



جانب پنجم

مبانی فلسفیه کوانتومی

تالیف سلیمان ویدر
ترجمه جعفر کودرزی



دانشگاه فردوسی مشهد

انتشارات دانشگاه فردوسی (مشهد) ، شماره ۱۰۲

مبانی

نظریه کوانتومی

سل ویدر

دانشگاه فیرلی دیکینسون

ترجمه

جعفر گودرزی

استادیار فیزیک دانشگاه فردوسی (مشهد)

نام کتاب : مبانی نظریه کوانتومی
مؤلف : سل ویدر
مترجم : جعفر گودرزی
ویراستار : دکتر محسن سربیشهای
طراح و مونتاژ : محسن مومنی مهرجردی
ناشر : انتشارات دانشگاه فردوسی (مشهد)
تعداد : ۲۵۰۰ نسخه
تاریخ انتشار : مهرماه ۱۳۶۸
چاپ و صحافی : چاپخانه دانشگاه فردوسی (مشهد)
قیمت : ۱۵۶۰ ریال

فهرست مطالب

<u>صفحه</u>	<u>عنوان</u>
سیزده	پیشگفتار
۱	قسمت اول: سیستم‌های یک ذره‌ای
۲	فصل ۱ جنبه‌های تاریخی
۳	۱ تابش جسم سیاه
۴	۲ مدلهای مشخصه در داخل یک کاواک
۱۰	۳ نظریه (کلاسیکی) رالی ^۱ - جینز ^۲
۱۱	۴ نظریه (کوانتومی) پلانک ^۳
۱۳	۵ اثر فوتوالکتریک
۱۶	۶ اثر کامپتون ^۴
۱۷	۷ نظریه کوانتومی ماده
۱۸	۸ فرضیه دوبروی ^۵ و آزمایش داویسن ^۶ - جرمر ^۷
۱۹	۹ نظریه بوهر ^۸ برای هیدروژن

1- Rayleigh

2- Jeans

3- Planck

4- Compton

5- De Broglie

6- Davisson

7- Germer

8- Bohr

۲۲	۱۰ اصل تناظر
۲۳	۱۱ خلاصه
۲۴	مسائل

فصل ۲ مکانیک کلاسیکی ۲۷

۲۷	۱ شکل نیوتونی مکانیک (غیرنسبیتی)
۳۲	۲ معادلات لاگرانژ ^۹
۴۱	۳ معادلات هامیلتون ^{۱۰}
۴۴	۴ کروشهای پواسن ^{۱۱}
۴۶	۵ دینامیک نسبیتی
۴۷	مسائل

فصل ۳ صورت‌بندی مکانیک کوانتومی ۵۱

۵۱	۱ بردارها در یک فضای مختلط خطی N بعدی
۵۶	۲ عملگرهای خطی
۶۰	۳ ویژه مقدارها و ویژه بردارها
۶۲	۴ جبر ویژه مقدارها و ویژه بردارها برای عملگرهای هرمیتی ^{۱۲}
۶۵	۵ جایه‌جاگر و مسئله ویژه مقدار
۶۷	۶ عملگر تصویرگر
۷۰	۷ اصول موضوع مکانیک کوانتومی
۷۸	۸ دینامیک کوانتومی
۸۳	۹ حالت‌های مانا
۸۴	۱۰ ابعاد "فضای کوانتومی"
۸۷	۱۱ نمایش مختصه‌ای
۸۹	۱۲ گذار به مکانیک موجی

9- Lagrange

10- Hamilton

11- Poisson

12- Hermite

۹۳	معادله موج شرودینگر ^{۱۲}
۹۶	معادله موج شرودینگر و جریان احتمال
۹۹	مسائل
 فصل ۴ مکانیک موجی در یک بعد 	
۱۰۵	طبقه‌بندی حالت‌های مانا در مکانیک موجی
۱۰۵	ذره آزاد در یک بعد
۱۰۸	پراکندگی از سدهای یک بعدی
۱۰۹	سد مستطیلی
۱۱۱	حالت‌های مانا مقید در یک بعد
۱۱۶	چاه نامتناهی
۱۱۸	چاه متقارن نامتناهی
۱۲۱	پاریته
۱۲۲	چاه متقارن متناهی
۱۲۵	نوسانگر هماهنگ
۱۲۹	خواص ویژه تابعهای نوسانگر
۱۳۵	نوسانات در حالت‌های غیرمانا - تناظر کلاسیکی
۱۳۸	مسطه نوسانگر در نمادگذاری دیراک ^{۱۴} - روش نردبانی
۱۴۰	مسائل
۱۴۶	
 فصل ۵ مکانیک موجی در سه بعد 	
۱۵۲	مسطه ویژه مقداری در سه بعد
۱۵۴	ذره آزاد (مختصات دکارتی)
۱۵۴	ذره در یک جعبه
۱۵۸	نوسانگر ناهمسانگرد
۱۶۱	مختصات منحنی الخط
۱۶۲	

۱۶۵	۶ مسئله نیروی مرکزی
۱۶۹	۷ کوانتش تکانه زاویه‌ای
۱۷۵	۸ ذره آزاد (مختصات کروی)
۱۷۶	۹ نوسانگر همسانگرد
۱۷۹	۱۰ حالت‌های مقید یک پتانسیل جاذبه کولنی
۱۸۳	۱۱ اتم هیدرژن
۱۸۸	۱۲ پاریته و مسئله نیروی مرکزی
۱۹۰	۱۳ اثر میدان مغناطیسی پکواخت روی مسئله نیروی مرکزی
۱۹۹	۱۴ مسائل

فصل ۶ تکانه زاویه‌ای اسپینی

۲۰۴	۱ نظریه پاولی ^{۱۵} برای اسپین الکترون
۲۰۹	۲ خواص تبدیل کتهای اسپینی - تکانه زاویه‌ای کل
۲۱۱	۳ اسپین و مسئله نیروی مرکزی
۲۱۵	۴ مغناطیسی اسپینی و برهمنش اسپین - مدار در هیدرژن
۲۱۸	۵ میدانهای مغناطیسی خارجی - اثر پاشن - باک ^{۱۶}
۲۲۱	۱۶ مسائل

فصل ۷ روش‌های تقریبی

۲۲۳	۱ نظریه پریشیدگی
۲۲۴	۲ نظریه پریشیدگی مانای حالت مقید ناتبهگن (روش رالی - شرودینگر)
۲۲۸	۳ یک کاربرد از نظریه مرتبه اول
۲۳۰	۴ نظریه مرتبه دوم
۲۳۲	۵ پریشیدگی یک تراز تبھگن
۲۳۶	۶ کاربرد نظریه پریشیدگی در یک تراز تبھگن - اثر استارک ^{۱۷} در هیدرژن

15- Pauli

16- pashen-Back

17- Stark

۲۳۹	۷ اتم هیدرژن با برهمنش اسپین - مدار
۲۴۴	۸ اثر غیرعادی زیمن ^{۱۸} در هیدرژن
۲۴۷	۹ نظریه پریشیدگی وابسته به زمان
۲۴۹	۱۰ گذارهای القاء شده به وسیله یک پریشیدگی ثابت
۲۵۱	۱۱ گذارهای مرتبه اول - قاعده طلائی فرمی ^{۱۹}
۲۵۴	۱۲ تصحیحات مرتبه های بالاتر قاعده طلائی
۲۵۶	۱۳ گذارهای القاء شده به وسیله یک پریشیدگی هماهنگ
۲۵۷	۱۴ گذارهای تابشی در هیدرژن
۲۶۱	۱۵ دیدگاه اینشتین ^{۲۰} در گسیل خود به خود - توازن دقیق
۲۶۳	۱۶ روش وردشی (رالی - ریتس ^{۲۱})
۲۶۸	مسائل

۲۷۳	فصل ۸ نظریه پراکندگی
۲۷۳	۱ نظریه کلاسیکی پراکندگی
۲۷۷	۲ نظریه کوانتومی مانا (حالت پا بر جا) پراکندگی
۲۸۰	۳ پراکندگی راترفورد ^{۲۲} (مورد کوانتومی)
۲۸۴	۴ بررسی پراکندگی مانا به روش پریشیدگی - سری بورن
۲۸۸	۵ تقریب اول بورن ^{۲۳}
۲۹۲	۶ تقریبهای بالاتر بورن
۲۹۳	۷ روش امواج جزئی
۲۹۷	۸ تقریب جابه جایی فاز جزئی
۳۰۰	۹ پراکندگی S - موج
۳۰۳	۱۰ پراکندگی کوانتومی دینامیکی و گذارها .
۳۰۶	۱۱ پراکندگی ناکشان و جذب
۳۰۷	مسائل

18- Zeeman

19- Fermi

20- Einstein

21- Rayleigh-Ritz

22- Rutherford

23- Born

۲۱۱ ۲۱۲ ۲۱۳ ۲۱۷ ۲۱۸ ۲۲۰ ۲۲۴ ۲۲۷ ۲۲۹ ۲۲۱ ۲۲۲ ۲۴۲ ۲۴۴ ۲۵۱	قسمت دوم : سیستم‌های چندذرمانی فصل ۹ ذرات بدون برهم‌گش ۱ مکانیک کلاسیکی ۲ گذار به مکانیک کوانتومی ۳ نمایش مختصه‌ای و مکانیک موجی ۴ عملگر جایگشت ۵ سیستم‌های ایده‌آل تمیزپذیر ۶ سیستم‌های ایده‌آل تمیزناپذیر ۷ همبستگی‌های آماری در سیستم‌های ایده‌آل بوز^{۲۳} و فرمی ۸ اتم هلیوم "ایده‌آل" ۹ حالت‌های برانگیخته در هلیوم ۱۰ گاز ایده‌آل کوانتومی ۱۱ نمایش N ، عملگر چکالی ، و آمار کوانتومی مسائل
۲۵۵ ۲۵۶ ۲۵۹ ۲۶۳ ۲۶۷ ۲۶۹ ۲۷۲ ۲۷۸	فصل ۱۰ سیستم‌های چندذره‌ای برهم‌گش‌گننده ۱ مسئله دوجسمی منزوی ۲ برآکدگی از یک هدف متحرک ۳ اتم هلیوم - بررسی بهروش بریشیدگی ۴ اتم هلیوم - یک روش وردشی ۵ مدل آماری توماس^{۲۴} و فرمی برای اتم‌های پیچیده ۶ روش میدان خود - سازگار و تقریب هارتی^{۲۵} - فوک^{۲۶} - اسلاتر^{۲۷} ۷ خواص اتم‌ها در تقریب HFS

23- Bose

24- Thomas

25- Hartree

26- Fock

27- Slater

۳۸۲	۸ مولکولهای دو اتمی - تقریب بی دررو
۳۸۹	۹ مولکول هیدرژن و پیوند کوالانت (نظریه لندن - هایتلر ^{۲۸})
۳۹۳	۱۰ تبدیل به مختصات بهنگار، شبکه خطی، فونونها
۴۰۰	مسائل

۴۰۵ قسمت سوم : مکانیک کوانتومی نسبیتی و نظریه میدانها

۴۰۷	فصل ۱۱ مکانیک کوانتومی نسبیتی
۴۰۷	۱ معادله کلاین ^{۲۹} - گوردون ^{۳۰}
۴۱۱	۲ معادله دیراک
۴۱۲	۳ ذرات آزاد دیراک
۴۱۵	۴ حالت‌های انرژی منفی
۴۱۷	۵ یک ذره دیراک در یک میدان ایستا
۴۲۱	۶ ذره دیراک در یک پتانسیل کولنی - ساختار ریز در هیدرژن
۴۲۶	مسائل

۴۲۹	فصل ۱۲ نظریه میدان کوانتومی
۴۳۰	۱ نظریه کلاسیکی میدانها
۴۳۲	۲ چگالی هامیلتونی
۴۳۳	۳ کوانتش میدان
۴۳۴	۴ الکترودینامیک کلاسیکی
۴۳۹	۵ همارزی بین تابش آزاد و نوسانگرها
۴۴۱	۶ کوانتش میدان (عرضی) تابش آزاد
۴۴۲	۷ الکترودینامیک کوانتومی - گذارهای تابشی
۴۴۹	۸ بهن‌شدنگی خطوط طیفی - رابط عدم قطعیت انرژی - زمان

۴۵۱	مسائل
۴۵۵	پیوست الف: تقریب ونتزل ^{۳۱} -کرامرز ^{۳۲} -بریلوئن ^{۳۳} (WKB یا "انتگرال فاز")
۴۶۵	پیوست ب: تصویرهای هایزنبرگ ^{۳۴} و برهم کش
۴۷۱	وازنامه:
۴۷۵	فهرست راهنمای:

31- Wentzel

32- Kramers

33- Brillouin

34- Heisenberg

پیشگفتار

برنامه فیزیک دورهٔ لیسانس در بسیاری از دانشکده‌ها در جهتی مورد تجدیدنظر قرار گرفته است که در دونیمسال اول مطالبی از فیزیک جدیدرا بهوشاند و مکانیک کوانتومی را بر یک پایهٔ نیمه کمی بررسی کند. دانشجو سپس درسی می‌گیرد که بر پایهٔ نظریه کوانتومی صوری استوار است. این کتاب‌گذار آرامی از کارهای اولیهٔ دورهٔ لیسانس به مطالب پیشرفته‌تر را فراهم می‌آورد. متن حاضر شکل تکمیل یافتهٔ یادداشت‌هایی است که در یک درس دو نیمساله در دانشگاه فیرلی دیکینسون^۱ مورد استفاده قرار گرفته بودند. دروس پیش‌نیاز آن مکانیک، الکتروسیسته و مفناطیس، و فیزیک جدید است.

بنابر تجربهٔ شخصی‌ام، دو روش آموختی را برای نظریهٔ کوانتومی مفید تشخیص داده‌ام. روش اول به‌طور نسبتاً زیادی بر شاهت بین معادلهٔ موج در اپتیک فیزیکی و معادلهٔ شرودینگر استوار است. این دیدگاه در واقع مسئول محدودکنندگی و نارسانی عنوان "مکانیک موجی" است. چون فرضیهٔ دوپروی به عنوان سنگ زیر بنای مکانیک موجی به‌کار می‌رود، این روش به‌طور محسوسی با گسترش تاریخی سازگار است. به علاوه، حد کلاسیکی براحتی می‌تواند از طریق مقایسه با اپتیک هندسی، با نشان‌دادن شاهتهاي معادله هامیلتون - زاکوبی^۲ و معادله آپکونال، توضیح داده شود. با این وجود تظاهر صوری بین مکانیک کلاسیکی و مکانیک کوانتومی صریحاً روشن نیست.

در این متن، من انتخاب دوم را، که کاهی اوقات "روش بندادی" نامیده می‌شود، برگزیده‌ام. اهمیت این روش که نخست هامیلتونی کلاسیکی را بر حسب مختصات بندادی و

تکانه‌های همیوغ آنها نوشته و سپس تقارنهای مربوط به مسئله را مطالعه کنیم یکی از موضوعهای مهم این کتاب را تشکیل می‌دهد. از این نظر این کتاب بدقت روش ظریف ولی صوری دیراک را دنبال می‌کند*. این کتاب مطلب را به صورتی مطرح می‌کند که برای دانشجویان مطلوب‌تر است. تناظر بین نظریه‌های کلاسیکی و کوانتومی از طریق مشابهت جابه‌جاگری کروشی پواسن ساخته می‌شود. قضیه اهرنفست^۳ به عنوان یک اصل موضوع برای ربط دادن معادلات کلاسیکی حرکت به معادله شرودینگر به کار می‌رود. بعداز ارائه شکل عمومی مکانیک موجی در نماد – گذاری "براکت"^۴، نشان خواهیم داد که مکانیک موجی تنها یکی از چند نمایش نظریه کوانتومی است.

توافق عموم براین است که جایی که مکانیک موجی قابل اعمال باشد، ساده‌ترین و مستقیم‌ترین راه برای بررسی مسئله است. بیشتر مسائل در این کتاب، با ذراتی واقع در پتانسیلهای معلوم سروکار دارند و بدین ترتیب مکانیک موجی به طور وسیعی مورد استفاده قرار می‌گیرد و روش‌های حل معادله دیفرانسیل شرودینگر به طور مفصل مورد بحث قرار می‌گیرند. با این وجود، هرجا که امكان داشتم باشد، جوابها با استفاده از روش‌های عمومی تر دیراک نیز بدست خواهد آمد. نظریه کوانتومی به مسائل منتخبی در فیزیک جدید، با قصد اکید آموزش نظریه کوانتومی و نه فیزیک جدید، اعمال می‌شود. احساس من این بوده است که بعداز ارائه دقیق مکانیک کوانتومی، فیزیک جدید به بهترین وجهی فهمیده و ارزیابی می‌شود. چون برهم‌کنشهای الکترومغناطیسی بهتر از دیگر برهم‌کنشها فهمیده می‌شوند، عمدًا" از اغلب کاربردها به فیزیک هسته‌ای احتراز کرده‌ام و بیشتر بحثها را به گستره اتمی و مولکولی محدود کرده‌ام.

این کتاب به سه قسم تقسیم شده است – سیستمهای یک ذره‌ای (فصلهای ۱ تا ۸)، سیستمهای چند ذره‌ای (فصلهای ۹ و ۱۰)، و مکانیک کوانتومی نسبیتی و نظریه میدانها (فصلهای ۱۱ و ۱۲). در قسمت اول، فصلهای ۳ و ۲ مهم و تعیین کننده‌اند و احتمالاً "سلط دانشجو بعنهای مشکلتر از سایر فصول حاصل خواهد شد. بدون توجه خاص به این دو فصل، آنچه که به دنبال می‌آید ممکن است نامفهوم باشد. در قسمت دوم، فصل ۹ به ذرات تمیز ناپذیر و بدون برهم‌کش می‌پردازد و موضوع تحت پوشش آن برای تقریباً تمام شاخه‌های فیزیک اساسی است. فصل ۱۰ شامل سیستمهای ذرات برهم‌کش کننده است و در

* P.A.M. Dirac, "The Principles of Quantum Mechanics," 4th ed. Oxford University, London, 1958.

صورت لزوم بعضی از بخش‌های آن می‌توانند نادیده‌گرفته شوند. قسمت سوم شامل موضوعهای قدری پیشرفت‌تر است و در صورت کمبود وقت می‌توان "کلا" از آن چشم‌پوشی کرد. چنانچه تمام دوازده فصل بخواهند تحت پوشش قرار گیرند حداقل تا نیمه فصل ۷ بایستی در پایان نیمسال اول تدریش شده باشد.

من به همکاران، دانشجویان و ویراستارانی که با صرف وقت و کوشش خود موجبات بهترشدن این متن را فراهم آورده‌اند بسیار مدیونم. سپاس من به دانشجوی متازم آقای آلن بلومبرگ^۵ که دست‌نوشت‌ها را بازخوانی کرد و به پروفسور آرتور^۶ که بررسی‌های موشکافانه وی از قسمت‌های مشکل کتاب تعداد غلط‌ها را به نحو چشمگیری تقلیل داد. بخصوص از پروفسور فلوری^۷ و پروفسور زیدلر^۸ به خاطر بحث‌های بسیار جالب و پیشنهادهای ارزشمندانه درباره نظریه کوانتومی که این کتاب را بهبود بخشیدند سپاسگزارم. مسئولیت هرگونه اشتباه باقیمانده یا نارسائی، کاملاً متوجه خود من است. همسرم سوزان، در حالی که از فرزندانم آری، جان، و جرمی مواظبت می‌کرد با شکیهای تمام دست‌نوشت‌هارا، گاهی برای چندبار، ماشین می‌نمود و گوشزدهای سودمند بسیاری بهمن می‌کرد. وی به خاطر این زحمات و به خاطر گذشتی که در طول این کار از خود نشان داد، شایسته خاصترین تشکرات من است.

قسمت اول

سیستم‌های یک ذره‌ای



جنبه‌های تاریخی

گسترش فیزیک در قرن بیستم، با دو کشف بزرگ رقم زده شده است . اول، نسبیت خاص (اینشتین، ۱۹۰۵) که معادلات دینامیک کلاسیک را وقتی سرعت ماده با سرعت نور قابل مقایسه می‌شود تصحیح می‌کند . دوم ، مکانیک کوانتمی (شrodینگر، هایزنبرگ، بورن ، دیراک، ۱۹۱۰-۱۹۲۸) که در مقایسه با قوانین نیوتونی تصویر دقیق‌تری از دینامیک سیستم‌های میکروسکوپیکی به ما می‌دهد . در اواخر قرن نوزدهم ، شواهد تجربی بتدریج اثبات شدند و پیشنهاد می‌کردند که نظریه‌های کلاسیکی نیوتون و ماکسول^۱ برای توضیح بسیاری از پدیده‌های وابسته به ماده و تابش مناسب نیستند . به عنوان اولین قدم در مطالعه مکانیک کوانتمی، به بررسی بعضی از مسائلی که در اوائل قرن در مقابل فیزیکدانها قرار گرفته بود می‌پردازم.

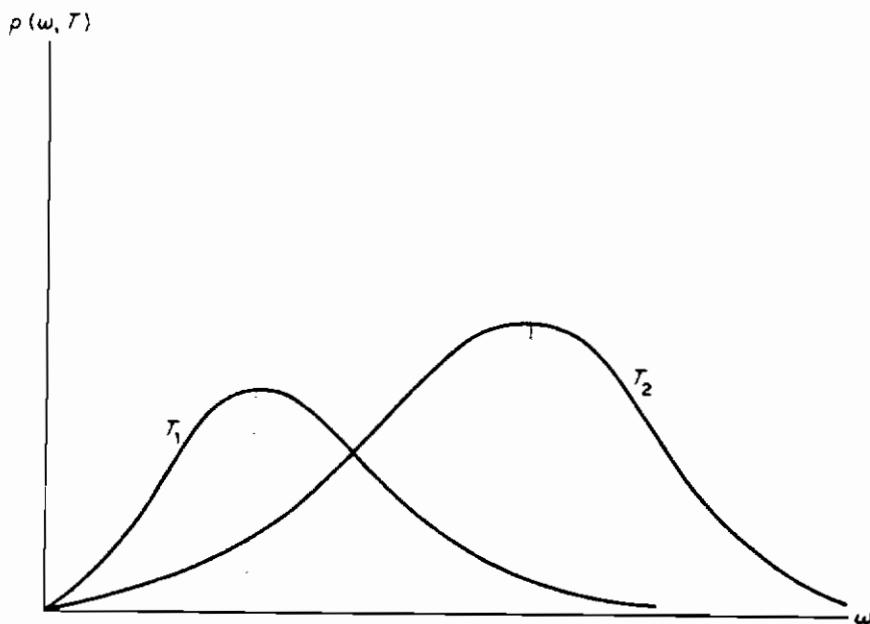
۱- تابش جسم سیاه

ماده به طور دائم در حال گسیل و جذب تابش است . هر جسم در اثر اغتشاشات حرارتی تابش گسیل می‌دارد . به عنوان مثال ، یک فلز وقتی تا چند هزار درجه کلوین^۲ گرم شود "ملتهب قرمز" می‌شود . بنابراین ، وقتی جسمی با دمای T در داخل محفظه بسته‌ای که قسمتی از فضارا اشغال کرده است قرار گیرد ، محفظه حاوی تابش الکترو مغناطیسی خواهد بود .

1- Maxwell

2- Kelvin

در حالت تعادل، این تابش، تابش "جسم سیاه" نامیده می‌شود، و به طور تجربی ثابت شده است که شامل ترکیب مشخصی از فرکانسها (یعنی، رنگها) است که فقط تابع دمای کلوین T است و تابع ترکیب شیمیایی، محتویات یا شکل محفظه نیست.



شکل (۱-۱) . چگالی تابشی جسم سیاه در دو دمای متفاوت کلوین ($T_2 > T_1$).

چگالی طیفی تابش (T, ω) را به صورت انرژی (در واحد حجم) تابشی ای که در گستره فرکانس (رادیان بر ثانیه) بین ω و $\omega + d\omega$ قرار داشته باشد، تعریف می‌کنیم. در شکل (۱-۱) چگالی طیفی در دو دمای متفاوت نشان داده شده است. سعی خواهیم کرد منحنی‌هایی را که منحنی‌های فوق دونمونه از آنها هستند، از نظریه کلاسیکی بدست آوریم. شکست ما در این مورد، نمای بهتری از نیاز به مکانیک کوانتومی بهما می‌دهد و در عین حال تعریفی در فیزیک کلاسیکی برایمان فراهم می‌کند. از نظر ریاضی داریم

$$d\mathcal{E} = \rho(\omega, T) d\omega. \quad (1-1)$$

چگالی انرژی کل مربوط به تمام فرکانس‌های ممکن عبارت است از

$$\mathcal{E}(T) = \frac{E}{\gamma} = \int_0^{\infty} \rho(\omega, T) d\omega \quad (1-2)$$

که در آن E انرژی کل واحد حجم محفظه است.

کوشش‌های کوناگونی برای توضیح منشاء طیف جسم سیاه صورت گرفته بود. وین^۳ پیشنهاد

کرد که شکل عمومی چگالی طیفی می‌تواند با انجام یک فرایند ترمودینامیکی (چرخه کارنو^۴) روی تابش داخل محفظه به دست آید. وی با درنظر گرفتن تابش به عنوان ماده کارد ر ماشین کارنو، به این نتیجه رسید که شکل عمومی $\rho(\omega, T)$ باید به صورت

$$\rho(\omega, T) = \omega^3 F\left(\frac{\omega}{T}\right) \quad (2-1)$$

باشد، که در آن F تابعی از متغیر $x = \omega/T$ است. ترمودینامیک به تنهایی نمی‌تواند تابع F را معین کند، ولی آن نظریه‌هایی را که با قانون "وین" (۲-۱) مطابقت نمی‌کنند از میدان خارج می‌کند.

با استفاده از قانون وین (۲-۱)، چگالی انرژی کل در داخل محفظه خواهد شد

$$\mathcal{E}(T) = \int_0^\infty \omega^3 F\left(\frac{\omega}{T}\right) d\omega = T^4 \int_0^\infty x^3 F(x) dx \quad (4-1)$$

که در آن $x = \omega/T$.

این انتگرال (اگر همکرا باشد) ایجاد می‌کند که چگالی انرژی کل در داخل محفظه متناسب باشد با T^4 ، یعنی،

$$\mathcal{E}(T) = \sigma' T^4 \quad (4-1\text{ الف})$$

که در آن ضریب ثابت عبارت است از $\int_0^\infty x^3 F(x) dx = \sigma'$. معادله (۴-۱ الف) چگالی انرژی الکترو مغناطیسی را به دمای کلوین مربوط می‌سازد. برای تابش همسانگرد، شار تابشی J (انرژی عبور کرده از واحد سطح در واحد زمان) به نوبه خود می‌تواند با رابطه

$$J = \frac{1}{4} c \mathcal{E}$$

به چگالی انرژی وابسته شود، که در آن c سرعت نور است (رک مسئله ۲-۱). معادله (۴-۱ الف) خواهد شد

$$J = \frac{1}{4} c \sigma' T^4 = \sigma T^4. \quad (5-1)$$

این، قانون استفان - بولتزمن^۵ است که در آن ثابت استفان - بولتزمن عبارت است از

$$\sigma = \frac{c}{4} \int_0^\infty x^3 F(x) dx.$$

در حالی که σ به طور تجربی برابر با $(\text{cgs})^{-4} = 0.567 \times 10^{-4}$ مده بود، $F(x)$ می‌باشد که به طور نظری تعیین می‌شود.

نتیجه دوم (۳-۱) قانون "جایه‌جایی" است که پناه آن رنگ غالب (یعنی، فرکانسی که در آن $\rho(\omega, T)$ بیشینه است) در داخل محفظه متناسب با دما است، یعنی،

$$\omega_0 \propto T. \quad (1-6)$$

این جا بهجایی در فرکانس بر اثر دما به طور تجربی نیز تأیید شده بود . افزایش دمای یک ماده، انتقالی از "قرمز ملتهب" به سوی "سفید ملتهب" ، که بیانگر حضور یک مولفه آبی رنگ است ، ایجاد می‌کند . فرکانس ω_0 که در آن $\omega = \omega/T$ بیشینه است می‌تواند با مشتق‌گیری از (۱-۳) به دست آید . با به کار بردن متغیر $x = \omega/T$ خواهیم داشت

$$\begin{aligned} \frac{\partial \omega^3 F(\omega/T)}{\partial \omega} \Big|_{\omega=\omega_0} &= T^4 \left\{ \frac{d}{dx} x^3 F(x) \right\}_{x=x_0} = 0 \\ &= T^4 \{x_0^3 F'(x_0) + 3x_0^2 F(x_0)\} = 0 \end{aligned}$$

پا

$$x_0 F'(x_0) - 3F(x_0) = 0. \quad (2-1)$$

برای هر تابع "معقول" $F(x)$ در قانون وین ، رابطه (۲-۱) یک معادله معمولی را نشان می‌دهد که می‌تواند نسبت به x_0 حل شود و رابطه

$$x_0 = \frac{\omega_0}{T} = \text{const.}$$

را به عنوان قانون جابه‌جایی (۱-۶) به دست دهد . البته ، مقدار ثابت بستگی به انتخاب F دارد . در واقع ، برای بعضی از توابع ، (۱-۲) جواب ندارد و قانون جابه‌جایی با شکست مواجه می‌شود .

به طور خلاصه ، مشاهده می‌کنیم که قانون وین منجر به یک چگالی طیفی می‌شود که هم با قانون "استفان - بولتزمن" سازگار است و هم با قانون جابه‌جایی . ثابت‌های وابسته به این قوانین به تابع بخصوص F ، که نمی‌تواند به کمک ترمودینامیک تنها تعیین شود ، بستگی دارد . در واقع ، جستجوی تابع F بود که پلانک را به کشف مکانیک کوانتومی هدایت کرد . بعدها "قوانین مکانیک الکترومغناطیس" را ، به‌امید به دست آوردن تابع $F(\omega/T)$ ، به مدل‌های متعددی اعمال خواهیم کرد .

۲ - مدهای مشخصه در داخل یک کاواک

در نظریه کلاسیکی ، تابش الکترومغناطیسی ترکیبی است از ارتعاشات میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی E و B . چون تابش جسم سیاه در داخل یک کاواک مستقل از شکل و ترکیب محفوظه است ، انتخاب یک کاواک فلزی مکعبی شکل بزرگ نه تنها از عمومیت مسئله کم نمی‌کند

بلکه از نظر ریاضی تسهیلاتی فراهم می‌کند. قوانین الکترومغناطیس ایجاد می‌کنند که این میدانها در معادلات موج زیر صدق کنند

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (8-1)$$

$$\nabla^2 \mathbf{B} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} = 0$$

که در آن c سرعت نور در خلاء است. به علاوه، میدانها باید در چند شرط مرزی در روی سطح فلز صدق کنند. به عنوان مثال، مولفه‌های مماسی \mathbf{E} و مؤلفه‌های قائم \mathbf{B} باید در سطح فلز صفر شوند. این نکته ایجاد می‌کند که فقط بعضی از مدهای مشخصه (امواج ساکن) می‌توانند توسط کاواک حفظ شوند. مدها و فرکانس‌های مشخصه آنها می‌توانند از قیاس با تار مرتعش به دست آیند.

مدهای طبیعی تار مرتعش با دو انتهای ثابت به وسیله

$$y_n = \exp(-i\omega_n t) \sin \frac{n\pi}{L} x \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (9-1)$$

نمایش داده می‌شوند که در آن L طول تار است. این جوابها هم در معادله موج (۸-۱) و هم در شرایط مرزی (یعنی $y_n(0, t) = 0$ و $y_n(L, t) = 0$) صدق می‌کنند. می‌توان مستقیماً نشان داد که فرکانس‌های طبیعی به وسیله

$$\omega_n = \frac{vn\pi}{L} \quad (10-1)$$

که در آن v سرعت فاز امواج عرضی در طول تار است، داده می‌شوند. هر مد با یک عدد صحیح n مشخص می‌شود و دارای یک فرکانس معین و یکتا است. مدهای مربوط به تابش در داخل یک کاواک فلزی دارای شبیه به (۹-۱) هستند، با استثنای اینکه این مدها با سه عدد صحیح مثبت l ، m و n مشخص می‌شوند. به علاوه، با مقایسه با (۱۰-۱)، فرکانس‌های مشخصه با

$$\omega_{l, m, n} = \frac{c\pi}{L} (l^2 + m^2 + n^2)^{1/2}. \quad (11-1)$$

داده می‌شوند. در اینجا L طول یک ضلع مکعب است. توجه کنیم که تمام مدها فرکانس‌های متعایزی ندارند. به عنوان مثال، از (۱۱-۱) نتیجه خواهد شد که سه "مد" $(l = 1, m = 1, n = 1)$ ، $(l = 1, m = 1, n = 2)$ و $(l = 1, m = 2, n = 1)$ دارای یک فرکانس یعنی $\omega = (c\pi/L)\sqrt{6}$ هستند. تعداد مدهایی که دارای یک فرکانس باشند، $N(\omega)$ ، تپه‌گنی مد نامیده می‌شود و برابر است با دو برابر تعداد طرقی که در آنها اعداد صحیح در

۱ جنبه‌های تاریخی

(۱۱-۱) می‌توانند به یک مقدار ω منجر شوند. ضریب دواز این واقعیت ناشی می‌شود که سور یک موج عرضی است و دارای دو حالت قطبیش است. هرچه ω بزرگ‌تر می‌شود تعداد طرق معکن برای انتخاب اعداد صحیح زیاد‌تر می‌شود به‌طوری که $N(\omega)$ با ω افزایش پیدا می‌کند.

فرض کنیم که انرژی متوسط حرارتی یک مد در یک دمای مشخص، فقط با فرکانس آن معین شود، یعنی، فرض کنیم

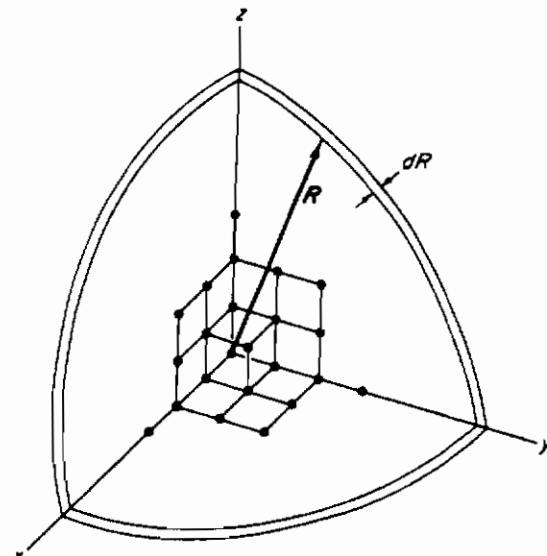
$$\bar{e}_{l, m, n} = \bar{e}(\omega). \quad (12-1)$$

این فرض درزیر توجیه خواهد شد. اگر بخواهیم انرژی کل حمل شده به‌وسیله مدهای متفاوت را محاسبه کنیم، می‌توانیم بنویسیم

$$E = \sum_{\omega} \bar{e}(\omega) N(\omega). \quad (13-1)$$

انرژی موجود در مدهایی که دارای یک فرکانس ω هستند دقیقاً "عبارت است از انرژی هر مد، $\bar{e}(\omega)$ ، ضربدر تعداد مدهایی که دارای این فرکانس می‌باشند، $N(\omega)$ ، انرژی کل با جمع بندی روی تمام فرکانسها به‌دست می‌آید. برای انجام این جمع بندی به‌نمایش صرفاً ریاضیاتی سیستم فیزیکی نظر می‌افکنیم.

مدهای داخل کواک می‌توانند به‌وسیله نقطه‌هایی که معرف اعداد صحیح وابسته‌به‌آنها در $\frac{1}{\lambda}$ اول فضای "اعداد صحیح" است نمایش داده شوند (شکل ۱-۲). نقاط l, m, n به



شکل (۱-۲). نمایش مدها به‌وسیله نقطه‌هایی در $\frac{1}{\lambda}$ اول فضای اعداد صحیح.

ترتیب، روی محورهای x ، y و z نمایش داده شده‌اند. توجه کنیم که فرکانس مد بوسیله فاصله نقطه معرف مد از مبدأ، یعنی، $\omega = (c\pi/L)R$ تعیین می‌شود که در آن

$$R = (l^2 + m^2 + n^2)^{1/2}$$

تبهگنی مد، $N(\omega)$ ، برابر است با دو برابر تعداد نقاط مد واقع بر روی $\frac{1}{\lambda}$ اول کره‌ای بشعاع R . برای تابش حرارتی نقاط مد غالباً که مورد توجه هستند دور از مبدأ قرار دارند که مسلماً "متناظرند با فرکانسهای بالاتر، یعنی، فرکانسهایی که در داخل ناحیه مادون قرمز یا بالاتر از آن قرار دارند. این مدها به قدری نزدیک به یکدیگر قرار دارند که می‌توان آنها را پیوسته تلقی کرد و تعداد مدهای بین ω و $\omega + d\omega$ را به صورت $dN = G(\omega) d\omega$ تعریف کرد، که در آن $G(\omega)$ چگالی مد است که بعداً آنرا محاسبه خواهیم کرد. انرژی کل داخل کاواک (۱۳-۱) خواهد شد

$$E = \int \bar{\epsilon}(\omega) dN = \int \bar{\epsilon}(\omega) G(\omega) d\omega \quad (14-1)$$

برای پیدا کردن $G(\omega)$ خاطرنشان کنیم که dN بیانگر حجمی از فضای اعداد صحیح است که در داخل لایه‌ای کروی بشعاع R و ضخامت dR ، در $\frac{1}{\lambda}$ اول، قرار دارد، یعنی،

$$dN = 2 \cdot \frac{1}{\lambda} \cdot 4\pi R^2 dR = \pi R^2 dR \quad (15-1)$$

ضریب ۲ از فیزیک سرچشم می‌گیرد نه از مدل ریاضی به کار برده شده، از این نظر که باید هر دو درجه قطبی را در نظر بگیریم. با استفاده از $(c\pi/L)R = \omega$ خواهیم داشت

$$R^2 dR = \left(\frac{L}{c\pi}\right)^3 \omega^2 d\omega = \frac{\gamma}{c^3 \pi^3} \omega^2 d\omega \quad (16-1)$$

که در آن $L^3 = \gamma$ حجم کاواک است. بالاخره، نتیجه می‌گیریم

$$dN = \frac{\gamma}{c^3 \pi^2} \omega^2 d\omega \quad (17-1)$$

و چگالی مد عبارت است از

$$G(\omega) = \frac{\gamma}{c^3 \pi^2} \omega^2 \quad (18-1)$$

چگالی انرژی کل در داخل کاواک از (۱۴-۱) به صورت

$$\mathcal{E} = \frac{E}{\gamma} = \frac{1}{c^3 \pi^2} \int_0^\infty \bar{\epsilon}(\omega) \omega^2 d\omega = \int_0^\infty \rho(\omega) d\omega \quad (19-1)$$

به دست می‌آید که از آن می‌توان چگالی طیفی را به صورت زیر مشخص کرد

$$\rho(\omega) = \frac{1}{c^3 \pi^2} \bar{\epsilon}(\omega) \omega^2 \quad (20-1)$$

برای تابش حرارتی (جسم سیاه)، انرژی متوسط \bar{e} هرمد نیز توسط دمای کلوین تعیین می‌شود و
(۲۰-۱) باید به صورت

$$\rho(\omega, T) = \frac{1}{c^3 \pi^2} \bar{e}(\omega, T) \omega^2 \quad (21-1)$$

نوشته شود. بستگی صریح به دما را در زیر محاسبه خواهیم کرد.

برای پیدا کردن \bar{e} از تشابه بین یک مد و یک نوسانگر هماهنگ ساده^{*} با فرکانس طبیعی ω استفاده می‌کنیم. فرض اینکه این نوسانگر از نظر ماهیت کاملاً "کلاسیکی" است اساس نظریه رالی - جینز را تشکیل می‌دهد.

۳ - نظریه (کلاسیکی) رالی - جینز

مجموعه‌ای از نوسانگرهایی را که همه آنها دارای یک فرکانس می‌باشند ولی انرژی‌های آنها متفاوتند در نظر بگیریم. طبق قانون کلاسیکی بولتزمن، کسری از نوسانگرهای انرژی‌شان e است متناسب است با $e^{-\epsilon/kT}$ ، که در آن k ثابت بولتزمن است ($k = 1/38 \times 10^{-16} \text{ erg/deg}$). انرژی متوسط با استفاده از نمایش مکانیک آماری کلاسیکی به صورت زیر بدست می‌آید^{**}

$$\bar{e}(\omega, T) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\epsilon/kT} dp dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\epsilon/kT} dp dx} \quad (22-1)$$

که در آن انرژی نوسانگر عبارت است از

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

انتگرال‌ها می‌توانند مستقیماً محاسبه شده و به $\bar{e}(\omega, T) = kT$ منجر شوند. این نتیجه مجباً توجه است زیرا بنابر آن مادامی که انرژی یک نوسانگر بتواند به طور پیوسته تغییر کند، انرژی متوسط مستقل از فرکانس نوسانگرهای مورد نظر است. با قراردادن $kT = \bar{e}$ در (۲۱-۱) خواهیم داشت

$$\rho_R(\omega, T) = \frac{1}{c^3 \pi^2} kT \omega^2 \quad (23-1)$$

که همان چگالی طیفی رالی - جینز است.

* آیدهٔ معادل بودن یک مد تابشی و یک نوسانگر، یک آیدهٔ دقیقی است که در فصل ۱۲ ثابت خواهد شد.

** به عنوان مثال، به کتاب زیر مراجعه کنید:

اين چگالي در صورتی با قانون وين (۲-۱) سازگار است که قرار دهيم

$$F_{RJ}\left(\frac{\omega}{T}\right) = \frac{k}{c^3 \pi^2} \left(\frac{\omega}{T}\right)^{-1} \quad (24-1)$$

زيرا در اين صورت (۲۳-۱) خواهد شد

$$\rho_{RJ} = \omega^3 F_{RJ}\left(\frac{\omega}{T}\right)$$

با اينکه نتیجه رالي - جينز با قانون وين سازگار است، اما بهدلائل زير نمیتواند به عنوان چگالي طيفي جسم سياه مورد قبول قرار گيرد:

(الف) رسم ساده $\rho_{RJ}(\omega, T)$ آشكار میکند که اين چگالي بيشينه ندارد، بلکه وقتی ω زياد میشود به مستع پنهانهايت ميل میکند. در نتیجه، قانون جابهجائي نقض میشود.

(ب) چگالي انرژي کل $\int_0^\infty \rho(\omega) d\omega$ بپنهانهايت میشود، که در تناقض مستقيم با قانون استفان، يعني، $\sigma T^4 = J$ ، است.

مشكل دوم به اين علت پيش میآيد که انتگرال در حد بالائي (فرکانسهاي بالا) واگرا میشود. اين واگرایي منشاء "فاجعه فرابينفس" مشهور است که، همان طور که خواهيم ديد، به وسیله نظریه پلانک رفع خواهد شد.

۴ - نظریه(کوانتومي) پلانك

تحليل پلانک دقیقاً دنباله نظریه رالي - جينز است، با این استثناء که او فرض کرد که انرژي یک نوسانگر با فرکانس n طبق قاعده

$$\epsilon_n = n\hbar\omega \quad (25-1)$$

محدود يا "کوانتиде" است، که در آن $\hbar = h/2\pi$ (h بار بخوانيد)، \hbar ثابت جهاني پلانک و ...، $n = 0, 1, 2, \dots$ است. انرژي متوسط حرارتی مشابه با (۲۲-۱) به وسیله قانون کوانتومي بولتزمن داده میشود

$$\bar{\epsilon}(\omega, T) = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \epsilon_n \exp(-\epsilon_n/kT)}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\epsilon_n/kT)} \quad (26-1)$$

با مشاهده اینکه (۲۶-۱) می‌تواند به صورت

$$\bar{e}(\omega, T) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta \epsilon_n) \quad (27-1)$$

که در آن $\beta = 1/kT$ است، نوشته شود، حاصل جمع‌های فوق به آسانی محاسبه می‌شوند. با استفاده از $\epsilon_n = n\hbar\omega$ ، حاصل جمع فوق خواهد شد

$$\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta n\hbar\omega) = \sum_{n=0}^{\infty} [\exp(-\beta\hbar\omega)]^n \quad (28-1)$$

با قراردادن $e^{-\beta\hbar\omega} = y$ ، جمع فوق به صورت جمع یک سری هندسی درخواهد آمد و خواهیم داشت

$$\sum_{n=0}^{\infty} y^n = \frac{1}{1-y}$$

بنابراین

$$\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta \epsilon_n) = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta n\hbar\omega) = \frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\omega}} \quad (29-1)$$

با مشتقگیری از عبارت فوق، که (۲۷-۱) ایجاب می‌کند، و ساده‌کردن آن خواهیم داشت

$$\bar{e}(\omega, T) = \frac{\hbar\omega e^{-\hbar\omega/kT}}{1-e^{-\hbar\omega/kT}} = \frac{\hbar\omega}{(e^{\hbar\omega/kT}-1)} \quad (30-1)$$

توجه کنیم که شرط کوانتش (۲۵-۱) منجر به یک انرژی متوسطی برای نوسانگر می‌شود که هم تابع T است و هم تابع ω . با قراردادن (۳۰-۱) در (۲۱-۱) چگالی طیفی پلانک را به صورت زیر به دست خواهیم آورد

$$\rho_p(\omega, T) = \frac{\omega^2}{c^3 \pi^2} \frac{\hbar\omega}{(e^{\hbar\omega/kT}-1)} = \omega^3 F_p\left(\frac{\omega}{T}\right) \quad (31-1)$$

که در آن

$$F_p\left(\frac{\omega}{T}\right) = \frac{\hbar}{c^3 \pi^2} [e^{(\hbar/k)(\omega/T)} - 1]^{-1} \quad (32-1)$$

فرمول پلانک با قانون وین سازگار است. ولی اکنون تابع پلانک، $F_p(\omega/T)$ ، منجر به یک چگالی طیفی می‌شود که با مشاهدات تجربی نیز سازگار است (شکل ۱-۱). هم قانون جا به جایی و هم قانون استفان-بولتزمن هردو مستقیماً از فرمول پلانک به دست می‌آیند. برای مقایسه نظریه با تجربه، راحت‌تر است که چگالی طیفی را، به جای فرکانسها، بر حسب طول موجها بیان کنیم. بنا به تعریف، (λ, T, μ) عبارت است از انرژی حمل شده به موسیله

طول موجهای بین λ و $d\lambda + \lambda$ بنا بر این

$$-\rho(\lambda, T) d\lambda = \rho(\omega, T) d\omega \quad (33-1)$$

با استفاده از $\lambda = \frac{2\pi c}{\omega^2} d\omega$ نتیجه خواهیم گرفت

$$\rho(\lambda, T) = \frac{\omega^2}{2\pi c} \rho(\omega, T)$$

یا

$$\rho_p(\lambda, T) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \left[\exp\left(\frac{hc}{\lambda kT}\right) - 1 \right]^{-1} \quad (34-1)$$

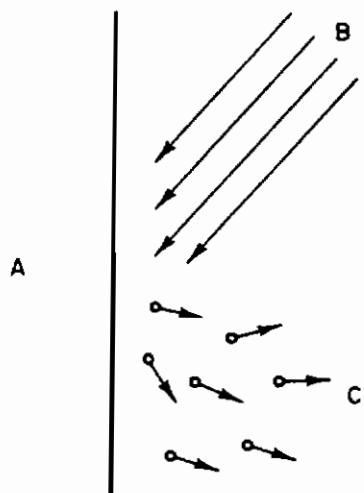
با قراردادن $h = 6.63 \times 10^{-34}$ erg-sec توانی توافق بسیار خوبی با تجربه حاصل می‌شود .
 تمام آنچه که برای حل مشکلاتی که با نظریه کلاسیکی داشتیم لازم بود عبارت بود از
 محدود کردن یا کوانتیده کردن انرژیهای یک نوسانگر بر طبق $\epsilon_n = n\hbar\omega$.
 بعداً دلیل دیگری ارائه خواهد شد که نشان می‌دهد کوانتش باید در دیگر سیستمها
 نیز صورت گیرد .

۵ - اثر فتوالکتریک

هر ماده از اتمهای تشکیل شده است که، بمنوبه خود، شامل الکترونها، پروتونها،
 و نوترونها هستند . در یک فلز بعضی از الکترونها در داخل فلز آزادانه حرکت کرده و از اتمی
 به اتم دیگر می‌روند . کمترین انرژی لازم برای اینکه یک الکtron را از فلز جدا کند تابع گار
 فلز نامیده می‌شود . انرژی لازم برای خارج کردن الکtron می‌تواند از طریق حرارتی (گسیل
 گرما یونی) ، برخورد ذرات پر انرژی (گسیل ثانوی) ، یا تابش الکترومغناطیسی (گسیل فوتونی)
 تأمین شود . در اینجا فرایند اخیر، اثر فتوالکتریک (شکل ۳-۱)، را قادری دقیق‌تر بررسی
 می‌کنیم زیرا گسترشهای اولیه مکانیک کوانتومی را روشن‌تر می‌سازد .

در نظریه کلاسیکی، انرژی یک موج الکترومغناطیسی با مریع دامنه آن متناسب است .
 در نتیجه، هر فرکانسی که دامنه آن کافی باشد بتواند انرژی لازم برای خروج الکترونها

را تأمین کند. با این وجود، از نظر تجربی، افزایش دامنه، یا در مورد نور، درخشندگی، باعث شروع گسیل فوتونی الکترون نمی‌شود. برخلاف تفکر کلاسیکی، گسیل فوتونی الکترون با افزایش فرکانس تا بالاتر از یک مقدار آستانه ایجاد می‌شود. به طور تجربی معلوم شده است که این فرکانس آستانه W "مستقیماً" با تابع کار W متناسب است.



شکل (۳-۱). اثر فتوالکتریک. A، فلز؛ B، نور؛ C، الکترونها.

توضیح اثر فتوالکتریک نخستین بار توسط اینشتین (۱۹۰۵) ارائه شد. او در نظریه کوانتومی خود از نور، حدس زد که نور دارای ویژگیهای ذره مانند بوده و از کوانتاهای نوری یا فوتون با خواص زیر تشکیل شده است.

$$c = \text{سرعت}$$

$$\omega = \text{انرژی} \quad h\nu = \text{انرژی}$$

$$m = \text{تکانه} \quad \frac{h}{\lambda}$$

$$v = \frac{\omega}{2\pi}$$

طبق نظر اینشتین، یک الکترون با جذب یک تک فوتون انرژی کسب می‌کند، بنابراین انرژی کمینه لازم فوتون برای آزاد کردن یک الکترون عبارت است از

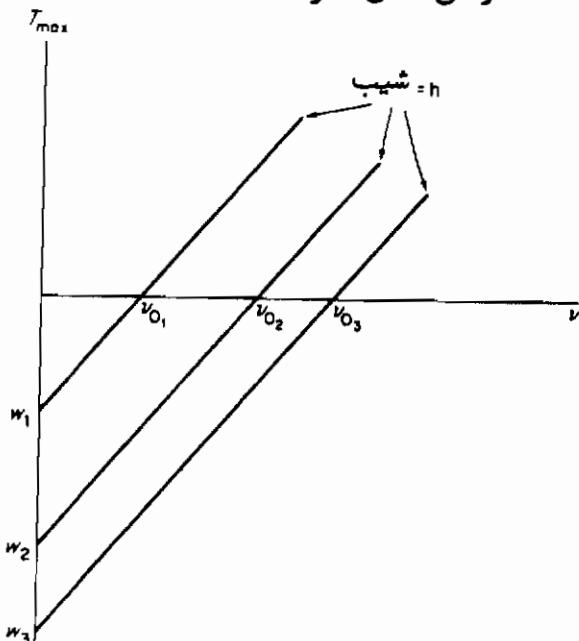
$$E_{min} = h\nu_0 = W \quad (35-1)$$

اگر انرژی فوتون ورودی بزرگتر از $h\nu_0$ باشد، انرژی اضافی به جای دیگر می‌رود، با احتمالاً بمانرژی جنبشی الکترون پرتاب شده تبدیل می‌شود. افزایش شدت پاره که نور تابیده شده "صرفًا" تعداد فوتونهای ورودی را افزایش می‌دهد، و در نتیجه، باعث افزایش تعداد

فتو-الکترونها می‌شود. انرژی جنبشی بیشینه هر الکترون عبارت است از

$$T_{\max} = h\nu - W = h(\nu - \nu_0) \quad (36-1)$$

این معادله، معادله فوتوالکتریک اینشتین نامیده می‌شود. اگر منحنی انرژی جنبشی مشاهده شده بیشینه نسبت به فرکانس فرودی را برای تعدادی از فلزات رسم کنیم، در واقع، یک رابطه خطی به دست خواهیم آورد (شکل ۳-۱). تمام منحنیها دارای یک شیب مشترک h هستند، ولی نقاط تقاطع آنها با محورها با یکدیگر تفاوت دارند که مربوط است به تابع کار خاص فلز. مقدار تجربی به دست آمده برای ν_0 با مقداری که از داده‌های تابش جسم سیاه برای آن به دست آمده است توافق کامل دارد.



شکل (۳-۱). منحنی معادله فوتوالکتریک برای سه فلز، که توابع کار و فرکانس‌های آستانه آنها را نشان می‌دهد.

تجوییه کامل نظریه اینشتین مستلزم بررسی دقیق فرایند کسیل فوتونی الکترون از طریق دینامیک کوانتومی است. فرمول نسبتاً پیچیده‌ای برای توضیح جنبه‌های ظرف این پدیده به دست آمده است*.

* برای بحث در فرمول اثر فوتوالکتریک به کتاب

"the Quantum Theory of Radiation." 3rd ed., pp. 204-211.

Oxford Univ. Press, London and New York, 1954.

تألیف W. Heitler مراجعه کنید.

۶- اثر کامپتون

نظریه کوانتمی اینشتین در مورد نور می‌تواند به پراکندگی فوتونهای اشعه X از الکترونها آزاد نیز اعمال شود. در عمل، الکترونها مقید به فلز هستند، اما چون انرژی‌های وابسته به اشعه X خیلی بزرگتر از تابع کار W است، الکترونها می‌توانند آزاد در نظر گرفته شوند. این اثر وقتی به طریق کلاسیکی بررسی شود، پراکندگی تامسون^۶ نامیده می‌شود. از نظر کلاسیکی، تابش‌های فرویدی و پراکنده شده دارای یک فرکانس هستند و شدت پراکنده شده بر طبق رابطه

$$I \propto I_0(1 + \cos^2 \theta) \quad (37-1)$$

با زاویه پراکندگی تغییر می‌کند، که در آن I_0 شدت تابش فرویدی است. وقتی اشعه X از الکترونها یک ورقه فلزی پراکنده می‌شوند، هیچکدام از پیشگوئیها صادق نیست. فرکانس اشعه X پراکنده شده کاهش می‌یابد و شدت آنها با فرمولی خیلی پیچیده‌تر از (۳۷-۱) داده می‌شود.

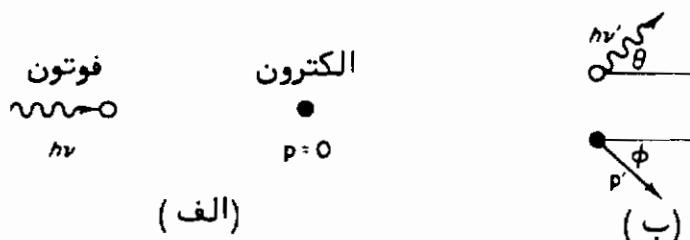
کاهش فرکانس اشعه X پراکنده شده، نخستین بار توسط کامپتون (۱۹۲۳)، با استفاده از نظریه کوانتمی اینشتین در مورد نور، توضیح داده شد. کامپتون این پراکندگی را به عنوان برخورد یک فوتون با یک الکترون آزاد که ابتدا در حال سکون بوده است، در نظر گرفت (شکل ۱-۵).

قوانين بقاء انرژی و تکانه ایجاب می‌کنند که

$$hv - hv' = T \quad (\text{انرژی})$$

$$\frac{h}{\lambda} = \frac{h}{\lambda'} \cos \theta - p \cos \phi \quad (\text{تکانه در امتداد محور } x \text{ ها}) \quad (38-1)$$

$$\frac{h}{\lambda'} \sin \theta = p \sin \phi \quad (\text{تکانه در امتداد محور } y \text{ ها})$$



شکل (۱-۵). سینماتیک اثر کامپتون (الف) قبل و (ب) بعد از برخورد یک فوتون و یک الکترون.

در اینجا T و p ، به ترتیب، انرژی جنبشی و تکانه خطی الکترون پراکنده شده‌اند. با استفاده از فرمول موجی

$$c = v\lambda = v'\lambda'$$

و رابطه نسبیتی بین تکانه و انرژی جنبشی

$$T^2 + 2Tmc^2 = p^2c^2$$

می‌توان p ، T ، v ، v' و ϕ را در (۳۸-۱) حذف کرد و فرمول کامپتون را به صورت زیر به دست آورد

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{mc} (1 - \cos \theta) \quad (39-1)$$

این فرمول طول موج پراکنده شده λ' را به‌زاویه پراکندگی فوتون، θ ، ربط می‌دهد. کمیت

$$\lambda_c = h/mc \approx 0.024 \times 10^{-8} \text{ cm} \quad (40-1)$$

طول موج کامپتون نامیده می‌شود. بیشینه جابه‌جایی برای پراکندگی به عقب ($\theta = 180^\circ$) رخ می‌دهد که برای آن $\Delta\lambda = 2\lambda_c$.

شدت اشعه X پراکنده شده، با فرمول کلاین-نیشینا^۷ (به‌جای فرمول تامسون) مطابقت می‌کند. این فرمول بر پایه الکترودینامیک کوانتومی نسبیتی بنا شده و خیلی پیچیده‌تر از آن است که در اینجا مورد بحث قرار گیرد*.

۲ - نظریه کوانتومی ماده

گرچه کوانتش در ابتدا در ارتباط با تابش وارد شده بود، به‌زودی آشکار شد که ماده نیز باید کوانتیده باشد. حتی ویژگیهای ساده‌ترین اتم، هیدروژن، نمی‌تواند بر حسب تنها مکانیک کلاسیکی توضیح داده شود. از نظر کلاسیکی، الکترون هیدروژنی باید روی یک مدار بیضی شکل در اطراف پروتون، شبیه به حرکت سیاره‌ای، که در آن جاذبه الکتروستاتیکی نیروی مرکز گرara نامین می‌کند، حرکت کند.

* برای بحث فرمول کلاین-نیشینا به کتاب

"the Quantum Theory of Radiation" 3rd. P.215. Oxford Univ. Press London and New York, 1954.

تألیف W. Heitler مراجعه کنید.

به طور کلاسیکی کاملاً" معلوم شده است که وقتی ذرات باردار دارای شتاب هستند انرژی تابشی از خود گسیل می‌دارند. الکترودینامیک کلاسیک ثابت می‌کند که آهنگ‌گسیل عبارت است از

$$\frac{E^2 a^2}{Z c^3} = \frac{\text{انرژی}}{\text{زمان}} \quad (41-1)$$

که در آن، E بار الکتریکی، a شتاب و c سرعت نور است. چون الکترون هیدرژنی همیشه شتابی به طرف پروتون دارد، باید از طریق فرایند تابش انرژی از دست بدهد و به صورت مارپیچ به طرف پروتون هدایت شود. با این وجود، این فروپاشی اتمی در طبیعت رخ نمی‌دهد، الکترون هیدرژن (به طور متوسط) هرگز نزدیکتر از $10^{-8} \text{ cm} \times \frac{e}{c} \sim d$ به هسته مشاهده نشده است.

یکی دیگر از نتایج نظریه کلاسیکی این است که در حالی که الکترون به طرف داخل حرکت مارپیچی دارد، فرکانس دوران آن باید به طور ملایم تغییر کرده و طیف تابشی باید پیوسته باشد، یعنی، تمام رنگها باید به طور پیوسته گسیل شوند، تجربه آشکارا نشان می‌دهد که طیف هیدرژن گسته است، یعنی، شامل چند رنگ مشخص می‌باشد.

ریدبرگ^۸ مشاهده کرد که طول موج خطوط طیفی در طیف تابشی هیدرژن با فرمول تجربی زیر وفق می‌دهد

$$\frac{1}{\lambda_{m,n}} = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad (n, m = 1, 2, \dots; \quad m > n) \quad (42-1)$$

که در آن $\text{cm}^{-1} = 109677 / 576 = R$ ثابت ریدبرگ است. توضیح مشاهدات ریدبرگ در زیر خواهد آمد.

۸ - فرضیه دوبروی و آزمایش داویسن - جرم

وقتی نوری با طول موج معین از یک سری روزنه‌های نزدیک بهم عبور کند، با خودش تداخل می‌کند و یک طرح پراش که، در روی پک پرده، به صورت تغییراتی درشت نوری قابل روئیت است، ایجاد می‌کند. این پدیده محدود به نور نیست و در تمام سیستمهایی که دارای خواص موجی هستند (مثلًا، صوت، امواج آب، و غیره) رخ می‌دهد. وقتی طول موج به سمت صفر میل می‌کند و یزگیهای موج مانندی (نور موجی) محو می‌شود و امواج مثل پرتوها رفتار می‌کنند

(نور هندسی) . وقتی $0 \rightarrow 2$ ، نور، به جای ایجاد طرحهای تداخلی، سایه‌هایی هندسی از روزنه‌ها ایجاد می‌کند. به بیان دیگر، در این حد هندسی نور به خط مستقیم حرکت می‌کند. لوبی دوبروی، در رساله دکترای خود (۱۹۲۴) پیشنهاد کرد که ماده نیز دارای ویژگیهای موج‌مانندی است. او حدس زد که بهر ذره آزاد می‌توان طول موج

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (43-1)$$

را نسبت داد که در آن p تکانه خطی ذره و λ ثابت پلانک است. چون λ فوق العاده کوچک است، " طول موج دوبروی" ذرات ماکروسکوپیکی ($1 \sim p = mv$) به قدری کوچک است که اثرات موجی آنها قابل تشخیص نیستند. برای ذرات میکروسکوپیکی طول موجها می‌توانند آنقدر بزرگ باشند که اثرات تداخلی قابل مشاهده شوند.

داویسن و جرم پیک باریکه الکترون هم انرژی را از یک بلور عبور دادند و آنها را روی یک فیلم عکاسی ظاهر کردند. آنها دریافتند که طرح شدت به طور شگفت‌آوری شبیه به طرحی است که در پراش نوری مشاهده شده است، و حدس زدند که باریکه الکترون به وسیله آرایش منظم اتمی شبکه بلوری پراشیده شده است. تجزیه و تحلیل‌های تجربی تایید کردند که فرضیه دوبروی (۴۳-۱) "واقعاً" درست است. در واقع، این رفتار موج‌مانندی الکترونها اساس کار میکروسکوپ الکترونی را تشکیل می‌دهد. وجود طول موجهای بین‌هایت کوچک سبب می‌شود که قدرت تفکیک این میکروسکوپها بزرگتر از قدرت تفکیک میکروسکوپهای نوری متداول باشد. کانونی کردن توسط میدانهای الکتریکی و مغناطیسی، به جای عدسی‌های معمولی، انجام می‌گیرد. طبیعت کوانتمی رابطه دوبروی از حضور ثابت پلانک آشکار است. اگر λ صفر می‌بود، خواص موج‌مانندی در ماده وجود نمی‌داشت. مسلماً می‌توان $0 \rightarrow \lambda$ را به عنوان "حد کلاسیکی" در نظر گرفت. جالب توجه است که نظریه کوانتمی، همان‌طور که به نور خواص ذره مانندی نسبت می‌دهد، به ماده نیز خواص موج‌مانندی نسبت می‌دهد. دوگانگی موج - ذره بخش عمدۀ نظریه کوانتمی تمام انواع انرژی، خواه مادی خواه تابشی، را تشکیل می‌دهد.

۹ - نظریه بوهر برای هیدرزن

خیلی پیش از فرضیه دوبروی، بوهر (۱۹۱۳) توصیفی از طبیعت کوانتمی هیدرزن ارائه داده بود. او اصل موضوع‌های زیر را در نظر گرفت:

- (۱) الکترونها روی مدارهای دایره‌ای حرکت می‌کنند.

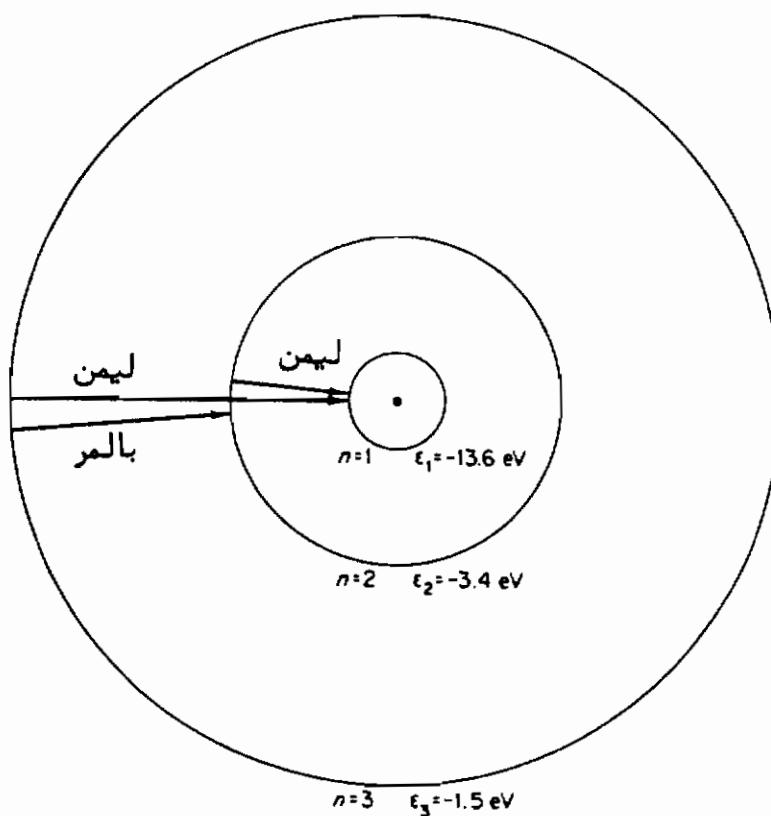
(۲) مدارهای مجاز آنهاستند که برای آنها تکانه زاویه‌ای طبق قاعده زیر کوانتیده باشد

$$L_n = m v_n r_n = n \hbar \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (43-1)$$

(۳) الکترون در روی هر کدام از این مدارها انرژی تابش نمی‌کند. بلکه، تابش فقط وقتی گسیل (یا جذب) می‌شود که الکترون از مدارهای با انرژی بالاتر (یا پائین‌تر) به مدارهای با انرژی پائین‌تر (یا بالاتر) "بپرد" (شکل ۱-۶). کوانتای انرژی گسیل شده برابر است با اتلاف انرژی مداری.

اصل موضوع دوم می‌تواند براساس فرضیه دوپروی فهمیده شود. اگر فرض کنیم که در هر مدار موج دوپروی وابسته به الکترون باید با خودش "هم‌فاز" باشد، باید بخواهیم که

$$2\pi r = n\lambda \quad \text{معنی،}$$



شکل (۱-۶). مدارهای کوانتیده در هیدروژن، طبق نظریه بوهر، چند گذار اول نشان داده شده‌اند.

اما چون $\lambda = h/p = h/mv$ داریم

$$mv r = n \hbar \quad (45-1)$$

که همان اصل موضوع بوهر است.
انرژیهای (جنبی به اضافه پتانسیل) مجاز

$$\varepsilon_n = \frac{1}{2} mv_n^2 - \frac{e^2}{r_n} \quad (46-1)$$

می‌توانند با استفاده از قانون نیوتن برای حرکت دورانی

$$F = ma, \quad \frac{e^2}{r_n^2} = m \frac{v_n^2}{r_n} \quad (47-1)$$

به دست آیند. با حل (47-1)، (46-1) و (45-1) برای r_n و ε_n خواهیم داشت

$$\varepsilon_n = \frac{\varepsilon_1}{n^2} \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (48-1\text{ الف})$$

$$r_n = an^2 \quad (48-1\text{ ب})$$

که در آن انرژی حالت پایه عبارت است از

$$\varepsilon_1 = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \approx -13.6 \text{ eV} \quad (49-1\text{ الف})$$

و اولین شعاع بوهر برابر است با

$$a = \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 0.53 \times 10^{-8} \text{ cm} \quad (49-1\text{ ب})$$

بالاخره، با استفاده از رابطه اینشتین برای فoton، $v = \epsilon / h$ ، نتیجه می‌گیریم که فرکانس‌های مشخصه طیف هیدرزن باید به صورت زیر باشند

$$hv_{mn} = \varepsilon_m - \varepsilon_n = |\varepsilon_1| \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad (n < m) \quad (50-1)$$

طول موجها عبارتنداز

$$\frac{1}{\lambda_{mn}} = \frac{v_{mn}}{c}$$

و در نتیجه

$$\frac{1}{\lambda_{mn}} = \frac{|\varepsilon_1|}{hc} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad (n < m) \quad (51-1)$$

این رابطه با فرمول ریدبرگ، که در آن ثابت ریدبرگ به مسیله $|\varepsilon_1|/hc = R$ داده شده است، مطابقت می‌کند. خطوط گسیلی هیدرژنی در جدول (۱-۱) طبقه‌بندی شده‌اند.

جدول ۱-۱ طبقه‌بندی خطوط گسیلی هیدرژنی

سری	گذار	گستره	فرکانس (چرخه‌برثانیه)
لیمن ^۹	$m > 1 \rightarrow n = 1$	فراپنفش	$\sim 3 \times 10^{15}$
بالمر ^{۱۰}	$m > 2 \rightarrow n = 2$	مرئی	$\sim 6 \times 10^{14}$
پاشن ^{۱۱}	$m > 3 \rightarrow n = 3$	مادون قرمز	$\sim 2 \times 10^{14}$
براکت ^{۱۲}	$m > 4 \rightarrow n = 4$	مادون قرمز	$\sim 7 \times 10^{13}$
فوند ^{۱۳}	$m > 5 \rightarrow n = 5$	مادون قرمز	$\sim 5 \times 10^{13}$

۱۰- اصل تناظر

اصول موضوع بوهر در مورد تابش حاصل از اتم هیدرژن، آشکارا با الکترودینامیک کلاسیکی ناسازگار بودند. با این حال قوانین کلاسیکی برای پدیده‌های الکترومغناطیسی ماقروسکوپیکی مناسب به نظر می‌رسیدند. بنابراین، باید فرض کنیم که حدی وجود دارد که در آن الکترودینامیک کواتنومی با الکترودینامیک کلاسیکی متناظر است.

برای اینکه بهینیم چگونه به‌این حد می‌رسیم توجه کنیم که ذره بارداری که دارای یک حرکت دورانی یکنواخت است باید، طبق الکترودینامیک کلاسیکی، تابشی با فرکانسی برابر با فرکانس دوران خود، یعنی،

$$v_{rot} = \frac{v}{2\pi r} = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{e^2}{mr^3} \right)^{1/2} \quad (52-1)$$

9- Lyman

10- Balmer

11- Paschen

12- Brackett

13- Pfund

یا، با استفاده از (۴۸-۱ ب) برای مدار n ام،

$$\nu_{rot,n} = \frac{1}{2\pi} \frac{me^4}{\hbar^3} \frac{1}{n^3} \quad (53-1)$$

گسیل بدارد، اما نظریه کوانتومی پیشگوئی می‌کند که فرکانس تابشی بین دو مدار مجاور n و $n+1$ عبارت است از

$$\nu_n = \frac{\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n}{2\pi\hbar} = \frac{|\varepsilon_1|}{2\pi\hbar} \left[\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2} \right]^2 \quad (54-1)$$

به طور واضح (۵۳-۱) و (۵۴-۱) باهم ناسازگارند. اما اگر (۵۴-۱) را در حد $\infty \rightarrow n$ مطالعه کنیم، خواهیم داشت

$$\left[\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2} \right] = \frac{2n+1}{n^2(n+1)^2} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \frac{2}{n^3}$$

بنابراین

$$\nu_n = \frac{|\varepsilon_1|}{2\pi\hbar} \frac{2}{n^3} = \frac{1}{2\pi} \frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{\hbar} \frac{2}{n^3} = \nu_{rot,n}$$

در حد $\infty \rightarrow n$ ، فرکانس‌های گسیلی پیشگوئی شده توسط قوانین کلاسیکی و کوانتومی مطابقت دارند، و می‌توانیم حد $\infty \rightarrow n$ را به عنوان حد کلاسیکی در نظر بگیریم. بنابراین از نظر کلاسیکی وقتی یک ذره باردار تابش گسیل می‌کند، "عملای" بین دو تراز کوانتومی مجاور با اعداد کوانتومی خیلی بزرگ‌گذارهایی انجام می‌دهد. اما در این نواحی فاصله نسبتی ترازهای انرژی، $\Delta E/E$ ، به قدری کوچک است که کوانتش غیرقابل توجه می‌شود.

۱۱ - خلاصه

مطالب بحث شده در بالا مبنای نظریه کوانتومی قدیمی را تشکیل می‌دادند. در حالی که این نظریه بعضی از مسائل وابسته به نظریه کلاسیکی ماده و تابش را حل می‌کرد، از سیاری جهات کمبود داشت. تعدادی از این نقاط عبارت بودند از:

- (۱) در شکل ارائه شده، فقط می‌توانست به تعداد محدودی از سیستمها اعمال شود.

- (۲) دلایلی که برای کوانتش ارائه می‌داد قانع کننده نبودند.
- (۳) طوری نبود که به عنوان تعمیم مکانیک کلاسیک در نظر گرفته شود و اصل تناظر همیشه روشن نبود.

نظریه قدیمی نیاز به این داشت که اصلاح شود، تعمیم داده شود، و مبنای نظری محکمی به وسیله "شروعینگر، هایزنبرگ، بورن، و دیراک (۱۹۲۵ – ۱۹۲۹)" برای آن طرح ریزی شود. در حالی که بعضی از نتایج نظریه‌های قدیم و جدید مطابقت می‌کردند، بسیاری از آنها مطابقت نمی‌کردند. به عنوان مثال، انرژیهای کوانتیده هیدرژن که به وسیله نظریه کوانتومی جدید پیشگوئی شده‌اند با نتایج بوهر (۱-۴۸ الف) مطابقت می‌کنند. اما مفهوم مدارهای "کاملاً" معین که در نظریه بوهر وجود داشت، به طور آشکاریکی از اصول موضوع بنیادی نظریه جدیدتر، اصل عدم قطعیت هایزنبرگ، را نقض می‌کرد.

در فصل بعد، خلاصه‌ای از مکانیک کلاسیک را ارائه می‌دهیم، و نشان خواهیم داد که چگونه می‌تواند در توسعه نظریه مکانیک کوانتومی مورد استفاده قرار گیرد.

مسائل

۱-۱ کدامیک از توابع زیر برای چگالی طیفی جسم سیاه با قانون وین سازگار است؟

- (a) $\rho(\omega, T) = A\omega^3 [\ln \omega - \ln T] / \sin^2 \frac{T}{\omega}$
- (b) $\rho(\omega, T) = \omega^3 T \cos \frac{\omega}{T}$
- (c) $\rho(\omega, T) = \omega^2 [\omega^{1/\omega} e^{1/T}]^\omega$
- (d) $\rho(\omega, T) = \frac{\omega^4}{T} + \omega^3$

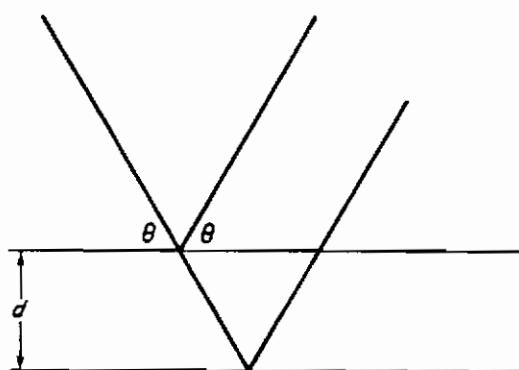
(x) را برای حالت‌های قابل قبول بیان کنید.

۱-۲ برای یک گاز فوتونی همسانگرد با چگالی انرژی E ، نشان دهید که انرژی عبور کرده از واحد سطح در واحد زمان، در هرجهت، با رابطه زیر داده می‌شود

$$\bar{J} = \frac{1}{4} c E$$

(راهنمایی: شار متوسط در امتداد z را با انتگرال‌گیری از $J = J \cos \theta$ روی یک نیمکره پیدا کنید. توجه کنید که در یک جهت مشخص فقط نصف چگالی انرژی جریان دارد)

- ۳- نشان دهید که چگالی طیفی رالی- جینز هم قانون استفان را نقض می کند و هم قانون جایه جایی را ، توضیح دهید که چرا چگالی طیفی پلانک از " فاجعه فرابنفش " جلوگیری می کند .
- ۴- در معادله (۲۲-۱) انتگرالها را محاسبه کنید و در نتیجه نشان دهید که $kT = \epsilon$.
- ۵- با استفاده از چگالی طیفی پلانک انتگرالی برای ثابت استفان - بولتزمن پیدا کنید .
- ۶- فرمول کامپتون ، معادله (۳۹-۱) ، را آن طور که دریخش ع پیشنهاد شده است، اثبات کنید .
- ۷- طول موج دوبروی وابسته به الکترون در حالت پایه هیدرزن را پیدا کنید . آنرا با طول موج دوبروی زمین در حرکت مداری آن به دور خورشید مقایسه کنید .
- ۸- (الف) طول موج دوبروی یک نوترون حرارتی (دردمای معمولی) را ، با فرض $kT \approx \epsilon$ تعیین کنید .
 (ب) فرض کنید که یک باریکه نوترون حرارتی روی یک مجموعه از سطوح اتمی در یک شبکه بلوری بتاپد . بر طبق نظریه برآگ^{۱۴} ، تقویت بازتابی وقتی اتفاق می افتد که داشته باشیم $2ds \sin \theta = n\lambda$ که در آن d فاصله بین سطوح ، θ زاویه بین باریکه نوترون و سطوح ، n یک عدد صحیح معرف مرتبه بازتاب ، و λ طول موج باریکه فرودی است . در مرتبه اول ، $n = 1$ ، بازتاب مشاهده شده در $\theta = 30^\circ$ رخ می دهد . فاصله بین سطوح اتمی را پیدا کنید .



شکل (۲-۱)

- ۹- تحقیق کنید که سریهای لیمن و بالمر به ترتیب در قسمتهای فرا بنفش و مرئی طیف الکترو مغناطیسی قرار دارند .

- ۱۰-۱ طبق اصل تناظر، وقتی یک نوسانگر کلاسیکی باردار نوری با فرکانسی برابر با فرکانس طبیعی خود، « گسیل می‌دارد، علاوه‌بر چه کاری می‌کند؟
- ۱۱-۱ مقادیر نظری و تجربی ثابت ریدبرگ را باهم مقایسه کنید.
- ۱۲-۱ با استفاده از معادله (۱-۱) زمانی را که طول می‌کشد تا الکترون هیدرزن، طبق نظریه کلاسیکی، از اولین شاعع بوهر بر روی پروتون سقوط کند، تعیین کنید.

مراجع پیشنهادی

- Born, M., "Atomic Physics." Hafner, New York, 1957.
- Eisberg, R. M., "Fundamentals of Modern Physics." Wiley, New York, 1961.
- McGerverey, J. D., "Introduction to Modern Physics." Academic Press, New York, 1971.
- Richtmyer, F. K., Kennard, E. H., and Lauritsen. T., "Introduction to Modern Physics." McGraw-Hill, New York, 1955.

۲

مکانیک کلاسیکی

موضوع مکانیک کوانتومی می‌تواند به طرق مختلفی گسترش داده شود . یک روش ، که از نظر تاریخی مهم است ، براساس فرضیه دوبروی مبنی بر دو گانگی موجی - ذره‌ای ماده بنا شده است . در این روش یک معادله موج برای امواج دوبروی شبیه به معادله امواج الکترو-مغناطیسی به دست می‌آید . با به کار بردن تشابهات فیزیکی ، ویژگیهای یک ذره می‌توانند به خواص موجی آن مرتبط شوند ؛ لذا پراش ، تداخل و اثرات تشديیدی جزء اصلی مکانیک کوانتومی ماده را تشکیل می‌دهند . ارتباط بین مکانیک کلاسیکی و مکانیک کوانتومی در این طریقه فوراً آشکار نمی‌شود .

یک روش دیگر ، به نظریه کوانتومی به عنوان تعمیم مستقیم دینامیک کلاسیکی نگاه می‌کند ، و دو گانگی موجی - ذره‌ای را پیامد طبیعی این نظریه می‌داند . امتیازات این روش در این است که تطابق با نظریه کلاسیکی را برقرار می‌کند و اجازه می‌دهد هم میدانها و هم ذرات با روش واحدی توصیف شوند . اما ، ارتباط بین نظریه‌های کوانتومی و کلاسیکی نباید در دینامیک نیوتونی ، بلکه باید در فرمولبندی هامیلتونی مکانیک کلاسیکی جستجو شود . صورت‌بندی مکانیک کلاسیکی ، یعنی ، عبور از دینامیک نیوتونی به دینامیک لاگرانژی و بالاخره به دینامیک هامیلتونی ، در ذیل مورد بحث قرار می‌گیرد .

۱ - شکل نیوتونی مکانیک (غیرنسبیتی)

در این مرحله به توصیف دینامیک یک ذره نقطه‌ای تحت تأثیر نیروهای خارجی

می پردازیم . ذره غیرنسبیتی فرض شده است ، یعنی ، سرعت آن خیلی کوچکتر از سرعت نور است . همچنانی فرض شده است که نیروی خالص وارد به ذره غیر چرخشی است $(\nabla \times F = 0)$ و در نتیجه ، مشتق از یک تابع انرژی پتانسیل (V) است*

$$F = -\nabla V \quad (1-2)$$

نیروهای وابسته به سرعت ، مثل نیروهای وارد به ذرات باردار در میدانهای مغناطیسی ، بهزودی مورد بحث قرارخواهد گرفت . اصطکاک ، که غیر چرخشی نیست ، در پدیده های میکروسکوپیکی وارد نمی شود و از بحث فعلی ما حذف خواهد شد .

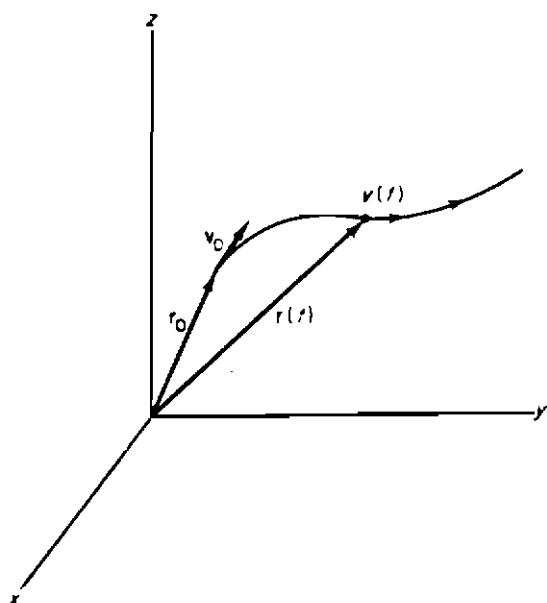
موضوع مکانیک نظری عبارت است از توصیف حرکت عمومی ذره وقتی که :

(۱) مکان و سرعت اولیه معلوم هستند ،

(۲) نیروی کل وارد به ذره ، $F(r, t)$ ، مشخص باشد .

جواب از نظر ریاضی در بردار مکانی (r) که در تمام لحظات ذره را در طول مسیرش جایگزین می کند نهفته است (شکل ۲-۱) . سرعت و شتاب لحظه ای ذره می توانند با مشتق گیری به دست آیند ،

$$v(t) = \frac{dr}{dt} \quad , \quad a(t) = \frac{dv}{dt} = \frac{d^2r}{dt^2} \quad (2-2)$$



شکل ۲-۱ . مسیر و بردارهای مکان و سرعت یک ذره

* از نمادگذاری $(r, t) = V(x, y, z, t) = V(r, t)$ استفاده خواهیم کرد .

نیروی کل وارد به ذره به وسیله قانون دوم نیوتون،

$$-\nabla V = \mathbf{F} = m\mathbf{a} = m \frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} \quad (3-2)$$

یا به طور عمومی تر به وسیله

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} \quad (4-2)$$

که در آن $m = p/t$ تکانه خطی ذره است، بهشتاب آن مربوط می‌شود. معادله (3-2) یک معادله دیفرانسیل هرداری است و می‌تواند، وقتی شرایط اولیه

$$\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}(0) \quad , \quad \mathbf{v}_0 = \mathbf{v}(0)$$

معلوم باشند، حل شود و

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(t) \quad (5-2)$$

را به دست دهد.

در مختصات دکارتی، از مولفه‌های (3-2) خواهیم داشت

$$\begin{aligned} m \frac{d^2x}{dt^2} &= F_x = -\frac{\partial V}{\partial x}(\mathbf{r}, t) \\ m \frac{d^2y}{dt^2} &= F_y = -\frac{\partial V}{\partial y}(\mathbf{r}, t) \\ m \frac{d^2z}{dt^2} &= F_z = -\frac{\partial V}{\partial z}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (6-2)$$

با حل این دستگاه معادلات دیفرانسیل جواب سینماتیکی زیر را به دست خواهیم آورد

$$\mathbf{r}(t) = x(t)\mathbf{i} + y(t)\mathbf{j} + z(t)\mathbf{k} \quad (7-2)$$

که در آن \mathbf{i} ، \mathbf{j} ، \mathbf{k} هردارهای پکای هستند که به ترتیب در امتداد x ، y و z قرار دارند. اگر جواب سینماتیکی معلوم باشد، می‌توان زمان t را بین $x(t)$ ، $y(t)$ و $z(t)$ حذف کرد و مسیر

$$y = y(x) \quad \text{و} \quad z = z(x) \quad (8-2)$$

را که ذره در طول آن حرکت می‌کند به دست آورد.

ساختن چند تابع دینامیکی از متغیرهای v و r در طول حرکت ذره و مطالعه آنها آموزنده خواهد بود. به عنوان مثال، مولفه‌های تکانهٔ زاویه‌ای

$$L = mr \times v \quad (9-2)$$

توابعی هستند که در مسائل مربوط به حرکت سیاره‌ای مفیداند. انرژی کل

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + V(r, t) \quad (10-2)$$

نیز در بسیاری از مسائل اهمیت زیادی دارد. هر تابع دینامیکی که با گذشت زمان، وقتی ذره در امتداد مسیرش به پیش می‌رود، تغییر نکند ثابت حرکت نامیده می‌شود. هم‌چنین می‌توان گفت که تابع پایسته است.

وقتی یک ذره تحت اثر نیروهای پایستار (غیر چرخشی و مستقل از زمان) قرارداده انرژی آن همیشه یک ثابت حرکت است، یعنی، انرژی پایسته است. از (10-2)، با استفاده از قاعده زنجیری برای مشتق‌گیری، خواهیم داشت

$$\frac{dE}{dt} = mv \cdot \frac{dv}{dt} + v \cdot \nabla V = v \cdot (ma + \nabla V)$$

با توجه به قانون نیوتون، جملهٔ داخل پرانتز صفر است و E یک ثابت حرکت است. برای روشن کردن نظریهٔ بالا، قوانین نیوتون را بهمک نوسانگر همسانگرد، یعنی، به ذره‌ای که به وسیله یک نیروی بازگرداننده خطی

$$F = -kr \quad (11-2)$$

به طرف مبدأ کشیده می‌شود، اعمال خواهیم کرد (k ضریب کشسانی است). انرژی پتانسیل وابسته به این نیرو عبارت است از

$$V = \frac{1}{2}kr^2 \quad (12-2)$$

معادلات حرکت به صورت زیر در می‌آیند

$$m\ddot{x} = - \frac{\partial V}{\partial x} = -kx$$

$$m\ddot{y} = - \frac{\partial V}{\partial y} = -ky$$

(۱۳-۲)

۶

$$m\ddot{z} = - \frac{\partial V}{\partial z} = -kz$$

فرض کنیم شرایط اولیه عبارت باشند از

$$\begin{aligned} x(0) &= x_0, & y(0) &= y_0, & z(0) &= 0, \\ v_x(0) &= v_{x_0}, & v_y(0) &= v_{y_0}, & v_z(0) &= 0 \end{aligned}$$

جواب برای مختصه z عبارت است از

$$v_z \equiv z \equiv 0$$

(۱۴-۲)

در نتیجه، حرکت در صفحه (x, y) باقی می‌ماند. جوابهای مربوط به x و y عبارتند از

$$x = A_x \cos(\omega t + \phi_x), \quad y = A_y \cos(\omega t + \phi_y) \quad (15-2)$$

که در آن

$$A_x = \left(x_0^2 + \frac{v_{x_0}^2}{\omega^2} \right)^{1/2}, \quad A_y = \left(y_0^2 + \frac{v_{y_0}^2}{\omega^2} \right)^{1/2}$$

$$\phi_x = \tan^{-1} \frac{v_{x_0}}{\omega x_0}, \quad \phi_y = \tan^{-1} \frac{v_{y_0}}{\omega y_0}$$

سرعت با مشتقگیری از (۱۵-۲) به دست می‌آید.
همان طور که قبل "ددیم، انرژی

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kr^2 = \frac{1}{2}m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) + \frac{1}{2}k(x^2 + y^2 + z^2) \quad (16-2)$$

یک ثابت حرکت است زیرا نوسانگر یک سیستم پایستار است. می‌توان ثابت کرد که مولفه غیر صفر تکانه زاویه‌ای،

$$L = L_z = m(xy - yx) \quad (17-2)$$

نیز یک ثابت حرکت است. هردو ثابت حرکت می‌توانند تحت شرایط اولیه محاسبه شده و بر حسب v_0 و ω_0 بیان شوند.

با فرض اینکه $v_{x_0} = 0$ و $\omega_{x_0} = 0$ است، مسئله را قدری ساده می‌کنیم. جوابهای (۱۵-۲) خواهند شد

$$x = x_0 \cos \omega t, \quad y = \frac{v_{y_0}}{\omega} \sin \omega t \quad (18-2)$$

و ثابت‌های حرکت می‌توانند به صورت زیر نوشته شوند

$$E = \frac{1}{2}mv_{y_0}^2 + \frac{1}{2}kx_0^2 \quad (19-2\text{ الف})$$

$$L = mx_0 v_{y_0} \quad (19-2\text{ ب})$$

معادله مسیر با حذف متغیر زمانی از معادلات (۱۸-۲) به صورت زیر بدست می‌آید

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1 \quad (20-2)$$

که در آن $x_0 = a$ و $v_{y_0} = b$. این مداریک بیضی، با شکل معمولی، است که قطرهای اطول و اقصر آن به وسیله شرایط اولیه تعیین می‌شوند. این شرایط می‌توانند، با استفاده از (۱۹-۲) الف) و (۱۹-۲ ب)، بر حسب E و L بیان شوند.

۲- معادلات لاغرانژ

دلیلی وجود ندارد که قوانین نیوتون را به مختصات دکارتی محدود کنیم. در واقع، خیلی از مسائل که در مختصات دکارتی غیرقابل حل هستند با به کار بردن دستگاههای مختصات دیگر حل شوند. به عنوان مثال، مسئله کپلر^۱ که به ذراتی که توسط نیروی

$$\mathbf{F} = -\frac{k\mathbf{r}}{r^3} \quad (k = GMm, \text{ گرانشی}) \quad (21-2)$$

$$(k = qq', \text{ الکتروستاتیکی})$$

به طرف مرکز نیرو کشیده می‌شوند می‌پردازد، شامل معادلاتی به شکل زیر است

$$\begin{aligned} m\ddot{x} &= -\frac{kx}{(x^2 + y^2 + z^2)^{3/2}} = F_x \\ m\ddot{y} &= -\frac{ky}{(x^2 + y^2 + z^2)^{3/2}} = F_y \\ m\ddot{z} &= -\frac{kz}{(x^2 + y^2 + z^2)^{3/2}} = F_z \end{aligned} \quad (22-2)$$

برخلاف معادلات حرکت یک نوسانگر، این معادلات جفت شده هستند، یعنی، معادله x شامل دو متغیر دیگر y و z نیز می‌باشد، و غیره... فرایند تفکیک "عمولاً" کار ساده‌ای نیست. اما، اگر مسئله در مختصات قطبی کروی، با به کار بردن متغیرهای r ، θ و ϕ ، بیان شده بود، معادلات حرکت، همان‌طور که در زیر به طور اختصار خواهیم دید، به آسانی تفکیک می‌شدند. می‌توان راحتی یک صورت‌بندی هم ارز با قوانین نیوتون را که مستقل از دستگاه مختصات بخصوصی باشد، حدس زد. این تعمیم، که به معادلات لاگرانژ موسوم است، می‌تواند بر حسب مجموعه‌ای از مختصات تعمیم یافته بیان شود؛ این مختصات جدید نیازی ندارند که ارتباط هندسی ساده‌ای با مختصات دکارتی داشته باشند. تنها محدودیت آنها این است که از یک دیگر مستقل باشند و مکان ذره را به طور یکتا تعیین کنند.

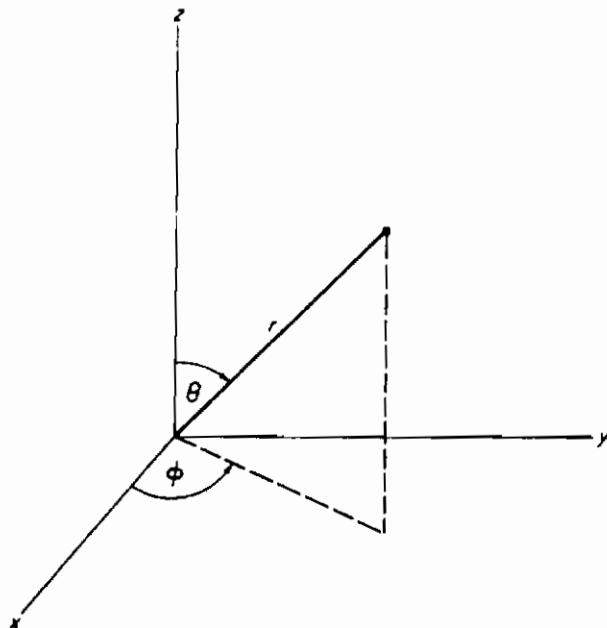
یک مجموعه مختصات تعمیم یافته می‌تواند با تبدیلی به شکل

$$q_j = q_j(r) \quad (j = 1, 2, 3), \quad (23-2)$$

بر حسب متغیرهای دکارتی تعریف شود. تعداد مختصات مستقل (در این حالت ۳) لازم برای جایگزینی کردن ذره، اصطلاحاً، "تعداد درجات آزادی نامیده می‌شود". بعنوان مثال، تبدیل به مختصات قطبی عبارت است از (شکل ۲-۲)

$$\begin{aligned} r &= (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2} \\ \theta &= \tan^{-1} \frac{(x^2 + y^2)^{1/2}}{z} \\ \phi &= \tan^{-1} \frac{y}{x} \end{aligned} \quad (24-2)$$

بنابراین $r = q_3 = \phi$ ، $q_2 = \theta$ ، $q_1 = r$ یک مجموعه بخصوصی از مختصات تعمیم یافته است.



شکل ۲-۲. مختصات قطبی کروی

در حالی که قوانین نیوتون مستقیماً با نیروها سروکار دارند، معادلات لاگرانژ کمیتی به نام لاگرانژی که به صورت

$$\mathcal{L} = T - V \quad (25-2)$$

تعریف می‌شود وارد می‌کنند که در آن (r, \dot{q}_j, q_j) انرژی جنبشی بر حسب مختصات و سرعت‌های تعیین یافته، و (q_j) انرژی پتانسیل است.

بر حسب لاگرانژی، معادلات لاگرانژ حرکت برای مختصات تعیین یافته به صورت

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_j} = 0 \quad (j = 1, 2, 3, \dots) \quad (26-2)$$

در می‌آیند. نحوه بدست آوردن (26-2) در کتابهای متعارف مکانیک کلاسیکی یافت می‌شود*. وقتی (26-2) حل شد و (q_j) ها بدست آمدند، بستگی زمانی متغیرهای دکارتی می‌توانند

* به عنوان مثال کتاب

K.R. Symon, "Mechanics" 3rd ed. Chapter 9. Addison-wesley, Reading, Massachusetts, 1971.

را بخوبی بینید.

با استفاده از تبدیل وارون تبدیل (۲-۲) به دست آید .
در مختصات دکارتی، لاگرانژی عبارت است از

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - V(x, y, z, t) \quad (22-2)$$

با اعمال معادلات لاگرانژ به متغیر x خواهیم داشت

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}}\right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} = 0 \quad \text{یا} \quad m\ddot{x} = -\frac{\partial V}{\partial x} = F_x \quad (28-2)$$

با اعمال به سایر متغیرهای دکارتی، قانون دوم نیوتون را به طور کامل به دست خواهیم آورد .
تناظر بین معادلات لاگرانژ و قانون نیوتون وقتی روشن تر می شود که تکانه تعمیم یافته
وابسته به q را به صورت

$$p_j = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j} \quad (29-2)$$

و نیروی تعمیم یافته را به صورت

$$F_j = -\frac{\partial V}{\partial q_j} \quad (30-2)$$

تعريف کنیم . بعلاوه

$$“F_j” = \frac{\partial T}{\partial q_j} \quad (31-2)$$

را به عنوان نیروی جنبشی یا نیروی لختی در نظر می گیریم . در این صورت ، معادلات لاگرانژ
به شکل

$$\dot{p}_j = F_j + “F_j” \quad (32-2)$$

در می آید که می تواند با (۴-۲) مقایسه شود .
لاگرانژی در مختصات قطبی صفحه ای عبارت است از

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2) - V(r, \phi, t) \quad (33-2)$$

با استفاده از معادلات لاگرانژ خواهیم داشت

$$\frac{d}{dt} p_r = \frac{d}{dt} (mr) = -\frac{\partial V}{\partial r} + mr\dot{\phi}^2 \quad (34-2)$$

و

$$\frac{d}{dt} p_\phi = \frac{d}{dt} (mr^2\dot{\phi}) = -\frac{\partial V}{\partial \phi} \quad (35-2)$$

معادله اول تغییرات تکانه شعاعی را با مولفه نیرو در امتداد شعاع به اضافه نیروی (گریز از مرکز) لختی برابر می‌داند. معادله دوم تغییرات تکانه زاویه‌ای را به نیروی تعیین یافته وابسته به متغیر زاویه‌ای، یعنی، کشتاور نیرو، ارتباط می‌دهد.

معادلات لاگرانژ عموماً "بهیک دستگاه معادلات دیفرانسیل مرتبه دوم جفت شده برای (r, ϕ) ها منجر می‌شوند. مسئله کلاسیکی وقتی حل شده است که جوابهای این معادلات با توجه به شرایط اولیه مشخص به دست آمده باشند.

یک مثال مهم که مختصات قطبی را به کار می‌برد مسئله کهpler است که در ارتباط با پژوهش مکانیک نیوتونی ارائه کردیم. پتانسیل وابسته به این مسئله عبارت است از

$$V = -\frac{k}{r} \quad (36-2)$$

می‌توان بدون حل کامل مسئله ثابت کرد که، مثل حالت نوسانگر همسانگرد، در اینجا نیز حرکت صفحه‌ای است. با فرض اینکه حرکت در صفحه xy انجام می‌گیرد، لاگرانژی در مختصات قطبی خواهد شد

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m(r^2\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2) + \frac{k}{r} \quad (37-2)$$

و از معادلات لاگرانژ نتیجه خواهد شد

$$m\ddot{r} - mr\dot{\phi}^2 = -\frac{k}{r^2} \quad (38-2)$$

و

$$\dot{p}_\phi = \frac{d}{dt} (mr^2\dot{\phi}) = 0 \quad \text{یا} \quad p_\phi = mr^2\dot{\phi} = L = \text{const} \quad (39-2)$$

چون ϕ در لاگرانژی ظاهر نمی‌شود، تکانه تعیین یافته متناظر با آن یک ثابت حرکت است. مختصاتی که در لاگرانژی ظاهر نمی‌شوند چرخه‌ای یا قابل اغماض نامیده می‌شوند. توجه کنیم که چگونه معادلات حرکت فوراً "از لاگرانژی به دست می‌آیند، در صورتی که در مکانیک کنیوتنی نخست باید تمام نیروها پیدا شوند و غالباً" پس از آن تجزیه شوند. اما، وقتی معادلات دیفرانسیل حرکت پیدا شند، چگونگی به دست آمدن آنها در حل آنها تاثیر ناچیزی خواهد داشت.

برای مسئله کپلر، هم انرژی

$$E = \frac{1}{2} m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2) - \frac{k}{r} \quad (40-2)$$

و هم تکانه زاویه‌ای

$$L = mr^2\dot{\phi} \quad (41-2)$$

ثبت حرکت‌اند. با استفاده از معادله (41-2) می‌توان $L/mr^2 = \dot{\phi}$ را در (40-2) قرار داد و آنرا برای \dot{r} حل کرد، که نتیجه خواهد شد

$$\dot{r} = \frac{dr}{dt} = \left[\frac{2}{m} \left(E + \frac{k}{r} - \frac{L^2}{2mr^2} \right) \right]^{1/2}$$

یا

$$t = \int_0^t dt = \int_{r_0}^r \frac{dr}{\left[\frac{2}{m} \left(E + \frac{k}{r} - \frac{L^2}{2mr^2} \right) \right]^{1/2}} = I(r) \quad (42-2)$$

با این‌گه انتگرال فوق، همان‌طور که نشان می‌دهد، انتگرال ساده‌ای نیست، می‌تواند به شکل آشنازی تبدیل شده و محاسبه شود، یا می‌تواند به روش عددی محاسبه گردد. در هر حالت (42-2) می‌تواند وارونه شود و نتیجه دهد

$$r = r(t) \quad (43-2)$$

بالاخره، می‌توان (41-2) را انتگرال‌گیری کرد و نتیجه گرفت

$$\phi(t) = L \int_0^t \frac{dt}{mr^2(t)} + \phi_0 \quad (44-2)$$

وقتی (t) شناخته شده باشد می‌توان این انتگرال را محاسبه کرد . در حالی که معکن نیست بتوان (t) و (ϕ) را به سادگی به دست آورد ، می‌توان به طور غیر مستقیم متغیر زمانی را حذف کرد و مسیر

$$r = r(\phi) \quad (45-2)$$

را تعیین کرد . نتیجه کاملاً "شناخته شده است و عبارت است از

$$r = \frac{a(1 - \varepsilon^2)}{1 + \varepsilon \cos(\phi - \phi_0)} \quad (46-2)$$

که در آن ثابت‌های هندسی به وسیله

$$\varepsilon = \left(1 + \frac{2EL^2}{mk^2}\right)^{1/2} \quad (\text{خروج از مرکز}) \quad (47-2)$$

و

$$a = -\frac{k}{2E} \quad (48-2)$$

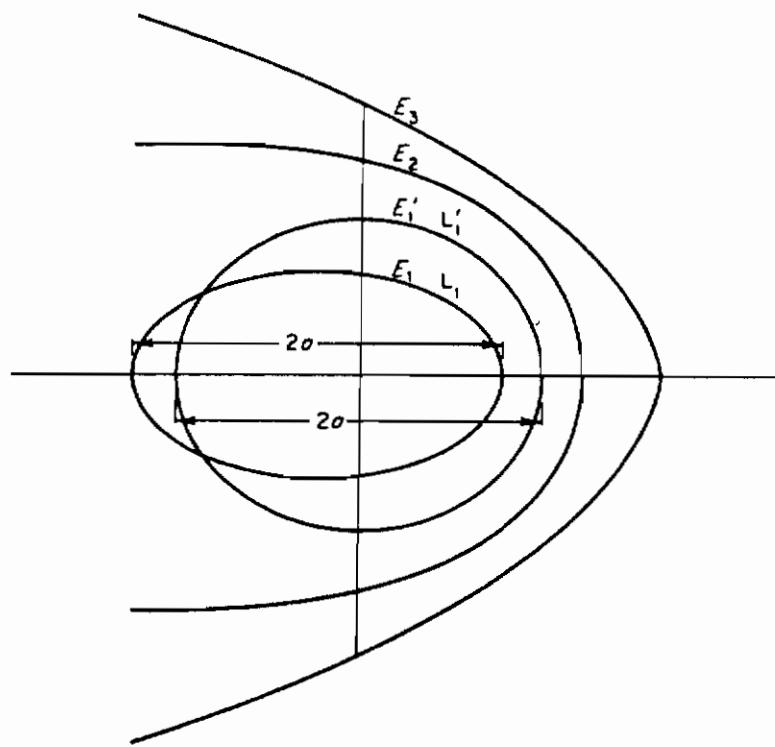
تعیین می‌شوند . مسیر یا مدار یک مقطع مخروطی است که مرکز نیرو در پکی از کانون‌های آن است . مخصوصاً " ، اگر $\varepsilon < 0$ ($E < 0$) باشد یک بیضی ، اگر $\varepsilon = 1$ ($E = 0$) باشد یک سهمی و اگر $1 > \varepsilon > 0$ ($E > 0$) باشد یک هذلولی خواهد بود . درحالتنی که مسیر بیضی است ، a نصف قطر ا طول می‌باشد و تابع E است ولی تابع L نیست . برای یک مقدار معین انرژی بیضی‌های زیادی وجود دارند ، که قطر ا طول تمام آنها پکی است . خروج از مرکزهای آنها ، بسته به تکانه زاویه‌ای L ذره ، متفاوت‌اند . وجود مدارهای متفاوت برای یک انرژی معین در مکانیک کوانتومی نیز رخ می‌دهد که در آنجا به تبیه‌گنی تعبیر می‌شود (شکل ۲-۲) .

ممکن است پتانسیلهای واپسیه به سرعت ، مثل

$$U(q_j, \dot{q}_j, t) \quad (49-2)$$

در فرمولبندی لاگرانژی وارد شوند . برای وارد کردن این پتانسیلهای نیروهای تعییم یافته باید به صورت زیر مشتق از آنها باشد

$$F_j = \frac{d}{dt} \frac{\partial U}{\partial \dot{q}_j} - \frac{\partial U}{\partial q_j} \quad (50-2)$$



شکل ۲-۲. مدارهای مربوط به پتانسیل، برای انرژیهای مختلف. توجه کنیم که دو مدار بسته طوری انتخاب شده‌اند که انرژیهای آنها برابر باشند.

در واقع، همان‌طور که در زیر نشان خواهیم داد، در مورد نیروهای الکترومغناطیسی که بهذرات باردار وارد می‌شوند این چنین است، ما صرفاً "نیاز داریم که ∇ را همانند ∇ در لاگرانژی مورد استفاده قرار دهیم، یعنی، قرار دهیم $U - T = \mathcal{L}$ ، و اقدام به بهدست آوردن معادلات لاگرانژ کنیم.

در مورد نیروهای الکتروستاتیکی و مغناطیسی، می‌خواهیم که نیروی وارد بهذره به صورت

$$\mathbf{F} = q\mathbf{E} + \frac{q\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{B} \quad (\text{نیروی لورنتس}) \quad (51-2)$$

باشد. با وارد کردن پتانسیلهای برداری و نرده‌ای \mathbf{A} و Φ ، به طوری که داشته باشیم

$$\mathbf{E} = -\nabla\Phi \quad \text{و} \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (52-2)$$

می‌توان یک تابع پتانسیل وابسته به سرعت به صورت

$$U = q\Phi(\mathbf{r}) - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{v} \quad (53-2)$$

ساخت*. با کاربرد (۵۳-۲) در مورد (۵۰-۲)، برای مولفه x خواهیم داشت

$$F_x = -\frac{d}{dt} \frac{q}{c} A_x - q \frac{\partial \Phi}{\partial x} + \frac{q}{c} \frac{\partial}{\partial x} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) \quad (54-2)$$

چون آنگ تغییرات A_x ، از دید ذره، عبارت است از

$$\frac{d}{dt} A_x = \frac{\partial A_x}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial A_x}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial A_x}{\partial z} \frac{dz}{dt} = \frac{\partial A_x}{\partial x} v_x + \frac{\partial A_x}{\partial y} v_y + \frac{\partial A_x}{\partial z} v_z$$

خواهد شد (۵۴-۲)

$$F_x = -\frac{q}{c} \left[\frac{\partial A_x}{\partial x} v_x + \frac{\partial A_x}{\partial y} v_y + \frac{\partial A_x}{\partial z} v_z \right] - q \frac{\partial \Phi}{\partial x} + \frac{q}{c} \frac{\partial}{\partial x} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) \quad (55-2)$$

این درست مولفه x نیروی

$$\mathbf{F} = -\frac{q}{c} \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{A} - q \nabla \Phi + \frac{q}{c} \nabla (\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) \quad (56-2)$$

است. اگر \mathbf{v} مستقل از \mathbf{r} باشد، می‌توان از اتحاد

$$\nabla(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) = \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{A} + \mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{A}) \quad (57-2)$$

استفاده کرد، و بالاخره (۵۶-۲) خواهد شد

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= q(-\nabla \Phi) + \frac{q}{c} \mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{A}) \\ &= q\mathbf{E} + \frac{q}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \end{aligned}$$

که همان نتیجه موردنظر است. بنابراین، لاگرانژی الکترومغناطیسی عبارت است از

$$\mathcal{L} = T - U = \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 + \frac{q}{c} \mathbf{A} \cdot \mathbf{v} - q\Phi \quad (58-2)$$

* این نتیجه برای میدانهای ثابع زمان نیز معتبر است.

۳- معادلات هامیلتون

صورت‌بندی لاگرانژی که در بخش قبل مورد بحث قرار گرفت برای بسط موضوع مکانیک کوانتومی نامناسب است. همان‌طور که در فصل ۳ خواهیم دید، مکانیک کوانتومی طلب می‌کند که مختصات تعمیم یافته نقشی برابر با تکانه‌های مزدوج بندادی متراقب‌شان بازی کنند. صورت‌بندی کلاسیکی مطلوب باید به‌طور صریح معادلات حرکتی را ارائه دهد که نسبت به q و p متقارن باشند. معادلات لاگرانژ (و قانون نیوتون) مختصات را متفاوت از تکانه‌های آنها تلقی می‌کنند، از این نظر که فقط مشتقات زمانی تکانه‌ها در (۳۲-۲) ظاهر می‌شوند. صورت‌بندی هامیلتونی، که قرار است در اینجا مورد بحث قرار گیرد، تقارن مورد نظرمان بین q و p را فراهم می‌کند.

با استفاده از تبدیل

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^3 p_i \dot{q}_i - \mathcal{L} \quad (59-2)$$

که در آن

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} = p_i(q_1, \dots, \dot{q}_1, \dots) \quad (60-2)$$

تابعی از لاگرانژی می‌سازیم. معادله (۵۹-۲) مثالی از تبدیل لوزاندر آست، که در این حالت تابعی موسوم به هامیلتونی ایجاد می‌کند به‌طوری که متغیرهای طبیعی آن به جای q و p که متغیرهای لاگرانژی هستند، عبارت‌دار q و p . ساختن هامیلتونی به‌کمک (۶۰-۲) که \dot{q} را بر حسب مختصات و تکانه‌هایی که در طرف راست (۵۹-۲) ظاهر می‌شوند بیان می‌کند انجام می‌گیرد. هامیلتونی همیشه بر حسب q و p بیان می‌شود.

می‌توان نشان داد که برای بیشتر سیستم‌هایی که پتانسیل آنها مستقل از سرعت است، هامیلتونی همان انرژی کل سیستم است که بر حسب مختصات و تکانه‌ها بیان شده باشد. برای چنین سیستم‌هایی می‌توان نوشت

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(r, t) = T(p_i, q_i) + V(q_i, t) \quad (61-2)$$

که در آن T انرژی جنبشی سیستم است. هامیلتونی یک ذره در حضور نیروهای الکترو-مغناطیسی را می‌توان، با انجام یک تبدیل لوزاندر روی (۵۸-۲) به صورت زیر به دست آورد

$$\mathcal{H} = \frac{(\mathbf{p} - q\mathbf{A}/c)^2}{2m} + q\Phi \quad (62-2)$$

با استفاده از معادلات لاگرانژ، می‌توان نشان داد که معادلات حرکت از هامیلتونی، با به کار بردن

$$\dot{p}_j = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_j}, \quad \dot{q}_j = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_j}, \quad \frac{d\mathcal{H}}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} \quad (63-2)$$

به دست می‌آیند. معادلات (۶۳-۲) به نام معادلات حرکت بندادی هامیلتون نامیده می‌شوند. این معادلات نسبت به q_j و p_j متقارن‌اند* و کامل‌اً هم ارز معادلات لاگرانژ (۲۶-۲) هستند. از (۶۳-۲) نتیجه می‌شود که اگر \mathcal{H} یا \mathcal{L} صریحاً به زمان وابسته نباشد، هامیلتونی (و در اغلب موارد انرژی) یک ثابت حرکت است**.

علی‌رغم سه معادله دیفرانسیل مرتبه دوم لاگرانژ، معادلات هامیلتون (۶۳-۲) منجر به شش معادله دیفرانسیل مرتبه اول جفت شده می‌شوند. معادلات اخیر باید برای (i) p_i و (i) q_i حل شوند. برای تفکیک این معادلات، می‌توان تبدیلاتی در نظر گرفت که مختصات و تکانه‌های جدیدی به صورت

$$p'_j = p_j'(p_1, \dots, q_1, \dots), \quad q'_j = q_j'(p_1, \dots, q_1, \dots) \quad (63-1)$$

و هامیلتونی جدیدی به صورت

$$\mathcal{H}'(p'_i, q'_i) = \mathcal{H}(p_i, q_i) \quad (65-2)$$

وارد کند. معادلات (۶۴-۲) "لزوماً" تبدیلات مختصات ساده‌ای‌که p_i و q_i را مخلوط می‌کنند نیستند؛ بلکه محدود به تبدیلاتی هستیم که برای آنها معادلات دیفرانسیل حرکت حاصل از

* بجز یک علامت منفی، تقارن کامل است.

** فرض خواهیم کرد. $\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = \frac{d\mathcal{H}}{dt} = 0$ مگر اینکه خلاف آن ذکر شود.

$$\dot{p}'_j = -\frac{\partial \mathcal{H}'}{\partial q'_j} \quad , \quad \dot{q}'_j = \frac{\partial \mathcal{H}'}{\partial p'_j} \quad (66-2)$$

با معادلات دیفرانسیل حرکت (۶۳-۲) معادل باشند. چنین تبدیلاتی تبدیلات بندادی نامیده می‌شوند، زیرا شکل معادلات هامیلتون را محفوظ نگاه می‌دارند. یک تغییر مختصات ساده (تبدیل نقطه‌ای) همیشه بندادی است.

در بعضی موارد می‌توان یک تبدیل بندادی پیدا کرد که به طور بسیار ساده معادلات هامیلتونی را از یکدیگر تفکیک نماید. به عنوان مثال، هامیلتونی یک نوسانگر یک بعدی

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2, \quad \omega = \left(\frac{k}{m}\right)^{1/2} \quad (67-2)$$

منجر به معادلات حرکت جفت شده

$$\dot{p} = -m\omega^2 x, \quad \dot{x} = \frac{p}{m} \quad (68-2)$$

می‌شوند. اگر تبدیلات بندادی

$$p = (2m\omega p')^{1/2} \cos x', \quad x = \left(\frac{2p'}{m\omega}\right)^{1/2} \sin x' \quad (69-2)$$

را به کار بریم معادلات دیفرانسیل ساده‌تری بددست می‌آید. هامیلتونی (۶۷-۲) خواهد شد،

$$\mathcal{H}' = \omega p' \cos^2 x' + \omega p' \sin^2 x' = \omega p' = E \quad (70-2)$$

و معادلات حرکت تفکیک شده

$$\dot{p}' = 0 \quad , \quad \dot{x}' = \omega \quad (71-2)$$

از آن بددست می‌آید که جواب آنها عبارت است از

$$p' = \text{const} = \frac{E}{\omega} \quad , \quad x' = \omega t + \phi \quad (72-2)$$

اگر نتایج را بر حسب مختصات و تکانه‌های قدیم بیان کنیم خواهیم داشت

$$p = (2mE)^{1/2} \cos(\omega t + \phi), \quad x = \left(\frac{2E}{m\omega^2}\right)^{1/2} \sin(\omega t + \phi) \quad (23-2)$$

این روابط همان نتایج آشنای یک نوسانگر استند، با این استثناء که دامنه بر حسب یک ثابت حرکت، یعنی، انرژی، بیان شده است.

البته، امکان تفکیک و حل ساده یک مسئله مشخص بستگی به تبدیلات بندادی مناسب با آن دارد. نحوه بدست آوردن چنین تبدیلی موضوع نظریه هامیلتون-زاکوبی است و در اینجا ارائه نخواهد شد*.

۴- کوشش‌های پواسن

برای هر تابع بندادی $G(p_i, q_i, t)$ ، معادلات حرکت می‌توانند، با استفاده از معادلات هامیلتون به صورت زیر نوشته شوند

$$\begin{aligned} \frac{dG}{dt} &= \sum_{i=1}^3 \frac{\partial G}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial G}{\partial p_i} \dot{p}_i + \frac{\partial G}{\partial t} \\ &= \sum_{i=1}^3 \frac{\partial G}{\partial q_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} - \frac{\partial G}{\partial p_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} + \frac{\partial G}{\partial t} \end{aligned} \quad (24-2)$$

کوشش پواسن دو تابع A و B را به صورت زیر تعریف می‌کنیم

$$\{A, B\} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial q_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} \quad (25-2)$$

بنابراین، $(24-2)$ می‌تواند به صورت

$$\frac{dG}{dt} = \{G, \mathcal{H}\} + \frac{\partial G}{\partial t} \quad (26-2)$$

* به عنوان مثال به کتاب زیر مراجعه کنید

H.Goldstein "classical Mechanics," Chapter 9, Addison Wesley 'Reading, Massachusetts 1950

** بعضی از مؤلفین نشانه [۱] را برای کوشش پواسن ترجیح می‌دهند. ما نشانه () را به کار می‌بریم تا با جایه‌جایگرها که در فصل سوم وارد خواهند شداشتباہ نشود.

خلاصه شود . برای توابع بندادی که صریحاً "تابع زمان نیستند" ($\partial G/\partial t = 0$) ، مشاهده می‌کنیم که اگر $G, \mathcal{H} = \{G, H\}$ باشد G یک ثابت حرکت است . در واقع ، (۷۶-۲) علاوه‌الای معمای "تمام معادلات هامیلتون را در بر دارد ، همان‌طور که می‌توان با قراردادن i ، $G = q_i$ ، $G = p_i$ نرا تحقیق کرد .

بهراحتی می‌توان ثابت کرد که

$$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij} \quad \text{و} \quad \{q_i, q_j\} = \{p_i, p_j\} = 0 \quad (۷۷-۲)$$

که در آن دلتأی کرونکر δ_{ij} به صورت زیر تعریف شده است

$$\begin{array}{ll} \delta_{ij} = 1 & i = j \\ \delta_{ij} = 0 & i \neq j \end{array} \quad (۷۸-۲)$$

هر رابطه‌ای که کروشهای پواسن را در برداشتہ باشد باید تحت یک تبدیل بندادی تغییر نماید . این در واقع تعریف دیگری برای تبدیل بندادی است . معادلات (۷۷-۲) روابط بینیادی کروشه پواسن برای تمام مختصات و تکانه‌های مزدوج بندادی آنها می‌باشند . تحقیق این که مولفه‌های تکانه زاویه‌ای

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (۷۹-۲)$$

در روابط

$$\{L_i, L_j\} = L_k \quad (i, j, k = x, y, z)$$

$$(۸۰-۲)$$

$$\{L_i, L^2\} = 0$$

صدق می‌کند مشکل نخواهد بود .

از (۷۵-۲) نتیجه می‌شود که مشتق یک تابع بندادی نسبت به یک مختصه q_j برابر است با کروشه پواسن آن تابع با تکانه مزدوج بندادی p_j آن ، یعنی ، $\partial F/\partial q_j = \{F, p_j\} = \{F, p_x\}$ بدویژه ، داریم

$$\frac{\partial F}{\partial x} = \{F, p_x\} \quad \Rightarrow \quad F(x + dx, y, z) = F(x, y, z) + \{F, p_x\} dx \quad (۸۱-۲)$$

تکانه بندادی p به نام مولد انتقالهای بینهایت کوچک در امتداد x موسوم است.

۵ - دینامیک نسبیتی

بحث را با تعمیم بعضی از نتایج قبلی پایان می‌دهیم بهنحوی که بتوانند به ذرات نسبیتی که با سرعتهای قابل مقایسه با سرعت نور ($c \lesssim v$) حرکت می‌کنند اعمال شوند، پایان می‌دهیم. قانون دوم نیوتون باید اصلاح شود و به صورت

$$\mathbf{F} = \dot{\mathbf{p}} \quad (82-2)$$

نوشته شود که در آن p تکانه نسبیتی ذره

$$p = \frac{mv}{\left(1 - (v^2/c^2)\right)^{1/2}} \quad (83-2)$$

و m جرم "سکون" ذره است. معادلات لاگرانژ و هامیلتون دست نخورد هباقی می‌مانند به شرط آنکه توابع نسبیتی مناسب

$$\mathcal{L} = -mc^2 \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{1/2} - V(r, t) \quad (84-2)$$

و

$$\mathcal{H} = (p^2 c^2 + m^2 c^4)^{1/2} + V(r, t) \quad (85-2)$$

را به کار بریم. می‌توان ثابت کرد که هامیلتونی نسبیتی یک ذره پاره‌دار در یک میدان الکترومغناطیسی به صورت زیر است

$$\mathcal{H} = \left[\left(p - \frac{qA}{c} \right)^2 c^2 + m^2 c^4 \right]^{1/2} + q\Phi \quad (86-2)$$

این نتیجه اخیر با اعمال کمترین جایگزینی، که عبارت است از

$$p \rightarrow p - \frac{qA}{c} \quad (87-2)$$

و با به کارگیری Φ به عنوان تابع انرژی پتانسیل معمولی به دست می آید .
 می توان مستقیماً تحقیق کرد که اعمال معادلات لاگرانژ به (۸۴-۲) ، یا به طور معادل
 اعمال معادلات هامیلتون به (۸۵-۲) ، به قانون دوم نیوتون (۸۲-۲) منجر می شود . در حد
 $1 \ll v/c$ ، بسط تیلور^۴ (۸۴-۲) و (۸۵-۲) نشان می دهد که شکل های نسبیتی دقیقاً به هم تابه ای
 غیر نسبیتی خود تبدیل می شوند ، به استثنای این واقعیت که انرژی سکون ، mc^2 ، از ∞ کم
 می شود و به ∞ اضافه می شود . اما این انرژی ثابت ، تاثیری در معادلات حرکت ندارد .
 فرمول بندی کروشه هامیلتون - پواسن بعویظه برای تعمیم به نظریه کوانتومی هنوز بآمده است .
 خواهیم دید که چنین تعمیمی ثابت پلانک ، h ، ثابت بنیادی نظریه کوانتومی را وارد می کند
 و هم چنین خواهیم دید که $h \rightarrow 0$ حد کلاسیکی را ارائه می دهد . در فصل (۸۶) ، پذیر جو ب
 ریاضیاتی نظریه کوانتومی را به طریقی گسترش خواهیم داد که به روشنی ارتباط آنرا با مکانیک
 کلاسیکی نمایان سازد .

مسائل

- ۱-۲ با استفاده از (۱۵-۲) مستقیماً نشان دهید که $L = m(xv_y - yv_x)$ برای یک نوسانگر
 همسانگرد یک ثابت حرکت است .
- ۲-۲ جوابهای (۱۸-۲) را بر حسب ثابت های حرکت E (انرژی) و L (تکانه زاویه ای) بیان
 کنید .
- ۳-۲ یک سیستم N ذره ای که هامیلتونی \mathcal{H}

$$\mathcal{H} = \sum_{j=1}^N \frac{p_j^2}{2m} + V(\mathbf{r}_j) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$$

باشد در نظر بگیرید . فرض کنید که مختصات و تکانه ها توابع متناوب . می باشند .
 تناوب ω ، از زمان باشند .
 (الف) رابطه

$$\left\langle \sum_{j=1}^N \mathbf{r}_j \cdot \nabla_j \mathcal{H} \right\rangle = \left\langle \sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j \cdot \nabla_{p_j} \mathcal{H} \right\rangle$$

را که در آن متوسط دوره‌ای به وسیله

$$\langle A \rangle = \int_0^\tau \frac{A \, dt}{\tau}$$

تعریف شده است، ثابت کنید. (راهنمایی: از نابع $r \cdot p_j = G = \sum_{j=1}^N p_j$ نسبت به زمان مشتق بگیرید)

(ب) منفی طرف چپ نتیجه فوق ویریال کلاوسیوس^۵، $\langle \mathfrak{V} \rangle$ ، نامیده می‌شود. نشان دهید که طرف راست برابر است با دو برابر انرژی جنبشی. این مطلب قضیه ویریال زیر را به ما می‌دهد

$$-\langle \mathfrak{V} \rangle = 2\langle T \rangle$$

(ج) نشان دهید که برای یک ذره واقع در یک پتانسیل $V = Ar^n$ ، قضیه ویریال به شکل زیر در می‌آید

$$\langle T \rangle = \frac{1}{2}n\langle V \rangle$$

(د) با یک محاسبه مستقیم نشان دهید که برای یک نوسانگر ساده یک بعدی، قضیه ویریال نتیجه می‌دهد $\langle V \rangle = \langle T \rangle$.

۴-۲ مورد یک ذره باردار در حضور یک میدان الکترومغناطیسی را در نظر بگیرید.

(الف) با استفاده از لاگرانژی (۵۸-۲) نشان دهید که تکانه مزدوج بندادی با عبارت است از

$$p_x = mv_x + \frac{qA_x}{c}$$

(ب) هم‌چنین نشان دهید که تکانه مزدوج با زاویه سنتی ϕ عبارت است از

$$p_\phi = (r \times mv)_z + \left(r \times \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)_z$$

(ج) یک تبدیل لوزاندر به لاغرانژی (۵۸-۲) اعمال کنید و هامیلتونی متناظر را به دست \bar{T} وردید.

۵-۲ (الف) هامیلتونی وابسته به دو الکترون اتم هلیوم را، با در نظر گرفتن نیروی جاذبه آنها به طرف هسته و همچنین دفع متقابل آنها بنویسید.

(ب) با اثبات

$$\{\mathcal{H}, \mathbf{L}\} = 0$$

نشان دهید که تکانه زاویه‌ای کل الکترونها، $\mathbf{L} = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2$ ، پایسته است.

۶-۲ نشان دهید که مولفه‌های تکانه زاویه‌ای در روابط زیر صدق می‌کنند

$$\{L_i, L_j\} = L_k, \quad \{L^2, L_i\} = 0$$

۷-۲ (الف) معادلات لاگرانژ و معادلات هامیلتون را به ترتیب به (۸۴-۲) و (۸۵-۲) اعمال کنید و تحقیق کنید که به قانون نیوتون منجر خواهند شد.

(ب) نشان دهید که

$$\mathcal{L}_{\text{rel}} \xrightarrow{v/c \rightarrow 0} \mathcal{L}_{\text{nonrel}} - mc^2$$

$$\mathcal{H}_{\text{rel}} \xrightarrow{v/c \rightarrow 0} \mathcal{H}_{\text{nonrel}} + mc^2$$

مراجع پیشنهادی

Curben, H. C., and Stehle, P., "Classical Mechanics." Wiley, New York, 1960.

Goldstein, H., "Classical Mechanics." Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1950.

Konopinski, E. J., "Classical Descriptions of Motion." Freeman, San Francisco, 1969.

۳

صورتیبندی مکانیک کوانتومی

تجربه‌های اولیه فیزیک جدید پیشنهاد می‌کردند که برای توضیح رفتار بنیادی ماده و تابش، لازم است به متغیرهای بندادی، از قبیل انرژی و تکانه زاویه‌ای، فقط بعضی مقادیر مجاز را نسبت دهیم. ولی، منشاء کوانتش در حقیقت تا سال ۱۹۲۵ فهمیده نشده بود. نظریه صوری مکانیک کوانتومی می‌باشد که بیش از مقادیر مشخصه توابع بندادی اندازه‌پذیر یا مشاهده‌پذیرها را پیشگویی می‌کند. این نظریه هم‌چنین می‌باشد که حاوی قالبی باشد که به کمک آن بتوان تمام اطلاعات ممکن از یک سیستم مکانیکی را به دست آورد. به تدریج که نظریه گسترش یافت تناظر بین مکانیک کلاسیک و مکانیک کوانتومی آشکارتر شد.

شکل جدید نظریه کوانتومی به طرق مختلف، اما معادلی، توسط شرودینگر، هایزنبرگ و دیراک فرمولبندی شد. روشی که در اینجا به کاربرده شده است مناسب به دیراک است؛ ارتباط آن با فرمولبندی شرودینگر بعداً برقرار خواهد شد. نمایش دیراک از نظریه کوانتومی مستلزم اطلاعاتی در مورد فضای برداری خطی است. بخشی از ریاضیات که برای بحث مالازم است در زیر ارائه می‌شود.

۱- بردارها در یک فضای خطی مختلط N بعدی

یک بردار در یک فضای حقیقی سه بعدی به وسیله اندازه و جهت آن مشخص می‌شود. برای نمایش بردار بهتر است که یک پایه راست‌هنگار که عبارت از سه بردار دو بهدو معتماد به طول واحد است، در نظر بگیریم. معمول است که بردارهای واپسی به محورهای x ، y و z را به ترتیب با i ، j و k نمایش می‌دهند. این بردارها دارای خواص راست‌هنگاری زیر

می‌باشد

$$\begin{aligned} \mathbf{i} \cdot \mathbf{i} &= \mathbf{j} \cdot \mathbf{j} = \mathbf{k} \cdot \mathbf{k} = 1 \\ \mathbf{i} \cdot \mathbf{j} &= \mathbf{i} \cdot \mathbf{k} = \mathbf{j} \cdot \mathbf{k} = 0 \end{aligned}$$

اگر فضا خطی باشد یک بردار غیرمشخص می‌تواند به وسیله یک ترکیب خطی از بردارهای پایه نمایش داده شود، یعنی

$$\mathbf{a} = a_x \mathbf{i} + a_y \mathbf{j} + a_z \mathbf{k} \quad (1-3)$$

کمیات a_x ، a_y ، و a_z مولفه‌های بردار \mathbf{a} در پایه \mathbf{i} ، \mathbf{j} ، \mathbf{k} نامیده می‌شوند. باید تأکید شود که در حالی که بردار \mathbf{a} یکتاست، a_x ، a_y و a_z بستگی به پایه به کار برده شده دارند. با استفاده از ویژگیهای بردارهای پایه خواهیم داشت

$$a_x = \mathbf{a} \cdot \mathbf{i}, \quad a_y = \mathbf{a} \cdot \mathbf{j}, \quad \text{و} \quad a_z = \mathbf{a} \cdot \mathbf{k}$$

در یک پایه دیگر مولفه‌ها به صورت زیر خواهند بود

$$a'_x = \mathbf{a} \cdot \mathbf{i}', \quad a'_y = \mathbf{a} \cdot \mathbf{j}', \quad \text{و} \quad a'_z = \mathbf{a} \cdot \mathbf{k}'$$

طول بردار به وسیله

$$|\mathbf{a}| = (a_x^2 + a_y^2 + a_z^2)^{1/2} = (a'_x^2 + a'_y^2 + a'_z^2)^{1/2}$$

تعریف می‌شود و در تمام پایه‌ها پکسان است. کمیاتی که در تمام پایه‌ها پکسان باشند نردهای نامیده می‌شوند.

حاصل ضرب نقطه‌ای یا داخلی دو بردار نیز نردهای است و می‌تواند بر حسب مولفه‌های آنها، با به کار بردن

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z = a'_x b'_x + a'_y b'_y + a'_z b'_z$$

تعیین شود.

می‌توان مولفه‌های یک بردار در یک پایه را با استفاده از یک ماتریس ستونی، یعنی

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{pmatrix}$$

نمايش داد . حاصل ضرب عددی $b \cdot a$ می تواند با نوشتن بردار اول به صورت یک ماتریس سطري و بردار دوم به صورت یک ماتریس ستونی نمايش داده شود . با استفاده از قاعده ضرب ماتریسها خواهیم داشت

$$b \cdot a = (b_x, b_y, b_z) \begin{pmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{pmatrix} = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z \quad (2-3)$$

روشن است که یک بردار می تواند یا به وسیله یک ماتریس سطري یا به وسیله یک ماتریس ستونی بیان شود . نمايش سطري را الحقی یا همزاد نمايش ستونی خواهیم نامید . حاصل ضرب داخلی شامل ضرب یک ماتریس ستونی در همزاد آن ، که یک ماتریس سطري است می باشد . در نمادگذاری ستونی بردارهای پایه همواره به شکل زیراند

$$i = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad j = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad k = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3-3)$$

اکنون با فرض این که بردارهای مورد نظر متعلق به یک فضای N بعدی هستند ، مطالب فوق را تعمیم می دهیم . یک بردار غیر مشخص می تواند در یک پایه راست هنجار ، مشابه با $(1-3)$ ، به صورت

$$a = \sum_{i=1}^N a^{(i)} \alpha_i \quad (4-3)$$

بسط داده شود که در آن روابط راست هنجاری عبارتند از

$$\alpha_i \cdot \alpha_j = \delta_{ij} \quad (i, j = 1, \dots, N) \quad (5-3)$$

N بردار پایه در شکل ستونی به صورت

$$\alpha_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_N = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \quad (6-3)$$

نمایش داده می‌شوند. بردار a برحسب مولفه‌هایش بهصورت

$$a = \begin{pmatrix} a^{(1)} \\ a^{(2)} \\ a^{(3)} \\ \vdots \\ a^{(N)} \end{pmatrix} \quad (7-3)$$

نمایش داده می‌شود. مجدداً باید تاکید شود که بردار a توسط جهت و اندازه‌اش مشخص می‌شود ولی مولفه‌های آن با پایه تغییر می‌کنند. نمایش یک بردار تنها وقتی با معنی است که پایه و هم‌چنین مولفه‌های بردار در این پایه معلوم شده باشند.

چون در اینجا فضای N بعدی یک فضای مجرد است، یک تعمیم دیگری که در نظریه کوانتومی مفید است انجام خواهیم داد. فرض می‌کنیم بردارهای فضا مختلط باشند. بهمیان دیگر، لزومی ندارد که مولفه‌های یک بردار در یک پایه حقیقی باشند. بهتر است که الحقیقی یک بردارستونی را از نوبه صورت یک بردار سطرنی با عناصری که مزدوج مختلط عناصر متاظر باشند تعریف کنیم. بهمیان ریاضی داریم

$$\begin{pmatrix} a^{(1)} \\ a^{(2)} \\ \vdots \\ a^{(N)} \end{pmatrix} = \text{الحقیقی} \quad (8-3)$$

نمادگذاری دیراک را وارد می‌کنیم و ماتریس ستونی را بهصورت

$$a = |a\rangle = \begin{pmatrix} a^{(1)} \\ a^{(2)} \\ \vdots \\ a^{(N)} \end{pmatrix} \quad (9-3)$$

که در آن $|a\rangle$ یک بردار گت¹ نامیده می‌شود، مختصر می‌کنیم. به طریق مشابهی، شکل الحقیقی $\langle a|$ را بهصورت

$$\langle a| = (a^{*(1)}, a^{*(2)}, \dots, a^{*(N)}) \quad (10-3)$$

که در آن $\langle a|$ یک بردار برا آنامیده می‌شود، می‌نویسیم. حاصل ضرب داخلی $a \cdot b$.

یک نرده‌ای مختلطی است که با ضرب برای b در کت a به دست می‌آید، یعنی

$$\begin{aligned} c = \mathbf{b} \cdot \mathbf{a} &= \langle b | a \rangle = (b^{*(1)}, b^{*(2)}, \dots, b^{*(N)}) \begin{pmatrix} a^{(1)} \\ a^{(2)} \\ \vdots \\ a^{(N)} \end{pmatrix} \\ &= \sum_{i=1}^N b^{*(i)} a^{(i)}. \end{aligned} \quad (11-۳)$$

"عبارت‌های برا و کت از این واقعیت سرهشمه می‌گیرند که حاصل ضرب داخلی یک "برا - کت" یا "براکت*" تشکیل می‌دهد. توجه کنیم که ضرب داخلی دیگر یک عمل جابه‌جا‌پر نیست زیرا عوض‌کردن ترتیب عوامل ضرب منجر به مزدوج مختلط حاصل ضرب داخلی خواهد شد.

الحقیقی بردار برا یک بردار کت است و برعکس. بهمیان ریاضی داریم

$$|a\rangle^\dagger = \langle a| \quad \text{و} \quad \langle a|^\dagger = |a\rangle \quad (12-۳)$$

با استفاده از قاعده ضرب ماتریسها، می‌توان نشان داد که الحقیقی حاصل ضرب دو بردار برابر است با حاصل ضرب الحقیقی‌های بردارها با ترتیب معکوس. بنابراین

$$c^\dagger = (\langle b | a \rangle)^\dagger = \langle a | b \rangle = c^* \quad (13-۳)$$

در نتیجه، الحقیقی یک نرده‌ای به‌طور ساده عبارت است از مزدوج مختلط آن. حاصل ضرب داخلی یک بردار در خودش هنجار آن بردار نامیده می‌شود و همیشه حقیقی و مثبت است، یعنی

$$\langle a | a \rangle = \sum_{i=1}^N a^{*(i)} a^{(i)} = \sum_{i=1}^N |a^{(i)}|^2 \geq 0$$

با استفاده از نمادگذاری دیگر، بسط بردار (۱۳-۳) می‌تواند در شکل کت به صورت

$$|a\rangle = \sum_{i=1}^N a^{(i)} |\alpha_i\rangle \quad (14-۳)$$

* براکت braket به معنی کروشه است. م.

یا در شکل برا به صورت

$$\langle a | = \sum_{i=1}^N \langle \alpha_i | a^{*(i)} \quad (15-3)$$

نوشته شود. رابطه راست‌هنگاری برای بردارهای پایه به شکل

$$\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = \delta_{ij} \quad (16-3)$$

در می‌آید، یعنی، حاصل ضرب داخلی دو بردار پایه متفاوت صفر است (تعامد) و هنگار هر کدام برابر با یک است.

۲ - عملگرهای خطی

یک عملگر در یک فضای مختلط N بعدی به وسیله عمل آن بر روی بردارهای مختلف فضا تعریف می‌شود. به عنوان مثال، در رابطه

$$|b\rangle = \hat{A}|a\rangle \quad (17-3)$$

عملگر \hat{A} وقتی یکتا است که برای به دست آوردن $|b\rangle$ از هر بردار $|a\rangle$ روشی تعیین شده باشد. ما بحث خود را به عملگرهای خطی، یعنی، عملگرهایی که دارای ویژگی

$$\hat{A}[c|a\rangle + d|b\rangle] = c\hat{A}|a\rangle + d\hat{A}|b\rangle \quad (18-3)$$

برای بردارهای دلخواه $|a\rangle$ و $|b\rangle$ و اعداد دلخواه c و d باشند محدود می‌کنیم. با بیان بردار $|a\rangle$ در پایه $\langle \alpha_i |$ ، عمل $|b\rangle = \hat{A}|a\rangle$ خواهد شد

$$|b\rangle = \hat{A} \sum_{i=1}^N a^{(i)} |\alpha_i\rangle = \sum_{i=1}^N a^{(i)} \hat{A} |\alpha_i\rangle \quad (19-3)$$

اگر مولفه‌های $|b\rangle$ نیز در این پایه معلوم باشند، اثر عملگر A یکتاست. طرفین (۱۹-۳) را در $\langle \alpha_j |$ ضرب داخلی می‌کنیم، داریم

$$\langle \alpha_j | b \rangle = b^{(j)} = \sum_{i=1}^N a^{(i)} \langle \alpha_j | \hat{A} | \alpha_i \rangle \quad (20-3)$$

عنصر N^2

$$A_{ji} = \langle \alpha_j | \hat{A} | \alpha_i \rangle$$

عناصر ماتریس عملگر خطی \hat{A} در پایه $\langle \alpha_i |$ نامیده می‌شوند. دقت در (۲۰-۳) آشکار می‌کند که مولفه‌های $\langle a |$ و $\langle b |$ در رابطه ماتریسی

$$|b\rangle = \hat{A}|a\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} b^{(1)} \\ \vdots \\ b^{(N)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N1} & \cdots & A_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^{(1)} \\ \vdots \\ a^{(N)} \end{pmatrix} \quad (21-3)$$

صدق می‌کند. به بیان معادل، یک عملگر خطی می‌تواند به صورت یک ماتریس $N \times N$ در یک پایه N بعدی معین نمایش داده شود. مجدداً، در حالی که عملگر \hat{A} مطلق است، یعنی، به وسیله عملش بر روی بردارهای فضای تعریف شده است، عناصر آن بستگی به پایه‌ای دارد که برای نمایش آن به کار رفته است.

یک عملگر ممکن است از جهت راست روی یک کت و یا از جهت چپ روی یک برا عمل کند. عملهای متواالی توسط حاصل ضرب عملگرها تجلی می‌کند. ضرب عملگرها از قوانین شرکت پذیری و توزیع پذیری پیروی می‌کند، اما لزوماً "جایه‌جا پذیر نیست، یعنی

$$\begin{aligned} (\hat{A}\hat{B})\hat{C} &= \hat{A}(\hat{B}\hat{C}) \\ \hat{A}(\hat{B} + \hat{C}) &= \hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{C} \\ \hat{A}\hat{B} &\neq \hat{B}\hat{A} \end{aligned} \quad (22-3)$$

این قواعد با نتایج مشهور ضرب ماتریسی مطابقت دارند. ساده‌ترین عملگرها عملگریکه یا همانی است که دارای ویژگی

$$\hat{I}|a\rangle = |a\rangle$$

برای تمام بردارهای فضای است، شکل ماتریسی آن در تمام پایه‌ها عبارت است از

$$\hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

وارون یک عملگر، A^{-1} ، اگر وجود داشته باشد*، توسط عمل

$$\hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{I} \quad (23-3)$$

تعریف می‌شود. در واقع، وارون A^{-1} اثر عملگر اصلی را خنثی می‌کند. الحاقی یک عملگر، \hat{A}^\dagger ، می‌تواند به طرق متعددی تعریف شود. تعریفی که ما در اینجا به کار برده‌ایم \hat{A}^\dagger را به‌وسیله روابط

$$\begin{aligned} |b\rangle &= \hat{A}|a\rangle \\ \langle b| &= \langle a|\hat{A}^\dagger \end{aligned} \quad \text{برای هر } |a\rangle \text{ و } |b\rangle \text{ دلخواه}$$

تعریف می‌کند. به بیان غیر ریاضی، اگر \hat{A} عملگری باشد که $|b\rangle$ را از کست $|a\rangle$ تولید کند، \hat{A}^\dagger عملگری خواهد بود که برای $|b\rangle$ را از برای $|a\rangle$ تولید می‌کند. با به‌کار بردن این تعریف، می‌توان ثابت کرد که

$$\langle \alpha_i | \hat{A} | \alpha_j \rangle = (\langle \alpha_j | \hat{A}^\dagger | \alpha_i \rangle)^* \quad (24-3)$$

در شکل ماتریسی، الحاقی به‌وسیله عوض‌کردن سطرها با ستونها و گرفتن مزدوج مختلط عناصر، به دست می‌آید.

دو عملگر مهم در مکانیک کوانتومی عبارتند از عملگر هرمیتی و عملگر پیکانی. یک عملگر هرمیتی است اگر با الحاقی خودش برابر باشد

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger$$

با

$$\langle \alpha_i | \hat{A} | \alpha_j \rangle = (\langle \alpha_j | \hat{A} | \alpha_i \rangle)^* \quad (25-3)$$

و پیکانی خواهد بود اگر وارون آن برابر با الحاقی اش باشد

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}^{-1}$$

با، با استفاده از (23-3)،

* عملگری که دترمینان آن (دک ۲۹-۳) صفر باشد تکین نامیده می‌شود و وارون ندارد.

$$\hat{A}\hat{A}^\dagger = \hat{A}^\dagger\hat{A} = \hat{I} \quad (26-3)$$

با استفاده از ویژگیهای عملگرها، می‌توان روابط زیر را تحقیق کرد

$$(\hat{A}\hat{B})^{-1} = \hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1}, \quad (\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger \quad (27-3)$$

اکنون تاثیر یک عملگر یکانی O را روی یک مجموعه بردارهای پایه راست‌هنگار $\langle \alpha_i |$ بررسی کنیم. می‌نویسیم

$$|\beta_i\rangle = O|\alpha_i\rangle$$

یا در شکل الحاقی (برا)

$$\langle \beta_j | = \langle \alpha_j | O^\dagger$$

با درنظر گرفتن ضرب داخلی و استفاده از تعریف عملگر یکانی، خواهیم داشت

$$\langle \beta_j | \beta_i \rangle = \langle \alpha_j | O^\dagger O | \alpha_i \rangle = \langle \alpha_j | \alpha_i \rangle = \delta_{ij}$$

درنتیجه، بردارهای $\langle \beta_i |$ یک پایه راست‌هنگار دیگر تشکیل می‌دهند. بنابراین می‌توانیم O را به یک دوران مناسب کنیم و نتیجه بگیریم که تحت یک عمل یکانی طول تمام بردارها و جهتهای نسبی آنها (حاصل ضرب داخلی) بدون تغییر می‌مانند. به‌طور عمومی‌تر، تمام کمیت‌های نرده‌ای تحت عملهای یکانی (دورانها) ناوردا هستند.

رد یک عملگر، که $\text{Tr } \hat{A}$ نوشته می‌شود، یک کمیت نرده‌ای است و، بنابراین، تحت تغییر پایه ناوردا است. این کمیت می‌تواند با جمع عناصر قطری ماتریس وابسته به \hat{A} در یک پایه محاسبه شود:

$$\text{Tr } \hat{A} = \sum_{i=1}^N \langle \alpha_i | \hat{A} | \alpha_i \rangle = \sum_{i=1}^N A_{ii} \quad (28-3)$$

دیگر می‌دانیم یک عملگر نیز یک کمیت نرده‌ای است و با محاسبه دترمینان ماتریس وابسته به دست می‌آید

$$|\hat{A}| = \det \hat{A} = \begin{vmatrix} \langle \alpha_1 | \hat{A} | \alpha_1 \rangle & \cdots & \langle \alpha_1 | \hat{A} | \alpha_N \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \alpha_N | \hat{A} | \alpha_1 \rangle & \cdots & \langle \alpha_N | \hat{A} | \alpha_N \rangle \end{vmatrix} \quad (29-3)$$

همانطور که قبل "خاطرنشان کردیم، ضرب دو عملگر عموماً" جا به جا پذیر نیست . تفاضل بین حاصل ضرب مستقیم و جابه‌جا شده، جابه‌جاگر نامیده می‌شود و از نظر ریاضی به صورت

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (30-3)$$

بیان می‌شود . نتیجه می‌شود که اگر دو عملگر جابه‌جاپذیر باشند ، جابه‌جاگر آنها صفر است . در زیر خواهیم دید که جابه‌جاگر دو عملگر یک‌نقش اساسی در گسترش ریاضیاتی مکانیک کوانتومی بازی می‌کند .

۳ - ویژه مقدارها و ویژه بردارها

"عموماً" عمل یک عملگر روی یک بردار اندازه و جهت آنرا تغییر می‌دهد . در حال حاضر توجه خود را به آن گروه از بردارهایی که تحت عمل یک عملگر معین فقط بزرگی آنها تغییر می‌کند محدود می‌کنیم . این تغییر در اندازه منجر به ضرب بردار در یک عدد ثابت می‌شود ؛ این نکته ما را به نوشتمن رابطه

$$\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle \quad (31-3)$$

هدایت می‌کند . شاخص پائین برای این تاکید اضافه شده است که بیش از یک بردار با این ویژگی وجود دارد . روش خواهد شد که N بردار وجود دارد که به طور خطی از یک‌دیگر مستقل‌اند و در (31-3) صدق می‌کنند . بردارهای $|a_i\rangle$ و نرده‌ایهای a_i به ترتیب ویژه بردارها (یا ویژه کتها) و ویژه مقدارهای عملگر آنها نامیده می‌شوند* . لذا این کمیات بردارها و مقدارهای سرشنی یا خودی عملگر می‌باشد . مجموعه ویژه مقدارها طیف عملگر نامیده می‌شود . چون (31-3) اندازه‌های ویژه بردارها را محدود نمی‌کند ، بیناسب است که آنها را بهنجار کنیم ، یعنی بخواهیم که

$$\langle a_i | a_i \rangle = 1$$

اگر عناصر یک عملگر در یک پایه راست‌هنگار معلوم باشند ، ویژه بردارها و ویژه

* ویژه بردار و ویژه مقدار به ترتیب ترجمه کلمات **eigenvalue** و **eigenvector** می‌باشد . پیشوند **eigen** به معنی "خود" یا "ویژه" در زبان آلمانی است .

مقدارها می‌توانند فوراً محاسبه شوند. به عنوان مثال، نمایش ماتریسی زیر را که وابسته به عملگر هرمیتی \hat{A} در فضای دوبعدی است در نظر بگیریم

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$$

معادله ویژه مقداری $\hat{A}|a_j\rangle = a_j|a_j\rangle$ می‌تواند در شکل ماتریسی به صورت

$$\begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_j^{(1)} \\ a_j^{(2)} \end{pmatrix} = a_j \begin{pmatrix} a_j^{(1)} \\ a_j^{(2)} \end{pmatrix} \quad (32-3)$$

بیان شود. می‌خواهیم دومولفه هریک از ویژه بردارها همراه با ویژه مقدارهای متناظر آنها را پیدا کیم. معادله (32-3) معادل با یک زوج معادله همکن برای مولفه‌های $a_j^{(1)}$ و $a_j^{(2)}$ است. جوابهای غیربدیهی ($a_j^{(1)} \neq 0 \neq a_j^{(2)}$) فقط برای آن مقادیری از a_j که ریشه‌های معادله جبری

$$\det(\hat{A} - \hat{1}a_j) = \begin{vmatrix} 0 - a_j & i \\ -i & 0 - a_j \end{vmatrix} = a_j^2 - 1 = 0$$

باشند وجود دارند. ریشه‌های این معادله، $a_j = \pm 1$ ، ویژه مقدارهای عملگر \hat{A} را تعیین می‌کند. با قراردادن $+1 = a_1$ و $-1 = a_2$ ، مولفه‌های ویژه بردارهای متناظر با $|a_1\rangle$ و $|a_2\rangle$ به‌وسیله جایگزینی مستقیم در (32-3) به دست می‌آیند. همان‌طور که قبل "متذکر شدیم، (31-3) فقط جهت بردارها، یعنی؛ نسبت مولفه‌های آنها را تعیین می‌کد. این آزادی را خواهیم داشت که هر کدام از مولفه‌های (غیر صفر) را برابر با یک قرار دهیم. با به‌کاربردن اولین ویژه مقدار $+1 = a_1$ در (32-3) و قراردادن $1 = a_1^{(1)}$ ، نتیجه می‌گیریم $a_1^{(2)} = -i$ و می‌نویسیم:

$$|a_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}, \quad a_1 = +1 \quad \text{برای}$$

ویژه بردار دوم به طریق مشابهی به صورت

$$|a_2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \quad a_2 = -1 \quad \text{برای}$$

به دست می‌آید. این بردارها در همان پایه‌ای که ماتریس اصلی نمایش داده شده است

نمایش داده شده‌اند. هنچار هرکدام از آنها برابر با $\sqrt{2}$ می‌باشد به‌طوریکه ضرب هرکدام در $\sqrt{2}/\sqrt{2}$ آنها را به‌نگارمی‌کند. تحقیق این که دو بردار متعامد‌اند ساده است. این نتیجه همراه با این واقعیت که ویژه مقدارها حقیقی هستند اتفاقی نیست بلکه، همانطوری که در زیر نشان خواهیم داد، از ویژگی هرمیتی بودن عملگر اولیه ناشی می‌شود.

