسی) وجود دارد. بنابراین هامیلتونی جدید هنوز با مولد این تقارن یعنی L_z جابجا می شود و بنابراین می توان ویژه پایه ای مشترک برای H و L_z یافت.
درپدیده زیمان هر دسته تراز $2l+1$ تایی انرژی $|n, l, m\rangle$ برای $(m = -l, \cdots l)$ که قبلا همگی یک مقدار انرژی داشتند $2l+1$

www.Endbook.net



شکل ۳: اثر زیمان. درست است که یک حالت با $l = 2$ به پنج حالت و یک حالت با $l = 1$ به سه حالت شکافته می شود ولی فوتون تنها می تواند گذارهایی با $\Delta m = 0, \pm 1$ انجام دهد.

انرژی متفاوت پیدا می کنند. این وضعیت درشکل (??) نشان داده شده است. اما این به این معنانیست که هر خط طیفی به تعداد زیادی خطوط نزدیک به هم تجزیه می شود. درحقیقت طیف نگاری دقیق نشان می دهد که هر خط طیفی حداکثر به سه خط با فاصله مساوی ازهم تجزیه می شود. دلیل این امر آن است که هرنوع گذاری بین خطوط ممکن نیست. ازآنجا که فوتون تکانه زاویه ای برابر با 1 دارد تنها گذار بین ترازهایی ممکن است که برای آنها $\Delta m = 0, \pm 1$ باشد. بنابراین بین انرژی های (55) تنها گذارهای زیر اتفاق می افتد:

$$\hbar\omega' = E_{n,l',m'} - E_{n,l,m} = (\frac{Ry}{n^2} - \frac{Ry}{n'^2}) + \frac{eB}{2\mu}\hbar\Delta m = \hbar\omega + \frac{eB}{2\mu}\hbar\Delta m \qquad (56)$$

که درآن ω فرکانس یک خط طیفی درغیاب میدان مغناطیسی است. به عبارت دیگر داریم

$$\omega' = \omega, \quad \text{یا} \quad \omega' = \omega \pm \frac{eB}{2\mu}. \qquad (57)$$

این موضوع بوضوح نشان می دهد که دراثر حضور میدان مغناطیسی در دو طرف یک خط طیفی دو خط دیگر با فاصله $\frac{eB}{2\mu}$ بوجود می آید.

۳.۴ اثر اشتارک برای حالت پایه اتم هیدروژن

دردرس های فیزیک پایه دیده ایم که هرگاه اتمی درمیدان الکتریکی قرارگیرد مرکز بارهای مثبت و منفی آن ازهم جدا شده و یک دو قطبی الکتریکی در اتم القا می شود. این اثر درمکانیک کوانتومی به اثر اشتارک معروف است. قبل از محاسبه دقیق می توان تخمینی از مرتبه دوقطبی الکتریکی که دریک اتم القا می شود بدست آورد. هرگاه اندازه دوقطبی الکتریکی یک اتم را با

www.Endbook.net

P و اندازه میدان الکتریکی را با $\mathcal{E}$ نشان دهیم دراین صورت می دانیم که $P = \alpha\mathcal{E}$ که درآن α ضریبی است با دیمانسیون حجم یا طول به توان سه. تنها طولی که دریک اتم مثلا اتم هیدروژن وجود دارد شعاع بوهراست. بنابراین انتظار داریم که دو قطبی الکتریکی از مرتبه $P \sim a_0^3\mathcal{E}$ باشد. برای بررسی دقیق اثر اشتارک می بایست ازهامیلتونی زیر شروع کنیم که درآن H_0 هامیلتونی اتم درغیاب میدان الکتریکی است. دراینجا اتم هیدروژن را درنظر می گیریم.

$$H = H_0 - e\mathcal{E}z \tag{58}$$

نخست تغییر انرژی حالت پایه اتم هیدروژن یعنی حالت $(n,l,m) = (1,0,0)$ را در رتبه اول حساب می کنیم. داریم

$$E^1_{1,0,0} = -e\mathcal{E}\langle 1,0,0|z|1,0,0\rangle \tag{59}$$

اما عنصر ماتریسی بالا برابر با صفر است. این امر را به طرق مختلف می توان دریافت. ساده ترین راه آن است که توجه کنیم حالت پایه اتم هیدروژن تقارن کامل کروی دارد (زیرا $Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}$) و بنابراین انتگرال z روی این حالت صفر می شود. راه دوم که درمواقع دیگر نیز مفید خواهد بود توجه به پاریته حالت های $|l,m\rangle$ است. از درس مربوط به تقارن زاویه ای در سه بعد می دانیم که $\Pi|l,m\rangle = (-1)^l|l,m\rangle$. بنابراین با توجه به اینکه $\Pi z + z\Pi = 0$ نتیجه می گیریم که عنصر ماتریسی بالا صفراست. پس در رتبه یک اثر اشتارک هیچ نوع تغییری در انرژی حالت پایه ندارد. حال تغییر رتبه دوم را حساب می کنیم. داریم

$$E^2_{1,0,0} = e^2\mathcal{E}^2 \sum_{n=2}\sum_{l,m} \frac{|\langle n,l,m|z|1,0,0\rangle|^2}{E_1 - E_n} \tag{60}$$

می توان عنصر ماتریسی را به طور صریح حساب کرد. داریم

$$\langle n,l,m|z|1,0,0\rangle = \int r^2 dr d\Omega R_{n,l}(r)Y^*_{l,m}(\theta,\phi)(r\cos\theta)R_{1,0}(r)Y_{0,0}(\theta,\phi). \tag{61}$$

با توجه به تساوی های زیر

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \qquad Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \tag{62}$$

نتیجه می گیریم که

$$\int d\Omega Y^*_{l,m}\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{1,0}\sqrt{\frac{1}{4\pi}} = \frac{1}{\sqrt{3}}\int d\Omega Y^*_{l,m}Y_{1,0} = \frac{1}{\sqrt{3}}\delta_{l,1}\delta_{m,0}. \tag{63}$$

www.Endbook.net

حال انتگرال شعاعی را حساب می کنیم: این انتگرال برابر است با

$$I_R = \int_0^\infty r^2 dr R_{n,1,0}(r) r R_{1,0,0}(r). \tag{64}$$

مقدار این انتگرال به طور دقیق قابل محاسبه است اگر چه ما دراین درس آن را محاسبه نخواهیم کرد. مقدار این انتگرال برابر است با:

$$|\langle n,1,0|z|1,0,0\rangle|^2 = \frac{1}{3}\frac{2^8 n^7 (n-1)^{2n-5}}{(n+1)^{2n+5}} a_0^2 =: f(n) a_0^2 \tag{65}$$

که درآن a_0 شعاع بوهر است و تابع $f(n)$ عبارت کنار a_0^2 است. باتوجه به اینکه $E_n = -R_y \frac{1}{n^2}$ و جمع و جور کردن محاسبات خواهیم داشت

$$E^2_{1,0,0} = -\frac{(e\mathcal{E}a_0)^2}{Ry} \sum_{n=2} \frac{f(n)}{1-\frac{1}{n^2}}. \tag{66}$$

ضریب پشت سری را می توان به شکل ساده تری نیز نوشت: می دانیم که $Ry = \frac{e^2}{2\ a_0}$. بنابراین

$$E^2_{1,0,0} = -2a_0^3 \mathcal{E}^2 \sum_{n=2} \frac{f(n)}{1-\frac{1}{n^2}}. \tag{67}$$

سری فوق یک سری واگراست و مقدار عددی آن را می توان بایک برنامه ساده براحتی حساب کرد. با محاسبه این سری درمی یابیم که مقدار $E_{1,0,0}$ برابراست با

$$E^2_{1,0,0} = -1.43313\ a_0^3 \mathcal{E}^2. \tag{68}$$

حال می توانیم میزان قطبش الکتریکی ایجاد شده دریک اتم را حساب کنیم. می دانیم که دوقطبی اﻟﻘا شده دراتم متناسب با میدان الکتریکی است. یعنی $p = \alpha\mathcal{E}$ که درآن α ضریب قطبش پذیری اتم است. وقتی که میدان الکتریکی را تغییر می دهیم اندازه دوقطبی الکتریکی نیز تغییر می کند و انرژی لازم برای این تغییر برابر است با $dU = -pd\mathcal{E} = -\alpha\mathcal{E}d\mathcal{E}$. بنابراین کل انرژی ذخیره شده وقتی که میدان به مقدار نهایی $\mathcal{E}$ می رسد برابر است با $U = -\frac{1}{2}\alpha]^2$. با مقایسه این رابطه با رابطه (68) می توانیم ضریب قطبش پذیری اتم هیدروژن را پیدا کنیم:

$$\alpha = 2.86626 a_0^3. \tag{69}$$

تا کنون سعی کردیم که عبارت دقیقی را درچارچوب روش اختلال برای تغییر مرتبه دوم انرژی پیدا کنیم. این کار مستلزم محاسبه یک عنصر ماتریسی و جمع یک سری بود که کار محاسبه را طولانی می کرد. با محاسبه بسیار کمتری می توانیم یک

www.Endbook.net

حد پایین برای این تغییر انرژی پیدا کنیم. برای این کار به این نکته توجه می کنیم که

$$|E^2_{1,0,0}| = e^2\mathcal{E}^2\frac{1}{R_y^2}\sum_{n=2}\sum_{l,m}\frac{|\langle n,l,m|z|1,0,0\rangle|^2}{1-\frac{1}{n^2}} \tag{70}$$

درنتیجه

$$\begin{aligned} |E^2_{1,0,0}| &> e^2\mathcal{E}^2\frac{1}{R_y}\sum_{n=2}\sum_{l,m}|\langle n,l,m|z|1,0,0\rangle|^2 = e^2\mathcal{E}^2\frac{1}{R_y^2}\left(\sum_{n,l,m}|\langle n,l,m|z|1,0,0\rangle|^2 - |\langle 1,0,0|z|1,0,0\rangle|^2\right) \\ &= e^2\mathcal{E}^2\frac{1}{R_y^2}|\langle 1,0,0|z^2|1,0,0\rangle|, \end{aligned} \tag{71}$$

که درآن از کامل بودن پایهٔ $|n,l,m\rangle$ و هم چنین صفر بودن $\langle 1,0,0|z|1,0,0\rangle$ استفاده کرده ایم. اما با استفاده از تقارن دورانی می دانیم که

$$|\langle 1,0,0|z^2|1,0,0\rangle| = |\langle 1,0,0|x^2|1,0,0\rangle| = |\langle 1,0,0|y^2|1,0,0\rangle| = \frac{1}{3}|\langle 1,0,0|r^2|1,0,0\rangle|. \tag{72}$$

اما عنصر ماتریسی آخری براحتی قابل محاسبه است و برابراست با

$$\langle 1,0,0|r^2|1,0,0\rangle = \int_0^\infty r^4 dr R^2_{10}(r) = \int_0^\infty r^2 dr (2(\frac{1}{a_0})^{3/2}e^{-r/a_0})^2 = a_0^2 \tag{73}$$

بنابراین بدست می آوریم

$$|E^2_{1,0,0}| > e^2\mathcal{E}^2\frac{1}{3R_y}|\langle 1,0,0|r^2|1,0,0\rangle| = e^2\mathcal{E}^2\frac{1}{3R_y^2}a_0^2. \tag{74}$$

هرگاه به این نکته توجه کنیم که $R_y = \frac{1}{2}\frac{e^2}{a_0}$ آنگاه عبارت بالا به صورت زیر درمی آید:

$$|E^2_{1,0,0}| >= \frac{2}{3}a_0^3\mathcal{E}^2. \tag{75}$$

دقت کنید که مقداردقیقی که برای تغییرمرتبه دوم انرژی بدست آوردیم با این حد تطبیق می کند.

۴.۴ اثر اشتارک برای حالت برانگیخته اتم هیدروژن

حال می خواهیم اثر اشتارک را برای اولین حالت برانگیخته اتم هیدروژن یعنی حالت $n=2$ محاسبه کنیم. این حالت واگنی مرتبه چهار دارد. بنابراین می بایست ماتریس اختلال را دراین زیرفضای چهاربعدی که با حالت های $|2,0,0\rangle$ و

www.Endbook.net

$|2,1,1\rangle, |2,1,0\rangle, |2,1,-1\rangle$ جاروب می شود محاسبه کنیم. دراینجا می توانیم نهایت استفاده را از تقارن دورانی اتم هیدروژن ببریم و ثابت کنیم که از ۱۶ درایه این ماتریس چهارده درایه آن صفر هستند. برای این کار ثابت می کنیم که به طور کلی عنصر ماتریسی

$$\langle n', l', m'|z|n, l, m\rangle \propto \delta_{m,m'}\delta l, l' \pm 1. \tag{76}$$

برای اثبات این که این عنصر ماتریسی متناسب با $\delta_{m,m'}$ است کافی است به رابطه زیر توجه کنیم:

$$[z, L_z] = 0, \qquad \longrightarrow 0 = \langle n'.l'.m'|zL_z - L_z|n, l, m\rangle = (m - m')\langle n', l', m'|z|n, l, m\rangle. \tag{77}$$

برای اثبات این که این عنصر ماتریسی متناسب با $\delta_{l,l'\pm1}$ است کافی است که به پاریته حالت های $|l, m\rangle$ توجه کنیم واینکه z پاریته فرد دارد به عبارت دیگر به روابط زیر

$$\Pi z + z\Pi = 0 \quad \Pi|l, m\rangle = (-1)^l|l, m\rangle. \tag{78}$$

بنابراین ماتریس اختلال تنهادریک زیرفضای دوبعدی از فضای واگن چهاربعدی اولیه غیرصفر است و دراین زیر فضا که با بردارهای $|2,0,0\rangle$ و $|2,1,0\rangle$ جاروب می شود قیافه ماتریس اختلال عبارت است از

$$\mathcal{V} = -e\mathcal{E}\begin{pmatrix} 0 & \langle 2,0,0|z|2,1,0\rangle \\ \langle 2,1,0|z|2,0,0\rangle & 0 \end{pmatrix} = -e\mathcal{E}\begin{pmatrix} 0 & \eta \\ \eta & \end{pmatrix} \tag{79}$$

که درآن $\eta = \langle 2,0,0|z|2,1,0\rangle$ و برابر است با

$$\begin{aligned} \eta = \langle 2,0,0|z|2,1,0\rangle &= \int r^2 dr d\Omega R_{2,0}(r)Y^*_{0,0}R_{2,1}(r)Y_{1,0}(r\cos\theta) \\ &= \left(\int r^3 dr R_{2,0}R_{2,0}\right)\left(\int \frac{1}{\sqrt{4\pi}}Y_{1,0}\sqrt{4\pi}3Y_{1,0}d\Omega\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}}\int r^3 dr R_{2,0}R_{2,1} \end{aligned} \tag{80}$$

با توجه به اینکه

$$R_{20} = 2(\frac{1}{2a_0})^{\frac{3}{2}}(1 - \frac{r}{2a_0})e^{-r/a_0} \quad , \quad R_{21} = \frac{1}{\sqrt{3}}(\frac{1}{2a_0})^{\frac{3}{2}}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}, \tag{81}$$

انتگرال شعاعی به راحتی محاسبه می شود و مقدار η برابر می شود با $\eta = -\frac{128\sqrt{3}}{729}a_0 = -0.3041a_0$.
اکنون می بایست ویژه مقدارها و ویژه بردارهای $\mathcal{V}$ را بدست آوریم. بسادگی معلوم می شود که ویژه مقدارها برابرند با $-e\mathcal{E}\eta$ و $e\mathcal{E}\eta$ به ترتیب با ویژه بردارهای

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|2,0,0\rangle + |2,1,0\rangle\right), \qquad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2,0,0\rangle - |2,1,0\rangle). \tag{82}$$

www.Endbook.net

بنابراین نتیجه می گیریم که ازچهارحالت اولیه انرژی حالت های $|2,1,-1\rangle$ و $|2,1,1\rangle$ دست نخورده باقی می ماند و ترکیبی از دو حالت دیگر که دررابطه فوق نوشته شده اند انرژی شان به اندازه $\pm e\mathcal{E}\eta$ جابجا می شود.

در درس آینده از روش اختلال برای مطالعه اتم هیدروژن واقعی استفاده می کنیم یعنی وقتی که آثارمختلفی را که دراتم هیدروژن وجود دارند و تا کنون ازآنها صرف نظر کرده ایم مورد مطالعه قرار می دهیم.

www.Endbook.net

درس شانزدهم: اتم هیدروژن واقعی

۱ مقدمه

آنچه را که تاکنون به عنوان اتم هیدروژن مورد مطالعه قرار داده‌ایم، می توان اتم هیدروژن ایده‌آل نامید زیرا درآن تنها پتانسیل $\frac{e^2}{r}$ را که معرف مهترین برهم کنش بین الکترون و هسته است درنظرگرفته ایم. برای مطالعه کامل تر اتم هیدروژن می بایست اثرات دیگری را نیز درنظربگیریم. درنظرگرفتن این آثار باعث می شود که طیف اتم هیدروژن تفاوت هایی جزیی با اتم هیدروژن ایده‌آل پیدا کند. نخستین این اثرات آثارنسبیتیِ ناشی از سرعت زیاد الکترون است. دومین اثر ناشی از برهم کنش ممان مغناطیسی ذاتی الکترون با ممان مغناطیسی مداری آن است که اصطلاحاً می گوییم باعث شکافتِ ریزِ طیف یاساختارِ ریزِ طیف $Fine\ Structure$ می شود. بالاخره آخرین اثری که درنظرمی گیریم ناشی از برهم کنش ممان مغناطیسی الکترون وممان مغناطیسی هسته است که اصطلاحاً می گوییم باعث شکافتِ فوق ریزِ طیف یاساختارِ فوقِ ریزِ طیف $Hyperfine\ Structure$ می شود.

