

آشنایی با

مکانیک کوانتومی

Planck's constant

Called the 'del-squared operator' this quantity describes how the wavefunction, Ψ , changes from one place to another

A mathematical quantity called an 'imaginary number'. It is equal to the square root of minus one

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

The mass of the particle being described

Describes the forces acting on the particle

Describes how Ψ changes its shape with time

ترجمه:

میثم زینلی طهرانی



آشنایی با مکانیک کوانتومی

دیوید. جی . گریفیث

ترجمه :

دکتر میثم زینلی طهرانی

فهرست مطالب

پیشگفتار نویسنده بر ترجمه فارسی.....	۸
پیشگفتار مترجم.....	۹
پیشگفتار.....	۱۴
بخش اول : نظریه	۱۷
فصل ۱ : تابع موج	۱۹
۱.۱ معادله شرودینگر.....	۲۰
۲.۱ تعبیر آماری.....	۲۱
۳.۱ احتمال.....	۲۶
۴.۱ بهنجارش.....	۳۵
۵.۱ تکانه.....	۳۹
۶.۱ اصل عدم قطعیت.....	۴۳
فصل ۲ : معادله موج شرودینگر مستقل از زمان	۵۱
۱.۲ حالت‌های مانا.....	۵۲
۲.۲ چاه پتانسیل نامتناهی.....	۵۹
۳.۲ نوسانگر هماهنگ.....	۷۳
۴.۲ ذره آزاد.....	۹۷
۵.۲ پتانسیل تابع دلتا.....	۱۰۸
۶.۲ چاه مربعی متناهی.....	۱۲۲
فصل ۳ : صورت‌بندی ریاضی	۱۴۳
۱.۳ فضای هیلبرت.....	۱۴۴
۲.۳ مشاهده‌پذیرها.....	۱۴۹
۳.۳ ویژه توابع یک عملگر هرمیتی.....	۱۵۴
۴.۳ تعبیر آماری تعمیم یافته.....	۱۶۲
۵.۳ اصل عدم قطعیت.....	۱۶۷

۶.۳ نمادگذاری دیراک..... ۱۷۹

فصل ۴: مکانیک کوانتومی در سه بعد..... ۱۹۷

۱.۴ معادله شرودینگر در مختصات کروی..... ۱۹۸

۲.۴ اتم هیدروژن..... ۲۱۴

۳.۴ تکانه زاویه‌ای..... ۲۳۳

۴.۴ اسپین..... ۲۴۶

فصل ۵: ذرات یکسان..... ۲۸۵

۱.۵ سیستم‌های دو ذره‌ای..... ۲۸۶

۲.۵ اتم‌ها..... ۲۹۹

۳.۵ جامدات..... ۳۰۹

۴.۵ مکانیک کوانتومی آماری..... ۳۲۳

بخش دوم: کاربردها..... ۳۴۹

فصل ۶: نظریه اختلال مستقل از زمان..... ۳۵۱

۱.۶ نظریه اختلال غیر تبهگن..... ۳۵۲

۲.۶ نظریه اختلال تبهگن..... ۳۶۱

۳.۶ ساختار ریز هیدروژن..... ۳۷۲

۴.۶ اثر زیمان..... ۳۸۶

۵.۶ شکافت فوق ریز در هیدروژن..... ۳۹۵

فصل ۷: اصل وردش..... ۴۰۷

۱.۷ نظریه..... ۴۰۸

۲.۷ حالت پایه هلیوم..... ۴۱۵

۳.۷ یون مولکول هیدروژن..... ۴۲۲

فصل ۸: تقریب WBA..... ۴۳۷

۱.۸ محدوده « کلاسیکی »..... ۴۳۹

۲.۸ تونل زنی..... ۴۴۴

۳.۸ فرمول‌های هموستار..... ۴۵۰

فصل ۹: نظریه اختلال وابسته به زمان..... ۴۶۹

۱.۹ سامانه‌های دو سطحی..... ۴۷۰

۲.۹ گسیل و جذب تابش..... ۴۸۱

۳.۹ گسیل خود به خودی..... ۴۸۹

فصل ۱۰: تقریب بی‌دررو..... ۵۰۷

۱.۱۰ قضیه بی‌دررو..... ۵۰۸

۲.۱۰ فاز بری..... ۵۱۸

فصل ۱۱: پراکندگی..... ۵۴۳

۱.۱۱ مقدمه..... ۵۴۴

۲.۱۱ تحلیل پاره موجی..... ۵۵۰

۳.۱۱ انتقال‌های فاز..... ۵۵۸

۴.۱۱ تقریب بورن..... ۵۶۲

فصل ۱۲: گفتار پایانی..... ۵۷۷

۱.۱۲ پارادوکس EPR..... ۵۷۹

۲.۱۲ قضیه بل..... ۵۸۲

۳.۱۲ قضیه تکثیر ناپذیری..... ۵۹۰

۴.۱۲ گریه شرودینگر..... ۵۹۲

۵.۱۲ پارادوکس زنوی کوانتومی..... ۵۹۴

ضمیمه: جبر خطی..... ۶۰۰

الف. بردارها..... ۶۰۰

ب. ضرب‌های اسکالر..... ۶۰۲

پ. ماتریس‌ها..... ۶۰۷

ت. ویژه بردارها و ویژه مقادیر..... ۶۱۸

ث. تبدیلات هرمیتی..... ۶۲۵

واژه‌نامه فارسی به انگلیسی..... ۶۳۱

نمایه موضوعی..... ۶۳۵

برابری‌های بنیادین

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$

معادله شرودینگر:

$$H\psi = E\psi, \quad \Psi = \psi e^{-iEt/\hbar}$$

معادله شرودینگر مستقل از زمان:

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

عملگر هامیلتونی:

$$p = -i\hbar \nabla$$

عملگر تکانه:

$$\frac{d\langle Q \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [H, Q] \rangle + \left\langle \frac{\partial Q}{\partial t} \right\rangle$$

بستگی زمانی یک مقدار چشمداشتی:

$$\sigma_A \sigma_B \geq \left| \frac{1}{2i} \langle [A, B] \rangle \right|$$

اصل عدم قطعیت تعمیم یافته:

$$\sigma_x \sigma_p \geq \hbar/2$$

اصل عدم قطعیت هایزنبرگ:

$$[x, p] = i\hbar$$

جابجاگر کانونیک:

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= \hbar L_z, & [L_y, L_z] &= \hbar L_x, \\ [L_z, L_x] &= \hbar L_y \end{aligned}$$

تکانه زاویه‌ای:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

ماتریس‌های پائولی:

ثابت‌های بنیادین

\hbar	$= 1.05457 \times 10^{-34} \text{ Js}$	ثابت پلانک:
c	$= 2.99792 \times 10^8 \text{ m/s}$	سرعت نور:
m_e	$= 9.10938 \times 10^{-31} \text{ kg}$	جرم الکترون:
m_p	$= 1.67363 \times 10^{-29} \text{ kg}$	جرم پروتون:
e	$= 1.60218 \times 10^{-19} \text{ C}$	بار پروتون:
$-e$	$= -1.60218 \times 10^{-19} \text{ C}$	بار الکترون:
ϵ_0	$= 8.85419 \times 10^{-23} \text{ C}^2/\text{Jm}$	ضریب گذردهی خلاء:
k_B	$= 1.38065 \times 10^{-23} \text{ J/K}$	ثابت بولتزمن:

اتم هیدروژن

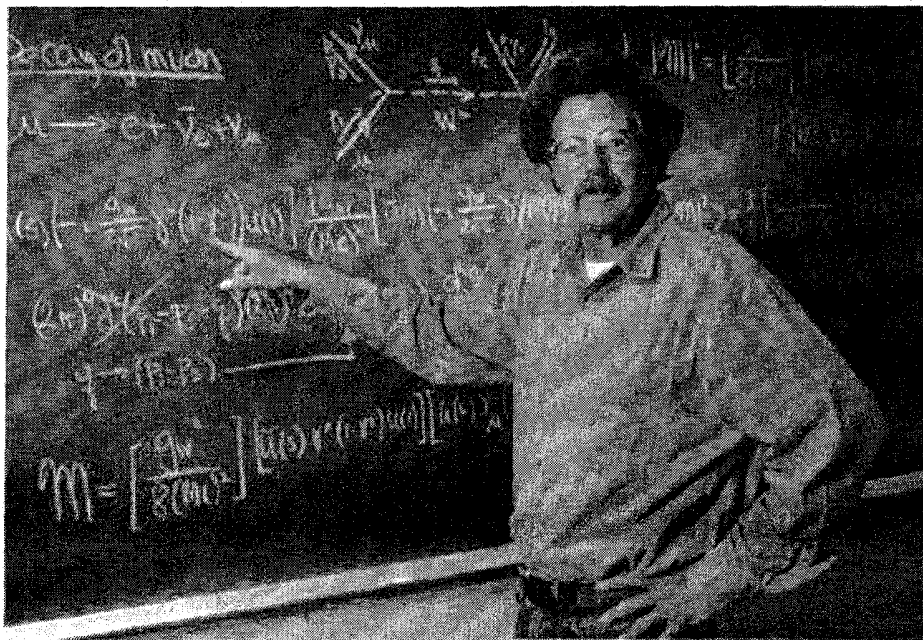
α	$= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}$	$= \frac{1}{137.036}$	ثابت ساختار ریز:
a	$= \frac{4\pi\epsilon_0\hbar c}{m_e e^2} = \frac{\hbar}{\alpha m_e c}$	$= 5.29177 \times 10^{-11} \text{ m}$	شعاع بور:
E_n	$= -\frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2}$	$= \frac{E_1}{n^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$	انرژی‌های بور:
$-E_1$	$= \frac{\hbar^2}{2m_e a^2} = \frac{\alpha^2 m_e c^2}{2}$	$= 13.6057 \text{ eV}$	حالت پایه:
$\frac{1}{\lambda}$	$= R \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$		فرمول ریذبرگ:
R	$= -\frac{E_1}{2\pi\hbar c}$	$= 1.09737 \times 10^7 \text{ /m}$	ثابت ریذبرگ:

پیشگفتار نویسنده بر ترجمه فارسی

بسیار خوشحالم که کتاب من توسط شما به فارسی ترجمه و در ایران چاپ شده است. پیام‌های الکترونیکی زیادی از دانشجویان فیزیک در ایران دریافت کرده‌ام (تقریباً بیش از هر کشور دیگری)؛ از این جهت و نیز به خاطر پیشینه برجسته‌ای که ایرانی‌ها در المپیاد فیزیک دارند، به خوبی در جریان آموزش ممتاز فیزیک در ایران هستم. شما بهترین امیدها برای آینده‌ای روشن و خردمند برای کشور خود و برای نسل بشر هستید؛ آینده‌ای که در آن اندیشه جای خرافه و مهرورزی و یکدلی جای نفرت و کینه‌توزی را بگیرد. آقای میثم طهرانی در مقام یک استاد پیشکسوت فیزیک برایتان بهترین آرزوها را دارم و امیدوارم در تحصیلاتتان موفق باشید!

David Griffiths

May, 14, 2009



” یک روز در (روزنامه‌ها) نوشتند که تنها دوازده نفر در دنیا نظریه نسبیت را می‌فهمند. من که باور نمی‌کنم اصلاً چنین روزی وجود داشته ... ولی به نظر می‌توان با اطمینان گفت که هیچکس مکانیک کوانتومی را درک نمی‌کند ... اگر می‌توانید از آن پرهیز کنید، پس هی مدام به فودتان نگه‌نید “ آفر بطور چنین چیزی می‌تواند وجود داشته باشد؟ “ چون آنوقت انرژی‌تان را در کوهه پس کوهه‌ای تاریک که هیچکس تا به حال از آن نگرفته به هدر فواید داد ... هیچکس نمی‌داند بطور چیزی می‌تواند مثل آن باشد. “

عبارت بالا از قول ریچارد فاینمن یکی از برجسته‌ترین فیزیکدانان قرن بیستم بود که از آنرا کتابش با عنوان ” سرشت قانون فیزیکی “ به سال ۱۹۶۷ نقل کردم. اظهار نظرهای گوناگونی درباره مکانیک کوانتومی وجود دارد؛ همه آنها به طور مشترک به چالش برانگیزی، دشواری درک و عدم تطابق آن با عقل سلیم اشاره دارند. اروین شرودینگر که معادله معروفش محور مکانیک کوانتومی است می‌گوید: ” دوستش ندارم و متأسفم از هر آنچه درباره‌اش انجام دادم. “ یا مثلاً ورنر هایزنبرگ که اصل عدم قطعیتش زیرساخت بنیادین این نظریه است می‌گوید: ” اگر می‌دانستم از شر این پرش‌های کوانتومی لعنتی خلاص نمی‌شویم، هیچ وقت خودم را درگیر نمی‌کردم. “ علی‌رغم اینگونه اظهار نظرها، نظریه مکانیک کوانتومی امروز کامل‌ترین توصیفی است که بشر در باز نمود سازوکارهای عالم بویژه در اندازه‌های بنیادین ارائه کرده است. با وجود دشواری در درک، چنان با آزمایش و تجربه سازگار است که تعجب انسان را برمی‌انگیزاند. این دیدمان در کنار مکانیک کلاسیک و الکترومغناطیس بن مایه اندیشه فیزیکی معاصر و شالوده درک انسانی از جهان طبیعت را تشکیل می‌دهد.

با توجه به ویژگی‌های خاص این نظریه و اهمیت کسب مهارت در درک و به کار بردن آن در توصیف پدیده‌های طبیعی، آموزش مکانیک کوانتومی مساله بسیار مهمی است. اصولاً آموزش آکادمیک مبتنی بر دو پایه است: یکی آموزش‌های درس محور و دیگری آموزش‌های پژوهش محور. آموزش ایده‌آل در دوره کارشناسی برای اکثر رشته‌های علوم طبعاً باید ترکیبی از این دو باشد، یعنی هم مبانی و اصول اساسی شناسانده شوند و هم سرشت پژوهش و جایگاه آن در موضوع مورد نظر گرامی داشته شود. نکته تعیین کننده‌ای که آموزش نظریه مکانیک کوانتومی را از دو نظریه کلاسیکی دیگر جدا می‌کند عدم وجود پیش‌زمینه ذهنی مناسب نزد دانشجویان به جهت آشنایی با مفاهیم بنیادین آن

است. از همان اولین سال‌هایی که پای آموزش مکانیک کوانتومی به دانشگاه‌ها باز شد بحث‌های زیادی وجود داشت (و هنوز هم دارد) که درس اول مکانیک کوانتومی چه باشد بهتر است و روند این آموزش چگونه باشد موثرتر است. متأسفانه هیچگاه پاسخ درستی به این پرسش‌ها داده نشد و هم‌زمانی قابل قبولی در بین اندیشمندان بوجود نیامد. در نتیجه، امروز با دسته‌بندی‌های متعددی در این زمینه مواجهیم که بویژه برای دانشجویان دردسرساز است.

به هر حال، مبحث مکانیک کوانتومی با همه آن اهمیتی که برایش ذکر می‌شود، موضوعی است که ما اساتید باید تلاش کنیم به بهترین و کامل‌ترین شکل ممکن آن را به دانشجویان مان بیاموزیم. در بازار کتاب‌های دانشگاهی ایران کتاب‌های متعددی با موضوع مکانیک کوانتومی مقدماتی و پیشرفته وجود دارد. این از یکسو مایه خوشحالی است که منابع اصلی به زبان فارسی در کشور مهیا هستند، اما از سوی دیگر همان مساله‌ای را که بالاتر برشمردم، یعنی مواجهه با دسته‌بندی و روش‌های ارائه گوناگون برای دانشجویان چندان کمک‌رسان نبوده است. البته می‌توان گفت که این مهم تا حدی در متن آموزش مرتفع می‌شود چون اساتید ما معمولاً با یک متن میانه دوستانه‌تری دارند و اغلب همان متنی را تدریس می‌کنند که در دوره دانشجویی خود آنرا مطالعه کرده‌اند! مساله تسلط بر متن نکته بسیار مهمی است. همچنین عمر متوسط مبانی مکانیک کوانتومی که تقریباً همه آن را پذیرفته‌اند حدود نیم قرن است. پس بسیاری اینگونه توجیه می‌کنند که در آموزش پایه مکانیک کوانتومی فرق زیادی میان کتاب‌های درسی وجود ندارد. همه غالباً از یک پیشینه تاریخی و دلایل وجودی کار را آغاز کرده و کم کم با معرفی ابزارها و تکنیک‌های مورد نیاز و مفاهیم اساسی وارد بحث اصلی می‌شوند. به این ترتیب، آموزش درس محور شده و مساله پژوهش به دوره‌های پیشرفته‌تر سپرده می‌شود.

صرفنظر از اینکه شما دوست گرامی دانشجوی علوم هستید یا ردای آموزگاری به تن دارید، عرض می‌کنم که با این دیدگاه کاملاً مخالفم. البته قصد ندارم اینجا به تشریح این مساله بپردازم، اما باید توجه داشته باشیم که وضعیت حال حاضر نظریه مکانیک کوانتومی، بویژه دروازه‌های جدید فلسفی، معنایی و کاربردی که رو به آن گشوده شده ما را ملزم به اصلاح دیدگاه‌های متداول و بسط ایده‌های آموزشی نوین می‌گرداند.

کتاب حاضر در میان مراجع عمده آموزش مکانیک کوانتومی مقدماتی از جایگاه ویژه‌ای برخوردار است. نویسنده که در نگارش کتاب پیشین خود - آشنایی با الکتروپدینامیک - بسیار موفق بوده، معتقد است در این کتاب نحوه کار با مکانیک کوانتومی را به دانشجویان یاد داده و مباحث الهام‌بخشی را درباره معنای آن در میان می‌گذارد. این کتاب به دانشجویان مکانیک کوانتومی مقدماتی هستند که

هر نویسنده‌ای کم و بیش خود را در تبیین آنها موفق می‌خواند. با این حال، کتاب گریفیث به واقع واجد ویژگی‌های ممتازی است. به نظر من می‌توان برتری‌های این کتاب را در قالب معیارهای زیر مورد توجه قرار داد:

- زیبایی و ایجاز در معرفی مفاهیم و ارائه تعاریف ساده و دقیق
- معرفی ابزارها و تکنیک‌های کار با مکانیک کوانتومی و تفکیک نسبی آنها از متن نظریه و اهدافی که دنبال می‌کند.

مکانیک کوانتومی نظریه‌ای است که زبانی به غایت ریاضیاتی دارد. اما این زبان آن نیست که ارزش آنرا تعیین می‌کند بلکه هدفی است که این نظریه در پی دستیابی به آن است: شناساندن سازوکارهای بنیادین جهان پیرامون. باید توجه داشت که در آموزش مکانیک کوانتومی نباید بگذاریم ریاضیات آنقدر غالب شود تا از مفاهیم و نقش آنها در شکل‌دهی نظریه باز بمانیم.

▪ تعیین کلاس مخاطبین

کتاب آشکارا خود را مناسب یک دوره درسی دو ترمی مقدماتی برای دوره کارشناسی فیزیک معرفی می‌کند. گرچه هم نگاهی به برخی مباحث پیشرفته داشته و هم مدعی قابل استفاده بودن برای سایر رشته‌ها بویژه شیمی است، اما بر این دسته‌بندی که مناسبترین استفاده از آن برای چه گروهی است تاکید می‌ورزد. این رسم همه کتاب‌های درسی است که مخاطب خود را معرفی کنند، اما همه آنها در طول کار به آن پایبند نمی‌مانند.

▪ کیفیت متن و میزان خواندنی بودن اثر

همه ما با این مشکل دست به گریبانیم که آموزش علوم پایه روح ندارد. نویسندگان کتاب‌های درسی فکر می‌کنند تمام وظیفه‌شان این است که در غالبی کاملاً اسکولاستیکی و خشک و مقدس‌مآبانه یکسری مفاهیم و مسائل را ارائه کنند، همین و بس. آموزش معاصر علوم دیدگاه دیگری دارد. باید با مخاطب تا حد امکان ارتباط برقرار کرده و او را در موضوع درگیر کرد. نوشته‌های گریفیث بن مایه‌هایی از متون دانش عمومی یا مقاله‌های مجله‌هایی مانند *Nature* و *Scientific American* را در بطن دارد. خواندن آنها اول لذت‌بخش است، بعد آموزنده.

▪ احاطه موضوعی کامل

اشاره کردم که آموزش نظریه مکانیک کوانتومی از عدم وجود هم‌زمانی رنج می‌برد. متأسفانه بر سر اینکه در یک متن مقدماتی دقیقاً باید چه چیزهایی را مطرح کرد توافقی وجود ندارد. با این حال، گریفیث برای اجتناب از بروز هرگونه مشکل، تقریباً به تمام آن حوزه‌هایی که مورد بحث صاحب‌نظران

آموزش این نظریه است به زیبایی اشاره کرده و در عین حال هدف اولیه خود یعنی تدوین مرجعی مقدماتی را از یاد نبرده است.

▪ پرداختن به جنبه‌های معناشناختی و وجودی

نظریه مکانیک کوانتومی نظریه‌ای به شدت معنایی است که اهمیت آشنا کردن تازه کارها با ماهیت آن کمتر از پهن کردن سفره‌ای پر از معادله ریاضی نیست. من معناشناسی مقدماتی را از فلسفه وجودی جدا می‌دانم. شناساندن معنایی یک نظریه با پرداختن به فلسفه آن فرق دارد. شاید این دو در یک رابطه طولی در امتداد هم قرار بگیرند، اما باز هم یکی نیستند. گریفیث به فلسفه مکانیک کوانتومی نپرداخته اما از همان ابتدا اساس معنایی و موضع‌گیری اندیشمندان در برابر آنها را به شکلی ستودنی مورد توجه قرار داده و پس‌زمینه فکری کتاب را با همین روند به پیش برده است. به عبارت دیگر، کسی که کتاب را از ابتدا شروع کرده و تا انتها به پیش می‌رود درکی لذت‌بخش از زمان سپری شده بدست می‌آورد و سرگشته نمی‌ماند که حالا باید چه کرد.

▪ ترکیب رویکردهای درس محور و پژوهش محور

گریفیث واقعاً در مطلب و موضوع چیزی در این کتاب کم نگذاشته است. به نظر بسیاری از اساتید کتاب وی حاوی تمام آنچیزهایی است که یک دانشجوی کارشناسی در رشته فیزیک باید بداند. این مهم در کنار مسائل چالش‌برانگیزی که طرح شده و نیز اشارات فراوانی که به مقالات علمی چه از جنبه تاریخی و چه از جنبه پژوهشی گردیده، طعم تحقیقاتی و رویکردهای پیشبرنده در این حوزه را نیز در حد قابل قبولی در کتاب دلپذیر کرده است.

▪ خودآموزی یا استادآموزی

کتاب مدعی است متنی خودآموز را فراهم کرده که می‌تواند مکانیک کوانتومی را با حداقل نیاز به یک استاد آموزش دهد. این ادعا شاید در بحث آموزش روش‌های ریاضی و یا ارائه یکسری تعاریف و روال‌های استاندارد درست باشد، اما از نگاه کلان بویژه آنجا که مساله روشنگری مفاهیم به میان می‌آید ضرورت گفتمان میان دانشجویان و آموزگاران انکار ناپذیر می‌شود. کسی که مفاهیم نظریه مکانیک کوانتومی را به دانشجویان منتقل نکند، شایسته تکیه بر کرسی استادی این درس نیست. این مهم بر عهده دانشجویان تیزبین و جستجوگر است که اساتیدشان را به ارائه اینگونه آموزش برانگیزانند.

▪ نیاز به مراجع دیگر

کتاب حاضر در فهرست متون درسی اصلی بیشتر دانشگاه‌های درجه یک دنیا از جمله

و Cambridge ، McGill ، Toronto ، UBC ، Cornell ، Illinois ، Oxford ، College ... معرفی شده است. بنابراین متن حاضر، متنی درجه یک در آموزش مکانیک کوانتومی مقدماتی می باشد. اما این بدان معنی نیست که این اثر کتاب مقدس مکانیک کوانتومی است. بی شک ترکیب آن با دیگر مراجع درجه یک می تواند یک صبحانه عالی و مغزی برای یک روز خوب فیزیکی به شمار رود! ضمن آنکه هیچگاه از حل مساله بیشتر دست نکشید. هر چه بیشتر مساله حل کنید بیشتر با مکانیک کوانتومی آشنا می شوید، نظریه ای که انتهای برایش متصور نیست.

درک سرشتی نظریه مکانیک کوانتومی برای همه راهوران علوم امری ضروری و بایسته است. امیدوارم کتاب حاضر در این امر راهگشا باشد. خواهش می کنم در صورت برخورد با هر مشکلی در متن یا حروفچینی کتاب اینجانب را مطلع فرمائید. همچنین مشتاقانه منتظر شنیدن یا بهتر بگویم خواندن نکات سازنده شما در این رابطه هستم. برای این منظور، می توانید از آدرس پست الکترونیکی maysamtehrani@gmail.com استفاده کنید.

با هم برای دنیایی روشن و خردمند

میثم طهرانی

مرکز تحقیقات مبتا در علوم پایه - ونکوور کانادا

مکانیک کوانتومی را بر خلاف مکانیک نیوتن، الکترودینامیک ماکسول و نسبیت اینشتین یک نفر پدید نیاورده یا حتی جمع‌بندی نکرده است، به همین خاطر تا امروز جای بعضی از زخم‌های دوران نوپایی دلشاد اما تکان دهنده آن در خاطر هست. هیچ اتفاق نظر عمومی از این بابت که اصول بنیادین آن چه هست، چگونه باید درباره آن اندیشید، یا اینکه دقیقاً چه معنایی می‌دهد در بین نیست. هر فیزیکدان کارآمدی می‌تواند روی مکانیک کوانتومی کار کند، اما همین داستان‌هایی که خودمان درباره کاری که انجام می‌دهیم می‌گوئیم به اندازه قصه‌های هزار و یک شب شهرزاد مختلف و گوناگون و تقریباً نامعقول است. ریچارد فاینمن (یکی از آن حرفه‌ای‌های مکانیک کوانتومی) می‌گفت: "به نظرم می‌توان با اطمینان کامل گفت که هیچکس مکانیک کوانتومی را نمی‌فهمد."

هدف این کتاب آموزش چگونگی کار کردن با مکانیک کوانتومی است. سوای از برخی پیش زمینه‌های ضروری در فصل ۱، پرسش‌های شبه فلسفی عمیق‌تر را برای انتهای کتاب نگاه داشته‌ام. معتقد نیستم آدم می‌تواند هوشمندانه در اینباره که مکانیک کوانتومی چه معنایی دارد به بحث بنشیند، تا آن زمان که درک کاملی درباره آنچه مکانیک کوانتومی انجام می‌دهد بدست آورد. اما اگر به هیچ وجه نمی‌توانید صبر کنید، حتماً پس از پایان فصل ۱ بخش گفتار پایانی را مطالعه کنید.

نظریه کوانتومی نه تنها از منظر مفهوم نظریه‌ای غنی و ارزشمند به شمار می‌رود بلکه از نظر فنی هم دشوار بوده و در این میان روش‌های حل دقیق نه همه مسائل اما اکثر مثالهای تصنعی کتابهای درسی کم تعداد و دور از دسترس‌اند. بنابراین ضروری است که تکنیک‌های خاصی برای حمله به تعداد بیشتری از مسائل واقع‌گرا را بسط و توسعه دهیم. بر همین اساس، کتاب حاضر را به دو قسمت تقسیم می‌کنم؛ بخش اول نظریه اساسی را در بر می‌گیرد و بخش دوم مجموعه‌ای از تمهیدات تقریبی به همراه کاربردهای توضیحی را گرد هم می‌آورد. اگرچه جدا نگاه داشتن این دو بخش از نظر منطقی حائز اهمیت است، اما مطالعه مطالب آنها به ترتیبی که اینجا ارائه شده ضرورتی ندارد. مثلاً برخی اساتید ممکن است بخواهند پس از فصل ۲ به نظریه اختلال مستقل از زمان بپردازند.

این کتاب برای یک درس یک ترمی یا یک سالی در سال سوم یا آخر دوره کارشناسی در نظر گرفته شده است. یک درس یک ترمی باید بیشتر روی بخش اول متمرکز باشد؛ یک درس یک ساله باید جای کافی برای مطالبی بیشتر از بخش دوم در اختیار داشته باشد. خواننده باید با اصول جبر خطی، اعداد

مختلط، و حساب دیفرانسیل و انتگرال تا حد مشتقات جزئی از پیش آشنایی داشته باشد؛ کمی آشنایی با آنالیز فوریه و تابع دلتای دیراک مفید خواهد بود. بی‌گمان، [آشنایی با] مکانیک کلاسیک مقدماتی ضروری است و کمی الکترودینامیک هم به جای خود سودمند است. مانند همیشه، هرچه ریاضی و فیزیک بیشتری بدانید کار آسان‌تر بوده و [در نتیجه] بهره بیشتری نیز از مطالعه خود خواهید برد. اما مایلم روی این نکته تأکید کنم که مکانیک کوانتومی از نظر من چیزی نیست که به راحتی و به طور طبیعی از نظریه‌های پیشین حاصل شود. برعکس، این نظریه نمایانگر انحرافی انقلابی و غیر منتظره از ایده‌های کلاسیک است که روش دور از عقل به تمامی نوین و بنیاد براندازی را در اندیشیدن درباره عالم به کار می‌اندازد. قدر مسلم، همین [روش اندیشیدن نوین] است که این نظریه را به موضوعی این چنین جذاب مبدل می‌سازد.

در نگاه نخست، کتاب حاضر به طرزى پس زننده ریاضیاتی به نظر تان می‌آید. با چند جمله‌ایهای لژاندر، هرمیت و لاگرانژ، هماهنگ‌های کروی، توابع بسل، نیومان و هنکل، توابع آیری و حتی تابع زتای ریمان مواجه می‌شویم - نیازی به گفتن نیست که تبدیلات فوریه، فضاهای هیلبرت، عملگرهای هرمیتی، ثوابت کلبش - گوردون و بس‌شمار (چند جمله‌ای) های لاگرانژ هم هستند. واقعا این بسته [ریاضی] ضرورت دارد؟ شاید نه، ولی علم فیزیک مانند یک کارگاه چوب‌بری است: استفاده از ابزار صحیح کار را آسانتر می‌کند نه دشوارتر و تدریس مکانیک کوانتومی بدون تجهیزات ریاضی مناسب به این می‌ماند که از دانشجویی بخواهیم با پیچ‌گوشتی فونداسیون حفر کند. (به عبارت دیگر، اینکه استاد خود را مجبور به ارائه درس‌های پیچیده در نحوه استفاده درست از این ابزارها بداند می‌تواند کسل کننده یا سرگرم کننده باشد. اقتضای طبیعت خود من که می‌گوید بیل‌ها را بدهید دست دانشجویها و به آنها بگوئید شروع به کندن کنند. ممکن است در ابتدا دستشتان تاول بزند اما من هنوز هم فکر می‌کنم این موثرترین و جذابترین راه برای یادگیری است.) در هر اندازه‌ای، می‌توانم به شما اطمینان دهم که [در این کتاب] خبری از ریاضیات پیچیده نیست و چنانچه با چیز نا آشنایی برخورد کردید و توضیح مرا کافی نیافتید، به هر طریقی که صلاح می‌کنید از کسی درباره آن سوال کنید یا در یک کتاب دیگر آنرا جستجو کنید. کتابهای خوبی درباره روش‌های ریاضی وجود دارند - من به خصوص کتاب *Mathematical Methods in Physical Sciences* اثر Mary Boas، ویرایش دوم انتشارات Wiley (نیویورک، ۱۹۸۳) و *Mathematical Methods for Physicists* اثر George Arfken ویرایش سوم انتشارات Academic (اورلاندو، ۱۹۸۵) را توصیه می‌کنم. اما به هر شکل که عمل می‌کنید، اجازه ندهید ریاضیات - که برای ما تنها ابزار موجود است - در فیزیک مداخله کند.

خوانندگان متعددی تاکنون به این مساله اشاره کرده‌اند که تعداد مثال‌های کار شده در این کتاب نسبت به کتابهای متداول کمتر است و نیز اینکه [طرح] برخی از مطالب مهم به مسائل واگذار شده است.

این امر تصادفی نیست. طبیعتاً اساتید باید بسیاری از مسائل را تا آنجا که زمان اجازه می‌دهد در کلاس مرور کنند اما باید به دانشجویان هم یادآور شد که قرار نیست همه استعدادهای درونی آدم حل همه جور مساله‌ای داشته باشند - شما اینجا در حال توسعه مجموعه کاملاً جدیدی از توانمندیها هستید و مساله هم این است که هیچ جایگزینی برای روش مطرح شده وجود ندارد. مارک سیمون پیشنهاد کرد برای مسائل یک کتابچه راهنما درست کنم که به هر مساله تعدادی ستاره اختصاص پیدا کند که سطح دشواری یا اهمیت آنها را نشان دهد. به نظر ایده خوبی آمد (گرچه، مانند کیفیت یک رستوران، اهمیت یک مساله تنها کمی به طعم آن مربوط می‌شود)؛ من هم جدولی برای رده‌بندی به شرح زیر درست کردم:

* مساله ضروری که هر خواننده‌ای باید آنرا مطالعه کند؛

*** مساله کمی دشوارتر یا فرعی‌تر

**** مساله چالش برانگیز غیر معمول که ممکن است بیش از یک ساعت

زمان نیاز داشته باشد

(مسائلی که ستاره ندارند غذای حاضری هستند: البته اگر گرسنه هستید چون خیلی هم مغذی نیستند.)
(اکثر مسائلی که یک ستاره دارند در انتهای بخش مربوطه می‌آیند؛ اکثر مسائلی که سه ستاره دارند در انتهای فصل می‌آیند. کتابچه راهنمای حل مسائل هم از طریق ناشر در دسترس است (تنها برای اساتید).
در آماده‌سازی ویرایش دوم تلاش کرده‌ام تا حد امکان جوهر و جان کلام ویرایش اول را از دست ندهم. تنها تغییر عمده در فصل ۳ رخ داده است که بسیار طولانی و بیش از حد منحرف کننده بود؛ این فصل با واگذار کردن موضوع پیش زمینه‌ای درباره فضاهای برداری با ابعاد متناهی (موضوعی که بیشتر دانشجویان در این سطح از پیش با آن آسوده‌اند) کاملاً بازنویسی شده است. مثال‌هایی را به فصل ۲ اضافه کرده‌ام (و تعریف بدقواره عملگرهای افزایشنده و کاهنده را برای نوسانگر هماهنگ اصلاح کرده‌ام). در فصل‌های پایانی تا آنجا که از دستم برمی‌آمده تغییراتی داده‌ام، حتی شماره‌گذاری مسائل و روابط را هم هر جا ممکن بوده حفظ کرده‌ام. این رویکرد در جاهایی کارآمد بوده است (برای نمونه، معرفی بهتر تکانه زاویه‌ای در فصل ۴ ، اثبات ساده‌تر قضیه بی‌دررو در فصل ۱۰ و بخش جدیدی درباره انتقال‌های فاز پاره‌ای در فصل ۱۱). ناگزیر، ویرایش دوم کمی طولانی‌تر از ویرایش اول است که از آن بابت متاسفم، اما امیدوارم بی‌کم و کاست‌تر و قابل قبول‌تر باشد.

نظرات و توصیه‌های بسیاری از همکارانم که مسائل را پیشنهاد کردند، دست نوشته‌های اولیه‌ام را خواندند یا از این کتاب در کلاسهای خودشان استفاده کردند برایم بهره فراوان داشته است. از همه آنها تشکر می‌کنم.

بخش اول



نظریه

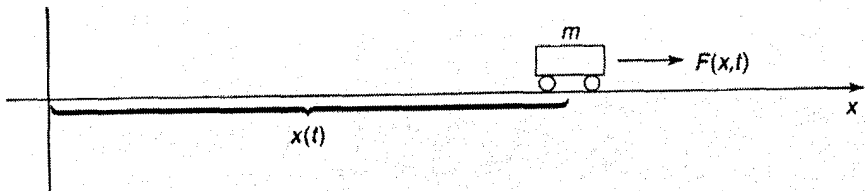
فصل اول

تابع موج

۱.۱ معادله شرودینگر

ذره‌ای به جرم m را تصور کنید که مقید به حرکت در امتداد محور x بوده و تحت تاثیر نیرویی به صورت $F(x, t)$ قرار دارد (شکل ۱.۱). کار مکانیک کلاسیک این است که موقعیت ذره را در هر زمان دلخواه تعیین نماید: $x(t)$. به مجرد دانستن آن می‌توانیم سرعت ($v = dx/dt$)، تکانه ($p = mv$)، انرژی جنبشی ($T = (1/2)mv^2$) یا هر متغیر دینامیکی دلخواه دیگری از ذره را بدست آوریم. خوب، حالا سوال اینجاست که چطور باید $x(t)$ را تعیین کرد؟ قانون دوم نیوتن را به کار می‌بریم: $F = ma$. (برای سامانه‌های پایستار - تنها نوعی که می‌توانیم مد نظر قرار دهیم و خوشبختانه تنها شکلی که در سطح میکروسکوپی رخ می‌دهد - نیرو را می‌توان بر حسب مشتق تابع انرژی پتانسیل^۱، $F = \partial V / \partial x$ ، بیان کرد که به این ترتیب قانون دوم نیوتن به شکل $m d^2x/dt^2 = -\partial V / \partial x$ درمی‌آید.) این رابطه به همراه شرایط اولیه مناسب (معمولاً مکان و سرعت در $t = 0$) تابع $x(t)$ را مشخص می‌کند.

مکانیک کوانتومی همین مساله را به شکلی کاملاً متفاوت مورد بررسی قرار می‌دهد. در اینحالت آنچه بدنبالش هستیم تابع موج، $\Psi(x, t)$ ، ذره است که آنرا از طریق حل معادله شرودینگر بدست می‌آوریم:



شکل ۱.۱ «ذره‌ای» مقید به حرکت در یک بعد تحت تاثیر یک نیروی مشخص

^۱ نیروهای مغناطیسی از این امر مستثنی هستند اما بهتر است فعلاً نگران آنها نباشیم. ضمناً، در تمام این کتاب فرض می‌کنیم حرکت غیر نسبیتی است ($v \ll c$).

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi \quad [۱.۱]$$

در این رابطه i جذر مربعی ۱- و \hbar ثابت پلانک است - یا به بیان دقیق‌تر، ثابت اصلی او (\hbar) تقسیم بر 2π :

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054572 \times 10^{-34} \text{ J s} \quad [۲.۱]$$

معادله شرودینگر به طور منطقی نقشی مشابه قانون دوم نیوتن را ایفا می‌کند: با داشتن شرایط اولیه مناسب (معمولاً، $\Psi(x, 0)$ ، معادله شرودینگر تابع $\Psi(x, t)$ را برای تمام زمان‌ها بدست می‌دهد، درست همانطور که در مکانیک کلاسیک قانون نیوتن تابع $x(t)$ را برای تمام زمان‌ها تعیین می‌کند.^۲

۲.۱ تعبیر آماری

اما این «تابع موج» دقیقاً چیست و وقتی آنرا بدست می‌آورید چه کاری برایتان انجام می‌دهد؟ هر چه باشد، یک ذره به خاطر ماهیتش در یک نقطه متمرکز می‌شود، در حالیکه تابع موج (آنگونه که از نامش پیداست) در فضا منتشر می‌شود (تابع موج برای هر زمان t تابعی از x است). چطور می‌توان گفت چنین چیزی حالت یک ذره را توصیف می‌کند؟ تعبیر آماری بورن از تابع موج پاسخ این سوال است که می‌گوید $|\Psi(x, t)|^2 dx$ احتمال یافتن ذره در نقطه x و لحظه t را بدست می‌دهد - یا به بیان دقیق‌تر،^۳

^۲ برای یک بررسی دست اول و لذت‌بخش از سرچشمه‌های معادله شرودینگر مقاله Felix Bloch در مجله *Physics Today*، دسامبر ۱۹۷۶ را ملاحظه کنید.

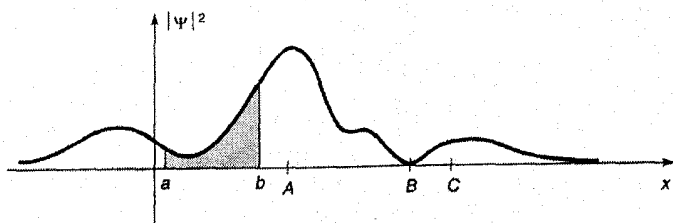
^۳ خود تابع موج مختلط است اما $|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi$ (که در آن Ψ^* مزدوج مختلط Ψ است) حقیقی و مثبت است - همانطور که طبعاً هر احتمالی باید باشد.

$$\int_a^b |\Psi(x, t)|^2 dx = \left\{ \begin{array}{l} \text{احتمال یافتن ذره} \\ \text{بین } x \text{ و } (x + dx) \\ \text{در لحظه } t \end{array} \right\} \quad [۳.۱]$$

احتمال عبارت است از مساحت زیر نمودار $|\Psi|^2$. برای تابع موج شکل ۲.۱، احتمال زیادی هست که بتوانید ذره را در مجاورت نقطه A ، جاییکه $|\Psi|^2$ بزرگ است، بیابید و به نسبت احتمال کمی وجود دارد که آنرا در نزدیکی نقطه B پیدا کنید.

تعبیر آماری نوعی ابهام را وارد مکانیک کوانتومی می‌کند، به طوریکه حتی اگر همه آنچیزی که نظریه باید درباره ذره به شما بگوید (یعنی: تابع موج آن) را بدانید، باز هم نمی‌توانید با قطعیت پیش‌بینی کنید که خروجی یک آزمایش ساده برای اندازه‌گیری مکان چیست - تمام آنچه مکانیک کوانتومی ارائه می‌دهد اطلاعاتی آماری درباره نتایج ممکن است. این ابهام همیشه برای فیزیکدانان و فلاسفه به یک شکل دردسرساز بوده و بدیهی است اگر از خودتان بپرسید آیا این واقعیت طبیعت است یا نقصی در نظریه.

فرض کنید مکان ذره را اندازه گرفته و آنرا در نقطه C می‌یابیم.^۴ سوال: ذره درست قبل از آنکه آنرا اندازه بگیریم کجا بود؟



شکل ۱.۱ یک تابع موج نمونه. یافتن ذره نزدیک نقطه A به نسبت محتمل است اما احتمال کمی وجود دارد که همین ذره در نزدیکی نقطه B یافت شود. محدوده سایه‌دار نشان دهنده احتمال یافتن ذره در بازه dx است.

^۴ البته، هیچ ابزار اندازه‌گیری کاملاً دقیق نیست؛ منظور من این است که ذره در مجاورت C یافت شد تا در محدوده تئورانس دستگاه قرار داشته باشد.

سه پاسخ محتمل برای این سوال وجود دارد که هر کدام مشخص کننده خصوصیات یکی از مکاتب اندیشه اصلی درباره ابهام کوانتومی است:

دیدگاه واقع گرایانه: ذره در نقطه C بود. این نظر کاملاً معقول به نظر می‌رسد و دیدگاهی است که اینشتین طرفدار آن بود. با این وجود توجه داشته باشید که اگر این دیدگاه درست باشد آنگاه مکانیک کوانتومی نظریه ناکاملی است، چرا که ذره واقعاً در نقطه C قرار داشت و آنوقت مکانیک کوانتومی از بیان [قطعی] این مساله به ما عاجز بود. در واقع گرایسی، ابهام حقیقتی از طبیعت نیست بلکه بازتابی از نادیده انگاری ماست. به قول d'Espagnat «مکان ذره هرگز مبهم نبود، بلکه صرفاً برای آزمایشگر شناخته شده نبود»^۵ از قرار معلوم Ψ تمام ماجرا نیست - قدری اطلاعات اضافی (که به متغیر پنهان معروف است) هم لازم است تا توصیف کاملی از ذره بدست آید.