مثال فوق، از این نظر که تلویحاً "بیان می‌کند که قبلاً از این که ویژه مقدارهای یک عملگر بتوانند معلوم شوند، باید این عملگر در یک پایه به‌صورت ماتریس نمایش داده شود، ممکن است تا حدی گمراه‌کننده باشد. باید تاکید شود که ویژه مقدارها و ویژه بردارها از مشخصات عملگراند و از پایه‌ای که برای محاسبه آنها به‌کارمی‌رود مستقل‌اند. در بعضی موارد که نمایش ماتریسی انجام شدنی نیست، باز هم می‌توان ویژه مقدارها و ویژه بردارها را بدون به‌کاربردن پایه خاصی نتیجه‌گیری کرد. این نکته، بخصوص وقتی مهم است که تعداد ابعاد فضا، N ، خیلی بزرگ باشد.

۴- جبر ویژه مقدارها و ویژه بردارها برای عملگرهای هرمیتی

قضیه‌هایی که در زیر مورد بحث قرار خواهند گرفت، کاملاً "از هر پایه‌ای که ممکن است برای نمایش به‌کار رفته باشد مستقل‌اند. این قضایا در نظریه کوانتومی از بیشترین اهمیت برخوردارند و شایسته است که دانشجویان توجه خاصی به آنها معطوف دارند.

قضیه ۱- تمام ویژه مقدارهای یک عملگر هرمیتی حقیقی‌اند.

اثبات: فرض کنیم \hat{A} هرمیتی باشد و $\langle a_j | a_i \rangle$ و a_j به‌ترتیب معرف ویژه بردارها و ویژه مقدارهای آن باشند. معادله ویژه مقداری، در شکل کت، عبارت است از

$$\hat{A}|a_j\rangle = a_j|a_j\rangle \quad (j = 1, \dots, N) \quad (33-3)$$

و در شکل برا عبارت است از

$$\langle a_k | \hat{A}^\dagger = \langle a_k | a_k^* \quad (k = 1, \dots, N) \quad (34-3)$$

با ضرب داخلی (۳۳-۳) در $|a_k\rangle$ و (۳۴-۳) در $\langle a_j |$ ، و سپس کم کردن نتایج از یکدیگر، خواهیم داشت

$$\langle a_k | \hat{A}^\dagger | a_j \rangle - \langle a_k | \hat{A} | a_j \rangle = (a_k^* - a_j)\langle a_k | a_j \rangle$$

چون عملگر هرمیتی فرض شده است ($\hat{A} = \hat{A}^\dagger$)، طرف چپ صفر می‌شود و نتیجه می‌گیریم

$$(a_k^* - a_j)\langle a_k | a_j \rangle = 0 \quad (25-3)$$

با قراردادن $j = k$ و پادآوری این نکته که هنجار یک ویژه بردار نمی‌تواند صفر باشد، خواهیم داشت

$$(a_j^* - a_j) = 0 \quad \text{یا} \quad a_j^* = a_j \quad (26-3)$$

که تنها در صورتی برقرار است که a_j حقيقی باشد.

تعريف- اگر دو یا چند ویژه مقدار یک عملگر برابر باشند آن عملگر تبہگن است، در غیر این صورت ناتبہگن است.

قضیه ۲- ویژه بردارهای هر عملگر هرمیتی ناتبہگن متقابلاً متعامدند.

اثبات: با به کار بردن (۲۵-۳) و قراردادن $j \neq k$ خواهیم داشت

$$(a_k - a_j)\langle a_k | a_j \rangle = 0$$

"قبلماً" ثابت شد که ویژه مقدارهای a_k حقيقی‌اند ($a_k^* = a_k$). با استفاده از این فرض که \hat{A} ناتبہگن است ($a_k \neq a_j$ برای $j \neq k$) به نتیجه مورد نظر خواهیم رسید

$$\langle a_k | a_j \rangle = \delta_{kj}$$

از قرارداد بهنجاربودن ویژه بردارها در اینجا استفاده شده است. به این نتیجه می‌رسیم که ویژه بردارهای یک عملگر هرمیتی ناتبہگن یکتا هستند و یک پایه راست هنجار تشکیل می‌دهند. اگر عملگر هرمیتی تبہگن باشد، اثبات قضیه ۲ با شکست مواجه می‌شود؛ متعامد بودن دو ویژه بردار تنها در صورتی قطعی است که ویژه مقدارهای متناظر نابرابر باشند. در مورد تبہگنی، تنها نیاز به درنظر گرفتن ویژه بردارهای واپسی به ویژه مقدارهای برابر (تبہگن) داریم؟ خواص سایر ویژه بردارها توسط قضیه ۲ پوشش می‌شوند.

لم ۱- ویژه بردارهای متناظر با ویژه مقدارهای مساوی یک عملگر هرمیتی تبہگن یکتا نیستند.

اثبات- این لم را با یک تبہگنی دوئی مصور می‌کنیم. فرض کنیم

$$\hat{A}|a_1\rangle = a_1|a_1\rangle \quad (27-3\text{ الف})$$

و

$$\hat{A}|a_2\rangle = a_2|a_2\rangle \quad (27-3\text{ ب})$$

که در آنها $a = a_1 + a_2$ می‌توان تحقیق کرد که ترکیب‌های خطی

$$|a_1'\rangle = \alpha|a_1\rangle + \beta|a_2\rangle \quad (38-3)$$

و

$$|a_2'\rangle = \gamma|a_1\rangle + \delta|a_2\rangle \quad (38-4)$$

ویژه‌بردارهای جدیدی وابسته به ویژه‌مقدار a هستند. از جایگذاری مستقیم در (۳۷-۳) نتیجه می‌شود

$$\hat{A}|a_1'\rangle = \alpha\hat{A}|a_1\rangle + \beta\hat{A}|a_2\rangle = a(\alpha|a_1\rangle + \beta|a_2\rangle) = a|a_1'\rangle$$

با $|a_2'\rangle$ نیز نتیجه مشابهی بدست می‌آید. با تغییردادن α, β, γ و δ ویژه‌بردارهای جدیدی وابسته به ویژه‌مقدار a ایجاد خواهیم کرد.

لم ۲- همه ویژه‌بردارهای وابسته به ویژه‌مقدارهای مساوی نیازی ندارند که متعامد باشند.

اثبات: این نتیجه از لم ۱ حاصل می‌شود زیرا همیشه می‌توان α, β, γ و δ را طوری انتخاب کرد که داشته باشیم

$$\langle a_1' | a_2' \rangle \neq 0$$

بنابراین می‌توان N ویژه‌بردار برای یک عملگر هرمیتی تبیه‌گن پیدا کرد که به‌طور خطی از یکدیگر مستقل باشند ولی متقابلاً متعامد نباشند.

لم ۳- حداقل یک مجموعه N ویژه‌بردار متعامد برای هر عملگر هرمیتی تبیه‌گن وجود دارد.

اثبات- اثبات این مطلب اصولاً "با روش ساختن صورت می‌گیرد. ما صرفاً "خاطرنشان" می‌کنیم که اگر $\langle a_1 | a_2 \rangle$ و $\langle a_2 | a_1 \rangle$ در (۳۷-۳) متعامد نباشند، یعنی $\langle a_1 | a_2 \rangle = c \neq 0$ ، همیشه می‌توان α, β, γ و δ در (۳۸-۳) را طوری انتخاب کرد که داشته باشیم

$$\langle a_1' | a_2' \rangle = 0$$

ساختن یک مجموعه ویژه‌بردارهای راست‌هنگار، روش راست‌هنگار کردن اشیاء نامیده

می شود . نتایج قضایا و لمحات پیشین در قضیه زیر خلاصه می شوند .
 قضیه ۳ - هر عملگر هرمیتی دارای حداقل یک مجموعه N ویژه بردار راست هنجار است .
 اگر عملگر ناتبهمگن باشد ، این مجموعه یکتاست . در غیر این صورت مجموعه های راست هنجار
 زیادی وجود دارند . (فقط ویژه بردارهای وابسته به ویژه مقدارهای ناتبهمگن یکتا هستند .)
 در مورد تبهمگن ، باید مشخص کنیم که گدام مجموعه راست هنجار مورد نظر ما است .
 چون هر عملگر هرمیتی در یک فضای N بعدی دارای حداقل یک مجموعه N ویژه -
 برداری است که متقابلاً " متعامداند ، می توانیم این مجموعه را به عنوان یک پایه ، که تمام
 بردارها و عملگرهای دیگر فضا توسط آن نمایش داده می شوند ، به کار ببریم . پایه ای که از
 ویژه بردارهای راست هنجار عملگر \hat{A} تشکیل شده است ویژه پایه \hat{A} نامیده می شود . ویژه
 بردارها به صورت بردارهای پایه در می آیند و دارای شکل ماتریسی زیر هستند

$$|a_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad |a_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad |a_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \dots \dots$$

ماتریس \hat{A} در ویژه پایه خودش عبارت است از

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & a_2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & a_3 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ & & & a_N \end{pmatrix}$$

این شکل \hat{A} اطمینان می دهد که رابطه $\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$ در این پایه برقرار خواهد بود .
 تبدیل از یک پایه غیر مشخص به ویژه پایه \hat{A} همواره به قطعی گردن ماتریس \hat{A} منتهی می شود .
 این ماتریس در ویژه پایه مربوطه اش فقط دارای عناصر قطری است که هر کدام از آنها یکی از
 ویژه مقدارهای \hat{A} است .

۵ - جایه جاگر و مسئله ویژه مقدار

ویژه پایه های دو عملگر هرمیتی \hat{A} ، \hat{B} را در نظر بگیریم . نشان خواهیم داد که

جهت‌های نسبی ویژه‌پایه‌های \hat{A} و \hat{B} اساساً به‌وسیله جابه‌جاگراین عملگرها تعیین می‌شوند. قضایای زیر در مورد عملگرهای هرمیتی این ارتباط را تامین می‌کند.

قضیه ۴ - اگر دو عملگر دارای یک مجموعه ویژه‌بردار مشترک باشند، جابه‌جاگر آنها صفر است. یعنی، جابه‌جاپذیر‌اند.

اثبات: فرض کنیم یک مجموعه N بردار راست هنجار، که با علامت $|a_i, b_i\rangle$ مشخص می‌شوند، به‌طور همزمان ویژه‌بردارهای عملگرها \hat{A} و \hat{B} وابسته به‌ویژه مقدارهای a_i و b_i باشند، یعنی،

$$\begin{aligned}\hat{A}|a_i, b_i\rangle &= a_i|a_i, b_i\rangle \\ \hat{B}|a_i, b_i\rangle &= b_i|a_i, b_i\rangle\end{aligned}\quad (39-۳)$$

با اعمال \hat{B} روی معادله اول و \hat{A} روی معادله دوم و سپس کم کردن آنها از یکدیگر، خواهیم داشت

$$(\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B})|a_i, b_i\rangle = (b_i a_i - a_i b_i)|a_i, b_i\rangle = 0$$

چون طرف چپ باید برای هر ویژه‌بردار $|a_i, b_i\rangle$ صفر باشد داریم

$$(\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B}) = [\hat{B}, \hat{A}] = 0 \quad (40-۳)$$

نتیجه: اگر دو عملگر جابه‌جاپذیر نباشند نمی‌توانند یک ویژه‌پایه مشترک داشته باشند.

قضیه ۵ - اگر دو عملگر ناتبهمی جابه‌جاپذیر باشند، دارای یک مجموعه ویژه‌بردارهای مشترک خواهند بود، یعنی هر ویژه‌بردار عملگر اول ویژه‌بردار عملگر دوم نیز خواهد بود.

اثبات: فرض کنیم معادلات ویژه مقداری \hat{A} و \hat{B} به‌ترتیب عبارت باشند از

$$\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle, \quad \hat{B}|b_i\rangle = b_i|b_i\rangle$$

و فرض کنیم

$$[\hat{A}, \hat{B}] = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) = 0$$

با تأثیردادن \hat{B} روی طرف چپ معادله اول و استفاده از رابطه جابه‌جائی، خواهیم داشت:

$$\hat{B}\hat{A}|a_i\rangle = \hat{A}\hat{B}|a_i\rangle$$

این رابطه می‌تواند، با استفاده از معادله ویژه‌مقداری اول به صورت

$$\hat{A}\{\hat{B}|a_i\rangle\} = \hat{B}\{\hat{A}|a_i\rangle\} = a_i\{\hat{B}|a_i\rangle\}$$

نوشته شود. از مقایسه طرف‌های چپ و راست این رابطه نتیجه می‌گیریم که بردار داخل پرانتر باید حداقل متناسب با ویژه‌بردار بهنجارشده \hat{A} وابسته به ویژه‌مقدار a_i باشد. در نتیجه می‌نویسیم

$$\hat{B}|a_i\rangle = b_i|a_i\rangle \quad (41-3)$$

که در آن b_i به عنوان یک ضریب تناسب وارد شده است. چون هردو عملگر ناتبهمگن فرض شده‌اند، $(41-3)$ ایجاب می‌کند که $|a_i\rangle$ یک ویژه‌بردار \hat{B} وابسته به ویژه‌مقدار b_i نیز باشد، و قرار می‌دهیم

$$|a_i\rangle = |b_i\rangle = |a_i, b_i\rangle$$

بدین طریق ثابت کردیم که ویژه‌پایه‌های یکتای دو عملگر هرمیتی جایه‌جاپذیر، یکسان‌اند. اگر یکی از عملگرها یا هردو تبهمگن باشند، اثبات قضیه ۵ در آخرین مرحله با شکست مواجه می‌شود. در این حالت بردار $|a_i\rangle$ می‌تواند یک ترکیب خطی از ویژه‌بردارهای تبهمگن \hat{A} باشد.

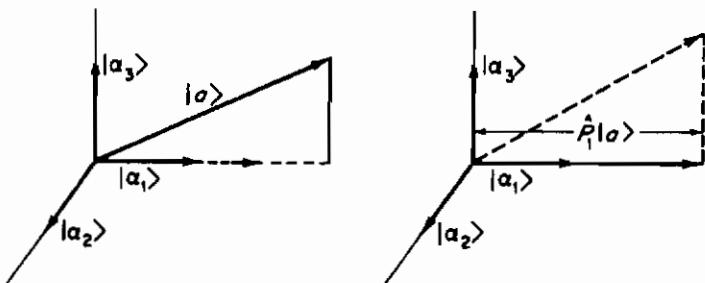
قضیه ۶ – هردو عملگر جایه‌جاپذیر دارای حداقل یک مجموعه ویژه‌بردارهای راست هنجار‌اند، حتی اگر تبهمگن باشند.

اثبات این قضیه با روش ساختن انجام می‌گیرد و در اینجا آورده نخواهد شد. کافی است بگوییم اگر \hat{A} و \hat{B} جایه‌جاپذیر و تبهمگن باشند، هرکدام از آنها چند ویژه‌پایه متطابق دارند و تمام ویژه‌پایه‌های \hat{A} بر ویژه‌پایه‌های \hat{B} منطبق نیستند. با این وجود، اگر دو عملگر جایه‌جاپذیر باشند، باید حداقل یک ویژه‌پایه مشترک برای آنها وجود داشته باشد. قضایای ۴ تا ایجاد می‌کنند که هر مجموعه‌ای از عملگرهای جایه‌جاپذیر حداقل در یک ویژه‌پایه مشترک‌اند. ماتریس‌های این عملگرها در این پایه مشترک به‌طور همزمان قطری هستند.

۶ – عملگر تصویرگر

اگر هر بردار دلخواه بتواند توسط یک‌پایه راست‌هنجار معین نمایش داده شود، گوییم

که این پایه کامل است. به عنوان مثال، بردارهای پیکه $|\alpha_1\rangle$ و $|\alpha_2\rangle$ برای نمایش بردارهای واقع در فضای سه‌بعدی حقیقی ناکامل‌اند؛ بردار a برای نمایش مولفه z لازم است. موجه به نظر می‌رسد که اگر برداری متعلق به یک فضای N بعدی باشد، هر مجموعه N برداریکه‌ای که متقابلاً متعامد باشند یک پایه کامل تشکیل می‌دهد، یعنی، این بردارها فضا را ایجاد می‌کنند. اما مفید خواهد بود که این ویژگی کامل بودن را به شکل ریاضی بیان کنیم. با هر بردار $\langle\alpha|$ از یک پایه راست‌هنگار، یک عملکر تصویرگر \hat{P}_j وارد می‌کنیم. تاثیر \hat{P}_j روی یک بردار دلخواه $|a\rangle$ در فضا عبارت است از ایجاد یک بردار جدید که جهت آن در جهت بردار پایه $\langle\alpha|$ و بزرگی آن برابر با $\langle\alpha|a\rangle$ باشد (شکل ۱-۳).



شکل (۱-۳)

از نظر ریاضی، عمل تصویرگر عبارت است از

$$\hat{P}_j|a\rangle = (\langle\alpha_j|a\rangle)|\alpha_j\rangle = |\alpha_j\rangle(\langle\alpha_j|a\rangle) \quad (42-3)$$

با استفاده از قانون شرکت‌پذیری، طرفهای راست و چپ به صورت زیر بهم مربوطند

$$\hat{P}_j|a\rangle = (|\alpha_j\rangle\langle\alpha_j|)|a\rangle$$

چون $\langle a|$ کاملاً دلخواه است، نتیجه می‌گیریم

$$\hat{P}_j = |\alpha_j\rangle\langle\alpha_j| \quad (43-3)$$

ضرب یک برآ از طرف چپ در یک کت به ضرب دیگری موسوم است و متناظر با ضرب یک ماتریس سطری، از طرف چپ، در یک ماتریس ستونی است. اگر بردار $\langle\alpha|$ در یک پایه دیگر به صورت

$$|\alpha_j\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_j^{(1)} \\ \vdots \\ \alpha_j^{(N)} \end{pmatrix} \quad , \quad \langle \alpha_j | = (\alpha_j^{*(1)} \cdots \alpha_j^{*(N)})$$

بیان شود ، \hat{P}_j به وسیله ماتریس هرمیتی زیر نمایش داده می شود

$$\hat{P}_j = |\alpha_j\rangle\langle \alpha_j| \rightarrow \begin{pmatrix} \alpha_j^{(1)} \\ \vdots \\ \alpha_j^{(N)} \end{pmatrix} (\alpha_j^{*(1)} \cdots \alpha_j^{*(N)}) = \begin{pmatrix} \alpha_j^{(1)}\alpha_j^{*(1)} \cdots \alpha_j^{(1)}\alpha_j^{*(N)} \\ \alpha_j^{(N)}\alpha_j^{*(1)} \cdots \alpha_j^{(N)}\alpha_j^{*(N)} \end{pmatrix} \quad (44-3)$$

توجه کنیم که وقتی \hat{P}_j روی $|\alpha\rangle$ عمل کند همان بردار را ایجاد می کند . از طرف دیگر ، چون بردارهای دیگر پایه بر $|\alpha\rangle$ عموداند نتیجه عمل تصویرگر بروی آنها صفر است . بنابراین ، بردارهای پایه ، ویژه بردارهای \hat{P}_j با ویژگی زیر می باشند

$$\hat{P}_k|\alpha_j\rangle = \delta_{kj}|\alpha_j\rangle \quad (j, k = 1, \dots, N)$$

چون این N عملگر تصویرگر دارای یک ویژه پایه مشترک ($|\alpha_j\rangle$) هستند ، دو بهدو جایه جا پذیراند (قضیه ۴) . در این پایه تمام آنها قطری هستند و دارای شکل ماتریسی زیراند

$$\hat{P}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad \hat{P}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$\hat{P}_N = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots 1 \end{pmatrix}$$

بالاخره یک پایه در صورتی کامل است که هر بردار دلخواهی از فضای بتواند به صورت

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= \sum_{j=1}^N (\langle \alpha_j | \alpha \rangle) |\alpha_j\rangle \\ &= \sum_{j=1}^N |\alpha_j\rangle \langle \alpha_j | |\alpha\rangle = \sum_{j=1}^N \hat{P}_j |\alpha\rangle \end{aligned} \quad (45-3)$$

نمایش داده شود . چون این بسط برای هر بردار دلخواه a معتبر است ، رابطه کامل بودن (یا بستاری) خواهد شد

$$\sum_{j=1}^N \hat{P}_j = \sum_{j=1}^N |\alpha_j\rangle\langle\alpha_j| = \hat{1} \quad (46-3)$$

همیشه فرض خواهیم کرد که N ویژه‌بردار راست‌هنگار یک عملگر هرمیتی ، کامل‌اند و در (۴۶-۳) صدق می‌کنند .

۷- اصول موضوع مکانیک کوانتومی

بعد از مرور خواص لازم عملگرها و بردارها در یک فضای خطی ، اکنون می‌توان اساس مکانیک کوانتومی را در نمادگذاری دیراک گسترش داد .

اصل موضوع ۱- به هر مشاهده‌پذیر دینامیکی (به عنوان مثال ، انرژی ، تکانه خطی ، تکانه زاویه‌ای) ، در یک فضای مختلط ، یک عملگر هرمیتی خطی که خواص آن طبیعت کوانتومی این مشاهده‌پذیر را بیان می‌کند ، نسبت می‌دهیم . (تعداد ابعاد فضای در همینجا مورد بحث قرار خواهد گرفت) .

بنابراین ، به متغیرهای دکارتی بندادی x و p وابستگی‌های زیر را نسبت می‌دهیم

$$x \rightarrow \hat{x} = \hat{x}^\dagger, \quad p \rightarrow \hat{p} = \hat{p}^\dagger \quad (47-3)$$

به هر تابع جبری از این متغیرها تابع عملگری متناظر آنرا نسبت می‌دهیم . به عنوان مثال ، عملگرهای وابسته به انرژی جنبشی و مولفه‌های تکانه زاویه‌ای ذرخ خواهند شد

$$\hat{T} = \frac{(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2)}{2m} \quad (\hat{p}_x^2 = \hat{p}_x \hat{p}_x)$$

و

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \quad \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z, \quad \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$$

* اصول موضوع فهرست شده لزوماً به ترتیب اهمیت نیامده‌اند بلکه به ترتیبی آمده‌اند که گمان می‌رود از نظر آموزشی بهترین باشد .

توجه کنیم که هرتابع علگری غیرجبری باید توسط سری تیلور آن تعریف شود . به عنوان مثال تابع علگری نمائی به وسیله سری بینهاست

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} x^n$$

تعریف می شود .

اصل موضوع ۲ - رابطه جابه جایی بین علگرهای وابسته به دو مشاهده پذیر کلاسیکی از کروشه پواسن آن مشاهده پذیرها ، با استفاده از تناظر

$$\{A, B\} \rightarrow \frac{[\hat{A}, \hat{B}]}{i\hbar} \quad (48-۳)$$

به دست می آید .

در زیر خواهیم دید که این تناظر به معادلات کوانتومی حرکتی منجر خواهد شد که با معادلات به دست آمده در مکانیک کلاسیک سازگاراند . توجه کنیم که این "تناظر صریحاً" ثابت پلانک ، ثابت بنیادی نظریه کوانتومی ، را وارد می کند . اما ارتباط بین کروشه پواسن و جابه جاگر عدد موهمی را نیز دخالت می دهد . همان طور که خواهیم دید بخش بزرگی از ریاضیات نظریه کوانتومی توابع مختلف را در بر دارد .

از روابط کروشه پواسن برای متغیرهای بندادی (۲۲-۲) ، روابط جابه جایی بنیادی علگرهای مکان و تکانها به صورت زیر به دست خواهیم آورد

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \hat{I} \delta_{ij} \\ [\hat{x}_i, \hat{x}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \quad (x_1 = x, \quad x_2 = y, \quad x_3 = z) \quad (49-۳)$$

نتیجه می شود که اگر کروشه پواسن دو مشاهده پذیر صفر باشد ، جابه جاگر متناظر صفر است و علگرها جابه جاپذیراند .

اصل موضوع ۳ - مقادیر کوانتومی مجاز هر مشاهده پذیر به وسیله ویژه مقدارهای علگر متناظر با آن تعیین می شوند . هر اندازه گیری از سیستم به یکی از این مقادیر منجر خواهد شد .

به عنوان مثال ، فرض کنیم علگر \hat{H} متناظر با هامیلتونی (انرژی) سیستم باشد . هر اندازه گیری انرژی منجر به یکی از ویژه مقدارهای \hat{H} ، که آنرا E می نامیم ، خواهد شد .

بنابراین به محض اینکه ویژگیهای عملگر \hat{A} ، وابسته به یک مشاهده‌پذیر، معلوم شدند، ویژه مقدارهای a_i مقادیر کوانتیده این مشاهده‌پذیر را تعیین می‌کنند. چون این ویژه مقدارها مستقیماً "قابل اندازه‌گیری هستند، باید حقیقی باشند. طبیعت هرمیتی عملگرهای منتب به مشاهده‌پذیرها حقیقی بودن این ویژه مقدارها را تضمین می‌کند (قضیه ۱) .

اصل موضوع ۴- حالت هرسیتم فیزیکی بهوسیله یک بردار حالت با طول واحد در یک فضای مختلط مشخص می‌شود. بعلاوه، اگر سیستم بهوسیله یک بردار $|\beta\rangle$ مشخص شده باشد و یک اندازه‌گیری از یک مشاهده‌پذیر \hat{A} انجام گیرد، در این صورت احتمال مشاهده سیستم با مقدار مشخصه a_i بهوسیله

$$\mathcal{P}_\beta(a_i) = |\langle a_i | \beta \rangle|^2 \leq 1 \quad (\langle \beta | \beta \rangle = 1) \quad (50-۳)$$

داده می‌شود.

اصل موضوع ۴، از این نظر که دقتوی را که با آن می‌توانیم حالت یک سیستم مکانیکی را تشریح کنیم محدود می‌کند، بسیار جالب است. معادله (۵۰-۳) ایجاب می‌کند که جنبه احتمالاتی سیستم بهوسیله β جهت‌گیری نسبی بردار حالت نسبت به ویژه بردارهای مختلف عملگرهای متناظر با مشاهده‌پذیرها تعیین شود. توجه کنیم که احتمالات شامل کمیتهای نرده‌ای (حاصل ضربهای داخلی) هستند و بنابراین از هر پایه‌ای که برای نمایش به کار می‌رود مستقل‌اند. با جمع بندی روی تمام مقادیر ممکن a_i ، می‌نویسیم

$$\begin{aligned} \sum_i \mathcal{P}_\beta(a_i) &= \sum_i |\langle a_i | \beta \rangle|^2 \\ &= \sum_i \langle \beta | a_i \rangle \langle a_i | \beta \rangle = \langle \beta | \left\{ \sum_i |a_i\rangle \langle a_i| \right\} | \beta \rangle \end{aligned}$$

با فرض اینکه ویژه‌پایه \hat{A} کامل است، $\sum_i |a_i\rangle \langle a_i| = \hat{I}$ ، خواهیم داشت

$$\sum_i \mathcal{P}_\beta(a_i) = \langle \beta | \beta \rangle = 1$$

بنابراین، شرط بهنجاربودن بردار حالت $|\beta\rangle$ منجر به بهنجاربودن احتمال می‌شود. یک طریقه دیگر تعبیر جنبه‌های احتمالاتی نظریه کوانتومی این است که فرض کنیم سیستم مورد مطالعه "علا" از بسیاری زیر سیستمهای کوانتومی میکروسکوپیکی یکسان تشکیل شده است. اگر سیستم بهوسیله $|\beta\rangle$ مشخص شده باشد،

$$\mathcal{P}_\beta(a_i) = |\langle a_i | \beta \rangle|^2 \quad (51-3)$$

می‌تواند به عنوان کسری از زیر سیستمها با مقدار مشخصه a_i تعبیر شود . میانگین یا مقدار قابل انتظار چند اندازه‌گیری از یک مشاهده‌پذیر \hat{A} ، وقتی سیستم به وسیله $\langle \beta |$ مشخص شده باشد ، با

$$\overline{A_\beta} = \sum_i \mathcal{P}_\beta(a_i) a_i / \sum_i \mathcal{P}_\beta(a_i) \quad (52-3)$$

داده می‌شود . چون احتمال ب亨جارت شده فرض شده است ، مخرج برابر است با یک . توجه کنیم که این مقدار قابل انتظار ، برای a_i حقیقی ، یعنی برای عملگرهای هرمیتی ، همیشه حقیقی است .

بهتر است که مقدار قابل انتظار را به صورت زیر بنویسیم

$$\begin{aligned} \overline{A_\beta} &= \sum_i \mathcal{P}_\beta(a_i) a_i = \sum_i (\langle \beta | a_i \rangle) (\langle a_i | \beta \rangle) a_i = \sum_i \langle \beta | a_i | a_i \rangle \langle a_i | \beta \rangle \\ \text{اما ، چون} \quad \hat{A} | a_i \rangle &= a_i | a_i \rangle \quad \text{خواهیم داشت} \end{aligned}$$

$$\overline{A_\beta} = \sum_i \langle \beta | \hat{A} | a_i \rangle \langle a_i | \beta \rangle = \langle \beta | \hat{A} \left(\sum_i | a_i \rangle \langle a_i | \right) | \beta \rangle$$

با فرض کامل بودن ویژه پایه \hat{A} ، مقدار قابل انتظار در نهایت خواهد شد

$$\overline{A_\beta} = \langle \beta | \hat{A} | \beta \rangle$$

از این به بعد نمادگذاری زیر را می‌پذیریم

$$\overline{A_\beta} = \langle A \rangle_\beta = \langle \beta | \hat{A} | \beta \rangle \quad (53-3)$$

مقدار قابل انتظار یک مشاهده‌پذیر \hat{A} در حالت $\langle \beta |$ به وسیله ساختن " ساندویچی " از بردارهای حالت برا و کت ، که عملگر در وسط آنها قرار دارد ، به دست می‌آید . برای تشریح میزان انحراف یک اندازه‌گیری کاتورهای از مقدار قابل انتظار ، عدم قطعیت یا انحراف ریشه میانگین مربعی یک اندازه‌گیری A (وقتی سیستم با $\langle \beta |$ مشخص شده است) را به وسیله

$$\begin{aligned}\Delta A_\beta &= [\langle \beta | (\hat{A} - \langle A \rangle_\beta)^2 | \beta \rangle]^{1/2} \\ &= [\langle \beta | \hat{A}^2 | \beta \rangle - 2\langle A \rangle_\beta \langle \beta | \hat{A} | \beta \rangle + \langle A \rangle_\beta^2]^{1/2} \\ &= [\langle A^2 \rangle_\beta - \langle A \rangle_\beta^2]^{1/2}.\end{aligned}\quad (54-۳)$$

تعریف می‌کنیم . عدم قطعیت عبارت است از ریشه دوم تفاضل بین میانگین مربعی و مربع میانگین \hat{A} .

اصل موضوع ۵—اگر بردار حالت سیستمی بر ویژه بردار $|a_i\rangle$ مربوط به عملگر \hat{A} منطبق باشد، می‌گوییم که سیستم در ویژه حالت عملگر \hat{A} قرار دارد . احتمال اینکه یک اندازه‌گیری منجر به مقدار a_i برای مشاهده‌پذیر \hat{A} شود برابر با یک است

$$|\langle a_i | \beta \rangle|^2 = |\langle a_i | a_i \rangle|^2 = 1$$

مقدار قابل انتظار \hat{A} در یکی از ویژه حالت‌های آن ، بطور بدیهی ، عبارت است از

$$\langle A \rangle_i = \langle a_i | \hat{A} | a_i \rangle = a_i$$

علاوه چون **

$$\hat{A}^2 |a_i\rangle = \hat{A}\hat{A}|a_i\rangle = a_i^2 |a_i\rangle$$

نتیجه می‌گیریم که عدم قطعیت اندازه‌گیری باید برابر باشد با

$$\langle A^2 \rangle_i - \langle A \rangle_i^2 = a_i^2 - a_i^2 = 0$$

وقتی سیستمی در یک ویژه حالت یک مشاهده‌پذیر عملگری قرار دارد ، گفته می‌شود که این مشاهده‌پذیر بندادی "کاملاً" معنی یا دقیق است .

عدم قطعیت‌های واپسیه به اندازه‌گیریهای همزمان دو مشاهده‌پذیر \hat{A} و \hat{B} با جابه‌جاگر عملگرها رابطه دارد . اگر \hat{A} و \hat{B} جابه‌جاپذیر باشند ، از قضیه نتیجه می‌شود که دارای

* این یک اصل موضوع جدید نیست ، بلکه اساساً از اصل موضوع ۴ نتیجه می‌شود . به خاطر اهمیت آن ، ما آنرا جداگانه شماره‌گذاری کردی‌ایم .

*** رابطه $\hat{A}^n |a_i\rangle = a_i^n |a_i\rangle$ را می‌توان به صورت $F(\hat{A})|a_i\rangle = F(a_i)|a_i\rangle$ تعمیم داد ، با استفاده از تعریف تابع عملگری غیر جبری ، داریم

حداقل یک مجموعه ویژه حالت‌های مشترک هستند. در هر کدام از این حالت‌ها \hat{A} و \hat{B} هردو می‌توانند با دقت کامل، یعنی، با عدم قطعیت صفر، اندازه‌گیری شوند (اصل موضوع ۵). از طرف دیگر، اگر \hat{A} و \hat{B} جابه‌جاپذیر نباشند، هیچ ویژه حالت مشترکی وجود ندارد (نتیجه قضیه ۴). در نتیجه، هیچ حالت فیزیکی‌ای که در آن A و B بتوانند به‌طور همزمان بادقت کامل اندازه‌گیری شوند وجود ندارد. به‌این دلیل گفته می‌شود که عملگرهای جابه‌جاپذیر سازگاراند. بحث فوق به‌وسیله قضیه زیر به‌طور ریاضی فرمولبندی می‌شود.

قضیه ۷ (اصل عدم قطعیت‌های زنبرگ) – اگر سه مشاهده‌پذیر عملگری هر میتی در رابطه جابه‌جائی

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C} \quad (55-۳)$$

صدق گنند، بدون توجه به حالت سیستم، $|\beta\rangle$ ، نتایج اندازه‌گیری‌های این مشاهده‌پذیرها باید با نامساوی هایزنبرگ، یعنی

$$\Delta A_\mu \Delta B_\mu \geq \frac{1}{2} \langle C \rangle_\mu \quad (56-۳)$$

مطلوب است داشته باشد.
اثبات – با استفاده از نامساوی شوارتز^۴

$$\langle \gamma | \gamma \rangle \langle \delta | \delta \rangle \geq |\langle \gamma | \delta \rangle|^2 \quad , \quad |\langle \delta | - \rangle|^2 \quad (57-۳)$$

شروع می‌کنیم. اثبات این نامساوی را می‌توان در اغلب متن‌های متعارف در مورد فضاهای برداری خطی پیدا کرد (رک مسئله ۳-۶). در یک فضای سه‌بعدی حقیقی، نامساوی شوارتز به صورت

$$a^2 b^2 \geq (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^2 = a^2 b^2 \cos^2 \theta$$

در می‌آید. این نامساوی مطمئناً در فضای حقیقی معتبر است زیرا $1 \leq \cos^2 \theta \leq 1$. برای اثبات این قضیه قرار می‌دهیم

$$|\gamma\rangle = (\hat{A} - \langle A \rangle_\mu) |\beta\rangle$$

$$|\delta\rangle = (\hat{B} - \langle B \rangle_\mu) |\beta\rangle$$

بنابراین

$$\langle \gamma | \gamma \rangle = \langle \beta | (\hat{A} - \langle A \rangle_\beta)(\hat{A} - \langle A \rangle_\beta) | \beta \rangle = \langle \beta | (\hat{A} - \langle A \rangle_\beta)^2 | \beta \rangle = (\Delta A_\beta)^2$$

و

$$\langle \delta | \delta \rangle = \langle \beta | (\hat{B} - \langle B \rangle_\beta)(\hat{B} - \langle B \rangle_\beta) | \beta \rangle = \langle \beta | (\hat{B} - \langle B \rangle_\beta)^2 | \beta \rangle = (\Delta B_\beta)^2$$

با استفاده از نامساوی شوارتز نتیجه می‌گیریم

$$\begin{aligned} (\Delta A_\beta)^2 (\Delta B_\beta)^2 &= \langle \gamma | \gamma \rangle \langle \delta | \delta \rangle \\ &\geq |\langle \gamma | \delta \rangle|^2 = |\langle \beta | (\hat{A} - \langle A \rangle_\beta)(\hat{B} - \langle B \rangle_\beta) | \beta \rangle|^2 \end{aligned} \quad (58-3)$$

عملگر غیر هرمیتی $\hat{G} = (\hat{A} - \langle A \rangle_\beta)(\hat{B} - \langle B \rangle_\beta)$ را به صورت

$$\hat{G} = \hat{D} + \frac{1}{2}i\hat{C}$$

تجزیه می‌کنیم*، که در آن

$$\hat{D} = \frac{(\hat{A} - \langle A \rangle_\beta)(\hat{B} - \langle B \rangle_\beta) + (\hat{B} - \langle B \rangle_\beta)(\hat{A} - \langle A \rangle_\beta)}{2}$$

و

$$\hat{C} = \frac{(\hat{A} - \langle A \rangle_\beta)(\hat{B} - \langle B \rangle_\beta) - (\hat{B} - \langle B \rangle_\beta)(\hat{A} - \langle A \rangle_\beta)}{i} = \frac{[\hat{A}, \hat{B}]}{i}$$

عملگرهای \hat{D} و \hat{C} هردو هرمیتی‌اند. چون $\langle D \rangle_\beta$ و $\langle C \rangle_\beta$ هردو حقیقی‌اند، $(58-3)$ به صورت

$$\begin{aligned} (\Delta A_\beta)^2 (\Delta B_\beta)^2 &\geq |\langle G \rangle_\beta|^2 = |\langle D \rangle_\beta + \frac{1}{2}i\langle C \rangle_\beta|^2 \\ &= \langle D \rangle_\beta^2 + \frac{1}{4}\langle C \rangle_\beta^2 \geq \frac{1}{4}\langle C \rangle_\beta^2 \end{aligned}$$

یا، بالاخره، به صورت

* حاصلضرب دو عملگر هرمیتی یک عملگر غیر هرمیتی است مگر اینکه دو عملگر جابه‌جا‌ذیر باشند

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = (\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger) = (\hat{B}\hat{A}) \neq (\hat{A}\hat{B})$$

$$\Delta A_\beta \Delta B_\beta \geq \frac{1}{2} \langle C \rangle_\beta \quad (59-3)$$

در می‌آید.

اصل هایزنبرگ مقدار حاصل ضرب $\Delta A \Delta B$ در یک حالت را معلوم نمی‌کند، بلکه حد پائینی این حاصل ضرب را برابر با $\langle C \rangle = \frac{1}{2}$ بدست می‌دهد. اگر دو عملگر جابه‌جاپذیر باشند ($C = 0$)، حد پائینی حاصل ضرب عدم قطعیت‌های وابسته به اندازه‌گیری‌های A و B صفر است. این نتیجه با بحث فوق سازگار است.

از روابط جابه‌جاپی بنیادی

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij} \hat{I}$$

و

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$$

نتیجه می‌گیریم که $\Delta x_i \Delta p_j \geq 0$ ، $\Delta x_i \Delta x_j \geq 0$ ، $\Delta p_i \Delta p_j \geq 0$. بنابراین، به عنوان مثال، عملگرهای \hat{x} و \hat{p} "کاملاً" ناسازکاراند و حالتی وجود ندارد که در آن حاصل ضربی‌های عدم قطعیت‌های آنها کمتر از 0 باشد. این نکته ایجاب می‌کند که اگر تکانه یک ذره را دقیقاً بدانیم، قادر نخواهیم بود با هیچ دقیقی موضع آن را تعیین کنیم.

اگر سیستم در یک حالتی که بوسیله $\langle \beta |$ مشخص شده است قراردادشته باشد، ویژگی‌های دینامیکی آن به طور احتمالاتی تعیین خواهند شد. فرض کنیم M سیستم اتمی یکسان‌داریم که همه در حالت $\langle \beta |$ قرار دارند. هم‌چنین فرض کنیم آشکارسازی داریم که مشاهده‌پذیر \hat{A} را اندازه‌گیری می‌کند. وقتی "A سنج" به اولین سیستم اعمال شود، احتمال اینکه مقدار a را بخواند عبارت است از $|\langle a_i | \beta \rangle|^2$ ، اما، وقتی اندازه‌گیری انجام شد و آشکارساز a را ثبت کرد، در این صورت بعد از اندازه‌گیری، می‌دانیم که اولین سیستم اتمی دارای مقدار معین a است. در نتیجه، تاثیر اندازه‌گیری، بعد از اینکه ثبت a انجام شد، عبارت است از وادارکردن سیستم به انتقال از حالت اولیه آن $\langle \beta |$ به حالت جدید $\langle a_i |$. به طور معادل، تاثیر یک اندازه‌گیری واقعی \hat{A} عبارت است از انتقال اجباری سیستم به یک ویژه حالت \hat{A} که متناظر با مقدار خوانده شده است. بدین طریق، یک دستگاه اندازه‌گیری مثل یک صافی عمل می‌کند و بردار حالت را روی ویژه حالت وابسته به مشاهده‌پذیر اندازه‌گیری شده تصویر می‌کند. ذهن دانشجو ممکن است با این واقعیت که وقتی اندازه‌گیری انجام می‌شود حالت سیستم به هم می‌خورد، مغشوش شود. خوشبختانه این مسئله فقط موزشی است

زیرا فرض کرده‌ایم که حالت اتمی تکرارپذیر است، یعنی، $1 - M$ -سیستم اتمی دیگر داریم که درست مثل آن هستند. درحالی‌که حالت تعدادی از سیستم‌ها ممکن است در اثر اندازه‌گیری بهم خورده باشد، اطلاعات به دست آمده به آن سیستم‌هایی که هنوز اندازه‌گیری نشده‌اند قابل اعمال است*.

۸- دینامیک کوانتومی

جهت بردار حالت در هر لحظه طبیعت آماری سیستم فیزیکی را تعیین می‌کند. وقتی این بردار در فضای مختلط می‌چرخد، مشخصه‌های فیزیکی سیستم با زمان تغییر می‌کنند. برای پیداکردن معادله حرکت بردار حالت، که آنرا به صورت $\langle \beta, t | \beta, t \rangle$ می‌نویسیم، نخست باید یک تناظر دینامیکی با مکانیک کلاسیکی برقرار کنیم. بنابراین، خواهیم خواست که تناظری بین مقدار قابل انتظار یک مشاهده‌پذیر کوانتومی و تابع کلاسیکی متناظر با آن وجود داشته باشد، یعنی،

$$\langle \beta, t | \hat{A} | \beta, t \rangle = \langle A(t) \rangle_{\beta} \leftrightarrow A_{\text{class}}(t) \quad (60-۲)$$

به طور معادل، انتظار داریم که معادله حرکت $\langle A(t) \rangle_{\beta}$ ، که در اثر چرخش $\langle \beta, t | \beta, t \rangle$ ایجاد شده است، شبیه به معادله حرکت تابع کلاسیکی $A_{\text{class}}(t)$ باشد. این شرط به قضیه‌های رنفست موسوم است. بنابراین، با قیاس با شکل کلاسیکی معادله حرکت (۶۰-۲)، معادله حرکت برای مقدار قابل انتظار یک عملگر را به صورت زیر وضع می‌کنیم

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle A(t) \rangle_{\beta} &= \frac{d}{dt} \langle \beta, t | \hat{A} | \beta, t \rangle \\ &= \langle \beta, t | \frac{[\hat{A}, \hat{\mathcal{H}}]}{i\hbar} | \beta, t \rangle + \langle \beta, t | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \beta, t \rangle \end{aligned} \quad (61-۲)$$

* برای یک بررسی مقدماتی بسیار جالب از فرایند اندازه‌گیری به کتاب زیر مراجعه کنید.

R.P. Feynman, R.B. Leighton and M. Sands, "The Feynman Lectures on physics", Vol. 3, Chapters 1 and 2. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1964.

بستگی زمانی $\langle A(t) \rangle$ از بستگی ضمنی، یعنی، تغییرات $\langle \beta \rangle$ و همچنین احیاناً "از بستگی صریح در خود عملگر، نشأت می‌گیرد. ما فقط در موارد نادری عملگرهایی با بستگی صریح به زمان در نظر خواهیم گرفت. برای تضمین (۶۱-۲)، اصل موضوع زیر را ارائه می‌دهیم.

اصل موضوع ع. حرکت بردار حالت یک سیستم فیزیکی به وسیله معادله حرکت شرودینگر که، در شکل کت، عبارت است از

$$\hat{\mathcal{H}} |\beta, t\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\beta, t\rangle \quad (62-2)$$

یا، در شکل برا، عبارت است از

$$\langle \beta, t | \hat{\mathcal{H}} = -i\hbar \frac{d}{dt} \langle \beta, t | \quad (\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}^\dagger)$$

تعیین می‌شود که در آن $\hat{\mathcal{H}}$ عملگر هامیلتونی سیستم است. برای تحقیق اینکه معادله حرکت شرودینگر واقعاً به (۶۱-۳) منجر می‌شود، مشتق گرفته و نتیجه می‌گیریم

$$\frac{d}{dt} \langle \beta, t | \hat{A} |\beta, t \rangle = \langle \beta, t | \hat{A} \left\{ \frac{d}{dt} |\beta, t\rangle \right\} + \left\{ \frac{d}{dt} \langle \beta, t | \right\} \hat{A} |\beta, t\rangle + \langle \beta, t | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} |\beta, t\rangle$$

جمله آخری از بستگی صریح عملگر \hat{A} به زمان سرچشمه می‌گیرد. با به کار گرفتن شکل‌های کت و برای معادله شرودینگر، خواهیم داشت

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \beta, t | \hat{A} |\beta, t \rangle &= \langle \beta, t | \hat{A} \left\{ \frac{1}{i\hbar} \hat{\mathcal{H}} |\beta, t\rangle \right\} \\ &\quad + \left\{ -\frac{1}{i\hbar} \langle \beta, t | \hat{\mathcal{H}} \right\} \hat{A} |\beta, t\rangle + \langle \beta, t | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} |\beta, t\rangle \end{aligned}$$

یا

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle_\beta = \left\langle \frac{[\hat{A}, \hat{\mathcal{H}}]}{i\hbar} \right\rangle_\beta + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle_\beta \quad (63-3)$$

که همان چیزی است که می‌خواستیم. باید تاکید شود که "تصویر" شرودینگر که در آن بردار حالت می‌چرخد (تحول می‌پابد. م.) تنها یکی از چند طریقی است که با آنها (۶۳-۳) حاصل می‌شود. همچنین ممکن است تصویری

داشته باشیم که در آن بردار حالت مانا بماند و اجازه دهد که ویژه بردارهای \hat{A} (هم‌چنین خود \hat{A}) طوری تغییر کند که مقادیر قابل انتظار مطابق با (۶۳-۳) تغییر کنند. این نمایش حرکت کوانتومی به تصویرهای زنگ مشهور است. در یک تصویر سوم، تصویر برهمنشی، هم بردارهای حالت وهم ویژه بردارهای \hat{A} به طریقی حرکت می‌کنند که (۶۳-۳) را محفوظ نگاه می‌دارند (به پیوست ب مراجعه کنید). ما کلا "در" تصویر شرودینگر" کار خواهیم کرد.

به عنوان یک نتیجه از (۶۳-۳) توجه کنیم که اگر یک عملگر \hat{A} به طور صریح به زمان بستگی نداشته باشد (یعنی، $\partial\hat{A}/\partial t = 0$) مقدار قابل انتظار آن در صورتی ثابت خواهد بود که با هامیلتونی جابه‌جاذیز باشد، یعنی، داشته باشیم $[\hat{A}, \hat{\mathcal{H}}] = 0$

جواب معادله شرودینگر (۶۲-۳) می‌تواند به‌طور صریح به صورت

$$|\beta, t\rangle = \left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(t - t_0)\right) \right] |\beta, t_0\rangle \quad (64-3)$$

نوشته شود به شرط این که $\hat{\mathcal{H}}$ مستقل از زمان باشد. کت $|\beta, t_0\rangle$ بیانگر حالت اولیه سیستم در $t_0 = t$ است. برای تحقیق این جواب، از هردو طرف نسبت به زمان مشتق می‌گیریم و خواهیم داشت

$$\frac{d}{dt} |\beta, t\rangle = \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(t - t_0)\right) \right] |\beta, t_0\rangle$$

با استفاده از (۶۴-۳)، معادله فوق خواهد شد

$$\frac{d}{dt} |\beta, t\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} |\beta, t\rangle$$

که همان معادله حرکت خواسته شده است.

تحول زمانی در (۶۴-۳) را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$|\beta, t\rangle = U(t, t_0) |\beta, t_0\rangle$$

که در آن عملگر تحول عبارت است از

$$U(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(t - t_0)\right) \quad (65-3)$$

در موردی که \hat{H} به زمان بستگی داشته باشد عملگر تحول نمی‌تواند به صورت (۶۵-۳) نوشته شود . می‌توان نشان داد که عملگر تحول در معادله انتگرالی زیر صدق می‌کند

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{I} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t \hat{\mathcal{H}}(\tau_1) \hat{U}(\tau_1, t_0) d\tau_1 \quad (66-3)$$

می‌توان مستقیماً ثابت کرد که وقتی \hat{H} مستقل از زمان باشد ، (۶۵-۳) در (۶۶-۳) صدق می‌کند .

اصول موضوع و قضایای فوق را با یک مثال ساده ولی فرضی مصور می‌کنیم . دو مشاهده - پذیر وابسته بهمیک ذره را به ترتیب عملگر S و عملگر I در نظر بگیریم . فرض کنیم که مقادیر مشخصه S عبارت باشند از s_1 و s_2 . هم‌چنین فرض کنیم دو حالت مشخصه I عبارت باشند از I_1 و I_2 . سپس فرض کنیم که این عملگرها در ویژه پایه S شکل‌های زیر را به خود بگیرند

$$S = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{و} \quad I = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

چون در ویژه پایه S کار می‌کنیم (S قطری است) ، ویژه‌بردارها و ویژه مقدارهای آن عبارت‌اند از

$$|s_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad , \quad s_1 = 0 \quad \text{برای}$$

و

$$|s_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad , \quad s_2 = 1 \quad \text{برای}$$

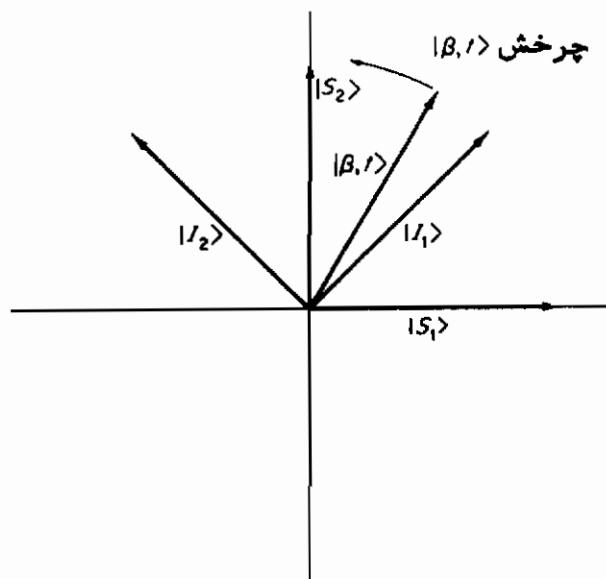
ویژه‌بردارهای I می‌توانند مستقیماً به صورت زیر به دست آیند

$$|I_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad , \quad I_1 = 0 \quad \text{برای}$$

و

$$|I_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad , \quad I_2 = 1 \quad \text{برای}$$

توجه کنیم که ویژه‌پایه‌های این دو عملگر هرمیتی نا تبهمگن متعایز‌اند (شکل ۲-۳). این مطلب می‌تواند از این واقعیت که ماتریس‌های وابسته به \hat{S} و \hat{I} جایه‌جاپذیر نیستند پیش‌بینی شود. در نتیجه، این دو عملگر ناسازگاراند و حالتی وجود ندارد که در آن هر دو به‌طور همزمان با دقت کامل تعیین شوند.



شکل (۲-۳)

فرض کنیم که در یک لحظه بردار حالت $|\beta, t\rangle$ بوسیله

$$|\beta, t\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} \end{pmatrix}$$

داده شده باشد. احتمال‌های مشاهده سیستم در حالت‌های مختلف عبارتند از

$$\mathcal{P}_\beta(s_1) = |\langle s_1 | \beta, t \rangle|^2 = \left[(1, 0) \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} \end{pmatrix} \right]^2 = (\frac{1}{2})^2 = \frac{1}{4}$$

$$\mathcal{P}_\beta(s_2) = |\langle s_2 | \beta, t \rangle|^2 = \left[(0, 1) \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} \end{pmatrix} \right]^2 = (\frac{1}{2}\sqrt{3})^2 = \frac{3}{4}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(I_1) &= |\langle I_1 | \beta, t \rangle|^2 = \left[\left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} \end{pmatrix} \right]^2 = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{3})^2 \\ &= \frac{1}{2}(4 + 2\sqrt{3}) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{3} = 0.933 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(I_2) &= |\langle I_2 | \beta, t \rangle|^2 = \left[\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\sqrt{3} \right) \right]^2 = \frac{1}{8}(-1 + \sqrt{3})^2 \\ &= \frac{1}{8}(4 - 2\sqrt{3}) = \frac{1}{2} - \frac{1}{4}\sqrt{3} = 0.067. \end{aligned}$$

مقادیر قابل انتظار هر کدام از مشاهده‌پذیرها در این حالت عبارتند از

$$\langle \beta, t | \hat{S} | \beta, t \rangle = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\sqrt{3} \right) \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} \end{pmatrix} = \frac{3}{4}$$

و

$$\langle \beta, t | \hat{I} | \beta, t \rangle = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\sqrt{3} \right) \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} \end{pmatrix} = 0.067$$

این مقادیر قابل انتظار می‌توانند به عنوان نمایش دهنده مقادیر متوسط \hat{S} و \hat{I} تعبیر شوند.
به تدریج که بردار حالت با زمان متحول می‌شود (می‌چرخد)، احتمالات و مقادیر قابل انتظار وابسته به \hat{S} و \hat{I} تغییر می‌کنند و اثرات حرکت کوانتومی را به دست می‌دهند. اگر \hat{S} و \hat{I} حقیقتاً متغیرهای بندادی بودند، می‌توانستیم هامیلتونی و عملگرهای تحول سیستم را بسازیم و تحول حالت را پیشگوئی کنیم.

۹ - حالتهای مانا

اگر در $t_0 = 0$ سیستم به وسیله یک بردار حالت $|\beta, 0\rangle = |\beta, t_0\rangle$ مشخص شده باشد تحول بعدی آن با استفاده از عمل

$$|\beta, t\rangle = U(t, 0)|\beta, 0\rangle \quad (67-3)$$

به دست می‌آید که در آن U به وسیله رابطه

$$U(t, 0) = e^{-i\omega t/\hbar}$$

به هامیلتونی سیستم مرتبط می‌شود. فرض کنیم حالت اولیه در واقع یک ویژه حالت هامیلتونی که آنرا با $|\beta, 0\rangle = |\psi, 0\rangle$ نمایش می‌دهیم، بوده باشد. در چنین حالتی اتریزی دقیقاً "برابر با ویژه مقدار متناظر" خواهد بود. با استفاده از (۶۷-۳) حالت را در زمانهای بعد به صورت

$$|\beta, t\rangle = e^{-i\omega_i t/\hbar} |\varepsilon_i\rangle$$

پس از اینکه . اما اگر $|\varepsilon_i\rangle$ یک ویژه‌بردار باشد ، باید ویژه‌بردار $e^{-i\omega_i t/\hbar} |\varepsilon_i\rangle$ با ویژه‌مقدار $e^{-i\omega_i t/\hbar}$ نیز باشد . تحول حالت خواهد شد

$$|\beta, t\rangle = e^{-i\omega_i t} |\varepsilon_i\rangle \quad (\omega_i = \varepsilon_i/\hbar)$$

ضریب نوسانی یک کمیت نرده‌ای مختلط با قدر مطلق یک است و تاثیری روی جهت بردار حالت اولیه ندارد . هم‌چنین توجه کنیم که

$$\begin{aligned} \langle \beta, t | \beta, t \rangle &= \langle \varepsilon_i | e^{i\omega_i t/\hbar} e^{-i\omega_i t/\hbar} |\varepsilon_i\rangle \\ &= \langle \varepsilon_i | \varepsilon_i \rangle = 1 \end{aligned}$$

بنابراین هنگار حالت نیز برابر با یک باقی می‌ماند . حالت $|\beta, t\rangle$ از نظر فیزیکی معادل با $|\varepsilon_i\rangle$ است و ابداً "تحولی صورت نمی‌گیرد . در نتیجه به قاعده زیر هدایت خواهیم شد . قاعده : اگر سیستمی در آغاز در یک ویژه حالت هامیلتونی (انرژی) باشد ، تا ابد در این حالت باقی خواهد ماند و تمام مقادیر قابل انتظار مشاهده‌پذیرها مانا خواهند بود . این قاعده توضیح می‌دهد چرا الکترون هیدرزنی در یکی از مدارهای بوهر تا ابد مانا می‌ماند مگر اینکه یک عامل خارجی (به عنوان مثال ، یک میدان الکترومغناطیسی) روی آن اثر کند . بر اهمیت هامیلتونی و ویژه‌حالتهای انرژی آن هرچه تاکید کنیم کم است . هامیلتونی تحول تمام حالتهای را تعیین می‌کند و به عنوان مولد جایه‌جاوی در زمان نامیده می‌شود . ویژه‌حالتهای آن ضمن اینکه حالتهای انرژی مشخصه‌اند مانا نیز هستند .

۱۰- ابعاد "فضای کوانتومی"

قضایا و اصول موضوع فوق بدون اشاره به N ، تعداد ابعاد فضا ، برقرار شدند . اکنون سه دلیل ارائه می‌کنیم که پیشنهاد می‌کنند تعداد این ابعاد باید بینهایت باشد .
نخست ، رابطه جایه‌جاوی بینیادی

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \quad (68-3)$$

را در نظر بگیریم . به سادگی می‌توان ثابت کرد که در یک فضای محدود بعدی ، رد حاصل ضرب هردو عملگری مستقل از ترتیب ضرب آنهاست . لذا نتیجه می‌شود که برای

هردو عملگری باید داشته باشیم

$$\text{Tr } \hat{A}\hat{B} - \text{Tr } \hat{B}\hat{A} = \text{Tr}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) = \text{Tr}[\hat{A}, \hat{B}] = 0$$

اما رد عملگر همانی \hat{I} لزوماً عبارت است از

$$\text{Tr } \hat{I} = N \neq 0$$

با اگرفتن رد دوطرف (۶۸-۳) به یک ناسازگاری خواهیم رسید که فقط در یک فضای بینهایت بعدی حل خواهد شد*.

ثانیاً، تعداد مقادیر مشخصه یک مشاهده‌پذیر باید با تعداد ویژه مقدارهای متمایز، که بهنوبه خود نمی‌تواند بیشتر از تعداد ابعاد فضائی باشد که عملگر در آن نمایش داده می‌شود، برابر باشد. اما تعداد مقادیر مشاهده‌شده یک مشاهده‌پذیر کلاسیکی عموماً بینهایت است. به عنوان مثال، انرژیهای مشخصه‌ای که توسط پلانک برای نوسانگر یک بعدی حدس زده شد عبارتنداز

$$\varepsilon_n = nh\nu$$

که در آن n عدد صحیحی است که از صفر تا بینهایت را می‌تواند اختیار کند. بنابراین، نمایش هامیلتونی نوسانگر، یک فضای بینهایت بعدی را طلب می‌کند.

هنوز یک دلیل سوم، و شاید مهمتری، برای لزوم یک فضای بینهایت بعدی وجود دارد. حالتهای مشخصه مکان را که با معادله

$$\Psi |r_i\rangle = r_i |r_i\rangle \quad (69-3)$$

تعیین می‌شوند در نظر بگیریم. هر کت $|r_i\rangle$ حالتی را نمایش می‌دهد که در آن ذره به طور مشخص در نقطه r_i ، یعنی، (z_i, y_i, x_i) ، در فضا قرار دارد. وقتی سیستم در یکی از این ویژه حالتها باشد عدم قطعیت ناظر بر مکان صفر است. از اصل عدم قطعیت نتیجه می‌شود که مشخصه‌های تکانه‌ای در این حالتها کاملاً "نامعین" هستند. لیکن، مشخصه‌بودن تمام نقاط در فضای اینکه اندازه‌گیری دقیق مکان ذره در هرجا امکان پذیراست یک واقعیت عینی است

* فضای بینهایت بعدی با ویژگیهایی که در بالا توصیف شد از نظر ریاضی به فضای برداری هیلبرت^۵ موسوم است.

به بیان دیگر، مکان کوانتیده نیست. معنی این مطلب این نیست که (۳-۶۹) معتبر نیست بلکه این است که طیف Ψ به جای گستته‌بودن (شمارش پذیربودن) پیوسته است*. برای نشان دادن پیوستگی طیف در (۳-۶۹) شاخص را حذف کرده و می‌نویسیم

$$\Psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) \quad (3-70)$$

چون Ψ و ψ به طور متقارن در روابط جایه‌جایی بنیادی ظاهر می‌شوند، پیوستگی طیف تکانه خطی تعجب آور نخواهد بود و می‌توان نوشت

$$\hat{\Psi}(\mathbf{p}) = \psi(\mathbf{p}) \quad (3-71)$$

در هر ویژه حالت Ψ ، ذره دقیقاً با سرعت $p/m = v$ حرکت می‌کند، اما، البته، مکان آن مبهم است. یک فضای محدود بعدی نمی‌تواند برای نمایش عملگرهایی که دارای طیف پیوسته هستند به کار رود.

دانشجو در این مرحله باید قادر باشد بردارهای گستته در یک فضای بینهایت بعدی را، با میل دادن N به سمت بینهایت، $N \rightarrow \infty$ ، از نظر مفهوم تصور کند. در یک ویژه پایه گستته عملگرها به صورت ماتریس‌هایی با بینهایت ستون و بینهایت سطر در می‌آیند. بردارهای کت به صورت ماتریس ستونی بینهایت در می‌آیند، یعنی، دارای بینهایت مولفه‌اند. ولی، نمایش یک بردار پا یک عملگر در یک ویژه پایه پیوسته نمی‌تواند مثل یک ماتریس عادی ارائه شود. بنابراین باید بهمیک چارچوب ریاضیاتی مطلق تکیه کنیم. راست‌هنگاربودن دو ویژه بردار پیوسته عملگر Ψ به صورت

$$\langle \mathbf{r}_i | \mathbf{r}_j \rangle = \delta_{ij} \rightarrow \langle \mathbf{r}' | \mathbf{r} \rangle = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \quad (3-72)$$

نوشته خواهد شد. تابع دلتای دیراگ (۳-۷۲) تعمیم مستقیمی از دلتای کرونکر می‌باشد و دارای ویژگی‌های زیر است

$$(الف) \quad \text{برای } \mathbf{r}' = \mathbf{r}, \quad \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \infty$$

$$(ب) \quad \text{برای } \mathbf{r}' \neq \mathbf{r}, \quad \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = 0$$

$$(ج) \quad \text{سطح زیرمنحنی} \int \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' = 1$$

* ویژه‌بردارهای متعلق به طیف پیوسته دارای هنجار محدود نمی‌باشند و لذا به معنی متدائل قابل ب亨جار کردن نیستند. به طور دقیقترا، این بردارها جزئی از یک فضای هیلبرت نیستند.

$$\int f(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' = f(\mathbf{r}) \quad (d)$$

ناحیه انتگرال‌گیری تمام فضا را می‌پوشاند. ویژگی آخر بدنام ویژگی "غربالی" نامیده می‌شود و بارها مورد استفاده قرار خواهد گرفت. به عنوان تعریفی که تابع دلتا را در برداشته باشد، به مسئله (۱۵-۳) مراجعه کنید.

* ۱۱- نمایش مختصه‌ای*

بسط یک بردار در ویژه پایه پیوسته ۴ با به کارگرفتن

$$|\beta, t\rangle = \sum_i \langle \mathbf{r}_i | \beta, t \rangle |\mathbf{r}_i\rangle \rightarrow \int d\mathbf{r} (\langle \mathbf{r} | \beta, t \rangle) |\mathbf{r}\rangle \quad (23-3)$$

انجام می‌گیرد. این یک تعمیم مستقیم (۴۵-۳) است که در آن به جای جمع انتگرال جایگزین شده است. چون ویژه مقدار ۴ متغیر پیوسته‌ای است، ضریب موجود در (۲۳-۳)، یعنی،

$$\Psi_\beta(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r} | \beta, t \rangle$$

می‌تواند به عنوان یک تابع پیوسته در نظر گرفته شود. با تعمیم اصل موضوع ۴، کمیت

$$|\langle \mathbf{r} | \beta, t \rangle|^2 d\mathbf{r} = |\Psi_\beta|^2 d\mathbf{r} \quad (24-3)$$

احتمال این را که سیستم در یک حجم دیفرانسیلی $d\mathbf{r}$ فضا حول نقطه ۲ یافت شود، بیان می‌کند. کمیت $|\Psi_\beta|^2 = \rho$ عبارت است از چالانی احتمال یافتن ذره در نقطه ۲ و در زمان ۲، وقتی که سیستم به وسیله $\langle \mathbf{r} | \beta, t \rangle$ مشخص شده باشد. همان‌طور که در زیر خواهیم دید (۲-۳)، Ψ_β تابع حالت سیستم نامیده می‌شود و حاوی تمام اطلاعات دینامیکی مربوط به سیستم در ویژه پایه ۴ است.

رابطه کامل بودن برای ویژه بردارهای ۴ به صورت

$$\sum_i |\mathbf{r}_i\rangle \langle \mathbf{r}_i| = \hat{1} \rightarrow \int d\mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}| = \hat{1} \quad (25-3)$$

* در نمایش تکانه‌ای، بردارها در ویژه پایه پیوسته علیرغم بسط داده می‌شوند. به مسئله ۱-۵ مراجعه کنید.

نوشته می‌شود. همیشه فرض خواهیم کرد که Ψ ناتبهکن است و در نتیجه ویژه پایه Ψ راست هنجار و یکتا است*.

کار با ویژه پایه پیوسته عملگر \hat{a} (نمایش مختصهای) دارای یک مزیت برجسته است.

در یک پایه گستته $\langle \alpha | \beta \rangle$ ، یک بردار حالت دلخواه $\langle \beta, t | \alpha, t \rangle$ بهوسیله یک مجموعه بینهاست از مولفه‌ها، یعنی

$$\beta^{(a_i)} = \langle a_i | \beta, t \rangle$$

مشخص می‌شود. از طرف دیگر، در نمایش مختصهای یک بردار حالت تنها بهوسیله یک تابع حالت پیوسته

$$\Psi_\beta(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r} | \beta, t \rangle$$

به‌طور کامل مشخص می‌شود. در مطالعه یک ذره، نمایش مختصهای محتملاً "خیلی مفیدتر است. مع ذالک، باید تاکید شود که این نمایش فقط وقتی امکان‌پذیر است که یک مشاهده‌پذیر باشد.

در نمایش مختصهای، هر بردار می‌تواند بهصورت

$$|\beta\rangle = \int \Psi_\beta(\mathbf{r}) |\mathbf{r}\rangle d\mathbf{r} \quad (3-76\text{ الف})$$

یا، به‌شکل برا، بهصورت

$$\langle \beta | = \int \Psi_\beta^*(\mathbf{r}) \langle \mathbf{r} | d\mathbf{r} \quad (3-76\text{ ب})$$

نمایش داده شود. حاصل ضرب داخلی دو بردار در نمایش مختصهای خواهد شد

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \beta \rangle &= \left\langle \int \langle \mathbf{r}' | \Psi_\alpha^*(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right\rangle \left\langle \int \Psi_\beta(\mathbf{r}) | \mathbf{r} \rangle d\mathbf{r} \right\rangle \\ &= \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \Psi_\alpha^*(\mathbf{r}') \Psi_\beta(\mathbf{r}) \langle \mathbf{r}' | \mathbf{r} \rangle \end{aligned}$$

با استفاده از راست هنجاربودن ویژه پایه Ψ (یعنی $\langle \mathbf{r}' | \mathbf{r} \rangle = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$) و ویژگی غربالی

* کامل‌بودن ویژه‌پایه Ψ همچنین برای بسط حالت‌های دلخواهی که شامل خصوصیات فضائی ذره هستند، در نظر گرفته می‌شود.

تابع دلتا، خواهیم داشت

$$\langle \alpha | \beta \rangle = \int \Psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) \Psi_{\beta}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (77-3)$$

قاعده - حاصل ضرب داخلی دو بردار حالت می‌تواند با انتگرال‌گیری از حاصل ضرب تابع
حالتهای آنها در نمایش مختصه‌ای محاسبه شود.

تابع وابسته به یک ویژه بردار $\langle a | \hat{A} | a \rangle$ از یک عملگر \hat{A} ، ویژه تابع \hat{A} نامیده می‌شود و
به صورت

$$\psi_a(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | a_i \rangle \quad (78-3)$$

نوشته می‌شود. این ویژه تابع یک ویژه حالت \hat{A} را مشخص می‌کند. هنابراین، به جای پیدا
کردن ویژه بردارهای مشاهده‌پذیرها، کافی است ویژه تابعهای وابسته به حالتهای مشخصه
متناظر را پیدا کنیم.

پیدا کردن ویژه تابعهای یک عملگر ساده‌تر از پیدا کردن ویژه بردارهای مجرد آن است
زیرا در حالی که ویژه بردارها در یک معادله ویژه مقداری برداری بینهایت بعدی صدق
می‌کنند، ویژه تابعها، همان‌طور که نشان خواهیم داد، در یک معادله دیفرانسیل صدق
می‌کنند. نمایش مکانیک کوانتومی در ویژه پایه ۴ مکانیک موجی نیز نامیده می‌شود و
نخستین بار توسط شرودینگر توسعه داده شد. بعدها "فرموله‌بندی ریاضی نظریه کوانتومی را
به زبان دیفرانسیلی مکانیک موجی بسط می‌دهیم. تمام کمیتهای فیزیکی، یعنی، حاصل -
ضربهای داخلی، احتمالات، مقادیر قابل انتظار، عدم قطعیت‌ها و غیره، بدون توجه به نوع
نمایش، دست‌نخورده می‌مانند. هر وقت ممکن باشد روی مکانیک موجی تکیه خواهیم کرد.
در مسائلی که ۴ مشاهده‌پذیر بندادی نیست، به عنوان مثال، در نمایش دادن اسپین ذاتی
و در کوانتش میدان الکترومغناطیسی، باید به جای مکانیک موجی شرودینگر فرموله‌بندی عمومی‌تر
دیراک را به کار ببریم.

۱۲- گذار به مکانیک موجی

بحث حاضر را به یک ذره منفرد که مشاهده‌پذیرهای مربوط به آن توابعی از $\hat{\rho}$ و \hat{A}
هستند محدود می‌کنیم. می‌خواهیم ویژه مقدارها و ویژه تابعهای یک تابع عملگری $\langle \hat{\rho}, \hat{A} \rangle$
را پیدا کنیم. معادله ویژه مقداری برداری عبارت است از

$$\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle \quad (79-3)$$

با ضرب داخلی $|r\rangle$ در دو طرف این معادله، معادله نرده‌ای

$$\langle r|\hat{A}|a_i\rangle = a_i\langle r|a_i\rangle = a_i\psi_{a_i}(r) \quad (80-2)$$

را به دست خواهیم آورد. با این که طرف راست شامل ویژه تابع است، هنوز روش نیست طرف چپ چه چیزی را بیان می‌کند. برای تعیین عناصر ماتریسی $\langle r|\hat{A}|a_i\rangle$ فرض می‌کنیم که عملگر به شکل

$$\hat{A}(\hat{p}, f) = \hat{G}(\hat{p}) + \hat{K}(f) \quad (81-2)$$

باشد (به عنوان مثال، \hat{A} می‌تواند عملگر هامیلتونی \hat{H} باشد که شامل یک جمله انرژی جنبشی و یک جمله انرژی پتانسیل است)، گرچه این شکل تا اندازه‌ای حالت خاص است، ولی نتایج کاملاً "عمومی باقی می‌مانند. با بردن (81-3) در (80-3)، نتیجه خواهیم گرفت

$$\langle r|\hat{G}(\hat{p})|a_i\rangle + \langle r|\hat{K}(f)|a_i\rangle = a_i\psi_{a_i}(r) \quad (82-3)$$

محاسبه جمله دوم طرف چپ ساده است. چون $|r\rangle$ یک ویژه برای $\hat{K}(f)$ است باید ویژه برای

$$\langle r|\hat{K}(r) = K(r)\langle r|$$

نمی‌باشد. معادله (82-3) خواهد شد

$$\langle r|\hat{G}(\hat{p})|a_i\rangle + K(r)\psi_{a_i}(r) = a_i\psi_{a_i}(r) \quad (83-3)$$

برای کامل کردن این تحلیل باید عنصر ماتریس $\langle r|\hat{G}(\hat{p})|a_i\rangle$ را تعیین کنیم، و این کار وقتی انجام پذیر است که تاثیر \hat{p} روی یک ویژه بردار $|r\rangle$ معلوم باشد. برای انجام این کار به قضیه زیر نیازمندیم.

قضیه ۸-عملگر \hat{x} مولد انتقال‌های بین‌هایت کوچک در امتداد محور x است*. به زبان ریاضی

دایم

* به فصل ۲ معادله (81-2) مراجعه کنید عملگر داخل پرانتر در واقع دو جمله اول بسط تیلور

$$O_{xx}(x) = \exp(-i\hat{p}_x x/\hbar)$$

که یک انتقال محدود x در امتداد محور x ها ایجاد می‌کند، می‌باشد.

$$\left\{ \hat{1} + \frac{\hat{p}_x dx}{i\hbar} \right\} |x, y, z\rangle = |x + dx, y, z\rangle \quad (84-3)$$

یعنی، تاثیر عملگر داخل پرانتز روی یک بردار حالت، $\langle z|$ ، عبارت است از انتقال ذره به اندازه dx در امتداد محور x .

اثبات - می خواهیم ثابت کنیم که جمله طرف چپ (۸۴-۳) در واقع یک ویژه بردار \hat{x} وابسته به ویژه مقدار $x + dx$ است، یعنی،

$$\hat{x} \left[\left\{ \hat{1} + \frac{\hat{p}_x dx}{i\hbar} \right\} |x, y, z\rangle \right] = (x + dx) \left[\left\{ \hat{1} + \frac{\hat{p}_x dx}{i\hbar} \right\} |x, y, z\rangle \right] \quad (85-3)$$

طرف چپ، با استفاده از رابطه جابه جایی $\hat{x}\hat{p}_x = i\hbar\hat{1} + \hat{p}_x\hat{x}$ ، می تواند به صورت

$$\left\{ \hat{x} + dx \hat{1} + \frac{\hat{p}_x \hat{x} dx}{i\hbar} \right\} |x, y, z\rangle = \left\{ x + dx + \frac{x dx \hat{p}_x}{i\hbar} \right\} |x, y, z\rangle$$

نوشته شود. اما، این دقیقاً برابر با طرف راست (۸۵-۳) است. این مطلب پس از انجام ضرب و حذف جمله های از مرتبه dx^2 ، یعنی،

$$\left\{ x + \frac{x dx}{i\hbar} \hat{p}_x + dx + \frac{dx^2 \hat{p}_x}{i\hbar} \right\} |x, y, z\rangle \simeq \left\{ x + dx + \frac{x dx \hat{p}_x}{i\hbar} \right\} |x, y, z\rangle$$

حاصل می شود. رابطه فوق (۸۵-۳) را برقرار و قضیه ۸ را ثابت می کند.
معادله (۸۴-۳) را می توان، با نوشت آن به صورت

$$\hat{p}_x |x, y, z\rangle = \frac{i\hbar(|x + dx, y, z\rangle - |x, y, z\rangle)}{dx}$$

پا، در شکل برا، به صورت

$$\langle x, y, z | \hat{p}_x = \frac{-i\hbar(\langle x + dx, y, z | - \langle x, y, z |)}{dx}$$

به شکل مفید تری در آورد. بالاخره عنصر ماتریس به صورت

$$\langle x, y, z | \hat{p}_x | a_i \rangle = - \frac{i\hbar(\langle x + dx, y, z | a_i \rangle - \langle x, y, z | a_i \rangle)}{dx}$$

پا

$$\langle r | \hat{p}_x | a_i \rangle = - \frac{i\hbar(\psi_{a_i}(x + dx, y, z) - \psi_{a_i}(x, y, z))}{dx} = \left(\frac{\hbar}{i} \right) \left(\frac{\partial \psi_{a_i}}{\partial x} \right)$$

در خواهد آمد . به طور عمومی‌تر برای عملگر \hat{p} خواهیم داشت

$$\langle r | \hat{p} | a_i \rangle = \frac{\hbar}{i} \nabla \psi_{a_i}$$

پا

$$\langle r | \hat{G}(\hat{p}) | a_i \rangle = \hat{G}\left(\frac{\hbar}{i} \nabla\right) \psi_{a_i} \quad (86-3)$$

که در آن $\hat{G}(\hbar/i)\nabla$ عبارت است از تابع عملگری دیفرانسیلی متناظر . بالاخره ، (۸۰ - ۳)

به صورت معادله ویژه مقداری

$$\begin{aligned} \langle r | \hat{A} | a_i \rangle &= \hat{A}\left(\frac{\hbar}{i} \nabla, r\right) \psi_{a_i} \\ &= \left\{ \hat{G}\left(\frac{\hbar}{i} \nabla\right) + K(r) \right\} \psi_{a_i}(r) = a_i \psi_{a_i}(r) \end{aligned} \quad (87-3)$$

در می‌آید .

قاعده – برای به دست آوردن عملگر (دیفرانسیلی) مکانیک موجی وابسته به یک مشاهده‌پذیر بندادی ، جایگزینی زیر را انجام می‌دهیم

$$\hat{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla, \quad \hat{r} \rightarrow r, \quad \hat{A}(\hat{p}, \hat{r}) \rightarrow \hat{A}\left(\frac{\hbar}{i} \nabla, r\right) \quad (88-3)$$

به عنوان مثال ، فرض کنیم می‌خواهیم ویژه تابعهای (حالت‌های مانا) انرژی هامیلتونی غیرنسبیتی $(\hat{p}^2/2m) + V(r) = \beta^2$ را پیدا کنیم . نخست عملگر مکانیک موجی

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\frac{\hbar}{i} \nabla \cdot \frac{\hbar}{i} \nabla}{2m} + V(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r})$$

را تشکیل می‌دهیم و سپس معادله ویژه مقداری

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} \psi_{\varepsilon_i} &= \varepsilon_i \psi_{\varepsilon_i} \\ \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right\} \psi_{\varepsilon_i}(\mathbf{r}) &= \varepsilon_i \psi_{\varepsilon_i}(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

را برای ویژه تابعها و ویژه مقدارهای انرژی حل می‌کنیم.

عناصر ماتریس که به شکل $\langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle$ هستند می‌توانند به طور کاملاً "ساده‌ای در مکانیک موجی محاسبه شوند. با استفاده از رابطه کامل بودن $\hat{1} = \int | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | d\mathbf{r}$ و (۸۷-۲) می‌نویسیم

$$\langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle = \int \langle \alpha | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \hat{A} | \beta \rangle d\mathbf{r} = \int \Psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) \hat{A} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla, \mathbf{r} \right) \Psi_{\beta}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (۸۹-۳)$$

قاعده - عنصر ماتریس $\langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle$ با تاثیردادن عملگر $\hat{A} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla, \mathbf{r} \right)$ روی $\Psi_{\beta}(\mathbf{r})$ و ضرب آن در $\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{r})$ و انتگرال‌گیری روی تمام فضای محدود می‌آید.

به عنوان مثال، عنصر $\langle \alpha | \beta | \beta \rangle$ در مکانیک موجی به صورت زیر محاسبه می‌شود

$$\langle \alpha | \beta | \beta \rangle = \int \Psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi_{\beta}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

۱۳- معادله موج شرودینگر

در مکانیک موجی، حالت پک سیستم توسط تابع حالت

$$\Psi_{\beta}(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r} | \beta, t \rangle$$

نمایش داده می‌شود. وقتی بردار حالت می‌چرخد، تابع حالت با زمان از مقدار اولیه‌اش $\Psi_{\beta}(\mathbf{r}, t_0) = \langle \mathbf{r} | \beta, t_0 \rangle$ متحول می‌شود. می‌توان، با استفاده از تصویر شرودینگر، که در آن بردار حالت در رابطه

$$\hat{H} |\beta, t\rangle = i\hbar \frac{d|\beta, t\rangle}{dt}$$

صدق می‌کند، معادله حرکتی برای تابع حالت به دست آورد. با ضرب داخلی دو طرف رابطه فوق در $|\beta, t\rangle$ خواهیم داشت

$$\langle \mathbf{r} | \hat{H} | \beta, t \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{r} | \beta, t \rangle$$

یا

$$\hat{H} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla, \mathbf{r} \right) \Psi_{\beta}(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\beta}(\mathbf{r}, t)$$

با به کار بردن هامیلتونی به شکل عمومی $\hat{H} = (\hat{p}^2/2m) + V(\mathbf{r})$ معادله موج شرودینگر را برای تابع حالت (یا موج) $\Psi_{\beta}(\mathbf{r}, t)$ به صورت زیر به دست خواهیم آورد

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_{\beta} + V(\mathbf{r}) \Psi_{\beta} = i\hbar \frac{\partial \Psi_{\beta}}{\partial t} \quad (90-3)$$

در حالی که خود Ψ_{β} مختلط و غیر قابل اندازه گیری است، توان دوم قدر مطلق آن با احتمال یافتن ذره در نواحی مختلف فضا مرتبط است. این واقعیت که Ψ_{β} در یک معادله موجی صدق می‌کند بیانگر وجود کیفیت‌های موج مانندی در ماده است که در فصل ۱ مورد بحث قرار گرفت. اکنون خواهیم دید که تابع موج یک ذره آزاد در اصل همان چیزی است که دو بروی در نظریه ابتدائی تر خود به آن اشاره کرده بود.

چون معادله موج نسبت به زمان از مرتبه اول است، تنها مقدار اولیه $\Psi_{\beta}(\mathbf{r}, t_0)$ برای تعیین تحول تابع حالت کافی است. جواب معادله موج به آسانی، با ضرب داخلی دو طرف (۶۵-۳)، که عبارت است از

$$|\beta, t\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\beta, t_0\rangle$$

در $|\beta, t\rangle$ به صورت زیر به دست می‌آید.

$$\Psi_{\beta}(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r} | \beta, t \rangle = \langle \mathbf{r} | \hat{U}(t, t_0) |\beta, t_0\rangle$$

این رابطه می‌تواند با استفاده از رابطه بستاری به صورت زیر بیان شود

$$\Psi_\beta(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r} | \hat{U}(t, t_0) | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | \beta, t_0 \rangle \quad (91-3)$$

با تعریف هسته انتشار یا انتشاردهنده به وسیله

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') = \langle \mathbf{r} | \hat{U}(t, t') | \mathbf{r}' \rangle \quad (92-3)$$

(91-3) می‌تواند به صورت زیر بیان شود

$$\Psi_\beta(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{r}' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t_0) \Psi_\beta(\mathbf{r}', t_0) \quad (93-3)$$

با استفاده از $\hat{U} = \exp(-i\hat{\mathcal{H}}(t - t_0)/\hbar)$ روش می‌شود، وقتی هامیلتونی معلوم و تابع حالت اولیه مشخص باشد، تابع موج در زمانهای بعد می‌تواند با استفاده از (93-3) محاسبه شود.

محاسبه انتشاردهنده G به شکل بسته از رابطه تعریف کننده (92-3) "عمولاً" مشکل است. اگر شرط کامل بودن ویژه پایه $\hat{\mathcal{H}}$ ، یعنی $\hat{1} = |\epsilon_i\rangle\langle\epsilon_i|$ را به کار ببریم بسط بمسری آن امکان پذیر خواهد بود. با قراردادن

$$\hat{U} = \exp[-i\hat{\mathcal{H}}(t - t_0)/\hbar]$$

(92-3) خواهد شد

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') &= \sum_i \langle \mathbf{r} | \exp[-i\hat{\mathcal{H}}(t - t_0)/\hbar] | \epsilon_i \rangle \langle \epsilon_i | \mathbf{r}' \rangle \\ &= \sum_i \exp[-i\epsilon_i(t - t_0)/\hbar] \langle \mathbf{r} | \epsilon_i \rangle \langle \epsilon_i | \mathbf{r}' \rangle \quad (94-3) \\ &= \sum_i \exp[-i\epsilon_i(t - t_0)/\hbar] \psi_{\epsilon_i}(\mathbf{r}) \psi_{\epsilon_i}^*(\mathbf{r}') \end{aligned}$$

وقتی که ویژه مقدارها و ویژه تابعهای هامیلتونی پیدا شدند، انتشاردهنده می‌تواند با استفاده از (94-3) ساخته شود.

۱۴ - معادله موج شرودینگر و جریان احتمال

به تدریج که تابع حالت با زمان تحول می‌پاید، چگالی احتمال وابسته به سیستم در سرتاسر فضا تغییر می‌کند. چون احتمال کلی همیشه برابر با یک است، چگالی از یک ناحیه به ناحیه دیگر، خیلی شبیه به یک سیال، جریان پیدا می‌کند.

ارتباط بین جریان احتمال و معادله شرودینگر با کاربرد این معادله،

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right\} \Psi_\beta = i\hbar \frac{\partial \Psi_\beta}{\partial t}$$

و مزدوج آن،

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right\} \Psi_\beta^* = -i\hbar \frac{\partial \Psi_\beta^*}{\partial t}$$

برقرار می‌شود. با ضرب معادله اول در Ψ_β^* ، و معادله دوم در Ψ_β ، و کم کردن آنها از یکدیگر، خواهیم داشت

$$\frac{-\hbar^2}{2m} (\Psi_\beta^* \nabla^2 \Psi_\beta - \Psi_\beta \Delta^2 \Psi_\beta^*) = i\hbar \left(\Psi_\beta^* \frac{\partial \Psi_\beta}{\partial t} + \Psi_\beta \frac{\partial \Psi_\beta^*}{\partial t} \right)$$

یا به طور معادل

$$\nabla \cdot \frac{i\hbar}{2m} (\Psi_\beta^* \nabla \Psi_\beta - \Psi_\beta \nabla \Psi_\beta^*) = \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_\beta|^2 \quad (95-3)$$

با تعریف شار احتمال یا بردار جریان احتمال به وسیله

$$\mathbf{J}_\beta(\mathbf{r}, t) = \frac{-i\hbar}{2m} (\Psi_\beta^* \nabla \Psi_\beta - \Psi_\beta \nabla \Psi_\beta^*) \quad (96-3)$$

و استفاده از تعریف چگالی احتمال، $\mathcal{P}_\beta(\mathbf{r}, t) = |\Psi_\beta|^2$ ، معادله (95-3) به صورت یک معادله پیوستگی در می‌آید، یعنی،

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_\beta + \frac{\partial \mathcal{P}_\beta}{\partial t} = 0 \quad (97-3)$$

معادله (۹۷-۳) ایجاب می‌کند که احتمال به‌طور موضعی پایسته باشد، یعنی، نهایجادمی‌شود و نه از بین می‌رود. بهبیان دیگر، هر کاهش (یا افزایش) احتمال بهناحیه‌ای از فضا با یک جریان خروجی (یا جریان ورودی) احتمال همراه است، همچنین، اگر سیستم در یک حالت مانا باشد، $0 = \partial \Psi / \partial t$ و جریان احتمال سیملوله‌ای است، یعنی، $0 = J \cdot \nabla \Psi$. اگر تابع حالتی حقیقی باشد، در این صورت از (۹۶-۳) نتیجه می‌شود که $J = 0$.

توجه کنیم که نتیجه‌گیری معادله پیوستگی برای جریان احتمال بستگی به‌حقیقی بودن تابع انرژی پتانسیل دارد. در حالی که پتانسیلهای مختلف، به‌خاطر این که به‌ویژه مقدارهای مختلف انرژی منجر می‌شوند، قدری غیرفیزیکی هستند، مع ذالک به‌طور گسترده‌ای در مدل سازی برهمنشیهای هسته‌ای مورد استفاده قرار گرفته‌اند. تحقیق این که قسمت موهومی پتانسیل مستقیماً منجر به‌یک جمله فروکشنه در (۹۷-۳) می‌شود، که به‌نوبه خود منجر به کاهش احتمال می‌شود، ساده است (مسئله ۳-۱۴). این کاهش احتمال به عنوان جذب ذرات توسط هسته‌ها تعبیر می‌شود.

محدودیتهای وجود دارند که باید به‌تابع حالت یک سیستم تحمیل شوند، زیرا توان دوم آن معرف یک چگالی احتمال است. این محدودیتها در اصل موضوع زیرگنجانده شده‌اند.

اصل موضوع ۷-یک تابع حالت، که نمایانگر یک سیستم فیزیکی حقیقی است، و مشتق آن باید در همه‌جا متواهی، پیوسته^{*}، و تک مقداری باشند.

در فصل ۴ توجه خود را به‌ویژه تابعهای مانا و ویژه مقدارهای (انرژی) هامیلتونی‌های یک بعدی گوناگونی معطوف می‌کنیم. چون با سیستم‌های تک ذره‌ای سروکار خواهیم داشت، نمایش مکانیک موجی مورد استفاده قرارخواهد گرفت. در جدول (۱-۳) ارتباط بین صورت‌بندی دیراک و مکانیک موجی شرودینگر خلاصه شده است. ویژگی آخر (کامل بودن) با کاربرد

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \sum_i |a_i\rangle\langle a_i| | \mathbf{r}' \rangle &= \langle \mathbf{r} | \hat{1} | \mathbf{r}' \rangle \\ \sum_i \psi_{a_i}^*(\mathbf{r}') \psi_{a_i}(\mathbf{r}) &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \end{aligned}$$

برقرار می‌شود.

* در وضعیت غیرفیزیکی که تابع انرژی پتانسیل یک ناپیوستگی بینهایت دارد، شرط پیوستگی روی مشتق Ψ بایستی رها شود.

جدول (۳-۱) : ارتباط بین صورتی‌بندی‌های دیواری (بوداری) و شرودینگر (تابعی) .
مکانیک کوانتومی در شایش مختصه‌ای (مکانیک موجودی) .

مکانیک کوانتومی در ریک فضای برداری	مکانیک کوانتومی در شایش مختصه‌ای (مکانیک موجودی)
$\hat{A}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla, \mathbf{r}\right)$ $\psi_{\alpha}(r) = \langle \mathbf{r} a_i \rangle, \psi_{\alpha}^*(r) = \langle a_i \mathbf{r} \rangle$ (ویژه تابع) a_i $\hat{A}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla, \mathbf{r}\right)\psi_{\alpha}(r) = a_i\psi_{\alpha}(r)$ $\Psi_{\beta}(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r} \beta, t \rangle, \Psi_{\beta}^*(\mathbf{r}, t) = \langle \beta, t \mathbf{r} \rangle$ $\int \psi_{\alpha}^*(\mathbf{r})\psi_{\beta}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ $\int d\mathbf{r}\psi_{\alpha}^*(\mathbf{r})\hat{A}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla, \mathbf{r}\right)\psi_{\beta}(\mathbf{r})$ $\int d\mathbf{r}\psi_{\alpha}^*(\mathbf{r})\hat{A}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla, \mathbf{r}\right)\psi_{\beta}(\mathbf{r}) = \left[\int d\mathbf{r}\psi_{\beta}^*(\mathbf{r})\hat{A}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla, \mathbf{r}\right)\psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \right]^*$ $\hat{\mathcal{H}}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla, \mathbf{r}\right)\Psi_{\beta}(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial\Psi_{\beta}(\mathbf{r}, t)}{\partial t}$ $\Psi_{\alpha}(\mathbf{r}, t) = \exp\left[-\frac{i\varepsilon_i(t-t_0)}{\hbar}\right]\Psi_{\alpha}(\mathbf{r}, t_0)$ $\Psi_{\beta}(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{r}'G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t-t_0)\Psi_{\beta}(\mathbf{r}', t_0)$ $\left\{ \begin{array}{l} \psi_{\alpha}(\mathbf{r}) = \sum_i \beta^{(a_i)} \psi_{a_i}(\mathbf{r}) \\ \beta^{(a_i)} = \int \psi_{a_i}^*(\mathbf{r})\psi_{\alpha}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ \sum_i \alpha_i\rangle\langle\alpha_i = 1 \end{array} \right.$	عملگر حالت مشخصه ویژه مقدار معادله ویژه مقداری حالت غیرمشخص حاصل ضرب داخلی عنصر ماتریس ویژگی هرمیتی معادله حرکت شرودینگر تحول زمانی پیک ویژه حالت انرژی تحول زمانی یک حالت غیرمشخص بسط رابطه کامل بودن

مسائل

۱-۳ (الف) ویژه‌مقدارها و یک مجموعه از ویژه‌بردارهای راست‌هنگار ماتریس هرمیتی

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

را پیدا کنید.

(ب) تحقیق کنید که ویژه‌بردارها متعامداند.

۲-۳ ماتریس زیر را در نظر بگیرید

$$\hat{B} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

(الف) نشان دهید که این ماتریس با ماتریس \hat{A} ای داده شده در مسئله (۱-۳) جایه‌جاپذیر است.

(ب) حداقل یک مجموعه از ویژه‌بردارهای راست‌هنگار مشترک \hat{A} و \hat{B} را پیدا کنید.

(ج) ماتریسهای را در این ویژه‌پایه مشترک نمایش دهید.

۳-۳ با استفاده از قواعد جبر برآ - کت تحقیق کنید که به‌طور کلی داریم

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger \quad \text{و} \quad (\hat{A}\hat{B})^{-1} = \hat{B}^{-1} \hat{A}^{-1}$$

۴-۳ یک مجموعه بردار راست‌هنگار در یک پایه داده شده در نظر بگیرید

$$|\beta_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad |\beta_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad |\beta_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

(الف) ماتریس‌های تصویرگر متناظر \hat{P}_1 ، \hat{P}_2 و \hat{P}_3 را پیدا کنید.

(ب) نشان دهید که $\hat{I} = \cdot \hat{P}_1 + \hat{P}_2 + \hat{P}_3$

(ج) فرض کنید

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

تحقيق کنید که $\hat{P}_2 |a\rangle = (\langle \beta_2 |a\rangle) |\beta_2\rangle$ روی $\langle \beta_2 |$ تصویر می‌کند، یعنی، برای هر عملگری معتبر نیست. تحت چه توضیح دهید چرا رابطه $e^{\lambda + \theta} = e^\lambda e^\theta$ برای شرایطی رابطه مذکور برقرار است؟ ماتریس $e^{\lambda x}$ را تا مرتبه λ^2 برای

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$$

بیان کنید.
۵-۳ اتحاد برداری

$$\langle \gamma | \gamma \rangle \langle \delta | \delta \rangle - |\langle \gamma | \delta \rangle|^2 \equiv \langle \beta | \beta \rangle \langle \delta | \delta \rangle$$

را که در آن

$$|\beta\rangle = |\gamma\rangle - \left[\frac{\langle \delta | \gamma \rangle}{\langle \delta | \delta \rangle} \right] |\delta\rangle$$

تحقيق کنید. از این اتحاد برای اثبات نامساوی شوارتز، (۵۷-۳)، استفاده کنید.
۷-۳ با استفاده از رابطه جابه‌جایی $i\hbar \hat{p}_x = [\hat{x}, \hat{H}]$ ، رابطه

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

را، که در آن \hat{H} هامیلتونی ای به شکل

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + V(\hat{x})$$

است، تحقیق کنید.

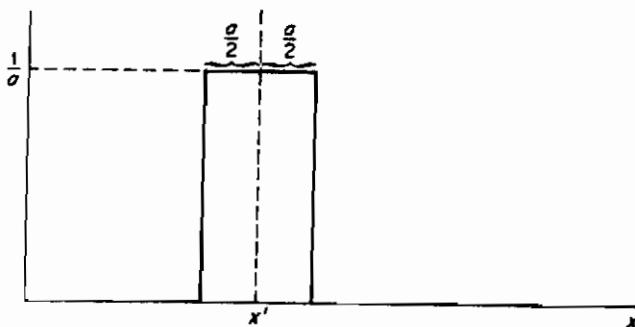
۸-۳ نشان دهید که برای هر حالت مقید مانا داریم $0 = \langle p_x \rangle_n = \langle p_x \rangle_{n+1}$. (راهنمایی: مقدار قابل انتظار دو طرف رابطه به دست آمده در مسئله (۷-۳) را برای یک ویژه حالت \hat{H} ، به عنوان مثال، $\langle \psi_n |$ ، به دست آورید.)

۹-۳ با استفاده از قواعد ضرب ماتریسها نشان دهید که در فضای سه بعدی داریم

$$\text{Tr } \hat{A}\hat{B} = \text{Tr } \hat{B}\hat{A}$$

۱۰-۳ تابعی را (شکل ۳-۳) که با

$$f(x, x') = \begin{cases} 1/a & -\frac{1}{2}a + x' \leq x \leq \frac{1}{2}a + x' \\ 0 & \text{در جاهای دیگر} \end{cases}$$



شکل (۳-۳)

تعریف می شود در نظر بگیرید.

(الف) نشان دهید که وقتی $a \rightarrow 0$ ، این تابع به تابع دلتای دیراک تبدیل می شود ، یعنی

$$\lim_{a \rightarrow 0} f(x, x') \rightarrow \delta(x - x')$$

(ب) با به کار گیری $g(x) = bx^2$ تحقیق کنید که این تابع دلتا دارای ویژگی "غربالی" زیر است

$$g(x') = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) \delta(x - x') dx$$

(راهنمایی: انتگرال گیری را برای مقدار متناهی a انجام دهید و سپس قرار دهید $(0, a \rightarrow 0)$

۱۱-۳ نشان دهید که اگر یک کت حالت را در مقدار اولیه اش نگاه داریم ، یعنی ، $|\beta\rangle \equiv |\beta, 0\rangle$ ، می توانیم شکل کلاسیکی معادله حرکت برای $\langle A(t) \rangle$ در معادله (۶-۱) را محفوظ نگاه داریم به شرط این که فرض کنیم عملکرها طبق

$$\hat{A}_H(t) = e^{i\hat{x}t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{x}t/\hbar}$$

تغییر کنند. در اینجا (i) \hat{A}_H و \hat{A} به ترتیب عملگرها در تصویر هایزنبرگ و تصویر شرودینگر هستند (رک پیوست ب)

۱۲-۳ با تاثیر دو طرف

$$\left[x, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right] = i\hbar \hat{I}$$

روی یکتابع دلخواه ψ نشان دهید که رابطه به دست آمده در مکانیک موجی برقرار است.

۱۳-۳ عملگر $\hat{p}_x/1/\hbar$ را در نظر بگیرید. روی شکل عمومی این عملگر در مکانیک موجی بحث کنید. (راهنمایی: عملگری را پیدا کنید که در رابطه

$$\frac{1}{\hat{p}_x} \psi(x) = \varphi(x)$$

صدق کند مشروط برآنکه داشته باشیم $\varphi(-\infty) = 0$. همین کار را با تاثیردادن روی دو طرف انجام دهید.

۱۴-۳ نشان دهید که اگر پتانسیل تابع مختلطی باشد یک جمله فروکشنده به شکل

$$-2 \operatorname{Im} V|\Psi|^2/\hbar = \text{احتمال جذب}$$

در (۹۷-۳) ظاهر می شود.

مراجع پیشنهادی

- Borowitz, S., "Fundamentals of Quantum Mechanics." Benjamin, New York, 1967.
- Dirac, P. A. M., "The Principles of Quantum Mechanics," 4th ed., 1958. Oxford Univ. Press, London and New York, 1958.
(This text is one of the great classic works on modern quantum theory. While it is mathematically sophisticated it is nevertheless unique in its approach, style, and notation, and much of the material in Chapter 3 can be found in Dirac's book.)
- Feynman R. P., Leighton, R. B., and Sands, M., "The Feynman Lectures on Physics," Vol. 3. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1964.
- Gottfried, K., "Quantum Mechanics," Vol. I. Benjamin, New York, 1966.
- Merzbacher, E. "Quantum Mechanics," 2nd ed. Wiley, New York, 1970.
- Messiah, A., "Quantum Mechanics," Vol. I. Wiley, New York, 1958.
- Stehle, P. "Quantum Mechanics." Holden-Day, San Francisco, 1966.

۲

مکانیک موجی در یک بعد

هر سیستم فیزیکی به وسیله هامیلتونی آن، که معمولاً "توسط تابع انرژی پتانسیل $V(r)$ " تعیین می‌شود، مشخص می‌گردد. برای روشن کردن نظرات مطرح شده در فصل ۳، خواص سیستمهای یک ذره‌ای یک بعدی را که هامیلتونی آنها مستقل از زمان است، با تأکید خاصی بر روی جوابهای ویژه حالت مانا مورد بررسی قرار می‌دهیم. ویژه حالت‌های مانا، به دلائل زیر، دارای اهمیتی اساسی هستند:

(الف) هر حالت دارای یک انرژی مشخصه E است.

(ب) اگر سیستم در آغاز در چنین حالتی باشد، تا ابد در این حالت باقی خواهد ماند.

(ج) وقتی ویژه مقدارها و ویژه تابعهای انرژی به دست آمدند، انتشار دهنده $G(t, t_0, r, r')$ می‌تواند با استفاده از (۹۳-۳) ساخته شده، و تحول حالت‌های غیر مشخص تعیین شود.

۱- طبقه‌بندی حالت‌های مانا در مکانیک موجی

ویژه‌تابعهای ویژه مقدارهای حالت‌های مانا به وسیله جوابهای معادله شرودینگر* (معادله ویژه مقداری انرژی)

* معادله شرودینگر مستقل از زمان نباید با معادله موج شرودینگر (معادله واپسیه به زمان) (۹۵-۳) اشتباه شود.

$$\hat{\mathcal{H}}\psi_{\epsilon_i}(\mathbf{r}) = \left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right\} \psi_{\epsilon_i}(\mathbf{r}) = \epsilon_i \psi_{\epsilon_i}(\mathbf{r}) \quad (1-4)$$

تعیین می‌شوند.

یک حالت را، بسته به اینکه تابع متضاظر (پا چگالی احتمال) آن در بینهایت صفر باشد یا نه مقید یا نامقید گوئیم. اگر تابع حالت وابسته به $\langle \beta |$ دارای ویژگی

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \langle r | \beta \rangle = \lim_{r \rightarrow \infty} \Psi_\beta(r) \rightarrow 0 \quad (2-4)$$

باشد حالت مقید است، در غیر این صورت نامقید. بهزادی خواهیم دید که قاعده زیربرقرار است.

قاعده – یک ویژه حالت انرژی عموماً "جزء یک طیف گسته" است اگر مقید باشد، و جزء یک طیف پیوسته است اگر نامقید باشد.

هم چنین داشتن قاعده‌ای که نوع طیف وابسته به یک هامیلتونی معین را تعیین کند مهم است.

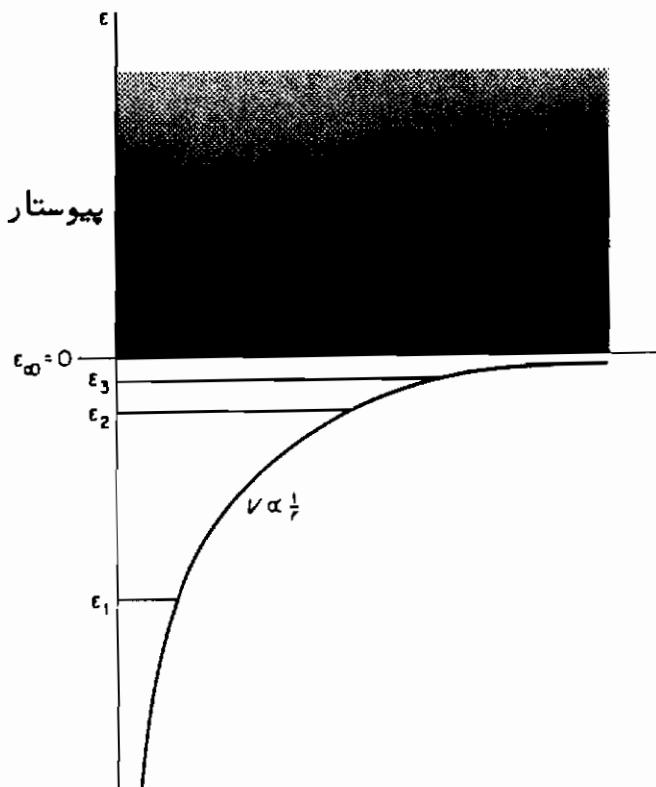
قاعده – ویژه حالت‌های یک عملگر هامیلتونی، بسته به اینکه همتای کلاسیکی آن مربوط به مدارهای مقید باشد یا نه، مقید (گسته) اند یا نامقید (پیوسته).

به عنوان مثال، از نظر کلاسیکی، ذره آزادی که توسط هامیلتونی با $V = \frac{1}{2}kr^2$ می‌رود. هامیلتونی روی یک خط مستقیم با سرعت ثابت حرکت می‌کند و سرانجام تا بینهایت می‌رود. هامیلتونی مکانیک کوانتومی متضاظر آن دارای فقط یک طیف پیوسته است. از طرف دیگر، هامیلتونی کلاسیکی نوسانگر ($V = \frac{1}{2}kr^2$)، صرفنظر از مقدار انرژی، فقط حرکات مقید را مجاز می‌داند. برای تمام انرژی‌های معین، یک جا به جایی بیشینه‌ای از مبدأ به نام دامنه نوسان وجود دارد. در نتیجه، نوسانگر کوانتومی شامل فقط حالت‌های مقید بوده و برای تمام انرژی‌ها دارای یک طیف گسته است. هامیلتونی کپلری پا کولنی ($V = -k/r$) برای $r > 0$ حرکات مقید (بیضی) و برای $r \leq 0$ حرکات نامقید (سهمی و هذلولی) را به دست می‌دهد. بنابراین باید برای $r > 0$ یک طیف گسته و برای $r \leq 0$ یک طیف پیوسته انتظار داشته باشم*.

نظریه‌های وابسته به ویژه حالت‌های مانای مقید و نامقید بهطور اساسی با یکدیگر متفاوتند. برای حالت‌های مقید، صفرشدن ویژه تابعها در بینهایت مستقيماً "به یک طیف گسته

* در اينجا r معرف انرژی است و نهايد با خروج از مرکز تعریف شده در فصل ۲ آشتباه شود.

منجر می‌شود. لذا مسئله عبارت است از پیدا کردن ویژه تابعها و ویژه مقدارهای انرژی متناظر آنها و محاسبه مقادیر قابل انتظار عملگرهای متناظر با مشاهده‌پذیرهای مختلف. از طرف دیگر، برای حالت‌های نامقید، ویژه مقدارهای انرژی پیوسته‌اند، یعنی، کوانتیده نیستند. به علاوه، شکل ویژه تابعهای مربوط به حالت‌های نامقید "معمول" منجر به روش‌های بهنجارشی می‌شود که مقادیر قابل انتظار بعضی عملگرها را نامعین باقی می‌گذارد. مهمترین آنها، جریان احتمال است زیرا این جریان به حالت ایستای فرایند پراکندگی ارتباط دارد. در واقع همان‌طور که در فصل ۸ خواهیم دید، نسبت بین شارهایی که در جهات مختلف و نواحی مختلف فضا عبور می‌کنند مقطع موثر پراکندگی یک فرایند برخورد را تعیین می‌کند. به این دلیل حالت‌های نامقید یا حالت‌های پیوسته، حالت‌های پراکندگی نیز نامیده می‌شوند.



شکل (۱-۴) طیف مقید (گستته) برای $\epsilon < \epsilon_0$ و نامقید (پیوسته) برای $\epsilon > \epsilon_0$ وابسته به انرژیهای با پتانسیل $V \propto 1/r$.

در موردی که ممکن نباشد بخواهیم که ویژه تابع مربوط به یک حالت نامقید در بینهایت صفر شود، لازم است که بعضی شرایط جانبی را که بوسیله آزمایش خاص پراکندگی پیشنهاد می‌شوند تحمیل کنیم. این شرایط طبیعت عمومی ویژه تابع را وقتی به بینهایت نزدیک می‌شویم معین می‌کنند.

۴ مکانیک موجی در یک بعد

اکنون مسئله ویژه مقداری انرژی برای سیستم‌های یک بعدی را بررسی خواهیم کرد . در حالی که مسائل یک بعدی معمولاً "بیانگر فقط تقریب‌های از وضعیت‌های فیزیکی هستند ، در اینجا اصولاً" بهاین جهت آنها را مورد بحث قرار می‌دهیم که فن ریاضیاتی مکانیک کوانتومی را جلوه‌گر می‌کنند . این مسائل اغلب اوقات به‌سانی می‌توانند به مسائل سه بعدی تعمیم داده شوند . بحث ما با حالت‌های پیوسته هامیلتونی‌ها در یک بعد شروع می‌شود و ارتباط آنها را با پراکندگی از سدهای پتانسیل بررسی می‌کند .

۲ - ذره آزاد در یک بعد

با درنظر گرفتن یک ذره آزاد ، یعنی ذره‌ای که برای آن $V = 0$ است ، شروع می‌کنیم . هامیلتونی این سیستم عبارت است از $\hat{p}^2/2m = \hat{\psi}$ و منجر به معادله ویژه مقداری انرژی شرودینگر ، یعنی

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi = \epsilon \psi$$

یا

$$\psi'' + k^2 \psi = 0 \quad , \quad k = \left(\frac{2m\epsilon}{\hbar^2} \right)^{1/2}$$

می‌شود . این معادله دارای دو جواب مستقل خطی

$$\psi_k^+ = e^{ikx} \quad \text{و} \quad \psi_k^- = e^{-ikx}$$

است .

هر دو جواب به‌طور همزمان ویژه تابع عملگر \hat{p} هستند . با تأثیردادن \hat{p} روی ψ_k^\pm داریم

$$\hat{p}\psi_k^\pm = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi_k^\pm = \pm \frac{\hbar}{i} ik \psi_k^\pm = \pm \hbar k \psi_k^\pm$$

به طوری که ویژه مقدارهای تکانه‌های متناظر عبارتند از $p^\pm = \pm \hbar k$. بنابراین ، حالت

$\psi_k^+ = e^{ikx}$ ذره‌ای با تکانه $\hbar k$ را نشان می‌دهد که در جهت مثبت محور x حرکت می‌کند .

همین طور ψ ذره آزادی با تکانه $\hbar k$ - را نشان می‌دهد که در جهت منفی محور x حرکت می‌کند. هردو حالت در انرژی تبیهگانند، زیرا هردو دارای انرژی می‌کنند.

$$\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

هستند.

شار احتمال وابسته به ψ^\pm ، از (۳-۹۶)، عبارت است از

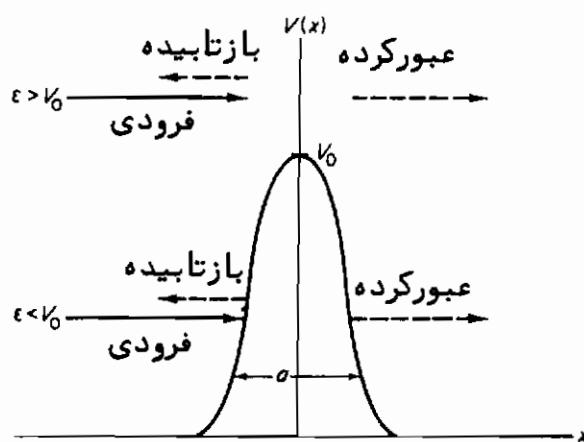
$$J^\pm = -\frac{i\hbar}{2m} \left[\psi_k^{\pm*} \frac{d}{dx} \psi_k^\pm - \psi_k^\pm \frac{d}{dx} \psi_k^{\pm*} \right] = \pm \frac{\hbar k}{m} = \pm \frac{p}{m} = \pm v$$

بنابراین شار برابر است با سرعت ذره و برای ψ_k^+ به طرف راست و برای ψ_k^- به طرف چپ جریان دارد. جواب عمومی معادله ویژه مقداری انرژی شرودینگر عبارت است از

$$\psi_{\text{gen}} = A\psi_k^+ + B\psi_k^-$$

۳ - پراکندگی از سدهای یک بعدی

در مسئله پراکندگی یک بعدی، یک باریکه از ذرات از یک جهت معین به طرف یک سد پتانسیل ($V(x)$) می‌تابد. قسمتی از آن بازتابیده می‌شود و باقیمانده باریکه عبور می‌کند (شکل ۲-۴).



شکل (۲-۴) پراکندگی از سد یک بعدی

سد ممکن است دافعه باشد ($0 < V$) یا جاذبه ($V < 0$) این وجود، پتانسیل‌هایی که ما در نظر خواهیم گرفت آنها بی هستند که وقتی $x \rightarrow \pm\infty$ به سمت صفر میل کنند. بنابراین ذرات باریکه در فاصله‌های زیاد از مبدأ "اصولاً" آزادند. در حالی که شکل سد دارای اهمیت ویژه‌ای نیست، ممکن است از نظر کیفی به‌وسیله یک ارتفاع V_0 و یک پهنای a ، مثل شکل (۳-۴)، مشخص شود. انرژی ذرات باریکه ممکن است بزرگتر یا کوچک‌تر از V_0 باشد.

ویژه تابعهای انرژی وابسته به‌این پتانسیل از حل معادله شرودینگر یک بعدی

$$\hat{H} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}, x \right) \psi_e(x) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right\} \psi_e(x) = e \psi_e(x) \quad (3-4)$$

به دست می‌آیند. برای حالت‌های پراکندگی، ویژه‌مدارهای انرژی پیوسته است و (۳-۴) را برای هر $e > 0$ حل خواهیم کرد. وقتی $\infty \rightarrow |x|$ پتانسیل صفرمی‌شود و می‌توان ثابت کرد که e^{ikx} و e^{-ikx} (که $(2me/\hbar^2)^{1/2} = k$ دو جوابی هستند که به‌طور خطی مستقل‌اند. همان‌طوری که قبلاً نشان داده شد این جوابها معرف ذراتی هستند که به‌ترتیب به‌طرف راست و به‌طرف چپ حرکت می‌کنند. فرض خواهیم کرد که باریکه از طرف چپ می‌تابد. در این صورت انتظار داریم در فاصله دور در طرف چپ یک باریکه فرودی ($e^{ikx} \sim$) و یک باریکه بازتابیده ($e^{-ikx} \sim$) داشته باشیم. اما در فاصله زیاد در طرف راست باقیستی فقط یک باریکه عبور کرده ($e^{ikx} \sim$) داشته باشیم. بنابراین، شرایط مجانبی زیرا، به‌جوابهای قابل قبول (۳-۴) تحمیل می‌کیم

$$\begin{aligned} \psi_e(x) &\underset{x \rightarrow -\infty}{\sim} A e^{ikx} + B e^{-ikx} && \text{(فرودی و بازتابیده)} \\ \psi_e(x) &\underset{x \rightarrow +\infty}{\sim} E e^{ikx} && \text{(عبور کرده)} \end{aligned} \quad (4-4)$$

$$\left(k = \left(\frac{2me}{\hbar^2} \right)^{1/2} \right)$$

مسئله پراکندگی به‌پیدا کردن آن جوابهای دقیق (برای مقدار داده شده e) معادله شرودینگر (۳-۴) که دارای شکل مجانبی موردنظر باشند تقلیل پیدا می‌کند. وقتی جواب دقیق به دست آمد، و شکل مجانبی برقرار شد، ضرایب A ، B و E می‌توانند برای پیش‌بینی آنگی که با آن باریکه بازتابیده می‌شود و یا عبور می‌کند به‌کار روند.

شار فرودی که به‌ویژه تابع مجانبی $A e^{ikx} = A_{\text{inc}}$ مربوط است، با استفاده از (۳-۳)، می‌دهد

$$J_{\text{inc}} = \frac{-i\hbar}{2m} \left(\psi_{\text{inc}}^* \frac{d}{dx} \psi_{\text{inc}} - \psi_{\text{inc}} \frac{d}{dx} \psi_{\text{inc}}^* \right) = \frac{\hbar k}{m} |A|^2$$

اعمال این روش به توابع بازتابیده و عبور کرده نتیجه می‌دهد

$$J_{\text{refl}} = \frac{\hbar k}{m} |B|^2 \quad \text{و} \quad J_{\text{trans}} = \frac{\hbar k}{m} |E|^2$$

مناسب خواهد بود که ضرایب بازتاب و عبور را به صورت زیر تعریف کنیم

$$\mathcal{R} = \frac{J_{\text{refl}}}{J_{\text{inc}}} = \left| \frac{B}{A} \right|^2 \quad (5-4)$$

و

$$\mathcal{T} = \frac{J_{\text{trans}}}{J_{\text{inc}}} = \left| \frac{E}{A} \right|^2 \quad (6-4)$$

به بیان دقیق‌تر، \mathcal{R} و \mathcal{T} به جریان احتمال اشاره دارند، اما، معرف بخشش‌های از باریکه فرویدی که بازتابیده و عبور کرده‌اند نیز هستند. چون احتمال پایسته است، انتظار داریم که $\mathcal{R} + \mathcal{T} = 1$ باشد. توجه کنیم که \mathcal{R} و \mathcal{T} هم به هم مشخصات سد، V_0 و a ، بستگی دارد.

۴- سد مستطیلی

جنبه‌های اساسی پراکندگی در یک بعد را با به کار بردن سد پتانسیل مستطیلی، $V(x) = V_0$ برای $0 \leq x \leq a$ و 0 برای $x < 0$ (شکل ۳-۴)، روش می‌سازیم. ناپیوستگی در $x = 0$ و $x = a$ این سد را تا اندازه‌ای غیر فیزیکی می‌سازد. معادله شرودینگر باید در سه ناحیه زیر حل شود

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_e^I(x) = \epsilon \psi_e^I(x) \quad (x < 0)$$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 \right\} \psi_e^{II}(x) = \epsilon \psi_e^{II}(x) \quad (0 \leq x \leq a)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_{\epsilon}^{III}(x) = \epsilon \psi_{\epsilon}^{III}(x) \quad (a < x) \quad (7-4)$$

جوابهای "خارجی" به آسانی به صورت عمومی زیر به دست می‌آیند

$$\begin{aligned} \psi_{\epsilon}^I(x) &= A e^{ikx} + B e^{-ikx} \\ &\quad \left(k = \left(\frac{2m\epsilon}{\hbar^2} \right)^{1/2} \right) \quad (8-4) \\ \psi_{\epsilon}^{III}(x) &= E e^{ikx} + F e^{-ikx}. \end{aligned}$$

جواب "داخلی" برای $V_0 > \epsilon$ به صورت

$$\psi_{\epsilon}^{II}(x) = C e^{ik'x} + D e^{-ik'x} \quad \left(k' = \left(\frac{2m(\epsilon - V_0)}{\hbar^2} \right)^{1/2} \right) \quad (9-4 \text{ الف})$$

و برای $V_0 < \epsilon$ به صورت

$$\psi_{\epsilon}^{II}(x) = C e^{Kx} + D e^{-Kx} \quad \left(K = \left(\frac{2m(V_0 - \epsilon)}{\hbar^2} \right)^{1/2} \right) \quad (9-4 \text{ ب})$$

به دست می‌آید.

مشاهده می‌کنیم که شرط مجانبی $e^{ikx} \sim e^{ik'x}$ فقط وقتی می‌تواند تأمین شود که در ناحیه III داشته باشیم $F = 0$. ضرایب باقی مانده می‌توانند با استفاده از شرایط پیوستگی (اصل موضوع ۷) روی ϵ ، مبنی بر اینکه E و مشتق آن باید در $x = 0$ باشد، محاسبه شوند. بنابراین برای پنج ضریب باقی مانده به چهار معادله خواهیم رسید (جدول ۹-۱). این معادلات به طور یکتاوی نسبتهاي B/A و E/A را، که توان دوم آنها به ترتیب ضرایب بازتاب و عبور را می‌دهند، تعیین می‌کنند.

جزئیات محاسبات به عنوان تعریف واکذار می‌شود ولی نتایج در زیر آورده می‌شوند.

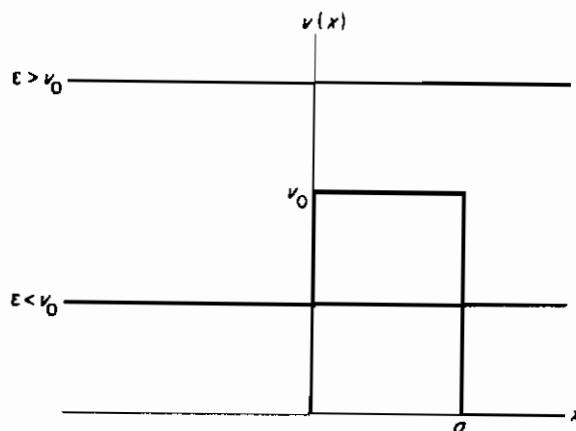
برای $V_0 > \epsilon$ خواهیم داشت

$$\begin{aligned} \mathcal{R} &= \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \frac{\sin^2 k'a}{(4\epsilon/V_0)(\epsilon/V_0 - 1)} \left[1 + \frac{\sin^2 k'a}{(4\epsilon/V_0)(\epsilon/V_0 - 1)} \right]^{-1} \\ \mathcal{T} &= \left| \frac{E}{A} \right|^2 = \left[1 + \frac{\sin^2 k'a}{(4\epsilon/V_0)(\epsilon/V_0 - 1)} \right]^{-1} \quad (10-4 \text{ الف}) \end{aligned}$$

در حالی که برای $V_0 < \epsilon$ داریم

$$\begin{aligned} \mathcal{R} &= \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \frac{\sinh^2 Ka}{(4\epsilon/V_0)(1 - \epsilon/V_0)} \left[1 + \frac{\sinh^2 Ka}{(4\epsilon/V_0)(1 - \epsilon/V_0)} \right]^{-1} \\ \mathcal{T} &= \left| \frac{E}{A} \right|^2 = \left[1 + \frac{\sinh^2 Ka}{(4\epsilon/V_0)(1 - \epsilon/V_0)} \right]^{-1} \end{aligned} \quad (10-4)$$

خاطرنشان کنیم که $\mathcal{R} + \mathcal{T} = 1$ در هردو مورد برقرار است.



شکل (۳-۴). سد مستطیلی و دو انرژی پراکندگی ممکن

جدول (۱-۴)

استنتاج چهار معادله برای A ، C ، B و E با استفاده از

شرایط پیوستگی روی ψ (برای $\epsilon > V_0$).

$x = 0$	$x = a$
$\psi_e^{II}(0) = \psi_e^{III}(0)$ $A + B = C + D$	$\psi_e^{II}(a) = \psi_e^{III}(a)$ $C e^{ik'a} + D e^{-ik'a} = E e^{ik'a}$
$\psi_e^{I}(0) = \psi_e^{II}(0)$ $ik(A - B) = ik'(C - D)$	$\psi_e^{II}(a) = \psi_e^{III}(a)$ $ik'(C e^{ik'a} - D e^{-ik'a}) = ikE e^{ik'a}$

جوابهایی که برای مسئله سد به دست آورده ایم دارای ویژگیهای جالب زیراند:

(الف) حتی وقتی $V_0 < \epsilon$ باید بازتاب امکان پذیر است. این یک اثر کاملاً "مکانیک کوانتومی" است و باید به رفتار موج مانندی ذره نسبت داده شود. حد کلاسیکی در انرژیهای

تابشی خیلی زیاد $(V_0 \gg \epsilon)$ به دست می‌آید، در این مورد، (۱۵-۴)، همان‌طوری که انتظار می‌رود، دقیقاً به $\mathcal{R} \rightarrow 0$ و $\mathcal{T} \rightarrow 1$ تقلیل می‌یابد.

(ب) حتی وقتی $V_0 < \epsilon$ باشد عبور امکان‌پذیر است، دلیل آن شبیه به دلیل مذکور در قسمت (الف) می‌باشد. حد کلاسیکی^{*} در (۱۵-۴) برای $1 \gg V_0/\epsilon$ رخ خواهد داد و، همان‌طور که انتظار می‌رود، منجر به $\mathcal{R} \rightarrow 0$ و $\mathcal{T} \rightarrow 1$ خواهد شد. امکان نفوذ بهناحیه‌ای که از نظر کلاسیکی ممنوع است ($0 < m^2$) پدیده مکانیک کوانتومی تونل‌زنی است و در تجربه‌های متعددی مشاهده شده است. توجه کنیم که احتمال یافتن ذره در ناحیه‌ای که از نظر کلاسیکی ممنوع است صفر نیست، با اینکه این احتمال در حد کلاسیکی کوچک می‌شود و به سمت صفر می‌میرد. حالت پراکندگی که توسط (۸-۴) و (۹-۴) توصیف می‌شود، وضعیتی را نشان می‌دهد که در آن بازتاب و عبور در فاصله بسیار دوری از سد اندازه‌گیری می‌شوند. هر اندازه‌گیری واقعی از مشخصات ذره در ناحیه‌ای که از نظر کلاسیکی ممنوع است، ذره را جایگزینه می‌کند، سد را تغییر می‌دهد، و کل طبیعت مسئله را عوض می‌کند.

(ج) برای $V_0 > \epsilon$ ، مجموعه‌ای از انرژیهای فرودی وجود دارد که برای آنها $\mathcal{R} = 0$ و در نتیجه سد برای آنها "نامرعی" می‌شود (شکل ۴-۴). از (۱۵-۴) نتیجه می‌شود که این انرژیها جوابهای معادله

$$\frac{\sin^2 k_n' a}{4 \frac{\epsilon_n}{V_0} \left(\frac{\epsilon_n}{V_0} - 1 \right)} = 0 \quad \left(k_n' = \frac{[2m(\epsilon_n - V_0)]^{1/2}}{\hbar} \right)$$

هستند زیرا در این حالت \mathcal{R} برابر با یک است. طرف چپ وقتی صفر می‌شود که داشته باشیم

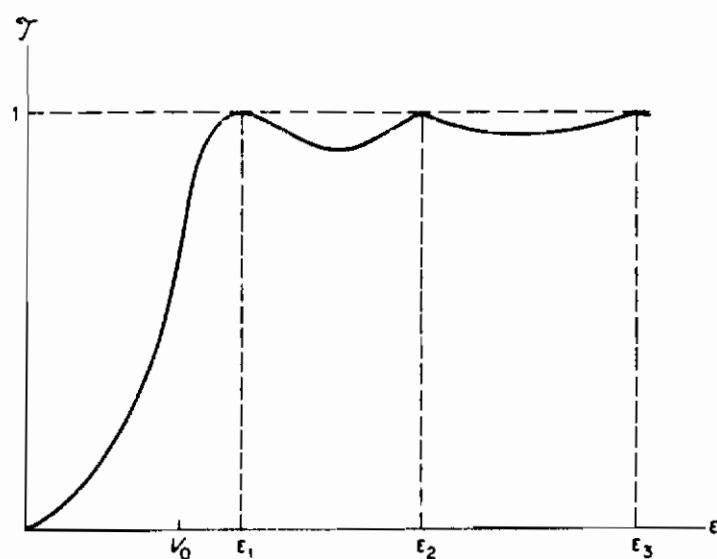
$$\frac{2\pi}{\lambda'} a = k_n' a = n\pi \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

* به بیان دقیق‌تر، حد کلاسیکی باید وقتی $\hbar \rightarrow 0$ حاصل شود. در این حد انتظار داریم که برای $V_0 > \epsilon$ داشته باشیم $\mathcal{R} = 1$ ، و برای $V_0 < \epsilon$ داشته باشیم $\mathcal{R} = 0$. در موردی که $V_0 < \epsilon$ باشد، (۱۵-۴ ب)، ملاحظه می‌کنیم که در حد $\hbar \rightarrow 0$ داریم $\sinh K a \rightarrow \infty$ و در واقع به نتیجه کلاسیکی می‌رسیم. اما برای $V_0 > \epsilon$ (۱۵-۴ الف)، در موقع گرفتن حد با مشکلاتی مواجه می‌شویم. این مشکلات به ناپیوستگی غیرفیزیکی پتانسیل در $x = 0$ و $x = a$ مربوط می‌شود و عموماً برای یک سد "ملایم" وجود ندارد.

یا، به بیان دیگر، که داشته باشیم

$$a = \frac{1}{2} n \lambda$$

یعنی، وقتی که پهنانی سد مضری از نصف طول موج دوپروی در داخل سد است. این یک اثر تداخلی مکانیک کوانتومی است. بعداً خواهیم دید که با الکترونهاهی که توسط اتمهای گازهای اصیل در سه بعد پراکنده می‌شوند پدیده مشابهی رخ خواهد داد. شفاف بودن پراکننده‌های اتمی برای بعضی از انرژیهای فرودی به اثر رامسوار^۱ موسوم است.



شکل (۴-۴). انرژیهای تشددی ϵ_n در ضریب عبور. توجه کنیم که وقتی $E \rightarrow \infty$ ، $T \rightarrow 1$ (حد کلاسیکی)

سدی که در بالا بررسی شد دارای طبیعت دافعه ($V_0 > 0$) است و فقط حالتها پراکنندگی را می‌دهد. سد جاذبه یا چاه ($V_0 < 0$) نیز می‌تواند برای $E < 0$ حالتها پراکنندگی را بدهد. ضرایب عبور با روشی شبیه به روش مورداستفاده در سد دافعه به دست می‌آیند. برای انرژیهای منفی ($E < 0$)، در بخش ۹ خواهیم دید که فقط حالتها مقید در داخل چاه وجود دارند. برای این حالتها باید بخواهیم که ψ در $x = \pm \infty$ صفر شود.

۵- حالتهای مانای مقید در یک بعد

در مسائل حالت مقید، با پیدا کردن ویژه تابعها و انرژیهای مجاز یک هامیلتونی سروکار داریم. اکنون آن جوابهایی از معادله شرودینگر

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right\} \psi_i(x) = \varepsilon_i \psi_i(x) \quad (11-4)$$

را جستجو می‌کنیم که تابع شرط مرزی $0 \rightarrow_{x \rightarrow \pm\infty} \psi$ باشد. خواهیم دید که اگر ψ را دلخواه انتخاب کنیم جواب (۱۱-۴)، وقتی به بینهایت نزدیک می‌شویم، به سمت صفر میل نخواهد کرد. فقط برای بعضی انتخابهای ψ جوابهای قابل قبولی وجود دارد. این مطلب در واقع بیان می‌کند که چگونه طبیعت مقید بودن ویژه تابعها منجر به طیفی گستره می‌شود. وقتی که مجموعه قابل قبول ψ و ψ به دست آمد، مقدار پر قابل انتظار عملگرهای متناظر با مشاهده پذیرهای مختلف می‌توانند محاسبه شوند.

در مناسبتهای متعددی نشان خواهیم داد که طبیعت عمومی ویژه حالتهای انرژی می‌توانند از تحلیل مشخصات هامیلتونی متناظر (به عنوان مثال، ویژگیهای تقارنی آن) پیش‌بینی شوند. مسئله را با اثبات قضیه زیر در رابطه با تبیه‌کنی هامیلتونیهای یک بعدی شروع می‌کنیم.

قضیه ۹- حالتهای مقید یک هامیلتونی یک بعدی همیشه ناتبیهگن‌اند.*

اثبات (خلف)- فرض کنیم ψ و ψ دو ویژه جواب معادله شرودینگر باشند که تبیهگن بوده و بهطور خطی از یکدیگر مستقل‌اند، یعنی

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right\} \psi_i(x) = \varepsilon_i \psi_i(x)$$

و

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right\} \psi_j(x) = \varepsilon_j \psi_j(x)$$

* این قضیه نمی‌تواند به سد بعد تعمیم داده شود. بعلاوه پتانسیلهای یک بعدی تکین غیر فیزیکی‌ای (به عنوان مثال $|x|^{1/2} = V$) وجود دارند که دارایی حالتهای مقید می‌باشند ولی تبیهگن‌اند. این پتانسیلهای در اینجا مورد بحث قرار نخواهند گرفت.

با $\epsilon_i = \epsilon_j = \epsilon$ با ضرب معادله اول در ψ_j و معادله دوم در ψ_i و کم کردن آنها از یکدیگر، خواهیم داشت

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\psi_i \psi_j'' - \psi_j \psi_i'') = 0$$

یا

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} (\psi_i \psi_j' - \psi_j \psi_i') = 0$$

که از آن نتیجه می شود*

$$(\psi_i \psi_j' - \psi_j \psi_i') = \text{const} \quad (12-4)$$

چون، همان طور که برای حالتهای مقید لازم است، داریم $0 = (\infty) \psi_j = (\infty) \psi_i$ ، نتیجه می شود که ثابت فوق صفر است و برای تمام x ها خواهیم داشت

$$\psi_i \psi_j' - \psi_j \psi_i' = 0 \quad (13-4)$$

معادله (13-4) می تواند به صورت زیر حل شود

$$\begin{aligned} \frac{\psi_j'}{\psi_j} &= \frac{\psi_i'}{\psi_i}, & \frac{d\psi_j}{\psi_j} &= \frac{d\psi_i}{\psi_i}, \\ \ln \psi_j &= \ln \psi_i + \ln C, & \psi_j &= C \psi_i \end{aligned} \quad (14-4)$$

اما چون ψ_i و ψ_j هر دو به نجار شده فرض شده اند نتیجه می شود که باید C را برابر با یک قرار دهیم و ψ_i و ψ_j در واقع پیکسان اند، و بدین ترتیب قضیه با روش خلف اثبات می شود.

* کمیت

$$W = \psi_i \psi_j' - \psi_j \psi_i' = \begin{vmatrix} \psi_i & \psi_j \\ \psi_i' & \psi_j' \end{vmatrix}$$

رنگین آن تابعهای ψ_i و ψ_j نامیده می شود.

در واقع ، می‌توانستیم در اثبات قضیه ۹ ، را به موسیله ψ_i^* جایگزین کنیم و نتیجه بگیریم که $\psi_i^* \psi_j = \delta_{ij}$ ، که ثابت می‌کند ویژه تابعهای مقید یک هامیلتونی یک بعدی نیز علی‌الاصول حقیقی است .

از قضیه ۲ در فصل ۳ نتیجه می‌شود که ویژه تابعهای مقید یکتا هستند و دویده و متعادل‌اند

یعنی

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_j^*(x) \psi_i(x) dx = \delta_{ji}$$

۶ - چاه نامتناهی

یک چاه نامتناهی به موسیله یک پتانسیل $V(x)$ ، که برای $x \leq 0$ داشته باشیم و برای جاهای دیگر $V(x) = \infty$ ، توصیف می‌شود (شکل ۴). هامیلتونی یک ذره در این چاه عبارت است از $(p^2/2m) + V(x) = E$. از نظر کلاسیکی ، حرکت در اشر بازتابهای متوالی از دیوارهای چاه ، در داخل چاه باقی می‌ماند . عملکر هامیلتونی متناظر فقط حالت‌های مقید را دارا می‌باشد و دارای یک طیف گسته است . چون V برای $x > 0$ و $x < 0$ بینهایت است ، خواهیم خواست که ψ در همه‌جا در خارج از چاه صفر باشد . بنابراین باید فقط جواب داخلی ψ را که در رابطه

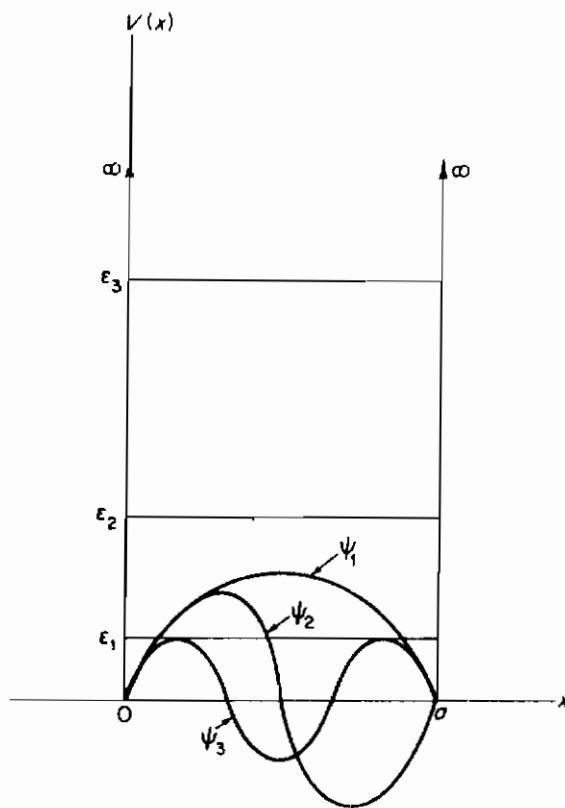
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_n = \epsilon_n \psi_n$$

صدق می‌کند و در روی مرزها صفر می‌شود ، پیدا کنیم . جواب عمومی عبارت است از

$$\psi_n = A_n \sin k_n x + B_n \cos k_n x \quad \left(k_n = \left(\frac{2m\epsilon_n}{\hbar^2} \right)^{1/2} \right)$$

با اعمال شرط پیوستگی در مبدأ ، یعنی $\psi_n(0) = 0$ ، نتیجه می‌گیریم $B_n = 0$. در $x = a$ باید داشته باشیم $\psi_n(a) = 0$ که نتیجه می‌گیریم

$$\psi_n(a) = A_n \sin k_n a = 0 \quad (15-4)$$



شکل (۴-۵). چاه بینهایت و چند ویژه مقدار و ویژه تابع آن

معادله (۱۵-۴) فقط در صورتی می‌تواند حل (غیربدیدهی، $A_n \neq 0$) شود که شناسه تابع سینوسی محدود به مقادیر

$$k_n a = n\pi \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

یا

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \quad (16-4)$$

باشد. این مقادیر ویژه تابعهایی به شکل $\psi_n = A_n \sin(n\pi/a)x$ ایجاد می‌کنند. ضرایب توسط شرط بمنجاش زیر تعیین خواهند شد*

$$\int \psi_n^* \psi_n dx = |A_n|^2 \int_0^a dx \sin^2\left(\frac{n\pi}{a} x\right) = |A_n|^2 \frac{1}{2} a = 1$$

* ثابت بمنجاش همواره حقیقی و مثبت در نظر گرفته خواهد شد.

* یا $A_n = (2/a)^{1/2}$. ویژه تابعهای وابسته به چاه اکنون به شکل زیراند*

$$\psi_n = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin \frac{n\pi}{a} x \quad (0 \leq x \leq a) \quad (17-4)$$

$\psi_n = 0 \quad (\text{در جاهای دیگر})$

و ویژه مقدارهای آن، با توجه به (۱۶-۴)، به صورت

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}\right) n^2 \quad (18-4)$$

در می‌آیند. چند ویژه تابع و ویژه مقدار اول در شکل (۱۵-۴) رسم شده‌اند. خاطرنشان کنیم که این ویژه تابعها، همان‌طور که انتظار می‌رفت، حقیقی و ناتبیگن‌اند. یک محاسبه ساده نشان می‌دهد که این توابع دو بهدو متعامداند. جالب توجه است که انرژی حالت پایه ($n=1$) صفر نیست. بعدها خواهیم دید که این پدیده یک نتیجه مستقیم از اصل عدم قطعیت است.

یک محاسبه نشان می‌دهد که مقدار قابل انتظار \hat{p} در حالت پایه برابر است با

$$\begin{aligned} \langle p \rangle_1 &= \langle \varepsilon_1 | \hat{p} | \varepsilon_1 \rangle = \int_0^a \psi_1^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi_1(x) dx \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx = 0 \end{aligned}$$

مع الوصف، چون $\hat{p}^2 = 2m\hat{H}^2$ (در داخل چاه)، داریم

$$\langle p^2 \rangle_1 = 2m \langle \hat{H}^2 \rangle_1 = 2m\varepsilon_1$$

لذا، عدم قطعیت در حالت پایه خواهد شد

$$\Delta p_1 = [\langle p^2 \rangle_1 - \langle p \rangle_1^2]^{1/2} = (\langle p^2 \rangle_1)^{1/2} = (2m\varepsilon_1)^{1/2} = \frac{\hbar\pi}{a} \quad (19-4)$$

* توجه کنید که مشتق ψ در $x=0$ و $x=a$ پیوسته نیست، این امر به ناپیوستگی بینهایت ($V(x)$) در این نقاط نسبت داده می‌شود. به‌پا نوشته صفحه ۹۷ رجوع کنید.

توجه کنیم که، هرچه پهنهای چاه، که ذره در آن جایگزیده است، کاهش یابد، عدم قطعیت θ ، همان طور که از اصل عدم قطعیت بر می‌آید، افزایش می‌یابد. اما چون Δp نمی‌تواند (برای مقدار متناهی a) صفر شود، (۱۹-۴) ایجاب می‌کند که θ نمی‌تواند صفر باشد. در واقع، تساوی آخر در (۱۹-۴) می‌تواند برای محاسبه انرژی حالت پایه یک ذره در داخل چاهی با پهنهای a ، بدون توجه به شکل مشخص آن، مورد استفاده قرار گیرد. استفاده از ویژه تابعها و انرژیهایی که توسط (۱۷-۴) و (۱۸-۴) داده شده‌اند، ساختن "انتشاردهنده" $G(x, x', t - t_0)$ را ممکن می‌سازد. حرکت یک حالت دلخواه در داخل چاه می‌تواند با استفاده از (۹۳-۳) تعیین شود.

۷- چاه متقارن نامتناهی

تقارن‌هامیلتونی اغلب اوقات در ویژه حالت‌های آن منعکس است. این نکته را با انتقال چاه مذکور در بخش قبل به فاصله $a/2$ در جهت منفی محور x نشان می‌دهیم. احساس فیزیکی به ما می‌گوید که در این انتقال ویژه مقدارهای انرژی دست نخورده باقی می‌مانند. پتانسیل جدید $V(x)$ و ویژه تابعها با استفاده از تبدیل $x \rightarrow x + a/2$ به دست می‌آیند. پتانسیل (که اینک متقارن است) و ویژه تابعها خواهند شد (شکل ۴-۶).

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 && \text{برای } -a/2 \leq x \leq a/2 \\ V(x) &= \infty && \text{در جاهای دیگر} \end{aligned}$$

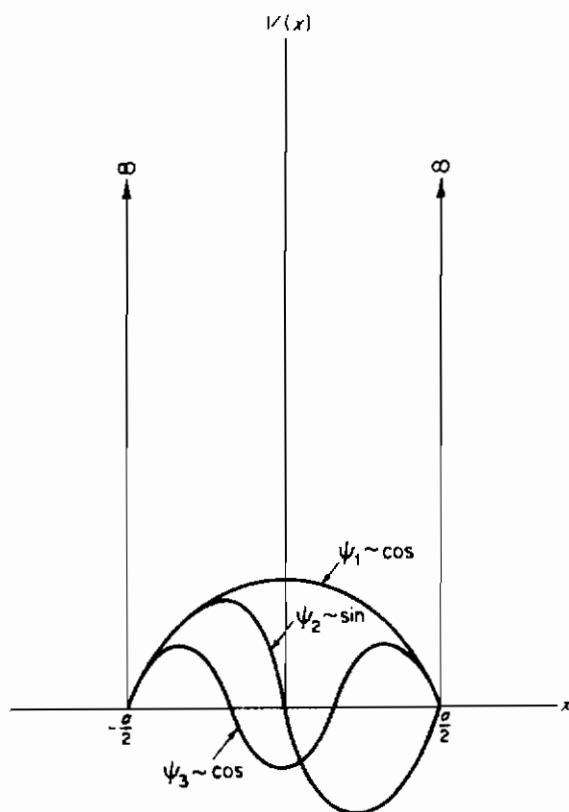
و

$$\psi_n(x) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin \frac{n\pi}{a} \left(x + \frac{a}{2}\right) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin \left(\frac{n\pi x}{a} + \frac{n\pi}{2}\right)$$

می‌بینیم که دو مجموعه جواب داریم، یعنی،

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \cos \frac{n\pi}{a} x && (n = 1, 3, 5, \dots) \\ &&& (-a/2 \leq x \leq a/2) \end{aligned}$$

$$\psi_n(x) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin \frac{n\pi}{a} x \quad (n = 2, 4, 6, \dots)$$



شکل (۴-۶). چاه متقارن نامتناهی و تقارن و پاد تقارن ویژه تابعهای آن

ویژه تابعهای کسینوسی دارای ویژگی $\psi_n(x) = \psi_n(-x)$ هستند، یعنی، نسبت به انعکاسهای نسبت به مبدأ متقارن‌اند. توابع سینوسی دارای ویژگی $\psi_n(x) = -\psi_n(-x)$ می‌باشند و پاد متقارن‌اند. در بخش بعدی خواهیم دید که توابع متقارن و پاد متقارن به ترتیب توابع با پاریته زوج و با پاریته فرد نامیده می‌شوند. در هردو حالت فرد و زوج، چگالی $|\psi|^2$ یک تابع زوج است. این تقارن انعکاسی تصادفی نیست، بلکه، همان‌طور که در زیر نشان خواهیم داد، از خاصیت تقارنی هامیلتونی ناشی می‌شود.

۸- پاریته

عملگر (هرمیتی) پاریته^{*} \hat{P} را که با خاصیت جابه‌جایی

* عملگر پاریته یک تابع بندادی از ψ و ψ نیست ولذا مشابه کلاسیکی ندارد. این مثالی از یک عملگر تقارنی است.

$$\hat{P}\hat{\mathbf{f}} = -\hat{\mathbf{f}}\hat{P} \quad (20-4)$$

یا

$$[\mathbf{r}, \hat{P}]_+ = 0$$

تعریف شده است وارد می‌کنیم ، که در آن پاد جابه‌جاگر توسط

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

تعریف شده است . معادله (۲۰-۴) وقتی $\hat{\mathbf{f}}$ را بهوسیله $\hat{\mathbf{p}}$ جایگزین کنیم (رک‌مسئله ۸-۴) نیز صادق است . از (۲۰-۴) نتیجه می‌شود

$$\hat{P}\hat{F}(\hat{\mathbf{f}}, \hat{\mathbf{p}}) = \hat{F}(-\hat{\mathbf{f}}, -\hat{\mathbf{p}})\hat{P}$$

که در آن $\hat{\mathbf{f}}$ تابع دلخواهی از $\hat{\mathbf{r}}$ و $\hat{\mathbf{p}}$ است . اگر یادآوری شود که $\hat{\mathbf{f}}$ بهوسیله یک سری تیلور تعریف شده است رابطه اخیر روشن‌تر می‌شود . اگر $\hat{\mathbf{f}}$ تابع زوجی از $\hat{\mathbf{r}}$ و $\hat{\mathbf{p}}$ باشد داریم $\hat{F}(-\hat{\mathbf{r}}, -\hat{\mathbf{p}}) = \hat{F}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}})$. بنابراین $\hat{\mathbf{f}}$ با هر تابع زوجی از $\hat{\mathbf{r}}$ و $\hat{\mathbf{p}}$ جابه‌جاپذیر است (یعنی ،

$$[\hat{P}, \hat{F}_{\text{even}}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{f}})] = 0 \quad (21-4)$$

با استفاده از خواص جابه‌جاپذیری عملگر پاریته می‌توان تأثیر $\hat{\mathbf{r}}$ روی ویژه‌کت $|r\rangle$ را تعیین کرد . با تأثیردادن $\hat{\mathbf{r}}$ روی معادله ویژه‌مقداری $\langle r|r\rangle = r|r\rangle$ و استفاده از (۲۰-۴) خواهیم داشت

$$\begin{aligned} \hat{P}\hat{\mathbf{f}}|r\rangle &= r\hat{P}|r\rangle \\ -\hat{\mathbf{f}}\{\hat{P}|r\rangle\} &= r\{\hat{P}|r\rangle\} \end{aligned}$$

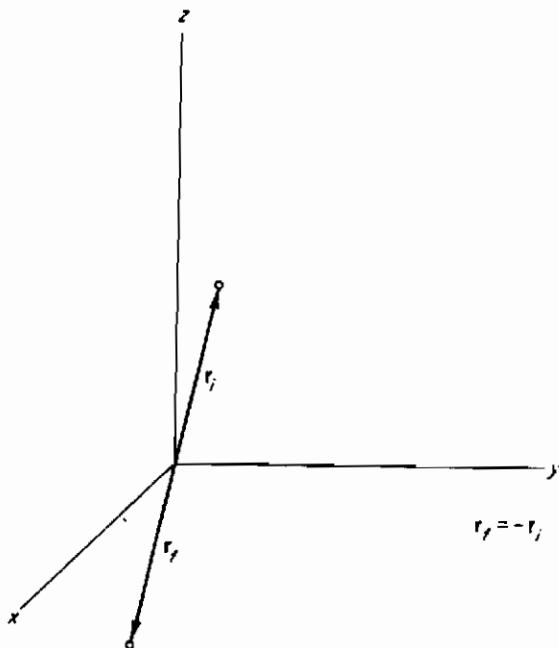
یا

$$\hat{\mathbf{f}}\{\hat{P}|r\rangle\} = -r\{\hat{P}|r\rangle\} \quad (22-4)$$

بردار داخل پوانتزها یک ویژه کت $\hat{\mathbf{f}}$ با ویژه مقدار $-r$ است، بدین ترتیب می‌توانیم اتحاد زیر را بسازیم

$$\hat{P}|r\rangle = |-r\rangle \quad (23-4)$$

بنابراین تأثیر عملگر پاریته ایجاد حالتی است که در آن ذره نسبت به مبدأ منعکس شده باشد (شکل ۷-۴) .



شکل (۷-۴) . اثر انعکاسی عملگر پاریته روی ذره‌ای که در ابتدا در \mathbb{R}^3 قرار داشته است .

با دوبار تأثیردادن \hat{P} روی $|r\rangle$ ، و با توجه به اینکه دو انعکاس متالی معادل با یک عمل همانی است ، می‌توان نوشت

$$\hat{P}\hat{P}|r\rangle = \hat{P}^2|r\rangle = |r\rangle$$

* در نتیجه

$$\hat{P}^2 = \hat{P}\hat{P} = \hat{I} \quad (24-4)$$

از (۲۴-۴) می‌توان نتیجه گرفت (رک مسئله ۱۴-۴) که ویژه‌مقدارهای \hat{P} عبارتند از $1 \pm i$. آن ویژه‌حالتهای \hat{P} که واپسی به ویژه‌مقدار $1 +$ هستند حالتهای با پاریته زوج می‌باشند . ویژه‌مقدار $1 -$ متناظر با حالتهای با پاریته فرد است . از نظر ریاضی می‌توان نوشت

$$\hat{P}|\beta(\text{even})\rangle = +1|\beta(\text{even})\rangle$$

* توجه کنیم که \hat{P} هم هرمیتی است و هم پکانی زیرا $\hat{P}^\dagger = \hat{P}$ و $\hat{I} = \hat{P}^\dagger\hat{P} = \hat{P}\hat{P}^\dagger = \hat{P}^2 = \hat{P}$

و

$$\hat{P}|\beta(\text{odd})\rangle = -1|\beta(\text{odd})\rangle \quad (25-4)$$

چون هامیلتونی ای که در اثر انعکاس تغییرناپذیر باشد^{*} $\hat{\mathcal{H}} = (\hat{p}^2/2m) + V(x)$ با عملگر پاریته، $\hat{\sigma}_z$ ، جایه‌جاپذیر است نتیجه می‌شود که دو عملگر باید دارای حداقل یک مجموعه ویژه بردارهای مشترک باشند. می‌توان نتیجه گرفت که هر پتانسیل متقارنی دارای حداقل یک مجموعه ویژه‌حالتهایی است که پاریته معینی دارند، یعنی، فرد یا زوج‌اند. ویژه تابع یک حالت با پاریته زوج دارای ویژگی زیر است

$$\begin{aligned}\psi_{\beta_{\text{even}}}(\mathbf{r}) &= \langle \mathbf{r} | \beta(\text{even}) \rangle = \langle \mathbf{r} | \{\hat{P}\} | \beta(\text{even}) \rangle \\ &= \{\langle \mathbf{r} | \hat{P} \rangle\} | \beta(\text{even}) \rangle \\ &= \langle -\mathbf{r} | \beta(\text{even}) \rangle = \psi_{\beta_{\text{even}}}(-\mathbf{r})\end{aligned} \quad (26-4)$$

یعنی، در اثر انعکاس نسبت به مبدأ، تغییرناپذیر است. به طریق مشابهی می‌توان نشان داد که برای حالتهای با پاریته فرد داریم

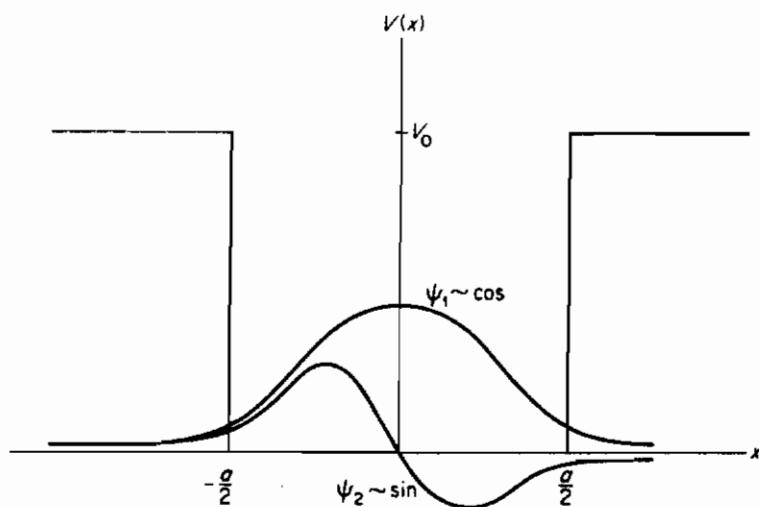
$$\psi_{\beta_{\text{odd}}}(\mathbf{r}) = -\psi_{\beta_{\text{odd}}}(-\mathbf{r}) \quad (27-4)$$

چون ویژه‌حالتهای مقید یک بعدی ناتبیگن و بنابراین یکتا هستند، نتیجه می‌شود که حالتهایی که متعلق به یک هامیلتونی متقارن هستند لزوماً پاریته معینی دارند؛ زوج یا فرد‌اند.