برای مطالعه تمام این آثار از روش اختلال تا مرتبه اول استفاده می کنیم.

قبل از پرداختن به محاسبات بهتراست چند رابطه مفید را درباره کمیت های مختلف دراتم هیدروژن به یاد بیاوریم.

انرژی حالت پایه اتم هیدروژن برابراست با

$$E_0 = -\frac{1}{2}mc^2\alpha^2 = -\frac{1}{2}\frac{e^2}{a_0} \tag{1}$$

که درآن $\alpha = \frac{1}{137}$ ثابت ساختار ریز و a_0 شعاع بوهر و حدوداً برابر با نیم آنگستروم است.

انرژی حالت n ام نیز برابراست با $E_n = \frac{E_0}{n^2}$.

شعاع بوهر نیز برابراست با

$$a_0 = \frac{1}{\alpha}\frac{\hbar}{mc}. \tag{2}$$

یادآوری می کنیم که $\frac{\hbar}{mc}$ طول موج کامپتونِ الکترون است.

www.Endbook.net

۲ اثر نسبیتی

دیدیم که سرعت الکترون ازمرتبه $\frac{1}{137}$ سرعت نوراست و به همین دلیل درتقریب صفرم از اثرات نسبیتی صرف نظرکردیم. برای دقت بیشتر می بایست این اثرات را بحساب بیاوریم. نخست می بایست هامیلتونی را تصحیح کنیم. برای انرژی جنبشی الکترون می بایست بجای $\frac{P^2}{2m}$ عبارت نسبیتی آن را به کاربریم که برابراست با

$$T = \sqrt{m^2c^4 + P^2c^2} - mc^2 = mc^2(1 + (\frac{p}{mc})^2)^{\frac{1}{2}} - mc^2 \tag{3}$$

با استفاده از بسط دو جمله‌ای یعنی $(1+x)^p \sim 1 + px + \frac{1}{2}p(p-1)x^2 + O(x^3)$ عبارت انرژی جنبشی را می توانیم به صورت زیر بسط دهیم

$$T = \frac{P^2}{2m} - \frac{1}{8}(\frac{p^4}{m^3c^2}) \tag{4}$$

اولین تصحیح به جمله انرژی جنبشی وقتی بدست می آید که تنها دوجمله اول و دوم را نگاه داریم. بنابراین هامیلتونی یک اتم هیدروژن گونه به صورت زیر خواهد بود:

$$H = H_0 - \frac{1}{8}\frac{P^4}{m^3c^2} = H_0 + H_1. \tag{5}$$

بهتراست که نخست مرتبه تصحیح انرژی را تخمین بزنیم. علامت $\approx$ را برای این تخمین بکار خواهیم برد. با این مقدمه می توانیم بنویسیم

$$H_1 \sim \frac{1}{4}\frac{1}{2}mc^2(\frac{P}{mc})^4 \sim \frac{1}{4}\frac{1}{2}mc^2(\frac{v}{c})^4 \sim \frac{1}{4}\frac{1}{2}mc^2\alpha^4 \sim \frac{1}{4}E_0\alpha^2. \tag{6}$$

بنابراین تصحیح انرژی ناشی از اثر نسبیتی حدوداً یک صدهزارم انرژی یک حالت است. بااین وجود این تصحیح را می بایست درنظرگرفت زیرا دقت اندازه گیری ها آنقدر هست که آن را آشکار کند.
حال به محاسبه دقیق این تصحیح درمرتبه اول اختلال می پردازیم. جمله H_1 را به صورت اختلال بررسی می کنیم. می دانیم که ترازهای اتم هیدروژن دریک لایه با $|n,l,m\rangle$ یعنی سه عدد کوانتومی نشان داده می شوند ولی انرژی آنها تنها به عدد کوانتومی n بستگی دارد. بنابراین ممکن است که درنگاه اول فکر کنیم که می بایست از روش اختلال واگن استفاده کنیم. اما کمی دقت نشان می دهد که پتانسیل H_1 درپایه $|n,l,m\rangle$ قطری است یعنی

$$\langle n,l'.m'|H_2|n,l,m\rangle \propto \delta_{l',l}\delta_{m',m}. \tag{7}$$

دلیل این امر آن است که عملگر H_2 با دوعملگری که ترازهای واگن را تعریف می کنند یعنی با L_z و L^2 جابجا می شود (زیرا H_1 یک عملگر اسکالر است). برای فهم رابطه فوق به محاسبه زیر توجه کنید:

$$0 = \langle n,l',m'|H_1L_z - L_zH_1]|n,l,m\rangle = (m-m')\langle n,l',m'|H_1|n,l,m\rangle. \tag{8}$$

www.Endbook.net

همین استدلال برای عملگر L^2 نیز بکار می رود. بنابر پتانسیل اختلال در پایه $|n,l,m\rangle$ ازهمان ابتدا قطری است و تنها کافی است که عناصر روی قطر آن را حساب کنیم تا تصحیح انرژی هر حالت را درمرتبه اول بدست آوریم. بنابراین خواهیم داشت

$$\Delta E_{n,l,m} = \langle n,l,m|H_1|n,l,m\rangle. \tag{9}$$

قبل از محاسبه این عنصر ماتریسی یک سوال خوب می توانیم بپرسیم و آن اینکه آیا تصحیح انرژی به هرسه عدد کوانتومی n,l,m بستگی دارد یا خیر؟ برای پاسخ به این سوال دقت می کنیم که هامیلتونی کامل یعنی H_0+H_1 هنوز یک اسکالر است و بنابراین تقارن دورانی دارد. ازآنجا که واگنی نسبت به عدد کوانتومی m ناشی از تقارن دورانی است ، تصحیح انرژی هرحالت هنوز این واگنی را حفظ می کند و بنابراین تصحیح انرژی به عدد کوانتومی m بستگی ندارد. یک راه دیگر برای فهم این نتیجه توجه به محاسبه زیراست. با توجه به اسکالر بودنِ H_1 و درنتیجه رابطهٔ $[H_1,L_-]=0$ می نویسیم

$$0 = \langle n,l,m|H_1L_- - L_-H_1|n,l,m+1\rangle, \tag{10}$$

امامی دانیم که

$$L_-|l,m+1\rangle = \sqrt{l(l+1)-(m+1)m}|l,m\rangle, \qquad \langle l,m|L_- = \sqrt{l(l+1)-(m+1)m}|l,m+1\rangle. \tag{11}$$

بنابراین خواهیم داشت

$$0 = \sqrt{l(l+1)-(m+1)m}\left(\langle n,l,m|H_1|n,l,m\rangle - \langle n,l,m+1|H_1|n,l,m+1\rangle\right). \tag{12}$$

این رابطه نشان می دهد که عنصر ماتریسی مستقل از m است. بنابراین باید بنویسیم

$$\Delta E_{n,l} = \langle n,l,m|H_1|n,l,m\rangle. \tag{13}$$

حال به محاسبه صریح این عنصر ماتریسی می پردازیم. ازاین مطلب استفاده می کنیم که

$$H_1 = \frac{-1}{8}\frac{P^4}{m^3c^2} = \frac{-1}{2mc^2}(\frac{P^2}{2m})^2 = \frac{-1}{2mc^2}\left(H_0+\frac{e^2}{r}\right)^2.$$

بنابراین

$$\Delta E_{n,l} \quad = \quad -\frac{1}{2mc^2}\langle n,l,m|H_0^2+\frac{e^4}{r^2}+H_0\frac{e^2}{r}+\frac{e^2}{r}H_0|n,l,m\rangle$$

www.Endbook.net

$$= \quad -\frac{1}{2mc^2}\left(E_n^2 + 2E_n e^2\langle\frac{1}{r}\rangle_{n,l} + e^4\langle\frac{1}{r^4}\rangle_{n,l}\right). \tag{14}$$

اما می دانیم که

$$\langle\frac{1}{r}\rangle_{n,l} = \frac{1}{a_0 n^2}, \qquad \langle\frac{1}{r^2}\rangle_{n,l} = \frac{1}{a_0^2 n^3 (l+\frac{1}{2})}. \tag{15}$$

باجایگذاری این مقادیر در رابطه قبلی خواهیم داشت

$$\Delta E_{n,l} = -\frac{1}{2mc^2}\left(E_n^2 + 2E_n e^2\frac{1}{a_0 n^2} + e^4\frac{1}{a_0^2 n^3 (l+\frac{1}{2})}\right). \tag{16}$$

با توجه به رابطه هایی که در مقدمه به آن اشاره کردیم تصحیح انرژی به صورت زیر ساده می شود:

$$\Delta E_{n,l} = \left[\frac{-3}{4n^2} + \frac{1}{n(l+\frac{1}{2})}\right]\alpha^2 E_n. \tag{17}$$

این رابطه نشان می دهد که درترازهای بالاتر اثرات نسبیتی کمتر می شود. دلیل این امر آن است که با افزایش n مرتبه سرعت به صورت $\frac{1}{n}$ کم می شود و این امر باعث کاهش اثرات نسبیتی می شود. برای اینکه این کاهش را ببینید کافی است که یک محاسبه ساده با استفاده از مدل اتمی بوهر انجام دهید.

۳ جفتیدگی اسپین مدار – شکافت ریز

دراین بخش تصحیح ناشی از برهم کنش ممان مغناطیسی الکترون را با میدان مغناطیسی ناشی از حرکت مداری آن بدست می آوریم. می دانیم که الکترون بدلیل تکانه زاویه ای ذاتی یا اسپین خود یک ممان مغناطیسی دارد که آن را با μ_s نشان می دهیم:

$$\mu = -\frac{g_e \epsilon}{2mc} S. \tag{18}$$

دراین رابطه g_e ثابت ژیرومغناطیسی الکترون نام دارد و مقدار آن به عدد 2 بسیار نزدیک است . به همین جهت ازاین به بعد می نویسیم $\mu = -\frac{\epsilon}{mc}\mathbf{S}$.
از دید ناظری که نسبت به الکترون ساکن است هسته اتم با بار e و سرعت $\mathbf{v}-$ خرکت می کند. چنین ذره ای یک میدان مغناطیسی تولید می کند که اندازه اش از روی میدان الکتریکی تولید شده توسط آن بدست می آید و برابراست با

$$B = \frac{v}{2c} \times E. \tag{19}$$

www.Endbook.net

دقت کنید که ضریب 2 درمخرج در حرکت مستقیم الخط وجود ندارد. بنابراین انرژی برهم کنش ممان مغناطیسی الکترون دراین میدان مغناطیسی برابراست با

$$H_2 \quad = \quad -\mu_s \cdot B = \frac{e}{mc} S \cdot \frac{v}{2c} \times E = \frac{e}{m^2 c} S \cdot \frac{P}{2c} \times \frac{e}{r^3} \vec{r} \tag{20}$$

ویا

$$H_2 = \frac{-e^2}{2m^2c^2} \frac{1}{r^3} S \cdot L. \tag{21}$$

حال همان مراحلی را که برای تصحیح نسبیتی طی کردیم برای این پتانسیل نیز طی می کنیم یعنی:

الف : مرتبه تصحیح را تخمین می زنیم

ب : نگاه می کنیم که آیا پتانسیل H_2 درپایه $|n,l,m\rangle$ قطری است یا خیر؟ اگر قطری نیست آیا پایه دیگری از حالت های موجود دراین تراز می توانیم انتخاب کنیم بطوری که پتانسیل H_2 درآن قطری باشد؟ برای این کار می بایست به رابطه جابجایی H_2 و L_z و L^2 نگاه کنیم.

ج: آیا این تصحیح واگنی موجود دریک تراز انرژی را از بین می برد؟ برای این کار می بایست به تقارن های H_2 به خصوص به تقارن آن تحت دوران نگاه کنیم. این تقارن با روابط جابجایی H_2 با مولد های دوران یعنی L_z و $L_\pm$ مشخص می شود.

حال این مراحل را یک به یک طی می کنیم. نخست مرتبه تصحیح:

$$H_2 \sim \frac{-e^2}{2m^2c^2} \frac{1}{a_0^3} \hbar^2 \sim \frac{e^2}{2a_0} \left(\frac{\hbar}{mc}\right)^2 \frac{1}{a_0^2} \sim E_0 \alpha^2. \tag{22}$$

که درآن از روابط درج شده در مقدمه استفاده کرده ایم. بنابراین این تصحیح از همان مرتبه تصحیح نسبیتی است.

حال به مرحله دوم می پردازیم. عملگر $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$ درپایه $|n,l,m\rangle$ قطری نیست. ولی $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$ را به شکل زیر می نویسیم

$$S \cdot L = \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2), \tag{23}$$

که درآن $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ تکانه زاویه ای کل است. این رابطه نشان می دهد که حالت هایی که تکانه زاویه ای کل آنها مشخص باشد، ویژه بردار $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$ و درنتیجه H_2 هستند. درفصل مربوط به جمع اندازه حرکت زاویه ای دیدیم که این حالت ها را می توان به شکل زیر نمایش داد

$$|j, m_j, l\rangle \tag{24}$$

www.Endbook.net

که ویژه بردارهای مشترک J^2، J_z و L^2 هستند. ضمناً می دانیم که از $2 \times (2l+1)$ حالت $|l,m\rangle|+\rangle$ و $|l,m\rangle|-\rangle$ می توان یک دسته $2l+2$ تایی با $j = l + \frac{1}{2}$ و یک دسته $2l$ تایی دیگر با $j = l - \frac{1}{2}$ ساخت.
ازآنجا که H_2 دراین پایه قطری است می توانیم بنویسیم

$$\Delta E_{n,j,m_j,l} = \langle n, j, m_j, l|H_2|n, j, m_j, l\rangle. \tag{25}$$

حال می توانیم به مرحله سوم بپردازیم و آن اینکه آیا این تصحیح انرژی به همه اعداد کوانتومی بستگی دارد یا خیر. برای پاسخ به این سوال بازهم به تقارن دورانی توجه می کنیم و اینکه عملگر $\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}$ و درنتیجه H_2 درفضای هیلبرت کل (فضایی + اسپینی) یک اسکالر است یعنی

$$[H_2, J_z] = [H_2, J_\pm] = 0. \tag{26}$$

این تقارن نشان می دهد که تصحیح انرژی به m_j بستگی ندارد. بنابراین می نویسیم

$$\Delta E_{n,j,l} = \langle n, j, m_j, l|H_2|n, j, m_j, l\rangle. \tag{27}$$

حال این عنصر ماتریسی را صریحاً محاسبه می کنیم.

$$\begin{aligned}\Delta E_{n,j,l} &= \langle n, j, m_j, l|\frac{-e^2}{2m^2c^2}\frac{1}{r^3}\frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2)|n, j, m_j, l\rangle \\ &= \frac{-e^2}{2m^2c^2}\langle\frac{1}{r^3}\rangle_{n,l}\left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right).\end{aligned} \tag{28}$$

با توجه به اینکه

$$\langle\frac{1}{r^3}\rangle_{n,l} = \frac{1}{a_0^3}\frac{1}{n^3\ l\ (l+1/2)(l+1)} \tag{29}$$

با جایگزینی این مقدار در رابطه قبلی بدست می آوریم

$$\begin{aligned}\Delta E_{n,j,l} &= \langle n, j, m_j, l|\frac{-e^2}{2m^2c^2}\frac{1}{r^3}\frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2)|n, j, m_j, l\rangle \\ &= \frac{-e^2}{2m^2c^2}\ \frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{a_0^3 n^3\ l(l+1/2)(l+1)}.\end{aligned} \tag{30}$$

ویا پس از کمی ساده کردن

$$\Delta E_{n,j=l+1/2,l} = \frac{-1}{2}E_n\alpha^2\frac{l}{n\ l\ (l+1/2)(l+1)}$$

www.Endbook.net

$$\Delta E_{n,j=l-1/2,l} = \frac{-1}{2} E_n \alpha^2 \frac{-l-1}{n\ l\ (l+1/2)(l+1)}. \quad (31)$$

۴ جفتیدگی اسپین اسپین – شکافت فوق ریز

شکافت فوق ریز ناشی از برهم کنش ممان مغناطیسی الکترون با ممان مغناطیسی هسته است. هسته اتم باجرم M_N، بار $+e$، اسپین $\mathbf{I}$ و ضریب ژیرومغناطیسی g_N ممان مغناطیسی زیر را دارد.

$$M = \frac{g_N e}{2M_N c} I \quad (32)$$

این ممان مغناطیسی درنقطه $\mathbf{r}$ یک پتانسیل برداری تولید می کند که با رابطه زیر داده می شود

$$A = -\frac{1}{4\pi}(M \times \nabla)\frac{1}{r} = \frac{1}{4\pi} M \times \frac{r}{r^3}. \quad (33)$$

میدان مغناطیسی ناشی از این پتانسیل برداری برابراست با

$$B = \nabla \times A = \frac{1}{4\pi} \nabla \times (M \times \frac{r}{r^3}). \quad (34)$$

کمی محاسبه و استفاده از اتحاد های برداری نشان می دهد که میدان مغناطیسی برابراست با:

$$B = -\frac{1}{4\pi}\left[(\nabla^2 \frac{1}{r})M - (M \cdot \nabla)\nabla \frac{1}{r}\right]. \quad (35)$$

ازطرفی می دانیم که ممان مغناطیسی الکترون برابراست با

$$\mu = \frac{-e}{mc} S. \quad (36)$$

انرژی برهم کنش ممان مغناطیسی الکترون واین میدان مغناطیسی که آن را با H_3 نشان می دهیم برابر است با:

$$\begin{aligned} H_3 &= \mu \cdot B = \frac{1}{4\pi}(\frac{e}{mc})(\frac{g_N e}{2M_N c})\left[(\nabla^2 \frac{1}{r})S \cdot I - (I \cdot \nabla)(S \cdot \nabla)\frac{1}{r}\right] \\ &= -\gamma \left[(\nabla^2 \frac{1}{r})S \cdot I - (I \cdot \nabla)(S \cdot \nabla)\frac{1}{r}\right] \end{aligned} \quad (37)$$

که درآن γ ضریب پشت کروشه است.