دیدگاه متعارف: ذره براستی هیچ جایی نبود. این عمل اندازه‌گیری بود که ذره را واداشت تا مکانی اختیار نماید (هرچند شهادت این را نداریم که بپرسیم ذره چگونه و چرا تصمیم می‌گیرد در نقطه C باشد). Jordan رک و بی‌تعارف معتقد بود: «مشاهدات نه تنها آنچه در حال اندازه‌گیری است را مختل می‌کنند بلکه آنرا تولید هم می‌کنند ... ما [ذره] را وامی‌داریم تا مکان مشخصی اختیار کند»^۶ این دیدگاه (که اصطلاحاً آنرا تعبیر کپنهاگی می‌نامند) به بور و طرفداران وی نسبت داده می‌شود. ایده مذکور در بین فیزیکدانان دیدگاهی است که بیش از همه مورد پذیرش بوده است. با این حال، توجه داشته باشید که چنانچه این عقیده صحیح باشد آنوقت نکته بسیار خاص و عجیبی درباره عمل اندازه‌گیری به میان می‌آید - چیزی که علی‌رغم بیش از نیم قرن جر و بحث عملاً توفیقی در روشن کردن این وضعیت بدست نیاورده است.

^۵ مقاله *The Quantum Theory and Reality* نوشته Bernard d'Espagnat در مجله Scientific American ،

نوامبر ۱۹۷۹.

^۶ نقل شده در مقاله زیبایی به قلم N. David Mermin با عنوان *Is the moon there when nobody looks?*

دیدگاه نمی‌دانم: از جواب دادن امتناع کنید. این ایده آنقدرها هم که به نظر می‌رسد نابخردانه و چرند نیست - به هر حال، [منطقی است که بپرسیم] چه موجود معقولی می‌توانسته آنجا باشد تا نسبت به وضعیت ذره پیش از اندازه‌گیری اعلام نظر قطعی کند، آن هم زمانی که تنها راه پی بردن به اینکه حق با شماست یا نه دقیقا این است که یک اندازه‌گیری انجام شود که در آن حالت آنچه بدست می‌آورد دیگر «پیش از اندازه‌گیری» نیست؟ این متافیزیک (به مفهومی با معنی منفی کلمه) است که نگران چیزی است که به خاطر ماهیتش نمی‌توان آنرا آزمود. پائولی می‌گفت: «آدم نباید فکر خودش را درباره مساله‌ای که همیشه هست و کسی چیزی درباره‌اش نمی‌داند، مثل این سوال دیرینه که چند فرشته می‌توانند روی نوک یک سوزن بنشینند، سخت به کار بیندازد.»^۷ برای چند دهه این دیدگاه پس‌رفتی اکثر فیزیکدان‌ها بود: آنها می‌کوشیدند پاسخ متعارف دوم را به شما غالب کنند، اما اگر پافشاری می‌کردید بلافاصله می‌پریدند روی جواب سوم و به گفتگو خاتمه می‌دادند.

تا تقریبا همین اواخر، هر سه دیدگاه (واقع‌گرایانه، متعارف و نمی‌دانم) هواداران پر و پا قرص خود را داشتند. اما در ۱۹۶۴ John Bell نشان داد که یک مشاهده‌پذیر در این که آیا ذره مکان دقیق (هر چند نامعلومی) داشته موثر است و با این کار جامعه فیزیک را شگفت زده کرد. کشف بل به شکل موثری دیدگاه نمی‌دانم را به عنوان یک گزینه کامیاب از دور خارج کرد و این سوال تجربی را به میان کشید که دیدگاه ۱ درست است یا ۲. در پایان کتاب باز هم به این داستان باز می‌گردم، آن زمان شما در موقعیت بهتری برای ارزیابی نظریه بل خواهید بود؛ فعلا، همین قدر کافی است که بگویم آزمایش‌ها با قاطعیت تمام تعبیر متعارفی را تأیید کرده‌اند^۸: یک ذره به وضوح پیش از اندازه‌گیری مکان دقیقی ندارد، همانطور که موجک‌های روی دریاچه ندارند؛ این فرایند

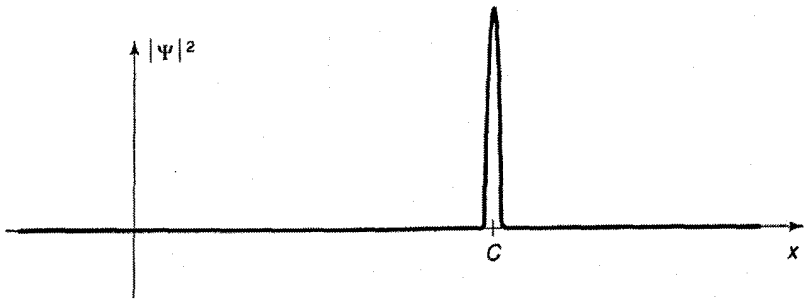
^۷ نقل شده توسط مرمین (زیرنویس شماره ۶)، صفحه ۴۰.

^۸ این بیان کمی زیادی مستدل و قانع کننده است: هنوز تعداد کمی شکاف‌های نظری و تجربی باقی مانده که در ادامه راجع به برخی از آنها بحث خواهم کرد. از طرف دیگر، صورت‌بندی‌های دیگری هم وجود دارد (مانند تعبیر چند جهانی‌ها) که چندان خوش قواره و بی‌کم و کاست در سه دسته‌بندی که ارائه دادم قرار نمی‌گیرند. با این حال فکر می‌کنم دست کم از یک منظر آموزشی صلاح باشد خط مشی روشن و منسجمی را در این مرحله اتخاذ کنم و بعدا دلوپس دیگر جایگزین‌ها شوم.

اندازه‌گیری است که مصرائه عدد خاصی را اعلام کرده و بدین ترتیب به نوعی آن نتیجه خاص را خلق می‌کند که تنها محدود به وزن آماری تحمیل شده توسط تابع موج است.

چه می‌شود اگر بلافاصله بعد از اندازه‌گیری اول، دومین اندازه‌گیری را انجام دهیم؟ آیا باز هم بدست می‌آوریم یا عمل اندازه‌گیری هر بار یک عدد کاملاً جدید را به بار می‌آورد؟ همه روی این سوال اتفاق نظر دارند: یک اندازه‌گیری تکراری (روی همان ذره) باید همان مقدار را جواب دهد. قدر مسلم، اگر نتوان این مطلب را با تکرار بلافاصله اندازه‌گیری تأیید کرد، اثبات این امر که ذره در مرحله اول واقعا در C یافت شد کار دشواری خواهد بود. تعبیر متعارفی به چه نحو این حقیقت را توجیه می‌کند که دومین اندازه‌گیری مقید به ارائه مقدار C است؟ ظاهراً که اولین اندازه‌گیری به شکلی اساسی تابع موج را دستکاری می‌کند، به طوریکه موج در حال حاضر آشکارا در محدوده C بیشینه است (شکل ۳.۱). می‌گوئیم تابع موج متعاقب اندازه‌گیری روی نقطه تیز C فرومی‌افتد (تابع مجدداً طبق معادله موج شرودینگر به سرعت پخش می‌شود، به همین خاطر باید اندازه‌گیری دوم را فوراً انجام داد). بنابراین، دو نوع فرایند فیزیکی مجزا از هم وجود دارد: فرایندهای متعارف که در آنها تابع موج آهسته و با خاطری آسوده بنابر معادله شرودینگر تحول می‌یابند و اندازه‌گیری‌ها که در آنها Ψ ناگهان و به صورت گسسته فرومی‌افتد.^۹

^۹ نقش اندازه‌گیری در مکانیک کوانتومی آنقدر حیاتی و خارق‌العاده است که ممکن است از خودتان بپرسید یک اندازه‌گیری دقیقاً مشکل از چیست. آیا هیچ ربطی به تعامل میان سامانه میکروسکوپی (کوانتومی) و افزار اندازه‌گیری ماکروسکوپی (کلاسیک) دارد (آنطور که بور اصرار داشت) یا آیا جا گذاشتن یک ثبت دائمی (آنطور که هایزنبرگ مدعی بود) خصوصیت آن را تعیین می‌کند یا آیا پای مداخله یک ناظر آگاه در میان است (آنطور که ویگنر در نظر داشت)؟ در گفتار پایانی باز به این مقوله دردرساز بازمی‌گردیم؛ فعلاً بیایید این دیدگاه ساده لوحانه را بپذیریم: اندازه‌گیری کاری است که دانشمند آنرا در آزمایشگاه با خط‌کش‌ها، کرومومترها، شمارگرهای گایگر و چیزهایی از این قبیل انجام می‌دهد.



شکل ۲.۱ فروافت تابع موج: نمودار $|\Psi|^2$ بلافاصله پس از اندازه‌گیری ذره را در نقطه C یافته است.

۱.۳ احتمال

۱.۳.۱ متغیرهای گسسته

به جهت تعبیر آماری، احتمال در مکانیک کوانتومی نقشی اساسی ایفا می‌کند، از این رو در این قسمت موضوع اصلی را رها کرده و کمی درباره نظریه احتمال بحث می‌کنم. بحث این قسمت بیشتر حول معرفی تعدادی نشانه و واژه‌شناسی [نظریه احتمال] است و قصد دارم آنرا در قالب یک مثال ساده انجام دهم.

اتاقی را تصور کنید که ۱۴ نفر در آن هستند که سنشان به صورت زیر است:

یک نفر ۱۴ ساله

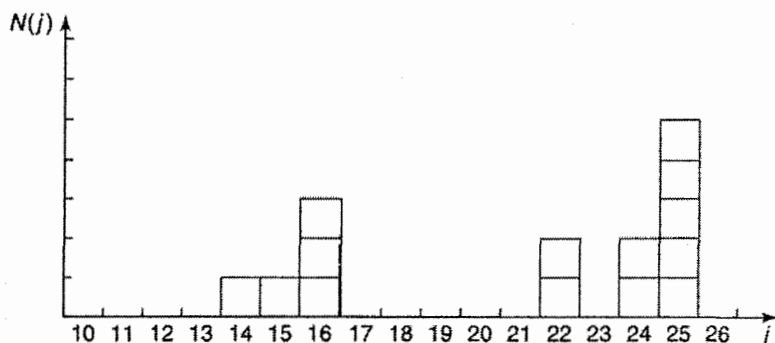
یک نفر ۱۵ ساله

سه نفر ۱۶ ساله

دو نفر ۲۲ ساله

دو نفر ۲۴ ساله

پنج نفر ۲۵ ساله.



شکل ۳.۱ نمودار ستونی که نشان‌دهنده تعداد افراد، $N(j)$ ، با سن j برای توزیع بخش ۱.۳.۱ است.

اگر $N(j)$ را تابع تعداد افراد با سن j در نظر بگیریم، در آنصورت داریم:

$$N(14) = 1$$

$$N(15) = 1$$

$$N(16) = 3$$

$$N(22) = 2$$

$$N(24) = 2$$

$$N(25) = 5$$

که در آن برای مثال $N(17)$ برابر است با صفر. تعداد کل افراد حاضر در اتاق برابر است با

$$N = \sum_{j=0}^{\infty} N(j) \quad [۴.۱]$$

(بدیهی است در این مثال $N = 14$ است.) شکل ۴.۱ نمودار ستونی این داده‌ها است. در زیر تعدادی پرسش آمده که می‌توان درباره این توزیع مطرح کرد.

سوال ۱. اگر فردی را به صورت تصادفی از میان این گروه انتخاب کنید، احتمال آنکه سن فرد انتخاب شده ۱۵ سال باشد چقدر است؟ پاسخ: احتمال یک به ۱۴ است زیرا ۱۴ انتخاب ممکن به یک اندازه محتمل از میان افرادی وجود دارد که هر یک سن خاص خود را دارد. اگر $P(j)$ احتمال بدست آمدن سن j باشد، در آنصورت $P(14) = 1/14$ ، $P(15) = 1/14$

و $P(16) = 3/14$ و همین طور الی آخر. به طور کلی داریم،

$$P(j) = \frac{N(j)}{N} \quad [5.1]$$

دقت داشته باشید که احتمال بدست آمدن [سن] ۱۴ یا ۱۵ برابر است با جمع احتمال‌های منفرد (در این حالت ۱/۷). به خصوص، جمع تمام احتمال‌ها برابر با ۱ است - بی‌تردید یکی از این سنین را بدست می‌آورید:

$$\sum_{j=0}^{\infty} P(j) = 1 \quad [6.1]$$

سوال ۲. محتمل‌ترین سن چقدر است؟ پاسخ: واضح است که ۲۵ است؛ پنج نفر در این سن هستند در حالیکه در مورد بقیه تعداد حداکثر سه نفر است. به طور کلی، محتمل‌ترین j آنی است که $P(j)$ آن بیشترین مقدار باشد.

سوال ۳. سن میانه چقدر است؟ پاسخ: ۲۳ سال، چون ۷ نفر سنی کمتر از ۲۳ و ۷ نفر سنی بیشتر از آن دارند. (به طور کلی، میانه آن مقداری از j است که احتمال بدست آمدن نتیجه‌ای بیشتر از آن درست برابر با احتمال بدست آمدن نتیجه‌ای کمتر از آن باشد).

سوال ۴. سن میانگین (یا متوسط) چقدر است؟ پاسخ:

$$\frac{(14) + (15) + 3(16) + 2(22) + 2(24) + 5(25)}{14} = \frac{294}{14} = 21$$

به طور کلی، مقدار میانگین j (که از این به بعد آنرا به صورت $\langle j \rangle$ می‌نویسیم) عبارت است از

$$\langle j \rangle = \frac{\sum jN(j)}{N} = \sum_{j=0}^{\infty} jP(j) \quad [7.1]$$

دقت کنید نیازی نیست فردی با سن میانگین یا سن میانه در گروه وجود داشته باشد - در این مثال هیچکس سنی برابر با ۲۳ یا ۲۵ سال ندارد، به همین خاطر باید آنرا مقدار چشمداشتی نامید. این کلمه عبارت گمراه‌کننده‌ای است زیرا حاکی از آن است که این نتیجه‌ای است که

چنانچه یک اندازه گیری انجام دهید بیش از هر مقدار دیگر انتظار بدست آمدنش را خواهید داشت (که محتمل ترین مقدار خواهد بود، نه مقدار میانگین) - اما متأسفم که ناگزیر از به کار بردن آن هستیم.

سوال ۵. میانگین مربعات سن ها چقدر است؟ پاسخ: ممکن است $14^2 = 196$ را با احتمال $1/14$ یا $15^2 = 225$ را با احتمال $1/14$ یا $16^2 = 256$ را با احتمال $3/14$ و همین طور الی آخر بدست آورید. پس میانگین برابر می شود با:

$$\langle j^2 \rangle = \sum_{j=0}^{\infty} j^2 P(j) \quad [۸.۱]$$

به طور کلی، مقدار میانگین تابعی از j با رابطه زیر بدست می آید

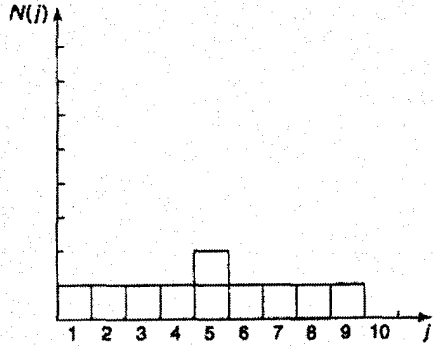
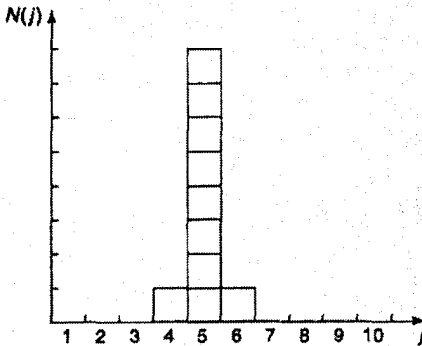
$$\langle f(j) \rangle = \sum_{j=0}^{\infty} f(j) P(j) \quad [۹.۱]$$

(روابطه ۶.۱، ۷.۱ و ۸.۱، اگر اینطور می پسندید، حالت های خاصی از این فرمول هستند.) مراقب باشید: میانگین مربعات، $\langle j^2 \rangle$ ، معمولاً برابر با مربع مقدار میانگین $\langle j \rangle^2$ نیست. برای نمونه، اگر اتاق تنها محتوی دو کودک در سنین ۱ و ۳ سال می بود در آن صورت داشتیم $\langle j^2 \rangle = 5$ در حالیکه $\langle j \rangle^2 = 4$ است.

باید توجه داشت که تفاوت آشکاری میان دو نمودار ستونی در شکل ۵.۱ وجود دارد، هر چند میانه، مقدار میانگین، محتمل ترین مقدار و تعداد عناصر هر دو یکی است: اولی حول مقدار میانگین بیشینه تندی دارد در حالیکه دومی حول میانگین تخت و صاف است. (نمودار اولی را می توان نمایانگر نمای سنی دانشجویان در کلاسی از یک کلان شهر و دومی را شاید نمایانگر دانش آموزان یک مدرسه روستایی تک کلاسی دانست.) ما به معیاری عددی از میزان «پخش» در توزیع حول مقدار میانگین نیاز داریم. بدیهی ترین راه برای انجام این کار این است که دریابیم هر فرد چقدر از مقدار میانگین منحرف است و آنگاه مقدار میانگین Δ را محاسبه

[۱۰.۱]

$$\Delta j = j - \langle j \rangle$$



شکل ۴.۱ دو نمودار ستونی با میانه، مقدار میانگین و محتمل‌ترین مقدار یکسان، اما انحراف معیارهای استاندارد متفاوت

البته مشکل اینجاست که مقدار صفر بدست می‌آید زیرا به خاطر ماهیت مقدار میانگین، Δj اغلب به همان میزان که منفی است مثبت هم هست:

$$\langle \Delta j \rangle = \sum (j - \langle j \rangle) P(j) = \sum j P(j) - \langle j \rangle \sum P(j) = \langle j \rangle - \langle j \rangle = 0$$

(دقت کنید که $\langle j \rangle$ ثابت است - این مقدار با حرکت شما از یک عضو به عضو دیگر تغییر نمی‌کند - بنابراین می‌توان آنرا از عملگر جمع خارج کرد). برای پرهیز از چنین مساله آزار دهنده‌ای، ممکن است بخواهید میانگین قدر مطلق Δj را بدست آورید. اما کار با قدر مطلق‌ها هم بیزار کننده است؛ در عوض، ما مشکل علامت را از طریق مربع کردن پیش از میانگین‌گیری دور می‌زنیم:

$$\sigma^2 \equiv \langle (\Delta j)^2 \rangle \quad [11.1]$$

کمیت فوق را واریانس (پراکندگی) این توزیع می‌نامند؛ خود σ (جذر میانگین مربع انحراف معیار از مقدار میانگین - اوه اوه چی شد!) را انحراف معیار استاندارد می‌نامند. این مورد آخری معیار مرسوم پخش حول $\langle j \rangle$ است.

فرمول کوچک اما سودمندی وجود دارد که مشتمل است بر انحراف معیارهای استاندارد:

$$\begin{aligned}
 \sigma^2 &= \sum (\Delta j)^2 P(j) = \sum (j - \langle j \rangle)^2 P(j) \\
 &= \sum (j^2 - 2j\langle j \rangle + \langle j \rangle^2) P(j) \\
 &= \sum j^2 P(j) - 2\langle j \rangle \sum j P(j) + \langle j \rangle^2 \sum P(j) \\
 &= \langle j^2 \rangle - 2\langle j \rangle \langle j \rangle + \langle j \rangle^2 = \langle j^2 \rangle - \langle j \rangle^2
 \end{aligned}$$

با گرفتن جذر مربعی، می‌توان خود انحراف معیار استاندارد را به این صورت نوشت

$$\sigma = \sqrt{\langle j^2 \rangle - \langle j \rangle^2} \quad [12.1]$$

در عمل، این روش سریعتر از بدست آوردن σ است: به آسانی $\langle j^2 \rangle$ و $\langle j \rangle^2$ را محاسبه کرده و جذر بگیرید. در ضمن، کمی قبل به شما اخطار کردم که در حالت کلی $\langle j^2 \rangle$ با $\langle j \rangle^2$ مساوی نیست. از آنجائیکه σ^2 آشکارا مقدار مثبتی است (از روی تعریفش در رابطه ۱۱.۱)، رابطه ۱۲.۱ حاکی از آن است که

$$\langle j^2 \rangle \geq \langle j \rangle^2 \quad [13.1]$$

و این دو مقدار زمانی با هم برابرند که داشته باشیم $\sigma = 0$ ، یعنی توزیع‌هایی داریم که به هیچ شکل پخش نیستند (اعضا مقادیر یکسانی دارند).

۲.۳.۱ متغیرهای پیوسته

تا اینجا فرض بر این بوده که سروکارمان با یک متغیر گسسته است - یعنی متغیری که تنها می‌تواند مقادیر مجزا از یکدیگر خاصی را بپذیرد (در این مثال، z باید عدد صحیح باشد زیرا سن‌ها را فقط بر حسب سال ارائه کردم). با این حال، تعمیم [مثال] به توزیع‌های پیوسته کار ساده‌ای است. اگر خانمی را به طور تصادفی در خیابان انتخاب کنم، احتمال آنکه سنش دقیقاً ۱۶ سال و ۴ روز و ۲۷ دقیقه و ۳۳۳۳/۳ ثانیه باشد صفر است. تنها مساله معقول در این میان سخن گفتن درباره احتمال آن است که سن فرد مذکور در یک بازه قرار داشته باشد - مثلاً بین ۱۶ و ۱۶ سال و یک روز. اگر بازه به اندازه کافی کوچک باشد، این احتمال با طول آن بازه متناسب می‌شود. مثلاً، شانس اینکه سن خانم انتخاب شده snap.sellfile.ir دو روز باشد به طور فرضی دو برابر

احتمال آن است که سنش بین ۱۶ و ۱۶ سال و یک روز باشد. (مگر آنکه فرض کنیم ۱۶ سال پیش دقیقاً در همان روزها یک دوره نسل‌زایی غیر عادی وجود داشته است - که در این حالت به وضوح بازه‌ای را انتخاب کرده‌ایم که طول آن برای به کار گرفتن در این قاعده بسیار بزرگ است. اگر آن دوره غیر عادی تولد نوزادان شش ساعت به طول انجامیده باشد، بازه‌های یک ثانیه‌ای یا کمتر از آن را فرض می‌کنیم تا [از دردسر] مصون باشیم. به بیان فنی، داریم درباره بازه‌های بسیار کوچک صحبت می‌کنیم.) در نتیجه

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{احتمال آنکه سن فرد} \\ \text{(که به طور تصادفی انتخاب شده)} \\ \text{بین } x \text{ و } (x + dx) \text{ باشد} \end{array} \right\} = \rho(x) dx \quad [14.1]$$

ضریب احتمال، $\rho(x)$ ، را اغلب به عبارت غیر دقیق «احتمال بدست آمدن x » می‌نامند، اما این بیان سرسری و ناشی‌گرانه است؛ عبارت بهتر چگالی احتمال است. احتمال آنکه x بین دو مقدار a و b قرار گیرد (یک بازه متناهی) از روی انتگرال $\rho(x)$ بدست می‌آید:

$$P_{ab} = \int_a^b \rho(x) dx \quad [15.1]$$

همچنین قواعدی که آنها را برای توزیع‌های گسسته استنتاج کردیم به طور بدیهی به این شکل تعبیر می‌شوند:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx = 1 \quad [16.1]$$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x \rho(x) dx \quad [17.1]$$

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \rho(x) dx \quad [18.1]$$

$$\sigma^2 \equiv \langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad [19.1]$$

مثال ۱.۱ فرض کنید قطعه سنگی را از بالای صخره‌ای به ارتفاع h به پائین می‌اندازم. همچنانکه سنگ سقوط می‌کند، یک میلیون عکس در بازه‌های کاتوره‌ای از آن می‌گیرم. روی هر عکس فاصله‌ای را که سنگ سقوط کرده اندازه‌گیری می‌کنم. سوال: میانگین همه این فواصل چقدر است؟ به عبارت دیگر، میانگین فاصله پیموده شده چقدر است؟^{۱۰}

پاسخ: تکه سنگ از حال سکون شروع کرده و همچنانکه سقوط می‌کند سرعتش زیاد می‌شود؛ در نزدیکی اوج زمان بیشتری صرف می‌کند، از اینرو میانگین فاصله باید کمتر از $h/2$ باشد. با صرفنظر کردن از مقاومت هوا، فاصله x در لحظه t برابر است با:

$$x = \frac{1}{2}gt^2$$

سرعت عبارت است از $dx/dt = gt$ و کل زمان سقوط هم $T = \sqrt{2h/g}$ است. احتمال آنکه دوربین در بازه زمانی dt عکسی بگیرد برابر است با dt/T ، بنابراین احتمال آنکه یک عکس مفروض فاصله‌ای در بازه متناظر dx را نشان دهد عبارت است از

$$\frac{dt}{T} = \frac{dx}{gt} \sqrt{\frac{g}{2h}} = \frac{1}{2\sqrt{hx}} dx$$

پیداست که چگالی احتمال (رابطه ۱۴.۱) برابر است با

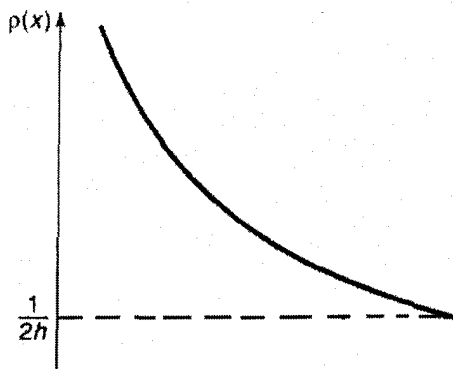
$$\rho(x) = \frac{1}{2\sqrt{hx}} \quad (0 \leq x \leq h)$$

(البته بیرون از بازه چگالی احتمال صفر است).

می‌توانیم درستی این نتیجه را با استفاده از رابطه ۱۶.۱ بیازمائیم:

$$\int_0^h \frac{1}{2\sqrt{hx}} dx = \frac{1}{2\sqrt{h}} (2x^{1/2}) \Big|_0^h = 1$$

^{۱۰} یک متخصص آمار اعتراض می‌کند که من دارم میانگین یک نمونه متناهی (یک میلیون، در اینحالت) را با میانگین «واقعی» (روی تمام پیوستار) اشتباه می‌کنم. این امر می‌تواند برای این آزمون‌گر مساله ناخوشایندی باشد، مخصوصاً وقتی اندازه نمونه کوچک باشد، اما راستش حواس من فقط بدنبال میانگین واقعی است، که با توجه به آن میانگین نمونه احتمالاً تقریب قابل قبولی است.

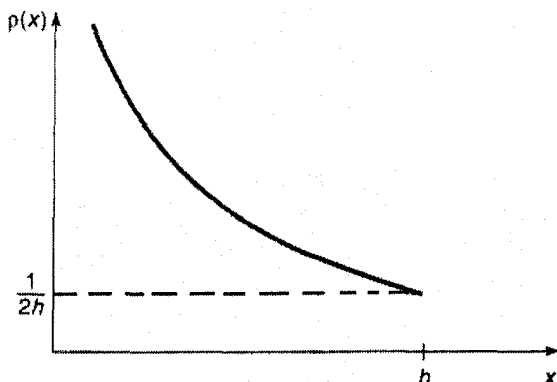


شکل ۵.۱ چگالی احتمالی در مثال ۱.۱: $\rho(x) = 1/(2\sqrt{hx})$

فاصله میانگین (رابطه ۱۷.۱) برابر است با:

$$\langle x \rangle = \int_0^h x \frac{1}{2\sqrt{hx}} dx = \frac{1}{2\sqrt{h}} \left(\frac{2}{3} x^{3/2} \right) \Big|_0^h = \frac{h}{3}$$

که برحسب انتظار، کمی کمتر از $h/2$ است.



شکل ۶.۱ نمودار $\rho(x)$ را نشان می‌دهد. توجه کنید که چگالی احتمال می‌تواند نامتناهی باشد، هرچند خود احتمال (انتگرال ρ) بی‌گمان باید متناهی باشد (قدر مسلم، کوچکتر یا مساوی ۱).

مساله ۱.۱* برای توزیع سنین در مثال بخش ۳.۱،

(الف) مقادیر $\langle j^2 \rangle$ و $\langle j \rangle^2$ را محاسبه کنید.

(ب) مقدار Δj را برای هر j تعیین کرده و از رابطه ۱۱.۱ برای محاسبه انحراف معیار استاندارد استفاده کنید.

(پ) از نتایج خود در قسمت‌های (الف) و (ب) برای بررسی معادله ۱۲.۱ استفاده کنید.

مساله ۲.۱

(الف) انحراف معیار استاندارد را در مثال ۱.۱ بدست آورید.

(ب) احتمال آنکه عکسی که به طور تصادفی انتخاب می‌شود، نشان دهنده فاصله x بیشتر از یک انحراف معیار آنطرف‌تر از میانگین باشد چقدر است؟

مساله ۳.۱* توزیع گاوسی را در نظر بگیرید

$$\rho(x) = Ae^{-\lambda(x-a)^2}$$

که در آن A ، a و λ مقادیر ثابت هستند. (در یک راهنمای ریاضی، هر انتگرالی را که نیاز دارید جستجو کنید).

(الف) با استفاده از رابطه ۱۶.۱ مقدار A را تعیین کنید.

(ب) مقادیر $\langle x \rangle$ ، $\langle x^2 \rangle$ و σ را بیابید.

(پ) نمودار $\rho(x)$ را رسم کنید.

۴.۱ بهنجارش

در این قسمت باز می‌گردیم به بحث تعبیر آماری تابع موج (رابطه ۳.۱) که می‌گویید عبارت $|\Psi(x, t)|^2$ چگالی احتمال یافتن ذره در نقطه x و لحظه t است. از اینجا به این نتیجه می‌رسیم که انتگرال $|\Psi|^2$ باید برابر با ۱ باشد (ذره باید یک جایی باشد):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$$

[۲۰.۱]

بدون این ویژگی، تعبیر آماری بی معنی خواهد بود.

با این وجود، بجاست اگر این بایستگی شما را به زحمت ببیندازد: هرچه باشد، فرض بر این است که تابع موج از طریق معادله شرودینگر تعیین می شود - نمی توانیم شرطی اضافی و نامربوط را بدون بررسی این مساله که آن دو با هم سازگار باشند به Ψ تحمیل کنیم. نگاهی سطحی به معادله ۱.۱ نشان می دهد که اگر $\Psi(x, t)$ یک پاسخ [معادله شرودینگر] باشد، در آن صورت عبارت $A\Psi(x, t)$ هم می تواند پاسخ باشد که در آن A می تواند هر ثابت (مختلط) دلخواهی باشد. پس کاری که باید انجام دهیم این است که این مضرب نامعین را طوری انتخاب کنیم تا اطمینان حاصل شود که رابطه ۲۰.۱ برقرار است. این فرایند را «بهنجار کردن» تابع موج می نامند. برای برخی از پاسخ های معادله شرودینگر، انتگرال بی نهایت می شود؛ در آن صورت هیچ مضرب عددی وجود نخواهد داشت که آنرا 1 کند. همین حالت برای پاسخ $\Psi = 0$ هم وجود دارد. چنین پاسخ های بهنجار نشدنی نمی توانند نمایانگر ذرات باشند و باید از آنها صرف نظر کرد. حالت هایی که از نظر فیزیکی واقعی بوده و حصول پذیرند با پاسخ های انتگرال پذیر مجزوری معادله شرودینگر مطابقت دارند.^{۱۱}

اما یک دقیقه صبر کنید! فرض کنید تابع موج را در لحظه $t = 0$ بهنجار کرده باشیم. از کجا بدانم تابع موج با گذشت زمان و متحول شدن Ψ همین طور بهنجار خواهد ماند؟ (نمی توانید که مدام و بی وقفه عمل بهنجارش را انجام دهید چون در آن صورت A تابعی از t می شود و دیگر یک جواب مشخص برای معادله شرودینگر ندارید.) خوشبختانه، معادله شرودینگر خصوصیتی دارد که به طور خودکار از بهنجارش تابع موج محافظت می کند - بدون این ویژگی با اهمیت، معادله شرودینگر سازگاری خود با تعبیر آماری را از دست خواهد داد و کل نظریه فرو می پاشد.

این مساله حائز اهمیتی است، پس بهتر است برای بدست آوردن یک اثبات دقیق قدری درنگ

کنیم. ابتدا داریم:

^{۱۱} چنین پیدا است که تابع $\Psi(x, t)$ وقتی $|x| \rightarrow 0$ میل می کند باید سریعتر از تابع $\frac{1}{\sqrt{|x|}}$ به سمت صفر برود. در ضمن، بهنجارش تنها مَدول (ضریب) A را ثابت می کند؛ فاز نامعلوم باقی می ماند. با این حال، همانطور که در ادامه خواهیم دید، فاز اصلا واجد هیچ اهمیت فیزیکی نیست.

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(x, t)|^2 dx \quad [۲۱.۱]$$

(توجه داشته باشید که انتگرال تنها تابعی از t است، به همین خاطر من در عبارت اول از یک مشتق کلی (d/dt) استفاده می‌کنم. اما انتگرال هم تابعی برحسب x است، بنابراین در عبارت دوم مشتق جزئی ($\partial/\partial t$) ظاهر می‌شود.) از قانون ضرب داریم:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) = \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi \quad [۲۲.۱]$$

حالا معادله شرودینگر می‌گوید:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} V \Psi \quad [۲۳.۱]$$

و در نتیجه (با گرفتن مزدوج مختلط از رابطه ۲۳.۱)

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar} V \Psi^* \quad [۲۴.۱]$$

پس

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \Psi \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \right] \quad [۲۵.۱]$$

اکنون می‌توان انتگرال (رابطه ۲۱.۱) را آشکارا عددیابی کرد:

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \Big|_{-\infty}^{+\infty} \quad [۲۶.۱]$$

اما $\Psi(x, t)$ باید به ازای میل کردن x به سمت $\pm\infty$ به سمت صفر میل کند - در غیر اینصورت تابع موج قابل بهنجارش نخواهد بود.^{۱۲} از آنجا نتیجه می‌شود که

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 0 \quad [۲۷.۱]$$

^{۱۲} یک ریاضیدان ماهر می‌تواند مثال‌های نقض متعددی در اختیار تان بگذارد، اما آن مثال‌ها در فیزیک مصداق ندارند؛

و لذا انتگرال در سمت چپ یک ثابت عددی است (مستقل از زمان)، چنانچه Ψ در لحظه $t = 0$ بهنجار باشد، برای تمام زمان‌های بعدی هم بهنجار شده باقی می‌ماند.

مسئله ۴.۱ در لحظه $t = 0$ ذره‌ای با تابع موج زیر نمایش داده می‌شود:

$$\Psi(x, 0) = \begin{cases} A \frac{x}{a}, & 0 \leq x \leq a \text{ اگر} \\ A \frac{(b-x)}{(b-a)}, & a \leq x \leq b \text{ اگر} \\ 0, & \text{در غیر اینصورت} \end{cases}$$

که در آن A ، b و a ثابت هستند.

(الف) Ψ را بهنجار کنید (یعنی A را بر حسب a و b بدست آورید).

(ب) نمودار $\Psi(x, 0)$ را بر حسب تابعی از x رسم کنید.

(پ) در لحظه $t = 0$ محتمل‌ترین نقطه‌ای که ذره ممکن است در آن یافت شود کجاست؟

(ت) احتمال یافتن ذره در سمت چپ a چقدر است؟ نتیجه خود را در حالت‌های حدی $a = b$

و $b = 2a$ بررسی کنید.

(ث) مقدار چشمداشتی x چقدر است؟

مسئله ۵.۱* تابع موج زیر را در نظر بگیرید:

$$\Psi(x, t) = A e^{-\lambda|x|} e^{-i\omega t}$$

که در آن A ، λ و ω اعداد ثابتی هستند. (در فصل دوم خواهیم دید که چه پتانسیلی (V) در حقیقت چنین تابعی را تولید می‌کند).

(الف) Ψ را بهنجار کنید.

(ب) مقادیر چشمداشتی x و x^2 را تعیین کنید.

(پ) انحراف معیار استاندارد x را بدست آورید. نمودار $|\Psi|^2$ را بر حسب تابعی از x رسم کرده

و نقاط $(\langle x \rangle + \sigma)$ و $(\langle x \rangle - \sigma)$ را روی آن علامتگذاری کنید تا آن جهتی نشان داده شود که

در آن σ نمایانگر «پخش شدگی» در x است. احتمال آنکه ذره در بیرون این بازه یافت شود

چقدر است؟

برای ذره‌ای در حالت Ψ ، مقدار چشمداشتی x برابر است با

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\Psi(x, t)|^2 dx \quad [28.1]$$

معنی این رابطه دقیقاً چیست؟ قطعاً به این معنی نیست که اگر مکان ذره‌ای را بارها اندازه بگیرید، $\int x |\Psi|^2 dx$ مقدار میانگین نتایجی است که بدست خواهید آورد. برعکس، نخستین اندازه‌گیری (که خروجی آن نامعلوم است) باعث فروافت تابع موج روی نقطه‌ای می‌شود که مقدار آن بدست آمده و اندازه‌گیریهای بعدی (اگر سریعاً انجام شوند) به سادگی همان نتیجه را تکرار می‌کنند. به بیان دقیق، $\langle x \rangle$ میانگین اندازه‌گیریهای انجام شده روی ذرات در تمام حالت‌های Ψ است، به این معنی که یا باید راهی برای بازگرداندن ذره به حالت اولیه‌اش پس از اندازه‌گیری پیدا کنید یا در غیر اینصورت مجموعه آماری کاملی از ذرات که هر کدام در حالت یکسان Ψ قرار دارد فراهم کرده و مکان تمام آنها را اندازه بگیرید: $\langle x \rangle$ میانگین این نتایج است. (این توصیف را به ردیفی از بطری‌ها روی یک تاقچه تشبیه می‌کنم که هر کدام محتوی ذره‌ای در حالت Ψ است (به نسبت مرکز بطری). برای هر بطری یک دانشجوی تحصیلات تکمیلی با یک خط‌کش گماشته می‌شود و با یک علامت آنها همگی مکان‌های ذرات مربوط به خود را اندازه می‌گیرند. سپس نموداری ستونی از نتایج درست می‌کنیم که باید با $|\Psi|^2$ همخوانی داشته باشد و میانگین را هم محاسبه می‌کنیم که آن هم باید با $\langle x \rangle$ تطبیق کند. (البته، از آن رو که از یک نمونه متناهی استفاده می‌کنیم نمی‌توانیم انتظار تطابق کامل داشته باشیم اما هرچه تعداد بطری‌ها را بیشتر کنیم به آنچه باید بدست آوریم بیشتر نزدیک می‌شویم). خلاصه آنکه، مقدار چشمداشتی برابر است با میانگین اندازه‌گیری‌های انجام شده روی مجموعه‌ای آماری از سامانه‌های تدارک دیده شده یکسان، نه میانگین اندازه‌گیری‌های تکراری روی همان یک سامانه یکسان.

اکنون، با گذشت زمان، $\langle x \rangle$ تغییر می‌کند (به دلیل وابستگی Ψ به زمان) و شاید بخواهیم بدانیم [این تغییر] با چه سرعتی انجام می‌شود. بازگردید به روابط ۲۵.۱ و ۲۸.۱، می‌بینیم که:^{۱۳}

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \int x \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 dx = \frac{i\hbar}{2m} \int x \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx \quad [29.1]$$

این عبارت را می‌توان با استفاده از انتگرال‌گیری جزء به جزء ساده‌تر کرد^{۱۴}:

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = -\frac{i\hbar}{2m} \int \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx \quad [30.1]$$

(از این نکته استفاده کردم که $\partial x / \partial x = 1$ است، حدود انتگرال را برداشتم و در حالت پایه هم Ψ در $\pm\infty$ صفر می‌شود). با انجام یک انتگرال‌گیری جزء به جزء دیگر روی عبارت دوم، نتیجه می‌گیریم که:

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = -\frac{i\hbar}{m} \int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx \quad [31.1]$$

این نتیجه به چه دردمان می‌خورد؟ توجه کنید داریم درباره «سرعت» مقدار چشمداشتی x صحبت می‌کنیم، که با سرعت ذره فرق می‌کند. هیچیک از آنچه تاکنون مشاهده کرده‌ایم ما را قادر نمی‌سازد تا سرعت ذره را محاسبه کنیم - حتی معنای سرعت ذره در مکانیک کوانتومی هنوز روشن نیست: اگر ذره مکان مشخصی نداشته باشد (پیش از اندازه‌گیری)، پس سرعت معلومی هم ندارد. به طور منطقی همه آنچه می‌توانیم طلب کنیم احتمال بدست آمدن یک مقدار بخصوص است. در فصل بعد خواهیم دید که چگونه با داشتن یک Ψ مشخص، برای سرعت چگالی احتمال

^{۱۳} برای آنکه از ریخت و پاش زیادی جلوگیری کنم، حدود انتگرال را برمی‌دارم.

^{۱۴} قاعده ضرب می‌گوید که

$$\frac{d}{dx}(fg) = f \frac{dg}{dx} + \frac{df}{dx} g$$

از آن رابطه زیر بدست می‌آید

$$\int_a^b f \frac{dg}{dx} dx = - \int_a^b \frac{df}{dx} g dx + fg \Big|_a^b$$

در اینصورت، می‌توانید یک مشتق را از انتگرال بیرون آورده و آنرا به طرف دیگر تساوی منتقل کنید - این برایتان به اندازه یک علامت منفی خرج برداشته و یک عبارت حدگذاری هم به رابطه اضافه می‌کند.

بسازیم؛ برای مقاصد فعلی کافی است این نکته را مبنا قرار دهیم که مقدار چشمداشتی سرعت مساوی است با مشتق زمانی مقدار چشمداشتی مکان:

$$\langle v \rangle = \frac{d\langle x \rangle}{dt} \quad [32.1]$$

پس، رابطه ۳۱.۱ می‌گوید چطور $\langle v \rangle$ را مستقیماً از روی Ψ بدست آوریم.

در عمل، کار کردن با تکانه به جای سرعت متداول‌تر است:

$$\langle p \rangle = m \frac{d\langle x \rangle}{dt} = -i\hbar \int \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) dx \quad [33.1]$$

بگذارید این عبارت را به شکلی الهام برانگیزتر برای $\langle x \rangle$ و $\langle p \rangle$ بنویسم

$$\langle x \rangle = \int \Psi^*(x) x \Psi dx \quad [34.1]$$

$$\langle p \rangle = \int \Psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi dx \quad [35.1]$$

در مکانیک کوانتومی، می‌گوئیم عملگر^{۱۵} x «نشان دهنده» مکان و عملگر $(\hbar/i)(\partial/\partial x)$ «نشان دهنده» تکانه است؛ برای محاسبه مقدار چشمداشتی، عملگر مناسب را مابین Ψ^* و Ψ «ساندویچ» می‌کنیم و از آن انتگرال می‌گیریم.

قشنگ است، اما تکلیف بقیه متغیرهای دینامیکی چه می‌شود؟ حقیقت امر این است که تمام این قبیل کمیت‌ها را می‌توان بر حسب مکان و تکانه نوشت. مثلاً انرژی جنبشی به این شکل است:

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$$

^{۱۵} «عملگر» دستورالعملی است برای انجام کاری روی تابعی که در ادامه آن می‌آید. عملگر مکان به شما می‌گوید در x ضرب کن؛ عملگر تکانه به شما می‌گوید نسبت به x مشتق بگیر (و نتیجه را در $-i\hbar$ ضرب کن). در این کتاب تمام عملگرها یا به صورت مشتق (d/dt) ، d^2/dt^2 ، $\partial/\partial x$ ، $\partial^2/\partial x^2$ یا به صورت ضرب در x ، x^2 و یا ترکیبی از هر دو هستند.