۹- چاه متقارن متناهی

برای نشان دادن اینکه چگونه تقارن برای ساده کردن مسئله مورد استفاده قرار می‌گیرد، ذره‌ای را که در یک چاه متقارن متناهی، $V(x) = V_0 - a/2 \leq x \leq a/2$ برای $0 \leq x \leq a/2$ در جاهای دیگر (شکل ۸-۴)، مقید است در نظر می‌گیریم.

* چون فرض می‌کنیم هامیلتونی به صورت $\hat{\mathcal{H}} = (\hat{p}^2/2m) + V(x)$ است، \hat{p} خود بخود نسبت به جایگزینی \hat{p} به وسیله \hat{p} - تغییرناپذیر است. به عبارت دیگرانریزی جنبشی همیشه با عملگر پاریته جایه‌جاپذیر است.



شکل (۸-۴) . چاه متقارن متناهی و تعدادی از ویژه تابعهای آن

بحث خود را به حالت‌های مقیدی که برای آنها $V < \epsilon_n$ است محدود می‌کنیم . معادله شرودینگر دارای جوابهای عمومی زیر است

$$\begin{aligned}\psi_n^I(x) &= C_n e^{K_n x} + E_n e^{-K_n x} & (x < -a/2) \\ \psi_n^{II}(x) &= A_n \sin k_n x + B \cos k_n x & (-a/2 \leq x \leq a/2) \\ \psi_n^{III}(x) &= D_n e^{-K_n x} + F_n e^{K_n x} & (a/2 < x)\end{aligned}\quad (28-4)$$

که در آنها

$$k_n = \left(\frac{2m\epsilon_n}{\hbar^2} \right)^{1/2} \quad \text{و} \quad K_n = \left(\frac{2m(V_0 - \epsilon_n)}{\hbar^2} \right)^{1/2} \quad (29-4)$$

چون حالت‌های مقید ایجاب می‌کنند که $\psi(\pm\infty) = 0$ ، باید در جوابهای خارجی قرار دهیم $E_n = F_n = 0$. سپس، خاطرنشان می‌کنیم که ویژه تابعهای مقیدیک هامیلتونی متقارن یک بعدی باید پا دارای پاریته فرد (پاد متقارن) باشند پا دارای پاریته زوج (متقارن). توابع زوج را می‌توان، با توجه به اینکه رابطه $(x)_{n+1} \psi = (-x)_{n+1} \psi$ در صورتی برقرار است که داشته باشیم $A_n = 0$ و $C_n = D_n$ ، ایجاد کرد . بهتر است که به این حالتها اعداد کوانتومی فرد را نسبت دهیم ، دلیل این کار بهزودی روشن خواهد شد . بنابراین ویژه تابعهای زوج دارای شکل زیراند

$$\begin{aligned}\psi_n^I &= D_n e^{K_n x} \\ \psi_n^{II} &= B_n \cos k_n x \quad (n = 1, 3, 5, \dots; \text{ پاریته زوج}) \\ \psi_n^{III} &= D_n e^{-K_n x}\end{aligned}\quad (30-4 \text{ الف})$$

با نسبت دادن اعداد زوج به توابع فرد و با توجه به اینکه $(-\psi_n)$ ایجاب می‌کند که $C_n = -D_n$ و $B_n = 0$ باشد، خواهیم داشت

$$\begin{aligned}\psi_n^I &= C_n e^{K_n x} \\ \psi_n^{II} &= A_n \sin k_n x \quad (n = 2, 4, 6, \dots; \text{ پاریته فرد}) \\ \psi_n^{III} &= -C_n e^{-K_n x}\end{aligned}\quad (30-4 \text{ ب})$$

برای هر حالت پاریته، می‌خواهیم که ویژه تابع و مشتق آن در $x = \pm a/2$ پیوسته باشد. به علت تقارن ψ ، پیوستگی در $x = +a/2$ خود به خود پیوستگی در $x = -a/2$ را تأمین می‌کند. شرایط لازم برای پیوستگی در $x = a/2$ در جدول (۲-۴) خلاصه شده‌اند. با تقسیم (ب) بر (الف) در جدول (۲-۴)، روابط زیر را به دست می‌وریم

$$k_n \tan \frac{1}{2} k_n a = K_n \quad (31-4 \text{ الف})$$

$$k_n \cot \frac{1}{2} k_n a = -K_n \quad (31-4 \text{ ب})$$

به علاوه، می‌توان از (الف) برای بیان C_n یا D_n بر حسب B_n یا A_n استفاده کرد. در این صورت ویژه تابعها به صورت زیر در خواهند بود

$$\begin{aligned}\psi_n^I &= B_n (e^{K_n a/2} \cos \frac{1}{2} k_n a) e^{K_n x} \\ \psi_n^{II} &= B_n \cos k_n x \quad (\text{پاریته زوج}; n = 1, 3, 5, \dots) \\ \psi_n^{III} &= B_n (e^{K_n a/2} \cos \frac{1}{2} k_n a) e^{-K_n x}\end{aligned}\quad (32-4 \text{ الف})$$

و

$$\begin{aligned}\psi_n^I &= -A_n (e^{K_n a/2} \sin \frac{1}{2} k_n a) e^{K_n x} \\ \psi_n^{II} &= A_n \sin k_n x \quad (\text{پاریته فرد}; n = 2, 4, 6, \dots) \\ \psi_n^{III} &= A_n (e^{K_n a/2} \sin \frac{1}{2} k_n a) e^{-K_n x}\end{aligned}\quad (32-4 \text{ ب})$$

جدول (۲-۴)

	پاریته زوج	پاریته فرد
a.	$\psi_n^{II}(a/2) = \psi_n^{III}(a/2)$ $B_n \cos \frac{1}{2}k_n a = C_n e^{-K_n a/2}$	a. $\psi_n^{II}(a/2) = \psi_n^{III}(a/2)$ $A_n \sin \frac{1}{2}k_n a = D_n e^{-K_n a/2}$
b.	$\psi_n'^{II}(a/2) = \psi_n'^{III}(a/2)$ $-k_n B_n \sin \frac{1}{2}k_n a = -K_n C_n e^{-K_n a/2}$	b. $\psi_n'^{II}(a/2) = \psi_n'^{III}(a/2)$ $k_n A_n \cos \frac{1}{2}k_n a = -K_n D_n e^{-K_n a/2}$

ضرایب A_n و B_n بوسیله شرایط بهنگارش تعیین می‌شوند. وقتی ϵ_n (K_n و k_n) تعیین شد، ویژه تابعها به طور یکتاوی به دست خواهند آمد. این ویژه مقدارهای انرژی از (۳۱-۴ الف) و (۳۱-۴ ب) به دست می‌آیند. چون این معادلات غیرجبری هستند، بهترین روش برای حل آنها روش ترسیمی است. قرار می‌دهیم

$$R = \left(\frac{mV_0 a^2}{2\hbar^2} \right)^{1/2} \quad \text{و} \quad \xi_n = \left(\frac{m\epsilon_n a^2}{2\hbar^2} \right)^{1/2} \quad (33-4)$$

(۳۱-۴ الف) و (۳۱-۴ ب) بر حسب آنها خواهند شد

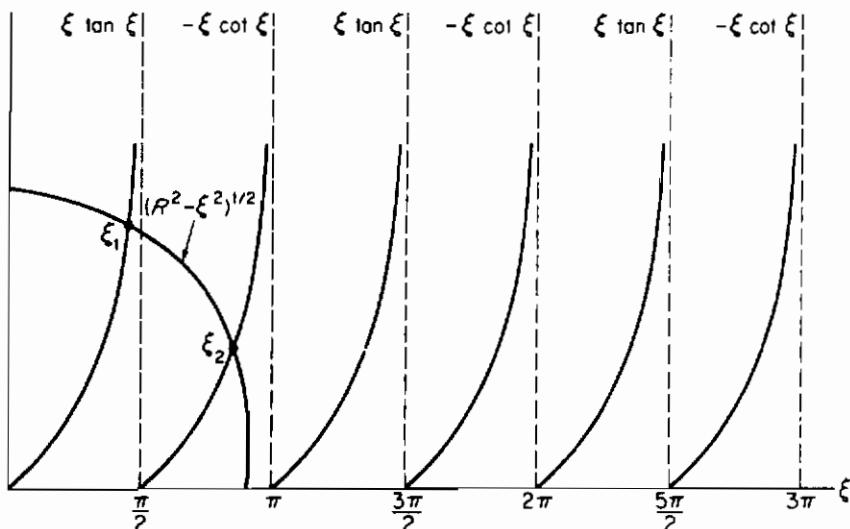
$$\xi_n \tan \xi_n = (R^2 - \xi_n^2)^{1/2} \quad \text{و} \quad -\xi_n \cot \xi_n = (R^2 - \xi_n^2)^{1/2}$$

جوابهای ξ_n ویژه مقدارهای انرژی ϵ_n در (۳۳-۴) را به دست می‌دهند و خودشان بوسیله نقاط تقاطع تابع دایره‌ای $\xi^2 - R^2$ با توابع مثلثاتی $\tan \xi$ و $\cot \xi$ (شکل ۹-۴) به دست می‌آیند.

بنابراین می‌توانیم ویژه تابعها را با تناوب حالت‌های با پاریته زوج و فرد، یعنی، $n=1, 2, 3, 000$ برای حالت‌های با پاریته زوج و $n=2, 4, 6, 000$ برای حالت‌های با پاریته فرد، مرتب کنیم. ملاحظه می‌کنیم که اولین جواب ξ_1 (پاریته زوج) متناظر است با حالت پایه، در حالی که دومین جواب ξ_2 (پاریته فرد) متعلق است به اولین حالت برانگیخته، و سومین جواب ξ_3 باز هم متعلق است به پاریته زوج، و الی آخر.

هرچه چاه عمیق‌تر، یعنی، V_0 بزرگ‌تر باشد، شعاع R تابع دایره‌ای بزرگ‌تر است، و بنابراین نقاط تقاطع زیاد‌تری با توابع مثلثاتی داریم، و در نتیجه، حالت‌های مقید‌زیاد‌تری خواهیم داشت. از شکل (۹-۴) می‌توان نشان داد که همیشه حداقل یک نقطه تقاطع وجود دارد، به طوری که حتی در تنگترین چاهها حداقل یک حالت مقید وجود دارد، و پاریته‌آن

زوج است.



شکل (۹-۴). حل ترسیمی برای ویژه مقدارهای یک چاه متقاض متناهی

بالاخره، با در نظر گرفتن حد $\infty \rightarrow V_0$ ، ارتباط آنرا با چاه بینهایت تحقیق می‌کیم از (۹-۴) نتیجه می‌شود که $\infty \rightarrow K_n$ و جوابهای خارجی در (۳۰-۴) در حقیقت هم برای حالت‌های زوج و هم برای حالت‌های فرد صفر می‌شوند. بعلاوه، شعاع تابع دایره‌ای (شکل ۹-۴) به سمت بینهایت میل می‌کند، و توابع $\xi \tan \xi$ و $\xi \cot \xi$ - را در نقاط مجانبی $\xi = \frac{1}{2}n\pi$ قطع می‌کند. ویژه مقدارها، از (۳۲-۴)، به صورت

$$\frac{m\varepsilon_n a^2}{2\hbar^2} = \zeta_n^2 = \frac{1}{4} n^2 \pi^2$$

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2$$

به دست می‌آیند. این نتیجه با نتایج قبلی برای ویژه مقدارهای انرژی یک چاه بینهایت مطابقت می‌کند.

۱۰- نوسانگر هماهنگ

مکانیک کوانتومی یک ذره که به وسیله یک پتانسیل کشسان $\frac{1}{2}kx^2$ به طرف مرکز کشیده

می‌شود هم‌دارای اهمیت عملی و هم‌دارای اهمیت آزمودشی است. در مسائل فیزیکی که تابش الکترومغناطیسی، ارتعاشات شبکه‌ای در جامدات، و ارتعاشات مولکولی را در بر دارند، حرکات می‌توانند به نوسانات ساده یک‌بعدی تجزیه شوند. نخست ویژه مقدارها و ویژه تابعها را در مکانیک موجی شروعینگر به دست می‌آوریم، سپس ثابت می‌کنیم که این جوابها می‌توانستند با استفاده از صورت‌بندی عملگری به دست آیند.

معادله شروعینگر برای نوسانگر عبارت است از

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right\} \psi_n = \epsilon_n \psi_n \quad (34-4)$$

که در آن $m\omega^2 = k/m$. همان‌طور که قبلاً ثابت کردیم، این هامیلتونی متقارن فقط حالتهای مقید را نامیم می‌کند و بنابراین دارای یک طیف گستره است. ویژه تابعها نیز حقیقی، ناتبیهگن، یکتا، متقابلاً متعامد، و با پاریته معین می‌باشد.

با وارد کردن متغیر بدون بعد $x = \sqrt{\alpha/\hbar}\xi$ ، که در آن $\alpha = m\omega^2/\hbar$ است، (34-4) خواهد

شد

$$\frac{d^2\psi_n(\xi)}{d\xi^2} + \left(\frac{\lambda_n}{\alpha} - \xi^2 \right) \psi_n(\xi) = 0 \quad (35-4)$$

با $\lambda_n = 2m\epsilon_n/\hbar^2$. فقط آن جوابهایی که در شرط $\psi(\pm\infty) = 0$ صدق کنند قابل قبول‌اند. خواهیم دید که اگر ϵ را به دلخواه انتخاب کنیم، جواب (35-4) معمولاً در بینهایت و اگر می‌شود. بنابراین، ویژه‌مقدارهای انرژی برای مسئله، آنهایی هستند که برای آنها (35-4) دارای جوابهایی باشد که در بینهایت صفر شوند.

روش حل (35-4) بر نظریه متعارف معادلات دیفرانسیل، که برای دانشجویان ریاضی شناخته شده است، پایه‌گذاری شده است. ما با این فرض شروع می‌کنیم که جوابی به‌شکل

$$\psi = G(\xi)H(\xi) \quad (36-4)$$

وجود دارد که در آن $G(\xi)$ تابعی است که رفتار ψ را برای مقادیر بزرگ $|\xi|$ تشریح می‌کند و $H(\xi)$ یک سری بینهایت است. تابع $G(\xi)$ جواب مجانبی نامیده می‌شود و می‌تواند با بررسی رفتار معادله دیفرانسیل در فاصله بسیار دوراز مبداء به دست آید. برای مقدار مجانبی $\xi (\infty \rightarrow |\xi|)$ می‌توان قرار داد $\alpha/\lambda_n \gg \xi^2$ و (35-4) را به صورت

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} - \xi^2\psi \simeq 0$$

نوشت که دو جواب مجانبی آن که به طور خطی از یکدیگر مستقل‌اند عبارتند از $e^{\xi^2/2}$ و $e^{-\xi^2/2}$. جواب اول در بینهایت واگرا می‌شود و منجر به ویژه تابعهای می‌شود که برای حالت‌های مقید غیرقابل قبول‌اند. معادله (۳۶-۴) پیشنهاد می‌کند که یک جواب آزمایشی به شکل $\psi = e^{-\xi^2/2} H(\xi)$ به کار ببریم، که در آن صورت (۳۵-۴) خواهد شد

$$\frac{d^2H(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH(\xi)}{d\xi} + \left(\frac{\lambda_n}{\alpha} - 1\right)H(\xi) = 0 \quad (37-4)$$

معادله (۳۷-۴) معادله دیفرانسیل هرمیت است. بنا به فرض، $H(\xi)$ باید بتواند به صورت یک سری بینهایت به شکل

$$H = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j \quad (38-4)$$

بهان شود. با قراردادن (۳۸-۴) در معادله هرمیت و مشتق‌گیری از هر جمله سری، خواهیم داشت

$$\sum_{j=2}^{\infty} j(j-1)a_j \xi^{j-2} - 2\xi \sum_{j=1}^{\infty} ja_j \xi^{j-1} + \left(\frac{\lambda_n}{\alpha} - 1\right) \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j = 0$$

یا، با مجتمع کردن توانهای یکسان زیج،

$$\sum_{j=0}^{\infty} \left\{ (j+1)(j+2)a_{j+2} + \left[\frac{\lambda_n}{\alpha} - (1+2j)\right] a_j \right\} \xi^j = 0 \quad (39-4)$$

چون (۳۹-۴) باید برای تمام مقادیر ξ صادق باشد نتیجه می‌شود که هر کدام از ضرایب باید جداگانه صفر شود، و بدین ترتیب معادله هازگشتی دو جمله‌ای زیر را به دست می‌آوریم

$$a_{j+2} = - \left[\frac{(\lambda_n/\alpha) - (1+2j)}{(j+1)(j+2)} \right] a_j \quad (40-4)$$

با انتخاب مقدار دلخواهی برای a_0 ، یک جواب برای (۳۷-۴) به دست می‌آوریم. معادله

(۴۰-۴) می‌تواند برای بیان تمام ضرایب زوج متوالی برحسب a_0 مورد استفاده قرار گیرد. به عنوان مثال، برای $0 = j$ و $2 = j$ ، به ترتیب داریم

$$a_2 = - \left[\frac{(\lambda_n/\alpha) - 1}{2} \right] a_0$$

و

$$a_4 = \frac{-[(\lambda_n/\alpha) - 5]}{12} a_2 = \frac{[(\lambda_n/\alpha) - 5]}{12} \frac{[(\lambda_n/\alpha) - 1]}{2} a_0$$

به این طریق یک سری زوج به شکل

$$H_{\text{even}}(\xi) = a_0 \left[1 - \frac{((\lambda_n/\alpha) - 1)}{2} \xi^2 + \frac{((\lambda_n/\alpha) - 5)(\lambda_n/\alpha) - 1}{(12)(2)} \xi^4 - \dots \right] \quad (41-4)$$

ایجاد می‌کنیم. اگر برای a_0 مقدار دلخواهی انتخاب کنیم، جوابی به صورت سری فرد

$$H_{\text{odd}}(\xi) = a_1 \left[\xi - \frac{((\lambda_n/\alpha) - 3)}{6} \xi^3 + \frac{((\lambda_n/\alpha) - 3)((\lambda_n/\alpha) - 7)}{(6)(20)} \xi^5 - \dots \right] \quad (42-4)$$

به دست می‌آوریم. چون a_0 و a_1 دلخواه هستند، و دوسری به طور خطی از یکدیگر مستقل‌اند، جواب عمومی معادله هرمیت به شکل $H_{\text{general}}(\xi) = H_{\text{even}}(\xi) + H_{\text{odd}}(\xi)$ است. در این صورت جواب معادله شرودینگر (۳۵-۴) عبارت است از

$$\psi_{\text{general}}(\xi) = e^{-\xi^2/2} [H_{\text{even}}(\xi) + H_{\text{odd}}(\xi)] \quad (43-4)$$

و برای هر مقداری از λ_n/α معتبر است.

متاسفانه، تا اینجا هنوز کوانتش ظاهر نشده است. علت آن این است که (۴۳-۴) هنوز در شرایط مزدی مطلوب در بینهایت صدق نمی‌کند. در واقع، یک مقایسه آزمایشی نشان می‌دهد که برای $1 \gg |\xi|$ ، هم سری زوج و هم سری فرد حداقل ها سرعت تابع $e^{-\xi^2}$ به سمت بینهایت میل می‌کنند. در نتیجه، برای مقادیر بزرگ $|\xi|$ داریم

$$\psi = e^{-\xi^2/2} H(\xi) \sim e^{-\xi^2/2} e^{\xi^2} \rightarrow \infty \quad |\xi| \rightarrow \infty$$

و نتیجه می‌شود که ψ در بینهایت واکرا است و به این را غیرقابل قبول است.

اکنون جواب (۴-۲۵) را وقتی که

$$\frac{\lambda_n}{\alpha} = 2n + 1 \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

باشد بررسی می‌کنیم . اگر n زوج باشد ، معادله بازگشتی (۴-۲۵) نشان می‌دهد که a_{n+2} و تمام ضرایب بالاتر صفر می‌شوند . در این صورت ، جواب وابسته به n زوج بهصورت

$$\psi = e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \quad (\text{سری})$$

در می‌آید . چون دیدیم که سری (فرد) منجر به جواب غیرقابل قبولی می‌شود ، فقط چند جمله‌ای (زوج) را نگه می‌داریم (یعنی ، قرار می‌دهیم $a_1 = 0$) . به همین طریق اگر n فرد باشد ، فقط جملات فرد را ، که منجر به یک چند جمله‌ای (فرد) از درجه n می‌شوند ، نگاه می‌داریم . کاملاً معلوم است که $e^{-\xi^2/2}$ -برای مقادیر بزرگ $|\xi|$ بهر چند جمله‌ای غالب می‌کند ، در نتیجه ، فقط برای وقتی که $\lambda_n/\alpha = 2n + 1$ باشد ویژه تابعهای قابل قبولی به دست خواهیم آورد . با استفاده از تعریفهای λ_n و α نتیجه می‌گیریم که ویژه تابعهای مقید فقط برای انرژیهای

$$\frac{\lambda_n}{\alpha} = \frac{2\varepsilon_n}{\hbar\omega} = 2n + 1$$

یا

$$\varepsilon_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (44-4)$$

وجود دارند . ویژه تابعها به شکل

$$\psi_n(\xi) = e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \quad (45-4)$$

که در آن $H_n(\xi)$ یک چند جمله‌ای زوج یا فرد از درجه n است ، در می‌آیند . چون $e^{-\xi^2/2}$ تابع زوجی است ، زوج یا فرد بودن پاریته بستگی به مقدار n دارد . ضرایب به کمک (۴-۲۵) وقتی که a_0 و a_1 مشخص شده باشند ، تعیین می‌شوند . به طور قراردادی قرار می‌دهیم

$$a_0^{(n)} = \frac{(-1)^{n/2} n!}{[\frac{1}{2}n]!} \quad (n \text{ زوج})$$

و

$$a_1^{(n)} = \frac{(-1)^{(n-1)/2} 2(n!) }{[\frac{1}{2}(n-1)]!} \quad (n \text{ فرد})$$

که در این حالت ، $H_n(\xi)$ تبدیل به چند جمله‌ای هرمیت می‌شود . تعدادی از چند جمله‌ایهای اول عبارتنداز

$$\begin{aligned} H_0 &= 1 & H_1 &= 2\xi \\ H_2 &= -2 + 4\xi^2 & H_3 &= -12\xi + 8\xi^3 \\ H_4 &= 12 - 48\xi^2 + 16\xi^4 & H_5 &= 120\xi - 160\xi^3 + 32\xi^5 \end{aligned} \quad (46-4)$$

ویژه تابعها بر حسب این چند جمله‌ایهای هرمیت به شکل

$$\psi_n(\xi) = N_n e^{-\xi^2/2} H_n(\xi)$$

.

$$\psi_n(x) = N_n e^{-\alpha x^2/2} H_n(\sqrt{\alpha}x), \quad (47-4 \text{ الف})$$

در می‌آیند ، که در آنها ثابت بهنجارش عبارت است از

$$N_n = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \left(\frac{1}{2^n n!}\right)^{1/2} \quad (47-4 \text{ ب})$$

چند ویژه تابع بهنجارشده و ویژه مقدارهای اول نوسانگر عبارتنداز

$$\begin{aligned} \psi_0 &= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2}[1] & (\varepsilon_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega) \\ \psi_1 &= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{1}{2}} e^{-\alpha x^2/2}[2\sqrt{\alpha}x] & (\varepsilon_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega) \\ \psi_2 &= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{1}{8}} e^{-\alpha x^2/2}[4\alpha x^2 - 2] & (\varepsilon_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega) \end{aligned} \quad (48-4)$$

توجه کنیم که ویژه مقدارهای متوالی به طور مساوی به سیله انرژی $\hbar\omega$ از یکدیگر جدا شده‌اند . بنابراین ، طبیعت عمومی طیف با فرضیه پلانک که در فصل اول مورد بحث قرار گرفت مطابقت دارد . در ذیل ثابت خواهیم کرد که وجود یک انرژی نقطه صفر ، $\varepsilon_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ ، که در

نظریه پلانک غایب است، در اینجا به عنوان نتیجه مستقیمی از اصل عدم قطعیت ظاهر می‌شود، همان‌طور که در مورد چاه پتانسیل ظاهر شد.

۱۱- خواص ویژه تابعهای نوسانگر

محاسبات عناصر ماتریس، با استفاده از خواص چند جمله‌ای‌های هرمیت که در زیر آمده‌اند، آسان می‌شود

$$(1) \quad e^{\xi^2 - (z - \xi)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(\xi) \frac{z^n}{n!} \quad (\text{تابع مولد})$$

$$(2) \quad H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2}) \quad (\text{فرمول رودریگز})$$

$$(3) \quad H_{n+1}(\xi) - 2\xi H_n(\xi) + 2n H_{n-1}(\xi) = 0 \quad (49-4)$$

$$(4) \quad H_n'(\xi) = 2n H_{n-1}(\xi)$$

$$(5) \quad H_n''(\xi) = 4n(n-1)H_{n-2}(\xi).$$

به عنوان مثال، عناصر ماتریس \hat{x} می‌توانند به صورت

$$\begin{aligned} \langle \epsilon_m | \hat{x} | \epsilon_n \rangle &= \int \psi_m^*(x) x \psi_n(x) dx \\ &= \frac{1}{\alpha} \int \psi_m^*(\xi) \xi \psi_n(\xi) d\xi \end{aligned} \quad (50-4)$$

بیان شوند. با ضرب کردن دو طرف خاصیت (۳) بـ $e^{-\xi^2/2}$ رابطه زیر را به دست می‌آوریم

$$\xi e^{-\xi^2/2} H_n = n e^{-\xi^2/2} H_{n-1} + \frac{1}{2} e^{-\xi^2/2} H_{n+1}$$

$$\xi \frac{\psi_n}{N_n} = n \frac{\psi_{n-1}}{N_{n-1}} + \frac{1}{2} \frac{\psi_{n+1}}{N_{n+1}}$$

با

$$\xi \psi_n = n \frac{N_n}{N_{n-1}} \psi_{n-1} + \frac{1}{2} \frac{N_n}{N_{n+1}} \psi_{n+1} \quad (51-4)$$

با قراردادن (۵۱-۴) در (۵۰-۴)، عنصر ماتریس خواهد شد

$$\begin{aligned}\langle \epsilon_m | \hat{x} | \epsilon_n \rangle &= \frac{N_n}{N_{n-1}} \frac{n}{\alpha} \int \psi_m^* \psi_{n-1} d\xi + \frac{N_n}{2N_{n+1}\alpha} \int \psi_m^* \psi_{n+1} d\xi \\ &= \frac{N_n}{N_{n-1}} \frac{n}{\sqrt{\alpha}} \int \psi_m^* \psi_{n-1} dx + \frac{N_n}{2N_{n+1}\sqrt{\alpha}} \int \psi_m^* \psi_{n+1} dx \\ &= \frac{N_n}{N_{n-1}} \frac{n}{\sqrt{\alpha}} \delta_{m, n-1} + \frac{N_n}{2N_{n+1}} \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \delta_{m, n+1} \quad (52-4)\end{aligned}$$

بنابراین تنها عناصر غیرصفر ماتریس عبارتند از

$$\langle \epsilon_{n-1} | \hat{x} | \epsilon_n \rangle = \frac{N_n n}{N_{n-1} \sqrt{\alpha}} = \left(\frac{n}{2\alpha} \right)^{1/2} = \left(\frac{n\hbar}{2m\omega} \right)^{1/2} \quad (53-4 \text{ الف})$$

و

$$\langle \epsilon_{n+1} | \hat{x} | \epsilon_n \rangle = \frac{N_n}{N_{n+1}} \frac{1}{2\sqrt{\alpha}} = \left(\frac{n+1}{2\alpha} \right)^{1/2} = \left[\frac{(n+1)\hbar}{2m\omega} \right]^{1/2} \quad (53-4 \text{ ب})$$

عملگر \hat{x} می‌تواند در ویژه پایه ψ_n به صورت

$$\hat{x} \rightarrow \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{1/2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

ویژه پایه ψ_n

نمایش داده شود. از (۵۲-۴) دیده می‌شود که عناصر قطری ماتریس صفراند و داریم $0 = \langle \epsilon_n | \hat{x} | \epsilon_n \rangle$ ؛ بنابراین مکان متوسط ذره‌ای که در یک ویژه حالت نوسانگر قرار دارد در مبدأ است. یک محاسبه که خاصیت (۴) فسوق را درگیر می‌کند نشان می‌دهد که متوسط تکانه در هر حالت نیز صفر است (رک مسئله ۳-۸)، یعنی، $\langle p \rangle_n = 0$.

$\langle x^2 \rangle_n$ و $\langle p^2 \rangle_n$ به این سادگیها نیست. از قضیه ویریال* در مکانیک کلاسیکی، که بیان می‌کند میانگین‌های زمانی \bar{x} و \bar{p} برای یک نوسانگر با یکدیگر برابرند، استفاده خواهیم کرد. با تعمیم این قضیه به مقادیر قابل انتظار کوانتومی، می‌توانیم برای تمام حالت‌های نوسانگر قرار دهیم $\langle T \rangle_n = \langle V \rangle_n = \frac{1}{2}\epsilon_n$. اما چون $\langle T + V \rangle_n = \langle H \rangle_n$ نتیجه‌می‌شود، که از آن نتیجه می‌گیریم

$$\langle T \rangle_n = \frac{1}{2m} \langle p^2 \rangle_n = \frac{1}{2}\epsilon_n = \frac{1}{2}\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$$

و

$$\langle V \rangle_n = \frac{1}{2}m\omega^2 \langle x^2 \rangle_n = \frac{1}{2}\epsilon_n = \frac{1}{2}\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$$

با استفاده از این نتایج عدم قطعیت متغیرهای بندادی می‌توانند به صورت

$$\Delta p_n = [\langle p^2 \rangle_n - \langle p \rangle_n^2]^{1/2} = [(n + \frac{1}{2})\hbar m\omega]^{1/2}$$

و

$$\Delta x_n = [\langle x^2 \rangle_n - \langle x \rangle_n^2]^{1/2} = [(n + \frac{1}{2})\hbar/m\omega]^{1/2}$$

بیان شوند. بنابراین حاصل ضرب عدم قطعیت‌ها در n امین حالت نوسانگر عبارت است از

$$\Delta x_n \Delta p_n = (n + \frac{1}{2})\hbar \quad (54-4)$$

توجه کنیم که در هیچ حالتی این حاصل ضرب، همان‌طور که اصل عدم قطعیت ایجاب می‌کند، کوچکتر از \hbar نخواهد بود، در واقع حد پائینی در حالت پایه ($n = 0$) حاصل می‌شود. اگر انرژی نقطه صفر $\hbar\omega$ نبود (۵۴-۴) به صورت $\Delta p_n \Delta x_n = n\hbar$ در می‌آمد، که در این صورت اصل عدم قطعیت در حالت پایه نقض می‌شد.

* برای بحث درباره "قضیه ویریال" به کتاب زیر مراجعه کنید

J. Marion, "Classical Dynamics of Particles" 2nd ed.

Academic Press, New York, 1970

یا به مسائل ۲-۳ و ۴-۵ مراجعه کنید.

۱۲ - نوسانات در حالت‌های غیرمانا - تناظر کلاسیکی

اگر ذره‌ای تحت تاثیر یک نیروی بازگرداننده کشسان قرار داشته باشد و حالت اولیه آن بهوسیله یک ویژه‌حالت (مانای) ψ مشخص شود، مقادیر قابل انتظار \hat{x} و \hat{p} مانا هستند و در تمام زمانها داریم $\langle p \rangle = 0$ و $\langle x \rangle = 0$. با این وجود اگر حالت اولیه ذره (در $t = t_0 = 0$) یک حالت دلخواه $\psi(x)$ باشد تحول آن بهوسیله

$$\Psi(x, t) = \int G(x, x', t) \Psi(x') dx' \quad (55-4)$$

تعیین می‌شود، که در آن "انتشاردهنده"**، با توجه به (۴۹-۳)، (۴۴-۴) و (۴۷-۴)، عبارت است از

$$\begin{aligned} G(x, x', t) &= \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n^*(x') \psi_n(x) \exp \frac{-i\epsilon_n t}{\hbar} \\ &= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{2^n n!}\right) \exp \left[-\frac{1}{2} \alpha(x^2 + x'^2)\right] H_n(\sqrt{\alpha}x) \\ &\quad \cdot H_n(\sqrt{\alpha}x') \exp[-i(n + \frac{1}{2})\omega t] \end{aligned}$$

به علت وجود ضریب نیمه صحیح $(\frac{1}{2} + n)$ در توان عامل نوسانی، نتیجه می‌شود که انتشاردهنده دارای دوره تناوبی است که دو برابر دوره تناوب کلاسیکی $\tau_{\text{class}} = 2\pi/\omega$ است. در واقع، بعداز گذشت زمان τ_{class} ، انتشاردهنده و در نتیجه تابع حالت ψ در (۵۵-۴)، یک ضریب اضافی $\exp[i(n + \frac{1}{2})2\pi]$ ایجاد می‌کند؛ بنابراین، بعداز یک دوره تناوب کلاسیکی علامت آنها عوض می‌شود. با این وجود، چون مقادیر قابل انتظار به جای انتگرال ψ شامل انتگرال $\int \psi^2 dx$ می‌باشند در واقع مشاهده‌پذیرها با فرکانس طبیعی ω نوسان می‌کنند. فرکانس‌های نوسان $\langle x \rangle$ و $\langle p \rangle$ را می‌توانیم با استفاده از معادلات حرکت (۶۱-۳) که عبارتنداز

* این انتشاردهنده را می‌توان به صورت بسته زیر نیز بیان کرد

$$G(x, x', t) = \left[\frac{m\omega}{2\pi\hbar i \sin \omega t} \right]^{1/2} \exp \left\{ \frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega t} [(x^2 + x'^2) \cos \omega t - 2xx'] \right\}$$

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = -\frac{\langle [\hat{H}, \hat{x}] \rangle}{i\hbar} \quad , \quad \frac{d\langle p \rangle}{dt} = -\frac{\langle [\hat{H}, \hat{p}] \rangle}{i\hbar}$$

به دست آوریم که در آنها $\hat{H} = (\hat{p}^2/2m) + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$. چون \hat{x} با انرژی پتانسیل، و \hat{p} با انرژی جنبشی، در \hat{H} ، جایه‌جاپذیراند معادلات فوق خواهند شد

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = -\frac{1}{2mi\hbar} \langle [\hat{p}^2, \hat{x}] \rangle = -\frac{1}{2mi\hbar} \langle (\hat{p}\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p}\hat{p}) \rangle \quad (56-4)$$

و

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = -\frac{m\omega^2}{2i\hbar} \langle [\hat{x}^2, \hat{p}] \rangle = -\frac{m\omega^2}{2i\hbar} \langle (\hat{x}\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}\hat{x}) \rangle \quad (57-4)$$

با دوبار کاربرد متوالی رابطه جایه‌جاپذیری $\hat{x}\hat{p} = i\hbar\hat{1} + \hat{p}\hat{x}$ ، خواهیم داشت

$$\begin{aligned} \hat{x}\hat{p}\hat{p} &= (\hat{x}\hat{p})\hat{p} = (i\hbar\hat{1} + \hat{p}\hat{x})\hat{p} \\ &= i\hbar\hat{p} + \hat{p}(\hat{x}\hat{p}) \\ &= i\hbar\hat{p} + \hat{p}(i\hbar\hat{1} + \hat{p}\hat{x}) = 2i\hbar\hat{p} + \hat{p}\hat{p}\hat{x} \end{aligned}$$

به همین طریق می‌توان ثابت کرد که

$$\hat{p}\hat{x}\hat{x} = 2i\hbar\hat{x} + \hat{x}\hat{x}\hat{p}$$

در این صورت (۵۶-۴) و (۵۷-۴) خواهند شد

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{\langle p \rangle}{m} \quad , \quad \frac{d\langle p \rangle}{dt} = -m\omega^2\langle x \rangle$$

با مشتق‌گیری از هردو معادله نسبت به زمان و تفکیک آنها از یکدیگر دو معادله مرتبه دوم

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle p \rangle = -\omega^2 \langle p \rangle \quad , \quad \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = -\omega^2 \langle x \rangle$$

با جوابهای

$$\langle p \rangle = \langle p \rangle_0 \cos(\omega t + \phi_p) \quad (58-4)$$

$$\langle x \rangle = \langle x \rangle_0 \cos(\omega t + \phi_x) \quad (59-4)$$

به دست می‌وریم. بنابراین، با تایید قضیه اهرنفست، مقادیر قابل انتظار، در واقع، یک حرکت هارمونیک ساده با فرکانس کلاسیکی را نشان می‌دهند. اما فقط در صورتی که حالت اولیه یک ویژه حالت انرژی نباشد. نشان داده ایم که در چینن حالتی $0 = \langle x \rangle_0 = \langle p \rangle_0$ ، و $(58-4)$ و $(59-4)$ نشان می‌دهند که $\langle x \rangle$ و $\langle p \rangle$ متعدد با صفر باقی می‌مانند.

حائز اهمیت است که توجه کنیم که اگر $\langle p \rangle$ و $\langle x \rangle$ را به p_{class} و x_{class} وابسته کنیم، در حالت‌های نوسانی مانا هیچ ارتعاشی رخ نخواهد داد. اگر نوسانگر یک ذره باردار باشد، مدامی که سیستم در یک ویژه حالت انرژی باقی بماند، هیچ تابشی گسیل نخواهد شد. همان‌طوری که در فصل ۷ نشان خواهیم داد، ارتعاشاتی که با گسیل پرتوزا همراه هستند وقتی رخ می‌دهند که ذره بین حالت‌های ماناگذارهایی انجام دهد.

۱۳ - مسئله نوسانگر در نمادگذاری دیراک - روش نردبانی

در این بخش آخر می‌خواهیم نشان دهیم که مکانیک موجی فقط یکی از نمایش‌های زیاد مکانیک کوانتومی است و طیف هامیلتونی اساساً "به‌وسیله بستگی آن به \hat{x} و \hat{p} و به روابط جابه‌جاپذیری بین این متغیرها تعیین می‌شود. ما اکنون ویژه مقدارهای هامیلتونی نوسانگر و عناصر ماتریس ۲ در ویژه پایه هم را بدون توصل به‌نمایش مختصه‌ای به دست می‌وریم. می‌خواهیم ویژه مقدارهای معادله

$$\hat{\mathcal{H}} |n\rangle = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 \right) |n\rangle = \epsilon_n |n\rangle \quad (60-4)$$

را که در آن متغیرهای بندادی در رابط $\hat{1} = i\hbar\hat{p}$ صدق می‌کنند، به دست می‌وریم. عملگرهای "کاهش‌یافته" (بدون بعد) مختصه و تکانه

$$\hat{x}' = \left(\frac{m\omega}{2\hbar} \right)^{1/2} \hat{x} \quad \text{و} \quad \hat{p}' = \left(\frac{1}{2m\hbar\omega} \right)^{1/2} \hat{p}$$

را که بر حسب آنها $(60-4)$ خواهد شد

$$\hat{\mathcal{H}} |n\rangle = \hbar\omega(\hat{p}'^2 + \hat{x}'^2) |n\rangle = \epsilon_n |n\rangle$$

وارد می‌کنیم . توجه کنیم که هامیلتونی می‌تواند به صورت

$$\hat{\mathcal{H}} = \hbar\omega\{(\hat{x}' - i\hat{p}')(\hat{x}' + i\hat{p}') - i[\hat{x}', \hat{p}']\} \quad (61-4)$$

تجزیه شود . چون \hat{x}' و \hat{p}' جابه‌جاپذیر نیستند ، لازم است جمله آخر جمله‌های ضربدری حاصل ضرب را خنثی کند . جابه‌جاکر عبارت است از

$$[\hat{x}', \hat{p}'] = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2} \left(\frac{1}{2m\hbar\omega}\right)^{1/2} [\hat{x}, \hat{p}] = \frac{1}{2}i\hat{I} \quad (62-4)$$

سپس عملکر

$$\hat{n} = \hat{x}' + i\hat{p}' \quad (63-4\text{الف})$$

والحاقی آن

$$\hat{n}^\dagger = \hat{x}' - i\hat{p}' \quad (63-4\text{ب})$$

را وارد می‌کنیم . هامیلتونی (۶۱-۴) بر حسب آنها خواهد شد

$$\hat{\mathcal{H}} = \hbar\omega(\hat{N} + \frac{1}{2}) \quad (64-4)$$

که در آن $\hat{n}^\dagger \hat{n} = \hat{N}$. می‌توان هامیلتونی را به صورت تابعی از مختصه جدید \hat{n} و تکانه همیوغ بندادی آن \hat{n}^\dagger در نظر گرفت . از (۶۴-۴) می‌توان نشان داد که رابطه جابه‌جاپذیری برای این متغیرها عبارت است از $\hat{I} = [\hat{n}, \hat{n}^\dagger]$. توجه کنیم که این متغیرهای جدید هرمیتی نیستند ($\hat{n} \neq \hat{n}^\dagger$) و در نتیجه مشاهده‌پذیر نیستند ، ولی با این وجود بهما امکان می‌دهند که \hat{n} را به دست بیاوریم .

برای پیدا کردن ویژه بردارها و ویژه مقدارهای هامیلتونی در (۶۴-۴) کافی است معادله ویژه مقداری

$$\hat{N}|n\rangle = N_n|n\rangle \quad (65-4)$$

را حل کنیم . کتهای $|n\rangle$ معرف ویژه بردارهای مشترک \hat{n} و \hat{N} هستند که ویژه مقدارهای آنها به وسیله رابطه

$$\epsilon_n = \hbar\omega(N_n + \frac{1}{2}) \quad (66-4)$$

به یکدیگر مربوط می‌شوند. اکنون باید ثابت کرد که ویژه مقدارهای \hat{N} اعداد صحیح غیر-منفی‌اند، یعنی، $n = N_n$ که در آن $n = 1, 2, \dots$ با تاثیردادن \hat{n} روی (۶۵-۴) خواهیم داشت

$$\hat{n}\hat{N}|\eta\rangle = \hat{n}\hat{n}^\dagger\hat{n}|\eta\rangle = N_n\hat{n}|\eta\rangle$$

با کاربرد رابطه جایه‌جاپذیری $\hat{n}\hat{n}^\dagger = \hat{1} + \hat{n}^\dagger\hat{n}$ ، رابطه فوق به صورت

$$\{\hat{1} + \hat{n}^\dagger\hat{n}\}\hat{n}|\eta\rangle = N_n\hat{n}|\eta\rangle$$

یا، با ترانهادن، به صورت

$$\hat{N}\{\hat{n}|\eta\rangle\} = (N_n - 1)\{\hat{n}|\eta\rangle\} \quad (67-4)$$

در می‌آید. از رابطه اخیر، (۶۷-۴)، نتیجه می‌شود که اگر N_n یک ویژه‌مقدار باشد $1 - N_n$ نیز ویژه‌مقدار است، که نشان می‌دهد ویژه‌مقدارها باهم به اندازه یک عدد صحیح اختلاف دارند. به علاوه، جمله داخل پرانتز باید متناسب با ویژه بردار متاظربا ویژه‌مقدار $1 - N_n$ باشد، یعنی،

$$\hat{n}|\eta\rangle = C_n^-|n-1\rangle$$

که در آن C_n^- یک ثابت تناساب است. استدلال مشابهی در مورد عملگر \hat{n}^\dagger منجر به نتیجه*

$$\hat{n}^\dagger|\eta\rangle = C_n^+|n+1\rangle$$

می‌شود. با ضرب کردن هردو رابطه در برای آنها خواهیم داشت

$$\begin{aligned} \langle n|\hat{n}^\dagger\hat{n}|n\rangle &= |C_n^-|^2\langle n-1|n-1\rangle \\ \langle n|\hat{N}|n\rangle &= N_n = |C_n^-|^2 \end{aligned} \quad (4-68\text{ الف})$$

و

$$\begin{aligned} \langle n|\hat{n}\hat{n}^\dagger|n\rangle &= |C_n^+|^2\langle n+1|n+1\rangle \\ \langle n|1+\hat{N}|n\rangle &= 1 + N_n = |C_n^+|^2 \end{aligned} \quad (4-68\text{ ب})$$

* عملگرهای \hat{n} و \hat{n}^\dagger به ترتیب عملگرهای پائین آورده (یا مخرب) و بالا برده (یا مولد) نام‌گذاری می‌شوند.

از (۴-۶۸ الف) نتیجه می‌شود $0 \geq N_n$ ، بنابراین باید یک ویژه‌مقدار کمینه غیر منفی، $N_{n_{\min}}$ وجود داشته باشد . عمل پائین‌آوری روی پائین‌ترین ویژه‌حالت نباید هیچگونه حالت جدیدی ایجاد کند ، یعنی

$$\hat{H}|n_{\min}\rangle = C_{n_{\min}}^-|n-1\rangle = 0$$

یا ، با استفاده از C_n^- از (۴-۶۸ الف) ،

$$\hat{H}|n_{\min}\rangle = (N_{n_{\min}})^{1/2}|n-1\rangle = 0$$

رابط اخیر در صورتی می‌تواند صادق باشد که داشته باشیم $N_{n_{\min}} = 0$. عملهای بالابری متوالی نشان می‌دهد که طیف \hat{N} باید از یک مجموعه اعداد صحیح مثبت و صفر تشکیل شده باشد . با قراردادن $n = N_n$ ، از (۴-۶۸) نتیجه می‌شود که طیف \hat{H} عبارت است از

$$\epsilon_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

که با روش مکانیک موجی در توافق است .

ضرایب C_n^- اکنون می‌توانند از (۴-۶۸ الف) و (۴-۶۸ ب) به صورت $C_n^- = \sqrt{n}$ و $C_n^+ = (n+1)^{1/2}$ تعیین شوند و عملهای پائین‌آوری و بالابری به صورت

$$|n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{H}|n\rangle \quad (4-69)$$

و

$$|n+1\rangle = \frac{1}{(n+1)^{1/2}} \hat{H}^\dagger |n\rangle \quad (4-70)$$

نوشته شوند .

بدین ترتیب طیف \hat{H} معین می‌شود . وقتی یکی از ویژه بردارها پیدا شد ، تمام ویژه بردارهای دیگرمی توانند با استفاده از عملهای بالابری و پائین‌آوری به دست آیند . بخصوص اولین حالت برانگیخته می‌تواند از حالت پایه به وسیله عمل بالابری $|1\rangle = |\sqrt{1}/(1/\sqrt{1})\rangle = |1\rangle$ به دست آید . در واقع ، با اعمال n عمل بالابری متوالی روی $|0\rangle$ ، n امین ویژه بردار ، یعنی

$$|n\rangle = \frac{1}{(n!)^{1/2}} (\hat{H}^\dagger)^n |0\rangle \quad (4-71)$$

را ایجاد می‌کنیم.

برای کامل کردن بحث، عناصر ماتریس $\langle m|\hat{x}|n\rangle$ را محاسبه می‌کنیم. با استفاده از (۶۳-۴)، عملگر \hat{x} می‌تواند بر حسب عملگرهای بالابرند و پائین‌آورنده به صورت

$$\hat{x} = (2\hbar/m\omega)^{1/2}\hat{x}' = (2\hbar/m\omega)^{1/2}(\hat{a}^\dagger + \hat{a})/2$$

نوشته شود، و عناصر ماتریس خواهد شد

$$\begin{aligned}\langle m|\hat{x}|n\rangle &= \frac{1}{2}(2\hbar/m\omega)^{1/2}[\langle m|\hat{a}^\dagger|n\rangle + \langle m|\hat{a}|n\rangle] \\ &= \frac{1}{2}(2\hbar/m\omega)^{1/2}[(n+1)^{1/2}\langle m|n+1\rangle + \sqrt{n}\langle m|n-1\rangle] \\ &= \frac{1}{2}(2\hbar/m\omega)^{1/2}[(n+1)^{1/2}\delta_{m,n+1} + \sqrt{n}\delta_{m,n-1}]\end{aligned}$$

بنابراین می‌توان عناصر غیر صفر را به صورت

$$\langle n+1|\hat{x}|n\rangle = \left[\frac{(n+1)\hbar}{2m\omega} \right]^{1/2}$$

و

$$\langle n-1|\hat{x}|n\rangle = \left[\frac{n\hbar}{2m\omega} \right]^{1/2}$$

که هر دوی آنها با نتایج قبلی، (۵۳-۴)، مطابقت دارند، نوشت.

"مجدداً" تاکید می‌کنیم که این عناصر ماتریس و ویژه مقدارها با استفاده از خواص عملگرهای متاظر، بدون توصل به هیچ نمایش بخصوصی به دست آمدند. در مسائل یک جسمی که پیچیده‌تر از مسئله مورد بحث در اینجاست، معمولاً "ساده‌تر است که روی نمایش مختصه‌ای تکیه شود، به شرط اینکه این نمایش وجود داشته باشد".

بالاخره نشان خواهیم داد که ویژه تابعهای نوسانگر نیز می‌توانند با استفاده از روش نرددانی ایجاد شوند. در نمایش مختصه‌ای قرار می‌دهیم $\psi \rightarrow |n\rangle$ ، $x \rightarrow \hat{x}$ و $\hat{p} \rightarrow (i/\hbar)d/dx$. عملهای پائین‌آوری و بالابری در (۶۹-۴) و (۷۰-۴) به شکل

$$\hat{p}\psi_n = \left(\left(\frac{m\omega}{2\hbar} \right)^{1/2} x + i \left(\frac{1}{2m\hbar\omega} \right)^{1/2} \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right) \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1} \quad (72-4)$$

$$\hat{H}\psi_n = \left\{ \left(\frac{m\omega}{2\hbar} \right)^{1/2} x - i \left(\frac{1}{2m\hbar\omega} \right)^{1/2} \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right\} \psi_n = (n+1)^{1/2} \psi_{n+1} \quad (73-4)$$

در می‌آیند. با قراردادن $n=0$ در معادله اول، معادله دیفرانسیلی برای ویژه تابع حالت پایه، یعنی

$$\frac{1}{(2\alpha)^{1/2}} \left(\frac{d}{dx} + \alpha x \right) \psi_0 = 0 \quad (\alpha = \frac{m\omega}{\hbar})$$

را به دست می‌وریم که جواب آن عبارت است از

$$\psi_0 = \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2}$$

ضریب طوری انتخاب شده است که بهنجارش را تأمین کند. مقایسه با (48-۴) تسانمی دهد که نتیجه فعلی ما با نتیجه مکانیک موجی پکسان است. اولین حالت برانگیخته می‌تواند با قراردادن $n=0$ در معادله بالابرند (73-۴) ایجاد شود. از این معادله نتیجه می‌شود

$$\frac{1}{(2\alpha)^{1/2}} \left(\frac{d}{dx} - \alpha x \right) \psi_0 = \sqrt{1} \psi_1$$

$$\frac{1}{(2\alpha)^{1/2}} \left(\frac{d}{dx} - \alpha x \right) \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2} = \psi_1$$

یا

$$\psi_1 = \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\alpha x^2/2} [2\sqrt{\alpha} x]$$

که با نتایج قبلی نیز مطابقت دارد. هنابراین، تمام ویژه تابعهای بهنجارشده می‌توانند به کمک عملهای بالابری متوالی ایجاد شوند.

مثالهای یک بعدی بحث شده در بالا، در حالی که به اندازه کافی جالب‌اند، بخصوص وقتی که نتایج آنها می‌توانند در مورد جهان سهبعدی به کار روند اهمیت پیدا می‌کنند. در فصل ۵، توجه خود را به ویژه حالت‌های هامیلتونیها در سهبعد معطوف خواهیم کرد. چون حالت‌های مقید و نامقید اساساً روش‌های متفاوتی را ایجاد می‌کنند، بحث در مورد حالت‌های پیوسته را به فصل ۸ (پراکندگی) موقول می‌کنیم.

مسائل

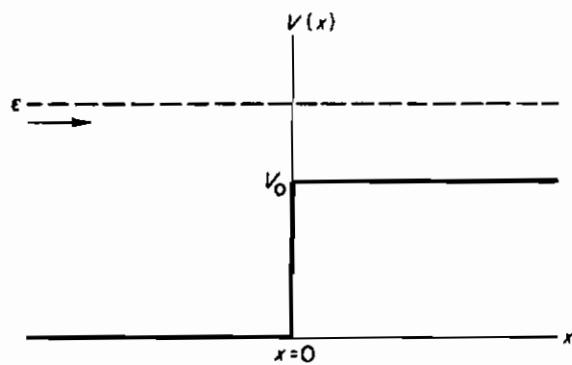
- ۱-۴ ضریب بازتاب یک باریکه از ذرات فرودی روی پتانسیل پله‌ای در شکل (۴-۱۵) را پیدا کنید.
- ۲-۴ ثابت کنید که ضرایب بازتاب و عبور از یک سد دافعه دقیقاً به وسیله معادله (۴-۳۴) داده می‌شوند.
- ۳-۴ (الف) نشان دهید که برای $V_0 \gg a$ (یعنی $a \ll V_0$) ضریب عبور در معادله (۴-۱۰) دارای شکل مجانبی $e^{-2K_0} \sim e^{-2\pi}$ است.
- (ب) بافرض اینکه ضریب عبور تقریبی برای یک مجموعه از سدهای مجاور یکدیگر (شکل ۱۱-۴) برابر است با حاصل ضرب ضرایب انفرادی، نشان دهید که برای N تا از چنین سدهایی داریم

$$\mathcal{T} \sim \exp\left(-2 \sum_{i=1}^N K_i a_i\right), \quad K_i = \frac{[2m(V_{0i} - \varepsilon)]^{1/2}}{\hbar}$$

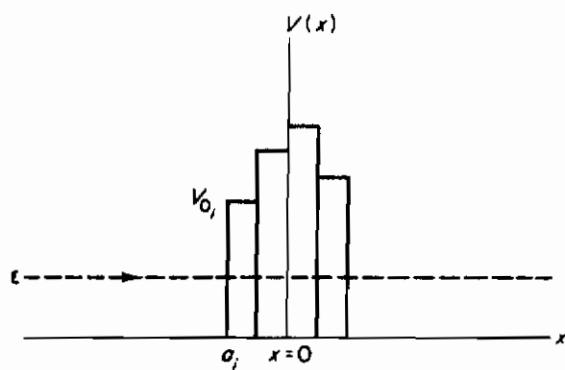
(ج) با بهکاربردن نتیجه فوق نشان دهید که برای یک سد دافعه دلخواه، ولی با تغییرات آرام، ضریب عبور تقریبی به وسیله

$$\mathcal{T} \sim \exp\left(-2 \int_{x_1}^{x_2} \frac{[2m(V(x) - \varepsilon)]^{1/2}}{\hbar} dx\right)$$

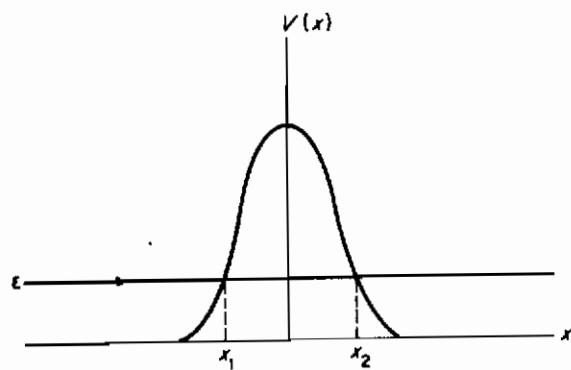
- که در آن x_1 و x_2 نقاط کلاسیکی بازگشت حرکت (شکل ۱۲-۴) هستند، داده می‌شود.
- چه فرضهایی برای بهدست آوردن این عبارت بهکار رفته‌اند؟ (رک پیوست الف).
- ۴-۴ با بهکاربردن نتیجه "نیمه کلاسیکی" داده شده در مسئله (۳-۴ ج) ضریب عبور تقریبی برای یک پتانسیل مثلثی (شکل ۱۳-۴) را وقتی $\frac{x_2}{x_1} = 4$ باشد پیدا کنید.
- ۵-۴ ضریب بازتاب را برای یک سد "دوگانه" در شکل (۱۴-۴)، وقتی $V_0 < 4$ باشد محاسبه کنید.
- ۶-۴ ضریب عبور را برای یک باریکه از ذرات فرودی روی یک پتانسیل به‌شكل تابع دلتا، $V = A\delta(x)$ ، پیدا کنید. (راهنمایی: معادله (۱۵-۴ ب) را بهکار ببرید و در حالی که حاصل ضرب $V_0 a$ را ثابت نگاه می‌دارید، قرار $V_0 a = A = \text{const}$ دهید و $a \rightarrow 0$ و $V_0 \rightarrow \infty$ (



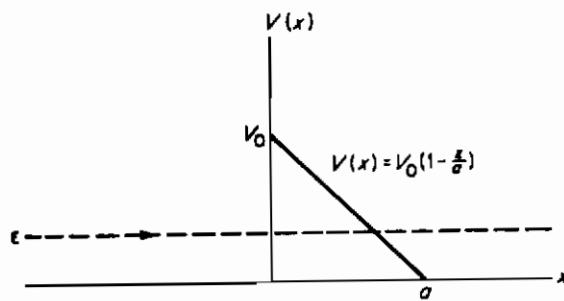
شكل ١٠-٤



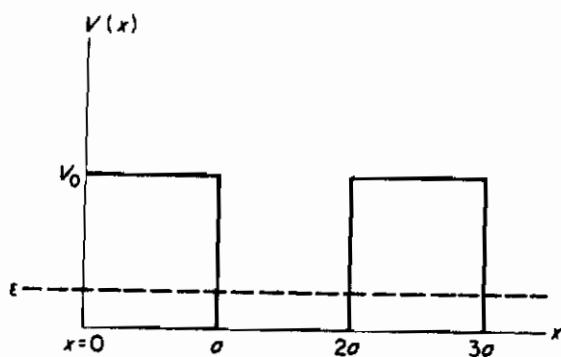
شكل ١١-٤



شكل ١٢-٤



شكل ١٣-٤



شکل ۱۴-۴

۷-۴ (الف) با انجام انتگرالهای لازم برای ذرهای که در یک چاه بینهایت غیرمتقارن قرار دارد روابط زیر را تحقیق کنید

$$\begin{aligned}\langle x \rangle_n &= \frac{1}{2}a & \langle p \rangle_n &= 0 \\ \langle x^2 \rangle_n &= \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2\pi^2 n^2} & \langle p^2 \rangle_n &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{a^2} n^2 \quad (n = 1, 2, \dots)\end{aligned}$$

(ب) نشان دهید که $\Delta p_n^2 \Delta x_n^2 \geq \frac{1}{4} \hbar^2$ برای تمام مقادیر n صادق است. مقدار $\Delta p_n \Delta x_n$ در حالت پایه، $n = 1$ ، چقدر است؟

۸-۳ با استفاده از رابطه $\hat{p}_x = i\hbar \frac{d}{dx}$ ، نشان دهید که اگر عملگر پاریته با σ پاد جا به جاپذیر باشد (یعنی، $\hat{\sigma} = -\hat{p}_x$) با \hat{x} نیز پاد جا به جاپذیر است (راهنمایی: عملگر همانی با تمام عملگرها، از جمله پاریته، جا به جاپذیر است).

۹-۴ با استفاده از رابطه جا به جاپذیری $\hat{p}_x = i\hbar \frac{d}{dx}$ نشان دهید که

$$[\hat{p}_x, \hat{x}^n] = -i\hbar n \hat{x}^{n-1} \quad \text{و} \quad [\hat{x}, \hat{p}_x^n] = i\hbar n \hat{p}_x^{n-1}.$$

$$(\cdot [\hat{p}_x, \hat{F}(\hat{x})] = -i\hbar (d\hat{F}/d\hat{x}) \quad \text{و} \quad [\hat{x}, \hat{G}(\hat{p}_x)] = i\hbar (d\hat{G}/d\hat{p}_x))$$

۱۰-۴ با به کاربردن نتایج مسئله (۹-۴) نشان دهید که برای هر هامیلتونی به شکل

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + a\hat{x}^n$$

رابطه عملگری زیر برقرار است

$$[\hat{x}\hat{p}_x, \hat{\mathcal{H}}] = i\hbar \left(\frac{\hat{p}_x^2}{m} - an\hat{x}^n \right) = i\hbar(2\hat{T} - n\hat{V})$$

(توجه کنید که برای یک حالت مانای مقید ، قضیه اهرنفست ایجاب می‌کند

$$\frac{d\langle xp_x \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{x}\hat{p}_x, \hat{\mathcal{H}}] \rangle = 0$$

بنابراین داریم $\langle V \rangle = n\langle T \rangle = 2\langle T \rangle$. این نتیجه ، قضیه ویریال کوانتومی برای یک پتانسیل توانی نامیده می‌شود . برای یک نوسانگر ($n = 2$) ، خواهیم داشت

$$\langle T \rangle = \langle V \rangle$$

۱۱-۴ ویژه مقدارها و ویژه تابعهای انرژی را برای ذرهای که در پتانسیل $(x^2 - 2bx) = \frac{1}{2}m\omega^2$ قرار دارد پیدا کنید .

(راهنمایی : پتانسیل را به صورت یک مریع کامل در آورید و این هامیلتونی را با هامیلتونی مربوط به پتانسیل نوسانگر ، یعنی $V = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ مقایسه کنید)

۱۲-۴ انرژی حالت پایه یک نوسانگر را با کمینه کردن

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

و با توجه به تحدید " عدم قطعیت "

$$\Delta p \Delta x = \frac{1}{2}\hbar$$

پیدا کنید .

۱۳-۴ انرژی حالت پایه یک الکترون

$$(m = 9 \times 10^{-28} \text{ gm})$$

واقع در یک چاه یک بعدی متناظر با ارتفاع $1.6 \times 10^{-11} \text{ erg} \sim 10 \text{ eV} \sim 10\%$ و بهنای $a = 10^{-8} \text{ cm}$ را به روش ترسیمی محاسبه کنید .

۱۴- ثابت کنید که اگر یک عملگر \hat{A} هرمیتی باشد و در رابطه $\hat{A}^2 = \hat{A}^2$ صدق کند ، ویژه مقدارهای آن عبارتند از \pm . یک عملگر با ویژگی $\hat{A}^2 = \hat{A}^2$ درونگرا نامیده می‌شود .

۱۵-۴ سیستمی در نظر بگیریم که به وسیله هامیلتونی یک ذره آزاد (یک بعدی) $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$ اداره می‌شود.

(الف) با استفاده از معادله (۹۴-۳) نشان دهید که "انتشاردهنده" این ذره آزاد می‌تواند به صورت

$$G(x, x', t, t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{(2\pi\hbar)} e^{-ip^2t/2m\hbar} e^{ipX/\hbar}$$

که در آن $x' = x - x_0 - \tau = t - t_0$ می‌باشد، بیان شود.
(ب) انتگرال‌گیری را انجام دهید و نشان دهید که

$$G(X, \tau) = \left[\frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right]^{1/2} e^{imX^2/2\hbar\tau}$$

(راهنمایی: نما را به صورت مربع کامل در آورد و از

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} du = \sqrt{\pi}.)$$

استفاده کنید.)

(ج) فرض کنید که در لحظه $t_0 = 0$ یک ذره آزاد در حالتی که به وسیله بسته موج

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{(\pi\delta^2)^{1/4}} e^{-x^2/2\delta^2} e^{ip_0 x/\hbar}$$

نمایش داده می‌شود قرار دارد. توجه کنید که در لحظه $t_0 = 0$ ، چگالی احتمال یک تابع گاوی با پهنای متوسط δ می‌باشد. با استفاده از معادله (۹۳-۳) نشان دهید که با گذشت زمان بسته موج گسترده می‌شود.

مراجع پیشنهادی

- Arfken, G., "Mathematical Methods for Physicists," 2nd ed., Chapter 9. Academic Press, New York, 1970.
- Bohm, D., "Quantum Theory," Chapter 11. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1951.
- Borowitz, S., "Fundamentals of Quantum Mechanics," Chapter 9. Benjamin, New York, 1967.
- Eisberg, R. M., "Fundamentals of Modern Physics," Chapter 8. Wiley, New York, 1961.
- Merzbacher, E., "Quantum Mechanics," 2nd ed., Chapter 6. Wiley, New York, 1970.
- Messiah, A., "Quantum Mechanics," Vol. I, Chapter 3. Wiley, New York, 1961.
- Pauling, L., and Wilson, E. B., "Introduction to Quantum Mechanics," Chapter 3. McGraw-Hill, New York, 1935.
- Saxon, D. S., "Elementary Quantum Mechanics," Chapter 6. Holden-Day, San Francisco, 1964.



مکانیک موجی در سه بعد

مسائلی که قرار است در این فصل مورد بررسی قرار گیرند شامل یک ذره در پیک چاه (جعبه) مستطیلی، نوسانگر سه بعدی، و مسئله کولنی (اتم هیدرزن) است. به خاطر اهمیتی که موضوع اخیر در نظریه اتمی دارد توجه خاصی به آن مبذول خواهد شد.

به عنوان یک قاعده، تعداد شاخصهای (اعداد کوانتومی) لازم برای کاملاً "مشخص کردن یک حالت برابر است با تعداد درجات آزادی وابسته به سیستم کلاسیکی متناظر. در مسئله یک بعدی بحث شده در فصل ۴ فقط یک شاخص (n) کافی بود، اما در سه بعد سه عدد کوانتومی لازم است. در زیر خواهیم دید که چگونه این اعداد پدیدار می‌شوند.

برخلاف حالت‌های مقید در یک بعد، ویژه حالت‌های یک هامیلتونی در سه بعد غالباً به‌طور شدیدی تبیه‌گن‌اند*. تبیه‌گنی همواره از تقارن خاصی که در مسئله فیزیکی وجود دارد نتیجه می‌شود. بنابراین ویژه تابعها دیگر منحصر به‌فرد نیستند و لزوماً "بر پیک دیگر عمود نیستند. راست‌هنچاری هر دسته ویژه تابع باید تحقیق شود. به علاوه، هر ترکیب خطی از ویژه‌تابعهای تبیه‌گن یک ویژه تابع جدید متعایزی از همان انرژی است. بنابراین، وقتی یک دسته ویژه تابع پیدا شد می‌توان تعداد زیادی دسته‌های تبیه‌گن جدید ایجاد کرد. معنی فیزیکی هر دسته و دلیل اینکه دسته خاصی ایجاد شده است در بحثی که در زیر خواهد آمد روشن خواهد شد.

* قضیه ۹ که امکان تبیه‌گنی در مسائل مقید یک بعدی را طرد می‌کند در سه بعد معتبر نیست.

۱ - مسئله ویژه مقداری در سه بعد

معادله ویژه مقداری انرژی شرودینگر به شکل زیر است

$$\hat{\mathcal{H}}|\varepsilon_i\rangle = \varepsilon_i|\varepsilon_i\rangle \rightarrow \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right\} \psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}) \quad (1-5)$$

که همان طوری که نشان خواهیم داد شاخص ε مخفف مجموعه شاخصهاست . معادله (۱-۵) یک معادله با مشتقات جزئی است که برای پیدا کردن تابع $\psi_i(\mathbf{r})$ باید حل شود . چون در اینجا با حالت‌های مقید سروکار داریم ، آن جوابهای را جستجو خواهیم کرد که درینهاست صفر شوند ، یعنی

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \varepsilon_i \rangle \xrightarrow[r \rightarrow \infty]{} 0$$

یک روش متعارف برای حل معادله مذبور روش تفکیک متغیرها است . این تفکیک ممکن است در مختصات دکارتی انجام گیرد ، یا ممکن است لازم باشد که تبدیلی به سیستم مختصات دیگری (به عنوان مثال ، مختصات قطبی کروی یا استوانه‌ای) انجام گیرد . خواهیم دید که در مورد تبیه‌گشته سیستم مختصاتی که در تفکیک متغیرها به کار می‌رود مجموعه بخصوص ویژه تابعهای به دست آمده را تعیین خواهد کرد . سپس تشخیص مشخصات این مجموعه به عهده ما قرار خواهد گرفت . با بررسی مسائلی که در مختصات دکارتی قابل حل باشند شروع می‌کنیم .

۲ - ذره آزاد (مختصات دکارتی)

هامیلتونی ذره آزاد ، $H = \frac{p^2}{2m} + V(r)$ ، فقط حالت‌های نامقید را در بر می‌گیرد و ، در حقیقت ، به پراکندگی در فصل ۸ تعلق دارد . مع هذا ، برای روشن کردن مفهوم تبیه‌گشته و اینکه چگونه در مکانیک کوانتومی ظاهر می‌شود ، آنرا در اینجا به طور اختصار مورد بحث قرار خواهیم داد .
معادله شرودینگر به شکل

$$\hat{\mathcal{H}}\psi_e = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_e = \varepsilon \psi_e \quad (2-5)$$

در می‌آید . روش تفکیک متغیرها پیشنهاد می‌کند که جوابی به شکل

$$\psi_e(\mathbf{r}) = X(x)Y(y)Z(z) \quad (3-5)$$

را آزمایش کنیم. اگر این جواب آزمایشی در نهایت به سه معادله دیفرانسیل معمولی برای x, y و z منجر شود می‌گوئیم که (۲-۵) در مختصات دکارتی تفکیک‌پذیر است. با قراردادن (۳-۵) در (۲-۵) خواهیم داشت

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(YZ \frac{d^2X}{dx^2} + XZ \frac{d^2Y}{dy^2} + XY \frac{d^2Z}{dz^2} \right) = \varepsilon XYZ$$

با

$$\left(\frac{1}{X} \frac{d^2X}{dx^2} + \frac{1}{Y} \frac{d^2Y}{dy^2} + \frac{1}{Z} \frac{d^2Z}{dz^2} \right) = -k^2$$

$$\text{که در آن } k^2 = 2m\varepsilon/\hbar^2$$

هر کدام از جملات طرف چپ این معادله تابعی از فقط یک متغیر است: حاصل جمع تنها در صورتی می‌تواند مقدار ثابتی باشد که هر کدام از جملات مستقل "ثابت باشند، یعنی

$$\frac{1}{X} X'' = -k_x^2, \quad \frac{1}{Y} Y'' = -k_y^2, \quad \frac{1}{Z} Z'' = -k_z^2$$

$$\text{که در آنها } k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k^2 = 2m\varepsilon/\hbar^2$$

راحت‌تر است که سه عدد کوانتومی (پیوسته) k_x, k_y و k_z را در یک عدد کوانتومی بوداری $\mathbf{k} = k_x\mathbf{i} + k_y\mathbf{j} + k_z\mathbf{k}$ خلاصه کنیم. جوابهای سه معادله فوق عبارتند از $X \sim e^{ik_xx}$ ، $Y \sim e^{ik_yy}$ و $Z \sim e^{ik_zz}$ ، بنابراین ویژه تابعها و ویژه مقدارهای ذره آزاد می‌توانند به صورت

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = N_{\mathbf{k}} e^{ik_xx} e^{ik_yy} e^{ik_zz} = N_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (4-5 \text{ الف})$$

و

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 |\mathbf{k}|^2}{2m} \quad (4-5 \text{ ب})$$

نوشته شوند*

* قراردادن $N_{\mathbf{k}} = (1/2\pi\hbar)^{3/2}$ توابع را بر طبق قانون قراردادی زیر بهنجار می‌کند، یعنی

$$\langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle = \int \psi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')/\hbar^3$$

اما روش دیگری (بهنجارش جعبه‌ای) نیز مورد استفاده قرار می‌گیرد که در آن ذره در یک جعبه بزرگ با حجم V در نظر گرفته می‌شود. در این روش قرار می‌دهیم $N_{\mathbf{k}} = 1/\sqrt{V}$ و پس از اینکه محاسبات به انجام رسید حد $V \rightarrow \infty$ را اعمال می‌کنیم.

بردار کوانتومی $\mathbf{k}(k_x, k_y, k_z)$ ویژه تابع دکارتی و ویژه مقدار آنرا مشخص می‌کند. وجود یک تبیهگنی باید روش شود. توجه کنیم که انرژی فقط تابع اندازه \mathbf{k} می‌باشد. تغییر جهت \mathbf{k} (تغییر k_x, k_y, k_z)، در حالی که داشته باشیم

$$|\mathbf{k}| = (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)^{1/2} = k_0$$

منجر به ایجاد ویژه تابعهای جدیدی در (۴-۵) می‌شود، بدون اینکه ویژه مقدارها تغییر کرده باشند. بنابراین هر ترکیب خطی از این ویژه تابعهای تبیهگن نیز یک ویژه تابع انرژی خواهد بود. به علت طبیعت پیوسته طیف، این ترکیب صورت یک انتگرال

$$\psi_{k_0}(\mathbf{r}) = \int_{|\mathbf{k}|=k_0} a(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d\Omega_{\mathbf{k}} \quad (5-5)$$

را به خود می‌گیرد که در آن انتگرال روی کره‌ای به شعاع k_0 در فضای \mathbf{k} گرفته می‌شود و مساحت مطمئن می‌سازد که فقط ویژه تابعهای تبیهگن باهم مخلوط شده‌اند. بنابراین با انتخاب هر ضریب اختلاط $a(\mathbf{k})$ یک ویژه تابع جدید (ψ_{k_0}) با همان انرژی $E_{k_0} = \hbar^2 k_0^2 / 2m$ ایجاد خواهیم کرد.

حال که می‌بینیم جوابهای (۲-۵) یکتا نیستند، باید سوال کنیم: اهمیت فیزیکی مجموعه ویژه تابعهای $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ در چیست و چرا به جای آن مجموعه‌های دیگر ظاهر نمی‌شوند؟ مشاهده می‌کنیم که برای یک ذره آزاد $\beta = \hbar^2 / 2m$ داریم $0 = [\beta, \psi] = \hbar \nabla \psi$ ، که از آن نتیجه می‌شود که برای $\hbar = 0$ یک مجموعه ویژه تابعهای مشترک وجود دارد. طبیعتاً باید بررسی کنیم که آیا ψ همان مجموعه است. با تأثیردادن $\nabla = \hbar / i$ روی ψ داریم

$$\frac{\hbar}{i} \nabla \psi = \frac{\hbar}{i} \nabla e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \hbar \mathbf{k} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \hbar \mathbf{k} \psi \quad (6-5)$$

از مقایسه طرفهای راست و چپ مشاهده می‌کنیم که در حقیقت ψ به طور همزمان ویژه تابع ψ با ویژه مقدار $\hbar = \beta$ است. بنابراین جواب دکارتی ذره آزاد به طور کاملاً "طبیعی" می‌باشد. به ویژه تابع تکانه هدایت می‌کند.

تحول زمانی این ویژه تابع تکانه عبارت است از (رك ۳-۶۷)

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t/\hbar} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t/\hbar} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}}t)} \quad (7-5)$$

و معادل است با انتشار یک موج تخت (در امتداد k) با

$$\omega_k = \frac{\epsilon_k}{\hbar} = \frac{\hbar^2 k^2}{\hbar 2m} = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

و $k = p/\hbar$. از رابطه اخیر نتیجه می شود که طول موج ، $\lambda = 2\pi/k = h/p$ ، با فرضیه دوبروی سازگار است و می توانیم این ویژه تابع تکانه ذره آزاد را با موج دوبروی یکی بدانیم. با این وجود ، طبیعت غیر فیزیکی موج وقتی ظاهر می شود که سرعت فاز آنرا محاسبه کنیم

$$v_{\text{phase}} = \frac{\omega_k}{k} = \frac{\hbar k^2}{2mk} = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{p}{2m} = \frac{1}{2} v_{\text{particle}}$$

علی رغم آنچه که می تواند انتظار رود ، سرعت فاز با سرعت ذره برابر نیست . باید به خاطر آرد که فقط جنبه های احتمالاتی ψ دارای معنی فیزیکی است . با اعمال عملگر جریان ∇ خواهیم داشت (۹۶-۳)

$$-\frac{i\hbar}{2m} (\psi_k^* \nabla \psi_k - \psi_k \nabla \psi_k^*) = \frac{\hbar k}{m} \psi_k^* \psi_k$$

$$\mathbf{J} = \frac{\mathbf{p}}{m} \psi_k^* \psi_k = v_{\text{particle}} \mathcal{P}_k \quad (8-5)$$

بنابراین ، سرعت جریان احتمال با سرعت ذره آزاد برابر است*. در تحلیل معادله ذره آزاد (۲-۵) به طور طبیعی به ویژه تابعهای تکانه خطی $N_k e^{ik \cdot r} = N_k e^{ik_x x + ik_y y + ik_z z}$ هدایت شدیم زیرا این معادله را در مختصات دکارتی تفکیک کرده بودیم . اگر معادله را در مختصات کروی تفکیک کرده بودیم ، به توابعی به شکل

$$\psi_{klm_i}(r, \theta, \phi) = j_i(kr) Y_{lm_i}(\theta, \phi)$$

هدایت می شدیم که در آن j_i یک تابع بسل کروی و Y_{lm_i} یک هماهنگ کروی است . نشان خواهیم داد که این توابع به طور همزمان ویژه تابعهای انرژی و تکانه زاویه ای (و نه تکانه

* این سرعت جریان هم چنین با سرعت موسوم به سرعت "گروه" موج دوبروی ، که به صورت $v_{\text{group}} = \partial \omega / \partial k$ تعریف می شود ، برابر است .

خطی) هستند، و دارای شکل ریاضی وابسته به امواج کروی (ونه امواج تخت) می‌باشند. اعداد کوانتومی $\epsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$ و m به حالت‌های تکانهٔ زاویه‌ای مربوط می‌شوند در حالی که k ، بارابطه به انرژی مربوط می‌شود. توجه کنیم که دومجموعهٔ ویژه‌تابع $(xyz)\psi$ و $\psi_{klm_1}(r, \theta, \phi)$ از یکدیگر متمایزاند زیرا ψ و $\psi_{klm_1}(r, \theta, \phi)$ سازگاراند (یعنی، $[\psi, \psi_{klm_1}(r, \theta, \phi)] = 0$). با این وجود همان طوری که در بخش ۸ خواهیم دید هر ویژه‌تابع تکانهٔ خطی همواره یک ترکیب خطی از ویژه‌تابعهای تبهم‌کن تکانهٔ زاویه‌ای است.

۳- ذره در یک جعبه

برای تعمیم یک چاه بینهایت یک بعدی، حالتهای مقید یک ذره را که در یک پتانسیل جعبهٔ مستطیل‌شکل قرار دارد در نظر می‌گیریم. معادلهٔ شرودینگر به صورت

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right\} (\psi_i(\mathbf{r})) = \epsilon_i \psi_i(\mathbf{r}) \quad (9-5)$$

در می‌آید که در آن

$$\begin{array}{ll} V(\mathbf{r}) = 0 & \text{برای } 0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq b, \text{ و } 0 \leq z \leq c \\ V = \infty & \text{جاهای دیگر} \end{array}$$

مثل حالت یک بعدی در فصل ۴، می‌خواهیم که $(\psi_i(\mathbf{r}))$ در مرزهای چاه صفر شود. طبیعت مستطیلی بودن مرز پتانسیل پیشنهاد می‌کند که این مسئلهٔ باید در مختصات دکارتی تفکیک‌پذیر باشد. در واقع، مانند حالت قبل، جایگذاری $(X(x)Y(y)Z(z)) = \psi_i$ فوراً منجر به معادلات دیفرانسیل

$$X'' = -k_x^2 X, \quad Y'' = -k_y^2 Y, \quad Z'' = -k_z^2 Z$$

می‌شود که در آنها $k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k^2 = 2m\epsilon/\hbar^2$. چون ویژه‌تابعهای باید در خارج از چاه و در مرزهای آن (که در آن $V=\infty$) صفر شوند، جوابهای قابل قبول باید به شکل

$$X_{n_x} = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin k_x x, \quad Y_{n_y} = \left(\frac{2}{b}\right)^{1/2} \sin k_y y, \quad Z_{n_z} = \left(\frac{2}{c}\right)^{1/2} \sin k_z z$$

باشند که در آن

$$k_x = \frac{n_x \pi}{a}, \quad k_y = \frac{n_y \pi}{b}, \quad k_z = \frac{n_z \pi}{c} \quad (10-5)$$

و می‌شوند و به شکل
ویژه تابعها به وسیله سه عدد کوانتومی n_x ، n_y و n_z مشخص

$$\psi_{n_x n_y n_z} = \left(\frac{8}{abc} \right)^{1/2} \sin \frac{n_x \pi x}{a} \sin \frac{n_y \pi y}{b} \sin \frac{n_z \pi z}{c} \quad (11-5)$$

در می‌آیند و ویژه مقدارهای انرژی خواهند شد

$$\begin{aligned} \epsilon_{n_x n_y n_z} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right) \end{aligned} \quad (12-5)$$

توجه کنیم که ضریب بھنگارش در (11-5) متناسب است با $\epsilon^{-1/2}$ (حجم جعبه). عموماً، این مسئله تبھگنی ندارد. ولی می‌توان با افزایش تقارن فضائی یک تبھگنی ایجاد کرد. به عنوان مثال، اگر قراردهیم $a = b = c$ ، ویژه مقدارها به شکل

$$\epsilon_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (13-5)$$

در می‌آیند. در اینجا مشاهده می‌کنیم که این مقادیر انفرادی n_x ، n_y و n_z نیستند که انرژی را تعیین می‌کنند بلکه مجموع مربعهای آنهاست که انرژی را می‌دهد. هنابراین در حالی که حالت پایه ϵ_{111} با انرژی $(3) \epsilon_{111} = [\hbar^2 \pi^2 / 2ma^2]$ ناتبھگن است، سه حالت برانگیخته اول ψ_{112} ، ψ_{121} و ψ_{211} با انرژی $\epsilon_{112} = \epsilon_{121} = \epsilon_{211} = [\hbar^2 \pi^2 / 2ma^2]$ ، به طور سه‌گانه‌ای تبھگن‌اند. برای حالت‌های با انرژی بالاتر این تبھگنی ممکن است زیاد‌تر باشد. به علت تبھگنی، ترکیب خطی $\alpha\psi_{112} + \beta\psi_{121} + \gamma\psi_{211} = \psi'$ هم یک ویژه تابع دیگر را بسته به اولین حالت برانگیخته است. هم‌چنین، چون توابع $\psi_{n_x n_y n_z}$ منحصر به فرد نیستند، متعامد بودن آنها باید تحقیق شود و نمی‌تواند بدون تحقیق پذیرفته شود. این ویژه تابعهای جعبه‌ای ویژه تابعهای تکانه نیستند زیرا برای هامیلتونی جعبه‌ای $0 \neq [0, \psi]$. هر روت

هامیلتونی شامل ψ (از طریق پتانسیل V) باشد، با تکانه خطی ناسازکار است.

ویژه تابعهای $\psi_{n_x n_y n_z}(r)$ در حد $a, b, c \rightarrow \infty$ باید متناظر با ویژه تابعهای ذرات آزاد باشند و انتظار داریم که توابع سینوسی در (۱۱-۵) مثل امواج تخت بهنجارشده جعبه‌ای رفتار کنند، یعنی

$$\begin{aligned} \psi_{n_x n_y n_z}(r) &\rightarrow \frac{1}{(abc)^{1/2}} e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} = \frac{1}{(abc)^{1/2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{\gamma}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \end{aligned} \quad (14-5)$$

چون ویژه تابعهای ذره آزاد مربوط به طیف پیوسته هستند جمع بندی روی حالتها به صورت انتگرال در می‌آید، یعنی،

$$\sum_{n_x n_y n_z > 0} \rightarrow \int_{\text{positive } n_i} dn_x dn_y dn_z \quad (15-5)$$

با استفاده از (۱۵-۵)، انتگرال می‌تواند به صورت زیر درآید

$$\begin{aligned} \int_{\substack{n_x n_y n_z \\ \text{positive}}} dn_x dn_y dn_z &= \frac{abc}{\pi^3} \int_{\substack{k_x k_y k_z \\ \text{positive}}} dk_x dk_y dk_z = \frac{\gamma}{\pi^3} \int_{\substack{\mathbf{k} \text{ in} \\ \text{first octant}}} d\mathbf{k} \\ &= \frac{\gamma}{8\pi^3} \int_{\substack{\mathbf{k} \text{ over} \\ \text{all space}}} d\mathbf{k} \end{aligned} \quad (16-5)$$

می‌توانیم، با تبدیل به مختصات قطبی کروی در فضای \mathbf{k} ، انتگرال روی حالتها را به انتگرال روی انرژی تبدیل کنیم و نتیجه بگیریم

$$\frac{\gamma}{8\pi^3} 4\pi \int_0^\infty k^2 dk = \int_0^\infty \rho(\epsilon) d\epsilon$$

با استفاده از رابطه $\rho(\epsilon) \propto \hbar^2 k^2 / 2m = \epsilon$ می‌تواند به صورت زیر محاسبه شود

$$\rho(\epsilon) = \frac{(2m)^{3/2} \gamma}{4\pi^2 \hbar^3} \sqrt{\epsilon} \quad (17-5)$$

* در این نمایش ذرات آزاد، شرایط مرزی‌ای که ایجاد می‌کند ویژه تابعها در بین‌هایت صفر شوند، با شرایط مرزی موسوم به "شرایط مرزی تناوبی" جایگزین شده است.

تابع (۱۸) میزان بستگی چگالی تبھگنی (تعداد حالتها تبھگن در واحد انرژی) به ۴ برای یک ذره آزاد را می‌دهد و چگالی حالتها نامیده می‌شود. در بحث مربوط به نظریه پراکندگی استفاده زیادی از (۱۷-۵) خواهیم کرد.

۴- نوسانگر ناهمسانگرد

نوسانگر ناهمسانگرد سه بعدی عبارت است از ذره‌ای که به وسیله یک نیروی کشسان، که ضرایب کشسانی آن به جهت مکان ذره نسبت به مبدأ بستگی دارد، به مبدأ مقید شده است. معادله شرودینگر برای این پتانسیل عبارت است از

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{1}{2} m\omega_x^2 x^2 + \frac{1}{2} m\omega_y^2 y^2 + \frac{1}{2} m\omega_z^2 z^2 \right\} \psi_i = \varepsilon_i \psi_i \quad (18-5)$$

که در آن $\omega_x^2 = K_x/m$ ، $\omega_y^2 = K_y/m$ ، $\omega_z^2 = K_z/m$. در اینجا نیز، اگر جوابی به شکل $\psi_i = X(x)Y(y)Z(z)$ به کار ببریم، تفکیک صورت می‌گیرد. در این مورد سه معادله زیر را بدست می‌وریم

$$-\frac{\hbar^2}{2m} X'' + \frac{1}{2} m\omega_x^2 x^2 X = \varepsilon_x X$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} Y'' + \frac{1}{2} m\omega_y^2 y^2 Y = \varepsilon_y Y$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} Z'' + \frac{1}{2} m\omega_z^2 z^2 Z = \varepsilon_z Z$$

که در آنها داریم $\varepsilon_i = \varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z$. جوابهای این معادلات قبلاً در حالت یک بعدی بدست آمده‌اند (رك ۴-۴۷). ویژه تابعها و ویژه مقدارهای (۱۸-۵) می‌توانند به صورت زیر نوشته شوند

$$\begin{aligned} \psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) &= X_{n_x} Y_{n_y} Z_{n_z} = \left[\frac{\alpha_x \alpha_y \alpha_z}{\pi^3} \right]^{1/4} \left[\frac{1}{2^{n_x+n_y+n_z} n_x! n_y! n_z!} \right]^{1/2} \\ &\times \exp[-\frac{1}{2}(\alpha_x x^2 + \alpha_y y^2 + \alpha_z z^2)] H_{n_x}((\alpha_x)^{1/2} x) \\ &\times H_{n_y}((\alpha_y)^{1/2} y) H_{n_z}((\alpha_z)^{1/2} z) \end{aligned} \quad (19-5)$$

و

$$\epsilon_{n_x n_y n_z} = (n_x + \frac{1}{2})\hbar\omega_x + (n_y + \frac{1}{2})\hbar\omega_y + (n_z + \frac{1}{2})\hbar\omega_z \quad (n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, 3, \dots) \quad (20-5)$$

عدم تبہگنی باید به فقدان تقارن در هامیلتونی نسبت داده شود. برای اثبات این مطلب، مورد خاص یک نوسانگر همسانگرد ($K_x = K_y = K_z$) را در نظر بگیریم که برای آن داریم

$$\epsilon_{n_x n_y n_z} = (n_x + n_y + n_z)\hbar\omega + \frac{3}{2}\hbar\omega \quad (21-5)$$

اینک مشاهده می‌کنیم که انرژی به حاصل جمع این اعداد صحیح بستگی دارد و تمام مجموعه‌های اعداد کوانتومی که حاصل جمع آنها یکسان باشند حالت‌های یک انرژی را بیان می‌دارند. بنابراین مثلاً، در حالی که $n=0, 1, 2, 3, \dots$ ناتبہگن است، حالت‌های $n=0, 1, 2, 3, \dots$ به طور سه‌گانه تبہگن‌اند. تبہگنی تراز \bar{n} ، که در آن $\bar{n} = n_x + n_y + n_z$ ، برابراست با تعداد طرقی که می‌توان سه عدد صحیح غیرمنفی انتخاب کرد به طوری که حاصل جمع آنها \bar{n} شود، یعنی

$$\text{تبہگنی تراز } \bar{n} = \frac{1}{2}(\bar{n} + 1)(\bar{n} + 2) \quad (22-5)$$

نوسانگر همسانگرد ($V = \frac{1}{2}K(x^2 + y^2 + z^2)$) مثالی از مسئله نیروی مرکزی است (نیرو در امتداد بردار مکانی) و از این‌رو در مختصات قطبی نیز تفکیک پذیر است. به‌زودی خواهیم دید که حل مسئله در مختصات کروی منجر به مجموعه‌ای از ویژه تابعهای تبہگن می‌شود که با مجموعه (۱۹-۵) متفاوت است، هرچند طیف انرژی همان طیف است. در زیر نشان خواهیم داد که ویژه تابعهای کروی تبہگن، حداقل ترکیبات خطی توابع دکارتی تبہگن‌اند. بنابراین، وقتی مسئله برای ویژه حالت‌های نوسانگر همسانگرد حل می‌شود، باید بیشتر دقت کنیم که کدام مجموعه حالت‌ها مورد نظر است.

۵- مختصات منحنی الخط

سائل مهم فیزیکی زیادی وجود دارند که در آنها معادله شرودینگر در مختصات دکارتی تفکیک نمی‌شود. از مهمترین آنها مسئله پتانسیل کولنی وابسته به اتم هیدروژن است که در مختصات کروی و سه‌موی تفکیک پذیر است. ما به‌طور اختصار بعضی جنبه‌های مختصات منحنی الخط عام را بررسی می‌کنیم.

یک مجموعه مختصات توسط تبدیل

$$q_i = q_i(x, y, z) \quad (i = 1, 2, 3, \dots)$$

تعریف می شود . اگر مربع یک عنصر دیفرانسیلی طول فقط جمله های dq_i^2 را در بر داشته باشد و نه جمله های ضربدری $dq_i dq_j$ را ، سیستم مختصات معتمد نامیده می شود و می توان قرار دارد

$$dl^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 = h_1^2 dq_1^2 + h_2^2 dq_2^2 + h_3^2 dq_3^2 \quad (23-5)$$

پارامتر های h_1 ، h_2 و h_3 خرایب متریک نامیده می شوند و هر کدام از آنها تابعی از q_i ها می باشند . وقتی h ها تعیین شدند ، لاپلاسی می تواند به صورت

$$\nabla^2 = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left\{ \frac{\partial}{\partial q_1} \frac{h_2 h_3}{h_1} \frac{\partial}{\partial q_1} + \frac{\partial}{\partial q_2} \frac{h_1 h_3}{h_2} \frac{\partial}{\partial q_2} + \frac{\partial}{\partial q_3} \frac{h_1 h_2}{h_3} \frac{\partial}{\partial q_3} \right\} \quad (24-5)$$

بهان شود و عنصر حجم خواهد شد

$$d\tau = dx dy dz = h_1 h_2 h_3 dq_1 dq_2 dq_3 \quad (25-5)$$

تبدیلات به مختصات قطبی کروی و قطبی استوانه ای ، به عنوان مثال (شکل ۵ - ۱) عبارتنداز

$$\begin{array}{ll} x = r \sin \theta \cos \phi & x = \rho \cos \phi \\ y = r \sin \theta \sin \phi & y = \rho \sin \phi \\ z = r \cos \theta & z = z. \end{array} \quad (26-5)$$

یک محاسبه ساده با استفاده از (23-5) و (26-5) نتیجه می دهد

$$\begin{array}{ll} h_r = 1 & h_\rho = 1 \\ h_\theta = r & h_\phi = \rho \\ h_\phi = r \sin \theta & h_z = 1 \end{array}$$

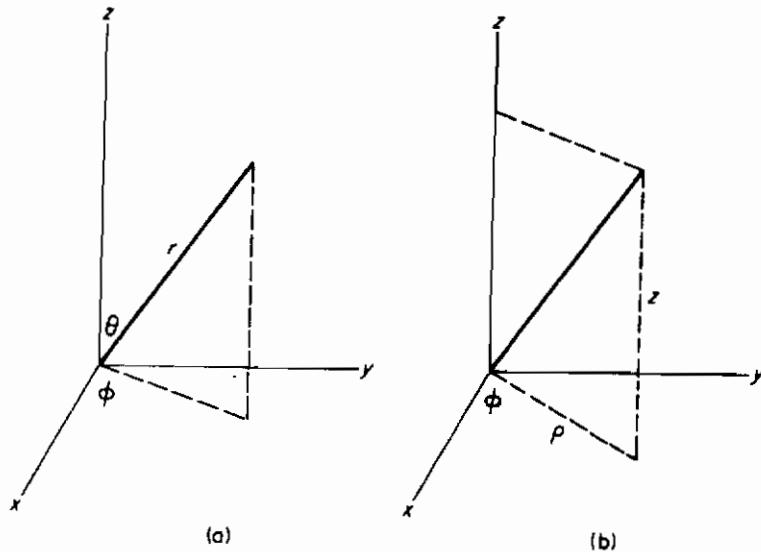
و لاپلاسی ها و عناصر حجم به ترتیب عبارت خواهند بود از

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2 \sin \theta} \left\{ \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \right\}$$

$$dr = r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\phi$$

$$\nabla^2 = \frac{1}{\rho} \left\{ \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\rho \frac{\partial}{\partial z} \right) \right\}$$

$$d\tau = \rho \, d\rho \, d\phi \, dz$$



شکل (۱-۵) معنی هندسی متغیرهای (الف) قطبی کروی (r, θ, ϕ) و (ب) قطبی استوانه‌ای (ρ, ϕ, z)

دستگاههای مختصات منحنی الخط متعامد زیادی وجود دارند و یک مسئله معین ممکن است در بیش از یک دستگاه تفکیک پذیر باشد*. مسئله نیروی مرکزی، همان‌طور که در زیر خواهیم دید، همیشه در مختصات قطبی کروی تفکیک پذیر است.

* به عنوان مثال به مرجع زیر رجوع کنید

P.M. Morse and H. Feshbach, "Methods of Theoretical physics," Volume I, P. 655. Mc Graw-Hill, New-York, 1953.

۶- مسئله نیروی مرکزی

معادله شرودینگر برای ذره‌ای که توسط یک پتانسیل نیروی مرکزی مقید شده است در مختصات کروی عبارت است از

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \right\} + V(r) \right] \times \psi_i(r, \theta, \phi) = \varepsilon_i \psi_i(r, \theta, \phi). \quad (27-5)$$

علاوه بر شرط معمولی حالت مقید $\psi_i \rightarrow 0$ ، باید تک مقداری بودن را تیز تحمیل کنیم، یعنی،

$$\psi_i(r, \theta, \phi) = \psi_i(r, \theta, \phi + 2\pi)$$

زیرا نقاط ϕ و $\phi + 2\pi$ در واقع یک نقطه فیزیکی هستند.
جواب آزمایشی $\psi_i = R(r)Y(\theta, \phi)$ را در (27-5) قرار می‌دهیم و پس از ساده کردن خواهیم داشت

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) \right\} + (\varepsilon_i - V(r))r^2 \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{Y} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right\} \quad (28-5) \end{aligned}$$

چون متغیر r در یکطرف و متغیرهای θ و ϕ در طرف دیگر قرار دارند، (28-5) فقط در صورتی می‌تواند برای تمام مقادیر r ، θ و ϕ برقرار باشد که هرکدام از طرفین برابر با مقدار ثابتی باشد. با انتخاب این ثابت^{*} به شکل $(\hbar^2/2m)l(l+1)$ ، دو معادله

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{r^2} \right\} R(r) = \varepsilon_i R(r) \quad (29-5)$$

و

* این انتخاب برای ثابت تفکیک به معادلاتی منجر می‌شود که برای متخصصین ریاضی فیزیک آشناست ولذا بررسی آنها آسانتر است.

$$-\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\} Y = \hbar^2 l(l+1) Y \quad (30-5)$$

را به دست خواهیم آورد.

به زودی به مفهوم فیزیکی این معادلات باز خواهیم گشت. نخست با فرض اینکه Y

به شکل

$$Y = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

باشد فرایند تفکیک را ادامه می‌دهیم. در این صورت معادله (۳۰-۵) خواهد شد

$$\hbar^2 \left\{ \left[\frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \right] + l(l+1) \sin^2 \theta \right\} = -\hbar^2 \frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} \quad (31-5)$$

مانند حالت قبل، این معادله فقط در صورتی برقرار است که هر دو طرف آن برابر با یک عدد ثابت باشند. با انتخاب این ثابت تفکیک^{*} به شکل $\hbar^2 m_i^2$ ، معادلات دیفرانسیل معمولی

$$-\hbar^2 \frac{d^2}{d\phi^2} \Phi_{m_i} = m_i^2 \hbar^2 \Phi_{m_i} \quad (32-5)$$

و

$$\hbar^2 \left\{ \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta_{lm_i}}{d\theta} \right) \right] + \left[l(l+1) - \frac{m_i^2}{\sin^2 \theta} \right] \Theta_{lm_i} \right\} = 0 \quad (33-5)$$

را به دست خواهیم آورد. در نتیجه، معادله شرودینگر کامل^۱ به (۳۲-۵)، (۳۳-۵) و (۳۰-۵) که به ترتیب معادلات دیفرانسیل معمولی از متغیرهای r ، ϕ و θ هستند، تفکیک می‌شود. لذا جواب کلی به صورت زیر در می‌آید

$$\psi_{lm_i} = R(r) Y_{lm_i}(\theta, \phi) = R(r) \Theta_{lm_i}(\theta) \Phi_{m_i}(\phi)$$

اینک به مسئله انتساب مفهوم فیزیکی به معادلات زاویه‌ای و ثابت‌های تفکیک می‌پردازیم.

* پانویس صفحه ۱۶۵ را بهینید.

توجه کنیم که در معادلات (۳۴-۵) و (۳۵-۵) فقط متغیرهای زاویه‌ای دخالت می‌کنند. بخصوص چون (۳۵-۵) در آنها ظاهر نمی‌شود، این معادلات در تمام مسائل نیروی مرکزی مشترک‌اند. می‌توان تحقیق کرد که طرف چهارم (۳۵-۵) در واقع همان عملگر \hat{L}^2 است. با به کار بردن تبدیل از مختصات دکارتی به مختصات قطبی کروی و قاعده زنجیره‌ای مشتق‌گیری، نتیجه خواهیم گرفت

$$\begin{aligned}\hat{L}_x &= \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) = i\hbar \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ \hat{L}_y &= \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) = i\hbar \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ \hat{L}_z &= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \end{aligned}\quad (۳۴-۵)$$

با انجام عملیات لازم، نتیجه می‌شود

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$$

چون در (۳۵-۵) فقط مشتقهای زاویه‌ای دخالت می‌کنند، وارد کردن (۳۵-۵) در دو طرف این معادله تغییری در آن ایجاد نمی‌کند و لذا خواهیم داشت

$$\hat{L}^2 R Y_{lm_l} = \hbar^2 l(l+1) R Y_{lm_l}$$

با

$$\hat{L}^2 \psi_{lm_l} = \hbar^2 l(l+1) \psi_{lm_l} \quad (۳۵-۵)$$

به علاوه، چون

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

نتیجه می‌شود که (۳۲-۵) عبارت است از

$$\hat{L}_z^2 \Phi_{m_l} = m_l^2 \hbar^2 \Phi_{m_l}$$

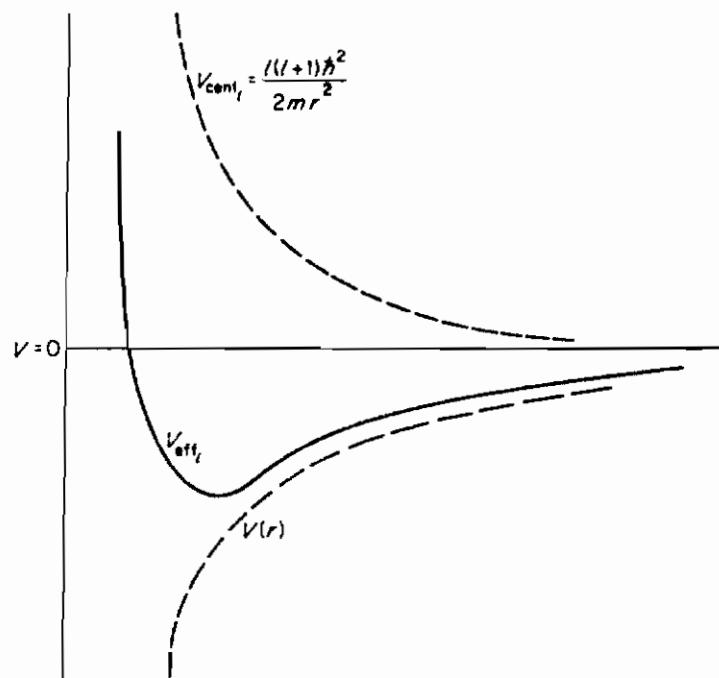
یا، با ضرب کردن دو طرف در $R\Theta_{lm_l}$ ،

$$\hat{L}_z^2 \psi_{lm_l} = m_l^2 \hbar^2 \psi_{lm_l} \quad (36-5)$$

بدین ترتیب به نتیجه زیر می‌رسیم: فرایند تفکیک متغیرهای هر مسئله نیروی مرکزی در مختصات کروی همیشه منجر به ویژه تابعهای از انرژی می‌شود که به طور همزمان ویژه تابعهای z^2 و z^2 نیز هستند. ویژه مقدارها به ترتیب عبارت‌انداز $\hbar^2(l+1)/l$ و $m_l^2 \hbar^2$ که در آنها z^2 و m_l باید تعیین شوند.

با بازگشت به معادله شعاعی مشاهده می‌کنیم که این معادله با یک معادله شرودینگر یک بعدی (جهت شعاعی) که پتانسیل مؤثر آن برابر با پتانسیل ناشی از نیروی مرکزی به اضافه یک پتانسیل گریزاز مرکز (دافعه) وابسته به تکانه زاویه‌ای (شکل ۲-۵) می‌باشد هم ارز است، یعنی،

$$V_{\text{eff},l}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \quad (37-5)$$



شکل (۲-۵) پتانسیلهای مؤثر شعاعی ($V_{\text{eff},l}$) و گریزاز مرکز (V_{center}) و نیروی مرکزی ($V(r)$)

جمله اول در (۲۹-۵) می‌تواند به عنوان انرژی جنبشی شعاعی^{*} در نظر گرفته شود.

$$\frac{\hat{p}_r^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) \quad (38-5)$$

چون در همه مسائل نیروی مرکزی (۳۲-۵) و (۳۳-۵) به طور مشترک وجود دارند، بهتر است نخست حل آنها را مورد مطالعه قرار دهیم. با این کار ما علاوه بر "تکانه زاویه‌ای" را کوانتیده کرده‌ایم. امکان اینکه هامیلتونی نیروی مرکزی دارای ویژه حالت‌های مشترک با \hat{L}^2 و \hat{L}_z باشد می‌توانست از روابط جابه‌جایی

$$[\hat{H}_{cr}, \hat{L}^2] = [\hat{H}_{cr}, \hat{L}_z] = 0 \quad (39-5)$$

پیش‌بینی شود. تحقیق این روابط به عنوان تعریف و اکذار می‌شود.

۷- کوانتش تکانه زاویه‌ای

دیدیم که تغییراتی که مسئله نیروی مرکزی در مختصات کروی همیشه منجر به معادله زاویه‌ای

$$-\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\} Y_{lm_l}(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm_l}(\theta, \phi) \quad (40-5)$$

* توجه کنید که

$$\hat{p}_r = \left(\frac{\mathbf{p}}{r} \right) \cdot \hat{\mathbf{p}} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r}$$

هرمیتی نیست زیرا از حاصل ضرب عملگرهای هرمیتی‌ای که جابه‌جاذیر نیستند بدست آمده است، یک نمایش قابل قبول برای \hat{p}_r شکل هرمیتی (به مسئله ۱۳-۵ مراجعه کنید)

$$\hat{p}_r = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\mathbf{p}}{r} \right) \cdot \mathbf{p} + \mathbf{p} \cdot \left(\frac{\mathbf{p}}{r} \right) \right] \rightarrow \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \right)$$

است که از آن نتیجه می‌شود

$$\frac{\hat{p}_r^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$$

می‌شود که پس از یک تفکیک دیگر، $Y_{lm} = \Theta_{lm}(θ)\Phi_{ml}(φ)$ ، منجر می‌شود به

$$\sin θ \frac{d}{dθ} \left(\sin θ \frac{d\Theta_{lm}}{dθ} \right) + (-m_l^2 + l(l+1)\sin^2 θ)\Theta_{lm} = 0 \quad (41-5)$$

و

$$-\hbar^2 \frac{d^2}{dφ^2} \Phi_{ml} = m_l^2 \hbar^2 \Phi_{ml} \quad (42-5)$$

علاوه بر (۴۰-۵) و (۴۲-۵) معرف معادلات ویژه مقداری برای \hat{L}_z^2 و \hat{L}_z (یا دقیقتر بگوئیم \hat{L}_z^2) با اعداد کوانتمی / (موسوم به مداری) و m_l (موسوم به سمتی یا "مغناطیسی") می‌باشد. وقتی که مقادیر مجاز / و تعیین شدند، ویژه مقدارهای \hat{L}_z^2 و \hat{L}_z می‌توانند به ترتیب به صورت $m_l \hbar^2 / (l+1) \hbar^2$ نوشته شوند.

مشاهده می‌کنیم که هر جواب

$$\hat{L}_z \Phi_{ml} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dφ} \Phi_{ml} = m_l \hbar \Phi_{ml} \quad (43-5)$$

خود به خود جواب (۴۲-۵) نیز هست. جواب (۴۳-۵) ویژه تابعهای \hat{L}_z را به صورت $\Phi_{ml} \propto e^{im_l φ}$ به دست می‌دهد. اما تک مقداری بودن ψ ایجاب می‌کند که

$$\begin{aligned} \Phi_{ml}(\phi + 2π) &= \Phi_{ml}(\phi) \\ e^{im_l(\phi + 2π)} &= e^{im_l \phi} \end{aligned}$$

پا

$$e^{im_l 2π} = 1$$

کما ز آن نتیجه می‌شود $0, \pm \hbar, \pm 2\hbar, \dots$ لذا ویژه مقدارهای \hat{L}_z عبارتنداز ... استفاده از $u = \cos \theta$ می‌تواند به سپس توجه خود را به (۴۱-۵) معطوف می‌کنیم که، با استفاده از $u = \cos \theta$ ، می‌تواند به

$$\frac{d}{du} \left[(1-u^2) \frac{d}{du} \Theta_{lm}(u) \right] + \left(l(l+1) - \frac{m_l^2}{1-u^2} \right) \Theta_{lm}(u) = 0 \quad (44-5)$$

وابسته لوزاندر، جایگذاری

$$\Theta_{lm_l} = (1 - u^2)^{|m_l|/2} \frac{d^{|m_l|}}{du^{|m_l|}} P_l(u) \quad (45-5)$$

در (۴۴-۵) آنرا به معادله معمولی (مستقل از m_l) لوزاندر تبدیل می‌کند

$$\frac{d}{du} \left[(1 - u^2) \frac{dP_l(u)}{du} \right] + l(l+1)P_l(u) = 0 \quad (46-5)$$

که در آن P_l توابع لوزاندر معمولی هستند. معادله (۴۶-۵) باید با شرط متناهی بودن ویژه تابعها حل شود.

بنابراین، انتظار داریم

$$P_l(u) = \text{متناهی} \quad -1 \leq u \leq 1 \quad (0 \leq \theta \leq \pi)$$

روش به کاربرده شده در اینجا "کاملاً شبیه به روش حل معادله هرمیت مربوط به ویژه تابعهای نوسانگر است. جواب معادله را به صورت سری

$$P_l(u) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j u^j$$

در نظر می‌گیریم که پس از جایگذاری در (۴۶-۵) معادله بازگشتی دو جمله‌ای

$$a_{j+2} = \frac{j(j+1) - l(l+1)}{(j+1)(j+2)} a_j \quad (47-5)$$

را به دست می‌دهد. دوباره با انتخاب دلخواه a_0 و a_1 یک سری زوج یا فرد ایجاد می‌کنیم. متسفانه، همان طور که می‌توان تحقیق کرد، در $u = \pm 1$ هردو جواب سری مانند و اکرامی شوند و این و اکرامی آنها را به عنوان ویژه تابع غیرقابل قبول می‌کند. اما اگر یک عدد صحیح مثبت یا صفر باشد، در این صورت یا سری زوج یا سری فرد (بسته به مقدار l) قطع می‌شود. برای l زوج، یک چندجمله‌ای زوج از درجه l به دست خواهیم آورد. هم‌چنین، وقتی l فرد باشد یک چندجمله‌ای فرد از درجه l به دست خواهد آمد. چون چندجمله‌ایها در $u = \pm 1$ متناهی می‌مانند ویژه تابعهای قابل قبولی هستند.

به طور قراردادی $a_0^{(l)}$ و $a_1^{(l)}$ را طوری انتخاب می‌کنند که $P_l(1) \equiv 1$ باشد، در این صورت

چندجمله‌ایها چندجمله‌ایهای لوزاندر هستند. چندتای اول آنها عبارتند از

$$\begin{aligned} P_0(u) &= 1 & P_3(u) &= \frac{1}{2}(5u^3 - 3u) \\ P_1(u) &= u & P_4(u) &= \frac{1}{8}(35u^4 - 30u^2 + 3) \\ P_2(u) &= \frac{1}{2}(3u^2 - 1) & P_5(u) &= \frac{1}{8}(63u^5 - 70u^3 + 15u) \end{aligned} \quad (48-5)$$

چندجمله‌ایهای (معمولی) لوزاندر دارای خواص مفید زیراند

$$(1) \quad (1 - 2uz + z^2)^{-1/2} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(u)z^l \quad (\text{تابع مولد})$$

$$(2) \quad P_l(u) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{du^l} (u^2 - 1)^l \quad (\text{فرمول رودریگز})$$

$$(3) \quad (l+1)P_{l+1}(u) - (2l+1)uP_l(u) + lP_{l-1}(u) = 0$$

$$(4) \quad (u^2 - 1)P_l'(u) = luP_l(u) - lP_{l-1}(u)$$

$$(5) \quad \int_{-1}^1 P_l(u)P_{l'}(u) du = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'} \quad (\text{تعامد}) \quad (49-5)$$

با استفاده از (45-5)، توابع وابسته لوزاندر^{*} خواهند شد

$$\Theta_{lm_l} = P_l^{m_l} = (1 - u^2)^{|m_l|/2} \frac{d^{|m_l|}}{du^{|m_l|}} P_l(u) \quad (50-5)$$

توابع وابسته دارای خاصیت راست هنجاری

$$\int_{-1}^1 P_l^{m_l}(u)P_{l'}^{m_l}(u) du = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+|m_l|)!}{(l-|m_l|)!} \delta_{ll'}$$

هستند. چون مشتق $|m_l|$ ام یک چند جمله‌ای از درجه $|m_l|$ بجز برای $|m_l| \leq m$ صفر است، از (50-5) نتیجه می‌شود که یک ویژه تابع فقط وقتی وجود خواهد داشت که عدد مغناطیسی از شاخص مداری تجاوز نکند**.

همانگاهای کروی (بهنجارشده) به صورت

* به خاطر عامل $(1 - u^2)^{|m_l|/2}$ ، توابع Θ_{lm_l} چند جمله‌ای نیستند

** این محدودیت متناظر با این شرط کلاسیکی است که هرمولفه یک بردار (L) نمیتواند از اندازه خود بردار (L) بزرگتر باشد.

$$Y_{lm_l}(\theta, \phi) = \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m_l|)!}{(l+|m_l|)!} \right]^{1/2} P_l^{|m_l|}(u = \cos \theta) e^{im_l \phi} \quad (51-5)$$

تعریف شده‌اند که در آنها $m_l = 0, 1, 2, \dots$ و $l = 0, 1, 2, \dots$. این هماهنگ‌ها ویژه تابعهای \hat{L}^2 و \hat{L}_z با ویژه مقدارهای $\hbar^2(l+1)$ و $\hbar m_l$ هستند و دارای خاصیت بهنجارش زیراند

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{lm_l}^*(\theta, \phi) Y_{l'm_l}(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi = \delta_{ll'} \delta_{m_lm_l} \quad (52-5)$$

ویژه تابع کلی هرمسئله نیروی مرکزی به صورت زیر در می‌آید

$$\psi_{nlm_l} = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \phi) \quad (53-5)$$

در اینجا یک عدد کوانتومی سومی، n ، وارد کرده‌ایم که مفهوم آنرا هنوز مشخص نکرده‌ایم. بنابراین، ویژه تابعهایی که بدین طریق ایجاد شده‌اند به طور همزمان هم ویژه تابعهای هامیلتونی نیروی مرکزی، $\hat{\mathcal{H}}$ ، هستند و هم ویژه تابعهای عملگرهای \hat{L}^2 و \hat{L}_z . در این مرحله خواننده ممکن است سوال کند که، در حالی که \hat{L}_z با \hat{L}^2 و \hat{L}_x نیز جایه‌جایز بوده است، پس چرا فقط ویژه تابع \hat{L}_z ظاهر شده است؟ به طور معادل، در مسئله‌ای که تقارن کروی دارد، محور z چه ویژگی خاصی دارد؟ جواب این است که این ریاضی است، و نه فیزیک که محور z را ممتاز کرده است. با نگاهی به تبدیل به مختصات کروی (۵-۲۶)، مشاهده می‌کنیم که زلولیه θ به سیله میل نسبت به محور z تعریف شده است. اگر دقیقترا بگوئیم، ویژه تابع ψ_{nlm_l} ویژه تابع $\psi_{nl'm_l}$ و یکی از مولفه‌های \hat{L}_z روی هر امتدادی در فضا است. برای سهولت ریاضی این امتداد به عنوان محور z در نظر گرفته می‌شود.

از رابطه کروشی پواسن (۲-۲۸) نتیجه می‌شود که رابطه جایه‌جایی برای مولفه‌های تکانه زاویه‌ای باید به صورت زیر باشد

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \hat{L}_k \quad , \quad i, j, k = x, y, z \quad (54-5) \quad (\text{در یک ترتیب چرخه‌ای})$$

ناسازگاری هر دو مولفه‌ای از \hat{L}_z روش می‌کند که چرا فقط ویژه تابعهای یکی از مولفه‌های آن می‌توانند به طور همزمان با \hat{L}^2 و \hat{L}_z کوانتیده شوند. با اینکه \hat{L}_x با \hat{L}_y و \hat{L}_z و \hat{L}_x جایه‌جایز است، مولفه‌های \hat{L}_x بین خودشان جایه‌جایز نیستند.

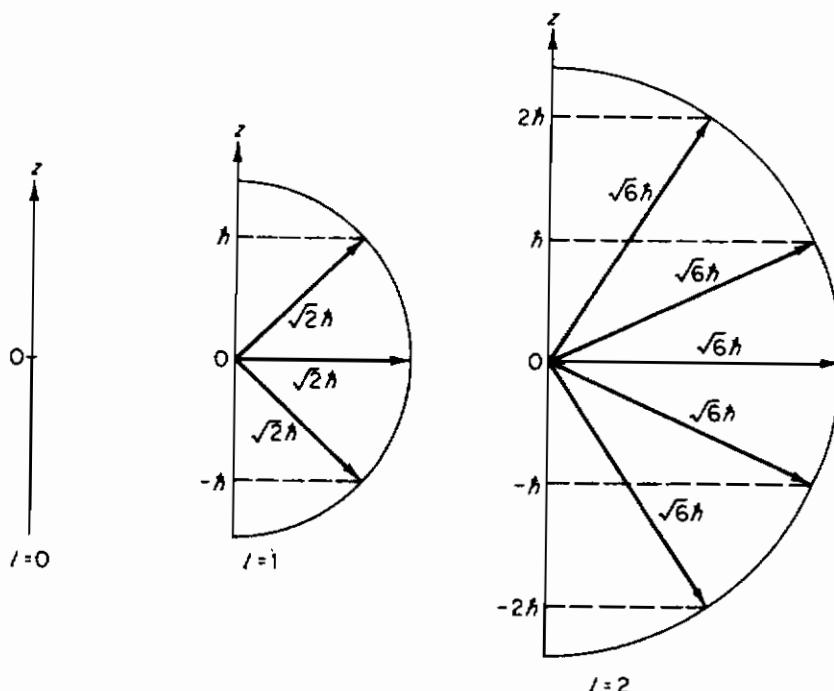
ویژه تابعهای نیروی مرکزی، $\psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi)$ ، متناظر با ویژه کتلهایی با خواص زیراند

$$\hat{H}|n, l, m_l\rangle = \varepsilon_{nl}|n, l, m_l\rangle$$

$$\hat{L}^2|n, l, m_l\rangle = l(l+1)\hbar^2|n, l, m_l\rangle \quad (l=0, 1, 2, \dots) \quad (35-5)$$

و

$$\hat{L}_z|n, l, m_l\rangle = m_l\hbar|n, l, m_l\rangle \quad (m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l)$$



شکل (۳-۵) کوانتش L_z و L^2 . توجه کنید که هر دارای L_z هرگز بر محور z منطبق نمی‌شود.

معادله شعاعی (۲۹-۵) شامل m_l نیست، در نتیجه ویژه مقدارهای انرژی حداقل به اعداد کوانتومی n و l بستگی دارند. بنابراین، یک تبهگنی "جهتی" یا فضایی نسبت به حالت‌های کوانتومی مغناطیسی خواهیم داشت. این تبهگنی جهتی ترازهای l حداقل از مرتبه $2l+1$ است (زیرا برای یک m_l معین این تعداد l وجود دارد) و می‌تواند به مقاین کردن پتانسیل (شکل ۳-۵) نسبت داده شود. نتیجه می‌شود که هر ترکیب خطی از زیر حالت‌های مغناطیسی یک ویژه حالت $h\omega$ و h^2 نیز هست، یعنی

$$|n, l\rangle' = \sum_{m_l=-l}^l a_{m_l}|n, l, m_l\rangle$$

یا

$$\psi'_{nl} = \sum_{m_l=-l}^l a_{m_l} \psi_{nlm_l}$$

اما، چون مقادیر m_l را "مخلوط" کرده‌ایم، ویژه حالت‌های جدید دیگر ویژه حالت‌های نیستند.

عدد کوانتومی سوم یا اصلی n (و در نتیجه E_n) باید به‌وسیله معادله شعاعی برای مسئله نیروی مرکزی خاص تعیین شود. به عنوان چند مثال، ذره آزاد، نوسانگر همسانگرد و مسئله کولنی را بررسی می‌کنیم.

۸- ذره آزاد (مختصات کروی)

ویژه تابع ذره آزاد در مختصات دکارتی به‌دست آورده شد و نشان داده شد که به‌صورت e^{ikr} است. اینک ویژه تابعهای ذره آزاد در مختصات کروی را در نظر خواهیم گرفت. معادله موج (۲۷-۵) باید با $V(r) = 0$ حل شود. برای هر ویژه حالت انرژی سه عدد کوانتومی k ، l و m_l وجود دارد. جواب باید به‌صورت $\psi_{klm_l} = R_{kl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \phi)$ باشد، که در آن پارامتر کوانتومی پیوسته k به‌جای n به‌کار رفته است. معادله شعاعی (۲۹-۵) برای ذره آزاد ($V = 0$) خواهد شد

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_{kl}}{dr} \right) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{kl} = 0 \quad (56-5)$$

که در آن $k^2 = 2me_k/\hbar^2$. با استفاده از تغییر متغیر $r = kr = \rho$ ، معادله فوق به‌صورت معادله بسل کروی

$$\frac{1}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \frac{dR_l(\rho)}{d\rho} \right) + \left(1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) R_l(\rho) = 0 \quad (57-5)$$

با جواب عمومی

$$R_l(kr) = A_l j_l(kr) + B_l n_l(kr)$$

در می‌آید که j_l و n_l به ترتیب توابع بسل کروی^{*} و نیومن¹ کروی مرتبه l نامیده می‌شوند. مجدداً می‌خواهیم که ψ در هم‌جا متناهی باشد. توابع نیومن دارای ویژگی $\psi_{r \rightarrow 0} \rightarrow n_l(kr)$ هستند و بنابراین جوابهای قابل قبولی برای مسئله ما نیستند. در نتیجه ویژه تابعها و ویژه مقدارهای ذره آزاد به صورت

$$\psi_{klm_l} = j_l(kr) Y_{lm_l}(\theta, \phi) \quad (58-5)$$

و $\hbar^2 k^2 / 2m = E$ در می‌آیند. توجه کنیم که انرژی فقط به پارامتر اصلی k بستگی دارد، و در نتیجه تبعنگی شامل E و m است. باید این امکان وجود داشته باشد که ترکیبات خطی حالت‌های مربوط به یک k ولی با m های مختلف را تشکیل داد و به جواب دکارتی که قبلاً به دست آمد رسید، یعنی

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m_l=-l}^l a_{lm_l}(k) j_l(kr) Y_{lm_l}(\theta, \phi) \quad , \quad |k| = k$$

برای حالت خاصی که در آن k در امتداد محور z قرار دارد، می‌توان ضرایب را طوری حساب کرد که داشته باشیم

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (59-5)$$

ویژه تابعهای کروی ذره آزاد به طور همزمان هم ویژه تابعهای J_l هستند و هم ویژه تابعهای P_l (به جای ψ)، اهمیت دستگاه مختصات به کاربرده شده برای به دست آوردن ویژه تابعهای انرژی حالا باید روشن شده باشد.

۹ - نوسانگر همسانگرد

معادله شعاعی (۵-۲۹) برای این مسئله $V = \frac{1}{2} Kr^2 = \frac{1}{2} m\omega^2 r^2$ به صورت

* این تابع بسل توسط رابطه زیر به توابع بسل استوانهای مربوط آند

$$j_l(kr) = \left(\frac{\pi}{2kr} \right)^{1/2} J_{l+1/2}(kr)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_{nl}}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(\epsilon_{nl} - \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_{nl} = 0 \quad (60-5)$$

در می‌آید . به دست آوردن جواب طولانی است و تشریح دقیق آن روش‌نگری خاصی در برندارد . لذا صرفاً "به طرح نکات عمدۀ روشهای به کار بردۀ شده اکتفا خواهیم کرد . نخست قرار می‌دهیم

$$\rho = \alpha r^2 , \quad \alpha = m\omega/\hbar \quad \text{و می‌نویسیم}$$

$$R_{nl} = \rho^{(l+1)/2} e^{-\rho/2} \frac{L_n^{l+1/2}}{\rho^{1/2}}$$

سپس انرژی را برابر با $\epsilon_{nl} = \hbar\omega(2n + l + \frac{1}{2})$ قرار می‌دهیم . در این صورت (۶۰-۵) به صورت معادله ابر هندسی (رک ۶۸-۵)

$$\rho \frac{d^2}{d\rho^2} L_n^{l+1/2}(\rho) + \left[\left(l + \frac{1}{2} \right) + 1 - \rho \right] \frac{d}{d\rho} L_n^{l+1/2}(\rho) + n L_n^{l+1/2}(\rho) = 0 \quad (61-5)$$

در می‌آید . جوابها در $\rho \rightarrow \infty$ و اکرا می‌شوند مگر اینکه n عدد صحیحی باشد ($n = 0, 1, 2, \dots$) که در این صورت جوابهای $L_n^{l+1/2}$ چند جمله‌ایهای لاغر (از مرتبه نیمه‌صحیح) خواهند بود . چند تای اول عبارتنداز

$$\begin{aligned} L_0^{1/2} &= 1 & L_1^{1/2} &= \frac{3}{2} - \rho \\ L_0^{3/2} &= 1 & L_1^{3/2} &= \frac{5}{2} - \rho \end{aligned}$$

ویژه تابعها و ویژه مقادیرهای نوسانگر* خواهند شد

* می‌توان (۶۲-۵) را بر حسب \bar{n} ، به صورت زیر بیان کرد

$$\psi_{nlm} = r^l e^{-\alpha r^2/2} L_{(l+1)/2}^{l+1/2}(\alpha r^2) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad ; \quad \epsilon_n = (\bar{n} + \frac{1}{2})\hbar\omega.$$

در این شکل بهوضوح دیده می‌شود که انرژی به عدد کوانتموی ℓ بستگی دارد و نه به l . چنین اتفاقی برای یک مساله نیروی مرکزی به عنوان تبہگنی "تصادفی" نامیده می‌شود و از تقارن خاصی غیر از تقارن کروی پتانسیل ناشی می‌شود . این تقارن معمولاً از این واقعیت نتیجه می‌شود که معادله شرودینگر برای این پتانسیل در دستگاه مختصاتی غیر از مختصات کروی تلفیک پذیر است .

$$\psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) \propto \frac{r^{l+1} e^{-\alpha r^2/2} L_n^{l+1/2}(\alpha r^2) Y_{lm_l}(\theta, \phi)}{r} \quad (62-5)$$

و

$$\varepsilon_{nl} = \varepsilon_{\bar{n}} = (\bar{n} + \frac{1}{2})\hbar\omega \quad (63-5)$$

که در آن $\bar{n} = 2n + l = 0, 1, 2, \dots$ و پیزه مقدارها با مقادیری که در مختصات دکارتی به دست آمدند در تواافق کامل هستند. این دو مجموعه اعداد کوانتومی با رابطه $n_x + n_y + n_z = \bar{n} = 2n + l$ بهیکدیگر مربوط می‌شوند. از (۶۲-۵) و پیزه تابع حالت پایه $(n = l = m_l = 0)$ عبارت است از

$$\psi_{000} \propto e^{-\alpha r^2/2} L_0^{1/2} Y_{00} \propto e^{-\alpha r^2/2} = e^{-\alpha(x^2+y^2+z^2)/2} \quad (64-5)$$

وانرژی آن برابر است با $\varepsilon_{000} = \frac{3}{2}\hbar\omega$. این حالت ناتبیگن و پکتاست و بنابراین (با استثنی بهنجارش) با نتیجه دکارتی (۱۹-۵) یکسان است.

اولین حالت برانگیخته $(l = 1, n = 0)$ به طور سهگانه تبیگن است و انرژی وابسته به هرسه تابع ψ_{011} ، ψ_{010} و ψ_{01-1} یکسان و برابر با $\frac{5}{2}\hbar\omega$ است. در اینجا نیز باید بتوان از پیزه تابعهای کروی حالت‌های دکارتی تبیگن را ساخت. اتفاقاً "اتفاقاً" $\psi_{001}(x, y, z)$ و $\psi_{010}(r, \theta, \phi)$ بیکسان هستند، یعنی

$$\psi_{010}(r, \theta, \phi) = e^{-\alpha r^2/2} r \cos \theta = e^{-\alpha(x^2+y^2+z^2)/2} z = \psi_{001}(x, y, z)$$

از طرف دیگر، نتیجه می‌گیریم که، همان‌طور که می‌توان از رابطه زیر دید، $\psi_{100}(x, y, z)$ یک ترکیب خطی از $\psi_{011}(r, \theta, \phi)$ و $\psi_{01-1}(r, \theta, \phi)$ است

$$\begin{aligned} \psi_{100}(x, y, z) &= e^{-\alpha(x^2+y^2+z^2)/2} x = e^{-\alpha r^2/2} r \sin \theta \cos \phi \\ &= e^{-\alpha r^2/2} \sin \theta \frac{1}{2}(e^{i\phi} + e^{-i\phi}) \\ &= \frac{1}{2}[\psi_{011}(r, \theta, \phi) + \psi_{01-1}(r, \theta, \phi)] \end{aligned}$$

محاسبه مشابهی نشان می‌دهد که

$$\psi_{010}(x, y, z) = \frac{1}{2i} [\psi_{011}(r, \theta, \phi) - \psi_{01-1}(r, \theta, \phi)]$$

در حالی که ویژه تابعها و اعداد کوانتومی با سیستم مختصات تغییر می‌کنند، ویژه مقدارهای انرژی و تبهمگنی یک تراز همیشه یکی هستند. ارتباط بین ویژه تابعهای کروی و دکارتی وابسته به یک نوسانگر در جدول (۱-۵) خلاصه شده‌اند

جدول (۱-۵)
طبقه‌بندی چند حالت اول نوسانگر

حالت	انرژی	ویژه تابع دکارتی	ویژه تابع کروی	تبهمگنی
$\bar{n} = 2n + l$ $\bar{n} = n_x + n_y + n_z$	$E_0 = (\bar{n} + \frac{1}{2})\hbar\omega$	$\psi_{n_x n_y n_z}$	ψ_{nlm_l}	$\frac{1}{2}(\bar{n} + 1)(\bar{n} + 2)$
حالت پایه $\bar{n} = 0$	$\frac{1}{2}\hbar\omega$	ψ_{000}	ψ_{000}	1
اولین حالت برانگیخته 1 $\bar{n} = 1$	$\frac{3}{2}\hbar\omega$	$\psi_{100}, \psi_{010}, \psi_{001}$	$\psi_{011}, \psi_{01-1}, \psi_{010}$	3
دومین حالت برانگیخته 2 $\bar{n} = 2$	$\frac{5}{2}\hbar\omega$	$\psi_{110}, \psi_{101}, \psi_{011}$ $\psi_{200}, \psi_{020}, \psi_{002}$	$\psi_{022}, \psi_{02-2}, \psi_{021}$ $\psi_{02-1}, \psi_{020}, \psi_{100}$	6

۱۰ - حالتهای مقید یک پتانسیل جاذبه کولنی ($V = -K/r$)

مسئله کولنی شاید مهمترین مثالی از یک مسئله نیروی مرکزی باشد که ما بررسی خواهیم کرد. الکترون هیدرژنی تحت تأثیر پتانسیلی از این نوع که ناشی از حضور پروتون در هسته است قرار دارد. بنابراین حل این مسئله توصیف نسبتاً دقیقی از رفتار ساده‌ترین اتمها ارائه می‌دهد، و با قدری تعمیم چارچوبی برای کل نظریه فیزیک اینی به دست می‌دهد. با این وجود، از بعضی نظرها، این پتانسیل کولنی خاص‌ترین پتانسیل‌ها است. خواهیم دید که حالتهای مقید آن ($l < 0$) ویژه مقدارهایی دارند که مستقل از l می‌باشند. این تبهمگنی "تصادفی" جالب را، مثل مورد نوسانگر همسانگرد، می‌توان به یک تقارن ذاتی (علاوه بر تقارن فضائی) وابسته به پتانسیل V/r نسبت داد. به علاوه، حالتهای نامقید آن به یک مقطع موثر پراکندگی کوانتومی منجر می‌شوند که با نتیجه کلاسیکی راتر فور دیگران است* و به یک

* مرجع زیر را به بینید:

H. Goldstein, "Classical Mechanics," P.84. Addison-

wesley, Reading, Massachusetts, 1950.

مقطع موثر کل واگرا منتهی می‌شود. در اینجا برد بلند پتانسیل کولنی مستقیماً^{*} مسئول این واگرایی است.

بحث فعلی خود را به حالت‌های مقید که برای آنها ویژه مقدارهای انرژی گستته و منفی

است ($\epsilon_n < 0$) محدود می‌کنیم. معادله شعاعی برای پتانسیل کولنی (۲۹-۵) خواهد شد*

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_{nl}}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(\epsilon_n + \frac{K}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_{nl} = 0 \quad (65-5)$$

جوابهایی از این معادله را جستجو می‌کنیم که در شرط مرزی $R_{nl}(r) \rightarrow 0$ صدق

کنند. با قراردادن $r = 2\zeta_n \rho$ ، که در آن $\zeta_n = (-2me_n/\hbar^2)^{1/2}$ و است، (۶۵-۵) شکل ساده‌تر

$$\left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\gamma_n}{\rho} - \frac{1}{4} \right\} y_{nl}(\rho) = 0 \quad (66-5)$$

را، که در آن $\gamma_n = mK/\zeta_n \hbar^2$ است، می‌گیرد.

فرض کنیم یک جواب به صورت

$$y_{nl}(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho/2} F_{nl} \quad (67-5)$$

وجود دارد که در آن F یک سری توانی از متغیر ρ است. با قراردادن (۶۷-۵) در (۶۶-۵) و ساده‌کردن آن، معادله ابر هندسی

$$\left\{ \rho \frac{d^2}{d\rho^2} + (\beta - \rho) \frac{d}{d\rho} - \alpha \right\} F(\alpha|\beta|\rho) = 0 \quad (68-5)$$

را به دست خواهیم آورد که در آن $\gamma_n = 2(l+1) = 2, 4, 6, \dots$ و $\alpha = l+1 - \beta = 2(l+1) - 2, 4, 6, \dots$ جوابهای سری‌مانند $F(\alpha|\beta|\rho)$ که در مداء خوش‌رفتارند، سریهای ابر هندسی نامیده می‌شوند. با قراردادن $\rho = \sum_{j=0}^{\infty} a_j(\alpha, \beta)$ در (۶۸-۵)، یک‌گفرمول بازگشتی دو جمله‌ای به دست می‌آوریم که a_{j+1} را به ربط می‌دهد. با انتخاب $a_0 = 1$ ، بقیه ضرایب a_j می‌توانند محاسبه شوند و منجر به

$$F(\alpha|\beta|\rho) = 1 + \frac{\alpha}{\beta}\rho + \frac{\alpha(\alpha+1)}{2!\beta(\beta+1)}\rho^2 + \frac{\alpha(\alpha+1)(\alpha+2)}{3!\beta(\beta+1)(\beta+2)}\rho^3 + \dots$$

به عنوان یک جواب خصوصی گردند.

حال می‌توان تحقیق کرده این سری بینهایت در بینهایت واگرا می‌شود و منجر به ویژه تابع غیرقابل قبولی می‌گردد. اما برای حالت خاصی که در آن α یک عدد صحیح منفی یا صفر باشد، سری قطع می‌شود و به یک چندجمله‌ای از درجه $\alpha - q$ تبدیل می‌شود و ویژه تابع قابل قبولی را نمایش می‌دهد. بنابراین جوابهای قابل قبول وقتی وجود دارند که $\alpha - q = -n$ باشد. چون / یک عدد صحیح غیرمنفی است نتیجه می‌شود $n = 1, 2, 3, \dots$ به اضافه این شرط کمکی که $n \leq l + 1$. ویژه مقدارهای (منفی) انرژی فوراً به صورت

$$\gamma_n^2 = n^2 = \frac{m^2 K^2}{\zeta_n^2 \hbar^4} = -\frac{mK^2}{2\hbar^2 \varepsilon_n} \quad (69-5)$$

با

$$\varepsilon_n = -\frac{mK^2}{2\hbar^2 n^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

به دست می‌آیند. معادله (69-5) معکس‌کننده تبیه‌گنی تصادفی است. هیچ دلیل قبلی برای پوداشدن این تبیه‌گنی وجود ندارد و از طبیعت ریاضی خاص جوابهای قابل قبول ناشی می‌شود. ظاهراً "یک تقارن بالاتر (علاوه بر تقارن کروی) وابسته به پتانسیل $n/1$ وجود دارد". با قراردادن عدد صحیح $l + 1 = p = \beta - 1$ معادله ابرهندسی (68-5) به صورت معادله وابسته لامگر

$$\left\{ \rho \frac{d^2}{d\rho^2} + \left[(p+1) - \rho \right] \frac{d}{d\rho} + q \right\} L_q^p(\rho) = 0 \quad (70-5)$$

در می‌آید که جوابهای چندجمله‌ای آن عبارتند از چندجمله‌ایهای لاگر (از مرتبه عدد صحیح)

$$L_q^p(\rho) = L_{n-(l+1)}^{2l+1}(\rho)$$

* این تقارن به این واقعیت مربوط می‌شود که معادله شرودینگر برای یک پتانسیل $1/r$ هم در مختصات قطبی کروی و هم در مختصات سه‌می تفکیک پذیر است.

چندتای اول عبارتند از

$$\begin{aligned} L_0^0 &= 1 & L_1^0 &= 1 - \rho & L_2^0 &= 1 - 2\rho + \frac{1}{2}\rho^2 \\ L_1^1 &= 2 - \rho & L_2^1 &= 3 - 3\rho + \frac{1}{2}\rho^2 \\ L_1^2 &= 3 - \rho & L_2^2 &= 6 - 4\rho + \frac{1}{2}\rho^2 \end{aligned} \quad (۴۱-۵)$$

چندجمله‌ایهای لگر دارای خواص زیراند

$$\begin{aligned} (1) \quad L_p^q(z) &= (-1)^q \frac{d^q}{dz^q} L_{p+q}^0(z) \\ &= \frac{e^z z^{-q}}{p!} \frac{d^p}{dz^p} (z^{p+q} e^{-z}) \quad (p, q = 0, 1, 2, 3, \dots) \end{aligned} \quad (\text{فرمول رودریگز})$$

$$(2) \quad \frac{e^{-zt/(1-t)}}{(1-t)^{q+1}} = \sum_{p=0}^{\infty} t^p L_p^q(z) \quad (\text{تابع مولد})$$

$$(3) \quad z L_p^{q+1}(z) = (p+q+1) L_p^q(z) - (p+1) L_{p+1}^q(z)$$

$$(4) \quad z L_p^{q+1}(z) = -(p-z) L_p^q(z) + (p+q) L_{p-1}^q(z) \quad (۴۲-۵)$$

$$(5) \quad \int_0^\infty dz z^q e^{-z} L_p^q(z) L_r^q(z) = \frac{[(p+q)!]^3}{p!} \delta_{pr} \quad (\text{تعامد})$$

پس از جمع و جور کردن نتایج و بهنجار کردن آنها، ویژه تابعهای مقید انرژی را برای یک پتانسیل کولنی به صورت

$$\begin{aligned} \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) &= \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m_l|)!}{(l+|m_l|)!} \right]^{1/2} P_l^{|m_l|}(\cos \theta) e^{im_l \phi} \\ &\cdot \left[\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \left(\frac{2}{na} \right)^3 \right]^{1/2} \left(\frac{2r}{na} \right)^l e^{-r/na} L_{n-(l+1)}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na} \right) \\ (n &= 1, 2, 3, \dots; \quad l = 0, 1, 2, \dots, n-1; \quad (42-5) \\ m_l &= 0, \pm 1, \dots, \pm l) \end{aligned}$$

* نتایجی که در اینجا ارائه می‌شود فقط شامل ساختار کلی است. تصحیحات کوچکتر به خاطر اسپین الکترون و حرکت بروتون در فصلهای ۶ و ۱۰ بررسی خواهد شد.

پیدا می‌کنیم که در آن جایگذاری $a = \hbar^2/mK$ را به کار بردہ ایم . چند ویژه تابع مقید اول کولنی عبارتنداز

$$\begin{aligned}\psi_{100} &= \left(\frac{1}{\pi a^3}\right)^{1/2} e^{-r/a} \\ \psi_{200} &= \frac{1}{4} \left(\frac{1}{2\pi a^3}\right)^{1/2} \left(2 - \frac{r}{a}\right) e^{-r/2a} \\ \psi_{210} &= \frac{1}{4} \left(\frac{1}{2\pi a^3}\right)^{1/2} \left(\frac{r}{a}\right) e^{-r/2a} \cos \theta \\ \psi_{21\pm 1} &= \frac{1}{8} \left(\frac{1}{\pi a^3}\right)^{1/2} \left(\frac{r}{a}\right) e^{-r/2a} \sin \theta e^{\pm i\phi} \\ \psi_{300} &= \frac{1}{81} \left(\frac{1}{3\pi a^3}\right)^{1/2} \left(27 - \frac{18r}{a} + \frac{2r^2}{a^2}\right) e^{-r/3a} \quad (24-5) \\ \psi_{310} &= \frac{1}{81} \left(\frac{2}{\pi a^3}\right)^{1/2} \left(6 - \frac{r}{a}\right) \left(\frac{r}{a}\right) e^{-r/3a} \cos \theta \\ \psi_{31\pm 1} &= \frac{1}{81} \left(\frac{1}{\pi a^3}\right)^{1/2} \left(6 - \frac{r}{a}\right) \left(\frac{r}{a}\right) e^{-r/3a} \sin \theta e^{\pm i\phi} \\ \psi_{320} &= \frac{1}{81} \left(\frac{1}{6\pi a^3}\right)^{1/2} \left(\frac{r}{a}\right)^2 e^{-r/3a} (3 \cos^2 \theta - 1) \\ \psi_{32\pm 1} &= \frac{1}{81} \left(\frac{1}{\pi a^3}\right)^{1/2} \left(\frac{r}{a}\right)^2 e^{-r/3a} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi} \\ \psi_{32\pm 2} &= \frac{1}{162} \left(\frac{1}{\pi a^3}\right)^{1/2} \left(\frac{r}{a}\right)^2 e^{-r/3a} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}\end{aligned}$$

۱۱- اتم هیدرژن

نتایج فوق می‌توانند به اتم هیدرژن ، که در آن الکترون هیدرژنی در پتانسیل کولنی حاصل از پروتون ساکن در هسته قرار دارد ، اعمال شوند . با قراردادن $K = e^2$ نتیجه می‌گیریم $a = \hbar^2/mK = \hbar^2/me^2$ ، که اولین شاع بومرا است . ویژه مقدارهای انرژی به شکل

$$\epsilon_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} = \frac{\epsilon_1}{n^2} \quad (25-5)$$

۵ مکانیک موجی در سه بعد

در می‌آیند که در آن $\frac{1}{2} \epsilon^2 - \frac{1}{2} e^2 = me^4/2\hbar^2 \approx -13/657$ در توافق کامل با نتایج بوهر است. قابل توجه است که بوهر (۲۵-۵) را با یک نظریه بسیار ساده به دست آورد.

به خاطر تبہگنی تصادفی، n امین تراز به تعداد $n^2 = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1)$ مرتبه تبہگن است. در موقع لزوم از نمادگذاری طیف نمائی، مذکور در جدول (۲-۵)، برای نمایش یک حالت هیدرزنی بر حسب مقدار L استفاده خواهیم کرد. تبہگنی تصادفی ممکن است با این مورد کلاسیکی که در آن بیضی‌های مختلف (مقادیر مختلف L)، به شرط اینکه قطرهای اطول آنها یکسان باشد دارای انرژی یکسانی هستند، مقایسه شود. تبہگنی فضائی متناظر با این واقعیت است که صفحه مدار کلاسیکی می‌تواند چرخانده شود بدون اینکه این چرخش روی انرژی آن تاثیری داشته باشد. با اینکه مفهوم یک مدار کاملاً مشخص در مکانیک کوانتومی بیجا و نامناسب است، مجسم کردن هر حالت (l, m_l) به وسیله یک مدار مفید است.

جدول (۲-۵) نمادگذاری طیف نمائی

مقدار L	حرف
۰	s (نمیز)
۱	p (اصلی)
۲	d (پخش)
۳	f (اساسی)
۴	g

چون حالتی $(l=0)$ دارای تکانه زاویه‌ای صفراند باید به صورت بیضی‌های تبہگنی (خطوط مستقیم) نمایش داده شوند. وقتی برای یک n معین، افزایش می‌باشد، انتظار داریم که بیضی تبدیل به یک شبه دایره شود؛ بنابراین حالتی $n-l=1$ را به صورت دایره‌هایی نمایش می‌دهیم. تمام حالتی دیگر بیضی‌هایی هستند با خروج از مرکزهای متفاوت و حالتی با n یکسان دارای قطرهای اطول مساوی هستند (شکل ۲-۵).

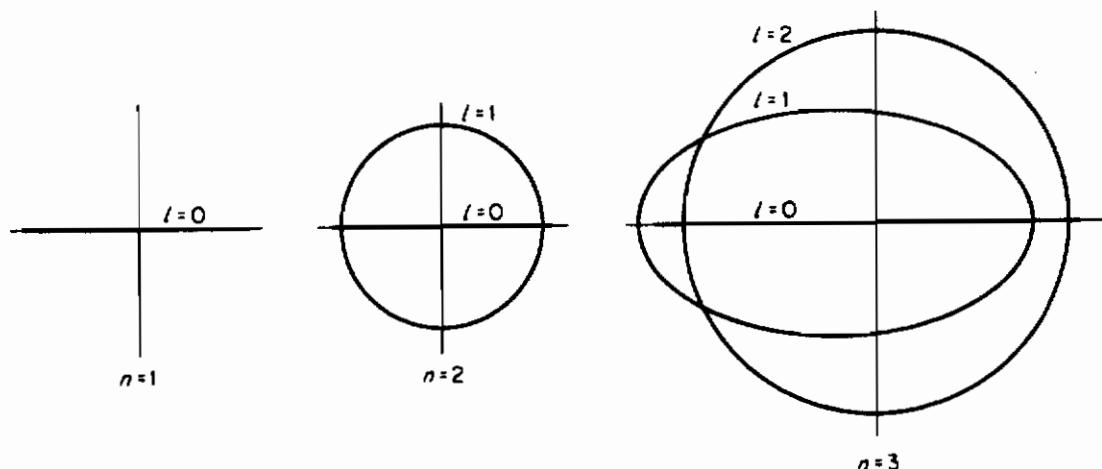
کوانتش فضائی (m_l) میل کلاسیکی صفحه مدار نسبت به محور z را محدود می‌کند. حالت $m_l=0$ شامل کوانتش جهتی نسبت به محورهای x و y نیست. بنابراین قائم بر سطح می‌تواند روی هر کجا از مخروطی حول محور z قرار گیرد (شکل ۵-۵).

احتمال یافتن الکترون هیدرزنی در یک عنصر حجم معین از فضا عبارت است از

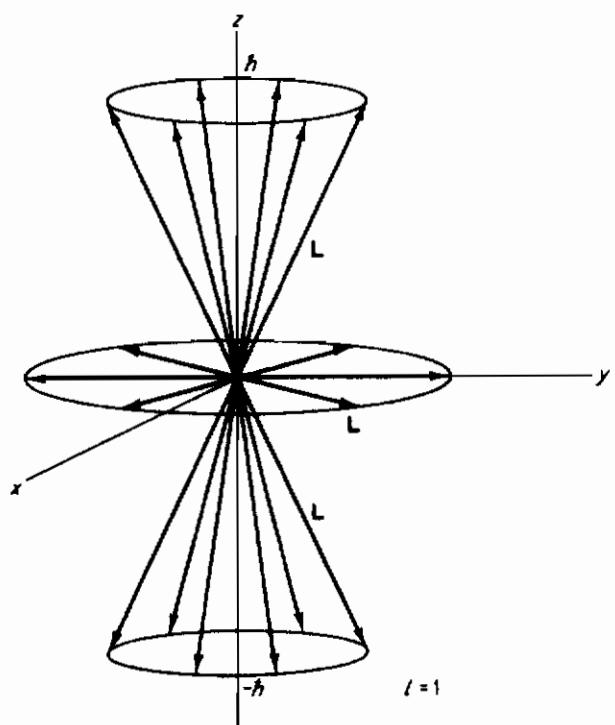
$$\Phi_{nlm_l} dr = R_{nl}^2 |Y_{lm_l}|^2 r^2 dr d\Omega$$

که در آن $d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$. این عبارت می‌تواند بهمیک چگالی زاویه‌ای $|Y_{lm_l}|^2$ و یک چگالی شعاعی $R_n^2 r^2$ تجزیه شود. چگالی اول به احتمال یافتن الکترون در داخل یک زاویه حجمی $d\Omega$ در اطراف مبدأ (پروتون) وابسته است. خاطرنشان کنیم که چگالی زاویه‌ای عبارت است از

$$|Y_{lm_l}|^2 = \Theta_{lm_l}^2$$

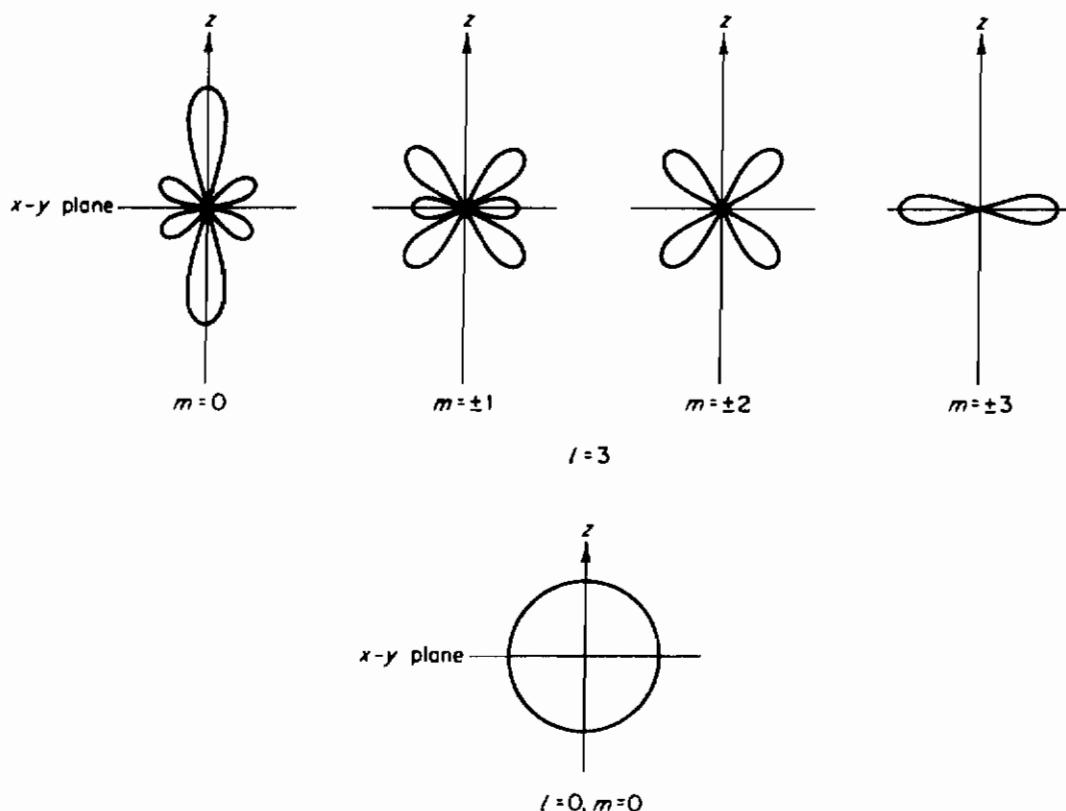


شکل (۴-۵). بعضی مدارهای نیمه کلاسیکی برای حالت‌های $n = 1, 2, 3$.