حال که هامیلتونی برهم کنش را بدست آورده ایم می خواهیم تصحیح انرژی را محاسبه کنیم. برای سادگی این تصحیح را فقط برای اربیتال های S یعنی حالت های $|n,0,0\rangle$ محاسبه می کنیم. در نمادی که برای نمایش دادن این اوربیتال بکاربرده

www.Endbook.net

ایم هیچ اثری از عدد کوانتومی اسپین الکترون دیده نمی شود. هم چنین اسپین هسته نیز وارد نشده است. می توانیم می توانیم از نوشتن اعداد کوانتومی $m=0$ و $l=0$ صرف نظر کنیم و درعوض توجه خود را به این اعداد کوانتومی معطوف کنیم و یک حالت را با $|n,\alpha,\beta\rangle$ نمایش دهیم که درآن $\alpha=\pm$ و $\beta=\pm$ به ترتیب نشان دهنده اسپین الکترون و هسته هستند. یادآوری می کنیم که هرگاه اسپین هسته را نیز درنظربگیریم هر تراز $|n,l,m\rangle$ از اتم هیدروژن ایده آل ازجمله تراز $|n,0,0\rangle$ که برای سادگی آن را با $|n\rangle$ نشان می دهیم یک واگنی 4 گانه دارد که این واگنی ناشی از درجات آزادی اسپینی الکترون و هسته است. به عبارت دیگر حالت های $|n,+,+\rangle,\ |n,+,-\rangle,\ |n,-,+\rangle,\ |n,-,-\rangle$ همه یک انرژی دارند. این واگنی دراثر برهم کنش اسپین – اسپین ازبین می رود و ما اکنون درصدد هستیم که این تغییرات را حساب کنیم. نخست انتگرال های فضایی را حساب می کنیم . بنابراین

$$\langle n|H_3|n\rangle=-\gamma\int\psi_{n,0,0}\left[(\nabla^2\frac{1}{r})S\cdot I-(I\cdot\nabla)(S\cdot\nabla)\frac{1}{r}\right]\psi_{n,0,0}d^3r \tag{38}$$

برای محاسبه طرف راست دقت می کنیم که جمله دوم داخل کروشه را درطرف راست با توجه به تقارن دورانی توابع موج می توان به شکل زیرنوشت:

$$(I\cdot\nabla)(S\cdot\nabla)\frac{1}{r}=\frac{1}{3}(I\cdot S)\nabla^2\frac{1}{r}. \tag{39}$$

بنابراین طرف راست برابر است با

$$-\frac{2}{3}\gamma\int\psi_{n,0,0}\left[\nabla^2\frac{1}{r}\right]\psi_{n,0,0}d^3r \tag{40}$$

باتوجه به اینکه $\nabla^2\frac{1}{r}=-4\pi\delta^3(r)$ و $\psi_{n,0,0}(\mathbf{r})=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}R_{n,0,0}(r)$ عبارت بالا برابر است با

$$\frac{2}{3}\gamma|R_{n,0,0}(0)|^2. \tag{41}$$

مقدار $|R_{n,0,0}(0)|^2$ برابراست با $\frac{4}{n^3a_0^3}$. (برای اثبات این می توانید به یک کتاب پیشرفته مکانیک کوانتومی مثل کتاب $Bethe$ و $Salpeter$ نگاه کنید.)

باکنارهم قراردادن این مقادیر بدست می آوریم

$$\langle n|H_3|n\rangle=\frac{8}{3}\gamma\frac{1}{n^3a_0^3}S\cdot I. \tag{42}$$

با توجه به آنچه که درباره واگنی مربوط به اسپین گفتیم این رابطه را می بایست به شکل دقیق تر زیر بنویسیم

$$\langle n,\alpha',\beta'|H_3|n,\alpha,\beta\rangle=\frac{8}{3}\gamma\frac{1}{n^3a_0^3}\langle\alpha',\beta'|S\cdot I|\alpha,\beta\rangle. \tag{43}$$

www.Endbook.net

اما می دانیم که عملگر $\mathbf{S}\cdot\mathbf{I}$ درپایه $|n,\alpha,\beta\rangle$ قطری نیست. اما درست شبیه به کاری که درمورد جفتیدگی اسپین مدار انجام دادیم دراین مورد هم می توانیم به این نکته توجه کنیم که $\mathbf{S}\cdot\mathbf{I}$ را می توان به شکل زیر نوشت

$$S\cdot I=\frac{1}{2}(F^2-I^2-S^2)=\frac{1}{2}(F^2-\frac{3}{2}). \tag{44}$$

که درآن $\mathbf{F}=\mathbf{S}+\mathbf{I}$ اسپین کل هسته و الکترون است. بنابراین درپایه ای که اسپین کل هسته و الکترون درآن مشخص است H_3 قطری است. بنابراین بجای پایه $|\alpha,\beta\rangle$ حالت های $Singlet$ با $F=0$ و $Triplet$ با $F=1$ را درنظرمی گیریم یعنی حالت های

$$Singlet=\frac{1}{\sqrt{2}}(|+,-\rangle-|-,+\rangle), \tag{45}$$

و

$$Triplet=\begin{cases}|+,+\rangle\\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|+,-\rangle+|-,+\rangle)\\ |-,-\rangle\end{cases} \tag{46}$$

تغییر انرژی حالت $Singlet$ برابر خواهد بود با

$$\Delta E(F=0)=\frac{8}{3}\gamma\frac{1}{n^3a_0^3}\times\frac{-3}{4}=-2\gamma\frac{1}{n^3a_0^3} \tag{47}$$

و تغییر انرژی حالت های $Triplet$ برابر خواهد بود با

$$\Delta E(F=1)=\frac{8}{3}\gamma\frac{1}{n^3a_0^3}\times\frac{1}{4}=\frac{2}{3}\gamma\frac{1}{n^3a_0^3}. \tag{48}$$

تفاوت انرژی این دو لایه برابر است با

$$\Delta E=\Delta E(F=1)-\Delta E(F=0)=\frac{8}{3}\gamma\frac{1}{n^3a_0^3}. \tag{49}$$

برای لایه $n=1$ تفاوت انرژی این دولایه متناظر با طول موج

$$\lambda\approx 21.1\ \ cm \tag{50}$$

است.
خط ۲۱ سانتی متر هیدروژن، آنطورکه درنجوم و اختر فیزیک نامیده می شود اهمیت فوق العادی ای درمشاهدات اخترفیزیکی

www.Endbook.net

دارد. دلیل این امر آن است که درحالت عادی یک اتم هیدروژن در پایین ترین حالت انرژی یعنی $n=1,\ F=0$ است. دراین حالت بخاطر یک قاعده انتخاب که بعداً با آن آشنا خواهیم شد اتم نمی تواند فوتونی را جذب کرده و به حالت بالاتر یعنی $n=1,\ F=1$ تحریک شود. اما برخورد با دیگر اتم های هیدروژن می تواند باعث تحریک آن به این لایه بشود. دربازگشت ازاین لایه اتم می تواند نوری با طول موج 21.1 سانی متر از خود ساطع کند که درطیف نگاری به آن خط ۲۱ سانتی متر هیدروژن گفته می شود. اخترفیزیکدانان با مطالعه این خط می توانند اطلاعات باارزشی از چگالی و دمای گازهای میان ستاره ای که عموماً از هیدروژن تشکیل یافته اند و هم چنین نحوه حرکت آنها بدست آورند. شدت و پهنای این خط به ترتیب به چگالی و دمای گاز هیدروژن مربوط هستند و جابجایی دوپلری این خط نیز سرعت حرکت گاز را تعیین می کند.

۵ اثر زیمان با درنظر گرفتن اسپین

درپایان این فصل می خواهیم اثر زیمان را با درنظرگرفتن اسپین الکترون یک باردیگر مطالعه کنیم. دریک میدان مغناطیسی ثابتِ B درراستای z، برهم کنش میدان مغناطیسی و ممان مغناطیسی مداری و اسپینی الکترون منجر به انرژی برهم کنش زیر می شود:

$$H_B = -(\mu_l + \mu_s)\cdot B = \frac{e}{2\mu c}(2S+L)\cdot B = \frac{e}{2\mu c}(2S_z + L_z)B, \tag{51}$$

که درآن جرم الکترون را برای اشتباه نشدن با عدد کوانتومی m با μ نشان داده ایم.

نخست بهتراست که مرتبه این انرژی را با تصحیح ناشی از برهم کنش اسپین مدار مقایسه کنیم. می دانیم که برهم کنش اسپین مدار از مرتبه $\alpha^2\frac{e^2}{a_0}$ است. باتوجه به اینکه $\frac{\hbar}{\mu c} = \alpha a_0$ ، خواهیم داشت

$$\frac{H_B}{H_{S-O}} \sim \frac{1}{\alpha}\frac{B\ a_0^2}{e} \sim 10^{-4}B. \tag{52}$$

درنتیجه درمیدان های مغناطیسی متعارف که از 10^4 گاووس کوچکترند، اثر زیمان بسیار کوچکتر از اثر جفتیدگی اسپین—مداراست. به همین جهت می بایست اثر زیمان را برای حالت های انرژی اتم هیدروژن واقعی بدست بیاوریم و نه اتم هیدروژن ایده آل. البته از جفتیدگی اسپین —اسپین می توانیم صرف نظرکنیم زیرا می دانیم که اثر آن حدوداً ۲۰۰۰ بار کوچکتراز جفتیدگی اسپین مداراست. ویژه حالت های انرژی برای اتم هیدروژن ایده آل با چهارعدد کوانتومی $|n,j,m_j = m+\frac{1}{2},l\rangle$ که درآن $j = l\pm\frac{1}{2}$ مشخص می شوند و می دانیم که طیف انرژی نسبت به m_j واگنی دارد. مطابق معمول نخستین سوالی که باید از خود بپرسیم آن است که آیا دراین پایه پتانسیل اختلال قطری است یاخیر؟ پاسخ این سوال مثبت است زیرا پتانسیل اختلال با عملگر J_z جابجا می شود. بنابراین خواهیم داشت:

$$\begin{aligned}\Delta E_{n,j,m+\frac{1}{2},l} &= \langle n,j,m+\frac{1}{2},l|H_B|n,j,m+\frac{1}{2},l\rangle = \frac{e}{2\mu c}\langle n,j,m+\frac{1}{2}l|J_z+S_z|n,j,m+\frac{1}{2},l\rangle \\ &= \frac{e}{2\mu c}\left(m+\frac{1}{2}+\langle n,j,m+\frac{1}{2},l|S_z|n,j,m+\frac{1}{2},l\rangle\right).\end{aligned} \tag{53}$$

www.Endbook.net

اما از درس مربوط به جمع تکانه زاویه ای می دانیم که

$$|j = l + \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}, l\rangle = \alpha_{l,m}|l, m\rangle|+\rangle + \beta_{l,m}|l, m+1\rangle|-\rangle,$$

$$|j = l - \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}, l\rangle = \beta_{l,m}|l, m\rangle|+\rangle - \alpha_{l,m+1}|l, m+1\rangle|-\rangle, \tag{54}$$

که درآن

$$\alpha_{l,m} = \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}}, \qquad \beta_{l,m} = \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}}. \tag{55}$$

با استفاده از این رابطه براحتی معلوم می شود که

$$\langle n, j, m + \frac{1}{2}, l|S_z|n, j, m + \frac{1}{2}, l\rangle) = \alpha^2_{l,m} - \beta^2_{l,m} = \frac{2m+1}{2l+1} \qquad j = l + \frac{1}{2}$$

$$\langle n, j, m + \frac{1}{2}, l|S_z|n, j, m + \frac{1}{2}, l\rangle) = \beta^2_{l,m} - \alpha^2_{l,m} = -\frac{2m+1}{2l+1} \qquad j = l - \frac{1}{2}. \tag{56}$$

درنتیجه بدست می آوریم

$$\Delta E_{n,j=l+\frac{1}{2},m+\frac{1}{2},l} = \frac{e}{2\mu c}\frac{2l+2}{2l+1}(2m+1), \tag{57}$$

و

$$\Delta E_{n,j=l-\frac{1}{2},m+\frac{1}{2},l} = \frac{e}{2\mu c}\frac{2l}{2l+1}(2m+1). \tag{58}$$

هردو رابطه را می توان دررابطه زیر گنجاند که درآن $m_j = m + \frac{1}{2}$:

$$\Delta E_{n,j,m_j,l} = \frac{2e}{\mu c}\frac{j+\frac{1}{2}}{2l+1}m_j. \tag{59}$$

www.Endbook.net

درس هفدهم: روش وردشی

۱ مقدمه

روش وردشی یا $Variational\ \ Method$ روشی است که به کمک آن می توانیم یک حد بالا برای انرژی حالت پایه یک هامیلتونی پیدا کنیم به این معنا که می توانیم بگوییم انرژی حالت پایه هرچه که باشد، از یک مقدار معین کمتر است. این روش محتاج حل یک معادله دیفرانسیل و یا قطری کردن هامیلتونی نیست و تنها نیازمند محاسبه متوسط هامیلتونی روی یک حالت اولیه است که آن را حالت یا تابع موج آزمایشی $Trial\ Wave\ Function$ می گوییم. هرچه که تابع موج آزمایشی خود را با دیدِ فیزیکی بهتری انتخاب کنیم، می توانیم از روش وردشی استفاده بهتری ببریم. دراین درس تنها به ذکر دو قضیه اساسی در روش وردشی اکتفا می کنیم. کاربردهای این روش را دردرس های آینده خواهیم دید.

۲ دوقضیه اساسی در روش وردشی

قضیه: اگر E_0 انرژی حالت پایه یک هامیلتونی باشد آنگاه به ازای هرحالت دلخواه $|\psi\rangle$ همواره نامساوی زیر برقراراست:

$$\frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \geq E_0. \tag{1}$$

اثبات: ویژه حالت های هامیلتونی را با $|n\rangle$ وانرژی آنها را با E_n نشان می دهیم. می توانیم $|\psi\rangle$ را برحسب ویژه حالت های هامیلتونی بسط دهیم.

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle. \tag{2}$$

دراین صورت طرف چپ نامساوی به صورت زیر درمی آید:

$$\frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{\sum_n E_n|c_n|^2}{\sum_n |c_n|^2} \geq \frac{E_0\sum_n |c_n|^2}{\sum_n |c_n|^2} = E_0 \tag{3}$$

www.Endbook.net

که درقدم آخر از نامساوی $\forall n \quad E_n \geq E_0$ استفاده کرده ایم.

درعمل وقتی که ازاین قضیه استفاده می کنیم سعی می کنیم که یک بردار حالت که به یک یا چند پارامتر پیوسته بستگی دارد انتخاب کنیم و کمینهٔ $\frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$ را حساب کنیم. به این ترتیب یک حد بالا برای انرژی حالت پایه هامیلتونی بدست می آوریم.

مثال ۱ : دراین مثال یک حد بالا برای انرژی حالت پایه نوسانگر ساده بدست می آوریم. می دانیم که هامیلتونی به شکل زیر است

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \tag{4}$$

تابع موج زیر را درنظرمی گیریم

$$\psi(x) = e^{-\alpha x^2} \tag{5}$$

که درآن α یک پارامتر آزاد و مثبت است. برای محاسبه تا بع $F(\psi) \equiv F(\alpha)$ به انتگرال های زیر احتیاج داریم:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}, \qquad \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2\alpha x^2} dx = \frac{1}{4\alpha}\sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \tag{6}$$

با استفاده از شکل هامیلتونی بدست می آوریم

$$F(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2} \left[\frac{\hbar^2\alpha}{m} + (\frac{1}{2}m\omega^2 - \frac{2\hbar^2\alpha^2}{m})x^2\right], \tag{7}$$

و با محاسبه انتگرال ها

$$F(\alpha) = \frac{m\omega^2}{8\alpha} + \frac{\hbar^2\alpha}{2m} \tag{8}$$

کمینه این تابع درنقطه $\alpha_0 = \frac{m\omega}{2\hbar}$ اتفاق می افتد و مقدار تابع درآن نقطه برابر است با

$$F(\alpha_0) = \frac{1}{2}\hbar\omega. \tag{9}$$

بنابراین بدست می آوریم

$$E_0 \leq \hbar\omega. \tag{10}$$

www.Endbook.net

دراین مثال می بینیم که حد بالایی که برای انرژی حالت پایه بدست آورده ایم دقیقاً انرژی حالت پایه است. تابع آزمایشی ای که با آن شروع کردیم پس از بهنجارکردن دراین نقطه برابر می شود با

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}, \tag{11}$$

که همان تابع موج حالت پایه نوسانگر است . این مثال نشاندهنده کیفیت کلی تری است که در قضیه زیر بیان شده است.

قضیه ریتز $(Reitz)$: تابع $\langle H\rangle := \langle\psi|H|\psi\rangle$ را که درآن ψ یک حالت بهنجاراست، درنظر بگیرید. این تابع در نقاطی دارای اکسترمم است که ویژه بر دار هامیلتونی باشند. به عبارت دیگر تغییرات درجه اول این تابع دراین نقاط صفراست.