و تکانه زاویه‌ای را هم به این شکل می‌نویسیم:

$$L = r \times mv = r \times p$$

(البته، رابطه دوم برای حرکت در یک بعد به کار نمی‌آید). برای محاسبه مقدار چشمداشتی هر کمیتی از این دست، $Q(x, p)$ ، به آسانی هر p را با عبارت $(\hbar/i)(\partial/\partial x)$ عوض کرده، عملگر حاصل را مابین Ψ^* و Ψ قرار داده و در نهایت انتگرال می‌گیریم:

$$\langle Q(x, p) \rangle = \int \Psi^* Q\left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi dx \quad [36.1]$$

به عنوان نمونه، مقدار چشمداشتی انرژی جنبشی عبارت است از

$$\langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} dx \quad [37.1]$$

رابطه ۳۶.۱ راهنمایی برای محاسبه مقدار چشمداشتی هر کمیت دینامیکی ذره‌ای است که در حالت Ψ قرار دارد؛ این رابطه، دو رابطه ۳۴.۱ و ۳۵.۱ را به عنوان حالت‌های خاص در خود می‌گنجاند. در این بخش تلاش کردم تا رابطه ۳۶.۱ موجه به نظر بیاید و به همین خاطر تعبیر آماری بور را هم ارائه کردم، راستش را بخواهید این رابطه نمایانگر چنان روش اساسا جدیدی برای انجام این کار است (در مقایسه با مکانیک کلاسیک) که انجام چند تمرین پیش از آنکه (در فصل ۳) مجدداً به آن بازگردیم و آنرا بر بنیاد نظری مستحکم‌تری قرار دهیم، ایده نیکویی است. در این فاصله، اگر ترجیح می‌دهید آنرا یک اصل موضوعه بدانید، من مخالفتی ندارم.

مساله ۶.۱ چرا نمی‌توانید انتگرال‌گیری جزء به جزء را مستقیماً روی عبارت میانی در رابطه ۲۹.۱ انجام دهید - مشتق زمانی را بکشید داخل x ، توجه داشته باشید که $\partial x / \partial t = 0$ و نتیجه بگیرید که $d\langle x \rangle / dt = 0$ ؟

مساله ۷.۱ * $d\langle p \rangle / dt$ را محاسبه کنید. پاسخ:

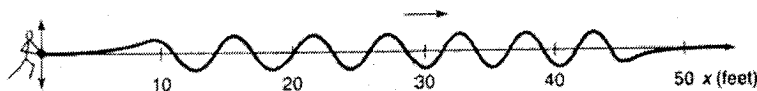
$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle \quad [۳۸.۱]$$

(این رابطه به قضیه اهرنرفست معروف است؛ این قضیه می گوید مقادیر چشمداشتی از قانون دوم نیوتن پیروی می کند).

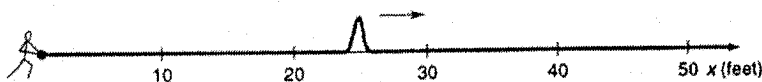
مساله ۸.۱ فرض کنید ثابت V_0 را به انرژی پتانسیل اضافه می کنید (منظورم از «ثابت» این است که آن عبارت مستقل از x و t است). در مکانیک کلاسیک این کار چیزی را تغییر نمی دهد، اما در مکانیک کوانتومی چطور؟ نشان دهید تابع موج به اندازه یک عامل فاز وابسته به زمان بالا می رود: $\exp(-iV_0 t/\hbar)$. این تغییر چه اثری روی مقدار چشمداشتی یک متغیر دینامیکی می گذارد؟

۶.۱ اصل عدم قطعیت

فرض کنید یک انتهای طناب بسیار بلندی را در دست گرفته اید و با بالا و پائین کردن هماهنگ آن موجی را روی طناب بوجود می آورید (شکل ۷.۱). اگر کسی از شما می پرسید «موج دقیقا کجاست؟» احتمالا با خودتان می گفتید که شاید وی کمی خل وضع و کم عقل بوده: موج دقیقا هیچ جا نیست - موج در یک فاصله ۵۰ پایی یا هر مقدار دیگر پخش می شود. به عبارت دیگر، اگر از شما می پرسید طول موج آن چقدر است، آنوقت می توانستید جواب معقولی به او بدهید: به نظر حدودا ۶ پا است. از سوی دیگر، اگر ناگهان طناب را به تندی بکشید (شکل ۸.۱)، یک دست انداز نسبتا باریک بوجود می آید که در طول طناب حرکت می کند. این بار سوال نخست (که موج دقیقا کجاست؟) سوال معقولی می شود و سوال دوم (طول موج آن چقدر است؟) به نظر نامعقول می آید - حتی به طور مبهم و نامشخص هم دوره تناوب و تکرار ندارد، پس چطور می توانید به آن طول موجی اختصاص دهید؟



شکل ۷.۱ موجی با یک طول موج (نسبتاً) معلوم اما مکان نامعلوم.



شکل ۸.۱ موجی با مکان (نسبتاً) معلوم اما طول موج نامعلوم.

البته، می‌توانید حالت‌های میانی را هم به حساب آورده و آشکار کنید که در آنها موج تا اندازه‌ای در یک جا متمرکز بوده و طول موج هم تقریباً معلوم است، اما تبادلی گریز ناپذیر در این بین وجود دارد: هرچه مکان موج با دقت بیشتری معلوم شود، طول موجش دقت کمتری داشته و برعکس.^{۱۶} قضیه‌ای در آنالیز فوریه این مساله را موشکافانه‌تر بررسی می‌کند، اما فعلاً فقط متوجه استدلال کیفی نهفته در پس این مثال هستم.

طبیعتاً این استدلال برای تمام پدیده‌های موجی به کار می‌رود و در نتیجه بخصوص در مورد تابع موج در مکانیک کوانتومی هم مصداق دارد. پس حالا طول موج Ψ را با استفاده از رابطه دوبروی به تکانه ذره مرتبط می‌کنم:^{۱۷}

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \quad [39.1]$$

^{۱۶} به همین خاطر است که نوازنده پیکولو (نوعی فلوت با صدای خیلی ملایم - م) باید روی گام درست باشد، چون نوازنده کترباس می‌تواند بدون هیچ مشکلی دستکش‌های باغبانی دستش کند. در مورد پیکولو، نت شصت و چهارم محتوی گاه‌های کامل بوده و فرکانس (حالا در حوزه زمانی به جای مکانی کار می‌کنیم) هم به خوبی معلوم است، در حالیکه در مورد باس، در یک دانگ بسیار پائین‌تر، نت شصت و چهارم محتوی تنها یک گاه (تناوب یا دوره) است و تمام آنچه می‌شنوید شکلی کلی از «اومف» بدون گام بسیار واضح است.

^{۱۷} در ادامه کار این رابطه را اثبات خواهم کرد. بسیاری از نویسندگان رابطه دوبروی را یک اصل موضوعه می‌گیرند که بعد بتوانند با استفاده از آن رابطه تکانه با عملگر $(\hbar/i)(\partial/\partial x)$ را نتیجه‌گیری کنند. اگرچه این رهیافتی است که از نظر مفهومی درستتر است، اما مستلزم پیچیدگیهای ریاضیاتی سردرگم‌کننده‌ای هم هست که ترجیح می‌دهم آنها را برای بعد نگاه دارم.

به این ترتیب پخش شدگی طول موج مطابق است با گسترده شدن تکانه و مشاهده کلی مان هم در حال حاضر می‌گوید هر چه مکان یک ذره با دقت بیشتری تعیین شود، تکانه با دقت کمتری معلوم می‌شود. با ترکیب روابط داریم:

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2} \quad [۴.۱]$$

که در آن σ_x انحراف معیار استاندارد x و σ_p انحراف معیار استاندارد p است. این همان اصل عدم قطعیت مشهور هایزنبرگ است. (این رابطه را در فصل ۳ اثبات خواهیم کرد، اما خواستیم در این بخش به آن اشاره‌ای کرده باشیم تا بتوانید آنرا روی مسائل فصل ۲ امتحان کنید).

خواهش می‌کنم درک کنید اصل عدم قطعیت به چه معنی است: مانند اندازه‌گیری‌های مکان، اندازه‌گیری‌های تکانه هم پاسخ‌های دقیقی بدست می‌دهند - «پخش شدگی» در اینجا به این حقیقت اشاره می‌کند که اندازه‌گیری‌های انجام شده روی سامانه‌های یکسان نتایج همخوانی به بار نمی‌آورد. اگر بخواهید می‌توانید سامانه‌ای را طوری درست کنید که اندازه‌گیری‌های پشت سر هم مکان بسیار به هم نزدیک باشند (با متمرکز کردن Ψ حول یک «نقطه تیز») اما باید هزینه‌ای هم بپردازید: اندازه‌گیری‌های تکانه روی این حالت بسیار پراکنده خواهند بود. یا می‌توانید سامانه‌ای با تکانه قابل تکرار تدارک ببینید (باید Ψ را به صورت یک موج سینوسی بلند درست کنید) اما در این حالت اندازه‌گیری‌های مکان به شدت پراکنده خواهند شد. و البته اگر حوصله ندارید می‌توانید سامانه‌ای درست کنید که در آن نه مکان و نه تکانه معلوم باشد: رابطه ۴.۱ یک نامساوی است و هیچ حدی هم برای میزان بزرگی σ_p و σ_x وجود ندارد - همین بس که Ψ را به صورت خط پر پیچ و خمی درست کنید که تعداد زیادی برآمدگی و فرورفتگی داشته و هیچ ساختار تناوبی منظمی هم نداشته باشد.

مساله ۹.۱* ذره‌ای به جرم m در حالت زیر قرار دارد

$$\Psi(x, t) = Ae^{-a[(mx^2/\hbar) + it]}$$

که در آن a و A مقادیر ثابت و حقیقی هستند.

(الف) A را بدست آورید.

(ب) برای چه تابع انرژی پتانسیلی، $V(x)$ ، تابع موج Ψ در معادله شرودینگر صدق می‌کند؟

(پ) مقدار چشمداشتی x ، x^2 ، p و p^2 را محاسبه کنید.

(ت) σ_x و σ_p را بیابید. آیا حاصل ضربشان با اصل عدم قطعیت همخوانی دارد؟

مسائل دیگری برای فصل ۱

مساله ۱۰.۱ اولین ۲۵ رقم در بسط دهدهی عدد π را در نظر بگیرید (... ۹، ۵، ۱، ۴، ۱، ۳).

(الف) اگر عددی از این مجموعه را به طور تصادفی انتخاب کنید، احتمال‌های بدست آمدن هر

۱۰ رقم چقدر است؟

(ب) محتمل‌ترین رقم کدام است؟ رقم میانه چیست؟ مقدار میانگین چقدر است؟

(پ) انحراف معیار را برای این توزیع بدست آورید.

مساله ۱۱.۱ سوزن سرعت‌سنج شکسته یک ماشین آزادانه حرکت می‌کند و دقیقاً از بین‌های دو

انتهای محل اتصال خود وامي جهد به گونه‌ای که اگر ضربه‌ای به آن بزنید با احتمال مساوی

ممکن است روی هر زاویه‌ای بین صفر تا π بایستد.

(الف) چگالی احتمال $\rho(\theta)$ چقدر است؟ راهنمایی: $\rho(\theta)d\theta$ احتمال آن است که سوزن روی

زاویه‌ای بین θ و $(\theta + d\theta)$ بایستد. نمودار $\rho(\theta)$ را به صورت تابعی از θ بین $-\pi/2$ و

$3\pi/2$ رسم کنید. (البته، بخشی از این بازه مستثنی است زیرا ρ در آن ناحیه صفر است.

(ب) مقادیر $\langle \theta \rangle$ و $\langle \theta^2 \rangle$ را محاسبه کنید.

(پ) مقادیر $\langle \sin \theta \rangle$ ، $\langle \cos \theta \rangle$ و $\langle \cos^2 \theta \rangle$ را محاسبه کنید.

مساله ۱۲.۱ دستگاهی مانند مساله قبل را در نظر می‌گیریم، اما اینبار توجه‌مان روی مختصه x

نوک سوزن است - یعنی «سایه» یا تصویر سوزن روی خط افقی.

(الف) چگالی احتمال $\rho(x)$ چقدر است؟ نمودار $\rho(x)$ را به صورت تابعی از x در بازه $-2r$ تا

$+2r$ رسم کنید که در آن r طول سوزن است. اطمینان حاصل کنید که جمع کل احتمالات ۱

باشد. راهنمایی: $\rho(x)dx$ احتمال آن است که تصویر بین x و $(x + dx)$ بیفتد. (از مساله ۱۱.۱) احتمال آنکه θ در بازه مشخصی قرار داشته باشد را می‌دانید؛ سوال اینجاست که کدام بازه dx مطابق با بازه $d\theta$ است؟

(ب) مقادیر $\langle x \rangle$ ، $\langle x^2 \rangle$ و σ را برای این توزیع محاسبه کنید. توضیح دهید چگونه می‌توانید این نتایج را از بخش (پ) مساله ۱۱.۱ بدست آورید.

مساله ۱۳.۱** سوزن بافون. سوزنی به طول l به طور تصادفی روی یک ورقه کاغذ می‌افتد که با خطوط موازی به فاصله l خط‌کشی شده است. احتمال آنکه سوزن خطی را قطع کند چقدر است؟ راهنمایی: به مساله ۱۲.۱ باز گردید.

مساله ۱۴.۱ $P_{ab}(t)$ را احتمال یافتن ذره در بازه $a < x < b$ در لحظه t بگیرید. (الف) نشان دهید

$$\frac{dP_{ab}}{dt} = J(a, t) - J(b, t)$$

که در آن

$$J(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)$$

واحدهای $J(x, t)$ چه هستند؟ توضیح: J را جریان احتمال می‌نامند زیرا بیانگر آهنگی است که تحت آن احتمال در حال جریان در ورای نقطه x است. اگر $P_{ab}(t)$ افزایش یابد آنگاه احتمال بیشتر از آنکه از یک انتها به بیرون جریان یابد، به سمت محدوده آن انتهای دیگر روان می‌شود. (ب) جریان احتمال تابع موج در مساله قبل را بدست آورید. (متأسفانه این مثال چندان با معنی نیست؛ در ادامه با نمونه‌های با اهمیت‌تری برخورد خواهیم کرد).

مساله ۱۵.۱** فرض کنید می‌خواهید ذره ناپایداری را توصیف کنید که به طور خود به خود با «طول عمر» τ دچار واپاشی می‌شود. در این حالت، جمع احتمال یافتن ذره در یک مکان نباید ثابت باشد بلکه باید (مثلاً) با آهنگ نمایی کاهش یابد:

$$P(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx$$

یک روش ابتدایی برای دستیابی به این نتیجه به این ترتیب است. در رابطه ۲۴.۱ به طور ضمنی فرض کردیم V (انرژی پتانسیل) حقیقی است. این فرض کاملاً منطقی است اما ما را به سمت «پایستگی احتمال» می‌برد که در رابطه ۲۷.۱ از آن تجلیل کردیم. حالا چه می‌شود اگر به V یک بخش موهومی هم اضافه کنیم:

$$V = V_0 - i\Gamma$$

که در آن V_0 انرژی پتانسیل حقیقی و Γ هم یک ثابت عددی است؟

(الف) نشان دهید (به جای رابطه ۲۷.۱) حالا رابطه زیر را داریم

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{2\Gamma}{\hbar}P$$

(ب) پاسخ $P(t)$ را بدست آورده و طول عمر ذره را بر حسب Γ بیابید.

مساله ۱۶.۱ نشان دهید رابطه زیر برای هر دو پاسخ (قابل بهنجارش) معادله شرودینگر، Ψ_1 و Ψ_2 ، برقرار است.

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^* \Psi_2 dx = 0$$

مساله ۱۷.۱ ذره‌ای (در لحظه $t = 0$) با تابع موج زیر نمایش داده می‌شود

$$\Psi(x, 0) = \begin{cases} A(a^2 - x^2), & a \leq x \leq +a \\ 0, & \text{در غیر اینصورت} \end{cases}$$

(الف) ثابت بهنجارش A را تعیین کنید.

(ب) مقدار چشمداشتی x (در لحظه $t = 0$) چقدر است؟

(پ) مقدار چشمداشتی p (در لحظه $t = 0$) چقدر است؟ توجه داشته باشید که نمی‌توانید این

مقدار را از رابطه $p = m dx/dt$ بدست آورید؟ چرا؟

(ت) مقدار چشمداشتی x^2 را بدست آورید.

(ث) مقدار چشمداشتی p^2 را بدست آورید.

(ج) عدم قطعیت در $\sigma_x(x)$ را بدست آورید.

(چ) عدم قطعیت در $\sigma_p(p)$ را بدست آورید.

(ج) اطمینان حاصل کنید که یافته‌های شما با اصل عدم قطعیت سازگارند.

مساله ۱۸.۱ به طور کلی، مکانیک کوانتومی زمانی وارد است که طول موج دوپروی ذره در مساله (h/p) بزرگتر از اندازه مشخصه سامانه (d) باشد. در تعادل گرمایی در دمای T (کلوین)، انرژی جنبشی میانگین عبارت است از:

$$\frac{p^2}{2m} = \frac{3}{2} k_B T$$

(که در آن k_B ثابت بولتزمن است)، از اینرو طول موج دوپروی نوعی عبارت است از:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{3mk_B T}} \quad [41.1]$$

هدف از این مساله پیش‌بینی آن است که کدام سامانه‌ها را باید با رویکرد مکانیک کوانتومی مورد بررسی قرار داده و کدام سامانه‌ها را می‌توان بدون هیچ مشکلی به صورت کلاسیکی توصیف کرد.

(الف) جامدات. فاصله شبکه‌ای در یک جامد نوعی حدوداً $d = 0.3 \text{ nm}$ است. دمایی را بدست آورید که زیر آن الکترون‌های آزاد^{۱۸} در یک جامد مکانیک کوانتومی هستند. زیر چه دمایی هسته‌ها در یک جامد مکانیک کوانتومی هستند؟ (از سدیم به عنوان یک مورد نوعی استفاده کنید).

نتیجه: الکترون‌های آزاد در یک جامد همیشه مکانیک کوانتومی هستند؛ هسته‌ها اغلب هیچ‌وقت مکانیک کوانتومی نیستند. همین مساله در مورد مایعات هم صادق است (که برای آنها فاصله میان اتمی به طور کلی یکسان است)، به استثنای هلیوم زیر 4 K .

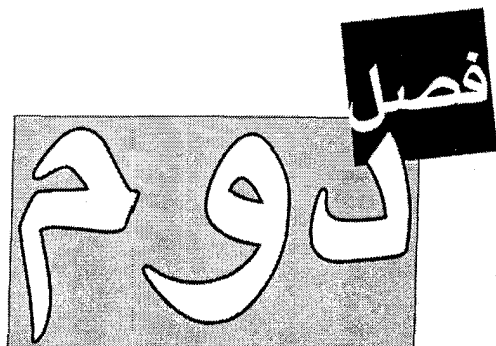
(ب) گازها به ازای چه دمایی اتم‌های یک گاز ایده‌آل در فشار P مکانیک کوانتومی هستند؟ راهنمایی: از قانون گاز ایده‌آل $(PV = Nk_B T)$ برای نتیجه‌گیری فاصله میان اتمی استفاده کنید.

^{۱۸} در یک جامد الکترون‌های داخلی به هسته بخصوصی متصل‌اند، برای همین اندازه مطرح برای آنها باید در حد شعاع اتم باشد. اما الکترون‌های بیرونی متصل نیستند به همین خاطر فاصله مطرح برای آنها فاصله شبکه‌ای است. این مساله راجع به الکترون‌های بیرونی است.

پاسخ:

$$T < (1/k_B)(h^2/3m)^{3/5}P^{2/5}$$

آشکارا (برای آنکه رفتار کوانتومی یک گاز را نشان دهیم) می‌خواهیم m تا حد امکان کوچک بوده و P به همان نسبت بزرگ باشد. اعداد مربوط به هلیوم در فشار اتمسفر را به کار ببرید. آیا هیدروژن در فضای خارج از جو (جائیکه در آن فاصله میان اتمی حدود 1 cm و دما حدود 3 K است) مکانیک کوانتومی است؟ (فرض کنید هیدروژن تک اتمی است نه H_2)



معادله شرودینگر مستقل از زمان

۱.۲ حالت‌های مانا

در فصل ۱ مقدار زیادی راجع به تابع موج و اینکه چگونه از آن برای محاسبه کمیت‌های مورد نظرمان استفاده کنیم صحبت کردیم. حالا زمان آن رسیده تا تعلق را کنار گذارده و به طور منطقی با سوال اصلی مان رو در رو شویم: در گام نخست چگونه تابع $\Psi(x, t)$ را بدست می‌آورید؟

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi \quad [۱.۲]$$

باید معادله شرودینگر را برای یک پتانسیل^۱ $V(x, t)$ حل کنیم. در این فصل (و اکثر قسمت‌های این کتاب) فرض من بر این است که V مستقل از t است. در آن حالت، معادله شرودینگر را می‌توان با روش تفکیک متغیرها (خط مقدم حمله فیزیكدانها به هر معادله دیفرانسیل) حل کرد: به دنبال راه حل‌هایی می‌گردیم که به صورت حاصلضرب‌های ساده باشند

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \varphi(t) \quad [۲.۲]$$

که در آن ψ (با حرف کوچک) تنها تابعی از x و φ هم فقط تابعی از t است. این راه حل در ظاهر قید و بندی نامعقول است و نمی‌توانیم نسبت به بدست آوردن چیزی بیشتر از یک زیر مجموعه کوچک از تمام پاسخ‌ها از این طریق امیدوار باشیم. اما دست نکشید چون راه حل‌هایی که بدست می‌آوریم بسیار جالب خواهند بود. از این گذشته، ویژگی تفکیک متغیرها نوعاً به گونه‌ایست که در انتها قادر خواهیم بود پاسخ‌های تفکیک شده را به طریقی به هم وصل کنیم تا عمومی‌ترین پاسخ بدست آید. در مورد پاسخ‌های تفکیک‌پذیر داریم:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \psi \frac{d\varphi}{dt} \qquad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{d^2 \psi}{dx^2} \varphi$$

(مشتقات معمولی)، به علاوه رابطه شرودینگر هم به این شکل درمی‌آید:

$$i\hbar \psi \frac{d\varphi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} \varphi + V\psi \varphi$$

^۱ اینکه مدام بگویم «تابع انرژی پتانسیل» اصلاً خوشایند نیست، به همین خاطر اکثر افراد فقط آنرا V «پتانسیل» می‌خوانند، هر چند این کار سبب اشتباه گرفتن گاه و بی گاه آن با پتانسیل الکتریکی می‌شود که در حقیقت انرژی پتانسیل به ازای واحد بار است.

یا اگر آنرا تقسیم بر $\psi\varphi$ کنیم:

$$i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{d\varphi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V \quad [۳.۲]$$

اکنون سمت چپ تنها تابعی از t است و سمت راست هم فقط تابعی از x است.^۲ این معادله تنها در صورتی می‌تواند برقرار باشد که هر دو سمت آن در واقع مقادیر ثابت باشند - در غیر اینصورت، با تغییر t ، می‌توانستیم سمت چپ را تغییر دهیم بدون آنکه طرف راست تغییر کند و آنوقت بود که دیگر دو طرف با هم برابر نمی‌بودند. (استدلال ظریف اما با اهمیتی است، به همین خاطر اگر برایتان تازگی دارد، اطمینان حاصل کنید که در این بخش کمی درنگ کرده و به خوبی آنرا بررسی کنید.) به دلائلی که کمی بعد به نظرتان خواهند رسید، این ثابت تفکیک را E می‌نامیم. در اینصورت:

$$i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{d\varphi}{dt} = E$$

یا

$$\frac{d\varphi}{dt} = -\frac{iE}{\hbar} \varphi \quad [۴.۲]$$

و

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V = E$$

یا

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi} \quad [۵.۲]$$

تفکیک متغیرها معادله دیفرانسیل جزء به جزء را به دو معادله دیفرانسیل معمولی تبدیل کرده است (روابط ۴.۲ و ۵.۲). حل کردن نخستین رابطه از این دو (رابطه ۴.۲) ساده است (کافی است طرفین را در dt ضرب کرده و انتگرال بگیرید)؛ پاسخ عمومی به صورت $C \exp(-iEt/\hbar)$ است،

^۲ دقت کنید اگر V هم تابعی از t و x بود، آنوقت این تفکیک نمی‌بود.

اما شاید بخواهیم ثابت C هم در ψ جذب شود (زیرا کمیت مورد توجه حاصلضرب $\psi\varphi$ است). بنابراین

$$\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar} \quad [۶.۲]$$

رابطه دوم (معادله ۵.۲) را معادله شرودینگر مستقل از زمان می‌نامند؛ تا زمانی که $V(x)$ مشخص نباشد نمی‌توانیم از این جلوتر برویم.

باقی این فصل به حل معادله شرودینگر مستقل از زمان به ازای پتانسیل‌های ساده اختصاص دارد. اما پیش از آن حق دارید بپرسید که: چرا پاسخ‌های تفکیک‌پذیر تا این حد حائز اهمیت‌اند؟ هر چه باشد بیشتر پاسخ‌های معادله شرودینگر (مستقل از زمان) شکل $\psi(x)\varphi(t)$ را به خود نمی‌گیرند. من برای این سوال سه جواب ارائه می‌کنم - دو مورد از آنها فیزیکی و یکی ریاضی است:

۱. آنها حالت‌های مانا هستند. اگرچه خود تابع موج

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar} \quad [۷.۲]$$

(آشکارا) وابسته به t است، ولی چگالی احتمال

$$|\Psi(x, t)|^2 = \Psi^*\Psi = \psi^*e^{+iEt/\hbar}\psi e^{-iEt/\hbar} = |\psi(x)|^2 \quad [۸.۲]$$

اینطور نیست - وابستگی زمانی حذف می‌شود.^۲ همین اتفاق در محاسبه مقدار چشمداشتی هر متغیر دینامیکی رخ می‌دهد؛ رابطه ۳۶.۱ به شکل زیر تحویل می‌یابد:

$$\langle Q(x, p) \rangle = \int \psi^* Q\left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}\right) \psi dx \quad [۹.۲]$$

هر مقدار چشمداشتی در زمان ثابت است؛ می‌توانیم بدون هیچ مشکلی عامل $\varphi(t)$ را حذف کرده و به سادگی از ψ به جای Ψ استفاده کنیم. (قدر مسلم، ارجاع به ψ به عنوان «تابع موج» متداول است اما اینجا هم باز طرز بیان قدری سرسری و ناشی‌گرانه می‌شود که می‌تواند مشکل‌ساز

^۲ برای پاسخ‌های قابل بهنجارش، E باید حقیقی باشد (مساله ۱.۲ الف) را ببینید)

باشد، به علاوه به خاطر داشتن این مساله هم حائز اهمیت است که تابع موج واقعی همواره حاوی آن عامل نمایی وابسته به زمان است. به خصوص، $\langle x \rangle$ ثابت است، و در نتیجه داریم $\langle p \rangle = 0$. در یک حالت مانا هرگز چیزی رخ نمی‌دهد.

۲. آنها حالت‌هایی با انرژی کل معین هستند. در مکانیک کلاسیک، انرژی کل (جنبشی به اضافه پتانسیل) را هامیلتونی می‌نامند:

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad [10.2]$$

عملگر هامیلتونی متناظر که از جاگذاری متعارف $p \rightarrow (\hbar/i)(\partial/\partial x)$ حاصل می‌شود به شکل زیر است^۴

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad [11.2]$$

پس معادله شرودینگر مستقل از زمان (رابطه ۵.۲) را می‌توان به این صورت نوشت

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad [12.2]$$

و مقدار چشمداشتی انرژی کل برابر است با

$$\langle H \rangle = \int \psi^* \hat{H} \psi dx = E \int |\psi|^2 dx = E \int |\Psi|^2 dx = E \quad [13.2]$$

(دقت کنید که بهنجارش Ψ بهنجارش ψ را در پی دارد.) از این گذشته،

$$\hat{H}^2 \psi = \hat{H}(\hat{H}\psi) = \hat{H}(E\psi) = E(\hat{H}\psi) = E^2 \psi$$

و در نتیجه

$$\langle H^2 \rangle = \int \psi^* \hat{H}^2 \psi dx = E^2 \int |\psi|^2 dx = E^2$$

^۴ هرگاه احتمال بروز یک اختلال وجود داشته باشد، یک «کلاه» ($\hat{}$) روی عملگر می‌گذارم تا آنرا از متغیر دینامیکی

بنابراین انحراف معیار استاندارد H از رابطه زیر بدست می‌آید

$$\sigma_H^2 = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2 = E^2 - E^2 = 0 \quad [14.2]$$

اما به یاد داشته باشید، اگر $\sigma = 0$ باشد در آنصورت هر عضو از نمونه باید مقدار یکسانی را به اشتراک بگذارد (پخش‌شدگی توزیع صفر است). نتیجه‌گیری: یک پاسخ تفکیک‌پذیر دارای خصوصیتی است که [براساس آن] هر اندازه‌گیری انرژی کل به حتم مقدار E را باز می‌گرداند. (به همین خاطر آن حرف را برای نمایش ثابت تفکیک انتخاب کردم).

۳. پاسخ عمومی یک ترکیب خطی از پاسخ‌های تفکیک‌پذیر است. همچنانکه در حال درک این سازوکار هستیم می‌بینیم که معادله شرودینگر مستقل از زمان (رابطه ۵.۲) مجموعه‌ای نامتناهی از جواب‌ها $(\psi_1(x), \psi_2(x), \psi_3(x), \dots)$ را بدست می‌دهد که هر کدام ثابت تفکیک مربوط به خود را دارد (E_1, E_2, E_3, \dots) ؛ از این رو تابع موج متفاوتی برای هر انرژی مجاز وجود دارد:

$$\Psi_1(x, t) = \psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} \quad \Psi_2(x, t) = \psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar} \quad \dots$$

اکنون (همانطور که می‌توانید به آسانی خودتان هم آنرا بررسی کنید) معادله شرودینگر (مستقل از زمان) (رابطه ۲.۱) دارای این ویژگی است که هر ترکیب خطی^۵ از جواب‌ها خودش هم یک جواب است. وقتی پاسخ‌های تفکیک‌پذیر را بدست آوردیم، آنگاه می‌توانیم بلافاصله یک پاسخ بسیار عمومی‌تر بسازیم که به شکل زیر می‌شود:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} \quad [15.2]$$

به این ترتیب هر جواب معادله شرودینگر (مستقل از زمان) را می‌توان به این صورت نوشت - این امر به وضوح مساله‌ای درباره یافتن ثوابت صحیح (c_1, c_2, \dots) از طریق اعمال شرایط اولیه در مورد مساله‌ایست که در اختیار داریم. در قسمت‌های پیش رو این مطلب را در عمل خواهید دید و

^۵ یک ترکیب خطی از توابع $f_1(z), f_2(z), \dots$ عبارتی است به صورت زیر

$$f(z) = c_1 f_1(z) + c_2 f_2(z)$$

که در آن c_1, c_2, \dots می‌توانند هر ثابت (مختلطی) باشند.

در فصل ۳ هم آنرا به بیانی ساده و زیباتر ارائه خواهیم کرد، اما نکته اصلی این است: وقتی معادله شرودینگر مستقل از زمان را حل می‌کنید، کارتان اساساً تمام شده است؛ رفتن از این نقطه به سمت تعیین جواب عمومی معادله شرودینگر مستقل از زمان، در عمل، ساده و سر راست است.

در چند صفحه گذشته اتفاقات زیادی افتاد، از اینرو اجازه دهید به اختصار آنچه گذشت را با نگاه متفاوتی خلاصه کنم. مساله کلی از این قرار است: پتانسیل (مستقل از زمان) $V(x)$ را در اختیار دارید و کار را با تابع موج $\Psi(x, 0)$ شروع می‌کنید؛ کارتان عبارت است از یافتن تابع موج، $\Psi(x, t)$ ، برای هر لحظه بعدی t . برای انجام اینکار می‌بایست معادله شرودینگر (وابسته به زمان) را حل کنید (رابطه ۱۰.۲). راهبرد^۶ از این قرار است که ابتدا معادله شرودینگر مستقل از زمان (رابطه ۵.۲) را حل می‌کنیم؛ به این ترتیب، در حالت کلی، مجموعه‌ای نامتناهی $(\psi_1(x), \psi_2(x), \dots, \psi_3(x), \dots)$ از جواب‌ها حاصل می‌شود که هر کدام انرژی مربوط به خود را دارد (E_1, E_2, E_3, \dots) . برای جور شدن با $\Psi(x, 0)$ ترکیب خطی کلی این جواب‌ها را می‌نویسید

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \quad [۱۶.۲]$$

شگفت اینجاست که همیشه می‌توانید حالت اولیه را با انتخاب تقریبی ثابت‌های c_1, c_2, c_3 و ... مطابق کنید. برای درست کردن $\Psi(x, t)$ به سادگی به هر جمله عامل بستگی زمانی آن یعنی $\exp(-iE_n t/\hbar)$ را الصاق می‌کنید:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(x, t) \quad [۱۷.۲]$$

خود جواب‌های تفکیک‌پذیر،

$$\Psi_n(x, t) = \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} \quad [۱۸.۲]$$

^۶ گاهی می‌توانید معادله شرودینگر وابسته به زمان را بدون توسل به تفکیک متغیرها هم حل کنید - برای نمونه، مسائل ۴۹.۲ و ۵۰.۲ را ملاحظه کنید. **snapp.sellfile.ir** بالا این کتاب را به رایگان می‌فروشند.

حالت‌های مانا هستند به این مفهوم که تمام احتمال‌ها و مقادیر چشمداشتی مستقل از زمان‌اند، اما جواب عمومی (رابطه ۱۷.۲) قاطعانه از این ویژگی بی‌بهره است؛ انرژی‌های حالت‌های مانای گوناگون مختلف‌اند، تازه توان‌ها هم آن هنگام که $|\Psi|^2$ را محاسبه می‌کنید حذف نمی‌شوند.

مثال ۱.۲ فرض کنید ذره‌ای ابتدا در ترکیبی خطی از دو حالت مانا قرار دارد:

$$\Psi(x, 0) = c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x)$$

(برای سادگی اینطور فرض می‌کنم که ثابت‌های c_n و حالت‌های $\psi_n(x)$ حقیقی هستند.) تابع موج $\Psi(x, t)$ در زمانهای بعدی چیست؟ چگالی احتمال را بدست آورده و حرکت ذره را توصیف کنید.

پاسخ بخش اول ساده است:

$$\Psi(x, t) = c_1\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + c_2\psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}$$

که در آن E_1 و E_2 انرژی‌های مربوط به ψ_1 و ψ_2 هستند. اینطور نتیجه می‌شود که

$$\begin{aligned} |\Psi(x, t)|^2 &= (c_1\psi_1e^{iE_1t/\hbar} + c_2\psi_2e^{iE_2t/\hbar})(c_1\psi_1e^{-iE_1t/\hbar} + c_2\psi_2e^{-iE_2t/\hbar}) \\ &= c_1^2\psi_1^2 + c_2^2\psi_2^2 + 2c_1c_2\psi_1\psi_2 \cos[(E_2 - E_1)t/\hbar] \end{aligned}$$

(از فرمول اولر، $\exp i\theta = \cos \theta + i \sin \theta$ ، استفاده کردم تا نتیجه ساده شود.) پیداست که چگالی احتمال به صورت سینوسی، در بسامد زاویه‌ای $(E_2 - E_1)/\hbar$ ، نوسان می‌کند؛ این بی‌تردید یک حالت مانا نیست. اما دقت کنید که ترکیبی خطی از حالت‌ها (با انرژی‌های گوناگون) برای ایجاد این حرکت به کار رفت.

مساله ۱.۲ * قضایای زیر را ثابت کنید:

(الف) ثابت تفکیک E برای پاسخ‌های تفکیک‌پذیر باید حقیقی باشد. راهنمایی: E را (در رابطه ۷.۲) به صورت $E_0 + i\Gamma$ بنویسید (که در آن E_0 و Γ حقیقی هستند) و نشان دهید اگر قرار باشد رابطه ۲۰.۱ باید برای تمام لحظات برقرار باشد، Γ هم باید صفر باشد.

(ب) تابع موج مستقل از زمان $\psi(t)$ را همواره می‌توان حقیقی گرفت (برخلاف Ψ که لزوماً مختلط است). این بدان معنی نیست که هر جوابی از معادله شرودینگر حقیقی است؛ عبارت فوق بیانگر این نکته است که اگر جوابی بدست آورده‌اید که حقیقی نیست همواره می‌توان آنرا به صورت ترکیبی خطی از جواب‌هایی (با انرژی یکسان) بیان کرد که حقیقی هستند. بنابراین می‌توانید به خوبی بچسبید به ψ هایی که حقیقی هستند. راهنمایی: اگر $\psi(x)$ به ازای یک مقدار مشخص E در رابطه ۵.۲ صدق کند، پس مزدوج مختلط آن و در نتیجه ترکیبات خطی حقیقی $(\psi + \psi^*)$ و $i(\psi - \psi^*)$ هم باید در آن صدق کنند.

(پ) اگر $V(x)$ یک تابع زوج باشد (یعنی داشته باشیم $V(-x) = V(x)$)، در آنصورت می‌توان $\psi(x)$ را یا فرد یا زوج گرفت. راهنمایی: اگر $\psi(x)$ به ازای مقدار مشخص E در رابطه ۵.۲ صدق کند، آنگاه $\psi(-x)$ و در نتیجه ترکیبات خطی زوج و فرد $\psi(x) \pm \psi(-x)$ هم در آن صدق می‌کنند.

مساله ۲.۲** نشان دهید E باید از مقدار کمینه $V(x)$ برای هر پاسخ قابل بهنجارش معادله شرودینگر مستقل از زمان بیشتر باشد. مانسته کلاسیکی این بیان چیست؟ راهنمایی: رابطه ۴.۲ را مجدداً به شکل زیر بازنویسی کنید.

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E]\psi$$

اگر $E < V_{min}$ باشد، آنگاه ψ و مشتق دومش همیشه هم علامت هستند - دلیل بیاورید که چنین تابعی را نمی‌توان بهنجار کرد.

۲.۲ چاه پتانسیل نامتناهی

فرض کنید

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq a \\ \infty, & \text{باقی نقاط} \end{cases} \quad [۱۹.۲]$$

شکل (۱.۲). ذره در این پتانسیل کاملاً آزاد است، به جز در دو نقطه انتهایی ($x = a$ و $x = 0$) جائیکه نیرویی بینهایت مانع از فرار آن می‌شود. مدل کلاسیکی این نمونه می‌تواند اربابه‌ای روی یک مسیر هوایی افقی بدون اصطکاک با سپرهای کاملاً کشسان باشد - اربابه همین طور تا ابد به عقب و جلو می‌رود. (این پتانسیل خیلی مصنوعی است اما از شما می‌خواهم که با احترام با آن رفتار کنید. علی‌رغم سادگی‌اش - یا به بیان دقیقتر، دقیقاً به خاطر سادگی‌اش - این پتانسیل به عنوان نمونه‌ای از یک محک قابل فهم بسیار خوب برای همه نمونه‌های پر جزئیاتی که در ادامه می‌آیند به کار می‌آید. دائماً به آن ارجاع خواهیم داد).

خارج از چاه $\psi = 0$ است (احتمال یافتن ذره در آنجا صفر است). درون چاه، جاییکه $V = 0$ است، معادله شرودینگر مستقل از زمان (رابطه ۴.۲) به این صورت است.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E \psi \quad [20.2]$$

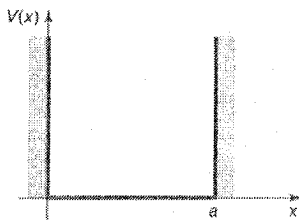
یا

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -K^2\psi \quad K \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad [21.2]$$

(وقتی رابطه را اینطور می‌نویسم، یعنی به طور ضمنی فرض کرده‌ام که $E \geq 0$ ؛ از مساله ۲.۲ می‌دانیم که حالت $E < 0$ عملی نیست.) رابطه ۲۱.۲ معادله نوسانگر هماهنگ ساده کلاسیکی است؛ جواب عمومی آن به این شکل است

$$\psi(x) = A \sin Kx + B \cos Kx \quad [22.2]$$

که در آن A و B ثوابت دلخواه هستند. معمولاً، این ثوابت توسط شرایط مرزی مساله تعیین می‌شوند. شرایط مرزی مناسب برای $\psi(x)$ چه هستند؟ عموماً، هم ψ و هم $d\psi/dx$ پیوسته‌اند، اما جائیکه پتانسیل به سمت بینهایت می‌رود فقط اولی صادق است. (در ادامه این شرایط مرزی را ثابت کرده و حالت استثناء $V = \infty$ را در بخش ۵.۲ توضیح خواهم داد؛ فعلاً امیدوارم به من اطمینان داشته باشید).



شکل ۱.۲: چاه پتانسیل مربعی بینهایت

پیوستگی $\psi(x)$ مستلزم آن است که

$$\psi(0) = \psi(a) = 0 \quad [۲۳.۲]$$

تا به این ترتیب به جواب در بیرون چاه متصل گردد. این رابطه حاوی چه اطلاعاتی درباره A و B است؟ خوب، توجه کنید که

$$\psi(0) = A \sin 0 + B \cos 0 = B$$

پس $B = 0$ است و در نتیجه

$$\psi(x) = A \sin kx \quad [۲۴.۲]$$

به همین ترتیب $\psi(a) = A \sin ka$ است، پس یا $A = 0$ می‌شود (در این حالت جواب کم اهمیت - غیر قابل بهنجارش - $\psi(x) = 0$ را مد نظر قرار ندادیم) یا $\sin ka = 0$ که یعنی

$$ka = 0, \pm\pi, \pm2\pi, \pm3\pi, \dots \quad [۲۵.۲]$$

اما اینکه $k = 0$ باشد مناسب نیست (چون باز هم به معنی $\psi(x) = 0$ است) و همچنین پاسخ‌های منفی هم چیز جدیدی بدست نمی‌دهند زیرا $\sin(-\theta) = -\sin(\theta)$ که می‌توانیم این علامت منفی را در A جذب کنیم. به این ترتیب پاسخ‌های قطعی عبارتند از

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad [۲۶.۱]$$

عجیب است که شرط مرزی در $x = a$ ثابت A را تعیین نمی‌کند بلکه در عوض k را معلوم می‌سازد و در نتیجه مقادیر چشمداشتی E از این قرارند:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad [۲۷.۲]$$

کاملاً برخلاف حالت کلاسیکی، انرژی یک ذره کوانتومی در چاه پتانسیل مربعی بینهایت نمی‌تواند هر مقداری داشته باشد - باید یکی از این مقادیر مجاز ویژه باشد.^۷ برای یافتن A ، ψ را بهنجار می‌کنیم:

$$\int_0^a |A|^2 \sin^2(kx) dx = |A|^2 \frac{a}{2} = 1 \Rightarrow A^2 = \frac{2}{a}$$

رابطه فوق تنها بزرگی A را تعیین می‌کند، با این حال گرفتن جذر حقیقی این رابطه کار بسیار ساده‌ای است: $A = \sqrt{2/a}$ (فاز A به هیچ وجه هیچ اهمیت فیزیکی ندارد). پس، جواب‌ها درون چاه به این شکل هستند.