شکل (۵-۵). مخروطهای "۳ماری" وابسته به کوانتش فضایی تکانه، زاویه‌ای

و فقط تابع زاویه قطبی θ است و به زاویه سمتی ϕ بستگی ندارد. چگالی زاویه‌ای به‌طور مناسبی در یک نمودار قطبی (شکل ۵-۶) ترسیم شده است.



شکل (۵-۶). منحنی‌های قطبی چگالی‌های زاویه‌ای $|Y_{lm}|^2$ وابسته به حالت‌های $l = 3$ و $l = 0$.

ذره‌ای که در حالت $m_l = 0$ ، $l = 3$ است به احتمال خیلی زیاد در $\theta = 0$ یا $\theta = \pi$ قرار دارد. در حالت $m_l = 3$ ، $l = 3$ بیشینه احتمال در $\theta = \pi/2$ (صفحه xy) رخ می‌دهد. چگالی احتمال شعاعی $R_{nl}^2 r^2$ مربوط است به احتمال یافتن الکترون در یک لایه کروی به ضخامت dr در یک فاصله r از مبدأ (شکل ۷-۵). توجه کنیم که موقعیت شعاعی بیشینه احتمال برای حالت پایه $l=0$ در $r_{max}=a_0$ رخ می‌دهد، که متناظر با نتیجه بوده است. اما مهمتر از همه مکان متوسط نسبت به مبدأ، یعنی

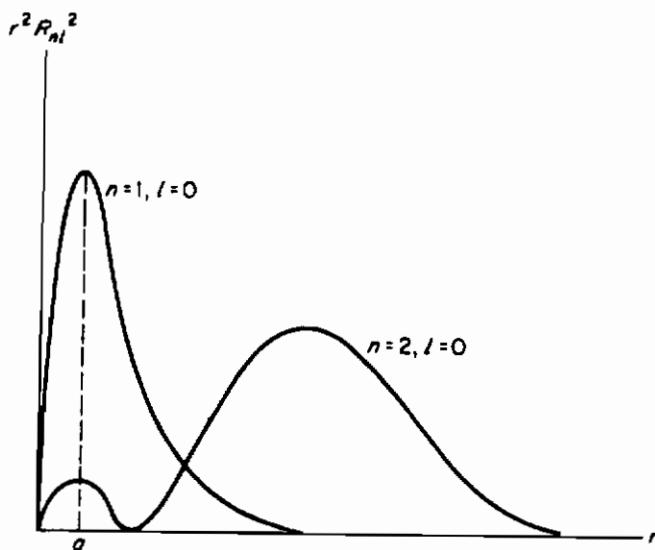
$$\langle r \rangle_{nl} = \int_0^\infty R_{nl} r R_{nl} r^2 dr$$

است. محاسبه انتگرال‌هایی از نوع

$$\langle r^n \rangle_{nl} = \int_0^\infty R_{nl} r^n R_{nl} r^2 dr$$

* نسبتاً مشکل است. ما نتایج چند نتا از آنها را در زیر می‌وریم*

$$\begin{aligned}\langle r \rangle_{n,l} &= n^2 a \left[1 + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{l(l+1)}{n^2} \right) \right] \\ \langle r^2 \rangle_{n,l} &= \frac{1}{2} n^2 [5n^2 + 1 - 3l(l+1)] a^2 \\ \langle r^{-1} \rangle_{n,l} &= \frac{1}{n^2 a} \\ \langle r^{-2} \rangle_{n,l} &= \frac{1}{n^3 (l+\frac{1}{2}) a^2}\end{aligned}\quad (26-5)$$



شکل (۲-۵). چگالیهای احتمال شعاعی برای حالت‌های $n=1, l=0$ و $n=2, l=0$ در هیدروژن

می‌توان سوال زیر را مطرح کرد: با چه دقیقی مکان الکترون در یک مدار از نظر شعاعی جایگزینده است؟ برای پاسخ به این سوال باید عدم قطعیت Δr در اطراف مقدار قابل انتظار $\langle r \rangle$ را محاسبه کرد. با استفاده از تعریفی که در فصل ۳ آمده است، و نتایج موجود در

* به کتاب زیر مراجعه کنید.

H.A. Bethe and E.E. Salpeter, "Quantum Mechanics of one and Two Electron Atomes," P.17. Springer-Verlag, Berlin, 1957.

(۷۶-۵) ، $\langle r \rangle_n$ و Δr_{nl} می‌توانند به آسانی محاسبه شوند .
محاسبه حد نسبت

$$\lim_{n,l \rightarrow \infty} \frac{\Delta r_{nl}}{\langle r \rangle_{nl}} = \lim_{n,l \rightarrow \infty} \frac{(\langle r^2 \rangle_{nl} - \langle r \rangle_{nl}^2)^{1/2}}{\langle r \rangle_{nl}}$$

جالب و مفید خواهد بود . با گذاردن $l_{\max} = n - 1$ و $n \rightarrow \infty$ با استفاده از (۷۶-۵) در حد خواهیم داشت

$$\frac{\Delta r_{n,n-1}}{\langle r \rangle_{n,n-1}} = \frac{1}{(2n+1)^{1/2}} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$$

بنابراین چگالیهای احتمال برای مقادیر بزرگ n در اطراف شعاعهای بوهر کاملاً "معین خواهند شد و متناظر با مدارهای شبهدایرها نظریه نیمه‌کلاسیکی بوهر خواهند بود .

مقدار قابل انتظار $V = -e^2/r$ می‌تواند با استفاده از (۷۶-۵) به دست آید که
نتیجه می‌دهد

$$\langle V \rangle_{nl} = \left\langle \frac{-e^2}{r} \right\rangle_{nl} = -e^2 \langle r^{-1} \rangle_{nl} = -\frac{e^2}{n^2 a} = 2\varepsilon_n$$

چون $\varepsilon_n = \langle E \rangle_{nl} = \langle T + V \rangle_{nl}$ ، نتیجه می‌شود

$$\langle T \rangle_{nl} = \varepsilon_n - \langle V \rangle_{nl} = -\varepsilon_n = -\frac{1}{2} \langle V \rangle_{nl} \quad (77-5)$$

در مکانیک کلاسیکی، که در آن مقادیر قابل انتظار به وسیله متوسطهای زمانی جایگزین شده‌اند، نیز چنین است، یعنی، $T = \bar{T}$ (رک مسائل ۲-۳ و ۴-۱۵) .

۱۲ - پاریته و مسئله نیروی مرکزی

چون هر هامیلتونی نیروی مرکزی در اثر انعکاس نسبت به مبدأ تغییر ناپذیر است $H_2 = H_1 = \mathcal{H}$ ، با عملکر پاریته جایه‌جاپذیر است . در نتیجه باید حداقل یک مجموعه از ویژه تابعهای انرژی نیروی مرکزی با پاریته معین وجود داشته باشد . این که آیا
حالتهای (r, θ, ϕ) مجموعه‌ای هستند را اکنون بررسی می‌کنیم .
انعکاس نسبت به مبدأ $x \rightarrow -x$ به وسیله $y \rightarrow -y$ ، $z \rightarrow -z$ ،

یا در مختصات کروی بهوسیله $\theta \rightarrow \phi + \pi$ ، $r \rightarrow r$ ، $\theta \rightarrow \pi - \theta$ (شکل ۸-۵) نمایش داده خواهد شد. جایگذاری $\theta \rightarrow \pi - \theta$ معادل است با $u \rightarrow -u$ که در آن $u = \cos \theta$. چون قسمت شعاعی R_{nl} تحت انعکاس بی تأثیر خواهد ماند، ما فقط رفتار هماهنگ‌های کروی

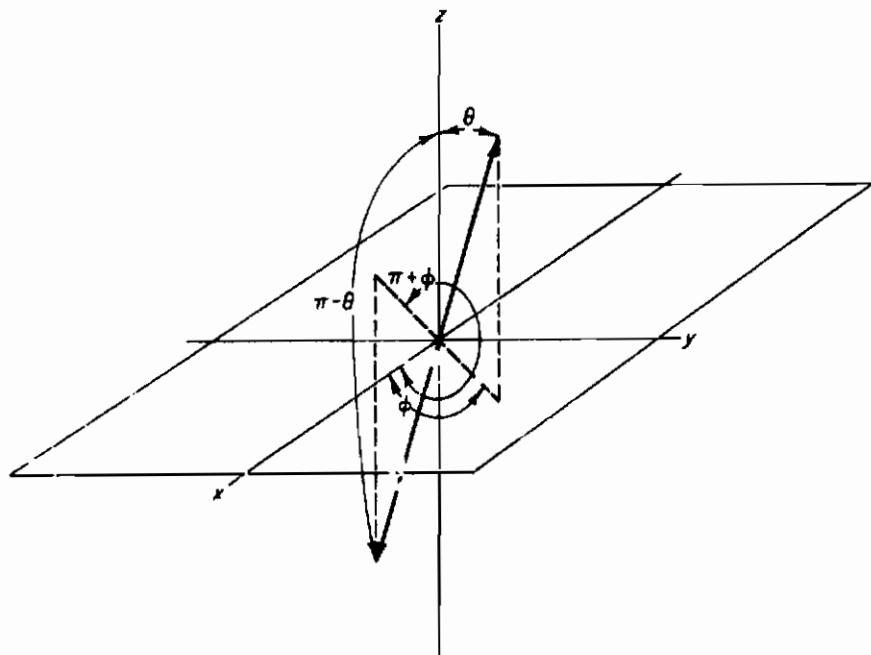
$$Y_{lm_l}(\theta, \phi) \propto (1 - u^2)^{|m_l|/2} \frac{d^{|m_l|}}{du^{|m_l|}} P_l(u) e^{im_l \phi}$$

را در نظر می‌گیریم. در اثر انعکاس، قسمت ϕ خواهد شد

$$e^{im_l \phi} \rightarrow e^{im_l(\phi + \pi)} = e^{im_l \pi} e^{im_l \phi} = (-1)^{m_l} e^{im_l \phi}$$

یعنی، اگر فقط m_l فرد باشد علامت آن تغییر خواهد کرد. تنها جمله‌ای در Y_{lm_l} که انعکاس $u \rightarrow -u$ روی آن تأثیر می‌کند عبارت است از

$$\frac{d^{|m_l|}}{du^{|m_l|}} P_l(u)$$



شکل (۸-۵) عمل پاریته (انعکاس) در مختصات کروی

چون این یک چندجمله‌ای است که بسته به مقدار $|m_l|$ - ازوج یا فرد است، علامت آن فقط در صورتی تغییر می‌کند که m_l - افرد باشد. ما دومورد را در نظر می‌گیریم:

مورد (الف): ازوج است. اگر m_l فرد باشد، قسمت ϕ تغییر علامت می‌دهد. اما چون $m_l = l$

نیز فرد است قسمت θ نیز تغییر علامت می‌دهد و بنابراین ویژه تابع بدون تغییر می‌ماند . همین‌طور اگر m_l زوج باشد ، تغییری در Y_{lm_l} رخ نمی‌دهد .

مورد (ب) : / فرد است . اگر m_l فرد باشد ، باز هم قسمت ϕ تغییر علامت می‌دهد . اما چون $-m_l$ - اکنون زوج است قسمت θ بدون تغییر باقی می‌ماند و بنابراین Y_{lm_l} تغییر علامت می‌دهد . اگر m_l زوج باشد نتیجه مشابهی به دست می‌آید .

نتیجه می‌گیریم که ویژه حالت‌های نیروی مرکزی که در مختصات کروی به دست می‌آیند دارای پارهته معینی هستند ، و بسته به اینکه مقادیر / فرد یا زوج باشند به ترتیب فرد یا زوج خواهند بود . بنابراین علاوه بر خواص معمولی ویژه مقدار ، این حالتها دارای خاصیت

$$\hat{P}|n, l, m_l\rangle = (-1)^l |n, l, m_l\rangle$$

یا

$$\psi_{nlm_l}(-\mathbf{r}) = (-1)^l \psi_{nlm_l}(\mathbf{r}) \quad (78-5)$$

می‌باشند

۱۳ - اثر میدان مغناطیسی یکنواخت روی مسئله نیروی مرکزی

اکنون می‌خواهیم نشان دهیم که کاهشی که میدان \mathbf{B} در تقارن ایجاد می‌کند منجر به حذف تهیگنی جهتی (نسبت به m_l) می‌شود . میدان مغناطیسی مشتق از یک پتانسیل برداری \mathbf{A} به صورت

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (79-5)$$

است . این \mathbf{A} است و نه \mathbf{B} که مستقیماً "در هامیلتونی کلاسیکی دخالت می‌کند . این هامیلتونی طبق (۶۲-۲) عبارت است از

$$\mathcal{H} = \frac{(\mathbf{p} - (q/c)\mathbf{A})^2}{2m} + V(r) \quad (80-5)$$

که در آن \mathbf{p} بار ذره موردنظر و c سرعت نور است . اگر میدان مغناطیسی یکنواخت باشد ، یعنی ، مشتقهای فضایی آن صفر باشند ، (۷۹-۵) می‌تواند معکوس شود و به صورت $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}$ درآید . این رابطه می‌تواند با گرفتن چرخش از دو طرف آن (برای \mathbf{B} ی ثابت) مورد تحقیق

قرار گیرد. خواهیم داشت

$$\nabla \times \mathbf{A} = \nabla \times (\frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}) = \frac{1}{2}[(\nabla \cdot \mathbf{r})\mathbf{B} - (\nabla \mathbf{r}) \cdot \mathbf{B}] = \frac{1}{2}[3\mathbf{B} - \mathbf{B}] = \mathbf{B}$$

که همان نتیجه خواسته شده است.

در این صورت هامیلتونی (۸۰-۵) به صورت زیر در می‌آید

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r) - \frac{q}{mc} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \frac{q^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2 \\ &= \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r) - \frac{q}{2mc} \mathbf{p} \cdot \mathbf{B} \times \mathbf{r} + \frac{q^2}{2mc^2} \left| \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r} \right|^2 \end{aligned} \quad (81-5)$$

در عمل، میدان مغناطیسی معمولاً "T" نقدر ضعیف* است که جمله حاوی توان دوم \mathbf{B} حذف می‌شود. با جایه‌جاکردن عوامل در ضرب سه‌گانه، (۸۱-۵) خواهد شد

$$\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r) - \frac{q}{2mc} (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \cdot \mathbf{B} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r) - \mu_i \cdot \mathbf{B} \quad (82-5)$$

که در آن

$$\mu_i = \frac{q}{2mc} \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \frac{q}{2mc} \mathbf{L}$$

گشتاور دوقطبی مغناطیسی مداری ذره باردار است. در نتیجه، برای میدان‌های ضعیف، سیستم دینامیکی حامل یک دوقطبی مغناطیسی است که وابسته به تکانهٔ زاویه‌ای مداری است. به جا و مناسب است که یک تعمیم ساده و اولیه‌ای از (۸۲-۵) با نوشتن

$$\mu_i = g_i \frac{q}{2mc} \mathbf{L} \quad (83-5)$$

که در آن g_i ضریب ژیرو مغناطیسی مداری یا ضریب "g" *** نامید و می‌شود، بنماییم.

* این تقریب وقتی معتبر است که انرژی مداری در مقایسه با انرژی مغناطیسی وابسته به میدان خارجی \mathbf{B} بزرگ باشد. برای بحث پیرامون اثر زیمن مربعی به کتاب زیر مراجعه کنید

H.A. Bethe and R.W. Jackiw, " intermediate Quantum Mechanics," Benjamin New York 1968, P. 122.

*** نسبت $g_i q = L / \mu$ نسبت ژیرومغناطیسی نامیده می‌شود.

برای سهولت، دستگاه محورهای مختصات خود را طوری انتخاب می‌کنیم که B در امتداد محور z باشد. در این صورت محور z یک محور فیزیکی کاملاً معین است و دیگر یک محور ریاضی صرف نیست.

هامیلتونی مکانیک کوانتومی خواهد شد

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_{cl} - \frac{g_1 q}{2mc} B \hat{L}_z \quad (84-5)$$

که در آن

$$\hat{\mathcal{H}}_{cl} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r)$$

برای پیدا کردن ویژه تابعها و ویژه مقادارهای این هامیلتونی جدید مشاهده می‌کنیم که $\psi_{nlm_l} = 0$. معنی این مطلب این است که دو هامیلتونی دارای یک مجموعه ویژه تابع مشترک هستند. لذا معکن است که ویژه تابعهای ψ_{nlm_l} که قبلاً به دست آورده شده‌اند ویژه تابعهای هم نیز باشند. این مطلب با نوشت

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}\psi_{nlm_l} &= \hat{\mathcal{H}}_{cl}\psi_{nlm_l} - \frac{g_1 q B}{2mc} \hat{L}_z \psi_{nlm_l} \\ &= \left(\varepsilon_{nl} - \frac{g_1 q B m_l \hbar}{2mc} \right) \psi_{nlm_l} \end{aligned} \quad (85-5)$$

تأثیر می‌شود. بنابراین توابع ψ_{nlm_l} ویژه تابعهای* هم نیز هستند ولی با ویژه مقادارهای اصلاح شده‌ای که توسط

$$\varepsilon_{nlm_l} = \varepsilon_{nl} - m_l \mu_B B \quad (g_l = 1)$$

* توجه کنید که ویژه تابعها توسط میدان مغناطیسی بدون تغییر می‌مانند. بخصوص، حالتها خصوصیات پاریته‌ای خود را "حفظ می‌کنند". این مطلب می‌رساند که جمله مغناطیسی در هامیلتونی، یعنی $qL_z B/2mc$ ، باید در اثر انعکاس تغییرناپذیر باشد (یعنی، با عملکر پاریته جایه‌جاپذیر باشد). چون B یک ثابت است، L_z باید در اثر انعکاس تغییرناپذیر باشد. در واقع این چنین نیز هست زیرا در اثر انعکاس داریم، $r \rightarrow -r$ و $p \rightarrow -p$ ، بنابراین $L_z \rightarrow -L_z$ و $p \rightarrow -p$.

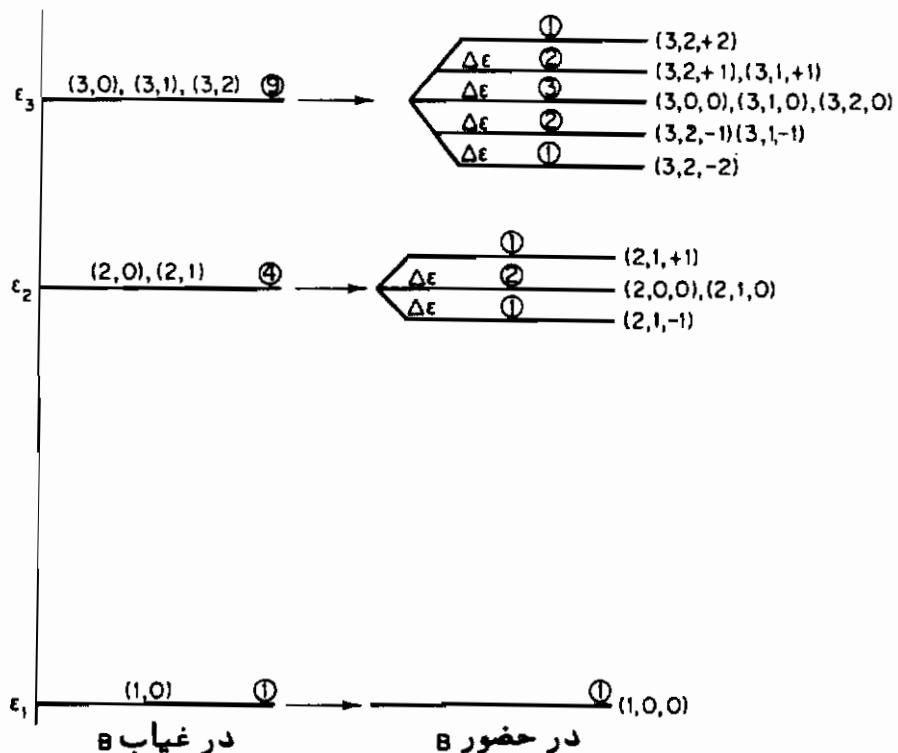
داده می‌شوند. پارامتر $\mu_B = q\hbar/2mc$ مانگتون بوهر نامیده می‌شود و یکی از مشخصه‌های ذره است. مقدار مانگتون بوهر برای الکترون عبارت است از

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} \approx 0.927 \times 10^{-20} \text{ erg/gauss} \quad (86-5)$$

در این صورت انرژی علاوه بر E ، n تابع m_l نیز می‌باشد؛ بدین ترتیب میدان مغناطیسی تبیه‌گنی جهتی را از بین می‌برد. از اینجا منشاء عبارت "عدد کوانتومی مغناطیسی" برای آشکار می‌شود. برای الکترون هیدرزنی، تبیه‌گنی تصادفی (نسبت به m_l) باقی می‌ماند. با قراردادن $e - q$ ترازهای بوهر به ترازهای

$$\epsilon_{nm_l} = \frac{\epsilon_1}{n^2} + \frac{m_l e\hbar B}{2mc} \quad (87-5)$$

جایه‌جا می‌شوند. این جایه‌جایی به اثر عادی زیمن (شکل ۹-۵) معروف است. قابل تذکر است که



شکل (۹-۵). اثر زیمن در هیدرزن. تبیه‌گنی تراز در داخل دایره مشخص شده است. توجه کنیم که میدان B تبیه‌گنی را به تور کامل از بین نمی‌برد، تبیه‌گنی تصادفی (m_l) باقی می‌ماند.

جابه‌جایی‌های انرژی زیر لایه‌های مغناطیسی به صورت مضاربی از

$$\Delta\epsilon(\text{mag}) = \frac{e\hbar B}{2mc}$$

ظاهر می‌شوند .
کمیت (مستقل از θ) کلاسیکی

$$\omega_L = \frac{\Delta\epsilon(\text{mag})}{\hbar} = \frac{eB}{2mc}$$

عبارت است از فرکانس لارمور حرکت تقدیمی * مداری که در تحلیل کلاسیکی (۸۵-۵) به دست آمده است .

در این شرایط ویژه حالت‌های θ به طور همزمان ویژه حالت‌های L^2 و مولفه L در امتداد B (در این مورد L) نیز هستند . مولفه‌های دیگر x و y مقدار صحیحی ندارند ، می‌توان ثابت کرد که در این حالت‌ها داریم

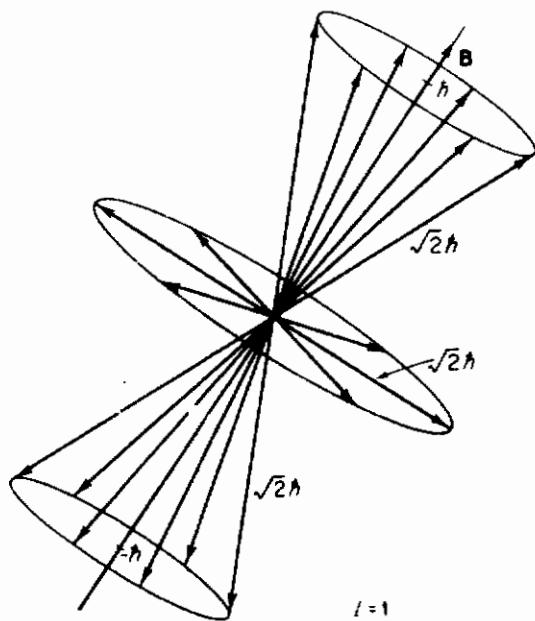
$$\langle L_x \rangle_{nlm_l} = \langle L_y \rangle_{nlm_l} = 0 \quad (۸۸-۵)$$

بنابراین به طور متوسط مولفه تکانه زاویه‌ای عمود بر B صفر است . به طور معادل ، L از نظر آماری به طور کاتورهای در روی مخروطی حول B قرار دارد ** (شکل ۵-۱۰) . وقتی خطوط گسیلی در هیدرزن با طیف نماهایی با قدرت تفکیک زیاد مشاهده می‌شوند ، جابه‌جایی‌های خطوط با اثر عادی زیمن در توافق کمی نیستند . این مغایرت در فصل ۶ با این اصل موضوع حل خواهد شد که الکترون علاوه بر گشتاور مغناطیسی مداری حامل یک دو-قطبی مغناطیسی است که توسط اسپین ذاتی الکترون ایجاد شده است . قبل از بحث در مورد اسپین ، سعی می‌کنیم که ویژه مقدارهای تکانه زاویه‌ای را با روش نردنیانی به دست آوریم .

* برای بحث درباره حرکت تقدیمی لارمور به کتاب زیر مراجعه کنید

K.R. Symon, "Mechanics," 3rd-ed. P. 284. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1971.

** از نظر کلاسیکی می‌توانیم بگوئیم که L حول B حرکت تقدیمی دارد ، اما از نظر مکانیک کوانتومی حالت مانا است . بنابراین مخروط طبیعتاً آماری است و نه دینامیکی .



شکل (۱۵-۵) . توزیع L روی مخروطهای حول B . از نظر کلاسیکی بردار L حول B با فرکانس $\omega_L = eB/2mc$ حرکت تقدیمی انجام می‌دهد (حرکت تقدیمی لارمور)

این انحراف از موضوع، دو هدف مهم دارد . نخست ، پکبار دیگر طبیعت عمومی بودن صورت‌بندی بردار - عملگر را نشان می‌دهد . دوم ، که برای منظورهای مهمتری است ، اینکه تنها بر پایه "جبر" جابه‌جاگرها "به‌این نتیجه هدایت می‌شویم که اعداد کوانتومی تکانه زاویه‌ای می‌توانند هم نیمه‌صحيح باشند و هم صحیح . در مورد تکانه زاویه‌ای مداری ، که برای آن یک مشابه کلاسیکی و درنتیجه یک ویژه تابع وجود دارد ، باید نیمه‌صحيح‌ها را طرد کنیم* . با این وجود ، در یک مورد صرفاً "مکانیک کوانتومی" ، مثل اسپین ذاتی الکترون ، تکانه‌های نیمه صحیح با روابط جابه‌جائی بنیادی برای مؤلفه‌های تکانه زاویه‌ای ، همان‌طور که در زیر نشان خواهیم داد ، سازگارند .

۱۴ - روش نردنی

می‌خواهیم ویژه مقدارها و ویژه بردارهای تکانه زاویه‌ای را فقط با استفاده از روابط

* یادآور می‌شویم که این شرط تک مقداری بودن m_l بود که به معرفی اعداد صحیح m_l منجر شد .

جابه‌جایی

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\hat{L}_k \quad (ijk = xyz) \quad (89-5)$$

به دست آوریم . این روابط می‌توانند به صورت تعمیمی از کروشه پواسن (۸۰-۲) یا مستقیماً با استفاده از روابط جابه‌جایی برای \hat{m} و $\hat{\theta}$ به دست آیند .
اکنون به معادلات ویژه مقداری

$$\hat{L}^2 |l, m_l\rangle = \hbar^2 \lambda_l |l, m_l\rangle \quad (90-\alpha)$$

$$\hat{L}_z |l, m_l\rangle = \hbar \lambda_{m_l} |l, m_l\rangle \quad (90-\beta)$$

می‌پردازیم ، که در آنها λ و λ_{m_l} باید تعیین شوند . مقادیر قابل انتظار $\langle L_y^2 \rangle$ و $\langle L_z^2 \rangle$ غیر منفی‌اند ، که از آن نتیجه می‌شود

$$\langle L^2 \rangle = \langle L_x^2 \rangle + \langle L_y^2 \rangle + \langle L_z^2 \rangle \geq \langle L_z^2 \rangle$$

"با مخصوصا"

$$\langle l, m_l | \hat{L}^2 | l, m_l \rangle \geq \langle l, m_l | \hat{L}_x^2 | l, m_l \rangle$$

با استفاده از (۹۰-۵) نتیجه می‌شود که پارامترهای ویژه مقدار دارای محدودیت زیراند

$$\lambda_l \geq \lambda_{m_l}^2 \quad (91-5)$$

عملگر (غیر هرمیتی) $\hat{L}^- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y$ و الحاقی آن $\hat{L}^+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y$ را وارد می‌کنیم . با تأثیر دادن \pm روی (۹۰-۵الف) و با توجه به $[\hat{L}^\pm, \hat{L}^2] = 0$ ، نتیجه می‌گیریم

$$\hat{L}^\pm \hat{L}^2 |l, m_l\rangle = \hbar^2 \lambda_l \hat{L}^\pm |l, m_l\rangle$$

با

$$\hat{L}^2 \{\hat{L}^\pm |l, m_l\rangle\} = \hbar^2 \lambda_l \{\hat{L}^\pm |l, m_l\rangle\}$$

بنابراین بردار داخل پرانتز نیز ویژه کت \hat{L}^2 با همان ویژه مقدار $\hbar^2 \lambda_l$ است .
اکنون عملگر \pm را روی (۹۰-۵ب) تأثیر می‌دهیم و خواهیم داشت

$$(\hat{L}_x \pm i\hat{L}_y)\hat{L}_z |l, m_l\rangle = \lambda_{m_l} \hbar (\hat{L}_x \pm i\hat{L}_y) |l, m_l\rangle \quad (92-5)$$

با استفاده از روابط جابه‌جایی $\hat{L}_y \hat{L}_z = \hat{L}_z \hat{L}_y + i\hbar \hat{L}_x$ و $\hat{L}_x \hat{L}_z = \hat{L}_z \hat{L}_x - i\hbar \hat{L}_y$ ، می‌توان (۹۲-۵) را ساده کرد و به صورت

$$(\hat{L}_z \hat{L}^\pm \mp \hbar \hat{L}^\pm) |l, m_l\rangle = \lambda_{m_l} \hbar \hat{L}^\pm |l, m_l\rangle$$

پا ترا نهاده‌ان

$$\hat{L}_z \{\hat{L}^\pm |l, m_l\rangle\} = (\lambda_{m_l} \pm 1) \hbar \{\hat{L}^\pm |l, m_l\rangle\} \quad (93-5)$$

نوشت . بنابراین کتهای داخل پرانتزها ویژه بردارهای \hat{L} با ویژه مقدارهای $1 \pm \lambda_{m_l}$ هستند . می‌توان تحقیق کرد که کت بهنجار شده عبارت است از

$$|l, m_l \pm 1\rangle = \frac{1}{[\{\lambda_l - \lambda_{m_l}(\lambda_{m_l} \pm 1)\}\hbar^2]^{1/2}} \hat{L}^\pm |l, m_l\rangle \quad (94-5)$$

عملگرهای \hat{L}^+ و \hat{L}^- به ترتیب عملگرهای بالابرند و پائین آورنده هستند و نتیجه می‌گیریم که مقادیر طیف \hat{L} به اندازه یک عدد صحیح باهم اختلاف دارند . با این وجود ، از (۹۱-۵) نتیجه می‌شود که λ_{m_l} کرانه‌دار است . از ملاحظات تقارن فضایی می‌توان فرض کرد که مقادیر λ_{m_l} نسبت به صفر متقارن‌اند و طبق

$$-\lambda_{m_0}, -\lambda_{m_0} + 1, \dots, \lambda_{m_0} - 1, \lambda_{m_0} \quad (95-5)$$

توسط کرانه λ_{m_0} محدود می‌شوند . با این وجود ، غیرممکن است مجموعه‌ای از اعداد با فاصله‌های عدد صحیح داشته باشیم که در (۹۵-۵) صدق کنند مگر اینکه λ_{m_0} با صحیح باشد یا نیمه صحیح . به عنوان مثال ، اگر $\lambda_{m_0} = +\frac{3}{2}$ باشد غیرممکن است به وسیله فواصل با عدد صحیح به $\frac{3}{2} -$ رسید . لذا قرار می‌دهیم $\lambda_{m_0} = 1$ با صحیح است یا نیمه صحیح ؟ بنابراین نتیجه می‌شود ، $m_l = \lambda_{m_l}$ که در آن m_l بسته به مقدار l با صحیح است یا نیمه صحیح . معادله (۹۵-۵) اکنون به صورت زیر در می‌آید

$$-l \leq m_l \leq l \quad (l, |m_l| = 0, 1, 2, \dots \quad \text{یا} \quad l, |m_l| = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots) \quad (96-5)$$

روش نردنی به این نتیجه اضافی منجر می‌شود که ، بر اساس (۸۹-۵) ، l و m_l ممکن است هم صحیح باشند هم نیمه صحیح . لیکن در موردی که \hat{L} دارای یک مشابه کلاسیکی است

(یعنی، \hat{L} یک تابع بندادی از ℓ و m_l است) و در نتیجه دارای یک ویژه تابع $|l, m_l\rangle$ است، تک مقداری بودن آن مقادیر نیمه صحیح را طرد می‌کند. در مورد یک تکانه زاویه‌ای صرف "مکانیک کوانتموی (به عنوان مثال، اسپین)"، خواهیم دید که مقادیر نیمه صحیح نه تنها مجاز هستند بلکه عمل "لازم هم هستند".

برای پیدا کردن مقدار λ مشاهده می‌کنیم که وقتی $\hat{L} = \lambda_{m_l} = \lambda_{m_0}$ باشد، تاثیر عملگر بالابرندۀ حالت جدیدی ایجاد نمی‌کند، یعنی،

$$\hat{L}^+ |l, l\rangle = 0 \quad (97-5)$$

با استفاده از اتحاد

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = \hat{L}^- \hat{L}^+ + \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z$$

خواهیم داشت

$$\hat{L}^2 |l, l\rangle = \hbar^2 \lambda_l |l, l\rangle$$

با

$$(\hat{L}^- \hat{L}^+ + \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z) |l, l\rangle = \hbar^2 \lambda_l |l, l\rangle$$

با استفاده از (۹۷-۵) و (۹۰-۵ ب) نتیجه خواهیم گرفت

$$(l^2 \hbar^2 + l \hbar^2) |l, l\rangle = \hbar^2 \lambda_l |l, l\rangle$$

با

$$\lambda_l = l(l+1)$$

که با نتایج قبلی مطابقت می‌کند. وقتی یکی از ویژه بردارهای $|l, m_l\rangle$ شناخته شده باشد، بردارهای مجاور می‌توانند با استفاده از (۹۴-۵) به دست آیند، که نتیجه می‌دهد

$$|l, m_l, \pm 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{[l(l+1) - m_l(m_l \pm 1)] \hbar^2}} \hat{L}^\pm |l, m_l\rangle$$

ویژه تابعها می‌توانند با بیان (۹۷-۵) در مکانیک موجی و ایجاد یک معادله دیفرانسیل برای $Y_{l,\pm 1}$ به دست آیند. سپس ویژه تابعهای مجاور $Y_{l,-1}$ ، با اعمال پائین آوری متوالی بهروشی مشابه با روش به کار برده شده در فصل ۴ برای یک نوسانگر، به دست می‌آیند. نتایج اینجا با نتایج به دست آمده از مکانیک موجی مطابقت می‌کنند.

خاطرنشان کردیم که الگوی عادی زیمن یک تصویر ناقصی از ترازهای انرژی الکترون هیدروژنی در یک میدان مغناطیسی یکنواخت ارائه می‌دهد. هم‌چنین ثابت کردیم که یک تکانه زاویه‌ای غیرکلاسیکی (اگر وجود داشته باشد) می‌تواند دارای اعداد کوانتمی نیمه – صحیح یا صحیح باشد. این واقعیتها همراه با بعضی داده‌های تجربی، که بعداً "مورد بحث قرار خواهند گرفت، به طور کاملاً" طبیعی منجر به وجود اسپین ذاتی – موضوع فصل بعدی – خواهد شد.

مسائل

۱-۵ تابع حالت وابسته به حالت کت $\langle \beta |$ در نمایش تکانه‌ای (پیوسته) به وسیله

$$\Psi_\beta(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p} | \beta \rangle$$

تعریف می‌شود، نشان دهید که $\Psi_\beta(\mathbf{p})$ تبدیل فوریه

$$\Psi_\beta(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \beta \rangle$$

است، یعنی

$$\Psi_\beta(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar} \Psi_\beta(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

(راهنمایی: رابطه بستاری $d\mathbf{r} = |\mathbf{r}| d\mathbf{r} \langle \mathbf{r} | \mathbf{r} \rangle$ را در تعریف $\Psi_\beta(\mathbf{p})$ وارد کنید).

۲-۵ نشان دهید چگونه می‌توان انرژی و ویژه تابع حالت پایه وابسته به یک پتانسیل جعبه‌ای متناهی، یعنی پتانسیلی که برای آن داشته باشیم

$$V = 0 \quad 0 \leq x \leq a, \quad 0 \leq y \leq b, \quad 0 \leq z \leq c \quad \text{برای} \\ V = V_0 \quad \text{برای جاهای دیگر}$$

به دست آورد.

۳-۵ با استفاده از تبدیل (۲۶-۵) نشان دهید که مولفه‌های $\hat{\psi}$ به وسیله (۳۴-۵) داده می‌شوند.

۴-۵ با استفاده از روابط جابه‌جایی برای مولفه‌های \hat{L}_x و \hat{L}_y ، رابطه جابه‌جایی

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z$$

را ثابت کنید .

۵-۵ ثابت کنید که \hat{L}_x^2 و \hat{L}_y^2 با هر هامیلتونی نیروی مرکزی جابه‌جاپذیراند .

۶-۵ تحقیق کنید که مسئله نوسانگر همسانگرد در مختصات قطبی استوانه‌ای تفکیک‌پذیر است و چند ویژه‌مقدار و ویژه‌تابع اول آنرا به دست آورید . این نتایج را با جوابهای به دست آمده در مختصات دکارتی مقایسه کنید .

۷-۵ نشان دهید چگونه می‌توان انرژی و ویژه تابع حالت پایه را برای ذره‌ای به جرم M در یک چاه پتانسیل کروی

$$V = -V_0 \quad (0 \leq r \leq R)$$

(جاهای دیگر)

محاسبه کرد (فرض کنید برای این حالت $I = 1$ است)

۸-۵ تحقیق کنید که محتمل‌ترین مکان برای الکترون هیدرزاوی در حالت پایه در $a = r$ است که در آن $a = \hbar^2/m e^2$ اولین شعاع بوهر است .

۹-۵ وقتی سیستمی در یک ویژه حالت ψ که آنرا با $|nlm\rangle$ نمایش می‌دهیم ، باشد نشان دهید که $\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$. (راهنمایی : از $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \hat{L}_k$ استفاده کنید)

۱۰-۵ فرمولهای مربوط به تبیه‌گنی نوسانگر همسانگرد ، یعنی ، $(2(\bar{n} + 1)(\bar{n} + \frac{1}{2}) = \text{تبیه‌گنی}$ ، را برای تراز $3 = \bar{n}$ با شمارش ویژه تابعهای این تراز در مختصات دکارتی و کروی ، امتحان کنید .

۱۱-۵ انرژی حالت پایه و اولین شعاع بوهر در هیدرزاوی را با کمینه‌سازی تابع انرژی

$$\mathcal{E} = \frac{(\Delta p)^2}{2m} - \frac{e^2}{\Delta r}$$

و با توجه به محدودیت $\hbar \approx \Delta p \Delta r \approx \Delta r_{\min}$ محاسبه کنید . Δr_{\min} و \mathcal{E}_{\min} به دست آمده را با مقادیر صحیح آنها مقایسه کنید .

۱۲-۵ چون $\phi = \frac{\partial}{\partial r} (\hbar/i)$ مزدوج بندادی زاویه سنتی ϕ است ، انتظار داریم که رابطه

عدم قطعیت زیر برقرار باشد

$$\Delta L_z \Delta \phi \geq \frac{1}{2}\hbar$$

(اما همیشه می‌توان، از دید نظریه، L_z را با دقت نامحدود (یعنی، $\Delta L_z \rightarrow 0$) اندازه‌گرفت. با این وجود $\Delta \phi$ باید همیشه کوچکتر یا مساوی با 2π باشد زیرا این بازه تمام مقادیر زاویه سمتی را می‌پوشاند. این تناقض ظاهری با اصل عدم قطعیت را توضیح دهد.)

۱۳-۵ (الف) نشان دهید که تکانه شعاعی می‌تواند به وسیله

$$\hat{p}_r = \frac{1}{2} \left[\frac{\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}} \cdot \frac{\hat{\mathbf{r}}}{m}}{m} \right] \rightarrow \frac{1}{2} \frac{\hbar}{i} \left[\frac{\mathbf{r}}{r} \cdot \nabla + \nabla \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right] = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right)$$

تعایش داده شود. هم چنین نشان دهید که

$$\frac{\hat{p}_r^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$$

(ب) رابطه جابه‌جائی $[\hat{p}, \hat{p}_r] = i\hbar \hat{I}$ را تحقیق کنید.

مراجع پیشنهادی

- Arfken, G., "Mathematical Methods for Physicists," 2nd ed. Academic Press, New York, 1970.
- Bethe, H. A., and Salpeter, E. E., "Quantum Mechanics of One and Two Electron Atoms," Chapter 1a. Springer-Verlag, Berlin, 1957.
(This reference work represents one of the most comprehensive texts on hydrogen and helium ever written!)
- Bohm, D., "Quantum Theory," Chapter 14. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1951.
- Borowitz, S., "Fundamentals of Quantum Mechanics," Chapters 12 and 13. Benjamin, New York, 1967.
- Merzbacher, E., "Quantum Mechanics," 2nd ed. Chapter 9. Wiley, New York, 1970.
- Morse, P. M., and Feshbach, H., "Methods of Theoretical Physics," Volume I, Chapter 5. McGraw-Hill, New York, 1953.
- Pauling, L., and Wilson, E. B., "Introduction to Quantum Mechanics," Chapter 4. McGraw-Hill, New York, 1935.
- Saxon, D. S., "Elementary Quantum Mechanics," Chapter 9. Holden-Day, San Francisco, 1964.

۶

تکانه زاویه‌ای اسپینی

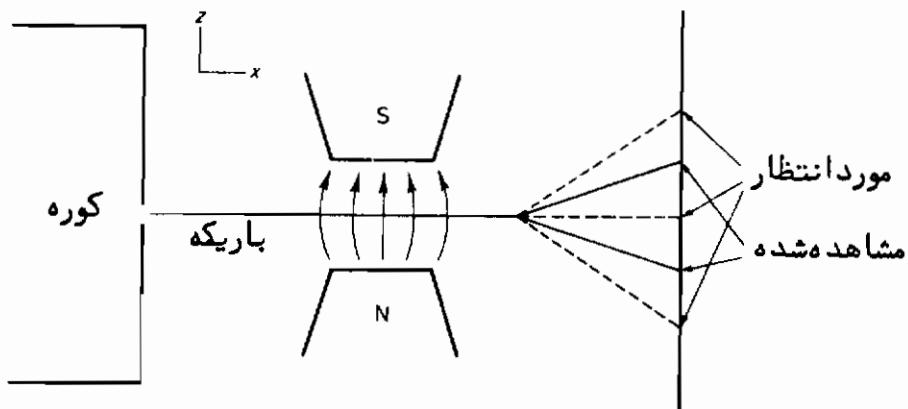
پیشرفت‌های تجربی در سال‌های ۱۹۲۵ داده‌های به دست دادند که فیزیکدان‌هارا به‌این نظریه هدایت کرد که ذرات بنیادی مثل الکترونها نه تنها دارای خواص موجی هستند بلکه ممکن است یک تکانه زاویه‌ای اسپینی ذاتی نیز داشته باشند. در سال ۱۹۲۲ یک آزمایش بوسیله اشترن و گرلاخ این اسپین را به طور بسیار جالبی آشکار کرد. در این آزمایش یک باریکه از اتمهای نقره از داخل یک میدان مغناطیسی کمی غیریکتواخت نیز عبور داده شد (شکل ۱-۱). اولاً، غیریکتواختی میدان یک نیروی خالصی بر روی دوقطبی مغناطیسی وابسته به اتمهای باریکه‌ایجاد می‌کند. ثانیاً، میدان جهتی (به عنوان مثال، محور z) برای کوانتش فضائی ایجاد می‌کند. اثبات اینکه نیروی خالص متوسطی که بریک دوقطبی مغناطیسی وارد می‌شود عبارت است از $\langle F_z \rangle = \mu_z \partial B_z / \partial z$ که در آن μ_z مولفه گشتاور دوقطبی مغناطیسی اتم در امتداد محور z است، به عنوان تمرین واگذار می‌شود.

همان‌طور که در فصل ۵ بحث شد، یک دوقطبی مغناطیسی از حرکت مداری الکترونها در اطراف هسته سرچشمه می‌گیرد. برای سهولت فرض می‌کنیم که این گشتاور از تنها الکترون خارجی‌ترین مدار هوکدام از اتمهای نقره ناشی می‌شود، در نتیجه بر طبق (۸۳-۵) انتظار داریم که گشتاور مغناطیسی برابر باشد با

$$\mu_z = -\frac{1}{2} \frac{e}{mc} L_z = -\frac{1}{2} \frac{e\hbar}{mc} m_i. \quad (1-6)$$

بنابراین نیروی وارد به هر اتم به‌زاویه میل آن نسبت به محور z ، یعنی، زیرحالتمغناطیسی آن، بستگی دارد. اگر یک عدد صحیح باشد، که در مورد تکانه زاویه‌ای مداری همیشه

چنین است، تعداد زیر حالات، $1 + 2l$ ، فرد است و انتظار خواهیم داشت که باریکه طوری تجزیه شود که تعداد خطوط روی پرده آشکارکننده فرد باشد. ولی وقتی آزمایش انجام گرفت فقط دو خط ظاهر شد. بنابراین گشتاورهای دوقطبی اتمهای نقره نمی‌توانستند به وسیله تکانه زاویه‌ای مداری ایجاد شده باشند.



شکل (۶-۱) آزمایش اشترن-گرلاخ.

شواهد بیشتری، حاکی از وجود اسپین، از اندازه‌گیری‌های طیف نمایی ساختار ریز روی طیف کسیلی اتمها به دست آمد. گودشمنیت و اوهلنگ با این پیشنهاد که الکترون علاوه بر تکانه زاویه‌ای مداری دارای یک اسپین داخلی یا تکانه زاویه‌ای ذاتی است که به وسیله اعداد کوانتومی s و m_s مشخص می‌شود، اختلاف بین نظریه و تجربه را برطرف کردند. این اعداد کوانتومی به ترتیب مشابه‌های l ، m_l وابسته به تکانه زاویه‌ای مداری می‌باشند. چون فقط دو تصویر در آزمایش اشترن-گرلاخ مشاهده شد، اعداد کوانتومی به $\frac{1}{2} = s$ و $\frac{1}{2} = m_s = \pm \frac{1}{2}$ محدود شدند. نظریه اسپین بلافاصله به وسیله پاولی فرمولبندی شد و این همان نظریه‌ای است که اکنون مورد بحث قرار خواهیم داد.

۱- نظریه پاولی برای اسپین الکترون

در آغاز تاکید می‌کنیم که اسپین ذاتی یک ذره مشابه کلاسیکی ندارد. بنابراین «جسم کردن الکترون به صورت کره‌ای که حول محور خود می‌چرخد کاملاً» نادرست است. اولاً، عطگر اسپین، S ، یک تابع بندادی از θ و ϕ نیست و الکترون ساختار کلاسیکی داخلی ندارد. ثانیاً، اگر یک حد کلاسیکی وجود می‌داشت، طبق اصل تناظر، وقتی s و m_s بزرگ بودند به‌این حد می‌رسیدیم. اما، برخلاف l ، m_l در تکانه زاویه‌ای مداری، مقادیر اسپین ذرات

بنیادی همیشه از مرتبه $\frac{1}{2}$ می باشند .

در حالی که نظریه ای که مورد بحث قرار می گیرد در مورد الکترون ($\frac{1}{2} = \frac{1}{2}$) صادق است، با کمی زحمت می تواند به مقادیر بالاتر اسپین ذاتی تعمیم داده شود* .

با استفاده از اصول موضوع زیر شروع می کنیم :

(الف) اسپین به موسیله یک عملگر هرمیتی \hat{S} که مولفه های آن در روابط جابه جایی شبیه به (۴-۸) صدق می کنند نمایش داده می شوند

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar\hat{S}_k \quad (i, j, k = x, y, z) \quad (۴-۶)$$

(ب) ویژه مقدارهای \hat{S}^2 عبارتنداز $\hbar^2(s+1)$ که در آن $\frac{1}{2} = \frac{1}{2}$. به علاوه ، ویژه مقدارهای هر کدام از مولفه های \hat{S} (به عنوان مثال \hat{S}_z) عبارتنداز $m_s\hbar$ که در آن $|m_s| \leq s$ $\pm \frac{1}{2}$.

می توان اصل (الف) را به عنوان تعریف هر تکانه زاویه ای در نظر گرفت . اصل موضوع (ب) ایجاب می کند که اسپین کاملاً "مکانیک کوانتومی" است و هم چنین چون متغیر θ در آن دخالت نمی کند ، مشابه مکانیک موجی برای آن وجود ندارد . وجود دو ویژه مقدار برای \hat{S}_z پیشنهاد می کند که عملگرهای اسپین باید در یک فضای "اسپینی" دو بعدی نمایش داده شوند . دیدیم که ویژه بردارهای یک عملگر هرمیتی می توانند به عنوان یک پایه ، که عملگرها و بردارهای دیگر را در آن نمایش می دهیم ، به کار روند . در مورد اسپین ، معمول است که ویژه پایه \hat{S}_z را به کار می بردند که در آن \hat{S}_z به صورت ماتریس قطری

$$\hat{S}_z \rightarrow \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\hbar & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}\hbar \end{pmatrix} \quad (۴-۷)$$

نمایش داده می شود ، و ویژه بردارهای راست هنجار آن ، یعنی ،

$$|m_s\rangle = |\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{و} \quad |m_s\rangle = |-\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (۴-۸)$$

* ذرات با اسپینهای نیمه صحیح را فرمیون و آنهایی را که دارای اسپین صحیح هستند بوزن می نامیم . بعدها "در فصل ۹" خواهیم دید که بوزنها و فرمیونها از آمارهای متفاوتی تبعیت می کنند ، و در نتیجه رفتار ترمودینامیکی ماده ای که آنرا تشکیل می دهد کلاً "متفاوت است .

به عنوان پایه به کار می‌روند. در این پایه عملگرهای دیگر به شکل

$$\hat{S}_x \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2}\hbar \\ \frac{1}{2}\hbar & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2}i\hbar \\ \frac{1}{2}i\hbar & 0 \end{pmatrix} \quad (5-6)$$

در می‌آیند. در نتیجه روابط جابه‌جایی (۶-۲)، همان‌طور که از

$$\begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2}\hbar \\ \frac{1}{2}\hbar & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2}i\hbar \\ \frac{1}{2}i\hbar & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2}i\hbar \\ \frac{1}{2}i\hbar & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2}\hbar \\ \frac{1}{2}\hbar & 0 \end{pmatrix} = i\hbar \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\hbar & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}\hbar \end{pmatrix}$$

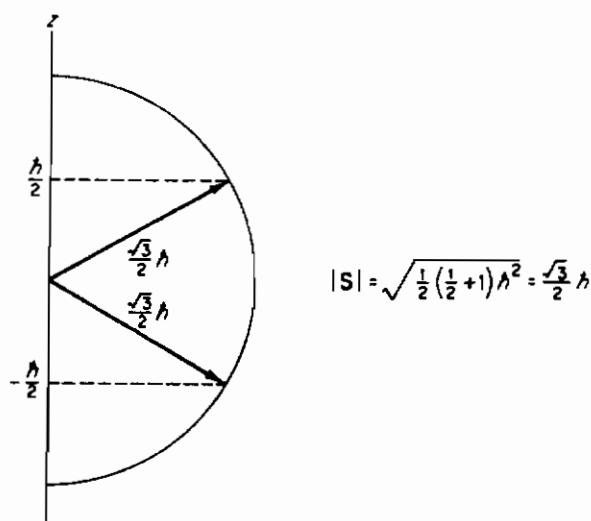
دیده می‌شود، برقرار هستند. ماتریس \hat{S}^2 ، بعد از ساده شدن، می‌شود

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 \rightarrow \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2 \hat{I} \quad (6-6)$$

که از آن ویژه مقدارها به صورت

$$s(s+1)\hbar^2 = \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)\hbar^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$$

همان‌طور که اصل موضوع اول ایجاد می‌کند، به دست می‌آیند (شکل ۶-۲).



شکل (۶-۲). کوانتش فضایی برای اسپین ذاتی، $s = \frac{1}{2}$

گاهی اوقات مناسب است که عملگرهای اسپین را به صورت $S_i = \frac{1}{2}\hbar\sigma_i$ بیان کنیم که در آن

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2-6)$$

عبارتنداز ماتریس‌های پاولی . این ماتریس‌ها دارای خواص زیراند

$$\begin{aligned} [\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] &= 2i\hat{\sigma}_k \\ [\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j]_+ &= 2\delta_{ij} \\ \sum_{i=1}^3 \hat{\sigma}_i^2 &= 3\hat{I}. \end{aligned} \quad (8-6)$$

از (ب) نتیجه می‌شود که دوماتریس پاولی متفاوت پاد جایه‌جاپذیراند، یعنی $\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = -\hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_i$ ویژه بردارها و ویژه مقدارهای $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ می‌توانند (در ویژه پایه $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$) با استفاده از روش‌های متداول ماتریسی به دست آیند . به عنوان مثال ، می‌توان مستقیماً تحقیق کرد که

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{و} \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

ویژه بردارهای $\hat{\sigma}_x$ با ویژه مقدارهای $\pm\frac{1}{2}$ هستند . ویژه بردارهای $\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ ، که آنها را با نمایش می‌دهیم یک پایه کامل راست‌هنجار تشکیل می‌دهند و هر کت اسپینی می‌تواند به وسیله*

$$|\chi\rangle = \sum_{m_s=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} a_{m_s} |m_s\rangle$$

نمایش داده شود . لازم نیست که ویژه کتها را با $|s, m_s\rangle$ نمایش دهیم زیرا برای یک ذره معین s همیشه مقدار ثابتی دارد (مثلاً)، برای الکترون داریم $\frac{1}{2} = s$. حالا که نمایش اسپینی توسعه داده شد می‌خواهیم یک کت حالت کلی بسازیم که هم خواص فضائی و هم خواص اسپینی را با هم منعکس نماید . برای انجام این کار یک ضرب مستقیم* از کت فضائی و کت اسپینی ، یعنی ، $\langle \text{اسپینی} | \otimes \langle \text{فضائی} | = \langle \text{کلی} |$

* این ضرب مستقیم کتهای فضائی و اسپینی نباید با ضرب برداری معمولی اشتباه شود . ضرب مستقیم را ضرب تانسوری نیز می‌نامند .

تشکیل می‌دهیم ، فرض می‌شود که تمام عملگرهای اسپینی با تمام عملگرهای فضائی (به عنوان مثال ، با \hat{L}_z و \hat{S}_z) جایه‌جاپذیراند . به علاوه ، عمل هر عملگر اسپینی روی $\langle \text{کلی} |$ قسمت فضائی را ثابت نگه می‌دارد و ترتیبها روی قسمت اسپینی عمل می‌کند . عکس آن در مورد عملگرهای فضائی صادق است . یک ذره در یک میدان نیروی مرکزی (به عنوان مثال ، یک الکترون هیدرژنی) می‌تواند به وسیله یک کت کلی

$$|nlm_l m_s\rangle = |nlm_l\rangle \otimes |m_s\rangle \quad (9-6)$$

نمایش داده شود ، که در آن اعداد کوانتومی جدید به اسپین ذره نسبت داده می‌شوند . این بردارهای کت دارای خواص زیراند

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} |nlm_l m_s\rangle &= \epsilon_{nl} |nlm_l m_s\rangle \\ \hat{L}^2 |nlm_l m_s\rangle &= l(l+1)\hbar^2 |nlm_l m_s\rangle \quad (l = 0, 1, 2, \dots) \\ \hat{L}_z |nlm_l m_s\rangle &= m_l \hbar |nlm_l m_s\rangle \quad (m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l) \\ \hat{S}^2 |nlm_l m_s\rangle &= s(s+1)\hbar^2 |nlm_l m_s\rangle \quad (s = \frac{1}{2}) \end{aligned}$$

و

$$\hat{S}_z |nlm_l m_s\rangle = m_s \hbar |nlm_l m_s\rangle \quad (m_s = \pm \frac{1}{2})$$

با

$$\langle n'l'm'_l m'_s | nlm_l m_s \rangle = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{m_l m'_l} \delta_{m_s m'_s}$$

برای اختصار ، از این به بعد علامت \otimes را حذف می‌کنیم و ضرب مستقیم را به صورت $\langle \text{اسپین} | \text{فضا} | \text{اسپین}\rangle$ نویسیم . ویژه اسپینور (ویژه تابع به اضافه اسپین) را با گرفتن حاصل ضرب داخلی $\langle \text{کلی} | \text{با} | \text{ز}$ ایجاد می‌کنیم . چون برای اخیر یک ویژه برای فضائی است ، حاصل ضرب داخلی فقط روی قسمت فضائی تأثیر می‌کند و خواهیم داشت

$$\psi_{nlm_l m_s}(r) = \langle \mathbf{r} | nlm_l \rangle | m_s \rangle = \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) | m_s \rangle \quad (10-6)$$

با به کار بردن ویژه پایه \hat{S}_z برای $|m_s\rangle$ ، ویژه اسپینورهای "اسپین بالا" ($m_s = \frac{1}{2}$) و "اسپین پائین" ($m_s = -\frac{1}{2}$) به ترتیب به صورت

$$\psi_{nlm_l \pm} = \psi_{nlm_l} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_{nlm_l} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (11-6)$$

و

$$\psi_{nlm_l-\frac{1}{2}} = \psi_{nlm_l} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{nlm_l} \end{pmatrix}$$

به دست می‌آیند.

بدین ترتیب حالت‌های نیروی مرکزی علاوه بر $2l+1$ تبیه‌گنی فضائی اکنون دارای یک تبیه‌گنی دوگانه ناشی از اسپین نیز می‌باشند. در مورد خاص هیدرژن، تبیه‌گنی تصادفی می‌شود

$$2 \sum_{l=0}^{n-1} 2l + 1 = 2n^2$$

برای مثال، حالت پایه هیدرژن (پتانسیل کولنی) که در آن $\psi_{100}\psi$ و $\psi_{-100}\psi$ دارای انرژی -13.6 eV می‌باشند، دوبار تبیه‌گن است.

۲ - خواص تبدیل کتهای اسپینی - تکانه زاویه‌ای کل

در فصل ۳ خاطرنشان ساختیم که عملگر $\hat{\mu}$ مولد انتقال‌های یک سیستم در امتداد محور x است. به همین طریق، عملگر $\hat{\mu}$ مولد دورانها حول محور z است. در واقع می‌توان ثابت کرد که اگر ذره‌ای در یک حالت $|r, \theta, \phi\rangle$ (یعنی دقیقاً در نقطه r ، θ و ϕ باشد، عملگر $\exp(-i\hat{L}_z\bar{\phi}/\hbar)$ حالتی ایجاد می‌کند که در آن ذره به r ، θ و $\phi + \bar{\phi}$ چرخیده است. این عمل از نظر ریاضی به صورت زیر بیان می‌شود

$$\exp(-i\hat{L}_z\bar{\phi}/\hbar)|r, \theta, \phi\rangle = |r, \theta, \phi + \bar{\phi}\rangle \quad (12-6)$$

حالا یک کت فضائی دلخواه $|\alpha\rangle$ در نظر بگیریم. چون پایه $|nlm_l\rangle$ ، تا آنجا که به کتهای فضائی مربوط می‌شود، کامل است، می‌توان بسط زیر را انجام داد

$$|\alpha\rangle = \sum_{nlm_l} a_{nlm_l} |nlm_l\rangle$$

اگر سیستم اصلی را به اندازه $\bar{\phi}$ درجه حول محور z دوران دهیم، حالت جدید خواهد شد

$$|\alpha'\rangle = \exp(-i\hat{L}_z\bar{\phi}/\hbar)|\alpha\rangle = \sum_{nlm_l} a_{nlm_l} \exp(-im_l\bar{\phi}) |nlm_l\rangle \quad (m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l) \quad (13-6)$$

فرض کنیم که دوران برابر $\bar{\phi} = 2\pi e^{-im_1 2\pi}$ باشد در این صورت $|\chi\rangle = |\alpha'\rangle$ و نتیجه می‌گیریم $|\alpha'\rangle = |\alpha\rangle$ همان‌طور که انتظار می‌رفت. بنابراین تک مقداری بودن به کت فضایی مربوط می‌شود.

برای تعیین بهاسپین، مولد دوران (حول محور z) را به صورت $\exp(-i\hat{S}_z \bar{\phi}/\hbar)$ در نظر می‌گیریم. با تأثیر این عملگر روی یک کت اسپینی عمومی

$$|\chi\rangle = \sum_{m_s=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} a_{m_s} |m_s\rangle$$

خواهیم داشت

$$|\chi'\rangle = \exp(-i\hat{S}_z \bar{\phi}/\hbar) |\chi\rangle = \sum_{m_s=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} a_{m_s} \exp(-im_s \bar{\phi}) |m_s\rangle \quad (14-6)$$

چون m_s نیمه صحیح است، یک دوران 2π کت اصلی را نمی‌دهد. در واقع یک دوران 4π لازم است تا $|\chi'\rangle = |\chi\rangle$ به دست آید. به این دلیل، کتهای اسپینی گاهی اوقات "نیمه‌بردار" یا متداول‌تر، اسپینور نامیده می‌شوند. یک اسپینور دلخواه تحت یک دوران 2π در $|-i\bar{\phi}/\hbar|$ ضرب می‌شود. با این وجود، چون احتمالات و مقادیر قابل انتظار، حاصل ضربهای داخلی یا "مربعها" ای این اسپینورها را در بردارند، مشاهده‌پذیرها تحت دوران 2π بدون تغییر باقی می‌مانند*.

چون $\exp(-i\hat{L}_z \bar{\phi}/\hbar)$ و $\exp(-i\hat{S}_z \bar{\phi}/\hbar)$ به ترتیب قسمتهای فضایی و اسپینی کت کلی حالت را تبدیل می‌کنند، نتیجه می‌شود

$$\begin{aligned} |\phi + \bar{\phi}\rangle &= \exp(-i\hat{L}_z \bar{\phi}/\hbar) \exp(-i\hat{S}_z \bar{\phi}/\hbar) |\text{total}(\phi)\rangle \\ &= \exp[-i(\hat{L}_z + \hat{S}_z) \bar{\phi}/\hbar] |\text{total}(\phi)\rangle \end{aligned} \quad (15-6)$$

عبارت

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}} \quad (16-6)$$

* اثر یک دوران 2π در (14-6) این است که یک ضریب فاز $-e^{i\bar{\phi}}$ ایجاد می‌کند. با اینکه دلیل تجربی‌ای که پیشنهاد کند این ضریب فاز مشاهده‌پذیر است وجود ندارد، اما بحث در این مورد پایان نیافته است.

را به عنوان عملگر تکانهٔ زاویه‌ای گل تعریف می‌کنیم . در بخش بعدی خواهم دید که \hat{J} در بسیاری از مسائل با نیروی مرکزی اهمیت زیادی دارد . از (۱۵) نتیجه می‌شود که $\exp(-i\hat{J}_z\phi/\hbar)$ به طور همزمان هم برای ویژگیهای فضائی و هم برای ویژگیهای اسپینی دورانهای حول محور z ایجاد می‌کند .

۳ - اسپین و مسئله نیروی مرکزی

برای گنجانیدن اسپین یک ذره در مسئله نیروی مرکزی ، هامیلتونی را به صورت حاصلضرب یک عملگر دیفرانسیلی در یک عملگر ماتریسی ، یعنی ،

$$\hat{\mathcal{H}}_{cf} \rightarrow \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right\} \hat{1} = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \end{pmatrix} \quad (17-6)$$

می‌نویسیم که در آن $\hat{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ ماتریس یکه یا همانی است . قسمتهای دیفرانسیلی و ماتریسی به ترتیب روی قسمتهای فضائی و اسپینی کتهای حالت عمل می‌کنند . همان‌طور که تا کنون نشان داده شده است ، مجموعه

$$|nlm_l m_s\rangle \rightarrow \psi_{nlm_l m_s} = \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) |m_s\rangle \quad (18-6)$$

شامل ویژه تابعهای همزمان $\hat{\mathcal{H}}$ ، \hat{L}^2 ، \hat{L}_z ، \hat{S}^2 و \hat{S}_z است . چون انرژی حداکثر به n و l بستگی دارد این حالتها تبیکاند و ویژه حالتها منحصر به فردی برای $\hat{\mathcal{H}}$ نیستند . هر ترکیب خطی به صورت

$$|nl\rangle = \sum_{m_l=-l}^l \sum_{m_s=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} a_{nlm_l m_s} |nlm_l m_s\rangle \quad (19-6)$$

نیز یک ویژه حالت جدید و متمایز $\hat{\mathcal{H}}$ با انرژی E_n می‌باشد (لم ۱ ، فصل ۳) . نخست بررسی خواهیم کرد که آیا ویژه تابعهای همزمانی برای عملگرهای $\hat{\mathcal{H}}$ ، \hat{L}^2 ، \hat{L}_z و \hat{S}_z که در آن $\hat{S}_z = \hat{L}_z + \hat{J}_z$ عملگر تکانهٔ زاویه‌ای کل مذکور در فوق است وجود دارند یا نه . برای انجام این کار کافی است مشاهده کنیم که پنج تا از عملگرهای فوق دو به دو جایه‌جاپذیر ، و در نتیجه سازگاراند . به عنوان مثال ، چون $\hat{\mathcal{H}}$ با مولفه‌های \hat{L}_z و

\hat{S} جابه‌جاپذیر است، نتیجه می‌گیریم

$$[\hat{J}^2, \hat{\mathcal{H}}_{cf}] = [(\hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L}_x\hat{S}_x + 2\hat{L}_y\hat{S}_y + 2\hat{L}_z\hat{S}_z), \hat{\mathcal{H}}_{cf}] = 0$$

$$[\hat{J}_z, \hat{\mathcal{H}}_{cf}] = [(\hat{L}_z + \hat{S}_z), \hat{\mathcal{H}}_{cf}] = 0$$

مولفه‌های \hat{J} در روابط جابه‌جائی معمولی برای تکانه زاویه‌ای، یعنی،

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\hat{J}_k \quad (i, j, k = x, y, z) \quad (20-6)$$

صدق می‌کنند (رک مسئله ۶-۲). در آخر فصل ۵، با استفاده از جبر نزدیکی، نشان دادیم که عملگرهای برداری که مولفه‌های آنها در (۶-۲۰) صدق می‌کنند باید در معادلات ویژه مقداری

$$\hat{J}^2 |jm_j\rangle = j(j+1)\hbar^2 |jm_j\rangle \quad (6-21\text{a})$$

$$\hat{J}_z |jm_j\rangle = m_j \hbar |jm_j\rangle \quad (|m_j| \leq j) \quad (6-21\text{b})$$

که در آنها $\hat{J}_z^2 + \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 = \hat{J}^2$ و اعداد کوانتومی می‌توانندیا صحیح یا نیمه‌صحیح باشند، صدق کنند.

سازگاربودن عملگرهای \hat{L}^2 ، \hat{L}_z^2 ، \hat{J}^2 و \hat{J}_z پیشنهاد می‌کند که یک مجموعه ویژه بردارهای مشترک وجود دارد که دارای خواص زیر هستند

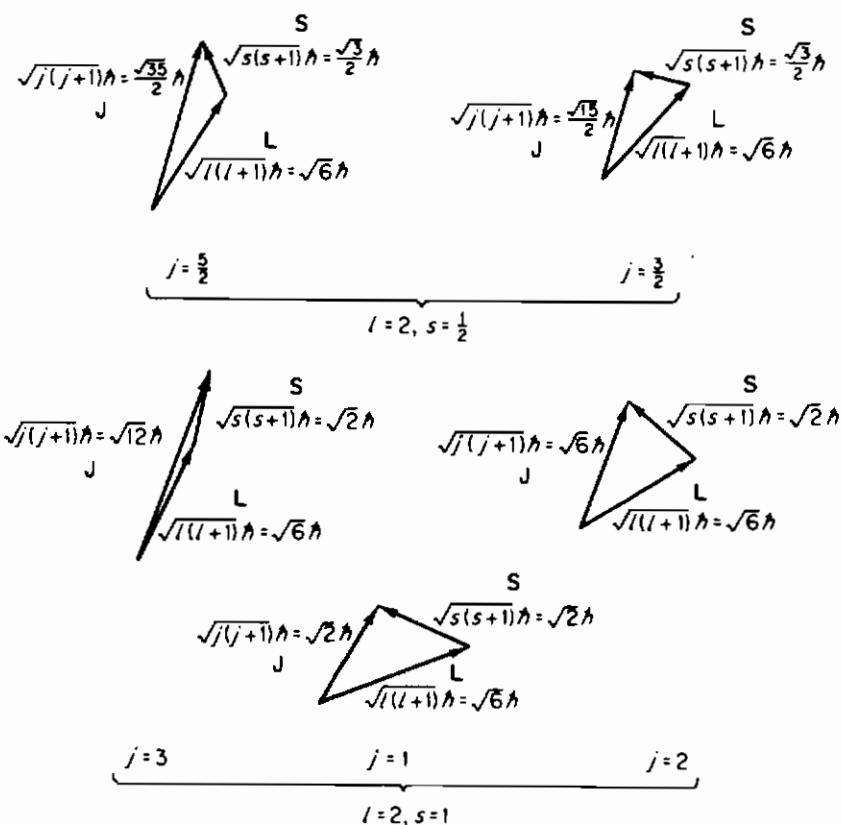
$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{cf} |nljm_j\rangle &= \epsilon_{nl} |nljm_j\rangle \\ \hat{L}^2 |nljm_j\rangle &= l(l+1)\hbar^2 |nljm_j\rangle \quad (l = 0, 1, 2, \dots) \\ \hat{J}^2 |nljm_j\rangle &= j(j+1)\hbar^2 |nljm_j\rangle \\ \hat{J}_z |nljm_j\rangle &= m_j \hbar |nljm_j\rangle \quad (|m_j| \leq j) \end{aligned} \quad (22-6)$$

این ویژه بردارها می‌توانند با استفاده از (۶-۱۹) ساخته شوند، یعنی،

$$|nljm_j\rangle = \sum_{m_l=-l}^l \sum_{m_s=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} C_{jm, m_l m_s}^{nl} |nlm_l m_s\rangle \quad (23-6)$$

ضرایب موجود در (۶-۲۳) که ویژه حالت‌های \hat{L}_z و \hat{J}_z را به ویژه حالت‌های \hat{J}_x و \hat{J}_y ربطی دهند

نمونه‌هایی از ضرایب به‌اصطلاح جمع برداری، ضرایب کل بش - گردان^۱، یا ضرایب ویکتر^۲، هستند. برای یک مقدار معین l ($\frac{1}{2} \leq s \leq l$)، تنها بعضی از ویژه حالت‌های j می‌توانند با استفاده از (۶-۲۳) ساخته شوند. برای پیدا کردن مقادیر ممکن عدد کوانتومی z از یک کمک نیمه کلاسیکی معروف به مدل برداری (شکل ۶-۴) استفاده می‌کنیم. این مدل بر پایه قاعده مثلثی برای جمع برداری استوار است و پیشگوئی می‌کند که مقادیر z محدود به



شکل (۶-۴) کاربرد مدل برداری به‌منظور ایجاد حالت‌های j ($S = L + J$)

برای موارد $s = 1$ ، $l = 2$ ، $s = \frac{1}{2}$ و $l = 3$

$|l - s| \leq j \leq l + s$ باشد یا در مورد الکترون که $\frac{1}{2} \leq s \leq l$ است، $l \pm \frac{1}{2} = j$ باشد. ماشرط می‌کنیم که j غیر منفی است و وقتی $l = 0$ است j را $\frac{1}{2}$ اختیاری می‌کنیم، $\frac{1}{2} = j$. چون j برای الکترون نیمه صحیح است، m_j نیز نیمه صحیح و محدود به مقادیر

$$m_j = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \dots, \pm j$$

است.

با اینکه نظریه گروهها محاسبات را ساده می‌کند ولی محاسبه ضرایب کلش گردان در (۲۳-۶) مشکل است. در مسئله موردنظر، برای $\frac{1}{2} = s$ و دلخواه، می‌توان نشان داد که ضرایب کلش گردان می‌دهد

$$\begin{aligned} |nljm_j\rangle &= \left| n, l, l \pm \frac{1}{2}, m_j \right\rangle \\ &= \frac{1}{(2l+1)^{1/2}} \left\{ \pm \left(l \pm m_j + \frac{1}{2} \right)^{1/2} \left| n, l, m_j - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right. \\ &\quad \left. + \left(l \mp m_j + \frac{1}{2} \right)^{1/2} \left| n, l, m_j + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right\} \end{aligned} \quad (24-6)$$

یا، از (۱۱-۶) در مکانیک موجی، ویژه تابعها عبارتندار

$$\psi_{nl\pm\frac{1}{2}m_j} = \frac{R_{nl}(r)}{(2l+1)^{1/2}} \left(\frac{\pm(l \pm m_j + \frac{1}{2})^{1/2} Y_l^{m_j-1/2}(\theta, \phi)}{(l \mp m_j + \frac{1}{2})^{1/2} Y_l^{m_j+1/2}(\theta, \phi)} \right) \quad (25-6)$$

بنابراین، به عنوان مثال، ویژه تابع برای $n=2$ ، $l=1$ ، $m_j = \frac{1}{2}$ خواهد بود

$$\psi_{2,1,3/2,1/2}(r, \theta, \phi) = \frac{R_{21}(r)}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} \sqrt{2} & Y_1^0(\theta, \phi) \\ \sqrt{1} & Y_1^1(\theta, \phi) \end{pmatrix} \quad (26-6)$$

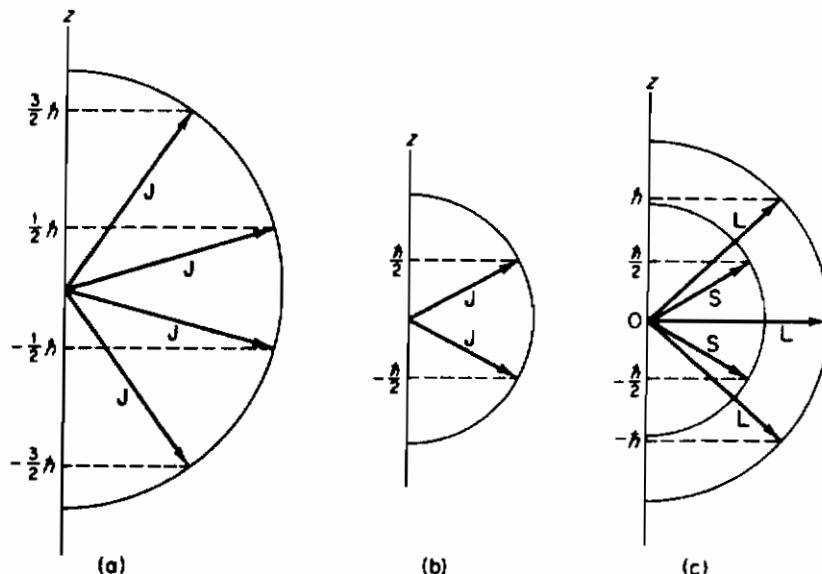
در مواقعي که اقتضا کند یک حالت هیدرزنی از نوع $|nljm_j\rangle$ را با

$${}^{2s+1}x_j = {}^2x_j \quad (27-6)$$

نمایش خواهیم داد که در آن x یک حرف قراردادی طیف نمائی وابسته به مقدار s است. به عنوان مثال، حالت (۲۶-۶) یک حالت ${}^2s^2$ است. حالت پایه (دوار تبهگن) هیدرزن (۱) $n=0$ ، $l=0$ و $j=\frac{1}{2}$ (یعنی $m_j = \pm \frac{1}{2}$) یک حالت ${}^2p^2$ است.

شایان توجه است که تبهگنی تراز $|n_l\rangle$ ، چه $|m_l m_s\rangle$ و چه $|jm_j\rangle$ را به کاربریم، یکسان است. به عنوان مثال، تراز $|21\rangle$ در طرحواره $|nlm_l m_s\rangle$ شش بار، یعنی $(1+2l+2j)$ بار، تبهگن است. این حالتها می‌توانند با هم ترکیب شوند و منجر به $|l+\frac{1}{2}\rangle$ و $|l-\frac{1}{2}\rangle$ و $|j=\frac{1}{2}\rangle$ و $|j=-\frac{1}{2}\rangle$ گردند. حالت اول $|41\rangle = |2j+1\rangle$ ۲ بار تبهگن است (یعنی،

صورتی که حالت دوم دوبار تبھگن است . تبھگنی کل بازهم ، همان طور که انتظار می رود ، شش است (شکل ۶-۴) .



شکل (۶-۴) شش حالت تبھگن برای $l = 1, s = \frac{1}{2}$ در طرحواره های $|l + s| = j = \frac{3}{2}, |\mathbf{J}| = (\sqrt{15}/2) \hbar, m_j = \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2}$ (الف) و $|m_l, m_s\rangle$ و $|lm_j\rangle$ (ب) $m_l = 0, \pm 1, m_s = \pm \frac{1}{2}, |l - s| = j = \frac{1}{2}, |\mathbf{J}| = (\sqrt{3}/2) \hbar, m_j = \pm \frac{1}{2}$ (ج)

تبھگنی های فضائی (m_l) و اسپینی (m_s) یک هامیلتونی نیروی مرکزی منجر به ابهلماتی در برچسب زدن ویژه حالتها می شوند . همان طور که دیدیم یک مجموعه به صورت $|nlm_l, m_s\rangle$ نشان داده می شود و شامل ویژه حالت های همزمان L^2, L_z, L^2, L_z و S^2 می باشد در صورتی که مجموعه دیگر به صورت $|nljm_j\rangle$ نمایش داده می شود و شامل ویژه کتهای همزمان L^2, L_z و S^2 است . به عنوان مثال ، چون L^2 و L_z ناسازگاراند ، این دو مجموعه متمایزاند . بنابراین باید تصریح کنیم که کدام مجموعه را مورد بررسی قرار می دهیم .

۴ - مغناطیس اسپینی و برهمنش اسپین - مدار در هیدرژن

هر ذره ای که اسپین ذاتی داشته باشد دارای یک گشتاور دوقطبی مغناطیسی است و در یک میدان مغناطیسی انرژی کسب می کند . این گشتاور دوقطبی نمی تواند به طور کلاسیکی محاسبه شود و باید در مقایسه با (۶-۵) با یک اصل موضوع به صورت

$$\mu_s = g_s \frac{q}{2mc} S \quad (6-6)$$

داده شود که در آن m_s و S به ترتیب بار، جرم و تکانه زاویه‌ای اسپین ذره و سرعت نور است. ضریب تناسب g ضریب اسپینی " g " نامیده می‌شود. براساس داده‌های تجربی برای الکترون داریم $g \approx 2.0023$

انرژی کسب شده به وسیله این دوقطبی در یک میدان مغناطیسی عبارت است از $E_{mag} = -\mu_s \cdot B$. حتی در غیاب یک میدان خارجی، یک الکترون که در یک پتانسیل نیروی مرکزی دور می‌زند تحت تأثیر یک میدان داخلی که آنرا B_{orbit} می‌نامیم قرار می‌گیرد و هامیلتونی مربوط به این مسئله می‌شود

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{cf} - \mu_s \cdot B_{orbit} \quad (29-6)$$

جمله آخر اساساً "از برهمن کش بین حرکت مداری ذره و اسپین ذاتی آن ناشی می‌شود". از الکترودینامیک کلاسیکی می‌دانیم که وقتی یک ذره هاردار با سرعت v در داخل یک میدان الکتریکی E حرکت می‌کند، ناظری که همراه با ذره حرکت می‌کند یک میدان مغناطیسی القائی*

$$B_{orbit} = B_{ind} \approx -\frac{v}{c} \times E \quad (30-6)$$

اندازه می‌گیرد. فرض خواهیم کرد که ذره در داخل یک پتانسیل الکتروستاتیکی نیروی مرکزی به صورت $V(r) = q\Phi(r)$ حرکت می‌کند. لذا قرار می‌دهیم

$$E = -\nabla\Phi(r) = -\frac{d\Phi}{dr} \frac{r}{r} \quad (31-6)$$

اما، چون الکترون شتاب دارد، دستگاه متصل به آن لخت نیست و در صورتی که بخواهیم بهطور دقیق انرژی اسپین - مداری را پیشگویی کنیم باید تصحیحات را منظور کنیم. بدون اثبات توضیح می‌دهیم که یک تبدیل نسبیتی به دستگاه الکترون، یک حرکت اضافی به نام حرکت تقدیمی - نامسون وارد می‌کند**. این حرکت یک ضریب $\frac{1}{3}$ در عبارت انرژی دوقطبی

* به عنوان مثال به کتاب زیر مراجعه کنید

J.K. Jackson, "Classical Electrodynamics", PP.

380-383, wiley, New-York, 1962.

** برای بحث مقدماتی در بارهٔ حرکت تقدیمی نامسون به کتاب زیر مراجعه کنید

R.M. Eisberg, "Fundamentals of Modern physics," P.

مغناطیسی وارد می‌کند. انرژی وابسته به مغناطیسی مداری در این صورت عبارت است از

$$-\mu_s \cdot \mathbf{B}_{\text{orbit}} = +\mu_s \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{E} \right) \quad (32-6)$$

که در آن ضریب $\frac{1}{2}$ از حرکت تقدیمی نامسون، که یک اثر نسبیتی است، ناشی می‌شود. با استفاده از (۳۱-۶) و (۳۲-۶) نتیجه می‌گیریم که هامیلتونی (۲۹-۶) خواهد شد

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{H}_{\text{cf}} + \frac{1}{2} \mu_s \cdot \left(\frac{\mathbf{v}}{c} \times -\frac{d\Phi}{dr} \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \\ &= \mathcal{H}_{\text{cf}} - \frac{1}{2qmc} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mu_s \cdot (m\mathbf{v} \times \mathbf{r}) \quad (V = q\Phi) \\ &= \mathcal{H}_{\text{cf}} + \frac{1}{2qmc} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mu_s \cdot \mathbf{L}. \end{aligned} \quad (33-6)$$

سپس حالت عمومی‌تری را که در آن سیستم با نیروی مرکزی در داخل یک میدان مغناطیسی پکتواخت خارجی \mathbf{B} قرار داشته باشد در نظر می‌گیریم. برهمنش با این میدان هم دوقطبی مغناطیسی مداری را درگیر می‌کند و هم دوقطبی مغناطیسی اسپینی را، هامیلتونی می‌شود

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{cf}} + \frac{1}{2qmc} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mu_s \cdot \mathbf{L} - \mu_l \cdot \mathbf{B} - \mu_s \cdot \mathbf{B}$$

با استفاده از (۸۳-۵) و (۲۸-۶) هامیلتونی مکانیک کوانتومی به صورت زیر در می‌آید

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{cf}} + \frac{g_s}{(2mc)^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}} - \frac{qg_l}{2mc} \hat{\mathbf{L}} \cdot \mathbf{B} - \frac{qg_s}{2mc} \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B} \quad (34-6)$$

جمله‌های رابطه (۳۴-۶) به ترتیب عبارتند از انرژی نیروی مرکزی، انرژی برهمنش "اسپین مدار"، انرژی گشتاورهای مغناطیسی مداری و اسپینی در میدان خارجی. برای الکترون هیدرزنی، قرار می‌دهیم $-e^2/r = V = -e^2/r$ ، $q = e$ و $g_s = 2$. در این صورت معادله (۳۴-۶) می‌شود

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{cf}} + \frac{e^2}{2m^2c^2} \frac{1}{r^3} \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}} + \frac{e}{2mc} \hat{\mathbf{L}} \cdot \mathbf{B} + \frac{e}{mc} \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B} \quad (35-6)$$

که در آن

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{cf}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$$

۵- میدانهای مغناطیسی خارجی - اثر پاشن - باک

جستجوی ویژه جوابهای دقیق هامیلتونی کامل‌ا" عمومی (۳۵-۶) نویسندگان است. با این وجود، دوموردکه از نظر عملی اهمیت دارند وجود دارد که در خور بررسی است. مورد اول موردی است که در آن میدان خارجی آنقدر ضعیف (در مقایسه با B_{orbit}) است که انرژی اسپین - مدار خیلی بزرگتر از انرژی برهم کش با B است. این اثر به اثر غیرعادی زمین موسوم است و برای اتم هیدروژن وقتی اتفاق می‌افتد که برای میدان خارجی داشته باشیم

$$B \ll B_{\text{orbit}} \simeq \frac{e v}{c r^2} \simeq 10^4 \text{ gauss}$$

حتی در این مورد فقط جوابهای تقریبی ممکن هستند و مباحثت اثر غیرعادی زمین را به فصل بعد (روشهای تقریبی) موکول می‌کنیم.

مورد دیگر برای میدانهای قوی*، وقتی $B \gg B_{\text{orbit}}$ باشد، اتفاق می‌افتد. مورد میدان قوی اثر پاشن - باک نامیده می‌شود. در اینجا در تقریب مرتبه اول از برهم - کش اسپین مدار کامل‌ا" صرفنظر می‌شود. هامیلتونی پاشن - باک، که ویژه حالت‌های آنرا جستجو می‌کنیم، عبارت است از

$$\hat{\mathcal{H}}_{PB} = \hat{\mathcal{H}}_{\text{cf}} + \frac{eB}{2mc} (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) \quad (36-6)$$

محور z را طوری انتخاب کرده‌ایم که منطبق بر امتداد B باشد. مشاهده می‌کنیم که هامیلتونهای پاشن - باک و نیروی مرکزی جایه‌جا به زیراند، یعنی،

$$[\hat{\mathcal{H}}_{PB}, \hat{\mathcal{H}}_{\text{cf}}] = 0$$

که بیان می‌کند دو هامیلتونی دارای یک مجموعه ویژه حالت‌های مشترک هستند. با فرض اینکه

* حتی در اینجا نیز B آنقدر کوچک فرض می‌شود (یعنی، $B \ll \mu_0 B$) که بتوان از اثرهایی که از توان دوم B هستند صرفنظر کرد.

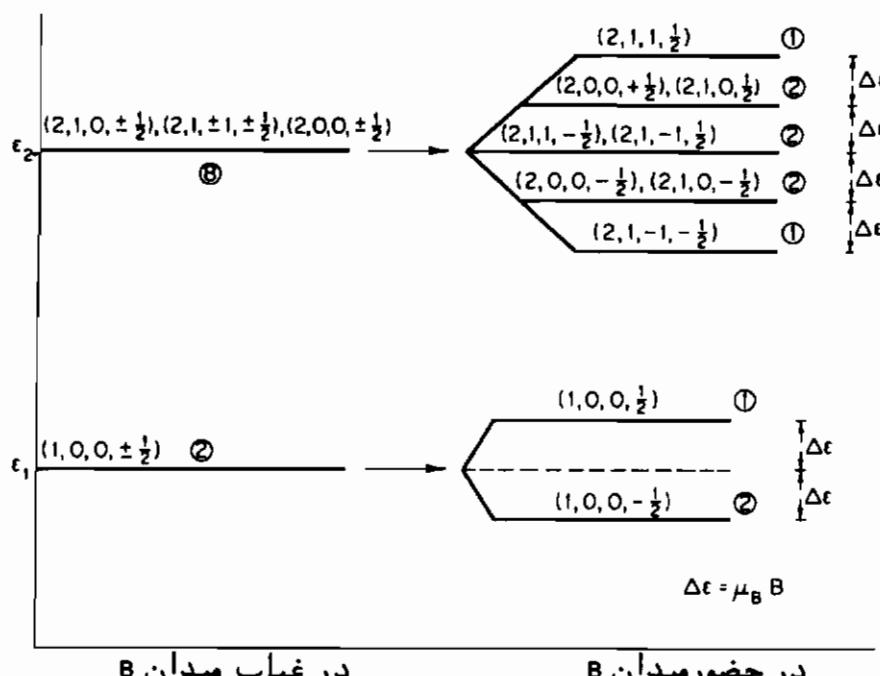
این مجموعه حالتها به صورت $|nlm_l m_s\rangle$ باشند می‌نویسیم

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}_{PB} |nlm_l m_s\rangle &= \left\{ \hat{\mathcal{H}}_{cl} + \frac{eB}{2mc} (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) \right\} |nlm_l m_s\rangle \\ &= \left\{ \epsilon_{nl} + \frac{eB}{2mc} (m_l + 2m_s)\hbar \right\} |nlm_l m_s\rangle\end{aligned}\quad (37-6)$$

بنابراین فرض ما توجیه می‌شود . در حالی که $\psi_{nlm_l m_s}$ ویژه تابعهای دقیق ψ_{PB} نیستند*، ویژه مقادرهای انرژی جابه‌جا می‌شوند و به صورت زیر در می‌آیند

$$\epsilon_{nlm_l m_s} = \epsilon_{nl} + \mu_B B(m_l + 2m_s) \quad (38-6)$$

شکافتگی زیر سطوح مغناطیسی در هیدرزن در شکل (۳۵) نمایش داده شده است .



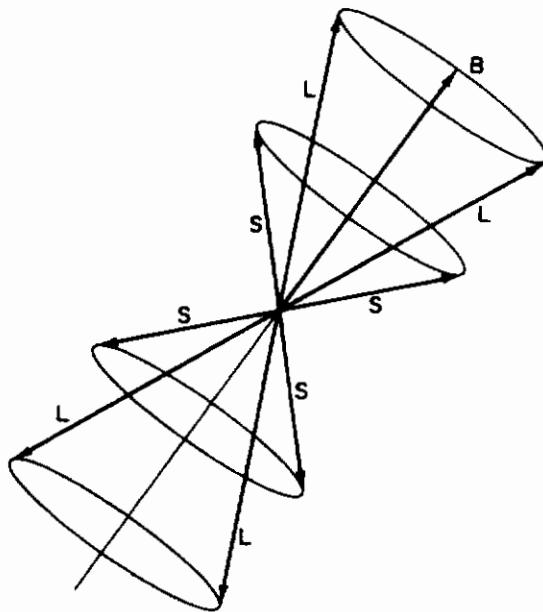
شکل (۳۵) شکافتگی ترازهای بوهر در هیدرزن در حضور یک میدان قوی B (اثر پاشن - باک) . حالتها به وسیله مقادیر (n, l, m_l, m_s) مشخص شده‌اند و اعداد درون دایره بیانگر درجه تبهگنی هستند .

* توجه کنید که این هامیلتونی تنها یک تقریب است زیرا از برهمنکش اسپین - مدار صرفنظر کرده‌ایم .

یک محاسبه ساده نشان می‌دهد که

$$[\hat{J}^2, \hat{\mathcal{H}}_{PB}] \neq 0$$

بنابراین، کتهای $|nljm_J\rangle$ ، که ویژه کتهای J_z و \hat{J}^2 هستند، مسلمًا "معرف ویژه حالتها" $\hat{\mathcal{H}}_{PB}$ نیستند. برای میدانهای قوی، فقط L_z , S_z و \hat{S}_z کوانتیده (دقیق) هستند؛ در تصویر کلاسیکی L و S به طور مستقل حول B حرکت تقدیمی انجام می‌دهند (شکل ع-۶)



شکل (ع-۶) "حرکت تقدیمی" آماری مستقل L و S حول B در مورد میدان قوی (اثر پاشن - باک)

آنچه که ما انجام داده‌ایم کاهش تقارن بهوسیله اعمال یک میدان مغناطیسی قوی روی سیستم است. این عمل تبھگنی فضائی یک مسئله نیروی مرکزی را از بین می‌برد. در این صورت ویژه‌تابعها منحصر بهفرد آنند به طوری که تنها مجموعه $|nlm_s m_s\rangle$ (ونه $|nljm_J\rangle$) یک ویژه پایه برای $\hat{\mathcal{H}}_B$ تشکیل می‌دهد.

وجود اسپین ذاتی به طور اعجاب‌انگیز بهوسیله آزمایش اشتتن - گرلانخ آشکار شد. این نظریه به صورتی که توسط گودشمت و اوهلنبرگ پیشنهاد شد و کمی بعد توسط پاولی فرمولبندی گردید بسیاری از جنبه‌های طیف گسیلی اتمها را توضیح داد. با این وجود، از دیدگاه ادراکی، این روش اصل موضوعی اسپین قانع‌کننده نیست. در فصل ۱۱ خواهیم دید که لازم نیست وجود اسپین ذاتی برای الکترون را به صورت یک اصل وضع کنیم. در واقع، نشان خواهیم داد که اسپین به طور کاملاً "طبیعی از مکانیک کوانتومی و نظریه نسبیت" اینشتین

حاصل می‌شود . معادله نسبیتی کوانتومی الکترون ، مشابه معادله شرودینگر ، معادله دیراک نامیده می‌شود . در حد $\hbar \rightarrow 0$ ، معادله نسبیتی دیراک به معادله غیرنسبیتی شرودینگر ، که شامل اسپین است ، تقلیل می‌یابد . بنابراین ، وجود پدیده اسپین ذاتی می‌تواند به عنوان نتیجه مستقیم مکانیک کوانتومی نسبیتی در نظر گرفته شود .

با مطالعه یک گروه از مسائل فیزیکی ، نتیجه خواهیم گرفت که جواب صحیح غالباً "خارج از گستره امکانات ریاضی است . یک مورد مهم که قبلاً "نیز به آن اشاره شده است مورد هیدرزن با برهم‌کنش اسپین - مدار است . خوشبختانه در بسیاری از موارد هامیلتونی مورد نظر تفاوت بسیارکمی با یک هامیلتونی پریشیدگی نامیده می‌شود . به دست آوردن تصحیحات اختلاف کوچک بین این دو هامیلتونی پریشیدگی احتیاج نداشته است ، دارد . لازم در مورد ویژه تابعها و ویژه مقدارها موضوع نظریه پریشیدگی است که در فصل ۷ مورد بحث قرار خواهد گرفت .

مسائل

۶-۱ (الف) با استفاده از مقایسه با الکتروستاتیک ، نشان دهید که مولفه z نیروی وارد بر یک دوقطبی مغناطیسی در یک میدان مغناطیسی غیریکنواخت عبارت است از

$$F_z = \mu_x \frac{\partial B_z}{\partial x} + \mu_y \frac{\partial B_z}{\partial y} + \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}$$

(ب) با فرض $B_z \gg B_x, B_y$ و اینکه دوقطبی به طور "فضائی" در امتداد محور z کوانتیده است ، با اثبات $0 = \langle \mu_y \rangle = \langle \mu_x \rangle$ نشان دهید

$$\langle F_z \rangle = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} = - \frac{e\hbar}{2mc} m \frac{\partial B_z}{\partial z}$$

(چرا برای اینکه رابطه مربوط به $\langle F_z \rangle$ برقرار باشد باید B_x و B_y وجود داشته باشند؟)

۶-۲ خواص ماتریس‌های پاولی را برای اسپین ، معادلات (۶-۸) ، تحقیق کنید .

۶-۳ (الف) ویژه بردارهای (در ویژه پایه S) ذره‌ای را که مولفه‌های اسپین آن در روی محور x به ترتیب $\pm \frac{1}{2}$ است پیدا کنید .

(ب) اگر ذره در یک حالت کوانتومی ، که در آن تصویر اسپین روی محور x دقیقاً

- ۶-۱) است، باشد احتمال پیدا کردن آن با مولفه \hat{L}_z روی محور z چقدر است؟
- ۶-۲) با استفاده از ماتریس‌های مناسب مستقیماً نشان دهید که اگر سیستم در یکی از ویژه حالت‌های \hat{S}_z باشد داریم $0 = \langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle$
- ۶-۳) (الف) ماتریس‌های S_x ، S_y و S_z (در ویژه پایه \hat{S}_z) را برای ذره‌ای که مولفه‌های اسپین آن به صورت $\pm \hbar, 0, +\hbar$ کوانتیده‌اند بسازید.
- (ب) عملگر $\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$ را بسازید و تحقیق کنید که ویژه مقدارهای آن عبارتند از $s(s+1)\hbar^2 = 1(1+1)\hbar^2 = 2\hbar^2$
- ۶-۴) شکل عملگر پیکانی‌ای که حالت فیزیکی کل را به اندازه ϕ رادیان حول یک محور دلخواه که بهوسیله برداریکه \mathbf{n} مشخص شده است دوران دهد به دست آورید.
- ۶-۵) ثابت کنید که مؤلفه‌های J در رابطه زیر صدق می‌کنند.

$$[J_i, J_j] = i\hbar J_k$$

- ۶-۶) ثابت کنید که تابع داده شده در معادله (۶-۲۵) یک ویژه تابع $\hat{L}_z + \hat{S}_z = J_z$ است.
- ۶-۷) ذره‌ای با اسپین $\frac{1}{2}$ در حالت مداری $|s=1\rangle$ در نظر بگیرید. نشان دهید که تبیه‌گشی تراز در دو طرحواره $|m_l m_s\rangle$ و $|jm_l\rangle$ یکسان است.
- ۶-۸) ضریب زیرومغناطیسی اسپین برای یک پروتون ($\frac{1}{2} = s$) عبارت است از $g_s^{(p)} = 5.59$.
- (الف) گشتاور دوقطبی مغناطیسی پروتون را پیدا کنید.
- (ب) تصویرهای این گشتاور را در امتداد یک میدان مغناطیسی بکنوخت B_z پیدا کنید.
- (ج) با فرض اینکه یک هسته می‌تواند بهوسیله یک پروتون تک که در یک پتانسیل نیروی مرکزی حرکت می‌کند نمایش داده شود، طبیعت شکافتنگی ترازهای انرژی در یک میدان مغناطیسی قوی را به‌طور کیفی بحث کنید.

مراجع پیشنهادی

- Bohm, D., "Quantum Theory," Chapter 17. Prentice-Hall, Englewood-Cliffs, New Jersey, 1951.
- Eisberg, R. M., "Fundamentals of Modern Physics," Chapter 11. Wiley, New York, 1961.
- Jackson, J. D., "Classical Electrodynamics," Chapter 11. Wiley, New York, 1962.
- Merzbacher, E., "Quantum Mechanics," 2nd ed. Chapter 12. Wiley, New York, 1970.
- Saxon, D., "Elementary Quantum Mechanics," Chapter 10. Holden-Day, San Francisco, 1968.
- Stehle, P., "Quantum Mechanics," Chapter 4. Holden-Day, San Francisco, 1966.



روشهای تقریبی

۱- نظریه پریشیدگی

در فصلهای پیشین سیستمهای ایده‌آل شده‌ای را، که برای آنها پیدا کردن ویژه‌تابعهای دقیق انرژی امکان‌پذیر بود، بررسی کردیم. متأسفانه، پیچیدگی‌های طبیعت به‌هامیلتونی‌هائی منجر می‌شوند که برای آنها جواب دقیق امکان‌پذیر نیست. در بسیاری از وضعیتهای فیزیکی تصحیحات لازم برای بعضی از سیستمهای ایده‌آل شده نسبتاً "کوچک" است. به عنوان مثال، خواهیم دید که برهم‌کنش اسپین - مدار در هیدرژن ما را به تصحیحات کسری از مرتبه 10^{-4} در ترازهای بوهر می‌کشاند. در این موارد ویژه‌تابعهای تقریبی انرژی می‌توانند به‌وسیله روش‌های تقریبی گوناگونی به دست آیند. هامیلتونی‌ای که ما در نظر خواهیم گرفت به صورت عمومی

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{V}$$

است که در آن \mathcal{H}_0 هامیلتونی ناپریشیده و \mathcal{V} پریشیدگی است. قسمت اخیر، برای سهولت به‌یک پارامتر "کوچک" λ و یک تابع پریشیدگی $\mathcal{V}(\mathbf{R}, \mathbf{P})$ تجزیه شده است. پریشیدگی را می‌توان با دو روش اساساً متفاوت بررسی کرد. روش نخست، که نظریه حالت مانا نامیده می‌شود، به تصحیحات در ویژه‌تابعها و ویژه مقدارهای انرژی ناپریشیده \mathcal{H}_0 می‌پردازد. این روش وقتی به‌کار می‌رود که هامیلتونی کل (پریشیده) از نظر فیزیکی در درجه اول اهمیت قرار دارد. این نظریه، به عنوان مثال، می‌تواند برای محاسبه تصحیحات ترازهای انرژی هیدرژن که از برهم‌کنش اسپین - مدار ناشی می‌شوند به‌کار رود.

دیدگاه دوم، به نام نظریه پریشیدگی وابسته به زمان، وقتی به‌کار می‌رود که هامیلتونی ناپریشیده دارای اهمیت اساسی است. چون \mathcal{H}_0 هامیلتونی کامل نیست (بدون \mathcal{V})، ویژه

حالتهای آن مانا نیستند . بخصوص ، اگر سیستم در آغاز ($t = t_0$) در یک ویژه حالت ناپریشیده - مثلاً $|\psi_i^0\rangle$ - باشد در یک زمان بعدی طبق قاعده زیر تحول پیدا خواهد کرد

$$|\beta_i, t\rangle = \exp[-i\hat{H}(t - t_0)/\hbar]|\psi_i^0\rangle = \exp[-i(\hat{H}_0 + \lambda\hat{V})(t - t_0)/\hbar]|\psi_i^0\rangle$$

که در آن یک پریشیدگی ، \mathcal{P} ، مستقل از زمان در نظر گرفته‌ایم . طبق اصول موضوع مکانیک کوانتومی ، احتمال مشاهده سیستم در یک ویژه حالت ناپریشیده دیگر $|\psi_j^0\rangle$ در زمان دیرتر ، عبارت است از

$$\mathcal{P}_{ij}(t) = |\langle\psi_j^0|\beta_i, t\rangle|^2$$

کمیت $d\mathcal{P}_{ij}(t)/dt$ آنگی است که سیستم با آن "گذارهای" را از حالت i ام به حالت j ام در اثر پریشیدگی انجام می‌دهد . بنابراین ، پریشیدگی در اینجا به عنوان عاملی در نظر گرفته می‌شود که باعث گذارهای سیستم بین ویژه حالت‌های ناپریشیده $|\psi_i^0\rangle$ می‌شود . آنگ گذار ارتباط نزدیکی به مقطع موثر پراکندگی دارد . نخست با بحث نظریه پریشیدگی مانا شروع می‌کنیم .

۲ - نظریه پریشیدگی مانا

حالت مقید ناتبهمگن (روش رالی - شرودینگر) *

فرض خواهیم کرد که هامیلتونی ناپریشیده ناتبهمگن باشد . این بدان معنی است که ویژه حالتها یکتا هستند و می‌توانیم یک تناظر یک به یک بین ویژه حالت‌های پریشیده $|\psi_i^0\rangle$ و ناپریشیده $|\psi_i\rangle$ برقرار کنیم . بنابراین می‌توانیم بنویسیم

$$\hat{H}_0|\psi_i^0\rangle = \epsilon_i^0|\psi_i^0\rangle \quad (1-2)$$

و

$$\hat{H}|\psi_i\rangle = (\hat{H}_0 + \lambda\hat{V})|\psi_i\rangle = \epsilon_i|\psi_i\rangle \quad (2-2)$$

که در آن $|\psi_i^0\rangle \rightarrow |\psi_i\rangle$. تأکید می‌کنیم که این شرط محدود کننده تنها در مرور هامیلتونی‌های ناتبهمگن یکتا است . ما هم چنین بحث خود را به پریشیدگی حالت‌های مقید (گستته) محدود می‌کنیم .

* این روش اصلتاً به رالی ، که آن را به نظریه صوت اعمال کرد ، منسوب است . بعداً این روش به وسیله شرودینگر به نظریه کوانتومی اعمال شد .

می‌توان جواب (۲-۷) را به صورت یک سری پریشیدگی^{*} از توانهای λ بسط داد. اما آنکه همگرائی این سری به میزان کوچکی λ بستگی دارد.

فرض خواهد شد که ویژه‌بردارها و ویژه مقدارهای پریشیده می‌توانند به صورت سری‌هایی به‌شکل

$$|\varepsilon_i\rangle = |\varepsilon_i^0\rangle + \lambda |\varepsilon_i^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\varepsilon_i^{(2)}\rangle + \dots \quad (3-7)$$

و

$$\varepsilon_i = \varepsilon_i^0 + \lambda \varepsilon_i^{(1)} + \lambda^2 \varepsilon_i^{(2)} + \dots \quad (4-7)$$

نوشته شوند. کتهای $\langle \varepsilon_i^{(n)} |$ و پارامترهای $\varepsilon_i^{(n)}$ بیانگر تصحیحات مرتبه n ام ویژه‌بردارها و ویژه‌مقدارها هستند. ما در نمایش دیراک کار خواهیم کرد اما شکل مکانیک موجی نیز به‌همین نتیجه منجر می‌شود. برای مقادیر به حد کافی کوچک λ می‌توان فرض کرد که تنها چند توان اول برای نزدیک شدن به جواب دقیق لازم هستند. ما بحث خود را به تقریب‌های مرتبه اول و مرتبه دوم محدود می‌کنیم.

با بردن (۳-۷) و (۴-۷) در (۲-۷) خواهیم داشت

$$\begin{aligned} (\hat{\mathcal{H}}_0 + \lambda \hat{V})(|\varepsilon_i^0\rangle + \lambda |\varepsilon_i^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\varepsilon_i^{(2)}\rangle + \dots) \\ = \{\varepsilon_i^0 + \lambda \varepsilon_i^{(1)} + \lambda^2 \varepsilon_i^{(2)} + \dots\}(|\varepsilon_i^0\rangle + \lambda |\varepsilon_i^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\varepsilon_i^{(2)}\rangle + \dots) \end{aligned}$$

و با مجتمع کردن توانهای λ ،

$$\begin{aligned} [\hat{\mathcal{H}}_0 |\varepsilon_i^0\rangle - \varepsilon_i^0 |\varepsilon_i^0\rangle] + [\hat{\mathcal{H}}_0 |\varepsilon_i^{(1)}\rangle + \hat{V} |\varepsilon_i^0\rangle - \varepsilon_i^0 |\varepsilon_i^{(1)}\rangle - \varepsilon_i^{(1)} |\varepsilon_i^0\rangle] \lambda \\ + [\hat{\mathcal{H}}_0 |\varepsilon_i^{(2)}\rangle + \hat{V} |\varepsilon_i^{(1)}\rangle - \varepsilon_i^{(1)} |\varepsilon_i^{(1)}\rangle - \varepsilon_i^0 |\varepsilon_i^{(2)}\rangle - \varepsilon_i^{(2)} |\varepsilon_i^0\rangle] \lambda^2 + \dots \\ = 0 \end{aligned} \quad (5-7)$$

چون این معادله باید برای تمام مقادیر λ معتبر باشد، ضریب هر λ^n باید برابر با صفر باشد؛ در نتیجه سلسه معادلات زیر را به دست خواهیم آورد

$$\hat{\mathcal{H}}_0 |\varepsilon_i^0\rangle = \varepsilon_i^0 |\varepsilon_i^0\rangle \quad (6-7)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_0 |\varepsilon_i^{(1)}\rangle + \hat{V} |\varepsilon_i^0\rangle = \varepsilon_i^0 |\varepsilon_i^{(1)}\rangle + \varepsilon_i^{(1)} |\varepsilon_i^0\rangle \quad (7-7)$$

* البته، در اینجا فرض براین است که چنین سری توانی وجود داشته باشد.

$$\hat{\mathcal{H}}_0 |\varepsilon_i^{(2)}\rangle + \hat{V} |\varepsilon_i^{(1)}\rangle = \varepsilon_i^{(1)} |\varepsilon_i^{(1)}\rangle + \varepsilon_i^0 |\varepsilon_i^{(2)}\rangle + \varepsilon_i^{(2)} |\varepsilon_i^0\rangle \quad (8-2)$$

⋮

معادله مرتبه صفرم درست همان معادله ویژه مقداری ناپریشیده (۱-۱) است ، ویژه کتها و ویژه مقدارهای آن دانسته فرض می‌شوند . معادله مرتبه n ام شامل تصحیحات بالاتر از مرتبه n ام نیست ، اما برای به دست آوردن این تصحیحات ، تمام جملات مرتبه‌های پائین‌تر باید قبلًا "محاسبه شده باشند .

* با بررسی نظریه مرتبه اول شروع می‌کنیم و بسط

$$|\varepsilon_i^{(1)}\rangle = \sum_{j=1} a_{ij}^{(1)} |\varepsilon_j^0\rangle \quad (i = 1, \dots, \infty) \quad (9-2)$$

را انجام می‌دهیم . این بسط مجاز است زیرا $|\varepsilon_j^0\rangle$ ها یک مجموعه کامل تشکیل می‌دهند که هر کت دلخواهی را می‌توان بر حسب آنها بسط داد . وقتی تمام $a_{ij}^{(1)}$ ها معلوم شدند ، تصحیح مرتبه اول ویژه کت ؛ ام کامل می‌شود . با بردن (۹-۲) در (۷-۷) خواهیم داشت

$$\hat{\mathcal{H}}_0 \sum_j a_{ij}^{(1)} |\varepsilon_j^0\rangle + \hat{V} |\varepsilon_i^0\rangle = \varepsilon_i^0 \sum_j a_{ij}^{(1)} |\varepsilon_j^0\rangle + \varepsilon_i^{(1)} |\varepsilon_i^0\rangle .$$

با

$$\sum_j (\varepsilon_j^0 - \varepsilon_i^0) a_{ij}^{(1)} |\varepsilon_j^0\rangle = (\varepsilon_i^{(1)} - \hat{V}) |\varepsilon_i^0\rangle \quad (10-2)$$

با ضرب کردن (۱۰-۲) در $|\varepsilon_k^0\rangle$ و استفاده از شرط تعاومند $\langle \varepsilon_k^0 | \varepsilon_j^0 \rangle = \delta_{kj}$ ، خواهیم داشت

$$\sum_{j=1} (\varepsilon_j^0 - \varepsilon_i^0) a_{ij}^{(1)} \delta_{kj} = \langle \varepsilon_k^0 | (\varepsilon_i^{(1)} - \hat{V}) | \varepsilon_i^0 \rangle$$

با

$$(\varepsilon_k^0 - \varepsilon_i^0) a_{ik}^{(1)} = \varepsilon_i^{(1)} \delta_{ki} - \langle \varepsilon_k^0 | \hat{V} | \varepsilon_i^0 \rangle \quad (11-2)$$

برای به دست آوردن تصحیح مرتبه اول ویژه مقدار ، قرار می‌دهیم $i = k$ و نتیجه می‌گیریم

$$\varepsilon_i^{(1)} = \langle \varepsilon_i^0 | \hat{V} | \varepsilon_i^0 \rangle = V_{ii} = \langle V \rangle_i \quad (12-2)$$

* جمع‌بندی روی حالت‌های پیوسته ر به انگرال تبدیل می‌شود .

با استفاده از (۴-۷) ویژه مقدار انرژی (تا مرتبه اول) می‌شود

$$\varepsilon_i = \varepsilon_i^0 + \lambda V_{ii} \quad (13-2)$$

برای پیداکردن ضرایب a_{ik} در (۱۱-۷) قرار می‌دهیم $k \neq i$ و نتیجه می‌گیریم

$$(\varepsilon_k^0 - \varepsilon_i^0)a_{ik}^{(1)} = -\langle \varepsilon_k^0 | \hat{V} | \varepsilon_i^0 \rangle \quad (i \neq k)$$

با

$$a_{ik}^{(1)} = \frac{V_{ki}}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_k^0} \quad (14-2)$$

چون حالت i ام ناتبهگن فرض شده است، داریم $\varepsilon_k^0 \neq \varepsilon_i^0$ بنابراین $a_{ik}^{(1)}$ متناهی است. از (۷-۹) و (۳-۷) ویژه کت پریشیده (تا مرتبه اول) می‌شود

$$\begin{aligned} |\varepsilon_i\rangle &= |\varepsilon_i^0\rangle + \lambda a_{ii}^{(1)}|\varepsilon_i^0\rangle + \lambda \sum_{j \neq i} \frac{V_{ji}}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_j^0} |\varepsilon_j^0\rangle \\ &= (1 + \lambda a_{ii}^{(1)})|\varepsilon_i^0\rangle + \lambda \sum_{j \neq i} \frac{V_{ji}}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_j^0} |\varepsilon_j^0\rangle \end{aligned} \quad (15-2)$$

فقط کافی است که ضریب $a_{ii}^{(1)}$ تعیین شود. شرط خواهیم کرد که (۱۵-۲) تا مرتبه اول نسبت به λ بهنجارشده باشد. با قراردادن $1 = \langle \varepsilon_i | \varepsilon_i \rangle$ و حذف جملات از مرتبه λ^2 ، خواهیم داشت

$$|1 + \lambda a_{ii}^{(1)}|^2 \simeq 1 + 2\lambda \operatorname{Re} a_{ii}^{(1)} = 1 \quad \text{یا} \quad \operatorname{Re} a_{ii}^{(1)} = 0$$

بنابراین $a_{ii}^{(1)}$ در بدترین وضعیت خود موهومی است. می‌توان قرارداد $a_{ii}^{(1)} = 0$ بدون اینکه روی مقادیر قابل انتظار عملگرها تا مرتبه اول λ تأثیری داشته باشد. پس از خلاصه کردن نتایج مرتبه اول، خواهیم داشت

$$\varepsilon_i = \varepsilon_i^0 + \lambda V_{ii} \quad (16-2)$$

و

$$|\varepsilon_i\rangle = |\varepsilon_i^0\rangle + \lambda \sum_{j \neq i} \frac{V_{ji}}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_j^0} |\varepsilon_j^0\rangle \quad (17-2)$$

(که چنان‌که باید تا مرتبه اول λ بهنجارشده هستند). مشابه مکانیک موجی آن خواهد بود

$$\varepsilon_i = \varepsilon_i^0 + \lambda V_{ii} \quad (18-2)$$

$$\psi_i = \psi_i^0 + \lambda \sum_{j \neq i} \frac{V_{ji}}{\varepsilon_j^0 - \varepsilon_i^0} \psi_j^0 \quad (19-2)$$

که در آن

$$V_{ji} = \int \psi_j^0 * \nabla \left(\frac{\hbar}{i} \nabla, \mathbf{r} \right) \psi_i^0 d\mathbf{r} \quad (20-2)$$

دقت در (۱۷-۲) روشن می‌کند که چرا همگرایی سریع به شرط

$$\frac{|\lambda| |V_{ij}|}{|\varepsilon_j^0 - \varepsilon_i^0|} \ll 1$$

بستگی دارد.

۳- یک کاربرد از نظریه مرتبه اول

نظریه پریشیدگی مرتبه اول را برای پیدا کردن ویژه تابعها و ویژه مقدارهای هامیلتونی تعدل شده نوسانگر یک بعدی (شکل ۱-۷) به کار خواهیم برد

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \lambda x^4 \quad (\mathcal{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2)$$

این درست همان مسئله نوسانگر هماهنگ معمولی است که یک پریشیدگی ناهماهنگ کوچک به آن اضافه شده است.
با استفاده از

$$\psi_n^0(x) = \left[\left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{2^n n!} \right) \right]^{1/2} e^{-\alpha x^2/2} H_n(\sqrt{\alpha}x) \quad \left(\alpha = \frac{m\omega}{\hbar} \right)$$

و $\varepsilon_n^0 = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ به عنوان ویژه تابعها و ویژه مقدارهای ناپریشیده، معادلات (۱۸-۲) و (۱۹-۲) کمیات پریشیده متناظر را به صورت

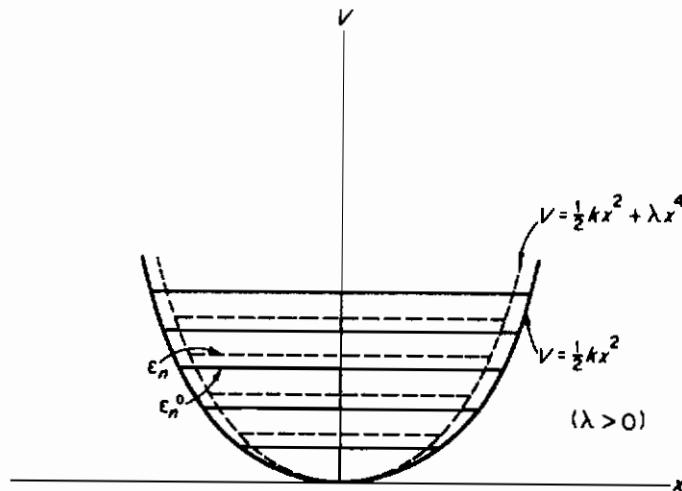
$$\psi_n = \psi_n^0 + \lambda \sum_{m \neq n} \left(\frac{V_{mn}}{\varepsilon_n^0 - \varepsilon_m^0} \right) \psi_m^0 \quad (21-7)$$

و $\varepsilon_n = \varepsilon_n^0 + \lambda V_{nn}$ به دست می‌دهند. انرژی می‌تواند مستقیماً به صورت

$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega + \lambda \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/2} \frac{1}{2^n n!} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha x^2} H_n^2(\sqrt{\alpha}x) x^4$$

با

$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega + \frac{3\lambda\hbar^2}{4m^2\omega^2} (2n^2 + 2n + 1) \quad (22-7)$$



شکل (۱-۷) جایه‌جایی‌های انرژی برای پتانسیل نوسانگر پریشیده. منحنی‌های پر بیانگر کمیات ناپریشیده هستند.

محاسبه شود. عناصر ماتریس موجود در (۲۱-۷) را محاسبه نخواهیم کرد لیکن خاطرنشان می‌کنیم که چنانچه داشته باشیم $|m - n| > 4$ ، این عناصر صفر می‌شوند. این نتیجه‌ها از واقعیت ناشی می‌شود که $H_n x^4$ می‌تواند به صورت یک ترکیب خطی از چند جمله‌ای‌های هرمیت واقع در گستره از $-H_{n+4}$ تا H_{n-4} بیان شود. با استفاده از

$$x^4 \psi_n^0 = \sum_{l=n-4}^{n+4} a_l \psi_l^0$$

و شرط تعامد^۰ ψ_n^0 ، برای $4 > |m - n|$ خواهیم داشت

$$V_{mn} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^{0*}(x^4 \psi_n^0) dx = 0$$

بنابراین لازم است که برای تصحیحات مرتبه اول حالت ψ_n^0 ، حداقل هشت عنصر ماتریس موجود در (۲۱-۷) را محاسبه کنیم.

از نظر تجربی، مشاهده ترازهای انرژی یک سیستم فیزیکی آسان تراز مشاهده سایر مشخصات آن است. اگر پریشیدگی کوچک باشد، ویژه تابعهای مرتبه صفر انرژی معمولاً "برای مقایسه با آزمایش مناسب‌اند. از طرف دیگر، ویژه مقدارهای مرتبه اول انرژی معمولاً "می‌توانند مستقیماً" مشاهده شوند. همان‌طور که در زیر نشان خواهیم داد، ویژه تابعهایی که تا مرتبه (۱-۲) تصحیح شده‌اند، برای محاسبه مرتبه p ام ویژه مقدارها مناسب‌اند. بنابراین، وقتی که از نظریه مرتبه اول صحبت می‌کنیم منظور ما انرژیها است و نه ویژه تابعها، چرا که در این صورت ویژه تابعها به‌وسیله مولفه‌های مرتبه صفر (ناپریشیده) خود بیان می‌شوند.

۴- نظریه مرتبه دوم

چند دلیل برای ادامه تا تصحیحات مرتبه دوم، حتی برای n ‌های کوچک، وجود دارد. اولاً، این تصحیحات می‌توانند از طریق تجربی (به‌عنوان مثال از طریق طیف نمایی) قابل مشاهده باشند، و بنابراین برای تائید یک نظریه بخصوص مفید هستند. ولی مهمتر از همه، اگر تصحیحات مرتبه اول صفر باشند این تصحیحات می‌توانند به‌عنوان تصحیحات مرتبه اول تلقی شوند. به‌عنوان مثال، فرض کنیم پریشیدگی مسئله نوسانگر بالا (به‌جای ψ_n^0)، ψ_n^3 باشد. در این صورت تصحیحات مرتبه اول ویژه مقدارها خواهند بود

$$V_{nn} = \int dx \psi_n^{0*} x^3 \psi_n^0 = 0$$

که صفر بودن آن از فرد بودن تابع زیر انتگرال ناشی می‌شود. در اینجاست که تصحیحات مرتبه دوم اهمیت پیدا می‌کنند.

جملات مرتبه دوم با حل (۸-۷) با استفاده از نتایج مرتبه اول به دست آمده ایجاد می‌شوند. طرز عمل سر راست است و کامل‌آ" مشابه روشی است که در نظریه مرتبه اول به کار رفته است. نتایج به قرار زیراند

$$\varepsilon_i = \varepsilon_i^0 + \lambda V_{ii} + \lambda^2 \sum_{j \neq i} \frac{V_{ji} V_{ij}}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_j^0} \quad (23-2)$$

و

$$\begin{aligned} |\varepsilon_i\rangle &= \left[1 - \frac{1}{2} \lambda^2 \sum_{j \neq i} \frac{V_{ji} V_{ij}}{(\varepsilon_i^0 - \varepsilon_j^0)^2} |\varepsilon_i^0\rangle \right] + \lambda \left[\sum_{j \neq i} \frac{V_{ji}}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_j^0} |\varepsilon_j^0\rangle \right] \\ &+ \lambda^2 \left[\sum_{j \neq i} \frac{1}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_j^0} \left\{ \sum_{k \neq i} \frac{V_{ki} V_{jk}}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_k^0} - \frac{V_{ii} V_{ji}}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_j^0} \right\} |\varepsilon_j^0\rangle \right] \quad (24-2) \end{aligned}$$

(که تا درجه دوم λ بهنجار شده است).مطالعه $\varepsilon_i^{(1)}$ و $\varepsilon_i^{(2)}$ در (23-2) نشان می‌دهد که

$$\varepsilon_i^{(1)} = V_{ii} = \langle \varepsilon_i^0 | \hat{V} | \varepsilon_i^0 \rangle$$

و

$$\varepsilon_i^{(2)} = \sum_{j \neq i} \frac{V_{ji} V_{ij}}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_j^0} = \langle \varepsilon_i^0 | \hat{V} | \varepsilon_i^{(1)} \rangle$$

برای تعمیم، می‌بینیم که تصحیح مرتبه $(1-p)$ ام ویژه بردار مستقیماً "ما را به تصحیح مرتبه p ام ویژه مقدار می‌رساند، یعنی

$$\varepsilon_i^{(p)} = \langle \varepsilon_i^0 | \hat{V} | \varepsilon_i^{(p-1)} \rangle \quad (25-2)$$

این قاعده کفایت ویژه تابع مرتبه $(1-p)$ ام در محاسبات انرژی مرتبه p ام را مورد تأکید قرار می‌دهد.

نظریه مرتبه دوم می‌تواند برای محاسبه تقریبی ترازهای انرژی یک نوسانگر با یک پریشیدگی ناهمماهنگ، ^۳جهد، بهکار رود. با قراردادن

$$\mathcal{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2, \quad \varepsilon_n^0 = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$$

و

$$\psi_n^0 = \left[\left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{2^n n!} \right) \right]^{1/2} e^{-\frac{1}{2} \alpha x^2} H_n(\sqrt{\alpha} x)$$

(۲۳-۷) خواهد شد

$$\epsilon_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega + \lambda^2 \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{\hbar\omega(n-m)}$$

که در آن

$$V_{mn} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^{*0} x^3 \psi_n^0 dx.$$

محاسبه انتگرال‌ها به عنوان یک تمرین واگذار می‌شود (مسئله ۳-۷).

۵ - پریشیدگی یک تراز تبهگن

مشاهده می‌کنیم که اگر تراز λ ام تبهگن باشد (مثلاً $\epsilon_0^0 = \epsilon_k^0$)، در این صورت هر یک از جمله‌های (۲۴-۷) که شامل $(\epsilon_k^0 - \epsilon_i^0) V_{ki}$ باشد واگذا می‌شود. البته اگر λ نیز صفر می‌بود این اشکال می‌توانست بر طرف گردد. اما، این طرز برخورد صرفاً "نمایانگر" به اصطلاح یک مداوا است نه معالجه.

مشکلاتی که با تراز تبهگن همراه‌اند از عدم یکتاً ویژه حالتها ناشی می‌شوند. فرض کنیم λ تبهگن باشد ولی هامیلتونی پریشیده $\lambda^2 + \lambda^0 = \lambda^0$ ناتبهگن باشد، یعنی، پریشیدگی تبهگنی را از بین می‌برد. به عنوان مثال، λ^0 ممکن است یک هامیلتونی وابسته به نیروی مرکزی با تبهگنی فضایی (جهتی) باشد، و λ^2 یک میدان مغناطیسی یکنواخت باشد که این تبهگنی را از بین می‌برد. در این صورت ویژه حالت‌های ناپریشیده یکتا نیستند و هر مجموعه از آنها متفاوت از هر مجموعه دیگر است. اما، ویژه حالت‌های λ^0 ، یعنی $\langle \epsilon_i^0 |$ ، باید یکتا باشند و تنها با تقریب می‌توانند (برای مقادیر کوچک λ) برابر با یک مجموعه ناپریشیده خاص $\langle \epsilon_i^0 |$ باشند. این مجموعه را مجموعه ناپریشیده "انتخابی" می‌نامیم. بدیهی است که اگر بخواهیم یک محاسبه مرتبه اول انجام دهیم، باید این مجموعه انتخابی را به عنوان یک تقریب مرتبه صفر به کار ببریم. به طور معادل، باید یک تناظر یک به یک بین حالت‌های پریشیده و مجموعه ناپریشیده "انتخابی" برقرار کنیم به طوری که

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \langle \epsilon_i^0 | \widetilde{\epsilon_i^0} \rangle = 1 \quad (26-7)$$

برای انجام تناظر فوق . وقتی این حالتها پیدا شدند ، همان طور که خواهیم دید ، هیچ جمله واگرایی در (۲۴-۷) ظاهر نخواهد شد . به علاوه ، جابه جاییهای مرتبه اول انرژی ، به سادگی ، به وسیله دو جمله اول (۲۳-۷) داده خواهند شد که عبارتند از

$$\varepsilon_i = \varepsilon_i^0 + \lambda \langle \widetilde{\varepsilon_i^0} | \mathcal{V} | \widetilde{\varepsilon_i^0} \rangle \quad (22-7)$$

پریشیدگی یک تراز ε بار تبھگن را در نظر بگیریم و قرار دهیم

$$\varepsilon_i^0 = \varepsilon^0 \quad (i = 1, \dots, s)$$

کتهای $\langle \varepsilon_i^0 | , i = 1, \dots, s$ ، ویژه حالتهای پکتای انرژی نبوده و لزوماً متعامد نیستند ، گرچه فرض می کنیم که آنها را متعامد ساخته ایم * . مجموعه انتخابی که دنبال آن هستیم همیشه می تواند به کمک

$$|\widetilde{\varepsilon_i^0}\rangle = \sum_{j=1}^s b_{ij} |\varepsilon_j^0\rangle \quad (i = 1, \dots, s) \quad (28-2)$$

ساخته شود . چون مجموعه انتخابی (و هم چنین مجموعه اولیه) باید راست هنجار باشد ، خواهیم داشت

$$\begin{aligned} \langle \widetilde{\varepsilon_i^0} | \widetilde{\varepsilon_i^0} \rangle &= 1 \\ \sum_{j, k=1}^s b_{ij}^* b_{ik} \langle \varepsilon_j^0 | \varepsilon_k^0 \rangle &= \sum_{j, k=1}^s b_{ij}^* b_{ik} \delta_{jk} \\ &= \sum_{j=1}^s |b_{ij}|^2 = 1 \end{aligned} \quad (29-2)$$

ضرایب b_{ij} مجموعه انتخابی "جدید " را تعیین می کنند . با به کار بردن $\langle \widetilde{\varepsilon_i^0} |$ در معادله مرتبه اول (۲۲-۷) ، خواهیم داشت

$$\mathcal{H}_0 |\varepsilon_i^{(1)}\rangle + \mathcal{V} |\widetilde{\varepsilon_i^0}\rangle = \varepsilon_i^0 |\varepsilon_i^{(1)}\rangle + \varepsilon_i^{(1)} |\widetilde{\varepsilon_i^0}\rangle \quad (30-2)$$

$\langle \varepsilon_i^{(1)} |$ را در پایه "قدیمی " به صورت

* یادآوری کنیم که همیشه می توان یک چنین مجموعه راست هنجاری ساخت .

$$|\varepsilon_i^{(1)}\rangle = \sum_{j=1}^{\infty} a_{ij}^{(1)} |\varepsilon_j^0\rangle \quad (31-2)$$

بسط می‌دهیم . با بردن (۲۱-۲) و (۲۰-۲) در (۲۸-۲) ، نتیجه می‌گیریم

$$\sum_{j=1}^{\infty} a_{ij}^{(1)} \varepsilon_j^0 |\varepsilon_j^0\rangle + \sum_{j=1}^s \hat{V} b_{ij} |\varepsilon_j^0\rangle = \varepsilon_i^0 \sum_{j=1}^{\infty} a_{ij}^{(1)} |\varepsilon_j^0\rangle + \varepsilon_i^{(1)} \sum_{j=1}^s b_{ij} |\varepsilon_j^0\rangle \quad (32-2)$$

چون برای $s \leq n$ داریم $\varepsilon_j^0 = \varepsilon_i^0 = \varepsilon^0$ ، جمله اول سری‌های بینهایت در دو طرف صفر می‌شوند به طوری که (۳۲-۲) خواهد شد

$$\sum_{j=s+1}^{\infty} a_{ij}^{(1)} \varepsilon_j^0 |\varepsilon_j^0\rangle + \sum_{j=1}^s \hat{V} b_{ij} |\varepsilon_j^0\rangle = \varepsilon^0 \sum_{j=s+1}^{\infty} a_{ij}^{(1)} |\varepsilon_j^0\rangle + \varepsilon_i^{(1)} \sum_{j=1}^s b_{ij} |\varepsilon_j^0\rangle \quad (33-2)$$

سپس، آنرا در $|\varepsilon_k^0\rangle$ ، که در آن $k = 1, \dots, s$ است ، ضرب می‌کنیم و با استفاده از راست هنجاری نتیجه می‌گیریم

$$\sum_{j=1}^s b_{ij} \langle \varepsilon_k^0 | \hat{V} | \varepsilon_j^0 \rangle = \varepsilon_i^{(1)} b_{ik}$$

با

$$\sum_{j=1}^s V_{kj} b_{ij} = \varepsilon_i^{(1)} b_{ik} \quad (34-2)$$

این مجموعه معادلات همگن برای ضرایب b_{ij} فقط برای بعضی از مقادیر i دارای جواب غیربدپنهانی است . در واقع ، (۳۴-۲) می‌تواند به صورت یک مسئله ویژه مقداری به شکل ماتریسی

$$\mathbf{V}\mathbf{b}_i = \varepsilon_i^{(1)}\mathbf{b}_i$$

با

$$\begin{pmatrix} V_{11} & \cdots & V_{1s} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{s1} & \cdots & V_{ss} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{i1} \\ \vdots \\ b_{is} \end{pmatrix} = \varepsilon_i^{(1)} \begin{pmatrix} b_{i1} \\ \vdots \\ b_{is} \end{pmatrix} \quad (i = 1, \dots, s) \quad (35-2)$$

نوشته شود که در آن شرط بمنجاش (۲۹-۲) خواهد بود

$$\sum_{j=1}^s |b_{ij}|^2 = 1$$

بدین ترتیب به قاعده زیر می‌رسیم :

ضرایبی که ویژه کت انتخابی ، ام $\langle \tilde{\epsilon}_i^0 |$ را تعیین می‌کنند به وسیله مولفه‌های ویژه بردار (بهنجارشده) ام b_i از ماتریس پریشیدگی V داده می‌شوند . به علاوه، جایه‌جایی مرتبه اول در انرژی حالت عمارت است از ویژه مقدار متضاظر $\langle \epsilon_i^0 |$ از ماتریس V .

قاعده فوق طرز عمل زیر را برای ساختن ویژه‌کتهای انتخابی یک تراز s مرتبه تبھگن داده شده پیشنهاد می‌کند :

(الف) برای هر تراز تبھگن از ویژه‌کتهای داده شده $\langle \tilde{\epsilon}_i^0 |$ برای ساختن ماتریس $s \times s$ استفاده کنید ، یعنی

$$V = \begin{pmatrix} \langle \tilde{\epsilon}_1^0 | \tilde{V} | \tilde{\epsilon}_1^0 \rangle & \cdots & \langle \tilde{\epsilon}_1^0 | \tilde{V} | \tilde{\epsilon}_s^0 \rangle \\ \langle \tilde{\epsilon}_s^0 | \tilde{V} | \tilde{\epsilon}_1^0 \rangle & \cdots & \langle \tilde{\epsilon}_s^0 | \tilde{V} | \tilde{\epsilon}_s^0 \rangle \end{pmatrix} \quad (36-2)$$

(ب) s ویژه مقدار $\langle \epsilon_i^0 |$ و ویژه بردارهای بهنجارشده متضاظر (ماتریس‌های ستونی)

$$b_i = \begin{pmatrix} b_{i1} \\ \vdots \\ b_{ij} \\ \vdots \\ b_{is} \end{pmatrix} \quad (i = 1, \dots, s) \quad (37-2)$$

را پیدا کنید . از مولفه‌ها برای ساختن مجموعه انتخابی جدید به صورت

$$\langle \tilde{\epsilon}_i^0 | = \sum_{j=1}^s b_{ij} |\epsilon_j^0 \rangle \quad (38-2)$$

استفاده کنید .

(ج) ویژه مقدارهای متضاظر V ، یعنی $\langle \epsilon_i^0 |$ ، تصحیحات مرتبه اول انرژی $\langle \epsilon_i |$ را به دست می‌دهند ، یعنی ،

$$\epsilon_i = \epsilon^0 + \lambda \epsilon_i^{(1)} \quad (i = 1, \dots, s) \quad (39-2)$$

عموماً ، این ویژه مقدارها متمایز‌اند ($i \neq k$) $\epsilon_i^{(1)} \neq \epsilon_k^{(1)}$ به طوری که تبھگنی معمولاً "در مرتبه اول از بین می‌رود .

اگر از آغاز مجموعه انتخابی را ، به جای مجموعه داده شده ، به عنوان تقریب مرتبه صفر به کار برده بودیم ، می‌توانستیم با نظریه ناتبھگن مرتبه اول ، که در بخش پیشین شرح داده شد ، کار را ادامه دهیم . در این مورد ، عناصر ماتریس در شرایط

$$V_{ij} = \langle \widetilde{\varepsilon_i^0} | \hat{V} | \widetilde{\varepsilon_j^0} \rangle = V_{ii} \delta_{ij} \quad (40-2)$$

صدق می‌کردند و جملات واگرای ($i \neq j$) در (۲۴-۷) وجود نمی‌داشتند. به علاوه، چون $\varepsilon_i^{(1)}$ معرف ویژه مقدارهای V هستند، باید برابر با عناصر قطری آن باشند، یعنی،

$$\varepsilon_i^{(1)} = \langle \widetilde{\varepsilon_i^0} | V | \widetilde{\varepsilon_i^0} \rangle$$

بنابراین داریم

$$\varepsilon_i = \varepsilon_i^0 + \lambda \langle \widetilde{\varepsilon_i^0} | \hat{V} | \widetilde{\varepsilon_i^0} \rangle$$

که درست همان نتیجه نظریه پریشیدگی ناتبهگن است.

۶- کاربرد نظریه پریشیدگی در یک تراز تبهگن - اثر استارک در هیدرزن*

اثریک میدان الکتریکی یکنواخت E روی ترازهای هیدرزن اثر استارک خوانده می‌شود. اگر این میدان به اندازه کافی قوی باشد، می‌توان از برهمنش اسپین - مدار، همان‌طور که در اثر پاشن - باکتردیم، کاملاً "صرف نظر کرد". وقتی یک الکترون وارد یک میدان الکتریکی یکنواخت شود، انرژی پتانسیلی برابر با $\int eE \cdot dr = eE \cdot r$ به دست می‌آورد. در هیدرزن، این عبارت می‌تواند به صورت $E \cdot p - er = p$ -، که در آن e گشتاور دوقطبی سیستم پروتون الکترون است، نیز نوشته شود. هامیلتونی مربوطه عبارت است از

$$\mathcal{H}_{\text{Stark}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} + eE \cdot r \quad (41-2)$$

* اثر استارک در واقع مثال مناسبی برای مساله پریشیدگی حالت مقید نیست. پتانسیل در راستای میدان به صورت $V = -eEx$ تغییر می‌کند. وقتی $r \rightarrow \infty$ ، پتانسیل به حد کافی منفی می‌شود به طوری که قادر به حفظ حالت‌های مقید نیست. بنابراین احتمال یافتن ذره در بین‌های پنهان صفر نیست و میدان توانایی "یونش" سیستم را که در آغاز مقید بوده است دارد. حالتها شبیه‌گسته‌اند و بعضی از خواص وابسته به یک طیف پیوسته را دارند. با وجود این، مادامی که میدان الکتریکی کوچک باشد احتمال یونش کوچک است و مساله را می‌توان با استفاده از روش‌های پریشیدگی حالت مقید حل کرد.

با انتخاب جهت E در امتداد محور z ، پریشیدگی به شکل $\lambda V = +eE$ و $V = z = r \cos \theta$ است، در می‌آید. در نمایش $|nlm_i\rangle^*$ ، حالت پایه $|100\rangle$ ناتبھگن است. تصحیح در انرژی برای این تراز، از (۱۶-۷)، عبارت است از

$$\lambda \epsilon^{(1)} = +eE\langle 100|z|100\rangle$$

عنصر ماتریس عبارت است از

$$\langle 100|z|100\rangle = \int \psi_{100}^* z \psi_{100} dr$$

اما، چون z تابع زوج و ψ_{100} تابع فردی است، تابع زیرانتگرال تابع فردی است. بنابر این، انتگرال صفر می‌شود و جایه‌جایی مرتبه اول استارک در حالت پایه هیدرزن وجود ندارد.

اولین حالت برانگیخته چهاربار تبھگن است، یعنی تمام حالات $|200\rangle$ ، $|210\rangle$ و $|21 \pm 1\rangle$ دارای انرژی $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon/2^2$ هستند. در اصل، باید یک ماتریس 4×4 برای V بسازیم. خوشبختانه این مسئله می‌تواند به مسئله‌ای که شامل یک ماتریس 2×2 است تبدیل شود. برای انجام این کار نخست مشاهده می‌کنیم که عناصر غیرقطری ماتریس 4×4 وابسته به حالت‌های $|1+21\rangle$ و $|1-21\rangle$ صفراند. چون پریشیدگی مستقل از زاویه سنتی ϕ است عناصر ماتریس مورد نظر شامل حاصلضربهای داخلی قسمتهای واپسی ϕ ای حالت‌های نیروی مرکزی است. اما چون این قسمتها متعامداند نتیجه می‌گیریم

$$\langle 211|z|21-1\rangle = \langle 211|z|210\rangle = \langle 211|z|200\rangle = 0$$

$$\langle 21-1|z|211\rangle = \langle 21-1|z|210\rangle = \langle 21-1|z|200\rangle = 0$$

بنابراین حالت‌های $|21 \pm 1\rangle$ اکنون جزئی از مجموعه انتخابی هستند. جایه‌جاییهای انرژی آنها به وسیله $\langle 21 \pm 1|z|21 \pm 1\rangle$ داده می‌شوند. لیکن نتیجه می‌شود که انتگرال‌های واپسی به این عناصر نیز صفر می‌شوند. این نتیجه می‌تواند به وسیله کاربرد استدللات پاریته در مورد توابع زیرانتگرال اثبات شود. در نتیجه جایه‌جایی مرتبه اول استارک واپسی به حالت‌های $|21 \pm 1\rangle$ وجود ندارد.

حالتهای انتخابی باقی مانده باید از $|210\rangle$ و $|200\rangle$ ساخته شوند. عناصر ماتریسی

* نمادهای اسپین را حذف می‌کنیم.

برای این حالتها انتگرال‌هایی را وارد می‌کنند که با استفاده از توابع هیدروژنی در (۴۵-۷) به صورت

$$\langle 210|z|210 \rangle = \langle 200|z|200 \rangle = 0$$

و

$$\langle 210|z|200 \rangle = \int \psi_{210}^* r \cos \theta \psi_{200} dr = \frac{-3\hbar^2}{me^2} = -3a$$

محاسبه می‌شوند. ماتریس تقلیل یافته خواهد شد

$$\begin{aligned} \mathbf{V} &= \begin{pmatrix} \langle 200|r \cos \theta|200 \rangle & \langle 200|r \cos \theta|210 \rangle \\ \langle 200|r \cos \theta|210 \rangle & \langle 210|r \cos \theta|210 \rangle \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & -3a \\ -3a & 0 \end{pmatrix} \quad (a = \hbar^2/me^2) \end{aligned}$$

ویژه مقدارهای رابطه ماتریسی

$$\begin{pmatrix} 0 & -3a \\ -3a & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{i1} \\ b_{i2} \end{pmatrix} = \varepsilon_i^{(1)} \begin{pmatrix} b_{i1} \\ b_{i2} \end{pmatrix} \quad (i = 1, 2) \quad (42-7)$$

به وسیله جوابهای معادله (فسر)

$$\begin{vmatrix} 0 - \varepsilon_i^{(1)} & -3a \\ -3a & 0 - \varepsilon_i^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

با

$$\varepsilon_i^{(1)} = \pm 3a \quad (43-7)$$

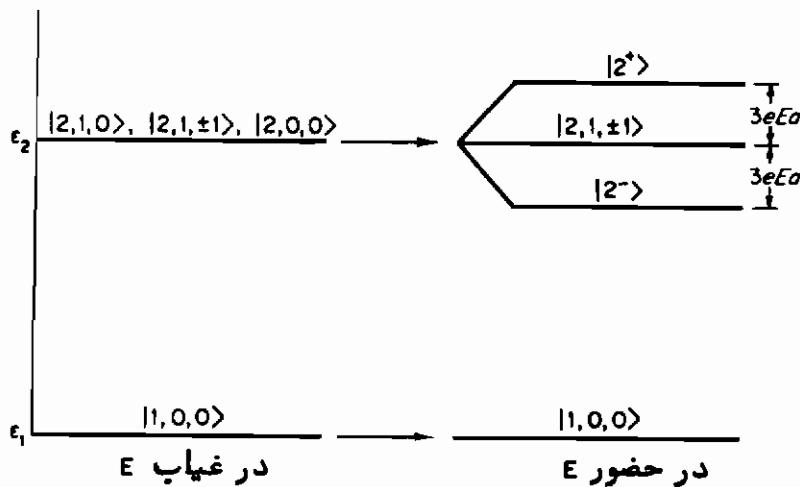
تعیین می‌شوند. با قراردادن $a = 3a$ و $\varepsilon_+^{(1)} = -3a$ و $\varepsilon_-^{(1)} = 3a$ ، ویژه بردارهای بهنجار شده متناظر خواهند شد

$$\mathbf{b}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \text{و} \quad \mathbf{b}_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ +1 \end{pmatrix} \quad (44-7)$$

بنابراین حالتها صحیح (انتخابی) مرتبه صفر برای تراز $n = 2$ و جایه‌جایی‌های انرژی آنها

عبارتنداز (شکل ۲-۷)

$$\begin{aligned}
 & |21\pm 1\rangle \quad (\text{بدون جابه‌جایی}) \\
 & |2^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|200\rangle - |210\rangle) = \lambda \varepsilon_+^{(1)} = +eE(3a) \quad (45-2) \\
 & |2^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|200\rangle + |210\rangle) = \lambda \varepsilon_-^{(1)} = +eE(-3a)
 \end{aligned}$$



شکل (۲-۷) جابه‌جایی مرتبه اول استارک در هیدرژن

به طور خلاصه، اگر یک تراز ناپریشیده تبیهگن باشد، ابتدا باید یک "ویژه پایه انتخابی" مناسب $\langle \tilde{\epsilon}_i | \tilde{\epsilon}_j \rangle$ پیدا کرد که ماتریس پریشیدگی نسبت به آن قطری باشد. این کتها با کتهای پریشیده دارای یک تناظر یک بهیک هستند و به عنوان یک تقریب مرتبه صفر مناسب به کار می‌روند. در اغلب موارد، لازم است که مجموعه انتخابی را با حل معادله ماتریسی (۲۵-۲) پیدا کنیم.

اما، در بعضی موارد بینش فیزیکی و تقارن مارا در پیدا کردن این مجموعه پاری می‌کند. این نکته را در مورد برهمنش اسپین - مدار در هیدرژن نشان خواهیم داد.

۷- اتم هیدرژن با برهمنش اسپین - مدار

دیدیم که حتی در یک وضعیت منزوی، پتانسیلی که یک الکترون اتمی می‌بیند پتانسیل نیروی مرکزی خالص نیست. انحراف کوچک ناشی از آثار مغناطیسی، برهمنش اسپین - مدار خوانده می‌شود. هامیلتونی مربوطه، از (۶-۳۴)، عبارت است از

$$\hat{\mathcal{H}}_{s=0} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \frac{e^2 f(r)}{2m^2 c^2} \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} \quad (46-7)$$

که در آن

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \hat{\mathcal{H}}_{\text{cf}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r) \quad \text{و} \quad f(r) = \frac{1}{e^2 r} \frac{dV}{dr}$$

این مسئله را با استفاده از روش‌های پریشیدگی مذکور در فوق بررسی خواهیم کرد. ویژه حالت‌های ناپریشیده نیروی مرکزی نسبت به m_l و m_s تبیه‌گانند و دارای انرژی E_{nl} می‌باشند. دومجموعه مخصوصاً "جالب ناپریشیده که قبلًا" مشخص گردید عبارت‌دار $|nlm_l m_s\rangle$ و $|nljm_r\rangle$. مناسب است که پریشیدگی اسپین - مدار را به صورت

$$\lambda = \frac{e^2}{2m^2 c^2}, \quad \hat{V} = f(r) \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$$

تجزیه کنیم.

یک مجموعه از ویژه‌بردارهای ناپریشیده می‌تواند به عنوان تقریب مرتبه صفر در مسئله پریشیدگی به کار رود به شرط اینکه این مجموعه ماتریس V را قطری کند. از این نظر مجموعه $|nlm_l m_s\rangle$ در برهم‌کنش اسپین - مدار با شکست مواجه می‌شود زیرا

$$\langle nlm_l m_s | f(r) \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} | nlm_l' m_s' \rangle \neq C \delta_{m_l m_l'} \delta_{m_s m_s'}$$

می‌توانستیم از مجموعه $|nlm_l m_s\rangle$ برای ساختن مجموعه مناسبی که ماتریس V در آن قطری باشد استفاده کنیم. ولی این مجموعه را با استفاده از بعضی از بینش‌های فیزیکی پیدا خواهیم کرد.

هامیلتونی (۴۶-۷)، $\hat{\mathcal{H}}_0 = \frac{p^2}{2m} + V(r)$ با $\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$ جابه‌جا‌پذیر نیست. این عدم سازگاری از این واقعیت ناشی می‌شود که $\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$ شامل $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ و $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ است. بنابراین تعجب‌آور نخواهد بود که ویژه حالت‌های \hat{L}_x و \hat{S}_z ، یعنی، $|nlm_l m_s\rangle$ ، ویژه حالت‌های \hat{L}_z و \hat{S}_x نباشند. از طرف دیگر، $\hat{\mathcal{H}}_0$ با J^2 و $\hat{\mathbf{J}}$ سازگار است. به عنوان مثال، با استفاده از اتحاد

$$\hat{J}^2 = \hat{\mathbf{L}}^2 + 2\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} + \hat{\mathbf{S}}^2$$

با

$$\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2}(J^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2) \quad (47-2)$$

نتیجه می‌گیریم

$$[\hat{L} \cdot \hat{S}, \hat{J}^2] = \frac{1}{2} \{ [\hat{J}^2, \hat{J}^2] - [\hat{L}^2, \hat{J}^2] - [\hat{S}^2, \hat{J}^2] \} = 0$$

یک محاسبه مشابه نشان می‌دهد که

$$[\hat{L} \cdot \hat{S}, \hat{J}_z] = 0$$

چون \hat{J}^2 ، \hat{J} و $\hat{L} \cdot \hat{S}$ دو بهدو جایه‌جاپذیراند این عملکرها حداقل یک ویژه پایه مشترک دارند. بخصوص، در حالی که ویژه حالت‌های نیروی مرکزی $|nljm_j\rangle$ ممکن است دقیق نباشند، محتمل است که این حالتها یک مجموعه انتخابی تشکیل دهند و بتوانند به عنوان تقریب مرتبه صفر ویژه پایه دقیق \hat{J}^2 به کار روند. اگر این استدلال فیزیکی متقاعد کننده نباشد، ما صرفاً نیاز به تحقیق این نکته داریم که آیا ماتریس V در پایه $|nljm_j\rangle$ قطری است یا نه. با نوشتن

$$V_{jj'mjm'_j}^{nl} = \langle nlj'm_j' | f(r) \hat{L} \cdot \hat{S} | nljm_j \rangle$$

و استفاده از (۴۷-۲)، نتیجه می‌گیریم

$$\begin{aligned} V_{jj'mjm'_j}^{nl} &= \langle nlj'm_j' | f(r) \frac{1}{2} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2) | nljm_j \rangle \\ &= \frac{1}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \hbar^2 \langle nlj'm_j' | f(r) | nljm_j \rangle \\ &= \frac{1}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \hbar^2 \langle nl | f(r) | nl \rangle \delta_{jj'mjm'_j} \quad (s = \frac{1}{2}) \end{aligned} \quad (48-2)$$

یعنی، V قطری است.

اکنون روشن است که مجموعه $|nljm_j\rangle$ بیانگر تقریب مرتبه صفر درست ویژه حالت‌های دقیق هامیلتونی اسپین - مدار است. با قراردادن $j' = j$ و $m_j' = m_j$ در (۴۸-۲)، ارزی تصحیح شده تا مرتبه اول خواهد شد.

$$\begin{aligned} \varepsilon_{nlj} &= \varepsilon_{nl} + \lambda V_{jj'mjm'_j}^{nl} \\ &= \varepsilon_{nl} + \frac{e^2}{2m^2c^2} \left[\frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2} \right] \hbar^2 \langle n, l | f(r) | n, l \rangle \end{aligned} \quad (49-2)$$

شکافتگی تراز در (۴۹-۲) به قاعده بازه لاند معروف است و به طور کلی به هر مسئله نیروی مرکزی اعمال می‌شود. به عنوان مثال، این قاعده می‌تواند در مورد الکترون ظرفیت هر اتم

قلیائی، که در آن پتانسیل کولنی بدو سیله پوشش الکترون‌های داخلی تصحیح شده است، اعمال شود.

در هیدرژن، عنصر ماتریسی $\langle nl | f(r) | nl \rangle$ عبارت است از

$$\langle nl | \frac{1}{r^3} | nl \rangle = \int_0^\infty R_{nl}(r) \frac{1}{r^3} R_{nl}(r) r^2 dr$$

که در آن قرار داده‌ایم

$$f(r) = \frac{1}{e^2 r} \frac{dV}{dr} = \frac{1}{r^3}$$

* عبارت است از ویژه تابع شعاعی هیدرژنی. پس از انتگرال‌گیری نتیجه خواهد شد

$$\langle nl | \frac{1}{r^3} | nl \rangle = \frac{1}{a^3 n^3 (l+1)(l+\frac{1}{2})l} \quad \left(a = \frac{\hbar^2}{me^2} \right)$$

بنابراین قاعده لانده برای هیدرژن می‌شود

$$\begin{aligned} \varepsilon_{nlj} &= \varepsilon_n + \frac{\hbar^2}{m^2 c^2 a^2} \left[\frac{1}{2} \frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{n(l+1)(l+\frac{1}{2})l} \right] \frac{e^2}{2n^2 a} \\ &= \varepsilon_n + \alpha^2 |\varepsilon_n| \left[\frac{1}{2} \frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{n(l+1)(l+\frac{1}{2})l} \right] \end{aligned} \quad (50-2)$$

که در آن از علامتهای اختصاری زیر استفاده کرده‌ایم

$$|\varepsilon_n| = \frac{e^2}{2n^2 a} = \frac{|\varepsilon_1|}{n^2} \quad , \quad \alpha = \frac{\hbar}{mca} = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

جمله داخل پرانتزها از مرتبه واحد است بنابراین تصحیح نسبی ناشی از برهم‌کنش اسپین-مدار عبارت است از

* به کتاب زیر رجوع کنید

H.A. Bethe and E.E. Salpeter, "Quantum Mechanics of one and Two Electron Atomes", P. 17. Springer-Verlag, Berlin, 1957.

$$\frac{\epsilon_{n+1}}{|\epsilon_n|} = \alpha^2 \simeq \left(\frac{1}{137}\right)^2 \simeq 10^{-4}$$

بهاین دلیل، ثابت بدون بعد α ثابت ساختار ریز نامیده می‌شود. توجه کنیم که چون اکنون انرژی به $n = 1$ و ز بستگی دارد تبہگنی تصادفی کم شده است. تبہگنی جهتی هنوز وجود دارد.