اثبات: با توجه به شرطی که برای بهنجاربودن بردار $|\psi\rangle$ داریم می بایست تغییرات درجه اول تابع $F := \langle H\rangle - \epsilon\langle\psi|\psi\rangle$ را که درآن ϵ یک ضریب لاگرانژ است حساب کنیم. تغییرات درجه اول تابع $F(\psi)$ را حساب می کنیم. داریم

$$\delta F = \langle\delta\psi|H|\psi\rangle + \langle\psi|H|\delta\psi\rangle - \epsilon\langle\delta\psi|\psi\rangle - \epsilon\langle\psi|\delta\psi\rangle. \tag{12}$$

حال قرارمی دهیم

$$|v\rangle := (H-\epsilon)|\psi\rangle. \tag{13}$$

دراین صورت رابطه بالا به شکل زیردرمی آید:

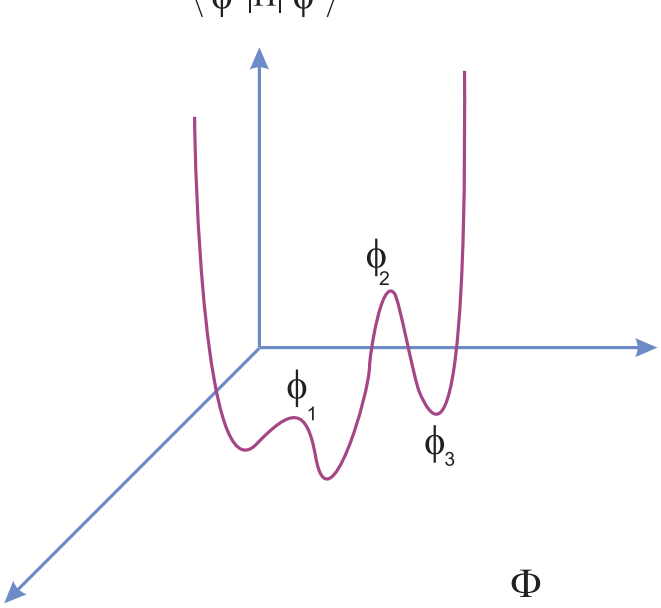
$$\langle v|\delta\psi\rangle + \langle\delta\psi|v\rangle = 0 \qquad\qquad \forall\delta\psi. \tag{14}$$

ازآن جا که این رابطه هم برای $\delta\psi$ و هم برای $i\delta\psi$ می بایست برقرار باشد با نوشتن دو رابطه و جمع کردن آن ها بایکدیگر به این نتیجه می رسیم که

$$\langle v|\delta\psi\rangle = 0 \qquad\qquad \forall\delta\psi \tag{15}$$

اما این شرط فقط وقتی برقرارمی شود که خود بردار $|v\rangle$ برابر باصفر باشد یعنی $H|\psi\rangle = \epsilon|\psi\rangle$. بنابراین نقطه ای که تابع F اکسترمم است همان نقطه ای است که ویژه بردار هامیلتونی است و ضریب لاگرانژ نیز دراین جا همان ویژه مقدار انرژی هامیلتونی است. شکل یک قضیه ریتز را بیان می کند.
نکته مهم: باید دقت کنیم که یک نقطه اکسترمم تنها وقتی یک ویژه بردارِ دقیق هامیلتونی را بدست می دهد که بتوانیم عبارت $F(\psi)$ را درهمه جهات درفضای توابع وردش دهیم. این امر از اثبات قضیه نیز واضح است به این معنا که نقطه اکسترمم

www.Endbook.net



شکل ۱: بنابر قضیه ریتز، نقاط فرین (اکسترمم) تابع $\langle\phi|H|\phi\rangle$ همان ویژه بردارهای هامیلتونی هستند. دراین شکل ϕ_1، ϕ_2 و ϕ_3 سه نقطه فرین و بنابراین سه ویژه بردار مختلف از هامیلتونی هستند.

وقتی منجر به معادله ویژه مقداری می شود که $\delta\psi$ کاملاً دلخواه باشد. به این ترتیب قضیه ریتزتنها یک ارزش نظری دارد. ولی می توان از این قضیه برای یافتن ویژه بردارها و ویژه مقدارهای تقریبی تابع موج استفاده کرد، واین موقعی است که یک تابع آزمایشی را که به یک یا چند پارامتر وابستهاست در عبارت $\langle\psi|H|\psi\rangle$. قرار داده و مقدار اکسترمم آن را پیدا کنیم. هرچه که تعداد پارامترهای قابل وردش در تابع بیشتر باشد، امکان اینکه تقریب بهتری از ویژه تابع هامیلتونی بدست بیاوریم بیشتر خواهد بود.

۳ استفاده از روش وردشی برای حل معادله شرودینگر چند ذره ای: روش هارتری

نخست یک مثال ساده دو ذرهای را بررسی می کنیم. مثال چند ذرهای تعمیم ساده ای از محاسبات این مثال ساده خواهد بود. یک سیستم دو ذرهای با هامیلتونی زیر توصیف می شود:

$$H=\frac{P_1^2}{2m}+\frac{P_2^2}{2m}+V(X_1)+V(X_2)+W(|X_1-X_2|), \tag{16}$$

که درآن $W(|X_1-X_2|)$ پتانسیل برهم کنش بین دو ذره است و به فاصله دو ذره بستگی دارد. می توانیم این هامیلتونی را به شکل زیر بازنویسی کنیم:

$$H=H_1+H_2+W(|X_1-X_2|), \tag{17}$$

که درآن H_1 و H_2 پتانسیل هایی همانند هستند که به ترتیب روی ذره یک و ذره دو اثر می کنند، یعنی

$$H_1=\frac{P_1^2}{2m}+V(X_1), \qquad H_2=\frac{P_2^2}{2m}+V(X_2). \tag{18}$$

www.Endbook.net

به عنوان یک تابع آزمایشی تابع موج زیر را انتخاب می کنیم:

$$\psi(x_1, x_2) = \phi_1(x_1)\phi_2(x_2), \tag{19}$$

که درآن ϕ_1 و ϕ_2 توابع تک ذره‌ای دلخواه هستند. دقت کنید که دراین جا تعداد پارامترهایی که درتابع موج آزمایشی به کار رفته اند بی نهایت است، زیرا شکل تابع های ϕ_1 و ϕ_2 کاملاً دلخواه هستند. با این وجود نباید انتظار داشته باشیم که با این روش تابع موج دقیق را بدست بیاوریم، زیرا خود را به توابع ضربی محدود کرده ایم و این یعنی این که وردش را درتمامی فضای توابع انجام نمی دهیم. می دانیم که این دو تابع می بایست بهنجارباشند به این معنا که

$$\langle\phi_1|\phi_1\rangle = 1 \qquad \langle\phi_2|\phi_2\rangle = 1. \tag{20}$$

مطابق با اصل وردشی می بایست تابع زیر را فرینه کنیم:

$$F(\phi_1, \phi_2) := \langle\psi|H|\psi\rangle - \epsilon_1\langle\phi_1|\phi_1\rangle - \epsilon_2\langle\phi_2|\phi_2\rangle. \tag{21}$$

با توجه به شکل تابع وردشی این عبارت به صورت زیر در می آید:

$$F(\phi_1, \phi_2) = \langle\phi_1|H_1|\phi_1\rangle + \langle\phi_2|H_2|\phi_2\rangle - \epsilon_1\langle\phi_1|\phi_1\rangle - \epsilon_2\langle\phi_2|\phi_2\rangle + \langle\phi_1, \phi_2|W|\phi_1, \phi_2\rangle, \tag{22}$$

که درآن $\langle\phi_1, \phi_2|W|\phi_1, \phi_2\rangle$ نماد خلاصه‌ای برای عبارت زیراست:

$$\langle\phi_1, \phi_2|W|\phi_1, \phi_2\rangle := \int dx_1 \int dx_2 \phi_1^*(x_1)\phi_2^*(x_2)W(|x_1 - x_2|)\phi_1(x_1)\phi_2(x_2). \tag{23}$$

وردش یک یک جملات را بسادگی می توان حساب کرد:

$$\delta\langle\phi_1|\phi_1\rangle = \int \delta\phi_1^*(x)\phi_1(x)dx + cc, \tag{24}$$

که علامت cc دراین جمله و بقیه جملات دیگر نشانه‌ی مزدوج مختلط است:

$$\delta\langle\phi_2|\phi_2\rangle = \int \delta\phi_2^*(x)\phi_2(x)dx + cc, \tag{25}$$

$$\delta\langle\phi_1|H_1|\phi_1\rangle = \int \delta\phi_1^*(x)\hat{H}_1\phi_1(x)dx + cc, \tag{26}$$

www.Endbook.net

که درآن منظوراز $\hat{H}_1$ عملگرِ $\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx_1^2}+V(x_1)$ است. هم چنین

$$\delta\langle\phi_2|H_2|\phi_2\rangle=\int\delta\phi_2^*(x)\hat{H}_2\phi_2(x)dx+cc, \tag{27}$$

و بالاخره

$$\delta\langle\phi_1,\phi_2|W|\phi_1,\phi_2\rangle=\int dx_1\int dx_2(\delta\phi_1^*(x_1)\phi_2^*(x_2)+\phi_1^*(x_1)\delta\phi_2^*(x_2))W(x_1,x_2)\phi_1(x_1)\phi_2(x_2)+cc. \tag{28}$$

با کنارهم گذاردن تمام این جملات به عبارت زیر برای تغییرات درجه اول F می رسیم:

$$\begin{aligned}\delta F &= \int dx_1\delta\phi_1^*(x_1)\left[\hat{H}_1\phi_1(x_1)+\int dx_2W(x_1,x_2)|\phi_2(x_2)|^2\phi_1(x_1)-\epsilon_1\phi_1(x_1)\right]\\ &+ \int dx_2\delta\phi_2^*(x_2)\left[\hat{H}_2\phi_2(x_2)+\int dx_1W(x_1,x_2)|\phi_1(x_1)|^2\phi_2(x_2)-\epsilon_2\phi_2(x_2)\right]+c.c.\end{aligned} \tag{29}$$

برای آنکه تغییرات درجه اول F برای هر تغییری از ϕ_1 و ϕ_2 برابر با صفر باشد، می بایست عبارت های داخل کروشه جداگانه برابر با صفر شوند، یعنی اینکه توابع موج ϕ_1 و ϕ_2 می بایست در معادلات جفت شده‌ی زیر صدق کنند:

$$\begin{aligned}\hat{H}_1\phi_1(x_1)+\int dx_2W(x_1,x_2)|\phi_2(x_2)|^2\phi_1(x_1) &= \epsilon_1\phi_1(x_1)\\ \hat{H}_2\phi_2(x_2)+\int dx_1W(x_1,x_2)|\phi_1(x_1)|^2\phi_2(x_2) &= \epsilon_2\phi_2(x_2).\end{aligned} \tag{30}$$

این معادلات تعبیر فیزیکی روشنی دارند. معادله یک بیان می کند که تابع موج ذره‌ی یک یعنی $\phi_1(x_1)$ در یک معادله تک ذره ای شرودینگر صدق می کند با این تفاوت که پتانسیل آن علاوه بر جمله‌ی $V(x_1)$ یک جمله موثر ناشی از برهم کنش این ذره با ذره دوم را نیز در بردارد. بنابراین معادلات بالا را می توان به شکل زیر نوشت:

$$\begin{aligned}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx_1^2}+V_{eff}(x_1)\right]\phi_1(x_1)=\epsilon_1(x_1)\\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx_2^2}+V_{eff}(x_2)\right]\phi_2(x_2)=\epsilon_2(x_2),\end{aligned} \tag{31}$$

که درآن

$$V_{eff}(x_1) = V(x_1)+\int dx_2W(x_1,x_2)|\phi_2(x_2)|^2$$

www.Endbook.net

$$V_{eff}(x_2) \quad = \quad V(x_2) + \int dx_1 W(x_1, x_2)|\phi_1(x_1)|^2. \tag{32}$$

بدین ترتیب توابع موج_ϕ_2, ϕ_1 در معادلات شرودینگر تک ذره‌ای صدق می کنند ولی پتانسیل این معادلات یک پتانسیل موثراست که درعبارت آن تابع موج ذره دیگر نیز وارد می شود. اگر پتانسیل $V_{eff}(x_1)$ را به عنوان مثال در نظر بگیرید، جمله اضافه شده به پتانسیل اصلی تعبیر روشنی دارد، زیرا $|\phi_2(x_2)|^2 dx_2$ احتمال آن است که ذره دوم در فاصله‌ی $(x_2, x_2 + dx_2)$ باشد و $\int dx_2 W(x_1, x_2)|\phi_2(x_2)|^2$ انرژی پتانسیلی است که دراین وضعیت بین دو ذره وجود دارد. بنابراین عبارت $W(x_1, x_2)$ متوسط انرژی پتانسیل بین دو ذره است. همین تعبیر برای معادله شرودینگر دوم نیز برقراراست. دقت کنید که اگر چه بجای یک معادله شرودینگر دو ذره‌ای دو معادله شرودینگر تک ذره ای بدست آورده ایم ولی برای این سادگی بهایی پرداخت کرده‌ایم. اول آنکه دو معادله به هم جفت شده و از هم مستقل نیستند. دوم آنکه این معادلات خطی نیستند، یعنی توان های بالاتر از مرتبه اول از تابع موج هم در آنها وارد شده است. به همین دلیل مجموع دو جواب دیگر یک جواب از معادله شرودینگر نیست. به یک نکته دیگر هم باید اشاره کنیم و آن این که ضرایب تکثیر لاگرانژ یعنی ϵ_1 و ϵ_2 نقش انرژی های تک ذره ها را بازی می کنند. باید دقت کنیم که حتی اگر بتوانیم معادلات جفت شده و غیرخطی 31 را به طور دقیق حل کنیم، به معنای این نیست که حل دقیقی از معادله دو ذره‌ای شرودینگر بدست آورده‌ایم، زیرا مجموعه توابعی که روی آنها وردش داده ایم در عین این که بزرگ بوده است ولی شامل تمام فضای توابع نمی شده است. فهم مستقیم این نکته بسیارساده است. کافی است که تابع_$\psi(x_1, x_2) = \phi_1(x_1)\phi_2(x_2)$ را در معادله

$$(H_1 + H_2 + W(X_1, X_2))\phi_1(x_1)\phi_2(x_2) = E\phi_1(x_1)\phi_2(x_2) \tag{33}$$

قرار دهیم و از معادلات 31 نیز استفاده کنیم. بنابراین با این روش تنها به یک ویژه بردار تقریبی از معادله شرودینگر می رسیم که ارزش نهایی آن را نیز می بایست تطبیق نتایج ناشی از آن و داده های تجربی معین کنند. ولی به هرحال درغیاب هر گونه روش دقیق برای حل معادله دو ذره‌ای شرودینگر استفاده از این روش می تواند به عنوان گام اول بسیار مفید باشد. حال که اصول اساسی این روش را در مورد یک سیستم دو ذره‌ای یاد گرفته‌ایم می توانیم آن را بدون انجام محاسبات بیشتر برای یک سیستم N ذره‌ای به کار ببریم. ما تنها نتایج را می نویسیم زیرا محاسبات آن تعمیم سرراستی از مثال دوذره‌ای است و خواننده خود می تواند محاسبات لازم را انجام دهد. برای یک سیستم N ذره‌ای داریم:

$$H = H_1 + H_2 + \cdots H_N + \sum_{1 \le i < j \le N} W(|X_i - X_j|). \tag{34}$$

قرار می دهیم:

$$\psi(x_1, x_2, \cdots x_N) \tag{35}$$

که درآن توابع تک ذره‌ای ϕ_1 تا ϕ_N همگی بهنجار هستند. دراین صورت وردش نسبت به توابع موج تک ذره‌ای منجر به دستگاه معادلات جفت شده‌ی زیر می شود:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + V_{eff}(x_i)\right]\phi_i(x_i) = \epsilon_i \phi_i(x_i), \qquad i = 1, 2, \cdots N, \tag{36}$$

www.Endbook.net

که درآن

$$V_{eff}(x_i) = V_i(x_i) + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\int W(|x_i - x_j|)|\phi_j(x_j)|^2 dx_j, \tag{37}$$

پتانسیل موثری است که روی ذره i ام اثر می کند. مجموعه معادلاتی که به این صورت بدست می آیند، به معادلات هارتری موسوم است.

۱.۳ ضمیمه: تابعی ها و وردش نسبت به یک تابع

دراین ضمیمه به معرفی تابعی $Functional$ و مشتق تابعی $FunctionalDerivative$ می پردازیم. خواندن این ضمیمه برای فهم متن این درس الزامی نیست، ولی دانشجوی علاقمند می تواند با مطالعه این ضمیمه به درک بهتری از وردش یک عبارت نسبت به یک تابع برسد. در حقیقت به زبان دقیق تر، عبارتی که ازآن صحبت می کنیم یک تابعی و وردش آن عبارت نسبت به آن تابع مشتق تابعی خوانده می شود. وقتی که می گوییم وردش یا تغییرات درجه اول یک عبارت نسبت به یک تابع برابر با صفر باشد، منظور این است که مشتق آن تابعی نسبت به تابعی که متغیرآن است برابر با صفرباشد.