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

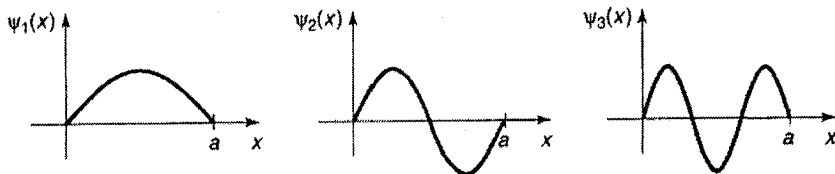
[۲۸.۲]

شواهد حاکی از آن است که معادله شرودینگر مستقل از زمان مجموعه بینهایتی از جواب‌ها (یکی برای هر n) بدست می‌دهد. چند جواب اول از این مجموعه در شکل ۲.۲ رسم شده‌اند؛ آنها به امواج ایستایی می‌مانند که روی طنابی به طول a تشکیل شده‌اند. ψ_1 که حامل کمترین انرژی است را حالت پایه می‌نامند؛ بقیه که انرژی‌شان متناسب با ضریب n^2 افزایش می‌یابد را حالت‌های برانگیخته می‌نامند. در قالب یک مجموعه، توابع $\psi_n(x)$ ویژگی‌های جالب توجهی دارند:

۱. آنها یک در میان نسبت به مرکز چاه زوج و فرد هستند. (ψ_1 زوج، ψ_2 فرد، ψ_3 زوج و همین‌طور تا آخر.^۸)

^۷ دقت کنید که بهنجارش انرژی در قالب یک پیامد نسبتاً فنی از شرایط مرزی اعمال شده روی جواب‌های معادله شرودینگر مستقل از زمان سربرآورد.

^۸ برای آشکار کردن بیشتر این تقارن، برخی نویسندگان مرکز چاه را در مبدا مختصات قرار می‌دهند. (به طوریکه حدود آن بین $-a/2$ و $+a/2$ تغییر می‌کند. به این ترتیب توابع زوج کسینوسی و توابع فرد سینوسی می‌شوند. مساله ۳۶.۲ را ببینید.



شکل ۲.۲: نخستین سه حالت مانای پتانسیل چاه مربعی بینهایت (رابطه ۲۸.۲).

۲. همچنانکه که با انرژی بالا می‌روید، هر حالت متوالی یک گره بیشتر پیدا می‌کند (محل تقاطع صفر). ψ_1 هیچ گره‌ای ندارد (نقاط انتهایی به حساب نمی‌آیند)، ψ_2 یکی دارد، ψ_3 دو تا و الی آخر.

۳. جواب‌ها متقابلاً بر هم عمودند، به این خاطر که به ازای $m \neq n$ داریم

$$\int \psi_m(x) \psi_n(x) dx = 0 \quad [29.2]$$

اثبات:

$$\begin{aligned} \int \psi_m(x) \psi_n(x) dx &= \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \\ &= \frac{1}{a} \int_0^a \left[\cos\left(\frac{m-n}{a}\pi x\right) - \cos\left(\frac{m+n}{a}\pi x\right) \right] dx \\ &= \left\{ \frac{1}{(m-n)\pi} \sin\left(\frac{m-n}{a}\pi x\right) - \frac{1}{(m+n)\pi} \sin\left(\frac{m+n}{a}\pi x\right) \right\} \Big|_0^a \\ &= \frac{1}{\pi} \left\{ \frac{\sin[(m-n)\pi]}{(m-n)} - \frac{\sin[(m+n)\pi]}{(m+n)} \right\} = 0 \end{aligned}$$

دقت کنید که این استدلال در صورتیکه $m = n$ باشد جوابگو نیست (می‌توانید نقطه‌ای را مشخص نمایید که در آن این استدلال ناکام باشد؟)؛ در این مورد بهنجارش به ما می‌گوید که انتگرال برابر است با ۱.

در واقع، می‌توانیم تعامد و بهنجارش را در یک رابطه با هم ترکیب کنیم^۹:

$$\int \psi_m(x)^* \psi_n(x) dx = \delta_{mn} \quad [۳۰.۲]$$

که در آن δ_{mn} (که آنرا دلتای کرونکر می‌نامند) به طور معمول به این صورت تعریف می‌شود

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 0 & m \neq n \\ 1 & m = n \end{cases} \quad [۳۱.۲]$$

می‌گوئیم ψ ها راست هنجار هستند.

۴. آنها کامل هستند به طوریکه هر تابع دیگری مانند $f(x)$ را می‌توان به صورت ترکیبی خطی

از آنها بیان کرد:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \quad [۳۲.۲]$$

قصد ندارم کامل بودن توابع $\sin(n\pi x/a)$ را در این قسمت اثبات کنم، اما اگر مطالعاتی روی

ریاضیات پیشرفته داشته باشید درمی‌یابید که رابطه ۲۸.۲ چیزی نیست مگر سری فوری تابع $f(x)$

و اینکه هر تابعی را می‌توان به این شکل بسط داد گاهی اوقات قضیه دیریکله نامیده می‌شود.^{۱۰}

ضرائب c_n را می‌توان - به ازای یک تابع $f(x)$ مفروض - از طریق روشی که من آنرا لم فوریه

می‌نامم برآورد کرد که به زیبایی از راست هنجاری $\{\psi_n\}$ بهره‌برداری می‌کند: هر دو طرف رابطه

۳۲.۲ را در $\psi_m(x)^*$ ضرب کرده و سپس از رابطه حاصل انتگرال بگیرد.

^۹ در این حالت، همه ψ ها حقیقی هستند، پس علامت * روی ψ_m لزومی ندارد، اما برای مقاصد بعدی مان ایده به جایی است که به گذاشتن علامت در آنجا عادت کنیم.

^{۱۰} به عنوان نمونه، کتاب *Mathematical Methods in Physical Sciences* اثر Mary Boas، ویرایش دوم (نیویورک، انتشارات Wiley & Sons، ۱۹۸۳) را ملاحظه کنید که در صفحه ۳۱۳ آن اینطور آمده: $f(x)$ حتی می‌تواند به تعداد متناهی ناپوستگی‌های متناهی داشته باشد.

$$\int \psi_m(x)^* f(x) dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \int \psi_m(x)^* \psi_n(x) dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \delta_{mn} = c_m \quad [33.2]$$

دقت کنید چطور دلتای کرونکر اثر هر عبارتی در جمع را از بین می‌برد به جز یکی که برای آن داریم $m = n$. به این ترتیب n امین ضریب در بسط $f(x)$ عبارت است از^{۱۱}

$$c_n = \int \psi_n(x)^* f(x) dx \quad [34.2]$$

این چهار رابطه بسیار موثرند، به علاوه آنکه منحصر به چاه مربعی بینهایت هم نیستند. اولین ضریب زمانی حقیقی است که خود پتانسیل تابعی متقارن باشد؛ دومی عمومی است، بدون توجه به شکل پتانسیل.^{۱۲} راست هنجاری هم کاملاً عمومی است - در فصل ۳ دلیل آنرا نشان خواهیم داد. کامل بودن درباره تمام پتانسیلهایی که احتمالاً با آنها برخورد خواهید کرد صدق می‌کند اما اثبات‌ها بیزار کننده و دشوارند.

حالت‌های مانا (رابطه ۱۸.۲) برای پتانسیل چاه مربعی بینهایت از قرار معلوم بدین ترتیب‌اند

$$\psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-i(n^2\pi^2\hbar^2/2ma^2)t} \quad [35.2]$$

پیشتر مدعی شدم (رابطه ۱۷.۲) که عمومی‌ترین جواب معادله شرودینگر (مستقل از زمان) یک ترکیب خطی از حالت‌های مانا است:

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-i(n^2\pi^2\hbar^2/2ma^2)t} \quad [36.2]$$

^{۱۱} اهمیتی ندارد که m را به عنوان شاخص بدل می‌گیرید یا n را (البته تا وقتی که در هر دو طرف رابطه سازگاری دارید)؛ از هر حرفی که استفاده کنید، در هر حال نشانه (هر عدد صحیح مثبت) است.

^{۱۲} برای نمونه، کتاب *Quantum Mechanics* اثر John L. Powell و Bernd Crasemann (ماساچوست، انتشارات

(اگر شک دارید که این یک جواب باشد، هر طور دوست دارید آنرا بررسی کنید!) تنها کاری که برایمان مانده این است که نشان دهیم می‌توانیم هر تابع موج اولیه مفروض، $\Psi(x, 0)$ ، را با انتخاب مناسب ضرائب c_n در این رابطه بگنجانیم:

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x)$$

کامل بودن ψ ها (که در این حالت طبق قضیه دیریکله تأیید می‌شود) تضمین می‌کند که همواره می‌توانیم $\Psi(x, 0)$ را به این شکل بیان کنیم، همچنین راست هنجاری آنها هم استفاده از لم فوریه برای تعیین ضرائب موجود را مجاز می‌کند:

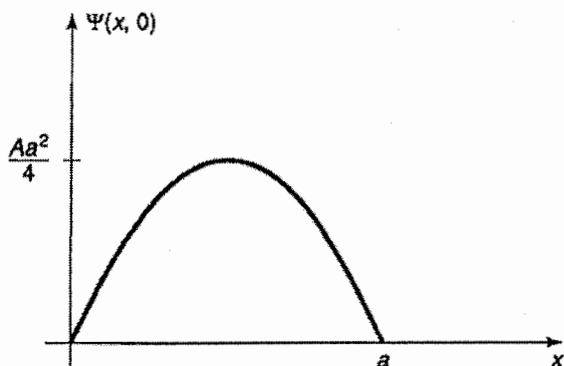
$$c_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \Psi(x, 0) dx \quad [37.2]$$

رابطه بالا اینطور عمل می‌کند که با در اختیار داشتن تابع موج اولیه، $\Psi(x, 0)$ ، ابتدا ضرائب بسط c_n را با استفاده از رابطه ۳۳.۲ محاسبه می‌کنیم، سپس آنها را در رابطه ۳۷.۲ قرار می‌دهیم تا $\Psi(x, t)$ را بدست آوریم. حالا که به تابع موج مسلحیم، در موقعیتی هستیم که هر کمیت دینامیکی دلخواهی را با استفاده از رهیافت‌های فصل ۱ محاسبه کنیم. به علاوه آنکه، این روش مرسوم برای تمام پتانسیل‌ها به کار می‌آید - تنها چیزی که تغییر می‌کند شکل تابعی ψ ها و معادله انرژی‌های مجاز است.

مثال ۲.۲ ذره‌ای در چاه مربعی بینهایت تابع موج اولیه‌ای به شکل زیر دارد

$$\Psi(x, 0) = Ax(a - x), (0 \leq x \leq a)$$

که در آن A یک مقدار ثابت است (شکل ۳.۲ را ملاحظه کنید). بی‌گمان بیرون از چاه $\Psi = 0$ است. $\Psi(x, t)$ را بدست آورید.



شکل ۳.۲: تابع موج اولیه در مثال ۲.۲.

پاسخ: ابتدا باید A را از طریق بهنجار کردن $\Psi(x, 0)$ تعیین کنیم:

$$1 = \int_0^a |\Psi(x, 0)|^2 dx = |A|^2 \int_0^a x^2 (a-x)^2 dx = |A|^2 \frac{a^5}{30}$$

ازاینرو

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

n امین ضریب عبارت است از (رابطه ۳۷.۲)

$$c_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \sqrt{\frac{30}{a^5}} x(a-x) dx$$

$$= \frac{2\sqrt{15}}{a^3} \left[a \int_0^a x \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx - \int_0^a x^2 \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \right]$$

$$= \frac{2\sqrt{15}}{a^3} \left\{ a \left[\left(\frac{a}{n\pi}\right)^2 \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) - \frac{ax}{n\pi} \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right] \right\} \Bigg|_0^a$$

$$\begin{aligned}
& - \left[2 \left(\frac{a}{n\pi} \right)^2 x \sin \left(\frac{n\pi}{a} x \right) - \frac{(n\pi/a)^2 - 2}{(n\pi/a)^3} \cos \left(\frac{n\pi}{a} x \right) \right] \Big|_0^a \\
& = \frac{2\sqrt{15}}{a^3} \left[-\frac{a^3}{n\pi} \cos(n\pi) + a^3 \frac{(n\pi)^2 - 2}{(n\pi)^3} \cos(n\pi) + a^3 \frac{2}{(n\pi)^3} \cos(0) \right] \\
& = \frac{4\sqrt{15}}{(n\pi)^3} [\cos(0) - \cos(n\pi)] \\
& = \begin{cases} 0, & \text{اگر } n \text{ زوج باشد} \\ 8\sqrt{15}/(n\pi)^3, & \text{اگر } n \text{ فرد باشد} \end{cases}
\end{aligned}$$

بدین ترتیب (رابطه ۳۶.۲):

$$\Psi(x, t) = \sqrt{\frac{30}{a}} \left(\frac{2}{\pi} \right)^3 \sum_{n=1,3,5,\dots} \frac{1}{n^3} \sin \left(\frac{n\pi}{a} x \right) e^{-in^2\pi^2\hbar t/2ma^2}$$

به بیان ساده، « c_n مقدار آن ψ_n ای را به شما می‌گوید که در Ψ موجود است.» برخی افراد بیشتر دوست دارند بگویند $|c_n|^2$ عبارت است از «احتمال یافتن ذره در n امین حالت مانا» اما این بیان مناسبی نیست؛ ذره در حالت Ψ است، نه در حالت Ψ_n و در هر صورت شما در آزمایشگاه ذره را در یک حالت مشخص نمی‌یابید - شما مشاهده‌پذیری را می‌سنجید و آنچه بدست می‌آورید یک عدد است. همانطور که فصل ۳ خواهیم دید، آنچه $|c_n|^2$ به شما می‌گوید احتمال آن است که یک اندازه‌گیری از انرژی مقدار E_n را بدست دهد (یک اندازه‌گیری مولفه‌ای همیشه یک مقدار «مجاز» در نتیجه یک نام را بازی‌گراند و $|c_n|^2$ احتمال بدست آوردن مقدار E_n بخصوص است).

بدیهی است که حاصلجمع این احتمال‌ها باید 1 شود

$$\boxed{\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1} \quad [38.2]$$

قدر مسلم، این رابطه پیامد بهنجارش Ψ است (c_n ها مستقل از زمان هستند، به همین دلیل می‌خواهم اثبات را به ازای $t = 0$ انجام دهم؛ اگر با این مساله راحت نیستید، می‌توانید به سادگی استدلال را به هر t دلخواه تعمیم دهید).

$$\begin{aligned} 1 &= \int |\Psi(x, 0)|^2 dx = \int \left(\sum_{m=1}^{\infty} c_m \psi_m(x) \right)^* \left(\sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \right) dx \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} c_m^* c_n \int \psi_m(x)^* \psi_n(x) dx \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} c_m^* c_n \delta_{mn} = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 \end{aligned}$$

(دوباره، دلتای کرونکر جمله $m = n$ در جمع روی m را بیرون می‌کشد).

علاوه بر این، مقدار چشمداشتی انرژی باید برابر باشد با

$$\langle H \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n \quad [39.2]$$

این را هم می‌توان به طور مستقیم بررسی کرد: معادله شرودینگر مستقل از زمان (رابطه ۱۲.۲) می‌گوید

$$H\psi_n = E_n\psi_n \quad [40.2]$$

بنابراین

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \int \Psi^* H \Psi dx = \int \left(\sum c_m \psi_m \right)^* H \left(\sum c_n \psi_n \right) dx \\ &= \sum \sum c_m^* c_n E_n \int \psi_m^* \psi_n = \sum |c_n|^2 E_n \end{aligned}$$

توجه داشته باشید که احتمال بدست آوردن یک انرژی به خصوص مستقل از زمان است و در نتیجه، پرواضح است که برابر است با مقدار چشمداشتی H . این نمودی از پایداری انرژی در

مثال ۳.۲ در مثال ۲.۲ تابع موج اولیه (شکل ۳.۲) شباهت نزدیکی به حالت پایه ψ_1 (شکل ۲.۲) دارد. این امر حاکی از آن است که $|c_1|^2$ باید غالب بوده و در واقع

$$|c_1|^2 = \left(\frac{8\sqrt{15}}{\pi^3} \right)^2 = 0.998555 \dots$$

اختلاف را بقیه ضریبها تشکیل می دهند:^{۱۳}

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = \left(\frac{8\sqrt{15}}{\pi^3} \right)^2 \sum_{n=1,3,5,\dots}^{\infty} \frac{1}{n^6} = 1$$

مقدار چشمداشتی انرژی، در این مثال، عبارت است از

$$\langle H \rangle = \sum_{n=1,3,5,\dots}^{\infty} \left(\frac{8\sqrt{15}}{n^3\pi^3} \right)^2 \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = \frac{480\hbar^2}{\pi^4 ma^2} \sum_{n=1,3,5,\dots}^{\infty} \frac{1}{n^4} = \frac{5\hbar^2}{ma^2}$$

همانطور که انتظار می رود این مقدار به دلیل هم آمیزی حالت های برانگیخته کمی بزرگتر به مقدار $E_1 = \pi^2\hbar^2/2ma^2$ نزدیک است.

مساله ۳.۲ نشان دهید هیچ جواب قابل قبولی برای معادله شرودینگر (مستقل از زمان) (با پتانسیل چاه مربعی نامتناهی) به ازای $E = 0$ یا $E < 0$ وجود ندارد. (این حالت خاصی از قضیه عمومی مساله ۲.۲ است اما اینبار آنرا از طریق حل صریح معادله شرودینگر و نشان دادن اینکه نمی توانید از عهده شرایط مرزی برآیید انجام دهید).

^{۱۳} می توانید در جداول ریاضی زیر عنوان «حاصلجمع توان های وارون» یا «تابع زتای ریمان» نگاهی به سری های زیر

بیندازید

$$\frac{1}{1^6} + \frac{1}{3^6} + \frac{1}{5^6} + \dots = \frac{\pi^6}{960}$$

$$\frac{1}{1^4} + \frac{1}{3^4} + \frac{1}{5^4} + \dots = \frac{\pi^4}{96}$$

مساله ۴.۲ * مقادیر $\langle x \rangle$ ، $\langle x^2 \rangle$ ، $\langle p \rangle$ ، $\langle p^2 \rangle$ و σ_p و σ_x را برای n امین حالت مانای چاه مربعی نامتناهی محاسبه کنید. بررسی کنید که اصل عدم قطعیت برقرار است. کدام حالت بیشتر به اصل عدم قطعیت نزدیک می‌شود؟

مساله ۵.۲ * ذره‌ای در چاه مربعی نامتناهی تابع موج اولیه‌ای دارد که ترکیبی از اولین دو حالت مانای آن است:

$$\Psi(x, 0) = A[\psi_1(x) + \psi_2(x)]$$

(الف) $\Psi(x, 0)$ را بهنجار کنید. یعنی، A را بدست آورید. اگر راست‌هنجاری ψ_1 و ψ_2 را در نظر بگیرید، کار بسیار آسان است. به خاطر بیاورید با داشتن Ψ که در $t = 0$ بهنجار شده، می‌توانید پراحتی اطمینان داشته باشید که تابع موج بهنجار می‌ماند - اگر نسبت به این مساله شک دارید، آنرا صراحتاً پس از اتمام بخش (ب) بررسی کنید).

(ب) $\Psi(x, t)$ و $|\Psi(x, t)|^2$ را بدست آورید. (عبارت آخری را برحسب توابع سینوسی از زمان مانند مثال ۱.۲ بیان کنید. برای ساده کردن نتیجه قرار دهید $\omega \equiv \pi^2 \hbar / 2ma^2$).

(پ) $\langle x \rangle$ را محاسبه کنید. دقت داشته باشید که مقدار چشمداشتی مکان در طول زمان نوسان می‌کند. فرکانس این نوسان چقدر است؟ دامنه نوسان چقدر است؟ (اگر دامنه شما بزرگتر از $a/2$ شد، بی معطلی خودتان را حبس کنید!)

(ت) $\langle p \rangle$ را محاسبه کنید. سعی کنید این کار را از راه میانبر انجام دهید.

(ث) اگر انرژی این ذره را اندازه می‌گرفتید، احتمالاً چه مقادیری بدست می‌آوردید و احتمال بدست آوردن هریک از آنها چه می‌بود؟ مقدار چشمداشتی H را بدست آورید. این مقدار چگونه با E_1 و E_2 قیاس می‌شود؟

مساله ۶.۲ اگرچه ثابت فاز تابع موج کلاً اهمیت فیزیکی ندارد (این ثابت هر کجا متغیری دینامیکی را محاسبه کنید حذف می‌شود)، فاز نسبی ضرائب بسط در معادله ۱۷.۲ حائز اهمیت است. برای مثال، فرض کنید فاز نسبی ψ_1 و ψ_2 در مساله ۵.۲ را به این شکل تغییر

دهیم

که در آن ϕ ثابت است. $\Psi(x, t)$ ، $|\Psi(x, t)|^2$ و $\langle x \rangle$ را بدست آورید. نتایج خود را با آنچه قبلا بدست آوردید مقایسه کنید. حالت‌های خاص $\phi = \pi/2$ و $\phi = \pi$ را بررسی کنید.

مساله ۷.۲* ذره‌ای در چاه مربعی بینهایت تابع موج اولیه‌ای به شکل زیر دارد^{۱۴}

$$\Psi(x, 0) = \begin{cases} Ax, & 0 \leq x \leq a/2 \\ A(a-x), & a/2 \leq x \leq a \end{cases}$$

(الف) $\Psi(x, 0)$ را رسم کرده و ثابت A را تعیین کنید.

(ب) $\Psi(x, t)$ را بدست آورید.

(پ) احتمال آنکه اندازه‌گیری انرژی مقدار E_1 را بدست دهد چقدر است؟

(ت) مقدار چشمداشتی انرژی را بدست آورید.

مساله ۸.۲ ذره‌ای به جرم m در چاه مربعی نامتناهی (با پهنای a) ابتدا در نیمه سمت چپ چاه قرار دارد و (در لحظه $t = 0$) با احتمال برابر در هر نقطه‌ای در آن منطقه یافت می‌شود.

(الف) تابع موج اولیه $\Psi(x, 0)$ چیست؟ (اینطور فرض کنید که این تابع حقیقی است. بهنجار کردن آنرا فراموش نکنید).

(ب) احتمال آنکه یک اندازه‌گیری انرژی مقدار $\pi^2 \hbar^2 / 2ma^2$ را بدست دهد چقدر است؟

مساله ۹.۲ برای تابع موج مساله ۲.۲، مقدار چشمداشتی H را در لحظه $t = 0$ «به روش قدیمی» بدست آورید:

^{۱۴} در عمل تا وقتی تابع موج قابل بهنجارش است محدودیتی روی شکل آن وجود ندارد. به ویژه، $\Psi(x, 0)$ نیازی به داشتن مشتق پیوسته ندارد - در واقع، حتی لازم نیست یک تابع پیوسته باشد. با این وجود، اگر بکشید $\langle H \rangle$ را در چنین حالتی با استفاده از $\int \Psi(x, 0)^* H \Psi(x, 0) dx$ محاسبه کنید، ممکن است با دشواری‌های فنی مواجه شوید، زیرا مشتق دوم $\Psi(x, 0)$ خوش تعریف نیست. این رهیافت در مساله ۹.۲ به کار می‌آید زیرا ناپیوستگی‌ها در نقاط انتهایی قرار دارند، جاییکه تابع موج در هر صورت صفر است. در مساله ۴۸.۲ ملاحظه خواهید کرد که چگونه باید به مواردی مانند مساله ۷.۲ رسیدگی کرد.

$$\langle H \rangle = \int \Psi(x, 0)^* \hat{H} \Psi(x, 0) dx$$

جواب خود را با آنچه در مثال ۳.۲ بدست آمد مقایسه کنید. توجه: چون $\langle H \rangle$ مستقل از زمان است، در استفاده از $t = 0$ به طور کلی چیزی از دست نمی‌رود.

۳.۲ نوسانگر هماهنگ

الگوی نوسانگر هماهنگ کلاسیکی عبارت است از جرم m که به فنری با ثابت نیروی k متصل است. قانون هوک حرکت این جرم را تعیین می‌کند.

$$F = -kx = m \frac{d^2x}{dt^2}$$

(با صرفنظر کردن از اصطکاک) جواب معادله بالا به این شکل است

$$x(t) = A \sin(\omega t) + B \cos(\omega t)$$

که در آن

$$\omega \equiv \sqrt{\frac{k}{m}} \quad [۴۱.۲]$$

بسامد (زاویه‌ای) نوسان است. انرژی پتانسیل برابر است با

$$V(x) = \frac{1}{2} kx^2 \quad [۴۲.۲]$$

نمودار این رابطه به شکل یک سهمی است.

البته، چنین چیزی را یک نوسانگر هماهنگ ساده تمام عیار نمی‌دانیم - اگر آنرا بیش از اندازه بکشید، فنر خراب می‌شود و عموماً قانون هوک خیلی پیش از رسیدن به آن نقطه دیگر به کار نمی‌آید. اما عملاً هر پتانسیلی در همسایگی یک کمینه موضعی تقریباً سهموی است (شکل ۴.۲).

از نظر شکل، اگر $V(x)$ را در یک سری تیلور در اطراف این کمینه بسط دهیم، داریم:

$$V(x) = V(x_0) + V'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2} V''(x_0)(x - x_0)^2 + \dots$$

از عبارت بالا $V(x_0)$ را کسر کنید (می‌توانید با مصونیت کامل ثابتی را به $V(x)$ اضافه کنید به شرط آنکه تغییری در نیرو ایجاد نکند)، قبول کنید که $V'(x_0) = 0$ (زیرا x_0 یک کمینه است) و عبارات مرتبه بالاتر را هم حذف کنید (که تا وقتی $(x - x_0)$ کوچک بماند قابل صرف‌نظر کردن هستند). پتانسیل در نهایت به این شکل درمی‌آید

$$V(x) \cong \frac{1}{2} V''(x_0) (x - x_0)^2$$

که نوسان هماهنگ ساده را (حول نقطه x_0) با ثابت فنر موثر $k = V''(x_0)$ توصیف می‌کند.^{۱۵} به همین دلیل است که نوسانگر هماهنگ ساده تا این حد اهمیت دارد: کمابیش هر حرکت نوسانی تا آن هنگام که دامنه‌اش کوچک باشد تقریبی از هماهنگ ساده است.

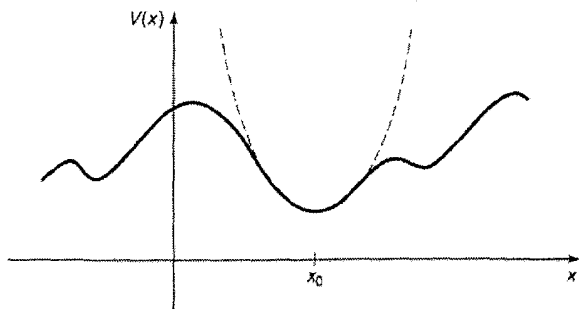
مساله کوانتومی در اینجا عبارت است از حل معادله شرودینگر برای پتانسیل زیر

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad [۴۳.۲]$$

(مرسوم است که ثابت فنر را با استفاده از رابطه ۴۱.۲ به نفع بسامد کلاسیک حذف می‌کنند).

همانطور که دیدیم، کافی است معادله شرودینگر مستقل از زمان زیر را حل کنیم:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi = E \psi \quad [۴۴.۲]$$



شکل ۴.۲: تقریب سهموی (منحنی خط چین) یک پتانسیل دلخواه در همسایگی یک کمینه موضعی.

^{۱۵} توجه کنید که $V''(x_0) \geq 0$ است زیرا فرض کردیم x_0 یک کمینه است. تنها در حالت نادر $V''(x_0) = 0$ است که نوسان حتی تقریباً هم هماهنگ ساده نیست.

در متون مختلف مکانیک کوانتومی دو رهیافت کاملاً متفاوت نسبت به این مسأله می‌یابید. روش اول یک راه حل سرراست موسوم به «نیروی بی‌تمایز» برای معادله دیفرانسیل است که از روش سری‌های توانی استفاده می‌کند؛ حسن آن این است که همین راهبرد را می‌توان در مورد بسیاری از پتانسیل‌های دیگر هم به کار برد (در واقع، از آن در فصل ۴ برای پرداختن به پتانسیل کولنی استفاده خواهیم کرد). دومی یک تکنیک جبری هوشمندانه اهریمنی است که از آنچه آنها را عملگرهای نردبانی می‌نامند استفاده می‌کند. اول روش جبری را به شما نشان خواهیم داد زیرا سریعتر و ساده‌تر است (و البته بسیار جالب‌تر هم هست)؛^{۱۶} اگر می‌خواهید فعلاً از روی روش سری‌های توانی رد شوید اشکالی ندارد، اما باید به هر شکل فرصتی برای مطالعه آن اختصاص دهید.

۱.۳.۲ روش جبری

برای شروع بیائید رابطه ۴۴.۲ را به شکلی الهام بخش‌تر از نو بازنویسی کنیم:

$$\frac{1}{2m}[p^2 + (m\omega x)^2]\psi = E\psi \quad [۴۵.۲]$$

که در آن $p \equiv (\hbar/i)d/dx$ طبعاً عملگر تکانه است. ایده اصولی عبارت است از فاکتورگیری از هاملیتونی

$$H = \frac{1}{2m}[p^2 + (m\omega x)^2] \quad [۴۶.۲]$$

اگر اینها عدد بودند کار ساده می‌بود:

$$u^2 + v^2 = (u - iv)(u + iv)$$

^{۱۶} در نظریه تکانه زاویه‌ای (فصل ۴) با همین راهبردها مواجه می‌شویم، تازه این تکنیک به دسته گسترده‌ای از

پتانسیل‌ها در مکانیک کوانتومی ابر تقارنی تعمیم می‌یابد (برای مثال، کتاب *Quantum Mechanics* اثر Richard

W. Robinett (نیویورک، انتشارات دانشگاه نیویورک) را ملاحظه کنید).

با این حال این کار برای منظور فعلی ما چندان ساده نیست زیرا p و x عملگر هستند. عملگرها به طور کلی با هم جابجا نمی‌شوند (xp با px یکسان نیست). با این حال، هنوز هم وسوسه برانگیز است که این کمیت‌ها را بررسی کنیم

$$a_{\pm} \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (\mp ip + m\omega x) \quad [47.2]$$

(ضرب جلوی رابطه صرفاً از این جهت آنجاست تا کاری کند نتایج پایانی مناسبتر به نظر برسند).

خب، حاصلضرب $a_- a_+$ چیست؟

$$\begin{aligned} (a_- a_+) &= \frac{1}{2\hbar m\omega} (ip - m\omega x)(-ip + m\omega x) \\ &= \frac{1}{2\hbar m\omega} [p^2 - (m\omega x)^2 - im\omega(xp - px)] \end{aligned}$$

طبق پیش‌بینی، جمله اضافی وجود دارد که شامل $(xp - px)$ است. این عبارت را جابجاگر x و p می‌نامیم؛ جابجاگر معیاری است از میزان عدم جابجایی‌پذیری آنها به طور کلی، جابجاگر عملگرهای A و B عبارت است از

$$[A, B] = AB - BA \quad [48.2]$$

با این نمادگذاری داریم:

$$a_- a_+ = \frac{1}{2\hbar m\omega} [p^2 + (m\omega x)^2] - \frac{i}{2\hbar} [x, p] \quad [49.2]$$

باید جابجاگر x و p را محاسبه کنیم. هشدار: زیانزد است که کار با عملگرها به شکل انتزاعی غیر قابل اعتماد است، همچنین ناگزیر از اشتباه کردن هستید مگر آنکه یک «تابع آزمون»، $f(x)$ ، به آنها بدهید تا روی آن عمل کنند. در پایان می‌توانید تابع آزمون را کنار بگذارید. آنچه برایتان می‌ماند رابطه‌ای است که تنها شامل عملگرهاست. در حالت اخیر داریم:

$$[x, p]f(x) = \left[x \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} (f) - \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} (xf) \right] = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{df}{dx} - x \frac{df}{dx} - f \right) = i\hbar f(x) \quad [50.2]$$

با برداشتن تابع آزمون، که حالا دیگر کارش را انجام داده، می‌رسیم به

$$[x, p] = i\hbar \quad [51.2]$$

این جواب دوست داشتنی و همیشه در دسترس به رابطه جابجایی کانونیک (بندادی) معروف است.^{۱۷}

به این ترتیب، رابطه ۴۹.۲ می‌شود

$$a_- a_+ = \frac{1}{\hbar\omega} H + \frac{1}{2} \quad [52.2]$$

یا

$$H = \hbar\omega \left(a_- a_+ - \frac{1}{2} \right) \quad [53.2]$$

اینطور که پیداست هامیلتونی به طور کامل عامل $1/2$ را در سمت چپ فاکتور نمی‌گیرد. توجه داشته باشید که اینجا ترتیب a_+ و a_- اهمیت دارد؛ همین استدلال، با در نظر گرفتن a_+ در سمت چپ، می‌دهد

$$a_+ a_- = \frac{1}{\hbar\omega} H - \frac{1}{2} \quad [54.2]$$

به ویژه،

$$[a_-, a_+] = 1 \quad [55.2]$$

از اینرو هامیلتونی را می‌توان به خوبی به شکل زیر نوشت

$$H = \hbar\omega \left(a_+ a_- + \frac{1}{2} \right) \quad [56.2]$$

^{۱۷} به یک مفهوم عمیق، علت تمام اسرارآمیزی مکانیک کوانتومی که مکان و تکانه با هم جابجا نمی‌شوند. قدر مسلم، برخی مولفین رابطه جابجایی کانونیک را به صورت یک اصل موضوعه از نظریه می‌گیرند و از آن برای استخراج $p = (\hbar/i)d/dx$ استفاده می‌کنند.

برحسب a_{\pm} ، معادله شرودینگر^{۱۸} به این صورت می‌شود

$$\hbar\omega\left(a_{\pm}a_{\mp} \pm \frac{1}{2}\right)\psi = E\psi \quad [57.2]$$

(در روابطی مانند این یا تماماً علامت‌های بالا را می‌خوانید یا علامت‌های پائین را).

حالا نوبت مرحله سرنوشت ساز است: ادعا می‌کنم که اگر ψ با انرژی E در معادله شرودینگر صدق کند در آنصورت $a_{+}\psi$ نیز با انرژی $(E + \hbar\omega)$ در معادله صدق می‌کند. اثبات:

$$\begin{aligned} H(a_{+}\psi) &= \hbar\omega\left(a_{+}a_{-} + \frac{1}{2}\right)(a_{+}\psi) = \hbar\omega\left(a_{+}a_{-}a_{+} + \frac{1}{2}a_{+}\right)\psi \\ &= \hbar\omega a_{+}\left(a_{-}a_{+} + \frac{1}{2}\right)\psi = a_{+}\left[\hbar\omega\left(a_{+}a_{-} + 1 - \frac{1}{2}\right)\psi\right] \\ &= a_{+}(H + \hbar\omega)\psi = a_{+}(E + \hbar\omega)\psi = (E + \hbar\omega)(a_{+}\psi) \end{aligned}$$

(از رابطه ۵۵.۲ برای جابجا کردن $a_{-}a_{+}$ با $a_{+}a_{-} + 1$ استفاده کردم. دقت کنید درحالی‌که که ترتیب a_{+} و a_{-} اهمیت دارد، ترتیب a_{\pm} یا هر ثابت دیگر - مانند \hbar ، E و ω - اهمیتی ندارد؛ یک عملگر با هر مقدار ثابتی جابجا می‌شود).

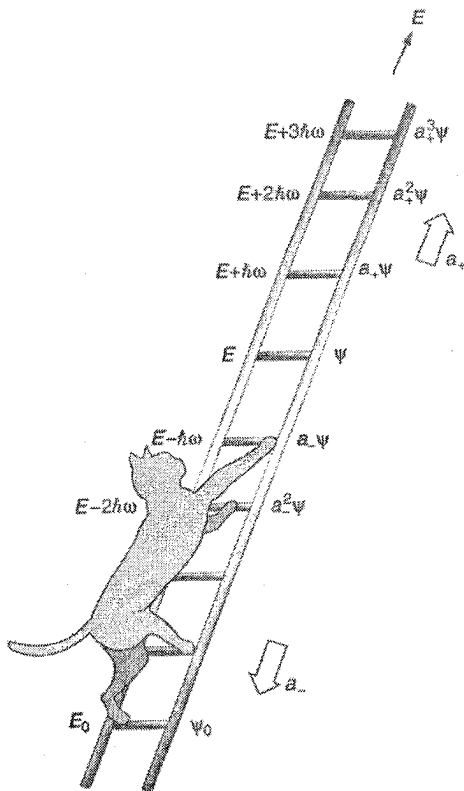
با همین استدلال، $a_{-}\psi$ هم یک جواب با انرژی $(E - \hbar\omega)$ است:

$$\begin{aligned} H(a_{-}\psi) &= \hbar\omega\left(a_{-}a_{+} - \frac{1}{2}\right)(a_{-}\psi) = \hbar\omega a_{-}\left(a_{+}a_{-} - \frac{1}{2}\right)\psi \\ &= a_{-}\left[\hbar\omega\left(a_{+}a_{-} - 1 - \frac{1}{2}\right)\psi\right] = a_{-}(H - \hbar\omega)\psi = a_{-}(E - \hbar\omega)\psi \\ &= (E - \hbar\omega)(a_{-}\psi) \end{aligned}$$

پس اینجا صحبت از ماشین فوق‌العاده‌ای است که جواب‌های جدیدی با انرژی‌های بالاتر و پائین‌تر تولید می‌کند - چه می‌شد اگر می‌توانستیم فقط یک جواب را برای شروع کار پیدا کنیم! a_{\pm} را

^{۱۸} خسته شدم از بس نوشتم «معادله شرودینگر مستقل از زمان». پس حالا که از محتوای متن آشکار می‌شود که منظورم کدام است، فقط آنرا معادله شرودینگر می‌نامم.

عملگرهای نردبانی می‌نامیم زیرا ما را قادر می‌سازند در طیف انرژی بالا و پائین برویم؛ a_+ را عملگر بالا برنده (افزاینده) و a_- را عملگر پائین آورنده (کاهنده) می‌نامیم. «نردبان» حالت‌ها در شکل ۴.۲ نشان داده شده است.



شکل ۵.۲: «نردبان» حالت‌های نوسانگر هماهنگ ساده.

اما صبر کنید! چه اتفاقی می‌افتد اگر عملگر پائین آورنده را به طور متوالی [روی تابع موج] اعمال کنم؟ تدریجاً می‌رسیم به حالتی که انرژی آن کمتر از صفر است، حالتی که (براساس قضیه عمومی مساله ۲.۲) وجود ندارد! این ساختار باید در نقطه‌ای متوقف شود. چطور چنین چیزی رخ می‌دهد؟ می‌دانیم که $a_-\psi$ جواب جدیدی برای معادله شرودینگر است، با این وجود هیچ تضمینی وجود ندارد که جواب مذکور بهنجار باشد - ممکن است صفر بوده یا شاید انتگرال مربع آن بینهایت باشد. در عمل اولی صادق است: یک «پایین‌ترین پله» وجود دارد به طوریکه

$$a_-\psi_0 = 0 \quad [58.2]$$

می‌توانیم از این برای تعیین ψ_0 استفاده کنیم:

$$\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) \psi_0 = 0$$

یا

$$\frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar} x \psi_0$$

حل معادله دیفرانسیل برای ψ_0 آسان است:

$$\int \frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar} \int x dx \Rightarrow \ln \psi_0 = -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + \text{ثابت}$$

از اینرو

$$\psi_0(x) = A e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

می‌توانیم همینجا هم آنرا بهنجار کنیم

$$1 = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-m\omega x^2/\hbar} dx = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}}$$

پس $A^2 = \sqrt{m\omega/\pi\hbar}$ و در نتیجه

$$\boxed{\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}} \quad [59.2]$$

برای تعیین انرژی این حالت آنرا به معادله شرودینگر وصل می‌کنیم (در شکل رابطه ۵۷.۲)،
 $\hbar\omega(a_+a_- + 1/2)\psi_0 = E_0\psi_0$ ، و از این نکته استفاده می‌کنیم که $a_-\psi_0 = 0$ است. واضح است
 که

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \quad [۶۰.۲]$$

حالا که پایمان امن و امان روی پله انتهایی رسیده (حالت پایه نوسانگر کوانتومی)،^{۱۹} صرفاً عملگر
 بالابرنده را به حالت‌های برانگیخته اعمال می‌کنیم:

$$\psi_n(x) = A_n(a_+)^n\psi_0(x) \quad E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad [۶۱.۲]$$

که در آن A_n ثابت بهنجارش است. به این ترتیب، با اعمال عملگر بالابرنده (به طور پی در پی) روی
 ψ_0 ، می‌توانیم (در عمل) تمام^{۲۰} حالت‌های مانای نوسانگر هماهنگ را درست کنیم. در این بین،
 بدون آنکه صریحاً اینکار انجام شود، انرژی‌های مجاز را تعیین کردیم.

مثال ۴.۲ نخستین حالت برانگیخته نوسانگر هماهنگ را بدست آوردید.

پاسخ. با استفاده از رابطه ۶۱.۲،

$$\psi_1(x) = A_1 a_+ \psi_0 = \frac{A_1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(-\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \quad [۶۲.۲]$$

^{۱۹} درمورد نوسانگر هماهنگ مرسوم است، به برخی دلایل، که از روال معمول عدول کرد. شماره حالت‌ها به جای
 $n = 0$ از $n = 1$ شروع می‌شود. آشکار است که حد پائینی روی حاصلجمع در فرمولی همانند رابطه ۱۷.۲ را باید بر
 این اساس دستکاری کرد.

^{۲۰} توجه داشته باشید که از این طریق همه جواب‌های (قابل بهنجارش) را بدست می‌آوریم. چون اگر جواب دیگری
 وجود می‌داشت، می‌توانستیم از روی آن با اعمال پی در پی عملگرهای بالابرنده و پائین آورنده نردبان دومی تولید
 کنیم. اما مرحله کفی این نردبان جدید می‌بایست در رابطه ۵۸.۲ صدق کند، تازه از آنجاکه این امر بی‌برو برگرد به
 رابطه ۵۹.۲ منتهی می‌شود، پله‌های کفی باید ناممکن باشد. بنابراین نردبان در واقع یکی خواهند بود.

$$= A_1 \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

می‌توانیم «دستی» این رابطه را بهنجار کنیم:

$$\int |\psi_1|^2 dx = |A_1|^2 \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \left(\frac{2m\omega}{\hbar} \right) \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} dx = |A_1|^2$$

از اینرو، تصادفاً، $A_1 = 1$ است.

خیال ندارم ψ_{50} را از این راه بدست آورم (یعنی عملگر بالابرنده را ۵۰ بار به کار ببرم)، اما مهم نیست: در عمل رابطه ۶۱.۲ کار را انجام می‌دهد - جز در مورد بهنجارش.

حتی می‌توانید بهنجارش را به صورت جبری هم بدست آورید، اما به کمی چالاکي و تردستی نیاز است، بنابراین حسابی حواس‌تان را جمع کنید. می‌دانیم که $a_{\pm}\psi_n$ متناسب است با ψ_{n+1}

$$a_+\psi_n = c_n\psi_{n+1}, a_-\psi_n = d_n\psi_{n-1} \quad [63.2]$$

اما عامل‌های تناسب، c_n و d_n ، چه هستند؟ ابتدا توجه کنید که به ازای «هر»^{۲۱} دو تابع $f(x)$

و $g(x)$ داریم

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(a_{\pm}g) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (a_{\mp}f)^* g dx \quad [64.2]$$

(به زبان جبر خطی، a_{\mp} مزدوج هرمیتی a_{\pm} است).