به طور تجربی نتیجه شده است که تصحیحات ساختار ریز برای اتم هیدرژن تنها از نظرکیفی با (۵۰-۷) مطابقت می‌کنند. این نکته از این واقعیت ناشی می‌شود که این تصحیحات انرژی با تصحیحات نسبیتی مرتبه اول، که در همه‌جا از آن صرفنظر کردۀ‌ایم، از یک مرتبه هستند. بنابراین، علاوه بر انرژی اسپین - مدار باید تصحیح مرتبه اول ناشی از تغییرات جرم با سرعت را نیز ملاحظه کنیم. جمله سومی نیز وجود دارد که باید ملاحظه کردد، این جمله کوانتومی - نسبیتی (جمله داروین) است و مشابه کلاسیکی ندارد. هرسه جمله (اسپین - مدار + تغییرات جرم + جمله داروین) به طور کاملاً "طبیعی در حد غیرنسبیتی معادله نسبیتی دیراک (فصل ۱۱) برای الکترون ظاهر می‌شوند. ترکیب اثرهای آنها، به جای (۵۰-۷)، می‌دهد

$$\epsilon_{nj} = \epsilon_n + \alpha^2 \epsilon_n \left[\frac{1}{n} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right] \quad (j = l \pm \frac{1}{2}) \quad (51-7)$$

* این فرمول ساختار ریز در فصل ۱۱ بدست خواهد آمد، فرمول فوق یک تبہگنی دوگانه* (علاوه بر تبہگنی m) نشان می‌دهد زیرا برای یک زی معین عموماً "دومقدار برای l وجود دارد ($j = \frac{1}{2} \mp l$)

به طور خلاصه، می‌بینیم که هامیلتونی هیدرژنی کامل با ساختار ریز عبارت است از

$$(جمله‌های ساختار ریز) + \mathcal{H}_{\text{eff}} = \mathcal{H}$$

که در آن

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \frac{\beta^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$$

* در واقع این تبہگنی به خاطر اثرات نسبتاً پیچیده الکترودینامیک کوانتومی (جایه‌جایی لمب) قدری شکافته می‌شود.

و جملات ساختار ریز برابرند با (اسپین-مدار+تفییرات جرم+جمله داروین). به علاوه ویژه حالت‌های انتخابی عبارتند از $\langle nljm_j |$ با انرژی‌های مرتبه اول که به وسیله (۵۱-۷) داده می‌شوند.

۸- اثر غیرعادی زیمن در هیدرزن

وقتی یک اتم هیدرزن وارد یک میدان مغناطیسی پکتواخت (در امتداد محور z) می‌شود هامیلتونی خواهد شد

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} + \frac{eB}{2mc} (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) \quad (52-2)$$

در عمل، تصحیحات مربوط به ساختار ریز و میدان خارجی همیشه در مقایسه با انرژی نیروی مرکزی الکتروستاتیکی کوچک‌اند. در اصل، ملزم هستیم که یک مجموعه ناپریشیده که هم انرژی ساختار ریز و هم انرژی مغناطیسی را قطری کند انتخاب نمائیم. اما در دو مورد مهم که مورد بررسی قرار خواهد گرفت یک روش ساده‌تر کافی است. اگر جمله آخر (۵۲-۷) بزرگتر از انرژی ساختار ریز باشد (میدان B قوی باشد)، می‌توانیم از انرژی اخیر بکلی صرف‌نظر کنیم. این همان اثر پاشن-باک است که قبلاً در فصل ۶ مورد بحث قرار گرفت. اما اگر B به قدر کافی ضعیف باشد، یک مجموعه انتخابی‌ای به کارخواهیم برد که فقط پریشیدگی‌های غالب را، که در این مورد ساختار ریز است، قطری کند. چون پیدا کردیم که این مجموعه باید $\langle nljm_j |$ باشد، تصحیحات انرژی مربوط به میدان خارجی B به طور ساده‌خواهند شد

$$\begin{aligned} \epsilon_B &= \frac{eB}{2mc} \langle nljm_j | \hat{L}_z + 2\hat{S}_z | nljm_j \rangle \\ &= \frac{eB}{2mc} \langle nljm_j | \hat{J}_z + \hat{S}_z | nljm_j \rangle \\ &= \frac{eB}{2mc} \{ m_j \hbar + \langle nljm_j | \hat{S}_z | nljm_j \rangle \} \end{aligned} \quad (53-2)$$

عنصر ماتریس $\langle S_z \rangle$ می‌تواند با کاربرد (۶-۲۴) برای بیان حالت $|nljm_j\rangle$ بر حسب $|nlm_1 m_s\rangle$ محاسبه شود. چون $\langle nlm_1 m_s |$ ویژه‌کتهای \hat{S}_z هستند محاسبه مذکور سرراست است. یک روش جالب‌تر این است که مدل برداری را به کاربریم. در حالت $|nljm_j\rangle$ بردار S حول بردار J حرکت تقدیمی انجام می‌دهد. بنابراین مقدار متوسط مؤلفه S در

امتداد عمود بر \mathbf{J} صفر می‌شود. تا آنجایی که به متوسطها مربوط می‌شود، می‌توان نوشت
(شکل ۳-۷)

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \langle \mathbf{S}_J \rangle = \langle (\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{J}}_u) \hat{\mathbf{J}}_u \rangle \quad (54-2)$$

که در آن $\hat{\mathbf{J}}_u = \hat{\mathbf{J}}/\mathbf{J}$ برداریکه در امتداد $\hat{\mathbf{J}}$ است. با استفاده از اتحاد

$$(\hat{\mathbf{J}} - \hat{\mathbf{S}})^2 = \hat{\mathbf{L}}^2, \quad \hat{\mathbf{J}}^2 - 2\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{S}} + \hat{\mathbf{S}}^2 = \hat{\mathbf{L}}^2$$

۳

$$\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{J}}^2 + \hat{\mathbf{S}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2)$$

خواهد شد (۵۴-۲)

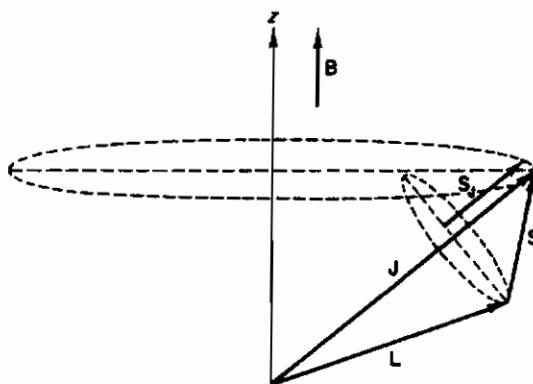
$$\langle \mathbf{S} \rangle = \left\langle \frac{(\hat{\mathbf{J}}^2 + \hat{\mathbf{S}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2) \hat{\mathbf{J}}}{2\hat{\mathbf{J}}^2} \right\rangle \quad (55-2)$$

برای مولفه z خواهیم داشت

$$\langle S_z \rangle = \left\langle \left(\frac{\hat{\mathbf{J}}^2 + \hat{\mathbf{S}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2}{2\hat{\mathbf{J}}^2} \right) J_z \right\rangle$$

۴

$$\langle nlsjm_j | \hat{S}_z | nlsjm_j \rangle = \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} m_j \hbar \quad (56-2)$$



شکل (۳-۷) بردار $S_J = \frac{(\mathbf{S} \cdot \mathbf{J}) \mathbf{J}}{J^2}$. توجه کنیم که برای میدانهای ضعیف B حرکت تقدیمی "S" و "L" حول "J" خیلی سریع تر از حرکت تقدیمی "J" حول "B" است.

با بازگشت به (۵۳-۷)، نتیجه می‌گیریم که شکافتگی مغناطیسی خواهد شد

$$\varepsilon_B = \frac{eB\hbar}{2mc} \left\{ 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \right\} m_j \quad (57-7)$$

مناسب است که ضریب لاند g را به صورت

$$g_L = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}$$

$$= 1 \pm \frac{1}{2l+1} \quad , \quad s = \frac{1}{2}, \quad j = l \pm \frac{1}{2} \quad \text{برای} \quad (58-7)$$

تعريف کنیم که بر حسب آن (۵۷-۷) می‌تواند به صورت زیر نوشته شود

$$\varepsilon_B = \mu_B B g_L m_j$$

پارامتر g عملای عبارت است از ضریب زیرو مغناطیسی موئیت وابسته به J و تابع نحوه پیوند میان L و S است. اگر $l = 0$ باشد داریم $g_L = g_s = 2$ ، اگر $s = 0$ باشد داریم $g_L = g_l = 1$

ترازهای انرژی برای الکترون هیدرژنی در حضور یک میدان ضعیف B خواهند شد

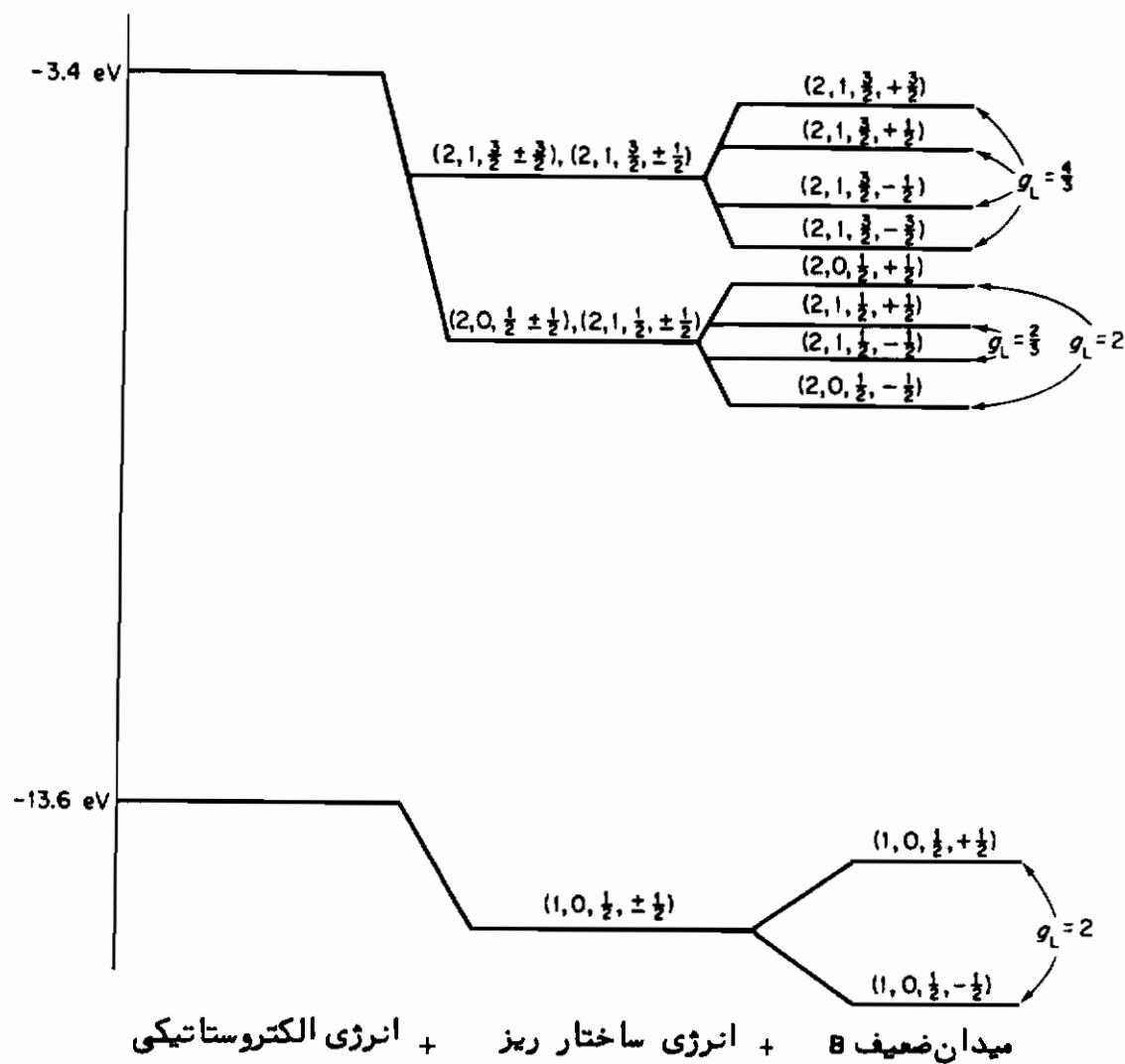
(شکل (۴-۷))

$$\varepsilon_{njlms} = \varepsilon_n + \alpha^2 \varepsilon_n \left\{ \frac{1}{n} \left(\frac{1}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right\} + \mu_B B g_L m_j \quad (59-7)$$

معادله (۵۸-۷) نشان می‌دهد که برای هر زیری معین دو مقدار متفاوت برای g_L وجود دارد ($\frac{1}{2} \mp l$) . این امر منجر به شکافتگی‌های نابرابری در زیر ترازهای مغناطیسی m_j می‌شود . به‌این دلیل، این اثر غیرعادی زیمن نامیده می‌شود . وقتی که میدان از یک میدان ضعیف به یک میدان قوی افزایش می‌یابد، به تدریج طیف غیرعادی زیمن تبدیل به طیف پاشن-باک، (ع-۳۸)، می‌شود . بررسی حالت واسطه که در آن انرژی‌های مغناطیسی و اسپین-مداری از یک مرتبه هستند خارج از سطح این کتاب است، بحث این حالت می‌تواند در هر مقاله پیشرفت‌های در مورد طیف‌های اتمی یافته شود*.

* به عنوان مثال به کتاب زیر مراجعه کنید ..

E.u. Condon and G.H. Shorteley, "The Theory of Atomic Spectra", P. 152. Cambridge Univ. Press, London and New York , 1935.



شکل (۴-۷) اثر غیرعادی زیمن (در هیدرزن) . پرانتزا معرف $(nljm_J)$ می باشد .

۹ - نظریه پریشیدگی وابسته به زمان

وقتی سیستم فیزیکی مورد نظر به وسیله هامیلتونی ناپریشیده \hat{H} نمایش داده می شود، معمول است که پریشیدگی $\hat{\mathcal{L}}$ به عنوان القاءکننده گذارهایی بین حالات ناپریشیده $\langle \psi | \hat{\mathcal{L}} | \psi' \rangle$ در نظر گرفته شود . از (۴-۳) نتیجه می شود که عملگر تحول کل برای سیستم ما در معادله انتگرالی

$$U(t, t_0) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t \hat{\mathcal{L}}(\tau_1) U(\tau_1, t_0) d\tau_1 \quad (4-7 \text{ الف})$$

که در آن

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}(t) \quad \text{و} \quad t > t_0$$

است، صدق می‌کند. در مورد خاصی که پریشیدگی مستقل از زمان است، جواب (۶۰-۷) عالف خواهد شد

$$O(t, t_0) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 (t - t_0) \right] \quad (60-7)$$

که در آن $\hat{H}_0 + \lambda \hat{V} = \hat{H}$. ما به نحوه تحول حالت‌های ناپریشیده ψ تحت تأثیر عملگر (۶۰-۷) علاقه‌مند خواهیم بود. به این دلیل مناسب است که $O(t, t_0)$ را بر حسب عملگر تحول ناپریشیده

$$O^{(0)}(t, t_0) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 (t - t_0) \right]$$

بيان کنیم. وسوسه‌انگیز است که این کار را با نوشتن (۶۰-۷) به صورت

$$O(t, t_0) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0 + \lambda \hat{V}] (t - t_0) \right\} = O^{(0)}(t - t_0) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \lambda \hat{V} (t - t_0) \right\} \quad (61-7)$$

انجام دهیم. تأکید می‌کنیم که (۶۱-۷) کاملاً نادرست است زیرا \hat{H} و \hat{V} جابه‌جاپذیر نیستند و اتحاد $e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}}$ فقط وقتی معتبر است که \hat{A} و \hat{B} جابه‌جاپذیر باشند. ربط دادن O به $O^{(0)}$ با یک تابع تحلیلی عمل "غیر ممکن است. با این وجود، اگر λ کوچک باشد، با یک سری پریشیده از توانهای λ معمولاً "امکان‌پذیر است. به دست آوردن ریاضیاتی یک چنین سری پیچیده‌تر از آن است که در اینجا نمایش داده شود، بنابر این ما فقط نتایج را ارائه می‌کنیم*. سری مذبور به صورت

$$O(t, t_0) = O^{(0)}(t, t_0) + \sum_{n=1}^{\infty} O^{(n)}(t, t_0) \quad (62-7)$$

* برای به دست آوردن این سری به کتاب زیر مراجعه کنید

A. Messiah, "Quantum Mechanics," Volume II, PP. 722-724, Wiley, New York, 1962.

هم چنین به پیوست ب از کتاب حاضر نیز رجوع کنید.

در می آید که در آن

$$O^{(n)} = \left(\frac{\lambda}{i\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t d\tau_n \int_{t_0}^{\tau_n} d\tau_{n-1} \cdots \int_{t_0}^{\tau_2} d\tau_1 \\ \times O^{(0)}(t, \tau_n) \hat{V}(\tau_n) O^{(0)}(\tau_n, \tau_{n-1}) \cdots O^{(0)}(\tau_2, \tau_1) \hat{V}(\tau_1) O^{(0)}(\tau_1, t_0)$$

معادله (۶۲-۷) نمایش دقیقی از جواب (۶۵-۶ الف) است به شرط اینکه سری همگرا باشد. این سری وقتی λ کوچک باشد، به طوری که چند جمله اول تقریب خوبی را بهما بدهند، خیلی مفید خواهد بود. وقتی $0 \rightarrow \lambda$ ، $O^{(0)}$ تقلیل پیدا می کند.

به ترتیب انتگرالهای زمانی برای جمله مرتبه n ام $O^{(n)}$ ، یعنی $\tau_n > \tau_{n-1} > \dots > \tau_2 > \tau_1$ ، توجه کنیم. این نکته به این واقعیت مربوط می شود که، از نظر غیرنسبیتی، تحول با گذشت زمان فقط به پیش می رود. در وضعیتهای نسبیتی به پدیده هایی که در جهت منفی زمان انتشار می یابند می توان مفهوم فیزیکی نسبت داد*.

۱۰- گذارهای القاء شده به وسیله یک پریشیدگی ثابت

نخست موردی را در نظر بگیریم که در آن τ مستقل از زمان باشد. بعلاوه فرض کنیم که سیستم در آغاز (در $t_0 = 0$) در یکی از ویژه حالت های $|e^0\rangle$ ، مثلاً، باشد. این تحول حالت به وسیله

$$|\beta_i, t\rangle = O(t, t_0)|e_i^0\rangle$$

داده می شود. از (۶۵-۷) آنکه وقتی τ مستقل از زمان است، عملگر تحول تابعی از بازه زمانی $t_0 - t = \tau$ است، یعنی

$$O(t, t_0) = O(\tau)$$

احتمال مشاهده سیستم در یک ویژه حالت دیگر $|e^0\rangle$ ، مثلاً، پس از گذشت زمان τ با رابطه

* به عنوان مثال، به کتاب زیر مراجعه کنید

R.P. Feynman, The Theory of Positrons, phys. Rev. 76, 764 (1949).

$$\mathcal{P}_{ij}(\tau) = |\langle \varepsilon_j^0 | \beta_i(\tau) \rangle|^2 = |\langle \varepsilon_j^0 | \hat{U}(\tau) | \varepsilon_i^0 \rangle|^2 \quad (63-2)$$

داده می‌شود. به طور معادل، احتمال گذار از حالت α به حالت β بوسیله مجدور عنصر متناظر ماتریس عملکر تحول داده می‌شود. به تقارن نسبت به تعویض α و β توجه کنید. این نکته برگشت پذیری میکروسکوپیکی فرایند را نشان می‌دهد.

سپس رفتار این احتمال گذار را وقتی بازه زمانی به بینهایت میل می‌کند بررسی می‌کنیم.

آهنگ گذار بین حالت ε_i^0 و ε_j^0 را به صورت

$$R_{ij} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{d\mathcal{P}_{ij}(\tau)}{d\tau} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{d}{d\tau} |\langle \varepsilon_j^0 | \hat{U}(\tau) | \varepsilon_i^0 \rangle|^2 \quad (64-2)$$

تعریف می‌کنیم. با استفاده از نمایش $\hat{U}(\tau)$ به صورت سری، (۶۲-۲)، آهنگ گذار را به صورت

$$R_{ij} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{d}{d\tau} \left\{ \left| \langle \varepsilon_j^0 | \hat{U}^0 | \varepsilon_i^0 \rangle + \langle \varepsilon_j^0 | \sum_{n=1}^{\infty} \hat{U}^{(n)}(\tau) | \varepsilon_i^0 \rangle \right|^2 \right\} \quad (65-2)$$

به دست می‌آوریم. با این همه، با استفاده از

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon_j^0 | \hat{U}^0 | \varepsilon_i^0 \rangle &= \langle \varepsilon_j^0 | \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t - t_0) \right] | \varepsilon_i^0 \rangle \\ &= \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \varepsilon_i^0(t - t_0) \right] \langle \varepsilon_j^0 | \varepsilon_i^0 \rangle \end{aligned}$$

و با به خاطر داشتن اینکه وقتی $i \neq j$ باشد داریم $\langle \varepsilon_j^0 | \varepsilon_i^0 \rangle = 0$ ، نتیجه می‌گیریم

$$R_{ij} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{d}{d\tau} \left\{ \left| \langle \varepsilon_j^0 | \sum_{n=1}^{\infty} \hat{U}^{(n)}(\tau) | \varepsilon_i^0 \rangle \right|^2 \right\} \quad (66-2)$$

آنکه گذار از حالت α به حالت β شامل مجدور حاصل جمع بینهایت جمله است، که جمله n ام آن متناسب است با λ^n . وقتی $\lambda \rightarrow 0$ ، نتیجه می‌گیریم $R_{ij} \rightarrow 0$ و گذار متوقف می‌شود. بنابراین تنها عامل گذارها پدیده پریشیدگی است. نخست موردی را در نظر می‌گیریم که در آن λ نقدر کوچک است که تنها جمله $n=1$ محتاج به نگاهداری است. این مطلب مستقیماً منجر به آنچه که قاعده طلائی فرمی خوانده می‌شود، می‌گردد.

۱۱ - گذارهای مرتبه اول - قاعده طلائی فرمی

آنک گذار مرتبه اول از (۶۲-۶) با استفاده از فقط جمله $1 = n$ به دست می‌آید .
به این نتیجه می‌رسیم که این آنک باید عبارت باشد از

$$R_{ij} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{d}{d\tau} |\langle \varepsilon_j^0 | \hat{U}^{(1)}(\tau) | \varepsilon_i^0 \rangle|^2 \quad (\tau = t - t_0) \quad (62-7)$$

با استفاده از (۶۲-۶) داریم (برای \hat{V} مستقل از زمان)

$$\begin{aligned} \hat{U}^{(1)} &= \frac{\lambda}{i\hbar} \int_{t_0}^t d\tau_1 \hat{U}^{(0)}(t, \tau_1) \hat{V} \hat{U}^{(0)}(\tau_1, t_0) \\ &= \frac{\lambda}{i\hbar} \int_{t_0}^t d\tau_1 \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0(t - \tau_1)\right] \hat{V} \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0(\tau_1 - t_0)\right] \end{aligned}$$

بنابراین آنک گذار مرتبه اول در (۶۲-۷) می‌تواند به صورت

$$\begin{aligned} R_{ij} &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{d}{d\tau} \left| \langle \varepsilon_j^0 | \frac{\lambda}{i\hbar} \int_{t_0}^t d\tau_1 \right. \\ &\quad \times \left. \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0(t - \tau_1)\right] \hat{V} \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0(\tau_1 - t_0)\right] | \varepsilon_i^0 \rangle \right|^2 \end{aligned}$$

نوشته شود . با استفاده از رابطه

$$\exp\left[\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0(\tau_1 - t_0)\right] | \varepsilon_i^0 \rangle = \exp\left[\frac{i}{\hbar} \varepsilon_i^0(\tau_1 - t_0)\right] | \varepsilon_i^0 \rangle$$

پس از قدری مرتبکردن ، داریم

$$\begin{aligned} R_{ij} &= \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{d}{d\tau} \left| \exp\left[-\frac{i}{\hbar} (\varepsilon_j^0 t - \varepsilon_i^0 t_0)\right] \langle \varepsilon_j^0 | \hat{V} | \varepsilon_i^0 \rangle \right. \\ &\quad \times \left. \int_{t_0}^t \exp\left[\frac{i}{\hbar} (\varepsilon_j^0 - \varepsilon_i^0) \tau_1\right] d\tau_1 \right|^2 \end{aligned}$$

انتگرال ساده و سرراست است و به عنوان تعریف واگذار می‌شود (رک مسئله ۷-۱۰) که نشان

دهید نتیجه می‌تواند به صورت

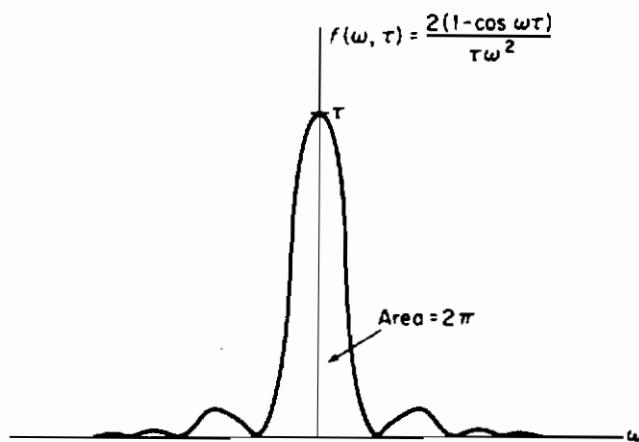
$$R_{ij} = \frac{\lambda^2}{\hbar^2} |V_{ji}|^2 \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{d}{d\tau} g(\omega_{ji}, \tau) \quad (68-7)$$

ساده شود که در آن

$$g(\omega, \tau) = \frac{2(1 - \cos \omega\tau)}{\omega^2} \quad , \quad \omega_{ji} = \frac{\varepsilon_j^0 - \varepsilon_i^0}{\hbar}$$

نخست رفتار تابع $g(\omega, \tau)$ را به منظور درک معنی آن مطالعه می‌کنیم . با وارد کردن تابع کمکی $f(\omega, \tau) = g(\omega, \tau)/\tau$ ، می‌بینیم که $f(\omega, \tau)$ بهزای τ ثابت‌پذیر تابع نوسانی از ω است (شکل ۷-۵) . قله آن در $\omega = 0$ است و مقدار بیشینه در آنجا عبارت است از

$$f(0, \tau) = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{2(1 - \cos \omega\tau)}{\tau\omega^2} \rightarrow \tau$$



شکل (۷-۵) تابع $f(\omega, \tau)$

بنابراین قله تابع $f(\omega, \tau)$ با افزایش τ به سمت بینهایت میل می‌کند . سطح زیر منحنی برابر است با

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\omega, \tau) d\omega = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2(1 - \cos \omega\tau)}{\tau\omega^2} d\omega = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2(1 - \cos \theta)}{\theta^2} d\theta = 2\pi$$

* این شکل مبهم می‌تواند به سادگی با استفاده از قاعده هوپیتال محاسبه شود .

که در آن قرار داده ایم $\omega = \theta$. نکته مهم این است که سطح زیر منحنی مستقل از τ است. در نتیجه وقتی $\tau \rightarrow \infty$ ، قله مرکزی بالا می‌رود و پهنهای منحنی در شکل (۶۸-۷) در حوالی $\omega = 0$ کاهش می‌یابد به طوری که مساحت زیر منحنی ثابت بماند. اما این دقیقاً همان خاصیت تابع دلتا است و می‌توان برابر سازی زیر را انجام داد

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} f(\omega, \tau) = 2\pi\delta(\omega) \quad \text{یا} \quad \lim_{\tau \rightarrow \infty} g(\omega, \tau) = 2\pi\tau\delta(\omega)$$

* بالاخره آهنگ‌گذار در (۶۸-۷) می‌شود

$$\begin{aligned} R_{ij} &= \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar^2} |V_{ji}|^2 \delta(\omega_{ji}) & \left(\omega_{ji} = \frac{\varepsilon_j^0 - \varepsilon_i^0}{\hbar} \right) \\ &= \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar} |V_{ji}|^2 \delta(\varepsilon_j^0 - \varepsilon_i^0) \end{aligned} \quad (69-2)$$

بنابراین آهنگ‌گذار تنها بین حالت‌های هم انرژی، یعنی $\varepsilon_i^0 = \varepsilon_j^0$ ، غیر صفر است. نتیجه می‌گیریم که یک پریشیدگی ایستا (مستقل از زمان) تنها باعث گذارهایی می‌شود که انرژی را پایسته نگاه می‌دارند و نه به سیستم تاپریشیده انرژی می‌افزاید و نه از آن می‌کاهد. توجه خودرا به گذارهای معطوف می‌کنیم که حالت نهایی قسمتی از یک پیوستار باشد. این مطلب بخصوص در فرایندهای پراکندگی که در آنها پتانسیل پریشیدگی مسئول گذارهای بین حالت‌های ذرات از دارد است. حالت‌های اخیر، البته، جزو طیف پیوسته‌اند. عموماً، فرایندهای اساسی از قبیل واکنشهای شیمیائی و هسته‌ای و برهم‌کنشهای فوتوالکتریکی شامل حالت‌های هستند که در طیف پیوسته قرار دارند.

در اینجا حالت‌های $\langle \varepsilon_i^0 |$ و $\langle \varepsilon_j^0 |$ با نمادهای $\langle \mathbf{m} |$ و $\langle \mathbf{n} |$ نمایش می‌دهیم و با استفاده از نماد گذاریهای قراردادی، (۶۹-۲) را به صورت

$$R_{mn} = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar} \int |\langle \mathbf{m} | \hat{V} | \mathbf{n} \rangle|^2 \delta(\varepsilon_m - \varepsilon_n) d\mathbf{m}$$

بازن‌نویسی می‌کنیم. وجود انتگرال لازم است زیرا در طیف پیوسته باید آهنگ‌گذار به یک گروه از حالت‌های نهایی $\langle \mathbf{m} |$ ، به جای یک حالت تک‌گسسته، را در نظر بگیریم. انتگرال فوق می‌تواند با استفاده از

$$d\mathbf{m} = \rho(\mathbf{m}) d\varepsilon_m \quad (70-2)$$

* تابع دلتا دارای خاصیت $\delta(ax) = |a|^{-1} \delta(x/a)$ است.

به انگرالی روی انرژی (به جای انتگرال روی حالت‌های نهایی) تبدیل شود. در این رابطه $\rho(m) = dm/d\epsilon_m$ بیانگر تعداد حالت‌های پیوستار بر واحد بازهٔ انرژی، یعنی، چگالی حالتها است. در نهایت، آنکه دار خواهد شد

$$R_{nm} = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar} \int |\langle m | V | n \rangle|^2 \delta(\epsilon_m - \epsilon_n) \rho(m) d\epsilon_m$$

یا، با استفاده از خاصیت غربالی تابع دلتا،

$$R_{nm} = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar} [|V_{mn}|^2 \rho(m)]_{\epsilon_m = \epsilon_n} \quad (21-2)$$

معادله (21-2) همان قاعدهٔ طلائی فرمی است و بیان می‌دارد که آنکه دار

(الف) فقط بین حالت‌های پیوستهٔ هم‌انرژی غیر صفر است.

(ب) متناسب با محدودهٔ عنصر ماتریس پریشیدگی‌ای است که این حالتها را به‌پاک‌پر می‌بینند.

(ج) متناسب با چگالی حالت‌های نهایی است.

در فصل ۸، قاعدهٔ طلائی را به‌مسائل پراکندگی که در آنها پتانسیل پراکندگی به عنوان یک پریشیدگی که باعث گذار از یک ویژهٔ حالت اولیهٔ تکانه، $\langle k |$ ، به یک ویژهٔ حالت نهایی، $\langle l |$ ، می‌شود اعمال خواهیم کرد. تغییر در بردار تکانه (که انرژی آن تغییر نکرده است) بیانگر پراکندگی کشان است و آنکه پیشگویی شده به‌وسیله (21-2) ارتباط خیلی نزدیکی با مقطع مؤثر دارد.

۱۲- تصحیحات مرتبه‌های بالاتر قاعدهٔ طلائی

قاعدهٔ طلائی فرمی (21-2) با استفاده از تنها جملهٔ مرتبه‌اول بسط عملکردن به دست آمد. غالباً نظریهٔ مرتبه‌اول ناکافی است. به دست آوردن جملات مرتبهٔ بالاتر برای منظور ما خیلی پیچیده است. اما، نتیجهٔ آن به قرار زیر است*

* برای بحث درباره (22-2) به کتاب زیر مراجعه کنید

L.P. Landau and E.M. Lifshitz, "Quatum Mechanics,"
2nd ed., Section 43. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts
1965.

$$R_{nm} = \frac{2\pi}{\hbar} \left[\left| \sum_{j=1}^{\infty} \lambda^j M_{nm}^{(j)} \right|^2 \rho(m) \right]_{\varepsilon_n = \varepsilon_m} \quad (22-2)$$

که در آن

$$\begin{aligned} M_{nm}^{(1)} &= V_{nm} \\ M_{nm}^{(2)} &= \int \frac{V_{nl} V_{lm} dI}{\varepsilon_m - \varepsilon_l} \\ M_{nm}^{(3)} &= \int \frac{V_{nl} V_{l'l} V_{l'm} dI dI'}{(\varepsilon_m - \varepsilon_l)(\varepsilon_m - \varepsilon_{l'})} \\ &\vdots \end{aligned}$$

$M^{(j)}$ ها دامنه‌های گذار نامیده می‌شوند . هر دامنه در λ^j ضرب می‌شود و برای پریشیدگی‌های به حد کافی ضعیف تنها چند دامنه اول در (22-2) کافی است . اگر اتفاقاً $M_{nm}^{(1)}$ صفر شود (این مورد گاهی اوقات پیش می‌آید) ، جمله عمدۀ (مرتبه دوم) در قاعده طلائی می‌دهد

$$R_{nm} = \frac{2\pi}{\hbar} [\lambda^4 |M_{nm}^{(2)}|^2 \rho(m)]_{\varepsilon_n = \varepsilon_m} \quad (23-2)$$

"عمولاً" لازم نخواهد بود که از مرتبه اول فراتر رویم .

اهمیت قاعده طلائی فرمی، (2 - ۲) و (2 - ۲۱)، در کاملانه " عمومی بودن آن است . توجه کنیم که در هیچ کجا نمایش مختصه‌ای (مکانیک موجی) در بهداشت - آوردن آن به کار نرفته است . تعدادی از فرایندهای بنیادی پراکندگی وجود دارد که در آنها ۲ مشاهده‌پذیر مناسبی نیست .

یک مثال خیلی مهم که قبلان نیز مورد بررسی قرار گرفته است برهمنکنش وابسته به اسپین است . در پراکندگی هسته‌ای، نیروهای وابسته به اسپین نقش مهمی بازی می‌کنند . یک مثال دیگر در برهمنکش‌های فوتالکتریکی، یعنی، پراکندگی فوتونها و الکترونها، رخ می‌دهد . همان‌طور که در فصل ۱۲ خواهیم دید ، کوانتش میدان تابشی که مستقیماً منجر به مفهوم فوتونی می‌شود عملکردن را در بر ندارد . در این مثال فوق‌الذکر مکانیک موجی برای توصیف کامل پراکندگی یا فرایند گذار نامناسب است . اما قاعده طلائی فرمی کاملانه " عمومی است و محتملاً" متداول‌ترین فرمول برای محاسبه آنگهای گذار (یا مقطع موئی) در فرایندهای بنیادی است .

۱۳- گذارهای القاء شده بهوسیله یک پریشیدگی هماهنگ

یکی از معمول‌ترین راههای القاء گذار بین حالت‌های مانای یک سیستم کوانتومی اعمال یک پریشیدگی هماهنگ است. به عنوان مثال، میدانهای الکترونیکی و مغناطیسی نوسانی وابسته به نور می‌توانند باعث گذار بین حالت‌های مانا در اتمها شوند. رابطه (۶۴-۷) را در مورد گذارهای بین حالت‌های گستته $\langle \varepsilon_i |$ و $\langle \varepsilon_j |$ که بهوسیله یک پریشیدگی هماهنگ به‌شکل

$$\lambda \hat{V} = \lambda \hat{V}(t) \cos \omega t = \lambda \hat{V}(t) \frac{1}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$$

القاء شده‌اند به‌کار خواهیم برد. روش‌ها اصولاً "شبیه به‌روش‌هایی هستند که در مورد مستقل از زمان به‌کار رفتنند. آنکه گذار با مقایسه با (۶۹-۷) عبارت است از

$$R_{ij}(\omega) = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar^2} |V_{ij}|^2 \frac{1}{2} [\delta(\omega_{ji} - \omega) + \delta(\omega_{ji} + \omega)] \quad (74-7)$$

آنکه گذار تابع فرکانس است و به‌جز در $|\omega_{ji}| = \omega$ صفر است. این مثالی از تشدید مکانیک کوانتومی است که در آن سیستم کوانتومی متاثر نمی‌شود مگر اینکه فرکانس پریشیده کاملاً بر یکی از فرکانس‌های برانگیختگی

$$\omega = |\omega_{ji}| = \frac{|\varepsilon_j - \varepsilon_i|}{\hbar}$$

"منطبق" شود.

در عمل غیرممکن است یک موج تکرینگ واقعی ایجاد کرد. از این‌رو پریشیدگی معمولاً به‌شکل یک بسته موج

$$\lambda \hat{V}(t, t) = \lambda \hat{V}(t) \int_0^\infty A(\omega) \cos \omega t d\omega$$

است که نمایشگر برهم‌نهشی از فرکانس‌های مختلف است. بنابراین آنکه گذار کل باید به صورت انتگرالی روی فرکانس‌های فرودی نوشته شود، یعنی،

$$R_{ij} = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar^2} |V_{ij}|^2 \frac{1}{2} \int_0^\infty |A(\omega)|^2 [\delta(\omega_{ji} - \omega) + \delta(\omega_{ji} + \omega)] d\omega \quad (75-7)$$

اگر $\varepsilon_i > \varepsilon_j$ باشد ($0 > \varepsilon_j - \varepsilon_i$)، تابع دلتای دوم صفر می‌دهد و خاصیت غربالی‌تابع دلتای

اول می‌دهد

$$R_{ij} = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar^2} |V_{ij}|^2 \frac{1}{2} |A(\omega_{ji})|^2 \quad (\epsilon_j > \epsilon_i) \quad (26-2)$$

آنگذار در (26-2) فرایندی را توصیف می‌کند که در آن سیستم کوانتومی از یک حالت با انرژی پائین تر به یک حالت با انرژی بالاتر می‌رود؛ این فرایند فرایند جذب القائی است که در آن انرژی از چشمde پریشنده به سیستم منتقل می‌شود. در اینجا آنگ مناسب باشد (مجذور دامنه) پریشیدگی در فرکانس تشدیدگر ω و با مجدور عنصر ماتریس $|V_{ij}|^2$ است.

اگر $\epsilon_j < \epsilon_i$ باشد ($0 < \omega$)، تابع دلتای اول صفر می‌دهد و تابع دلتای دوم می‌دهد

$$R_{ij} = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar^2} |V_{ij}|^2 \frac{1}{2} |A(\omega_{ji})|^2 \quad (\epsilon_j < \epsilon_i) \quad (27-2)$$

بنابراین آنگ سیل القائی با آنگ جذب بین دو تراز یکسان است. این ارتباط مثالی است از اصل برگشت‌پذیری میکروسکوپیکی.

بنابراین وقتی یک سیستم در معرض یک پریشیدگی هماهنگ شامل فرکانس ω قرار گیرد، گذارهای بین ترازهای ϵ_j و ϵ_i القاء می‌شوند. در مورد جذب، گذارها با یک افزایش در انرژی سیستم کوانتومی همراه است، سرچشمde این انرژی همان پریشیدگی است. برای گسیل، انرژی به چشمde پریشنده داده می‌شود. اگر عنصر ماتریسی که حالات را بهم ربط می‌دهد صفر شود، گذار اتفاق نمی‌افتد (در مرتبه اول) و اصطلاحاً "گفته می‌شود که گذار ممنوع است.

۱۴- گذارهای تابشی در هیدرژن

روابط (26-2) و (27-2) را به گذارهایی در هیدرژن که به میله تابش الکترومغناطیسی حرارتی (جسم سیاه) القاء می‌شوند اعمال می‌کنیم. اگر طول موج تابش در مقایسه با ابعاد سیستم اتمی بزرگ باشد*، از تغییرات فضایی میدان الکتریکی در تقریب اول می‌توان صرفنظر

* ابعاد یک اتم در حدود $10^{-8} \text{ cm} \sim 10^{-9} \text{ m}$ است در حالی که تابش مورد توجه معمولاً "دارای طول موج $cm^{-5} \sim 10^{-5} \text{ m}$ می‌باشد.

* کرد. در این صورت پریشیدگی معادل است با یک میدان الکتریکی نوسانی یکنواخت $E = E_0 \cos \omega t$. پتانسیل پریشنده شبیه به پتانسیلی است که در اثر استارک وجود داشت یعنی، $p = -e\mathbf{r} \cdot \nabla = eE \cdot \mathbf{r} = eE_0 \cdot \mathbf{r} \cos \omega t$ ، که در آن ω فرکانس تابش فرودی است. چون \mathbf{r} معرف گشتاور دوقطبی اتم هیدروژن است، بنابراین ما تقریبی را اعمال کرده‌ایم که تقریب دوقطبی الکتریکی نامیده می‌شود. این تقریب نیز تنها وقتی معتبر است که طول موج تابش در مقایسه با ابعاد اتم بزرگ باشد.

آنگ جذب و گسیل القائی می‌شود

$$R_{ij} = \frac{2\pi e^2}{\hbar^2} \frac{1}{2} |\mathbf{E}_0(\omega_{ij}) \cdot \langle i | \mathbf{r} | j \rangle|^2 \quad (78-2)$$

چون تابش حرارتی (جسم سیاه) به طور کاتورهای قطبی شده است باید روی سه مؤلفه \mathbf{E} متوسط گرفت و نوشت

$$R_{ij} = \frac{2\pi e^2}{\hbar^2} \frac{1}{2} \frac{|E_0(\omega_{ij})|^2}{3} |\langle i | \mathbf{r} | j \rangle|^2 \quad (79-2)$$

که در آن

$$|\langle i | \mathbf{r} | j \rangle|^2 = |x_{ij}|^2 + |y_{ij}|^2 + |z_{ij}|^2$$

چگالی انرژی تابشی به وسیله رابطه $\rho_{\text{rad}} = (|E|^2/4\pi) \rho_{\text{rad}}$ به میدان الکتریکی مربوط می‌شود، به طوری که آنگ در نهایت خواهد شد

$$R_{ij} = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2} \rho_{\text{rad}}(\omega_{ij}) |\langle i | \mathbf{r} | j \rangle|^2 \quad (80-2)$$

بنابراین گذارهای تابشی تنها در صوتی در مرتبه اول رخ می‌دهند که

(الف) تابش با فرکانس برانگیختگی موجود باشد، و

(ب) عنصر ماتریس $\langle j | \mathbf{r} | i \rangle$ صفر نباشد.

شرط (ب) منجر به قواعدی می‌شود که اصطلاحاً "قواعد گزینش" نامیده می‌شوند و برگذارهای مجاز و ممنوع حاکمند. به عنوان مثال، در یک مسئله نیروی مرکزی که در آن کتهای $|nlm_l m_s\rangle$ سیستم را مشخص می‌کنند، گذارها تنها بین حالت‌هایی رخ می‌دهند که در آنها عنصر ماتریس $\langle n'l'm'_l m'_s | \mathbf{r} | nlm_l m_s \rangle$ صفر نباشد.

* در این تقریب دوقطبی الکتریکی اثرات میدان مغناطیسی قابل اغماض است.

عنصر ماتریس دوقطبی عبارت است از

$$\begin{aligned} z_{ij} &= \int \psi_{n'l'm_l'm_s'}^* r \cos \theta \psi_{nl'm_l} dr \\ &= \int R_{n'l'} r R_{nl} r^2 dr \int_{-1}^1 du P_{l'm_l}(u) u P_{lm_l}(u) \int_0^{2\pi} e^{-im_l \phi} e^{im_s \phi} d\phi \langle m_s' | m_s \rangle \quad (81-2) \end{aligned}$$

دو حاصلضرب آخونشان می‌دهند که

$$z_{ij} \propto \delta_{m_l m_l'} \delta_{m_s m_s'}$$

بنابراین z_{ij} فقط برای گذارهایی وجود دارد که در آنها $\Delta m_l = 0$ و $\Delta m_s = 0$. انتگرال θ (یا μ) می‌تواند با استفاده از یک اتحاد برای توابع وابسته لوژاندر، یعنی،

$$\mu P_{lm_l} = \left[\frac{l - m_l + 1}{2l + 1} \right] P_{l+1, m_l} + \left[\frac{l + m_l}{2l + 1} \right] P_{l-1, m_l}$$

محاسبه شود. با بردن در (۸۱-۲) و با استفاده از تعامد توابع وابسته لوژاندر، نتیجه می‌گیریم

$$z_{ij} \propto \delta_{m_l m_l'} \delta_{m_s m_s'} [\delta_{l, l'+1} + \delta_{l, l'-1}]$$

z_{ij} به جز برای $l = \pm \Delta m_l$ صفر است. ممکن است محدودیتهای دیگری ناشی از انتگرال شعاعی وجود داشته باشد اما این محدودیتها بسته به مسئله نیروی مرکزی مورد نظر تغییر می‌کنند.

اثبات اینکه عنصرهای x_{ij} و y_{ij} منجر به قواعد گزینش $l = \pm 1$ و $m_l = \pm 1$ و $\Delta m_s = 0$ می‌شوند به عنوان تمرین و اگذار می‌شود. به طور خلاصه، می‌بینیم که در تقریب دوقطبی الکتریکی، سیستمهایی که به وسیله حالت‌های $|nlm_l m_s\rangle$ مشخص می‌شوند متحمل گذارهای تابشی‌ای می‌شوند که در آنها قواعد گزینش $l = \pm 1$ و $m_l = 0, \pm 1$ و $\Delta m_s = 0$ برقرار است. تمام گذارهای دیگر در مرتبه اول ممنوع هستند. هم چنین می‌توان قواعد گزینش $l = \pm 1$ و $\Delta m_s = 0, \pm 1$ را برای طرحواره $|nljm_j\rangle$ اثبات کرد. هنگ (۷۵-۸) به شرطی معتبر است که هم طول موج تابش بزرگ باشد (تقریب دوقطبی) و هم شدت تابش کم باشد (پریشیدگی مرتبه اول).

اکنون، با استفاده از یک استدلال آماری، نشان خواهیم داد که (۸۱-۲) در واقع ناکامل است. در واقع همین استدلال جملات از قلم افتاده در فرایند گذار را ایجاد می‌کند.

استدلال به صورت زیر است:

مجموعه‌ای از سیستم‌های کوانتومی، مثلاً اتمها، در نظر بگیریم که هر کدام از آنها می‌توانند فقط در یکی از دو حالت $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ یا $\langle \psi | \bar{\psi} \rangle = 0$ قرار گیرند. فرض کنیم که اتمها و تابش‌های با فرکانس تشدید ω_i در یک جعبه قرار داشته باشند. به علاوه، فرض کنیم که در آغاز تعداد اتمها موجود در هر دو حالت باهم برابرند، یعنی $N_i = N_j$. از اصل بزرگشتن پذیری میکروسکوپیکی، نتیجه می‌گیریم

$$\frac{dN_{i \rightarrow j}}{dt} = \frac{dN_{j \rightarrow i}}{dt}$$

بنابراین ترازها هم جمعیت باقی می‌مانند. چون در مجموع هیچ انرژی توسط اتمها جذب یا گسیل نمی‌شود، حالت تابش بدون تغییر باقی می‌ماند. متأسفانه، این نتایج با مشاهدات تجربی ناسازگاراند. در فصل ۱ دیدیم که توزیع فرکانس تابش در یک کاواک به سمت چگالی طیفی جسم سیاه‌که فقط به وسیله دمای دیواره‌های محفظه، و نه به وسیله ترکیب محفظه یا ثابت‌های آن، تعیین می‌شود میل می‌کند.

هم چنین می‌توان تحقیق کرد که اتمها داخل جعبه به یک توزیع تعادل می‌رسند که با قانون بولتزمن سازگار است. نسبت جمعیت‌های ترازها باید به سمت

$$\frac{N_j}{N_i} = \frac{e^{-\epsilon_j/kT}}{e^{-\epsilon_i/kT}} \quad (82-2)$$

میل کند. چون ترازهای با انرژی پائین‌تر میل دارند که پر جمعیت‌تر شوند، باید فرایندی وجود داشته باشد که گذارهای از انرژی بالاتر به انرژی پائین‌تر را تسهیل نماید. به علاوه چون باید، صرفنظر از حالت اولیه تابش، به توزیعی نظیر توزیع موجود در (۸۲-۲) برسیم نتیجه می‌گیریم که این فرایند باید مستقل از (ω_{rad}) باشد و می‌تواند فقط تابع سیستم اتمی باشد. لذا گذارهای تابشی باید به طور خود به خود از حالت‌های با انرژی بالاتر به حالت‌های با انرژی پائین‌تر، حتی در غیاب تابش، صورت گیرند. اگر از یک حالت معینی گذار نتواند به طور خود به خود صورت گیرد، آن حالت باید حالت پایه با حالت با پائین‌ترین انرژی باشد. توضیح منشاء این گسیلهای خود به خود و محاسبه آهنگ آن نمی‌توانند تنها با استفاده از مکانیک کوانتومی ماده انجام گیرند.

با این وجود، دو روش وجود دارد که عموماً برای به دست آوردن این آهنگ "به کار برده می‌شوند. یکی از آنها که دقیق‌تر است متنکی به این واقعیت است که یک پریشیدگی تابشی

وابسته به زمان دارای هویت مخصوص به خود است و تابع قوانین نظریه کوانتومی است، کوانتش این میدان تابشی مستقیماً "به مفهوم کوانتای نور یا فوتون منجر می‌شود". علاوه بر این، یک چنین کوانتشی به طور کامل "طبیعی منجر به آهنگ‌های خودبهخودی و هم‌چنین آهنگ‌های القائی می‌شود. بنابراین کل سیستم تشکیل می‌شود از ماده به اضافه تابش که انرژی بین آنها به صورت فوتون مبادله می‌شود. بحث مشروح‌تر این روش را به فصل ۱۲ موكول می‌کنیم.

برای مقصود فعلی ما می‌توان آهنگ خودبهخودی را با استفاده از روش آماری به دست آورد. در حالی که این روش قادر دقت به نظرمی‌آید، با این وجود معتبراست و منجر به همان نتایجی می‌شود که از روش بحث شده در بالا به دست می‌آید.

۱۵ - دیدگاه اینشتین در گسیل خودبهخود - توازن دقیق

برای تعقیب دیدگاه اینشتین، مناسب است که آهنگ القائی (جذب و گسیل) در (۸۰-۲) را به صورت

$$R_{ij}^{(ind)} = B_{ij} \rho_{rad}(\omega_{ij})$$

بنویسیم که در آن

$$B_{ij} = \frac{4\pi^2}{3} \frac{e^2}{\hbar^2} |\langle \epsilon_i | r | \epsilon_j \rangle|^2 \quad (83-2)$$

ضریب "B" اینشتین نامیده می‌شود. به‌طور مشابه آهنگ خودبهخودی برای گذار از $\langle \epsilon_j |$ به $\langle \epsilon_i |$ را به صورت

$$R_{ij}^{(spont)} = A_{ij} \quad (\epsilon_j > \epsilon_i) \quad (84-2)$$

وارد می‌کنیم که در آن روز ضریب "A" نامیده می‌شود. تعداد اتصالاتی که (در واحد زمان) از $\langle \epsilon_i |$ به $\langle \epsilon_i |$ ، با $\epsilon_i > \epsilon_j$ ، عبور می‌کنند عبارت است از

$$\begin{aligned} \frac{dN_{j \rightarrow i}}{dt} &= N_j [R_{ij}^{(ind)} + R_{ij}^{(spont)}] \\ &= N_j [B_{ij} \rho_{rad}(\omega_{ji}) + A_{ij}] \end{aligned} \quad (85-2)$$

هم‌چنین، تعدادی که از انرژی پائین‌تر به بالاتر می‌دونند ($\epsilon_i > \epsilon_j$) عبارت است از

$$\frac{dN_{i \rightarrow j}}{dt} = N_i R_{ij}^{(\text{ind})} = N_i B_{ij} \rho_{\text{rad}}(\omega_{ji}) \quad (86-2)$$

وقتی تعادل حرارتی برقرار شود، داریم

$$\frac{dN_{i \rightarrow j}}{dt} = \frac{dN_{j \rightarrow i}}{dt}$$

با

$$N_j [B_{ij} \rho_{\text{rad}}(\omega_{ji}) + A_{ij}] = N_i B_{ij} \rho_{\text{rad}}(\omega_{ji}) \quad (87-2)$$

به علاوه، در حالت تعادل نسبت جمعیتها با قانون بولتزمن داده می‌شود

$$\frac{N_j}{N_i} = \frac{e^{-\epsilon_j/kT}}{e^{-\epsilon_i/kT}} = e^{-\hbar\omega_{ji}/kT} \quad \left(\omega_{ji} = \frac{\epsilon_j - \epsilon_i}{\hbar} \right) \quad (88-2)$$

با ترکیب (87-2) و (88-2) و حل آن برای ρ_{rad} ، خواهیم داشت

$$\rho_{\text{rad}}(\omega_{ji}) = \frac{A_{ij}}{B_{ij}} \frac{1}{e^{\hbar\omega_{ji}/kT} - 1} \quad (89-2)$$

بالاخره، انتظار داریم که چگالی طیفی تعادل با قانون پلانک

$$\rho(\omega, T) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{e^{+\hbar\omega/kT} - 1} \quad (90-2)$$

مطابقت داشته باشد. از مقایسه (89-2) و (90-2) مشاهده می‌شود که

$$\frac{A_{ij}}{B_{ij}} = \frac{\hbar\omega_{ij}^3}{\pi^2 c^3}$$

در نتیجه

$$A_{ij} = \frac{\hbar\omega_{ij}^3}{\pi^2 c^3} B_{ij} \quad (91-2)$$

توجه کنیم که توازن دقیق آماری منجر به رابطه‌ای بین ضرایب A و B می‌شود، اما اطلاعاتی در مورد ساختار فردی آنها نمی‌دهد. چون زیرا B_{ij} قبلًا در (83-2) به دست آمد است، هنگ

خودبهخودی به صورت زیر به دست می‌آید

$$\begin{aligned} R_{ij}^{(\text{spont})} &= A_{ij} = \frac{\hbar\omega_{ji}^3}{\pi^2 c^3} \frac{4\pi^2}{3} \frac{e^2}{\hbar^2} |\langle \varepsilon_i | r | \varepsilon_j \rangle|^2 \\ &= \frac{4\omega_{ji}^3 e^2}{3\hbar c^3} |\langle \varepsilon_i | r | \varepsilon_j \rangle|^2 \end{aligned}$$

به طور خلاصه، مشاهده می‌کنیم که وقتی نظریه پریشیدگی به یک پریشیدگی هماهنگ اعمال شود، منجر به آهنگهای گذار ناکامل می‌شود. علت این مطلب این است که فرض کرده‌ایم می‌توان بستگی زمانی پریشیدگی در مجاورت یک سیستم کوانتومی را "کنترل" کرد. در مکانیک کلاسیکی، به ندرت وجود چنین قیدهای وابسته به زمانی مورد سوال قرار می‌گیرد. در نظریه کوانتومی، خود پریشیدگی در معرض محدودیت‌ها بیوی است که به وسیله اصل عدم قطعیت تحمیل می‌شوند. در حالی که استدلالهای آماری می‌توانند برای به دست آوردن آهنگهای خودبهخودی به کار روند، یک روش دقیق‌تر مستلزم کوانتش میدان پریشنه است.

۱۶- روش و ردشی (رالی - ریتس)

در روش‌های تقریبی بحث شده در بالا لازم است که ثابت پریشیدگی λ کوچک باشد. به علاوه، وقتی $0 \rightarrow \lambda$ جملات مرتبه اول برای نزدیک شدن به انرژیها و هم‌چنین ویژه‌حالتها، کافی هستند.

اکنون یک روش تقریبی در نظرخواهیم گرفت که مستقل از مقدار λ است و حتی در مردمی که پریشیدگی بزرگ باشد اعمال می‌شود. اما، تعیین دقت این روش مشکل است. به علاوه، این روش معمولاً "برای ارزشیابی ویژه مقدارها مفیدتر است تا برای ویژه تابعها.

روش و ردشی بخصوص در تعیین انرژی حالت پایه هامیلتونی وقتی این تراز جزء یک طیف گستته باشد مفید است. در این روش نیاز به لم زیر خواهیم داشت.

لم - فرض کنیم $\langle \alpha | \mathcal{H} | \alpha \rangle \geq \epsilon_1$ یک‌گت بهنجارشده و $\langle \alpha | \mathcal{H} | \alpha \rangle = \sum_i \alpha_i \epsilon_i$ باشد. در این صورت نامساوی زیر همیشه برقرار است

$$\langle \alpha | \mathcal{H} | \alpha \rangle \geq \epsilon_1 \quad (92-2)$$

اثبات - با بسط $\langle \alpha | \mathcal{H} | \alpha \rangle$ در ویژه پایه راست هنجار \mathcal{H} ، یعنی $\langle \alpha | \mathcal{H} | \alpha \rangle = \sum_i \alpha_i \epsilon_i$ طرف چپ (92-2) خواهد شد

$$\begin{aligned} \left\langle \sum_i^{\infty} \langle \varepsilon_i | a_i^* \right\rangle \hat{\mathcal{H}} \left\{ \sum_j^{\infty} a_j | \varepsilon_j \rangle \right\} &= \sum_{ij}^{\infty} a_i^* a_j \varepsilon_j \langle \varepsilon_i | \varepsilon_j \rangle \\ &= \sum_{ij}^{\infty} a_i^* a_j \varepsilon_j \delta_{ij} = \sum_{i=1}^{\infty} \varepsilon_i | a_i |^2 \end{aligned}$$

چون ε_1 انرژی حالت پایه است، داریم $\varepsilon_i \leq \varepsilon_1$ و

$$\langle \alpha | \hat{\mathcal{H}} | \alpha \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \varepsilon_i | a_i |^2 \geq \varepsilon_1 \sum_{i=1}^{\infty} | a_i |^2$$

کت $\langle \alpha |$ بهنجارشده فرض می‌شود، بنابراین جمع طرف راست برابر با یک است و لم اثبات شده است.

در مکانیک موجی، این نامساوی به شکل

$$I = \int \psi_{\alpha}^* \hat{\mathcal{H}} \psi_{\alpha} d\mathbf{r} \geq \varepsilon_1 \quad (93-7)$$

در می‌آید که در آن

$$\int \psi_{\alpha}^* \psi_{\alpha} d\mathbf{r} = 1$$

توجه کنیم که انتگرال طرف چپ بیانگر حد بالای انرژی دقیق حالت پایه $\hat{\mathcal{H}}$ ، بدون توجه به ψ_{α} است.

روش و ردشی را با انتخاب یکتابع آزمایشی "معقول" کهوابسته به N پارامتر ξ_1, \dots, ξ_N می‌باشد، یعنی،

$$\psi_{\text{trial}} = \psi_{\text{trial}}(\mathbf{r}, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N)$$

به کار خواهیم برد. با بردن شکل فرضی ψ_{trial} در (93-7)، عنصر ماتریس $\langle \alpha | \hat{\mathcal{H}} | \alpha \rangle$ خواهد شد.

$$\int \psi_{\text{trial}}^* \hat{\mathcal{H}} \psi_{\text{trial}} d\mathbf{r} = I(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) \quad (94-2)$$

از لم فوق نتیجه می‌شود که، بدون توجه به مقادیر عددی ξ ها، $I \geq \varepsilon_1$. بنابراین می‌توان با کمینه‌کردن I گمترین حد بالائی برای انرژی دقیق حالت پایه، ε_1 ، به دست آورد. این امر با پیدا کردن جواب N معادله

$$\frac{\partial I}{\partial \xi} \Big|_{\xi_i = \xi_{i0}} = 0 \quad (i = 1, \dots, N)$$

حاصل می‌شود. انرژی وردشی خواهد شد

$$\varepsilon_{\text{var}} = I_{\min}(\xi_{10}, \xi_{20}, \dots, \xi_{N_0}) \geq \varepsilon_1 \quad (95-7)$$

روش مذبور را با توابع آزمایشی متفاوتی تکرار می‌کنیم. کمترین انرژی وردشی نگاه داشته می‌شود و معرف بهترین تقریب برای ψ است. در عمل، با توابع آزمایشی‌ای که پارامترهای بسیاری داشته باشند نتایج بهتری بدست می‌آید، زیرا ψ انتعاف بیشتری نسبت به تغییرات خواهد داشت.

اگر تابع آزمایشی طوری باشد که بتواند با تغییر پارامترها کاملاً "بر تابع دقیق حالت پایه منطبق شود، کمینه مقدار انتگرال وردشی با انرژی دقیق حالت پایه متناظر خواهد بود. در واقع، اگر $\psi = \psi_{\text{var}}$ باشد، داریم

$$\langle \varepsilon_1 | \psi | \varepsilon_1 \rangle = \int \psi^* \mathcal{H} \psi \, dr = \varepsilon_1 \quad (96-7)$$

تغییرشکل تابع آزمایشی برای رسیدن به مقدار کمتری از I_{\min} و در نتیجه نزدیک‌تر به مقدار ε_1 ممکن است منجر به تقریب ضعیفتری برای ψ گردد. چون ψ معمولاً "شناخته شده نیست، تعیین دقت $(\xi_{N_0}, \dots, \xi_{10}, \psi_{\text{var}})$ مشکل است.

روش فوق را در محاسبه‌ای که شامل حالت پایه هیدرزن است روش خواهیم کرد*. البته، در این مورد می‌دانیم که جواب دقیق به صورت

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{a^{3/2}} e^{-r/a} \quad \varepsilon_1 = -e^2/2a \quad (a = \hbar^2/me^2) \quad (97-7)$$

است. بهنابراین ارزیابی دقت روش وردشی برای توابع آزمایشی متعددی امکان پذیر خواهد بود.

اگر یک تابع آزمایشی بهنجارشده به شکل

* به عنوان مثال به کتاب زیر مراجعه کنید

A. Messiah, "Quantum Mechanics", Volume II P. 767.

wiley, New York , 1962.

$$\psi_{\text{trial}}(r, \xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{\xi}{a}\right)^{3/2} e^{-\xi r/a} \quad (98-7)$$

به کار برمی‌رد، انتگرال وردشی به شکل

$$I(\xi) = \int \psi_{\text{trial}}^* \left\{ \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{r} \right\} \psi_{\text{trial}} d\mathbf{r} = \frac{-e^2}{2a} (\xi^2 - 2\xi) \quad (99-7)$$

در خواهد آمد. این انتگرال وقتی کمینه است که

$$\frac{\partial I}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_0} = \frac{-e^2}{2a} (2\xi_0 - 2) = 0 \quad \text{با} \quad \xi_0 = 1$$

انرژی وردشی عبات است از

$$I_{\min} = \frac{-e^2}{2a} = \varepsilon_1$$

که با (97-7) یکسان است. اینجا موردی است که تابع آزمایشی با ویژه تابع دقیق سازگار است. روش وردشی، وقتی $\xi_0 = 1$ باشد، منجر به یک مقدار کمینه برای انرژی می‌شود. این تابع وردشی و انرژی وردشی نمایشگر جواب دقیق هستند.

اگر یک تابع آزمایشی بهنجارشده (با یک پارامتر) به شکل

$$\psi_{\text{trial}}(r, \xi) = \left(\frac{\xi^5}{3\pi a^5}\right)^{1/2} r e^{-\xi r/a} \quad (100-7)$$

انتخاب کرده بودیم، انتگرال وردشی مشابه (99-7) می‌شد

$$I_{\text{var}}(\xi) = \frac{-e^2}{2a} \left(\xi - \frac{\xi^2}{3}\right)$$

مقدار کمینه در $\xi_0 = 1$ رخ می‌دهد که در آن I مقدار

$$\varepsilon_{\text{var}} = I_{\min} = \frac{-e^2}{2a} \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{3} \left(\frac{3}{2}\right)^2\right) = \frac{-3}{4} \frac{e^2}{2a} = 0.75\varepsilon_1 \quad (101-7)$$

را می‌گیرد و ۲۵ درصد خطأ ایجاد می‌کند. چون ε_1 منفی است، نتیجه می‌گیریم $\varepsilon_{\text{var}} > \varepsilon_1$

همان چیزی که لم فوق ایجاد می‌کند. تابع وردشی در (۱۰۵-۲) خواهد شد

$$\psi_{\text{var}}(r, \zeta) = \left[\frac{\left(\frac{3}{2}\right)^5}{3\pi a^5} \right]^{1/2} r e^{-3r/2a}$$

بالاخره، تابع آزمایشی

$$\psi_{\text{trial}}(r, \zeta) = \frac{1}{\pi a^{3/2}} \sqrt{\zeta} \frac{1}{[\zeta^2 + (r/a)^2]} \quad (102-2)$$

را در نظر می‌گیریم. انتگرال وردشی در این مورد می‌دهد

$$I_{\text{var}}(\zeta) = \frac{-e^2}{2a} \left[\frac{8\zeta - \pi}{2\pi\zeta^2} \right] \quad (103-2)$$

مشتق‌گیری نشان می‌دهد که $\zeta_0 = \pi/4$ و

$$I_{\min} = \frac{8\varepsilon_1}{\pi^2} \simeq 0.8\varepsilon_1 \quad (104-2)$$

این بالغ بر ۲۵ درصد خطأ می‌شود. جالب است که تابع آزمایشی به‌ظاهر ضعیفتر (۱۰۲-۲) "علا" منجر به انرژی کمتر و در نتیجه درست‌تر از تابع موجود در (۱۰۵-۲) می‌شود. روش وردشی بخصوص وقتی که انرژی‌های دقیق حالت پایه مورد نیازاند مفید است. ارزیابی دقت تابع آزمایشی متناظر مشکل است و اعتبار آن باید به درستی مورد سؤال قرار گیرد. روش فوق با قدری اصلاح می‌تواند به‌حالت‌های برانگیخته نیز اعمال شود، اما ما در اینجا این کار را نخواهیم کرد. در بحث‌هایی که از اتمهای چندالکترونی خواهیم داشت (فصل ۱۵) فرصت خواهیم یافت که روش وردشی را به‌کار ببریم.

زمان و فضا اجازه‌توصیف تمام روش‌های تقریبی را به‌دعا نمی‌دهد. در بین آنها روش‌های عددی وجود دارند که در عصر کامپیوتر بیشتر رواج یافته‌اند. یک روش تحلیلی مهم که در بحث ما فراموش شده است تقریب "انتگرال فاز" یا تقریب ونتزل - کرامز - بریلوون (WKB) است. بحث مختصر این روش در پیوست (الف) آورده شده است.

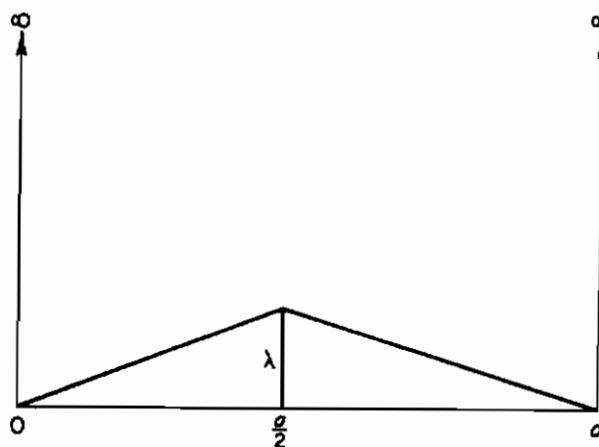
مسائل

۱-۷ انرژی حالت پایه را، تا تقریب مرتبه اول، برای ذره‌ای واقع در یک چاه یک بعدی پریشیده (شکل ۶-۶) زیر پیدا کنید

$$V = \frac{2\lambda}{a}x \quad , \quad 0 \leq x \leq \frac{1}{2}a \quad \text{برای}$$

$$V = 2\lambda \left(1 - \frac{x}{a}\right) \quad , \quad \frac{1}{2}a < x \leq a \quad \text{برای}$$

$$V = \infty \quad \text{جاهای دیگر}$$



نمودار شکل (۶-۶)

۲-۷ (الف) ویژه مقدارهای تقریبی انرژی (تا تقریب مرتبه دوم) ذره‌ای را که در پتانسیل $V = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 + \lambda x$ قرار دارد پیدا کنید.

(ب) این مسئله را با تکمیل کردن مربع در پتانسیل و تغییر متغیر مستقل، به‌طور دقیق حل کنید. نتیجه را با نتیجه فوق مقایسه کنید.

۳-۷ انرژی تقریبی حالت پایه یک ذره در پتانسیل $\lambda x^3 + \frac{1}{2}m\omega x^2 = V$ را پیدا کنید.

۴-۷ روابط (۲۴-۷) و (۲۵-۷) را برای بدست آوردن فرمولی برای تصحیحات مرتبه سوم ویژه مقدارهای انرژی بعکار برید.

۵-۷ (الف) نشان دهید که گشتاور دوقطبی الکتریکی هیدروژن در حالت پایه ناپریشیده $<100|$ صفر است.

(ب) نشان دهید که گشتاور دوقطبی وابسته به حالت‌های برانگیخته اول $<2^\pm|$

[که بهوسیله (۴۵-۷) داده شده‌اند] ، عبارت است از $\psi = p - 3ea$ و درامتداد محور z قرار دارد . آیا این گشتاور دائمی است یا القائی ؟ توضیح دهید .

۷-۶ معادله‌ای برای پیداکردن جابه‌جایی اثر استارک در چند تراز اول هیدرزن برای یک میدان ضعیف E بسازید (راهنمایی : جملات ساختار ریز را به عنوان پریشیدگی غالب، همان‌طور که در اثر غیرعادی زیمن انجام شد ، به کار برد . سپس ، فرض کنید که $\psi_{1,1,1,1,1,1}$ یک مجموعه ناپریشیده با انرژی ناپریشیده‌ای که فقط تابع n و z است باشد . بالاخره ماتریس پریشیدگی وابسته به میدان E نسبت به حالت‌های با l و m متفاوت را بسازید و قطری کنید .)

۷-۷ (الف) یک ذره بدون اسپین را در یک چاه مربعی دو بعدی

$$\psi = 0 \quad (0 \leq x, y \leq a)$$

$$\psi = \infty \quad (\text{جاها} \text{ دیگر})$$

در نظر بگیرید . انرژی‌ها و ویژه تابعهای حالت‌های پایه و برانگیخته‌ای را کم‌رفتگیک متغیرها در مختصات دکارتی ظاهر می‌شوند به دست آورید .
(ب) سپس فرض کنید که یک پریشیدگی به شکل

$$\psi = \lambda xy \quad , \quad \text{برای } 0 \leq x, y \leq a$$

اضافه می‌شود . ویژه تابعهای ناپریشیده و جابه‌جایی‌های مرتبه اول انرژی را برای حالت پایه و حالت‌های برانگیخته اول پیدا کنید .

۸-۷ رابطه $0 = [J \cdot S] \cdot L$ را تحقیق کنید .

۹-۷ با استفاده از نتایج (۲۴-۶) ، "مستقیما" نشان دهید که (۵۶-۷) درست است .

۱۰-۷ با انتگرال‌گیری و ساده‌کردن نشان دهید که (۶۸-۷) از معادله پیشین به دست می‌آید .

۱۱-۷ در روی یک دیاگرام تراز (شامل آثار ساختار ریز) برای هیدرزن ، چند گذار مجاز اول را در تقریب دوقطبی الکتریکی نشان دهید .

۱۲-۷ (الف) ثابت بنهنجارش را برای تابع آزمایشی

$$\psi(\xi, r) = Ne^{-\xi(r/a)^2} \quad (a = \hbar^2/m e^2)$$

که در آن ξ یک پارامتر وردشی است ، پیدا کنید .

(ب) این تابع را برای پیداکردن حد بالای انرژی حالت پایه هیدرزن به کار برد .

(ج) نتیجه مقایسه این انرژی با مقدار دقیق آن چیست ؟ (توجه کنید که این تابع

آزمایشی اصولاً" ویژه تابع حالت پایه نوسانگر هماهنگ است .)

۱۳-۷ نشان دهید که عناصر ماتریسی $\langle nlm_l m_s | \hat{x} | nl'm'_l m'_s \rangle$ و $\langle nlm_l m_s | \hat{y} | nl'm'_l m'_s \rangle$ تنها در صورتی غیر صفرند که داشته باشیم $l = l' = \pm 1$ ، $m_s = m'_s$ و $m_l = m'_l = \pm 1$

۱۴-۷ یک الکترون هیدرژنی (با صرف نظر کردن از اسپین) را در یک میدان الکتریکی یکنواخت در امتداد محور z در نظر بگیرید .

(الف) با استفاده از (۴-۷) ، معادله ویژه مقداری انرژی را برای الکترون در مختصات

$$\text{قطبی کروی بنویسید . قرار دهید } E = eE .$$

(ب) تحقیق کنید که تابع

$$\psi = \left(\frac{1}{\pi a^3} \right)^{1/2} e^{-r/a} \left[1 - \frac{\lambda \cos \theta}{e^2} \left(ar + \frac{r^2}{2} \right) \right]$$

(که در آن $a = \hbar^2/me^2$ است) معرف تقریب مرتبه اول ویژه تابع حالت پایه اتم هیدرژن است . این کار را مستقیماً با قراردادن نتیجه در معادله به دست آمده در بخش (الف) انجام دهید . ویژه مقدار درست تا مرتبه اول را پیدا کنید (راهنمایی: از جملات $\lambda^2 \varepsilon^{(2)}$ و بالاتر صرف نظر کنید)

(ج) با استفاده از (۲۵-۲) ، نشان دهید که تصحیح مرتبه دوم انرژی عبارت است از

$$\lambda^2 \varepsilon^{(2)} = -\frac{9}{4} a^3 E^2$$

(د) انرژی وابسته به یک گشتاور دوقطبی الکتریکی القائی یک سیستم به صورت

$$\varepsilon = -\frac{1}{2} \alpha E^2$$

بهیان شود که در آن α قطبی پذیری سیستم نامیده می‌شود . نشان دهید که قطبی پذیری اتم هیدرژن در حالت پایه‌اش عبارت است از

$$\alpha = \frac{9}{2} a^3$$

مراجع پیشنهادی

- Bethe, H. A., and Salpeter, E., "Quantum Mechanics of One and Two Electron Atoms." Springer-Verlag, Berlin, 1957.
- Bohm, D., "Quantum Theory." Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1951.
- Borowitz, S., "Fundamentals of Quantum Mechanics," Benjamin, New York, 1967.
- Eisberg, R. M., "Fundamentals of Modern Physics." Wiley, New York, 1961.
- Merzbacher, E., "Quantum Mechanics." 2nd ed. Wiley, New York, 1970.
- Messiah, A. "Quantum Mechanics," Volume II. Wiley, New York, 1962.
- Saxon, D., "Elementary Quantum Mechanics." Holden-Day, San Francisco, 1964.



نظریه پراکندگی

در تمام طول گسترش فیزیک جدید، فیزیکدانها به دنبال درک برهم کنشهای اساسی طبیعت بودند. بیشتر دانش ما از این برهم کنشها را آزمایش‌های پراکندگی فراهم ساخته‌اند. در این فصل، مکانیک کوانتومی فرایند پراکندگی را مورد بررسی قرار خواهیم داد. مطلب را با یادآوری مختصر نظریه کلاسیکی پراکندگی شروع می‌کنیم.

۱ - نظریه کلاسیکی پراکندگی

یک آزمایش نمونه‌ای پراکندگی مشاهده مسیرهای اولیه و نهائی ذراتی است که تحت تأثیر یک نیروی مرکزی - حرکت می‌کنند. در فیزیک اتمی و هسته‌ای یک باریکه از ذرات روی یک مرکز نیرو می‌تابد و سپس پراکنده می‌شود. هر ذره باریکه تحت زاویه‌ای که بستگی به انرژی و تکانه اولیه‌آن و هم‌چنین طبیعت مرکزنیرو دارد منحرف می‌شود. ما بحث خود را به مسائلی محدود می‌کنیم که در آنها انرژی ذره در فرایند پراکندگی پایسته می‌ماند (پراکندگی کشسان).

پتانسیل نیروی مرکزی به شکل $V(r) = V_0 e^{-r/a}$ است، در نتیجه مناسب است که از مختصات قطبی کروی، که مرکز نیرو در مبدأ آن است استفاده کنیم و جهت فرود را منطبق بر جهت $\theta = 0$ ، معمولاً "جهت محور z "، انتخاب کنیم. جهت پراکندگی به وسیله زوایای قطبی و سمتی θ و ϕ مشخص می‌شود. باریکه فرودی به وسیله انرژی E و چگالی شار پا شدت J دارد. آن شخص می‌شود. تعداد ذرات پراکنده شده (در واحد زمان) در داخل زاویه حجمی $d\Omega$ در اطراف زوایای θ و ϕ هم با J و هم با $d\Omega$ متناسب است، و می‌توان نوشت $dN \propto J d\Omega$.

ثابت تناسب تابعی است از θ و ϕ و موسوم است به مقطع موثر دیفرانسیلی، یعنی،

$$dN = \sigma(\theta, \phi) J d\Omega$$

یا

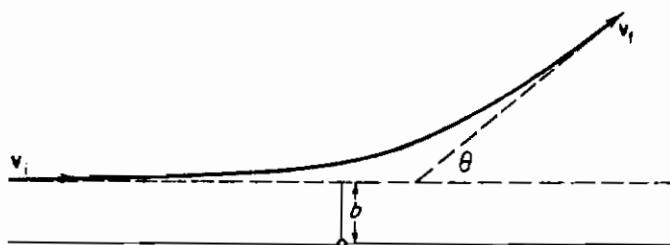
$$\sigma(\theta, \phi) = \frac{1}{J} \frac{dN}{d\Omega} \quad (1-8)$$

برای نیروی مرکزی پراکنده، تقارن ایجاب می‌کند که مقطع موثر مستقل از زاویه سمتی باشد. بنابراین پراکندگی نسبت به جهت تابش (محور z) متقارن است. مناسب است که تعداد کل ذرات پراکنده شده (در واحد زمان) را محاسبه کنیم. این کار با انتگرال‌گیری (۱-۸) روی یک زاویه حجمی کامل انجام می‌گیرد

$$N = J \int_{4\pi} \sigma(\theta, \phi) d\Omega = J \sigma_T \quad (2-8)$$

انتگرال فوق مقطع موثر کل را، که عبارت از مساحت موثر پراکنده است که به وسیله باریکه دیده می‌شود، به دست می‌دهد.

در آنچه در زیر می‌آید بحث خود را به پراکنده‌های با نیروی مرکزی محدود می‌کنیم. برای محاسبه مقطع موثر $\sigma(\theta)$ ، باید نخست زاویه پراکندگی را برای هر ذره باریکه بدانیم. مسیر یک ذره در شکل (۱-۸) رسم شده است.

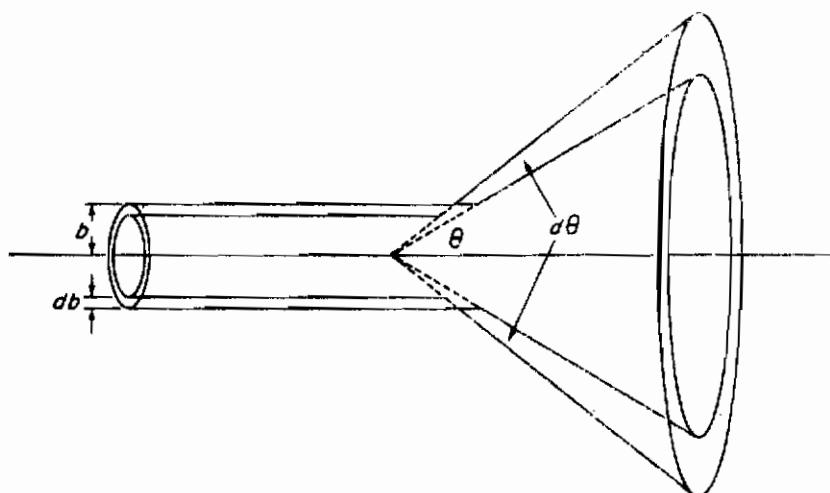


شکل (۱-۸) یک مسیر پراکندگی نمونه‌ای که سرعتهای اولیه و نهایی، پارامتر برخورد و زاویه پراکندگی را نشان می‌دهد.

برای یک انرژی معین، زاویه پراکندگی به پارامتر برخورد b بستگی دارد. این پارامتر با فاصله عمودی مرکز نیرو از امتداد سرعت اولیه v (شکل ۱-۸) تعریف شده است. معادله $b = b(\theta)$ ، که پارامتر برخورد را به زاویه پراکندگی ربط می‌دهد، باید قبل از اینکه هرگونه پیشگویی در باره مقطع موثر بتواند صورت گیرد از مسیر ذره محاسبه شود. در بیشتر مسائل

پراكندي، زاويه پراكندي با افزایش b به سرعت کاهش می‌پابد. تعداد ذرات پراكنده شده در داخل یک زاويه حجمی بین θ و $\theta + d\theta$ باید با تعداد ذراتی که در هاریکه فرودي در حلقه‌ای به شعاع b و ضخامت db حول محور z قرار دارند برابر باشد (شکل ۲-۸). اين تعداد عبارت است از

$$dN = J dA = J2\pi b db = J2\pi b \frac{db}{d\Omega} d\Omega$$



شکل (۲-۸) پراكندي ذرات از یک حلقه دiferانسيلي در داخل یک زاويه حجمي دiferانسيلي

با استفاده از (۱-۸)، مقطع موثر به صورت

$$\sigma(\theta) = 2\pi b \frac{db}{d\Omega}$$

در می‌آيد. اين عبارت، با استفاده از*

$$d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$$

به صورت

$$\sigma(\theta) = \frac{-b(\theta)}{\sin \theta} \frac{db(\theta)}{d\theta} \quad (3-8)$$

* چون b با کاهش θ افزایش می‌پابد، $db/d\theta$ منفی است، از اين رويک علامت منفی در (۳-۸) وارد کرده‌ايم تا مقطع موثر مثبت بماند.

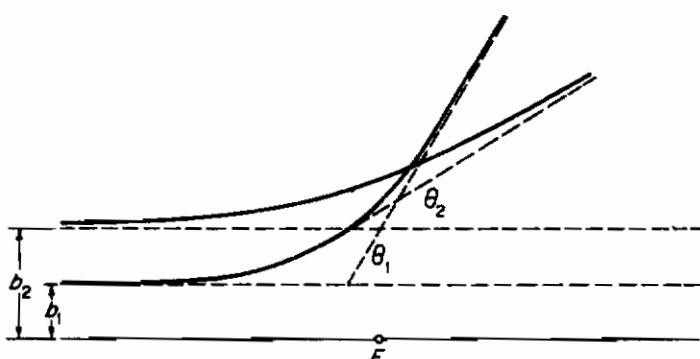
در می‌آید . وقتی $b = b(\theta) = b$ معلوم شد ، مقطع موثر می‌تواند مستقیماً محاسبه شود . این روش را با به کار بردن آن در مورد نیروی دافعه کولنی (پراکندگی راترفورد) روشن می‌کنیم . فرض می‌کنیم که پرتا به و هدف به ترتیب دارای بارهای $Z'e$ و Ze باشند . پتانسیل دافعه عبارت است از

$$V = \frac{ZZ'e^2}{r}$$

مسیر پرتا به همیشه یک شاخه هذلولی است (شکل ۳-۸) که مرکز نیرو (هدف) در کانون بیرونی آن قرار دارد . بدون اثبات بیان می‌کنیم که رابطه بین b و θ عبارت است از*

$$b = \frac{ZZ'e^2}{2\varepsilon} \cot\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

که در آن e انرژی پرتا به است .



شکل (۳-۸) دو مسیر هذلولی شکل با پارامترهای بخورد متفاوت در پراکندگی کولنی

با استفاده از (۳-۸) ، مقطع موثر کلاسیکی راترفورد به صورت

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{ZZ'e^2}{4\varepsilon}\right)^2 \sin^{-4} \frac{\theta}{2} \quad (4-8)$$

* به عنوان مثال ، به کتاب زیر مراجعه کنید .

J , B. Marion " Classical Dynamics of Particles and

Systemes " 2nd ed. Academic Press , New York , 1970.

به دست می‌آید.

با انتگرال‌گیری، نتیجه می‌گیریم که مقطع موثر کل راترفورد، در واقع، واگرا می‌شود، یعنی،

$$\sigma_T = \left(\frac{ZZ'e^2}{4\epsilon} \right)^2 \int \sin^{-4} \frac{\theta}{2} d\Omega = \left(\frac{ZZ'e^2}{4\epsilon} \right)^2 2\pi \int_0^\pi \sin^{-4} \frac{\theta}{2} (\sin \theta d\theta) \rightarrow \infty$$

انتگرال در حد پائین، $0 \rightarrow \theta$ ، یعنی $\infty \rightarrow b$ ، واگرا می‌شود. این واگرایی به این واقعیت مربوط می‌شود که پتانسیل $1/r$ خیلی بلند برد است، در نتیجه، حتی آن ذراتی که پارامتر برخورد آنها به بینهایت می‌کند پراکنده می‌شوند به طوریکه σ_T را واگرا می‌سازند. برای پتانسیلهای کوتاه بر دتر، σ_T عموماً "متناهی" است.

بررسی مکانیک کوانتومی پراکنده معمولاً به‌یکی از دو روش زیر انجام می‌گیرد. روش نخست، پراکنده مانا، مقطع موثر را از ویژه حالت‌های پیوسته پتانسیل پراکنده می‌ددست می‌آورد. این روش شبیه به روشنی است که در مورد مسائل یک بعدی در فصل ۴، که در آن ضریب بازتاب δ مشابه پارامتر برخورد است، به‌کار برده شد.

روش دوم، پراکنده تجزیه و تحلیل می‌کند. همان‌طورکه نشان خواهیم داد، آهنگذار به‌ویژه حالت‌های پراکنده تجزیه و تحلیل می‌کند. همان‌طورکه نشان خواهیم داد، آهنگذار به‌ویژه حالت‌های "دیگر تکانه مستقیماً" به مقطع موثر پراکنده ارتباط پیدا می‌کند. هرچند که هردو روش اساساً به مقطع موثرهای پیکانی منجر می‌شوند، روش دینامیکی عمومی‌تر است. از یک نظر، این روش مستقل از مکانیک موجی است. با این حال، بحث خود را با روش‌های پراکنده مانا شروع خواهیم کرد.

۲- نظریه کوانتومی مانا (حالت پا بر جا) پراکنده

در نظریه کلاسیکی، قادر بودیم ارتباطی بین مسیرهای نامحدود یک پرتا به و مقطع موثر پراکنده متناظر برقرار کنیم. ارتباط مشابهی بین ویژه حالت‌های مربوط به مقادیر پیوسته انرژی یک پتانسیل و مقطع موثر پراکنده کوانتومی متناظر وجود دارد. بنابراین به‌آنچه که حالت‌های پراکنده می‌دانیم معادله شرودینگر

$$\left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right\} \psi = E \psi \quad (5-8)$$

نامیده می شود خواهیم پرداخت . فرض می شود که $|rV(r)| \gg \epsilon$ بهست صفر میل می کند . چون ویژه تابعهای پراکندگی حالت های ناقید را نشان می داشند ، نمی توانیم بخواهیم که در بینهایت صفر شوند . ولی ، می توانیم چند شرط ساده ای که با شرایط تجربی سازگار باشند تحمل نمائیم .

در آزمایشهای پراکندگی ، ناحیه مورد توجه دوراز هدف واقع است . در این ناحیه مجانبی ، انتظار داریم یک شار فرودی مربوط به یک موج تخت که در امتداد سوراخ حرکت می کند ، یعنی e^{ikz} ، و یک شار پراکنده شده وابسته به یک موج کروی خروجی ، یعنی $f(\theta, \phi)e^{ikr}/r$ ، وجود داشته باشد . این جوابها مربوط به ذرات آزاد با انرژی $\epsilon = \hbar^2 k^2 / 2m$ می باشند . بنابراین شرط مجانبی

$$\psi \sim e^{ikz} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad \left(k = \left(\frac{2m\epsilon}{\hbar^2} \right)^{1/2} \right) \quad (6-8)$$

را به جوابهای معادله شرودینگر (5-8) تحمل می کنیم . اثبات اینکه جوابی با این شکل مجانبی وجود دارد به شرط اینکه پتانسیل خیلی بلند برد نباشد ، مشکل نیست . در زیر نشان خواهیم داد که پتانسیل کولنی ، با برد بلندش ، دارای جوابی با شکل مجانبی خواسته شده نیست . با این وجود ، جوابی دارد که برای پیدا کردن مقطع موثر کولنی به قدر کافی به آن نزدیک است .

در حالی که برای یک معین ، جوابهای زیادی برای (5-8) وجود دارد ، مسئله ما پیدا کردن جوابی است که رفتار مجانبی آن مانند رفتار (6-8) باشد . این کار به آن سادگی که به نظر می رسد نیست . اما ، وقتی لای مطلوب پیدا شد و شکل مجانبی آن ایجاد گردید ، $f(\theta, \phi)$ می تواند مستقیماً "به مقطع موثر ارتباط داده شود . برای انجام این کار ، شار فرودی با استفاده از معادله شار (3-۹۶) ، از موج فرودی e^{ikz} به صورت زیر به دست می آید

$$J_{\text{inc}} = -\frac{i\hbar}{2m} \left[(e^{ikz})^* \frac{\partial}{\partial z} e^{ikz} - e^{ikz} \frac{\partial}{\partial z} (e^{ikz})^* \right] = \frac{\hbar k}{m}$$

همین طور ، شار پراکنده شده (شعاعی) از $f(\theta, \phi)e^{ikr}/r$ با استفاده از معادله شار (3-۹۶) به دست می آید

$$J_{\text{scat}} = -\frac{i\hbar}{2m} |f(\theta, \phi)|^2 \left[\left(\frac{e^{ikr}}{r} \right)^* \frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{e^{ikr}}{r} \right)^* \right] = \frac{\hbar k}{m} \frac{|f(\theta, \phi)|^2}{r^2}$$

تعداد ذرات پراکنده شده در واحد زاویه حجمی عبارت است از

$$\frac{dN}{d\Omega} = J_{\text{scat}} r^2 = \frac{\hbar k}{m} |f(\theta, \phi)|^2$$

با تقسیم بر $J_{\text{inc}} = \hbar k/m$ ، مقطع موثر به صورت زیر بدست می‌آید

$$\sigma(\theta, \phi) = \frac{1}{J_{\text{inc}}} \frac{dN}{d\Omega} = |f(\theta, \phi)|^2 \quad (2-8)$$

این رابطه دقیق است . ضریب مدولاسیون زاویه‌ای (ϕ, θ) دامنه پراکندگی نامیده می‌شود . در جدول (۲ - ۸) یک مقایسه اجمالی بین روش‌های کلاسیکی و کوانتومی پراکندگی انجام داده‌ایم .

جدول (۲ - ۸)

مقایسه‌ای بین روش‌های کلاسیکی و کوانتومی محاسبات پراکندگی

نظریه کوانتومی	نظریه کلاسیکی
(الف) برای پیدا کردن مسیر (نامقید) یک ذره، قوانین نیوتون را برای یک انرژی ، پارامتر بخورد، و پتانسیل پراکندگی داده شده، معادله شرودینگر را حل کنید .	(الف) برای پیدا کردن ویژه تابع (پیوسته) یک ذره با شکل مجانبی خواسته شده در یک انرژی پارامتر بخورد، و پتانسیل پراکندگی داده شده، معادله حل کنید .
(ب) زاویه پراکندگی θ را بر حسب پارامتر پراکندگی (ϕ, θ) را پیدا کنید .	(ب) از شکل مجانبی جواب (الف) دامنه بخورد θ پیدا کنید .
(ج) مقطع موثر را با استفاده از	(ج) مقطع موثر را با استفاده از

$$\sigma(\theta, \phi) = |f(\theta, \phi)|^2$$

$$\sigma(\theta) = \frac{-b}{\sin \theta} \frac{db}{d\theta}$$

محاسبه کنید

محاسبه کنید

نظریه فوق را به تحلیل مکانیک کوانتومی پراکندگی را تفورد اعمال خواهیم کرد .

۳ - پراکندگی راترفورد (مورد کوانتمی)

مسئله کوانتمی راترفورد، مثل مشابه کلاسیکی اش، می‌تواند به‌طور دقیق حل شود.
توجه خود را مستقیماً "به حل مناسب معادله شرودینگر

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{K}{r} \right) \psi = \epsilon \psi \quad (8-8)$$

یا

$$\left(-\nabla^2 + \frac{2mK}{\hbar^2 r} \right) \psi = k^2 \psi$$

معطوف می‌کنیم که در آن

$$K = ZZ' e^2 \quad \text{و} \quad k = \left(\frac{2m\epsilon}{\hbar^2} \right)^{1/2}$$

این معادله، البته، در مختصات کروی تفکیک‌پذیر است. اما جوابهای حاصله شکل مجانبی خواسته شده را ندارند. البته می‌توانیم از ترکیبات خطی این ویژه تابعهای کروی تبعه‌گن برای ساختن شکل مجانبی مناسب استفاده کنیم. با این همه، تفکیک متغیرها در (8-8) در مختصات سه‌می ساده‌تر است. ویژه تابعهای سه‌می به‌طور طبیعی با شرط مجانبی موردنظر مطابقت می‌کنند.

تبدیلی که مختصات سه‌می را به دست دهد عبارت است از*

$$\xi = r(1 + \cos \theta) = r + z$$

$$\eta = r(1 - \cos \theta) = r - z$$

$$\phi = \phi = \tan^{-1} \frac{y}{x}.$$

ضرایب متریک، لاپلاسی و عنصر حجم در مختصات سه‌می می‌توانند به‌ترتیب به صورت زیر نوشته شوند

$$h_\xi = \left[\frac{(\eta + \xi)}{4\xi} \right]^{1/2}, \quad h_\eta = \left[\frac{(\eta + \xi)}{4\eta} \right]^{1/2}, \quad h_\phi = (\xi\eta)^{1/2}$$

$$\nabla^2 = \left\{ \frac{4}{\xi + \eta} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \right] + \frac{1}{\xi\eta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\}$$

* تعریف و معادگذاری مختصات سه‌می در کتابهای مختلف تا حدودی متفاوت است.
www.ketabha.org

و

$$d\mathbf{r} = \frac{1}{4}(\xi + \eta) d\xi d\eta d\phi$$

با به کار بردن جوابی به شکل

$$\psi(\xi, \eta, \phi) = F(\xi)G(\eta)\Phi(\phi)$$

معادله (۸-۸) به معادلات دیفرانسیل معمولی زیر تجزیه می شود

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = -m_l^2\Phi, \quad \frac{d}{d\xi} \left(\xi \frac{dF}{d\xi} \right) + \left(-\frac{m_l^2}{4\xi} + \frac{k^2}{4} \xi - \beta \right) F = 0$$

(۹-۸)

$$\frac{d}{d\eta} \left(\eta \frac{dG}{d\eta} \right) + \left(-\frac{m_l^2}{4\eta} + \frac{k^2\eta}{4} + \beta - \frac{Km}{\hbar^2} \right) G = 0$$

که در آنها m_l و β ثابت های تفکیک هستند.

حاصل ضربهای جوابهای این معادلات دیفرانسیل بدون توجه به مقادیر m_l و β ، منجر به جوابهای معادله شرودینگر (۸-۸) می شوند . سعی ما براین است که m_l و β را طوری انتخاب کنیم که ψ شکل مجانبی موردنظر

$$\psi_{r \rightarrow \infty} \sim e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

را بگیرد . عدم حضور ϕ در دامنه پراکندگی نتیجه ای از خاصیت مرکزی بودن پتانسیل کولنی است .

جواب معادله ϕ در (۹-۸) عبارت است از $e^{im_l\phi} = \Phi$. اما چون شکل مجانبی مستقل از زاویه سمتی است ، جواب دقیق نمی تواند شامل ϕ باشد . بنابراین ثابت تفکیک را $m_l = 0$ انتخاب می کنیم به طوری که $\Phi \equiv 1$. در این صورت جواب به شکل

$$\psi(\xi, \eta) = F(\xi)G(\eta)$$

در می آید که در آن F و G جوابهای معادلات

$$\frac{d}{d\xi} \left(\xi \frac{dF}{d\xi} \right) + \left(\frac{k^2}{4} \xi - \beta \right) F = 0 \quad (8-10\text{ الف})$$

$$\frac{d}{d\eta} \left(\eta \frac{dG}{d\eta} \right) + \left(\frac{k^2}{4} \eta + \beta - \frac{Km}{\hbar^2} \right) G = 0 \quad \left(k = \left(\frac{2me}{\hbar^2} \right)^{1/2} \right) \quad (8-10\text{ ب})$$

* هستند. شکل مجانبی مطلوب می‌تواند در مختصات سه‌می به صورت زیر بیان شود

$$\begin{aligned} \psi(\xi, \eta) &\underset{\eta \rightarrow \infty}{\sim} e^{ikz} + f \frac{e^{ikr}}{r} = e^{ikz} \left(1 + \frac{fe^{ik(r-z)}}{r} \right) \\ &= e^{ik(\xi-\eta)/2} \left(1 + \frac{fe^{ik\eta}}{r} \right) \end{aligned} \quad (11-8)$$

از معادله (11-8) استنباط می‌شود که جواب دقیق باید به شکل

$$\psi(\xi, \eta) = e^{ik(\xi-\eta)/2} W(\eta) = e^{ik\xi/2} e^{-ik\eta/2} W(\eta)$$

باشد که در آن

$$W(\eta) \underset{\eta \rightarrow \infty}{\sim} \left(1 + \frac{fe^{ik\eta}}{r} \right)$$

با قراردادن $F(\xi) = e^{ik\xi/2}$ در (8-10الف)، نتیجه می‌گیریم $\beta = \frac{1}{2}ik$. با استفاده از این انتخاب برای ثابت تفکیک β و قراردادن $G(\eta) = e^{-ik\eta/2} W(\eta)$ در (8-10ب)، نتیجه می‌گیریم

$$\eta \frac{d^2 W(\eta)}{d\eta^2} + (1 - ik\eta) \frac{dW(\eta)}{d\eta} - \gamma W(\eta) = 0 \quad (12-8)$$

که در آن $\gamma = Km/\hbar^2 k$

معادله (12-8) همان معادله ابر هندسی است، که قبلاً در فصل ۵ مورد بحث قرار

* چون، بنا به تعریف، باریکه پراکنده شده در خارج از محور فرودی (z) مشاهده می‌شود،

(یعنی $r > z$)، حد مجانبی می‌تواند به جای $\eta \rightarrow \infty$ به صورت $\eta \rightarrow \infty \rightarrow r - z$ نوشته شود.

گرفته است . جوابی که در مبدأ ($\eta = 0$) خوش رفتار باشد سری ابر هندسی نامیده شده و با $F(-iy|1|ik\eta)$ نمایش داده می شود . بالاخره ، جواب کلی می تواند به صورت

$$\psi(\xi, \eta) = Ne^{ik(\xi-\eta)/2}F(-iy|1|ik\eta) \quad (13-8)$$

نوشته شود . برای سهولت ، ثابت ضربی N را به صورت *

$$N = \frac{\Gamma(1+iy)}{e^{\pi y/2}}$$

انتخاب خواهیم کرد .

معادله (13-8) جواب دقیقی از معادله شرودینگر است که به طور رضایت بخشی دارای شکل مجانبی مناسب است . با استفاده از روش های تا اندازه ای پیشرفت ریاضی می توان نشان داد که شکل مجانبی (13-8) عبارت است از

$$\psi_{r \rightarrow \infty} \sim \exp i[kz + \gamma \ln kr(1 - \cos \theta)] + f(\theta) \frac{\exp[i(kr - \gamma \ln 2kr)]}{r}$$

که در آن

$$f(\theta) = \frac{-\Gamma(1+iy)}{\Gamma(1-iy)} \frac{\gamma}{k} \frac{\exp[-iy \ln \sin^2 \theta/2]}{2 \sin^2 \theta/2} \quad (14-8)$$

به نظر می آید که در اثر کوششمان ، (14-8) تا آنجا که ممکن است به شکل مجانبی مناسب نزدیک است . جمله های فاز لگاریتمی در توان های موج های فرودی و پراکنده شده بیانگر تغییر شکل های هستند که مشخصه پتانسیل بلندبرد کولنی است . این تغییر شکل ها در جواب های مجانبی برای پتانسیل های کوتاه برد بر طرف می شوند . خوش بختانه ، جملات لگاریتمی هیچ اشکالی ایجاد نمی کنند زیرا سریع تراز جملات خطی در توان (14-8) به سمت صفر میل می کنند . سهم آنها در شاره ای مجانبی را می توان نادیده گرفت و مقطع موثر را با استفاده از

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{\gamma^2}{4k^2 \sin^4 \theta/2} \left| \frac{\Gamma(1+iy)}{\Gamma(1-iy)} \right|^2$$

* تابع گاما به صورت $\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} dt$ تعریف شده است .

محاسبه کرد . چون $|\Gamma(1 + iy)| = |\Gamma(1 - iy)|$ ، بالاخره داریم

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{\gamma^2}{4k^2} \right) \sin^{-4} \frac{\theta}{2} = \left(\frac{K}{4\epsilon} \right)^2 \sin^{-4} \frac{\theta}{2} = \left(\frac{ZZ' e^2}{4\epsilon} \right)^2 \sin^{-4} \frac{\theta}{2} \quad (15-8)$$

از مقایسه این نتیجه با (۱۵-۸) مشاهده می‌کنیم که مقطع موثرهای کلاسیکی و کوانتومی راترفورد یکسان‌اند . این یکسانی باید تصادفی تلقی شود . مقطع موثرهای مکانیک کوانتومی برای سایر پتانسیلهای "خوش‌رفتار" معمولاً شامل \neq هستند و بنابراین با همتای کلاسیکی خودتفاوت دارند .

در عمل ، فرمول راترفورد به‌ندرت مشاهده می‌شود زیرا پتانسیل کولنی به‌وسیله عواملی کمکی تعديل می‌شود . در آزمایش اصلی راترفورد که پراکندگی ذرات α از هسته‌های طلا را شامل می‌شد ، انحرافهایی از پتانسیل کولنی خالص در $0 \sim 2$ (ساختار هسته‌ای) و $2 \sim \infty$ (پوشش توسط الکترونها اتتمهای طلا) رخ داد .

همان‌طور که در بالا دیدیم ، پیداکردن جوابی برای معادله شرودینگر با شکل مجانبی مناسب کار ساده‌ای نیست . برای پتانسیلهای پراکندگی پیچیده‌تر وابسته به‌نیروهای هسته‌ای ، روش‌های دیگر و احتمالاً "روشهای تقریبی لازم می‌شوند . دو روش را که عموماً در به‌دست آوردن مقطع‌های موثرهای کارمی روند بررسی خواهیم کرد . روش نخست ، بسط بورن ، وقتی قابل اعمال است که شدت λ ای پراکننده خیلی کوچک‌تر از انرژی فرودی باشد . در این حالت دامنه پراکندگی به‌صورت یک سری پریشیدگی شامل توانهای n بیان می‌شود . این روش شبیه بفروش رالی – شرودینگر است که برای حالت‌های مقید به‌کار می‌رود .

روش دوم ، تحلیل موج جزئی ، منجر به مجموعی از نوع دیگر می‌شود و به‌شرطی مفید است که پتانسیل کوتاه برد باشد . این روش کاملاً مستقل از شدت پراکننده است . هم‌روش بورن و هم‌روش موج جزئی هردو مفید هستند ؟ روش خاص به‌کار برده شده معمولاً "به‌انرژی باریکه فرودی و به‌طبیعت پتانسیل پراکندگی ، مثلًا" شدت و برد آن ، بستگی دارد .

۴ - بورسی پراکندگی مانا به‌روش پریشیدگی – سری بورن

توجه خودرا به معادله شرودینگر برای یک پتانسیل پراکندگی λ ، که پارامتر λ مشخص کننده شدت پراکننده است ، معطوف می‌کنیم . معادله‌ای که باید حل شود عبارت است از

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \lambda V \right) \psi = E\psi \quad (16-8)$$

که جواب آن باید در شرط مجانبی

$$\psi \sim e^{ikr} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad \left(|k| = k = \left(\frac{2m\epsilon}{\hbar^2} \right)^{1/2} \right)$$

صدق کند . بردار تکانه فرودی ، k ، در امتداد محور z قرار دارد (یعنی ، $e^{ikr} = e^{ikz}$) . شرط مجانبی تنها برای پتانسیلهای ممکن است که سریع تراز $1/r$ سقوط می‌کند و بنابراین لازم است که پتانسیل در شرط

$$\lim_{r \rightarrow \infty} rV(r) \rightarrow 0$$

صدق کند .

اشکال حل معادله دیفرانسیل (۱۶-۸) این است که برای هر انرژی معین تعداد زیادی جوابهای تنهای می‌تواند وجود داشته باشد . تنها جوابی را که شکل مجانبی مناسب را دارا باشد جستجوی کنیم . برای بیرون کشیدن این جواب ، بهتر است که (۱۶-۸) را به یک معادله انتگرالی که فقط ویژه تابع مورد نظر را به عنوان جواب قبول می‌کند ، تبدیل کنیم .

با قراردادن

$$u(r) = \frac{2m}{\hbar^2} \lambda V(r) \psi(r)$$

در (۱۶-۸) و جایه‌جاکردن جملات ، معادله شرودینگر خواهد شد

$$(\nabla^2 + k^2)\psi = u \quad (17-8)$$

درواقع ، معادله اصلی (۱۶-۸) یک معادله دیفرانسیل همکن است که در آن هر کدام از جملات شامل ψ است . اما ، (۱۷-۸) اکنون یک معادله ناممکن است که در آن ψ به عنوان "چشم" یا ناممکنی در نظر گرفته می‌شود . جواب عمومی (۱۷-۸) ترکیب شده است از جواب عمومی معادله همکن $0 = \psi(\nabla^2 + k^2)$ به اضافه هر جواب خصوصی معادله کلی $u = \psi$.

جواب عمومی عبارت است از $\psi_0 + \psi_1$.

چون ψ_0 معرف موردي است که در آن $0 = u$ (یا $V = 0$) است ، باید معرف موج تخت فرودی باشد . بنابراین قرار می‌دهیم $\psi_0 = e^{ikr}$. سپس جواب خصوصی را به دست می‌آوریم و شرط

$$\psi_{s, r \rightarrow \infty} f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} = \text{(موج کروی خروجی)} \quad (18-8)$$

را به آن تحمیل می‌کنیم. به بیان دیگر، انتظار داریم که جواب خصوصی معرف موج پراکنده شده باشد. جواب مورد نظر به شکل

$$\psi = e^{ik \cdot r} + \psi_{s, r \rightarrow \infty} e^{ik \cdot r} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r}$$

در می‌آید. ما مسئله را به پیدا کردن یک جواب خصوصی (17-8) که به طور مجانبی معرف یک موج کروی خروجی باشد تقلیل داده‌ایم.

فرض کنیم بتوانیم تابعی مثل $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ (تابع گرین) با خاصیت

$$(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (19-8)$$

پیدا کنیم، در این صورت تابع

$$\psi_s(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') u(\mathbf{r}') \quad (20-8)$$

خود به خود جوابی از (17-8) است. با جایگذاری مستقیم تحقیق می‌شود که

$$\begin{aligned} (\nabla^2 + k^2)\psi_s &= \int d\mathbf{r}' (\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') u(\mathbf{r}') \\ &= \int d\mathbf{r}' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') u(\mathbf{r}') = u(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

بنابراین، "واقعاً" یک جواب است.

در حالی که تعداد زیادی تابع گرین معکن‌ها خاصیت موجود در (19-8) وجود دارد، فقط یکی از آنها که شرط

$$\psi_s = \int d\mathbf{r}' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') u(\mathbf{r}') \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r}$$

را برآورده می‌کند مورد توجه ما است. می‌توان نشان داد که تابع گرین خاص

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{-1}{4\pi} \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \quad (21-8)$$

تüm خواص مورد نظر را در بردارد. همان طور که یک محاسبه مستقیم نشان می دهد (رک مسئله ۸-۶)، این تابع در (۱۹-۲) صدق می کند. اما خود ساختار آن برای ۲ بزرگ ($r \gg r'$) و شکل مجانبی درخواست شده به وسیله (۱۸-۸) را تضمین می کند. با استفاده از (۲۰-۸) و (۲۱-۸)، بالاخره، یک معادله انتگرالی اساسی برای پراکندگی به صورت

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \frac{\lambda 2m}{4\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r}' \frac{e^{i\mathbf{k}|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \psi(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \quad (22-8)$$

خواهیم داشت.

در حالی که (۲۲-۸) در (۱۶-۸) صدق می کند، تنها به مفهوم صوری یک جواب است. معادله (۲۲-۸) به این جهت معادله انتگرالی نامیده می شود* که تابع مجہول ψ در داخل انتگرال در طرف راست قرار گرفته است. موفق شده ایم که معادله دیفرانسیل را به یک معادله انتگرالی تبدیل کنیم. مزیت این تبدیل آن است که در حالی که معادله دیفرانسیل، برای یک ψ داده شده، جوابهای زیادی دارد، معادله انتگرالی تنها دارای جواب با شکل مجانبی مناسب است. متأسفانه، حل (۲۲-۸) معمولاً مشکل تر از حل معادله دیفرانسیل همتای آن است.

یک روش که می تواند در حل (۲۲-۸) به کار رود به روش تکراری موسوم است. این روش منجر به یک جواب به صورت یک سری از توانهای λ (موسوم به سری بورن) می شود و وقتی معتبر است که λ آنقدر کوچک باشد که سری را همگرا کند. جواب مرتبه صفر ($\lambda = 0$) آشکارا عبارت است از $\psi^{(0)} = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ و بیانگر حالت پراکندگی صفر است. با قراردادن این جواب در انتگرال طرف راست (۲۲-۸)، جواب مرتبه اول (λ) را به دست خواهیم آورد. جواب مرتبه n ام با استفاده از $\psi^{(n-1)}$ به طریق مشابهی به دست می آید، یعنی،

$$\psi^{(n)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \frac{2m\lambda}{4\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r}' \frac{e^{i\mathbf{k}|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \psi^{(n-1)}(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \quad (23-8)$$

تقریب مرتبه n ام منجر به یک سری از توانهای λ می شود که بالاترین توان آن λ^n است. وقتی λ پیدا شد، باید دارای شکل مجانبی

* به طور دقیق‌تر، یک معادله فردholm^۱ از نوع دوم است.

$$\psi^{(n)} \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{ik \cdot r} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r}$$

باشد که در آن $f(\theta, \phi) = \sum_{j=1}^n f^{(j)}(\theta, \phi)$ در هر کدام از جملات سری بورن برای ψ جمله‌ای به نام دامنه مرتبه j ام بورن وجود دارد. مقطع موثر تا مرتبه n به وسیله

$$\sigma^{(n)} = \left| \sum_{j=1}^n f^{(j)} \right|^2$$

داده می‌شود. مقطع موثر دقیق در حد $\infty \rightarrow n$ به دست می‌آید، به شرط اینکه سری همگرا شود، و می‌توانیم بنویسیم

$$\sigma_{\text{exact}} = \left| \sum_{j=1}^{\infty} f^{(j)} \right|^2 \quad (24-8)$$

۵- تقریب اول بورن

اگر λ به اندازه کافی کوچک باشد، کافی است تنها جملاتی را که از یک بار تکرار (۲۴-۸) به دست می‌آیند نگه داریم، یعنی

$$\psi^{(1)}(\mathbf{r}) = e^{ik \cdot \mathbf{r}} - \frac{m\lambda}{2\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r}' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') e^{ik \cdot \mathbf{r}'} \quad (25-8)$$

این جواب در همه جای فضا (برای λ کوچک) معتبر است. ولی ما فقط به آن دامنه پراکندگی علاقه مندیم که از شکل مجانبی به دست می‌آید. برای r بزرگ، می‌توان بسط زیر را انجام داد

$$\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \underset{r \gg r'}{\sim} \frac{\exp[i(kr - k\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'/r)]}{r} = (e^{-ik' \cdot \mathbf{r}'}) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (26-8)$$

عبارت $k' = kr/r$ یعنی k' برداری است با بزرگی k که در امتداد شعاعی (پراکنده شده) قرار دارد. شکل مجانبی (۲۶-۸) خواهد شد

$$\psi^{(1)}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{ik \cdot \mathbf{r}} - \frac{m\lambda}{2\pi\hbar^2} \left[\int d\mathbf{r}' e^{i(k-k') \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \right] \frac{e^{ikr}}{r}$$

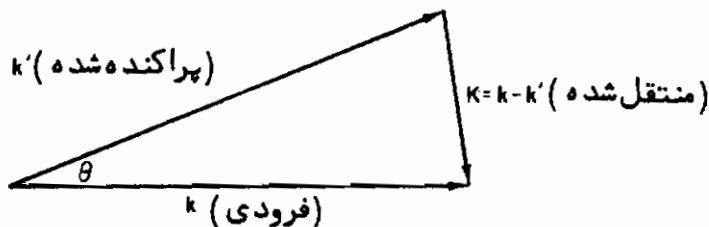
می‌توان قرار داد

$$f^{(1)}(\theta, \phi) = \frac{-m\lambda}{2\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r}' e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \quad (27-\lambda)$$

را که در آن $f^{(1)}(\theta, \phi)$ دامنه اول بورن نامیده می‌شود، در نظر گرفت. انتگرال می‌تواند به صورت

$$V(\mathbf{K}) = \int d\mathbf{r}' e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \quad (28-\lambda)$$

نوشته شود که در آن $\mathbf{K} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ بردار انتقال تکانه نامیده می‌شود. مفهوم هندسی آن در شکل (۴-۸) نشان داده شده است. تابع $V(\mathbf{K})$ تبدیل فوريه (r) است. مقطع موثر در تقریب



شکل (۴-۸) ارتباط بین بردارهای \mathbf{K} ، \mathbf{k}' و \mathbf{k} و زاویه پراکندگی θ . توجه کنیم که برای پراکندگی کشسان، $k = k'$ ، مثلث متساوی الساقین است.

اول بورن، اکنون می‌تواند به صورت

$$\sigma^{(1)}(\theta, \phi) = |f^{(1)}(\theta, \phi)|^2 = \left(\frac{-m\lambda}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |V(\mathbf{K})|^2 \quad (29-\lambda)$$

نوشته شود. توجه کنیم که $(1-\lambda)$ مستقل از علامت λ است و بنابراین برای پراکنده‌های جاذبه و دافعه یکسان است. در مرتبه‌های بالاتر علامت λ اهمیت پیدا می‌کند.

معادله (۲۹-۱) تقریب خوبی برای مقطع موثر است به شرطی که $|f^{(1)}(\theta, \phi)|/r$ برای تمام مقادیر r کوچک باشد، یعنی،

$$\frac{|f^{(1)}|}{r} = \left| \frac{m\lambda}{2\pi\hbar^2} \frac{V(\mathbf{K})}{r} \right| \ll 1 \quad \text{معیار بورن}$$

این شرط برای اینکه سری بورن (۲۴-۱) همگرا باشد لازم است. به طور کامل "عمومی این

شرط برای پتانسیلهای کوتاه برد، وقتی انرژی باریکه فرودی در مقایسه با قدرت پتانسیل پراکندگی بزرگ باشد، برقرار است*. اما، تعیین میزان تحقق این شرط عموماً خیلی مشکل است و بستگی به طبیعت خاص تابع پتانسیل پراکندگی دارد.

زاویه پراکندگی θ (یعنی، زاویه بین \mathbf{k} و \mathbf{k}') به طور ضمنی، همان‌طور که از رابطه

$$K^2 = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2 = k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \theta$$

دیده می‌شود، در اندازه K نهفته است. چون پراکندگی کشسان است (یعنی، انرژی پایسته است) قرار می‌دهیم $k' = k$ و نتیجه می‌گیریم

$$K^2 = 2k^2(1 - \cos \theta) = 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad \text{یا} \quad K = 2k \sin \frac{\theta}{2} \quad (30-\lambda)$$

تبديل فوريه پتانسیل نیروی مرکزی، $V(r)$ ، می‌تواند با استفاده از مختصات قطبی کروی محاسبه شود.

با انتخاب \mathbf{K} در امتداد محور $'z$ (به منظور انتگرال‌گیری)، داریم

$$\begin{aligned} V(\mathbf{K}) &= \int d\mathbf{r}' e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}'} V(r') \\ &= 2\pi \int_0^\infty V(r') r'^2 dr' \int_{-1}^1 du' e^{iKr'u'} \quad (u' = \cos \theta') \\ &= \frac{4\pi}{K} \int_0^\infty \frac{V(r') \sin Kr'}{r'} r'^2 dr' \end{aligned} \quad (31-\lambda)$$

مشاهده می‌کنیم که برای یک پتانسیل نیروی مرکزی، $V(\mathbf{K})$ تنها تابعی از بزرگی \mathbf{K} است، یعنی $V(\mathbf{K}) = V(K)$. چون $|K| = K$ فقط زاویه قطبی θ را در برابر دارد، نتیجه می‌شود که r' و $\sigma^{(1)}$ ، همان‌طور که انتظار می‌رفت، مستقل از ϕ هستند. مقطع موثر اول بورن برای $V(r)$ خواهد شد

* برای انرژیهای بالا، معیار بورن می‌تواند به صورت زیر بیان شود

$$\frac{m\lambda^2 V_0^2 R^2}{2\hbar^2 \epsilon} \ll 1$$

که در آن R برد موثر و λ قدرت پتانسیل است. بنابراین وقتی تقریب بورن معتبر است که انرژی پراکندگی بزرگ و پتانسیل پراکندگی ضعیف و کوتاه برد باشد.

$$\sigma^{(1)}(\theta) = \left(-\frac{m\lambda}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \left| \frac{4\pi}{K} \int_0^\infty \frac{V(r') \sin Kr'}{r'} r'^2 dr' \right|^2 \quad (22-8)$$

چون پتانسیل کولنی با افزایش r به حد کافی سریع سقوط نمی‌کند، معادله انتگرالی (۲۲-۸) و سری بورن برای پراکندگی راترفورد مناسب نیستند. با این وجود، نتایج تقریب بورن در این مورد جالب است. تبدیل فوریه پتانسیل کولنی $V(r) = 1/r$ ، با استفاده از (۲۱-۸)، عبارت است از*

$$V(K) = \frac{4\pi}{K} \int_0^\infty \frac{1}{r'} \frac{\sin Kr'}{r'} r'^2 dr' = \frac{4\pi}{K^2}$$

قطع موثر می‌شود

$$\sigma^{(1)}(\theta) = \left(-\frac{m\lambda}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \left| \frac{4\pi}{K^2} \right|^2 = \frac{4m^2\lambda^2}{\hbar^4 16k^4 \sin^4 \theta/2}$$

با قراردادن $\lambda = ZZ'e^2$ و $\epsilon = \hbar^2 k^2 / 2m$ ، تقریب اول بورن می‌دهد

$$\sigma^{(1)}(\theta) = \left(\frac{ZZ'e^2}{4\epsilon} \right)^2 \sin^{-4} \frac{\theta}{2}$$

که دقیقاً همان قطع موثر کلاسیکی راترفورد است. این درست انطباق "تصادفی" دیگری با پتانسیل کولنی است.

تقریب بورن می‌تواند به طور مناسبی به پتانسیل مرکزی کوتاه بردتر اعمال شود. به عنوان مثال، در مورد پتانسیل گاوسی (شکل ۸-۵ الف)

$$V = \lambda \exp \left[-\left(\frac{r}{R} \right)^2 \right]$$

تبدیل فوریه عبارت است از

* این انتگرال معمولاً با استفاده از یک ضریب همگرایی به صورت زیر انجام می‌شود

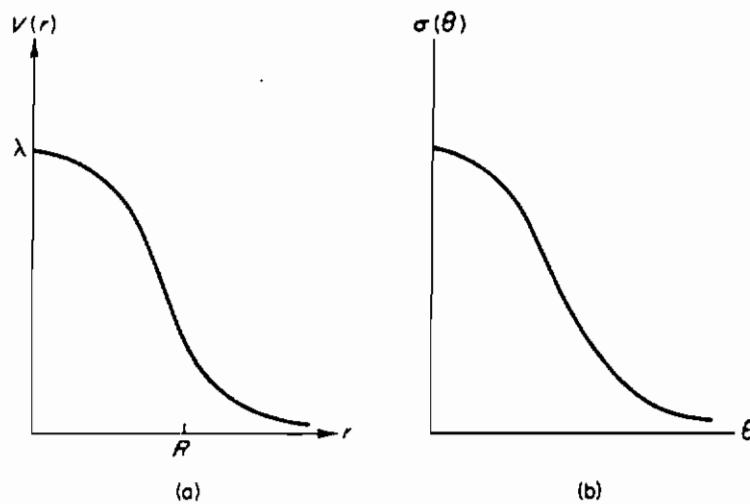
$$\int_0^\infty \sin Kr dr = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_0^\infty \sin Kr e^{-\alpha r} dr = \frac{1}{K}$$

$$V(K) = \int d\mathbf{r}' e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}'} e^{-(r/R)^2} = (2\pi)^{3/2} R^3 e^{-K^2 R^2/2}$$

قطع موثر بورن می‌شود (شکل ۵-۸ ب)

$$\begin{aligned}\sigma^{(1)}(\theta) &= \left(-\frac{m\lambda}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |V(K)|^2 = \frac{m^2\lambda^2}{4\pi^2\hbar^4} (2\pi)^3 R^6 e^{-K^2 R^2} \\ &= \frac{2\pi m^2\lambda^2}{\hbar^4} R^6 \exp\left(-4k^2 R^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}\right) \\ &= \frac{2\pi m^2\lambda^2}{\hbar^4} R^6 \exp\left[-\left(\frac{8me}{\hbar^2}\right) R^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}\right]\end{aligned}$$

توجه کنیم که انتظار می‌رود این قطع موثر تها وقتی درست باشد که λ کوچک و e بزرگ باشد (معیار بورن).



شکل (۵-۸) منحنی (الف) یک پتانسیل دافعه کاوی و (ب) قطع موثر مکانیک کوانتومی آن در تقریب بورن

۶- تقریبهای بالاتر بورن

اگر روش تکراری معادله انتگرالی (۲۲-۸) را ادامه دهیم، سری بورن را ایجاد خواهیم کرد و به مجموعه‌ای از دامنه‌های (n) بورن هدایت خواهیم شد که حاصل جمع آنها دامنه کل پراکندگی را به دست می‌دهد، یعنی،

$$f(\theta, \phi) = \sum_{j=1}^{\infty} f^{(j)}(\theta, \phi)$$

چند دامنه اول عبارتند از*

$$\begin{aligned}
 f^{(1)} &= -\frac{2m\lambda}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = -\frac{m\lambda}{2\pi\hbar^2} V(\mathbf{K}) \\
 f^{(2)} &= \left(\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{4\pi} \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{V(\mathbf{k} - \mathbf{k}'')V(\mathbf{k}'' - \mathbf{k}') d\mathbf{k}''}{(k''^2 - k^2)} \\
 f^{(3)} &= -\left(\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\right)^3 \frac{1}{4\pi} \frac{1}{(2\pi)^6} \int \frac{V(\mathbf{k} - \mathbf{k}'')V(\mathbf{k}'' - \mathbf{k}'')V(\mathbf{k}''' - \mathbf{k}') d\mathbf{k}'' d\mathbf{k}'''}{(k''^2 - k^2)(k'''^2 - k^2)} \quad (33-8)
 \end{aligned}$$

وقتی $\lambda \rightarrow 0$ ، دامنه‌های بالاتر بورن سهم کمتری در مقطع موثردارند . برای هرپتانسیل کوتاه برد ، سری بورن عموماً همکرا می‌شود به شرطی که هم λ کوچک و هم ϵ به اندازه کافی بزرگ باشد . در مرد پراکندگی الکترون از اتمها ، انرژیهای پراکندگی درگیر معقولاً "به خوبی در محدوده معیار بورن قرار دارند . اما ، برای پراکندگی هسته‌ای انرژیهای باید از 100 MeVjz باشند . چون در برخورد های هسته‌ای غالباً "انرژیهای پائین تر دخالت می‌کنند ، معیار بورن نقض می‌شود و روش‌های تحلیلی دیگری برای محاسبه مقطع موثرهای پراکندگی هسته‌ای مورد نیاز است . یک چنین روشی تحلیل موج جزئی نامیده می‌شود . این روش عموماً مستقل از قدرت پراکندگی است و می‌تواند حتی به پراکنده‌های قوی اعمال شود به شرط آنکه برد پتانسیل کوتاه باشد . همان طور که خواهیم دید این روش برای انرژیهای فرودی پائین مفیدترین است .

۷- روش امواج جزئی

این روش نخستین بار توسط رالی در تجزیه و تحلیل او از پراکندگی صوت از موانع ارائه شد . بعداً "توسط فاکسن^(۱) و هولتزمارک^(۲) به مسائل پراکندگی مکانیک کوانتومی اعمال شد .

* در انتگرال‌دهای دامنه‌های (33-8) تکینگی‌هایی مربوط به نقاطی که در آنها مخرج صفر می‌شود ، وجود دارد . بنابراین در محاسبه^(۲) و^(۳) ابهام‌های وارد می‌شود . این اشکال کوچک می‌تواند با جایگذاریهای $(k^2 - k''^2) \rightarrow (k^2 - k''^2 + i\Delta)$ ، $(k^2 - k''^2) \rightarrow (k^2 - k''^2 + i\Delta)$ و غیره در مخرجها و قراردادن $0 \rightarrow \Delta$ بعد از اینکه انتگرال (منحنی الخط) محاسبه شد ، رفع گردد .

قطع موقت برای ذره بدون اسپین در یک پتانسیل نیروی مرکزی $V(r)$ می‌تواند به آسانی از یک ویژه تابع انرژی ψ محاسبه شود به شرط اینکه:

(الف) ψ در معادله شرودینگر

$$\left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(r) \right\} \psi_e = e \psi_e \quad \left(r V(r) \xrightarrow[r \rightarrow \infty]{} 0 \right) \quad (34-8 \text{ الف})$$

صدق کند و
(ب) ψ دارای شکل مجانبی

$$\psi_e \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{ikr} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad \left(k = \left(\frac{2me}{\hbar^2} \right)^{1/2} \right) \quad (34-8 \text{ ب})$$

باشد، چون در مختصات کروی کار خواهیم کرد بهتر است که از اتحاد (رک ۵۹-۵)

$$e^{ikr} = e^{ikr \cos \theta} \equiv \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l P_l(\cos \theta) j_l(kr) \quad (35-8)$$

در (۳۴-۸ ب) استفاده کنیم. تفکیک (۳۴-۸ الف) در مختصات کروی نتیجه می‌دهد

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m_l=-l}^l a_{lm_l} Y_{lm_l}(\theta, \phi) R_{kl}(r)$$

که در آن R_{kl} جواب خوشرفتار معادله شعاعی زیر است

$$\left\{ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + \left[k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \right\} R_{kl}(r) = 0 \quad \left(k = \left(\frac{2me}{\hbar^2} \right)^{1/2} \right) \quad (36-8)$$

چون شکل مجانبی (۳۶-۸) باید مستقل از زاویه سمتی ϕ باشد کافی است فقط جملاتی را نگاه داریم که در آنها $m_l = 0$ است. بنابراین باید آن ضرایب a در جواب دقیق را پیدا کنیم که منجر به شکل مجانبی مناسب شود، یعنی

$$\sum_{l=0}^{\infty} a_l P_l(\cos \theta) R_{kl}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l P_l(\cos \theta) j_l(kr) + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (37-8)$$

جواب معادله شعاعی (۳۶-۸) وقتی $V=0$ است به طور ساده عبارت است از $j_l(kr)$ ؛
این جواب دارای شکل مجانبی

$$j_l(kr) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\sin(kr - \frac{1}{2}l\pi)}{kr}$$

است. سپس شکل مجانبی $R_{kl}(r)$ در (۳۶-۸) را برای حالت عمومی که در آن $V \neq 0$ است پیدا خواهیم کرد. توجه کنیم که در بینهایت V به سمت صفر میل می‌کند به طوری که (۳۶-۸) به سمت معادله ذره‌آزاد میل می‌کند. از این نکته چنین استنباط می‌شود که چون پرتابه همیشه در بینهایت V زاد است، $R_{kl}(r)$ و $j_l(kr)$ باید دارای شکل‌های مجانبی مشابه باشند. در واقع، تا وقتی V سریع‌تر از $1/r$ به سمت صفر میل می‌کند*، شکل مجانبی جواب شعاعی خواهد بود

$$R_{kl}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\sin(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l)}{kr}$$

δ_l جابه‌جایی فاز جزئی / ام نامیده می‌شود و میزانی از درجه تفاوت $R_{kl}(r)$ و $j_l(kr)$ در بینهایت است. چون پتانسیل پراکندگی مسئول این تفاوت است، انتظار داریم که δ_l ، δ_j و اندازه‌ای، شکل مقطع موثر پراکندگی را تعیین کند. با قراردادن شکل‌های مجانبی $R_{kl}(r)$ و $j_l(kr)$ در (۳۷-۸)، خواهیم داشت

$$\begin{aligned} & \sum_{l=0}^{\infty} a_l P_l(\cos \theta) \frac{\sin(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l)}{kr} \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l P_l(\cos \theta) \frac{\sin(kr - \frac{1}{2}l\pi)}{kr} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (38-8) \end{aligned}$$

با مرتب کردن جملات داریم

$$\sum_{l=0}^{\infty} \frac{P_l(u)}{kr} \left[a_l \sin \left(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l \right) - (2l+1)i^l \sin \left(kr - \frac{1}{2}l\pi \right) \right] = f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

با

* قبلًا دیدیم که یک پتانسیل $1/r$ از شکل مجانبی مطلوب در بینهایت انحراف پیدا می‌کند

$$\begin{aligned} & \sum_{l=0}^{\infty} \frac{P_l(u)}{2ik} \left[e^{-\frac{1}{2}i\pi l} (a_l e^{i\delta_l} - (2l+1)i^l) \frac{e^{ikr}}{r} - e^{\frac{1}{2}i\pi l} (a_l e^{-i\delta_l} - (2l+1)i^l) \frac{e^{-ikr}}{r} \right] \\ & = f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \end{aligned} \quad (39-8)$$

که در آن $u = \cos \theta$. طرف‌های راست و چپ (۳۹-۸) تنها در صورتی می‌توانند برابر باشند که ضریب e^{-ikr}/r صفر شود ، یعنی ،

$$a_l = (2l+1)i^l e^{i\delta_l}$$

این رابطه ضرایب را در (۳۷-۸) تعیین می‌نماید . بالاخره ، این نتیجه را در (۳۹-۸) می‌بریم و خواهیم داشت

$$\sum_{l=0}^{\infty} \frac{P_l(u)}{2ik} e^{-il\pi/2} (2l+1)i^l (e^{i2\delta_l} - 1) \frac{e^{ikr}}{r} = f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (40-8)$$

و به دنبال آن نتیجه می‌کیریم

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{P_l(u)}{2ik} e^{-il\pi/2} (2l+1)i^l (e^{i2\delta_l} - 1)$$

با

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{il\theta} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) \quad (41-8)$$

این رابطه برای دامنه پراکندگی ، گرچه جمع و جور نیست ، رابطه دقیقی است . سری فوق یک سری پریشیدگی نیست و مستقل از قدرت پراکننده است . تنها محدودیت دراعتبار آن این است که پتانسیل سریع تر از پتانسیل $1/r$ سقوط کند . برای محاسبه مقطع موثر ، نخست معادله شعاعی (۳۶-۸) را برای هر مقداری از r حل می‌کنیم . بعدها پیدا کردن $R_{kl}(r)$ شکل مجانبی آنرا بررسی می‌کنیم و r را ، که هر کدام از آنها بستگی به k (انرژی) دارد ، بددست می‌آوریم . معادله (۴۱-۸) فوراً "دامنه پراکندگی" را به دست می‌دهد . بالاخره ، مقطع موثر با استفاده از

$$\begin{aligned} \sigma(\theta) &= |f(\theta)|^2 \\ &= \frac{1}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) e^{i(l\theta-l'\theta)} \sin \delta_l \sin \delta_{l'} P_l(u) P_{l'}(u) \end{aligned} \quad (42-8)$$

به دست می‌آید. توجه کنیم که اگر $\theta = \pi/2$ باشد، تمام δ_i ها صفر می‌شوند و $\sigma(\theta) = 0$ ، همان‌طور که انتظار می‌رود.

مقطع مؤثر کل خواهد بود

$$\sigma_T = \int \sigma d\Omega = 2\pi \int_{-1}^1 \sigma(u) du = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (43-8)$$

در به دست آوردن (43-8)، از رابطه تعامل

$$\int_{-1}^1 du P_l(u) P_{l'}(u) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}$$

استفاده شده است. توجه کنیم که

$$\operatorname{Im} f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l P_l(u)$$

چون برای $\theta = 0$ داریم $P_l(1) = 1$ ، نتیجه می‌گیریم

$$\frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(0) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l = \sigma_T \quad (44-8)$$

معادله (44-8) دقیق است و قضیه نوری نظریه پراکندگی را بیان می‌دارد. در واقع، قسماً موهومی (0) را متناسب با تعداد ذراتی است که از جهت تابش منحرف می‌شوند. قضیه نوری این عدد را به تعداد کل ذراتی که در باریکه پراکنده شده ظاهر می‌شود ربط می‌دهد و بنابر این بیانی است از پایستگی احتمال. این قضیه مشابه با رابطه $1 = \mathcal{P} + \mathcal{Q}$ در پراکندگی یک بعدی است.

-۸- تقریب جابه‌جایی فاز جزئی

روش امواج جزئی منجر به مقطع موثری به‌شکل یک مجموع بینهایت جمله می‌شود. بنابر این وقتی که چند جمله اول تقریب درستی را نشان دهد، مفیدترین است. این روش، در واقع، باریکهٔ فرودی را بر حسب مقادیر آنها (تکانهٔ زاویه‌ای) به امواج جزئی تجزیه می‌کند. هر موج دارای دامنهٔ پراکندگی مشخص است که به‌وسیلهٔ جابه‌جایی فاز آن، δ ، تعیین می‌شود. دامنهٔ کل برابر است با مجموع دامنه‌های امواج جزئی.

امواجی که آنها بزرگ است متناظر با ذراتی هستند که پارامتر برخورد آنها بزرگ است. همان‌گونه که در مورد کلاسیکی ملاحظه کردیم، این ذرات به طور قابل ملاحظه‌ای پراکنده نمی‌شوند. بنابراین سهم مهمی در مقطع موثر ندارند و می‌توانند نادیده گرفته شوند.

مقطع موثر تقریبی به دست آمده در صورتی درست است که پتانسیل کوتاه برد باشد.

از نظر کلاسیکی، برای یک پتانسیل سخت-کره به شاعر R ، آن ذراتی که پارامتر برخورد آنها در گستره $R > b$ است پراکنده نخواهند شد. با ضرب و تقسیم طرف چپ در تکانه زاویه‌ای، شرط فوق می‌تواند به صورت $R > bp/p$ بیان شود. با قرار دان

$$\text{تکانه زاویه‌ای} \quad bp = L = \hbar(l(l+1))^{1/2} \simeq \hbar l \quad \text{و} \quad p = (2m\epsilon)^{1/2} = \hbar k \quad \text{به شرط}$$

$$\frac{\hbar l}{\hbar k} > R \quad \text{یا} \quad l > kR$$

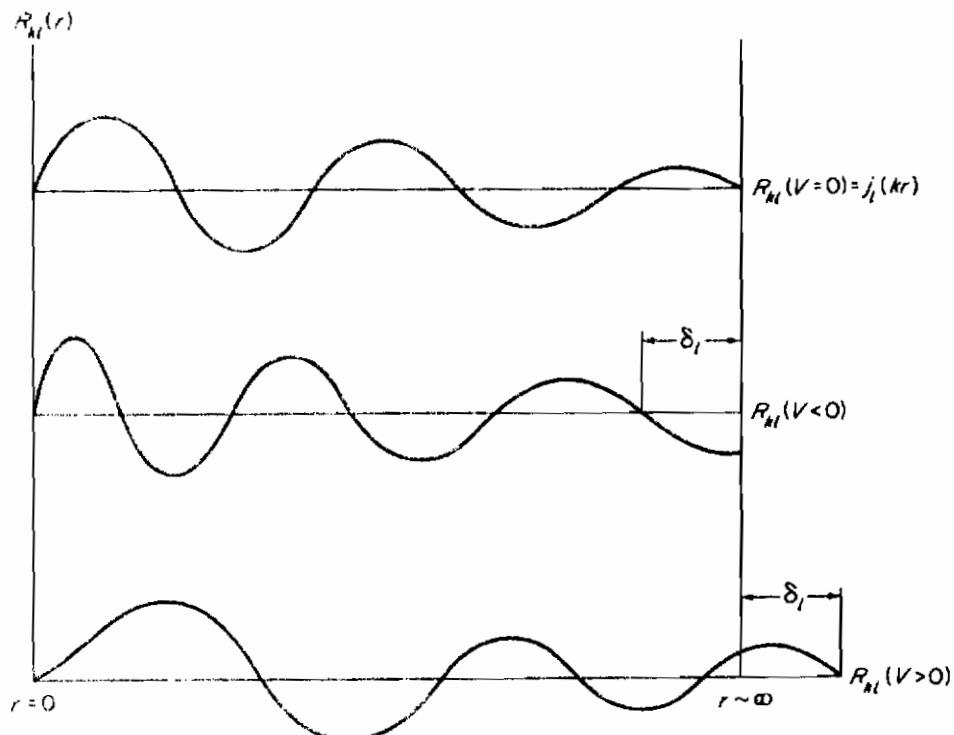
خواهیم رسید. به طور کلی تر، اگر R برد پتانسیل باشد، آن امسواجی که برای آنها $l \gg l_{\max} = kR$ باشد از نظر مکانیک کوانتومی به اندازه قابل ملاحظه‌ای پراکنده نمی‌شوند. برای یک مقدار k (انرژی) و برد معین، مقطع موثر تقریبی (۴۵-۸) می‌تواند به صورت

$$\sigma \simeq \left| \sum_{l=0}^{l_{\max}} \frac{1}{k} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) \right|^2 \quad (45-8)$$

نوشته شود. برای یک برد مشخص، l_{\max} با کاهش k کاهش می‌یابد، درنتیجه، تعداد کمتری از جملات برای به دست آوردن مقطع موثر تقریبی لازم است. به طور معادل، وقتی تعداد ثابتی از جملات در (۴۵-۸) نگاه داشته می‌شوند، دقت مقطع موثر با کاهش k افزایش می‌یابد. بنابراین، این تقریب، برخلاف تقریب بورن، برای انرژی‌های فرودی پائین اعتبار دارد.

جایه‌جایی فاز جزئی δ ، δ ، به انرژی فرودی (یا k) و به طبیعت پتانسیل پراکنده‌ی بستگی دارد. برای بعضی از پتانسیلهای "معمول" جاذبه، موج پراکنده شده به سوی پراکنده کشیده می‌شود، ولذا یک δ مثبت ایجاد می‌کند. عکس این مطلب عموماً "برای پتانسیلهای دافعه صادق است (شکل ۴-۶). این مطلب می‌تواند بدین ترتیب درک شود که برای پتانسیلهای جاذبه، $\delta < 0$ ، انرژی‌جنبی در مجاورت پراکنده زیاد است. پارامتر

$\lambda = 2\pi/k = (2m(\epsilon - V)/\hbar^2)^{1/2}$ نیز بزرگ است ولذا یک طول موج دوبروی منقبض شده ایجاد می‌کند. بنابراین تابع موج به طرف پراکنده کشیده می‌شود. برای پتانسیلهای دافعه انرژی جنبشی و پارامتر k در نزدیکی پراکنده کمترین مقدارشان را دارند، در نتیجه طول موج بیشترین مقدار را دارد و موج از پراکنده دور می‌شود.



شکل (۴-۸) تاثیر پتانسیلهای نیروی مرکزی جاذبه و دافعه روی شکل مجانبی و پیزه تابعهای شعاعی.

اگر فرض کنیم که سهم عده σ در (۴۵-۸) از امواج δ ($\delta = 0$) حاصل می‌شود، این مقطع موثر به طور حساسی به δ_0 بستگی دارد. اگر برای یک انرژی داده شده δ_0 برابر با $n\pi$ شود، داریم $0 = \delta_0$ و (۴۵-۸) یک افت چشمگیری در مقطع موثر پراکنده بیشگویی می‌کند. این اثر به طور تجربی در پراکنده کترونهای کم انرژی (۱~۷eV) از اتمهای گاز بسیار مشاهده شده است. غیاب چشمگیر پراکنده در این انرژی، اثراً مسحور - تونزند 3^α نامیده می‌شود. این اثر در پراکنده کترونهای از اتمهای گاز بسیار مشاهده شده می‌شود که در آن در بعضی انرژیها، کترونهای دچار افت چشمگیری در پراکنده می‌شوند. در دیگر انرژیها، جابه‌جایی فاز می‌تواند برابر با $\pi(n + \frac{1}{2})$ شود، که در این صورت پراکنده تشدید

می شود . در این انرژیها ، تشیدهای s -موج داریم . تشیدهای مشابهی می تواند برای مقادیر بالاتر / رخ دهد .

۹ - پراکندگی s -موج

تقریب موج جزئی را به محاسبه مقطع موثر وابسته به پتانسیل

$$V = V_0 \quad , \quad 0 < r \leq R \quad \text{برای}$$

$$V = 0 \quad , \quad r > R \quad \text{برای}$$

اعمال خواهیم کرد . جابه جاییهای فاز با حل معادله شعاعی متناظر

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dr^2} u_{kl}(r) + \left(K^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u_{kl}(r) &= 0 \quad (0 < r \leq R) \\ \frac{d^2}{dr^2} u_{kl}(r) + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u_{kl}(r) &= 0 \quad (r > R) \end{aligned} \quad (46-\lambda)$$

به دست می آیند که در آنها قراردادهایم

$$R_{kl} = \frac{u_{kl}}{r}, \quad k = \left(\frac{2m\epsilon}{\hbar^2} \right)^{1/2},$$

$$K = \left(\frac{2m(\epsilon - V_0)}{\hbar^2} \right)^{1/2} \quad \text{لی} \quad K = [k^2 - (2mV_0/\hbar^2)]^{1/2}$$

جوابهای قابل قبول برای R_{kl} باید در همه جا متناهی ، پیوسته و مشتق پذیر باشند . ما توجه خود را به جوابهای s -موج معطوف می کنیم . جواب داخلی ($R \leq r \leq R$) برای $\epsilon = 0$ در (46-۸) عبارت است از

$$u_{k0} = A \sin Kr + B \cos Kr$$

اما ، ویژه تابعهای شعاعی

$$R_{kl} = \frac{u_{kl}(r)}{r}$$

در صورتی و فقط در صورتی می‌توانند در مبدأ متناظر بمانند که $u_{k0}(0) = 0$ باشد. این مطلب ایجاب می‌کند که قرار دهیم $B = 0$ و بنویسیم

$$u_{k0}(r \leq R) = A \sin Kr \quad (47-8)$$

جواب خارجی می‌تواند به صورت

$$u_{k0}(r > R) = D \sin(kr + \delta_0) \quad (48-8)$$

نوشته شود. پیوستگی R_{k0} و مشتق آن در $r = R$ ایجاب می‌کند که*

$$\frac{u'_{k0}(r \leq R)}{u_{k0}(r \leq R)} \Big|_{r=R} = \frac{u'_{k0}(r > R)}{u_{k0}(r > R)} \Big|_{r=R}$$

که، با استفاده از (47-8) و (48-8)، خواهد شد

$$K \cot KR = k \cot(kR + \delta_0)$$

یا

$$\left(\frac{2m(\epsilon - V_0)}{\hbar^2} \right)^{1/2} \cot \left(\frac{2m(\epsilon - V_0)}{\hbar^2} \right)^{1/2} R = \left(\frac{2m\epsilon}{\hbar^2} \right)^{1/2} \cot \left(\left(\frac{2m\epsilon}{\hbar^2} \right)^{1/2} R + \delta_0 \right) \quad (49-8)$$

جا به جایی فاز δ - موج از حل (49-8) برای δ_0 بر حسب ϵ و V_0 ، به دست می‌آید. با استفاده از (45-8)، مقطع موثر σ - موج می‌شود

$$\sigma^{(s)} = \frac{1}{k^2} \sin^2 \delta_0$$

تشدیدهای σ - موج وقتی رخ می‌دهند که $\delta_0 = (n + \frac{1}{2})\pi$ و در نتیجه $\sin^2 \delta_0$ باشد. انرژی فرودی تشددی ϵ_n ، که در آن بهینه پراکندگی موجهای δ (برای R و V_0 ثابت)

* شرط پیوستگی تابع و مشتق آن می‌تواند با این خواسته که مشتق لگاریتمی تابع پیوسته باشد، برقرار گردد. از نظر ریاضی

$$\frac{u'_1}{u_1} = \frac{u'_2}{u_2}$$

با رابطه $(\ln u_1)' = (\ln u_2)'$ معادل است.

رخ می‌دهد، از جوابهای (۴۹-۸) با قراردادن $\pi(\frac{1}{2} + n) = \delta_0$ به دست می‌آید.

اشری از نوع رامسون در انرژیهایی در (۴۹-۸) رخ می‌دهد که برای آنها داشته باشیم

$$\delta_0 = \pi n \quad \text{در این مورد } 0 = \sin^2 \delta_0 \quad \text{و همچنین نوع پراکندگی } s - \text{موج صورت نمی‌گیرد.}$$

قطع موضع s - موج دقیقاً "قطع موضع حقیقی را توصیف می‌کند به شرط اینکه $kR \ll \epsilon$

یا $\hbar^2/2mR \ll \epsilon$ ، یعنی، انرژیهای فروودی پائین باشند. از طرف دیگر، وقتی انرژیهای بالا هستند، یعنی $V_0 \gg \epsilon$ ، قطع موضع بورن معمولاً "تقریب بهتری را نشان می‌دهد.

قابل توجه است که در مورد حدی $\infty \rightarrow V_0$ (کره نفوذناپذیر)، تقریب بورن کلاً غیرقابل اعمال است. اما، روش امواج جزئی می‌تواند مستقیماً اعمال شود. جواب داخلی

برای $V_0 = \infty$ خواهد شد

$$u_{k0}(r \leq R) \equiv 0$$

شرط پیوستگی در $R = r$ برای امواج s می‌شود

$$u_{k0}(r \leq R)|_{r=R} = B \sin(kR + \delta_0) = 0$$

که از آن نتیجه می‌شود $\delta_0 = -kR$. قطع موضع دیفرانسیلی s - موج برای یک کره نفوذناپذیر می‌شود

$$\sigma^{(s)} = \frac{1}{k^2} \sin^2 \delta_0 = \frac{1}{k^2} \sin^2(-kR)$$

در حد انرژیهای پائین، $1 \ll kR$ ، داریم

$$\sigma \simeq \sigma^{(s)}(kR \ll 1) = \frac{1}{k^2} \sin^2(-kR) \simeq \frac{1}{k^2} (-kR)^2 = \frac{1}{k^2} k^2 R^2$$

قطع موضع کل s - موج به صورت زیر به دست می‌آید

$$\sigma_T \simeq \sigma_T^{(s)} = 4\pi R^2 \quad (50-8)$$

توجه کنیم که (۵۰-۸) شامل \hbar نیست. با این وجود، این نتیجه نمی‌تواند یک نتیجه کلاسیکی باشد زیرا انتظار این است که حد کلاسیکی در انرژیهای بالا باشد*. بعلاوه، قطع موضع برای کره سخت به طور منطقی فقط πR^2 است. ضریب ۴ در (۵۰-۸) از تداخل آثار مکانیک

* در واقع می‌توان نشان داد که وقتی $\infty \rightarrow \epsilon$ ، قطع موضع کوانتومی به سمت $2\pi R^2 \sim$ میل کند که دو برابر نتیجه کلاسیکی است. این اختلاف آشکار به این واقعیت مربوط می‌شود که پتانسیل سخت - کره به طور ناگهانی در $R = r$ تغییر می‌کند.

کوانتمومی سرچشمه می‌گیرد. این واقعیت که \hbar حضور ندارد، باید بهناپیوستگی غیرفیزیکی پتانسیل پراکندگی در $R = r$ نسبت داده شود.

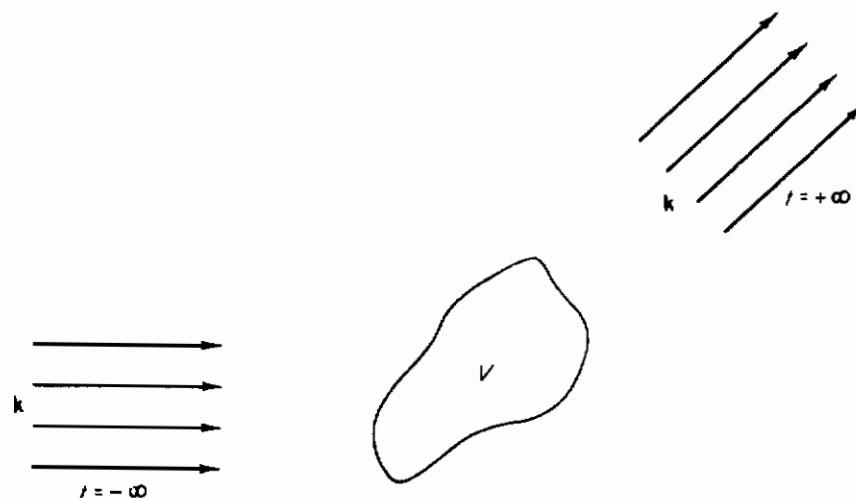
۱۰- پراکندگی کوانتمومی دینامیکی و گذارها

روشهای پراکندگی بحث شده در بالا برای پراکندگیهای کشسان ذرات از پراکنده ثابت کاملاً "عمومی" هستند، اما نمی‌توانند به مسائل غیرمکانیک موجی تعمیم داده شوند. یک مسئله از این قبیل، به عنوان مثال، پراکندگی کامپتونی فوتونها از الکترونها آزاد است، که شامل پراکندگی میدان الکترومغناطیسی کوانتیده است.

سپس صورت‌بندی‌ای را توسعه می‌دهیم که می‌تواند برای تمام فرایندهای کوانتمومی اساسی طبیعی به کار رود. این صورت‌بندی را به پراکندگی ذرات از پتانسیلهای ثابت، به منظور اثبات هم‌ارزی آن با روشهای مانای بحث شده در فوق، اعمال خواهیم کرد.