به زبان ریاضی تابعی یا $Functional$، نگاشتی است که متغیرآن یک تابع و حاصل آن یک عدد است. مثالهایی از تابعی ها عبارتنداز:

$$F(\phi) := \int_a^b \phi(x)dx, \tag{38}$$

$$G(\phi) := \int_a^b e^{-\phi^2(x)}dx \tag{39}$$

$$F_{x_0}(\phi) := \phi(x_0), \tag{40}$$

در مثال سوم، تابعی F_{x_0} هر تابع مثل ϕ را به عنوان متغیر می پذیرد و مقدار آن را در نقطه x_0 تحویل می دهد. یک تابعی را می توان به عنوان حد یک تابع چند متغیره وقتی که تعداد متغیرهای آن به سمت بی نهایت میل کرده است نیز نگاه کرد. به عبارت دیگر می توانیم یک تابع مثل $\phi(x)$ را با مقادیر آن در رشته‌ی ای از نقاط نزدیک به هم مثل $\{\phi_n\}$. بنابراین یک تابعی را می توان به عنوان یک تابع N متغیره از متغیرهای $(\phi_1, \cdots \phi_N)$ در حدّی که N به سمت بی نهایت میل می کند نگاه کرد. با این دیدگاه خواننده براحتی می تواند مفهوم مشتق تابعی یا همان وردش را نیز دریابد. برای کامل بودن در زیر نشان می دهیم که چگونه در حد $N \longrightarrow \infty$ مفاهیم مربوط به تابع به مفاهیم مربوط به تابعی تبدیل می شوند:

$$\phi_n \longrightarrow \phi(x)$$

$$(\phi_1, \phi_2, \cdots \phi_N) \longrightarrow \phi$$

www.Endbook.net

$$
\begin{aligned}
F(\phi_1, \phi_2, \cdots \phi_N) &\longrightarrow F[\phi] \\
F(\phi_1 + \epsilon_1, \cdots \phi_N + \epsilon_N) = F(\phi_1, \cdots \phi_N) + \sum_{n=1}^{N} \frac{\partial F}{\partial \phi_n}\epsilon_n &\longrightarrow F[\phi + \epsilon] = F[\phi] + \int \frac{\delta F}{\delta \phi(x)}\epsilon(x)dx \\
\frac{\partial F}{\partial \phi_n} &\longrightarrow \frac{\delta F}{\delta \phi(x)}
\end{aligned} \tag{41}
$$

از رابطه ماقبل آخر می توان عبارت صریحی برای مشتق تابعی بدست آورد. دراین رابطه بجای تابع $\epsilon(x)$ قرار می دهیم $\epsilon_{x_0}(x) := \epsilon\delta(x - x_0)$ که درآن ϵ یک پارامتر ثابت ولی دلخواه و x_0 یک نقطه دلخواه در محدوده تعریفِ تابع $\phi(x)$ است. در نتیجه بدست می آوریم:

$$F[\phi + \epsilon_{x_0}] = F[\phi] + \epsilon\frac{\delta F}{\delta \phi(x_0)} \tag{42}$$

و درنتیجه به تعریف زیر از مشتق تابعی می رسیم:

$$\frac{\delta F}{\delta \phi(x_0)} = \lim_{\epsilon \longrightarrow 0} \frac{F[\phi + \epsilon_{x_0}] - F[\phi]}{\epsilon} \tag{43}$$

این تعریف تعمیم سرراست ِتعریف زیر از مشتق جزیی یک تابع است و بیان می کند که مقدار تابعی F چه مقدار تغییر می کند اگر تابع ِϕ را تنها در نقطه‌ی x_0 تغییر دهیم. بهترین راه برای اثبات خواص مشتق تابعی استفاده از همان رابطه‌ی ماقبل آخر در معادلات ِ41 است. در زیر نمونه ای از روابطی را که خواننده می تواند براحتی با استفاده از آن تعریف ثابت کند بدست می دهیم:

$$
\begin{aligned}
&F[\phi] = \phi(x_0) \longrightarrow \frac{\delta F}{\delta \phi(x)} = \delta(x - x_0) \\
&F[\phi] = \int_a^b K(y)\phi(y)dy \longrightarrow \frac{\delta F}{\delta \phi(x)} = K(x) \qquad if\ x \in (a, b) \\
&F[\phi] = \int dy \int dz \phi(y)K(y, z)\phi(z) \longrightarrow \frac{\delta F}{\delta \phi(x)} = \int dz K(x, z)\phi(z) + \int dy K(y, x)\phi(y) \\
&\frac{\delta F + G}{\delta \phi(x)} = \frac{\delta F}{\delta \phi(x)} + \frac{\delta G}{\delta \phi(x)} \\
&\frac{\delta FG}{\delta \phi(x)} = F[\phi]\frac{\delta G}{\delta \phi(x)} + \frac{\delta F}{\delta \phi(x)}G[\phi] \\
&\frac{\delta g(F[\phi])}{\delta \phi(x)} = \frac{\partial g(F[\phi])}{\partial F[\phi]}\frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi(x)}.
\end{aligned} \tag{44}
$$

www.Endbook.net

دررابطه‌ی آخر، F یک تابعی و h یک تابع معمولی است. به عنوان مثالی از رابطه آخر داریم:

$$\frac{\delta e^{\phi^2(x)}}{\delta \phi(y)} = 2\delta(x-y)\phi(x) \times e^{\phi^2(x)}. \tag{45}$$

بنابراین می توان قضیه ریتز را به شکل زیر نیز بیان کرد. نقاطی که درآن مشتق تابعی $F[\phi] := \langle\phi|H|\phi\rangle - \epsilon\langle\phi|\phi\rangle$ صفر می شوند، ویژه بردارهای هامیلتونی هستند.

$$\frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi} = 0 \quad \leftrightarrow \quad H|\phi\rangle = \epsilon|\phi\rangle. \tag{46}$$

www.Endbook.net

درس هجدهم : ذرات یکسان

۱ ذرات یکسان و اصل طرد پاوولی

درفیزیک کلاسیک همواره می توانیم مجموعه ای از ذرات یکسان را با دنبال کردن مسیرهایشان مشخص کنیم زیرا پذیرفته ایم که مکان و سرعت هرذره یعنی مسیر آن با دقت دلخواه قابل اندازه گیری است. اگر بر فرض هر ذره را با برچسب یا شماره ای علامت زده باشیم، همواره می توانیم درطول زمان مسیرذرات را دنبال کنیم و ووقتی که این ذرات به هم نزدیک شده باهم برهم کنش می کنند و سپس از هم دور می شوند با دنبال کردن شماره ها ذرات را از یکدیگر تمیز دهیم.
اما در دنیای میکروسکوپی که فیزیک کوانتومی سینماتیک و دینامیک ذرات را تعیین می کند، چنین چیزی ممکن نیست زیرا یک ذره نه با مسیر خود بلکه با تابع موجی که درفضا گسترده است تعین می شود. تصورکنید که مجموعه ای از ذرات یکسان کاملاً دور از هم قرارگرفته باشند. هرکدام از این ذرات با یک بسته موج سه بعدی، چیزی مثل یک ابر یا مِه، که به احتمال حضورآن وابسته است مشخص می شود. می توانیم فرض کنیم که ذرات آنقدرازهم دورند که ابرهای احتمال ِآنها با یکدیگر تداخل نمی کنند. دراین صورت می توانیم هر ابرِ احتمال را با یک شماره معین کنیم و درذهن خود این شماره ها را دنبال کنیم. با سپری شدن زمان بسته های موج یا ابرهای احتمال این ذرات به یکدیگر نزدیک شده درهم ادغام می شوند وتغییر شکل می دهند و سپس از هم جدا می شود. حال می پرسیم که کدام ابر متعلق به کدام ذره است؟ واضح است که به این پرسش نمی توانیم پاسخ قطعی بدهیم. بنابراین دردنیای میکروسکوپی یک مجموعه از ذرات یکسان الزاماً از یکدیگر تمیز پذیر نیستند. درنتیجه تابع موجی مثل $\Psi(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ که درآن $\mathbf{r}$ مکان ذره ۱ و $\mathbf{r}'$ مکان ذره دو را نشان دهد درمکانیک کوانتومی بی معناست. آنچه که می توانیم بگوییم آن است که یکی از ذرات درمکان $\mathbf{r}$ و دیگری درمکان $\mathbf{r}'$ است. چنین تابع موجی به ناگزیر باید دارای این خاصیت باشد که مربع آن که نشان دهنده احتمال حضور ذرات است تحت جایگشت دو ذره تغییر نکند، به عبارت دیگر می بایست درشرط زیر صدق کند:

$$|\Psi(r,r')|^2 = |\Psi(r',r)|^2. \tag{1}$$

این امر به این معناست که خود تابع موج تحت جایگشت دو ذره به ترتیب زیر رفتارکند

$$\Psi(r,r') = e^{i\phi}\Psi(r',r). \tag{2}$$

اما می دانیم که اگر جایگشت دو ذره را دو بارانجام دهیم مثل این است که هیچ کاری نکرده باشیم بنابراین می بایست داشته باشیم

$$\Psi(r,r') = e^{2i\phi}\Psi(r,r'). \tag{3}$$

www.Endbook.net

و درنتیجه $e^{2i\phi}=1$ و $e^{i\phi}=\pm 1$. بنابراین تابع موج دو ذره یکسان می بایست دارای خاصیت زیر باشد:

$$\Psi(r,r')=\pm\Psi(r',r). \tag{4}$$

بحث ما تا اینجا ازیک نقطه نظر اساسی ناقص است و آن اینکه توصیف کامل یک ذره تنها با تابع موج فضایی آن امکان پذیر نیست، بلکه حالت یک ذره به طور کامل درفضای هیلبرتی صورت می گیرد که هم مختصات فضایی و هم مختصات اسپینی درآن قابل نمایش باشد. به همین دلیل است که برای توصیف دو ذره متفاوت بجای تابع موج $\Psi(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ می بایست از تابع موجِ $\Psi_{\alpha,\beta}(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ استفاده کرد. این تابع موج احتمال این را می دهد که ذره شماره ۱ در مکان $\mathbf{r}$ و اسپین اش در وضعیت α باشد و ذره شماره ۲ در نقطه $\mathbf{r}'$ واسپین اش در وضعیت β باشد. برای ذرات یکسان این توصیف می بایست اصلاح شود زیرا نمی توان ذرات را حتی با یک برچسب ذهنی از یکدیگر تمیز داد. بنابراین تنها می توانیم بگوییم که یک ذره در نقطه $\mathbf{r}$ با اسپینِ α وجود دارد و یک ذره دیگر در نقطهٔ $\mathbf{r}'$ با اسپین β. بنابراین، تابع موج این دو ذره باید دارای این خاصیت باشد که مربع آن تحت جایگشت دو ذره تغییر نکند، به این معنا که

$$|\Psi_{\alpha,\beta}(r,r')|^2=|\Psi_{\beta,\alpha}(r',r)|^2. \tag{5}$$

باید دقت کنیم که این جایگشت، جایگشت بین دو ذره یعنی بین برچسب های آن هاست و نه فقط مکان آنها. به همین دلیل است که در توابع موج هردو طرف در رابطه فوق هنوز ذره ای که درمکان $\mathbf{r}$ است همچنان اسپین α و ذره ای که درمکان $\mathbf{r}'$ است همچنان اسپین β دارد، و تنها نکته ای که این تساوی می خواهد نشان دهد آن است که ما نمی دانیم که آیا آن ذره ای که در نقطه $\mathbf{r}$ قرار دارد و اسپین اش α است ذره ۱ است یا ذره ۲. برای تاکید براین نکته نامساوی زیر را می نویسیم تا نشان دهیم که تساوی تابع موج تحت جایگشت را به چه صورت می بایست نوشت و به چه صورت نمی بایست نوشت:

$$|\Psi_{\alpha,\beta}(r,r')|^2\neq|\Psi_{\alpha,\beta}(r',r)|^2. \tag{6}$$

در طرف چپ این رابطه ذره ای که در نقطه $\mathbf{r}$ است اسپین اش α است و درطرف راست ذره ای که در نقطه $\mathbf{r}$ است اسپین اش β است و تمیز ناپذیری ذرات هیچ چیزی در باره نسبت این دو تابع موج به ما نمی گوید.

با همان استدلالی که درباره توابع موج فضایی خالص انجام دادیم اکنون نیز می توانیم بنویسیم

$$\Psi_{\alpha,\beta}(r,r')=\pm\Psi_{\beta,\alpha}(r',r). \tag{7}$$

۱.۱ قضیه اسپین — آمار

حال مسئله این است که از علامت مثبت و منفی کدام یک را باید انتخاب کرد؟ پاسخ به این سوال درچارچوب مکانیک کوانتومی امکان پذیرنیست. پاسخِ این سوال درچارچوب مکانیک کوانتومی نسبیتی و یا نظریه کوانتومی میدانها که درآن ها لوازم تلفیق یک نظریه کوانتومی با نسبیت خاص مورد بررسی قرارمی گیرد، طی یک قضیه موسوم به قضیه اسپین — آمار یا

www.Endbook.net

$Spin - Statistics$ داده می شود. بنابراین قضیه می بایست برای ذراتی که اسپین آنها صحیح است یعنی بوزون ها علامت مثبت و برای ذراتی که اسپین آنها نیمه صحیح است یعنی فرمیون ها علامت منفی را انتخاب کرد. بنابراین بنابراین تحت جایگشت ذرات تابع موج فرمیونها می بایست پاد متقارن و تابع موج بوزون ها می بایست متقارن باشد. آنچه که برای دو ذره گفتیم برای یک مجموعه N ذره ای نیز صحیح است به این معنا که

$$\Psi_{\alpha_{\sigma(1)},\alpha_{\sigma(2)},\cdots\alpha_{\sigma(N)}}(r_{\sigma(1)},r_{\sigma(2)})\cdots r_{\sigma(N)}) = (\pm)^{|\sigma|}\Psi_{\alpha_1,\alpha_2,\cdots\alpha_N}(r_1,r_2,\cdots r_N), \tag{8}$$

که درآن σ یک جایگشت دلخواه، $|\sigma|$ علامت آن جایگشت (0 برای جایگشت های زوج و 1 برای جایگشت های فرد) است. علامت مثبت برای بوزون ها و علامت منفی نیز برای فرمیون ها درنظر گرفته می شود.

به یک نکته می بایست توجه کنیم و آن اینکه اگر تابع موج به صورت ضرب یک تابع موج فضایی در یک تابع حالت اسپینی باشد، می توان تقارن یا پاد تقارن را روی این دو حالت به طور جداگانه اعمال کرد به طوریکه تابع موج کل تقارن یا پاد تقارن مورد نیاز را داشته باشد.

۲ ذرات یکسان درون جعبه

فرض کنید که دو ذره یکسان در یک چاه پتانسیل بی نهایت عمیق به پهنای L قرار دارند. برای سادگی نیز فرض می کنیم که این دو ذره با هم برهم کنش نمی کنند. دراین بخش می خواهیم ویژه حالت ها و ویژه انرژی این سیستم دو ذره‌ای را پیدا کنیم. بدلیل این که ذرات با هم برهم کنش ندارند ویژه توابع هامیلتونی حاصل ضرب ویژه توابع تک ذره ای و ویژه انرژی ها حاصل جمع انرژی تک ذرات است با این تفاوت که می بایست این توابع را بسته به فرمیون یا بوزون بودن ذرات کاملاً پاد متقارن یا کاملاً متقارن کرد. این کار را جداگانه برای هر حالت انجام می دهیم. درضمن از درس های مقدماتی می دانیم که توابع موج تک ذرات و انرژی آنها در این چاه پتانسیل عبارت اند از:

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi}{L}x, \qquad E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{n^2\pi^2}{L^2}. \tag{9}$$

۱.۲ فرمیون ها

اگر این دو ذره فرمیون باشند، می بایست تابع موج کامل آنها کاملاً پاد متقارن باشد. منظور از تابع موج تابع موج فضایی و اسپینی است. برای سادگی اسپین ذرات را $1/2$ می گیریم. بنابراین ویژه حالت های این ذرات به ترتیب زیر خواهند بود:

$$\Psi^s(x_1,x_2) = A\left(\phi_n(x_1)\phi_m(x_2) + \phi_n(x_2)\phi_m(x_1)\right)\chi^s \tag{10}$$

www.Endbook.net

و یا

$$\Psi^t(x_1,x_2) = A\left(\phi_n(x_1)\phi_m(x_2) - \phi_n(x_2)\phi_m(x_1)\right)\chi^t. \tag{11}$$

انرژی این حالت ها برابر است با

$$E_{n,m} = E_n + E_m. \tag{12}$$

در روابط بالا χ^s و χ^t به ترتیب حالت های اسپین دو ذره هستند:

$$\chi^s = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+,-\rangle - |-,+\rangle), \tag{13}$$

و

$$\chi^t = \begin{cases} |+,+\rangle, \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|+,-\rangle + |-,+\rangle), \\ |-,-\rangle \end{cases} \tag{14}$$

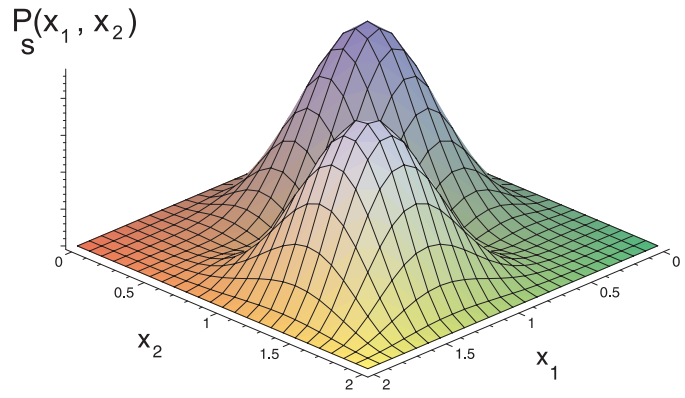
چگالی احتمال اینکه یک ذره را در نقطه x_1 و دیگری را در نقطه‌ی x_2 پیدا کنیم دراین دو حالت برابر است با:

$$P^s(x_1,x_2) = A^2\left(\phi_n(x_1)\phi_m(x_2) + \phi_n(x_2)\phi_m(x_1)\right)^2 \tag{15}$$

$$P^t(x_1,x_2) = A^2\left(\phi_n(x_1)\phi_m(x_2) - \phi_n(x_2)\phi_m(x_1)\right)^2. \tag{16}$$

از رابطه های بالا می بینیم که هرگاه x_2 را به x_1 نزدیک کنیم، $P^t(x_1,x_2)$ به سمت صفر میل می کند و حال آنکه $P^s(x_1,x_2)$ به سمت دو برابر چگالی احتمال تک ذره ها میل می کند. معنای این حرف آن است که وقتی دو ذره در حالت $|+,+\rangle$ یا $|-,-\rangle$ هستند یعنی اسپین شان یکی است نمی توان آنها را در یک نقطه قرار داد. این همان بیان متعارف و غیردقیق از اصل طرد پاوولی است . بدین جهت لفظ غیر دقیق را به کار می بریم که حتی وقتی که دو ذره در حالت $\frac{1}{\sqrt{2}}(|+,-\rangle + |-,+\rangle)$ هستند، که اسپین شان با هم متفاوت است باز هم احتمال یافتن دو ذره در یک نقطه صفر است. این نکته یعنی کوچک شدن تابع چگالی احتمال را وقتی که دو ذره را به هم نزدیک می کنیم، می توان به زبان حسی تری نیز بیان کرد و آن اینکه دو ذره که اسپین شان یکی است یا اینکه در حالت $triplet$ هستند یک دیگر را دفع می کنند و اگر در حالت $singlet$ باشند یکدیگر را جذب می کنند. بنابراین مثل این است که این دوذره یک برهم کنش از نوع مغناطیسی بین اسپین هایشان برقرار است که واقعاً مغناطیسی نیست بلکه ناشی از اصل طرد پاوولی است. این نوع برهم کنش را برهم کنش تبادلی یا $ExchangeInteraction$ می گویند. این موضوع را می توان در شکل های ۲ و ۱ ببینیم.

www.Endbook.net



شکل ۱: تابع $P^s(x_1, x_2)$، توزیع احتمال برای دو فرمیون که اسپین آنها در حالت منفرد است. دراین حالت به نظر می رسد که این دو ذره یک دیگر را جذب می‌کنند.