اثبات:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(a_{\pm}g) dx = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} f^* \left(\mp \hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) g dx$$

چون انتگرال‌گیری جزء به جزء $\int f^*(dg/dx) dx$ را به $\int (df/dx)^* g dx$ - می‌برد (جملات

مرزی به دلیلی که در زیرنویس ۲۲ آمد ناپدید می‌شوند)، پس

^{۲۱} البته، انتگرال‌ها باید وجود داشته باشند، همچنین این بدان معنی است که $f(x)$ و $g(x)$ باید در $\pm\infty$ به سمت صفر میل کنند.

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(a_{\pm}g)dx = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\left(\pm \hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) f \right]^* g dx = \int_{-\infty}^{\infty} (a_{\mp}f)^* g dx$$

همانطور که باید ثابت می‌شد.

به ویژه،

$$\int_{-\infty}^{\infty} (a_{\pm}\psi_n)^*(a_{\pm}\psi_n)dx = \int_{-\infty}^{\infty} (a_{\mp}a_{\pm}\psi_n)^*\psi_n dx$$

اما (با بهره‌گیری از روابط ۵۷.۲ و ۶۱.۲) داریم

$$a_+a_-\psi_n = n\psi_n \quad a_-a_+\psi_n = (n+1)\psi_n \quad [۶۵.۲]$$

از اینرو

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} (a_+\psi_n)^*(a_+\psi_n)dx &= |c_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_{n+1}|^2 dx = (n+1) \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2 dx \\ \int_{-\infty}^{\infty} (a_-\psi_n)^*(a_-\psi_n)dx &= |d_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_{n-1}|^2 dx = n \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2 dx \end{aligned}$$

اما از آنجا که ψ_n و ψ_{n+1} بهنجار شده هستند، می‌توان اینطور نتیجه گرفت که

$$|d_n|^2 = n \quad \text{و} \quad |c_n|^2 = n+1$$

$$a_+\psi_n = \sqrt{n+1} \psi_{n+1} \quad a_-\psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1} \quad [۶۶.۲]$$

بدین ترتیب

$$\begin{aligned} \psi_1 &= a_+\psi_0, \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} a_+\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_+)^2 \psi_0 \\ \psi_3 &= \frac{1}{\sqrt{3}} a_+\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{3 \cdot 2}} (a_+)^3 \psi_0, \psi_4 = \frac{1}{\sqrt{4}} a_+\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{4 \cdot 3 \cdot 2}} (a_+)^4 \psi_0 \end{aligned}$$

و همینطور تا آخر. آشکار است که

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a_+)^n \psi_0 \quad [۶۷.۲]$$

که یعنی عامل بهنجارش در رابطه ۶۱.۲ عبارت است از $A_n = 1/\sqrt{n!}$ (به ویژه، $A_1 = 1$ نتیجه ما در مثال ۴.۲ را تأیید می‌کند).

مانند مورد چاه مربعی نامتناهی، حالت‌های مانای نوسانگر هماهنگ متعامد هستند:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n dx = \delta_{mn} \quad [۶۸.۲]$$

می‌توان این را با یکبار استفاده از رابطه ۶۵.۲ و دو بار استفاده از رابطه ۶۴.۲ اثبات کرد - ابتدا a_+ و سپس a_- :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* (a_+ a_-) \psi_n dx &= n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (a_- \psi_m)^* (a_- \psi_n) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (a_+ a_- \psi_m)^* \psi_n dx \\ &= m \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n dx \end{aligned}$$

جز در حالت $m = n$ ، عبارت $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n dx$ باید صفر باشد. راست هنجاری یعنی می‌توانیم وقتی $\Psi(x, 0)$ را به صورت ترکیبی خطی از حالت‌های مانا بسط می‌دهیم باز هم از لم فوریه (رابطه ۳۴.۲) برای محاسبه ضریب‌ها استفاده کنیم، همچنین $|c_n|^2$ هنوز هم احتمال آن است که یک اندازه‌گیری انرژی مقدار E_n را نتیجه دهد.

مثال ۵.۲ مقدار چشمداشتی انرژی پتانسیل در n امین حالت نوسانگر هماهنگ را بدست آورید.

پاسخ.

$$\langle V \rangle = \langle \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* x^2 \psi_n dx$$

ترفند زیبایی برای محاسبه انتگرال‌هایی از این نوع (که شامل توان‌های x و p می‌شوند) وجود دارد: از تعریف (رابطه ۴۷.۲) برای بیان x و p برحسب عملگرهای بالابرنده و پائین آورنده استفاده کنید:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a_+ + a_-)p = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(a_+ - a_-) \quad [۶۹.۲]$$

در این مثال نگاه مان متوجه x^2 است:

$$x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} [(a_+)^2 + (a_+a_-) + (a_-a_+) + (a_-)^2]$$

از اینرو

$$\langle V \rangle = \frac{\hbar\omega}{4} \int \psi_n^* [(a_+)^2 + (a_+a_-) + (a_-a_+) + (a_-)^2] \psi_n dx$$

اما $(a_+)^2 \psi_n$ (سوی از بهنجارش) برابر است با ψ_{n+2} که عمود بر ψ_n است و همین وضع هم برای $(a_-)^2 \psi_n$ برقرار است که متناسب است با ψ_{n-2} . بنابراین آن جملات حذف شده و می‌توانیم از رابطه ۶۵.۲ برای محاسبه دو جمله باقیمانده استفاده کنیم:

$$\langle V \rangle = \frac{\hbar\omega}{4} (n + n + 1) = \frac{1}{2} \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

تصادفا، مقدار چشمداشتی انرژی پتانسیل دقیقاً برابر است با نصف انرژی کل (و طبعاً نصف دیگر هم انرژی جنبشی است). همانطور که در ادامه خواهیم دید، این صفت مشخصه نوسانگر هماهنگ است.

مساله ۱۰.۲ *

(الف) عبارت مناسب برای $\psi_2(x)$ را تشکیل دهید.

(ب) توابع ψ_0 ، ψ_1 و ψ_2 را رسم کنید.

(پ) با انتگرال گیری صریح از تعامد ψ_0 ، ψ_1 و ψ_2 اطمینان حاصل کنید. راهنمایی: اگر از فرد بودن و زوج بودن توابع بهره بگیرید، به واقع تنها یک انتگرال برای محاسبه باقی می‌ماند.

مساله ۱۱.۲ *

(الف) عبارت‌های مناسب $\langle x \rangle$ ، $\langle p \rangle$ ، $\langle x^2 \rangle$ و $\langle p^2 \rangle$ را برای حالت ψ_0 (رابطه ۵۹.۲) و ψ_1 (رابطه ۶۲.۲) را با انتگرال گیری صریح تعیین کنید. توضیح: در این مساله و مسائل دیگر شامل

نوسانگر هماهنگ با معرفی متغیر جدید $\xi = \sqrt{m\omega/\hbar} x$ و ثابت $\alpha = (m\omega/\pi\hbar)^{1/4}$ کار ساده‌تر می‌شود.

(ب) اصل عدم قطعیت را برای این حالت‌ها بررسی کنید.

(پ) مقدار $\langle T \rangle$ (میانگین انرژی جنبشی) و $\langle V \rangle$ (میانگین انرژی پتانسیل) را برای این حالت‌ها تعیین کنید. (مجاز به انجام هیچ انتگرال گیری جدیدی نیستید!) آیا حاصلجمع آنها چیزی هست که انتظارش را داشتید؟

مساله ۱۲.۲* عبارت‌های مناسب $\langle x \rangle$ ، $\langle p \rangle$ ، $\langle x^2 \rangle$ ، $\langle p^2 \rangle$ و $\langle T \rangle$ را برای n امین حالت مانای نوسانگر هماهنگ با استفاده از روش مثال ۵.۲ بیابید. بررسی کنید که آیا اصل عدم قطعیت اعتبار دارد یا نه.

مساله ۱۳.۲ ذره‌ای در پتانسیل نوسانگر هماهنگ در حالت زیر قرار دارد

$$\Psi(x, 0) = A[3\psi_0(x) + 4\psi_1(x)]$$

(الف) ثابت A را بدست آورید.

(ب) عبارت‌های $\Psi(x, t)$ و $|\Psi(x, t)|^2$ را تشکیل دهید. چندان تعجب نکنید اگر $|\Psi(x, t)|^2$ دقیقاً با بسامد کلاسیکی نوسان می‌کند؛ اگر به جای ψ_1 ، ψ_2 را مشخص کرده بودم چه می‌شد؟

(پ) $\langle x \rangle$ و $\langle p \rangle$ را بدست آورید.

(ت) اگر انرژی این ذره را اندازه گرفته بودید، ممکن بود چه مقادیری بدست آورید و احتمال آن مقادیر چه می‌بود؟

مساله ۱۴.۲ ذره‌ای در حالت پایه نوسانگر هماهنگی با بسامد کلاسیکی ω قرار دارد که ناگهان ثابت فنر چهار برابر می‌شود، از اینرو $\omega' = 2\omega$ می‌شود، بدون آنکه از ابتدا تغییری در تابع موج بوجود آید (البته، حالا Ψ به شکل متفاوتی متحول می‌شود، زیرا هامیلتونی تغییر

کرده است). احتمال آنکه یک اندازه گیری انرژی باز هم مقدار $\hbar\omega/2$ را باز گرداند چقدر است؟
[پاسخ: 0.943]

۲.۳.۲ روش تحلیلی

باز می گردیم به معادله شرودینگر برای نوسانگر هماهنگ:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi = E\psi \quad [70.2]$$

و آنرا به طور مستقیم به روش سری ها حل می کنیم. اگر متغیری به شکل زیر تعریف کنیم وضع کمی روشن تر می شود

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad [71.2]$$

معادله شرودینگر بر حسب ξ اینطور می شود

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = (\xi^2 - K)\psi \quad [72.2]$$

که در آن K همان انرژی است که بر حسب واحد $(1/2)\hbar\omega$ بیان شده:

$$K \equiv \frac{2E}{\hbar\omega} \quad [73.2]$$

مساله ما در این قسمت حل رابطه ۷۲.۲ و در ادامه بدست آوردن مقادیر «مجاز» K (و در نتیجه E) است.

در آغاز، دقت کنید که به ازای مقادیر بسیار بزرگ ξ (یعنی در x های بسیار بزرگ)، ξ^2 کاملاً

ثابت K را تحت الشعاع خود قرار می دهد، پس با این حساب

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} \approx \xi^2 \psi \quad [74.2]$$

که جواب تقریبی آن برابر است با (بررسی کنید!)

$$\psi(\xi) = A e^{-\xi^2/2} + B e^{+\xi^2/2} \quad [75.2]$$

عبارت شامل B به وضوح قابل بهنجارش نیست (این عبارت به ازای $|x| \rightarrow \infty$ بینهایت می شود)؛ بنابراین، جواب های قابل قبول فیزیکی به ازای ξ بزرگ، شکل مجانبی دارند

$$\psi(\xi) \rightarrow () e^{-\xi^2/2} \quad [۷۶.۲]$$

از اینجا این نکته به ذهن می رسد که بخش نمایی را «جدا می کنیم»

$$\psi(\xi) = h(\xi) e^{-\xi^2/2} \quad [۷۷.۲]$$

به این امید که آنچه باقی می ماند، $h(\xi)$ ، شکل تابعی ساده تری نسبت به خود $\psi(\xi)$ داشته باشد.^{۲۲} با مشتق گیری از رابطه ۷۷.۲ داریم

$$\frac{d\psi}{d\xi} = \left(\frac{dh}{d\xi} - \xi h \right) e^{-\xi^2/2}$$

و

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = \left(\frac{d^2h}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dh}{d\xi} + (\xi^2 - 1)h \right) e^{-\xi^2/2}$$

به این ترتیب معادله شرودینگر (رابطه ۷۲.۲) می شود

$$\frac{d^2h}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dh}{d\xi} + (K - 1)h = 0 \quad [۷۸.۲]$$

قصد داریم در جستجوی جوابی برای رابطه ۷۸.۲ به صورت سریهای توانی برحسب ξ باشیم^{۲۳}:

^{۲۲} دقت داشته باشید که اگرچه به کمی تقریب برای برانگیزاندن رابطه ۷۷.۲ متوسل شدیم، آنچه متعاقبا حاصل شد دقیق است. ترفند جدا کردن رفتار مجانبی اولین گام استاندارد در روش سری های توانی برای حل معادلات دیفرانسیل است - به عنوان نمونه، کتاب Boas (زیرنویس ۱۱) فصل دوازدهم را ببینید.

^{۲۳} این روش به روش فروبنیوس برای حل معادله دیفرانسیل معروف است. براساس روش تیلور، هر تابع خوش تعریف مناسبی را می توان به صورت یک سری توانی بیان کرد، از اینرو رابطه ۷۹.۲ به طور معمول بدور از هر گونه از دست رفتن کلیت است. برای اطلاعات بیشتر درباره شرایط اطلاق پذیری و کاربری سریهای توانی، کتاب Boas

$$h(\xi) = a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + \dots = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j \quad [۷۹.۲]$$

از همه جملات رابطه فوق مشتق می گیریم

$$\frac{dh}{d\xi} = a_1 + 2a_2\xi + 3a_3\xi^2 + \dots = \sum_{j=0}^{\infty} j a_j \xi^{j-1}$$

۹

$$\frac{d^2h}{d\xi^2} = 2a_2 + 2 \times 3a_3\xi + 3 \times 4a_4\xi^2 + \dots = \sum_{j=0}^{\infty} (j+1)(j+2)a_{j+2}\xi^j$$

اگر این دو را در رابطه ۷۸.۲ قرار دهیم نتیجه زیر بدست می آید

$$\sum_{j=0}^{\infty} [(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (K+1)a_j] \xi^j = 0 \quad [۸۰.۲]$$

(از یکتایی بسط‌های سری‌های توانی)^{۲۴} نتیجه می‌شود که ضریب هر توانی از ξ باید از میان برود

$$(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (K-1)a_j = 0$$

و از اینرو

$$a_{j+2} = \frac{(2j+1-K)}{(j+1)(j+2)} a_j \quad [۸۱.۲]$$

(زیرنویس ۱۱) یا کتاب *Mathematical Methods for Physicists* نوشته Hans-Jurgen و George Arfken

Weber، ویرایش پنجم، (اورلاندو، انتشارات Academic، ۲۰۰۰) بخش ۵.۸ را ملاحظه کنید.

این فرمول بازگشتی کاملاً هم ارز خود معادله شرودینگر است. با شروع از a_0 ، تمام ضرائب با شماره زوج را تولید می‌کند.

$$a_2 = \frac{(1-K)}{2} a_0, a_4 = \frac{(5-K)}{12} a_2 = \frac{(5-K)(1-K)}{24} a_0, \dots$$

و با شروع از a_1 ، تمام ضرائب فرد را تولید می‌کند:

$$a_3 = \frac{(3-K)}{6} a_1, a_5 = \frac{(7-K)}{20} a_3 = \frac{(7-K)(3-K)}{120} a_1, \dots$$

جواب کامل را به این ترتیب می‌نویسیم

$$h(\xi) = h_{\text{زوج}}(\xi) + h_{\text{فرد}}(\xi) \quad [۸۲.۲]$$

که در آن

$$h_{\text{زوج}}(\xi) \equiv a_0 + a_2 \xi^2 + a_4 \xi^4 + \dots$$

تابع زوجی از ξ که روی a_0 ساخته شده و

$$h_{\text{فرد}}(\xi) \equiv a_1 \xi + a_3 \xi^3 + a_5 \xi^5 + \dots$$

تابع فردی است بر پایه a_1 . لذا رابطه ۸۱.۲ عبارت $h(\xi)$ را بر حسب دو ثابت دلخواه (a_0 و a_1) تعیین می‌کند - که دقیقاً همان چیزی است که برای یک معادله دیفرانسیل درجه دو انتظار داشتیم.

با این همه، تمام جواب‌هایی که تاکنون به دست آورده‌ایم قابل بهنجارش نیستند. برای z بسیار بزرگ، فرمول بازگشتی (تقریباً) به این شکل درمی‌آید

$$a_{j+2} \approx \frac{2}{j} a_j$$

که جواب (تقریبی) آن عبارت است از:

$$a_j \approx \frac{C}{(j/2)!}$$

به ازای یک ثابت C این رابطه (در ξ بزرگ جاییکه توانهای بالاتر تسلط دارند) داریم

$$h(\xi) \approx C \sum \frac{1}{(j/2)!} \xi^j \approx C \sum \frac{1}{j!} \xi^{2j} \approx C e^{\xi^2}$$

اکنون، اگر h همانند $\exp(\xi^2)$ رشد کند، در آنصورت ψ (آنها به خاطر می‌آورید؟ - این همان است که سعی می‌کنیم آنها محاسبه کنیم) همانند $\exp(\xi^2/2)$ رشد می‌کند (رابطه ۷۷.۲) که دقیقاً همان رفتار مجانبی است که به آن علاقه‌ای نداشتیم.^{۲۵} تنها یک راه برای خلاصی از این مشکل وجود دارد: برای جواب‌های قابل به‌جارش، سری‌های توانی متوقف شوند. باید یک مقدار «حداکثر» برای j وجود داشته باشد (آنها n می‌نامیم) به طوریکه رابطه بازگشتی شرط $a_{n+2} = 0$ را برآورده سازد (با این کار یا بخشی از سریهای زوج h یا بخشی از فرد h قطع می‌شود؛ آن دیگری باید از ابتدا صفر باشد). پس برای جواب‌های فیزیکی قابل قبول، رابطه ۸۱.۲ مستلزم آن است که

$$K = 2n + 1$$

به ازای عدد مثبت صحیح n ، این رابطه به آن معنی است که بگوئیم (با ارجاع به رابطه ۷۳.۲) انرژی باید به شکل زیر باشد

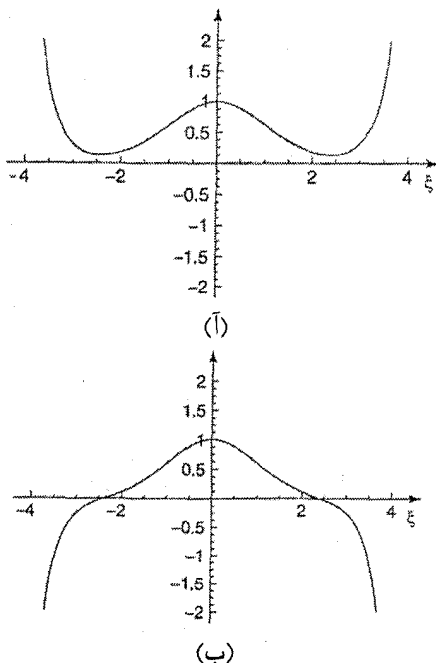
$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad [۸۳.۲]$$

در نتیجه با روشی کاملاً متفاوت، شرط کوانتشی که به صورت جبری در رابطه ۶۱.۲ بدست آوردیم را دوباره بدست می‌آوریم.

ابتدا کمی شگفت‌آور به نظر می‌رسد که بهنجارش انرژی بناست از جزئیات تکنیکی در جواب سری‌های توانی معادله شرودینگر پدیدار شود، اما بیائید از یک دورنمای متفاوت نگاهی به آن بیندازیم. رابطه ۷۰.۲ طبعاً جوابهایی برای هر مقدار E دارد (در واقع، دو جواب مستقل خطی برای هر E دارد). با این حال تقریباً تمام این جوابها در x های بزرگ به صورت نمایی به بینهایت می‌روند، در نتیجه قابل بهنجارش نیستند، مثلاً فرض کنید با استفاده از یک E که کمی کمتر از

^{۲۵} تعجبی ندارد که رابطه ۸۱.۲ هنوز هم محتوی جوابهای بد رفتار است؛ این رابطه بازگشتی هم ارز معادله شرودینگر

یکی از مقادیر مجاز است (به فرض، $0.49 \hbar\omega$) و رسم جواب (شکل ۶.۲ (آ))؛ «دنباله‌ها» با سرعت به بینهایت می‌روند. اکنون انرژی دیگری که کمی بزرگتر است (به فرض، $0.51 \hbar\omega$) را امتحان کنید؛ حالا «دنباله‌ها» در جهت دیگری به بینهایت می‌روند (شکل ۶.۲ (ب)). همینکه پارامتر را در والش‌های بسیار کوچک به طور جزئی از ۰.۴۹ به ۰.۵۱ تغییر می‌دهید، هنگام عبور از ۰.۵ دنباله واهی گردد - فقط در ۰.۵ است که دنباله‌ها به صفر میل کرده و جواب قابل بهنجارشی را بدست می‌دهند.^{۲۶}



شکل ۶.۲: جواب‌های معادله شرودینگر برای (آ) $E = 0.49 \hbar\omega$ و (ب) $E = 0.51 \hbar\omega$.

^{۲۶} این امکان وجود دارد که کار را روی کامپیوتر انجام دهیم و انرژی‌های مجاز را به صورت «تجربی» بدست آوریم. می‌توانید آنرا روش دم جنبانیدن بنامید. هرگاه دنباله‌ها تکانی می‌خورند، متوجه می‌شوید که در همان لحظه از یک مقدار مجاز عبور کرده‌اید. برخی آنرا «روش شلیک کردن» می‌نامند (کتاب *Computational Physics* اثر Nicholas Giordano از انتشارات Prentice Hall چاپ ۱۹۹۷ بخش ۲.۱۰ را ملاحظه کنید. مسائل ۵۴.۲ تا ۵۶.۲ را ملاحظه کنید.

به ازای مقادیر مجاز K ، رابطه بازگشتی عبارت می‌شود از

$$a_{j+2} = \frac{-2(n-j)}{(j+1)(j+2)} a_j \quad [۸۴.۲]$$

اگر $n = 0$ باشد، تنها یک عبارت در سری وجود دارد (باید فرض کنیم $a_1 = 0$ تا h_3 از بین برود.

فرض $j = 0$ در رابطه ۸۴.۲ هم $a_2 = 0$ را نتیجه می‌دهد؛

$$h_0(\xi) = a_0$$

و بنابراین

$$\psi_0(\xi) = a_0 e^{-\xi^2/2}$$

(که، جدا از یهنجارش، رابطه ۵۹.۲ را بازسازی می‌کند). برای $n = 1$ می‌گیریم $a_0 = 0$ و

رابطه ۸۴.۲ هم با $j = 1$ می‌دهد $a_3 = 0$ ، پس

$$h_1(\xi) = a_1 \xi$$

و از اینرو

$$\psi_1(\xi) = a_1 \xi e^{-\xi^2/2}$$

(که رابطه ۶۲.۲ را تأیید می‌کند). برای $n = 2$ ، $j = 0$ می‌دهد $a_2 = -2a_0$ و $j = 2$ می‌دهد

$a_4 = 0$ ، پس

$$h_2(\xi) = a_0(1 - 2\xi^2)$$

و

$$\psi_2(\xi) = a_0(1 - 2\xi^2)e^{-\xi^2/2}$$

و الی آخر. (با مساله ۱۰.۲ مقایسه کنید که در آن همین نتیجه به روش جبری بدست آمد).

به طور کلی، $h_n(\xi)$ یک جمله‌ای درجه n از ξ است که تنها شامل توانهای زوج است اگر n عدد

زوجی باشد و تنها شامل توانهای فرد است اگر n عدد فردی باشد. جدا از ضریب اضافی (a_0 یا a_1)

این توابع به چند جمله‌ایهای هرمیت، $H_n(\xi)$ ، معروفند.^{۲۸} چند مورد نخستین از آنها در جدول

^{۲۷} دقت کنید که برای هر مقدار n مجموعه کاملاً متفاوتی از ضرایب a_j وجود دارد.

^{۲۸} چند جمله‌ایهای هرمیت در متون ریاضی به تفصیل مورد بررسی قرار گرفته‌اند و ابزارها و ترفندهای بسیاری برای

۲.۱ فهرست شده است. مرسوم است که ضریب دلخواه طوری انتخاب می‌شود که بیشترین توان ξ به اندازه 2^n باشد. به سبب این قاعده، حالت‌های مانای بهنجار^{۲۹} نوسانگر هماهنگ ساده عبارتند از

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2} \quad [۸۵.۲]$$

این توابع همانهایی هستند که به صورت جبری در رابطه ۶۷.۲ بدست آوردیم.

در شکل ۷.۲ (آ) تابع ψ_n را برای چند n اول رسم کرده‌ام. نوسانگر هماهنگ به شکل چشمگیری با همتای کلاسیکی‌اش فرق می‌کند - نه تنها انرژی‌های آن کوانتیزه هستند، بلکه توزیع‌های مکان هم ویژگیهای اعجاب‌انگیزی دارند. برای نمونه، احتمال یافتن ذره خارج از محدوده مجاز کلاسیکی (یعنی جائیکه در آن x بزرگتر از دامنه کلاسیکی انرژی در مساله باشد) صفر نیست (مساله ۱۵.۲ را ببینید) و در تمام حالت‌های فرد احتمال یافتن ذره در مرکز صفر است. تنها به ازای n های بزرگ شاهد مشابهت با حالت کلاسیکی هستیم.

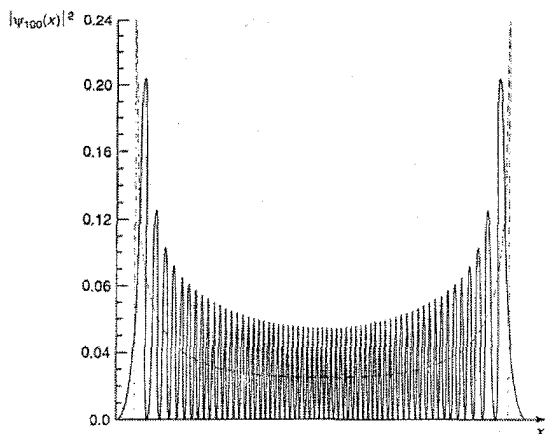
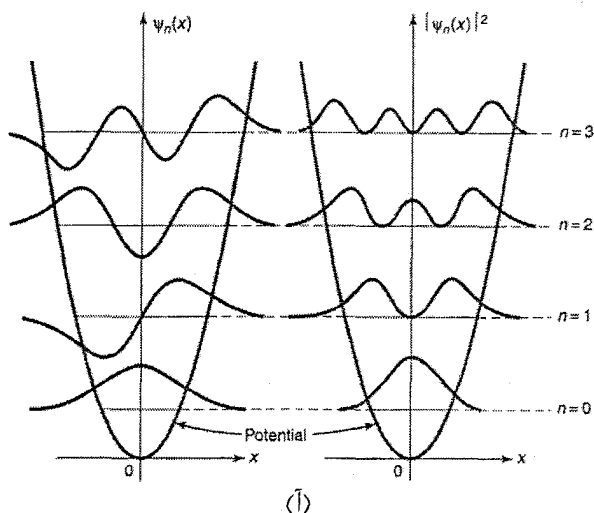
در شکل ۷.۲ (ب) توزیع مکان کلاسیکی را روی نمونه کوانتومی آن منطبق کرده‌ام (برای $n = 100$)؛ اگر برآمدگیها را هموار می‌کردید، هر دو به خوبی بر هم منطبق می‌شدند

جدول ۱.۲: تعدادی از نخستین چند جمله‌ایهای هرمیت، $H_n(\xi)$.

$H_0 = 1$
$H_1 = 2\xi$
$H_2 = 4\xi^2 - 2$
$H_3 = 8\xi^3 - 12\xi$
$H_4 = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12$
$H_5 = 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi$

^{۲۹} اینجا ضریب بهنجارش را محاسبه نمی‌کنم؛ اگر علاقمند به دانستن نحوه انجام اینکار هستید، برای نمونه کتاب *Quantum Mechanics* اثر Leonard Schiff چاپ سوم (نیویورک، انتشارات McGraw-Hill، ۱۹۶۸) بخش ۱۳ را ملاحظه کنید.

(با این وجود، در حالت کلاسیکی برای یک نوسانگر از توزیع مکان‌ها طی زمان صحبت می‌کنیم، در حالیکه در حالت کوانتومی درباره یک مجموعه آماری از سامانه‌های تدارک دیده شده مانند هم صحبت می‌کنیم).^{۳۰}



(ب)

شکل ۷.۲: (آ) نخستین چهار حالت مانای نوسانگر هماهنگ ساده. این تصویر با اجازه John Wiley & Sons از کتاب گازیروویچ استفاده شده است. (ب) نمودار $|\psi_{100}|^2$ به همراه توزیع کلاسیکی (نمودار خط‌چین) که روی آن منطبق شده است.

^{۳۰} شاید اگر توزیع کلاسیک را به صورت یک مجموعه آماری از نوسانگرها تعبیر کنید که همگی‌شان انرژی یکسانی

مساله ۱۵.۲ در حالت پایه نوسانگر هماهنگ، احتمال یافتن ذره خارج از محدوده مجاز کلاسیکی چقدر است؟ (تا سه رقم اعشار آنرا بدست آورید) راهنمایی: به بیان کلاسیکی، انرژی نوسانگر عبارت است از $E = (1/2)ka^2 = (1/2)m\omega^2 a^2$ که در آن a دامنه است. پس منطقه مجاز کلاسیکی برای نوسانگری با انرژی E از $-\sqrt{2E/m\omega^2}$ تا $+\sqrt{2E/m\omega^2}$ کشیده شده است. سری به یک جدول ریاضی زیر عنوان «توزیع نرمال» یا «تابع خطا» بزنید.

مساله ۱۶.۲ با استفاده از رابطه بازگشتی (رابطه ۸۴.۲) توابع $H_5(\xi)$ و $H_6(\xi)$ را محاسبه کنید. از این روش بهره‌برداری کنید که ضریب بالاترین توان ξ برابر است با 2^n تا با ثابت سراسری جور درآید.

مساله ۱۷.۲** در این مساله چند قضیه و اصل سودمند را درباره چند جمله‌ایهای هرمیت مورد بررسی قرار می‌دهیم (که بدون اثبات بیان می‌شوند)

(الف) براساس رابطه رودریگز داریم

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \left(\frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2} \quad [۸۶.۲]$$

از این رابطه استفاده کرده H_3 و H_4 را بدست آورید.

(ب) رابطه بازگشتی زیر H_{n+1} را بر حسب دو چند جمله‌ای هرمیت متوالی به شما می‌دهد

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2nH_{n-1}(\xi) \quad [۸۷.۲]$$

با استفاده از آن به همراه پاسخ بخش (الف) همین سوال، H_5 و H_6 را تعیین کنید.

(پ) اگر از یک چند جمله‌ای درجه n مشتق بگیرید، چند جمله‌ای از درجه $n-1$ بدست می‌آید. در مورد چند جمله‌ایهای هرمیت داریم

$$\frac{dH}{d\xi} = 2nH_{n-1}(\xi) \quad [۸۸.۲]$$

این رابطه را از طریق محاسبه H_5 و H_6 بررسی کنید.

(ت) $H_n(\xi)$ از جهتی n امین مشتق \mathcal{Z} در نقطه $\mathcal{Z} = 0$ از تابع مولد $\exp(-\mathcal{Z}^2 + 2\mathcal{Z}\xi)$ است؛ یا به بیان دیگر، $H_n(\xi)$ ضریب $\mathcal{Z}^n/n!$ در بسط سری تیلور تابع زیر است:

$$e^{-z^2+2z\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} H_n(\xi) \quad [۸۹.۲]$$

با استفاده از رابطه فوق توابع H_0 ، H_1 و H_2 را بدست آورید.

۴.۲ ذره آزاد

بار دیگر برمی گردیم به آنچه بناست ساده ترین حالت ممکن باشد (که در آن برای همه جا داریم $V(x) = 0$). به بیان کلاسیکی، آزاد بودن ذره صرفاً بدین معنی است که حرکت با سرعت ثابت انجام می شود، اما در مکانیک کوانتومی مساله به طرز شگفت آوری پیچیده و مستلزم دقت زیاد است. معادله شرودینگر مستقل از زمان به این شکل است

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad [۹۰.۲]$$

یا

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi \quad k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad [۹۱.۲]$$

تا اینجا مساله همانند آن بخشی از چاه مربعی بینهایت (رابطه ۲۱.۲) بود که در آن هم پتانسیل صفر بود؛ اما اینبار بیشتر دوست داریم به دلیلی که در ادامه خواهد آمد جواب عمومی را به شکل نمایی بنویسیم (به جای سینوس ها و کسینوس ها):

$$\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad [۹۲.۲]$$

برخلاف چاه مربعی بینهایت، اینجا خبری از شرایط مرزی برای مقید کردن مقادیر ممکن k (و در نتیجه E) نیست؛ ذره آزاد می تواند هر مقدار انرژی داشته باشد. با افزودن بستگی زمانی استاندارد، $\exp(-iEt/\hbar)$ ، به رابطه فوق می رسیم به

$$\Psi(x, t) = Ae^{ik(x - \frac{\hbar k}{2m}t)} + Be^{-ik(x + \frac{\hbar k}{2m}t)} \quad [۹۳.۲]$$

پس حالا، هر تابعی از x و t که به صورت ترکیب خاص $(x \pm vt)$ به این متغیرها بستگی داشته باشد (v ثابت است) نمایشگر موجی با نمای ثابت در جهت $\mp x$ با سرعت v است. یک نقطه

ثابت روی شکل موج (مثلاً، یک بیشینه یا کمینه) هم ارز یک مقدار ثابت شناسه و در نتیجه x و t است به طوریکه

$$x = \mp vt + \text{ثابت} \quad \text{یا} \quad x \pm vt = \text{ثابت}$$

از آنجا که هر نقطه روی شکل موج با سرعت یکسان جابجا می‌شود، شکل آن ضمن انتشار تغییر نمی‌کند. لذا عبارت اول در رابطه ۹۳.۲ نمایانگر موجی است که در حال حرکت به سمت راست بوده و عبارت دوم نمایانگر موجی است (با همان انرژی) که به سمت چپ می‌رود. ضمناً، چون این دو تنها در علامت مقابل k با هم تفاوت دارند، می‌توانیم اینطور هم بنویسیم که

$$\Psi_k(x, t) = Ae^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)} \quad [94.2]$$

و بگذاریم v منفی بماند تا به این ترتیب مورد امواجی که به سمت چپ می‌روند را هم پوشش دهیم:

$$k \equiv \pm \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \begin{cases} k > 0 \Rightarrow \text{در حال حرکت به سمت راست} \\ k < 0 \Rightarrow \text{در حال حرکت به سمت چپ} \end{cases} \quad [95.2]$$

پیداست که «حالت‌های مانای» ذره آزاد امواج منتشر شونده هستند؛ طول موج آنها عبارت است از $\lambda = 2\pi/|k|$ و بنابر فرمول دوپروی (رابطه ۳۹.۱)، حامل تکانه زیر هستند

$$p = \hbar k \quad [96.2]$$

سرعت این امواج (ضریب t روی ضریب x) عبارت است از

$$v_{\text{کوانتومی}} = \frac{\hbar|k|}{2m} = \sqrt{\frac{E}{2m}} \quad [97.2]$$

از سوی دیگر، سرعت کلاسیکی ذره آزاد با انرژی E از رابطه $E = (1/2)mv^2$ بدست می‌آید (تماماً جنبشی، زیرا $V = 0$ است)، بنابراین

$$v_{\text{کوانتومی}} = \sqrt{\frac{2E}{m}} = 2v_{\text{کلاسیکی}} \quad [۹۸.۲]$$

اینطور که پیداست تابع موج مکانیک کوانتومی با نصف سرعت آن ذره آزادی حرکت می‌کند که قرار است نشان دهنده‌اش باشد! کمی بعدتر به این باطل نما بازمی‌گردیم - مساله از این جدی‌تری هم وجود دارد که باید با آن مواجه شویم: این تابع موج قابل بهنجارش نیست! به دلیل آن که

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_k^* \Psi_k dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} 1 dx = |A|^2(\infty) \quad [۹۹.۲]$$

پس در مورد ذره آزاد، جوابهای تفکیک‌پذیر نشانگر حالت‌های فیزیکی واقعی نیستند. یک ذره آزاد نمی‌تواند در یک حالت مانا وجود داشته باشد؛ یا به بیان دیگر، چیزی تحت عنوان ذره آزاد با انرژی معلوم وجود ندارد.

اما این به آن معنی نیست که جوابهای بدست آمده هیچ فایده‌ای برایمان ندارند. آنها نقشی ریاضیاتی ایفا می‌کنند که کاملاً مستقل از تعبیر فیزیکی شان است: جواب عمومی معادله شرودینگر مستقل از زمان هنوز هم ترکیبی خطی از جوابهای تفکیک‌پذیر است (فقط این دفعه انتگرال روی متغیر پیوسته k است به جای آنکه حاصلجمعی روی شناسه گسسته n باشد):

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} dk$$

[۱۰۰.۲]

(برای سادگی، از مقدار $1/\sqrt{2\pi}$ فاکتور می‌گیریم؛ آنچه اینجا نقش ضریب c_n در رابطه ۱۷.۲ را ایفا می‌کند ترکیب $\phi(k) dk$ است.) حالا می‌توان این تابع موج را بهنجار کرد (به ازای $\phi(k)$

مناسب). اما این رابطه ضرورتاً محدوده‌ای از k ها را با خود به همراه دارد و در نتیجه گستره‌ای از انرژی‌ها و سرعت‌ها را. آن را یک بسته موج می‌نامیم.^{۳۱}

در یک مساله عمومی مکانیک کوانتومی، $\Psi(x, 0)$ را از پیش داریم و آنچه باید انجام دهیم بدست آوردن $\Psi(x, t)$ است. برای ذره آزاد، جواب معادله شرودینگر به صورت رابطه ۱۰۰.۲ است؛ تنها سوال این است که چطور باید $\phi(k)$ را تعیین کرد تا با تابع موج اولیه جور باشد:

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{ikx} dk \quad [10.1.2]$$

این مساله شناخته شده‌ای در آنالیز فوریه است، پاسخ آن از قضیه پلانشرل بدست می‌آید (مساله ۲۰.۲ را ببینید):

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} F(k) e^{ikx} dk \Leftrightarrow F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx \quad [10.2.2]$$

$F(x)$ را تبدیل فوریه $f(x)$ می‌نامند؛ $f(x)$ تبدیل فوریه معکوس $F(x)$ است (اختلاف تنها در علامت نما است). البته محدودیتی روی توابع قابل قبول وجود دارد: انتگرال‌ها باید وجود داشته باشند.^{۳۲} برای منظور ما پیش نیازهای فیزیکی تضمین می‌کنند که خود $\Psi(x, t)$ بهنجار باشد. بنابراین جواب این مساله شناخته شده مکانیک کوانتومی، ذره آزاد، عبارت است از رابطه ۱۰۰.۲ با در نظر گرفتن

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, 0) e^{-ikx} dx \quad [10.3.2]$$

^{۳۱} امواج سینوسی تا بینهایت گسترش می‌یابند برای همین قابل بهنجارش نیستند. اما برهم‌نهی چنین امواجی به تداخل می‌انجامد که جایگزیدگی و قابلیت بهنجار پذیری را ممکن می‌سازد.

^{۳۲} شرط لازم و کافی برای $f(x)$ این است که $\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx$ متناهی باشد. (در این حالت، $\int_{-\infty}^{+\infty} |F(k)|^2 dk$ هم باید متناهی بوده و در واقع هر دو انتگرال با هم برابرند. برخی این را قضیه پلانشرل می‌نامند و نامی بر رابطه ۱۰۲.۲ نمی‌گذارند.) Arfken (زیرنویس ۲۳) بخش ۱۵.۵ را ملاحظه کنید.

مثال ۶.۲ ذره آزادی که در ابتدا در محدوده $-a < x < a$ جای دارد در لحظه $t = 0$ آزاد می‌شود:

$$\Psi(x, 0) = \begin{cases} A, & -a < x < a \\ 0, & \text{بقیه نقاط} \end{cases}$$

که در آن A و a ثابت‌های حقیقی مثبت هستند. $\Psi(x, t)$ را بدست آورید.
پاسخ. ابتدا باید $\Psi(x, 0)$ به‌نحیج کنیم:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, 0)|^2 dx = |A|^2 \int_{-a}^a dx = 2a|A|^2 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2a}}$$

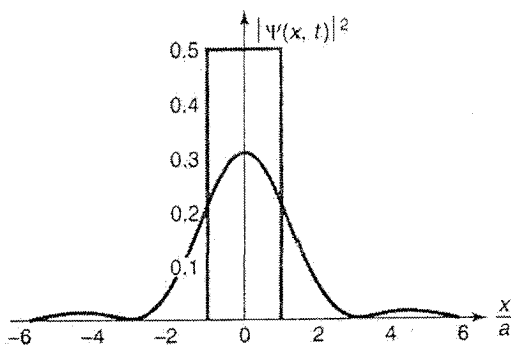
در مرحله بعد $\phi(k)$ را با استفاده از رابطه ۱۰۳.۲ محاسبه می‌کنیم

$$\begin{aligned} \phi(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{2a}} \int_{-a}^a e^{-ikx} dx = \frac{1}{2\sqrt{\pi a}} \frac{e^{-ikx}}{-ik} \Big|_{-a}^a \\ &= \frac{1}{k\sqrt{\pi a}} \left(\frac{e^{ika} - e^{-ika}}{2i} \right) = \frac{1}{\sqrt{\pi a}} \frac{\sin(ka)}{k} \end{aligned}$$

در پایان، عبارت فوق را در رابطه ۱۰۰.۲ قرار می‌دهیم:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\pi\sqrt{2a}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(ka)}{k} e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} dk \quad [۱۰۴.۲]$$

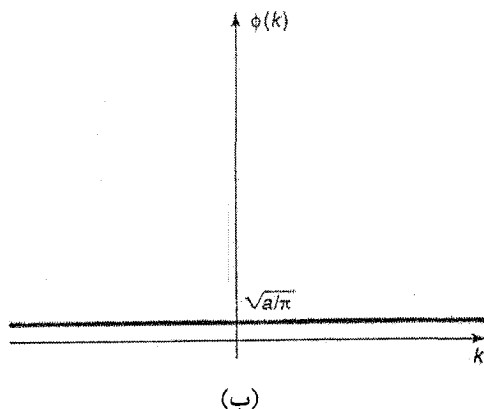
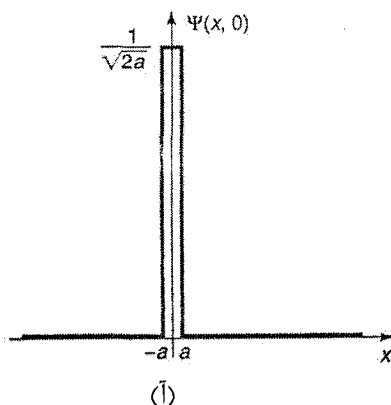
متأسفانه، نمی‌توان این انتگرال را برحسب توابع اساسی حل کرد، هرچند طبعاً می‌توان به‌طور عددی آنرا ارزیابی کرد (شکل ۸.۲). (در حقیقت، حالت‌های ارزشمند کم تعدادی وجود دارند که می‌توان در آنها انتگرال $\Psi(x, t)$ (رابطه ۱۰۰.۲) را صریحاً محاسبه کرد؛ مساله ۲۲.۲ را برای یک مثال زیبای خاص ملاحظه کنید).



شکل ۸.۲: نمودار $|\Psi(x, t)|^2$ (رابطه ۱۰.۴.۲) در لحظه $t = 0$ (مستطیل) و در لحظه $t = ma^2/\hbar$ (منحنی).