روش دینامیکی پراکندگی براساس قاعده طلائی فرمی استوار است و پدیده پراکندگی را به عنوان فرایند گذار از یک حالت اولیه تکانه $\langle \mathbf{k} |$ به یک حالت نهایی دیگر $\langle \mathbf{k}' |$ در نظر می‌گیرد. گذار بهوسیله پریشیدگی پراکندگی ۷-۲ (شکل ۷-۸) القاء می‌شود. میزان احتمالی که با آن ذرات از $\langle \mathbf{k} |$ به $\langle \mathbf{k}' |$ می‌روند، از (۷-۲)، عبارت است از

$$R_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \left[\frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum_{j=1}^{\infty} \lambda^j M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{(j)} \right|^2 \rho(\mathbf{k}') \right]_{\varepsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}'}} \quad (7-8)$$



شکل (۷-۸) فرایند پراکندگی که به صورت یک گذار از یک حالت اولیه تکانه ($t = -\infty$) به یک حالت نهایی آن (در $t = +\infty$) نشان داده شده است. گذار بهوسیله پتانسیل پراکندگی القاء شده است.

جمله $M_{kk}^{(j)}$ معرف دامنه‌گذار مرتبه j است. چند دامنه اول، از (۵۲-۱) ، با قراردادن $d\mathbf{n} = [\mathcal{V}/(2\pi)^3] d\mathbf{k}$ به صورت زیر به دست می‌آیند*

$$\begin{aligned} M_{kk}^{(1)} &= \langle \mathbf{k}' | \hat{P} | \mathbf{k} \rangle \\ M_{kk}^{(2)} &= \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int \frac{\langle \mathbf{k}' | \hat{P} | \mathbf{k}'' \rangle \langle \mathbf{k}'' | \hat{P} | \mathbf{k} \rangle d\mathbf{k}''}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}''}} \\ M_{kk}^{(3)} &= \left(\frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \right)^2 \int \frac{\langle \mathbf{k}' | \hat{P} | \mathbf{k}'' \rangle \langle \mathbf{k}'' | \hat{P} | \mathbf{k}''' \rangle \langle \mathbf{k}''' | \hat{P} | \mathbf{k} \rangle d\mathbf{k}'' d\mathbf{k}'''}{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}''})(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'''})} \quad (52-1) \end{aligned}$$

برای مسئله پراکندگی مورد نظر، ویژه تابعهای بهنجار شده در جعبه

$$|\mathbf{k}\rangle \rightarrow \psi_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (53-1)$$

ویژه حالت‌های ذره‌آزاد را نشان خواهد داد. انرژیها و شارهای متناظر عبارتند از

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \text{و} \quad \mathbf{J} = \frac{1}{\mathcal{V}} \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} \quad (54-1)$$

دامنه اول گذار در (۵۲-۱) به شکل زیر است

$$\begin{aligned} M_{kk}^{(1)} = \langle \mathbf{k}' | \hat{P} | \mathbf{k} \rangle &= \frac{1}{\mathcal{V}} \int V(\mathbf{r}') e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}'} d\mathbf{r}' \\ &= \frac{1}{\mathcal{V}} V(\mathbf{K} = \mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (55-1) \end{aligned}$$

چگالی حالت‌های (با نادیده گرفتن اسپین) وابسته به این ویژه تابعهای با استفاده از (۱۶-۵) که عبارت است از

$$d\mathbf{n} = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} d\mathbf{k} = \rho(\mathbf{k}) d\mathbf{e}$$

به دست می‌آید. با بیان این معادله در مختصات قطبی کروی و استفاده از (۵۴-۱)، خواهیم داشت

* فرض می‌شود که فرایند پراکندگی در یک جعبه بزرگ با حجم \mathcal{V} اتفاق افتاده است (رس. معادله ۱۶-۵).

$$\frac{\gamma}{(2\pi)^3} d\Omega_{\mathbf{k}} k^2 dk = \rho(\mathbf{k}) dk = \rho(\mathbf{k}) \frac{\hbar^2 k}{m} dk$$

یا

$$\rho(\mathbf{k}) = \frac{\gamma}{(2\pi)^3} \frac{mk}{\hbar^2} d\Omega_{\mathbf{k}} \quad (56-\lambda)$$

معادله (۵۶-λ) نمایشگر تعداد حالتها بی، بر واحد انرژی، است که بردار \mathbf{k} ای آنها در زاویه حجمی $d\Omega_{\mathbf{k}}$ قرار دارد. تعداد کل ذراتی که در واحد زمان به این زاویه حجمی وارد می‌شوند، با استفاده از (۵۱-λ)، عبارتنداز

$$R_{\mathbf{kk}'} = dN_{\mathbf{kk}'} = \left[\frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum_{j=1}^{\infty} \lambda^j M_{\mathbf{kk}'}^{(j)} \right|^2 \frac{\gamma}{(2\pi)^3} \frac{mk'}{\hbar^2} d\Omega_{\mathbf{k}'} \right]_{k=k'}$$

یا

$$dN_{\mathbf{kk}'} = \frac{\gamma mk}{(2\pi)^2 \hbar^3} \left| \sum_{j=1}^{\infty} \lambda^j M_{\mathbf{kk}'}^{(j)} \right|_{k=k'}^2 d\Omega_{\mathbf{k}'}$$

با تقسیم طرفین بر شار فرودی $J_{\text{inc}} = (1/\gamma)(\hbar k/m)$ ، بالاخره مقطع موثر خواهد شد

$$\sigma = \frac{1}{J_{\text{inc}}} \frac{dN_{\mathbf{kk}'}}{d\Omega_{\mathbf{k}'}} = \frac{\gamma^2 m^2}{(2\pi \hbar^2)^2} \left| \sum_{j=1}^{\infty} \lambda^j M_{\mathbf{kk}'}^{(j)} \right|_{k=k'}^2 \quad (57-\lambda)$$

در نگاه اول عجیب به نظر می‌رسد که چرا حجم جعبه به کار برده شده در بهنجارش λ باید در مقطع موثر وارد شود. اما، هر جمله شامل $M_{\mathbf{kk}'}^{(j)}$ حاوی یک ضریب مناسبی است که هر نوع بستگی معکن σ به حجم را حذف می‌کند.

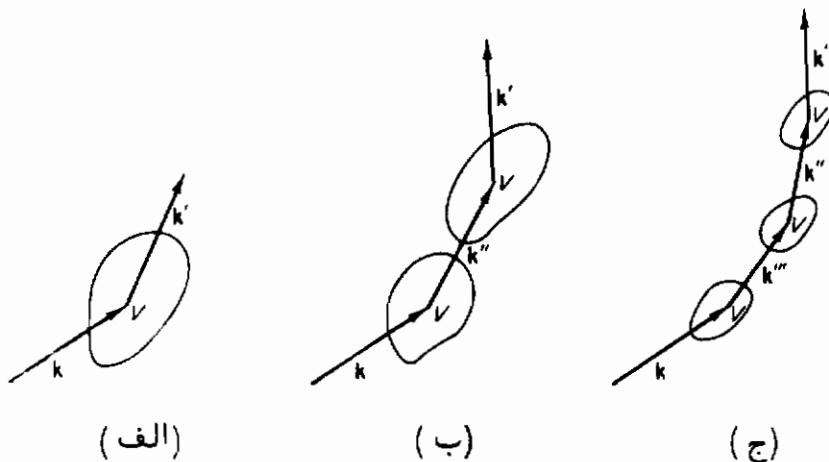
اگر λ کوچک باشد، تنها نیاز به نگاهداری دامنه اول

$$M_{\mathbf{kk}'}^{(1)} = \frac{1}{\gamma} V(\mathbf{k})$$

داریم و مقطع موثر مرتبه اول خواهد شد

$$\begin{aligned} \sigma^{(1)} &= \frac{\gamma^2 m^2}{(2\pi \hbar^2)^2} \left| \frac{\lambda}{\gamma} V(\mathbf{K}) \right|^2 \\ &= \left(\frac{\lambda m}{2\pi \hbar^2} \right)^2 |V(\mathbf{K})|^2 \end{aligned} \quad (58-\lambda)$$

نتیجه مرتبه اول با تقریب اول بورن (۲۹-۸) یکسان است . در واقع ، می‌توان چنین کرد (رک مسئله ۱۰-۸) که دامنه‌های بالاتر نیز جمله به جمله با جمله‌های سری بورن (۲۹-۸) برابر باشند . گفته می‌شود که هر دامنه گذار در (۵۷-۸) یک فرایند را نشان می‌دهد . در سورد پراکندگی از یک پتانسیل ثابت ، می‌توان به هر $M_{kk}^{(l)}$ در (۵۷-۸) یک نمودار نسبت داد . فرایند مرتبه اول شامل یک پیکان ورودی برای k ، یک رأس برای پتانسیل ν و یک پیکان خروجی برای k' (شکل ۸-۸) است . فرایند مرتبه دوم شامل یک پیکان ورودی برای k ، یک رأس برای ν ، یک پیکان وسط برای k'' ، یک رأس دیگر برای ν و یک پیکان خروجی برای k' می‌باشد . این نوع نمودارها توسط فاینمن^۴ معرفی شدند و از آن به بعد به همین نام نامیده می‌شوند . این نمودارها بخصوص در مسائل پیچیده‌تر وابسته به پراکندگی میدانهای کوانتومی که در آن پراکندگی چندذره‌ای صورت می‌گیرد مفید هستند . به تناظر بین انتگرالهای مربوط به $M_{kk}^{(l)}$ در (۵۲-۸) و نمودارهای فاینمن در شکل (۸-۸) توجه کنیم . در فصل ۱۲ فرصت خواهیم یافت که قاعده طلائی فرمی را در بحث الکترودینامیک کوانتومی به کار برمی .



شکل (۸-۸) نمودارهای فاینمن برای پراکندگی از یک پتانسیل ثابت در (الف)
مرتبه اول ، (ب) مرتبه دوم و (ج) مرتبه سوم .

۱۱ - پراکندگی ناکشان و جذب

در مسائل پراکندگی که تا اینجا بررسی کرده‌ایم ، پتانسیل ایستای هدف ثابت یک نقش غیرفعال بازی می‌کرد . در نتیجه ، دو اصل پایستگی زیر در مقطع موثر منعکس شدند .
(۱) پایستگی انرژی ، یعنی ، باریکه‌های فرودی و پراکنده شده دارای انرژیهای برابر

بودند (پراکنده بگی کشسان) .

(۲) پایستگی ذرات، یعنی، به تعداد ذرات منحرف شده از باریکه فرودی در باریکه پراکنده شده ظاهر شدند (قضیه اپتیکی) .

در موارد زیادی، هدف نقش فعالی در فرایند پراکنده بگی بازی می‌کند . به عنوان مثال، در فرایند واقعی پراکنده بگی راترفورد، هسته‌های پس زده طلا ناقل هم انرژی و هم تکانه هستند . ذرات پراکنده شده لا در اثر برخورد لزوماً مقداری انرژی از دست می‌دهند . انرژی کل (پرتابه + هدف) / درایین وضعیت پایسته می‌ماند . در پراکنده بگی الکترونها از اتمها، پرتابه ممکن است با برآگبختن داخلی هدفها انرژی از دست بدهند . بنابراین پرتابه‌ها ممکن است به طور ناکشسان پراکنده شوند . در فرایندهای پراکنده بگی دیگر، ممکن است پرتابه بدو سیله هدف ریشه با جذب شود . این یدیده در واکنشهای هسته‌ای کاملاً عادی است . بنابراین عده قابل راست ذرات را حذف کند؛ تعداد ذرات حذف شده از باریکه فرودی نیازی ندارند که در باریکه پراکنده شده ظاهر شوند .

گفته می‌شود که هر مد پراکنده بگی (کشسان، ناکشسان، جذب) یک "کانال" نمایش می‌دهد و هر کدام مقطع موثری دارد که می‌تواند با استفاده از قاعده طلائی فرمی محاسبه شود . اما در چنین محاسبه‌ای طبیعت دقیق پراکنده باید گنجانیده شده باشد . به طور کلی، تجزیه و تحلیل فرایندهای پراکنده بگی مستلزم درک مسئله چند جسمی است .

در فصلهای ۹ و ۱۵ مکانیک کوانتومی مسئله چند جسمی را آنگونه که به حالتهای مقید و پراکنده بگی مربوط است، بحث خواهیم کرد .

مسئلے

۱-۸ (الف) با استفاده از نظریه کلاسیکی، یک عبارت عمومی برای مسیر هذلولی شکل ذره‌ای، که به وسیله پتانسیل $V = ZZ' e^2/r$ از مبدأ دفع می‌شود به دست آورید .

(ب) نشان دهید که رابطه بین پارامتر برخورد b و زاویه پراکنده θ عبارت است از

$$b = \left(\frac{ZZ' e^2}{2c} \right) \cot \frac{\theta}{2}$$

(ج) با استفاده از (۱-۸) نشان دهید که مقطع موثر راترفورد به وسیله

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{ZZ' e^2}{4c} \right)^2 \sin^{-4} \left(\frac{\theta}{2} \right)$$

داده می شود .

۲-۸ (الف) با استفاده از مکانیک کلاسیکی ، رابطه $b(\theta) = b$ را برای یک پتانسیل کروی غیرقابل نفوذ $V = \infty$ برای $R \leq r = 0$ برای جاهای دیگر ، به دست آورید .

(ب) مقطع موثر دیفرانسیلی را برای این پتانسیل به دست آورید .

(ج) نتیجه (ب) را انتگرال گیری کنید و مقطع موثر کل را به دست آورید (توجه کنید که مقطع موثر مستقل از ϵ است) .

۳-۸ عباراتی برای ضرایب متربک ، لاپلاسی و عنصر حجم در مختصات سه‌می به دست آورید .

۴-۸ (الف) مقطع موثر دیفرانسیلی کلاسیکی را برای یک پتانسیل سخت - کره $V_0 = -V$ برای $R \leq r = 0$ در جاهای دیگر ، محاسبه کنید .

(ب) مقطع موثر کوانتومی در تقریب بورن کدام است ؟

(ج) مقطع موثر کوانتومی را با استفاده از تحلیل موج جزئی ، شامل موجهای δ و p به دست آورید .

۵-۸ (الف) با استفاده از مکانیک کلاسیکی ، نشان دهید که رابطه بین پارامتر برخورد و زاویه پراکندگی برای یک پتانسیل $V = K/r^2$ عبارت است از

$$b^2 = \frac{K}{\varepsilon} \frac{1}{\theta} \frac{(\pi - \theta)^2}{(2\pi - \theta)}$$

که در آن ϵ انرژی پرتابه‌ها است .

(ب) مقطع موثر کلاسیکی را برای این پتانسیل محاسبه کنید .

(ج) مقطع موثر کوانتومی را برای یک پتانسیل $1/r^2$ در تقریب بورن پیدا کنید .

۶-۸ نشان دهید کهتابع گرین

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$$

دارای خاصیت زیر است

$$(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

۷-۸ (الف) نشان دهید که دامنه دوم بورن با رابطه

$$f^{(2)} = \left(\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{4\pi} \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{V(\mathbf{k} - \mathbf{k}'')V(\mathbf{k}'' - \mathbf{k}') d\mathbf{k}''}{(k''^2 - k^2)}$$

داده می‌شود.

(ب) عبارت مقطع موثر در تقریب دوم بورن چیست؟

۸-۸ شکل عمومی بستگی زاویه‌ای مقطع موثر را وقتی موج جزئی $\theta = 2$ در نظر گرفته می‌شود بیان کنید.

۹-۸ (الف) نشان دهید که برای انرژیهای پائین ($0 \rightarrow k$) جابه‌جایی فاز δ — موج برای یک پتانسیل سخت—کره ($V = V_0$ برای $R \leq r$)، از (۴۹-۸) به صورت

$$\delta_0 \simeq kR \left[\frac{\tanh[k_0 R]}{k_0 R} - 1 \right] \quad , \quad k_0 = \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2} \right)^{1/2}$$

به دست می‌آید.

(ب) نشان دهید که مقطع موثر کل δ — موج عبارت است از

$$\sigma_0 \simeq 4\pi R^2 \left[\frac{\tanh[k_0 R]}{k_0 R} - 1 \right]^2$$

(ج) این عبارت وقتی $V_0 \rightarrow \infty$ به چه صورتی در خواهد آمد؟

۱۰-۸ نشان دهید که دو جمله اول در (۵۷-۸) همان نتایج دو جمله اول در (۲۴-۸) (تقریب دوم بورن) را می‌دهد.

مراجع پژوهش‌های دی

- Bohm, D., "Quantum Theory," Chapter 21. Prentice-Hall, Englewood Cliff, New Jersey, 1951.
- Landau, L. D., and Lifshitz, E. M., "Quantum Mechanics," 2nd ed., Chapter XVII. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1965.
- Marion, J. B., "Classical Dynamics of Particles and Systems," 2nd ed. Academic Press, New York, 1970.
- Merzbacher, E., "Quantum Mechanics," 2nd ed., Chapter 21. New York, Wiley, 1970.
- Newton, R., "Scattering Theory of Waves and Particles." McGraw-Hill, New York, 1966.
(This advanced text is devoted entirely to scattering phenomena. It is aimed at the more advanced student and considerable mathematical background is required on the part of the student.)
- Rodberg, L. S., and Thaler, R. M., "Introduction to the Quantum Theory of Scattering." Academic Press, New York, 1967.
(This text on scattering is somewhat more introductory and less specialized in its discussions of quantum mechanics than is R. Newton's book above.)

قسمت دوم

سیستم‌های چند ذره‌ای

۹

ذرات بدون برهیم کنش

سیستمهای چندذره‌ای اهمیت و فایده زیادی هم در مکانیک کلاسیکی و هم در مکانیک کوانتومی دارند. حتی هیدرزن، که ساده‌ترین اتمهاست، از دودره تشکیل شده است، پروتون و الکترون. بیشتر مسائل فیزیک اتمی و هسته‌ای شامل تعداد متوسطی ($N \lesssim 100$) از ذرات می‌باشند. در فیزیک جامدات، مایعات و گازها، وضعیت در حقیقت یک مسئله چند جسمی است ($N \sim 10^{23}$). قبل از فرمولبندی نظریه کوانتومی، به طور اختصار بعضی از مفاهیم کلاسیکی سیستمهای چندذره‌ای را مورد بحث قرار خواهیم داد.

۱ - مکانیک کلاسیکی

یک سیستم مرکب از N ذره نقطه‌ای از نظر سینماتیکی به وسیله مجموعه‌ای از N بردار مکانی، که در آن (q) مکان ذره q ام را مشخص می‌کند ($N, 1, \dots, q = 1, \dots, N$) نمایش داده می‌شود. وقتی که بستگی زمانی هریک از این بردارها (با توجه به شرایط اولیه داده شده) مشخص شده باشد، مسئله مکانیکی حل شده تلقی می‌شود.

مطلوب را با ساختن لگرانژی $L = T - \mathcal{L}$ بر حسب N مختصات دکارتی و سرعتهای $x_i^{(q)}$ و $\dot{x}_i^{(q)}$ ($i = 1, \dots, 3, q = 1, \dots, N$) شروع می‌کنیم که در آن انرژی حنبشی عبارت است از

$$\begin{aligned}
 T &= \sum_{q=1}^N \frac{1}{2} m_q |\dot{\mathbf{r}}^{(q)}|^2 = \sum_{q=1}^N \sum_{i=1}^3 \frac{1}{2} m_q \dot{x}_i^{(q)2} \\
 &= \sum_{q=1}^N \frac{1}{2} m_q (\dot{x}^{(q)2} + \dot{y}^{(q)2} + \dot{z}^{(q)2})
 \end{aligned} \tag{1-9}$$

* انرژی پتانسیل به صورت زیر تجزیه خواهد شد

$$V = \sum_q V_q + \frac{1}{2} \sum_q \sum_{q \neq i} V_{qi}$$

که در آن V_q انرژی پتانسیل ذره q ام ناشی از نیروهای خارجی است و V_{qi} مابینگر انرژی برهم‌کش بین ذرات q ام و i ام می‌باشد. فرض خواهیم کرد که V_{qi} مستقل از سرعت است و در قانون سوم نیوتون، یعنی $V_{qi} = V_{iq}$ ، صدق می‌کند. در موارد زیادی V_{qi} فقط تابعی از فاصله بین دو ذره است.

با اعمال معادلات لاگرانژ (۲-۲۶) به (۱-۹)، تعداد ۳ معادله دیفرانسیل برای

$\ddot{x}_i^{(q)}$ به صورت

$$m_i \ddot{x}_i^{(q)} - \frac{\partial V}{\partial x_i^{(q)}} - \frac{\partial}{\partial x_i^{(q)}} \sum_{l \neq q} V_{ql} = 0 \quad (i = 1, 2, 3, \quad q = 1, \dots, N)$$

یا به شکل بودایی

$$m_q \ddot{r}^{(q)} - \nabla^{(q)} V(r^{(q)}) - \nabla^{(q)} \sum_{l \neq q} V(r^{(q)} - r^{(l)}) = 0 \quad (q = 1, \dots, N) \quad (2-9)$$

به دست می‌آید.

معادلات (۲-۹) را برای $r^{(q)}$ با در نظر نرفتن شتابه اولیه $r_0^{(q)} = r^{(q)}(0)$ و $v_0^{(q)} = \dot{r}^{(q)}(0)$ حل می‌تواند. اشکال در حل (۲-۹)، حتی برای تعداد نسبتاً کمی از ذرات، از این واقعیت ناشی می‌شود که این معادلات جفت شده هستند، یعنی، معادله q ام شامل 2^q است. توجه کنیم که این جفت شدگی از انرژی پتانسیل برهم‌کش سرچشم می‌گیرد نه از نیروهای خارجی که روی هر ذره به طور انفرادی عمل می‌کند. متأسفانه همچ روش عمومی وجود ندارد که دستگاه معادلات (۲-۹) را تفکیک و آنرا قابل حل کند. برای برهم‌کنشهای بسیار خاصی، گاهی اوقات می‌توان معادلات حرکت را، با تبدیل به مجموعه

* جمله برهم‌کش V_{qq} حذف شده است زیرا یک ذره نمی‌تواند روی خودش نیرو وارد کند. ضریب $\frac{1}{2}$ برای جبران دوبارشمردن وارد شده است. بعضی از مولفیین از نمادگذاری

$$\frac{1}{2} \sum_q \sum_{q \neq i} V_{qi} = \sum_q \sum_{i < q} V_{qi}$$

که در آن دوباره شماری صورت نمی‌گیرد استفاده می‌کنند.

دیگری از مختصات بندادی، تغییری نیست. به عبارت دیگر وقتی فقط ذره برهم کشتنده، بدون هیچ نوع نیروی خارجی، داریم $\ddot{x}_1 = \dots = \ddot{x}_N$ ، میتوانند با استفاده از تبدیل به مرکز جرم تفکیک شوند. متاسفانه این روش نصیحتهای خوبی دارد که ذره تعیین داده شود. در مورد خاصی که N ذره توسط نیروهای کشسان با یکدیگر به هم کشش میکنند (یعنی، وقتی انرژی پتانسیل به شکل یک عبارت درجه دوم از مختصات است) تبدیل دیگر (تبدیل به مختصات بهنجار) وجود دارد که مسئله را قابل حل میکند*. در فصل ۱۵ بهاین مسئله بازخواهیم گشت. وقتی معادلات حرکت جفت شده هستند، آنها میشود که حرکات ذرات از نظر دینامیکی همبسته‌اند. در این صورت حرکت هر ذره در راسته های تمام ذرات دیگر تأثیر می‌گذارد. در موارد نسبتاً نادری که برهم کنشها صرف نظر کردند میتوانند یا شاید وجود ندارند، معادلات حرکت، علی‌الاصول، تفکیک می‌شوند و مسئله به شکلی که پیشتر به مسئله‌ای که شامل N مسئله یک جسمی است تقلیل می‌یابد. حرکت یک سیستم "ایده‌آل" به عنوان مثال، گاز ایده‌آل، از نظر دینامیکی ناهمبسته است و هر ذره طوری حرکت می‌کند که گوئی ذرات دیگر وجود ندارند. بنابراین می‌توانیم نتیجه بگیریم که از نظر کلاسیکی مسئله N جسمی "ایده‌آل" یا بدون برهم کش دیگر مشکل تراز هیچ یک از مسائل یک جسمی انسان تشکیل دهنده آن نخواهد بود. در عمل، وقتی فاصله متوسط ذرات خیلی بزرگتر از راه پتانسیل برهم کش باشد، سیستم تقریباً "ایده‌آل" می‌شود. بهاین دلیل است که گازهای الاموی با نیروهای بین مولکولی کوتاه برد، وقتی به اندازه کافی رقیق باشند رفتار گاز ایده‌آل از خود نشان می‌دهند.

مسئله مکانیک کوانتومی چند جسمی مشتمل است، با این با همتای کلاسیکی خوددارد. حل مسئله کوانتومی مستلزم حل معادله شرودینگر چند جسمی (جفت شده) است. تفکیک این معادله مشکلاتی شبیه به آنچه که در معادلات لاگرانژ کلاسیکی می‌باشد. پیش آمد پیش می‌آورد. در مورد یک سیستم ایده‌آل (بدون برهم کش) تفکیک ساده و سریاست است. با این وجود، یک تفاوت فاحش بین سیستمهای ایده‌آل کلاسیکی و کوانتومی وجود دارد. این مسئله وقتی رخ می‌دهد که ذرات از یکدیگر تمیز ناپذیر باشند. در مورد کوانتومی، حرکات ذرات هنوز همبسته‌اند، یعنی، ذرات روی یکدیگر تأثیر می‌گذارند هرچند هیچ نیروی بین آنها وجود ندارد. این همبستگی‌ها، آماری (در مقابل دینامیکی) نامیده می‌شوند و هیچ مشابهی در گسترده کلاسیکی ندارند. این همبستگی‌ها عموماً برای بوزون‌ها (در راستا با اسپین درست) جاذبه و برای

* به عنوان مثال به کتاب زیر مراجعه کنید

H. Goldstein, "Classical Mechanics." Addison-wesley, Reading Massachusetts, 1950.

فرمیون‌ها (ذرات با اسپین نیمه‌درست) دافعه‌اند. به علت این همبستگی‌ها، گفته می‌شود که اولیه‌ها از آمار بوز - اینشتین پیروی می‌کنند در حالی که آخربه از آمار فرمی - دیراک پیروی می‌کنند (رک بخش ۱۱). ذرات کلاسیکی همیشه از آمار ماکسول - بولتزمن پیروی می‌کنند. به‌زودی به‌این مسائل باز خواهیم گشت.

همان‌طور که قبلاً دیده‌ایم، عبور به نظریه کوانتومی مستلزم صورت‌بندی هامیلتونی است. هامیلتونی در این مورد درست عبارت است از انرژی کل که بر حسب $p^{(q)}$ و $r^{(q)}$ بیان شده باشد، یعنی

$$\mathcal{H} = \sum_{q=1}^N \frac{|\mathbf{p}^{(q)}|^2}{2m_q} + \sum_{q=1}^N V(\mathbf{r}^{(q)}) + \frac{1}{2} \sum_q^N \sum_{i \neq q}^N V(\mathbf{r}^{(q)} - \mathbf{r}^{(i)}) \quad (3-9)$$

N معادله هامیلتونی حرکت عبارتنداز

$$-\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_i^{(q)}} = \dot{p}_i^{(q)}; \quad \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i^{(q)}} = \dot{x}_i^{(q)} \quad (4-9)$$

مشابه با (۲-۷۶)، هر تابع بندادی از متغیرهای $x_i^{(q)}$ و $p_i^{(q)}$ در معادله حرکت

$$\frac{dA}{dt} = \{A, \mathcal{H}\} + \frac{\partial A}{\partial t} \quad (5-9)$$

صدق می‌کند. کروشه پواسنی دو تابع بندادی عبارت است از

$$\{A, B\} = \sum_{q=1}^N \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial A}{\partial x_i^{(q)}} \frac{\partial B}{\partial p_i^{(q)}} - \frac{\partial B}{\partial x_i^{(q)}} \frac{\partial A}{\partial p_i^{(q)}} \right) \quad (6-9)$$

روابط زیر برای کروشه‌های پواسنی به سادگی اثبات می‌شوند

$$\{x_i^{(q)}, x_j^{(t)}\} = \{p_i^{(q)}, p_j^{(t)}\} = 0$$

و

$$\{x_i^{(q)}, p_j^{(t)}\} = \delta_{ij} \delta_{qt} \quad (7-9)$$

در واقع، اگر A و B به ترتیب توابع بندادی وابسته به ذرات q و t باشند، داریم

$$\{A^{(q)}, B^{(t)}\} = 0 \quad (t \neq q) \quad (\text{برای})$$

۲- گذار به مکانیک کوانتومی

مجموعه‌ای از N ذره که مختصات و تکانه‌های بندادی آنها $r^{(q)}$ و $p^{(q)}$ باشند در نظر بگیریم. سپس تناظرها

$$\begin{aligned} r^{(q)} &\rightarrow \hat{r}^{(q)} \\ p^{(q)} &\rightarrow \hat{p}^{(q)} \end{aligned} \quad (q = 1, \dots, N)$$

و برای تابع بندادی،

$$A(r^{(1)}, p^{(1)}, \dots, r^{(N)}, p^{(N)}) \rightarrow \hat{A}(\hat{r}^{(1)}, \hat{p}^{(1)}, \dots, \hat{r}^{(N)}, \hat{p}^{(N)})$$

را برقرار نمائیم. می‌خواهیم که تمام علملگرهایی که از نظر فیزیکی مشاهده‌پذیراند هرمیتی باشند. با استفاده از روابط کروشه پواسنی (۲-۹)، روابط جایه‌جایی اساسی زیر را به دست می‌آوریم

$$[\hat{x}_i^{(q)}, \hat{x}_j^{(r)}] = [\hat{p}_i^{(q)}, \hat{p}_j^{(r)}] = 0$$

و

$$[\hat{x}_i^{(q)}, \hat{p}_j^{(r)}] = \delta_{ij} \delta_{qr} \hat{1}i\hbar \quad (8-9)$$

توجه خود را به حالت‌های مانا، یعنی، ویژه حالت‌های انرژی سیستم چند جسمی معطوف می‌کنیم. این حالت‌ها با کتهایی نمایانده می‌شوند که در

$$\hat{\mathcal{H}} |E_\alpha\rangle = E_\alpha |E_\alpha\rangle \quad (9-9)$$

صدق می‌کند*. در این رابطه $\hat{\mathcal{H}}$ هامیلتونی‌ای است که از (۳-۹) به دست آمده است. تاکید می‌کنیم که کت $|E_\alpha\rangle$ کل سیستم چند ذره‌ای را مشخص می‌کند و نه یکی از ذرات تشکیل‌دهنده آنرا. همین‌طور، E_α انرژی کوانتیده کل سیستم را بیان می‌کند. شاخص α مجموعه‌ای از N عدد کوانتومی را نشان می‌دهد زیرا به همین تعداد درجات آزادی وجود دارد. وقتی ذرات سیستم دارای یک اسپین ذاتی باشند، هر کدام از آنها یک درجه آزادی داخلی به دست می‌آورند. بنابراین برای سیستمهای با اسپین ذاتی N عدد کوانتومی وجود دارد.

* برای مشخص کردن حالت‌های چند ذره‌ای از حروف یونانی برای شاخصهای پائین استفاده خواهیم کرد.

۳- نمایش مختصهای و مکانیک موجی

در حالی که (۹-۹) رابطه‌ای را نشان می‌دهد که کاملاً مستقل از پایه است، مناسب است که مشابه مکانیک موجی آن، یعنی، شکل آن در نمایش مختصهای، را به دست آوریم. چون عملگرهای $r^{(q)}$ دو بهدو جای‌جاپذیراند و ناتبهمگ فرض می‌شوند، باید یک ویژه کت مشترک وجود داشته باشد که دارای ویژگی زیر باشد

$$\hat{r}^{(q)} |r^{(1)} \dots r^{(q)} \dots r^{(N)}\rangle = r^{(q)} |r^{(1)} \dots r^{(q)} \dots r^{(N)}\rangle \quad (q = 1, \dots, N) \quad (10-9)$$

این کت معرف حالتی است که در آن ذره اول "قیف" در $r^{(1)}$ ، ذره دوم در $r^{(2)}$ ، و ... قرار دارد. می‌توان این کت را به صورت که \rightarrow مل غرب مستقیم

$$\begin{aligned} |r^{(1)} \dots r^{(q)} \dots r^{(N)}\rangle &= |r^{(1)}\rangle \otimes \dots \otimes |r^{(q)}\rangle \otimes \dots \otimes |r^{(N)}\rangle \\ &= |r^{(1)}\rangle \dots |r^{(q)}\rangle \dots |r^{(N)}\rangle \end{aligned}$$

همان‌طور که در مورد اسپین ذاتی در فصل ۶ انجام دادیم، نمایش داد. عملگر $r^{(q)}$ فقط روی کت $|r^{(q)}\rangle$ عمل می‌کند و بر کتهای دیگر تاثیر نمی‌گذارد. چون این کتها قسمتی از یک طیف پیوسته را تشکیل می‌دهند، دارای خاصیت آشکار راست‌هنگاری

$$\langle r^{(1)\prime} \dots r^{(N)\prime} | r^{(1)} \dots r^{(N)}\rangle = \delta(r^{(1)\prime} - r^{(1)}) \dots \delta(r^{(N)\prime} - r^{(N)})$$

می‌باشد. به علاوه، این کتها یک پایه کامل تشکیل می‌دهند و هر کت حالت چند جسمی می‌تواند به صورت

$$|\beta\rangle = \int_N \dots \int_1 d\mathbf{r}^{(1)} \dots d\mathbf{r}^{(N)} \Psi_\beta(\mathbf{r}^{(1)} \dots \mathbf{r}^{(N)}) |r^{(1)} \dots r^{(N)}\rangle \quad (11-9)$$

بهان شود. "ضریب"

$$\Psi_\beta(\mathbf{r}^{(1)} \dots \mathbf{r}^{(N)}) = \langle r^{(1)} \dots r^{(N)} | \beta \rangle \quad (12-9)$$

تابع حالت چند جسمی نامیده می‌شود. طبق اصول موضعی مکانیک کوانتومی، کمیت

$$dP_\beta = |\Psi_\beta|^2 d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \quad (13-9)$$

احتمال وجود ذره اول در یک حجم $d\mathbf{r}_1$ حول \mathbf{r}_1 ، ذره دوم در $d\mathbf{r}_2$ حول \mathbf{r}_2 ، وغیره، را نشان می‌دهد. اگر حالت مقید باشد، باید داشته باشیم

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \Psi_n = 0$$

بنابراین می‌توانیم بین این دو نسبت را با استفاده از

$$\langle \beta | \beta \rangle = 1$$

یا

$$\int_1 \cdots \int_N |\Psi_n|^2 d\mathbf{r}^{(1)} \cdots d\mathbf{r}^{(N)} = 1$$

بهنجارکنیم . برای حالت‌های پیوسته ، انتخاب طرحواره بهنجارش بستگی به مسئله خاص مورد نظر دارد . برای یک گاز ایده‌آل نامقید ، معمولاً "بهنجارش جعبه‌ای" انجام می‌شود (رک بخشن) ۱۰

از تعمیم استدلالی که در فصل ۴ برای سیستمهای یک ذره‌ای ارائه شد ، بر می‌آید که عملگرهای چندذره‌ای در مکانیک موجی با جایگذاریهای

$$\mathbf{r}^{(q)} \rightarrow \mathbf{r}^{(q)} \quad \text{و} \quad \hat{\mathbf{p}}^{(q)} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla^{(q)} \quad (14-9)$$

به دست می‌آیند . عملگر گرادیان فقط روی مختصات $\mathbf{r}^{(q)}$ عمل می‌کند ، در حالی که بقیه مختصات را به عنوان ثابت در نظر می‌گیرد . معادله ویژه مقداری انرژی چندذره‌ای شرودینگر (۹-۹) می‌تواند در مکانیک موجی به صورت

$$\hat{\mathcal{H}} \Psi_a = E_a \Psi_a \quad (15-9)$$

نوشته شود که در آن

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{q=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m_q} \nabla^{(q)2} + \sum_{q=1}^N V(\mathbf{r}^{(q)}) + \frac{1}{2} \sum_{q=1}^N \sum_{i \neq q}^N V(\mathbf{r}^{(q)}, \mathbf{r}^{(i)}) \quad (15-9)$$

معادله (۱۵-۹) یک معادله دیفرانسیل با مشتقهای جزئی برای ویژه تابعهای انرژی چندذره‌ای $(\Psi^{(1)}, \dots, \Psi^{(N)})$ و ویژه مقدارهای E_a است . عموماً "نمی‌توان (۱۵-۹) را به معادلات یک جسمی تفکیک کرد . اشکال در حل این معادله از جملات برهمنکش دو جسمی ناشی می‌شود . خواهیم دید که وقتی این جملات غایب باشند (۱۵-۹) به طور خیلی ساده به N معادله ویژه مقداری انرژی شرودینگر یک ذره‌ای تفکیک می‌شود .

وقتی طیف و ویژه حالتها تعیین شدند ، مقادیر قابل انتظار عملگرهای چندذره‌ای می‌توانند به طریق معمولی محاسبه شوند ، یعنی ،

$$\begin{aligned}\langle A \rangle_a &= \langle E_a | \hat{A}(\hat{\mathbf{p}}^{(1)}, \hat{\mathbf{p}}^{(2)}, \dots, \hat{\mathbf{p}}^{(N)}, \hat{\mathbf{p}}^{(N)}) | E_a \rangle \\ &= \int \Psi_a^*(\mathbf{r}^{(1)} \dots \mathbf{r}^{(N)}) \hat{A}\left(\mathbf{r}^{(1)}, \frac{\hbar}{i} \nabla^{(1)} \dots \mathbf{r}^{(N)}, \frac{\hbar}{i} \nabla^{(N)}\right) \\ &\quad \times \Psi_a(\mathbf{r}^{(1)} \dots \mathbf{r}^{(N)}) d\mathbf{r}^{(1)} \dots d\mathbf{r}^{(N)}\end{aligned}\quad (16-9)$$

مقداری قابل انتظار $\langle A \rangle$ و همین طور ویژه مقدارهای انرژی E_a به کل سیستم اشاره دارند نه به ذرات تشکیل دهنده آن.

۴ - عملگر جایگشت

گرچه حل دقیق (15-9) عموماً غیرممکن است، با این وجود ممکن است خواص گوناگونی از ویژه‌حالتها را با اعمال اصول تقارن نتیجه گرفت. عملگرهای چندجسمی عموماً شامل شاخصهایی وابسته به هر کدام از ذرات هستند. بنابراین بررسی رفتار فیزیکی سیستم در اثر جایگشت این شاخصها جالب خواهد بود. عملگر هرمیتی جایگشت^{*} ($\hat{P}^{(q)}$) را با خاصیت

$$\hat{P}^{(q)} \hat{A}(1, 2, \dots, q, \dots, t, \dots, N) = \hat{A}(1, 2, \dots, t, \dots, q, \dots, N) \hat{P}^{(q)} \quad (t, q = 1, \dots, N; t \neq q)$$

که در آن \hat{A} یک عملگر دلخواه چندجسمی است، وارد می‌کنیم. بردن عملگر جایگشت از طرف چپ به طرف راست \hat{A} به عوض شدن شاخصهای q و t منجر می‌شود.

چون دو عمل متواالی عملگر جایگشت باید هر عملگر را ناوردا باقی بگذارد، انتظار داریم که $\hat{A} = [\hat{P}^{(q)}]^2$ ، در نتیجه ویژه مقدارهای $\hat{P}^{(q)}$ عبارتنداز $1 \pm$. از این نظر، عملگر جایگشت شبیه عملگر پاریته است. اصطلاحاً "گفته می‌شود که ویژه تابعهای $\hat{P}^{(q)}$ دارای تقارن معینی (به جای پاریته معین) هستند. به آنها باید متناظر با ویژه مقدار $1 \pm$ هستند می‌گوئیم که از نظر جایگشت متقارن‌اند و دارای خاصیت زیر هستند

$$\begin{aligned}\Psi^S(1, \dots, q, \dots, t, \dots, N) &= \Psi^S(1, \dots, t, \dots, q, \dots, N) \\ (t, q &= 1, \dots, N)\end{aligned}\quad (18-9 \text{ الف})$$

ویژه تابعهای وابسته به ویژه مقدار $1 \pm$ متقارن‌اند و دارای خاصیت زیر می‌باشند

۱) این عملگر گاهی عملگر تعویض نامیده می‌شود.

$$\Psi^A(1, \dots, q, \dots, t, \dots, N) = -\Psi^A(1, \dots, t, \dots, q, \dots, N) \quad (18-9)$$

توجه کنیم که در هر حالت با تقارن معین، چگالی احتمال $|\Psi|^2$ همیشه نسبت به تعویض شاخصها ناورد است. به طور معادل، در چنین حالت‌هایی، ذرات کاملاً "تمیزناپذیرند". اگر عملگری نسبت به جایگشت‌ها متقارن باشد، داریم

$$\begin{aligned} \hat{P}^{(qt)} \hat{A}(1, \dots, q, \dots, t, \dots, N) &= \hat{A}(1, \dots, t, \dots, q, \dots, N) \hat{P}^{(qt)} \\ &= \hat{A}(1, \dots, q, \dots, t, \dots, N) \hat{P}^{(qt)} \\ &\quad (q, t = 1, \dots, N) \end{aligned}$$

با

$$[\hat{A}, \hat{P}^{(qt)}] = 0 \quad (19-9)$$

بنابراین هر عملگر متقارن (نسبت به جایگشت) همیشه با عملگر جایگشت جابه‌جاپذیر است. اما توجه کنیم که عملگرهای جایگشت عموماً بین خودشان جابه‌جاپذیر نیستند. به عنوان مثال تابع سه‌ذره‌ای

$$\Psi(x_1, x_2, x_3) = \frac{x_1 x_2}{x_3}$$

را در نظر بگیریم. توجه کنیم که دو عمل جایگشت

$$\hat{P}_{12} \hat{P}_{23} \Psi = \frac{x_2 x_3}{x_1}, \quad \hat{P}_{23} \hat{P}_{12} \Psi = \frac{x_3 x_1}{x_2}$$

معادل نیستند، بنابراین \hat{P}_{12} و \hat{P}_{23} "عموماً" جابه‌جاپذیر نیستند. خوب‌خشنده‌شواهد نشان می‌دهد که طبیعت چیزها را طوری مرتب کرده است که برای ذرات تمیزناپذیر، تنها حالت‌هایی که از نظر فیزیکی تحقق‌پذیراند به‌وسیله تابع حالت‌هایی که نسبت به جایگشت‌داری تقارن معینی هستند نمایش داده می‌شوند. می‌توان نشان داد که برای هر عملگر متقارن ساختن مجموعه‌ای از ویژه تابعهای با تقارن معین و از نظر فیزیکی کامل، بهمنظور بسط یک تابع حالت فیزیکی دلخواه وابسته به مجموعه ذراتی که از نظر مکانیک کوانتومی تمیزناپذیراند امکان‌پذیر است. تاکید می‌کنیم که این تقارن (یا پاد تقارن) همیشه نسبت به تعویض هم اسین و هم مختصات فضائی هرزوج از ذرات در نظر گرفته می‌شود. بنابراین قوانین طبیعت اعتبار قضیه ۶ (از فصل ۳) را محفوظ نگاه می‌دارد. در نتیجه می‌توان فرض کرد که

برای هر هامیلتونی متقارن وابسته به ذرات تمیزناپذیر مجموعه کاملی از ویژه تابعهای انرژی با تقارن معین وجود دارد. از طرف دیگر، اگر عملکر متقارن نباشد، هیچکدام از ویژه حالت‌های آن نمی‌توانند تقارن معینی داشته باشند (قضیه ۴).

اگر هامیلتونی یک سیستم نسبت به جایگشت متقارن نباشد، ذرات مسلماً "متفاوت و تمیزپذیرند". از بحث فوق، ویژه حالت‌های انرژی نمی‌توانند دارای تقارن معینی باشند. از طرف دیگر، اگر ذرات تمیزناپذیر باشند هامیلتونی و تمام عملکرها مشاهده‌پذیر وابسته باید نسبت به جایگشت متقارن باشند، و براساس موافقت با طبیعت لازم است که ویژه حالت‌های انرژی (و همین‌طور تمام تابع حالت‌های دیگر) نسبت به جایگشت دارای تقارن معینی باشند (یعنی، یا متقارن باشند یا پاد متقارن). آزمایشها نشان داده‌اند که حالت بخصوص تقارن به‌اسپین ذاتی ذرات تمیزناپذیر مربوط است. تناظر به‌وسیله اصول موضوع زیر برقرار می‌شود.

اصل موضوع (الف) ذرات با اسپین صحیح بوزون نامیده می‌شوند. تمام تابع حالت‌های سیستمهای بوزون‌های تمیزناپذیر کاملاً "متقارن‌اند و دارای خاصیت

$$\Psi^S(1, 2, \dots, t, \dots, q, \dots, N) = +\Psi^S(1, 2, \dots, q, \dots, t, \dots, N)$$

(۲۰-۹) (بوزونها)

می‌باشند.

اصل موضوع (ب) ذرات با اسپین نیمه صحیح فرمیون نامیده می‌شوند. تمام تابع حالت‌های فرمیون‌های تمیزناپذیر کاملاً "پاد متقارن‌اند و دارای خاصیت

$$\Psi^A(1, 2, \dots, t, \dots, q, \dots, N) = -\Psi^A(1, 2, \dots, q, \dots, t, \dots, N)$$

(۲۰-۹) (فرمیونها)

می‌باشند.

شرط‌تقارن برای بوزون‌ها و فرمیون‌های تمیزناپذیر منجر به آثاری می‌شوند که حتی در رفتار ترمودینامیکی ماکروسکوپیکی شان مشهود است. برای فرمیون‌ها، توجه کنیم که وقتی قرار می‌دهیم $\mathbf{r}^{(q)} = \mathbf{R}$ ، $(۲۰-۹) \text{ ب}$ خواهد شد

$$\Psi^A(1, 2, \mathbf{R}, \dots, \mathbf{R}, \dots, N) = -\Psi^A(1, 2, \mathbf{R}, \dots, \mathbf{R}, \dots, N)$$

اما، چون فقط تابعی که متعدد با صفر است می‌تواند برابر با منفی خود باشد، نتیجه می‌شود که

$$\Psi^A(1, 2, \dots, \mathbf{R}, \mathbf{R}, \dots, N) = 0$$

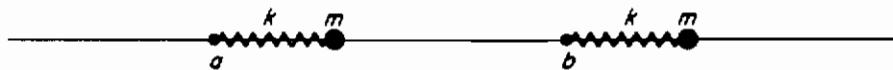
بدین ترتیب بواز فرمیونها به‌اصل زیر خواهیم رسید :
اصل طرد پاولی (شکل عمومی) : احتمال یافتن دو فرمیون تمیزناپذیر در یک نقطه از فضا صفر است*. *

اصل پاولی می‌رساند که اگر یک فرمیون در نقطه بخصوصی قرار داشته باشد، تمام فرمیونهای دیگر با همان حالت اسپینی را از آن نقطه طرد می‌کند . این دفع آماری صرفاً مکانیک کوانتمومی است و کاملاً مستقل از نیروهای دینامیکی بین دو ذره است . این دفع از طبیعت تمیزناپذیری دو ذره نشأت می‌گیرد .

بوزونهای در یک حالت اسپینی اثر کاملای متسادی روی یکدیگر دارند . برهم‌کنشهای آماری آنها منجر به‌جاذبه‌هایی می‌شود که خوشایشدن ذرات را تقویت می‌کند . این اثر را در بخش ۷ نشان خواهیم داد .

باید خاطرنشان کرد که تمام ذرات یکسان تمیزناپذیر نیستند . به عنوان مثال، دو جرم مشابه بدون برهم‌کنش را در نظر بگیریم که توسط فنرهایی به نقاط a و b در روی محور x ها (شکل ۱-۹) مقید شده‌اند . هامیلتونی یک بعدی برای این سیستم عبارت است از

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^{(1)2}}{2m} + \frac{\hat{p}^{(2)2}}{2m} + \frac{1}{2} k[(x^{(1)} - a)^2 + (x^{(2)} - b)^2]$$



شکل (۱-۹) دوسیستم مشابه ولی تمیزناپذیر

با اینکه ذرات خودشان یکسانند، واقعیت بسته‌بودن آنها به نقاط مختلف در فضا ناوردائی نیز نسبت به‌جایگشت (۲ ↔ ۱) را از بین می‌برد . این ذرات نمی‌توانند به عنوان ذرات تمیزناپذیر در نظر گرفته شوند .

تاكید می‌کنیم که برای اینکه دو ذره تمیزناپذیر باشند لازم است که تمام عملگرهای متضاد را مشاهده‌پذیرهایی که از نظر فیزیکی قابل اندازه‌گیری هستند نسبت به‌جایگشت متقاضی باشند . به عنوان مثال، یک اتم پوزیترونیوم بسیار شبیه به اتم هیدروژن است با این تفاوت که پروتون به‌وسیله پوزیترون، که جرم آن مساوی با جرم الکترون ولی بار آن مخالف بار

* این اثر طرد به‌فرمیونهای با مختصات اسپینی یکسان، یعنی مقادیر m یکسان، اعمال می‌شود .

الکترون است، جایگزین شده است. هامیلتونی الکتروستاتیکی برای یک اتم پوزیترونیوم منفرد عبارت است از

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^{(1)2}}{2m} + \frac{\hat{p}^{(2)2}}{2m} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}^{(2)}|}$$

که در آن ۱ و ۲ به ترتیب اشاره به پوزیترون و الکترون دارند. با اینکه این هامیلتونی نسبت به جایگشت متقارن است، دو ذره حقیقتاً تمیزناپذیر نیستند. این مطلب می‌تواند با اعمال یک میدان الکتریکی پکنواخت، که در آن اتم یک انرژی اضافی $(\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}) \cdot \mathbf{eE} = V$ با $4.8 \times 10^{-10} \text{ esu}$ کسب می‌کند، مشاهده شود. هامیلتونی اتم پوزیترونیوم در یک میدان الکتریکی دیگر نسبت به جایگشت متقارن نیست، بنابراین ذرات تمیزناپذیر نیستند و حالتهای با تقارن معین وجود ندارد.

حل معادله شرودینگر برای یک سیستم از ذرات برهمنش‌کننده خیلی مشکل است. اما برای سیستمهای "ایدهآل" که در آنها برهمنش‌های دوجسمی نادیده گرفته می‌شوند، همیشه ممکن است (۱۵-۹) را به N معادله یک ذره‌ای تجزیه‌گرد. بنابراین مسئله چند جسمی ایدهآل، علی‌الاصول قابل حل است. سیستمهای ایدهآل بخصوص وقتی که تقریب نزدیکی از سیستمهای حقیقی باشند مفیدند. معمولاً، وقتی یک گاز حقیقی به حد کافی رقیق باشد، فاصلهٔ بین ذرات زیاد است. برهمنشها قابل صرفنظرکردن است و گاز می‌تواند به عنوان یک گاز ایدهآل در نظر گرفته شود. لیکن، اثرات کوانتومی تمیزناپذیری هنوز می‌توانند برقرار باشند.

۵- سیستمهای ایدهآل تمیزپذیر

سیستمی از N ذره تمیزپذیر بدون برهمنش را که هر کدام از آنها دارای جرم متفاوت $m^{(q)}$ بوده و تحت تاثیر پتانسیل خارجی متفاوت $V^{(q)}(\mathbf{r}^{(q)}) = V^{(q)}$ قرار دارد در نظر گیریم. معادله شرودینگر برای این سیستم عبارت است از

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}\Psi_a &= \left\{ \sum_{q=1}^N \frac{-\hbar^2}{2m^{(q)}} \nabla^{(q)2} + V^{(q)}(\mathbf{r}^{(q)}) \right\} \Psi_a(\mathbf{r}^{(1)}, \dots, \mathbf{r}^{(N)}) \\ &= E_a \Psi_a(\mathbf{r}^{(1)}, \dots, \mathbf{r}^{(N)}) \end{aligned} \quad (21-9)$$

با در نظر گرفتن جوابی به شکل

$$\Psi_a = \psi_1^{(1)}(\mathbf{r}^{(1)}) \cdots \psi_j^{(N)}(\mathbf{r}^{(N)}) \quad (22-9)$$

معادله بالا به N معادله یک ذره‌ای به شکل

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m^{(q)}} \nabla^{(q)2} + V^{(q)} \right\} \psi_i^{(q)}(\mathbf{r}_i^{(q)}) = \varepsilon_i^{(q)} \psi_i^{(q)}(\mathbf{r}_i^{(q)}) \quad (q = 1, \dots, N) \quad (23-9)$$

با

$$E_\alpha = \sum_{q=1}^N \varepsilon_i^{(q)}$$

تفکیک می‌شود. به بیان دیگر وقتی بر هم‌کنشها نادیده گرفته می‌شوند، معادله شرودینگر (۲۱-۹) تفکیک می‌شود و هر ذره مجموعه حالت‌های تک‌ذره‌ای $\psi_i^{(q)}$ و انرژی‌های $\varepsilon_i^{(q)}$ خاص خود را که در یک معادله تک‌ذره‌ای صدق می‌کند دارد. این حالت‌های تک‌ذره‌ای گاهی اوقات "مدار" نامیده می‌شوند. مدارها در اتمها و مولکولهارا در فصل ۱۵ بحث خواهیم کرد. چون عموماً به هر ذره معادله شرودینگر متفاوتی حکم‌فرمایست (یعنی $m^{(1)} \neq m^{(2)}$ و $V^{(1)} \neq V^{(2)}$)، طبیعت طیفها و مدارها از ذره‌ای به ذره دیگر تغییر می‌کند. شاخصهای فوقانی در $\psi_i^{(q)}$ و $\varepsilon_i^{(q)}$ مبین این نکته‌اند. چون نعاد مداری؛ اشاره به سه (وقتی اسپین وجود داشته باشد چهار) عدد کوانتموی دارد نعاد حالتی کلی α مخفف N (یا $4N$) عدد کوانتموی است. حالت کل وقتی معلوم است که مدارهای اشغال شده به وسیله هر ذره داده شده باشند. تابع حالت کل حاصل ضرب ساده‌ای از این توابع مداری است، در حالی که انرژی کل درست مجموع انرژی‌های مداری متناظر است.

به عنوان یک مثال، دو ذره بدون اسپین تمیزپذیر به جرم‌های m_1 و m_2 واقع در یک چاه پتانسیل یک بعدی بینهایت به عرض a در نظر بگیریم. معادله شرودینگر عبارت است از

$$\begin{aligned} & \left[\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2}{dx^{(1)2}} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{d^2}{dx^{(2)2}} \right\} + \{V^{(1)} + V^{(2)}\} \right] \Psi_\alpha(x^{(1)}, x^{(2)}) \\ & = E_\alpha \Psi_\alpha(x^{(1)}, x^{(2)}), \end{aligned} \quad (24-9)$$

که در آن

$$V^{(1)} = V^{(2)} = 0 \quad , \quad 0 \leq x \leq a$$

$$V^{(1)} = V^{(2)} = \infty \quad \text{جاهاي ديجر}$$

با استفاده از

$$\Psi_\alpha = \psi_n^{(1)}(x^{(1)}) \psi_n^{(2)}(x^{(2)})$$

این معادله به

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2}{dx^{(1)2}} + V^{(1)} \right\} \psi_n^{(1)}(x^{(1)}) = \varepsilon_n^{(1)} \psi_n^{(1)}(x^{(1)})$$

و

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{d^2}{dx^{(2)2}} + V^{(2)} \right\} \psi_n^{(2)}(x^{(2)}) = \varepsilon_n^{(2)} \psi_n^{(2)}(x^{(2)})$$

تفکیک می‌شود. جوابها، که قبلاً نیز آنها را دیده‌ایم، عبارتند از

$$\psi_n(x^{(1)}) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin \frac{n\pi}{a} x^{(1)}, \quad \varepsilon_n^{(1)} = \frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\pi^2}{a^2} n^2$$

و

$$\psi_{n'}(x^{(2)}) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin \frac{n'\pi}{a} x^{(2)}, \quad \varepsilon_{n'}^{(2)} = \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\pi^2}{a^2} n'^2$$

$$(n, n' = 1, 2, \dots)$$

ویژه حالت‌های انرژی کل و ویژه مقدارها به صورت

$$\Psi_a = \Psi_{n, n'}(x^{(1)}, x^{(2)}) = \frac{2}{a} \sin \frac{n\pi}{a} x^{(1)} \sin \frac{n'\pi}{a} x^{(2)} \quad (25-9)$$

و

$$E_a = E_{n, n'} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2} \left(\frac{n^2}{m_1} + \frac{n'^2}{m_2} \right) \quad (25-9)$$

در می‌آیند.

آنچه که باید مشخص شود اعداد کوانتومی حالت‌های n و n' است که به وسیله ذرات m_1 و m_2 اشغال شده‌اند. این تجویز یک رایش نامیده می‌شود. به عنوان مثال، رایش حالت پایه عبارت است از $n = 1, n' = 1$ به طوری که

$$\Psi_a = \Psi_{1, 1} = \frac{2}{a} \sin \frac{\pi}{a} x^{(1)} \sin \frac{\pi}{a} x^{(2)}$$

و

$$E_a = E_{1,1} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right)$$

این مثال می‌تواند براحتی به N ذره بدون برهم‌کنش تعمیم داده شود. در اینجا آرایش بهوسیله مجموعه‌ای از اعداد کوانتموی n, n', n'', \dots ، وغیره، که حالت‌های مداری اشغال شده بهوسیله هر ذره را نشان می‌دهند مشخص می‌شود. تأکید می‌کنیم که یک آرایش تنها وقتی معنی دارد که معادله شرودینگر چند ذره‌ای اصلی تفکیک‌پذیر باشد. این وقتی رخ می‌دهد که سیستم ایده‌آل باشد. برای سیستمهای حقیقی، آرایشهای مدارهای مستقل کاملاً "تعریف شده نیستند، اما در روش‌های وردشی و سایر روش‌های تقریبی به صورت مفیدی به کار می‌آیند.

ع- سیستمهای ایده‌آل تمیزناپذیر

وقتی سیستمی از ذرات بدون برهم‌کنش تمیزناپذیر تشکیل شده است (یعنی $m_q = m$ و $V^{(q)} = V$) تمام معادلات شرودینگر تک ذره‌ای پکسان‌اند و به شکل

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^{(q)2} + V(\mathbf{r}^{(q)}) \right\} \psi_i(\mathbf{r}^{(q)}) = \epsilon_i \psi_i(\mathbf{r}^{(q)}) \quad (26-9)$$

می‌باشند. چون مدارها و ویژه مقدارهای آنها برای تمام ذرات پکسانند، شاخص فوقانی در ψ و ϵ حذف شده است. تابع حالت‌های کل مشابه با (۲۶-۹) خواهد شد

$$\Psi_a = \psi_i(\mathbf{r}^{(1)}) \psi_j(\mathbf{r}^{(N)}) \dots \quad (27-9\text{ الف})$$

با

$$E_a = \sum_i \epsilon_i \quad (27-9\text{ ب})$$

ضرب و جمع روی تمام مدارهای اشغال شده منظور شده است. متأسفانه ضرب ساده در (۲۷-۹) شرط تمیزناپذیری را نقض می‌کند زیرا Ψ نسبت به جایگشت دارای تقارن معینی نیست. اما، می‌توان همیشه یک تابع که به طور مناسب متقارن شده باشد از (۲۷-۹) ساخت. توجه کنیم که معادلهای مختصه‌ای در (۲۷-۹) می‌توانند به تعداد N جایه‌جا شوند. با جمع این حاصل‌ضرب‌های جایه‌جا شده و تقسیم بر ${}^{(1)}(N)!$ برای بهنجارش، یک Ψ با همان انرژی بدست می‌آوریم که

نسبت به جایگشتها متقارن است .
این عمل را با عملگر متقارن‌ساز $\hat{\psi}$ که دقیقاً "همان اثر مذکور در بالا را دارد نمایش می‌دهیم ، یعنی ،

$$\Psi_a^s = \frac{1}{(N!)^{1/2}} \hat{\psi} \psi_i(\mathbf{r}^{(1)}) \cdots \hat{\psi}_j \psi_j(\mathbf{r}^{(N)}) \quad (28-9)$$

وقتی $\hat{\psi}$ روی یک حاصل ضرب ساده ، مثل (۲۹-۷الف) عمل می‌کند ، حاصل جمعی از $N!$ حاصل ضرب جابه‌جاشده ایجاد می‌کند که خود به خود یک تابع حالت متقارن است .
به همین طریق ، می‌توان یک تابع پاد متقارن با استفاده از عملگر پاد متقارن‌ساز $\hat{\psi}$ ساخت که دارای خاصیت زیر باشد

$$\Psi_a^A = \frac{1}{(N!)^{1/2}} \hat{\psi} \psi_i(\mathbf{r}^{(1)}) \hat{\psi}_j \psi_j(\mathbf{r}^{(N)}) \quad (29-9)$$

این عمل تقریباً شبیه به عملی است که در (۲۸-۹) انجام شد با این تفاوت که جمله‌هایی که با تعداد فردی جایگشت از حاصل ضرب اولیه حاصل شده‌اند ، به جای اضافه شدن ، تغیریق می‌شوند . اثر خالص عبارت است از ایجاد ویژه تابعی که نسبت به جایگشتها پاد متقارن است . روش متقارن‌سازی را با استفاده از دو ذره واقع در چاه بینهایت بحث شده در پخش ۵ نشان خواهیم داد . اما ، این بار فرض خواهیم کرد که ذرات تمیز ناپذیرانند (یعنی ، $m_1 = m_2$) و از اسپین نیز صرف نظر خواهیم کرد .

تابع حالت کل دیگر حاصل ضرب ساده‌ای مثل (۲۵-۹) نیست . متقارن‌سازی مناسبی

* نتیجه می‌دهد

$$\Psi_a = \Psi_{nn'} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \frac{2}{a} \sin \frac{n\pi}{a} x^{(1)} \sin \frac{n'\pi}{a} x^{(2)} \pm \frac{2}{a} \sin \frac{n\pi}{a} x^{(2)} \sin \frac{n'\pi}{a} x^{(1)} \right\} \quad (30-9\text{الف})$$

با

$$E_{nn'} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2} (n^2 + n'^2) \quad (30-9\text{ب})$$

* برای اختصار نمادهای اسپینی را حذف می‌کنیم و فرض می‌کنیم هر دو ذره در یک حالت اسپینی باشند .

علامت بالائی برای بوزونها است در حالی که علامت پائینی برای فرمیونهاست . توجه کنیم که در حالی که آرایش بهوسیله دو عدد کوانتموی n و n' داده می‌شود ، هیچکدام از آنها وابسته بهیکی از ذرات نیست . چون این ذرات تمیزناپذیراند ، فقط می‌گوئیم که حالت‌های مداری n و n' را اشغال می‌کنند . دیگر نمی‌توان گفت که کدام یک در کدام حالت است . نمایش دیگری برای یک حالت پاد متقارن با ساختن دترمینان اسلاتراز مدارهای اشغال شده به دست می‌آید ، یعنی ،

$$\Psi_{\alpha}^A = \frac{1}{(N!)^{1/2}} \begin{vmatrix} \psi_i(r^{(1)}) & \cdots & \psi_j(r^{(1)}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_i(r^{(N)}) & \cdots & \psi_j(r^{(N)}) \end{vmatrix} \quad (31-9)$$

همان طور که با بسط دترمینان می‌توان تحقیق کرد ، معادله (31-9) با (۲۹-۹) یکسان است . دترمینان اسلاتراز روش مناسبی برای نمایش حالت فرمیونها تمیزناپذیر ایده‌آل (به عنوان مثال ، الکترونها رسانشی در یک فلز) است .

اگر دو ذره در یک نقطه از فضا باشند ، در این صورت دو سطر از (۳۱-۹) یکسان اند و تابع حالت کل صفر خواهد شد . این نکته شکل عمومی اصل پاولی را ثابت می‌کند . اما ، هم‌چنین توجه کنیم که اگر دو فرمیون یک مدار را اشغال کنند ، دوستون برابر می‌شوند و دترمینان بازهم صفر می‌شود . این مطلب ما را به شکل خاص اصل پاولی هدایت می‌کند . اصل طرد پاولی (برای فرمیونها) : در هر آرایشی ، هیچ دو فرمیون تمیزناپذیری نمی‌توانند هردو در یک حالت تک ذره‌ای باشند . به طور متعادل ، به هیچ دو فرمیونی نمی‌توان یک مجموعه اعداد کوانتموی یکسان نسبت داد .

۷- همبستگی‌های آماری در سیستم‌های ایده‌آل بوزوفرمی

خاطرنشان شد که حتی در سیستم‌های کوانتموی ایده‌آل ، بوزونها و فرمیونها تمیز ناپذیر می‌توانند ، به ترتیب ، یکدیگر را جذب و دفع کنند . ما این مطلب را برای دو ذره آزاد ، بدون برهمنش ، تمیزناپذیر ، در یک بعد ، نشان خواهیم داد . چون حالت‌های تک ذره‌ای ، بدون در نظر گرفتن اسپین ، به شکل ikx هستند ، حالت کل سیستم که به طور مناسب متقارن شده است* (به جز ضریب بهنجارش) عبارت است از

* بازهم فرض می‌کنیم دو ذره در یک حالت اسپینی قرار دارند و از نعادهای اسپینی صرف نظر کرده‌ایم .

$$\Psi_a = \Psi_{kk'}(x_1, x_2) = e^{ikx_1}e^{ik'x_2} \pm e^{ikx_2}e^{ik'x_1} \quad (32-9)$$

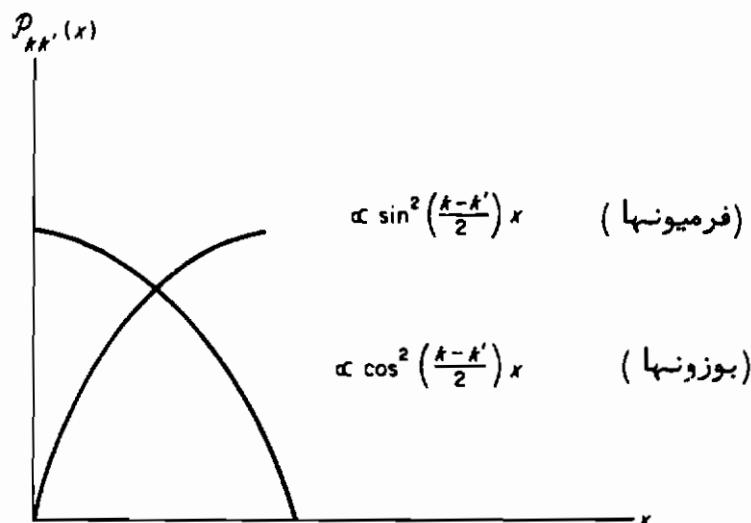
با وارد کردن متغیرهای $x_1 - x_2$ و $x = x_2 - x_1$ ، تابع حالت (۳۲-۹) می‌شود

$$\Psi_{kk'}(x, X) = e^{i(k+k')X}[e^{i(k-k')x/2} \pm e^{-i(k-k')x/2}] \quad (33-9)$$

متغیرهای x و X به ترتیب معرف فاصله نسبی و مرکز جرم دو ذره می‌باشد . با مربع کردن (۳۳-۹) (ضرب آن در مزدوج مختلط خود) ، نتیجه می‌شود که چگالی احتمال یافتن سیستم با فاصله بین ذره‌ای x عبارت است از (شکل ۲-۹)

$$\rho_{kk'}(x) \propto \cos^2\left(\frac{k-k'}{2}\right)x \quad (\text{بوزونها})$$

$$\propto \sin^2\left(\frac{k-k'}{2}\right)x \quad (\text{فرمیونها}) \quad (34-9)$$



شکل (۲-۹) نمودار توابعی که نشان‌دهنده احتمال یافتن دو ذره آزاد تمیز-ناپذیر با جدائی x در پیک بعد ، می‌باشد .

چگالی احتمال در جدائی صفر برای بوزونها بیشینه و برای فرمیونها صفر است (اصل پاولی) . به معنی آماری ، بوزونها تمايل دارند که در نزدیکی یکدیگر قرار بگیرند در حالی که

* فرمیونها طوری حرکت می‌کنند که گوئی فرمیونها دیگر را طرد می‌کنند.
در عمل، هیچ سیستم ذراتی در حقیقت ایدهآل نیست. یک سوال مهم که باید پاسخ داده شود این است که آیا برهم‌کنشها در یک سیستم حقیقی آنقدر کوچک هستند که اجازه دهنده یک سیستم ایدهآل به عنوان یک تقریب مرتباً صفر به کار رود یا خیر. ما یک مسئله نمونه‌ای دو الکترونی را در حد ایدهآل با فرض اینکه برهم‌کنش کولنی قابل صرف‌نظر کردن باشد بررسی خواهیم کرد.

۸- اتم هلیوم "ایدهآل"

اتم هلیوم تشکیل شده است از دو الکترون که به وسیله یک نیروی کولنی بهمک هسته با بار Ze ($Z=2$) مقید شده‌اند. هامیلتونی الکتروستاتیکی عبارت است از

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^{(1)2} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^{(2)2} - \frac{Ze^2}{r^{(1)}} - \frac{Ze^2}{r^{(2)}} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}|} \quad (35-9)$$

اگر از جمله برهم‌کنش صرف‌نظر کنیم، معادله شرودینگر بعد از معادله هیدرزن مانند تفکیک می‌شود که هر کدام از آنها به شکل

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{r} \right\} \psi_{nlm_1m_s} = \epsilon_{nl} \psi_{nlm_1m_s} \quad (36-9)$$

است که در آن

$$\psi_{nlm_1m_s} = R_{nl}(r) Y_{lm_1}(\theta, \phi) |m_s\rangle \quad (37-9)$$

و

* همبستگی‌های آماری مخصوصاً "در $1 \ll x^{-1/(k-k')}$ " یا $(k-k')x \ll 1$ اهمیت پیدا می‌کنند. با توجه به اینکه طول موج دوبروی وابسته به تکانه نسبی ذرات برابر $(k'-k)x = 2\pi/\lambda$ است مشاهده می‌کنیم که شرط فوق می‌تواند به صورت $\lambda \ll x$ نوشته شود. هم‌چنین توجه کنیم که برای فرمیونها، تابع احتمال، وقتی دو ذره در یک حالت تکانه قرار دارند (یعنی $k=k'$) متعدد با صفر می‌شود.

** چون ویژه تابعهای کولنی یک تبیه‌گنجی تصادفی ایجاد می‌کنند، انرژی‌ها مستقل از ۱ می‌باشند. اما، برای عمومیت بیشتر، انرژی را چنان در نظر خواهیم گرفت که گوئی وابستگی به ۱ وجود داشته است. در واقع برای اتصالات حقیقی، همانطوری که در فصل ۱۰ خواهیم دید، وضعیت این چنین است.

$$\varepsilon_{nl} = -\frac{Z^2(13.6)}{n^2} = -\frac{54}{n^2} \text{ eV}$$

توابع موج هیدرژن مانند با جایگذاری $a \rightarrow a/Z$ در (۲۴-۵) به دست می‌آیند. چون الکترونها فرمیون هستند، حالت کل اتم هلیوم ایده‌آل می‌تواند به موسیله دترمینان اسلاتر

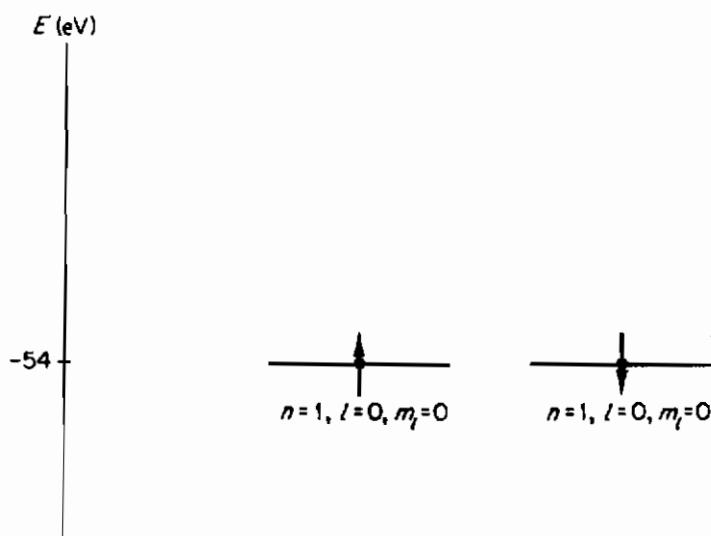
$$\Psi_a = \Psi_{nlm_lm_s} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_{nlm_lm_s}(1) & \psi_{n'l'm_l'm_s}(1) \\ \psi_{nlm_lm_s}(2) & \psi_{n'l'm_l'm_s}(2) \end{vmatrix} \quad (38-9 \text{ الف})$$

نمایش داده شود. انرژی متناظر عبارت است از

$$E_a = E_{nl'n'l'} = \varepsilon_{nl} + \varepsilon_{n'l'} = -54 \left(\frac{1}{n^2} + \frac{1}{n'^2} \right) \quad (38-9 \text{ ب})$$

توجه کنیم که در حالی که برای حالت آرایشی هلیوم ایده‌آل هشت عدد کوانتومی موردنیاز است، انرژی متناظر تنها بستگی به دو تا از این اعداد دارد. بنابراین آرایشها می‌توانند بسیار تبہگن باشند.

برای انرژی حالت پایه داریم $n = n' = l = l'$. چون در این مورد اعداد کوانتومی m_l و m'_l باید همه صفر باشند، از اصل پاولی نتیجه می‌شود که اعداد کوانتومی اسپینی باید متفاوت باشند، یعنی $m_s = \frac{1}{2}$ ، $m'_s = -\frac{1}{2}$ (شکل ۳-۹). حالت پایه هلیوم ایده‌آل ناتبہگن و یکتاست و می‌تواند به صورت زیر نوشته شود



شکل (۳-۹) آرایش الکترون‌های هلیوم در حالت پایه. انرژی حالت پایه ،

با صرف نظر کردن از برهم‌کش بین الکترون‌ها، عبارت است از $E = -54 + (-54) = -108 \text{ eV}$

$$\begin{aligned}\Psi_{100-\frac{1}{2}} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_{100}(1) \psi_{100}(2) \begin{vmatrix} |\frac{1}{2}\rangle^{(1)} & |-\frac{1}{2}\rangle^{(1)} \\ |\frac{1}{2}\rangle^{(2)} & |-\frac{1}{2}\rangle^{(2)} \end{vmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_{100}(1) \psi_{100}(2) [|\frac{1}{2}\rangle^{(1)} |-\frac{1}{2}\rangle^{(2)} - |\frac{1}{2}\rangle^{(2)} |-\frac{1}{2}\rangle^{(1)}]\end{aligned}\quad (39-9 \text{ الف})$$

با

$$E_{nn'} = E_{11} = -54 \left[\frac{1}{1^2} + \frac{1}{1^2} \right] = -108 \text{ eV} \quad (\text{حالت پایه})$$

(39-9 ب)

حالت یکبار یونیزه هلیوم متناظر است با اینکه یک الکترون در حالت $n=1$ و الکترون دیگر در حالت آزاد $\infty = n'$ قرار داشته باشد. انرژی این حالت عبارت است از

$$E_{mm'} = E_{1\infty} = -54 \left[\frac{1}{1^2} + \frac{1}{\infty^2} \right] = -54 \text{ eV}$$

بنابراین اولین انرژی یونش (یعنی، انرژی لازم برای اینکه اتم را یکبار یونیزه کند) هلیوم ایده‌آل عبارت است از

$$(E_{1\infty} - E_{11}) = -54 - (-108) = 54 \text{ eV}$$

به طور تجربی معلوم شده است که تنها $24 \text{ eV} \sim$ لازم است تا هلیوم را یکبار یونیزه کند. این اختلاف به این حقیقت مربوط می‌شود که دافعه الکترون – الکترون، که به فراپند یونش کم می‌کند، نادیده گرفته شده است. به طور واضح مرتباً بزرگی این اختلاف این را که ویژهٔ حالت‌های اتم هلیوم ایده‌آل بتوانند شاهدتی باویژهٔ حالت‌های اتم هلیوم حقیقی داشته باشند مشکوک می‌سازد. با این همه، همان‌طور که در فصل ۱۰ نشان خواهیم داد، این حالت‌های ایده‌آل می‌توانند با اعمال روش و ردشی و دیگر روش‌های تقریبی اصلاح شوند.

۹- حالتهای برانگیخته در هلیوم

دترمینان اسلاتر در (39-9) معرف حالتی است که در آن الکترونها مدارهای $n'l'm_l'm_s$ و $n'l'm_l'm_s$ را اشغال می‌کنند. برای تعایش این دترمینان از کت

$$|nn' ll' m_l m_l' m_s m_s' \rangle$$

استفاده می‌کنیم. چون اعداد کوانتومی مغناطیسی m_l ، m_s ، m_l' ، m_s' در عبارت انرژی ظاهرنمی‌شوند، انرژی آرایش حداقل به وسیله مقادیر $l-l'$ تعیین می‌شود. یک آرایش $l-l'$ را با طرحواره زیر نشان می‌دهیم.

(1s²) $l=0$ ، $n=1$ هردو الکترون در تراز

(1s¹, 2s¹) $l=0$ ، $n=1$ یک الکترون در تراز

$l'=0$ ، $n'=2$ و دیگری در تراز

(1s¹, 2p¹) $l=0$ ، $n=1$ یک الکترون در تراز

$l'=1$ ، $n'=2$ و دیگری در تراز

آرایش حالت پایه هلیوم یک آرایش (1s²) است و، همان‌طور که دیدیم، ناتبهگن است و برای آن آرایش اولین حالت برانگیخته (1s¹, 2s¹) دارای انرژی

$$E_{12} = -54 \left(\frac{1}{1^2} + \frac{1}{2^2} \right) = -68 \text{ eV}$$

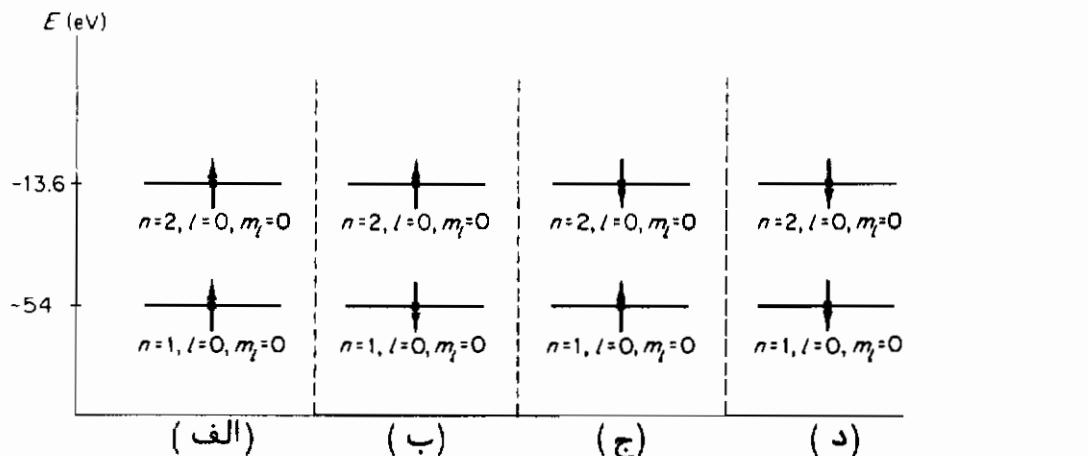
است و دومرتبه تبھگن است. زیر آرایش‌های مغناطیسی

$$|1,2,0,0,m_l m_l' m_s m_s' \rangle$$

عبارتند از (شکل ۴-۹)

$$\begin{aligned} \Psi_a &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_{100\pm}(1) & \psi_{200\pm}(1) \\ \psi_{100\pm}(2) & \psi_{200\pm}(2) \end{vmatrix} \\ \Psi_b &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_{100-\frac{1}{2}}(1) & \psi_{200\pm}(1) \\ \psi_{100-\frac{1}{2}}(2) & \psi_{200\pm}(2) \end{vmatrix} \\ \Psi_c &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_{100\pm}(1) & \psi_{200-\frac{1}{2}}(1) \\ \psi_{100\pm}(2) & \psi_{200-\frac{1}{2}}(2) \end{vmatrix} \\ \Psi_d &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_{100-\frac{1}{2}}(1) & \psi_{200-\frac{1}{2}}(1) \\ \psi_{100-\frac{1}{2}}(2) & \psi_{200-\frac{1}{2}}(2) \end{vmatrix} \end{aligned} \quad (40-9)$$

در واقع، تبھگنی یک‌تراز برابر است با تعداد راههای که اعداد مغناطیسی می‌توانند، با توجه به محدودیتهای ناشی از اصل طرد، برای یک آرایش ثابت $l-l'$ مرتب شوند. خواننده باید خود را متقادع کند که آرایش (1s¹, 2p¹) در هلیوم دوازده بار تبھگن است.



شکل (۴-۹) چهار آرایش حالت برانگیخته تبیکن اول الکترونهای هلیوم.
هر کدام از این حالتهای دارای انرژی $E = 68 \text{ eV} \approx -68 \text{ eV}$ است.

یک نتیجه تبیکنی وابسته به آرایش $n-l$ - n عدم یکتاًی ویژه حالتهای انرژی است.
انتظار داریم که هر ترکیب خطی به شکل

$$|nn'l'l'\rangle = \sum_{m_l, m_s} \sum_{m'_l, m'_s} C_{n l m_l m_s} |n n' l l' m_l m'_l m_s m'_s\rangle \quad (41-9)$$

معرف یک ویژه حالت جدید انرژی اتم هلیوم ایده‌آل با

$$E_a = E_{n_l} = \varepsilon_{n_l} + \varepsilon_{n' l'} \quad (42-9)$$

باشد. چون علاقه‌مندیم آن حالتهای اتفی ایده‌آل را ایجاد کنیم که بهبترین وجهی به حالتهای اتم هلیوم حقیقی نزدیک باشند، باید حالتهای در (۴۱-۹) بسازیم که ماتریس پریشیدگی را، که در این مورد برهمنش الکتروستاتیکی الکترون، یعنی

$$\lambda D = \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}|} \quad (43-9)$$

است، قطری کند. دترمینانهای اسلاتر در (۴۰-۹) خودشان در این شرط صدق نمی‌کنند. چون یک روش سرراست قطری‌کردن بسیار پیچیده است، مسئله را با استفاده از استدلالهای فیزیکی ساده می‌کنیم.

بهتر است که نخست عملگرهای چند جسمی زیر را وارد کنیم

$$\hat{L}^{(T)} = \hat{L}^{(1)} + \hat{L}^{(2)} \quad (\text{عملگر تکانه زاویه‌ای کل})$$

$$\hat{S}^{(T)} = \hat{S}^{(1)} + \hat{S}^{(2)} \quad (\text{عملگر اسپین کل})$$

مولفه‌های این عملگرها طبیعتاً در روابط

$$[\hat{L}_i^{(T)}, \hat{L}_j^{(T)}] = i\hbar \hat{L}_k^{(T)}$$

$$(ijk = xyz) \quad (\text{در ترتیب دوره‌ای ۴۴-۹})$$

$$[\hat{S}_i^{(T)}, \hat{S}_j^{(T)}] = i\hbar \hat{S}_k^{(T)}$$

صدق می‌کنند. این عملگرها، همان‌طور که به راحتی می‌توان تحقیق کرد، با هامیلتونی هلیوم ایده‌آل، یعنی، با هامیلتونی‌ای که در آن جمله برهمنش مساوی صفر فرض می‌شود، جایه جا پذیراند. در نتیجه، می‌توان فرض کرد که مجموعه‌ای از ویژه‌حالتهای با خواص زیر وجود دارد

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_0 |E_a LSM_L M_S\rangle &= E_a |E_a LSM_L M_S\rangle \quad (E_a = \varepsilon_{nl} + \varepsilon_{n'l'}) \\ \hat{L}^{(T)2} |E_a LSM_L M_S\rangle &= L(L+1)\hbar^2 |E_a LSM_L M_S\rangle \\ \hat{S}^{(T)2} |E_a LSM_L M_S\rangle &= S(S+1)\hbar^2 |E_a LSM_L M_S\rangle \quad (45-9) \\ \hat{L}_Z^{(T)} |E_a LSM_L M_S\rangle &= M_L \hbar |E_a LSM_L M_S\rangle \quad (|M_L| \leq L) \\ \hat{S}_Z^{(T)} |E_a LSM_L M_S\rangle &= M_S \hbar |E_a LSM_L M_S\rangle \quad (|M_S| \leq S) \end{aligned}$$

که مقادیر L و S باید تعیین شوند. آنچه که می‌توانیم بگوییم، براساس (۴۴-۹)، این است که این مقادیر پا صلحیح‌اند یا نیمه‌صلاحیح.

آنچه که در باره عملگرها $\hat{L}^{(T)}$ و $\hat{S}^{(T)}$ غیرعادی است این است که با هامیلتونی کل (۳۵-۹) نیز جایه جا پذیراند. به طور معادل، این مشاهده‌پذیرها، حتی در حضور دافعه الکتروستاتیکی بین الکترونها، پایسته‌اند. بنابراین حالتهای اتمی اتم هلیوم حقیقی ویژه حالتهای همزمان $\hat{L}^{(T)}$ و $\hat{S}^{(T)}$ هستند و به نظر موجه می‌آید که حالتهای مذکور در فوق، (۴۵-۹)، تقریب‌های مرتبه صفر مناسبی باشند. یک محاسبه مستقیم، ولی نه آنقدر ساده، نشان می‌دهد که حالتهای (۴۵-۹) حقیقتاً جمله پریشیدگی الکتروستاتیکی را قطری می‌کنند. آنچه که می‌ماند پیدا کردن ضرایبی است که دترمینانهای اسلاتر را به حالتهای اتمی مربوط کنند، یعنی،

$$|E_a LSM_L M_S\rangle = \sum_{m_l} \sum_{m_s} C_{nn' ll' m_l m_l' m_s m_s'} |nn' ll' m_l m_l' m_s m_s'\rangle \quad (46-9)$$

این ضرایب کل بش - گوردان خیلی پیچیده تراز آن هستند که بتوان آنها را در اینجا محاسبه کرد، اما محاسبات مزبور می‌توانند با استفاده از روش‌های نظریه گروه تا حدی ساده شوند. ما صرفاً "به ذکر این نکته قناعت می‌کنیم که این ضرایب در جدولها وجود دارند".*

ساختن ویژه حالتهای اتمی $L^{(T)}$ و $S^{(T)}$ به طریق (۴۹-۶) به نام ترکیب $S-L$ یا ترکیب راسل^۱ - ساوندرز^۲ موسوم است. می‌توان مقادیر مجاز L و S برای آرایش داده شده $n-l$ را با استفاده از مدل برداری که در فصل ۶ آمد نتیجه‌گیری کرد. این مدل پیشگوئی می‌کند که مقادیر مجاز L و S با فواصل عدد صحیح تغییر می‌کنند و محدود به روابط

$$|l'-l| \leq S \leq l+l' \quad \text{و} \quad |l'-l| \leq s \leq s+s' \quad (47-9)$$

هستند. چون برای الکترونها داریم $\frac{1}{2} = s = s'$ ، عدد کوانتومی اسپین کل برای حالتهای اتمی هلیوم یا $S=0$ است یا $S=1$. در یک آرایش ($1s^1, 2p^1$)، یعنی، $l=0$ و $l'=1$ ، مقادیر مجاز L عبارتند از $0=L$ یا $1=L$. یک هشدار در اینجا لازم است. یادآوری کنیم که جمع (۴۶-۹) تنها روی آن آرایش‌هایی انجام می‌شود که با اصل طرد پاولی سازگاراند. اما، مدل برداری حالتهایی ایجاد می‌کند که بعضی از آنها تنها می‌توانند از آرایش‌هایی که این اصل را نقض می‌کنند ساخته شوند. در نتیجه مدل مزبور در واقع یک حد بالایی برای مقادیر مجاز L و S به دست می‌دهد. بعضی از این مقادیر باید به موسیله اصل طرد پاولی رد شوند. اصل طرد بخصوص وقتی که آرایش‌هایی را که در آنها الکترونها دارای اعداد کوانتومی اصلی (n) و مداری (l) یکسان باشند ترکیب می‌کنیم، موثر است. در این مورد، گفته می‌شود که الکترونها هم ارزند. بنابراین باید دقیق شود که در پیوند الکترون‌های هم ارز بعضی از حالتهای که توسط مدل برداری پیش‌بینی می‌شوند، حذف شوند.

آرایش حالت پایه هلیوم عبارت است از ($1s^2$). در این حالت، با الکترون‌های هم ارز سروکار داریم زیرا $l=n=n'=0$ و $l'=0$. چون اصل طرد پاولی تنها یک زیرآرایش مغناطیسی (یعنی، $m_s=0$) را مجاز می‌داند، این تراز ناتبیگن و یکتا است. بر طبق مدل برداری (۹-۴۷)، حالتهای اتمی با $L=0$ ، $S=0$ و $l=0$ ، $S=1$ امکان‌پذیر هستند. اما حالت اخیرداری سه زیر حالت مغناطیسی

1- Russel

2- Saunders

* به عنوان مثال به کتاب زیر رجوع کنید

A. Messiah, "Quantum Mechanics," Volume II, P. 1054. Wiley,
New York, 1962.,

$M_s = \pm 1$ و $M_s = 0$) است که تبیهگانند و بنابراین نمی‌توانند معرف حالت پایه باشد. لذا می‌توانیم حالت پایه هلیوم را به صورت زیر مشخص کنیم (رک ۴۹-۹)

$$\begin{aligned} |(1s^2)\rangle &= |ELSM_L M_S\rangle = |-108,0,0,0,0\rangle \\ &= [1/\sqrt{2}]\psi_{100}(1)\psi_{100}(2) \\ &\quad \times \{|{\frac{1}{2}}\rangle^{(1)}| - {\frac{1}{2}}\rangle^{(2)} - |{\frac{1}{2}}\rangle^{(2)}| - {\frac{1}{2}}\rangle^{(1)}\} \end{aligned} \quad (48-9)$$

بهبیان دیگر، چون حالت پایه هلیوم ناتبیهگان است، دترمینان اسلاتر در طرف راست (۴۸-۹) نیز یک ویژه حالت $L^{(T)^2}$ ، $S_Z^{(T)^2}$ و $S^{(T)}$ با ویژه مقدارهای $0 = L = S = M_L = M_S = 0$ است. چهار دترمینان برانگیخته اسلاتر در (۴۰-۹) که متناظر با آرایش $(1s^1, 2s^1)$ هستند، می‌توانند طبق مدل برداری، به صورت $S = 0$ ، $L = 0$ یا $S = 1$ ، $L = 0$ ترکیب شوند. چون اولی ناتبیهگان و دومی سهبار تبیهگان است، تبیهگنی کل تراز، همان‌طور که انتظار می‌رفت، چهارگانه است. در این مورد هردو حالت ایجاد شده به‌وسیله مدل برداری با اصل پاولی سازگاراند. این نتیجه قابل انتظار بود زیرا الکترونها در آرایش $(1s^1, 2p^1)$ غیر هم‌ارزاند (یعنی $m \neq m'$).

بدون اثبات بیان می‌کنیم که ضرایب کلبش-گوردان در (۴۱-۹) برای آرایش $(1s^1, 2s^1)$ حالت‌های اتمی زیر را می‌دهند،

$$\begin{aligned} &|E, L, S, M_L, M_S\rangle \\ S=0 &\left\{ \begin{array}{l} |-68,0,0,0,0\rangle \rightarrow \frac{\{\psi_{100}(1)\psi_{200}(2) + \psi_{100}(2)\psi_{200}(1)\}}{\sqrt{2}} \\ \quad \times \frac{\{|{\frac{1}{2}}\rangle^{(1)}| - {\frac{1}{2}}\rangle^{(2)} - |{\frac{1}{2}}\rangle^{(2)}| - {\frac{1}{2}}\rangle^{(1)}\}}{\sqrt{2}} \\ \\ \left| \begin{array}{l} |-68,0,1,0,1\rangle \rightarrow \frac{\{\psi_{100}(1)\psi_{200}(2) - \psi_{100}(2)\psi_{200}(1)\}}{\sqrt{2}} |{\frac{1}{2}}\rangle^{(1)}|{\frac{1}{2}}\rangle^{(2)} \\ |-68,0,1,0,0\rangle \rightarrow \frac{\{\psi_{100}(1)\psi_{200}(2) - \psi_{100}(2)\psi_{200}(1)\}}{\sqrt{2}} \\ \quad \times \frac{\{|{\frac{1}{2}}\rangle^{(1)}| - {\frac{1}{2}}\rangle^{(2)} + |{\frac{1}{2}}\rangle^{(2)}| - {\frac{1}{2}}\rangle^{(1)}\}}{\sqrt{2}} \\ \\ |-68,0,1,0,-1\rangle \rightarrow \frac{\{\psi_{100}(1)\psi_{200}(2) - \psi_{100}(2)\psi_{200}(1)\}}{\sqrt{2}} | - {\frac{1}{2}}\rangle^{(1)}| - {\frac{1}{2}}\rangle^{(2)} \end{array} \right. \end{array} \right. \end{aligned} \quad (49-9)$$

این چهار حالت برانگیخته دارای خواص زیراند.

(الف) با وجودی که خودشان دترمینان اسلاتر نیستند، اما ترکیباتی خطی از چهار دترمینان داده شده در (۴۵-۹) می‌باشد.

(ب) ویژه تابعهای^(۲) $L_z^{(T)}$ ، $S_z^{(T)}$ و $\hat{L}_z^{(T)}$ هستند. در اولین حالت داریم $L = S = M_L = M_S = 0$ ؛ چون تبیگنی مغناطیسی $(2S+1)$ برابریک است، این حالت یک حالت یگانه است. سه حالت آخرين متعلق به مقدار $S = 1$ است و آنها به ترتیب برابرند با 1^0 ، 0^+ و -1^0 . بنابراین حالت $S = 1$ یک حالت یگانه را بیان می‌کند. تبیگنی اسپینی، $2S+1$ چندگانگی حالت نامیده می‌شود.

(ج) همه آنها دارای انرژی

$$E_{12} = -54 \left(\frac{1}{1^2} + \frac{1}{2^2} \right) = -68 \text{ eV}$$

هستند.

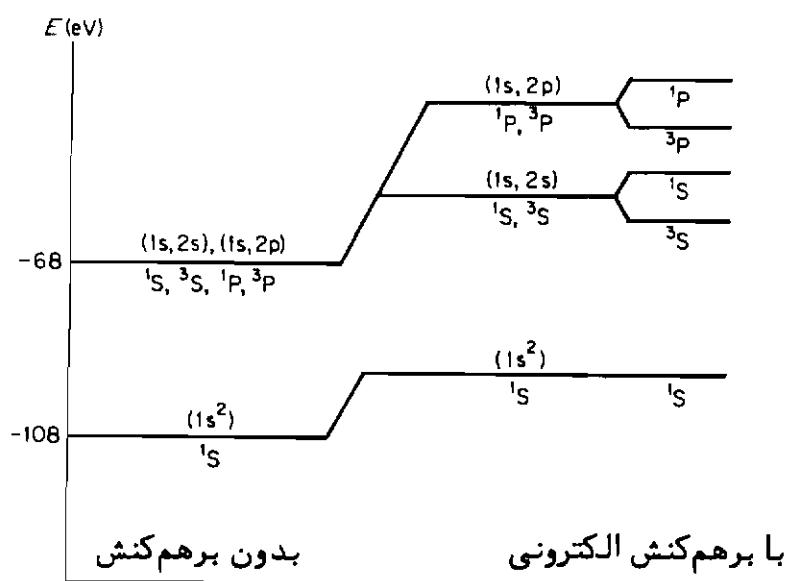
(د) همه آنها از یک قسمت فضائی متقارن و یک قسمت اسپینی پاد متقارن با بر عکس تشکیل شده‌اند، در نتیجه، هر کدام از آنها کلاً "پاد متقارن" است، همان‌طور که برای فرمیون‌ها لازم است.

(ه) مهمتر از همه، جمله برهمنش الکتروستاتیکی در (۳۵-۹) را قطری می‌کنند و بنابراین یک تقریب مرتبه صفر مناسبی برای ویژه حالتهای انرژی اتم هلیوم حقیقی تشکیل می‌دهند.

مقادیر L و S یک حالت اتمی از نظر طیف نمایی با بهکاربردن یک حرف بزرگ برای نمایش مقدار L و یک شاخص بالا برای نمایش چندگانگی $2S+1$ نشان داده می‌شوند. به عنوان مثال، حالت S^1 دارای $S = L = 0$ است، در حالی که 3P دارای $S = 1$ و $L = 1$ می‌باشد.

آرایش $(1s^1, 2p^1)$ در هلیوم دوازده بار تبیگن است. طبق مدل برداری، می‌توانیم آرایش مغناطیسی را با حالتهای اتمی با $S = 0$ ، $L = 0$ ، $S = 1$ ، $L = 1$ و $S = 1$ ، $L = 1$ ترکیب کنیم. چون حالت اخیر نهار و حالت قبلی سه بار تبیگن است تبیگنی کل دوازده گانه است. مجدداً، چون الکترونها غیر هم‌ارزاند، هیچ‌کدام از حالتهای اتمی مذکور در فوق رد نمی‌شوند. به علت تبیگنی تصادفی، آرایشهای $(1s^1, 2s^1)$ و $(1s^1, 2p^1)$ هردو دارای یک انرژی هستند، در نتیجه حالتهای 1S ، 3S ، 1P و 3P همه دارای انرژی 8.8 eV می‌باشند. وقتی نظریه پریشیدگی مرتبه اول به برهمنش الکتروستاتیکی اعمال شود (فصل ۱۵)، انرژیهای این

حالتها بر حسب مقادیر L و S مربوطه شان جایه‌جا می‌شوند (شکل ۵-۹). در فصل ۱۰ نشان خواهیم داد که اصل طرد پاولی به صورت یک قاعده (قاعده هاند^۳) باعث می‌شود که، برای یک آرایش معین، حالتها با چندگانگی بالاتر انرژی کمتری داشته باشند. در نتیجه، در آرایش $(1s^1, 2s^1)$ ، حالت 3S انرژی کمتری از حالت 1S دارد. هم‌چنین در آرایش $(1s^1, 2p^1)$ ، حالت 3P پائین تراز حالت 1P قرار می‌گیرد (شکل ۹-۵).



شکل (۵-۹) جایه‌جایی انرژی حالتها انتی ایده‌آل در هلیوم وقتی که برهمنش الکترونی در نظر گرفته می‌شود.

هر چند بحث فوق مربوط به اتم هلیوم است، روش مذکور می‌تواند به اتم Z الکترونی تعمیم داده شود. اگر پریشیدگی غالب برهمنش الکتروستاتیکی باشد، باید دترمینانسی اسلاتر را به ویژه حالتها $\hat{L}^{(i)} = \sum_{i=1}^Z \hat{\mathbf{S}}^{(i)}$ و $\hat{S}^{(T)} = \sum_{i=1}^Z \hat{S}^{(i)}$ پیوند دهیم. مدل برداری برای حالتها جفت شده $L-S$ منجر به محدودیتها زیر در مقادیر L و S می‌شود.

$$\begin{aligned} |l + l' + l'' + \dots|_{\min} &\leq L \leq (l + l' + l'' + \dots) \\ |s + s' + s'' + \dots|_{\min} &\leq S \leq (s + s' + s'' + \dots) \quad (s = s' = s'' = \dots = \frac{1}{2}) \end{aligned} \quad (50-9)$$

معنی جمله $|l + l' + l'' + \dots|_{\min}$ این است که بردارها طوری جمع می‌شوند که اندازه برآیند کمینه باشد. در نگاه اول چنین به نظر می‌رسد که وقتی عدد انتی Z افزایش می‌یابد، تعداد حالتها

اتمی ممکن برای یک آرایش معین به طور هماهنگ افزایش می‌یابد. در واقع، به خاطر اصل طرد پاولی، بسیاری از حالتهای جفت شده که توسط مدل برداری پیش‌بینی می‌شوند غایبند. در واقع، اتمها در حالت پایه معمولاً "تعداد زیادی الکترون هم ارز دارند". می‌توان نشان داد که در یک آرایش داده شده تعداد زیرآرایش‌های مغناطیسی که با اصل طرد پاولی سازگاراند با فرمول

$$\frac{g!}{k!(g-k)!} = \text{تبهگنی}$$

داده می‌شود که در آن g تعداد حالتهای در خارجی ترین زیرلایه پر نشده، یعنی $(2L+1)$ و k تعداد الکترونها در این زیرلایه است. بنابراین، به عنوان مثال، اگر اتمی در حالت پایه یک لایه خارجی کاملاً پر شده داشته باشد، یعنی $k = g$ ، در این صورت آرایش ناتبهگن است و فقط می‌تواند به یک حالت S^1 ، همان‌طور که در مورد هلیوم بود، قرار گیرد. بنابراین تعداد حالتهای اتمی (جمله‌های طیفی) برای یک آرایش حالت پایه معین، به وسیله خارجی ترین زیرلایه تعیین می‌شود. در جدول (۱-۹) جمله‌های طیفی ممکن را برای الکترونها هم ارز s و p در یک زیرلایه خارجی نشان داده‌ایم. توجه کنیم که بعضی جملات ایجاد شده به وسیله مدل برداری، به خاطر اصل طرد پاولی، غایب هستند. هم‌چنین توجه کنیم که تبهگنی وابسته به زیرآرایش‌های مغناطیسی برای یک آرایش $1-n$ داده شده برابر است با تبهگنی کل حالتهای اتمی که از طرحواره جفت شدگی $1-L$ ایجاد شده‌اند. تبهگنی یک آرایش $1-n$ در اتمهایی که زیرلایه خارجی آنها نیمه‌پراست بیشترین مقدار را دارد. در این مورد، فرایند جفت شدگی پیچیده‌ترین است.

جدول (۱-۹)

حالتهای مجاز در طرحواره جفت شدگی $1-L$ برای الکترونها هم ارز در یک زیرلایه پر نشده خارجی

تبهگنی زیرآرایش‌های مغناطیسی آرایش $1-n$	حالتهای اتمی	تبهگنی حالتهای اتمی	$\frac{g!}{k!(g-k)!}$
در طرحواره جفت شدگی $1-L$	(جملات طیفی)		
$\sum (2S+1)(2L+1)$			
2	2S	($\cdots ns^1$)	2
1	1S	($\cdots ns^2$)	1
6	2P	($\cdots np^1$)	6
15	$^1S, ^1D, ^3P$	($\cdots np^2$)	15
20	$^2P, ^2D, ^4S$	($\cdots np^3$)	20
15	$^1S, ^1D, ^3P$	($\cdots np^4$)	15
6	2P	($\cdots np^5$)	6
1	1S	($\cdots np^6$)	1

هم چنین ممکن است با ترکیب حالت‌های $|ELSM_L M_S\rangle$ به‌ویژه حالت‌های $|\hat{L}^{(T)} + \hat{S}^{(T)}\rangle^2 = |\hat{J}_Z^{(T)} + S_Z^{(T)}\rangle^2 = |\hat{J}^{(T)2}\rangle$ رسید. حالت‌های اخیر را با $|ELSJM_J\rangle$ نمایش می‌دهیم. مدل برداری J را طبق $|L - S| \leq J \leq L + S$ ، با $J \leq |M_J|$ ، محدود می‌کند. هردو مجموعه حالت‌های راسل-ساوندرز هستند و هردو پریشیدگی الکتروستاتیکی را قطری می‌کنند. ضرایب کلبش-گوردان برای این جفت‌شدگی از نظر شکل با ضرایبی که در مورد الکترون هیدرژنی به‌کاررفت یکسانند. اگر پریشیدگی ثانوی از آثار اسپین-مداری (میدان‌های خارجی قوی وجود ندارند) ناشی شده باشد مجموعه انتخابی $|ELSJM_J\rangle$ است. برای نمایش این مطلب از نظر طیف نمایی، یک شاخص پائینی برای نمایاندن مقدار J اضافه می‌کنیم، به عنوان مثال، $|E, 2, 1, 3, M_J\rangle = |D_3^3\rangle$ به صورت نوشته می‌شود.

برای اتمهای با عدد اتمی خیلی بالا نتیجه می‌شود که پریشیدگی‌های غالب از آثار اسپین-مداری ناشی می‌شوند. در این صورت، حالت‌های اتمی راسل-ساوندرز ($L-S$) پریشیدگی را قطری نمی‌کنند. برای اتمهای با Z بزرگ یک طرحواره جفت‌شدگی لازم است که به آن جفت‌شدگی $z-z$ می‌گویند. بحث جفت‌شدگی $z-z$ می‌تواند در هر کتاب درسی متعارفی درباره نظریه اتمی پاافت شود*.

۱۵- گاز ایدهآل کوانتومی

در نظریه جامدات، مایعات و گازها تعداد ذرات سیستم معمولاً "از مرتبه 10^{23} " هستند. چون ذرات در جامدات و مایعات عموماً به‌طور شدید برهمنکش می‌کنند، این سیستمهای نمی‌توانند به عنوان سیستمهای ایدهآل در نظر گرفته شوند. در مورد گازهای رقیق فاصله بین ذرات معمولاً "آنقدر زیاد است که می‌توان آنها را ایدهآل در نظر گرفت. با این وجود، در بعضی موارد، طبیعت تمیزناپذیری ذرات گاز نقش مهمی در رفتار ماکروسکوپیکی آن بازی می‌کند. به عنوان مثال، He^4 (یک بوزون) در درجات حرارت پائین رفتاری کاملآ متفاوت از He^3 (یک فرمیون) دارد. چون این دو اتم ایزوتوب یکدیگرند، دارای خواص شیمیایی یکسانی می‌باشند. اختلاف در اسپین‌های هسته‌ای آنها منشاء رفتار ترمودینامیکی

* به عنوان مثال به کتاب زیر مراجعه کنید

E.U.Condon and G.H. Shortley, "The Theory of Atomic Spectra", Chapter X., Cambridge Univ. Press, London and New York, 1963.

کاملاً "متفاوت آنهاست.

هامیلتونی مجموعه‌ای از ذرات تمیزناپذیر ایده‌آل در یک جعبه بزرگ به حجم \mathcal{V} عبارت است از

$$\mathcal{H} = \sum_{q=1}^N \frac{\vec{p}^{(q)2}}{2m} + V^{(q)} , \quad \begin{array}{ll} V^{(q)} = 0 & \text{در داخل} \\ V^{(q)} = \infty & \text{در جای دیگر} \end{array} \quad (51-9)$$

حالت‌های تک‌ذره‌ای (بهنجارشده جعبه‌ای) و انرژی‌های آنها عبارتنداز

$$\psi_{\mathbf{k}, m_s} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} |m_s\rangle \quad \text{و} \quad \epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (52-9)$$

که مقادیر مجاز بردار کوانتومی \mathbf{k} به‌وسیله

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{\mathcal{V}^{1/3}} (n_x \mathbf{i} + n_y \mathbf{j} + n_z \mathbf{k}), \quad n_x, n_y, n_z = \text{اعداد درست}$$

داده می‌شوند. حالت‌های کل برای بوزونها حاصل‌ضربهای متقابن شده‌ای به‌شكل

$$|\alpha\rangle = |\text{کلی}\rangle \rightarrow \frac{1}{(N!)^{1/2}} \mathcal{D} \psi_{\mathbf{k}_1, m_1}(1) \psi_{\mathbf{k}_2, m_2}(2) \cdots \psi_{\mathbf{k}_N, m_N}(N) \quad (53-9)$$

هستند. حالت‌های فرمیونها می‌توانند بر حسب دترمینانهای اسلاتر $N \times N$ به صورت

$$|\alpha\rangle = |\text{کلی}\rangle \rightarrow \frac{1}{(N!)^{1/2}} \begin{vmatrix} \psi_{\mathbf{k}_1, m_1}(1) & \cdots & \psi_{\mathbf{k}_N, m_N}(1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{\mathbf{k}_1, m_1}(N) & \cdots & \psi_{\mathbf{k}_N, m_N}(N) \end{vmatrix} \quad (54-9)$$

نوشته شوند. برای کوتاه‌کردن نعادگذاری‌ها در مسئله چند جسمی، توجه کنیم که وقتی اعداد اشغال حالت‌های تک‌ذره‌ای، $n_{\mathbf{k}, m_s}$ ، داده شده باشند می‌توانیم تابع حالت با تقارن مناسب را بسازیم. قرار می‌دهیم

$$|\alpha\rangle = |\{n_{\mathbf{k}, m_s}\}\rangle$$

که در آن عدد کوانتومی $\alpha = \{n_{\mathbf{k}, m_s}\}$ معرف دنباله‌ای از اعداد درست است که تعداد ذرات در حالت تک‌ذره‌ای $n_{\mathbf{k}, m_s}$ را نشان می‌دهند. برای فرمیونها، این محدودیت دیگر را داریم که $n_{\mathbf{k}, m_s}$ باید یا یک باشد یا صفر (اصل طرد پاولی). انرژی کل گاز عبارت است از

$$E_\alpha = \sum_{\mathbf{k}, m_s} n_{\mathbf{k}, m_s} \epsilon_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}, m_s} n_{\mathbf{k}, m_s} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (55-9)$$

البته، اعداد اشغال باید در رابطه

$$N = \sum_{k, m_k} n_{k, m_k} \quad (56-9)$$

صدق کنند. در حالت پایه یک گاز بوزونی ایده‌آل، هر ذره در حالت پائین‌ترین انرژی قرار دارد. از طرف دیگر، یک گاز فرمی ایده‌آل، نظیر الکترونها در یک فلز، دارای یک ذره در هر کدام از N حالت پائین‌ترین انرژی است. پرانرژی‌ترین تراز اشغال شده در حالت پایه تراز فرمی نامیده می‌شود.

۱۱- نمایش N ، عملگر چگالی، آمار کوانتومی

یک آرایش داده شده $\{n_{k, m_k}\}$ از یک سیستم چند ذره‌ای می‌تواند به وسیله انرژی‌سیستم و تعداد کل ذرات N ، $E_a = \sum n_{k, m_k} E_k$ نمایش داده شود. از نمادگذاری زیر (برای سیستمهای ایده‌آل) استفاده خواهیم کرد

$$|E_a, N\rangle = |\alpha\rangle = |\{n_{k, m_k}\}\rangle \quad (57-9)$$

کت $\langle E_a, N |$ معرف یک حالت با انرژی E_a و تعداد N ذره است. این تراز شدیداً "تبهکن" است زیرا عموماً می‌توان در حالی که انرژی و تعداد کل ذرات ثابت می‌مانند اعداد اشغال را جایه‌جا کرد. توجه کنیم که وقتی ذرات برهمنش می‌کنند آرایش طرف راست بسی معنی می‌شود. انرژی و تعداد کل ذرات در طرف چپ (۵۷-۹) بازم کاملاً معین هستند ولی دیگر به وسیله (۵۵-۹) و (۵۶-۹) داده نمی‌شوند.

برای کاربردهای بسیاری کافی است که N را به عنوان یک پارامتر ثابت در نظر بگیریم. اما در مواردی که N هایسته نهاد، باید به آن به عنوان یک عدد کوانتومی نگاه کنیم و گذارهای بین حالت‌های با N متفاوت را در نظر بگیریم. به عنوان مثال، در فرایندهای با انرژی بالا که ذرات بوجود می‌آیند یا از بین می‌روند، N ثابت نیست. یک دلیل روشن تر برای اینکه N به عنوان یک متغیر (نمایش N) در نظر گرفته شود این است که به آسانی در نظریه مکانیک آماری کوانتومی مورد استفاده قرار می‌گیرد. حالت‌های $|E_a, N\rangle$ اکنون به عنوان ویژه حالت‌های \hat{H}_0 و \hat{N} در نظر گرفته می‌شوند، یعنی،

$$\hat{H}|E_a, N_a\rangle = E_a|E_a, N_a\rangle \quad (N_a = 0, 1, 2, \dots) \quad (58-9)$$

$$\hat{N}|E_a, N_a\rangle = N_a|E_a, N_a\rangle$$

اگر سیستم چند جسمی در یکی از ویژه حالت‌های خود ، $\langle E_a, N_a \rangle$ ، باشد مقدار قابل انتظار یک عملگر چند جسمی (مثل " ، عملگر انرژی جنبشی)

$$\hat{A} = \hat{A}(f^{(1)}, f^{(2)}, \dots, f^{(N_a)}, f^{(N_a)})$$

می‌تواند به صورت

$$\langle \hat{A} \rangle_a = \langle E_a, N_a | \hat{A} | E_a, N_a \rangle \quad (59-9)$$

محاسبه شود . وقتی مشخص باشد که سیستم در یکی از ویژه حالت‌های خود قرار دارد ، می‌گوئیم که سیستم در یک حالت "حالص" است .

در عمل ، غالباً "با یک حالت "مخلوط" سروکار داریم و تنها یک شناخت آماری از سیستم داریم . اطلاعات آماری دارای طبیعت ترمودینامیکی است و به وسیله یک تابع توزین W که وزن ترمودینامیکی نسبی یا فتن سیستم در حالت $\langle E_a, N_a \rangle$ را می‌دهد ، نمایش داده می‌شود . متوسط ترمودینامیکی با استفاده از

$$\bar{A}_{\text{therm}} = \sum_a W_a \langle E_a, N_a | \hat{A} | E_a, N_a \rangle \quad (60-9)$$

به دست می‌آید . بدیک معنا ، ما متوسط حرارتی توزین شده ، مقادیر قابل انتظار کوانتومی را محاسبه می‌کنیم . طرحواره‌ای از این نوع متوسط مجموعه‌ای نامیده می‌شود و ، از ملاحظات احتمالاتی ، انتظار داریم که توابع توزین مجموعه‌ای بهنجار شده باشند ، یعنی

$$\sum_a W_a = 1$$

محتملاً " مهمترین تابع توزین مجموعه‌ای (چگالی) متعلق به مجموعه بندادی بزرگ است که به وسیله

$$W_a = \frac{e^{(\mu N_a - E_a)/k_B T}}{\sum_b e^{(\mu N_b - E_b)/k_B T}} \quad (\text{ثابت بولتزمن} = k_B) \quad (61-9)$$

تعریف می‌شود . مخرج طوری انتخاب شده است که چگالی مجموعه‌ای بهنجار شده باشد . پارامترهای μ (پتانسیل شیمیائی) و T (دمای کلوین) حالت ترمودینامیکی سیستم را مشخص می‌کنند . وقتی پتانسیل شیمیائی و دمای سیستم معلوم باشند ، متوسط ترمودینامیکی هر عملگر چند جسمی می‌تواند با استفاده از

$$\bar{A}(\mu, T) = \frac{\sum_{\alpha} e^{(\mu N_{\alpha} - E_{\alpha})/k_B T} \langle E_{\alpha}, N_{\alpha} | \hat{A} | E_{\alpha}, N_{\alpha} \rangle}{\sum_{\alpha} e^{(\mu N_{\alpha} - E_{\alpha})/k_B T}} \quad (62-9)$$

محاسبه شود. متوسط فوق می‌تواند در یک شکل فشرده‌تری به صورت

$$\bar{A}(\mu, T) = \frac{\text{Tr} \hat{\rho} \hat{A}}{\text{Tr} \hat{\rho}} \quad (63-9)$$

بیان شود که در آن عملگر چگالی مجموعه بندادی بزرگ عبارت است از

$$\hat{\rho} = e^{(\mu R - \mathcal{H})/k_B T}$$

چون رد عبارت از حاصل جمع عناصر قطری (در هر پایه) است، نتیجه می‌گیریم

$$\text{Tr} \hat{\rho} \hat{A} = \sum_{\alpha} \langle E_{\alpha}, N_{\alpha} | e^{(\mu R - \mathcal{H})/k_B T} \hat{A} | E_{\alpha}, N_{\alpha} \rangle$$

$$= \sum_{\alpha} e^{(\mu N_{\alpha} - E_{\alpha})/k_B T} \langle E_{\alpha}, N_{\alpha} | \hat{A} | E_{\alpha}, N_{\alpha} \rangle$$

،

$$\text{Tr} \hat{\rho} = \sum_{\alpha} \langle E_{\alpha}, N_{\alpha} | e^{(\mu R - \mathcal{H})/k_B T} | E_{\alpha}, N_{\alpha} \rangle = \sum_{\alpha} e^{(\mu N_{\alpha} - E_{\alpha})/k_B T}$$

معادلات (63-9) و (62-9) در واقع بکسان‌اند. البته، برای محاسبه متوسط حرارتی در (62-9) باید نخست مسئله چند جسمی را حل کنیم و هر کدام از مقادیر قابل انتظار $\langle E_{\alpha}, N_{\alpha} | \hat{A} | E_{\alpha}, N_{\alpha} \rangle$ را پیدا کنیم.

بدون اثبات ذکر می‌کنیم که برای سیستمهای بدون برهمنش ایده‌آل متوسط روی حالت‌های $\langle E_{\alpha}, N_{\alpha} |$ ، چند جسمی به متوسط روی حالت‌های تک‌ذره‌ای به شکل

$$\bar{A}(\mu, T) = \sum_{\mathbf{k}, m_s} \bar{n}_{\mathbf{k}, m_s}(\mu, T) \langle \mathbf{k}, m_s | \hat{A} | \mathbf{k}, m_s \rangle \quad (64-9)$$

تقلیل پیدا می‌کند. در اینجا، $\langle A \rangle_{\mathbf{k}, m_s}$ عبارت است از مقدار قابل انتظار یک عملگر یک‌جسمی در یک حالت تک‌ذره‌ای و $(\mu, T) \bar{n}_{\mathbf{k}, m_s}$ در اصل یک متوسط حرارتی اعداد اشغال است. این اعداد اشغال متوسط به وسیله روابط* (رک مسئله ۸-۹)

* برای ذرات تمیزی‌ذیر، \bar{n} به وسیله توزیع کوانتومی بولتزمن

$$\bar{n}_{\mathbf{k}, m_s} = e^{\mu/k_B T} e^{-E_{\mathbf{k}}/k_B T}$$

داده می‌شود. برای بدست آوردن آن، به عنوان مثال، به کتاب

$$\bar{n}_{\mathbf{k}, m_s} = \frac{1}{e^{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)/k_B T} - 1} \quad (\text{توزیع بوز - اینشتین برای بوزونهای تمیزناپذیر})$$

(۶۵-۹ الف)

$$\bar{n}_{\mathbf{k}, m_s} = \frac{1}{e^{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)/k_B T} + 1} \quad (\text{توزیع فرمی - دیراک برای فرمیونهای تمیزناپذیر})$$

(۶۵-۹ ب)

داده می‌شوند.

انرژی و تعداد ترمودینامیکی ذرات به ترتیب عبارتند از

$$E(\mu, T) = \sum_{\mathbf{k}, m_s} \bar{n}_{\mathbf{k}, m_s} \langle \mathbf{k}, m_s | \hat{\mathcal{H}} | \mathbf{k}, m_s \rangle = \sum_{\mathbf{k}, m_s} \bar{n}_{\mathbf{k}, m_s} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (66-9)$$

$$N(\mu, T) = \sum_{\mathbf{k}, m_s} \bar{n}_{\mathbf{k}, m_s} \quad (67-9)$$

در عمل، ذرات در یک جعبه بزرگ قرار دارند و \mathbf{k} شبه پیوسته می‌شود. حاصل جمع می‌تواند، با استفاده از (۱۶-۵)، به وسیله یک انتگرال جایگزین شود، که می‌دهد

$$\sum_{\mathbf{k}, m_s} \rightarrow \Gamma_s \int \frac{d\mathbf{k} \sqrt[4]{\epsilon}}{(2\pi)^3} = \Gamma_s \int \frac{dp \sqrt[4]{\epsilon}}{\hbar^3} \quad \left(\mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar} \right) \quad (68-9)$$

ضریب تبھگنی اسپینی $1 + s = 2s$ برای الکترون ($\frac{1}{2} = s$) برابر است با ۲. متوسطهای حرارتی مشاهده‌پذیرهای مستقل از اسپین به شکل $\hat{A}(\mathbf{p})$ شکل زیر را به خود می‌گیرند

$$\bar{A}(\mu, T) = \Gamma_s \frac{\sqrt[4]{\epsilon}}{\hbar^3} \int \bar{n}(\mathbf{p}) A(\mathbf{p}) d\mathbf{p}$$

J. Kestin and J.R. Dorfman, "A Course in Statistical Thermodynamics" PP. 343-349, Academic Press, New York, 1971.

با به کتاب

C. Kittel, "Elementary Statistical Physics" P. 86, Wiley, New York, 1958.

مراجعه کنید.

که در آن

$$\bar{n}(\mathbf{p}) = \frac{1}{e^{(p^2/2m - \mu)/k_B T} \pm 1}$$

به عنوان مثال، انرژی و تعداد ترمودینامیکی ذرات در (۶۶-۹) و (۶۷-۹) می‌شوند

$$E(\mu, T) = \Gamma_s \frac{\gamma}{h^3} \int \bar{n}(\mathbf{p}) \frac{p^2}{2m} d\mathbf{p} \quad (\text{تمام فضای } \mathbf{p}) \quad (69-9\text{الف})$$

و

$$N(\mu, T) = \Gamma_s \frac{\gamma}{h^3} \int \bar{n}(\mathbf{p}) d\mathbf{p} \quad (\text{تمام فضای } \mathbf{p}) \quad (69-9\text{ب})$$

باید مخصوصاً "در موقع جایگزین کردن حاصل جمع بهوسیله انتگرال برای بوزونهای در دمای پائین دقت کنیم. نزدیک صفر مطلق، اغلب ذرات بوزون سعی دارند که حالت‌های تک ذره‌ای در مجاورت $\mathbf{0} = \mathbf{k}$ را اشغال نمایند. این حالت‌ها حتی برای حجم‌های بزرگ شبه پیوسته نمی‌شوند و بنابراین نمی‌توان بهجای حاصل جمع از یک انتگرال استفاده کرد. در واقع، در زیر یک دمای بحرانی T_0 ، ذرات سریعاً "حالت پایه $\mathbf{0} = \mathbf{k}$ " را اشغال می‌کنند. این پدیده به تراکم اینشتینی معروف است (شکل ۹-۶). چون برای فرمیونها اصل طرد پاولی مانع این "تجمع" در مجاورت $\mathbf{0} = \mathbf{k}$ می‌شود، این تراکم در مورد الکترونها دیده نمی‌شود. از (۶۹-۹) آشکار است که متوسطهای حرارتی بستگی به حجم کاز دارند و باید به صورت

$$\bar{E} = \bar{E}(\mu, T, \gamma) \quad \text{و} \quad \bar{N} = \bar{N}(\mu, T, \gamma)$$

نوشته شوند. هم‌چنین از (۶-۹) روشن است که در $T = 0$ توزیع فرمی دیراک در هر حالت زیر تراز فرمی* یک الکترون دارد و در حالت‌های با انرژی بالاتر از E_F هیچ الکترونی ندارد. بنابراین تراز فرمی بهوسیله تعداد فرمیونها در سیستم، یا به طور معادل بهوسیله چگالی ذرات معین می‌شود. برای ربط دادن E_F به چگالی، (۶۹-۹ ب) را به صورت

$$\frac{\bar{N}}{\gamma} = \rho = \frac{\Gamma_s}{h^3} \int \bar{n}(\mathbf{p}) d\mathbf{p} \quad (\Gamma_s = 2) \quad (70-9)$$

می‌نویسیم که ($T = 0$)

* انرژی فرمی با پتانسیل شیمیائی در $T = 0$ برابر است، یعنی، $\mu|_{T=0} = \epsilon_F$.

$$\bar{n}(\mathbf{p}) = 1, \quad |\mathbf{p}| \leq p_F \\ \bar{n}(\mathbf{p}) = 0, \quad |\mathbf{p}| > p_F \quad \left(\frac{p_F^2}{2m} = \varepsilon_F \right)$$

با تبدیل انتگرال به مختصات کروی ، (۷۰-۹) خواهد شد

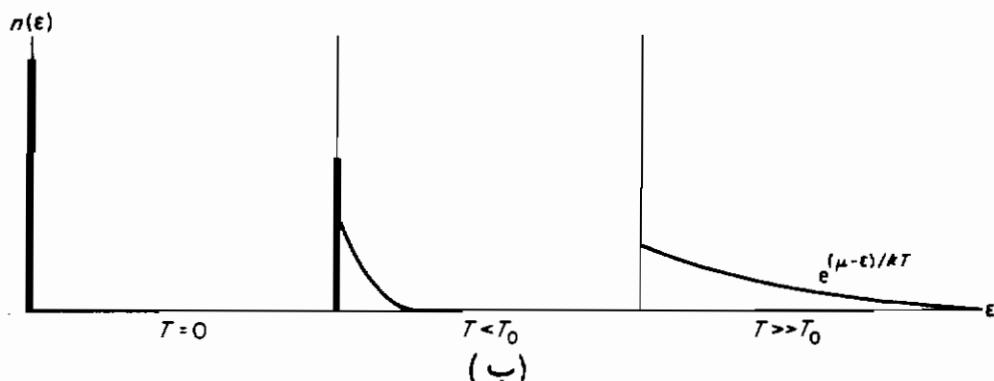
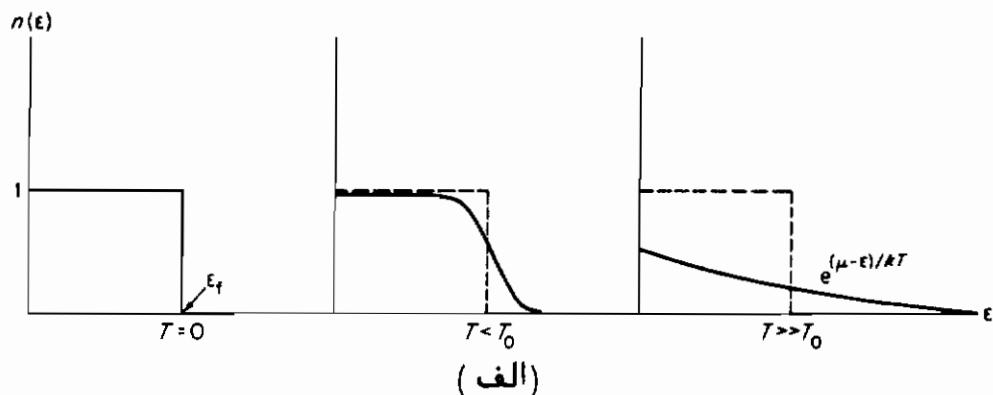
$$\rho = \frac{2}{h^3} \int_0^{p_F} 4\pi p^2 dp = \frac{8\pi}{3h^3} p_F^3$$

تکانهٔ فرمی عبارت است از

$$p_F = \left(\frac{3h^3}{8\pi} \rho \right)^{1/3} \quad (71-9)$$

با استفاده از $p_F = (2m\varepsilon_F)^{1/2}$ ، انرژی فرمی می‌شود

$$\varepsilon_F = 3^{2/3} \pi^{4/3} \frac{\hbar^2}{2m} \rho^{2/3} \quad (71-9)$$



شکل (۷۱-۹) توزیع (الف) فرمی-دیراک و (ب) بوز-اینشتین برای دماهای گوناگون . T_0 عبارت است از دمای تبھگنی داده شده در معادله (۷۲-۹) .

به طور خلاصه، مشاهده می‌کنیم که تفاوت اصلی بین مسائل چند جسمی ایده‌آل کلاسیکی و کوانتومی از آثار همبستگی آماری سرچشمه می‌گیرد. این آثار در تابع توزیع آماری یک ذره‌ای

$$\bar{n}_k = \frac{1}{e^{(\epsilon_k - \mu)/k_B T} \pm 1} \quad (72-9)$$

منعکس شده‌اند. جمله $1 \pm$ در (72-9)، که از این همبستگی‌ها ناشی می‌شود و در آمار ذرات تمیزپذیر وجود ندارد، روی رفتار ترمودینامیکی فرمیونها و بوزونها تاثیر می‌گذارد. وقتی فاصله متوسط بین ذرات تمیزپذیر در مقایسه با متوسط طول موجه‌ای دوبروی آنها بزرگ می‌شود، انتظار داریم که این ذرات تا اندازه‌ای تمیزپذیری فضائی کسب کنند. اگر فرض کنیم که انرژی متوسط یک ذره در یک گاز $\pi k_B T \sim \rho$ باشد، داریم

$$\lambda = \frac{\hbar}{\bar{p}} = \frac{\hbar}{(2m\bar{\epsilon})^{1/2}} \simeq \frac{\hbar}{(2\pi m k_B T)^{1/2}}$$

فاصله بین ذره‌ای به طور تقریب با $1/\rho^{1/3} = d$ داده می‌شود. در نتیجه، انتظار داریم وقتی که

$$\lambda \ll d, \quad \frac{\hbar}{(2\pi m k_B T)^{1/2}} \ll \frac{1}{\rho^{1/3}}$$

با

$$T_0 \ll T \quad , \quad (T_0 = \frac{\rho^{2/3} h^2}{2\pi m k_B}) \quad (73-9)$$

باشد ذرات تقریباً "تمیزپذیر" بشوند. به طور معادل، توزیعهای فرمی-دیراک و بوزاینشتین باید، وقتی دما خیلی بالاتراز دمای تبھگنی T_0 است، به توزیع بولتزمن $e^{(\mu - \epsilon_k)k_B T}$ تقلیل یابند. در واقع، همان‌طور که از شکل (6-9) دیده می‌شود، نیز همین‌طور است. از طرف دیگر، در زیر این دما آثار کوانتومی غلبه می‌کنند. برای فرمیونها، سیستم تقریباً "در حالت پایه" است. برای بوزونها، شروع تراکم اینشتینی را مشاهده می‌کنیم.

برای سیستمهای رقیق، چگالی پائین است و T_0 در (73-9) خیلی نزدیک به صفر مطلق است. از طرف دیگر، گاز الکترون آزاد در یک فلز دارای $10^{23} \sim \text{ذره cm}^3$ است. دمای تبھگنی متناظر $K \sim 10,000^\circ$ است به طوری که حتی در دمای اطاق بیشتر الکترونها یک فلز اصولاً "پائین‌ترین" حالت‌های مجاز، بوسیله اصل طرد پاولی، را اشغال می‌کنند.

بحث ما تا اینجا اصولاً روی سیستمهای ایده‌آل متمرکز شده بود. وقتی برهمنشها

منظور شوند، یک جواب دقیق، بهجز در موارد نادر، غیرممکن است. قدرت و برد نسبی برهمنشایی که از نظر فیزیکی جالب‌اند غالباً "امکان یک بررسی مستقیم پریشیدگی را رد می‌کنند. در فصل ۱۵، بعضی از روشایی را که در بررسی سیستم‌های ذرات حقیقی مفید تشخیص داده شده‌اند، گسترش خواهیم داد.

مسائل

۱-۹ (الف) مجموعه‌ای از N ذره، که جرم هر کدام m_i است و تحت تاثیر پتانسیل خارجی $V_i(r)$ قرار دارد، در نظر بگیرید. برهمنش بین ذرات می‌تواند به صورت $V_{ij} = V(|r_i - r_j|)$ نوشته شود. هامیلتونی سیستم و معادلات هامیلتونی حرکت را برای ذره i ام بنویسید.

(ب) هامیلتونی مکانیک کوانتومی را در مکانیک موجی بنویسید و نشان دهید که وقتی برهمنشها نادپده گرفته شوند، معادله شرودینگر به معادلات تک ذره‌ای تفکیک می‌شود.

۲-۹ دو ذره (m_1 و m_2) بدون برهمنش در یک پتانسیل نوسانگر یک بعدی $V = \frac{1}{2}Kx^2$ و در یک حالت اسپینی در نظر بگیرید.

(الف) یک عبارت عمومی برای انرژیهای کوانتیده سیستم پیدا کنید.

(ب) اگر ذرات تمیزناپذیر باشند، یعنی $m_1 \neq m_2$ ، ویژه تابعهای متناظر (x_1, x_2) را پیدا کنید.

(ج) قسمت (ب) را برای موردی که در آن ذرات فرمیونهای تمیزناپذیر باشند ($m_1 = m_2$) تکرار کنید. برای بوزونها نیز تکرار کنید.

(د) با استفاده از قسمت (ج) احتمال یافتن ذرات با فاصله معین $x = x_2 - x_1 = n$ را وقتی که سیستم در حالت $0 = |n\rangle$ باشد پیدا کنید. این عمل را هم برای بوزونها و هم برای فرمیونها انجام دهید.

۳-۹ (الف) با استفاده از (۱۷-۹) نشان دهید که اثر عملکر جایگشت $\hat{P}^{(qt)}$ روی یک ویژه کت مکانی عبارت است از

$$\hat{P}^{(qt)} |r^{(1)} \dots r^{(q)}, r^{(t)} \dots r^{(N)}\rangle = |r^{(1)} \dots r^{(t)}, r^{(q)} \dots r^{(N)}\rangle$$

(ب) با استفاده از قسمت (الف) نشان دهید که اگر $|\alpha^5\rangle$ و $|\alpha^8\rangle$ ویژه حالت‌های

پ) با ویژگی

$$\hat{P}^{(qt)} |x^S\rangle = |\alpha^S\rangle, \quad \hat{P}^{(qr)} |\alpha^A\rangle = -|\alpha^A\rangle$$

باشد ویژه تابعهای متناظر دارای ویژگی زیر هستند.

$$\Psi_{\alpha}^S(1, 2, \dots, q, t, \dots, N) = \Psi_{\alpha}^S(1, 2, \dots, t, q, \dots, N)$$

$$\Psi_{\alpha}^A(1, 2, \dots, q, t, \dots, N) = -\Psi_{\alpha}^A(1, 2, \dots, t, q, \dots, N)$$

(راهنمایی: از روش‌های ارائه شده در فصل ۴ برای پاریته استفاده کنید)

۴-۹ (الف) تبھگی وابسته به یک آرایش (1s, 3d) در هلیوم را پیدا کنید و حالت‌های جفت‌شده $S-L$ را بنویسید. آیا در این آرایش الکترونها هم ارزاند؟

(ب) تحقیق کنید که تبھگی جمله‌های طیفی با تبھگی آرایش برابر است.

۵-۹ (الف) تبھگی وابسته به یک آرایش (1s², 2s², 2p³)، (یعنی، حالت پایه‌اتم ازت) را پیدا کنید.

(ب) حالت‌های اتمی معکن $S-L$ را برای این آرایش پیدا کنید. (راهنمایی: از جدول ۱ استفاده کنید)

(ج) جمله طیفی متناظر با حالت پایه می‌تواند با استفاده از قواعد (هاند) زیر به دست آید:

(۱) برای یک آرایش معین، جمله با بزرگترین چندگانگی (بالاترین مقدار S) از نظر انرژی پائین‌ترین است.

(۲) برای این چندگانگی جمله با بزرگترین مقدار L از نظر انرژی پائین‌ترین است. از جملات به دست آمده در (ب) جمله طیفی حالت پایه را برای اتم ازت پیدا کنید. ۶-۹ یک الکترون منفرد که در یک چاه کروی بینهایت به شعاع R ، (یعنی، $V=0$ برای $R=\infty$ و $V=\infty$ برای جاهای دیگر)، قرار دارد در نظر بگیرید.

(الف) عبارتهایی برای ویژه تابعها و انرژیهای حالت پایه و اولین حالت برانگیخته در مختصات کروی پیدا کنید.

(ب) سهیں فرض کنید که دو الکترون در این چاه محبوساند. با صرف نظر کردن از برهم‌کنش‌های کولنی، دترمینانس‌های اسلاتر (شامل اسپین) و ویژه مقدارهای انرژی متناظر با حالت پایه و اولین حالت برانگیخته سیستم را پیدا کنید.

(ج) با در نظر گرفتن برهم‌کنش کولنی به عنوان پریشیدگی غالب، حالت پایه و اولین حالت برانگیخته جفت‌شده $S-L$ را پیدا کنید و عبارتهای مربوط به جابجا‌یی مرتبه‌اول

در انرژی این حالتها را بنویسید . (راهنمایی : روش انجام شده در اتم هلیوم را دنبال کنید)

۷-۹ در یکی از آرایش‌های یک سیستم سه ذره‌ای ، یک الکترون در هر کدام از حالت‌های مداری زیر وجود دارد

$$\psi_1 = N_1 \exp - m_1^2 r_1^2; \quad \psi_2 = N_2 \sin m_2 r_2; \quad \psi_3 = N_3 \exp - m_3 r_3$$

که در آنها m_i جرم ذرات و N_i ثابت بینجاش است .

(الف) اگر سه ذره تمیزپذیر باشند (یعنی $m_1 \neq m_2 \neq m_3$) ، تابع حالت کل سیستم را بسازید .

(ب) اگر ذرات تمیزناپذیر باشند (یعنی $m_1 = m_2 = m_3$) ، تابع حالت‌های با تقارن نوج و فرد را بسازید .

۸-۹ (الف) معادله (۶-۲۶) می‌تواند به تعداد ترمودینامیکی ذرات \bar{N} با قراردادن $\hat{A} =$ اعمال شود . نشان دهید که \bar{N} می‌تواند به صورت

$$\bar{N} = k_B T \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \sum_{\alpha} \exp \left[\frac{(\mu N_{\alpha} - E_{\alpha})}{k_B T} \right]$$

نوشته شود . (راهنمایی : $\langle \hat{N} | E_{\alpha}, N_{\alpha} \rangle = N_{\alpha} | E_{\alpha}, N_{\alpha} \rangle$)

(ب) برای سیستمهای آیده‌آل داریم $N_{\alpha} = \sum_i n_i \delta_{\alpha i}$ که در آن n_i و ε_i به ترتیب اعداد اشغال و انرژی‌های حالت‌های تک ذره‌ای هستند . نشان دهید که نتیجه فوق به شکل

$$N = k_B T \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \sum_{(n_i)} \prod_i \exp \left[\frac{n_i (\mu - \varepsilon_i)}{k_B T} \right]$$

در می‌آید که در آن جمع‌بندی روی تمام آرایش‌های معکن صورت می‌گیرد .

(ج) با عوض‌کردن جای جمع و ضرب نشان دهید که نتیجه فوق شکل

$$\bar{N} = \sum_i \bar{n}_i$$

را به خود می‌گیرد که در آن

$$\bar{n}_i = \frac{1}{\exp[(\varepsilon_i - \mu)/k_B T] \pm 1}$$

علامت فوقانی اشاره به فرمیونها دارد . (راهنمایی برای فرمیونها محدود دیت $n_i = 0, 1$ را داریم)

۹- یک ستاره نوترونی ستاره‌ای است که از نظر نوترونی دارای چگالی 10^{14} gm/cm^3 است . دمای تبهگنی را برای چنین ستاره‌ای پیدا کنید . اعتقاد براین است که دمای ستارگان نوترونی خیلی پائین‌تر از دمای تبهگنی است . در باره توزیع نوترونی چه می‌توانید بگوئید ؟

مراجع پیشنهادی

- Borowitz, S., "Fundamentals of Quantum Mechanics." Benjamin, New York, 1967.
- Condon, E. U., and Shortley, G. H., "The Theory of Atomic Spectra," Chapter VI. Cambridge Univ. Press, London and New York, 1963.
- Heitler, W., "Elementary Wave Mechanics," Chapter V. Oxford Univ. Press, London and New York, 1956.
- Kestin, J., and Dorfman, J. R., "A Course in Statistical Thermodynamics," Chapter 8. Academic Press, New York, 1971.
- Kittel, C., "Elementary Statistical Physics," pp. 86–102. Wiley, New York, 1958.
- Merzbacher, E., "Quantum Mechanics," 2nd ed., Chapter 18. Wiley, New York, 1970.
- Pauling, L., and Wilson, E. B., "Introduction to Quantum Mechanics," Chapter VIII. McGraw-Hill, New York, 1935.
- Sommerfeld, A., "Thermodynamics and Statistical Mechanics," Section 37. Academic Press, New York, 1964.

۱۰

سیستمهای چند ذره‌ای برهم‌کنش‌کننده

وقتی در یک سیستم چند ذره‌ای برهم‌کنشها نادیده گرفته شوند، ذرات هویت سینماتیکی خود را محفوظ نگاه می‌دارند و، به جز برای آثار تبادلی وابسته به تمیزناپذیری، ناهمبسته باقی می‌مانند. در سیستمهای واقعی، که برهم‌کنشها نقش مهمی بازی می‌کنند، معادله شرودینگر چند ذره‌ای دیگر تفکیک‌پذیر نیست. در نتیجه، مسئله چند جسمی به N مسئله یک جسمی تقلیل پیدا نمی‌کند و تصور ذرات تک از نظر مکانیک کوانتومی معنی خود را از دست می‌دهد.

گاهی اوقات ممکن است یک تبدیل بندادی به یک مجموعه جدیدی از مختصات و تکانه‌ها طوری انجام داد که هامیلتونی جدید دیگر صریحاً برهم‌کنشهای دوجسمی را در بر نداشته باشد. وقتی برهم‌کنشهای را به این طریق "دور" می‌کنیم، به مفهوم شبه ذراتی هدایت می‌شویم که به هر کدام از آنها یکی از متغیرهای بندادی جدید وابسته است. شبه ذرات یک سیستم ایده‌آل تشکیل می‌دهند و می‌توانند با استفاده از روش ارائه شده در فصل پیش مورد بررسی قرار گیرند. البته مفهوم فیزیکی این شبه ذرات نیاز به تعبیر خاصی دارد، اما با استفاده از تبدیل وارون همیشه می‌توانیم خواص آنها را به خواص ذرات اصلی ربط دهیم. به عنوان مثال نشان خواهیم داد که تبدیل به مختصات بهنجار، وقتی به مجموعه‌ای از جرم‌های نقطه‌ای که توسط فنرهاشی بهم وابسته شده‌اند اعمال شود، یک هامیلتونی جدید ایجاد می‌کند که معرف یک گاز ایده‌آل از شبه ذرات به نام فونون^{*} است. می‌توان نشان داد که هر فونون

* به طور دقیقترا، عبارت شبه ذره به موردی اطلاق می‌شود که در آن ارتباطی با ذره اصلی وجود داشته باشد. فونونها، در واقع، متناظر با وضعیتی هستند که در آن یک گروه از

(کوانتی ارتعاش کشسانی) یک بوزون است . به علاوه ، این فونونها می‌توانند ایجاد شوند یا از بین بروند .

این طرز بررسی مسئله چند جسمی موکول به پیدا کردن تبدیل بندادی مناسب است . در غیر این صورت ، روش‌های تقریبی ، نظریه پریشیدگی ، روش‌های و ردشی ، وغیره ، باید به کار گرفته شوند .

به عنوان یک نقطه شروع ، مسئله دو ذره را بررسی خواهیم کرد و تبدیلی ارائه خواهیم کرد که همیشه آنرا قابل حل کند .

۱- مسئله دوجسمی منزوی

اتم هیدرزن (پروتون به اضافه الکترون) (مثال مهمی از یک مسئله دوجسمی منزوی (بدون نیروی خارجی) است . در این مورد ذرات از طریق نیروهای کولنی برهمنش می‌گشند . در بحث قبلی مان از هیدرزن (فصل ۵) فرض کردیم که هسته ساکن می‌ماند . وقتی حرکت هسته در نظر گرفته شود ، معادله شرودینگر به شکل

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^{(1)2} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^{(2)2} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}|} \right\} \Psi_a(\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}) = E_a \Psi_a(\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}) \quad (1-10)$$

در می‌آید که در آن M جرم پروتون ، m جرم الکترون ، $\mathbf{r}^{(1)}$ مختصه پروتون و $\mathbf{r}^{(2)}$ مختصه الکترون است .

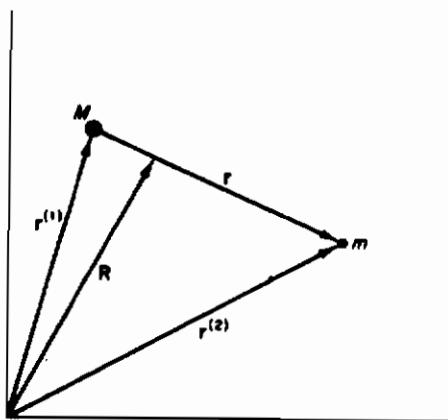
چون این ذرات تمیزه‌ذیراند ($M \neq m$) ، انتظار داریم که $\Psi_a(\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)})$ تحت عمل تعویض $\mathbf{r}^{(1)} \leftrightarrow \mathbf{r}^{(2)}$ نه متقارن باشد نه پاد متقارن . معادله (۱-۱۰) ، به صورتی که هست ، تفکیک‌پذیر به یک قسمت الکترونی و یک قسمت پروتونی نیست . برای اینکه به شکل قابل تفکیکی بررسیم تبدیل به مرکز جرم (c.m.) را به صورت (شکل ۱-۱۰)

$$\mathbf{R} = \frac{M\mathbf{r}^{(1)} + m\mathbf{r}^{(2)}}{M + m} \quad (\text{بردار مرکز جرم})$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)} \quad (\text{بردار نسبی})$$

ذرات برانگیخته شده‌اند و لذا "برانگیختگی تجمعی" نامیده می‌شود . با این وجود ، عبارت شبه ذره را با معنی رقیقتی برای فونونها به کار خواهیم برد .

وارد می‌کنیم.



شکل (۱-۱۰) بردار مرکز جرم R و بردار نسبی r برای یک سیستم دو جسمی.

با استفاده از این تبدیل، (۱-۱۰) بعد از قدری ساده‌سازی خواهد شد

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2(M+m)} \nabla^{(R)^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^{(r)^2} - \frac{e^2}{r} \right\} \Psi_\alpha(R, r) = E_\alpha \Psi_\alpha(R, r) \quad (2-10)$$

که در آن

$$\mu = \frac{mM}{M+m} = \frac{m}{1+m/M} \quad (\text{جرم کاهش یافته سیستم})$$

کمیت $|\Psi_\alpha(R, r)|^2$ نمایانگر چگالی احتمال یافتن اتم هیدروژن در وضعیتی است که مرکز جرم آن در نقطه R در فضا و فاصله الکترون - پروتون r باشد. چون این مسئله دو ذره‌ای شش درجه آزادی (بدون در نظر گرفتن اسپین) دارد، انتظار داریم که نماد α معرف یک مجموعه شش عدد کوانتومی باشد.

با به کار بردن یک جواب تزماشی به شکل (۲-۱۰)، نتیجه می‌گیریم که (۲-۱۰) به صورت زیر تفکیک می‌شود

$$-\frac{\hbar^2}{2(M+m)} \nabla^{(R)^2} \xi_k(R) = \varepsilon_k^{(\text{c.m.})} \xi_k(R) \quad (3-10)$$

و

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^{(r)^2} - \frac{e^2}{r} \right\} \psi_i(r) = \varepsilon_i^{(\text{int})} \psi_i(r) \quad (4-10)$$

با

$$E_\alpha = \varepsilon_k^{(c.m.)} + \varepsilon_i^{(int)}$$

که در آن $\varepsilon_i^{(int)}$ معرف انرژی داخلی اتم است. این تفکیک تنها در صورتی عملی است که سیستم منزوى باشد، یعنی، نیروهای خارجی حضور نداشته باشند. معادله مرکز جرمی (۴-۱۰) با معادله یک ذره آزاد هم ارز است و نشان‌دهنده یک انتقال خالص است. طیف پیوسته است و داریم

$$\varepsilon_k = e^{ik \cdot R}, \quad \varepsilon_k^{(c.m.)} = \frac{\hbar^2 k^2}{2(M+m)}$$

چون قسمت انتقالی روی رفتار داخلی تاثیر نمی‌کند، در موقع محاسبه ترازهای کوانتیسیده هیدرژنسی می‌توان از آن صرف‌نظر کرد. معادله دوم (۴-۱۰) حاکم بر رفتار کوانتوسی حرکت نسبی ذرات است و طبیعت طیف داخلی اتم را تعیین می‌کند، به جز برای جایگذاری

$$m \rightarrow \mu = \frac{m}{1 + m/M}$$

معادله (۴-۱۰) با معادله (۱-۵) در فصل ۵ یکسان است. در نتیجه، انتظار داریم که ویژه جوابها به شکل

$$\psi_i = \psi_{nlm_l} = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \phi)$$

و

$$\varepsilon_i^{(int)} = \varepsilon_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2 n^2}$$

باشند. گذارهای بین این ترازها منجر به یک طیف گسیلی می‌شود که اصولاً "با طیفسی که با ساکن‌بودن پروتون به دست می‌آید مشابه است، تنها تفاوت در این است که ثابت ریدبرگ، به جای m ، شامل μ است. تصحیحات مربوط به جرم کاهن پاfte در هیدرژن، با اینکه فقط از عرته $10^{-3} \times \frac{1}{n} \sim \frac{1}{m/M}$ هستند، توسط طیف نماهای با قدرت تفکیک زیاد مشاهده شده‌اند. در واقع، می‌توان طیفهای گسیلی هیدرژن و دوتربیوم (که در هسته آن یک پروتون و یک نوترون وجود دارد) را از یکدیگر تمیز داد، تفاوت طیفها از تفاوت نسبت M/m تثییج می‌شود.

متاسفانه هیچکس هنوز تبدیلی پیدا نکرده است که بتواند به مسئله عمومی سه‌جسمی

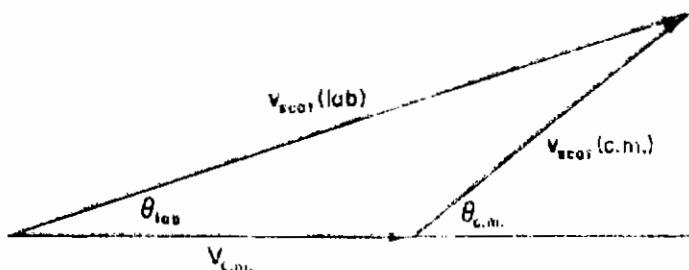
اعمال شود . بنابراین ، به عنوان مثال ، برای اتم هلیوم (هسته به اضافه دوالکترون) ، جواب دقیقی وجود ندارد .

۲- پراکندگی از یک هدف متعدد

تحلیل فرایند پراکندگی که در فصل ۸ ارائه شد محدود به مسائلی بود که هدف در حین برخورد ساکن می‌ماند . در واقع وقتی جرم هدف نسبت به جرم پرتابه خیلی بزرگ باشد عقب‌نشینی هدف کوچک است . از طرف دیگر ، اگر جرم‌های هدف و پرتابه در یک حدود باشند ، حرکت هدف مهم است و یک مسئله پراکندگی دوجسمی داریم .

مسئله پراکندگی دوجسمی می‌تواند با استفاده از تبدیل به مرکز جرم حل شود . اگر فرایند پراکندگی از یک دستگاه محورهای مختصات که با مرکز جرم حرکت می‌کند (دستگاه مرکز جرمی) مشاهده شود ، زاویه پراکندگی مشاهده شده درست همانند موردي است که جرم هدف ، M ، ثابت باشد و جرم پرتابه m به وسیله جرم کاهش یافته $[m/(1+m/M)] = \mu$ جایگزین شود . زاویه پراکندگی $\theta_{c.m.}$ و عقطع موثر $v_{c.m.}$ در دستگاه مختصات $c.m.$ ، می‌توانند با استفاده از روش‌های ارائه شده در فصل ۸ ، با گذاردن μ به جای m ، محاسبه شوند .

ازبخت بد نظریه پردازها ، داده‌های تجربی پراکندگی نسبت به دستگاه مختصاتی تشهیه شده‌اند که در آزمایشگاه ساکن است . عقطع موثر آزمایشگاهی v_{lab} از این جهت با $\theta_{c.m.}$ تفاوت دارد که زاویه‌های پراکندگی در دو دستگاه مختصات با یکدیگر متفاوتند* (شکل ۲-۱۰).



شکل (۲-۱۰) استفاده از رابطه $v_{lab} = v_{c.m.}(c.m.) + v_{c.m.}$ برای نشان دادن رابطه بین θ_{lab} و $\theta_{c.m.}$.

* در دهه اخیر تجربیات "باریکه‌های برخوردکننده" ای که در آن جرم‌های مساوی با سرعتهای برابر و متقابل به یکدیگر برخورد می‌کنند توسعه یافته است . در اینجا ، دستگاه‌های مرکز جرمی و آزمایشگاهی بر یکدیگر منطبق می‌شوند .