۲.۲ سطح‌فرمی

دراین بخش می خواهیم با یک مفهوم مهم یعنی سطح فرمی، که در فیزیک حالت جامد بارها به آن برمی خوریم، آشناشویم. برای سادگی چاه پتانسیل بی نهایت عمیق و یک بعدی با پهنای L را در نظر می گیریم. فرض کنید که تعدادی فرمیون اسپین $1/2$ را دراین چاه می ریزیم. این فرمیون ها با هم برهم کنش نمی کنند. از خود می پرسیم که حالت پایه این سیستم چیست؟ می دانیم که ویژه حالت های این سیستم، عبارت از حاصل ضرب حالت های تک ذره ای است به شرطی که به درستی پاد متقارن شده باشند. در حالت پایه می بایست مجموع انرژی این ذرات کمترین مقدار خود را دارا باشد. بنابراین اگر اصل طرد پاوولی برقرار نبود، همه ذرات به حالت $n = 1$ می رفتند، ولی بدلیل اصل طرد این حالت تنها دو ذره قبول می کند که می بایست اسپین آنها در خلاف جهت هم باشد. بنابراین ذرات دیگر دو به دو ترازهای بالاتر را اشغال می کنند. اگر $2N$ ذره داشته باشیم بالاترین ترازی که اشغال می شود، تراز N ام که انرژی اش برابر است با

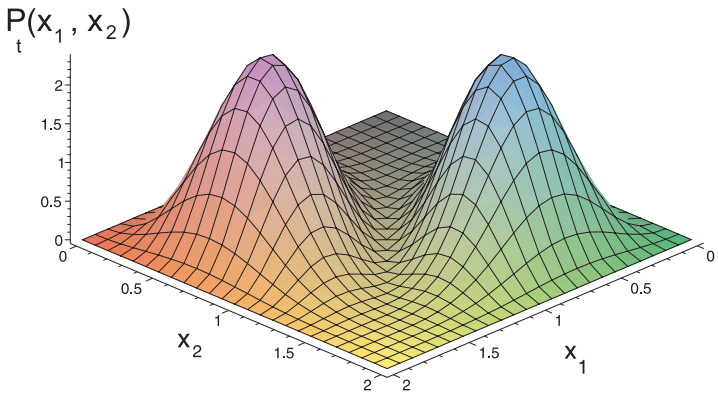
$$E_N = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{N^2\pi^2}{L^2}. \tag{17}$$

این بالاترین تراز که در شکل ۳ نشان داده شده است سطح انرژی فرمی خوانده می شود و معمولاً با E_F نشان داده می شود. انرژی حالت پایه برابر است با:

$$E_{gs} = 2\sum_{n=1}^{N}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{n^2\pi^2}{L^2} = 2\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{L^2}\sum_{n=1}^{N} n^2. \tag{18}$$

دراین حالت ساده می توان انرژی حالت پایه را به طور دقیق حساب کرد. از رابطه‌ی $\sum_{n=1}^{N} n^2 = \frac{1}{6}N(N+1)(2N+1)$

www.Endbook.net



شکل ۲: تابع $P^t(x_1, x_2)$، توزیع احتمال برای دو فرمیون که اسپین آنها در حالت سه تایی است. دراین حالت به نظر می رسد که این دو ذره یک دیگر را دفع می‌کنند.

بدست می آوریم:

$$E_{gs} = \frac{\hbar^2}{12m}\frac{\pi^2}{L^2}N(N+1)(2N+1). \tag{19}$$

محاسبات فوق مربوط به یک چاه پتانسیل یک بعدی است. در یک چاه پتانسیل دوبعدی مربعی به ابعاد L انرژی ها به ترتیب زیرهستند:

$$E_{n_1,n_2} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{L^2}(n_1^2 + n_2^2). \tag{20}$$

دراین حالت می توانیم سطح فرمی را با توجه به شکل ۴، به صورت زیر محاسبه کنیم. تعداد حالت هایی که انرژی آنها بین E و $E + dE$ هستند برابراست با:

$$g(E)dE = 2 \times \frac{1}{4}d\pi R^2 \tag{21}$$

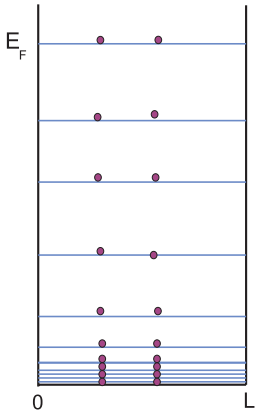
ضریب $1/2$ به خاطر اسپین ذرات آمده است.
که درآن R از رابطه زیر بدست می آید:

$$R^2 = \frac{2mEL^2}{\hbar^2\pi^2} \tag{22}$$

درنتیجه تعداد تراز هایی که انرژی آنها از یک مقدار معین مثل E کمتراست برابر است با:

$$N(E) = \int_0^E g(\epsilon)d\epsilon = \int_0^E \frac{1}{2}\pi\frac{2mL^2}{\hbar^2\pi^2}d\epsilon = \frac{1}{2}\pi\frac{2mL^2}{\hbar^2\pi^2}E. \tag{23}$$

www.Endbook.net



شکل ۳: سطح فرمی برای یک چاه پتانسیل یک بعدی

سطح فرمی جایی است که تمام تراز هاتا زیر آن پر شده اند و تمام تراز های بالای آن خالی هستند. این وضعیت در واقع حالت پایه سیستم بس ذره‌ای را نشان می دهد. بنابراین اگر تعداد N داشته باشیم از رابطه بالا بدست می آوریم:

$$N = \frac{1}{2}\pi\frac{2mL^2}{\hbar^2\pi^2}E_F \tag{24}$$

و یا

$$E_F = \frac{\hbar^2\pi}{mL^2}N. \tag{25}$$

عبارت $\frac{N}{L^2}$ برابر با چگالی سطحی تعداد ذرات است. انرژی حالت پایه برابر می شود با:

$$E_{gs} = \int_0^{E_F} d\epsilon\epsilon g(\epsilon) = \int_0^{E_F} d\epsilon\epsilon\frac{1}{2}\pi\frac{2mL^2}{\hbar^2\pi^2} = \frac{1}{2}\pi\frac{2mL^2}{\hbar^2\pi^2}\frac{1}{2}E_F^2, \tag{26}$$

و یا پس از ساده کردن

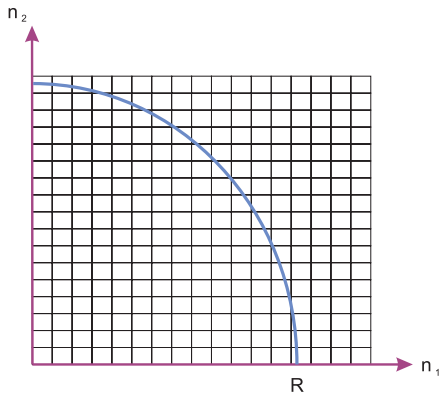
$$E_{gs} = \frac{1}{2}NE_F. \tag{27}$$

خواننده می تواند محاسبات مربوطه را برای یک چاه پتانسیل دو بعدی انجام دهد.

به همین ترتیب می توان تکانه فرمی P_F را حساب کرد. تکانه فرمی در حقیقت تکانه‌ی ذراتی است که در سطح فرمی قرار دارند. دقت کنید که یک تراز انرژی فرمی ممکن است همزمان تکانه مشخصی نداشته باشد، منظور ما از تکانه یک ذره دراین حالت متوسط مقدار آن یا مرتبه آن است که در رژیم غیر نسیبیتی از رابطه‌ی ساده‌ی

$$P_F = \sqrt{2mE_F}$$

www.Endbook.net



شکل ۴: سطح فرمی برای یک چاه پتانسیل یک بعدی

بدست می آید. هم چنین می توان از دمای فرمی سخن گفت که بنابر نظریه جنبشی یا مکانیک آماری از رابطه‌ی

$$E_F = \frac{3}{2}kT_F \tag{28}$$

بدست می آید که در آن d بعد سیستم است.

دقت کنید که حالت های برانگیخته حالت هایی هستند که در آن ذرات نزدیک سطح فرمی به تراز های بالا تر می روند و جای آنها خالی می شود.

اکنون از خود می پرسیم که تابع موج ذرات در حالت پایه چیست؟ برای سادگی خود را به چاه پتانسیل یک بعدی محدود می کنیم. برای شروع فرض کنید که تنها دو ذره در چاه وجود داشته باشند. یعنی $N = 2$، دراین صورت حالت پایه برابراست با:

$$\psi(x_1, x_2)\chi = A(\phi_1(x_1)\phi_1(x_2) + \phi_1(x_2)\phi_1(x_1))\chi^s, \tag{29}$$

اصطلاحاً می گوییم که دو ذره با اسپین های مخالف تراز پایه را اشغال کرده اند. ذرات دیگر می بایست حالت های بالاتر را اشغال کنند. بنابراین اگر سیستم ما بجای دو ذره چهار ذره داشته باشد، آنگاه حالت پایه وضعیتی است که دو ذره با اسپین های مخالف در تراز $n = 1$ و دو ذره دیگر بااسپین های مخالف در تراز $n = 2$ قرار می گیرند. نوشتن شکل کامل تابع موج در این حالت کمی دردسر دارد و مفید نیست. مثلاً این تابع چنین شکلی دارد:

$$\psi(x_1, x_2, x_3, x_4) = A(\phi_1(x_1)\phi_1(x_2) + \phi_1(x_2)\phi_1(x_1))\chi^s_{12} + (\phi_2(x_3)\phi_2(x_4) + \phi_2(x_3)\phi_2(x_4))\chi^s_{34} + \cdots \tag{30}$$

که درآن علامت $\cdots$ نشان دهنده این است که می بایست جایگشت های کافی با علامت های مناسب به عبارت اول اضافه شود تا تمیزناپذیری کامل ذرات تضمین شود، زیرا عبارت اول بیان کننده این است که دو ذره‌ی ۱ و ۲ که در تراز اول

www.Endbook.net

قرار دارند از دو ذره ۳ و ۴ که در تراز دوم قرار دارند تمیز داده شده اند و حال آنکه این ممکن نیست. واضح است که وقتی تعداد ذرات بیشتر می شود نوشتن شکل صریح تابع موج حالت پایه و حالت های برانگیخته از این هم پیچیده تر می شود که درعین حال دارای اطلاع مفیدی هم نیست. برای ما تنها این مهم است که چه تعداد ذره در هر تراز قرار دارد. به عبارت بهتر پایه مناسب برای توصیف یک سیستم بس ذره‌ای آن است که بگوییم چه تعداد ذره در هرتراز انرژی قرار دارد. ما در فصل های آینده دو باره به سیستم های بس ذره‌ای باز می گردیم و پایه مناسب را که به آن پایه عدد اِشغال *Occupation Number Representation* می گویند، به تفصیل توضیح می دهیم.

۳.۲ بوزون ها

حال فرض کنید که این دو ذره بوزون باشند. برای سادگی می توانیم فرض کنیم که اسپین آنها صفراست. بنابر این تنها قسمت فضایی را کافی است در نظر بگیریم زیرا اسپین صفر یعنی اینکه ذره یک حالت اسپینی بیشتر ندارد و و همواره در این حالت یعنی $|0\rangle$ است. دراین حالت تنها می بایست تابع موج فضایی را متقارن کرد. بنابراین ویژه های این دو ذره به ترتیب زیر خواهند بود:

$$\Psi(x_1,x_2) = A\left(\phi_n(x_1)\phi_m(x_2) + \phi_n(x_2)\phi_m(x_1)\right) \tag{31}$$

چگالی احتمال اینکه یک ذره را در نقطه x_1 و دیگری را در نقطه‌ی x_2 پیدا کنیم برای این دو ذره بوزون برابر است با:

$$P(x_1,x_2) = A^2\left(\phi_n(x_1)\phi_m(x_2) + \phi_n(x_2)\phi_m(x_1)\right)^2 \tag{32}$$

که نشان دهنده آن است که بوزون ها تمایل دارند به سمت هم نزدیک شوند. این هم درواقع یک نوع برهم کنش القاشده است که ناشی از اصل طرد پاوولی است. در مثالی که ذکر کردیم، اثر اسپین را نتوانستیم ببینیم زیرا اسپین هردو ذره را صفر گرفته بودیم. برای آنکه اثر اسپین را بهتر بفهمیم، اسپین هردو ذره را یک می گیریم. دراین صورت اسپین کل دو ذره می تواند مقادیرِ 0، 1 و یا 2 را اختیار کند. اگر حالت های اسپین یک ذره را به اختصار با $|1\rangle := |1,1\rangle$، $|0\rangle := |1,0\rangle$ و $|\overline{1}\rangle = |1,-1\rangle$ نمایش دهیم آنگاه از جمع تکانه زاویه ای می دانیم که حالت های اسپین ۲ و اسپین 0 حالت های متقارن و حالت های اسپین 1 پاد متقارن اند. درواقع داریم:

$$\chi^{(2)} = \begin{cases} |1,1\rangle, \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,0\rangle + |0,1\rangle), \\ \frac{1}{\sqrt{6}}(|1,\overline{1}\rangle + 2|0,0\rangle + |\overline{1},1\rangle), \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|\overline{1},0\rangle + |0,\overline{1}\rangle), \\ |\overline{1},\overline{1}\rangle \end{cases} \tag{33}$$

،

www.Endbook.net

$$\chi^{(1)} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,0\rangle - |0,1\rangle), \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,\overline{1}\rangle - |\overline{1},1\rangle), \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|\overline{1},0\rangle + |0,\overline{1}\rangle), \end{cases} \tag{34}$$

و

$$\chi^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,\overline{1}\rangle - |0,0\rangle + |\overline{1},1\rangle). \tag{35}$$

بنابراین ویژه حالت های انرژی برای دو بوزون در چاه پتانسیل به صورت زیرهستند: و حالت های

$$\begin{aligned} \Psi^{(2)}(x_1,x_2) &= A\left(\phi_n(x_1)\phi_m(x_2) + \phi_n(x_2)\phi_m(x_1)\right)\chi^{(2)} \\ \Psi^{(1)}(x_1,x_2) &= A\left(\phi_n(x_1)\phi_m(x_2) - \phi_n(x_2)\phi_m(x_1)\right)\chi^{(1)} \\ \Psi^{(0)}(x_1,x_2) &= A\left(\phi_n(x_1)\phi_m(x_2) + \phi_n(x_2)\phi_m(x_1)\right)\chi^{(0)}. \end{aligned} \tag{36}$$

دراین جا دیده می شود که وقتی اسپین کل ۲ یا ۰ است ذرات تمایل به جذب هم و وقتی که اسپین کل برابر با یک است ذرات تمایل به دفع هم دارند. بنابراین همواره نمی توان گفت که برهم کنشی که توسط اصل طرد پاوولی بین اسپین ذرات القا می شود دافعه یا جاذبه است بلکه نوع این برهم کنش بستگی به بوزون بودن یا فرمیون بودن ذرات و هم چنین بستگی به اسپین کل دو ذره دارد.