کاوش حالت‌های حدی به روشن شدن بیشتر مطلب کمک می‌کند. اگر a خیلی کوچک باشد، تابع موج آغازین یک قله جایگزیده خوب است (شکل ۹.۲.۱). این نمونه‌ای از اصل عدم قطعیت است: اگر پخش مکانی کوچک باشد، پخش تکانه (و در نتیجه k - رابطه ۹.۶.۲ را ملاحظه کنید) باید بزرگ باشد. در بیشینه دیگر (وقتی a بزرگ است) پخش مکانی گسترده می‌شود (شکل ۱۰.۲.۱) را ملاحظه کنید) و

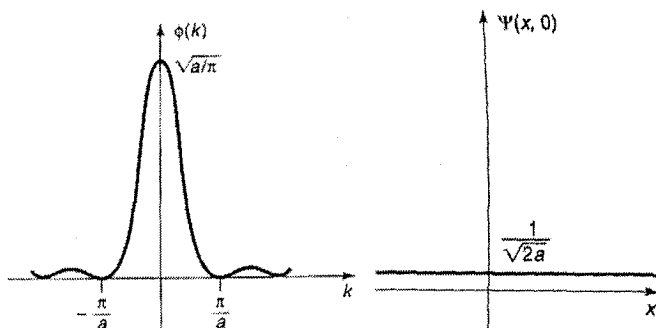
$$\phi(k) = \sqrt{\frac{a}{\pi}} \frac{\sin(ka)}{ka}$$



شکل ۹.۲: مثال ۶.۲ به ازای a کوچک. (آ) نمودار $\Psi(x, 0)$. (ب) نمودار $\phi(k)$.

باید توجه داشت که $\sin z/z$ بیشینه‌ای در $z = 0$ دارد و در $z = \pm\pi$ به صفر می‌رسد (که، در این متن، یعنی $k = \pm\pi/a$). بنابراین به ازای a های بزرگ، $\phi(k)$ قله تیزی در اطراف $k = 0$ است (شکل ۱۰.۲ ب)). اینبار تکانه خوش تعریفی دارد اما مکان آن مشخص نیست.

اکنون باز می‌گردم به پارادوکسی که قبلا به آن اشاره کردم: این امر مسلم که جواب تفکیک پذیر $\Psi_k(x, t)$ در رابطه ۹۴.۲ در مورد ذره آزاد سرعتی «اشتباه» به نسبت ذره‌ای دارد که نمایانگر آن است. به بیان دقیق، این مساله آن زمان که دریافتیم Ψ_k یک حالت فیزیکی قابل دسترس نیست ناپدید شد. با این وجود، جالب است دریابیم چگونه اطلاعات مربوط به سرعت توسط تابع موج (رابطه ۱۰۰.۲) ذره آزاد نگهداری می‌شود. ایده اساسی از این قرار است: یک بسته موج یک برهم‌نهی از توابعی سینوسی است که دامنه آن توسط Φ مدوله (پیمانه بندی) می‌شود (شکل ۱۰۲)؛ این بسته متشکل از «ریزموج‌هایی» است که درون یک «پوش» قرار گرفته‌اند. آنچه با سرعت ذره مطابق است، سرعت تک ریزموج‌ها نیست (که آنرا سرعت فاز می‌نامند) بلکه در عوض سرعت آن پوش است (سرعت گروه) - که بسته به ماهیت امواج مساوی یا کمتر از سرعت ریزموج‌هایی است که آنرا تشکیل می‌دهند. برای امواج روی یک فنر، سرعت گروه با سرعت فاز برابر است. در مورد امواج آب سرعت گروه نصف سرعت فاز است، که احتمالا وقتی سنگی را بدرون آب افکنده‌اید متوجه‌اش شده‌اید (اگر توجه‌تان را روی یک ریزموج معطوف کنید، خواهید دید که از عقب درست شده، مستقیم از میان گروه حرکت کرده و در مرز محو می‌شود در حالیکه گروه به عنوان یک کل با نصف آن سرعت منتشر می‌شود).



شکل ۱۰.۲: مثال ۴.۲ به باریک‌بینی، $\Psi(x, y)$ (ب) نمودار $\phi(k)$

آنچه باید به شما نشان دهم این است که در مورد تابع موج یک ذره آزاد در مکانیک کوانتومی، سرعت گروه دو برابر سرعت فاز است - درست مثل سرعت ذره در نمایش کلاسیکی اش.

پس مساله عبارت است از تعیین سرعت گروه یک بسته موج با شکل کلی

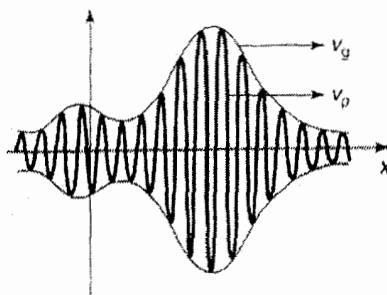
$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i(kx - \omega t)} dk$$

(در این حالت، $\omega = (\hbar k^2 / 2m)$ است، اما آنچه اکنون باید بگویم در مورد هر نوع بسته موج بدون توجه به رابطه پاشندگی آن صدق می کند - رابطه ω به صورت تابعی از k) بیایید فرض کنیم $\phi(k)$ با پهنای کم در حوالی مقدار به خصوص k_0 دارای بیشینه است. (هیچ محدودیتی درباره پهن شدن k وجود ندارد، اما آنوقت شکل چنان بسته موجی به سرعت تغییر می کند - زیرا اجزاء مختلف با سرعت های گوناگون حرکت می کنند - به همین خاطر برداشت صحیح از یک «گروه» با سرعت معلوم از بین می رود).

از آنجا که تابع تحت انتگرال جز در مجاورت k_0 در بقیه نقاط قابل صرف نظر کردن است، می توانیم به خوبی تابع $\omega(k)$ را حول آن نقطه بسط تیلور داده و تنها عبارت های عمده را نگاه داریم:

$$\omega(k) \cong \omega_0 + \omega'_0(k - k_0)$$

که در آن ω'_0 مشتق ω نسبت به k در نقطه k_0 است.



شکل ۱۱.۲: یک بسته موج. «پوش» با سرعت گروه حرکت می کند؛ «ریزموج ها» با سرعت فاز جابجا می شوند.

با تغییر متغیر از k به $k - k_0 \equiv s$ (برای متمرکز کردن انتگرال در نقطه k_0) داریم

$$\Psi(x, t) \cong \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k_0 + s) e^{i[(k_0+s)x - (\omega_0 + \omega'_0 s)t]} ds$$

در $t = 0$

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k_0 + s) e^{i(k_0+s)x} ds$$

و در زمانهای بعدی

$$\Psi(x, t) \cong \frac{1}{2\pi} e^{i(-\omega_0 t + k_0 \omega'_0 t)} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k_0 + s) e^{i(k_0+s)(x - \omega'_0 t)} ds$$

به استثنای جابجایی از x به $(x - \omega'_0 t)$ ، این انتگرال مانند انتگرال $\Psi(x, 0)$ است. از اینرو

$$\Psi(x, t) \cong e^{i(\omega_0 - k_0 \omega'_0)t} \Psi(x - \omega'_0 t, 0) \quad [۱۰.۵.۲]$$

جدا از عامل فاز (که به هیچ شکل روی $|\Psi|^2$ تاثیری نخواهد گذاشت)، بسته موج از قرار معلوم با سرعت ω'_0 جابجا می‌شود:

$$v_{\text{مروه}} = \frac{d\omega}{dk} \quad [۱۰.۶.۲]$$

(در نقطه $k = k_0$ محاسبه می‌شود)، این مغایر با سرعت فاز معمول است

$$v_{\text{فاز}} = \frac{\omega}{k} \quad [۱۰.۷.۲]$$

در این مورد، $\omega = (\hbar k^2 / 2m)$ ، پس $\omega/k = (\hbar k / 2m)$ است در حالیکه $d\omega/dk = (\hbar k / m)$ که دو برابر بزرگتر است. این نتیجه مهر تأییدی است بر این امر که این سرعت گروه بسته موج است نه سرعت فاز حالت‌های مانا که با سرعت ذره کلاسیکی مطابقت می‌کند:

$$v_{\text{کلاسیکی}} = v_{\text{مروه}} = 2v_{\text{فاز}} \quad [۱۰.۸.۲]$$

مساله ۱۸.۲ نشان دهید عبارت‌های $[Ae^{ikx} + Be^{-ikx}]$ و $[C \cos kx + D \sin kx]$ روش‌های معادلی در نوشتن تابع یکسانی از x هستند و سپس ضرائب C ، D را بر حسب A و B تعیین کنید. توضیح: در مکانیک کوانتومی، وقتی $V = 0$ است، قسمت‌های نمایی نشان دهنده امواج متحرک هستند و در بحث ذره آزاد مناسب‌اند در حالیکه سینوس‌ها و کسینوس‌ها مانسته امواج ایستاده هستند که به طور طبیعی در حالت چاه مربعی بینهایت بوجود می‌آیند. تابع را حقیقی فرض کنید.

مساله ۱۹.۲ جریان احتمال J (مساله ۱۴.۱) را برای تابع ذره آزاد رابطه ۹۴.۲ بدست آورید. جریان احتمال به کدام سمت در جریان است؟

مساله ۲۰.۲** این مساله جهت راهنمایی شما برای دستیابی به «اثباتی» از قضیه پلاتشرل طراحی شده که با نظریه عمومی سریهای فوریه در یک بازه متناهی شروع شده و امکان می‌دهد آن بازه تا بینهایت گسترش یابد.
(الف) قضیه دیریکله می‌گوید «هر» تابع $f(x)$ روی بازه $[-a, +a]$ را می‌توان به شکل یک سری فوریه بسط داد:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} [a_n \sin(n\pi x/a) + b_n \cos(n\pi x/a)]$$

نشان دهید به طور معادل می‌توان رابطه بالا را به این صورت نوشت

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{in\pi x/a}$$

رابطه c_n بر حسب a_n و b_n چیست؟

(ب) نشان دهید (با تغییر شکل جزئی مناسب لم فوریه)

$$c_n = \frac{1}{2a} \int_{-a}^{+a} f(x) e^{-in\pi x/a} dx$$

(پ) n و c_n را به نفع متغیر جدید $k = (n\pi/a)$ و $F(k) = \sqrt{2/\pi} ac_n$ حذف کنید. نشان دهید (الف) و (ب) اکنون به این صورت درمی آیند

$$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-a}^{+a} f(x) e^{-ikx} dx \quad f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} F(k) e^{ikx} \Delta k$$

که در آن Δk برابر است با نمو k از یک n تا n بعدی.

(ت) قرار دهید $a \rightarrow \infty$ تا قضیه پلانشرل را بدست آورید. توضیح: از منظر خاستگاه‌های کاملاً متفاوت‌شان، شگفت‌آور (و لذت بخش) است که این دو فرمول - یکی $F(k)$ بر حسب $f(x)$ و دیگری $f(x)$ بر حسب $F(k)$ - چنین ساختار مشابهی در حد $a \rightarrow \infty$ دارند.

مساله ۲۱.۲ ذره آزادی را در نظر بگیرید، که در ابتدا در بازه $-a < x < a$ قرار گرفته، در لحظه $t = 0$ رها می‌شود:

$$\Psi(x, 0) = A e^{-a|x|}$$

که در آن A و a ثابت‌های حقیقی مثبت هستند.

(الف) $\Psi(x, 0)$ را بهنجار کنید.

(ب) $\phi(k)$ را تعیین کنید.

(پ) $\Psi(x, t)$ را به شکل یک انتگرال تشکیل دهید.

(ت) پیرامون حالت‌های حدی (a خیلی بزرگ و A خیلی کوچک) بحث کنید.

مساله ۲۲.۲* بسته موج گاوسی. ذره آزادی دارای تابع موج اولیه زیر است

$$\Psi(x, 0) = A e^{-ax^2}$$

که در آن A و a ثابت هستند (a حقیقی و مثبت است).

(الف) $\Psi(x, 0)$ را بهنجار کنید.

(ب) $\Psi(x, t)$ را بدست آورید. راهنمایی: به انتگرال‌هایی به شکل

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(ax^2+bx)} dx$$

می‌توان از طریق «تشکیل مربع کامل» پرداخت. قرار دهید $y \equiv \sqrt{a}(x + (b/2a))$ و توجه داشته باشید که $(ax^2 + bx) = y^2 - (b^2/4a)$. پاسخ:

$$\Psi(x, t) = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4} \frac{e^{-ax^2/[1+2i\hbar at/m]}}{\sqrt{1+2i\hbar at/m}}$$

(پ) $|\Psi(x, t)|^2$ را بدست آورید. پاسخ‌تان را برحسب کمیت

$$w \equiv \sqrt{a/[1 + (2\hbar at/m)^2]}$$

بیان کنید. $|\Psi|^2$ را رسم کنید (به صورت تابعی از x)، در لحظه $t = 0$ و مجدداً برای t خیلی

بزرگ. از نظر کیفی، با زیاد شدن زمان چه اتفاقی برای $|\Psi|^2$ رخ می‌دهد؟

(ت) $\langle x \rangle$ ، $\langle p \rangle$ ، $\langle x^2 \rangle$ ، $\langle p^2 \rangle$ ، σ_x و σ_p را بدست آورید. پاسخ جزئی: $\langle p^2 \rangle = a\hbar^2$ اما احتمالاً کمی کار جبری لازم است تا آن را به این صورت ساده خلاصه کرد.

(ث) آیا اصل عدم قطعیت پابرجا می‌ماند؟ در چه لحظه‌ای سامانه به نزدیکترین حد عدم

قطعیت می‌رسد؟

۵.۲ پتانسیل تابع دلتا

۱.۵.۲ حالت‌های مقید و حالت‌های پراکنده

تاکنون با دو نوع جواب کاملاً متفاوت برای معادله شرودینگر مواجه شده‌ایم: یکی برای چاه مربعی نامتناهی و نوسانگر هماهنگ که هر دو قابل بهنجارش بوده و با یک شاخص گسسته n مشخص می‌شوند؛ یکی برای ذره آزاد که توابعش قابل بهنجارش نبوده و با متغیر پیوسته k مشخص می‌شوند. گروه اول نمایانگر حالت‌های فیزیکی واقعی است درحالی‌که گروه دوم اینطور نیست؛ اما در هر دو مورد جواب عمومی معادله شرودینگر مستقل از زمان ترکیبی خطی از حالت‌های مانا است - در مورد نوع اول این ترکیب شکل یک جمع (روی n) را به خود می‌گیرد در حالی‌که در مورد نوع دوم به صورت انتگرال (روی k) است. اهمیت فیزیکی این تمایز چیست؟

در مکانیک کلاسیک، یک پتانسیل یک بعدی مستقل از زمان می‌تواند باعث بوجود آمدن دو نوع حرکت کاملاً متفاوت شود. اگر $V(x)$ بالاتر از انرژی کل ذره (E) در هر یک از طرفین باشد (شکل ۱۲.۲ (آ)) در آنصورت ذره داخل چاه پتانسیل «گیر» می‌افتد - ذره بین نقاط بازگشت به

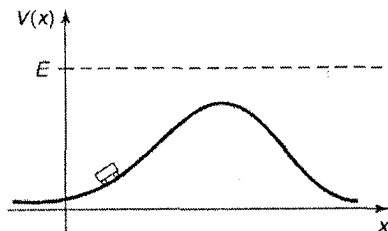
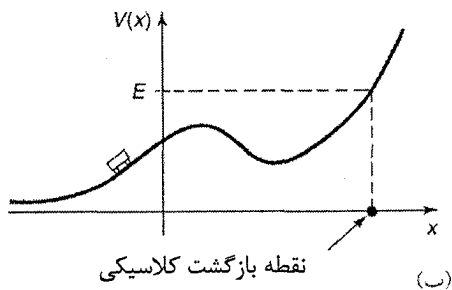
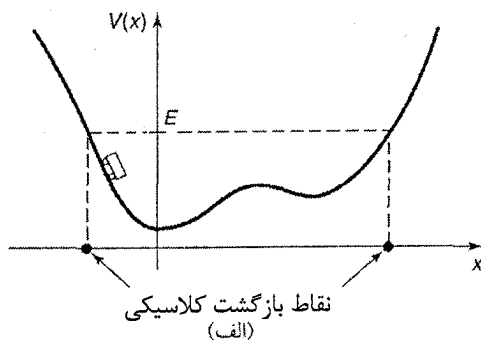
عقب و جلو می‌رود، اما نمی‌تواند بگریزد (طبعاً منوط به اینکه یک منبع انرژی اضافی مانند یک موتور در نظر بگیرید که البته موضوع بحث ما در این بخش نیست). این پیکربندی را یک حالت مقید می‌نامیم. از سوی دیگر، اگر E در یک سمت (یا هر دو) از $V(x)$ بیشتر شود آنگاه ذره از «بینهایت» وارد شده، سرعتش تحت تاثیر پتانسیل کاهش یا افزایش پیدا می‌کند و مجدداً به بینهایت بازمی‌گردد (شکل ۱۲.۲ (ب)). (نمی‌توان ذره را در این پتانسیل به دام انداخت مگر آنکه سازوکاری همانند اصطکاک وجود داشته باشد تا مقداری انرژی تلف کند، ولی باز هم این مقوله مورد بحث ما در این بخش نیست). این وضع را حالت پراکنده می‌نامیم. برخی از پتانسیل‌ها تنها حالت‌های مقید را می‌پذیرند (برای نمونه، نوسانگر هماهنگ)؛ برخی دیگر فقط حالت‌های پراکنده را مجاز می‌شمارند (مثلاً یک تپه پتانسیل بدون هیچ فرورفتگی در آن)؛ بعضی‌ها هم هر دو نوع را قبول می‌کنند که به انرژی ذره بستگی دارد.

این دو نوع جواب معادله شرودینگر دقیقاً مانسته حالت‌های مقید و پراکنده هستند. تمایز در محدوده کوانتومی واضح‌تر هم می‌شود زیرا پدیده‌ای موسوم به تونل‌زنی (که کمی بعد به آن می‌رسیم) ذره را قادر می‌سازد تا از میان هر سد پتانسیلی «نشت» کند، به همین دلیل تنها چیزی که اهمیت دارد پتانسیل در بینهایت است (شکل ۱۲.۲ (پ)):

$$\begin{cases} \text{حالت مقید} & E < [V(-\infty) \text{ و } V(+\infty)] \\ \text{حالت پراکنده} & E > [V(-\infty) \text{ یا } V(+\infty)] \end{cases} \quad [۱۰۹.۲]$$

در «واقعیت» بیشتر پتانسیل‌ها در بینهایت به سمت صفر میل می‌کنند که در آن حالت ملاک باز هم ساده‌تر می‌شود:

$$\begin{cases} \text{حالت مقید} & E < 0 \\ \text{حالت پراکنده} & E > 0 \end{cases} \quad [۱۱۰.۲]$$



شکل ۱۲.۲: (ا) یک حالت مقید. (ب) حالت‌های پراکنده. (پ) یک حالت مقید کلاسیکی، از سوی دیگر یک حالت پراکنده کوانتومی.

چون پتانسیل‌های چاه مربعی نامتناهی و نوسانگر هماهنگ به ازای $x \rightarrow \pm\infty$ به سمت بینهایت می‌روند، تنها حالات مقید را مجاز می‌شمارند؛ از آنجا که پتانسیل ذره آزاد همه جا صفر است، فقط

حالت‌های پراکنده را می‌پذیرد.^{۳۳} در این بخش (و بخش بعدی) پتانسیل‌هایی را مورد ملاحظه قرار می‌دهیم که هر دو نوع حالت را بوجود می‌آورند.

۲.۵.۲ چاه تابع دلتا

تابع دلتای دیراک قله تیز بسیار بلند و بی‌اندازه نازکی در مبدا است که مساحت آن برابر است با ۱ (شکل ۱۳.۲):

$$\delta(x) = \begin{cases} 0, & \text{اگر } x \neq 0 \\ \infty, & \text{اگر } x = 0 \end{cases} \quad \text{با} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1 \quad [111.2]$$

به بیان فنی، این اصلاً یک تابع نیست، چون در $x = 0$ متناهی نیست (ریاضیدانان آنرا تابع یا توزیع تعمیم یافته می‌نامند).^{۳۴} با این وجود، دلتای دیراک مفهوم بسیار سودمندی در فیزیک نظری به شمار می‌رود. (مثلاً، در الکترودینامیک چگالی بار یک بار نقطه‌ای به صورت تابع دلتا است.) دقت داشته باشید که $\delta(x - a)$ یک برآمدگی به مساحت ۱ در نقطه a است. اگر $\delta(x - a)$ را در تابع معمولی $f(x)$ ضرب کنید، مثل این می‌ماند که آنرا در $f(a)$ ضرب کرده باشید:

$$f(x)\delta(x - a) = f(a)\delta(x - a) \quad [112.2]$$

زیرا حاصلضرب به جز در نقطه a در بقیه نقاط صفر است. به خصوص

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x - a)dx = f(a) \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - a)dx = f(a) \quad [113.2]$$

^{۳۳} اگر فرد تیز بین و به شدت سختگیری باشید احتمالاً متوجه شده‌اید که این اصل کلی که می‌گوید $E > V_{min}$ (مسئله ۲.۲) به واقع در مورد حالت‌های پراکنده به کار نمی‌رود، زیرا آنها به هیچ وجه قابل بهنجارش نیستند. اگر این وضع برایتان خوشایند نیست، سعی کنید معادله شرودینگر را با $E < 0$ برای ذره آزاد حل کنید و دقت داشته باشید که حتی ترکیبات خطی این جوابها را هم نمی‌توان بهنجار کرد. جوابهای مربوط به انرژی مثبت خودشان روی هم مجموعه کاملی را تشکیل می‌دهند.

^{۳۴} می‌توان تابع دلتا را حد دنباله‌ای از توابع مانند مستطیل‌ها (یا مثلث‌ها) دانست که ارتفاعشان مدام زیاد و عرضشان مدام کم می‌شود.

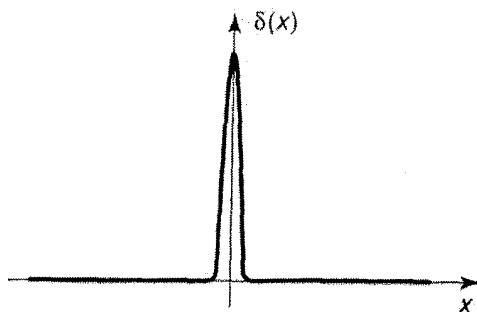
این مهم‌ترین ویژگی تابع دلتا است: این انتگرال مقدار تابع $f(x)$ در نقطه a را «بیرون می‌کشد» (البته، نیازی نیست انتگرال از $-\infty$ تا $+\infty$ باشد؛ همه آنچه اهمیت دارد این است که محدوده انتگرال شامل نقطه a باشد، که به این ترتیب به ازای هر $\epsilon > 0$ ، بازه مذکور نقاط $a - \epsilon$ و $a + \epsilon$ را هم شامل شود).

بیایید پتانسیلی به شکل زیر را در نظر بگیریم

$$V(x) = -\alpha\delta(x) \quad [۱۱۴.۲]$$

که در آن α مقدار ثابتی است.^{۳۵} این، بی شک، یک پتانسیل غیر واقعی است (مانند چاه پتانسیل نامتناهی)، اما کار کردن با آن به شکل لذت بخشی ساده است و نظریه اساسی را با کمترین حد در هم ریختگی تحلیلی توضیح می‌دهد. معادله شرودینگر چاه تابع دلتا اینگونه است.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} - \alpha\delta(x)\psi = E\psi \quad [۱۱۵.۲]$$



شکل ۱۳.۲: تابع دلتای دیراک (رابطه ۱۱۱.۲).

^{۳۵} خود تابع دلتا دارای واحد طول/۱ است (رابطه ۱۱۱.۲ را ملاحظه کنید)، از اینرو α دارای بعد طول \times انرژی می‌باشد.

این پتانسیل هر دو جواب حالت مقید ($E < 0$) و پراکنده ($E > 0$) را بدست می‌دهد.

نخست نگاهی به حالت‌های مقید می‌اندازیم. در ناحیه $x < 0$ داریم $V(x) = 0$ ، بنابراین

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = \kappa^2\psi \quad [۱۱۶.۲]$$

که در آن

$$\kappa \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \quad [۱۱۷.۲]$$

(E طبق فرض منفی است، برای همین κ حقیقی و مثبت است.) جواب عمومی رابطه ۱۱۶.۲ برابر است با

$$\psi(x) = Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x} \quad [۱۱۸.۲]$$

اما عبارت اول به ازای $x \rightarrow -\infty$ خیلی بزرگ می‌شود، به این دلیل باید قرار دهیم $A = 0$:

$$\psi(x) = Be^{\kappa x} \quad (x < 0) \quad [۱۱۹.۲]$$

در ناحیه $x > 0$ ، $V(x)$ صفر است و جواب عمومی به شکل $F\exp(-\kappa x) + G\exp(\kappa x)$ درمی‌آید؛ اینبار این عبارت دوم است که به ازای $x \rightarrow +\infty$ بسیار بزرگ می‌شود، از اینرو

$$\psi(x) = Fe^{-\kappa x} \quad (x > 0) \quad [۱۲۰.۲]$$

فقط می‌ماند کوک زدن این دو تابع به یکدیگر با استفاده از شرایط مرزی مناسب در $x = 0$. قبلاً شرایط مرزی استاندارد برای ψ را ذکر کردیم:

۱. ψ همیشه پیوسته باشد؛

[۱۲۱.۲]

۲. $d\psi/dx$ به جز در نقاطی که پتانسیل بینهایت است، پیوسته باشد.

در این حالت اولین شرط مرزی می‌گوید $F = B$ ، پس

$$\psi(x) = \begin{cases} Be^{\kappa x} & (x \leq 0) \\ Be^{-\kappa x} & (x \geq 0) \end{cases} \quad [۱۲۲.۲]$$

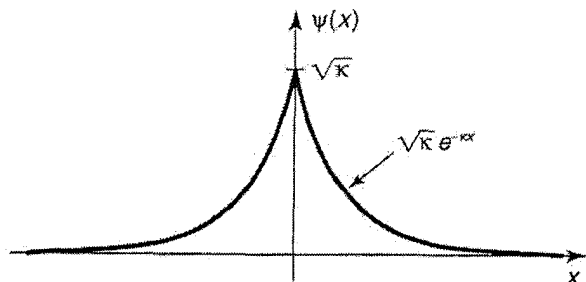
$\psi(x)$ در شکل ۱۴.۲ رسم شده است. دومین شرط مرزی چیزی در اختیارمان نمی‌گذارد؛ این (مانند چاه مربعی نامتناهی) حالت خاصی است که در آن V در نقطه اتصال نامتناهی است و از روی نمودار هم واضح است که این تابع در $x = 0$ تاب دارد. به علاوه، در این مرحله تابع دلتا اصلاً وارد ماجرا نمی‌شود. اینطور که پیداست تابع دلتا باید ناپیوستگی در مشتق ψ در $x = 0$ را مشخص کند. حالا نشانان می‌دهم که اینکار چطور انجام می‌شود و به عنوان یک نتیجه فرعی خواهیم دید که چرا $d\psi/dx$ بر حسب معمول پیوسته است.

ایده عبارت است از انتگرال‌گیری از معادله شرودینگر، از $-\epsilon$ تا $+\epsilon$ و آنگاه حدگیری در حالی که $\epsilon \rightarrow 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \frac{d^2\psi}{dx^2} dx + \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} V(x)\psi(x) dx = E \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \psi(x) dx \quad [۱۲۳.۲]$$

انتگرال اول چیزی نیست به جز $d\psi/dx$ که در دو نقطه انتهایی عددیابی می‌شود؛ انتگرال آخر در حد $\epsilon \rightarrow 0$ صفر است، زیرا این مساحت باریکه‌ای است که طولش در حال ناپدید شدن و ارتفاعش هم متناهی است. لذا

$$\Delta\left(\frac{d\psi}{dx}\right) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{d\psi}{dx} \Big|_{-\epsilon} - \frac{d\psi}{dx} \Big|_{+\epsilon} \right) = \frac{2m}{\hbar^2} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} V(x)\psi(x) dx \quad [۱۲۴.۲]$$



شکل ۱۴.۲: تابع موج حالت مقید برای پتانسیل تابع دلتا (رابطه ۱۲۲.۲).

به طور معمول، حد عبارت سمت راست مجدداً صفر است و در نتیجه $d\psi/dx$ پیوسته است. اما هنگامیکه $V(x)$ روی مرز نامتناهی است، این استدلال دیگر به کار نمی‌آید. به خصوص، اگر $V(x) = -\alpha\delta(x)$ ، رابطه ۱۱۳.۲ نتیجه می‌دهد

$$\Delta\left(\frac{d\psi}{dx}\right) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(0) \quad [125.2]$$

برای حالت فعلی (رابطه ۱۲۲.۲) داریم

$$\begin{cases} d\psi/dx = -B\kappa e^{-\kappa x}, & (x > 0), & d\psi/dx|_+ = -B\kappa \\ d\psi/dx = +B\kappa e^{+\kappa x}, & (x < 0), & d\psi/dx|_- = +B\kappa \end{cases}$$

و در نتیجه $\Delta(d\psi/dx) = -2B\kappa$. به علاوه $\psi(0) = B$ است. به این ترتیب رابطه ۱۲۵.۲ می‌گوید

$$\kappa = \frac{m\alpha}{\hbar^2} \quad [126.2]$$

و انرژی مجاز (رابطه ۱۱۷.۲) برابر است با

$$E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \quad [127.2]$$

در نهایت، ψ را بهنجار می‌کنیم:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 2|B|^2 \int_0^{\infty} e^{-2\kappa x} dx = \frac{|B|^2}{\kappa} = 1$$

بنابراین (برای راحتی، با انتخاب ریشه مثبت حقیقی):

$$B = \sqrt{\kappa} = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} \quad [128.2]$$

از قرار معلوم چاه تابع دلتا بدون توجه به «قدرت» α آن دقیقاً یک حالت مقید دارد:

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-m\alpha|x|/\hbar^2} \quad E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \quad [129.2]$$

حالت‌های پراکنده با $E > 0$ چه می‌شوند؟ برای $x < 0$ معادله شرودینگر اینطور می‌شود

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = -k^2\psi$$

که در آن

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad [۱۳۰.۲]$$

حقیقی و مثبت است. جواب عمومی عبارت است از

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad [۱۳۱.۲]$$

و اینبار نمی‌توانیم هیچیک از عبارات را غیر محتمل بدانیم، چون هیچ کدامشان بی‌اندازه بزرگ نمی‌شود. به طور مشابه، برای $x < 0$ داریم

$$\psi(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} \quad [۱۳۲.۲]$$

پیوستگی $\psi(x)$ در $x = 0$ مستلزم آن است که

$$F + G = A + B \quad [۱۳۳.۲]$$

مشتقات بدین شرح‌اند

$$\begin{cases} d\psi/dx = ik(Fe^{ikx} - Ge^{-ikx}), & (x > 0), & d\psi/dx|_+ = ik(F - G) \\ d\psi/dx = ik(Ae^{ikx} - Be^{-ikx}), & (x < 0), & d\psi/dx|_- = ik(A - B) \end{cases}$$

و در نتیجه $\Delta(d\psi/dx) = ik(F - G - A + B)$. در این میان، $\psi(0) = (A + B)$ است،

پس دومین شرط مرزی (رابطه ۱۰۷.۲) می‌گوید

$$ik(F - G - A + B) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A + B) \quad [۱۳۴.۲]$$

یا به طور فشرده‌تر

$$F - G = A(1 + 2i\beta) - B(1 - 2i\beta) \quad \beta \equiv \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} \quad [۱۳۵.۲]$$

با تحمیل شرایط مرزی، دو رابطه (روابط ۱۳۳.۲ و ۱۳۵.۲) با چهار مجهول (G, F, B, A) برآیمان می‌ماند - پنج تا، اگر k را هم حساب کنید. بهنجارش کمکی نمی‌کند - این یک حالت قابل بهنجارش نیست. پس شاید بهتر باشد همینجا توقف کنیم و اهمیت فیزیکی این ثوابت مختلف را بررسی کنیم. به خاطر بیاورید که $\exp(ikx)$ (زمانیکه با عامل وابسته به زمان $\exp(-iEt/\hbar)$ جفت می‌شود) موجب منتشر شدن تابع موج به سمت راست و $\exp(-ikx)$ به انتشار تابع موج به سمت چپ منجر می‌شود. نتیجه اینکه A (در رابطه ۱۳۱.۲) دامنه موجی است که از سمت چپ می‌آید، B دامنه موجی است که به سمت چپ باز می‌گردد، F (در رابطه ۱۳۲.۲) دامنه موجی است که به سمت راست بیرون می‌رود و G دامنه موجی است که از سمت راست به داخل می‌آید (شکل ۱۵.۲). در یک آزمایش پراکندگی نوعی، ذرات را از یک جهت شلیک می‌کنند - مثلاً فرض کنید از سمت چپ. در این حالت، دامنه موج فرودی از سمت راست صفر خواهد بود:

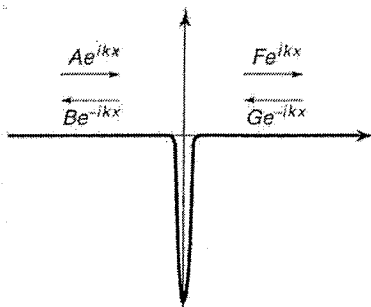
$$G = 0 \quad [۱۳۶.۲] \quad (\text{برای پراکندگی از سمت چپ})$$

به این ترتیب A دامنه موج فرودی، B دامنه موج بازتابیده و F دامنه موج عبوری است.

با حل روابط ۱۳۳.۲ و ۱۳۵.۲ برای F و B داریم

$$B = \frac{i\beta}{1 - i\beta} A, \quad F = \frac{1}{1 - i\beta} A \quad [۱۳۷.۲]$$

(اگر بخواهید پراکندگی را از سمت راست بررسی کنید، قرار دهید $A = 0$ ؛ در آنصورت G دامنه ورودی، F دامنه بازتابی و B دامنه عبوری می‌شود).



شکل ۱۵.۲: پراکندگی از یک چاه تابع دلتا.

خب، احتمال یافتن ذره در مکان مشخص از $|\Psi|^2$ بدست می‌آید، بنابراین احتمال نسبی^{۳۶} آنکه یک ذره فروودی به عقب بازتابیده شود برابر است با

$$R \equiv \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{\beta^2}{1 + \beta^2} \quad [۱۳۸.۲]$$

R ضریب بازتاب است. (اگر باریکه‌ای از ذرات در اختیار داشته باشید، این ضریب به شما می‌گوید چه کسری از ذرات فروودی به عقب وامی‌جهند.) در این بین، احتمال عبور از روی ضریب عبور بدست می‌آید

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \beta^2} \quad [۱۳۹.۲]$$

طبعاً، جمع این احتمالات باید ۱ باشد - و اینطور هم هست:

$$R + T = 1 \quad [۱۴۰.۲]$$

دقت کنید که R و T توابعی از β هستند و در نتیجه از E (روابط ۱۱۲.۲ و ۱۱۷.۲)

$$R = \frac{1}{1 + (2\hbar^2 E / m\alpha^2)}, \quad T = \frac{1}{1 + (m\alpha^2 / 2\hbar^2 E)} \quad [۱۴۱.۲]$$

هر چه انرژی بیشتر باشد، احتمال عبور هم بیشتر است (که منطقی هم به نظر می‌رسد). مطالب زیادی مطرح شدند، اما هنوز یک مساله اساسی دشوار در کار است که نمی‌توانیم به تمامی آنرا نادیده بگیریم: این توابع موج پراکنده قابل بهنجارش نیستند، پس آنها در حقیقت نمایانگر حالت‌های ممکن ذره نیستند. با این حال راه حل این مساله را می‌دانیم: باید ترکیبی خطی از این حالت‌های مانای غیر قابل بهنجارش درست کنیم، همانطور که در مورد ذره آزاد کردیم -

^{۳۶} این یک تابع موج قابل بهنجارش نیست، به همین خاطر احتمال قطعی یافتن ذره در مکان مشخص به درستی تعریف نمی‌شود؛ با این وجود، نسبت احتمال امواج فروودی و بازتابیده معنی‌دار است. در پاراگراف بعدی بیشتر در اینباره بحث شده است.

ذرات فیزیک واقعی توسط بسته‌های موج برآیند نمایش داده می‌شوند. در هر حال بهتر است رو راست باشیم که از نظر اصولی این کار در عمل فرایند در هم و برهمی است و در این مرحله بهترین کار این است که مساله را به یک کامپیوتر واگذار کنیم.^{۳۷} در این بین، از آنجا که درست کردن تابع موج قابل بهنجارش برای ذره آزاد بدون شمول طیفی از انرژی‌ها غیر ممکن است، R و T را باید به عنوان احتمال‌های تقریبی بازتاب و عبور برای ذراتی در همسایگی E تعبیر کرد.

ضمناً، شاید عجیب به نظر تان برسد که توانستیم یک مساله اصیل وابسته به زمان (ذره وارد می‌شود، از روی پتانسیل پراکنده شده و به سمت بینهایت حرکت می‌کند) را با استفاده از حالت‌های مانا حل کنیم. هر چه باشد، $1/l$ (در رابطه‌های ۱۳۱.۲ و ۱۳۲.۲) به وضوح تابع سینوسی مستقل از زمان پیچیده‌ایست که (با دامنه ثابت) از هر دو سمت به طرف بینهایت کشیده می‌شود. به علاوه، با تحمیل شرایط مرزی مناسب روی این تابع، توانستیم احتمالی را تعیین کنیم که یک ذره (که با یک بسته موج جایگزیده نمایش داده می‌شود) از یک پتانسیل واجهیده یا عبور کرده است. گمان می‌کنم اعجاز ریاضی در پس این مورد این حقیقت است که با گرفتن ترکیبات خطی از حالت‌هایی که در تمام فضا پخش شده‌اند و با لحاظ کردن بستگی زمانی اساساً کم اهمیت، می‌توانیم توابع موجی بسازیم که حول یک نقطه (در حال حرکت) متمرکز بوده و در زمان رفتار بسیار پیچیده‌ای دارند (مساله ۴۳.۲ را ملاحظه کنید).

تا وقتی روابط مربوطه را در جدول در اختیار داریم، بیائید نگاهی بیندازیم به مورد سد تابع دلتا (شکل ۱۶.۲). همه آنچه قاعدتاً باید انجام دهیم عبارت است از تغییر علامت α . با این کار طبیعتاً حالت مقید از بین می‌رود (مساله ۲.۲). از سوی دیگر، ضرائب بازتاب و عبور که تنها به α^2 بستگی دارند، بدون تغییر می‌مانند. بیان این نکته عجیب و غیر عادی است که ذره حتی ممکن است مانند رد شدن از یک دیوار از میان سد عبور کند! به بیان کلاسیکی، ذره، بدون توجه به انرژی‌اش، نمی‌تواند از سدی به ارتفاع بینهایت عبور کند. در حقیقت، مسائل پراکندگی کلاسیکی تا اندازه‌ای

^{۳۷} بررسی‌های عددی توابع موجی که از چاه‌ها و سدها پراکنده می‌شوند ساختاری فوق‌العاده ارزشمند را آشکار می‌سازند. تحلیل کلاسیکی در مقاله H. M. Schey, A. Goldberg و J. L. Schwartz در مجله *American Journal of Physics*, 35, 177 (1967) snap.sellfile.ir می‌توان روی وب پیدا کرد.

کسل کننده‌اند: اگر $E > V_{max}$ باشد در آن صورت $T = 1$ و $R = 0$ است. ذره قطعاً می‌تواند از سد عبور کند؛ اگر $E < V_{max}$ باشد آنگاه $T = 0$ و $R = 1$ است. آنقدر تا بالای تپه می‌آید تا انرژی‌اش تمام شود و سپس از همان راهی که آمده بازمی‌گردد. مسائل پراکندگی کوانتومی سرگرم کننده‌تر و بامعنی‌تر است؛ احتمال غیر صفری وجود دارد که ذره حتی وقتی که $E < V_{max}$ است بتواند از میان پتانسیل عبور کند. این پدیده را تونل زنی می‌نامیم؛ تونل زنی سازوکاری است که بخش عمده‌ای از الکترونیک را تحقق می‌بخشد. چه رسد به پیشرفت‌های اخیر در ریزبینی. برعکس، اگر $E > V_{max}$ باشد، احتمال آن می‌رود که ذره از سد واجهد. در هر حال توصیه نمی‌کنم ماشین‌تان را به سمت یک پرتگاه برانید که شاید یکی از آن استثنای کوانتومی رخ دهد و شما نجات پیدا کنید (مساله ۳۵.۲ را ملاحظه کنید).

مساله ۲۳.۲ * مقدار عددی انتگرال‌های زیر را بدست آورید.

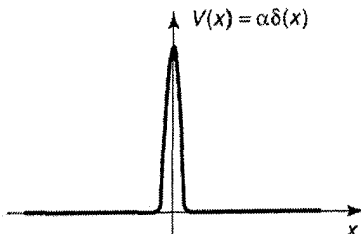
(الف) $\int_{-3}^{+1} (x^3 - 3x^2 + 2x - 1) \delta(x + 2) dx$

(ب) $\int_0^{\infty} [\cos(3x) + 2] \delta(x - \pi) dx$

(پ) $\int_{-1}^{+1} \exp(|x| + 3) \delta(x - 2) dx$

مساله ۲۴.۲ می‌گوئیم دو عبارت $D_1(x)$ و $D_2(x)$ شامل توابع دلتا با هم برابرند اگر

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) D_1(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) D_2(x) dx$$



شکل ۱۶.۲: سد تابع دلتا.

برای هر تابع (معمولی) $f(x)$.

(الف) نشان دهید

$$\delta(cx) = \frac{1}{|c|} \delta(x) \quad [۱۴۲.۲]$$

(ب) فرض کنید $\theta(x)$ تابع پله‌ای باشد:

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & \text{اگر } x > 0 \\ 0, & \text{اگر } x < 0 \end{cases} \quad [۱۴۳.۲]$$

(در حالت نادری که این تابع به واقع آنجا اهمیت دارد، $\theta(0)$ را $1/2$ می‌گیریم.) نشان دهید

$$d\theta/dx = \delta(x)$$

مساله ۲۵.۲** اصل عدم قطعیت را برای تابع موج در رابطه ۱۲۹.۲ بررسی کنید. راهنمایی:

محاسبه $\langle p^2 \rangle$ مستلزم دقت زیاد است، زیرا مشتق ψ دارای پله ناپیوستگی در $x = 0$ است. از نتیجه مساله ۲۴.۲ (ب) استفاده کنید. پاسخ جزئی: $\langle p^2 \rangle = (m\alpha^2/\hbar)^2$.

مساله ۲۶.۲** تبدیل فوری $\delta(x)$ چیست؟ از قضیه پلانشرل استفاده کرده و نشان دهید که

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk \quad [۱۴۴.۲]$$

توضیح: این رابطه منجر به سخته ناقص ریاضیدانان محترم می‌شود. با آنکه این انتگرال به ازای $x = 0$ آشکارا بینهایت می‌شود، اما وقتی هم که $x \neq 0$ باشد همگرا نمی‌شود (به سمت صفر یا هر مقدار دیگر نمی‌رود)، زیرا انتگرال برای همیشه نوسان می‌کند. راههایی برای اصلاح کردنش وجود دارد (برای نمونه، می‌توانید انتگرال را از $-L$ تا $+L$ بگیرید و انتگرال رابطه ۱۴۴.۲ را به صورت مقدار میانگین این انتگرال متناهی به ازای $\infty \rightarrow L$ تعبیر کنید). خاستگاه این مساله از آنجاست که تابع دلتا بایستگی‌های قضیه پلانشرل (انتگرال‌پذیری مجذوری) را بر آورده

نمی‌سازد (زیرنویس ۳۳ را ببینید). علیرغم این مساله، رابطه ۱۴۴.۲ می‌تواند بسیار سودمند باشد اگر با احتیاط از آن استفاده کنید.