تعداد ذرات پراکنده شده در داخل یک زاویه حجمی معین باید، بدون توجه به دستگاه مختصات به کاربرده شده، پکی باشد. برای مسائل پراکنده‌گی با نیروی مرکزی، این عدد عبارت است از

$$dN = I_0 \sigma_{c.m.} d\Omega_{c.m.} = I_0 \sigma_{lab} d\Omega_{lab}$$

که از آن نتیجه می‌شود

$$\sigma_{lab} = \sigma_{c.m.} \frac{d\Omega_{c.m.}}{d\Omega_{lab}} = \frac{\sin \theta_{c.m.}}{\sin \theta_{lab}} \frac{d\theta_{c.m.}}{d\theta_{lab}} \sigma_{c.m.} \quad (5-10)$$

که در آن $\sigma_{c.m.} = |f(\theta_{c.m.})|^2$ وقتی رابطه بین θ_{lab} و $\theta_{c.m.}$ معلوم شد، مقطع موثر در مرکز جرم (که از طریق نظری به دست می‌آید) می‌تواند به مقطع موثر آزمایشگاهی (که به طور تجربی به دست می‌آید) تبدیل شود. رابطه هندسی بین این زوایا در شکل (۲-۱۰)، که از آن رابطه

$$\tan \theta_{lab} = \frac{v_{scat}(c.m.) \sin \theta_{c.m.}}{v_{scat}(c.m.) \cos \theta_{c.m.} + V_{c.m.}} \quad (6-10)$$

حاصل می‌شود، نشان داده شده است. اگر هدف در آغاز ساکن باشد سرعتهای اولیه پرتابه از دید دستگاه‌های مختصات مرکز جرمی و آزمایشگاهی به وسیله

$$v_0(c.m.) = \frac{\mu}{m} v_0(lab)$$

به یکدیگر مربوط می‌شوند. به علاوه، چون انرژی در دستگاه مختصات مرکز جرمی پایسته است، داریم

$$v_0(c.m.) = \frac{\mu}{m} v_0(lab) = v_{scat}(c.m.) \quad (7-10)$$

سرعت مرکز جرم می‌تواند به وسیله

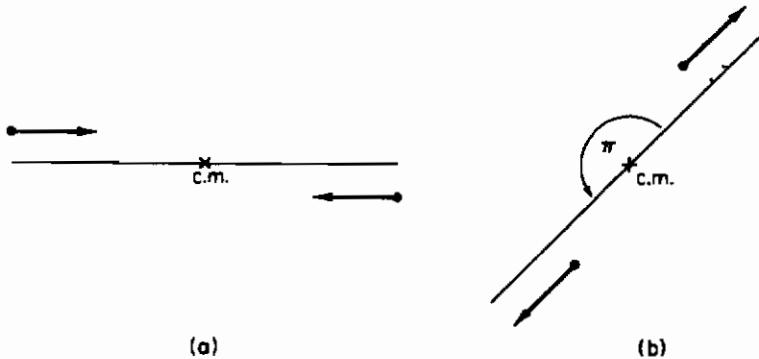
$$(M+m)V_{c.m.} = mv_0(lab) \quad \text{یا} \quad V_{c.m.} = \frac{\mu}{M} v_0(lab) \quad (8-10)$$

بیان شود . با به کار بردن (۷-۱۰) و (۸-۱۰) در (۶-۱۰) ، بالاخره خواهیم داشت

$$\tan \theta_{\text{lab}} = \frac{\sin \theta_{\text{c.m.}}}{\cos \theta_{\text{c.m.}} + (m/M)}$$

که رابطه مورد نظر بین زاویه ها است (مسئله ۳-۱۰ الف) . توجه کنیم که وقتی $m/M \rightarrow 0$ دو زاویه ، و در نتیجه دومقطع موثر ، همان طور که انتظار می رفت ، پیکان می شوند . در بالا فرض کردیم که ذرات تمیز پذیراند (یعنی $M \neq m$) . اما ، اگر دوزده تمیز ناپذیر باشند ، $\sigma_{\text{c.m.}}$ باید تقارن تبادلی مناسب را منعکس نماید . اگر جرمها پیکان باشند ، وقتی از دستگاه مختصات c.m آنها را مشاهده کنیم ، به نظر می رسد که با سرعتهای مساوی و مختلف الجهت به یکدیگر نزدیک می شوند . برای اینکه تکانه پایسته باشد ، باید با سرعتهای مساوی و متقابل پراکنده شوند (شکل ۳-۱۰) . در نتیجه ، هدفها تحت زاویه 180° نسبت به پرتابه ها عقب نشینی می کنند * دامنه های پراکندگی برای هدف و پرتابه به وسیله

$$f_{\text{target}}(\pi - \theta_{\text{c.m.}}) = f_{\text{projectile}}(\theta_{\text{c.m.}})$$



شکل (۳-۱۰) سینماتیک (الف) قبل و (ب) بعد از برخورد دو جسم در دستگاه مقایسه مرکز جرمی

به یکدیگر مربوط می شوند . اما ، اگر هدف و پرتابه بوزونهای بدون اسپین تمیز ناپذیر باشند ، مقطع موثر کل باید متقارن شده و به شکل زیر باشد **

* برای پراکندگی دوجسمی ، پایستگی تکانه همواره ایجاد می کند که ذرات پراکنده شده ، در دستگاه مختصات c.m. تحت زاویه 180° نسبت به یکدیگر حرکت کنند ، حتی وقتی $m \neq M$ باشد .

** در این رابطه باید جرم کاهش یافته $\frac{1}{2}m = \mu$ به کار رود .

$$\begin{aligned}\sigma_{c.m.} &= |f_{tot}(\theta_{c.m.})|^2 = |f(\theta_{c.m.}) + f(\pi - \theta_{c.m.})|^2 \\ &= |f(\theta_{c.m.})|^2 + |f(\pi - \theta_{c.m.})|^2 + 2 \operatorname{Re} f(\theta_{c.m.}) f(\pi - \theta_{c.m.})\end{aligned}\quad (9-10)$$

دو جمله اول در طرف راست با استدلالات کلاسیکی مورد انتظار هستند. چون ذرات یکسان‌اند، مقطع موثر کلاسیکی کل از نو طوری تعریف می‌شود که عقب‌نشینی هدفها را در برداشته باشد. اما جمله سوم "صرفًا" مکانیک کوانتومی است و ناشی از آثار تبادلی است.

اگر ذرات α را بوزون‌های بدون اسپین فرض کنیم، مقطع موثر مرکز جرمی برای پراکندگی $\alpha-\alpha$ می‌تواند مستقیماً محاسبه شود. با استفاده از نتایج را تر فور د، (۱۴-۸)، که عبارت است از

$$f(\theta) = -\frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)} \frac{\gamma}{k} \frac{\exp(-i\gamma \ln \sin^2 \theta/2)}{2 \sin^2 \theta/2}$$

(۹-۱۰) پس از قدری محاسبات جبری طولانی می‌شود

$$\sigma_{c.m.} = \left(\frac{Z^2 e^2}{4\epsilon}\right)^2 \left(\frac{1}{\sin^4 \theta/2} + \frac{1}{\cos^4 \theta/2} + \frac{2 \cos \gamma (\ln \tan^2 \theta/2)}{\sin^2 \theta/2 \cos^2 \theta/2} \right) \quad (Z=2) \quad (10-10)$$

که در آن $\gamma = Z^2 e^2 \mu/\hbar(2\mu\epsilon)^{1/2}$. دو جمله اول در طرف راست شامل \hbar نیستند و از طریق کلاسیکی نیز به دست می‌آیند. جمله سوم جمله تبادلی است* (پراکندگی مات) و ماهیت آن کاملاً "مکانیک کوانتومی" است.

برای فرمیون‌های با اسپین نیمه‌درست (به عنوان مثال، پراکندگی الکترون - الکترون)، پراکندگی ممکن است یا در حالت یکانه ($S=0$) یا در حالت سه‌گانه ($S=1$) رخدید. این حالات به ترتیب دارای قسمتی‌های فضایی متقاض و پاد متقاض می‌باشند (رس ۴۹-۹). اگر باریکه ناقطبیده باشد، با توزیع هر حالت ($S=0$ یا $S=1$) به وسیله چندگانگی آن، یک مقطع موثر متوسط ایجاد می‌کنیم، یعنی،

* وقتی $\hbar \rightarrow 0$ ($\gamma \rightarrow \infty$) صورت با تغییر θ سریعاً "نوسان می‌کند" و غیرقابل اندازه‌گیری می‌شود. جمله تبادلی قابل اغماس می‌شود و نتیجه کلاسیکی به دست می‌آید.

$$\begin{aligned}\bar{\sigma}_{c.m.} &= \frac{1}{4}|f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 + \frac{1}{4}|f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 - \operatorname{Re} f(\theta)f(\pi - \theta)\end{aligned}\quad (\text{فرمیونهای با اسپین } \frac{1}{2})$$

(۱۱-۱۰)

هم (۹-۱۰) و هم (۱۱-۱۰) هردو می‌توانند، سرانجام، با استفاده از (۵-۱۰)، به دستگاه مختصات آزمایشگاهی تبدیل شوند.

۳- اتم هلیوم - بررسی بهروش پریشیدگی

در فصل ۹ به‌این نتیجه رسیدیم که حالت‌های مرتبه صفر مناسب برای اتم هلیوم ایده‌آل باید به‌شکل $\langle E_a LSM_L M_S |$ باشند. با استفاده از روش‌های پریشیدگی فصل ۷، تصحیحات مرتبه اول انرژی به‌وسیله

$$\begin{aligned}E_{aLS} &= E_a + \langle E_a LSM_L M_S | \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}|} | E_a LSM_L M_S \rangle \\ &= -54\left(\frac{1}{n^2} + \frac{1}{n'^2}\right) + \int d\mathbf{r}^{(1)} d\mathbf{r}^{(2)} \Psi_{E_a LSM_L M_S}^*(\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}) \left[\frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}|} \right] \\ &\quad \times \Psi_{E_a LSM_L M_S}(\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)})\end{aligned}\quad (12-10)$$

داده‌می‌شوند. چون پریشیدگی فقط متغیرهای فضایی را درگیر می‌کند، قسمت اسپینی بهنجار شده $\Psi_{E_a LSM_L S}$ در انتگرال برابر با یک است و در محاسبات زیر می‌تواند نادیده گرفته شود.

تصحیح انرژی در حالت پایه 1S (هلیوم، با استفاده از (۹-۴۸)، می‌دهد

$$\begin{aligned}E_{a00} &= -108 + \int d\mathbf{r}^{(1)} d\mathbf{r}^{(2)} \psi_{100}^*(\mathbf{r}^{(1)}) \psi_{100}^*(\mathbf{r}^{(2)}) \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}|} \\ &\quad \times \psi_{100}(\mathbf{r}^{(1)}) \psi_{100}(\mathbf{r}^{(2)})\end{aligned}$$

توابع مداری توابع هیدرژن مانند هستند، یعنی،

$$\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} e^{-Zr/a} \quad (Z = 2)$$

و می‌توان نشان داد که انتگرال فوق برابر است با $\Delta E \sim 34 \text{ eV}$. انرژی حالت پایه که تا تقریب مرتبه اول تصحیح شده است (شکل ۱۰-۴) عبارت است از

$$E_{a00} = -108 + 34 = -74 \text{ eV} \quad (\text{حالت پایه})$$

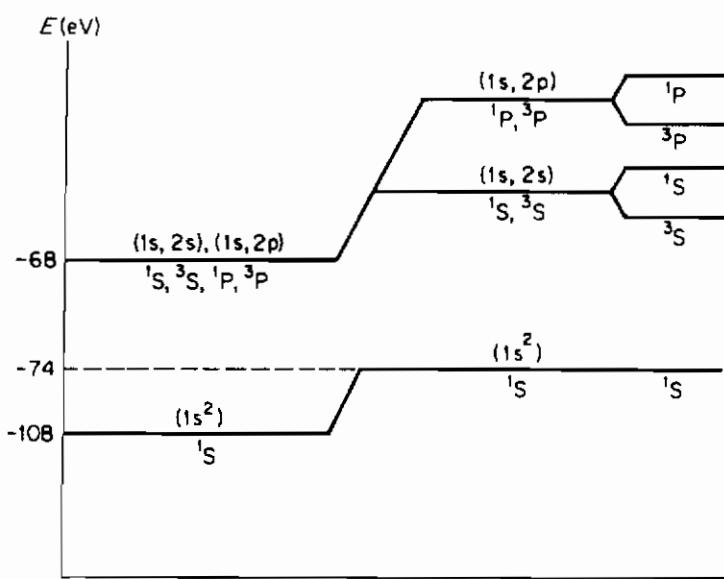
انرژی بیوتیش اول هلیوم می‌شود

$$E_{\text{ion}} = E_{100} - E_{a00} = -54 - (-74) = 20 \text{ eV}$$

این مقدار به طور قابل قبولی با مقدار مشاهده شده 24 eV می‌خواند. اما اندازه نسبی جابه‌جایی انرژی عبارت است از

$$\left| \frac{\Delta E}{E_a} \right| \approx \frac{34}{108} \approx 0.3$$

که مقدار قابل ملاحظه‌ای است، در نتیجه اعتبار نظریه پریشیدگی به صورتی که ارائه شد هم چنان مورد سوال باقی می‌ماند.



برهم‌کنش تبادلی + برهم‌کنش مستقیم + بدون برهم‌کنش

شکل (۱۰-۴) جابه‌جایی‌های انرژی حالت‌های اتمی ایده‌آل در هلیوم وقتی برهم‌کنش الکترونی در نظر گرفته می‌شود.

جابه‌جایی‌های مربوط به حالت‌های برانگیخته اول $1S$ و $3S$ به طریق مشابهی به دست می‌آیند. با استفاده از (۱۰-۹)، این جابه‌جاییها به صورت زیر به دست می‌آیند

$$\Delta E = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}^{(1)} d\mathbf{r}^{(2)} \{ \psi_{100}^*(\mathbf{r}^{(1)}) \psi_{200}^*(\mathbf{r}^{(2)}) \pm \psi_{100}^*(\mathbf{r}^{(2)}) \psi_{200}^*(\mathbf{r}^{(1)}) \}$$

$$\times \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}|} \{ \psi_{100}(\mathbf{r}^{(1)}) \psi_{200}(\mathbf{r}^{(2)}) \pm \psi_{100}(\mathbf{r}^{(2)}) \psi_{200}(\mathbf{r}^{(1)}) \}$$

که علامت بالائی برای S^1 و علامت پائینی برای S^3 است. جابه‌جایی‌های انرژی می‌توانند به صورت زیر تجزیه شوند

$$\Delta E = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}^{(1)} d\mathbf{r}^{(2)} \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}|} \{ |\psi_{100}(\mathbf{r}^{(1)})|^2 |\psi_{200}(\mathbf{r}^{(2)})|^2$$

$$+ |\psi_{100}(\mathbf{r}^{(2)})|^2 |\psi_{200}(\mathbf{r}^{(1)})|^2 \} \quad (\text{انتگرال مستقیم})$$

$$\pm \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}^{(1)} d\mathbf{r}^{(2)} \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}|} \{ 2 \operatorname{Re} \psi_{100}^*(\mathbf{r}^{(1)}) \psi_{200}^*(\mathbf{r}^{(2)})$$

$$\times \psi_{100}(\mathbf{r}^{(2)}) \psi_{200}(\mathbf{r}^{(1)}) \} \quad (\text{انتگرال تبادلی})$$

انتگرال مستقیم نشان می‌دهد که هر دو حالت برانگیخته اول (S^1 و S^3) به علت دافعه کولنی الکترونها جابه‌جا می‌شوند. انتگرال تبادلی مثبت برای حالت S^1 یک جابه‌جایی ثانوی به طرف بالا برای این حالت نشان می‌دهد. انتگرال تبادلی منفی برای حالت S^3 نشان می‌دهد که حالت سه‌گانه قدری به طرف پائین جابه‌جا می‌شود. برای تعمیم، مشاهده می‌کنیم که انتگرال مستقیم یک انتقال بسته به مقدار آن ایجاد می‌کند. به علاوه، بسته به اینکه حالت مورد نظر دارای ماهیت یگانه یا سه‌گانه باشد، یک شکافتگی دیگر هم رخ می‌دهد. برای یک آرایش معین حالت سه‌گانه همیشه در زیر حالت یگانه قرار دارد.*

شکافتگی حالت‌های یگانه و سه‌گانه می‌تواند براساس اصل طرد پاولی توضیح داده شود. به خاطر آوریم که در دترمینان اسلامتی که حالت یگانه $S=0$ را می‌سازد ذرات دارای اسپین‌های مختلف الجهت می‌باشند. قسمت فضایی متقارن است و همبستگی‌های دافعه وجود ندارند. ذرات می‌توانند نزدیک یکدیگر قرار داشته باشند و انرژی برهمنشی مثبت می‌تواند بزرگ باشد. از طرف دیگر، حالت $S=1$ شامل دترمینانهای اسلامتی با اسپین‌های هم جهت است. دافعه‌های آماری وابسته به قسمت فضایی پاد متقارن الکترونها را دور از یکدیگر نگاه می‌دارد.

* تعمیم این اصل به اتمهای چند الکترونی به نام قاعده هاند موسوم است، بنابراین قاعده هرچه چندگانگی اسپینی بالاتر باشد (برای یک آرایش ثابت) انرژی پائین‌تر است (رک مسئله ۵-۹).

و بنابراین انرژی برهم‌کنشی مثبت را کاهش می‌دهد. بنابراین حالت $S^3 (S=1)$ در زیر حالت $S^1 (S=0)$ قرار می‌گیرد.

برهم‌کنش الکتروستاتیکی تبیه‌گنی را به طور کامل از بین نمی‌برد زیرا انرژی پریشیده در (۱۰-۱۲) هنوز از M_L و M_S مستقل است. در نتیجه هر ترکیب خطی از این زیر حالت‌های مغناطیسی هنوز ویژه حالت مرتبه صفر مناسب انرژی برای هامیلتونی الکتروستاتیکی هلیوم است. چون این هامیلتونی با عملکر $\hat{L}^{(T)} + \hat{S}^{(T)}$ جایه‌جاپذیر است، قادر خواهیم بود ویژه حالت‌های انرژی را به صورت

$$|E_a LSJM_J\rangle = \sum_{M_L, M_S} C_{M_L, M_S} |E_a LSM_L M_S\rangle \quad (10-13)$$

با خواص

$$\hat{J}^{(T)2} |E_a LSJM_J\rangle = J(J+1)\hbar^2 |E_a LSJM_J\rangle \quad (|L-S| \leq J \leq L+S)$$

و

$$\hat{J}_z^{(T)} |E_a LSJM_J\rangle = M_J \hbar |E_a LSJM_J\rangle \quad (|M_J| \leq J)$$

بسازیم.

بهینان دیگر، هم دسته حالت‌های $|M_L M_S\rangle$ و هم دسته حالت‌های $|JM_J\rangle$ پریشیدگی الکتروستاتیکی را قطری می‌کنند. اگر میدان‌های خارجی غایب باشند، پریشیدگی غالب (بعد از برهم‌کنش الکتروستاتیکی) ناشی از آثار ساختار ریز است. مجموعه مرتبه صفر صحیح عبارتست از $|JM_J\rangle$ ، و انرژی‌های مرتبه اول مربوطه وابستگی به J را نشان می‌دهند. اگر یک میدان ضعیف B وارد شود، در ترازها بسته به مقدار B یک جایه‌جاپذیر (اثر غیرعادی زیمن ۵۷-۲) مشاهده می‌کنیم.

اگر یک میدان قوی B به‌اتم هلیوم اعمال شود، جمله‌های ساختار ریز در هامیلتونی می‌توانند نادیده گرفته شوند و حالت‌های مرتبه صفر به شکل $|M_L M_S\rangle$ هستند. جایه‌جاپذیری ترازها، طبق الگوی پاشن-باک (۳۸-۶) به M_L و M_S بستگی دارند.

برای متمایز کردن حالت‌های $|E_a LSJM_J\rangle$ از حالت‌های $|E_a LSM_L M_S\rangle$ ، یک شاخص پائین (مقدار J) به نماد طیف نمایی اخیر اضافه می‌کنیم. به عنوان مثال، 3P معرف حالت $|E_a 1, 1, M_L M_S\rangle$ است در حالی که 3P_2 معرف حالت $|E_a 1, 1, 2, M_J\rangle$ می‌باشد.

قواعد گزینش برای گذارهای دوقطبی تابشی در اتمهای جفت شده $L-S$ شبیه به قواعدی هستند که در فصل ۷ برای هیدروژن به دست آمد، یعنی، $\Delta S = 0, \pm 1$ ، با $\Delta L = 0, \pm 1$ اما $\Delta J = 0$ معنی ندارد. قاعده $\Delta S = 0$ بخصوص جالب است زیرا

ایجاد می‌کند که فقط گذارهای یگانه به یگانه ($S = 0 \rightarrow S = 0$) با سه‌گانه به سه‌گانه ($S = 1 \rightarrow S = 1$) در تقریب دوقطبی امکان‌پذیر باشد. اگر هلیوم در اولین حالت برانگیخته سه‌گانه خود، 3S ، باشد نمی‌تواند از طریق یک گذار دوقطبی به حالت پایه خود، 1S ، باز گردد. بنابراین اولین حالت برانگیخته سه‌گانه یک حالت فراپایدار ("شیدا" پایدار) است. یک گاز مرکب از اتمهای هلیوم می‌تواند به عنوان یک سیستم دومولفه‌ای در نظر گرفته شود. اتمهایی که در حالت‌های سه‌گانه و در حالت‌های یگانه هستند به ترتیب ارتو-هلیوم و پارا-هلیوم را تشکیل می‌دهند. هر کدام از این زیرسیستمها از نظر طیف نمائی از دیگری متمایز است.

قبل‌ا" دیدیم که برهم‌کنشهای الکتروستاتیکی بین الکترونها در هلیوم تصحیحات قابل ملاحظه‌ای در ترازهای ایده‌آل (هیدرژن مانند) ایجاد می‌کند. با اینکه تصحیحات مرتبه اول انرژی با تجربه سازگارند، هیچ دلیلی وجود ندارد که قبول کنیم نظریه پریشیدگی مرتبه بالاتر وضعیت را بهتر می‌کند. در واقع، سری پریشیدگی حتی ممکن است همگرا نشود. خوب‌بختانه روش‌های دیگری وجود دارد که بررسی اتمهای حقیقی را میسر می‌سازند و به نتایج متناهی منجر می‌شوند. این روشها در زیر مورد بحث قرار خواهند گرفت.

۴- اتم هلیوم - یک روش وردشی

روش وردشی با موفقیت بزرگی (هیلراس^۲، ۱۹۳۰) در محاسبه انرژیهای اتم هلیوم به کار گرفته شده است. مطلب را با درنظر گرفتنتابع آزمایشی یک پارامتری به شکل

$$\Psi_{\text{trial}}(\alpha, \mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}) = \frac{\alpha^3}{\pi a^3} \exp\left(-\frac{\alpha(r^{(1)} + r^{(2)})}{a}\right) \quad \left(a = \frac{\hbar^2}{me^2}\right) \quad (14-10)$$

شروع می‌کنیم. این تابع آزمایشی اساساً حاصل‌ضریبی از توابع هیدرژن مانند است که در آن پارامتر وردشی α است. انتگرال وردشی (با استفاده از هامیلتونی هلیوم) عبارت است از

$$I(\alpha) = \int d\mathbf{r}^{(1)} d\mathbf{r}^{(2)} \Psi_{\text{trial}}^*(\alpha, \mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}) \left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^{(1)2}}{2m} - \frac{\hbar^2 \nabla^{(2)2}}{2m} - \frac{2e^2}{r^{(1)}} - \frac{2e^2}{r^{(2)}} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}|} \right\} \Psi_{\text{trial}}(\alpha, \mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)})$$

$$= \langle T_1 \rangle + \langle T_2 \rangle + \langle V_1 \rangle + \langle V_2 \rangle + \langle V_{12} \rangle$$

از انتگرال‌ها نتیجه می‌شود

$$\begin{aligned}\langle T_1 \rangle &= \langle T_2 \rangle = -\alpha^2 \varepsilon_1 \\ \langle V_1 \rangle &= \langle V_2 \rangle = 4\alpha \varepsilon_1 \quad \left(\varepsilon_1 = \frac{-me^4}{2\hbar^2} = -13.6 \text{ eV} \right) \\ \langle V_{12} \rangle &= -\frac{5}{4}\alpha \varepsilon_1\end{aligned}$$

با مشتق‌گیری از انتگرال وردشی

$$I(\alpha) = -\varepsilon_1 [2\alpha^2 - 8\alpha + \frac{5}{4}\alpha] = -\varepsilon_1 [2\alpha^2 - \frac{27}{4}\alpha]$$

نتیجه خواهیم گرفت

$$\frac{dI}{d\alpha} \Big|_{\alpha=a_0} = -\varepsilon_1 (4\alpha_0 - \frac{27}{4}) = 0 \quad \text{یا} \quad \alpha_0 = \frac{27}{16}$$

انرژی و ویژه تابع وردشی برای حالت پایه هلیوم می‌شود

$$E_{\text{var}} = I(\alpha_0) = -\varepsilon_1 [2(\frac{27}{16})^2 - \frac{27}{4} \cdot \frac{27}{16}] = 2(\frac{27}{16})^2 \varepsilon_1 \sim -76.6 \text{ eV}$$

$$\Psi_{\text{var}} = \left[\frac{(\frac{27}{16})^3}{\pi a^3} \right] \exp \left[-\left(\frac{27}{16} \right) \frac{(r^{(1)} + r^{(2)})}{a} \right] \quad (15-10)$$

این انرژی از نتیجه مرتبه صفر پریشیدگی ($E_{\text{pert}} \approx -74 \text{ eV}$) کمتر است و بنابراین دقیق‌تر است. مقدار مشاهده شده برای انرژی حالت پایه عبارت است از

$$E_{\text{exp}} \approx -78.6 \text{ eV}$$

می‌توان با تعمیم تابع آزمایشی به‌طوری که پارامترهای زیادتری در برداشته باشد نتایج فوق را بهبود بخشید. هیلراس یک تابع آزمایشی به‌شکل

$$\Psi_{\text{trial}} = e^{-as} P(s, t, u)$$

به‌کاربرد که در آن P یک چهارده جمله‌ای (با چهارده پارامتر) از متغیرهای زیر است

$$s = \frac{r^{(1)} + r^{(2)}}{a}, \quad t = \frac{r^{(1)} - r^{(2)}}{a}, \quad \text{و} \quad u = \frac{|r^{(1)} - r^{(2)}|}{a}$$

انرژی وردشی به دست آمده برای حالت پایه، $eV = 0.0016$ پائین‌تر از مقدار مشاهده شده است – یک تناقض ظاهری با قضیه وردشی. با جلوگیری از هرگونه خطای عددی، تفاوت مذبور باید به نادیده گرفتن جمله‌های ساختار ریز در هامیلتونی الکتروستاتیکی هلیوم نسبت داده شود. مرتبه این تفاوت به راستی از همان مرتبه ساختار ریز است.

می‌توان قضیه وردشی را به حالت‌های برانگیخته هلیوم نیز اعمال کرد. این امر ایجاب می‌کند که شرایط اضافه‌تری (به عنوان مثال، تعامل نسبت به تابع حالت پایه) روی توابع حالت برانگیخته هلیوم اعمال کنیم و این کار خارج از محدوده این کتاب است.*

۵- مدل آماری توماس و فرمی برای اتمهای پیچیده

اتم Z الکترونی، چون یک سیستم چند جسمی است، نمی‌تواند دقیقاً "حول شود". می‌توانستیم یک روش پریشیدگی را با استفاده از حالت‌های اتمی اتم ایده‌آل به عنوان تقریب مرتبه صفر، اعمال کنیم. اما همان طور که اخیراً دیدیم، تصحیحات وابسته به جمله‌های برهم‌کنش الکترونی غالباً آنقدر بزرگ‌اند که نظریه پریشیدگی نمی‌تواند مفید باشد. خواهیم دید که هر الکترون اتمی را می‌توان طوری در نظر گرفت که، تقریباً، به طور مستقل در یک پتانسیل الکتروستاتیکی حاصل از میدان کولنی هسته که بوسیله سایر الکترونها پوشش شده است حرکت کند. بنابراین داشتن مدلی که پتانسیل و چگالی بار در داخل ابر الکترونی یک اتم را تعیین کند مفید خواهد بود. چنین مدلی نخستین بار توسط توماس و توسط فرمی (۱۹۲۸) به طور مستقل ارائه شد.

مدل (آماری) توماس- فرمی فرض می‌کند که هسته بوسیله یک گاز الکترونی با تقارن کروی احاطه شده است. چگالی به حد کافی بزرگ است، به‌گونه‌ای که ابر الکترونی می‌تواند به عنوان یک گاز فرمی تهیگن در نظر گرفته شود. بعلاوه، فرض شده است که چگالی تابعی

* برای بررسی مفصل اتم هلیوم به کتاب زیر مراجعه کنید

H.A. Bethe and E.E. Salpeter, "Quantum Mechanics of one and Two Electron Atomes", pp.118-165. Springer -Verlag, Berlin, 1957.

از فاصله r هسته است که به‌گذنده با آن تغییر می‌کند* در نتیجه، هر عنصر حجم را می‌توان به عنوان جعبه‌ای که حاوی یک گاز الکترونی یکنواخت با چگالی موضعی $\rho(r)$ است در نظر گرفت. انرژی کل یک الکترون در داخل این جعبه عبارت است از

$$\epsilon(r) = \frac{p^2}{2m} - e\phi(r) \quad (16-10)$$

که در آن $\phi(r)$ پتانسیل موضعی در داخل عنصر حجم دیفرانسیلی است. انرژی جنبشی موضعی بیشینه، تراز فرمی موضعی، $\epsilon_F(r) = p_F^2/2m$ نامیده می‌شود. با استفاده از رابطه بین چگالی موضعی و ϵ_F ، (۲۱-۹)، خواهیم داشت

$$\epsilon_{\max}(r) = \mu = \epsilon_F - e\phi(r) = \frac{\hbar^2}{2m} [3\pi^2\rho(r)]^{2/3} - e\phi(r) \quad (17-10)$$

انرژی موضعی کل بیشینه درست همان پتانسیل شیمیائی گاز است و وقتی تعادل حاصل شده باشد در همه‌جا ثابت است. برای یک اتم خنثی، می‌توان مقدار $\phi(r)$ و $\rho(r)$ در همینهاست را برابر با صفر در نظر گرفت، در این صورت نتیجه می‌شود که μ در آن نقطه صفر است. چون μ ثابت است، بنابر این باید در همه جا صفر باشد و از (۱۷-۱۰) نتیجه خواهد شد

$$\phi(r) = \frac{\hbar^2}{2me} [3\pi^2\rho(r)]^{2/3} \quad (18-10)$$

این معادله ارتباطی بین چگالی موضعی و پتانسیل برقرار می‌سازد. از ترکیب این معادله و معادله پواسن، $\nabla^2\phi = 4\pi e\rho$ ، خواهیم داشت

$$\nabla^2\phi = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\phi}{dr} \right) = \frac{4\pi e}{3\pi^2} \frac{(2me)^{3/2}}{\hbar^3} \phi^{3/2} \quad (19-10)$$

وقتی $r \rightarrow 0$ ، قانون گاوس ایجاد می‌کند که میدان الکتریکی "تماماً" از هسته ناشی شده باشد

* بخصوص چگالی باید در فاصله‌ای که در حدود طول موجه‌ای دوبروی الکترونها در آن ناحیه است، تقریباً "ثابت" باشد. در اتمها، این شرط عموماً هم در فاصله بسیار نزدیک و هم در فاصله بسیار دور از هسته نقض می‌شود، بنابراین مدل توماس-فرمی در این نواحی غیرقابل اعتماد است.

یعنی،

$$\lim_{r \rightarrow 0} E \rightarrow \frac{Ze}{r^2} \quad (20-\alpha)$$

بهطور معادل، وقتی بههسته نزدیک شویم پتانسیل باید بهشکل $\lim_{r \rightarrow 0} \phi(r) \sim Ze/r$ در آید. شرط مرزی روی ϕ بهطور مناسب بهصورت $\lim_{r \rightarrow 0} r\phi = Ze$ نوشته می شود. دوراز اتم (خنثی)، انتظار داریم که پتانسیل (پوشش داده شده) سریع تراز $1/r$ سقوط کند زیرا بار کل اتم صفر است. بنابراین شرط مرزی دیگر برای ϕ عبارت است از

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r\phi \rightarrow 0 \quad (20-\beta)$$

برای اینکه تحلیل ما مستقل از Z ، و بنابراین برای تمام اتمها معتبر باشد تبدیل مقیاسی

$$r = \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi}{4} \right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{me^2} \frac{x}{Z^{1/3}} = 0.885 a \frac{x}{Z^{1/3}} \quad (21-10)$$

را وارد می کنیم که در آن x متغیر (بدون بعد) توماس-فرمی است. به علاوه، تابع توماس-فرمی χ را توسط

$$\phi = \frac{Ze\chi}{r} \quad (22-10)$$

تعریف می کنیم. با استفاده از متغیرهای جدید، $(19-10)$ می شود

$$x^{1/2} \frac{d^2\chi}{dx^2} = \chi^{3/2} \quad (23-10)$$

با شرایط مرزی

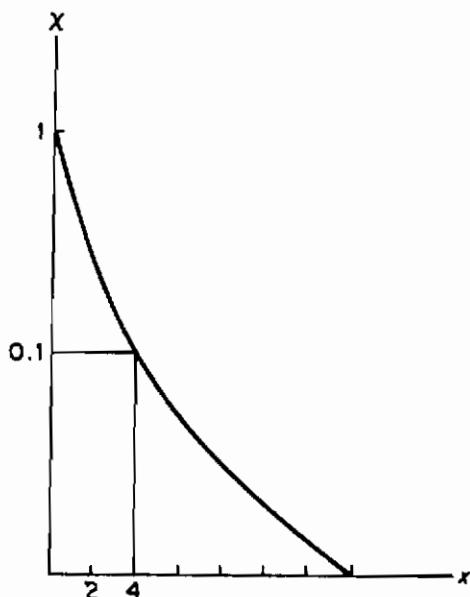
$$\lim_{x \rightarrow 0} \chi \rightarrow 1 \quad \text{و} \quad \lim_{x \rightarrow \infty} \chi \rightarrow 0$$

معادله $(23-10)$ معادله (غیرخطی) توماس-فرمی است. جواب آن بهطور عددی بهدست می آید و بهصورت منحنی نشان داده شده در شکل $(10-5)$ است. وقتی χ تعیین شد، $\rho(r)\phi(r)$ را از $(22-10)$ و $(18-10)$ بدست می آوریم. هم پتانسیل و هم چگالی هردو بسته به مقدار Z از اتمی بهاتم دیگر تغییر می کنند.

با وجودی که مدل توماس-فرمی از نظر ماهیت نیمه کلاسیکی است و اطلاعات کمی از جزئیات ساختار اتمی بهدست می دهد، به بعضی از نتایجی منجر می شود که حتی دریک بررسی

بغرنج تر معتبر است. r_x را شعاع کره‌ای (در واحدهای توماس - فرمی) حول هسته تعریف خواهیم کرد که شامل کسر r از Z الکترون باشد. چون r_x مستقل از Z است، نتیجه می‌شود که کسر داخل کره‌ای به شعاع r روی مقیاس واقعی فاصله، با استفاده از (۱۵-۱۲)، عبارت است از

$$r_x = \frac{0.885a}{Z^{1/3}} \cdot x_f$$



شکل (۱۵-۵) تابع توماس - فرمی $\chi(x)$. بهمنظور بزرگ نشان دادن منحنی برای مقادیر بزرگ x ، مقیاس قائم خطی نیست. توجه کنیم که $\chi(4) = 0.1$ فقط یک دهم $\chi(0) = 1$ است.

اگر "اندازه" اتم را عبارت از فاصله شعاعی که در آن کسر معینی (مثلاً ۹۵%) الکترونها قرار دارند در نظر بگیریم، این اندازه با افزایش عدد اتمی به صورت $Z^{-1/3}$ کاهش می‌یابد. این "انقباض" اتم با افزایش Z یک ویژگی برای اتمها است و حتی در دقیق‌ترین بررسیها ظاهر می‌شود.

مفاهیم آشنازی ظرفیت و ساختار لایه‌ای از مدل آماری توماس - فرمی نتیجه نمی‌شوند. یک بررسی کوانتومی دقیق‌تر از اتم Z الکترونی نخست توسط هارتی و توسط فوک ارائه شد. تقریب هارتی - فوک نتایجی را به دست می‌دهد که برای درک ما از اتم اساسی هستند و زیربنایی برای شیمی مولکولی تشکیل می‌دهند.

۶- روش میدان خود سازگار و تقریب هارتی - فوک - اسلاتر

اتم Z الکترونی - یک سیستم چند جسمی برهم کنش کننده - نمی تواند دقیقاً "بررسی شود . طبیعی به نظر می رسد که در تقریب مرتبه صفر برهم کنش ها را نادیده بگیریم و نظریه پریشیدگی را اعمال کنیم . اما ، چون انرژی برهم کنش الکترونها قابل ملاحظه است ، بعید است که حالت های اتمی ایده آل که از توابع مداری هیدرژن مانند تشکیل شده باشند بتوانند حتی شباختی جزئی با ویژه حالت های اتمی های حقیقی داشته باشند .

یک راه برای به دست آوردن توابع مداری دقیق تر این است که فرض کنیم هسته از نظر الکتروستاتیکی به وسیله یک پتانسیل موثر متوسط حاصل از ابر الکترونی پوشش شده است . به طور معادل ، برهم کنش های دوجسمی به وسیله پتانسیل های یک جسمی موثر جایگزین می شوند . هامیلتونی دقیق برای اتم می تواند با اضافه کردن و کم کردن پتانسیل موثر $V_{eff}^{(q)}(r^{(q)})$ بازنویسی شود ، یعنی ،

$$\hat{H} = \left\{ \sum_{q=1}^Z -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^{(q)2} - \frac{Ze^2}{r^{(q)}} + V_{eff}^{(q)}(r^{(q)}) \right\} \\ + \left\{ \frac{1}{2} \sum_q^Z \sum_{i \neq q}^Z \frac{e^2}{|r^{(q)} - r^{(i)}|} - \sum_q^Z V_{eff}^{(q)}(r^{(q)}) \right\} \quad (24-10)$$

آکولاد اول که به ترتیب شامل انرژی جنبشی ، پتانسیل الکتروستاتیکی هسته و پتانسیل موثر پوششی می باشد به عنوان هامیلتونی ناپریشیده در نظر گرفته می شود . آکولاد دوم ، انرژی همبستگی ، معرف تفاضل بین برهم کنش های دوجسمی و پتانسیل های یک جسمی موثر است و به عنوان پریشیدگی منظور خواهد شد ؟ این جمله مسئول همبستگی های دینامیکی بین الکترونها است . منظور ، البته ، پیدا کردن پتانسیل های موثری است که بهترین وجه نزدیک به برهم کنش های دوجسمی باشند زیرا در این صورت جمله همبستگی به اندازه ای کوچک خواهد بود که بتوانیم نظریه پریشیدگی را اعمال کنیم .

چون هامیلتونی ناپریشیده حاصل جمع عملکردهای یک جسمی است ، معادله شرودینگر متناظر چند جسمی تفکیک پذیر است و منجر به مجموعه ای از معادلات ویژه مقداری یک جسمی به شکل

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{r} + V_{eff}(r) \right\} \psi_i(r) = \epsilon_i \psi_i(r) \quad (25-10)$$

می‌شود .^{۱۰} و ^{۱۱} عبارتنداز ویژه تابعها و انرژی‌های مدارها . برای سهولت ، فرض کردہ ایم که پتانسیل موثر وارد به تمام الکترونها یکی است و اینکه این پتانسیل مرکزی است . یک تفاوت مهم بین این حالت‌های مداری و حالت‌های هیدرژن مانند اتم ایده‌آل این است که تبھگنی تصادفی (کولنی) در حالت‌های مداری وجود ندارد . در نتیجه ، انرژی‌های مداری هم به ^{۱۲} و هم به ^{۱۳} بستگی دارند . انرژی کل اتم عبارت است از حاصل جمع انرژی‌های حالت‌های اشغال شده* .

حالت‌های اتمی می‌توانند از دترمینانهای اسلاتر مدارهای اشغال شده تشکیل شوند . چگالی یا رابطه بموسیله آرایش داده شده بموسیله رابطه

$$e\rho(r) = e \sum_{i=1}^Z |\psi_i|^2 \quad (10-26)$$

به چگالی‌های احتمال ذره انفرادی مرتبط می‌شود ، که در آن جمع بندی روی مدارهای اشغال شده انجام شده است .

موجه بمنظر می‌رسد که پتانسیل موثر پوششی به طریقی به‌این چگالی بستگی داشته باشد و بنابراین بموسیله ماهیت ویژه تابعهای مداری اشغال شده تعیین شود . به‌یک معنا ، وقتی می‌گوئیم ^{۱۴} توسط ^{۱۵} به ^{۱۶} بستگی دارد و ^{۱۷} به نوبه خود از طریق ^{۱۸}-^{۱۹} به ^{۲۰} بستگی دارد ، وارد مدار بسته‌ای خواهیم شد . این ، در واقع ، همان فکری است که در ورای روش میدان خودسازگار (SCF) که برای تعیین ^{۲۱} در یک آرایش داده شده به کار رفت ، قرار دارد . نحوه عمل برای آرایش‌های حالت پایه را به‌طور خلاصه شرح می‌دهیم .

(الف) یک پتانسیل موثر حالت پایه تخمین می‌زنیم (به عنوان مثال ، پتانسیل توماس - فرمی را برای آزمایش انتخاب می‌کنیم)

(ب) معادله ^{۲۵}-^{۲۶} را حل می‌کنیم و توابع مداری ^{۲۷} و ویژه مقدارهای ^{۲۸} را که ^{۲۹} تابع مداری با انرژی کمینه را نمایش می‌دهند ، پیدا می‌کنیم .

(ج) از ^{۲۶}-^{۲۷} چگالی ابر الکترونی را با استفاده از ^{۲۹} تابع مداری در (ب) پیدا

* مانند نظریه هارتی - فوک ، استثنایی برای این قاعده انرژی کل وجود دارد ، اما در اینجا مورد بحث قرار نخواهد گرفت ، به عنوان مثال به کتاب زیر مراجعه کنید :

H.A. Bethe and R.W. Jackiw , " Intermediate Quantum Mechanics , " 2nd ed., P.63. Benjamin , New York , 1968.

می‌کنیم.

(د) یک رابطه بین چگالی ابر و پتانسیل موثر وضع می‌کنیم (مثلاً "قانون کولن") و $V_{\text{eff}}(r)$ را محاسبه می‌کنیم.

(ه) اگر $V_{\text{eff}}(r)$ امکنی نباشد، یک متوسط گیری روی یک زاویه حجمی انجام می‌دهیم و $V_{\text{eff}}(r)$ را بدست می‌آوریم.

(و) به مرحله (ب) باز می‌گردیم و مراحل از (ب) تا (و) را آنقدر تکرار می‌کنیم تا خود سازگاری حاصل گردد، یعنی، تا دیگر $V_{\text{eff}}(r)$ در هر دوره‌ای تغییر نکند. تعداد دوره‌های لازم برای رسیدن به یک حالت معقول از خودسازگاری بستگی به تخمین اولیه در مرحله (الف) دارد. بعلاوه، پتانسیل موثر به دست آمده به طور مؤثری بستگی به مرحله (د) دارد.

هارتی در ابتدا پیشنهاد کرد که پتانسیل باید توسط قانون کولن به چگالی هار ربط داده شود^{*}، یعنی،

$$V_{\text{eff}}(r) = e^2 \int \frac{d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (27-10)$$

در این تحلیل، هارتی کاملاً "اثر همبستگی آماری در (۲۷-۱۰)" را نادیده گرفت. فوک، با به کار بردن روش وردشی، نظریه هارتی را تعمیم داد تا آثار تبادلی را نیز شامل شود. متأسفانه، روش فوک منجر به مجموعه معادلاتی می‌شود که بررسی عددی آنها نسبتاً مشکل است. اسلاتر معادلات هارتی - فوک را با استفاده از یک تقریب اضافی مبتنی بر نظریه توماس - فرمی ساده کرد. نتیجه اسلاتر در زیر خلاصه می‌شود:

$$V_{\text{eff}}(r) = e^2 \int \frac{d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \frac{3}{2} e^2 \left(\frac{3}{\pi} \rho(r) \right)^{1/3} \quad (28-10)$$

که در آن

$$\rho = \sum_{\text{occupied orbitals}} |\psi_i|^2$$

در حالی که جمله اول اساساً پتانسیل هارتی است، جمله دوم معرف تقریب اسلاتر از

* در نظریه هارتی انتگرال کولنی (۲۷-۱۰) با حذف اثر الکترون روی خودش محاسبه می‌شود. در (۲۸-۱۰) انرژی خودی گنجانده شده است.

تصحیحات تبادلی فوک است.

تقریب اسلاتر در فاصله‌های زیاد از هسته اعتبار خود را از دست می‌دهد. چون انتگرال کولنی در (۱۰-۲۸) مربوط به چشم‌های است که بار آن $-Ze$ است، از قانون گاوی نتیجه می‌شود که این پتانسیل در r بزرگ پتانسیل هسته را خنثی می‌کند. به طور معادل، پتانسیل کل از دید یک الکترون لایه خارجی اساساً پتانسیل تبادلی اسلاتر است که با فاصله به طور نمایی سقوط می‌کند. این مطلب از نظر فیزیکی نادرست است زیرا انتظار داریم که یک الکترون خارجی یک پتانسیل پوشش شده معادل با پتانسیل الکترون هیدروژنی، یعنی e^2/r را بهبینیم. تصحیح اسلاتر باید در فاصله زیاد با جانشینی جمله $m^{1/3}$ به وسیله یک "دباهه کولنی" (یعنی $-e^2/r$)، اصلاح گردد (شکل ۱۰-۶).

چون پتانسیل HFS معمولاً تقارن کروی ندارد، مناسب است که از آن روی یک زاویه حجمی متوسط گرفت، یعنی،

$$V_{HFS}(r) = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} V_{HFS}(r) d\Omega \quad (10-29)$$

این فرایند متوسط‌گیری تقریب میدان مرکزی نامیده می‌شود که در بالا در مرحله (ه) ذکر گردیده است.

کامپیوتراها محاسبات پتانسیل HFS خودسازگار را آسان کرده‌اند. پتانسیلهای حالت پایه برای همه اتمهای جدول تناوبی محاسبه شده و در جداولی آورده شده‌اند*. نظریه HFS به صورتی که در فوق ارائه شد باید در مورد الکترونهای داخلی اتمهای سنگین اصلاح شود. چون این الکترونها انرژی‌هایی در حدود ۵۰ keV دارند آثار نسبیتی قابل ملاحظه‌اند.

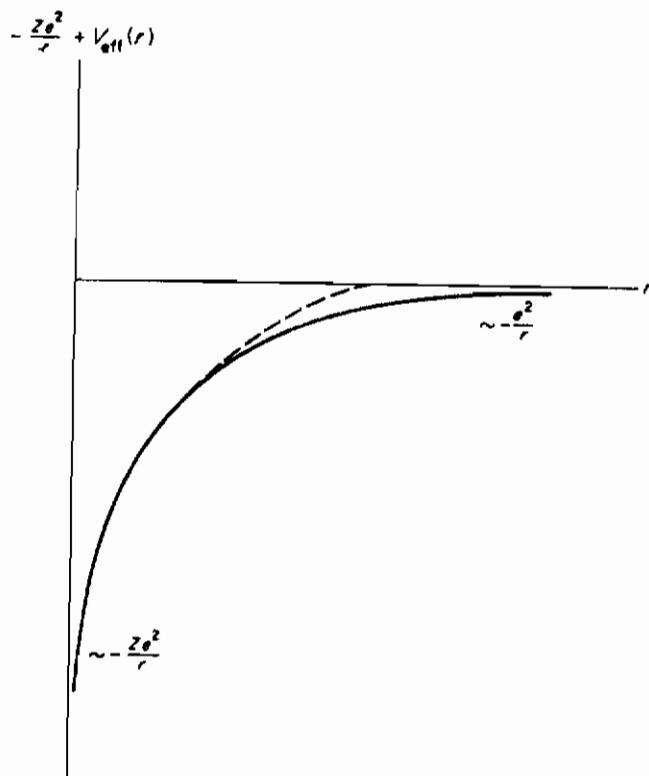
"معمولًا" فرض می‌شود که پتانسیل موثر حالت پایه شبیه به پتانسیل حالت‌های برانگیخته پائینی است، یعنی، حالت‌هایی که در آنها فقط یک الکترون خارجی برانگیخته شده است. توجیه این فرض این است که چگالی اتمی یک اتم با Z بزرگ، وقتی که فقط یک الکترون به مدار مجاور برود، تغییر قابل ملاحظه‌ای نمی‌کند. توابع مداری HFS دارای شکل

$$\psi_{nlm_1m_s} = R_{nl}(r) Y_{lm_1}(\theta, \phi) |m_s\rangle$$

* به کتاب زیر مراجعه کنید:

F.Herman and S. Skillman, "Atomic structure

Calculations, Prentice-Hall. Englewood Cliffs, New Jersey,
www.ketabha.org
1963.



شکل (۱۵-۶) یکتابع انرژی پتانسیل نمونه‌ای که الکترون اتمی در آن قرار دارد، تابع رسم شده از یک پتانسیل HFS اصلاح شده به دست آمده است. به دنباله کولنی متصل شده در $r \rightarrow \infty$ توجه کنید. در نزدیکی هسته، پتانسیل "معدتاً" محصول بار هسته است. منحنی خط چین پتانسیل HFS اصلاح نشده را نشان می‌دهد.

می‌باشد. این توابع شبیه به توابع هیدرزن مانند اتم اپدآل هستند به استثنای اینکه قسمت شعاعی دیگر یک تابع واپسخواه لایکر نیست. انرژی مداری هم به $1/r$ و هم به $2/r$ بستگی دارد و بنابراین دیگر "بوهرگونه" نیست.

حالت‌های اتمی به دست آمده از مدارهای HFS نمایانگر تقریب‌های مرتبه صفراند. از نظر انرژی، این حالتها بر حالت‌های اتم حقیقی منطبق‌اند. به طور معادل، انرژی همبستگی در (۱۰-۲۴) "کاملاً" کوچک است. این تعجب‌آور نیست زیرا نظریه فوک بر یک اصل وردشی پایه‌گذاری شده و انرژی‌های دقیق غیرمنتظره نیستند. از طرف دیگر، خود تابع حالت‌های HFS ممکن است از سایر لحاظ‌شبیه تابع حالت‌های یک اتم حقیقی نباشد. توابع وردشی عموماً همبستگی کمی با حالت‌های دقیق دارند. تا آنجا که به انرژی مربوط است، شبیه‌ای‌یی یا طیف‌نمایی، تقریب HFS می‌تواند کاملاً درست باشد. برای مشاهده پذیره‌های دیگر، این

تقریب می‌تواند به نتایج کاملاً "بی معنی‌ای" منجر شود.

۷- خواص اتمها در تقریب HFS

هامیلتونی الکتروستاتیکی برای اتم Z الکترونی در حالت پایه‌اش می‌تواند به صورت

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \lambda V$$

بهان شود که در آن

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_{q=1}^Z \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^{(q)2} - \frac{Ze}{r^{(q)}} + V_{\text{HFS}}(r^{(q)}) \right\} \quad (30-10)$$

عبارت است از هامیلتونی هارتی-فوك-اسلاتر و

$$\lambda V = \frac{1}{2} \sum_q^Z \sum_{i \neq q}^Z \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(q)} - \mathbf{r}^{(i)}|} - \sum_{q=1}^Z V_{\text{HFS}}(r^{(q)}) \quad (31-10)$$

عبارت است از جمله همبستگی (دینامیکی).

حالتهای ایده‌آل ناپریشیده می‌توانند از دترمینانهای اسلاتر مدارهای HFS، یعنی، $\psi_{nlm_lm'}$ ساخته شوند. برای یک آرایش $n-l$ داده شده از این مدارها، مدل برداری ایجاب می‌کند که حالتهای ایده‌آل بتوانند با کمک*

$$|E_a LS\rangle = \sum_{m_s} \sum_{m_l} C_{mm_l \dots m_s m_s'} |nn' \dots ll' \dots m_l m_l' \dots m_s m_s' \dots\rangle \quad (32-10)$$

با محدودیتهای

$$|l + l' + \dots|_{\min} \leq L \leq (l + l' + \dots) \quad (33-10)$$

$$|s + s' + \dots|_{\min} \leq S \leq (s + s' + \dots)$$

* بقیه اعداد کوانتموی را ننوشتم ایم زیرا بسته به طرحواره جفت‌شدگی می‌توانند M_L و M_S یا J و M_J باشند.

ساخته شوند. انرژی کل آرایش $n-l$ عبارت است از

$$E_{\text{HFS}} = \varepsilon_{nl} + \varepsilon_{n'l'} + \dots \quad (34-10)$$

انرژی اتم به مقادیر n و l مربوط به مدارهای HFS اشغال شده بستگی دارد. گفته می‌شود که الکترون‌های با یک عدد کوانتومی اصلی n در یک لایه قرار دارند. برای یک n معین، الکترون‌های با یک l در یک زیرلایه قرار دارند. اصل پاولی حد اکثر $(1+1)2l$ الکترون را در یک زیرلایه n^2 الکtron را در یک لایه مجاز می‌دارد. در حالت پایه یک اتم، مدارهای با کمترین انرژی اشغال هستند. برای n و l های به حد کافی بزرگ بستگی ε_{nl} به n معکن است به بستگی آن به n غالب گردد. به عنوان مثال، در ^{36}Kr لایه $4s$ در انرژی پائین‌تری نسبت به لایه $3d$ قرار دارد و بنابراین قبل از آن پر می‌شود.

چگالی شعاعی یک اتم به وسیله ویژه تابعهای شعاعی مدارهای اشغال شده به صورت

$$\rho_r = \sum_{\substack{n \\ \text{occupied}}}^Z R_{nl}^2(r) r^2 \quad (35-10)$$

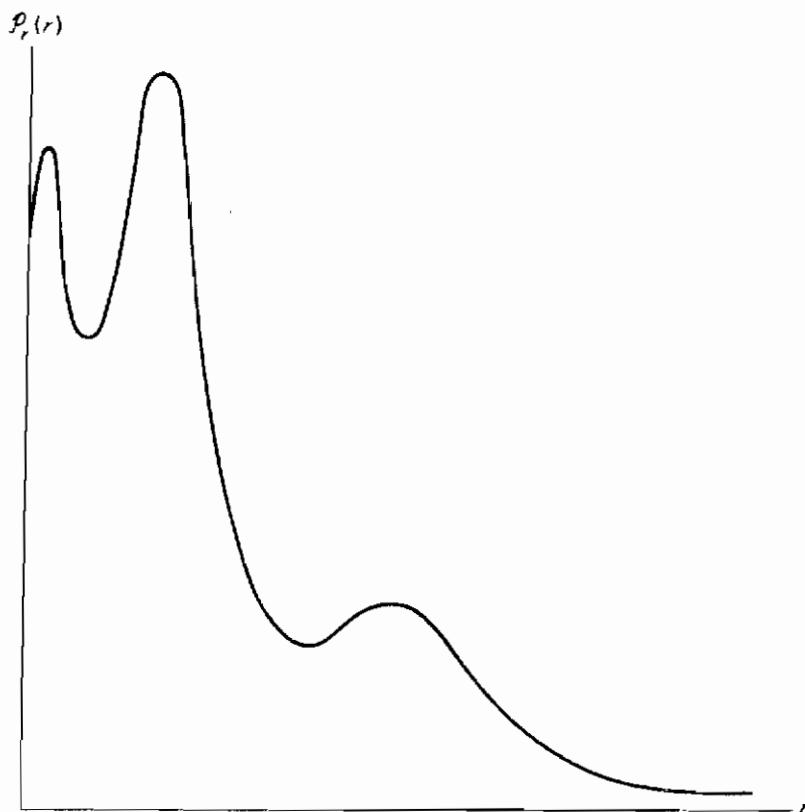
تعیین می‌شود. چگالی شعاعی حالت پایه برای $^{18}\text{Ar}(1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6)$ در شکل (۲-۱۰) رسم شده است. توجه کنید که این چگالی در فاصله‌های مشخصه‌ای از هسته‌داری قله‌هایی است که تجمع فضای الکترون‌ها را در داخل لایه‌ها نشان می‌دهند.

حالت پایه یک اتم با لایه‌های کاملاً پر شده نا تبیکن است زیرا فقط یک آرایش از اعداد کوانتومی مغناطیسی، بدون نقض اصل پاولی، امکان پذیر است. در واقع، زیرhalt‌های مغناطیسی مداری (m_l) به طور متقاضن حول مقدار صفر مجتماع شده‌اند. هم‌چنین نیمی از الکترون‌ها دارای $\frac{1}{2} = m_s$ هستند در حالی که نیمی دیگر دارای $-\frac{1}{2} = m_s$ می‌باشند. حالت پایه یک چنین اتمی به طور خود به خود یک حالت 1S_0 ($L=0, S=0, J=0$) است. می‌توانیم این نتیجه را تا حدی با مشاهده اینکه یک زیر لایه پرسه‌می در تکانه زاویه‌ای اتم ندارد، تعمیم دهیم. در نتیجه، کافی است مدل برداری فقط به الکترون‌های یک زیر لایه پرنشده اعمال شود تا حالت طیف نمایی اتم تعیین شود.

اتمهایی که آخرین زیرلایه آنها p^6 و کاملاً پر باشد معمولاً انرژی فوق العاده زیادی برای برانگیخته شدن طلب می‌کنند. بنابراین، به عنوان مثال، اتم‌های ^{10}Ne ($1s^2, 2s^2, 2p^6$), ^{18}Ar ($1s^2, 2s^2, 2p^6$), ^{36}Kr ($1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^2, 3d^{10}, 4p^6$)

* به "جایه‌جایی" زیر لایه‌های $4s$ و $3d$ توجه کنید.

بی‌اثراند*. بعلاوه، همه آنها دارای حالت‌های پاییه اتمی S^1 هستند. این اتمها از نظر شیمیائی غیرفعال می‌باشند و نسبتاً "پایدارند" و انرژی‌های یونش آنها خیلی زیاد است.



شکل (۷-۱۵) چگالی ساعی حالت پاییه برای آرگون

اتمهایی که یک الکترون کمتر از الکترونهای گازهای بی‌اثر مذکور در فوق دارند، از نظر انرژی تعامل دارند که در یک واکنش شیمیایی یک الکترون کسب کنند. این اتمها، یعنی شیمیائی مثل غیرفلزهای فعال رفتار می‌کنند و انرژی‌های زیاد واکنش را تولید می‌کنند.

اتمهایی که یک الکترون بیشتر از گازهای بی‌اثر دارند، از نظر انرژی تعامل دارند که این الکترون ظرفیت را در واکنشهای شیمیائی شرکت دهند و یک رفتار فلزگونهای از خود بروز می‌دهند. این اتمهای قلیائی شامل (${}^{37}\text{Rb}$, ${}^{40}\text{K}$, ${}^{39}\text{K}$, ${}^{23}\text{Na}$, ${}^{22}\text{Ne}$, ${}^{19}\text{F}$, ${}^{35}\text{Cl}$, ${}^{35}\text{Br}$, ${}^{53}\text{I}$, ${}^{55}\text{S}$, ${}^{40}\text{Ar}$) می‌باشند.

* اتم ${}^2\text{He}$ با یک آرایش ${}^2\text{He}$ نیز بی‌اثر است.

و $(5s^1, 5p^6 \dots 55^{55}Cs)$ می‌باشد*. اتمهای قلیائی از اهمیت خاصی برخوردارند زیرا خطوط طیفی آنها کاملاً شبیه به خطوط طیفی هیدرژن است. چون در اتمهای قلیائی الکترونهای داخلی در زیر لایه‌های پر قرار دارند، تکانهزاویه‌ای مشخصه آنها به موسیله تنها الکترون ظرفیت S تعیین می‌شود. حالت پایه یک قلیائی مثل هیدرژن یک دوگانه $\frac{1}{2}, L = 0, S = \frac{1}{2}, J = \frac{1}{2}$ است. اختلاف اصلی بین الکترون ظرفیت در یک قلیائی و الکترون هیدرژنی، این است که اولی تحت یک پتانسیل پوشش شده غیر کولنی قرار دارد، در نتیجه، طیف انرژی قلیائی بوهگونه نیست.

یک فرمول تجربی خیلی مفید برای انرژی الکترون ظرفیت در یک قلیائی عبارت است از

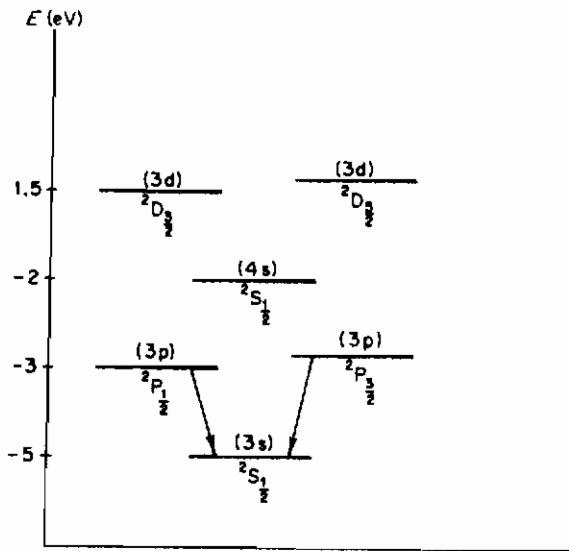
$$\epsilon_{nl} = \frac{\epsilon_1}{[n - \mu(l)]^2} \quad (\epsilon_1 = -13.6 \text{ eV}) \quad (36-10)$$

انحرافهای از فرمول بوهگونه مجموعه‌ای از پارامترهای $(l)\mu$ موسوم به نقاویں کوانتوسی مشخص می‌شوند. این پارامترها از یک قلیائی به قلیائی دیگر تغییر کرده و پوشش هسته به موسیله الکترونهای داخلی (مغزه) را ایجاد می‌کنند. برای سدیم ($n \geq 3$)، نقاوی کوانتوسی عبارتند از $1.35\mu(0) = 0.86\mu(1) = 0.01\mu(2)$ و $0 \approx 0\mu(3)$. این پارامترها با افزایش کاهش می‌یابند. برای $l=1$ های بزرگ (مدارهای شبیه دایره‌ای)، الکترونهای بطور قابل ملاحظه‌ای در مغزه نفوذ نمی‌کنند و یک پتانسیل کولنی پوششی معادل با پتانسیل الکترون هیدرژنی تحمل می‌کنند. برای مقادیر پائین، مدار بهشت غیر دایره‌ای می‌شود، الکترون ظرفیت وارد مغزه شده و بیشتر هسته را می‌بیند. مدار بهسته مقیدتر و انرژی آن کمتر است. با استفاده از $(36-10)$ و مقادیر $(l)\mu$ برای سدیم، به سادگی می‌توان تحقیق کرد که تراز $4s$ دارای انرژی کمتری از تراز $3d$ است.

حالتهای اتمی پائین یک قلیائی با تراز اشغال شده به موسیله الکترون ظرفیت (سوری) تعیین می‌شود. حالت پایه $(3s^1)$ اتم Na، به عنوان مثال، یک حالت $\frac{1}{2}, S^2$ است. معادله $(36-10)$ نشان می‌دهد که انرژی الکترون ظرفیت عبارت است از $-5.13 \text{ eV} \approx \epsilon_{30}$. آرایش $3p^1$ می‌تواند به حالتهای $\frac{3}{2}, P^3$ و $\frac{1}{2}, P^3$ که هر کدام دارای $-2.96 \text{ eV} \approx \epsilon_{31}$ هستند پیوند شود. عملای وقتی تصحیحات ساختار ریز در نظر گرفته شوند، $\frac{1}{2}, P^2$ کمی بالای $\frac{3}{2}, P^2$ قرار خواهد گرفت. در راقع، گذارهای از حالتهای $\frac{1}{2}, P^2$ و $\frac{3}{2}, P^2$ به حالت پایه

* ${}^3\text{Li}(1s^2, 2s^1)$ نیز یک قلیائی است زیرا یک الکترون بیش از ${}^2\text{He}(1s^2)$ دارد.

$^2S_{\frac{1}{2}}$ مسئول رنگ زرد مشخصه دوگانه "P" ($\lambda_1 = 5895.9 \text{ \AA}$) و ($\lambda_2 = 5889.9 \text{ \AA}$) در طیف گسیلی سدیم است (شکل ۱۵-۸).



شکل (۱۵-۸) یک دیاگرام تراز برای حالت‌های برانگیخته پائین الکترون ظرفیت سدیم که گذارهای مسئول دوگانه زرد را نشان می‌دهد. جدائی مختصر در حالت‌های دوگانه P و دوگانه D همان ساختار ریز است.

اتمهای بازیرلایه‌های نیمه‌پربعدلت وجود تبھگی از مرتبه بالا به‌طور قابل ملاحظه‌ای برای بررسی نظری مشکل‌ترند. به‌طور کلی، برانگیختگی‌های نوری پائین در اتمها به‌وسیله گذارهای وابسته به الکترون‌های خارجی ایجاد می‌شوند. الکترون‌های داخلی نمی‌توانند گذارهایی به حالت‌های مجاور انجام دهند زیرا این حالت‌ها معمولاً "اشغال" هستند. با استفاده از الکترون‌های پرانرژی یا فوتونها ممکن است یک اتم را از یک الکtron داخلی خالی کرد. گذارهای به حالت‌های خالی معمولاً با گسیل تابش مشخصه اشعه X همراه هستند.

۸- مولکولهای دواتمی - تقریب بی‌دررو

نظریه کوانتمی مولکولها به‌طور قابل ملاحظه‌ای پیچیده‌تر از نظریه کوانتمی اتمها است. در مولکولها، الکترونها به‌بیش از یک مرکز نیرو، که در اینجا هسته‌ها هستند، مقیدند. پیچیدگی با توجه به این واقعیت که سیستم هسته‌ای در حرکت است افزایش بیشتری پیدا می‌کند. اما چند عامل فیزیکی وجود دارد که تقریب‌هایی را ممکن می‌سازند. فرکانس

حرکت هسته‌ای خیلی کمتر از فرکانس وابسته به الکترونها است*. این ویژگی کاربرد تقریب بی دررو را مجاز نماید. ما این تقریب را وقتی به مولکولهای دوامی، یعنی، مولکولهای کماز دوام تشكیل شده‌اند، اعمال می‌شود، مورد بحث قرار خواهیم داد**.

معادله شرودینگر برای یک مولکول دوامی، با صرف نظر کردن از اسپین، عبارت است از

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{\nabla^{(A)^2}}{M_A} + \frac{\nabla^{(B)^2}}{M_B} \right] + \sum_{j=1}^{Z_A+Z_B} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^{(J)^2} + V_{\text{tot}}(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{R}^{(A)}, \mathbf{R}^{(B)}) \right\} \times \Psi_e(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{R}^{(A)}, \mathbf{R}^{(B)}) = \varepsilon_e \Psi_e(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{R}^{(A)}, \mathbf{R}^{(B)}) \quad (37-10)$$

که در آن M_A و M_B جرم هر کدام از هسته‌ها، m جرم هر الکtron، $\mathbf{R}^{(A)}$ و $\mathbf{R}^{(B)}$ مکان‌های هسته‌ها، $\mathbf{r}^{(j)}$ مکان الکtron زام و Z_A ، Z_B عدد اتمی هر کدام از اتمها است. انرژی پتانسیل کل سیستم مولکولی می‌تواند به صورت

$$V_{\text{tot}} = \frac{Z_A Z_B e^2}{|\mathbf{R}^{(A)} - \mathbf{R}^{(B)}|} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(i)} - \mathbf{r}^{(j)}|} - e^2 \sum_i \left\{ \frac{Z_A}{|\mathbf{r}^{(i)} - \mathbf{R}^{(A)}|} + \frac{Z_B}{|\mathbf{r}^{(i)} - \mathbf{R}^{(B)}|} \right\} \quad (38-10)$$

تجزیه شود. این جملات، به ترتیب، بیانگر انرژی دافعه الکتروستاتیکی بین هسته‌ها، انرژی دافعه بین الکترونها، و انرژی جاذبه بین الکترونها و هسته‌ها هستند. چون انرژی جنبشی برای هسته‌ها خیلی کوچک‌تر از الکترونها است، فرضهای زیر را در نظر می‌گیریم:

(الف) تابع حالت مولکولی می‌تواند به صورت یک حاصل ضرب از یک قسمت هسته‌ای در یک قسمت الکترونی بیان شود، یعنی

$$\Psi_e(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{R}^{(A)}, \mathbf{R}^{(B)}) = \zeta_{\text{nuc}}(\mathbf{R}^{(A)}, \mathbf{R}^{(B)}) \psi_{\text{elec}}(\mathbf{r}^{(j)}) \quad (39-10)$$

(ب) قسمت الکترونی می‌تواند طوری مورد بحث قرار گیرد که گوئی، هسته‌ها با $\mathbf{R}^{(A)}$ و $\mathbf{R}^{(B)}$ ثابت، ساکن باقی می‌مانند.

* این امر به خاطر این است که هسته‌ها به طور قابل ملاحظه‌ای از الکترونها سنگین‌ترند.

** تقریب بی دررو اولین بار توسط بورن و اپنهایمر به مولکولها اعمال شد (۱۹۲۷).

علاوه فرض خواهیم کرد که در مورد مولکول دواتمی، مختصات هسته‌ای، از طریق بردار نسبی $\mathbf{R} = \mathbf{R}^{(A)} - \mathbf{R}^{(B)}$ در پتانسیل مولکولی شرکت می‌کند. این استدلال نمی‌تواند به راحتی به یک مولکول سه‌اتمی، که دارای ساختار خیلی پیچیده‌تری است، تعمیم داده شود.

فرض (ب) ایجاب می‌کند که قسمت الکترونی در معادله

$$\left\{ \sum_j -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^{(j)2} + V_{\text{tot}}(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{R}) \right\} \psi_n(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{R}) = E_n(\mathbf{R}) \psi_n(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{R}) \quad (40-10)$$

صدق کند که در آن Ψ معرف مجموعه‌ای از اعداد کوانتومی الکترونی است. باید تأثیر داشت که \mathbf{R} در (۴۰-۱۰) یک متغیر نیست، بلکه صرفاً "عنوان یک پارامتر عمل می‌کند". به بیان دیگر، ویژه مقدارها و ویژه تابعهای الکترونی به طور پارامتری به جدائی هسته‌ای \mathbf{R} بستگی دارند. برای خوب فهمیدن مفهوم (۴۰-۱۰)، فرض کنیم که هسته ساکن می‌ماند و \mathbf{R} برابر با یک ثابت \mathbf{R}_0 است. علاوه فرض کنیم که الکترونها در حالت پایه هستند، $n=0$. اکنون فرض کنیم هسته به طور بی‌دررو حرکت کند، یعنی، \mathbf{R} به آهستگی تغییر کند. در این صورت موجه به نظر می‌رسد که الکترونها در حالت پایه ($n=0$) باقی مانند، ولی تابع و انرژی حالت پایه به آهستگی تغییر کنند. به بیان دیگر، انرژی و ویژه تابع حالت پایه با حل (۴۰-۱۰)، با استفاده از مقدار لحظه‌ای \mathbf{R} ، تعیین می‌شوند. به بیان معادل، وقتی مولکول ارتعاش می‌کند و می‌چرخد، ابر الکترونی نا برانگیخته باقی می‌ماند و به طور بی‌دررو حرکت هسته را تعقیب می‌کند. این توجهی شهودی برای تقریب بی‌دررو بر پایه قضیه بی‌دررو* که برای آن اثبات دقیقی وجود دارد، پایه‌گذاری شده است.

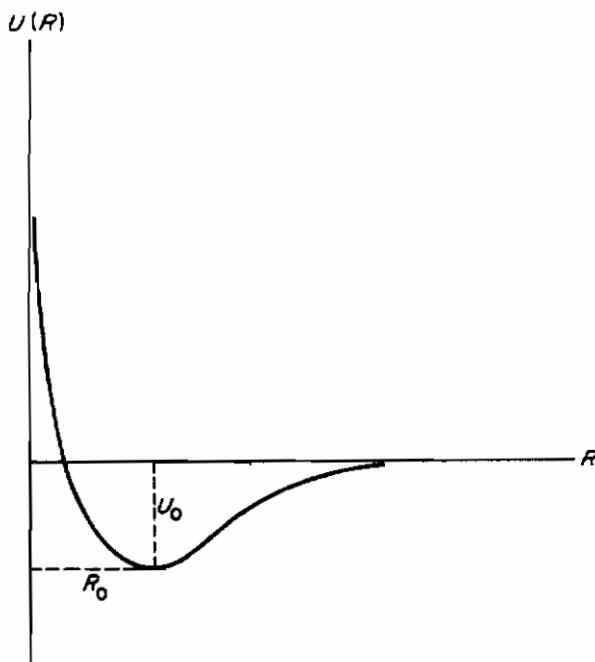
برای منظور ما، کافی است موردی را در نظر بگیریم که در آن الکترونها در حالت پایه هستند. بنابراین، باید (۴۰-۱۰) را حل کنیم و تابع حالت پایه $\xi_v(\mathbf{R}^{(A)}, \mathbf{R}^{(B)})$ و انرژی $E_0(\mathbf{R})$ را برای تمام مقادیر پارامتری متغیر جدائی هسته‌ای \mathbf{R} پیدا می‌کنیم. این کار فنی نفسه یک محاسبه عددی پیچیده است. با بردن (۳۹-۱۰) در (۳۷-۱۰) و با استفاده از (۴۰-۱۰) به معادله هسته‌ای

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{\nabla^{(A)2}}{M_A} + \frac{\nabla^{(B)2}}{M_B} \right] + E_0(\mathbf{R}) \right\} \xi_v(\mathbf{R}^{(A)}, \mathbf{R}^{(B)}) = \varepsilon_v \xi_v(\mathbf{R}^{(A)}, \mathbf{R}^{(B)}) \quad (41-10)$$

* به کتاب زیر مراجعه کنید

A. Messiah, "Quantum Mechanics," Volume II, P. 747.
wiley, New York, 1962.

هدایت خواهیم شد. توجه کنیم که ویژه مقدارهای الکترونی نقش یک پتانسیل بین هسته‌ای (مولکولی) را بازی می‌کنند. به طور کلی، قسمت هسته‌ای باید به صورت $E_{\text{ext}}^{(R)}$ و انرژی به صورت $E_{\text{int}}^{(R)}$ نوشته شوند زیرا پتانسیل مولکولی $E_{\text{int}}(R)$ به حالت الکترونی بستگی دارد.



شکل (۹-۱۰) پتانسیل مرس که نمایانگر انرژی مولکولی به صورت تابعی از فاصله بین هسته‌ای R است. انرژی کمینه U_0 در R_0 رخ می‌دهد و فاصله تعادل را تعیین می‌کند.

شکل عمومی $E_0(R)$ برای بیشتر مولکولهای دو اتمی می‌تواند به طور موجهی به پتانسیل مرس (شکل ۹-۱۰) تقریب زده شود

$$\begin{aligned} E_0(R) &= U(R) = -U_0[1 - e^{-(R-R_0)/a}]^2 + U_0 \\ &= U_0\{1 - [1 - e^{-(R-R_0)/a}]^2\} \quad (U_0 < 0) \end{aligned} \quad (42-10)$$

پارامترهای U_0 و a به انگر پارامترهای شدت و گستره‌اند و از مولکولی به مولکول دیگر تغییر می‌کنند. پارامتر R_0 فاصله‌ای است که در آن $U(R_0) = U_0$ کمینه است، یعنی، که در آن $U'(R_0) = 0$. به این این پارامتر معرف جداولی تعادل هسته‌است. بعلاوه، U_0 را می‌توان به عنوان انرژی تجزیه مولکول در نظر گرفت.

با اعمال تبدیل مرکز جرم به (۴۰-۱۰)، معادله حرکت نسبی به شکل

$$\left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2\mu_M} + U(R) \right\} \xi_v(\mathbf{R}) = \varepsilon_v \xi_v(\mathbf{R}) \quad (43-10)$$

در می‌آید که در آن

$$\mu_M = \frac{M_A + M_B}{M_A M_B} \quad (\text{جرم کاوش یافته هسته‌ها})$$

چون پتانسیل مرس (۴۲-۱۰) دارای طبیعت مرکزی است، (۴۳-۱۰) می‌تواند با به کار بردن

$$\xi_v(\mathbf{R}) = u_{v,K}(R) Y_{K,M_K}(\theta, \phi) \quad (K = 0, 1, 2, \dots; |M_K| \leq K)$$

تفکیک شود که قسمت شعاعی آن در معادله

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_M} \frac{d^2 u_{v,K}}{dR^2} + \left(U(R) + \frac{\hbar^2}{2\mu_M} \frac{K(K+1)}{R^2} \right) u_{v,K} = \varepsilon_{v,K} u_{v,K} \quad (44-10)$$

صدق می‌کند.

پتانسیل مولکولی موثر عبارت است از پتانسیل مرس و یک "پتانسیل گریز از مرکز".

در حالی که حل دقیق (۴۴-۱۰) نسبتاً پیچیده است، این کار می‌تواند با فرض اینکه انحراف از وضع تعادل، $\rho = R - R_0$ ، در مقایسه با R_0 کوچک است، ساده شود. پتانسیل مرس (یا پتانسیل مولکولی دقیق اگر معلوم باشد) می‌تواند به یک سری تیلور در حول R_0 به صورت

$$U(R) = U_0 + \frac{1}{2} U_0'' \rho^2 + \dots \quad (45-10)$$

بسط داده شود. در این بسط جمله خطی وجود ندارد زیرا، بنابراین تعریف R_0 ، داریم $U_0' = 0$. مقدار مشتق دوم پتانسیل مرس در $R = R_0$ نقش ثابت‌کشانی یک نیروی بازگردانده خطی را بازی می‌کند. اگر ρ کوچک باشد، یعنی، مولکول خیلی برانگیخته نباشد، دو جمله اول در (۴۵-۱۰) به پتانسیل مرس نزدیک می‌شوند. بعلاوه پتانسیل گریز از مرکز می‌تواند (تا مرتبه ρ^2) به صورت

$$\frac{\hbar^2}{2\mu_M} \frac{K(K+1)}{(R_0 + \rho)^2} = \sigma K(K+1) \left[1 - 2 \frac{\rho}{R_0} + 3 \frac{\rho^2}{R_0^2} + \dots \right] \quad (46-10)$$

بسط داده شود که در آن

$$\sigma = \frac{\hbar^2}{2\mu_M R_0^2}$$

تقریباً معرف یک "کوانتوم" دوران است . کمیت $I_0 = \mu_M R_0^2$ به عنوان گشتاور اپنرسی مولکول نسبت به مرکز جرم وقتی مولکول در وضعیت تعادل است شناخته می شود . فرض خواهیم کرد که انرژی دورانی $(K + 1)\sigma K$ آنقدر کوچک است که جمله های شامل $\omega^2 m$ در $(46-10)$ می توانند به عنوان پریشیدگی در نظر گرفته شوند . اگر در تقریب اول این جمله ها نادیده گرفته شوند ، ویژه مقدارهای انرژی در $(44-10)$ به شکل

$$\epsilon_{v, K} = U_0 + (\gamma + \frac{1}{2})\hbar\omega + \sigma K(K + 1) \quad (47-10)$$

حاصل می شوند که در آن $\omega = (U_0''/\mu_M)^{1/2}$. جمله اول انرژی حالت پایه الکترون درجه ای تعادل هسته ها است . جملات دوم و سوم به ترتیب بیانگر انرژی های ارتعاشی و دورانی هستند .

وقتی تصحیحات (تا مرتبه ω^2) پتانسیل گریزان مرکز در $(46-10)$ نگه داشته شوند ، نظریه کوانتومی انرژی های ارتعاشی و دورانی را به صورت تقریبی زیر به دست می دهد

$$\begin{aligned} \epsilon_{v16} &\simeq (\gamma + \frac{1}{2})\hbar\tilde{\omega} \\ \epsilon_{rot} &\simeq \sigma K(K + 1) - \frac{(K(K + 1)\sigma)^2}{3K(K + 1)\sigma + \frac{1}{2}U_0''R_0^2} \end{aligned} \quad (48-10)$$

فرکانس ارتعاشی اصلاح شده عبارت است از

$$\tilde{\omega} = \left(\frac{U_0''R_0^2 + 6K(K + 1)\sigma}{\mu_M R_0^2} \right)^{1/2} \quad (49-10)$$

اصلاح فرکانس طبیعی و حضور پارامتر کشسانی U_0'' در انرژی دورانی از "کشیدگی مرکز گریزان" مولکول ناشی می شود . اگر مولکول نسبتاً سخت و مد دورانی پائین باشد $(\sigma K(K + 1) \ll U_0''R_0^2)$. مولکول مستقل "شبیه به یک نوسانگر و پک چرخنده عمل می کند و $(48-10)$ به $(47-10)$ تبدیل می شود .

البته نتایج $(48-10)$ فقط برای ترازهای خیلی پائین دورانی و ارتعاشی معتبر است* .

* این محدودیت مستقل از شرط لازم برای تقریب بی دررو است . برای بررسی برمبنای پریشیدگی به مرجع زیر رجوع کنید

Bethe and Jackiw, " Intermediate Quantum Mechanics", —

2nd ed, P. 131, Benjamin, 1968.

اگر تراز ارتعاشی خیلی بالا باشد، انحراف از تعادل آنقدر بزرگ است که ایجاد می‌کند جملات بالاتر α^2 را در بسط پتانسیل مرس در (۴۵-۱۰) نگه داریم. در واقع، در (۱۰-۴۸) به غلط ایجاد می‌کند که ترازهای ارتعاشی متساوی الفاصله باشند. برای انرژیهای بهاندازه کافی بالا، پتانسیل مرس حالت‌های مولکولی نامقید (گسته شده) را تایید می‌کند. این نکته پیشنهاد می‌کند که، حداقل، ترازهای مولکولی باید وقتی انرژی افزایش می‌باید به طرف یک پیوستار سوق داده شوند. بررسی دقیق‌تری از مولکولها می‌تواند درجای دیگری پیدا شود*. برای مورد خاص مولکول دواتمی هم بسته (یعنی، مرکب از اتم‌های مشابه)، تمیزناپذیری دوهسته باید در نظر گرفته شود. این وضعیت را برای مولکول هیدروژن که هسته‌ها (پروتونها) فرمیون‌های با اسپین $\frac{1}{2}$ هستند تشریح می‌کنیم. همانند مورد دو الکترون هلیوم، اگر پروتونها اسپین‌های موازی داشته باشند، برای اسپین کل هسته یک حالت سهگانه (با اسپین $S = 1$) داریم. بعلاوه، تابع اسپینی کل هسته نسبت به تعویض مختصات اسپینی هسته‌ای متقارن است. چون تابع هسته‌ای کل برای فرمیونها باید کلا" پاد متقارن باشد، نتیجه می‌شود که قسمت فضائی حالت سهگانه باید در اثر تعویض مختصات فضائی هسته‌ای تغییر علامت دهد. این تعویض از طریق یک انعکاس نسبت به مرکز جرم هسته‌ها خیلی راحت انجام می‌گیرد. برای اطمینان از پاد متقارن فضائی، شرط می‌کنیم که قسمت فضائی تابع هسته‌ای باید دارای پاریته فرد باشد. چون عدد کوانتموی دورانی K پاریته حالت را تعیین می‌کند، لازم است که K فرد باشد. بنابراین در حالت سهگانه دوپروتون (ارتو هیدروژن) فقط حالت‌های دورانی فرد (یعنی، $K = 1, 3, 5, \dots$) امکان‌پذیر هستند. استدلال مشابهی نشان می‌دهد که در حالت یگانه ($S = 0$) که اسپین‌های پروتونها پاد موازی هستند (پارا هیدروژن) فقط حالت‌های دورانی زوج ($K = 0, 2, 4, \dots$) منجر به تابع حالت‌هایی برای سیستم پروتونی می‌شود که کلا" پاد متقارن است. در نتیجه کوانتش دورانی (K زوج یا فرد) بستگی به حالت اسپین کل هسته‌ای دارد. احتمال اینکه دو پروتون جهت‌های نسبی اسپین‌های خود را عوض کنند کم است. به طور معادل اسپین کل هسته‌ای، S ، در حین گذارها پایسته است و قاعده گزینش $S = 0, \pm 1, \dots$ را خواهیم داشت. معنی این مطلب این است که گذارها می‌توانند بین حالت‌های پارا و پارا یا بین حالت‌های ارتو و ارتو صورت‌گیرند و اینکه دو نمونه گاز هیدروژنی از نظر طیف نمایی متغیر

* به کتاب زیر مراجعه کنید.

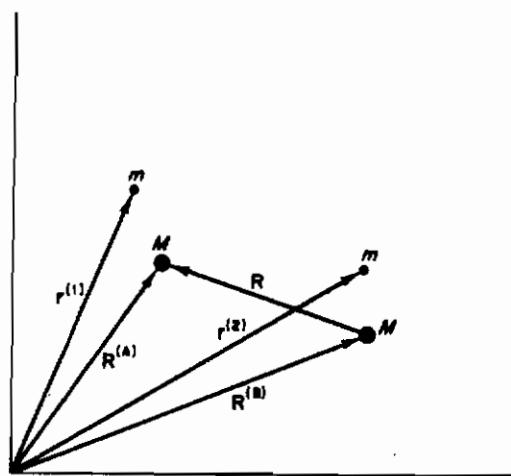
L. pauling and E.B. wilson, Jr. " Introduction to Quantum Mechanics", Chapters 12 and 13, Mc Graw-Hill, New York, 1935.

باقي میمانند.

۹- مولکول هیدرژن و پیوند کوالانت (نظریه لندن^۳ - هایتلر^۴)

مولکول هیدرژن دو الکترون دارد و شاید ساده‌ترین مولکول (خنثی) دو اتمی برای بررسی باشد. به کارگیری روش‌های بخش قبل برای محاسبه شکل پتانسیل مولکولی ($R(U)$) و پیوند بین اینکه یک پیوند کوالانت (هم قطبی) چگونه تشکیل می‌شود آموزنده است. بردن به اینکه یک پیوند کوالانت (هم قطبی) طبق (۱۰-۳۷)، هامیلتونی مولکولی H_2 عبارت است از (شکل ۱۰-۱۵)

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -\frac{\hbar^2}{2M} [\nabla^{(A)2} + \nabla^{(B)2}] - \frac{\hbar^2}{2m} [\nabla^{(1)2} + \nabla^{(2)2}] + \frac{e^2}{|\mathbf{R}^{(A)} - \mathbf{R}^{(B)}|} \\ & + \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}^{(2)}|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{R}^{(A)}|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{R}^{(A)}|} \\ & - \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{R}^{(B)}|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{R}^{(B)}|} \end{aligned} \quad (10-15)$$



شکل (۱۰-۱۵) بردارهای مکانی وابسته به الکترونها (m) و بروتونها (M) در مولکول H_2

با استفاده از تقریب‌بی دررو، و با ثابت نگهداشت $R^{(A)}$ و $R^{(B)}$ و حذف $\nabla^{(A)}$ و $\nabla^{(B)}$ در (۱۰-۱۵)، یک معادله ویژه مقداری برای الکترونها برقرار می‌کنیم. از (۱۰-۴۰) برای

دو الکترون داریم

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} [\nabla^{(1)2} + \nabla^{(2)2}] + V_{\text{tot}}(\mathbf{R}^{(A)}, \mathbf{R}^{(B)}, \mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}) \right\} \Psi_n(\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}, \mathbf{R}^{(A)}, \mathbf{R}^{(B)}) \\ = E_n(R) \Psi_n(\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}, \mathbf{R}^{(A)}, \mathbf{R}^{(B)}) \quad (51-10)$$

که در آن n بیانگر اعداد کوانتومی حالت الکترونی است و $\mathbf{R} = \mathbf{R}^{(B)} - \mathbf{R}^{(A)}$. جمله V_{tot} شامل انرژی پتانسیل‌های داده شده در (۵۰-۱۰) است.

سعی خواهیم کرد که (۵۱-۱۰) را با استفاده از روش‌های پریشیدگی فصل ۷ حل کنیم. فرض می‌کنیم که مولکول از دو اتم هیدروژن بدون برهم‌کنش که در آن الکترون ۱ روی هسته A و الکترون ۲ روی هسته B قراردارد تشکیل شده است. بنابراین هامیلتونی ناپریشیده عبارت است از

$$\mathcal{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^{(1)2} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{R}^{(A)}|} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^{(2)2} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{R}^{(B)}|} \quad (52-10)$$

در صورتی که پریشیدگی نمایانگر برهم‌کنش بین دو اتم است، یعنی،

$$\lambda V = \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}^{(2)}|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{R}^{(B)}|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{R}^{(A)}|} \quad (52-10)$$

هامیلتونی ناپریشیده منجر به یک معادله تفکیک‌پذیر می‌شود و ویژه تابعها نمایانگر یک جفت اتم هیدروژن مجزا هستند؛ قسمت فضایی ویژه تابع می‌تواند به صورت یک حاصل ضرب به‌شکل

$$\Psi_n = \psi_{nlm_1}^{(A)}(1) \psi_{n'l'm_1'}^{(B)}(2) \quad (53-10)$$

نوشته شود که در آن توابع ψ توابع هیدروژنی هستند. اعداد کوانتومی حالت‌های الکترونی دو اتم را مشخص می‌کنند. شاخصهای بالایی بیان می‌دارند که دو ویژه تابع نسبت به مبدأهای واقع بر روی هسته‌های متفاوت در نظر گرفته شده‌اند.

هامیلتونی کل در (۵۱-۱۰) نسبت به جایگشت الکترونها متقارن است. در نتیجه، وقتی مولکول تشکیل شد ذرات تمیزناپذیراند و لازم است که (۵۳-۱۰) را با نوشتن

$$\Psi_n^{\pm} = \psi_{nlm_1}^{(A)}(1) \psi_{n'l'm_1'}^{(B)}(2) \pm \psi_{nlm_1}^{(A)}(2) \psi_{n'l'm_1'}^{(B)}(1) \quad (54-10)$$

به طور مناسبی متقارن کنیم . مثل مورد اتم هلیوم ، قسمت فضایی و متقارن (علامت به اضافه) باید در یک قسمت اسپینی پاد متقارن متناظر یگانه $S = 0$ ، حالتی که در آن دو اسپین الکترونی مختلف الجهت هستند ، ضرب شود . همین طور قسمت پاد متقارن در $(54-10)$ در یک قسمت اسپینی متقارن متناظر با سه گانه $S = 1$ ، حالتی که در آن اسپینهای الکترونها به صورت موازی ترکیب می شوند ، ضرب می شود .

یک اشکال خیلی کوچک ، ناشی از این واقعیت که ما هامیلتونی موجود در $(51-10)$ را که نسبت به جایگشت متقارن است قدری به طور نامتقارن مثل $(52-10)$ تفکیک کرده ایم ، وجود دارد . توجه کنیم که نه $(52-10)$ الف) و نه $(52-10)$ ب) نسبت به شاخصهای الکترونها تقارن جایگشتی ندارند . بنابراین ، اصولاً $(54-10)$ ویژه تابع ψ نیست . اما این اشکال می تواند با متقارن کردن معادلات پریشیدگی برطرف شود .

مناسب است که مبدأ ترازها را طوری انتخاب کنیم که انرژی دو اتم بدون برهم کنش (سیستم ناپریشیده) صفر باشد . در این صورت پتانسیل مولکولی به طور ساده به وسیله تصحیح مرتبه اول ناشی از انرژی برهم کنش ، یعنی ،

$$E_n(R) = \frac{\lambda \int V |\Psi_n^{\pm}|^2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2}{\int |\Psi_n^{\pm}|^2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2} \quad (55-10)$$

داده می شود . مخرج این کسر توابع مولکولی را بهنجار می کند . وقتی جملات شامل $|\psi_{n'l'm_l}(1)\psi_{n'l'm_l}(2)|^2$ را انتگرال گیری می کنیم ، از λ که توسط $(52-10)$ ب) داده شده است برای متقارن کردن $(55-10)$ استفاده می کنیم . از طرف دیگر وقتی جملات به شکل $|\psi_{n'l'm_l}(2)\psi_{n'l'm_l}(1)|^2$ را انتگرال گیری می کنیم ، تبادل $2 \leftrightarrow 1$ را نیز در λ انجام می دهیم . جملات ضربدری در λ در اثر تبادل $2 \leftrightarrow 1$ دست نخورده باقی می مانند .

نشان دادن اینکه $(55-10)$ شکل

$$E^{\pm}(R) = \frac{D \pm I}{1 \pm N} \quad (56-10)$$

را به خود می گیرد که در آن

$$D(R) = \lambda \int V(\mathbf{R}^{(A)}, \mathbf{R}^{(B)}, \mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}) |\psi_{nlm_l}^{(A)}(1)\psi_{nl'm_l}^{(B)}(2)|^2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$$

$$I(R) = \lambda \int V(\mathbf{R}^{(A)}, \mathbf{R}^{(B)}, \mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}) \{ \text{Re } \psi_{nlm_l}^{*(A)}(1)\psi_{nl'm_l}^{*(B)}(2) \times \psi_{nlm_l}^{(A)}(2)\psi_{nl'm_l}^{(B)}(1) \} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$$

$$N(R) = \operatorname{Re} \int \psi_{nlm_l}^{*(A)}(1) \psi_{n'l'm_l'}^{*(B)}(2) \psi_{nlm_l}^{(A)}(2) \psi_{n'l'm_l'}^{(B)}(1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$$

به عنوان تعریف به عهد و خواننده واگذار می‌شود.

ا. ۱۱.۴۰.۱. $I(R)$ و $D(R)$ مدت‌تسبیب همه‌کنش‌های مستقیم و تبادلی بین دو اتم را نشان

غالبی بازی می‌کند. از (۱۰-۵۶) نتیجه می‌شود که برای R متوسط $E^+(R)$ منفی است در صورتی که $E^-(R)$ مثبت است (شکل ۱۰-۱۱). بنابراین برای پیوندهای کوالانت به قواعد زیر می‌رسیم:

(۱) آثار تبادلی کوانتمی در تشکیل یک پیوند کوالانت یا همقطبی پایدار نقش غالبی بازی می‌کنند.

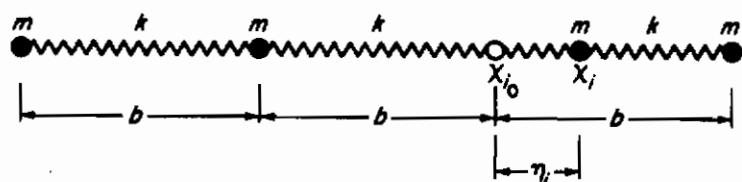
(۲) دو اتم هیدرژن تنها در صورتی یک مولکول پایدار تشکیل می‌دهند که الکترون‌های آنها پاد موازی باشند، یعنی مولکول در حالت $S=0$ ، پیانه، تشکیل می‌شود. وقتی $E^+(R)=U(R)$ (به عنوان مثال در حالت پایه الکترونی) پیدا شد، مشخصات ارتعاشی و دورانی مولکول H_2 می‌تواند مستقیماً با استفاده از روش‌های بخش قبل بدست آید.

۱۰- تبدیل به مختصات بهنجار، شبکه خطی، فونونها

زنجیرکشان خطی یا شبکه خطی مثالی از یک مسئله چند جسمی حقیقی است که می‌تواند دقیقاً حل شود. این سیستم از یک ردیف یک بعدی N جرم نقطه‌ای پکسان که متوسط فنرهای پکسانی به یکدیگر پیوند شده‌اند تشکیل شده است. برای سهولت، فرض خواهیم کرد که فقط حرکتهای طولی، یعنی حرکتهای در امتداد زنجیر، امکان پذیر هستند. شبکه سه‌بعدی، با اینکه قدری پیچیده‌تر از شبکه خطی است، نیز می‌تواند حل شود و نقش مهمی در نظریه ارتعاشات شبکه‌ای جامدات بازی می‌کند. گرچه نیروهای بین اتمی کاملاً "کشان نیستند"، مادامی که تغییر مکان اتمها از وضعیت‌های تعادلشان کوچک است، می‌توانند کشان در نظر گرفته شوند.

هامیلتونی کلاسیکی زنجیر (شکل ۱۰-۱۲) عبارت است از

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{P_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} K(\eta_{i+1} - \eta_i)^2 \quad (10-52)$$



شکل (۱۰-۱۲) یک زنجیر کشان خطی که جرم m ام از وضع تعادلش تغییر مکان داده است.

که در آن $x_i - x_{i_0} = \eta_i$ معرف تغییر مکان جرم نقطه‌ای ، ام از وضع تعادل (درامتداد محور x) است و K ثابت کشسانی فنرها است . این K را با عدد کوانتوموی دورانی بخش ۸ اشتباه نکنید . بهتر است فاصله شبکه‌ای تعادل (بردار شبکه‌ای) را

$$b = x_{(i+1)_0} - x_{i_0}$$

تعریف کنیم و فرض کنیم که زنجیر طویل است * یعنی $b \gg L \gg 1$ ($N \gg 1$) . با اعمال معادلات هامیلتون به (۵۷-۱۵) ، معادلات حرکت زیر را برای جرم ام بددست می‌آوریم

$$\dot{\eta}_i = \frac{P_i}{m} \quad \text{و} \quad \dot{P}_i = K(\eta_{i+1} - \eta_i) - K(\eta_i - \eta_{i-1}) \quad (58-10)$$

از ترکیب این معادلات خواهیم داشت

$$m\ddot{\eta}_i = K(\eta_{i+1} - 2\eta_i + \eta_{i-1}) \quad (i = 1 \dots N) \quad (59-10)$$

معادلات (۵۹-۱۰) مجموعه‌ای از N معادله دیفرانسیل معمولی جفت شده تشکیل می‌دهند زیرا η_{i+1} و η_{i-1} هردو در معادله دیفرانسیل ، ام ظاهر می‌شوند . معادلاتی از این قبیل برای مهندسین برق که با تجزیه و تحلیل مدارهای خطی سروکار دارند آشنا است . جوابهای آنها معمولاً "با استفاده از تبدیلات خطی (به عنوان مثال ، آنالیز فوریه)" بددست می‌آیند .

جفت شدگی در (۵۹-۱۰) از جملات ضربدری $\eta_{i+1} \eta_i$ در هامیلتونی (۵۷-۱۵) ناشی می‌شود ، این جملات بهنوبه خود مربوط به برهم‌کنشهای بین جرم‌های مجاوراند . اگر این جملات نبودند ، هامیلتونی یک سیستم از نوسانگرهای جفت نشده را نشان می‌داد ، ممکن است یک تبدیل خطی به یک مجموعه جدید متغیرهای بندادی ، ξ و η پیدا کرد ، که در آنها هامیلتونی جدید دارای جمله‌های ضربدری نباشد . بهبیان دیگر ، ممکن است برهم‌کنشها را حذف کرد و مسئله جدیدی ایجاد کرد که شامل نوسانگرهای جفت نشده باشد . برای انجام این کار ،

* توجه کنید که جرم‌های واقع در دو انتهای زنجیر تنها یک جرم همسایه دارند ولذا از نظر دینامیکی با جرم‌های درون زنجیر متفاوتند . لیکن وقتی زنجیر طویل باشد آثار انتهایی قابل اغماض است .

$$\eta_i = \sum_{n=1}^N a_{in} \xi_n \quad (60-10)$$

و

$$P_i = \sum_{n=1}^N m a_{in} p_n \quad (60-10)$$

را وارد می‌کنیم. با استفاده از رابطه $P_i = m\ddot{\eta}_i$ ، نتیجه می‌گیریم $\ddot{\xi}_n = p_n$ به‌طوری که مختصات و تکانه‌های بهنجار $\ddot{\xi}_n$ و p_n سیستم‌هایی با جرم واحد را نمایش می‌دهند. ضرایب a_{in} باید طوری انتخاب شوند که وقتی (۶۰-۱۰) در (۵۷-۱۰) قرارداده شد، هامیلتونی جدید به‌صورت

$$H = \sum_{n=1}^N (\frac{1}{2} p_n^2 + \frac{1}{2} \omega_n^2 \xi_n^2) \quad (61-10)$$

درآید. هامیلتونی جدید باید معرف مجموعه‌ای از N نوسانگر جفت‌نشده باشد که هر کدام دارای جرم واحد و یک فرکانس مشخصه ω_n باشد. بعلاوه، هر نوسانگر یا مدد بهنجار یک مجموعه از p_n و ξ_n های خاص خود را دارد. با اعمال معادلات بندادی هامیلتون به (۶۱-۱۰)، برای هر ξ_n معادله حرکتی بدست می‌آوریم که جواب آن عبارت است از*

$$\ddot{\xi}_n = A_n e^{-i\omega_n t} \quad (62-10)$$

A_n یک دامنه مختلطی است (دامنه و فاز) که باید از شرایط اولیه تعیین شود. به‌محض اینکه فرکانس‌های بهنجار ω_n برای هر مد شناخته شدن و ضرایب a_{in} تعیین شدند، (۶۰-۱۰) می‌تواند برای تعیین حرکت جرم نقطه‌ای n ام به‌صورت

$$\eta_i(t) = \sum_{n=1}^N a_{in} A_n e^{-i\omega_n t} \quad (63-10)$$

به‌کار رود.

برای محاسبه ω_n و a_{in} ، (۶۳-۱۰) را در معادله حرکت (۵۹-۱۰) قرار می‌دهیم و نتیجه می‌گیریم

$$m\ddot{\eta}_i = K(\eta_{i+1} - 2\eta_i + \eta_{i-1})$$

* در (۶۲-۱۰) و (۶۳-۱۰) فقط قسمت حقیقی معرف حرکت فیزیکی است.

یا

$$\sum_{n=1}^N -m\omega_n^2 a_{in} A_n e^{-i\omega_n t} = \sum_{n=1}^N K(a_{i+1,n} - 2a_{in} + a_{i-1,n}) A_n e^{-i\omega_n t} \quad (64-10)$$

چون (۶۴-۱۰) باید برای هر ضایعات اولیه‌ای معتبر باشد، باید برای تمام A_n ها برقرار باشد، این فقط در صورتی ممکن است که ضایعات متناظر a_{in} در طرفهای راست و چپ برابر باشند، یعنی،

$$-m\omega_n^2 a_{in} = K(a_{i+1,n} - 2a_{in} + a_{i-1,n}) \quad (i = 1, \dots, N) \quad (65-10)$$

معادله (۶۵-۱۰) مجموعه‌ای از N معادله جبری خطی همگن برای مججهولهای a_{in} تشکیل می‌دهند. جوابهای غیر بدینه‌یی ($a_{in} \neq 0$) فقط برای بعضی از مقادیر ω_n^2 وجود دارند. این مقادیر به وسیله این شرط که دترمینان ضایعات a_{in} در (۶۵-۱۰) صفر باشد به دست می‌آیند. بدین ترتیب به یک معادله جبری درجه N که N ریشه آن مقادیر مجاز ω_n^2 را به دست می‌دهند، هدایت می‌شویم. هر کدام از مقادیر ω_n^2 مجدداً در (۶۵-۱۰) گذاشته می‌شود و مجموعه متناظر ضایعات a_{in} به دست می‌آیند.

محاسبه فرکانس‌های بهنجار ω_n و مجموعه متناظر ضایعات a_{in} حتی برای شبکه‌های نسبتاً کوچک فوق العاده مشکل است. نکته عجیب اینکه، برای مقادیر خیلی بزرگ N ، پیدا کردن جوابهای (۶۵-۱۰) با استفاده از استدلالات مبتنی بر تقارن انتقالی سیستم امکان‌پذیر می‌شود. اگر $N \rightarrow \infty$ ، یک انتقال شبکه به اندازهٔ مضبوی از ثابت شبکه‌ای b هامیلتونی را دست‌نخورده‌های می‌گذارد. این موضوع پیشنهاد می‌کند که ضایعات موجود در (۶۵-۱۰) را به صورت

$$a_{in} = \frac{1}{(Nm)^{1/2}} \exp(ik_n x_{i_0}) \quad (66-10)$$

اختیار کنیم که در آن k_n (بردار موج) ثابتی است که بستگی به مد دارد؛ به طور معادل، در یک مد داده شده حرکت‌های جرم‌های نقطه‌ای حداکثر در فاز با هم تفاوت دارند. از جایگذاری (۶۶-۱۰) در (۶۵-۱۰) محقق می‌شود که "حدس" مادر صورتی درست است که داشته باشیم

$$\begin{aligned} -m\omega_n^2 &= K\{\exp[ik_n(x_{(i+1)_0} - x_{i_0})] - 2 + \exp[-ik_n(x_{i_0} - x_{(i-1)_0})]\} \\ &= 2K[\cos k_n b - 1] \end{aligned}$$

یا

$$\omega_n = \left(\frac{K}{m}\right)^{1/2} \sin \frac{1}{2} k_n b \quad (67-10)$$

وقتی بردارهای موج معلوم شدند، ضرایب (۶۶-۱۰) و فرکانس‌های (۶۷-۱۰) می‌توانند به دست آیند. معادله (۶۷-۱۰) مثالی است از یک رابطه پاشندگی، یعنی، رابطه‌ای بین ω_n و k_n برای شبکه.

یک راه نسبتاً "جالب برای پیدا کردن مقادیر k_n تحمیل شرایط مرزی روی جرم‌های اول و آخر زنگیر است. وقتی $N \rightarrow \infty$ ، می‌توان تصور کرد که هردو نقطه مرزی به بینهایت می‌روند. به طور معادل، می‌توان شرط کرد که هردو حرکتهای یکسانی داشته باشند (شرایط دوره‌ای بورن - فون کارمن^۵). از نظر ریاضی شرط می‌کنیم که

$$\eta_1(t) = \eta_N(t) \quad (68-10)$$

یا، از (۶۵-۱۰)،

$$\sum_{n=1}^N a_{1,n} \xi_n(t) = \sum_{n=1}^N a_{N,n} \xi_n(t)$$

چون این رابطه باید برای هر زمانی معتبر باشد، باید داشته باشیم

$$a_{1,n} = a_{N,n}, \quad \exp(ik_n x_{1_0}) = \exp(ik_n x_{N_0})$$

یا

$$\exp[ik_n(x_{N_0} - x_{1_0})] = e^{ik_n L} = 1 \quad (\text{برای هر } n) \quad (69-10)$$

معادله (۶۹-۱۰) در صورتی و فقط در صورتی می‌تواند برقرار باشد که*

$$k_n = \frac{2\pi n}{L} \quad (n = 1, \dots, N) \quad (70-10)$$

فرکانس‌های بهنجار و ضرایب (۶۷-۱۰) و (۶۶-۱۰) به شکل

۵ - Von Karman

* این انتخاب بخصوص برای "تا حدی دلخواه است و هر مجموعه از N عدد صحیح متوالی می‌تواند مورد استفاده قرار گیرد.

$$\omega_n = \left(\frac{K}{m}\right)^{1/2} \sin \frac{\pi b n}{L}$$

و

$$a_{in} = \frac{1}{(Nm)^{1/2}} \exp\left(\frac{i2\pi x_{i_0} n}{L}\right) \quad (21-10)$$

در می‌آیند. عبور به نظریه کوانتومی به وسیله جایگذاری‌های

$$\eta_i \rightarrow \hat{\eta}_i, \quad P_i \rightarrow \hat{P}_i, \quad \xi_n \rightarrow \hat{\xi}_n, \quad p_n \rightarrow \hat{p}_n$$

و

$$\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} = \sum_{n=1}^N \frac{\hat{p}_n \hat{p}_n}{2} + \frac{1}{2} \omega_n^2 \hat{\xi}_n \hat{\xi}_n \quad (22-10)$$

انجام می‌گیرد. معادله شرودینگر حاصله تفکیک‌پذیر است (زیرا برهمنش وجود ندارد) و
ویژه مقدارهای کل به وسیله حاصل جمع

$$E_{tot} = \sum_{n=1}^N E_{v_n}^{(n)} = \sum_{n=1}^N (v_n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_n \quad (v_n = 0, 1, 2, \dots) \quad (23-10)$$

داده می‌شوند. حالت ارتعاشی شبکه با معلوم بودن اعداد صحیح v_n وابسته به برانگیختگی برای هر کدام از نوسانگرهای مد بهنجار معلوم می‌شود. حالت پایه شبکه وقتی به تحقق می‌پیوندد که تمام v_n ها صفر باشند.
انرژی متناظر با " نقطه صفر " شبکه عبارت است از

$$E_{\text{ground state}} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \hbar \omega_n \quad (24-10)$$

هم ارزی بین یک شبکه کشسان و یک مجموعه از نوسانگرهای مستقل بهنجار فرمولبندی نظری نسبتاً ساده‌ای برای ارتعاشات شبکه ممکن می‌سازد. این روش در توضیح رفتار حرارتی و صوتی مشاهده شده جامدات کاملاً مفید است.

یک راه جالب برای تعبیر طیف انرژی شبکه (۲۳-۱۰) وجود دارد. مفهوم یک شبکه ذره بهنام فونون را وارد می‌کنیم. هر فونون یک فرکانس ω و یک انرژی $\hbar \omega$ دارد. به هر مد بهنجار یک چنین فونونی با همان فرکانس وابسته می‌کنیم. اعداد صحیح برانگیختگی v_n به عنوان تعداد فونونهای موجود با فرکانس ω تعبیر می‌شوند. وقتی هیچ فونونی حضور

نداشته باشد، یعنی، تمام ω ها صفر باشند، یک "حالت تهی" با انرژی

$$\sum_{n=1}^N \frac{1}{2} \hbar \omega_n$$

داریم. چون عدد فونونی n ممکن است تغییر کند، فونونها می‌توانند ایجاد شوند یا از بین بروند. بعلاوه، چون n می‌تواند بزرگتر از یک باشد، بیش از یک فونون می‌توانند دارای یک انرژی $\hbar \omega$ باشند. بنابراین، فونونها می‌توانند به عنوان بوزون‌های تعیین‌ناپذیر در نظر گرفته شوند که از آمار بوز-اینشتین پیروی می‌کنند. اما چون فونونها از نظر تعداد پایسته نیستند، پتانسیل شیمیائی باید مساوی با صفر قرار داده شود و توزیع فونونی خواهد شد

$$\bar{n}_n = \frac{1}{e^{\hbar \omega_n / k_B T} - 1} \quad (n = 1, \dots, N) \quad (75-10)$$

این رابطه، توزیع پلانک برای فوتونها (۲۲-۱) را به یاد می‌آورد. فوتونها کوانتای میدان الکترومغناطیسی هستند.

دو قسمت اول این کتاب "عمدها" با نظریه کوانتومی ذرات غیرنسبیتی سروکار داشت. فرض اینکه تمام تصحیحات نسبیتی می‌توانند از معادلهای کلاسیکی‌شان نتیجه شوند نادرست است. به عنوان مثال، از جملات ساختار ریز نسبیتی در هیدرزن فقط جمله مربوط به تغییر جرم قابل اقتباس از یک شکل کلاسیکی است. جمله اسپین - مداری و جمله داروین هیچ همتای کلاسیکی ندارند. در حالی که ممکن است برهم‌کنش اسپین - مداری را با استفاده از مقایسه بین \S و \P توضیح داد، جمله داروین هیچگونه معادل کلاسیکی ندارد و یک بررسی کوانتومی نسبیتی را طلب می‌کند. در فصل ۱۱ خواهیم دید که هر سه جمله ساختار ریز "مستقیماً" از معادله دیراک برای الکترون نسبیتی نتیجه می‌شوند.

مسائل

۱-۱۰ جابه‌جایی اولین خط بالمر در هیدرزن را وقتی که حرکت هسته‌ای در نظر گرفته می‌شود پیدا کنید. این جابه‌جایی را با تصحیحات ساختار ریز مقایسه کنید.

۲-۱۰ مجموعه‌ای از اتم‌های هیدرزن را در یک جعبه بزرگ در نظر بگیرید که هر کدام به وسیله $e^{ik\cdot R} = \psi$ مشخص می‌شوند. علاوه بر عوامل داخلی (به عنوان مثال، ساختار ریز، تصحیحات مربوط به جرم کاهش یافته، و غیره) آیا هیچ اثر کلاسیکی دیگری ناشی از انتقال، وجود دارد که بتواند روی طیف گسیلی اتمها تاثیر بگذارد؟ عبارتی برای این اثر بنویسید.

۳-۱۰ (الف) نشان دهید که وقتی یک جرم متوجه به یک جرم مشابه دیگری که در آغاز در حال سکون بوده است برخورد کند، جرم اول هرگز نمی‌تواند نسبت به امتداد اولیه‌اش، وقتی در دستگاه مقایسه‌آزمایشگاهی مشاهده شود، بیش از 95° منحرف شود (راهنمایی: از رابطه

$$\frac{\sin \theta}{\cos \theta + 1} = \tan \frac{\theta}{2}$$

استفاده کنید).

(ب) با استفاده از معادله (۱-۵) و رابطه‌ای که بعداز (۱-۸) آمده است نشان دهید که مقطع موثرهای آزمایشگاهی و مرکز جرمی با رابطه

$$\sigma_{\text{lab}} = \left\{ \frac{[1 - (m/M)^2 + 2(m/M) \cos \theta_{\text{c.m.}}]^{3/2}}{1 + (m/M) \cos \theta_{\text{c.m.}}} \right\} \sigma_{\text{c.m.}}$$

به یکدیگر مربوط می‌شوند.

۴-۱۰تابع وردشی برای اتم هلیوم که در معادله (۱۵-۱) داده شده است، می‌تواند به صورت

$$\Psi_{\text{var}}(1, 2) = \psi(1)\psi(2)$$

نوشته شود که در آن

$$\psi(r) = \left(\frac{Z'}{\pi a^3} \right)^{1/2} e^{-Z'r/a}$$

و "بار موثر" عبارت است از $Z' = \frac{2}{\pi} Z$.

- (الف) چگالی بار در اطراف هسته را پیدا کنید . (راهنمایی : فرض کنید که چگالی کترونی عبارت است از مجموع چگالیهای احتمال وابسته به هرتابع الکترونی) .
 (ب) تحقیق کنید که پتانسیل الکتروستاتیکی در اطراف هسته عبارت است از

$$\phi(r) = 2e \left(\frac{1}{r} + \frac{Z'}{a} \right) e^{-2Z'r/a}$$

(راهنمایی : از معادله پواسن استفاده کنید)

- ۵-۱۵ (الف) نشان دهید که انرژی متوسط هر ذره یک گاز ایده‌آل فرمی در $T = 0$ عبارت است از

$$\bar{\epsilon} = \frac{3}{2} \epsilon_F$$

- (ب) نشان دهید که انرژی جنبشی کل گاز الکترونی اتمی ، طبق مدل توماس-فرمی عبارت است از

$$T = \int \tau(r) dr = \int \frac{\hbar^2 (3\pi^2)^{5/3}}{10m\pi^2} [\rho(r)]^{5/3} dr$$

- (ج) عبارتی برای انرژی کل اتم توماس-فرمی بر حسب $\rho(r)$ بنویسید .
 ۶-۱۵ با استفاده از معادله (۲۶-۱۵) و مقادیر مقایص کوانتومی داده شده در متن ، طول موج خط زرد مشخصه سدیم را محاسبه کنید . این خط به مسیله الکترون ظرفیت درگذار $3p \rightarrow 3s$ گسیل می‌شود .

- ۷-۱۵ یک اتم Z الکترونی که در آن هر الکترون به طور مستقل در یک پتانسیل الکتروستاتیکی پوشش شده $V(r)$ حرکت می‌کند در نظر بگیرید .

- (الف) نشان دهید که برای هر الکترون رابطه زیر برقرار است

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

$\hat{H} = \hat{p}^2/2m + V(r)$ هامیلتونی هر الکترون است .

- (ب) با استفاده از نتیجه بالا نشان دهید که

$$\langle \epsilon_i - \epsilon_j | \langle \epsilon_j | \hat{x} | \epsilon_i \rangle \rangle = \frac{i\hbar}{m} \langle \epsilon_j | \hat{p}_x | \epsilon_i \rangle$$

(ج) هردو طرف را در $r_i z$ ضرب کنید و روی \int جمع‌بندی کنید، و با استفاده از قواعد ضرب ماتریسها نشان دهید که

$$\sum_{j=1}^{\infty} (\varepsilon_i - \varepsilon_j) |z_{ji}|^2 = \frac{i\hbar}{m} (2\hat{p}_z)_{ii}$$

یا، با مزدوج کردن دو طرف،

$$\sum_{j=1}^{\infty} (\varepsilon_i - \varepsilon_j) |z_{ji}|^2 = -\frac{i\hbar}{m} (\hat{p}_z^2)_{ii}$$

(د) با جمع کردن معادلات فوق، نشان دهید که

$$\sum_{j=1}^{\infty} (\varepsilon_j - \varepsilon_i) |z_{ji}|^2 = \frac{\hbar^2}{2m}$$

$$\sum_{i=1}^Z \sum_{j=1}^{\infty} (\varepsilon_j - \varepsilon_i) |\mathbf{r}_{ji}|^2 = \frac{3\hbar^2}{2m} Z$$

که در آن

$$|\mathbf{r}_{ji}|^2 = |x_{ji}|^2 + |y_{ji}|^2 + |z_{ji}|^2$$

نتیجه فوق به قاعده جمع نوسانگر موسوم است.

۸-۱۰ یک اتم هلیوم در نظر بگیرید که تابع حالت پایه $(S^1)^T$ عبارت است از

$$\Psi_{He}(1, 2) = \psi_{100}^A(1) \psi_{100}^A(2) \left\{ \frac{|+\frac{1}{2}\rangle^{(1)} |-\frac{1}{2}\rangle^{(2)} - |+\frac{1}{2}\rangle^{(2)} |-\frac{1}{2}\rangle^{(1)}}{\sqrt{2}} \right\}$$

^۸ از نظر شکل هیدرزنی است و نسبت به هسته A در نظر گرفته شده است.

(الف) تابع کل سیستمی را که مرکب از اتم هلیوم فوق و یک اتم هیدرزنی در حالت پایه، با هسته B، است، وقتی دور از یکدیگر قرار دارند بنویسید.

(ب) نشان دهید که وقتی دو اتم پهلوی هم آورده شوند، تنها حالت با تقارن مناسب حالتی است که در آن اثرهای تبادلی، دافعه ایجاد می‌کنند. بهطور معادل، نشان دهید که یک اتم هلیوم نمی‌تواند یک پایدار با هیدرزن تشکیل دهد. این

نتیجه را تعمیم دهید و نشان دهید که آثار تبادلی بین اتمهای گاز می‌باشد منجر به دافعه می‌شوند.

۹-۱۰ در پیوند یونی مولکول NaCl ، الکترون ظرفیت اتم سدیم به اتم کلر منتقل می‌شود. یون Na^+ شبیه به اتم نئون که به طور مشتبه باردار شده است می‌باشد در صورتی که Cl^- کاملاً "شبیه به اتم آرگون" که به طور منفی باردار شده است می‌باشد . بر پایه نتایج مسئله ۸-۱۰ ویژگیهای دافعه و جاذبه پیوند یونی پایدار را توضیح دهید .

۱۰-۱۱ یک پتانسیل مولکولی به شکل

$$U(R) = -\frac{A}{R} + \frac{B}{R^2}$$

در نظر بگیرید .

(الف) محل تعادل و انرژی تجزیه مولکول را بر حسب A و B پیدا کنید .
 (ب) با استفاده از (۱۰-۴۷) عبارتهای تقریبی برای طیفهای دورانی و ارتعاشی بر حسب A و B پیدا کنید .

۱۱-۱۰ نشان دهید که معادله (۱۰-۵۶) از معادله (۱۰-۵۵) نتیجه می‌شود .
 ۱۲-۱۰ رابطه پاشندگی مناسب $\omega(k)$ در شبکه یک بعدی را وقتی که بعد از نزدیکترین همسایه‌ها را شامل می‌شود پیدا کنید .
 ۱۳-۱۰ عبارت انرژی کل یک شبکه مرتعش یک بعدی در دمای T را با فرض اینکه شبکه به موسیله یک گاز فونونی ایده‌آل نمایانده می‌شود بنویسید . گاز فونونی بوزونهایی هستند که در T مار بوز-اینشتین ، با $0 = \mu$ ، صدق می‌کنند .

مراجع پیشنهادی

- Bethe, H. A., and Jackiw, R. W., "Intermediate Quantum Mechanics." 2nd ed. Benjamin, New York., 1968.
- Bethe, H. A., and Salpeter, E. E., "Quantum Mechanics of One and Two Electron Atoms." Springer-Verlag, Berlin, 1957.
- Borowitz, S., "Fundamentals of Quantum Mechanics." Benjamin, New York, 1967.
- Condon, E. U., and Shortley, G. H., "The Theory of Atomic Spectra." Cambridge Univ. Press, London and New York, 1963.
- Eisberg, R. M., "Fundamentals of Modern Physics," Chapter 13. Wiley, New York, 1961.
- Goldstein, H., "Classical Mechanics," Chapter 3. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1950.
- Heitler, W., "Elementary Wave Mechanics," 2nd ed. Oxford Univ. Press, London and New York, 1956.
- Stehle, P., "Quantum Mechanics." Holden-Day, San Francisco, 1966.

قسمت سوم

مکانیک کوانتومی نسبیتی و نظریه میدانها

۱۱

مکانیک کوانتومی نسبیتی

در یک بحث دقیق نظریه کوانتومی نسبیتی از فرمولبندی همورد^۱ یعنی استفاده می‌شود که در آن تمام قوانین در یک فضای چهار بعدی کمزمان به عنوان بعد چهارم آن به کار می‌رود، بیان می‌شوند. مزیت این صورتبندی در این است که متغیرهای زمانی و فضایی خود به خود به طور متقارن در نظر گرفته می‌شوند. هم‌چنین این اطمینان را می‌دهد که قوانین به دست آمده، تحت تبدیلات لورنتس^۲، که بین مشاهده‌پذیرها از دید دوناظر که نسبت به یکدیگر با سرعت ثابت حرکت می‌کنند ارتباطی ایجاد می‌کیند، تغییرناپذیراند.

برای احتراز از پیچیدگی‌های یک بررسی همودرا، تمام کمیت‌های نسبیتی در یک فضای سه‌بعدی معمولی بیان خواهند شد. نتایج به دست آمده در صورتی صحیح فرض می‌شوند که:

- (الف) با همتاها کلاسیکی خود سازگار باشند،
- (ب) نسبت به متغیرهای زمانی و فضایی متقارن باشند،
- (ج) وقتی $c \rightarrow \infty$ باشد به نتایج نظریه شرودینگر منتهی شوند.

۱- معادله کلاین - گوردون

معادله حرکت شرودینگر می‌تواند با وارد کردن عملگر انرژی، $\hat{H} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ ، به دست آید، از مساوی قراردادن این عملگر با عملگرها میلتونی، خواهیم داشت

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi = \hat{\mathcal{E}}\Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) \Psi = i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t} \quad (1-11)$$

که همان نتیجه مطلوب است. از تأمل در (۲-۱۱) آشکار می‌شود که معادله شرودینگر به عنوان یک معادله نسبیتی قابل قبول نیست زیرا از نظر فضائی مشتقات مرتبه دوم (یعنی، ∇^2) ولی از نظر زمانی فقط مشتقات مرتبه اول را در بردارد. دو انتخاب داریم. یا معادله‌ای ایجاد کنیم که نسبت به زمان از مرتبه دوم باشد (معادله کلاین-گوردون) یا اینکه هامیلتونی را نسبت به عملگر تکانه خطی کنیم (معادله دیراک). هردو انتخاب باید در حد غیرنسبیتی به معادله شرودینگر تقلیل پیدا کنند، و در مورد یک ذره در یک میدان الکترو مغناطیسی، هردو باید با رابطه کلاسیکی نسبیتی* هستند.

$$c^2(p - \frac{q}{c} A)^2 + m^2 c^4 = (\varepsilon - q\Phi)^2 \quad (2-11)$$

با دنبال کردن روش کلاین و گوردون، جایگذاریهای

$$\varepsilon \rightarrow \hat{\varepsilon} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad \text{و} \quad p \rightarrow \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$$

را در (۲-۱۱) اعمال می‌کنیم و معادله KG را به شکل

$$\left\{ c^2 \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{q}{c} A \right)^2 + m^2 c^4 \right\} \Psi = \left\{ \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\Phi \right)^2 \right\} \Psi \quad (3-11)$$

بعدست می‌آوریم.

این معادله ابتدا توسط خود شرودینگر در نظر گرفته شد، ولی به علت اینکه منجر به احتمالات منفی می‌شد از آن صرف نظر کرد. معادله KG با شرایط (الف) و (ب) مذکور در فوق سازگار است.

برای میدانهای الکتریکی و مغناطیسی ایستاداریم

$$\left(\frac{\partial A}{\partial t} = \frac{\partial \Phi}{\partial t} = 0 \right)$$

و معادله کلاین-گوردون می‌شود

* از m_0 (به جای m) برای جرم در حال سکون استفاده می‌کنیم. معادله (۲-۸۶) از فصل ۲ را بهینید.

$$\left\{ c^2 \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 + m^2 c^4 \right\} \Psi = \left\{ -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} - 2i\hbar q\Phi \frac{\partial}{\partial t} + q^2 \Phi^2 \right\} \Psi \quad (4-11)$$

بعداً نشان خواهیم داد که معادله KG وقتی $v/c \rightarrow 0$ ، به معادله شرودینگر تقلیل پیدا می‌کند . پس از اینکه از نظر نسبیتی ، انرژی کل ϵ یک سیستم شامل یک قسمت سکون mc^2 است که باید در تابع حالت مکانیک کوانتومی منعکس شود ، لذا بستگی به mc^2 را با بیان تابع حالت به شکل

$$\Psi = e^{-imc^2t/\hbar} \Psi_{kin} \quad (5-11)$$

جدا می‌کنیم . قسمت جنبشی Ψ_{kin} جمله‌ای است که باید با تابع حالت غیرنسبیتی شرودینگر مقایسه شود . با قراردادن (5-11) در (4-11) ، معادله KG برای قسمت جنبشی به صورت زیر به دست می‌آید

$$\begin{aligned} \left\{ c^2 \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 + m^2 c^4 \right\} \Psi_{kin} &= \left\{ \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} + 2i\hbar(mc^2 - q\Phi) \frac{\partial}{\partial t} \right) \right. \\ &\quad \left. - [q\Phi(2mc^2 - q\Phi) + m^2 c^4] \right\} \Psi_{kin} \\ \left\{ c^2 \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 \right\} \Psi_{kin} &= \left\{ -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} + 2i\hbar(mc^2 - q\Phi) \frac{\partial}{\partial t} \right. \\ &\quad \left. - q\Phi(2mc^2 - q\Phi) \right\} \Psi_{kin} \quad (6-11) \end{aligned}$$

اما ، اگر ذره غیرنسبیتی باشد ، انرژی سکون غالب است و جملاتی که در طرف راست (6-11) شامل mc^2 نیستند می‌توانند حذف شوند . لذا برای $c \ll v$ داریم

$$\left\{ \frac{(\hat{\mathbf{p}} - (q/c)\mathbf{A})^2}{2m} + q\Phi \right\} \Psi_{kin} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{kin} \quad (7-11)$$

که تحت عنوان معادله شرودینگر شناخته خواهد شد . چون ویژگی‌های اسپینی در معادله KG حضور ندارند این معادله حاکم بر رفتار بوزون‌های بدون اسپین ، به عنوان مثال ، مزونهای π ، خواهد بود .

می‌توان فرض کرد که ویژه حالت‌های مانای یک ذره KG با زمان به صورت

$$\Psi = e^{-i\varepsilon_i t/\hbar} \psi_i(\mathbf{r})$$

تحول پیدا می‌کنند. از قراردادن این عبارت در (۸-۱۱)، معادله ویژه مقداری انرژی KG به صورت

$$\left\{ c^2 \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 + m^2 c^4 \right\} \psi_i(\mathbf{r}) = (\varepsilon_i - q\Phi)^2 \psi_i(\mathbf{r}) \quad (8-11)$$

به دست می‌آید. اگر (۸-۱۱) را در مورد یک الکترون هیدرژنی که در آن $e = -e$ ، $\mathbf{A} = \mathbf{0}$ ، $q = e/r\Phi$ است به کار ببریم، می‌توانیم نشان دهیم که اثرات اسپینی ظاهر نمی‌شوند. چون این یک مسئله نیروی مرکزی است، (۸-۱۱) با به کارگیری

$$\psi_i = R_{nl}(r) Y_{lm_i}(\theta, \phi)$$

تفکیک پذیر است. مثل مورد غیرنسبیتی، معادله شعاعی طیف انرژی اتم را تعیین می‌کند. بدون اثبات* متذکر می‌شویم که R_{nl} فقط در صورتی در شرایط حالت مقید صدق می‌کند که انرژی توسط

$$\varepsilon_{nl} = mc^2 \left[1 + \frac{\gamma^2}{\{n - (l + \frac{1}{2}) + [(l + \frac{1}{2})^2 - \gamma^2]^{1/2}\}^2} \right]^{-1/2} \quad (9-11)$$

$$(n = 1, 2, 3 \dots; \quad l = 0, 1, \dots, n - 1)$$

که در آن $\gamma = e^2/\hbar c = 1/137$ ثابت ساختار ریز است، داده شده باشد. در حد غیرنسبیتی**، با استفاده از $1 \ll \gamma$ ، ترازهای "هیدرژنی" خواهند شد

$$\varepsilon_{nl} \simeq mc^2 \left\{ 1 - \frac{\gamma^2}{2n^2} - \frac{\gamma^4}{2n^4} \left(\frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right\} + (\text{جملاتی از مرتبه } \gamma^6) \quad (10-11)$$

* به عنوان مثال به کتاب زیر مراجعه کنید

L.I. Schiff, "Quantum Mechanics," 3rd ed. P.470, Mc Graw-Hill, New York 1968.

** در واقع می‌توان اثبات کرد که سرعت الکترون در اولین مدار بوده برابر $v = e^2/\hbar$ است. بنابراین رابطه $v^2/\hbar c = v/c = 1/137$ نشان می‌دهد که الکترون در یک حالت مقید هیدرژن بهوضوح غیرنسبیتی است.

جمله اول دقیقاً انرژی سکون ذره است . جمله بعدی عبارت است از

$$-\frac{mc^2\gamma^2}{2n^2} = \frac{\epsilon_1}{n^2} = \epsilon_n$$

که همان فرمول بوهر است ، جملات آخر از ساختار ریز ناشی می شوند و به صورت زیر در می آیند

$$\epsilon_{rs} = \epsilon_n \frac{\gamma^2}{n} \left[\frac{1}{(l+\frac{1}{2})} - \frac{3}{4n} \right] \quad (11-11)$$

از مقایسه این نتیجه با (۱۱-۵۱) می بینیم که (۱۱-۱۱) در صورتی صحیح خواهد بود که / ، به جای عدد صحیح ، عدد نیمه صحیح (یعنی ، $z = 1$) باشد . مسلماً ، (۱۱-۱۱) معرف ساختار ریز بدون اسپین ، مثل مورد یک اتم مزونی (به عنوان مثال ، یک اتم هیدروژن که به جای الکترون آن یک مزون π نشسته است) می باشد .

۲- معادله دیراک

دیراک در یک مقاله کلاسیک (۱۹۲۸) یک شق دیگری از معادله کلاین - گوردون را راهنمود . این معادله در حالی که تمام خواسته های نسبیتی را تامین می کرد ، وجود یک اسپین ذاتی را در حد غیرنسبیتی نیز ایجاد می کرد . نه تنها این اسپین برابر با $\frac{1}{2}$ بود ، بلکه جملات ساختار ریز که برای یک ذره دیراک در یک میدان کولنی به دست می آمدند با جملات مشاهده شده در طبقه هیدروژن توافق داشتند . تردیدی نیست که الکترون نسبیتی ذره ای است که از معادله دیراک پیروی می کند . یعنی ، یک ذره دیراک است .
دیراک شکل خطی معادله شرودینگر ، یعنی

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi = \hat{\mathbf{p}}\Psi = i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t} \quad (12-11)$$

را انتخاب کرد . چون $\hat{\mathcal{H}}$ باید نسبت به $\hat{\mathbf{p}}$ خطی باشد ، دیراک شکل

$$\hat{\mathcal{H}} = c\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \beta m_0 c^2 \quad (13-11)$$

را پیشنهاد کرد . ماهیت عملگرهای هرمیتی $\hat{\mathbf{A}}$ و $\hat{\mathbf{p}}$ در زیر تعیین خواهد شد . با استفاده از

جایگذاریهای (جایگذاری "کمینه‌ای")

$$\hat{p} \rightarrow \hat{p} - \frac{q}{c} A \quad \text{و} \quad \hat{\theta} \rightarrow \hat{\theta} - q\Phi \quad (14-11)$$

معادله حرکت دیراک (۱۲-۱۱) برای یک ذره در یک میدان الکترومغناطیسی خواهد شد

$$\left\{ c\hat{a} \cdot \left(\hat{p} - \frac{q}{c} A \right) + \beta m_0 c^2 \right\} \Psi = \left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\Phi \right\} \Psi \quad (15-11)$$

با "مجذور" کردن (تأثیردادن مجدد عملگرها) طرفین (۱۱-۵) نتیجه می‌گیریم

$$\left\{ c\hat{a} \cdot \left(\hat{p} - \frac{q}{c} A \right) + \beta mc^2 \right\}^2 \Psi = \left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\Phi \right\}^2 \Psi \quad (16-11)$$

طرف راست همان طرف راست معادله KG است. طرف چپ در صورتی با (۱۱-۳) مطابقت می‌کند که اگر و فقط اگر α و β با \hat{p} و $\hat{\theta}$ جایه‌جاپذیر باشند و روابط زیر نیز برقرار باشند

$$[\hat{\alpha}_i, \hat{\alpha}_j]_+ = 2\delta_{ij}\hat{1}, \quad [\hat{\alpha}_i, \beta]_+ = 0, \quad \text{و} \quad \beta^2 = \hat{1} \quad (17-11)$$

این روابط جایه‌جائی تضمین می‌کنند که جملات ضربدری ناشی از "مجذور کردن" طرف چپ (۱۶-۱۱) حذف شوند.

ویژگیهای روابط جایه‌جائی عملگرها α و β کاملاً شبیه به روابط جایه‌جائی ماتریسهای پاولی هستند. این شباهت پیشنهاد می‌کند که ماتریسهای 4×4 زیر را بسازیم

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_i \\ \hat{\sigma}_i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{و} \quad \beta = \begin{pmatrix} \hat{1} & 0 \\ 0 & -\hat{1} \end{pmatrix} \quad (18-11)$$

که در آن $\hat{\sigma}_i$ ها ماتریسهایی هستند 2×2 که به وسیله (۱۷-۲) داده شده‌اند. معادلات (۱۸-۱۱) مخفف ماتریسهای زیراند

$$\alpha_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (19-11)$$

$$\alpha_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

جایگذاری مستقیم محقق می‌دارد که این ماتریسها واقعاً در روابط جابه‌جایی (۱۱-۱۷) صدق می‌کنند*. بنابراین معادله دیراک (۱۱-۱۵) می‌تواند به عنوان یک معادله دیفرانسیل ماتریسی ۴×۴ برای تابع حالت چهار مولفه‌ای (اسپینور)

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi^{(1)} \\ \Psi^{(2)} \\ \Psi^{(3)} \\ \Psi^{(4)} \end{pmatrix} \quad (20-11)$$

در نظر گرفته شود . یا به طور معادل ، این معادله می‌تواند به عنوان مجموعه‌ای از چهار معادله دیفرانسیل جفت شده برای مولفه‌های Ψ در نظر گرفته شود .
ویژه حالتهای مانای انرژی با در نظر گرفتن

$$\Psi = e^{-i\epsilon_i t/\hbar} \psi_i(\mathbf{r})$$

به دست می‌آیند که وقتی در (۱۱-۱۵) قرار داده شود معادله ویژه مقداری انرژی دیراک را به صورت زیر به دست می‌دهد

$$\left\{ c\alpha \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) + q\Phi + \hat{\beta}mc^2 \right\} \psi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \psi_i(\mathbf{r}) \quad (21-11)$$

فرض می‌کنیم که A و Φ معرف میدانهای ایستا هستند .

۳- ذرات آزاد دیراک

معادله (ویژه مقداری انرژی) دیراک برای یک ذره آزاد ($\mathbf{A} = \Phi = 0$) عبارت است از

$$\left\{ c\frac{\hbar}{i}\alpha \cdot \nabla + \hat{\beta}mc^2 \right\} \psi_p = \epsilon_p \psi_p \quad (22-11)$$

در مقایسه با مورد غیرنسبیتی ، فرض می‌کنیم که جواب ، یک ویژه تابع تکانه به شکل زیر است
$$\psi_p = |u_p\rangle e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar} \quad (23-11)$$

* این نهایش بخصوص برای α و β ، هرچند یکتا نیست ، ولی اغلب مورد استفاده قرار می‌گیرد .

که دامنه آن اسپینور چهار مولفه‌ای

$$|u_p\rangle = \begin{pmatrix} u_p^{(1)} \\ u_p^{(2)} \\ u_p^{(3)} \\ u_p^{(4)} \end{pmatrix}$$

است. با قراردادن (۱۱-۲۳) در (۱۱-۲۲) معادله ویژه مقداری ماتریسی 4×4

$$\{cp \cdot \alpha + \beta mc^2\} |u_p\rangle = \varepsilon_p |u_p\rangle \quad (24-11)$$

به دست می‌آید. نشان دادن اینکه ویژه مقدارهای (۱۱-۲۴) عبارتنداز

$$\varepsilon_p^+ = (c^2 p^2 + m^2 c^4)^{1/2} \quad \text{و} \quad \varepsilon_p^- = -(c^2 p^2 + m^2 c^4)^{1/2} \quad (25-11)$$

به عنوان یک تعریف و اگذار می‌شود (رک مسئله ۱-۳). در زیرنشان خواهیم داد که حالت‌های انرژی منفی نباید به عنوان زاید و نامربوط کنار گذاشته شوند. نتیجه می‌شود که ویژه بردارها برای انرژی مشبّت عبارتنداز

$$|u_{p\uparrow}^+\rangle = N_p \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{cp_z}{\varepsilon_p^+ + mc^2} \\ \frac{c(p_x - ip_y)}{\varepsilon_p^+ + mc^2} \end{pmatrix} \quad \text{و} \quad |u_{p\downarrow}^+\rangle = N_p \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{c(p_x - ip_y)}{\varepsilon_p^+ + mc^2} \\ \frac{-cp_z}{\varepsilon_p^+ + mc^2} \end{pmatrix} \quad (26-11\text{ الف})$$

که در آن N_p یک ثابت بهنجارش است. "پیکانها" برای تمايز بین دو حالت انرژی مشبّت به کار می‌روند و، همان‌طور که خواهیم دید، جهت اسپین (بالا یا پائین) ذره دیراک را نشان می‌دهند. حالت‌های انرژی منفی دارای دامنه‌هایی به صورت زیراند

$$|u_{p\uparrow}^-\rangle = N_p \begin{pmatrix} -cp_z \\ -\varepsilon_p^- + mc^2 \\ \frac{-c(p_x + ip_y)}{-\varepsilon_p^- + mc^2} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{و} \quad |u_{p\downarrow}^-\rangle = N_p \begin{pmatrix} -c(p_x - ip_y) \\ -\varepsilon_p^- + mc^2 \\ \frac{cp_z}{-\varepsilon_p^- + mc^2} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (26-11\text{ ب})$$

هر چهار اسپینور فوق می‌توانند بر طبق $|u_p|u_p\rangle = 1$ با قراردادن

$$N_p = \left[\frac{\varepsilon_p^+ + mc^2}{2\varepsilon_p^+} \right]^{1/2}$$

بهنجار شوند. حالت کل بهوسیله تکانه آن، p ، اسپین (بالا یا پائین) آن، و نوع انرژی (ثبت یا منفی) آن، مشخص می‌شود. به عنوان مثال، یک ذره که در امتداد محور z با انرژی منفی و اسپین بالا حرکت می‌کند، بهوسیله

$$\psi_{p\uparrow}^- = |u_{p\uparrow}^-\rangle e^{ip_z z/\hbar} = N_p \begin{pmatrix} -cp_z \\ -\varepsilon_p^- + mc^2 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{ip_z z/\hbar}$$

با انرژی

$$\varepsilon_p = \varepsilon_p^- = -(p_z^2 c^2 + m^2 c^4)^{1/2}$$

نشان داده می‌شود.

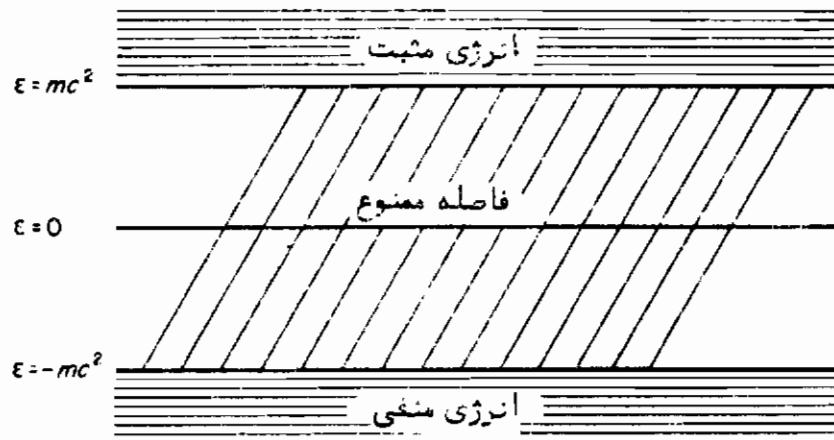
اثبات اینکه برای حالتهای انرژی ثابت، دو مولفه پائین (۲۶-۱۱ الف) نسبت به دو مولفه بالائی از مرتبه c/v هستند به عنوان یک تعریف واکذار می‌شود (رک مسئله ۱۱-۵). بنابراین، در حد غیرنسبیتی، مولفه‌های پائین کوچک‌اند و می‌توانند نادیده گرفته شوند. وقتی $0 \rightarrow c/v$ ، ویژه تابعهای انرژی ثابت متناظر با حالتهای غیرنسبیتی ذره‌اند، و بنابر این ویژگی‌های این حالتها بهوسیله دو مولفه بالائی (۲۶-۱۱ الف) تعیین می‌شوند. در حد غیرنسبیتی، تابع حالتهای نسبیتی (۲۶-۱۱ الف) به اسپینورهای مولفه‌ای $e^{ip_z z/\hbar} ({}_0^1)$ و $e^{ip_z z/\hbar} ({}_1^0) = {}_0^1 e^{ip_z z/\hbar}$ تقلیل می‌یابند که به ترتیب معرف یک ذره آزاد با اسپین $\frac{1}{2}$ در جهت "بالا" و در جهت "پائین" می‌باشد.

۴- حالتهای انرژی منفی

همان‌طور که در بالا ذکر شد، حالتهای انرژی منفی نمی‌توانند به عنوان جوابهای نامربوط‌کنار گذاشته شوند؛ در زیر نشان می‌دهیم که این حالتهای معنی فیزیکی دارند. طیف ذره آزاد پیوسته است و از $+\infty$ تا $-mc^2$ ، به جز برای یک فاصله، معنوع، $<\epsilon|mc^2>$

تسترد است . (سکل ۱-۱۱) .

دیراک پیشنهاد کرد که در طبیعت بینهایت الکترون - بیش از آنچه که برای پرکردن حالت های انرژی منفی لازم باشد - وجود دارد . اصل پاولی جمعیت هر حالت یک ذره آزاد را به یک الکترون محدود می کند . حالت های انرژی منفی کاملاً پر فرض می شوند . این "دریای " بینهایت فرمی از الکترون های با انرژی منفی یک چئالی بار یکنواختی در همه جای فضا ایجاد می کند . قانون گاوس ایجاد می کند که میدان در مرکز یک کره که به طور یکنواخت باردار شده است ، صفر باشد . چون شعاع این کره می تواند به سمت بینهایت میل کند ، و هر نقطه از فضا می تواند به عنوان مرکز کره در نظر گرفته شود ، به این نتیجه می رسیم که یک توزیع بار با چئالی یکنواخت در یک گستره نامحدود همچو میدان قابل مشاهده ای ایجاد نمی کند . حالتی که در آن دقیقاً "آنقدر الکترون وجود دارد که تراز های منفی را پر کنند حالت خلا" نامیده می شود . هر ذره اضافی باید در حالت های انرژی مثبت قرار گیرد و به عنوان الکترون مشاهده می شود .



شکل (۱-۱۱) دیاگرام تراز انرژی برای ذرات آزاد دیراک .

از حالت خلا شروع می کیم . با جذب یک فوتون باید برانگیختن یک الکترون با انرژی منفی به تراز مثبت اسکان ہذیر باشد . جای خالی یا "حفره" به جای مانده این الکترون یکنواختی دریای فرمی را از بین می برد . میدان ایجاد شده به وسیله این حفره معادل با میدانی است که یک ذره با بار مخالف بار الکترون ایجاد می کند . این حفره به صورت یک الکترون مثبت - یک پوزیترون - که پاد ذره الکترون است مشاهده می شود . فرایندی که در آن یک فوتون جذب می شود و یک جفت الکترون - پوزیترون از خلا به وجود می آید "افرینش جفت" نامیده می شود . کمترین انرژی لازم فوتون عبارت است از

$$mc^2 - (-mc^2) = 2mc^2 = \hbar\omega \approx 1 \text{ MeV}$$

فوتونی با این انرژی متاظر با یک کوانتای اشعه نیست و قطبی یک فوتون اشعه نیست از بین می‌رود و یک جفت الکترون - پوزیترون به وجود می‌آید هم تکانه و هم انرژی هردو پایسته باشند، به عنوان تمرین بهخواننده واگذار می‌شود. چون هم تکانه و هم انرژی، هردو، باید پایسته باشند، این فرایند تنها در حضور یک میدان خارجی مثل میدان یک هسته اتمی، که مقداری از تکانه را جذب می‌کند، رخ می‌دهد. فرایند معکوس (نابودی جفت) وقتی رخ می‌دهد که الکترون بازگشت کند و حفره را پر نماید، و بدین وسیله یک جفت فوتون اشعه نیاز ندارد. چون دوفوتون در این فرایندگسیل می‌شود، انرژی و تکانه می‌توانند به طور همزمان، بدون نیاز به هیچ جرم اضافی مثل هسته، پایسته باشند. توجه کنیم که این تعبیر حالتهای انرژی منفی نمی‌تواند به ذرات کلاین - گوردون اعمال شود زیرا آنها بوزوشهای هستند که از اصل طرد پاولی پیروی نمی‌کنند.

۵ - یک ذره دیراک در یک میدان ایستا

معادله ویژه مقداری انرژی دیراک (۲۷-۱۱) برای یک ذره در یک میدان الکتروستاتیک ایستا (الکتروستاتیک) ($\mathbf{E} = -\nabla\Phi$) و یک میدان مغناطیسی ایستا (ماگنتوستاتیک) ($\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$) عبارت است از

$$\left\{ c\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right) \cdot \hat{\mathbf{e}} + \beta mc^2 + q\Phi \right\} \psi_i = \varepsilon_i \psi_i \quad (27-11)$$

که در آن

$$\psi_i = \begin{pmatrix} \psi_i^{(1)} \\ \psi_i^{(2)} \\ \psi_i^{(3)} \\ \psi_i^{(4)} \end{pmatrix}$$

معادله (۲۷-۱۱) معادل است با دو معادله جفت شده،

$$\left\{ c\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right) \cdot \hat{\mathbf{e}} \right\} \psi_i^{(B)} + (mc^2 + q\Phi)\psi_i^{(A)} = \varepsilon_i \psi_i^{(A)} \quad (28-11)$$

$$\left\{ c\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right) \cdot \hat{\mathbf{e}} \right\} \psi_i^{(A)} - (mc^2 - q\Phi)\psi_i^{(B)} = \varepsilon_i \psi_i^{(B)}$$

که در آنها

$$\psi_i^{(A)} = \begin{pmatrix} \psi_i^{(1)} \\ \psi_i^{(2)} \end{pmatrix} \quad \text{و} \quad \psi_i^{(B)} = \begin{pmatrix} \psi_i^{(3)} \\ \psi_i^{(4)} \end{pmatrix}$$

مولفه‌های بالائی و پائینی و پیزه‌تابع چهار مولفه‌ای دیراک هستند. برای تفکیک این معادلات نخست دومی را حل می‌کنیم و نتیجه می‌گیریم

$$\psi_i^{(B)} = \left\{ \frac{c(\hat{\mathbf{p}} - (q/c) \mathbf{A}) \cdot \hat{\mathbf{o}}}{\varepsilon_i - q\Phi + mc^2} \right\} \psi_i^{(A)} \quad (29-11)$$

با قرار دادن این نتیجه در معادله اول خواهیم داشت

$$\begin{aligned} c^2 \left\{ \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \cdot \hat{\mathbf{o}} (\varepsilon_i - q\Phi + mc^2)^{-1} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \cdot \hat{\mathbf{o}} \right\} \psi_i^{(A)} + (mc^2 + q\Phi) \psi_i^{(A)} \\ = \varepsilon_i \psi_i^{(A)}. \end{aligned} \quad (30-11)$$

در حد غیرنسبیتی، $(30-11)$ در مقابل $(29-11)$ قابل صرفنظر کردن است؛ در حد $v/c \rightarrow 0$ ، رفتار این ذره کلاً "بعوسیله $(30-11)$ " تعیین می‌شود. به علاوه، در حد غیرنسبیتی، انرژی غیرنسبیتی کل $mc^2 - \varepsilon_i = \varepsilon'_i$ و انرژی پتانسیل $q\Phi$ خیلی کوچک‌تر از انرژی سکون هستند. می‌توان بسط زیر را انجام داد

$$\begin{aligned} (\varepsilon_i - q\Phi + mc^2)^{-1} &= (\varepsilon'_i - q\Phi + 2mc^2)^{-1} \\ &\simeq \frac{1}{2mc^2} \left[1 - \frac{\varepsilon'_i - q\Phi}{2mc^2} + \dots \right] \end{aligned} \quad (31-11)$$

در حد نهایی غیرنسبیتی، فقط جمله‌اول طرف راست $(31-11)$ را نگه می‌داریم و $(30-11)$ می‌شود

$$\left\{ \frac{[(\hat{\mathbf{p}} - (q/c) \mathbf{A}) \cdot \hat{\mathbf{o}}]^2}{2m} + q\Phi \right\} \psi_i^{(A)} = \varepsilon'_i \psi_i^{(A)} \quad (32-11)$$

برای نشان دادن اینکه چگونه اسپین به صورت پک نتیجه طبیعی معادله دیراک در حد غیرنسبیتی حاصل می‌شود، $(32-11)$ را با وارد کردن اتحادهای عملگری زیر ساده می‌کنیم*

* توجه کنید که حاصل ضرب برداری دو عملگر یکسان در (ب) صفر نیست. این بدان علت است که مؤلفه‌های $\hat{\mathbf{o}}$ و \mathbf{A} جابجا‌پذیر نیستند.

(الف)

$$(\hat{\theta} \cdot \vec{U})(\hat{\theta} \cdot \vec{V}) = \vec{U} \cdot \vec{V} + i\hat{\theta} \cdot (\vec{U} \times \vec{V})$$

$$[\hat{\theta}, \vec{U}] = [\hat{\theta}, \vec{V}] = 0$$

(۳۳-۱۱ الف)

و (ب)

$$\left(\hat{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A}\right) \times \left(\hat{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A}\right) = \frac{iq\hbar}{c} \nabla \times \mathbf{A} = \frac{iq\hbar}{c} \mathbf{B} \quad \left(\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla\right)$$

(۳۳-۱۱ ب)

با قراردادن $\mathbf{A} = \mathbf{V} = \hat{p} - \frac{q}{c}$ (۳۲-۱۱) خواهد شد

$$\left\{ \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{q}{mc} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} + q\Phi \right\} \psi_i^{(A)} = \varepsilon_i' \psi_i^{(A)}$$

(۳۴-۱۱)

که در آن $\hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2}\hbar\hat{\mathbf{e}}$

معادله (۳۴-۱۱) با معادله ویژه مقداری انرژی غیرنسبیتی شرودینگر با تعیین پاولی، یکسان است. جمله اول هامیلتونی طرف چپ (۳۴-۱۱) شامل انرژی جنبشی و برهم‌کنش مداری با میدان \mathbf{B} است. جملات دوم و سوم به ترتیب برهم‌کنشهای اسپین - مغناطیسی و الکتروستاتیکی هستند.