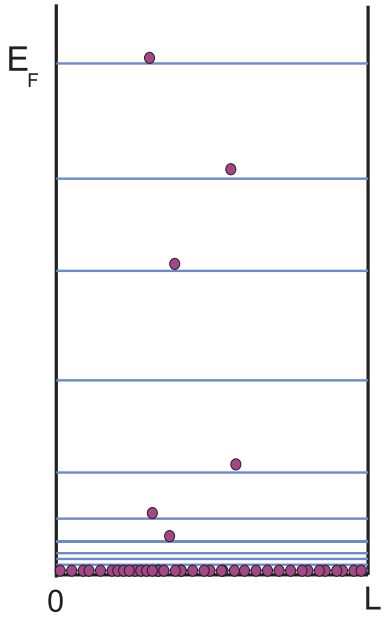
۴.۲ چگالش بوز—اینشتین

برخلاف فرمیون ها که بیش از دوتای آنها نمی توانند یک تراز انرژی را اشغال کنند، برای بوزون ها هیچ محدودیتی در اشغال تراز های انرژی نیست. به همین جهت در یک گاز بوزونی ممکن است در دماهای خیلی پایین کسر قابل ملاحظه‌ای از کل ذرات به حالت پایه یک تک ذره بروند و آنرا اشغال کنند. دراین حالت می گوییم که این ذرات به حالت پایه چگالیده شده‌اند، شکل ۵، یا اصطلاحاُ چگالش بوز—اینشتین به وقوع پیوسته‌است. این پدیده آثار فیزیکی خیلی مهمی دارد، زیرا به این معناست که عددکوانتومی کسر قابل ملاحظه‌ای از کل ذرات و درنتیجه خواص آنها مثل تکانه و انرژی آنها باهم یکسان شده است. این پدیده به نوبه خود منشاء پدیده هایی مثل ابررسانایی فلزات در دماهای پایین و یا ابرشارگی هلیوم است.

۵.۲ چه موقع اصل طرد پاوولی مهم می شود؟

سوال مهمی که می بایست به آن پاسخ بدهیم آن است که چه موقع می بایست تمیزناپذیری ذرات را در نظر بگیریم و چه موقع می بایست از آن چشم پوشی کنیم. به عبارت دقیق تر، می توان پرسید که آیابرای مثلاً باریکه‌ای از الکترونها که در اشعه

www.Endbook.net



شکل ۵: چگالش بوز—اینشتین.

کاتودی مشاهده می شود، بازهم باید اصل طرد پاوولی را در نظر گرفت یا خیر؟ برای یک گاز تک اتمی اکسیژن که همه ذرات گاز یکسان و یک شکل هستند، چطور؟ برای پاسخ دادن به این سوال می بایست به طول موج دوبروی ذرات یعنی λ از یک طرف و فاصله میانگین آنها یعنی l نگاه کرد. هرگاه $\lambda << l$ امکان همپوشانی توابع موج ذرات وجود ندارد و از لحاظ نظری ذرات از یک دیگر قابل تمیز هستند. اما هرگاه که $\lambda \approx l$ یا اینکه هرگاه $\lambda < l$ آنگاه توابع موج براحتی همپوشان می شوند و دیگر نمی توان آنها را از هم تمیز داد. طول موج دوبروی را سرعت ذرات و در نتیجه دما تعیین می کند. به عبارت بهتر داریم:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} \approx \frac{h}{\sqrt{mkT}} \tag{37}$$

و حال آنکه l توسط چگالی ذرات تعیین می شود،

$$l^3 = \frac{N}{V} = n \longrightarrow l = n^{\frac{1}{3}} \tag{38}$$

بنابراین شرط آنکه تمیزناپذیری ذرات را در نظر بگیریم آن است که دما به اندازه کافی پایین و چگالی آ نقدر بالا باشد، که شرط زیر برآورده شود:

$$n^{1/3} \approx \frac{h}{mkT}. \tag{39}$$

۳ فضای هیلبرت بوزونی و فرمیونی

دراین آخرین بخش می خواهیم ساختار فضای هیلبرت را برای دو ذره یکسان بیشتر بررسی کنیم. در درس های نخستین دیدیم که هرگاه فضای هیلبرت یک ذره را با V نشان دهیم فضای هیلبرت مربوط به دو ذره ضرب تانسوری دو فضای تک

www.Endbook.net

ذره ای یعنی $V \otimes V$ است. هرگاه بردارهای پایه فضای V را با $|e_\mu\rangle$ نشان دهیم، بردارهای پایه فضای $V \otimes V$ عبارتند از $|e_m, e_n\rangle := |e_m\rangle \otimes |e_n\rangle$. خواص تعامد و کامل بودن این بردارهای پایه به شکل زیراست:

$$\langle e_m, e_n | e_{m'}, e_{n'}\rangle = \delta_{m,m'}\delta_{n,n'} \tag{40}$$

و

$$\sum_{m,n} |e_m, e_n\rangle\langle e_m, e_n| = I_{V\otimes V}. \tag{41}$$

دقت کنید که دراینجا اندیس m را به عنوان کلی ترین اندیسی که بردارهای پایه را مشخص می کند، به کار برده ایم. این اندیس می تواند پیوسته یا گسسته و یا ترکیبی از هردو باشد. در نتیجه نمادِ $\delta_{m,m'}$ و یا علامت $\sum_m$ درهر مورد تعبیر مناسب خود را دارد. مثلاً برای یک دوذره‌ی اسپین $1/2$ داریم:

$$|e_m\rangle \longrightarrow |x, \alpha\rangle, \quad \alpha = \pm. \tag{42}$$

که دراین صورت روابط تعامد و کامل بودن به شکل زیرخواهند بود:

$$\langle x, \alpha | x', \alpha'\rangle = \delta(x - x')\delta_{\alpha,\alpha'}, \tag{43}$$

و

$$\int dx \sum_\alpha |x, \alpha\rangle\langle x, \alpha| = I_V \tag{44}$$

وقتی که فضای هیلبرت دو ذره را به این گونه در نظر می گیریم، به طور ضمنی پذیرفته‌ایم که با دو ذره تمیزپذیر سر و کار داریم. سوالی که در اینجا پیش می آید این است که فضای هیلبرت دو ذره تمیز ناپذیر به چه صورت می بایست تعریف شود و بردارهای پایه چنین فضایی چیست؟ آنچه که در مورد متفارن کردن تابع موج ذرات در ابتدای این درس گفتیم راهنمای ما برای یافتن پاسخ صحیحِ این سوال است. در فضای $V \otimes V$ عملگر جایگشت، عملگری مثلِ $\mathcal{P}$ است که به صورت زیر عمل می کند:

$$\mathcal{P}|u, v\rangle = |v, u\rangle. \tag{45}$$

بدیهی است که $\mathcal{P}^2 = I$. بنابراین ویژه مقدارهای $\mathcal{P}$ برابر با 1 یا -1 هستند. ویژه فضای مربوط به مقدارِ ۱ را فضای هیلبرت متفارن و ویژه فضای مربوط به مقدارِ ۱− را فضای هیلبرت پاد متقارن می گوییم و این دو زیر فضارا به ترتیب با $(V \otimes V)_+$ و $(V \otimes V)_-$ نشان می دهیم. می توانیم هر دو فضا را به شکل $(V \otimes V)_\xi$ بنویسیم که درآن $\xi = \pm$. از عملگر $\mathcal{P}$ می توان دو عملگر تصویرگر به صورت زیر ساخت:

$$\Pi_+ := \frac{1}{2}(I + \mathcal{P}), \qquad \Pi_- := \frac{1}{2}(I - \mathcal{P}). \tag{46}$$

www.Endbook.net

یا بطور خلاصه $\Pi_\xi = \frac{1}{2}(I + \xi P)$.

خواننده براحتی می تواند خواص زیر را تحقیق کند:

$$\Pi_\pm^2 = \Pi_\pm, \qquad \Pi_+\Pi_- = \Pi_-\Pi_+ = 0, \qquad \Pi_+ + \Pi_- = I. \tag{47}$$

از رابطه آخر معلوم می شود که

$$V \otimes V = (V \otimes V)_+ \oplus (V \otimes V)_- \tag{48}$$

هرگاه دو ذره بوزون باشند، فضای هیلبرت آنها را $(V \otimes V)_+$ و هرگاه فرمیون باشند، فضای هیلبرت آنها را $(V \otimes V)_-$ می گیریم. یک مجموعه بردارهای پایه برای $(V \otimes V)_+$ با اثر عملگرِ Π_+ روی بردارهای پایه $V \otimes V$ بدست می آید. هم چنین یک مجموعه بردارهای پایه برای $(V \otimes V)_-$ با اثر عملگرِ Π_- روی بردارهای پایه $V \otimes V$ بدست می آید:

$$|e_m, e_n\rangle_\xi = \frac{1}{2}(I + \xi P)|e_m, e_n\rangle = \frac{1}{2}(|e_m, e_n\rangle + \xi|e_n, e_m\rangle). \tag{49}$$

$$|e_m, e_n\rangle_\xi = \frac{1}{2}(I + \xi P)|e_m, e_n\rangle = \frac{1}{2}(|e_m, e_n\rangle + \xi|e_n, e_m\rangle). \tag{50}$$

رابطه تعامد هردو نوع پایه به شکل زیراست:

$${}_\xi\langle e_m, e_n|e_{m'}, e'_n\rangle_\xi = \frac{1}{2}(\langle e_m, e_n|(I + \xi P)|e_{m'}, e_{n'}\rangle = \frac{1}{2}(\delta_{m,m'}\delta_{n,n'} + \xi\delta_{m,n'}\delta_{n,m'}). \tag{51}$$

و رابطه کامل بودن آنها نیز عبارت است از:

$$\sum_{m,n} |e_m, e_n\rangle_\xi\langle e_m, e_n| = \sum_{m,n} \frac{1}{4}((I + \xi P)|e_m, e_n\rangle\langle e_m, e_n|(I + P)) = \frac{1}{2}(I + \xi P) = I_{(V\otimes V)_\xi}. \tag{52}$$

به این ترتیب ساختار فضای هیلبرت برای دو ذره بوزون یکسان یا دو ذره فرمیون یکسان را مشخص کردیم. وقتی که با مجموعه بزرگ تری از ذرات سرو کار داریم، این نوع نگرش به فضای هیلبرت مناسب نخواهد بود. در درس های آینده ساختار مناسب تری را برای فضای هیلبرت ذرات یکسان معرفی خواهیم کرد.

www.Endbook.net

درس نوزدهم: اتم هلیوم

۱ مقدمه

دراین درس ساده ترین اتم بعد از هیدروژن یعنی اتم هلیوم را مطالعه می کنیم. برای این اتم و دیگر اتم ها نمی توان معادله شرودینگر را به طور دقیق حل کرد و می بایست از مجموعه ای از روش های اختلالی برای تعیین طیف آنها کمک گرفت.

۲ روش های تقریبی برای یافتن طیف اتم هلیوم

هامیلتونی اتم هلیوم درساده ترین شکل خود (یعنی وقتی که از جفتیدگی های اسپین — مدار، آثارنسبیتی و نظایر آن صرف نظر کنیم) به شکل زیراست:

$$H = \frac{P_1^2}{2m} + \frac{P_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} = H_0 + H_1. \quad (1)$$

دراین هامیلتونی جمله برهم کنش دوالکترون را به صورت اختلال درنظر می گیریم و سعی می کنیم ترازهای پایین اتم هلیوم را به طورتقریبی بدست بیاوریم. نخست بهتراست که طیف هامیلتونی H_0 را مطالعه کنیم که چیزی نیست جز مجموع دو هامیلتونی برای اتم های هیدروژن گونه با عدد اتمی $Z = 2$. اگر از اسپین صرف نظر کنیم، ویژه حالت های این هامیلتونی با ٦ عدد کوانتومی مشخص می شوند و می توان آنها را به شکل زیر نوشت:

$$\Psi_{n,l,m}(r_1, r_2) = \psi_{n_1,l_1,m_1}(r_1)\psi_{n_2,l_2,m_2}(r_2), \quad (2)$$

که درآن $\mathbf{n} = (n_1, n_2)$، $\mathbf{l} = (l_1, l_2)$ و $\mathbf{m} = (m_1, m_2)$. انرژی چنین حالتی برابراست با

$$E_n = E_{n_1} + E_{n_2} = -\frac{1}{2}(\frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2})(Z\alpha)^2 mc^2. \quad (3)$$

چنانکه می دانیم الکترون ها فرمیون هستند و بنابراصل طرد پاوولی تابع موج کل دوالکترون می بایست نسبت به جایگشت آنها پاد متقارن باشد. بنابراین وقتی که اسپین الکترون ها را درنظر می گیریم می بایست توابع موج بالا را با توابع موج زیر جایگزین کرد:

www.Endbook.net

$$\Psi^s_{n,l,m}(r_1,r_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{n_1,l_1,m_1}(r_1)\psi_{n_2,l_2,m_2}(r_2)+\psi_{n_1,l_1,m_1}(r_2)\psi_{n_2,l_2,m_2}(r_1)\right)\chi_{singlet}, \tag{4}$$

و

$$\Psi^t_{n,l,m}(r_1,r_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{n_1,l_1,m_1}(r_1)\psi_{n_2,l_2,m_2}(r_2-\psi_{n_1,l_1,m_1}(r_2)\psi_{n_2,l_2,m_2}(r_1)\right)\chi_{triplet}, \tag{5}$$

که درآن

$$\chi_{singlet}=\frac{1}{\sqrt{2}}(|+,-\rangle-|-,+\rangle), \tag{6}$$

و

$$\chi_{triplet}=\begin{cases}|+,+\rangle,\\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|+,-\rangle+|-,+\rangle),\\ |-,-\rangle\end{cases} \tag{7}$$

توابع حالت در فضای اسپین هستند.
حالت Ψ^s حالتی است که تابع موج فضایی در آن متقارن و تابع موج اسپینی پاد متقارن است و حالت Ψ^t حالتی است که درآن تابع موج فضایی پاد متقارن و تابع موج اسپینی متقارن است.
هرکدام ازاین حالت ها یک واگنی چهارگانه دارند که توسط تکانه زاویه ای l و m مشخص می شود.
بنابراین هر ویژه حالت انرژی H_0 یگ واگنی هشت گانه دارد. انرژی تمام این حالت ها یکسان و برابر است با :

$$E_n=E_{n_1}+E_{n_2}=-\frac{1}{2}(\frac{1}{n_1^2}+\frac{1}{n_2^2})(Z\alpha)^2mc^2. \tag{8}$$

به این ترتیب حالت پایه H_0 حالت زیر خواهد بود:

$$\phi^s_0=\psi_{1,0,0}(r_1)\psi_{1,0,0}(r_2)\chi_{singlet}=\psi_{1,0,0}(r_1)\psi_{1,0,0}(r_2)\frac{1}{\sqrt{2}}(|+,-\rangle-|-,+\rangle). \tag{9}$$

دراین حالت تابع ϕ^t_0 وجود ندارد.

www.Endbook.net

انرژی این حالت برابر است با:

$$E_0 = \frac{-1}{2}mc^2(Z\alpha)^2 - \frac{-1}{2}mc^2(Z\alpha)^2 = -8 \times 13.6\ ev = -108.8\ \ ev. \tag{10}$$

اولین حالت برانگیخته وقتی درست می شود که یکی از الکترون ها در حالت $n = 1$ و دیگری در حالت $n = 2$ باشد . ویژه حالت های انرژی دراین حالت برابرند با:

$$\phi_1^s = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{1,0,0}(r_1)\psi_{2,l,m}(r_2) + \psi_{2,l,m}(r_1)\psi_{1,0,0}(r_2)\right)\chi_{singlet}, \tag{11}$$

و

$$\phi_1^t = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{1,0,0}(r_1)\psi_{2,l,m}(r_2) - \psi_{2,l,m}(r_1)\psi_{1,0,0}(r_2)\right)\chi_{triplet}, \tag{12}$$

که انرژی تمام آنها برابراست با:

$$E_1 = \frac{-1}{2}mc^2(Z\alpha)^2 - \frac{-1}{2}mc^2(\frac{1}{4})(Z\alpha)^2 = -5 \times 13.6\ ev = -68\ \ ev. \tag{13}$$

۱.۲ بدست آوردن انرژی حالت پایه به روش اختلال

حال می توانیم جمله برهم کنش بین دو الکترون را به صورت یک جمله اختلالی درنظرگرفته و تصحیح انرژی حالت پایه را درمرتبه اول حساب کنیم. مطابق با روش اختلال می دانیم که این تصحیح به صورت زیر محاسبه می شود:

$$\Delta E_0 = \langle\phi_0|H_1|\phi_0\rangle = \int d^3r_1 d^3r_2 \psi_{1,0,0}^2(r_1)\psi_{1,0,0}^2(r_2)\frac{e^2}{|r_1 - r_2|} \tag{14}$$

قبل ازمحاسبه این عبارت به تعبیر فیزیکی آن توجه می کنیم. می توان طرف راست را به شکل زیر نوشت:

$$\Delta E_0 = \int d^3r_1 d^3r_2 \rho(r_1)\frac{1}{|r_1 - r_2|}\rho(r_2) = \int d^3r \rho(r)V(r), \tag{15}$$

که درآن $\rho(\mathbf{r}) = e|\phi(\mathbf{r})|^2$ چگالی بار الکترون در نقطه $\mathbf{r}$ است و $V(\mathbf{r})$ پتانسیل ای است که یک الکترون در مکان نقطه $\mathbf{r}$ ایجاد می کند.

www.Endbook.net

حال به محاسبه طرف راست می پردازیم. می دانیم که

$$\psi_{1,0,0}(r) = Ae^{-\frac{Zr}{a_0}}, \tag{16}$$

که درآن

$$A = \frac{1}{\sqrt{\pi}}(\frac{Z_0}{a})^{\frac{3}{2}}. \tag{17}$$

بنابراین

$$\Delta E_0 = A^2 \int d^3r_1 d^3r_2 e^{\frac{-2Zr_1}{a_0}} e^{\frac{-2Zr_2}{a_0}} \frac{e^2}{|r_1 - r_2|}. \tag{18}$$

برای محاسبه انتگرال روی $\mathbf{r}_2$، محور های مختصات را طوری درنظرمی گیریم که محور $\mathbf{z}$ روی بردار $\mathbf{r}_1$ که درمحاسبه این انتگرال ثابت فرض می شود، منطبق شود. دراین حالت خواهیم داشت

$$|r_1 - r_2| = \left(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta_2\right)^{1/2} \tag{19}$$

ودرنتیجه

$$\Delta E_0 = A^2 \int d^3r_1 e^{\frac{-2Zr_1}{a_0}} \int r_2^2 dr_2 e^{\frac{-2Zr_2}{a_0}} \int d\Omega_2 \frac{e^2}{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta_2}. \tag{20}$$

اما انتگرال روی $\cos\theta_2$ براحتی قابل محاسبه است: یک محاسبه ساده نشان می دهد که

$$\int d\Omega_2 \frac{1}{|r_1 - r_2|} = \frac{4\pi}{r_>}, \tag{21}$$

که درآن $r_>$ یعنی اندازه بردارِبزرگتر دربین بردارهای $\mathbf{r}_1$ و $\mathbf{r}_2$.