مساله ۲۷.۲ * پتانسیل دلتای دوگانه را در نظر بگیرید

$$V(x) = -\alpha[\delta(x+a) + \delta(x-a)]$$

که در آن a و α ثابت‌های مثبت هستند.

(الف) نمودار این پتانسیل را رسم کنید.

(ب) $\phi(k)$ را تعیین کنید. انرژی‌های مجاز را به ازای $\alpha = \hbar^2/ma$ و $\alpha = \hbar^2/4ma$ بدست

آورده و توابع موج را رسم کنید.

مساله ۲۸.۲ ** ضریب عبور را برای پتانسیل مساله ۲۷.۲ بدست آورید.

۶.۲ چاه مربعی متناهی

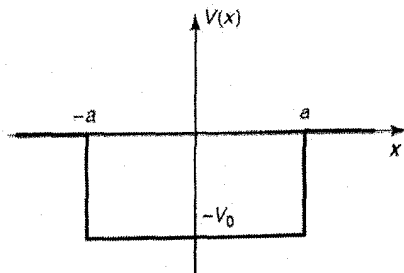
به عنوان آخرین مثال، چاه مربعی متناهی را در نظر بگیرید

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & -a \leq x \leq a \\ 0, & |x| > a \end{cases} \quad [۱۴۵.۲]$$

که در آن V_0 یک ثابت (مثبت) است (شکل ۱۷.۲). همانند چاه تابع دلتا، این پتانسیل هر دو

حالت مقید (با $E < 0$) و پراکنده (با $E > 0$) را می‌پذیرد. نخست نگاهی می‌اندازیم به

حالت‌های مقید.



شکل ۱۷.۲: چاه مربعی متناهی (رابطه ۱۴۵.۲).

در ناحیه $x < -a$ پتانسیل صفر است، بنابراین معادله شرودینگر عبارت می‌شود از

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = \kappa^2\psi$$

که در آن

$$\kappa \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \quad [۱۴۶.۲]$$

حقیقی و مثبت است. جواب عمومی عبارت است از $\psi(x) = A\exp(-\kappa x) + B\exp(\kappa x)$ ، اما عبارت اول (به ازای $x \rightarrow -\infty$) بسیار بزرگ می‌شود، به همین دلیل جواب فیزیکی قابل قبول (مانند قبل - رابطه ۱۱۹.۲ را ملاحظه کنید) به این شکل است

$$\psi(x) = Be^{\kappa x} \quad x < -a \quad [۱۴۷.۲]$$

در ناحیه $-a < x < a$ داریم $V(x) = -V_0$ و معادله شرودینگر هم به این صورت است

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} - V_0\psi = E\psi \quad \text{یا} \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = -l^2\psi$$

که در آن

$$l \equiv \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar} \quad [۱۴۸.۲]$$

اگرچه E منفی است، اما برای یک حالت مقید، باید بزرگتر از $-V_0$ باشد، از روی اصل سابق

$E > V_{min}$ (مساله ۲.۲)؛ پس l هم حقیقی و مثبت است. جواب عمومی عبارت است از^{۳۸}

$$\psi(x) = C \sin(lx) + D \cos(lx) \quad (-a < x < a) \quad [۱۴۹.۲]$$

^{۳۸} اگر مایل باشید می‌توانید جواب عمومی را به شکل نمایی $(C'e^{ilx} + D'e^{-ilx})$ بنویسید. این به همان نتیجه پایانی منجر می‌شود، اما از آنجا که پتانسیل متقارن است می‌دانیم که جوابها باید یا زوج یا فرد باشند، همچنین نمادگذاری سینوس / کسینوس ما را قادر می‌سازد تا این نمادگذاری کنیم.

که در آن C و D ثابت‌های دلخواه هستند. در نهایت، در ناحیه $x > a$ پتانسیل باز هم صفر است؛ جواب عمومی به شکل $\psi(x) = F \exp(-\kappa x) + G \exp(\kappa x)$ است، اما عبارت دوم به ازای $x \rightarrow \infty$ بسیار بزرگ می‌شود، بنابراین تنها عبارت زیر می‌ماند

$$\psi(x) = F e^{-\kappa x} \quad x > a \quad [150.2]$$

گام بعدی اعمال کردن شرایط مرزی است: ψ و $d\psi/dx$ در $-a$ و $+a$ پیوسته هستند. اما می‌توانیم با یادآوری این مساله که پتانسیل مذکور تابعی زوج است کمی در زمان صرفه‌جویی کنیم، لذا می‌توانیم اینطور فرض کنیم که کلیت این امر که جواب‌ها یا فرد هستند یا زوج تغییر نمی‌کند (مساله ۱.۲ (پ)). مزیت این فرض این است که تنها باید شرایط مرزی را روی یک سمت تحمیل کنیم (مثلا سمت $+a$)؛ طرف دیگر به این ترتیب به طور خودکار تعیین می‌شود زیرا $\psi(-x) = \pm \psi(x)$. من جواب‌های زوج را محاسبه می‌کنم؛ شما می‌بایست جواب‌های فرد را در مساله ۲۹.۲ بدست آورید. کسینوس تابعی زوج است (و سینوس تابعی فرد)، پس بدنبال جواب‌هایی به شکل زیر می‌گردم

$$\psi(x) = \begin{cases} F e^{-\kappa x}, & x > a \\ D \cos(lx), & 0 < x < a \\ \psi(-x), & x < 0 \end{cases} \quad [151.2]$$

پیوستگی $\psi(x)$ در $x = a$ حاکی از آن است که

$$F e^{-\kappa a} = D \cos(la) \quad [152.2]$$

و پیوستگی $d\psi/dx$ هم بیانگر آن است که

$$-\kappa F e^{-\kappa a} = -l D \sin(la) \quad [153.2]$$

با تقسیم رابطه ۱۳۵.۲ به ۱۳۴.۲ می‌رسیم به

$$\kappa = l \tan(la) \quad [154.2]$$

این رابطه فرمولی برای انرژی‌های مجاز است زیرا κ و l هر دو توابعی از E هستند. برای حل براساس E ، ارزشمند است که از نشانه‌گذاری مناسب‌تری استفاده کنیم. فرض کنید

$$z \equiv la \quad z_0 \equiv \frac{a}{\hbar} \sqrt{2mV_0} \quad [۱۵۵.۲]$$

براساس معادله ۱۴۶.۲ و ۱۴۸.۲، داریم $(\kappa^2 + l^2) = 2mV_0/\hbar^2$ ، پس $\kappa a = \sqrt{z_0^2 - z^2}$ و رابطه ۱۵۴.۲ به این صورت درمی‌آید

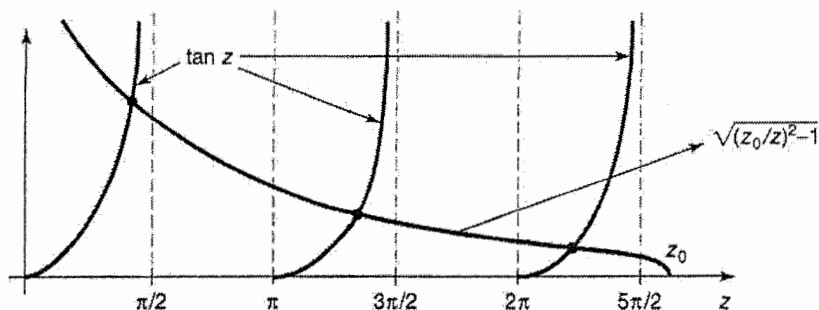
$$\tan z = \sqrt{(z_0/z)^2 - 1} \quad [۱۵۶.۲]$$

عبارت فوق رابطه‌ای غیر جبری برحسب z (و در نتیجه E) به عنوان تابعی از z_0 است (که معیاری از «اندازه» چاه است). این رابطه را می‌توان با استفاده از ماشین حساب یا کامپیوتر یا از روی نمودار با رسم $\tan z$ و $\sqrt{(z_0/z)^2 - 1}$ روی یک صفحه شطرنجی یکسان و جستجوی نقاط تقاطع به صورت عددی حل کرد (شکل ۱۸.۲).

دو حالت حدی که برایمان اهمیت دارند بدین شرح‌اند:

۱. چاه پهن عمیق. اگر z_0 خیلی بزرگ باشد، نقاط تقاطع تنها کمی پائین‌تر از $n\pi/2$ ، با n های فرد یافت می‌شوند؛ نتیجه آنکه

$$E_n + V_0 \cong \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m(2a)^2} \quad [۱۵۷.۲]$$



شکل ۱۸.۲: حل نموداری رابطه ۱۵۶.۲ به ازای $z_0 = 8$ (حالت‌های زوج).

اما $(E_n + V_0)$ انرژی بالاتر از کف چاه است و در سمت راست هم دقیقاً انرژی‌های چاه مربعی نامتناهی را برای چاهی به عرض $2a$ داریم (رابطه ۲۷.۲ را ببینید) - یا به بیان دقیقتر، نصف آنها، زیرا n فرد است. (البته بقیه همانطور که در مساله ۲۹.۲ خواهید دید، از توابع موج فرد بدست می‌آیند). لذا چاه مربعی متناهی به ازای $V_0 \rightarrow \infty$ ، چاه مربعی بینهایت را مورد بازبینی قرار می‌دهد؛ با این حال، به ازای هر V_0 متناهی تنها تعداد محدودی حالت مقید وجود دارد.

۲. چاه کم عمق باریک. با افزایش z_0 ، حالت‌های مقید کمتر و کمتری وجود خواهند داشت تا آنکه بالاخره (به ازای $z_0 < \pi/2$) که پائین‌ترین حالت فرد در آن نمایان می‌شود) فقط یکی باقی می‌ماند. شایان ذکر است که همواره یک حالت مقید، بدون توجه به اینکه چاه چقدر «ضعیف» می‌شود، وجود دارد.

اگر علاقمندید، با کمال میل اجازه می‌دهم ψ (رابطه ۱۵۱.۲) را بهنجار کنید (مساله ۳۰.۲ را ملاحظه کنید)، اما اکنون می‌خواهم به حالت‌های پراکنده بپردازم ($E > 0$). در سمت چپ، جائیکه $V(x) = 0$ است داریم

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad x < -a \quad [158.2]$$

که در آن (مثل همیشه)

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad [159.2]$$

درون چاه، جائیکه $V(x) = -V_0$ داریم

$$\psi(x) = C \sin(lx) + D \cos(lx) \quad -a < x < a \quad [160.2]$$

که مانند قبل،

$$l \equiv \frac{\sqrt{2E(E + V_0)}}{\hbar} \quad [161.2]$$

برای سمت راست، با فرض آنکه هیچ موجی وارد این ناحیه نمی‌شود، داریم

$$\psi(x) = Fe^{lkx} \quad [162.2]$$

اینجا A دامنه ورودی، B دامنه بازتابیده و F دامنه عبوری است.^{۳۹}

چهار حالت مقید وجود دارد: پیوستگی $\psi(x)$ در $-a$ حاکی از آن است که

$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = -C \sin(la) + D \cos(la) \quad [۱۶۳.۲]$$

پیوستگی $d\psi/dx$ در $-a$ می‌دهد

$$ik[e^{-ika} - Be^{ika}] = l[C \cos(la) + D \sin(la)] \quad [۱۶۴.۲]$$

پیوستگی $\psi(x)$ در $+a$ به نتیجه زیر می‌انجامد

$$C \sin(la) + D \cos(la) = Fe^{ika} \quad [۱۶۵.۲]$$

و پیوستگی $d\psi/dx$ در $+a$ هم مستلزم عبارت زیر است

$$l[C \cos(la) - D \sin(la)] = ikFe^{ika} \quad [۱۶۶.۲]$$

می‌توانیم با استفاده از دو رابطه از این مجموعه ضرائب C و D را حذف کرده و باقیمانده را برحسب B و F حل کنیم (مساله ۳۲.۲ را ببینید):

$$B = i \frac{\sin(2la)}{2kl} (l^2 - k^2) F \quad [۱۶۷.۲]$$

$$F = \frac{e^{-2ika} A}{\cos(2la) - i \frac{(k^2 + l^2)}{2kl} \sin(2la)} \quad [۱۶۸.۲]$$

ضریب عبور $T = |F|^2/|A|^2$ که برحسب متغیرهای اصلی بیان می‌شود، از رابط زیر بدست می‌آید

$$T^{-1} = 1 + \frac{V_0^2}{4E(E + V_0)} \sin^2 \left(\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)} \right) \quad [۱۶۹.۲]$$

^{۳۹} می‌توانستیم از توابع زوج و فرد استفاده کنیم، اما مساله پراکندگی ذرات نامتقارن است، چراکه امواج تنها از یک سو می‌آیند و نمادگذاری نمایی هم (که نه در snap.sellfile.ir این متن طبیعی تر است.

توجه داشته باشید که هر جا شناسه سینوس صفر باشد در آنصورت $T = 1$ است (چاه «فرانما» می‌شود)، مثل این است که بگوئیم

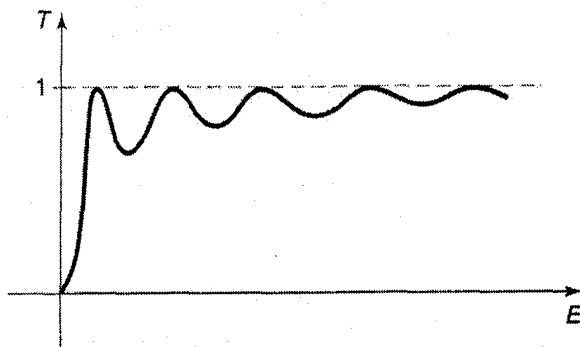
$$\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(E_n + V_0)} = n\pi \quad [۱۷۰.۲]$$

که در آن n می‌تواند هر عدد صحیحی باشد. پس، انرژی‌ها به ازای عبور کامل به این ترتیب بدست می‌آیند

$$E_n + V_0 = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m(2a)^2} \quad [۱۷۱.۲]$$

که اتفاقاً همان انرژی‌های مجاز چاه مربعی نامتناهی هستند. T در شکل ۱۹.۲ به صورت تابعی از انرژی رسم شده است.^{۴۰}

مساله ۲۹.۲* توابع موج حالت مقید فرد را برای چاه مربعی متناهی بدست آورید. رابطه غیر جبری انرژی‌های مجاز را استخراج کرده و آنها را راه نمودار حل کنید. دو حالت حدی را بررسی کنید. آیا همواره دست کم یک حالت مقید فرد وجود دارد؟



شکل ۱۹.۲: ضریب عبور به صورت تابعی از انرژی (رابطه ۱۶۹.۲).

^{۴۰} این پدیده شایان توجه در آزمایشگاه، به شکل اثر رامسائر-تاوژند مشاهده شده است. برای یک بحث روشن‌گرانه کتاب *Quantum Mechanics* اثر Richard W. Robinett (انتشارات دانشگاه آکسفورد، ۱۹۹۷)، بخش ۱.۴.۱۲ را ملاحظه کنید.

مساله ۳۰.۲ $\psi(x)$ را در رابطه ۱۵۱.۲ بهنجار کنید تا ثابت‌های D و F بدست آیند.

مساله ۳۱.۲ تابع دلتای دیراک را می‌توان به عنوان چارچوبی حدی برای مستطیلی به مساحت ۱ دانست که ارتفاعش به سمت بینهایت و پهنایش به سمت صفر می‌رود. نشان دهید چاه تابع دلتا (رابطه ۱۱۴.۲) در حالتی که $x_0 \rightarrow \infty$ می‌رود، پتانسیل «ضعیفی» است (حتی اگر عمقش بینهایت باشد). انرژی حالت مقید را برای پتانسیل تابع دلتا با فرض آنکه این تابع حد یک چاه پتانسیل متناهی است تعیین کنید. بررسی کنید که پاسختان با معادله ۱۲۹.۲ سازگاری داشته باشد. همچنین نشان دهید رابطه ۱۶۹.۲ در حد مناسب به رابطه ۱۴۱.۲ ساده می‌شود.

مساله ۳۲.۲ روابط ۱۶۷.۲ و ۱۶۹.۲ را استخراج کنید. راهنمایی: از روابط ۱۶۵.۲ و ۱۶۶.۲ برای یافتن C و D برحسب F استفاده کنید:

$$C = \left[\sin(la) + i \frac{k}{l} \cos(la) \right] e^{ika_F}$$

$$D = \left[\cos(la) - i \frac{k}{l} \sin(la) \right] e^{ika_F}$$

این دو رابطه را در روابط ۱۶۳.۲ و ۱۶۴.۲ قرار دهید. ضریب عبور را تعیین کرده و رابطه ۱۶۹.۲ را تصدیق کنید.

مساله ۳۳.۲** ضریب عبور را برای یک سد مستطیلی تعیین کنید (مانند رابطه ۱۴۵.۲ است با این اختلاف که در ناحیه $-a < x < a$ داریم $V(x) = +V_0 > 0$). سه حالت $E < V_0$ ، $E = V_0$ و $E > V_0$ را جداگانه مورد بررسی قرار دهید (دقت کنید که تابع موج درون سد با این سه حالت فرق می‌کند). پاسخ جزئی: برای حالت $E < V_0$ داریم^{۴۱}

$$T^{-1} = 1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2 \left(\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \right)$$

مساله ۳۴.۲ * پتانسیل تابع «پله‌ای» را در نظر بگیرید

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0 \\ V_0, & x > 0 \end{cases}$$

(الف) ضریب بازتاب را برای حالت $E < V_0$ محاسبه کرده و پاسخ را توضیح دهید.

(ب) ضریب بارتاب را برای $E > V_0$ بدست آورید.

(پ) برای پتانسیلی مانند این که در سمت راست سد به صفر میل نمی‌کند، ضریب عبور به سادگی $|F|^2/|A|^2$ نیست که در آن A دامنه ورودی و F دامنه عبوری باشد، زیرا موج عبوری با سرعت متفاوتی حرکت می‌کند. نشان دهید

$$T = \sqrt{\frac{E - V_0}{E}} \frac{|F|^2}{|A|^2} \quad [۱۷۲.۲]$$

که در آن $E > V_0$ است. راهنمایی: می‌توانید این رابطه را از روی رابطه ۹۸.۲ بدست آورید یا - به بیان کلی‌تر، اما با آموزندگی کمتر - از روی جریان احتمال (مساله ۱۹.۲). T به ازای $E < V_0$ چقدر است؟

(ت) ضریب عبور را برای پتانسیل پله‌ای به ازای $E > V_0$ محاسبه کرده و رابطه $T + R = 1$ را بررسی کنید.

مساله ۳۵.۲ ذره‌ای به جرم m و انرژی جنبشی $E > 0$ به یک افت پتانسیل ناگهانی V_0 نزدیک می‌شود (شکل ۲۰.۲)

(الف) با فرض آنکه $E = V_0/3$ باشد، احتمال آنکه ذره به عقب «بازتابیده» شود چیست؟ راهنمایی: این درست مانند مساله ۳۴.۲ است، با این فرق که پله در اینجا رو به پائین می‌رود به جای بالا.

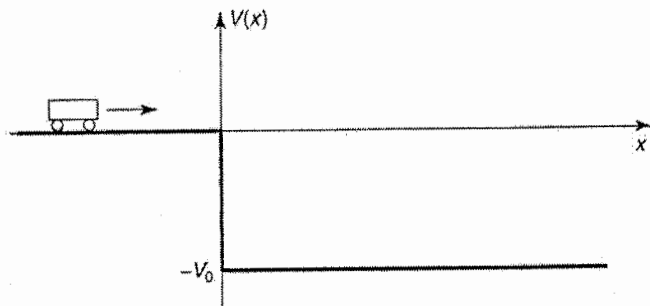
(ب) شکل را از آن جهت رسم کردم تا شما را به فکر ماشینی بیندازم که به یک پرتگاه نزدیک می‌شود، اما واضح است که احتمال «عقبگرد» از لبه یک پرتگاه بسیار کوچکتر از آنچه‌ای است که در قسمت (الف) بدست آوردید - مگر آنکه باگز بانی خرگوش والت دیسنی باشید! توضیح

دهید چرا این پتانسیل به درستی نمایانگر یک پرتگاه نیست. راهنمایی: در شکل ۲۰.۲ انرژی پتانسیل ماشین به طور ناپیوسته هنگام عبور از $x = 0$ ، به $-V_0$ افت می‌کند؛ آیا این برای یک ماشین در حال سقوط درست خواهد بود؟

(پ) وقتی یک نوترون آزاد وارد هسته می‌شود، با افتی ناگهانی در انرژی پتانسیل مواجه می‌شود که از مقدار $V_0 = 0$ در خارج ناگهان به 12 MeV (میلیون الکترون ولت) در داخل می‌رسد. نوترونی را فرض کنید که با انرژی پتانسیل 4 MeV از یک رویداد شکافتی گسیل شده و به چنین هسته‌ای برخورد می‌کند. احتمال آنکه نوترون جذب شده و در نتیجه شکافت دیگری را سبب شود چقدر است؟ راهنمایی: احتمال بازتاب را در قسمت (الف) محاسبه کردید؛ از رابطه $T = 1 - R$ برای بدست آوردن احتمال عبور از سطح استفاده کنید.

مسائل دیگری برای فصل ۲

مساله ۳۶.۲ معادله شرودینگر مستقل از زمان با شرایط مرزی مناسب را برای چاه مربعی نامتناهی که در مبدا قرار گرفته ($V(x) = 0$ در $-a < x < +a$ و $V(x) = \infty$ در بقیه نقاط) حل کنید. بررسی کنید که انرژی‌های مجازتان با آنهایی که من بدست آوردم (رابطه ۲۷.۲) همخوانی داشته باشند و اطمینان حاصل کنید که با جاگذاری $(x+a)/2 \rightarrow x$ می‌توان ψ های شما را از روی ψ های من بدست آورد (رابطه ۲۸.۲) (و بازبهنجارش مناسب). سه جواب اول خود را رسم کرده و با شکل ۲.۲ مقایسه کنید. دقت کنید که پهنای چاه اکنون $2a$ است.



مساله ۳۷.۲ ذره‌ای در چاه مربعی نامتناهی (رابطه ۱۹.۲) دارای تابع موج اولیه‌ای به شکل زیر است

$$\Psi(x, 0) = A \sin^3(\pi x/a) \quad (0 \leq x \leq a)$$

به صورت تابعی از زمان، ثابت A را تعیین کنید، $\Psi(x, t)$ را بدست آورید و $\langle x \rangle$ را محاسبه کنید. مقدار چشمداشتی انرژی چیست؟ راهنمایی: می‌توان $\sin^n \theta$ و $\cos^n \theta$ را با تکرار کاربرد فرمول‌های جمع مثلثاتی به ترکیبات خطی $\sin(m\theta)$ و $\cos(m\theta)$ که در آن $m = 1, 2, \dots, n$ ساده کرد.

مساله ۳۸.۲* ذره‌ای به جرم m در حالت پایه چاه مربعی نامتناهی (رابطه ۱۹.۲) قرار دارد. ناگهان چاه به دو برابر اندازه اصلی خود گسترده می‌شود - دیوار سمت راست از a به $2a$ می‌رود - به طوریکه تابع موج (برای لحظه‌ای) بدون تغییر می‌ماند. حال انرژی ذره را اندازه می‌گیریم.

- (الف) محتمل‌ترین نتیجه چیست؟ احتمال بدست آمدن آن چقدر است؟
 (ب) محتمل‌ترین نتیجه بعد از آن چیست و احتمال بدست آمدن آن چقدر است؟
 (پ) مقدار چشمداشتی انرژی چیست؟ راهنمایی: اگر خود را مواجه با یک سری نامتناهی یافتید، روش دیگری را امتحان کنید.

مساله ۳۹.۲ (الف) نشان دهید تابع موج یک ذره در چاه مربعی نامتناهی پس از زمان احیای کوانتومی $T = 4ma^2/\pi\hbar$ به شکل اصلی‌اش باز می‌گردد. به عبارت دیگر: برای هر حالتی (نه فقط یک حالت مانا $\Psi(x, T) = \Psi(x, 0)$ است.

(ب) زمان احیای کلاسیکی برای ذره‌ای با انرژی E که بین دو دیواره به پس و پیش وامي‌جهد چیست؟

(پ) به ازای چه مقدار انرژی دو زمان احیا با هم برابر می‌شوند؟^{۴۲}

مساله ۴۰.۲ ذره‌ای به جرم m در پتانسیل زیر قرار دارد

$$V(x) = \begin{cases} \infty & (x < 0) \\ -32\hbar^2/ma^2 & (0 \leq x \leq a) \\ 0 & (x > a) \end{cases}$$

(الف) چه تعداد حالت مانا وجود دارد؟

(ب) در حالت مانایی که واجد بالاترین انرژی است، احتمال آنکه ذره در بیرون چاه ($x > a$) یافت شود چقدر است؟ پاسخ: 0.542، پس هرچند ذره «مقید» به چاه است، احتمال آنکه در خارج یافت شود بیشتر از داخل است!

مساله ۴۱.۲ ذره‌ای به جرم m در پتانسیل نوسانگر هماهنگ (رابطه ۴۳.۲) ابتدا در حالت زیر قرار دارد

$$\Psi(x, 0) = A \left(1 - 2\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right)^2 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

که در آن A مقدار ثابتی است.

(الف) مقدار چشمداشتی انرژی چیست؟

(ب) پس از گذشت زمان T تابع موج عبارت است از

$$\Psi(x, T) = B \left(1 + 2\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right)^2 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

که در آن B مقدار ثابتی است. کمترین مقدار ممکن T چقدر است؟

مساله ۴۲.۲ انرژی‌های مجاز نوسانگر هماهنگ نیمه با پتانسیل زیر را بدست آورید

^{۴۲} این نکته که زمان‌های احیای کلاسیکی و کوانتومی ارتباط آشکاری با یکدیگر ندارند (و اینکه زمان کوانتومی حتی

به انرژی هم ربطی ندارد) باطل‌نمای عجیبی است؛ مقاله Daniel Styer در مجله *Am. J. Phys.* 69, 56 (2001) را

$$V(x) = \begin{cases} (1/2)m\omega^2 x^2, & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$$

(این پتانسیل برای مثال نشان دهنده فنری است که می‌توان آنرا کشید، اما فشرده نمی‌شود). راهنمایی: حل مساله مستلزم تفکر دقیق است، با این حال کمی محاسبه هم لازم دارد.

مساله ۴۳.۲** در مساله ۲۲.۲ بسته موج ذره آزاد گاوسی مانا را بررسی کردید. اکنون همان

مساله را برای بسته موج گاوسی متحرکی حل کنید که تابع موج اولیه آن عبارت است از

$$\Psi(x, 0) = A e^{-ax^2} e^{ilx}$$

که در آن l یک ثابت حقیقی است.

مساله ۴۴.۲** معادله شرودینگر مستقل از زمان را برای چاه مربعی نامتناهی واقع در مرکز با

یک سد تابع دلتا در وسط حل کنید:

$$V(x) = \begin{cases} a\delta(x), & -a < x < +a \\ \infty & |a| \geq a \end{cases}$$

توابع موج زوج و فرد را جداگانه بررسی کنید. خودتان را برای بهنجار کردن آنها به زحمت نیندازید. انرژی‌های مجاز را (چنانچه لازم است به طور گرافیکی) بدست آورید. چگونه آنها را با انرژی‌ها در غیاب تابع دلتا مقایسه می‌کنید؟ توضیح دهید چرا جواب‌های فرد تحت تاثیر تابع دلتا قرار نمی‌گیرند. حالت‌های حدی $\alpha \rightarrow 0$ و $\alpha \rightarrow \infty$ را تفسیر کنید.

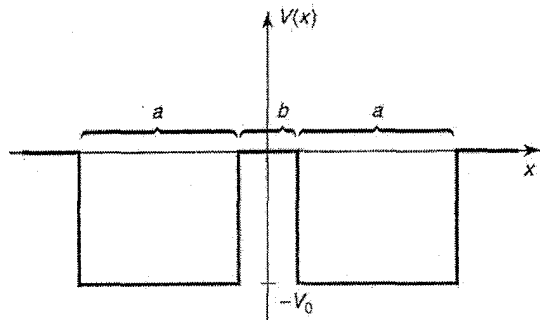
مساله ۴۵.۲ اگر دو (یا تعداد بیشتری) جواب مجزا^{۴۳} برای معادله شرودینگر دارای انرژی

یکسان E باشند، می‌گوئیم حالت‌های مذکور تبهگن هستند. مثلاً، حالت‌های ذره آزاد تبهگنی دوگانه دارند - یک جواب که نشان دهنده حرکت به سمت راست است و جواب دیگری که نشان دهنده حرکت به سمت چپ می‌باشد. اما هرگز با جواب‌های تبهگن قابل بهنجارش مواجه

^{۴۳} اگر دو جواب تنها در یک ضریب عددی با هم تفاوت داشته باشند (به طوریکه، وقتی بهنجار می‌شوند تفاوت شان تنها در یک عامل فاز $e^{i\phi}$ باشد) آن دو نمایانگر حالت فیزیکی یکسانی هستند و به این مفهوم جواب‌های مجزایی محسوب نمی‌شوند. به بیان فنی، منظور از «مجزا» دقیقاً «مستقل خطی» است.

نشده‌ایم که این هم تصادفی نیست. قضیه زیر را ثابت کنید: در یک بعد^{۴۴} هیچ حالت مقید تبهگنی وجود ندارد. راهنمایی: فرض کنید دو جواب، ψ_1 و ψ_2 ، داریم که انرژی هر دو E است. معادله شرودینگر ψ_1 را در ψ_2 و معادله شرودینگر ψ_2 را در ψ_1 ضرب کنید. سپس آن دو را از هم کسر کنید تا نشان دهید $(\psi_2 d\psi_1/dx - \psi_1 d\psi_2/dx)$ مقدار ثابتی است. از این نکته استفاده کنید که برای جواب‌های قابل بهنجارش در $\pm\infty$ داریم $\psi \rightarrow 0$ تا نشان دهید این ثابت در واقع صفر است. سرانجام به این نتیجه برسید که ψ_2 مضربی از ψ_1 است و در نتیجه جوابها مجزا نیستند.

مساله ۴۶.۲ مهره‌ای به وزن m را در نظر بگیرید که بدون اصطکاک بدور حلقه‌ای سیمی با محیط L می‌لغزد. (این درست مانند ذره آزاد است با این تفاوت که $\psi(x) = \psi(x + L)$.) حالت‌های مقید (با بهنجارش مناسب) و انرژی‌های مجاز مانسته آنها را بدست آورید. دقت کنید که دو جواب مستقل برای هر انرژی E_n وجود دارد - که مانسته دوران ساعتگرد و پاد ساعتگرد هستند؛ آنها را $\psi_n^+(x)$ و $\psi_n^-(x)$ بنامید. از منظر قضیه مساله ۴۵.۲، این تبهگنی را چگونه توجیه می‌کنید (چرا آن قضیه در این مورد ناکام می‌ماند)؟



شکل ۲۱.۲: چاه مربعی دو گانه (مساله ۴۷.۲).

^{۴۴} در ابعاد بالاتر چنین تبهگنی بسیار متداول است که در فصل ۴ به آن می‌رسیم. اینطور فرض کنید که پتانسیل متشکل از قطعات جدا از هم نیست که با مناطقی که در آنها $V = \infty$ است از هم جدا شده‌اند - برای نمونه، دو چاه مربعی نامتناهی منزوی به حالت‌های مقید تبهگنی دارند. snap.sellfile.ir در یکی از دو چاه قرار دارد.

مساله ۴۷.۲** توجه: این یک مساله کاملاً کیفی است - مجاز به انجام هیچ محاسبه‌ای نیستید! پتانسیل «چاه مربعی دوگانه» را در نظر بگیرید (شکل ۲۱.۲) فرض کنید V_0 عمق و a عرض آن هر دو ثابت بوده و آنقدر بزرگ هستند که برای آن چندین حالت مقید وجود دارد.

(الف) تابع موج حالت پایه ψ_1 و نخستین برانگیختگی ψ_2 را (۱) برای حالت $b = 0$ ، (۲) برای $a \approx b$ و (۳) برای $a \gg b$ رسم کنید.

(ب) به طور کیفی، انرژی‌های مانسته (E_1 و E_2) به ازای میل کردن b از ۰ به سمت ∞ چگونه تغییر می‌کنند؟ نمودارهای $E_1(b)$ و $E_2(b)$ را یکجا رسم کنید.

(پ) چاه دوگانه مدل یک بعدی بسیار ابتدایی برای پتانسیلی است که الکترون در یک مولکول دو اتمی درگیر آن است (دو چاه نمایانگر نیروی جاذبه هسته‌ها هستند). اگر هسته‌ها برای حرکت آزاد باشند، پیکربندی متناسب با کمینه انرژی را اختیار می‌کنند. با در نظر گرفتن برداشت‌های شما در قسمت (ب)، آیا الکترون مایل است هسته‌ها را کنار هم نگاه دارد یا آنها را از هم دور کند؟ (طبیعتاً یک دفع درون هسته‌ای هم وجود دارد که باید آنرا مد نظر قرار داد، اما آن مساله جداگانه‌ای است).

مساله ۴۸.۲ در مساله ۷.۲ (ت) مقدار چشمداشتی انرژی را از طریق جمع زدن سری‌های رابطه ۳۹.۲ بدست آوردید، اما به شما هشدار دادم (در زیرنویس ۱۴) که سعی نکنید این کار را به روش قدیمی، $\langle H \rangle = \int \Psi(x, 0)^* H \Psi(x, 0)$ ، انجام دهید زیرا ناپیوستگی مشتق اول $\Psi(x, 0)$ یک مشتق دوم نامعلوم و پر دردسر پس می‌دهد. در حقیقت، می‌توانستید آن مساله را با استفاده از انتگرال‌گیری جزء به جزء حل کنید، اما تابع دلتای دیراک روش مناسب‌تری برای پرداختن به چنین ناهنجاریهایی را موجب می‌شود.

(الف) مشتق اول $\Psi(x, 0)$ (در مساله ۷.۲) را محاسبه کرده و جواب را برحسب تابع پله‌ای، $\theta(x - a/2)$ ، که در رابطه ۱۴۳.۲ تعریف شده بدست آورید. (نگران نقاط انتهایی نباشید - فقط محدوده داخلی $0 < x < a$ را در نظر بگیرید).

(ب) از نتیجه مساله ۲۴.۲ (ب) برای نوشتن مشتق دوم $\Psi(x, 0)$ بر حسب تابع دلتا بهره‌برداری کنید.

(پ) انتگرال $\int \Psi(x, 0)^* H \Psi(x, 0)$ را محاسبه کرده و اطمینان حاصل کنید که همان جواب پیشین را بدست می‌آورید.

مساله ۴۹.۲ ***

(الف) نشان دهید

$$\Psi(x, t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}\left(x^2 + \frac{a^2}{2}(1 + e^{-2i\omega t}) + \frac{i\hbar t}{m} - 2axe^{-i\omega t}\right)\right]$$

در معادله شرودینگر مستقل از زمان برای پتانسیل نوسانگر هماهنگ (رابطه ۴۳.۲) صدق می‌کند. اینجا a می‌تواند هر ثابت حقیقی (در ابعاد طول)^{۴۵} باشد

(ب) $|\Psi(x, t)|^2$ را بدست آورده و حرکت بسته موج را توصیف کنید.

(پ) $\langle x \rangle$ و $\langle p \rangle$ را یافته و بررسی کنید که آیا قضیه اهرنفتست (رابطه ۳۸.۱) برقرار است.

مساله ۵۰.۲ ** چاه تابع دلتای متحرک را در نظر بگیرید:

$$V(x, t) = -\alpha\delta(x - vt)$$

که در آن v سرعت (ثابت) چاه است.

(الف) نشان دهید معادله شرودینگر وابسته به زمان جواب دقیق زیر را می‌پذیرد

$$\Psi(x, t) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-m\alpha|x-vt|/\hbar^2} e^{-i[(E+(1/2)mv^2)t-mvx]/\hbar}$$

که در آن $E = -m\alpha^2/2\hbar^2$ عبارت است از انرژی حالت مقید تابع دلتای مانا. راهنمایی: این رابطه را در معادله قرار داده و آنرا بررسی کنید! از نتیجه مساله ۲۴.۲ (ب) استفاده کنید.

^{۴۵} این نمونه بی‌نظیری از یک جواب کاملاً نهایی و قطعی برای معادله شرودینگر مستقل از زمان است که توسط خود

(ب) مقدار چشمداشتی هامیلتونی در اینحالت را بدست آورده و نتیجه را تفسیر کنید.

مساله ۵۱.۲ *** پتانسیل زیر را در نظر بگیرید

$$V(x) = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{m} \operatorname{sech}^2(ax)$$

که در آن a ثابت مثبت و sech مخفف «سکانت هیپربولیک» است.

(الف) این پتانسیل را رسم کنید.

(ب) نشان دهید این پتانسیل حالت مقیدی به شکل زیر دارد

$$\psi_0(x) = A \operatorname{sech}(ax)$$

انرژی را بدست آورید. ψ_0 را بهنجار کرده و نمودار آنرا رسم کنید.

(پ) نشان دهید تابع

$$\psi_k(x) = A \left(\frac{ik - a \tanh(ax)}{ik + a} \right) e^{ikx}$$

که در آن $k \equiv \sqrt{2mE}/\hbar$ است، مثل همیشه) معادله شرودینگر را برای هر انرژی (مثبتی) حل می کند. چون وقتی $x \rightarrow -\infty$ میل می کند $\tanh x \rightarrow -1$ می رود، به ازای مقادیر بزرگ و منفی x داریم:

$$\psi_k \approx A e^{ikx}$$

پس، این رابطه موجی را نشان می دهد که از سمت چپ بدون هیچ موج بازتابیده همراهی می آید (یعنی، هیچ عبارت e^{-ikx} ندارد). شکل مجانبی $\psi_k(x)$ در x های بزرگ مثبت چگونه است؟ R و T این پتانسیل را بدست آورید. توضیح: این مساله مثال معروفی از پتانسیل بدون بازتاب است - هر ذره فرودی، بدون توجه به انرژی اش، کاملاً عبور می کند.^{۴۶}

مساله ۵۲.۲ ماتریس پراکندگی. نظریه پراکندگی شیوه بسیار روشنی را در نحوه پرداختن

به پتانسیل های جایگزیده دلخواه تعمیم می دهد (شکل ۲۲.۲). در سمت چپ (ناحیه ۱)

$V(x) = 0$ است، از اینرو

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad [173.2]$$

برای سمت راست (ناحیه ۳)، $V(x)$ باز هم صفر است، بنابراین

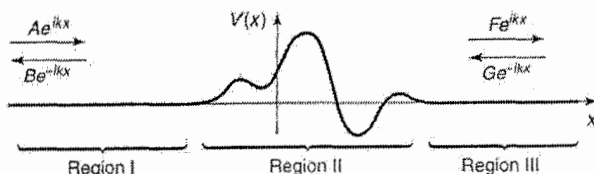
$$\psi(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} \quad [174.2]$$

طبیعتاً در فضای میانی (ناحیه ۲) نمی‌توانم چیزی راجع به ψ به شما بگویم تا آن زمان که پتانسیل را معلوم کنید، اما چون معادله شرودینگر یک معادله دیفرانسیل خطی از مرتبه دو است، جواب عمومی باید شکل کلی زیر را داشته باشد.

که در آن $f(x)$ و $g(x)$ دو جواب ویژه مستقل از هم خطی هستند.^{۴۷} چهار شرط مرزی خواهیم داشت (دو تا از آنها نواحی ۱ و ۲ و دو تای دیگر نواحی ۲ و ۳ را به هم مرتبط می‌کنند). دو تا از این شرایط را می‌توان برای حذف C و D و دو تای دیگر را نیز برای «حل کردن» B و F برحسب A و G مورد استفاده قرار داد:

$$B = S_{11}A + S_{12}G, F = S_{21}A + S_{22}G$$

$$\psi(x) = Cf(x) + Dg(x)$$



شکل ۲۲.۲: پراکندگی از یک پتانسیل جایگزیده دلخواه ($V(x) = 0$ به جز در ناحیه ۲)؛ مساله ۵۲.۲.

^{۴۷} هر کتابی را که مایلید درباره معادلات دیفرانسیل ببینید - برای مثال، کتاب *Ordinary Differential Equations with Numerical Techniques* نوشته J. L. Van Iwaarden (انتشارات Harcourt Brace Jovanovich، سن دیه گو، ۱۹۸۵) فصل ۳.

چهار ضریب S_{ij} که به k (و در نتیجه به E) وابسته‌اند، یک ماتریس 2×2 را تشکیل می‌دهند که ماتریس پراکندگی (یا ماتریس S) خوانده می‌شود. ماتریس S دامنه‌های خروجی (B و F) را برحسب دامنه‌های ورودی (A و G) در اختیار تان می‌گذارد.

$$\begin{pmatrix} B \\ F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix} \quad [175.2]$$

در حالت نوعی پراکندگی از سمت چپ، $G = 0$ است، پس ضرائب بازتاب و عبور عبارتند از

$$R_l = \left. \frac{|B|^2}{|A|^2} \right|_{G=0} = |S_{11}|^2 \quad T_l = \left. \frac{|F|^2}{|A|^2} \right|_{G=0} = |S_{21}|^2 \quad [176.2]$$

برای پراکندگی از سمت راست، $A = 0$ است و

$$R_r = \left. \frac{|B|^2}{|G|^2} \right|_{A=0} = |S_{22}|^2 \quad T_r = \left. \frac{|F|^2}{|G|^2} \right|_{A=0} = |S_{12}|^2 \quad [177.2]$$

(الف) ماتریس S را برای پراکندگی از یک چاه مربعی (رابطه ۱۱۴.۲) تشکیل دهید.

(ب) ماتریس S را برای چاه مربعی متناهی (رابطه ۱۴۵.۲) تشکیل دهید. راهنمایی: اگر با دقت

از تقارن مساله استفاده کنید، برای یافتن پاسخ این بخش هیچ کار جدیدی نیاز ندارید.

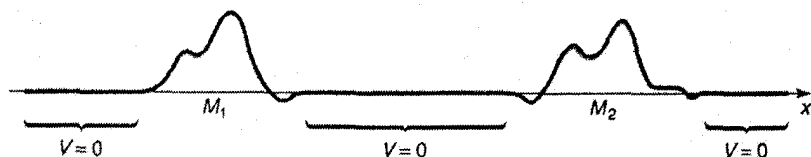
مساله ۵۳.۲*** ماتریس انتقال. ماتریس S (مساله ۵۲.۲) دامنه‌های خروجی (B و F) را

برحسب دامنه‌های ورودی (A و G) به شما می‌دهد - رابطه ۱۷۵.۲. برای بعضی مقاصد مناسبتر

است تا با ماتریس انتقال، M ، کار کرد که دامنه‌های سمت راست پتانسیل (F و G) را برحسب

دامنه‌های سمت چپ (A و B) بدست می‌دهد:

$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \quad [178.2]$$



شکل ۲۳.۲: پتانسیلی متشکل از دو بخش مجزا از هم (مساله ۵۳.۲).

(الف) چهار مولفه ماتریس M برحسب مولفه‌های ماتریس S و برعکس را بدست آورد. T_I ، R_I و T_r و R_r (روابط ۱۷۶.۲ و ۱۷۷.۲) را برحسب مولفه‌های ماتریس M بدست آورید.

(ب) فرض کنید پتانسیلی در اختیار دارید که متشکل از دو قسمت جدا شده است (شکل ۲۳.۲). نشان دهید ماتریس M برای این ترکیب برابر است با حاصلضرب دو ماتریس M هر قسمت به طور جداگانه:

$$M = M_2 M_1 \quad [179.2]$$

(این به وضوح به هر تعداد بخش دلخواه قابل تعمیم است و کارایی ماتریس M را می‌رساند).