بنابراین، در حد غیرنسبیتی، یک ذره دیراگ دارای ویژگیهای اسپین - مغناطیسی است. قابل توجه است که این جنبه، که از ملاحظات نسبیتی نشأت گرفته است، در حد $v/c \rightarrow 0$ محفوظ می‌ماند. همچنین توجه کنیم که گشتاور دوقطبی اسپینی در (۳۴-۱۱) به‌طور صحیحی به صورت

$$\mu_s = \frac{g_s q \hat{\mathbf{S}}}{2mc} = \frac{q \hat{\mathbf{S}}}{mc}$$

داده می‌شود، در این رابطه ضریب زیرو مغناطیسی برابر است با $g_s = 2$ ، مقداری که به‌طور تجربی برای الکترون مشاهده شده است.

جالب توجه است که تصحیحات نسبیتی مهم در (۳۵-۱۱) را در موردی که $\mathbf{A} = 0$ است و $q\Phi = V(r)$ یک پتانسیل نیروی مرکزی است، در نظر نگیریم. این وضعیت، وقتی قرار دهیم $V = -e^2/r$ ، متناظر با یک الکترون هیدرژنی است. با بردن (۳۱-۱۱) در (۳۵-۱۱)، نتیجه می‌گیریم

$$\left\{ \left[\frac{\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{e}} (1 - [\varepsilon_i' - V(r)]/2mc^2) \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{e}}}{2m} \right] + V(r) \right\} \psi_i^{(A)} = \varepsilon_i' \psi_i^{(A)} \quad (35-11)$$

در این مورد $T = \varepsilon_i' - V(r) = \hat{p}^2/2m$ انرژی جنبشی غیرنسبیتی ذره است. با استفاده از اتحادهای (۳۳-۱۱) و خواص عملگرهای $\hat{\mathbf{e}}$ و $\hat{\mathbf{p}} = (\hbar/i)\nabla$ اتحاد زیر می‌تواند برقرار گردد

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{e}}) \left[1 - \frac{(\varepsilon_i' - V)}{2mc^2} \right] (\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{e}}) \\ &= \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2} - \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} \nabla V \cdot \nabla + \frac{\hbar}{4m^2c^2} \hat{\mathbf{e}} \cdot \nabla V \times \hat{\mathbf{p}} \end{aligned} \quad (36-11)$$

با استفاده از این رابطه و توجه به اینکه برای میدانهای مرکزی داریم

$$\nabla V = \frac{dV}{dr} \frac{\mathbf{r}}{r}$$

(۳۵-۱۱)، بعد از جمع و جورکردن جملات، می‌شود

$$\begin{aligned} & \left\{ \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V \right) - \frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2} + \frac{\hbar}{4m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \hat{\mathbf{e}} \cdot (\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}) - \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} \frac{dV}{dr} \frac{\partial}{\partial r} \right\} \psi_i^{(A)} \\ &= \varepsilon_i' \psi_i^{(A)} \end{aligned} \quad (37-11)$$

دو جمله اول طرف چپ نمایشگر هامیلتونی غیرنسبیتی هستند، جمله سوم جمله منوط به تغییر جرم است که تصحیحات نسبیتی بر جسته انرژی جنبشی را تأمین می‌کند. جمله چهارم می‌تواند به صورت

$$\Delta E = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$$

با در مورد هیدرزن به صورت

$$\Delta E = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{e^2}{r^3} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$$

نوشته شود . این جمله مانند جمله به دست آمده در (۳۵-۶) جمله برهمنکش اسپین - مدار نامیده می شود ، و در آن ضریب تقدیمی توomas $\frac{1}{3}$ به طور طبیعی ظاهر شده است .
جمله پنجم جمله داروین است که اشاره به بحثمان از ساختار ریز در فصل ۷ دارد . در هیدرژن ، جمله داروین تصحیحات مرتبه اول انرژی را فقط در حالتهای $\ell = 0$ ایجاد می کند . این تصحیحات به وسیله

$$\Delta E \propto \langle n, l | \frac{dV}{dr} \frac{\partial}{\partial r} | n, l \rangle \rightarrow \int_0^\infty R_{nl} \frac{dV}{dr} \frac{dR_{nl}}{dr} r^2 dr$$

داده می شوند . برای هیدرژن $V = -e^2/r$ این رابطه خواهد شد

$$\begin{aligned} \Delta E &\propto e^2 \int_0^\infty R_{nl} \frac{1}{r^2} \frac{dR_{nl}}{dr} r^2 dr \\ &= e^2 \int_0^\infty R_{nl} dR_{nl} = \frac{1}{2} e^2 \left| R_{nl}^2 \right|_0^\infty \end{aligned}$$

پادآوری کنیم که R_{nl} در بینهایت ، برای تمام حالتها مقید ، صفر می شود . چون اینتابع در مبدأ نیز برای تمام حالتها به استثنای حالتهاي $\ell = 0$ صفر می شود ، تصحیحات انرژی فقط برای این حالتها وجود دارد .

بنابراین اثرات ساختار ریز در هیدرژن آثارنسبیتی مرتبه اول معادله دیراک هستند . در نتیجه می توانیم یک ذره دیراک را یک الکترون نسبیتی بدانیم .

۶- ذره دیراک در یک پتانسیل کولنی - ساختار ریز در هیدرژن

می توان انرژی ساختار ریز الکترون هیدرژنی را با اعمال نظریه پریشیدگی مرتبه اول به مسه جمله ساختار ریز در (۱۱-۳۷) ، محاسبه کرد . اما در مورد خاص یک پتانسیل کولنی حل دقیق معادله دیراک امکان پذیر است . ویژه مقدارهای دقیق انرژی می توانند بر حسب توانهای ثابت ساختار ریز بیان شوند ، و جملات عده نگه داشته شوند . چون این روش بسیار پیچیده است ، ما فقط خلاصه مراحل کار را بیان می کنیم و نتایج را فهرست می کنیم .
معادله دیراک (۱۱-۳۷) برای پتانسیل کولنی عبارت است از

$$\left\{ c\alpha \cdot \beta + \beta mc^2 - \frac{e^2}{r} \right\} \psi = \epsilon \psi \quad (11-38)$$

گرچه بهنظر می‌رسد که (۳۸-۱۱) معرف یک مسئله نیروی مرکزی است، اما نمی‌توان با بهکار بردن $R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta, \phi)$ متغیرها را از هم تفکیک کرد، زیرا خود معادله جفت‌شدگی اسپین-مدار را در بر دارد و L_z پایسته نیست. به طور معادل، m_l یک عدد کوانتومی "خوب" نیست. برای انجام یک تفکیک، دو دسته جواب زیر را وارد می‌کنیم

$$\psi_{lj\pm m_l} = \begin{pmatrix} u(r) \left[\frac{l \pm m_l + \frac{1}{2}}{2l+1} \right]^{1/2} Y_{l, m_l - \frac{1}{2}} \\ \mp u(r) \left[\frac{l \mp m_l + \frac{1}{2}}{2l+1} \right]^{1/2} Y_{l, m_l + \frac{1}{2}} \\ - iv(r) \left[\frac{(l \pm 1) \mp (m_l \mp \frac{1}{2})}{(2l+1) \pm 2} \right]^{1/2} Y_{l \pm 1, m_l - \frac{1}{2}} \\ \mp iv(r) \left[\frac{(l \pm 1) \pm (m_l \pm \frac{1}{2})}{(2l+1) \pm 2} \right]^{1/2} Y_{l \pm 1, m_l + \frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad (۳۹-۱۱)$$

که در آن $\frac{1}{2} j^2 = l \pm m_l$ و $j \leq |m_l|$. با بیان (۳۸-۱۱) در مختصات کروی و قراردادن (۳۹-۱۱) در آن، به معادلات زیر برای قسمتهای شعاعی $u(r)$ و $v(r)$ هدایت می‌شویم

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar c} \left\{ \epsilon_l + \frac{e^2}{r} + mc^2 \right\} v &= \frac{du}{dr} + \frac{(1+k)u}{r} \\ \frac{1}{\hbar c} \left\{ \epsilon_l + \frac{e^2}{r} - mc^2 \right\} u &= -\frac{dv}{dr} - \frac{(1-k)v}{r} \end{aligned} \quad (۴۰-۱۱)$$

که در آنها

$$k = -(l+1) \quad (\text{برای } +\psi)$$

$$k = l \quad (\text{برای } -\psi)$$

این معادلات بهروشی مشابه با روش بهکار برده شده در معادلات شعاعی غیرنسبیتی مورد بررسی قرار می‌گیرند. شرایط حالت مقید* روی u و v در صورتی می‌توانند برقرار شوند که

* برای جزئیات بهیکی از دو مرجع زیر مراجعه کنید

L.I.Schiff, "Quantum Mechanics." 3rd ed. P.485, McGraw-Hill, New York, 1968.
H.A.Bethe and E.E.Salpeter, "Quantum Mechanics of one and two Electron Atomes," P. 65, Springer-Verlag, Berlin, 1957.

اگر و تنها اگر ϵ به مقادیر زیر محدود شود

$$\epsilon_i = \epsilon_{n'k} = mc^2 \left\{ 1 + \frac{\gamma^2}{[(k^2 - \gamma^2)^{1/2} + n']^2} \right\}^{-1/2}, \quad \left(\gamma = \frac{e^2}{\hbar c} \right) \quad (41-11)$$

که در آن $n' = 0, 1, 2, \dots$. این نتیجه دقیق است و انرژیهای کوانتیده یک الکترون نسبیتی هیدرزنی را به دست می‌دهد. چون $10^{-4} \approx \frac{1}{137^2} \simeq \gamma^2$ ، می‌توانیم (41-11) را بر حسب توانهای γ^2 بسط دهیم. جملات عمدۀ عبارتنداز

$$\epsilon_i \simeq mc^2 \left[1 - \frac{\gamma^2}{2n^2} - \frac{\gamma^4}{2n^4} \left(\frac{n}{|k|} - \frac{3}{4} \right) + \dots \right] \quad (42-11)$$

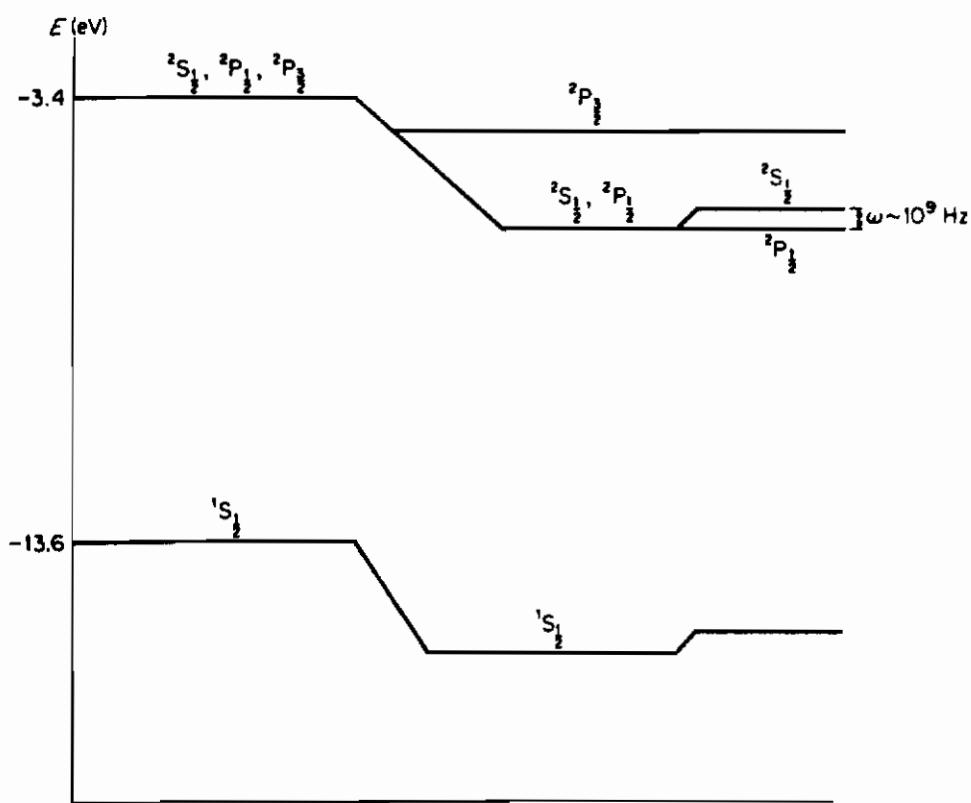
که در آن $n = n' + |k| = 1, 2, 3, \dots$. به خاطر داریم که $|k| = l + \frac{1}{2}$ برای k و $|k| = l$ برای $k = 0$ ، در نتیجه برای هر کدام از این دو مورد داریم $\frac{1}{2} + j$ به طوری که (42-11) می‌تواند به صورت زیر بیان شود

$$\begin{aligned} \epsilon_{n,j} &= mc^2 - \frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} - \frac{\gamma^2 me^4}{2\hbar^2 n^3} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \\ &= mc^2 + \epsilon_n + \frac{\gamma^2 \epsilon_n}{n} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \end{aligned} \quad (43-11)$$

این جملات به ترتیب عبارتنداز انرژی سکون ، انرژی "بوهر" و انرژی ساختار ریز ، که در (51-7) داده شده‌اند. جمله آخر با داده‌های طیف نمائی مشاهده شده در هیدرزن مطابقت می‌کند.

جملات ساختار ریز در هیدرزن آن‌طور که توسط (43-11) داده شده‌اند تصحیحاتی به دست می‌دهند که نسبت به ترازهای الکتروستاتیکی بوهر از مرتبه 4^{-15} است. عوامل اضافی دیگری وجود دارند که تصحیحاتی خیلی کوچک‌تر از تصحیحات ناشی از ساختار ریز به وجود می‌آورند. به عنوان مثال ، پروتون ، که دارای گشتاور دوقطبی مغناطیسی اسپینی مخصوص به خود است ، می‌تواند با دوقطبی وابسته به اسپین الکترونی برهمنش کند. این برهمنشها ساختار فوق ریز را در طیف هیدرزن به وجود می‌آورند. هم‌چنین ، الکترون هیدرزنی فقط در خارج پروتون تحت تاثیر یک پتانسیل کولنی قرار می‌گیرد. در داخل پروتون (10^{-13} cm^2) ، پتانسیل قطعاً به صورت $1/r$ نیست. این انحراف یک جایه‌جائی خیلی کوچکی در طیف انرژی هیدرزنی ایجاد می‌کند. سومین عامل مهم مربوط به برهمنش

بین یک الکترون و تابش در خلا، است. در غیاب تابش خارجی، مقادیر متوسط E و B ، همان طورکه انتظار می‌رود، صفراند. اما، افت و خیزهای غیرصفر یا عدم قطعیت‌های میدان کوانتیده هنوز با الکترون برهم‌کنش می‌کند و یک ضریب اسپینی غیرعادی g ، یعنی، $g \approx 2.00232$ به وجود می‌آورند. این اثر که مسئول جابه‌جائی کوچک در طیف هیدروژن است، جابه‌جایی لعب آنامیده می‌شود و جدائی مختصری بین ترازهای 2S و 2P در هیدروژن ایجاد می‌کند (شکل ۲-۱۱). افت و خیزهای میدان تابشی کوانتیده مسئول گذارهای خود به‌خود در غیاب میدانهای مشاهده‌پذیر E و B نیز هستند.



Jabeh-Jaiyi Lub + Sاختار ریز + انرژی الکتروستاتیک

شکل (۲-۱۱)- سهم‌های ساختار ریز و جابه‌جایی لعب در طیف انرژی هیدروژن. جدائی انرژیهای الکتروستاتیک، ساختار ریز و جابه‌جایی لعب به نسبتیهای 1 ، 4^{-5} و 10^{-5} هستند.

کوانتش میدان الکترومغناطیسی نه تنها سازگاری با اصل عدم قطعیت هایزنبرگ را تأمین می‌کند، بلکه مفهوم فوتون به عنوان یک کوانتای میدان را نیز توجیه می‌کند.

۱) Lamb

علاقهمندان به مسئله عمومی کوانتش را به فصل ۱۲ ارجاع می‌دهیم . در حالی که به نظر می‌رسد معادله دیراک بر رفتار کوانتمی الکترون نسبیتی حاکم است ، جوابهای آن از نظر فیزیکی همیشه آشکار نیستند . از یک نظر مفهوم مکان و سرعت یک ذره دیراک تا اندازه‌ای مبهم باقی می‌ماند . در واقع ، یک تحلیل دقیق معادله دیراک نشان می‌دهد که یک ذره دیراک که در یک جهت معین حرکت می‌کند عملًا "دو حرکت با هم انجام می‌دهد . حرکت اول یک انتقال مکان متوسط ذره در جهت حرکت کلاسیکی است . حرکت دوم یک حرکت نامنظم است ، که عبارت است از نوسان بسا فرکانس زیاد "لرزشی" بسیار بسیار بالاتراز آن است که بتواند مستقیماً مشاهده شود . جمله "افت و خیز" داروین در انرژی ساختار ریزمی تواند ، به طور فیزیکی ، برپایه حرکت "لرزشی" الکترون توضیح داده شود :

* به عنوان مثال به کتاب زیر مراجعه کنید .

J.D. Bjorken and S.D. Drell, "Relativistic Quantum Mechanics," P.52, Mc Graw-Hill, New York, 1964.

مسائل

- ۱-۱۱ نشان دهید که روابط جابه‌جایی (۱۷-۱۱) تضمین می‌کنند که معادلات دیراک و کلاین-گوردون با یکدیگر سازگارند.
- ۲-۱۱ نشان دهید که ماتریس‌های دیراک (۱۹-۱۱) در (۱۷-۱۱) صدق می‌کند.
- ۳-۱۱ معادله ویژه مقداری ماتریسی (۲۴-۱۱) را بنویسید و حل کنید. تحقیق کنید که ویژه بردارها و ویژه مقدارها دقیقاً بهوسیله (۲۵-۱۱) و (۱۱-۲۶) داده می‌شوند.
- ۴-۱۱ تحقیق کنید که ویژه اسپینورهای ذره آزاد در (۱۱-۲۶) بهنجار شده بهیک هستند، $\langle u | u \rangle = 1$
- ۵-۱۱ نشان دهید که در حد غیرنسبیتی، دومولفه پائینی (۱۱-۲۶الف) برابر مولفه‌های بالائی هستند.
- ۶-۱۱ نشان دهید که واکنش $e^+ + e^- \rightarrow \gamma$ (آفرینش جفت) نمی‌تواند هم انرژی و هم تکانه را در خلاه پایسته نگه دارد.
- ۷-۱۱ اتحادهای داده شده در (۱۱-۳۳) و (۱۱-۳۶) را به دست آورید.
- ۸-۱۱ (الف) نشان دهید که اگر چگالی احتمال وابسته به اسپینور دیراک $\Psi^* \Psi = \rho$ باشد، جریان احتمال بهوسیله

$$\mathbf{J} = e \Psi^* \mathbf{\hat{v}} \Psi$$

- داده می‌شود (راهنمایی: معادله (۱۱-۱۵) را به شکل $(\partial \rho / \partial r) = 0$ به شکل $\nabla \cdot \mathbf{J} = 0$ در آورید)
- (ب) یک ذره آزاد دیراک با انرژی ثابت، که در جهت مثبت محور z با تکانه p حرکت می‌کند در نظر بگیرید. با استفاده از تعریف \mathbf{J} در بالا، سرعت جریان احتمال را پیدا کنید. نتیجه را توضیح دهید.
- ۹-۱۱ با استفاده از نظریه پریشیدگی مرتبه اول، جابه‌جایی انرژی حالت پایه هیدروژن را در صورتی که پروتون را به صورت کره‌ای با شعاع 10^{-13} cm که به‌طور یکنواخت بساردار شده است در نظر بگیریم، محاسبه کنید.

مراجع پیشنهادی

- Berestetskii, V. B., Lifshitz, E. M., and Pitaevskii, L. P., "Relativistic Quantum Theory." Addison-Wesley, Reading Massachusetts, 1971.
- Bethe, H. A., and Salpeter, E. E., "Quantum Mechanics of One and Two Electron Atoms." Springer-Verlag, Berlin, 1957.
- Bjorken, J. D., and Drell, S. D., "Relativistic Quantum Mechanics." McGraw-Hill, New York, 1964.
- Messiah, A., "Quantum Mechanics," Volume II. Wiley, New York, 1962.
- Schiff, L. I., "Quantum Mechanics," 3rd ed. McGraw-Hill, New York, 1968.

۱۳

نظریه میدان کوانتمی

یک میدان کلاسیکی از نظر ریاضی به وسیله یک تابع (t, x) که حالت میدان را در نقطه x و زمان t مشخص می‌کند نشان داده می‌شود. به عنوان مثال، ψ می‌تواند نمایانگر افت و خیز چگالی وابسته به یک موج صوتی در هوا یا تغییر مکان یک نقطه از یک تار مرتضع باشد. این میدانها اساساً "دانه‌ای هستند زیرا معرف حرکات ذرات می‌باشند".
نمایش میدانی اغلب اوقات مسئله چندجمله‌ای را ساده می‌کند. به عنوان مثال، امواج عرضی یک تار کشیده شده در معادله موج یک بعدی

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = 0 \quad (1-12)$$

صدق می‌کند که در آن (t, x) بر جابه‌جائی تار و $\frac{1}{2} \left(\frac{\text{تنش}}{\text{چگالی خطی}} \right) = v$ سرعت فاز امواج

در امتداد تار است، بررسی این یک معادله میدان از $22 \sim 10$ معادله حرکت مولکولهای انفرادی تار ساده‌تر است، تقریب یک سیستم چندجمله‌ای میکروسکوپیکی به وسیله یک میدان کلاسیکی وقتی که ویژگیهای ماکروسکوپیکی مورد نظر باشند مفید است. از طرف دیگر میدان الکترومغناطیسی اساساً یک میدان غیردانه‌ای است و از نظر دینامیکی معادل با یک مسئله چندجمله‌ای شامل بهینه‌سازی ذره است.

معادله (۱-۱۲) "اصولاً" یک فرمول بندی نیوتونی از دینامیک محیط‌های پیوسته است. نظریه کوانتمی میدانها باید براساس یک صورت‌بندی لاغرانژی-هامیلتونی بندادی توسعه یابد. ما یک نظریه بندادی را با در نظر گرفتن گذار از یک زنجیر کشسان گستته به یک تار

پیوسته هموار گسترش خواهیم داد.

۱- نظریه کلاسیکی میدانها

* لاگرانژی وابسته به ارتعاشات عرضی یک زنجیرکشسان خطی N -ذره‌ای عبارت است از

$$L = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m \dot{y}_i^2 - \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} K(y_{i+1} - y_i)^2 \quad (2-12)$$

که m جرم هر ذره، K ثابت کشسانی هر فنر و a جابه‌جایی عرضی جرم نقطه‌ای i است. حرف a را برای نشان دادن فاصله دو جرم متواالی در حال تعادل (ثابت شبکه‌ای) به کار خواهیم برد و در نتیجه Na طول کل زنجیر خواهد بود. گذار از زنجیر گستته به پیوسته، با برداشتن نیمی از هر جرم و انتقال آن به اندازه $a/2$ به سمت راست، شروع می‌شود. با تکرار این عمل در بینهایت بار، زنجیری با یک توزیع جرمی پیوسته ایجاد می‌کنیم. به علاوه در هر "نیمه‌سازی" ثابت شبکه، ثابت کشسانی هر فنر دو برابر می‌شود. بدین ترتیب، به روابط ریاضی زیر هدایت می‌شویم

$$\begin{aligned} \lim_{a \rightarrow 0} \sum a &\rightarrow \int dx \\ \lim_{a \rightarrow 0} \frac{m}{a} &\rightarrow \frac{dm}{dx} = \mu \\ \lim_{\substack{a \rightarrow 0 \\ K \rightarrow \infty}} Ka &\rightarrow \tau \end{aligned}$$

شكل حدی لاگرانژی (2-12) عبارت است از

$$L = \lim_{a \rightarrow 0} \sum a \left\{ \frac{1}{2} \frac{m}{a} \dot{y}_i^2 - \frac{1}{2} Ka \left(\frac{y_{i+1} - y_i}{a} \right)^2 \right\} \rightarrow \int dx \left\{ \frac{1}{2} \mu \dot{y}^2 - \frac{1}{2} \tau y'^2 \right\} \quad (3-12)$$

که در آن $\ddot{y} = \partial y / \partial t$ و $y' = \partial y / \partial x$ معادله (3-12) می‌تواند به صورت $L = \int dx (\tau y' - \frac{1}{2} \mu \dot{y}^2)$ نوشته می‌شود که چگالی لاگرانژی (بر واحد طول) است و بر حسب چگالیهای انرژی جنبشی

* در این فصل L و H را به عنوان لاگرانژی و هامیلتونی به کار خواهیم برد و از \mathcal{L} و \mathcal{H} برای نمایش دادن چگالیهای آنها استفاده خواهیم کرد.

و انرژی پتانسیل به صورت $\mathcal{V} = \mathcal{T} - \mathcal{L}$ ، با $\frac{1}{2}\mu\dot{y}^2 = \mathcal{T}$ و $\mathcal{V} = \frac{1}{2}\mu\dot{x}^2 = \mathcal{L}$ است . چگالی لاگرانژی تابعی از سرعت میدان ، (x, t) باز ، و مختصه میدان ، (x, t) یا (و احتمالاً) مشتق آن ' y) است . باید تأکید کرد که x ، که نمایانگر نقطه‌ای است که در آن میدان در نظر گرفته شده است ، یک مختصه میدان نیست ، بلکه "صرفاً" متغیری است که از شاخص پائینی ψ در (۳-۱۲) سرچشمه می‌گیرد . اکنون باید تعیین کنیم چگونه معادله حرکت برای میدان ، (x, t) ، از \mathcal{L} به دست می‌آید . تعیین به سه بعدی (۳-۱۲) با رفتن از تابع میدان (x, t) به (t, ψ) حاصل می‌شود که یک میدان نرده‌ای است ، لاگرانژی این میدان دارای شکل عمومی زیر است

$$L = \int \mathcal{L}(\dot{\psi}, \psi, \nabla\psi) d\mathbf{r} = \int \mathcal{L}\left(\dot{\psi}, \psi, \frac{\partial\psi}{\partial x}, \frac{\partial\psi}{\partial y}, \frac{\partial\psi}{\partial z}\right) d\mathbf{r}$$

مشتق "تابعی" یا "وردشی" L نسبت به ψ را به صورت

$$\frac{\delta L}{\delta \psi} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} - \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial \psi / \partial x_i)} \quad (x_1 = x, \quad x_2 = y, \quad x_3 = z) \quad (4-12)$$

تعريف می‌کنیم . به طور مشابه مشتق نسبت به سرعت میدان (۴-۱۲) ، $\delta L / \delta \dot{\psi}$ ، با جانشینی کردن ψ به وسیله $\dot{\psi}$ به دست می‌آید . با استفاده از این تعریف مشتق ، بدون اثبات بیان می‌کنیم که معادله حرکت برای میدان می‌تواند از طرحواره آشنای* فصل ۲ به صورت

$$\frac{d}{dt} \frac{\delta L}{\delta \dot{\psi}} - \frac{\delta L}{\delta \psi} = 0 \quad (5-12)$$

به دست آید . این معادلات ، معادلات لاگرانژی برای یک میدان هستند . با اعمال (۵-۱۲) به چگالی لاگرانژی تار ، (۳-۱۲) ، خواهیم داشت**

* مشتق نسبت به زمان به صورت زیر محاسبه می‌شود

$$\frac{d}{dt} \frac{\delta L}{\delta \dot{\psi}} = \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} - \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial \psi / \partial x_i)} \right\}$$

** چون ' y در \mathcal{L} وارد نمی‌شود می‌توانیم قرار دهیم $\partial \mathcal{L} / \partial \dot{y} = 0$

$$\frac{\delta L}{\delta y} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y'} = \tau \frac{\partial^2 y}{\partial x^2}$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\delta L}{\delta \dot{y}} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{y}} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{y}'} \right) = \mu \frac{\partial^2 y}{\partial t^2}$$

بهطوری که از (۱۲-۵) نتیجه می شود

$$\mu \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} - \tau \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = 0$$

که همان شکلی است که (۱-۱۲) ایجاب می کند.

برای یک میدان برداری (\vec{x}, ψ) ، برای هر مولفه ψ_i ، بهشرط اینکه این مولفهها مستقل باشند، یک معادله میدان بهشکل (۱۲-۵) بهدست می آوریم.

۲- چگالی هامیلتونی

هامیلتونی یک میدان می تواند برحسب چگالی τ بهصورت $H = \int \mathcal{H} dx$ بیان شود. چگالی ψ_i تابعی است از مختصات میدانی، ψ_i و چگالی های تکانه مزدوج بندادی τ_{ij} که بهصورت زیر تعریف شده اند

$$\pi_i = \frac{\delta L}{\delta \dot{\psi}_i} \quad (6-12)$$

با انجام یک تبدیل لوزاندر، شبیه به (۲-۵۹)، خواهیم داشت

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^3 \dot{\psi}_i \pi_i - \mathcal{L} \quad (7-12)$$

مسلم است که ψ_i باید بهصورت تابعی از π_i ، ψ_i و $\nabla \psi_i$ بیان شود ولی نمی تواند شامل ψ_i باشد. با استفاده از تعریف (۶-۱۲)، معادلات هامیلتون یک میدان بهصورت

$$\frac{\delta H}{\delta \pi_j} = \dot{\psi}_j \quad \text{و} \quad \frac{\delta H}{\delta \psi_j} = - \dot{\pi}_j \quad (8-12)$$

بهدست می آیند. این معادلات هم ارز با معادلات لاگرانژی میدان می باشند. بهویژه، می توان نشان داد که چگالی هامیلتونی یک تار بهشکل

$$\mathcal{H} = \frac{\pi_y^2}{2\mu} + \frac{\tau y'^2}{2} \quad (9-12)$$

است . این تابع از لحاظ عددی با چگالی انرژی وابسته به تار مرتعش برابر است . از اعمال معادلات هامیلتون (۹-۱۲) به (۸-۱۲) نتیجه می‌شود

$$\dot{y} = \frac{\pi_y}{\mu} \quad \text{و} \quad \dot{\pi}_y = \tau y''$$

که پس از ترکیب با یکدیگر خواهند داد $0 = \tau y'' - \dot{\pi}_y$. این نتیجه ، همان‌طور که انتظار می‌رفت ، با (۱۰-۱۲) یکی است .

۳- کوانتش میدان

کوانتش یک میدان به‌این ترتیب انجام می‌گیرد که نخست متغیرهای بندادی میدان به‌وسیله عملگرهای هرمیتی

$$\pi_j \rightarrow \hat{\pi}_j \quad \text{و} \quad r \hat{\psi} \rightarrow \hat{r} \psi$$

جاگزین می‌شوند و سپس روابط جابه‌جایی بین مختصات و تکانه‌های میدان ، با مشابهت با روابط وابسته به‌یک سیستم ذرات ، به صورت زیر وضع می‌شود

$$[\hat{\pi}_j(r'), \hat{\pi}_k(r)] = [\hat{\psi}_j(r'), \hat{\psi}_k(r)] = 0 \quad (10-12)$$

$$[\hat{\psi}_j(r'), \hat{\pi}_k(r)] = i\hbar\delta_{jk}\delta(r - r')$$

این روابط جابه‌جایی ایجاب می‌کنند که اندازه‌گیری‌های همزمان دو مختصه یا دو تکانه متفاوت میدان می‌توانند با دقت کامل در یک زمان انجام گیرند . از طرف دیگر ، اندازه‌گیری‌های همزمان و دقیق $r \hat{\psi}$ و $\hat{\pi}_j$ نمی‌توانند در یک نقطه از فضا انجام پذیرند . در بعضی موارد (به عنوان مثال ، میدان‌های نسبیتی) اثرات تاخیری مهم‌اند . در این صورت روابط جابه‌جایی (۱۰-۱۲) باید به‌اندازه‌گیری‌هایی اشاره داشته باشند که در زمانهای متفاوت انجام می‌شوند .

اما ، (۱۰-۱۲) به‌طور مناسبی راه عمومی کوانتش را روشن می‌کند .

هامیلتونی میدان به‌وسیله عملگر هرمیتی

$$\hat{H}_{\text{field}} = \int \mathcal{H}(r, \hat{\psi}_j, \nabla \hat{\psi}_j) dr$$

نشان داده می شود . ویژه حالت های انرژی \hat{H}_{field} حالت های مانای میدان کوانتیده را تعیین می کنند . به طور معادل ، ویژه بردارها و ویژه مقدارهای معادله

$$\hat{H}_{\text{field}} |\text{field}\rangle = \epsilon_{\text{field}} |\text{field}\rangle$$

را جستجو می کنیم ، چون Ψ یک مشاهده پذیر مناسبی برای میدان نیست ، این معادله ویژه مقداری نمی تواند در زبان دیفرانسیلی مکانیک موجی فرمولبندی شود .

۴- الکترودینامیک کلاسیکی

به طور مضحکی ، یکی از مشکل ترین میدانهای کلاسیکی برای کوانتش ، میدان وابسته به تابش الکترومغناطیسی است ، چون میدان تابشی طبیعتاً "نسبیتی" است ، باید در اعمال روابط جابه جایی دقت کافی مبذول شود . همان طور که خواهیم دید ، مولفه های E و B ای وابسته به میدان الکترومغناطیسی مستقل نیستند . بنابراین قبل از اعمال کوانتش لازم است که آنها را به مختصات میدان مستقل تقلیل داد .
سیستمی از ذرات باردار را در حضور میدانهای الکترومغناطیسی در نظر بگیریم
معادلات حرکت نیوتونی * ذرات به میانه قانون نیروی لورنتس ، یعنی ،

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i = q \mathbf{E}_i + \frac{q}{c} \mathbf{v}_i \times \mathbf{B}_i \quad (11-12)$$

داده می شوند که در آن E_i و B_i میدانهای الکتریکی و مغناطیسی در محل ذره i ام هستند .
معادلات این میدانها توسط معادلات ماکسول به صورت زیر داده می شوند

$$(1) \quad \nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho$$

$$(2) \quad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

$$(3) \quad \nabla \times \mathbf{E} = - \frac{1}{c} \dot{\mathbf{B}} \quad (12-12)$$

$$(4) \quad \nabla \times \mathbf{B} = \frac{1}{c} \dot{\mathbf{E}} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{J}$$

* در آنچه به دنبال می آید فرض می کنیم ذرات غیر نسبیتی هستند .

چگالیهای بار و جریان بهوسیله روابط زیر به مختصات ذرات ارتباط پیدا می‌کنند

$$\rho = \sum_i q\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \quad \text{و} \quad \mathbf{J} = \sum_i q\mathbf{v}_i\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \quad (13-12)$$

ساختن یک لاگرانژی بر حسب \mathbf{E} و \mathbf{B} به عنوان مختصات میدان، بیهوده است زیرا این میدانها مستقل نیستند. شش مولفه (\mathbf{E} و \mathbf{B}) می‌توانند با استفاده از معادلات دوم و سوم ماسکول به چهار مولفه تقلیل یابند. معادله دوم، $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ ، ایجاب می‌کند که \mathbf{B} مشتق از یک پتانسیل برداری به صورت

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (14-12)$$

باشد. معادله سوم می‌تواند به صورت

$$\nabla \times \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{A} \right) = 0$$

نوشته شود که به ما اجازه می‌دهد یک پتانسیل نرده‌ای Φ به‌گونه‌ای تعریف کنیم که داشته باشیم

$$\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{A} = -\nabla\Phi \quad \text{یا} \quad \mathbf{E} = -\nabla\Phi - \frac{1}{c} \mathbf{A} \quad (15-12)$$

سه مولفه \mathbf{A} همراه با Φ چهار مولفه میدان را نمایش می‌دهند. گرچه این چهار مولفه هنوز "کاملاً" مستقل نیستند، تقلیل نهایی را بعداز اینکه لاگرانژی و هامیلتونی ساخته شدند انجام می‌دهیم. معادلات حرکت (11-12) و (12-12) اکنون می‌توانند بایان \mathbf{E} و \mathbf{B} بر حسب \mathbf{A} و Φ نوشته شوند.

لاگرانژی کل سیستم الکترو دینامیکی می‌تواند به صورت

$$L = \int (\mathcal{L}_{\text{part}} + \mathcal{L}_{\text{rad}} + \mathcal{L}_{\text{int}}) d\mathbf{r} \quad (16-12)$$

نوشته شود، که در آن

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\text{part}} &= \sum_i \frac{1}{2} m\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)\mathbf{v}_i^2 \\ \mathcal{L}_{\text{rad}} &= \frac{\left(-\nabla\Phi - \frac{1}{c} \mathbf{A} \right)^2 - (\nabla \times \mathbf{A})^2}{8\pi} = \frac{E^2 - B^2}{8\pi} \\ \mathcal{L}_{\text{int}} &= -\rho\Phi + \frac{\mathbf{J} \cdot \mathbf{A}}{c} \end{aligned}$$

و ρ و J توسط (۱۲-۱۳) داده می‌شوند. تحقیق اینکه اعمال معادلات لاگرانژ به (۱۲-۱۶) هم قانون نیروی لورنتس برای ذرات و هم معادلات ماکسول برای میدانها را دوباره ایجاد می‌کند کاری است طولانی ولی سر راست.*

چگالی تکانه مزدوج با A ، با استفاده از (۱۲-۶)، عبارت است از

$$\Pi = \frac{\delta L}{\delta \dot{A}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}} = \frac{1}{4\pi c} \left(-\nabla \Phi - \frac{1}{c} \dot{A} \right) = \frac{\mathbf{E}}{4\pi c} \quad (12-12)$$

چون Φ در \mathcal{L} ظاهر نمی‌شود، چگالی تکانه مزدوج با آن صفر است. تبدیل لوزاندر برای ساختن H سرراست است و نتیجه آن عبارت است از

$$H = \int \left\{ \frac{1}{8\pi} (E^2 + B^2) + \frac{\mathbf{E} \cdot \nabla \Phi}{4\pi} \right\} + \left\{ \sum_i \left[\frac{(\mathbf{p}_i - (q/c) \mathbf{A})^2}{2m} + q\Phi \right] \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \right\} d\mathbf{r} \quad (12-18)$$

که در آن $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ و $\mathbf{E} = 4\pi c \mathbf{\Pi}$ می‌شود. \mathbf{A} و Φ فقط تابع آنجا فیزیکی هستند که \mathbf{E} و \mathbf{B} بتوانند از آنها به دست آیند. بخصوص، تبدیل پیمانه‌ای

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla \chi, \quad \Phi \rightarrow \Phi - \frac{\dot{\chi}}{c}$$

که در آن χ یک نرده‌ای دلخواه است، میدانهای \mathbf{E} و \mathbf{B} در (۱۲-۱۴) و (۱۲-۱۵) را دست نخورد می‌گذارد (مسئله ۳-۱۲). این مطلب می‌تواند با جایگذاری مستقیم، و با توجه به اینکه تاو گرادیان هر تابع χ صفر است، مشاهده شود. بنابراین، این آزادی را داریم که \mathbf{A} و Φ را با یک انتخاب مناسب χ محدود کنیم. پیمانه لورنتس که در آن محدودیت $\nabla \cdot \mathbf{A} = \Phi/c$ را قائل می‌شویم، برای یک فرمولبندی که از نظر نسبیتی هموردا باشد مناسب است، اما به پیچیدگی‌های زیادی در نظریه کوانتومی منجر می‌شود. یک پیمانه ساده‌تر برای مقاصد ما پیمانه تابشی است که در آن

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad (19-12)$$

* به عنوان مثال به کتاب زیر مراجعه کنید

H. Goldstein, "Classical Mechanics", Chapter 11.

Addison-wesley, Reading, Massachusetts, 1950.

با انتخاب این پیمانه، هموردای آشکار را به خاطر سادگی قربانی می‌کنیم، معذالت نتایج معتبر باقی می‌مانند.

با قراردادن (۱۲-۱۵) در اولین معادله ماکسول خواهیم داشت

$$\nabla^2\Phi + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \cdot \mathbf{A}) = -4\pi\rho$$

پا، با استفاده از (۱۲-۱۹)،

$$\nabla^2\Phi = -4\pi\rho \quad \text{(معادله پواسن)} \quad (20-12)$$

جواب (۲۰-۱۲) به وسیله قانون کولن، یعنی،

$$\Phi = \int \frac{\rho(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \int \frac{\sum_i q\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_i)d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

داده می‌شود. به همین جهت پیمانه تابشی اغلب اوقات پیمانه گولنی نامیده می‌شود. در این پیمانه، Φ به وسیله مکانهای لحظه‌ای ذرات باردار تعیین می‌شود و در غیاب آنها صفر است. در زیر خواهیم دید که Φ یک مختصه میدان تابشی در پیمانه تابشی نیست. هرمیدان برداری همیشه می‌تواند به یک قسمت طولی (غیرچرخشی) و یک قسمت عرضی (سیملولهای)، به صورت زیر تجزیه شود

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_L + \mathbf{A}_T \quad (21-12 \text{ الف})$$

این دو قسمت با ویژگیهای زیر تعریف می‌شوند

$$\nabla \cdot \mathbf{A}_T = 0, \quad \nabla \times \mathbf{A}_L = 0 \quad (21-12 \text{ ب})$$

در پیمانه تابشی (۱۲-۱۹)، نتیجه می‌شود که \mathbf{A} کاملاً "عرضی" است، پیمانه تابشی پیمانه عرضی نیز نامیده می‌شود. از معادله دوم ماکسول، $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ نتیجه می‌شود که \mathbf{B} همیشه بدون توجه به پیمانه، عرضی است. میدان الکتریکی، از (۱۲-۱۷)، عبارت است از

$$\mathbf{E} = 4\pi c\Pi = -\nabla\Phi - \frac{1}{c}\dot{\mathbf{A}}$$

نتیجه می‌شود

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_L + \mathbf{E}_T$$

که در آن

$$\mathbf{E}_L = -\nabla\Phi = 4\pi c\Pi_L \quad , \quad \mathbf{E}_T = -\frac{1}{c}\mathbf{A} = 4\pi c\Pi_T \quad (22-12)$$

این تجزیه \mathbf{E} در (۲۲-۱۲) در پیمانه تابشی معتبر است زیرا تنها در این صورت \mathbf{A} عرضی خواهد بود . از (۲۲-۱۲) نتیجه خواهیم گرفت

$$E^2 = E_T^2 + E_L^2 + 2\mathbf{E}_T \cdot \mathbf{E}_L = E_T^2 + E_L^2 - 2\mathbf{E}_T \cdot \nabla\Phi$$

و

$$\dot{\mathbf{E}} \cdot \nabla\Phi = \mathbf{E}_T \cdot \nabla\Phi + \mathbf{E}_L \cdot \nabla\Phi = \mathbf{E}_T \cdot \nabla\Phi - E_L^2$$

با استفاده از این روابط، هامیلتونی (۱۸-۱۲) خواهد شد

$$H = \int \left\{ \frac{1}{8\pi} (E_T^2 + B^2) + \frac{\mathbf{E} \cdot \nabla\Phi}{8\pi} - \frac{\mathbf{E}_T \cdot \nabla\Phi}{8\pi} \right\} \\ + \left\{ \sum_i \left[\frac{(\mathbf{p}_i - (q/c)\mathbf{A})^2}{2m} + q\Phi \right] \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \right\} d\mathbf{r} \quad (23-12)$$

با انتگرال‌گیری بهروش جزء بهجزء، و نادیده گرفتن جمله سطحی که برای یک میدان فیزیکی در بینهایت صفر می‌شود، و با استفاده از

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho = 4\pi\sum_i q\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$$

خواهیم داشت

$$\int \frac{\mathbf{E} \cdot \nabla\Phi}{8\pi} d\mathbf{r} = -\frac{1}{2} \int \frac{\nabla \cdot \mathbf{E}}{4\pi} \Phi d\mathbf{r} = -\frac{1}{2} \int \sum q\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) d\mathbf{r}$$

و

$$\int \mathbf{E}_T \cdot \nabla\Phi d\mathbf{r} = - \int \Phi \nabla \cdot \mathbf{E}_T d\mathbf{r} = 0$$

با قراردادن این تساوی در (۲۳-۱۲) و با استفاده از ویژگیهای تابع دلتا، هامیلتونی الکترودینامیکی خواهد شد

$$H = \int \frac{1}{8\pi} (E_T^2 + B^2) d\mathbf{r} + \sum_i \left[\frac{(\mathbf{p}_i - (q/c) \mathbf{A}_i)^2}{2m} + \frac{1}{2} q\Phi_i \right]$$

با استفاده از قانون کولن برای Φ_i ، هامیلتونی الکترودینامیکی شکل نهایی

$$H = H_{\text{rad}} + H_{\text{part}} + H_{\text{int}}$$

را به خود می‌گیرد ، که در آن

$$\begin{aligned} H_{\text{rad}} &= \int \frac{1}{8\pi} (E_T^2 + B^2) d\mathbf{r} = \int \frac{1}{8\pi} [(4\pi c \Pi_T)^2 + (\nabla \times \mathbf{A})^2] d\mathbf{r} \\ H_{\text{part}} &= \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \frac{q^2}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|} \\ H_{\text{int}} &= \sum_i \left[-\frac{q}{mc} \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{A}_i + \frac{q^2}{2mc^2} \mathbf{A}_i^2 \right] \end{aligned} \quad (24-12)$$

در پیمانه تابشی ، E_T و Φ در هامیلتونی تابش‌آزاد وارد نمی‌شوند ، بلکه در برهم‌کنشهای کولنی الکتروستاتیکی بین ذرات شرکت می‌کنند . متأسفانه ، جمله کولنی در (24-12) انرژی‌های خودی ذرات را در برداشت . این اشکال از آنجا ناشی می‌شود که فرض کردۀ این ذرات نقطه‌ای هستند . در عمل ، اگر بارها از نظر تعداد پاییسته باشند ، این انرژی خودی تغییر نمی‌کند و نمی‌تواند روی دینامیک ذرات تاثیر بگذارد ، بنابراین در برهم‌کنشهای کولنی از جمله‌هایی که در آنها $z = i$ است صرفنظر می‌کنیم .

میدان تابشی فقط مولفه‌های عرضی را دخالت می‌دهد . سپس کوانتش این میدان تابشی آزاد ، یعنی ، وضعیتی را که در آن هیچ ذره‌ای حضور ندارد ($0 = p_i = q$) ، بررسی می‌کنیم .

۵ - هم‌ارزی بین تابش‌آزاد و نوسانگرها

در حالی که ممکن است H_{rad} در (24-12) را مستقیماً کوانتیده کرد ، بهتر است که نخست میدان تابش‌آزاد را به صورت یک سری فوریه بسط دهیم . این کار از ابهامات وابسته به اثرات تاخیری در روابط جایه‌جایی میدانها جلوگیری می‌کند . فرض می‌کنیم که تابش در یک جعبه بزرگ به حجم \mathcal{V} محبوس است و مدھای مشخصه کاواک را که امواج تختی به شکل

$$\mathbf{u}_{k\lambda} = \frac{(4\pi)^{1/2} c}{\sqrt{\mathcal{V}}} \mathbf{e}_{k\lambda} e^{ik \cdot r} \quad (25-12)$$

هستند، اختیار می‌کند. هر مد به وسیله یک بردار موج \mathbf{k} و یک شاخص قطبش λ مشخص می‌شود. بردار قطبش طولی \mathbf{e}_k بردار واحدی در جهت \mathbf{k} است، در حالی که بردارهای عرضی $\mathbf{e}_{k,1}$ و $\mathbf{e}_{k,2}$ بر یکدیگر و بر \mathbf{k} عموداند. این مدهای میدان دارای ویژگی تعامد زیراند

$$\int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{u}_{k,\lambda}^* \cdot \mathbf{u}_{k',\lambda'} d\mathbf{r} = 4\pi c^2 \delta_{kk'} \delta_{\lambda\lambda'} \quad (26-12)$$

حالت عمومی تابش داخل کاواک به وسیله برهمنهش این مدها داده می‌شود و می‌توانیم
بسط‌های زیر را انجام دهیم*

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) &= \sum_{\mathbf{k}, \lambda} q_{k,\lambda}(t) \mathbf{u}_{k,\lambda}(\mathbf{r}) \\ \Pi_T(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{4\pi c^2} \sum_{\mathbf{k}, \lambda} p_{k,\lambda}(t) \mathbf{u}_{k,\lambda}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (27-12)$$

که در آن $q_{k,\lambda}$ و $p_{k,\lambda}$ ضرایب حقیقی بسط هستند که به وسیله شرایط اولیه تعیین می‌شوند.
(توجه کنیم که ضرایب $q_{k,\lambda}$ و $p_{k,\lambda}$ فقط توابعی از زمان هستند و نه از مکان). مقادیر مجاز \mathbf{k} به وسیله شرایط مرزی که در دیوارهای کاواک تحمیل می‌شوند، تعیین می‌شوند. وقتی حجم محفظه بزرگ می‌شود، عدد کوانتومی k شبیه پیوسته می‌گردد. حاصل جمع‌ها شامل فقط قطبش‌های عرضی ($\lambda = 1, 2$) هستند زیرا هامیلتونی تابش آزاد شامل میدان‌های کاملاً "عرضی" است.

عمل تاو گرفتن از موج تخت $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ منجر به ضرب آن در $\mathbf{k} \times i\mathbf{k}$ می‌شود. بنابراین داریم

$$\nabla \times \mathbf{A} = \sum_{\mathbf{k}, \lambda=1, 2} q_{k,\lambda} i\mathbf{k} \times \mathbf{u}_{k,\lambda} \quad (28-12)$$

با استفاده از روابط $\mathbf{k} \times \mathbf{u}_{k,1} = -k \mathbf{u}_{k,2}$ و $\mathbf{k} \times \mathbf{u}_{k,2} = k \mathbf{u}_{k,1}$ (رک شکل ۱-۱۲) همراه با (۲۶-۱۲)،
بعد از مقداری ساده‌سازی خواهیم داشت

$$\int |\nabla \times \mathbf{A}|^2 d\mathbf{r} = \sum_{\mathbf{k}, \lambda=1, 2} q_{k,\lambda}^2 k^2 4\pi c^2 \quad (29-12)$$

به‌طور مشابه، با توجه به تعریف Π_T در (۲۷-۱۲)، خواهیم داشت

* به عبارت دقیقتر، میدان‌ها برای یک سیستم فیزیکی در (۲۷-۱۲) باید حقیقی باشند و در بینهایت صفر شوند. در حالی که مدهای (۲۵-۱۲) در این شرط صدق نمی‌کنند، ولی محاسبات را به‌طور قابل ملاحظه‌ای ساده می‌کنند و با وجود این نتایج معتبرند.

$$|\Pi_T|^2 = \frac{1}{(4\pi c^2)^2} \sum_{\mathbf{k}\lambda' \lambda} p_{\mathbf{k}'\lambda'} p_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{u}_{\mathbf{k}'\lambda'}^* \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda} \quad (30 - 12)$$

با قراردادن این نتایج در (۲۴-۱۲)، انتگرال‌گیری و استفاده از روابط تعاملد (۲۶-۱۲) خواهیم داشت

$$H_{rad} = \int \left[\frac{|4\pi c \Pi_T|^2 + |\nabla \times \mathbf{A}|^2}{8\pi} \right] d\mathbf{r} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda=1,2} \left[\frac{p_{\mathbf{k}\lambda}^2}{2} + \frac{1}{2} \omega_k^2 q_{\mathbf{k}\lambda}^2 \right] \quad (31 - 12)$$

که در آن $\omega_k = ck$. بنابراین هامیلتونی تابش آزاد معادل است با هامیلتونی یک‌مجموعه بینهایت از نوسانگرهای با جرم واحد که هرکدام وابسته به یکی از مدهای مشخصه‌اند. ضرایب بسط $p_{\mathbf{k}\lambda}$ و $q_{\mathbf{k}\lambda}$ نقش متغیرهای بندادی برای هرکدام از نوسانگرهای مdra ایفا می‌کنند. هر نوسانگر به‌وسیله یک بردار موج \mathbf{k} و یک شاخص قطبی $\lambda = 1, 2$ مشخص می‌شود. در اینجاست که به‌خاطر دانه‌ای نبودن میدان بینهایت نوسانگر (به‌جای N نوسانگر زنجیرگسته در فصل ۱۵) داریم.

۶- کوانتش میدان (عرضی) تابش آزاد

کوانتش میدان تابشی با همان الگوی آشنا تبدیلات زیر به‌دست می‌آید

$$\mathbf{A} \rightarrow \hat{\mathbf{A}} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hat{q}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}\lambda} \quad (32 - 12)$$

$$\Pi_T \rightarrow \hat{\Pi}_T = \frac{1}{4\pi c^2} \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hat{p}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hat{\Pi}_{T_{\mathbf{k}\lambda}} \quad (33 - 12)$$

که در آنها

$$\hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}\lambda} = \hat{q}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda} \quad , \quad \hat{\Pi}_{T_{\mathbf{k}\lambda}} = \frac{1}{4\pi c^2} \hat{p}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}$$

با استفاده از (۱۰-۱۲)، روابط جابه‌جاوی میدان برای مولفه‌های فوریه عرضی می‌شوند

$$[\hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}'\lambda'}(\mathbf{r}'), \hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r})] = [\hat{\Pi}_{T_{\mathbf{k}'\lambda'}}(\mathbf{r}'), \hat{\Pi}_{T_{\mathbf{k}\lambda}}(\mathbf{r})] = 0 \quad (34 - 12)$$

$$[\hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}'\lambda'}(\mathbf{r}'), \hat{\Pi}_{T_{\mathbf{k}\lambda}}(\mathbf{r})] = i\hbar \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\lambda\lambda'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

بر طبق اصل عدم قطعیت هایزنبرگ، توانایی ما در اندازه‌گیری همزمان مولفه‌های فوریه عرضی \hat{A} و $\hat{\Pi}_T$ در یک نقطه از فضا محدود است، با انتگرال‌گیری از (۳۴-۱۲) روی تمام فضا و با کاربرد (۲۶-۱۲) خواهیم یافت

$$\begin{aligned} [\hat{q}_{k' \lambda'}, \hat{q}_{k \lambda}] &= [\hat{p}_{k' \lambda'}, \hat{p}_{k \lambda}] = 0 \\ [\hat{q}_{k' \lambda'}, \hat{p}_{k \lambda}] &= i\hbar \delta_{kk'} \delta_{\lambda \lambda'} \end{aligned} \quad (35-12)$$

کوانتش هامیلتونی،

$$\hat{H}_{rad} = \sum_{k \lambda} \frac{1}{2} \hat{p}_{k \lambda}^2 + \frac{1}{2} \omega_k^2 \hat{q}_{k \lambda}^2 \quad (36-12)$$

از الگویی که مشخصه کوانتش برای نوسانگرهای سیلیکون می‌کند، حالت تابش به‌وسیله یک حاصلضرب مستقیم حالت‌های نوسانگر که هر کدام از آنها به‌یک مد مشخصه وابسته هستند، نمایش داده می‌شود، یعنی

$$|\text{rad}\rangle = |v_{k_1 \lambda_1}\rangle \otimes |v_{k_2 \lambda_2}\rangle \otimes \dots = |\{v_{k \lambda}\}\rangle \quad (37-12)$$

که در آن $v_{k \lambda}$ ها اعداد صحیح برانگیختگی مد k و λ هستند. وقتی دنباله اعداد صحیح برانگیختگی $\{v_{k \lambda}\}$ مشخص شده باشد حالت تابش معلوم است، انرژی حالت عبارت است از

$$\epsilon(\text{rad}) = \sum_{k \lambda} (v_{k \lambda} + \frac{1}{2}) \hbar \omega_k \quad (38-12)$$

شیاهت بین (۳۸-۱۲) و (۳۷-۱۰) پیشنهاد می‌کند که فوتون را به عنوان کوانتای میدان الکترومغناطیسی وارد کنیم. به هر مد فوتونی با انرژی $E = \hbar \omega_k$ نسبت می‌دهیم، فوتون یک ذره کاملاً نسبیتی با جرم در حال سکون صفر است که با سرعت نور حرکت می‌کند، با قراردادن $m = 0$ در رابطه $(P^2 c^2 + m^2 c^4)^{1/2} = E$ ، نتیجه می‌گیریم که تکانهٔ فوتون عبارت است از $c/E = \hbar \omega_k/c$ یا به شکل برداری $P_k = \hbar k$. اعداد صحیح دنباله برای یک حالت داده شده، یعنی $v_{k \lambda}$ ، به عنوان تعداد فوتونهای موجود از هر نوع تعبیر می‌شوند، حالت خلا، (تمام $v_{k \lambda} = 0$) دارای انرژی

$$\epsilon_{vac} = \sum_{k \lambda}^{\infty} \frac{1}{2} \hbar \omega_k \rightarrow \infty$$

ثابت است، آنرا نادیده می‌گیریم، همانطور که در مورد انرژی خودی بینهایت برهم‌کنش کولنی در (۲۴-۱۲) انجام دادیم.

۷- الکترودینامیک کوانتومی - گذارهای تابشی

ویژه حالت‌های مانای یک سیستم الکترودینامیکی به‌وسیله ویژه‌بردارهای $\hat{H} = \hat{H}_{\text{rad}} + \lambda \hat{H}_{\text{part}} + \hat{H}_{\text{int}}$ ، عبارت است از

$$\hat{H}_{\text{int}} = - \sum_i \frac{q}{mc} \hat{\mathbf{p}}^{(i)} \cdot \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}^{(i)}) + \sum_i \frac{q^2}{2mc^2} \hat{A}^2(\mathbf{r}^{(i)}) \quad (39-12)$$

برای الکترونها، ثابت پریشیدگی، در پکاهای cgs، مقدار زیر در نظر گرفته می‌شود

$$\lambda = \frac{q}{c} = \frac{4.8 \times 10^{-10}}{3 \times 10^{10}} \sim 10^{-20}$$

با صرف‌نظر کردن از جمله دوم (چون شامل λ^2 است)، برهم‌کنش می‌تواند به عنوان یک پریشیدگی مرتبه اول در نظر گرفته شده و به صورت

$$\hat{H}_{\text{int}} \approx - \lambda \sum_i \frac{\hat{\mathbf{p}}^{(i)} \cdot \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}^{(i)})}{m} \quad (40-12)$$

نوشته شود. با انتخاب $\hat{H}_0 = \hat{H}_{\text{rad}} + \hat{H}_{\text{part}}$ به عنوان هامیلتونی ناپریشیده، ویژه تابعهای آن می‌توانند به صورت حاصل‌ضرب مستقیم

$$|\alpha\rangle = |\text{rad} + \text{part}\rangle = |\text{rad}\rangle \otimes |\text{part}\rangle = |\{v_{k\lambda}\}\rangle \otimes |i\rangle \quad (41-12)$$

نوشته شود که در آن $|i\rangle$ نمایانگر یک ویژه حالت سیستم ذره‌ای است، حالت ناپریشیده وقتی معلوم می‌شود که هم حالت‌های تابشی و هم حالت‌های ذره‌ای هردو مشخص شده باشند. انرژی ناپریشیده حالت (با صرف‌نظر کردن از انرژی خلا) عبارت است از

$$\epsilon_\alpha = \epsilon_{\text{rad} + \text{part}} = \epsilon_i(\text{part}) + \sum_{k\lambda} v_{k\lambda} \hbar \omega_k \quad (42-12)$$

واضح است که عملکردهای تابشی و ذره‌ای فقط روی کتهای مربوط به خودشان در (۴۱-۱۲) اثر می‌کنند.

فرض خواهیم کرد که پریشیدگی (۴۰-۱۲) گذارهای را بین حالت‌های ناپریشیده (۴۱-۱۲) القاء می‌کند. حالت اولیه را به صورت

$$|\alpha\rangle = |\{v_{k\lambda}\}\rangle |i\rangle$$

خواهیم گرفت که دنباله $\{v_{k\lambda}\}$ نمایانگر تعداد اولیه فوتون‌های موجود هرنوع و $|i\rangle$ نمایانگر حالت اولیه سیستم ذره‌ای است. حالت نهائی به صورت

$$|\beta\rangle = |\{v'_{k\lambda}\}\rangle |f\rangle$$

نوشته می‌شود. حالت‌های تابشی اولیه و نهائی توزیعهای فوتونی متفاوتی دارند (یعنی، $\{v_{k\lambda}\} \neq \{v'_{k\lambda}\}$). سیستم ذره‌ای یک گذار از حالت $|i\rangle$ به یک حالت نهائی $|f\rangle$ انجام داده است. آنگ گذار مرتبه اول به وسیله قاعده طلائی فرمی (۷۱-۷)

$$R_{\alpha \rightarrow \beta} = \frac{2\pi}{\hbar} \lambda^2 \left[\langle \alpha | \sum_i \frac{\hat{p}^{(i)}}{m} \cdot \hat{A}(\mathbf{r}^{(i)}) | \beta \rangle \right]^2 \rho_\beta \Big|_{\epsilon_\alpha = \epsilon_\beta} \quad (43-12)$$

داده می‌شود که در $T = q/c$ ، $\lambda = q/c$

رابطه (۴۳-۱۲) را به یک سیستم ذره‌ای مرکب از یک الکترون هیدروژنی اعمال می‌کنیم. محاسبه (۴۳-۱۲) با مشاهدات زیر ساده می‌شود:

(۱) چون عملگرهای

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

$$\hat{A} = \frac{(4\pi c^2)^{1/2}}{\sqrt{\gamma}} \sum_{k\lambda} \hat{q}_{k\lambda} \mathbf{e}_{k\lambda} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

به ترتیب فقط روی کتهای ذره‌ای و تابشی عمل می‌کنند، عناصر ماتریسی (۴۳-۱۲) می‌توانند به صورت زیر نوشته شوند

$$\left| \langle \alpha | \frac{\hat{p} \cdot \hat{A}(\mathbf{r})}{m} | \beta \rangle \right|^2 = \frac{4\pi c^2}{\gamma} \left| \sum_{k\lambda} \langle \{v_{k\lambda}\} | \hat{q}_{k\lambda} | \{v'_{k\lambda}\} \rangle \mathbf{e}_{k\lambda} \cdot \langle i | \frac{\hat{p} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{m} | f \rangle \right|^2 \quad (44-12)$$

(۲) قاعده طلائی فقط گذارهای بین حالت‌های با یک انرژی را در بر می‌گیرد و لازم است که داشته باشیم

$$\varepsilon_i + \sum_{\mathbf{k}\lambda} v_{\mathbf{k}\lambda} \hbar \omega_k = \varepsilon_f + \sum_{\mathbf{k}\lambda} v'_{\mathbf{k}\lambda} \hbar \omega_k \quad (45-12)$$

بر طبق نتایج فصل ۴، رابطه (۵۳-۴)، می‌توان عناصر ماتریسی تابش‌های نوسانگر گونه (۴۶-۱۲) را به صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} \langle \{v_{\mathbf{k}\lambda}\} | \sum_{\mathbf{k}\lambda} q_{\mathbf{k}\lambda} | \{v'_{\mathbf{k}\lambda}\} \rangle &= \sum_{\mathbf{k}\lambda} \langle v_{\mathbf{k}\lambda} | q_{\mathbf{k}\lambda} | v'_{\mathbf{k}\lambda} \rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}\lambda} \left[\frac{(v_{\mathbf{k}\lambda} + 1)\hbar}{2\omega_k} \right]^{1/2} \delta_{v_{\mathbf{k}\lambda} + 1, v'_{\mathbf{k}\lambda}} \\ &\quad + \left[\frac{v_{\mathbf{k}\lambda} \hbar}{2\omega_k} \right]^{1/2} \delta_{v_{\mathbf{k}\lambda} - 1, v'_{\mathbf{k}\lambda}} \end{aligned} \quad (46-12)$$

به طور معادل، تعداد فوتونهای هرنوع ممکن است فقط یکی افزایش (گسیل) یا کاهش (جدب) یابد و نه بیشتر، در نظریه پریشیدگی مرتبه بالاتر فرایندهای چند فوتونی امکان پذیر استند. فرض خواهیم کرد که سیستم ذره‌ای، در این مورد اتم هیدروژن، گذاری انجام دهد که در آن $\nu_e > \nu_h$ باشد. برای برقراری اصل پایستگی انرژی، (۴۵-۱۲)، انرژی فوتون باید به اندازه $\nu_e - \nu_h$ افزایش یابد، اما، قاعده تک‌فوتونی در صورتی می‌تواند برقرار بماند که فقط و فقط فوتونهای با فرکانس

$$\omega_{ij} = |\mathbf{k}|c = \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_f}{\hbar}$$

گسیل شده باشند. این نکته پیشنهاد می‌کند که فقط دلتای اول کرونکر در (۴۶-۱۲) باید نگهداشی شود (برای فرایند گسیل) و اینکه جمع باید روی حالتها فوتونی با

$$|\mathbf{k}| = \frac{\omega_{ij}}{c} = \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_f}{\hbar c}$$

انجام گیرد:

(۴) چگالی حالتها (با ظرف‌نظر کردن از قطبش) برای یک فوتون با بردار موجی \mathbf{k} از روابط زیر به دست می‌آید

$$\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \rho(\omega) d\varepsilon = \rho(\omega) \hbar d\omega$$

$$\frac{\gamma k^2 dk}{(2\pi)^3} d\Omega_{\mathbf{k}} = \frac{\gamma \omega^2 d\omega}{(2\pi c)^3} d\Omega_{\mathbf{k}} = \rho(\omega) \hbar d\omega$$

با

$$\rho(\omega) = \frac{\gamma \omega^2}{(2\pi c)^3 \hbar} d\Omega_{\mathbf{k}} \quad (47-12)$$

(۵) گذارهای نوری درهیدرژن شامل فوتونهای هستند که طول موج آنها خیلی بزرگتر از ابعاد اتم است . بنابراین می‌توانیم بنویسیم $r \gg \lambda$ یا $\mathbf{r} \cdot \mathbf{k} = 0$ ، به‌طوری که موج تخت عنصر ماتریسی ذره می‌تواند با $|i\rangle \langle i| \hat{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ تقریب زده شود . عنصر مورد نظر خواهد شد

$$\langle f | \hat{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} | i \rangle \simeq \langle f | \hat{\mathbf{p}} | i \rangle \quad (48-12)$$

این رابطه ، همان‌طور که خواهیم دید ، همان تقریب دوقطبی است که در فصل ۷ به‌کاررفت . با قراردادن نتایج فوق در قاعده طلائی (۴۳-۱۲) ، و جانشین‌کردن جمع‌بندی روی \mathbf{k} ها به‌وسیله انتگرال ، آنگ گسیل را به‌صورت زیر به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} R_{\alpha \rightarrow \beta} &= \frac{2\pi e^2}{\hbar c^2} \int \sum_{\lambda} \frac{4\pi c^2}{\gamma} \frac{\hbar(v_{\mathbf{k}\lambda} + 1)}{2\omega_{fi}} \left| \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \langle f | \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} | i \rangle \right|^2 \frac{\gamma \omega_{fi}^2}{(2\pi c)^3 \hbar} d\Omega_{\mathbf{k}} \\ &= \frac{e^2 \omega_{fi}}{2\pi c^3 \hbar} \int \sum_{\lambda} (v_{\mathbf{k}\lambda} + 1) \left| \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \langle f | \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} | i \rangle \right|^2 d\Omega_{\mathbf{k}} \end{aligned}$$

با استفاده از اتحاد

$$\frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} = \frac{[\mathbf{r}, \hat{H}]}{i\hbar}$$

می‌توان نوشت

$$\begin{aligned} \langle i | \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} | f \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \langle i | \mathbf{r} \hat{H} - \hat{H} \mathbf{r} | f \rangle \\ &= \frac{\epsilon_i - \epsilon_f}{i\hbar} \langle i | \mathbf{r} | f \rangle = \frac{\omega_{if}}{i} \langle i | \mathbf{r} | f \rangle \end{aligned}$$

در این صورت آنگ گسیل خواهد شد

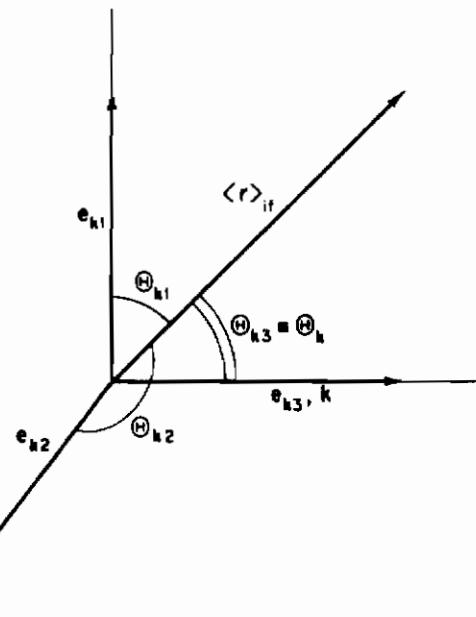
$$R_{\alpha \rightarrow \beta} = \frac{e^2 \omega_{if}^3}{2\pi \hbar c^3} \int d\Omega_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda} (v_{\mathbf{k}\lambda} + 1) |\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \langle i | \mathbf{r} | f \rangle|^2 \quad (49-12)$$

آنگ جذب شبیه به رابطه فوق است به استنای اینکه دلتای دوم کرونکر در (۴۶-۱۲) را نگه می‌داریم . به بیان دیگر ، جمله $(v_{k\lambda} + 1)$ در (۴۹-۱۲) را به وسیله v_k برای جذب جایگزین می‌کنیم . توجه کنیم که انتگرال (۴۹-۱۲) روی کره‌ای به شعاع $k = \omega_{if}/c$ گرفته می‌شود . اگر حالت اولیه تابش ناقطبیده باشد ، اعداد صحیح اشغال مستقل از λ هستند و قرار می‌دهیم $v_k = v_{k\lambda}$. حاصل جمع قطبشی در (۴۹-۱۲) خواهد شد

$$\sum_{\lambda} (v_{k\lambda} + 1) |e_{k\lambda} \cdot \langle i | f | f \rangle|^2 = (v_k + 1) \sum_{\lambda=1,2} |\langle i | f | f \rangle|^2 \cos^2 \Theta_{k\lambda} \quad (50-12)$$

که در آن $\Theta_{k\lambda}$ زاویه بین $e_{k\lambda}$ و $\langle r \rangle_{if}$ است (شکل ۱-۱۲) . اما ، چون حاصل جمع مربعهای سه‌کسینوس‌هادی برابر با یک است ، داریم

$$\sum_{\lambda=1,2} \cos^2 \Theta_{k\lambda} = \cos^2 \Theta_{k1} + \cos^2 \Theta_{k2} = 1 - \cos^2 \Theta_{k3} = \sin^2 \Theta_k \quad (51-12)$$



شکل (۱-۱۲) زاویه‌های Θ_{k1} ، Θ_{k2} و $\Theta_{k3} = \Theta_k$

که در آن Θ_k زاویه بین r_i و k (یعنی ، e_{k3}) است ، اگر تابش همسانگرد باشد (تعداد فوتونها برای تمام جهت‌های k بساناند) v_k می‌تواند برابر v_{if} قرار داده شود و از زیر انتگرال بیرون بیاورد . آنگ گذار سرانجام خواهد شد

$$R_{\alpha \rightarrow \beta} \left(\text{جذب} \right) = \frac{e^2 \omega_{if}^3}{2\pi \hbar c^3} \left(\frac{v_k + 1}{v_k} \right) \left[\int d\Omega_k \sin^2 \Theta_k = \frac{8\pi}{3} \right] |\langle r \rangle_{if}|^2$$

$$\left(k = \frac{\omega_{if}}{c} \right) \quad (52-12)$$

آنگسیل (جمله بالائی) از دو جمله تشکیل شده است . جمله اول شامل حالت تابش اولیه (یعنی ، ν_k) است و متناظر با گسیل القاعی است . این جمله ، همانطور که از اصل برگشت پذیری میکروسکوپیکی انتظار می رود ، با آنگ جذب القاعی یکسان است . جمله دوم در آنگ گسیل مستقل از حالت تابش اولیه است و حتی در غیاب تابش نیز رخ می دهد . این آنگ خود به خودی از (۵۲-۱۲) به صورت

$$R_{\alpha \rightarrow \beta}^{\text{spont}} = \frac{4e^2 \omega_{if}^3}{3\hbar c^3} |\langle i | \mathbf{f} | f \rangle|^2 \quad (52-12)$$

نتیجه می شود و با ضریب " A " اینشتین که در (۹۱-۷) محاسبه شد یکی است . توجه کنیم که این نتیجه گیری کاملاً مکانیک کوانتومی است و روی توازن دقیق آماری تکیه نمی کند . چگالی انرژی تابشی ، $\rho_{\text{rad}}(\omega)$ ، بر بازه فرکانس $d\omega$ به وسیله رابطه زیر تعریف می شود

$$2v_k \hbar \omega \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \rho_{\text{rad}}(\omega) d\omega$$

با استفاده از $\omega = ck$ ، این رابطه خواهد شد

$$2v_k \hbar \omega \frac{k^2 dk d\Omega_{\mathbf{k}}}{(2\pi)^3} = 2v_k \hbar \omega \frac{\omega^2 d\omega}{(2\pi c)^3} d\Omega_{\mathbf{k}} = \rho_{\text{rad}}(\omega) d\omega \quad (54-12)$$

ضریب دواز دو حالت قطبش نتیجه می شود . همسانگردی تابش جایگذاری $d\Omega_{\mathbf{k}} \rightarrow 4\pi$ را مجاز می سازد . با حل معادله فوق برای ν_k ، خواهیم یافت

$$\nu_k = \frac{\pi^2 c^3}{\omega^3 \hbar} \rho_{\text{rad}}(\omega) \quad \left(k = \frac{\omega}{c} \right) \quad (55-12)$$

با قراردادن (۵۵-۱۲) در (۵۲-۱۲) نتیجه می شود

$$R_{\alpha \rightarrow \beta}^{(\text{induced absorption or emission})} = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2} |\langle i | \mathbf{f} | f \rangle|^2 \rho_{\text{rad}}(\omega_{if}) \quad (56-12)$$

که منجر به ضریب " B " اینشتین ، در توافق با (۸۳-۷) ، می شود . آنگهای گذار در (۵۲-۱۲) و (۵۶-۱۲) به شرطی معتبرند که میدان تابشی خیلی شدید نباشد ؟ در غیر این صورت ، نظریه مرتبه اول نامناسب است . هم چنین ، تقریب دوقطبی

برای گذارهایی که در آنها طول موج فوتونهای گسیل شده یا جذب شده در مقایسه با ابعاد سیستم اتمی بزرگ هستند معتبر است . در گذارهای نوری داریم $\text{Å} \approx 5000 \text{ Å} \approx \lambda$ ، در صورتی که ابعاد اتمی فقط $\text{Å} \sim d$ است . برای گسیل اشعه X ($1 \text{ Å} \sim \lambda$) ، تقریب دوقطبی به طور آشکاری نامناسب است .

کوانتش میدان مفهوم فوتون ذره‌مانند با انرژی $\hbar\omega = \epsilon$ و تکانه $\hbar\mathbf{k} = \mathbf{P}$ را توجیه می‌کند . قطبش را می‌توان به حالت اسپینی فوتون ربط داد ، فوتون یک بوزونی است با اسپین واحد که جهتهای بالا و پائین آن با دو درجه قطبش عرضی متناظرند . جهت صفر اسپین وجود ندارد زیرا این جهت متناظر با قطبش طولی است ، که در تابش آزاد وجود ندارد (پیمانه عرضی) .

بالاخره ، چون لازم نیست تعداد فوتونها پایسته باشد ، توزیع حرارتی به وسیله فرمول بوز-اینشتین با پتانسیل شیمیائی مساوی با صفر ، یعنی

$$\bar{n}_k = \frac{1}{e^{(\hbar\omega_k/k_B T)} - 1}$$

داده می‌شود . با استفاده از (۱۲-۵۵) ، انرژی موجود در این فوتونهای حرارتی با فرکانس ω عبارت است از

$$\rho_{\text{rad}}(\omega) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}$$

که دقیقاً همان فرمول پلانک (۷-۹۰) است .

۸ - پهن شدن خطوط طیفی - رابطه عدم قطعیت انرژی - زمان

تعامیل‌بختهای ما برفرض وجود حالت‌های واقعاً "مقید مانا و امکان مشاهده دقیق مشخصات آنها استوار بوده‌اند . یک رابطه عدم قطعیت دیگر علاوه بر رابطه عدم قطعیت مکان-تکانه که در فصل ۳ آمد و مستقل از آن است وجود دارد . این اصل جدید دقت اندازه‌گیری انرژی یک حالت مانا را ، وقتی که این اندازه‌گیری در یک زمان محدودی انجام می‌گیرد ، محدود می‌کند . باید در نظر داشت که مفهوم یک حالت مقید مانا به‌طور زیرکانه‌ای دلالت براین دارد که از دیدگاه فیزیکی مشخصات حالت نسبت به انتقال در زمان تغییرناپذیر هستند . هر فرایند اندازه‌گیری که شامل کاوشی در انرژی وابسته به سیستم باشد ، که در یک بازهٔ

زمانی متناهی τ صورت گیرد ، این تغییرناپذیری را از بین می‌برد . نشان خواهیم داد که این امر منجر به عدم قطعیتی در اندازه‌گیری انرژی ΔE ، می‌شود که با

$$\Delta E \cdot \tau \approx \hbar$$

داده می‌شود .

در استنتاج قاعده طلائی در فصل ۷ (رک ۶۸-۷) به احتمال گذار وابسته به زمان به صورت زیر رسیدیم

$$P_{ij}(\tau) \propto \frac{(1 - \cos \omega_{ij}\tau)}{\tau \omega_{ij}^2} = \frac{\left(1 - \cos\left(\frac{\epsilon_j - \epsilon_i}{\hbar}\right)\tau\right)}{\tau \left[\frac{\epsilon_j - \epsilon_i}{\hbar}\right]^2}$$

این رابطه احتمال گذار بین ترازهای ϵ_j و ϵ_i را که به وسیله یک پریشیدگی ایستا القاء شده است ، به دست می‌دهد . این احتمال ، وجود گذار به حالت‌های نهایی ای را ایجاب می‌کند که انرژیهای آنها با انرژی حالت اولیه ، به طور متوسط به اندازه

$$|\epsilon_j - \epsilon_i| = \Delta E \approx \frac{\hbar}{\tau}$$

تفاوت دارد .

می‌توان این نتیجه را این‌گونه تعبیر کرد که بگوئیم پریشیدگی ایستا مانند یک وسیله اندازه‌گیری انرژی سیستم ناپریشیده عمل می‌کند . به علاوه ، اگر وسیله برای یک مدت محدود τ عمل کند ، نتیجه اندازه‌گیری منجر به عدم قطعیت ΔE در انرژی می‌شود . اگر $\tau \rightarrow \infty$ اندازه‌گیری موئشر انرژی دقیق می‌شود .

لازم به تذکر است که این رابطه عدم قطعیت فقط به طول مدت τ بستگی دارد و نه به شدت پریشیدگی .

سیستمی مرکب از دو زیر سیستم که به طور ضعیفی برهم‌کنش می‌کنند ، به عنوان مثال ، جعبه‌ای شامل اتمها و تابش الکترومغناطیسی ، در نظر بگیریم . فرض کنیم که انرژی سیستم اتمی به وسیله برهم‌کنش با تابش اندازه‌گیری شود . چون این تابش گذارهایی را در سیستم اتمی القاء می‌کند ، اتمها به مدت زمان محدودی که طول عمر نامیده می‌شود و با

$$\tau_i = \frac{1}{\gamma_i}$$

داده می شود، در حالت های اولیه خود باقی می مانند. لذا بیانگر آهنگ کل کاهش جمعیت تراز است که در اثر فوتونها القاء شده است. در واقع، همان طور که دیدیم، حتی در غیاب فوتونها (خلاء تابشی)، عمر محدودی که ناشی از گسیل خود به خودی است وجود دارد. بنابراین انرژی یک تراز یک سیستم اتمی نمی تواند با دقیقی بیشتر از

$$\Delta \varepsilon_i \sim \frac{\hbar}{\tau_i}$$

که در آن τ_i عمر مربوط به گسیل خود به خودی است، اندازه گیری شود. این عدم قطعیت منجر به یک پهنه ای طبیعی تراز می شود و معنی آن این است که یک تراز اتمی حداکثر شبه گستته است.

گذارهای بین حالت های که به طور طبیعی پهن شده اند منجر به گسیل (یا جذب) فوتونه ای با پهنه ای طیفی

$$\Delta \omega_{ij} = \frac{\Delta \varepsilon_i + \Delta \varepsilon_j}{\hbar} = \frac{1}{\tau_i} + \frac{1}{\tau_j} = \gamma_i + \gamma_j$$

می شوند. بنابراین خطوط طیفی یک اتم به طور طبیعی پهن هستند، و پهنه ای هر خط به وسیله عمر حالت های اولیه و نهایی وابسته به گذار تعیین می شود. این پهن شدن زیر بنای واقعیتی است که بنا به آن تابش، وقتی در یک مدت محدودی از زمان اندازه گیری می شود، نمی تواند در یک حالت تکفام مشاهده شود.

مسائل

۱-۱۲ چگالی لاغرانژی ارتعاشات یک سیال ایده‌آل را به صورت

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \rho_0 \dot{\eta}^2 + P_0 \nabla \cdot \eta - \frac{1}{2} \gamma P_0 (\nabla \cdot \eta)^2$$

در نظر بگیرید که در آن ρ_0 چگالی در حال تعادل، P_0 فشار در حال تعادل و η نسبت گرمای ویژه در فشار ثابت به گرمای ویژه در حجم ثابت سیال است. $\eta(r, t)$ را مختصه میدانی بگیرید که جایه جایی یک نقطه در داخل سیال در نقطه r و در زمان t را توصیف می کند.

(الف) چگالی تکانه مزدوج π را پیدا کند.

(ب) معادله حرکت برای $\langle \mathbf{r}, t \rangle$ را پیدا کنید .

(ج) نشان دهید که چگالی موضعی سیال به وسیله

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \rho_0(1 + \xi(\mathbf{r}, t))$$

داده می شود که در آن

$$\xi = -\nabla \cdot \eta$$

(د) قسمت (ب) را بر حسب $\langle \mathbf{r}, t \rangle$ بیان کنید .

(ه) با به کار بردن یک تبدیل لوزاندر، چگالی هامیلتونی سیال را پیدا کنید .

۲-۱۲ تحقیق کنید که لاگرانژی (۱۶-۱۲) منجر به هامیلتونی (۱۸-۱۲) می شود .

۳-۱۲ نشان دهید که تبدیل پیمانه ای $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla \chi$ و $\Phi \rightarrow \Phi - \frac{\chi}{c}$ ، میدان های \mathbf{E} و \mathbf{B} را تغییر نمی دهد .

۴-۱۲ اتحاد زیر را ثابت کنید

$$\frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} = \frac{[\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}]}{i\hbar} \quad \hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}})$$

۵-۱۲ مقطع موثر یونش برای گسیل الکترون از حالت پایه هیدروژن را که در اثر اشعه X که به شکل یک موج الکترومغناطیسی تخت با فرکانس ω که در جهت محور z منتشر می شود و در امتداد محور z قطبیده شده است القاء می شود ، پیدا کنید . فرض کنید $\omega \gg \omega_0$ و از اسپین الکترون صرف نظر کنید . (راهنمایی : فرض کنید حالت اولیه مركب است از یک الکترون هیدروژنی در حالت

$$\psi_1 = \frac{1}{(\pi a^3)^{1/2}} e^{-r/a}$$

همراه با تعداد n فوتون که بردار تکانه آنها (\mathbf{k}) در امتداد محور z و بردار قطبیش آنها در امتداد محور z است . حالت نهایی تشکیل شده است از یک فوتون کمتر (جذب) و یک الکترون آزاد در حالت

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

که $P = \hbar K$ تکانه الکترون است . چگالی حالت‌های نهائی الکترون (با صرف‌نظر کردن از اسپین) عبارت است از

$$\rho_K = \frac{\sqrt{mK}}{(2\pi)^3} \frac{d\Omega_K}{\hbar^2}$$

به خاطر داشته باشید که $\hbar\omega = p^2/2m + 13.6 \text{ eV}$

۱۲-۶ با استفاده از نتایج فوق ، نشان دهید که اگر الکترون در آغاز آزاد باشد اثر فتو-الکتریکی (جذب فوتونی) نمی‌تواند صورت گیرد . (راهنمایی: قرار دهید $\psi = e^{ikx - Et}/\sqrt{v}$)

۱۲-۷ عملگر $(45-12)$ عبارت است از حاصل ضرب عملگرهای جابه‌جانا پذیر و بنابراین عموماً "هرمیتی" نیست . نشان دهید که این مطلب تاثیری روی نتایج $(44-12)$ نمی‌گذارد . (راهنمایی: نشان دهید که در پیمانه عرضی ، جملات $(44-12)$ با عوض کردن ψ با $e^{ikx - Et}/\sqrt{v}$ دست‌نخورده باقی می‌مانند) .

مراجع پیشنهادی

-
- Berestetskii, V. B., Lifshitz, E. M., and Pitaevskii, L. P., "Relativistic Quantum Theory." Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1971.
- Bjorken, J. D., and Drell, S. D., "Relativistic Quantum Fields." McGraw-Hill, New York, 1965.
- Goldstein, H., "Classical Mechanics." Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1950.
- Heitler, W., "Quantum Theory of Radiation," 3rd ed. Oxford Univ. Press, London and New York, 1954.
- Messiah, A., "Quantum Mechanics," Vol. II. Wiley, New York, 1962.
- Schiff, L. I., "Quantum Mechanics," 3rd ed. McGraw-Hill, New York, 1968.
- Yourgrau, W., and Mandelstam, S., "Variational Principles in Dynamics and Quantum Theory," 3rd ed. Saunders, Philadelphia, 1968.

پیوست الف

تقریب و نتzel - کرامز - بریلوئن (WKB) یا "انتگرال فاز"

معادله شرودینگر یک بعدی برای ذرهای در یک پتانسیل $V(x)$ با انرژی $\epsilon > V(x)$ را در نظر بگیرید

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right\} \psi = \epsilon \psi$$

با

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + k^2(x) \right\} \psi = 0 \quad (\text{الف - ۱})$$

که در آن

$$k(x) = \left[\frac{2m(\epsilon - V(x))}{\hbar^2} \right]^{1/2}$$

اگر $V(x)$ برابر با مقدار ثابتی، مثلاً V_0 ، باشد، جواب (الف - ۱) عبارت است از $\psi = e^{\pm ik_0 x}$

$$k_0 = \left[\frac{2m(\epsilon - V_0)}{\hbar^2} \right]^{1/2}$$

موردی را در نظر بگیریم که در $T(x)$ به هستگی تغییر می‌کند و جوابی به شکل

$$\psi = e^{iu(x)} \quad (\text{الف - ۲})$$

را آزمایش کنیم. با قراردادن این جواب در (الف - ۱) خواهیم داشت

$$iu'' - (u')^2 + k^2 = 0 \quad \text{یا} \quad u' = \pm(k^2 + iu'')^{1/2} \quad (\text{الف - ۳})$$

اگر $u'' = 0$ ثابت باشد از (الف - ۲) انتظار داریم که $u \rightarrow \pm k_0 x$ ، $u' \rightarrow \pm k_0$ و باشد. این انتظار با (الف - ۳) سازگار است. اما اگر u'' به کندی تغییر کند، در (الف - ۳) با تقریب مرتبه اول قرار می‌دهیم $u'' = 0$ و نتیجه می‌گیریم

$$u' = \pm k(x)$$

که پس از انتگرال‌گیری منجر می‌شود به

$$u = \pm \int k(x) dx + C$$

با قراردادن این نتیجه، یعنی، $u'' = \pm k'(x)$ ، در طرف راست (الف - ۳) نتیجه بهتری به دست می‌آوریم که عبارت است از

$$u' = \pm(k^2 \pm ik')^{1/2}$$

با

$$u = \pm \int (k^2 \pm ik')^{1/2} dx + C$$

با استفاده از (الف - ۲)، جواب تقریبی معادله شرودینگر می‌شود

$$\psi \simeq \exp[\pm i \int (k^2 \pm ik')^{1/2} dx] \quad (\text{الف - ۴})$$

ثابت^۴ حذف شده است زیرا، حداکثر، در بهنجارش \neq تاثیر می‌گذارد. اکنون فرض کنیم که پتانسیل به کندی تغییر کند، به طوری که داشته باشیم

$$|k'| \ll k^2 \quad (\text{الف - ۵})$$

در این مورد، رادیکال موجود در (الف - ۴) می‌تواند بسط داده شود و نتیجه دهد

$$\psi \simeq \exp \pm i \int \left(k \pm \frac{i}{2} \frac{k'}{k} \right) dx = \exp[-\frac{1}{2} \ln k] \exp[\pm i \int k dx]$$

یا

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{k}} \exp[\pm i \int k dx] \quad (\text{الف - ۶})$$

که در آن

$$k(x) = \left[\frac{2m(\epsilon - V)}{\hbar^2} \right]^{1/2}$$

معادله (الف - ۶) به تقریب WKB برای حل (الف - ۱) موسوم است.
در موردی که $\epsilon > V(x)$ باشد، می‌توان نشان داد که تابع تقریبی به شکل

$$\psi \simeq \frac{1}{\sqrt{K}} \exp(\pm \int K dx) \quad (\text{الف - ۷})$$

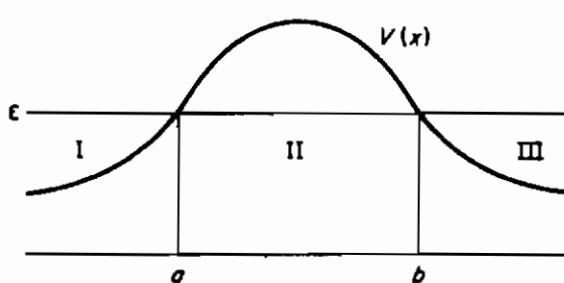
در می‌آید که در آن

$$K(x) = \left[\frac{2m(V - \epsilon)}{\hbar^2} \right]^{1/2}$$

هم (الف - ۶) و هم (الف - ۷) در آن نواحی ای معتبرند که داشته باشیم

$$|k'| \ll k^2 \quad \text{یا} \quad |K'| \ll K^2 \quad (\text{الف - ۸})$$

فرض کنیم با یک سد پتانسیل $V(x)$ سروکار داریم که انرژی ذره کمتر از قله سد باشد (شکل الف - ۱). توجه کنیم که در نقاط بازگشت کلاسیکی (a و $x = b$)، k (یا K) صفر می‌شود. در نتیجه (الف - ۵) نمی‌تواند برقرار باشد و تقریب WKB در این نقاط با شکست مواجه می‌شود.



شکل (الف - ۱)

فرض کنیم جواب عمومی معادله شرودینگر (الف - ۱) را که در شرایط پیوستگی در $x = a$ و $x = b$ صدق می‌کند، می‌دانیم. در ناحیه I به اندازه کافی دور از $x = a$ ، این

جواب می‌تواند به‌طور تقریب به‌وسیله تابع WKB به‌صورت

$$\psi_1 \approx \frac{A}{\sqrt{k}} \exp\left(i \int_a^x k dx\right) + \frac{B}{\sqrt{k}} \exp\left(-i \int_a^x k dx\right)$$

$$\left(k = \left[\frac{2m(\epsilon - V(x))}{\hbar^2} \right]^{1/2} \right) \quad (\text{الف - ۹ الف})$$

به‌دست آید، انتخاب حدّهای پائین در انتگرال‌ها مهم نیستند زیرا صرفاً "در ضرایب A و B که در این نقطه اختیاری هستند، مؤثرند. برای نواحی II و III داریم

$$\psi_{II} \approx \frac{C}{\sqrt{K}} \exp\left(\int_a^x K dx\right) + \frac{D}{\sqrt{K}} \exp\left(-\int_a^x K dx\right) \quad (\text{الف - ۹ ب})$$

$$\psi_{III} \approx \frac{E}{\sqrt{K}} \exp\left(i \int_a^x k dx\right) + \frac{F}{\sqrt{K}} \exp\left(-i \int_a^x k dx\right) \quad (\text{الف - ۹ ج})$$

که در آنها

$$K = \left[\frac{2m(V(x) - \epsilon)}{\hbar^2} \right]^{1/2}$$

این تقریب‌ها تا وقتی قابل قبول‌اند که در نزدیکی a و b باشیم، می‌مانند ثابت‌های E، D، C، B، A و F که باید تعیین شوند. به‌نظر جالب می‌آید که با تحمیل شرایط پیوستگی در $x = a$ و $x = b$ به (الف-۹) معادلاتی برای این ثابت‌ها ایجاد کنیم. این اقدام کاملاً "نادرست است زیرا جواب‌های (الف-۹) فقط دوراز نقاط بازگشت کلاسیکی معتبراند. از یک نظر، جواب‌های WKB رفتار مجانبی جواب درست را در هردو طرف، اما دوراز نقاط بازگشت کلاسیکی، توصیف می‌کنند. در نزدیکی این نقاط یک تقریب کاملاً "متفاوتی موردنیاز است. آنچه که ما به‌دلیل آن هستیم فرمول‌های رابطی هستند که جواب‌های WKB را به‌طور رام از طریق این توابع "مجاور" به‌یکدیگر ربط می‌دهند، ریاضیات لازم برای برقراری این فرمول‌ها خارج از بحث این کتاب است. نتایج به‌صورت زیر هستند*:

* به عنوان مثال به کتاب‌های زیر مراجعه کنید

P. stehle, " Quantum Mechanics ", Holden-Day, San Francisco, 1966.

S. Borowitz, " Fundamentals of Quantum Mechanics ",

Benjamin, New York, 1967.

مورد (الف) نقطه بازگشت در سمت چپ ناحیه‌ای که از نظر کلاسیکی ممنوع است

($x = a$ در شکل الف - ۱) قرار دارد

$$x < a \quad x > a$$

$$\frac{2}{\sqrt{k}} \cos \left[\int_x^a k dx - \frac{1}{4} \pi \right] \leftarrow \frac{1}{\sqrt{K}} \exp \left(- \int_a^x K dx \right) \quad (\text{الف - ۱۰ الف})$$

$$\frac{1}{\sqrt{k}} \sin \left[\int_x^a k dx - \frac{1}{4} \pi \right] \rightarrow \frac{-1}{\sqrt{K}} \exp \left(\int_a^x K dx \right) \quad (\text{الف - ۱۰ ب})$$

مورد (ب) نقطه بازگشت در سمت راست ناحیه‌ای که از نظر کلاسیکی ممنوع است

($x = b$ در شکل الف - ۱) قرار دارد

$$x < b \quad x > b$$

$$\frac{1}{\sqrt{K}} \exp \left(- \int_x^b K dx \right) \rightarrow \frac{2}{\sqrt{k}} \cos \left(\int_b^x k dx - \frac{1}{4} \pi \right) \quad (\text{الف - ۱۰ ج})$$

$$\frac{-1}{\sqrt{K}} \exp \left(\int_x^b K dx \right) \leftarrow \frac{1}{\sqrt{k}} \sin \left(\int_b^x k dx - \frac{1}{4} \pi \right) \quad (\text{الف - ۱۰ د})$$

این فرمولهای رابط جوابهای نمایی را به جوابهای نوسانی در نقاط بازگشت ربط می‌دهند. پیکانها جهت ارتباط را نشان می‌دهند، گرچه با جهت ارتباط کاری نخواهیم داشت.

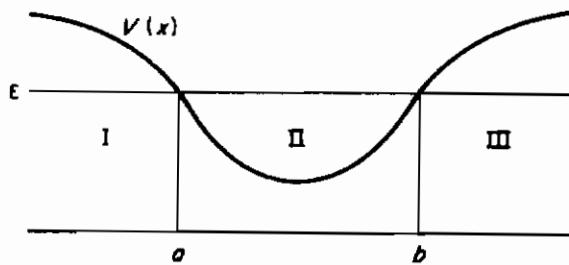
نسبتهای ثابت‌های وابسته به جوابهای مربوط به سه ناحیه که به‌وسیله (الف - ۹) داده شده‌اند، اکنون می‌توانند با استفاده از فرمولهای رابط به عنوان شرایط "مرزی" به دست آیند. ریاضیات مربوطه سراسرت و لی طولانی است، ضریب عبور در تقریب WKB به صورت زیر حاصل می‌شود

$$\mathcal{T} = \left| \frac{E}{A} \right|^2 = \left[\exp \left(\int_a^b K dx \right) + \frac{1}{4} \exp \left(- \int_a^b K dx \right) \right]^{-2}$$

برای سدهای بلند و پهن، نمای منفی داخل کروشه می‌تواند نادیده گرفته شود و داریم

$$\mathcal{T} \approx \exp \left(-2 \int_a^b K dx \right) \quad \left(K = \left[\frac{2m(V(x) - \epsilon)}{\hbar^2} \right]^{1/2} \right) \quad (\text{الف - ۱۱})$$

تقریب WKB هم چنین می‌تواند به حالات مقید یک پتانسیل جاذبه، شبیه‌آنچه که در شکل (الف-۲) نمایش داده شده است، به‌کار رود. در اینجا نقطه بازگشت کلاسیکی $a = x$



(شکل الف - ۲)

در سمت راست ناحیه I که از نظر کلاسیکی منوع است قرار دارد در صورتی که $b = x$ در سمت چپ ناحیه III که از نظر کلاسیکی منوع است واقع شده است، توابع قابل قبول (یعنی، آنهایی که در $x = \pm\infty$ صفر می‌شوند) به‌شکل زیر هستند

$$\psi_I \simeq \frac{A}{\sqrt{K}} \exp\left(\int_a^x K dx\right)$$

$$\psi_{II} \simeq \frac{B}{\sqrt{k}} \exp\left(i \int_b^x k dx\right) + \frac{C}{\sqrt{k}} \exp\left(-i \int_b^x k dx\right)$$

$$\psi_{III} \simeq \frac{D}{\sqrt{K}} \exp\left(-\int_b^x K dx\right)$$

فرمول رابط (الف - ۱۵ج) را به ψ_I و ψ_{II} در $a = x$ اعمال می‌کنیم. با نوشتن

$$\psi_I = \frac{A}{\sqrt{K}} \exp\left(-\int_x^a K dx\right)$$

توجه کنیم که این تابع باید، با استفاده از (الف - ۱۵ج)، به

$$\psi_{II} \simeq \frac{2A}{\sqrt{k}} \cos\left(\int_a^x k dx - \frac{1}{4}\pi\right)$$

متصل شود که می‌تواند، با استفاده از $\cos \theta = \sin(\theta + \frac{1}{2}\pi)$ ، به صورت زیر نیز نوشته شود

$$\begin{aligned}\psi_{11} &\simeq \frac{2A}{\sqrt{k}} \cos \left(\int_a^b k dx - \int_x^b k dx - \frac{1}{4}\pi \right) \\ &= \frac{2A}{\sqrt{k}} \sin \left(\int_a^b k dx - \int_x^b k dx + \frac{1}{4}\pi \right)\end{aligned}$$

با استفاده از اتحاد $\sin(A - B) = \sin A \cos B - \cos A \sin B$ رابط فوق می‌تواند به شکل زیر درآید

$$\begin{aligned}\psi_{11} &\simeq \left[\sin \int_a^b k dx \right] \left[\frac{2A}{\sqrt{k}} \cos \left(\int_x^b k dx - \frac{1}{4}\pi \right) \right] \\ &\quad - \left[\cos \int_a^b k dx \right] \left[\frac{2A}{\sqrt{k}} \sin \left(\int_x^b k dx - \frac{1}{4}\pi \right) \right]\end{aligned}\quad (\text{الف - ۱۲})$$

اما ، در $x = b$ ، جمله دوم (بنابر (الف - ۱۰ ب)) به یک نمایی صعودی در ناحیه III متصل می‌شود . چون حالت مقید است چنین جمله‌ای نباید وجود داشته باشد و تنها در صورتی جواب قابل قبولی داریم که ضریب جمله سینوسی در (الف - ۱۲) صفر شود ، یعنی ،

$$\cos \int_a^b k dx = 0 \quad \text{یا} \quad \int_a^b k_n dx = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi \quad (\text{الف - ۱۳})$$

چون داریم

$$k_n = \left[\frac{2m(\epsilon_n - V)}{\hbar^2} \right]^{1/2}$$

(الف - ۱۳) در حقیقت یک شرط کوانتش برای انرژی است . شرط (الف - ۱۳) می‌تواند به صورت

$$\frac{2}{\hbar} \int_a^b [2m(\epsilon_n - V)]^{1/2} dx = (n + \frac{1}{2})2\pi$$

یا

$$2 \int_a^b p_n(x) dx = (n + \frac{1}{2})\hbar$$

نوشته شود . انتگرال طرف چپ انتگرالی روی حرکت کلاسیکی از a به b و سپس به a است و می‌تواند به صورت

$$J_n = \oint p_n dx = (n + \frac{1}{2})\hbar \quad (\text{الف - ۱۴})$$

نوشته شود، که در آن \int انتگرال فاز نامیده می‌شود. معادله (الف - ۱۴) تعمیمی است از آنچه که تحت عنوان قواعد کوانتش ویلسون - سامرفلد خوانده می‌شود، با اعمال (الف - ۱۳) به نوسانگر، قرار می‌دهیم $V = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ و نتیجه می‌گیریم

$$\int_a^b \left[\frac{2m\varepsilon_n - m^2\omega^2x^2}{\hbar^2} \right]^{1/2} dx = (n + \frac{1}{2})\pi$$

نقاط بازگشت کلاسیکی در $b = (2\varepsilon/m\omega^2)^{1/2}$ و $a = -(2\varepsilon/m\omega^2)^{1/2}$ هستند. از محاسبه انتگرال طرف چپ نتیجه می‌شود

$$\frac{\pi\varepsilon_n}{\hbar\omega} = (n + \frac{1}{2})\pi \quad \text{یا} \quad \varepsilon_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$$

که همان نتیجه شناخته شده برای نوسانگر است.

(جواب WKB (الف - ۲) می‌تواند در سه بعدی (با قراردادن $u(\mathbf{r}) = W(\mathbf{r})/\hbar$) به صورت

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{iW(\mathbf{r})/\hbar} \quad (\text{الف - ۱۵})$$

نوشته شود، با قراردادن این جواب در معادله ویژه مقداری شرودینگر

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right\} \psi(\mathbf{r}) = \varepsilon \psi(\mathbf{r}) \quad (\text{الف - ۱۶})$$

نتیجه می‌گیریم

$$\frac{1}{2m} (\nabla W)^2 - [\varepsilon - V(\mathbf{r})] - \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 W = 0 \quad (\text{الف - ۱۷})$$

توجه کنیم که ثابت پلانک \hbar فقط در جمله آخر طرف چپ در (الف - ۱۷) وارد می‌شود. در حد کلاسیکی، $\hbar \rightarrow 0$ ، داریم

$$\frac{1}{2m} (\nabla W)^2 + V(r) = \varepsilon \quad (\text{الف - ۱۸})$$

معادله (الف - ۱۸) به معادله هامیلتون - راکوبی مستقل از زمان برای تابع مشخصه هامیلتون

W موسوم است . یک حل این معادله منجر به جواب مسئله کلاسیکی می شود* . روش WKB تصحیحاتی در این نتیجه کلاسیکی برحسب توانهای \hbar فراهم می کند** .
یک شاهد جالب بین مکانیک کوانتومی و اپتیک وجود دارد . در اپتیک ، جوابهای معادله

$$\nabla^2\phi + k^2\phi = 0 \quad (\text{الف} - ۱۹)$$

را جستجو می کنیم که در آن $k(\mathbf{r})$ بردار موج و $\phi(\mathbf{r})$ "تابع" موج است . بردار موج می تواند به صورت

$$k(\mathbf{r}) = k_0 n(\mathbf{r}) \quad \text{که در آن}$$

$$k_0 = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$$

و n ضریب شکست موضعی است ، بیان شود . معادله (الف - ۱۹) مشابه (الف - ۱۶) است به شرط اینکه "ضریب شکست" مکانیک کوانتومی را با

$$n_{\text{quantum}}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\epsilon - V(\mathbf{r})}{\epsilon}}$$

مشخص کنیم . با قراردادن یک جواب آزمایشی به شکل

$$\phi = e^{ik_0 L(\mathbf{r})} \quad (\text{الف} - ۲۰)$$

در (الف - ۱۹) به معادله ای به شکل زیر برای L هدایت می شویم

$$ik_0 \nabla^2 L - k_0^2 (\nabla L)^2 + n^2 k_0^2 = 0 \quad (\text{الف} - ۲۱)$$

* به کتاب زیر مراجعه کنید

H. Goldstein, " classical Mechanics ", Addison-wesley,
Reading , Massachusetts , 1950.

** به کتاب زیر مراجعه کنید

S. Borowitz, "Fundamentals of Quantum Mechanics",
Benjamin , New York , 1967.

معادله (الف - ۲۱) مشابه با (الف - ۱۷) است . در حد نور هندسی ($0 \rightarrow h$) به این نتیجه می رسم که k_0 باید بزرگ باشد و جمله اول (الف - ۲۱) می تواند حذف شود و نتیجه می شود

$$(\nabla L)^2 = n^2 \quad (\text{الف} - 22)$$

معادله (الف - ۲۲) به معادله آیکونال موسوم است و معادله بنیادی نور هندسی است ، این معادله مشابه با معادله هامیلتون - ژاکوبی (الف - ۱۸) است ،تابع L طول مسیر نوری یا آیکونال نامیده می شود .

این مشابهت می تواند این طور خلاصه شود که مکانیک کلاسیکی (معادله هامیلتون - ژاکوبی) نمایانگر حد هندسی مکانیک کوانتومی (معادله شرودینگر) در حد $0 \rightarrow h$ است .

پیوست ب

تصویرهای هایزنبرگ و برهمکنش

در تصویر شرودینگر، عملگرها می‌توانند فقط طبق یک بستگی صریح زمانی، تحول پیدا کنند، یعنی

$$\hat{A}_S = \hat{A}(t)$$

برای سهولت، $|0\rangle$ را به عنوان زمان اولیه در نظر می‌گیریم. بردارهای حالت در تصویر شرودینگر به صورت

$$|\beta, t\rangle_S = e^{-i\omega t/\hbar} |\beta, 0\rangle$$

تحول می‌یابند، که در آن فرض کردہ ایم هامیلتونی \hat{H} مستقل از زمان است. بستگی زمانی مقادیر قابل انتظار به مسیله رابطه زیر داده می‌شود

$$\langle A(t) \rangle = \langle \beta, t | S \hat{A}_S | \beta, t \rangle_S = \langle \beta, 0 | e^{i\omega t/\hbar} \hat{A}(t) e^{-i\omega t/\hbar} | \beta, 0 \rangle \quad (ب - ۱)$$

اگر بردارهای حالت را در همان مقادیرشان در $0 = t$ ثابت نگه داریم و اجازه دهیم که عملگرها به صورت

$$\hat{A}_H = e^{i\omega t/\hbar} \hat{A}_S e^{-i\omega t/\hbar} \quad (ب - ۲)$$

تحول یابند به همان بستگی زمانی (ب - ۱) می‌رسیم. این دستورالعمل به تصویر هایزنبرگی موسوم است.

فرض می‌کنیم که \hat{H} "صریحاً" به زمان بستگی نداشته باشد. توجه کنیم که (ب - ۲) ایجاب می‌کند که $\hat{H}_S = \hat{H}_H$. بنابراین شاخص پائینی هامیلتونی لازم نیست، همچنان در $t = 0$ بردارها و عملگرهای دو تصویر برباریکار منطبق‌اند.

در تصویر شرودینگر یک بردار حالت می‌چرخد، در نتیجه تصاویر آن روی ویژه - بردارهای عملگرهای مناسب به مشاهده پذیرها با زمان تغییر می‌کند و برای مقادیر قابل انتظار یک بستگی زمانی به شکل (ب - ۱) ایجاد می‌کنند. در تصویر هایزنبرگ بردار حالت ثابت می‌ماند ولی ویژه بردارهای عملگرهای هایزنبرگ می‌چرخند، نتیجه آن ایجاد یک بستگی زمانی است که با آنچه که توسط (ب - ۱) داده شده است یکسان است.

در تصویر شرودینگر بردارهای حالت در معادله حرکت شرودینگر، یعنی،

$$\hat{H} |\beta, t\rangle_S = i\hbar \frac{d}{dt} |\beta, t\rangle_S \quad (\text{ب - ۳ الف})$$

صدق می‌کنند، در حالی که در تصویر هایزنبرگ، عملگرها در معادله حرکت هایزنبرگ، یعنی،

$$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{[\hat{A}_H, \hat{H}]}{i\hbar} + \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} \quad (\text{ب - ۳ ب})$$

صدق می‌کنند. معادله (ب - ۳ ب) از مشتق‌گیری از (ب - ۲) به دست می‌آید، جمله آخر طرف راست (ب - ۳ ب) شامل هرنوع بستگی صریح زمانی است و به وسیله

$$\frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} = e^{i\hat{H}t/\hbar} \frac{\partial \hat{A}_S}{\partial t} e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$

تعریف می‌شود. دو تصویر فوق به صورت زیر خلاصه می‌شوند

تصویر شرودینگر	تصویر هایزنبرگ
$ \beta, t\rangle_S = e^{-i\hat{H}t/\hbar} \beta, 0\rangle$	$ \beta, t\rangle_H = \beta, 0\rangle$
$\hat{A}_S = \hat{A}(t)$	$\hat{A}_H = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{A}_S e^{-i\hat{H}t/\hbar}$
$\hat{H} \beta, t\rangle_S = i\hbar \frac{d}{dt} \beta, t\rangle_S$	$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{[\hat{A}_H, \hat{H}]}{i\hbar} + \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t}$

تصاویر واسطی بین تصویر شرودینگر و هایزنبرگ نیز می‌توانند ایجاد شوند. یک

هامیلتونی به شکل $\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 = \mathcal{H}$ در نظر بگیریم . در عمل ، \mathcal{H}_0 معمولاً "نمايانگر" هامیلتونی برای سیستمهای چند جسمی ایده‌آل است در صورتی که \mathcal{H} مربوط به برهمکنش بین ذرات است ، در نتیجه تصویری که باید گسترش داده شود به تصویر برهمکنشی موسوم است . تصویری در نظر بگیرید که در آن عملگرهای مناسب به مشاهده‌پذیرها به طریقی شبیه به عملگرهای هایزنبرگ تحول می‌یابند ، یعنی ،

$$\hat{A}_1 = e^{i\mathcal{H}_0 t/\hbar} \hat{A}_S e^{-i\mathcal{H}_0 t/\hbar} \quad (\text{ب - ۴ الف})$$

این تصویر تصویر هایزنبرگ نیست زیرا در این رابطه \mathcal{H}_0 وارد شده است و نه \mathcal{H} ، اکنون می‌پرسیم ، تحول بردار حالت چگونه باید باشد تا این نتایج با (ب - ۱) سازگار باشند ؟ تحقیق اینکه رفتار آن باید به صورت

$$|\beta, t\rangle_1 = e^{i\mathcal{H}_0 t/\hbar} e^{-i\mathcal{H}_1 t/\hbar} |\beta, 0\rangle \quad (\text{ب - ۴ ب})$$

باشد ساده است ، در این مورد داریم

$$\langle A \rangle = \langle \beta, t |_1 \hat{A}_1 | \beta, t \rangle_1$$

که با (ب - ۱) سازگار است . توجه کنیم که (ب - ۴ ب) می‌تواند به صورت زیر نوشته شود

$$|\beta, t\rangle_1 = e^{i\mathcal{H}_0 t/\hbar} |\beta, t\rangle_S \quad (\text{ب - ۴ ج})$$

معادله حرکت برای عملگرها در تصویر برهمکنشی از شکل هایزنبرگ پیروی می‌کند ، یعنی

$$\frac{d\hat{A}_1}{dt} = \frac{[\hat{A}_1, \mathcal{H}_0]}{i\hbar} + \frac{\partial \hat{A}_1}{\partial t} \quad (\text{ب - ۵})$$

این رابطه می‌تواند با مشتق‌گیری از (ب - ۴ الف) به دست آید .

معادله حرکت برای بردارهای حالت در این تصویر با مشتق‌گیری از (ب - ۴ ج) و با استفاده از (ب - ۳ الف) به دست می‌آید . از این نتیجه می‌شود

$$\mathcal{D}_1 |\beta, t\rangle_1 = i\hbar \frac{d}{dt} |\beta, t\rangle_1 \quad (\text{ب - ۶ الف})$$

که در آن

$$\mathcal{D}_1 = e^{i\mathcal{H}_0 t/\hbar} \mathcal{D}_S e^{-i\mathcal{H}_0 t/\hbar} \quad (\text{ب - ۶ ب})$$

در تصویر برهم‌کنشی، عملگرها برابر با \hat{P}_i تحول می‌یابند در صورتی که بردارها بر طبق \hat{P}_i تحول می‌یابند. با این وجود، جواب (ب - ۶الف) نمی‌تواند به راحتی پیدا شود زیرا \hat{P}_i در (ب - ۶ب)، حتی وقتی که \hat{P}_i مستقل از زمان باشد، به زمان بستگی دارد. وقتی برهم‌کنشها صفر می‌شوند، تصویر برهم‌کنشی به تصویر هایزنبرگ تقلیل می‌یابد. تصویر برهم‌کنشی، حتی وقتی که \hat{P}_i به‌طور صریح تابع زمان نباشد، نیز معتبر است.

گرچه (ب - ۶الف) نمی‌تواند به راحتی حل شود، ولی با ضرب کردن هر دو طرف آن در $dt/i\hbar$ ، انتگرال‌گیری و اضافه کردن یک مقدار ثابت اولیه، می‌تواند به یک معادله انتگرالی تبدیل شود. با انجام این عملیات، خواهیم داشت

$$|\beta, t\rangle_i = |\beta, 0\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \hat{P}_i(t') |\beta, t'\rangle_i dt' \quad (\text{ب - ۷})$$

در این مرحله، بهتر است که (ب - ۷) را، با استفاده از (ب - ۴ج) و (ب - ۶الف)، در تصویر شرودینگر بیان کنیم؛ بدین ترتیب خواهیم داشت

$$e^{i\omega_0 t/\hbar} |\beta, t\rangle_s = |\beta, 0\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_0 t'/\hbar} \hat{P}_s e^{-i\omega_0 t'/\hbar} e^{i\omega_0 t'/\hbar} |\beta, t'\rangle_s dt'$$

پس از ساده کردن،

$$|\beta, t\rangle_s = e^{-i\omega_0 t/\hbar} |\beta, 0\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{-i\omega_0(t-t')/\hbar} \hat{P}_s(t') |\beta, t'\rangle_s dt' \quad (\text{ب - ۸})$$

از این به بعد، شاخص پائینی s در تصویر شرودینگر را حذف می‌کنیم، نماد $(t)\hat{P}$ هر نسخه بستگی صریح زمانی در پتانسیل برهم‌کنشی را شامل می‌شود. اگر \hat{P} کوچک باشد، یعنی، $\hat{P} \rightarrow \lambda\hat{P}$ ، معادله (ب - ۸) می‌تواند با تکرارهای متوالی حل شود، تقریب مرتبه اول با قراردادن نتیجه مرتبه صفر، $e^{-i\omega_0 t/\hbar} |\beta, 0\rangle = |\beta, t\rangle$ ، در انتگرال به دست می‌آید که عبارت است از

$$|\beta, t\rangle \simeq e^{-i\omega_0 t/\hbar} |\beta, 0\rangle + \frac{\lambda}{i\hbar} \int_0^t e^{-i\omega_0(t-t')/\hbar} \hat{P}(t') e^{-i\omega_0 t'/\hbar} |\beta, 0\rangle dt'$$

پس

$$|\beta, t\rangle = [O^{(0)}(t, 0) + O^{(1)}(t, 0)] |\beta, 0\rangle$$

که در T_n

$$U^{(0)}(t, 0) = e^{-i\omega_0 t / \hbar}$$

و

$$U^{(1)}(t, 0) = \frac{\lambda}{i\hbar} \int_0^t e^{-i\omega_0(t-t')/\hbar} D(t') e^{-i\omega_0 t'/\hbar} dt'$$

این درست همان نتیجه برای تصحیح مرتبه اول عملگر تحول است ، که در فصل ۷ مذکور است اینکه در اینجا t_0 مساوی با صفر گذاشته شده است . تکرارهای متوالی بالاتر از (ب - ۸) تصحیحات مرتبه بالاتر $U^{(n)}$ را برای عملگر تحول ایجاد می کند .

مراجع پیشنهادی

- Berestetskii, V. B., Lifshitz, E. M., and Pitaevskii, L. P., "Relativistic Quantum Theory." Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1971.
- Bjorken, J. D., and Drell, S. D., "Relativistic Quantum Fields." McGraw-Hill, New York, 1965.
- Goldstein, H., "Classical Mechanics." Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1950.
- Heitler, W., "Quantum Theory of Radiation," 3rd ed. Oxford Univ. Press, London and New York, 1954.
- Messiah, A., "Quantum Mechanics," Vol. II. Wiley, New York, 1962.
- Schiff, L. I., "Quantum Mechanics," 3rd ed. McGraw-Hill, New York, 1968.
- Yourgrau, W., and Mandelstam, S., "Variational Principles in Dynamics and Quantum Theory," 3rd ed. Saunders, Philadelphia, 1968.

واژه‌نامه
انگلیسی – فارسی

Adiabatic approximation	تقریب بی‌دررو
Adjoint	الحقی
Angular momentum	تکانه زاویه‌ای
Canonical transformation	تبديل بندادی
Closure relation	رابطه بستاری
Commutable	جایه‌جاہذیر
Correspondence principle	اصل تناظر
Covariant formulation	فرمولبندی هموردا
Degeneracy	تبهکنی
Dispersion relation	رابطه پاشندگی
Ehrenfest,s theorem	قضیه اهرنفست
Electric dipole approximation	تقریب دوقطبی الکتریکی
Fermi Sea	دریای فرمی
Fermi,s Golden rule	قاعده طلایی فرمی
Feynman diagrams	نمودارهای فاینمن
Gauge transformation	تبديل پیمانه‌ای
Invariant	ناوردا

Isotropic	همسانگرد
Ladder method	روش نرده‌بانی
Lagrangian formalism	صورت‌بندی لاغرانژی
Lamb shift	جابه‌جایی لمب
Lowering operator	عملگر پائین‌آورنده
Multiplicity	چندگانگی
observable	مشاهده‌پذیر
Pair Production	آفرینش جفت
Permutation operator	عملگر جایگشت
Perturbation	پریشیدگی
Phonon	فونون
Poisson,s braket	کروشه پواسن
Projecting operator	عملگر تصویرگر
Quantization	کوانتنش
Quantum defects	نقایص کvantومی
Quantum Postulate	اصل موضع کvantومی
Quasiparticle	شبه ذره
Raising operator	عملگر بالابرندہ
Secular equation	معادله سده‌ای
Selection rules	قواعد گزینش
Self-consistant field	میدان خودسازکار
Spinor	اسپینور
Stationary state	حالت مانا
Trace of operator	رد عملگر
Transition	گذار
Tunneling	تونل زنی
Ultraviolet Catastrophe	فاجعه فرابینفش
Variational method	روش وردشی
Wave - particle duality	دوقانگی موجی - ذره‌ای
W.K.B. approximation	تقریب W.K.B.

واژه‌نامه
فارسی – انگلیسی

Spinor	اسپینور
Correspondence principle	اصل تنااظر
Quantum postulate	اصل موضع کوانتومی
Pair production	آفرینش جفت
Adjoint	الحاقی
Perturbation	پریشیدگی
Canonical transformation	تبديل بندادی
Gauge transformation	تبديل پیمانه‌ای
Degeneracy	تبهکنی
Adiabatic approximation	تقریب بی‌دررو
Electric dipole approximation	تقریب دوقطبی الکتریکی
W.K.B. approximation	W.K.B. تقریب
Angular momentum	تکانه زاویه‌ای
Tunneling	تونل زنی
Commutable	جابه‌جاپذیر
Lamb shift	جابه‌جایی لمب
Multiplicity	چند گانگی
Stationary state	حالت مانا

Fermi sea	دریای فرمی
Wave-particle duality	دوگانگی موجی - ذره‌ای
Closure relation	رابطه بستاری
Dispersion reation	رابطه پاشندگی
Trace of operator	رد عملگر
Ladder method	روش نردبانی
Variational method	روش وردشی
Quasiparticle	شبه ذره
Lagrangian formalism	صورتیبندی لاگرانژی
Raising operator	عملگر بالا برنده
Lowering operator	عملگر پائین آورنده
Projecting operator	عملگر تصویرگر
Permutation operator	عملگر جایگشت
Ultraviolet catastrophe	فاجعه فرابینفش
Covariant formulation	فرمولبندی هموردا
Phonon	فونون
Fermi,s Golden Rule	قاعده طلایی فرمی
Ehrenfest,s theorem	قضیه اهرنفست
Selection rules	قواعد گزینش
Poisson braket	کروشه پواسن
Quantization	کوانتش
Transition	گذار
observable	مشاهده‌پذیر
Secular equation	معادله سده‌ای
Self-consistent field	میدان خود سازگار
Invariant	ناوردا
Quantum defects	نقایص کوانتومی
Feynman diagrams	نمودارهای فاینمن
Isotropic	همسانگرد
Dispersion relation	

فهرست راهنمای

(الف)

۱۸۴	نماد گذاریهای طیف نمایی ...		اتمهای قلیاًی
۱۸۸	قضیه ویریال برای ...	۲۸۱	انرژی ...
۲۲۴-۲۲۶	رایش	۲۸۲	برانگیختگی نوری ...
۲۶۷	ارتولیوم	۲۸۰	خواص ...
۲۸۸	ارتودیدرزن	۲۸۱	نقایص کوانتومی ...
۱۸	آزمایش داویسن - جرم	۲۲۶	اثر استارک در هیدرزن
۲۰۴	آزمایش اشترن - گرلاخ	۲۱۸	اثر پاشن - باک
۴۱۲-۲۱۰	اسپینور	۲۲۰	مدل کلاسیکی برای ...
۱۶	أشعه α و اثر کامپتون	۲۱۹	ویژه تابعها و ویژه مقدارها برای ...
۲۲	اصل تناظر	۳۶۶	... در هلیوم
۲۲۹-۲۲۳	اصل پاولی		اثر زیمن
	اصل عدم قطعیت	۳۶۶-۲۴۵-۲۱۷	... غیر عادی
۷۷	... مختصه - نگاهه	۱۹۳	... عادی
۴۴۹	... انرژی - زمان	۲۴۶-۱۹۳	مدل کلاسیکی برای ...
۷۵	اثبات ...	۲۹۹-۱۱۵	اثر رامسون - تاونزند
۱۳۷	نوسانگر و ...	۱۳	اثر فوتولکتریکی
۱۲۰	ذره در یک چاه و ...	۱۶	اثر کامپتون
۷۰	اصول موضوع مکانیک کوانتومی		اتم هیدرزن
۳۲۹-۳۲۳	اصل طرد	۱۸۶	چگالی احتمال زاویه‌ای برای ...
۱۹	اصول موضوع بوهر	۱۸۴	تبهگنی در ...
۲۴۳	اعداد اشغال	۱۸۷	چگالی احتمال شعاعی برای ...
۲۳۷	الکترونهای هم ارز	۴۲۱	حل نسبیتی برای ...
۴۱۶	آفرینش جفت	۱۸۵	مدارهای نیمه‌کلاسیکی برای ...

			الکترودینامیک کلاسیکی
۲۹۳	امواج جزئی	۴۳۶	تبدیل پیمانه‌ای در ...
۲۹۷	تحلیل ...	۴۳۶	هاملتونی در ...
۲۹۶	تقریب ...	۴۳۹-۴۴۲	لاگرانژی در ...
۲۹۷	دامنه بر حسب ...	۴۴۱	قانون لورنتس در ...
۲۹۶	قصبه نوری برای ...	۴۴۴	معادلات ماسکول در ...
۴۶۴	قطع مؤثر ...	۴۴۶	پتانسیل نرده‌ای در ...
۵۴	آیکونال	۴۴۵	پتانسیل برداری در ...
۵۴	(ب)	۴۴۵	الکترودینامیک کوانتومی
۵۴	بردار برآ	۴۴۶	تقریب دو قطبی در ...
۲۳۸	بردار کت	۴۴۶	پهن شدن طبیعی و ...
۲۲۸-۱۰۹-۹۶	بردار انتقال تکانه	۴۵۱	پهناه طبیعی ترازو ...
۲۲	بردار جریان احتمال	۴۵۱	جذب و گسیل در ...
۲۵۷-۲۵۰	بردار حالت	۴۴۷	چگالی حالتها در ...
۴۲۱-۲۳۹-۲۱۵	برگشت پذیری میکروسکوپیکی	۴۴۵	فوتوتها
۲۲	برهمنکش اسپن - مدار	۴۴۹	گذارهای تابشی و قاعده طلایی در ...
	بهنجارش احتمال	۴۴۵	الحقی
	(پ)		
۱۲۳	پاد جایه‌جاگر	۵۸	... یک عملگر
۶۸	پایه کامل	۵۵	... یک نرده‌ای
۳۴۵	پتانسیل شیمیائی	۵۵	... یک بردار
۳۹	پتانسیل الکترومغناطیسی		آمار
۲۸۶	پتانسیل گریز از مرکز	۳۱۶	... بوز - آینشتین
۲۸۵	پتانسیل مرس	۳۱۶	... فرمی - دیراک
۹۷	پتانسیل مختلط	۳۱۶-۱۰	... ماسکول - بولتزمن
۲۸	پتانسیلهای وابسته به سرعت	۳۴۴	... کوانتومی
۲۸۸	پارا هیدرزن		انرژی
۳۶۷	پارا هلیوم	۳۹۲	... تبادلی
۵۱	پایه راست هنجر	۱۸۴-۲۱	... حالت پایه هیدرزن
	پاریته	۴۲۲-۴۱۱-۲۴۳	... ساختار ریز
۱۲۳	رابطه جایه‌جاوی برای ...	۴۷	... سکون
۱۸۸	مسئله نیروی مرکزی و ...	۲۸	... پتانسیل
۱۲۳	مشخصه‌های انعکاسی ...	۱۳۲-۱۳۴	... نقطه صفر
۱۲۴	ویژه تابعهای ...	۹۵	انتشاردهنده و تحول یک حالت
۲۸۰-۲۷۶	پراکندگی راتفورد	۳۹۲	انتگرال تبادلی
۱۶	پراکندگی تامسون	۴۶۲	انتگرال فار

۲۴۷	پریشیدگی وابسته به زمان	۳۰۰	پراکندگی S - موج
۴۴۳	الکترودینامیک کوانتموی و ...	۱۱۵	پراکندگی در پاک بعد
۲۵۰	آهنگ کذار	۱۴۴	اثر رامسور برای ...
۲۵۴	چگالی حالتها	۱۱۳	تونل زنی در ...
۲۵۳	حالتهای پیوستار و ...	۲۹۰-۲۲۲	حد کلاسیکی برای ...
۲۴۷	عملگر تحول و ...	۳۰۶	پراکندگی کشان
۲۵۶	... هماهنگ	۲۸۱-۲۲۶	پراکندگی ناکشان
۲۵۴-۲۵۱	قاعده طلایی فرمی	۳۶۲	پراکندگی کولنی
۲۴۹	گذارهای القاء شده به وسیله ...	۲۲۳	پراکندگی مات
۲۵۲	گذارهای تابشی در هیدرژن	۲۷۶	پراکندگی در سه بعد (کلاسیکی)
۴۱۶-۳۲۳	پوزیترون ...	۲۷۴	... راترفورد
۳۲۳	پوزیترونیوم	۲۷۸	قطع موقت ...
۴۵۱	پهنه شدگی طبیعی	۲۸۸	پراکندگی در سه بعد (کوانتموی)
۴۵۱	پهنه شدگی خط	۲۸۶	تقریب بورن برای ...
۴۵۱	پهنهای طبیعی تراز	۳۰۶	تابع گرین برای ...
	پیمانه	۲۸۰	جذب در ...
۴۳۶	تبديل پیمانهای	۲۷۹	... راترفورد
۴۳۷	... تابشی	۲۷۷	دامنه ...
۴۳۷	... عرضی	۲۷۸	روش مانای ...
۴۳۷	... کولنی	۳۶۱	(شرط) مجانبی در ...
۴۳۶	... لورنتسی	۳۰۷	ذرات تمیز ناپذیر و ...
۳۹۳-۳۸۹	پیوند کوالانت	۲۷۷	... ناکشان
	(ت)	۳۰۳	... مانا
۱۰ - ۶ - ۳	تابش جسم سیاه	۳۰۳	... و گذارها
۲۵۳-۸۶	تابع دلتا	۲۷۹	قاعده طلایی فرمی
۲۸۳	تابع گاما	۲۲۳	قطع موقت ...
	تابع مولد	۲۴۴	پریشیدگی مستقل از زمان
۱۳۴	... چند جمله ایهای هرمیت	۲۳۶	اثر غیرعادی زیمن و ...
۱۲۲	... چند جمله ایهای لوزاندر	۲۲۹	اثر استارک در هیدرژن
۱۸۱	... چند جمله ایهای لاگر	۲۲۹	برهم کش اسپین - مدار و ساختار ریز
۲۸۶	تابع گرین برای پراکندگی	۲۲۳	... تبهگن
۴۴۷	تابش همسانگرد	۲۲۴	... نا تبهگن
۷۰	تابع عملگری	۲۲۴	روش رالی - شروعینگر
۴۳۹	تابش	۲۳۰	نظریه مرتبه دوم
۳	... جسم سیاه	۲۳۱-۲۲۸	نوسانگر ناهمانگ و ...

۳۷۶	... میدان مرکزی	۶	کاواک و ...
۳۷۸	خاصیت اتم در ...	۴۲۲	فوتونها
۳۷۳	معادله شرودینگر برای ...	۴۴۰	قطبشن ...
	W.K.B.	۴۴۱	کوانتش ...
۴۶۵	حالتهای مقید و ...	۴۲۹	گسترش موج نخت برای ...
۴۸۴	انتگرال فاز	۴۴۱	ماهیت عرضی ...
۴۵۹	فرمولهای رابط برای ...	۴۲۹	نوسانگرها و ...
۴۶۲	معادله هامیلتون - زاکوبی	۴۳۹	ویژه حالتهای ...
۳۵	تکانه تعمیم یافته	۳۱۸-۹۱ -۸۷	تابع حالت
	تکانه زاویه‌ای	۷	تابع حرارتی
۱۷۴	جمع ...		تار مرتعش
۳۰	تعریف کلاسیکی ...	۴۲۲	هایمیلتونی ...
۱۷۴	تبهگنی در ...	۴۲۰	لگرانزی ...
۱۹۵	روش نردبانی برای ...	۱۳	تابع کار
۱۷۳	جایه‌جاگر برای ...	۳۴۱-۱۵۳-۱۱۶	تبهگنی
۱۶۹	کوانتش ...	۱۲۹-۱۲۷	تبهگنی تصادفی
۲۰۳	... اسپینی	۷	تبهگنی مد
۲۰۹	... کلی	۴۰۷	تبدیلات لورنتس
۲۱۳	مدل برداری ...	۳۷۰-۳۴۸-۳۴۴	تراز فرمی
۱۷۰	ویژه تابعها و ویژه مقدارهای ...	۳۴۸	تراکم بوز - آهنستین
۱۷۳	مسئله نیروی مرکزی و ...	۳۴۸	تراکم آهنستینی
۲۹	تکانه خطی	۴۵ -۴۳	تبديل بندادی
۴۶	تکانه نسبیتی	۴۲۶-۴۱	تبديلات لوزاندر
۱۶۹	تکانه شعاعی		تبديل به مختصات بهنجار
	تکانه زاویه‌ای اسپینی	۳۹۵	... مختصات و تکانه‌ها
۲۰۴	تجربه اشترن - گرلاخ	۳۹۷	... و رابطه پاشندگی
۲۰۴	فرضیه گود شمیت و اوهلنبرگ	۳۹۸	... و انرژیهای کوانتیده
۲۰۷	ماتریس‌های پاولی برای ...	۳۹۶	... و فرکانس‌های بهنجار
۲۱۱-۲۰۸	مسئله نیروی مرکزی و ...	۸۳-۸۰	تحول پک حالت
۲۰۸	ویژه مقدارها و ویژه بردارهای ...	۳۳۷	ترکیب I-S
۲۰۹	ویژگیهای تبدیلی ...	۳۰۰	تشدید
۴۶۷-۸۰	تصویر برهم‌کنشی	۳۸۲	تقریب بی‌درررو
۴۶۶-۷۹	تصویر شرودینگر	۲۸۸	تقریب بورن
۴۶۵-۸۰	تصویر هایزنبرگ	۴۶۶-۴۵۸	تقریب دوقطبی الکترونیکی
۱۷۰	توابع وابسته لوزاندر		تقریب هارتی - فوک - اسلاتر

۱۸۱-۱۲۷	چند جمله‌ایهای لامر	۲۸۷	تکرار یک معادله انتگرالی
۱۲۱	چند جمله‌ایهای لوزاندر	۳۲۷	تبیین‌ناپذیری
۲۳۹	چند کانگی (تعدد)	۲۶۱	توازن دقیق
	چند جمله‌ایهای هرمیت	۳۴۷	توزیع فرمی - دیراک
۱۱	خواص ...		(ث)
۱۲۲	فرمول بازگشتی برای ...	۵	ثابت استفان - بولتزمن
۸۷	چگالی احتمال	۳۴۵-۱۰	ثابت بولتزمن
۹-۴	چگالی طیفی	۱۱	ثابت پلانک
۴۴۹-۲۶۲-۱۲	چگالی طیفی پلانک	۲۲-۱۸	ثابت ریدبرگ
۹	چگالی مد	۳۰	ثابت حرکت
	چگالی حالتها	۴۲۲-۴۱۰	ثابت ساختار ریز
۱۶۱	ذره آزاد و ...		(ج)
۲۵۴	قاعده طلابی و ...	۶۶-۶۰	جا به جاگر
	(ج)	۲۹۵	جا به جایی فاز
۲۴۵	حالت خالص	۴۲۴-۲۴۳	جا به جایی لمب
۸۳	حالت مانا	۴۱۲-۴۶	جا به کاری کمینه‌ای
۲۴۵	حالت مخلوط	۱۰۷-۹۶	جریان احتمال
۲۷۷-۱۰۷	حالتهای پراکندگی	۳۷۶-۳۶۲	جمله تبادلی
۱۱۶	حالتهای مقید در یک بعد	۴۲۵-۴۲۱-۲۴۳	جمله داروین
۱۱۵-۲۳-۱۹	حد کلاسیکی		جذب
۲۱۶	حرکت تقدیمی توماس	۳۰۶	... ذرات
۱۹۴	حرکت تقدیمی لارمور	۴۴۸-۲۵۷	... القایی
	(د)	۴۴۸-۲۶۱	ضریب اینشتین برای ...
۲۸۹	دامنه بورن		(ج)
۲۳۲-۳۲۹	دترمینان اسلاستر		چاه نامتناهی
۵۹	دترمینان یک عملگر	۱۲۹	بستگی با چاه نامتناهی
۲۲	درجه آزادی	۱۲۶	ویژه تابعها و ویژه مقادیر ...
۴۱۶	دریای فرمی	۱۲۷	ویژگیهای تقارنی ...
۴۵	دلتای کرونکر		چاه نامتناهی
۳۵۰	دمای تبهگنی بوز - اینشتین	۱۲۰	اصل عدم قطعیت برای ...
	دوقطبی مغناطیسی	۱۲۰	ویژه توابع و ویژه مقادیر ...
۱۹۱	... مداری		چاه متقارن
۲۱۵-۲۰۳	... اسپینی	۱۲۰	ویژه بردارها و ویژه مقادیرها ...
۱۹	دوگانگی موجی - ذره‌ای	۱۲۲	مشخصه‌های ...
۷۸	دینامیک کوانتوسی	۵	چرخه کارنو

۱۱۱	سد مستطیلی	۴۶	دینامیک نسبیتی
۲۲	سری پاشن		(ذ)
۲۲	سری بالمر		ذره آزاد
۲۸۷	سری بورن	۱۵۵	بهنجارش برای ...
۲۲	سری لینن	۱۲۶-۱۵۶	تمهگنی برای ...
	ساختار ریز	۱۵۷-۱۰۹	جریان احتمال ...
۲۴۳	معادله دیراک و ...	۱۰۸	... در پک بعد
۴۱۰	معادله کلاین - گوردون و ...	۱۲۵-۱۵۴	... در سه بعد
۲۴۳	فرمول دیراک برای ...	۴۱۳	... نسبیتی
	(ش)	۱۵۷	موج دوبروی و ...
۳۵۵	شبه ذرات	۱۷۵-۱۵۵	ویژه تابعها و ویژه مقدارهای ...
۳۹۳	شبکه خطی		ذره در پک جعبه
۴۴۰-۷	شرایط مرزی برای E و B	۱۶۰	ارتباط با ذره آزاد و بهنجارش جعبه‌ای
۳۹۷	شرایط مرزی دوره‌ای	۱۵۹	تمهگنی برای ...
۲۹۴-۲۸۵-۲۷۸	شرط مجانبی برای پراکندگی	۱۶۱	چکالی حالتها برای ...
۱۸۳-۲۱	شعاع بومر	۱۵۸	ویژه تابعها و ویژه مقدارهای ...
	(ض)		(د)
۳۴۲-۳۳۸-۲۱۳	ضرایب کلپش - گوردان	۸۷-۷۰	رابطه بستاری (کامل بودن)
۵۴-۵۲	ضرب داخلی	۳۹۷	رابطه پاشندگی
۶۸	ضرب دیادیک	۱۱۷	رنسکین
۳۴۳-۳۱۸-۲۰۷	ضرب مستقیم دیراک		روابط جابه‌جاوی
۸۹	ضرب داخلی بردارهای حالت	۲۰۵-۱۹۴-۱۷۳	... تکانه‌های زاویه‌ای
۱۱۱	ضریب بازنتاب	۲۲۱-۶۱	... مختصات و تکانه‌ها
۱۱۱	ضریب عبور	۴۴۱-۴۳۳	... میدانها
۲۴۶	ضریب لانده " و "	۲۱۶	روش رالی - ریتس
	(ط)		روش میدان خود - سازگار
۶۰	طیف	۳۷۳	انرژی همبستگی در ...
	... پک عملکر	۳۷۴	پتانسیل مؤثر برای ...
۱۰۶	... پک هامیلتونی		رد
۱۰۶-۸۶	طیف پیوسته	۵۹	... پک عملکر
۴۵۰	طول عمر	۸۴	... پک جابه‌جاکر
۱۷	طول موج کامپتون		روش نرده‌هایی
	(ع)	۱۵۹	تکانه زاویه‌ای و ...
۱۱۰	عبور از سد	۱۴۰	نوسانگر هماهنگ و ...
۷۴	عدم قطعیت		(س)

۱۷	فرمول کامپیون	۲۲۸	عملگر پاد متقارن ساز
	فرمیونها		عملگر بالابرند
۲۲۲	تعمیزناپذیری ...	۱۹۷	... تکانه زاویه‌ای
۲۲۹-۳۲۲	اصل پاولی برای ...	۱۴۳	... نوسانگر
۲۲۳	اسپین ...		عملگر پائین آورنده
۲۲۹	دترمینان اسلاتر برای ...	۱۹۷	... تکانه زاویه‌ای
۲۲۳	متقارن. حالت‌های ...	۱۴۳	... نوسانگر
	(ق)	۶۳	عملگر تبیگن
۲۴۲	قاعده بازه لاند		عملگر تحول
۲۶۵-۱۱ -۱۰	قانون بولتزمن	۸۰	تعریف ...
۱۲-۵	قانون جابه‌جایی	۴۶۹-۲۴۸	بسط به سری ...
۴۴۴-۳۰۳-۲۵۴-۲۵۱	قاعده طلایی فرمی	۲۴۷-۸۱	معادله انگرالی برای ...
۶۵	قطری کردن	۲۲۰	عملگر جایگشت
۲۶۵-۳۵۲	قواعد هاند	۲۲۱	ویژه حالت‌های ...
	قانون دوم نیوتون	۲۲۰	ویژگی‌های متقارنی ...
۲۹	... برای یک ذره	۲۲۱	ویژگی‌های جابه‌جایی ...
۳۱۴	... برای چند ذره	۳۴۵	عملگر چگالی
۴۶	... نسبیتی	۵۶	عملگر خطی
۱۲-۵	قانون استفان - بولتزمن	۶۷	عملگر تصویرگر
۱۲-۵	قانون وین	۳۲۸	عملگر متقارن ساز
۴۰۲	قاعده جمع نوسانگر	۶۳	عملگر ناتبیگن
۲۲۰	قطبش پذیری	۵۷	عملگر همانی
۴۴۰-۸	قطبش نور	۵۸	عملگر هرمیتی
۲۸	قضیه اهرنفست برای نوسانگر	۵۸	عملگر پکانی و چرخش
۲۹۷	قضیه نوری		(ف)
	قضیه ویریال	۱۱	فاجعه فرابینش
۴۸	... کلاسیکی	۴۴۹-۱۴	فوتونها
۱۳۷	نوسانگر و ...	۳۹۸	فوتونها
۱۴۹	... کوانتمی	۸	فضای اعداد صحیح برای مدهای تابشی
۳۶۶-۲۵۸	قواعد گزینش	۸۵	فضای هیلبرت
۴۶۲	قواعد کوانتش ویلسون - سومرفلد	۴۵۸	فرمولهای رابط
	(ک)	۱۳۵	فرمول رودریگز
۲۸۷	کشیدگی مرکزگریزی	۱۸	فرمول رید برگ
	کروشه پواسن	۱۷	فرمول کلابن نیشنینا
۴۵	تکانه‌زاویه‌ای و ...	۴۰۷	فرمولبندی هموردا

	مختصات استوانه‌ای	۴۵	... مختصات و تکانه‌ها
۱۶۴	عنصر حجم در ...		(گ)
۱۶۴	لاپلاسی در ...		کاز ایده‌آل
	مختصات کروی	۳۴۴	... بوز - اینشتین
۱۶۴	عنصر حجم در ...	۳۴۴	... فرمی - دیراک
۱۶۴	لاپلاسی در ...	۳۴۴	اعداد اشغال در ...
	مختصات سهمی	۳۴۴	نمایش برای ...
۲۸۱	عنصر حجم در ...	۳۸۰	کاز بی اثر
۲۸۰	لاپلاسی در ...		گذارها
۳۵۶	مختصات مرکز جرمی	۳۵۴	دامنه ...
۳۵۹	پراکندگی در ...	۴۴۳-۲۵۷	... تابشی
۳۵۶	تبدیل به ...	۳۰۳	... پراکندگی
۳۵۷	جرم کاهش یافته برای ...		گذارهای تابشی
	مختصات منحنی الخط	۴۴۳	الکترودینامیک کوانتومی و ...
۱۶۳	ضایای متریک در ...	۲۵۹	تقریب دوقطبی الکتریکی برای ...
۱۶۳	عنصر حجم در ...	۲۵۹	قواعد گزینش برای ...
۱۶۳	لاپلاسی در ...	۲۵۹-۲۵۷	... منوع
۳۲۷	مدل برداری		گسیل تابش
	مدل توماس - فرمی	۴۴۸-۲۶۱	ضایای اینشتین در ...
۳۶۹	امتهای پیچیده و ...	۴۴۸-۲۵۶	... القایی
۳۷۱	تابع ...	۴۴۸-۲۵۸	... خود به خودی
۳۷۱	شرایط مرزی برای ...	۲۵۸	گشاور دوقطبی الکتریکی
۳۷۱	متغیر ...		(ل)
۳۷۱	معادله ...		لاگرانژی
۴۴۱-۶	مدهای مشخصه	۴۳۵	الکترودینامیک کوانتومی و ...
	مسئله کولنی	۴۰	... الکترو مغناطیسی
۲۷۹-۲۷۶	پراکندگی در ...	۴۳۱	میدانها و ...
۱۸۱-۱۷۷	چند جمله‌ایهای لاگر در ...	۳۴	... یک ذره‌ای
۱۷۹	کوانتش ...	۳۱۳	... چند ذره‌ای
۱۸۱	معادله لاگر در ...	۴۶	... نسبیتی
۱۸۳	ویژه مقدارها و ویژه بردارها در ...		(م)
۳۵۶	مسئله دو جسمی	۱۹۳	ماگنتون بوهر
۳۷-۳۲	مسئله کهler	۳۴۵	مجموعه بندادی بزرگ
۷۵	شاهدۀ هذیرهای عملگری سازکار	۳۴۵	متوسط مجموعه‌ای
۷۴	شاهدۀ هذیر معین (خوش تعریف)	۳۷	مختصات چرخه‌ای (قابل اعماض)

۷۹	معادله شرودینگر برای حرکت	معادله ابر هندسی
۹۳	معادله موج شرودینگر	پراکندگی راترفورد و ...
۹۶	معادله پیوستگی در احتمال	حل مجانبی ...
۶۱	معادله سدهای	مسئله کولنی و ...
۲۳	مقدار قابل انتظار	معادله لاگر و ...
۲۸۹	معیار بورن	نوسانگر همسانگرد و ...
۳۸	مقاطع مخروطی برای مسئله کلپر	معادله دیراک
۲۲۴	قطع مقطع موئش	انرژیهای منفی برای ...
۲۸۸	قطع مقطع موئش بورن	ذرات آزاد و ...
	مولد	ساختار ریز و ...
۲۰۹	... دورانها	ماتریسهای ...
۹۰	... انتقالها	مفتانطیس اسپینی و ...
	مکانیک موجی	هیدرزن و ...
۹۳	عناصر ماتریسی در ...	ویژه مقدار انرژی در ...
۲۱۷-۹۲	عملگر تکانه در وابسته به زمان
۲۵	مکانیک نیوتونی	معادله انتگرالی بورن
	مولکول هیدرزن	معادله آیکونال
۳۹۱	پتانسیل مولکولی برای ...	معادلات موج الکترومغناطیسی
۳۹۰	معادله شرودینگر برای ...	معادلات هامیلتون
۳۸۹	نظریه لندن - هایپرل در مورد ...	سیستم یک ذرهای و ...
۳۹۰	ویژه تابعها و ویژه مقدارهای ...	سیستم چند ذرهای و ...
	مولکولهای دواتمی	میدانها و ...
۳۸۸	تقارن و هم هستهای ...	معادله دیفرانسیل هرمیت
۳۸۴	تقریب بی دررو برای ...	معادله کلاین - گوردون
۳۸۶	پتانسیل مولکولی ...	معادله شرودینگر و ...
۳۸۴	معادله الکترونی برای ...	ویژه توابع و ویژه مقادیر ...
۳۸۳	معادله شرودینگر برای ...	ویژه مقدار انرژی ...
۳۸۶	معادله هستهای برای ...	معادلات لاگرانز
۳۸۷	ویژه تابعها و ویژه مقدارهای ...	سیستم یک ذرهای و ...
۳۸۸	مولکولهای هم هسته	سیستم چند ذرهای و ...
	میدانهای کلاسیکی	میدانها و ...
۴۲۴	الکترودینامیک و ...	معادله لاگر
۴۲۲	لاگرانزی برای ...	معادله وابسته لوزاندر
۴۲۱	معادلات لاگرانز برای ...	معادلات ماکسول
۴۲۲	معادلات هامیلتون برای ...	معادله فتوالکتریکی

۱۳۶-۱۳۵	عناصر ماتریسی برای ...	۴۲۲	هامیلتونی برای
۱۳۰	ویژه تابعها و ویژه مقدارهای ...		میدانهای کوانتمی
	نوسانگر همسانگرد	۴۲۳	قواعد جابه‌جایی برای ...
۱۷۷	تبهگنی تصادفی و ...	۴۲۴	مسئله ویژه مقداری برای ...
۱۷۸-۱۳۳	کوانتش ...		(ن)
۱۷۷	معادله ابر هندسی برای ...	۷۷	ناسازگاری مکان و تکانه
۱۷۸-۱۶۲	ویژه تابعها و ویژه مقدارهای ...	۴۱۷	تابودی زوج
	نوسانگر ناهمسانگرد	۷۵	نامساوی شوارتز
۱۶۲	تقارن و تبھگنی در ...	۴۸۱	نقایص کوانتمی
۱۶۲	ویژه تابعها و ویژه مقدارهای ...	۴۵۷	نقاط بازگشت
۲۰	نیروهای پایستار	۱۹۱	نسبت زیرو- مغناطیسی
۲۵	نیروی تعییم یافته	۱۹	نظریه بوهر برای هیدرزن
۳۲	نیروی لختی	۲۲۲	نظریه پریشیدگی تبهگن
۲۸	نیروهای وابسته به سرعت	۴۱۶	نظریه دیراک در مورد الکترونها و حفره‌ها
	نیروهای مرکزی	۱۴	نظریه کوانتمی اینشتین از نور
۱۷۴	اثر عادی زیمن و حرکت تقدیمی لارمور در ...	۱۱	نظریه پلانک
۲۴۴-۲۱۸	اثر غیرعادی زیمن در ...	۱۰	نظریه رالی جینز
۲۱۸	اثر پاشن - باک برای ...	۴۳۰	نظریه کلاسیکی میدانها
۱۸۸	پاریته و ...	۴۴	نظریه هامیلتون زاکوبی
۲۱۰-۲۰۸	تکانه زاویه‌ای اسپینی و ...	۸۸	نمایش تکانه‌ای
	جابه‌جایی‌های انرژی در یک میدان		نمایش N
۲۴۴-۱۹۰	مغناطیسی غیر یکنواخت	۳۴۴	نمایش ماتریسی
۱۶۵	جدا بی متفیرها برای ...	۵۷	عملکرها و ...
۱۶۵	معادله شرودینگر برای ...	۵۳	بردارها و ...
۲۴۴-۱۷۵-۱۶۸	ویژه تابعها و ویژه مقدارهای برای ...	۳۱۸-۸۷	نمایش مختصه‌ای
	(و)	۳۰۶	نمودارهای فاینمن
۵۸	وارون یک عملکر		نوسانگر هماهنگ
۶۵	ویژه پایه یک عملکر	۱۲۸	انتشار دهنده برای ...
۲۰۸	ویژه اسپینور	۲۱۷	اصل عدم قطعیت برای ...
۶۰	ویژه مقدارها	۱۲۷-۱۲۴	انرژی نقطه صفر ...
۶۲	عملکرهای هرمیتی و ...	۱۲۸	تاظر کلاسیکی در ...
۷۱	مشاهده پذیرها و ...	۱۲۸	حالت‌های غیرمانای ...
۸۹	ویژه تابعها	۱۴۰	روش نردنی در ...
	ویژه بردارها	۱۲۵	خواص ویژه حالت‌های ...
		۱۴۳	عملکر بالابرند و پائین آورنده در ...

۳۲۹	چندگانگی در ...	۶۶	جابه‌جاگر و ...
۳۲۸	ضرایب کلبش - گوردان در ...	۶۲	عملگرهای هرمیتی و ...
۳۲۹	طبقه‌بندی حالتها در ...		(۵)
۳۲۲	ویژه تابعها و ویژه مقدارهای ...	۳۱۶	الگوریتم هامیلتونی
	هليوم واقعی		هالوژنها
۳۶۳	انرژی و ویژه تابعهای ...	۴۲۹-۴۲۶	الکترو دینامیک کلاسیکی و ...
۳۶۵	چندگانگی در ...	۴۲۳	میدانها و ...
۳۶۷	روش وردشی برای ...	۴۱	... یک ذره‌ای
۳۶۵	قاعدۀ هاند برای ...	۳۱۶	... چند ذره‌ای
۳۶۴	طبقه‌بندی حالتهای ...	۴۶	... نسبیتی
۳۶۶	گذارهای تابشی در ...		هامیلتونی الکترومغناطیسی
۳۶۳	نظریه پریشیدگی برای ...	۴۲	... غیرنسبیتی
۱۲۲	همانگ کروی	۴۶	... نسبیتی
	همبستگی		هليوم ایدهآل
۳۲۳-۳۱۵	... دینامیکی	۲۲۵	آرایش در ...
۳۲۹-۳۱۵	آماری ...	۲۲۷	ترکیب S - L برای ...
۵۵	هنجار یک بردار	۳۴۱	تنه‌گنی در ...



Ferdowsi University of Mashhad

Publication No: 107

THE FOUNDATIONS OF QUANTUM THEORY

SOL WIEDER

Fairleigh Dickinson University

Translated

by

JAAFAR GOODARZI

Ferdowsi University Press

1989