بنابراین بدست می آوریم

$$\begin{aligned} \Delta E_0 &= e^2 A^2 (4\pi)^2 \int dr_1 r_1^2 r_2^2 dr_2 e^{-\frac{2Zr_1}{a_0}} e^{-\frac{2Zr_2}{a_0}} \frac{1}{r_>} \\ &= (4\pi e A)^2 \int_0^\infty r_1^2 dr_1 e^{-2\frac{Zr_1}{a_0}} \left[\int_0^{r_1} r_2 dr_2 e^{-2Zr_2/a_0} + \int_{r_1}^\infty \frac{r_2^2}{r_1} dr_2 e^{-2Zr_2/a_0}\right] \end{aligned} \tag{22}$$

محاسبه انتگرال های فوق دیگر کارساده ای است. پس ازجایگذاری مقدار A و مرتب کردن حاصل انتگرال بدست می آوریم

$$\Delta E_0 = \frac{5}{8}\frac{Ze^2}{a_0} = \frac{5}{4}Z(\frac{1}{2}mc^2\alpha^2). \tag{23}$$

www.Endbook.net

برای هلیوم $(Z = 2)$ این مقدار برابرخواهد بود با

$$\Delta E_0 \approx 34\ ev. \tag{24}$$

با افزودن این تصحیح به انرژی حالت پایه H_0 بدست می آوریم که

$$E_0 \approx -108.8 + 34 = -74.8\ ev. \tag{25}$$

مقدارتجربی برابراست با:

$$E_{exp} \approx -78.975\ ev. \tag{26}$$

بنابراین توانسته ایم با تصحیح مرتبه اول تطابق بسیارخوبی بین مقدار نظری و تجربی انرژی حالت پایه دست آوریم.

۲.۲ استفاده از روش وردشی برای تصحیح/انرژی حالت پایه

دراین بخش از روش وردشی استفاده می کنیم و حد بالایی برای انرژی حالت پایه بدست می آوریم. برای این کار از یک تابع موج فیزیکی استفاده می کنیم که معنای فیزیکی روشنی نیز دارد. می توانیم استدلال کنیم که هرکدام از الکترون ها درغیاب الکترون دیگر تنها یک هسته با بار Z می بیند واثر الکترون دیگر که درفضای اتم گردش می کند، آن است که به طور متوسط قسمتی از این بار را از نظر الکترون مورد نظر ما می پوشاند و باعث می شود که آن الکترون بار موثری به اندازه Z^* که از Z کمتراست ببیند.
بااین استدلال می توانیم یک تابع موج آزمایشی به صورت زیر درنظر بگیریم:

$$\Psi(r_1, r_2) = \phi(r_1)\phi(r_2) \tag{27}$$

که درآن $\phi_{1,0,0}(r)$ تابع موج حالت پایه برای یک اتم هیدروژن گونه است که بار هسته آن برابراست با Z^*. به عبارت دیگر $\phi_{1,0,0}$ درمعادله زیر صدق می کند:

$$H^*\phi = (\frac{P^2}{2m} - \frac{Z^*e^2}{r})\phi(r) = E_0^*\phi(r) \tag{28}$$

که درآن

$$E_0^* = -\frac{1}{2}(Z^*\alpha)^2\ mc^2 = -\frac{(Z^*e)^2}{2a_0}. \tag{29}$$

www.Endbook.net

حال متوسط تابع $\langle\Psi|H|\Psi\rangle$ را برای این تابع آزمایشی حساب کرده و مقدارآن را به عنوان تابعی از متغیر Z^* کمینه می کنیم. این کار هم یک حد بالای انرژی بدست می دهد و هم به یک معنا مقداری برای بار موثر هسته که هرکدام از الکترون ها حس می کنند بدست می دهد. داریم

$$\langle\Psi|H|\Psi\rangle = \int d^3r_1 d^3r_2 \phi^*(r_1)\phi^*(r_2)\left(\frac{P_1^2}{2m}+\frac{P_2^2}{2m}-\frac{Ze^2}{r_1}-\frac{Ze^2}{r_2}+\frac{e^2}{|r_1-r_2|}\right)\phi(r_1)\phi(r_2) \tag{30}$$

برای محاسبه طرف راست واقعاً نیازی به محاسبه دو باره انتگرال ها نداریم زیرا می توانیم هامیلتونی را به شکل زیر بازنویسی کنیم:

$$\begin{aligned} H &= \frac{P_1^2}{2m}-\frac{Z^*e^2}{r_1}+\frac{P_2^2}{2m}-\frac{Z^*e^2}{r_2}+\frac{(Z^*-Z)e^2}{r_1}+\frac{(Z^*-Z)e^2}{r_2}+\frac{e^2}{|r_1-r_2|} \\ &= H_1^*+H_2^*+\frac{(Z^*-Z)e^2}{r_1}+\frac{(Z^*-Z)e^2}{r_2}+\frac{e^2}{|r_1-r_2|}. \end{aligned} \tag{31}$$

بنابراین با توجه به بهنجار بودن هرکدام از توابع ϕ_1 و ϕ_2 خواهیم داشت:

$$\langle\Psi|H\Psi\rangle = 2E_0^*+2(Z^*-Z)e^2\langle\frac{1}{r}\rangle+\langle\frac{e^2}{|r_1-r_2|}\rangle. \tag{32}$$

که درآن می بایست برای عبارت $\langle\frac{1}{r}\rangle$ مقدارآن را از درس مربوط به اتم هیدروژن قرار دهیم و عبارت $\langle\frac{e^2}{|r_1-r_2|}\rangle$ را در بخش قبلی حساب کرده ایم. داریم

$$\langle\frac{1}{r}\rangle = \frac{1}{a_0} \tag{33}$$

و

$$\langle\frac{e^2}{|r_1-r_2|}\rangle = \frac{5}{8}\frac{Ze^2}{a_0}. \tag{34}$$

با جایگذاری این مقادیر در طرف راست $\langle H\rangle$ و مرتب کردن آن بدست می آوریم

$$\langle\Psi|H|\Psi\rangle = -\frac{e^2}{2a_0}\left[-2Z^{*2}+4Z^*Z-\frac{5}{4}Z^*\right]. \tag{35}$$

مطابق با اصل وردشی این عبارت برای هر مقدارِ Z^* از انرژی حالت پایه بیشتراست. بنابراین می توانیم بهترین حد بالا برای انرژی را با کمینه کردن این عبارت برحسب Z^* بدست آوریم. با محاسبه مشتق این عبارت بدست می آوریم که مقدار کمینه آن در نقطه $Z^* = Z-\frac{5}{16}$ قرار دارد و برابراست با

$$\langle H\rangle_{min} = -2\times\frac{1}{2}\alpha^2mc^2(Z-\frac{5}{16})^2. \tag{36}$$

www.Endbook.net

این نتیجه را می توان به این شکل تعبیر کرد که یک الکترون باعث کاهش بارالکتریکی هسته از Z به مقدار موثر $Z-\frac{5}{16}$ شود. عبارت بالا برای $Z=2$ برابر می شود با -77.38 الکترون ولت که با مقدار دقیق -79.975 الکترون ولت تفاوت بازهم کمتری نسبت به آنچه که از طریق روش اختلال بدست آوردیم دارد.
یادآوری می کنیم که تطابق خیلی خوبی که با مقدار دقیق بدست آورده ایم تنها ناشی از به کاربردن یک تابع موج آزمایشی با یک پارامتر آزاد بوده است. می توان با استفاده از توابع موج آزمایشی با تعداد بیشتری پارامترهای آزاد بازهم نتایج بهتری بدست آورد.

۳ تصحیح انرژی حالت های برانگیخته

اولین سری از حالت های برانگیختهٔ اتم هلیوم برای اعداد کوانتومی $\{(1,n)\}=\{(1,2),\ (1,3),\ (1,4),\cdots\}$ بدست می آید. دراین بخش می خواهیم با استفاده از روش اختلال، تصحیح انرژی این حالت ها را بدست آوریم. دیدیم که تابع موج هرکدام ازاین حالت ها به یکی از دوشکل زیراست:

$$\Psi^s(r_1,r_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{1,0,0}(r_1)\psi_{n,l,m}(r_2)+\psi_{1,0,0}(r_2)\psi_{n,l,m}(r_1)\right)\chi_{singlet}, \tag{37}$$

و

$$\Psi^t(r_1,r_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{1,0,0}(r_1)\psi_{n,l,m}(r_2-\psi_{1,0,0}(r_2)\psi_{n,l,m}(r_1)\right)\chi_{triplet}. \tag{38}$$

دراین جا نیز واگنی وجود دارد و در وهله اول به نظر می رسد که محاسبه تصحیح انرژی کار مشکلی است. ولی خوشبختانه پتانسیل اختلال در پایه این ویژه حالت ها قطری است و کافی است که برای بدست آوردن تصحیح انرژی عناصر روی قطر را حساب کنیم. پتانسیل اختلال برابر است با: $\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}$.. نخستین سوالی که با آن مواجه هستیم این است که آیا این عملگر در پایه فوق قطری است یاخیر؟ قبل از هر نوع محاسبه ای می دانیم که بدلیل متعامد بودن بردارهای حالت منفرد و سه گانهٔ اسپین بریکدیگر این عملگر درپایه فوق بلوکه قطری است. یعنی اینکه

$$\langle\Psi^t|\frac{e^2}{|r_1-r_2|}|\Psi^s\rangle=0. \tag{39}$$

حال دقت می کنیم که عملگر $\frac{1}{|r_1-r_2|}$ درفضای دو ذره یک عملگر اسکالراست یعنی با تمام مولفه های تکانه زاویه ای کل جابجا می شود. باید تاکید کنیم که این عملگر درفضای یک ذره یک اسکالر نیست و به همین دلیل هم با مولفه های تکانه زاویه ای مربوط به یک ذره جابجا نمی شود. این امر ممکن است ما را به این نتیجه برساند که این عملگر در پایه فوق قطری نیست زیرا اعداد کوانتومی l,m مربوط به تکانه یک ذره هستند، ولی با کمی تامل این نگرانی رفع می شود زیرا ذره دیگر در حالتی است که تکانه زاویه ای آن کاملاً صفراست و درنتیجه تکانه زاویه ای یک ذره همان تکانه زاویه ای کل است و اعداد

www.Endbook.net

کوانتومی $l,\ m$ نشان دهنده تکانه زاویه ای کل نیز هستند. ضمناً به دلیل این که هامیلتونی کل هنوز تقارن دورانی دارد تصحیح انرژی بستگی به عدد کوانتومی m نخواهد داشت. بنابراین بدست می آوریم:

$$\begin{aligned}
\Delta E_{n,l}^{(s,t)} &= \langle \Psi_{n,l,m}^{(s,t)} | \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} | \Psi_{n,l,m}^{(s,t)} \rangle \\
&= \frac{1}{2} \int \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} \left[\psi_{1,0,0}(r_1) \psi_{n,l,m}(r_2) \pm \psi_{1,0,0}(r_2) \psi_{n,l,m}(r_1) \right]^2 \\
&= \int \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} |\psi_{1,0,0}(r_1)|^2 |\psi_{n,l,m}(r_2)|^2 \pm \int \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} \psi_{1,0,0}^*(r_1) \psi_{1,0,0}(r_2) \psi_{n,l,m}^*(r_1) \psi_{n,l,m}^*(r_2) \\
&= J_{n,l} \pm K_{n,l}
\end{aligned} \tag{40}$$

انتگرال های مربوطه را می توان به طریق تحلیلی حساب کرد اگر چه ما این کار را دراینجا انجام نخواهیم داد. آنچه که به آن توجه خواهیم کرد آن است که این انتگرال ها مثبت هستند و هم چنین درقید زیر صدق می کنند:

$$0 \leq K_{n,l} \leq J_{n,l} \tag{41}$$

بنابراین بدست می آوریم

$$\Delta E_{n,l}^{s} = J_{n,l} + K_{n,l}, \tag{42}$$

و

$$\Delta E_{n,l}^{t} = J_{n,l} - K_{n,l}. \tag{43}$$

این روابط نشان می دهند که تصحیح انرژی برای هردو نوع حالت مثبت است که طبیعی است زیرا این تصحیح ناشی از نیروی دافعه الکترون هاست، ثانیاً تصحیح انرژی حالت Ψ^s از تصحیح انرژی حالت های Ψ^t بیشتراست. این نتیجه نیز طبیعی است زیرا در حالت Ψ^s تابع موج فضایی متقارن است و احتمال اینکه الکترون ها به نزدیکی یکدیگر بیایند بیشتراست ، درنتیجه انرژی دافعه آنها بیشترازوقتی است که درحالت پادمتقارنِ Ψ^t قرار دارند.
جمله $J_{n,l}$ تعبیر روشنی دارد و نشان دهنده انرژی دافعه دو الکترون با یکدیگر است . جمله دوم ناشی از اصل طرد پاوولی و متقارن کردن یا پاد متقارن کردن تابع موج فضایی است و هیچ تعبیر کلاسیکی ندارد. این جمله به جمله تبادلی یا $Exchange\ Term$ معروف است. می توان به یک معنا آن را برهم کنش ناشی از اسپین الکترون ها درنظرگرفت اگرچه این برهم کنش ناشی از گشتاور مغناطیسی الکترون ها نیست و فقط ناشی از فرمیون بودن الکترون ها و اصل طرد پاوولی است.
برای آنکه بستگی این برهم کنش را به اسپین نشان دهیم می توانیم راه زیر را طی کنیم. قرار می دهیم

$$\Delta E_{n,l} = J_{n,l} + \alpha K_{n,l} \tag{44}$$

www.Endbook.net

که درآن α عددی است که برای حالت منفرد یا $S(S+1)=0$ برابراست با 1 و برای حالت ِسه گانه یا $S(S+1)=2$ برابراست با -1. بنابراین می توانیم بنویسیم

$$\alpha = 1 - 2S(S+1). \tag{45}$$

از طرفی می دانیم که

$$S(S+1) = (s_1+s_2)^2 = \frac{3}{4}+\frac{3}{4}+2s_1\cdot s_2 = \frac{3}{2}+\frac{1}{2}\sigma_1\cdot\sigma_2. \tag{46}$$

بنابراین خواهیم داشت

$$\alpha = -\frac{1}{2}(1+\sigma_1\cdot\sigma_2), \tag{47}$$

و در نتیجه

$$\Delta E_{n,l} = J_{n,l} - \frac{1}{2}(1+\sigma_1\cdot\sigma_2)K_{n,l}. \tag{48}$$

به این ترتیب می بینیم که تصحیح انرژی به صورت یک ضریب منفی در جمله برهم کنش دواسپین نوشته شده است. این جمله عیناً مثل جمله هامیلتونی برهم کنش مغناطیسی دواسپین است با این تفاوت که منشأ آن اصل طرد پاوولی است و از نظر مرتبه نیز از برهم کنش مغناطیسی بین اسپین دوالکترون بسیار قوی تراست. درواقع انرژی برهم کنش مغناطیسی اسپین دو الکترون که در فاصله ای از مرتبه ابعاداتمی ازهم قرارگرفته اند از مرتبه زیراست:

$$E_{mag} \sim \frac{\mu_1\cdot\mu_2}{r^3} \sim \frac{1}{a_0^3}(\frac{e}{mc})^2 s_1\cdot s_2 \sim \frac{1}{a_0^3}(\frac{e}{mc})^2\hbar^2 \tag{49}$$

و برهم کنش تبادلی دوالکترون از مرتبه زیراست:

$$E_{exchange} \sim e^2\frac{1}{a_0} \tag{50}$$

که درآن a_0 شعاع بوهراست. باتوجه به اینکه $a_0 = \frac{1}{\alpha}\frac{\hbar}{mc}$ بدست می آوریم که

$$E_{exchange} \sim \alpha^{-2}E_{mag} \sim (137)^2 E_{mag}, \tag{51}$$

که نشان می دهد انرژی تبادلی بین ده تا صد هزار بار از انرژی برهم کنش مغناطیسی دوالکترون بیشتراست. این موضوع که در مواد فرومغناطیسی اسپین ها چگونه با برهم کنش مغناطیسی ضعیف شان می توانند بایکدیگر برهم کنش کرده ویک نظم

www.Endbook.net

بلند برد و مغناطش خود بخود بوجود آورند تا مدتها به عنوان یک معما در فیزیک کوانتومی و فیزیک حالت جامد باقی مانده بود تااینکه ورنر هایزنبرگ توضیح فوق را مبنی بر برهم کنش تبادلی الکترون ها برای انرژی زیاد برهم کنش بین اسپین ها درمواد فرومغناطیس ارایه کرد.