(پ) ماتریس M را برای پراکندگی از یک تک پتانسیل تابع دلتا در نقطه a بدست آورید:

$$V(x) = -\alpha \delta(x - a)$$

(ت) با استفاده از روش قسمت (ب)، ماتریس M را برای پراکندگی از تابع دلتای دوگانه بدست

$$V(x) = -\alpha [\delta(x + a) + \delta(x - a)] \quad \text{آورید.}$$

ضریب عبور برای این پتانسیل چقدر است؟

مساله ۵۴.۲ انرژی حالت پایه نوسانگر هماهنگ را تا پنج رقم اعشار از روش «دم جنباندن»

بدست آورید. به عبارت دیگر، رابطه ۷۲.۲ را به صورت عددی حل کنید و در آن آنقدر K را تغییر دهید تا تابع موجی بدست آورید که در \hbar های بزرگ به صفر میل می‌کند.

مساله ۵۵.۲ سه انرژی برانگیخته نخست (تا پنج رقم اعشار) نوسانگر هماهنگ را از روش دم

جنبانی (مساله ۵۴.۲) بدست آورید. برای نخستین (و سومین) حالت برانگیخته تابع موج اولیه صفر و مشتق آن ۱ است.

مساله ۵۶.۲ چهار انرژی مجاز نخست (تا پنج رقم اعشار) چاه مربعی نامتناهی را از روش دم

جنبانی بدست آورید. راهنمایی: به مساله ۵۴.۲ بازگشته و تغییرات مناسب را به معادله دیفرانسیل اعمال کنید. اینبار شرط لازم این است که تابع در ۱ برابر با صفر باشد.

فصل

سوم

صورت بندی ریاضی

۱.۳ فضای هیلبرت

در دو فصل گذشته چند ویژگی شایان توجه سامانه‌های کوانتومی ساده را به اجمال مورد بررسی قرار دادیم. برخی از اینها ویژگی‌های «پیش‌بینی نشده» پتانسیل‌های خاص هستند (مثلاً، فاصله یکنواخت سطوح انرژی نوسانگر هماهنگ)، اما به نظر می‌رسد بقیه کلی‌ترند، همچنین اثبات آنها یکبار برای همیشه (برای نمونه، اصل عدم قطعیت و تعامد حالت‌های مانا) خالی از فایده نیست. هدف این فصل عبارت است از نوریزی نظریه در شکلی توانمندتر و سپس به خاطر سپاری آن در ذهن. آنچه اینجا می‌خوانید خیلی هم جدید نیست؛ به بیان دقیق‌تر، ایده عبارت است از ایجاد مفهومی منسجم از آنچه تاکنون در حالت‌های خاص بدست آورده‌ایم.

نظریه کوانتومی مبتنی بر دو ساختار است: توابع موج و عملگرها. حالت یک سامانه با تابع موج آن نشان داده می‌شود، مشاهده‌پذیرها با عملگرها نشان داده می‌شوند. به بیان ریاضی، توابع موج شرایط معرف بردارهای انتزاعی را برآورده کرده و عملگرها نیز به صورت تبدیلات خطی روی آنها عمل می‌کنند. از اینرو زبان طبیعی مکانیک کوانتومی جبر خطی است.^۱

اما به گمانم این شکلی از جبر خطی نیست که مستقیماً با آشنا کنید. در فضای N بعدی ساده‌ترین کار این است که بردار را با $|\alpha\rangle$ نشان دهیم، یک N تایی از مولفه‌ها، $\{\alpha_n\}$ ، نسبت به یک پایه راست هنجار خاص:

$$|\alpha\rangle \rightarrow a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} \quad [۱.۳]$$

ضرب داخلی، $\langle\alpha|\beta\rangle$ ، دو بردار (تعمیم ضرب نقطه‌ای در سه بعد) عدد مختلطی است

$$\langle\alpha|\beta\rangle = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + \dots + a_N^* b_N \quad [۲.۳]$$

تبدیلات خطی، T ، با ماتریس‌ها (نسبت به پایه خاص) نشان داده می‌شوند که با قواعد معمولی ضرب ماتریس‌ها روی بردارها عمل می‌کنند:

^۱ اگر هیچ مطالعه‌ای روی جبر خطی نداشته‌اید، باید پیش از ادامه این فصل بخش ضمیمه را بخوانید.

$$|\beta\rangle = T|\alpha\rangle \rightarrow b = Ta = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} & \dots & t_{1N} \\ t_{21} & t_{22} & \dots & t_{2N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ t_{N1} & t_{N2} & \dots & t_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} \quad [۳.۳]$$

اما «بردارهایی» که در مکانیک کوانتومی با آنها برخورد می‌کنیم (در بیشتر بخش‌ها) توابعی هستند که در فضای نامتناهی وجود دارند. برای آنها نمادگذاری N تایی / ماتریسی، در بهترین حالت، بدساخت و به کار بردنش سخت است، همچنین سازورزی‌هایی که در فضاها متناهی خوش رفتارند ممکن است در فضاهایی با ابعاد نامتناهی دردسر زا باشند. (دلیل اصلی این است که درحالی‌که حاصلجمع متناهی در رابطه ۲.۳ همیشه وجود دارد، یک حاصلجمع نامتناهی - یا یک انتگرال - ممکن است همگرا نشود، که در آن صورت ضرب داخلی وجود ندارد و هر استدلالی شامل ضرب‌های داخلی بلافاصله مورد شک و تردید قرار می‌گیرد.) پس هرچند بخش عمده واژگان و نمادگذاری باید برایتان آشنا باشد، ارزش آنرا دارد که با احتیاط به این موضوع نزدیک شویم. مجموعه تمام توابع x یک فضای برداری را تشکیل می‌دهند، با این حال این فضا برای مقاصد فعلی ما بیش از اندازه بزرگ است. برای نمایش یک حالت فیزیکی ممکن، تابع موج Ψ باید بهنجار شود:

$$\int |\Psi|^2 dx = 1$$

مجموعه تمام توابع انتگرال‌پذیر مجذوری، روی یک بازه خاص^۲

$$f(x) \text{ به گونه‌ای که } \int_a^b |f(x)|^2 dx < \infty \quad [۴.۳]$$

^۲ برای ما، حدهای $(a \text{ و } b)$ تقریباً همیشه $\pm\infty$ خواهند بود، اما این احتمال هم هست که اوضاع را برای مدت کوتاهی کلی‌تر نگاه داریم.

فضای برداری (بسیار کوچکتری) را تشکیل می‌دهد (مساله ۱.۳ الف) را ملاحظه کنید). ریاضیدانان این فضا را $L_2(a, b)$ می‌نامند؛ فیزیکدان‌ها آنرا فضای هیلبرت می‌نامند.^۳ بنابراین، در مکانیک کوانتومی،

[۵.۳]

توابع موج در فضای هیلبرت قرار دارند

ضرب داخلی دو تابع $f(x)$ و $g(x)$ را به این صورت تعریف می‌کنیم:

$$\langle f|g \rangle \equiv \int_a^b f(x)^* g(x) dx \quad [۶.۳]$$

اگر f و g هر دو انتگرال‌پذیر مجذوری باشند (یعنی، اگر هر دو در فضای هیلبرت قرار داشته باشند)، وجود ضرب داخلی آنها تضمین شده است (انتگرال رابطه ۶.۳ به یک عدد متناهی همگرا می‌شود).^۴ این رابطه پیامد انتگرال نامساوی شوارتز است:^۵

^۳ به بیان فنی، یک فضای هیلبرت یک فضای ضرب داخلی کامل است و مجموعه توابع انتگرال‌پذیر مجذوری تنها نمونه‌ای از یک فضای هیلبرت هستند - قدر مسلم، هر فضای برداری با ابعاد متناهی به طور معمول یک فضای هیلبرت است. اما از آنجا که L_2 صحنه عرض اندام مکانیک کوانتومی به شمار می‌رود، این منظور کلی فیزیکدان‌ها از گفتن «فضای هیلبرت» است. در ضمن، واژه کامل در اینجا به این معنی است که هر دنباله کوشی از توابع در فضای هیلبرت به تابعی همگرا می‌شود که آن هم در همان فضا قرار دارد: هیچ «جای خالی» در آن نیست، درست مانند مجموعه همه اعداد حقیقی که هیچ جای خالی ندارد (برعکس، مثلاً فضای تمام چند جمله‌ای‌ها مانند مجموعه همه اعداد کسری، بی‌تردید دارای حفره‌هایی درون خود است). کامل بودن یک فضا ربطی به کامل بودن (متاسفانه، همان واژه) مجموعه‌ای از توابع ندارد که عبارت است از این ویژگی که هر تابع دیگری را می‌توان برحسب ترکیبی خطی از آنها بیان کرد.

^۴ در فصل ۲ گاه و بیگاه ملزم به کار با توابعی بودیم که قابل بهنجارش نبودند. این قبیل توابع خارج از فضای هیلبرت هستند، برای همین می‌خواهیم خودمان را مجبور به رسیدگی به آنها با توجه خاص بدانیم، همانطور که کمی بعدتر ملاحظه خواهیم کرد. فعلاً، فرض را بر این می‌گذاریم که تمام توابعی که با آنها مواجه می‌شویم در فضای هیلبرت هستند.

^۵ برای یک اثبات، کتاب *Functional Analysis* نوشته F. Riesz و B. Sz-Nagy (انتشارات Unger، نیویورک،

۱۹۵۵) بخش ۲۱ را ملاحظه کنید. در یک فضای برداری با ابعاد متناهی اثبات نامساوی شوارتز، $|\langle \alpha|\beta \rangle|^2 \leq$

$$\left| \int_a^b f(x) * g(x) dx \right| \leq \sqrt{\int_a^b |f(x)|^2 dx \int_a^b |g(x)|^2 dx} \quad [۷.۳]$$

خودتان می‌توانید بررسی کنید که رابطه ۶.۳ تمام شرایط ضرب داخلی (مساله ۱.۳ (ب)) را برآورده می‌سازد. به ویژه توجه داشته باشید که

$$\langle g|f \rangle = \langle f|g \rangle^* \quad [۸.۳]$$

علاوه بر این، ضرب داخلی $f(x)$ در خودش

$$\langle f|f \rangle = \int_a^b |f(x)|^2 dx \quad [۹.۳]$$

حقیقی و غیر منفی است؛ فقط ^۶ زمانی صفر است که $f(x) = 0$ باشد.

تابعی که ضرب داخلی آن با خودش ۱ باشد را **بهنجار** می‌نامیم؛ دو تابعی که حاصلضرب داخلی‌شان صفر باشد **متعامد** هستند؛ مجموعه‌ای از توابع $\{f_n\}$ ، که بهنجار بوده و دو به دو متعامد باشند **راست هنجار** است:

$$\langle f_m|f_n \rangle = \delta_{mn} \quad [۱۰.۳]$$

$\langle \alpha|\alpha \rangle \langle \beta|\beta \rangle$ ، آسان است (مساله ۵ از بخش ضمیمه را ملاحظه کنید). اما آن اثبات وجود ضرب‌های داخلی را به عنوان پیش فرض در نظر می‌گیرد که دقیقاً همان چیزی هستند که ما اینجا می‌کشیم آنرا بنا کنیم.
^۶ وضع تابعی که همه جا به جز چند نقطه منزوی صفر است چیست؟ انتگرال (رابطه ۹.۳) باز هم حذف می‌شود، هرچند خود تابع صفر نمی‌شود. اگر اینجوری راحت نیستید، باید استاد ریاضی باشید. در فیزیک چنین توابع بیمارگونه‌ای یافت نمی‌شوند، اما در هر صورت، در فضای هیلبرت دو تابع را در صورتی به حساب می‌آوریم که انتگرال قدر مطلق اختلاف آنها صفر شود. به بیان فنی، بردارهای فضای هیلبرت نمایانگر کلاس‌های معادلی از توابع هستند.

سرانجام، مجموعه‌ای از توابع کامل هستند اگر هر تابع دیگری (در فضای هیلبرت) را بتوان به صورت ترکیبی خطی از آنها بیان کرد:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n f_n(x) \quad [۱۱.۳]$$

اگر توابع $\{f_n(x)\}$ راست هنجار باشند، ضرائب از لم فوریه بدست می‌آیند:

$$c_n = \langle f_n | f \rangle \quad [۱۲.۳]$$

که خودتان می‌توانید بررسی کنید. البته من این واژه‌گذاری را پیشتر در فصل دوم پیش بینی کردم. (حالت‌های مانای چاه مربعی (رابطه ۲۸.۲) مجموعه کامل راست هنجاری روی بازه $(0, a)$ تشکیل می‌دهند؛ حالت‌های مانای نوسانگر هماهنگ (روابط ۶۷.۲ یا ۵۸.۲) مجموعه کامل راست هنجاری روی بازه $(-\infty, \infty)$ محسوب می‌شوند).

مساله ۱.۳

(الف) نشان دهید مجموعه تمام توابع انتگرال پذیر مجذوری یک فضای برداری است (برای تعریف، بازگردید به بخش ۱ از ضمیمه). راهنمایی: مساله اصلی عبارت است از نشان دادن اینکه حاصل جمع دو تابع انتگرال پذیر مجذوری خودش انتگرال پذیر مجذوری است. از رابطه ۷.۳ استفاده کنید. آیا مجموعه تمام توابع بهنجار یک فضای برداری است؟

(ب) نشان دهید انتگرال رابطه ۶.۳ شرایط ضرب داخلی (بخش ۲ از ضمیمه) را برآورده می‌سازد.

مساله ۲.۳ *

(الف) به ازای چه محدوده‌ای از v تابع $f(x) = x^v$ در بازه $(0,1)$ در فضای هیلبرت قرار دارد؟ فرض را بر این بگذارید که v حقیقی است، اما لزوماً مثبت نیست.

(ب) به ازای حالت خاص $v = 1/2$ ، آیا تابع $f(x)$ در فضای هیلبرت قرار دارد؟ وضع $xf(x)$ چگونه است؟ در مورد $(d/dx)f(x)$ چه می‌گوئید؟

۲.۳ مشاهده‌پذیرها

۱.۲.۳ عملگرهای هرمیتی

مقدار چشمداشتی مشاهده‌پذیر $Q(x, p)$ را می‌توان بسیار شسته و رفته با نمادگذاری ضرب داخلی بیان کرد:^۷

$$\langle Q \rangle = \int \Psi^* Q \Psi dx = \langle \Psi | Q | \Psi \rangle \quad [۱۳.۳]$$

خاطر نشان می‌شود که نتیجه یک اندازه‌گیری باید حقیقی باشد، برای همین پر واضح است که میانگین بیشتر اندازه‌گیری‌ها هم همینطور است:

$$\langle Q \rangle = \langle Q \rangle^* \quad [۱۴.۳]$$

اما مزدوج مختلط یک ضرب داخلی ترتیب قرارگیری (رابطه ۸.۳) را عوض می‌کند، بنابراین

$$\langle \Psi | Q | \Psi \rangle = \langle Q | \Psi | \Psi \rangle \quad [۱۵.۳]$$

این رابطه باید برای هر تابع موج Ψ برقرار باشد. بدین ترتیب عملگرهایی که نمایانگر مشاهده‌پذیرها هستند ویژگی خاصی دارند که براساس آن

$$\langle f | Q | f \rangle = \langle Q | f | f \rangle \quad \text{به ازای تمام } f(x) \quad [۱۶.۳]$$

^۷ به یاد بیاورید \hat{Q} عملگری است که از روی Q با جایجایی $p \rightarrow p \equiv (\hbar/i) d/dx$ درست می‌شود. این عملگرها خطی هستند، به این مفهوم که به ازای توابع f و g و هر دو عدد مختلط a و b داریم

$$\hat{Q}[af(x) + bg(x)] \rightarrow a\hat{Q}f(x)$$

آنها سازنده تبدیلات خطی (بخش ۳ از ضمیمه) هستند. با این وجود، گاهی تابعی از درون فضای هیلبرت را به تابعی خارج از آن منتقل می‌کنند (مساله ۲.۳ (ب) را ملاحظه کنید)، برای همین در اینحالت ممکن است مجبور به محدود کردن محدوده عملگر باشیم.

این قبیل عملگرها را هرمیتی می‌نامیم.

در واقع، بیشتر کتاب‌ها در ظاهر روی شرط قوی‌تری تاکید می‌کنند:

$$[۱۷.۳] \quad \langle f|\hat{Q}g\rangle = \langle \hat{Q}f|g\rangle \quad \text{ها } g(x) \text{ و } f(x) \text{ تمام}$$

اما پیداست که علیرغم ظواهر، این رابطه دقیقاً معادل است با تعریف من (رابطه ۱۶.۳) که آنرا در مساله ۳.۳ اثبات خواهید کرد. پس از هرکدام که دوست دارید استفاده کنید. نکته اساسی این است که یک عملگر هرمیتی را، با همان نتیجه، می‌توان یا به اولین عضو ضرب داخلی و یا به دومی اعمال کرد، برای همین عملگرهای هرمیتی به طور طبیعی در مکانیک کوانتومی نمود می‌یابند زیرا مقادیر چشمداشتی حقیقی هستند:

$$[۱۸.۳] \quad \text{مشاهده‌پذیرها را با عملگرهای هرمیتی نمایش می‌دهیم.}$$

خب، بیایید این عبارت را بررسی کنیم. آیا مثلاً عملگر تکانه هرمیتی است؟

$$[۱۹.۳] \quad \langle f|\hat{p}g\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f^* \frac{\hbar}{i} \frac{dg}{dx} dx = \frac{\hbar}{i} f^* g \Big|_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{df}{dx} \right)^* g dx = \langle \hat{p}f|g\rangle$$

البته من از انتگرال‌گیری جزء به جزء استفاده کردم، برای همین جمله حدی را به همان دلیل همیشگی کنار گذاشتم: اگر $f(x)$ و $g(x)$ انتگرال‌پذیر مجذوری باشند، باید در $\pm\infty$ به سمت صفر میل کنند.^۸ توجه داشته باشید که مزدوج مختلط اجزاء i به ازای علامت منفی چگونه از

^۸ راستش، این بیان کاملاً هم درست نیست. همانطور که در فصل ۱ گفتم، توابع بیمارگونه‌ای وجود دارند که انتگرال‌پذیر مجذوری هستند اما در بینهایت به سمت صفر میل نمی‌کنند. با این حال، سر و کله چنین توابعی در فیزیک پیدا نمی‌شود و تازه اگر هم این مساله فکرتان را به خود مشغول کرده می‌توانیم به راحتی حوزه عملگرهایمان را محدود کنیم تا آن توابع طرد شوند. در هر حال، روی بازه‌های منتهای، به واقع مجبورید دقت بیشتری نسبت به جملات حدی به خرج دهید، چون عملگری که روی بازه $(-\infty, \infty)$ هرمیتی است احتمال دارد روی بازه $(0, \infty)$ یا $(-\infty, 0)$ هرمیتی نباشد. اگر از خودتان می‌پرسید چاه مربعی نامتناهی چه می‌شود، مطمئن‌ترین کار این است که آن توابع موج را در حالی در نظر بگیرید که روی خطی نامتناهی قرار دارند - آنها تصادفاً در خارج از $(0, a)$ صفر هستند.

انتگرال‌گیری جزء به جزء انتخاب می‌شوند - عملگر d/dx (بدون i) هرمیتی نیست، به همین خاطر نمایشگر یک مشاهده‌پذیر ممکن نمی‌باشد.

مساله ۳.۳* نشان دهید اگر به ازای تمام توابع h (در فضای هیلبرت) داشته باشیم $\langle h|\hat{Q}h\rangle = \langle \hat{Q}h|h\rangle$ در آنصورت برای تمام توابع f و g داریم $\langle f|\hat{Q}g\rangle = \langle \hat{Q}f|g\rangle$ (یعنی، دو تعریف هرمیتی بودن - روابط ۱۶.۳ و ۱۷.۳ - با هم معادلند). راهنمایی: ابتدا قرار دهید $h = f + ig$ و سپس بگذارید $h = f + ig$.

مساله ۴.۳

(الف) نشان دهید حاصلجمع دو عملگر هرمیتی، هرمیتی است.

(ب) فرض کنید \hat{Q} هرمیتی است و α هم یک عدد مختلط. به چه شرطی (روی $\alpha\hat{Q}$) α هرمیتی است؟

(پ) چه وقت حاصلضرب دو عملگر هرمیتی، هرمیتی است؟

(ت) نشان دهید عملگر مکان ($\hat{x} = x$) و عملگر هامیلتونی $\hat{H} = -(\hbar^2/2m)d^2/dx^2 +$ هرمیتی هستند.

مساله ۵.۳ مزدوج هرمیتی (یا الحاقی) یک عملگر \hat{Q} عبارت است از عملگر \hat{Q}^\dagger به نحوی که

$$[20.3] \quad \langle f\hat{Q}|g\rangle = \langle \hat{Q}^\dagger f|g\rangle \quad g \text{ و } f \text{ به ازای تمام مقادیر}$$

(پس یک عملگر هرمیتی برابر است با مزدوج مختلط خودش: $\hat{Q} = \hat{Q}^\dagger$).

(الف) مزدوج هرمیتی x ، i و d/dx را بدست آورید.

(ب) مزدوج هرمیتی عملگر بالا برنده نوسانگر هماهنگ، a_+ (رابطه ۴۷.۲) را بدست آورید.

(پ) نشان دهید $(\hat{Q}\hat{R})^\dagger = \hat{R}^\dagger\hat{Q}^\dagger$.

۲.۲.۳ حالت‌های معین

به طور معمول، وقتی مشاهده‌پذیر Q را روی یک مجموعه آماری از سامانه‌های تدارک دیده شده یکسان، که همه در حالت یکسان Ψ قرار دارند، اندازه می‌گیرید هر بار نتیجه یکسانی بدست نمی‌آوردید - این همان ابهام مکانیک کوانتومی است.^۹ سوال: آیا امکان فراهم آوردن چنین حالتی به گونه‌ای وجود دارد که هر اندازه‌گیری Q حتما یک مقدار یکسان (آنرا q بنامید) را بازگرداند؟ اگر اینطور می‌پسندید، این یک حالت معین برای مشاهده‌پذیر Q خواهد بود. (در حقیقت، از پیش با یک نمونه آشنائیم: حالت‌های مانا حالت‌های معین هامیلتونی هستند؛ اندازه‌گیری انرژی کل روی ذره‌ای در حالت مانای Ψ_n حتما انرژی «مجاز» E_n متناظر را بدست می‌دهد).

خب، انحراف معیار استاندارد Q ، در یک حالت معین، صفر خواهد بود که این یعنی

$$\sigma^2 = \langle (Q - \langle Q \rangle)^2 \rangle = \langle \Psi | (Q - q)^2 | \Psi \rangle = \langle (Q - q) \Psi | (Q - q) \Psi \rangle = 0 \quad [21.3]$$

(البته، اگر هر اندازه‌گیری مقدار q را بدهد، میانگین آنها هم q خواهد بود: $\langle Q \rangle = q$). از این نکته هم که Q و در نتیجه $Q - q$ نیز، یک عملگر هرمیتی است استفاده کردم تا یک عامل را از روی جمله اول ضرب داخلی جابجا کنم.) اما تنها تابعی که ضرب داخلی آن در خودش از بین می‌رود 0 است، بنابراین

$$Q\Psi = q\Psi \quad [22.3]$$

این رابطه ویژه مقداری برای عملگر Q است؛ Ψ یک ویژه تابع Q محسوب می‌شود و به همین خاطر q هم ویژه مقدار متناظر است. بدین ترتیب

حالت‌های معین ویژه توابع Q محسوب می‌شوند.

[23.3]

اندازه‌گیری Q روی چنین حالتی حتما ویژه مقدار q را بدست می‌دهد.

^۹ البته حرف من درباره اندازه‌گیری‌های کافی است - همواره امکان ارتکاب اشتباه وجود دارد، برای همین به سادگی

جواب‌های اشتباه بدست می‌آیند، اما این تقصیر مکانیک کوانتومی نیست.

دقت کنید که ویژه مقدار یک عدد است (نه یک عملگر یا تابع). می‌توانید هر ویژه تابعی را در یک ثابت عددی ضرب کنید چون باز هم یک ویژه تابع با همان ویژه مقدار است. صفر یک ویژه تابع به حساب نمی‌آید (ما در تعریف برای آن استثنا قایل شدیم - جز این هر عددی یک ویژه مقدار خواهد بود، چرا که برای هر عملگر خطی \hat{Q} و تمام q ها داریم $Q0 = q0 = 0$). اما مشکلی با ویژه مقدار بودن صفر نداریم. مجموعه همه ویژه مقادیر یک عملگر را طیف می‌نامیم. گاهی اوقات دو (یا تعداد بیشتری) ویژه تابع مستقل خطی یک ویژه مقدار را با هم به اشتراک می‌گذارند؛ در آن حالت می‌گوئیم طیف تبه‌گن است.

مثلاً، حالت‌های معین انرژی کل ویژه توابع هامیلتونی هستند:

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad [24.3]$$

که دقیقاً همان معادله شرودینگر مستقل از زمان است. در این متن از حرف E برای ویژه مقدار استفاده کرده و از حرف کوچک ψ به جای ویژه تابع (عامل $\exp(-iEt/\hbar)$ را به آن الصاق کنید) برای درست کردن Ψ استفاده می‌کنیم؛ این هنوز هم ویژه تابعی از H است.

مثال ۱.۳ عملگر زیر را در نظر بگیرید

$$\hat{Q} \equiv i \frac{d}{d\phi} \quad [25.3]$$

که در آن ϕ مختصات قطبی معمول در دو بعد است. (اگر در حال مطالعه مساله مهره روی یک حلقه بودیم، ممکن بود این عملگر در بافتی فیزیکی نمایان شود؛ مساله ۴۶.۲ را ملاحظه کنید). آیا \hat{Q} هرمیتی است؟ ویژه توابع و ویژه مقادیر آنرا بدست آورید.

پاسخ. اینجا مشغول کار بر روی ویژه توابع $f(\phi)$ روی یک بازه متناهی به صورت

$$0 \leq \phi \leq 2\pi \text{ هستیم و تصریح می‌کنیم که}$$

$$f(\phi + 2\pi) = f(\phi) \quad [26.3]$$

چرا که ϕ و $\phi + 2\pi$ یک نقطه فیزیکی را توصیف می کنند. با استفاده از انتگرال گیری جزء به جزء داریم:

$$\langle f | \hat{Q} g \rangle = \int_0^{2\pi} f^* \left(i \frac{dg}{d\phi} \right) d\phi = i f^* g \Big|_0^{2\pi} - \int_0^{2\pi} i \left(\frac{df^*}{d\phi} \right) g d\phi = \langle \hat{Q} f | g \rangle$$

پس \hat{Q} هرمیتی است (اینبار جمله مرزی بنابر رابطه ۲۶.۳ از میان می رود).

رابطه ویژه مقدار

$$i \frac{d}{d\phi} f(\phi) = q f(\phi) \quad [27.3]$$

واجد جواب عمومی زیر است

$$f(\phi) = A e^{-iq\phi} \quad [28.3]$$

رابطه ۲۶.۳ مقادیر ممکن q را محدود می کند:

$$e^{-iq2\pi} = 1 \Rightarrow q = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad [29.3]$$

طیف این عملگر عبارت است از مجموعه تمام اعداد صحیح، برای همین غیر تبهگن است.

مساله ۶.۳ عملگر $\hat{Q} = d^2/d\phi^2$ را در نظر بگیرید که در آن (همانند رابطه ۱.۳) ϕ زاویه سمتی در مختصات قطبی بوده و توابع هم منوط به رابطه ۲۶.۳ هستند. آیا \hat{Q} هرمیتی است؟ ویژه توابع و ویژه مقادیر آنرا بدست آورید. طیف \hat{Q} چیست؟ آیا این طیف تبهگن است؟

۳.۳ ویژه توابع یک عملگر هرمیتی

توجه ما به ویژه توابع عملگرهای هرمیتی (به بیان فیزیکی: حالت های معین مشاهده پذیرها) معطوف است. این بحث به دو دسته تقسیم می شود: چنانچه طیف گسسته باشد (یعنی، ویژه مقادیر از یکدیگر جدا باشند) آنگاه ویژه توابع در فضای هیلبرت قرار داشته و حالت هایی را تشکیل می دهند که از نظر فیزیکی قابل ادراک هستند. چنانچه طیف پیوسته باشد (یعنی ویژه مقادیر تمام گستره یک محدوده را پر کنند) در آن صورت ویژه توابع قابل بهنجارش نبوده و نمایانگر توابع موج ممکن هم نیستند (هرچند ترکیبات خطی آنها - که لزوماً شامل بخشی شدگی در ویژه مقادیر

می‌شوند - ممکن است قابل بهنجارش باشند). بعضی از عملگرها فقط یک طیف گسسته دارند (مثل هامیلتونی نوسانگر هماهنگ)، بعضی فقط یک طیف پیوسته دارند (مثل هامیلتونی ذره آزاد) و بعضی هر دو بخش گسسته و پیوسته را دارند (مثل هامیلتونی یک چاه مربعی متناهی). پرداختن به حالت گسسته آسان‌تر است، زیرا وجود ضرب‌های داخلی مربوطه تضمین است - در حقیقت، خیلی به نظریه ابعاد متناهی (ویژه بردارهای یک ماتریس هرمیتی) شبیه است. ابتدا به حالت گسسته می‌پردازم و سپس حالت پیوسته را بررسی می‌کنم.

۱.۳.۳ طیف گسسته

به بیان ریاضی، ویژه توابع قابل بهنجارش یک عملگر هرمیتی دو ویژگی مهم دارند:

قضیه ۱: ویژه مقادیر آنها حقیقی است.

اثبات: فرض کنید

$$\hat{Q}f = qf$$

یعنی، $f(x)$ یک ویژه تابع \hat{Q} با ویژه مقدار q است و^{۱۰}

$$(f|\hat{Q}f) = (\hat{Q}f|f)$$

(\hat{Q} هرمیتی است). بنابراین

$$q(f|f) = q^*(f|f)$$

q یک عدد است، از اینرو از انتگرال بیرون می‌آید و چون تابع نخست در ضرب داخلی، مزدوج مختلط شده (رابطه ۶.۳)، پس q سمت راست هم مزدوج مختلط شده است. اما $(f|f)$ نمی‌تواند صفر باشد ($f(x) = 0$) یک ویژه تابع انتگرال‌پذیر مجذوری نیست، برای همین $q = q^*$ بوده و در نتیجه q حقیقی است. همانطور که باید اثبات می‌شد.

^{۱۰} اینجاست که فرض را بر این می‌گذاریم که ویژه توابع در فضای هیلبرت قرار دارند - در غیر اینصورت ممکن است حاصلضرب داخلی اصلاً وجود نداشته باشد.

این قضیه بدردمان می خورد: اگر مشاهده پذیری را روی ذره‌ای در یک حالت معین اندازه بگیرید، دست کم یک عدد حقیق بدست می آورید.

قضیه ۲: ویژه توابع متعلق به ویژه مقادیر گسسته، متعامد هستند.

اثبات: فرض کنید

$$\hat{Q}f = qf \quad \text{و} \quad \hat{Q}g = q'g$$

و نیز اینکه \hat{Q} هرمیتی است. در آن صورت $\langle \hat{Q}f | g \rangle = \langle f | \hat{Q}g \rangle$ است، از اینرو

$$q' \langle f | g \rangle = q \langle f | g \rangle$$

(دوباره، ضرب‌های داخلی وجود دارند، زیرا ویژه توابع بنا به فرض اولیه در فضای هیلبرت قرار دارند.) اما q حقیقی است (از قضیه ۱)، پس اگر $q' \neq q$ باشد باید داشته باشیم $\langle f | g \rangle = 0$. همانطور که باید اثبات می شد.

به همین دلیل است که مثلاً حالت‌های مانای چاه مربعی نامتناهی یا نوسانگر هماهنگ متعامد هستند - آنها ویژه توابع هامیلتونی با ویژه مقادیر گسسته به شمار می روند. اما این ویژگی منحصر به آنها یا حتی به هامیلتونی نیست - برای حالت‌های معین هر مشاهده پذیری وضع همینطور است. متأسفانه، قضیه ۲ چیزی درباره حالت‌های تبهگن به ما نمی گوید ($q' = q$). با این حال، چنانچه دو (یا تعداد بیشتری) ویژه تابع یک ویژه مقدار را با هم به اشتراک بگذارند، هر ترکیب خطی از آنها نیز خودش یک ویژه تابع با همان ویژه مقدار است (مساله ۷.۳ (الف)) برای همین می توانیم از روش متعامدسازی گرام - اشمیت (مساله ۴ بخش ضمیمه) برای ساختن ویژه توابع متعامد درون هر زیر فضای تبهگن استفاده کنیم. تقریباً هیچگاه ضرورتی ندارد که این کار صریحاً انجام شود (خدا را شکر!)، اما همیشه می توان در عمل آنرا انجام داد. پس حتی در حضور تبهگنی هم می توان ویژه توابع را طوری انتخاب کرد که متعامد باشند، به همین خاطر در سازمان دهی صورت بندی ریاضی مکانیک کوانتومی فرض را بر این می گذاریم که اینکار از پیش انجام شده است. این کار رسماً اجازه می دهد تا از لم فوریه که به راست هنجاری توابع پایه وابسته است استفاده

در یک فضای برداری با ابعاد متناهی، ویژه توابع یک ماتریس هرمیتی واجد یک ویژگی سوم بنیادین هم هستند: آنها تمام فضا را پوشش می‌دهند (هر برداری را می‌توان به صورت ترکیبی خطی از آنها بیان کرد). متأسفانه، اثبات این ویژگی به فضاهای با ابعاد نامتناهی تعمیم پیدا نمی‌کند. اما خود این ویژگی برای سازگاری درونی مکانیک کوانتومی ضروری است، از اینرو (به پیروی از دیراک^{۱۱}) این بیان را یک اصل موضوعه (یا به بیان دقیقتر، به صورت قیدی روی کلاس عملگرهای هرمیتی که می‌توانند نمایانگر مشاهده‌پذیرها باشند) می‌گیریم:

اصل موضوعه: ویژه توابع یک عملگر مشاهده‌پذیر کامل هستند: هر تابعی (در فضای هیلبرت) را می‌توان به صورت ترکیبی خطی از آنها بیان کرد.^{۱۲}

مساله ۷.۳

(الف) فرض کنید $f(x)$ و $g(x)$ دو ویژه تابع عملگر \hat{Q} با ویژه مقدار یکسان q هستند. نشان دهید هر ترکیب خطی از f و g خودش ویژه تابعی از \hat{Q} با ویژه مقدار q است.

(ب) بررسی کنید که آیا $f(x) = \exp(x)$ و $g(x) = \exp(-x)$ ویژه توابع عملگر d^2/dx^2 با یک ویژه مقدار هستند. دو ترکیب خطی از f و g درست کنید که روی بازه $(-1, 1)$ ویژه توابع متعامد باشند.

مساله ۸.۳

(الف) بررسی کنید که آیا ویژه مقادیر عملگر هرمیتی مثال ۱.۳ حقیقی است. نشان دهید که ویژه توابع (برای ویژه مقادیر گسسته) متعامد هستند.

(ب) همین کار را برای عملگر مساله ۶.۳ انجام دهید.

^{۱۱} کتاب *The Principles of Quantum Mechanics* نوشته P. A. M. Dirac، (انتشارات دانشگاه آکسفورد، نیویورک، ۱۹۵۸).

^{۱۲} در بعضی از حالت‌های خاص، کامل بودن قابل سنجش است (مثلاً می‌دانیم که حالت‌های مانای چاه مربعی متناهی به خاطر قضیه دیراک کامل هستند). اصل موضوعه خواندن چیزی که در بعضی موارد قابل سنجش است کمی اسباب دردسر است، اما من دیگر راه بهتری برای پرداختن به آن بلد نیستم.

۲.۳.۳ طیف‌های پیوسته

اگر طیف یک عملگر هرمیتی پیوسته باشد، پیکربندی‌ها قابل بهنجارش نیستند و برای همین قضیه ۱ و ۲ دیگر بدرد نمی‌خورند، زیرا ضرب‌های داخلی ممکن است وجود نداشته باشند. در هر صورت، به یک معنی سه ویژگی ضروری (واقعیت، تعامد و کامل بودن) هنوز برقرارند. به نظر من بهترین کار این است که با یک مثال خاص به این مورد پیچیده بپردازیم.

مثال ۲.۳ ویژه توابع و ویژه مقادیر عملگر تکانه را بدست آورید.

پاسخ. $f_p(x)$ را ویژه تابع و P را ویژه مقدار بگیرد

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} f_p(x) = p f_p(x) \quad [30.3]$$

جواب عمومی عبارت است از

$$f_p(x) = A e^{ipx/\hbar}$$

این تابع به ازای هیچ مقدار (مختلط) p انتگرال‌پذیر مجذوری نیست - عملگر تکانه هیچ ویژه تابعی در فضای هیلبرت ندارد. ولی با این وجود، اگر خودمان را به ویژه مقادیر حقیقی مقید کنیم، بالاخره حتما یکجور «راست هنجاری» سرهم‌بندی شده‌ای جور می‌کنیم. با مراجعه به مساله‌های ۲۴.۲ (الف) و ۲۶.۲ داریم:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_{p'}^*(x) f_p(x) dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p-p')x/\hbar} dx = |A|^2 2\pi\hbar \delta(p-p') \quad [31.3]$$

اگر بگیریم $A = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$ ، به طوریکه

$$f_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \quad [32.2]$$

در آنصورت

$$\langle f_{p'} | f_p \rangle = \delta(p-p') \quad [33.3]$$

که به شکل جالبی یادآور راست‌هنجاری واقعی (رابطه ۱۰.۳) است - حالا شناسه‌ها متغیرهای پیوسته‌ای هستند و برای همین دلتای کروکر به یک دلتای دیراک تبدیل می‌شود، اما جز این‌ها ظاهرش همان است. من رابطه ۳۳.۳ را راست‌هنجاری دیراک می‌نامم.

از همه مهمتر اینکه ویژه‌توابع، با در نظر گرفتن حاصلجمع (رابطه ۱۱.۳) جابجا شده با انتگرال، کامل هستند: هر تابع (انتگرال‌پذیر مجذوری) $f(x)$ را می‌توان به این شکل نوشت.

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) f_p(x) dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} c(p) e^{ipx/\hbar} dp \quad [۳۴.۳]$$

ضریب بسط (که حالا تابعی به صورت $c(p)$ است) مانند همیشه با استفاده از لم فوریه بدست می‌آید:

$$\langle f_p' | f_p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) \langle f_p' | f_p \rangle dp = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) \delta(p - p') dp = c(p') \quad [۳۵.۳]$$

به طور جایگزین، می‌توانید آنها را با قضیه پلانشرل (رابطه ۱۰.۲.۲) هم بدست آورید، به این دلیل که بسط (رابطه ۳۴.۳) چیزی نیست مگر یک تبدیل فوریه.

ویژه‌توابع تکانه (رابطه ۳۲.۳) سینوسی‌هایی هستند با طول موج

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} \quad [۳۶.۳]$$

این همان رابطه قدیمی دوبروی (رابطه ۳۹.۱) است که قول دادم در زمان مناسب آنرا ثابت کنم. اینطور که پیداست از آنچه دوبروی تصور می‌کرد پیچیده‌تر است، چون اکنون می‌دانیم که در واقع چیزی تحت عنوان یک ذره با تکانه معین وجود ندارد. اما می‌توانیم بسته موج بهنجاری با تکانه باریک درست کنیم و آنوقت است که رابطه دوبروی را می‌توان در مورد آن به کار برد.

باید از مثال ۲.۳ چه چیزی بدست آوریم؟ اگرچه هیچیک از ویژه‌توابع \hat{p} در فضای هیلبرت قرار ندارند، دسته مشخصی از آنها (همانهایی که ویژه‌مقادیر حقیقی دارند) در نزدیکی «حومه»

با نوعی شبه راست هنجاری در این فضا وجود دارند. آنها نمایشگر حالت‌های فیزیکی ممکن نیستند، اما هنوز بسیار مفیدند (همانطور که پیشتر هنگام مطالعه پراکندگی یک بعدی ملاحظه کردیم).^{۱۳}

مثال ۳.۳ ویژه توابع و ویژه مقادیر عملگر مکان را بدست آورید.

پاسخ. $g_y(x)$ را ویژه تابع و y را ویژه مقدار بگیرید:

$$xg_y(x) = yg_y(x) \quad [۳۷.۳]$$

اینجا y (به ازای هر ویژه تابع مفروض) عدد ثابتی است، اما x متغیری پیوسته به شمار می‌رود. چه تابعی از x دارای این ویژگی است که ضرب آن در x مانند ضرب آن در ثابت y است؟ آشکار است که آن تابع باید صفر باشد، به جز در نقطه $x = y$ ؛ در واقع، این چیزی نیست مگر تابع دلتای دیراک:

$$g_y(x) = A\delta(x - y)$$

اینبار ویژه مقدار باید حقیقی باشد؛ ویژه توابع انتگرال‌پذیر مجذوری نیستند، اما باز هم راست هنجاری دیراک را می‌پذیرند:

^{۱۳} تکلیف ویژه توابعی که ویژه مقادیر غیر حقیقی دارند چه می‌شود؟ این ویژه توابع فقط غیر قابل بهنجارش نیستند - آنها در واقع در $\pm\infty$ بسیار بزرگ هم می‌شوند. توابعی که در آنچه من «حومه» فضای هیلبرت نامیدم (کل این منطقه کلان را گاهی اوقات «فضای هیلبرت مهیا» می‌نامند؛ برای مثال کتاب *Quantum Mechanics: A Modern Development* نوشته Leslie Ballentine از انتشارات World Scientific، ۱۹۹۸ را ملاحظه کنید) قرار دارند دارای این ویژگی هستند که گرچه ضرب داخلی (متناهی) آنها با خودشان تعریف نشده، اما ضرب‌های داخلی با تمام اعضای فضای هیلبرت را کاملاً مجاز می‌شمارند. این بیان برای توابعی از \mathcal{H} که ویژه مقادیر غیر حقیقی دارند صحیح نیست. به ویژه، نشان دادم که عملگر تکانه به ازای توابعی در فضای هیلبرت هرمیتی است، اما آن استدلال به برداشتن جمله حدی (در رابطه ۱۹.۳) بستگی داشت. آن جمله هنوز صفر است به شرطی که g ویژه تابع \mathcal{H} با ویژه مقدار حقیقی باشد (تا وقتی که f در فضای هیلبرت است)، اما نه وقتی که ویژه مقدار بخش موهومی دارد. به این معنی هر عدد مختلطی یک ویژه مقدار عملگر \mathcal{H} محسوب می‌شود، اما فقط اعداد حقیقی هستند که ویژه مقادیر عملگر هرمیتی \mathcal{H} به شمار می‌روند - بقیه خارج از فضای هستند که روی آن \mathcal{H} هرمیتی است.

$$\int_{-\infty}^{\infty} g_{y'}^*(x) g_y(x) dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - y') \delta(x - y) dx = |A|^2 \delta(y - y') \quad [38.3]$$

اگر بگیریم $A = 1$ ، پس

$$g_y(x) = \delta(x - y) \quad [39.3]$$

در آن صورت

$$\langle g_{y'} | g_y \rangle = \delta(y - y') \quad [40.3]$$

این ویژه توابع کامل هم هستند:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(y) g_y(x) dy = \int_{-\infty}^{\infty} c(y) \delta(x - y) dy \quad [41.3]$$

با در نظر گرفتن

$$c(y) = f(y) \quad [42.3]$$

(درست است که در این حالت اهمیت چندانی ندارد، اما اگر اصرار دارید می‌توانید آنرا از لم فوریه هم بدست بیاورید).

اگر طیف یک عملگر هرمیتی پیوسته باشد (که در آن صورت ویژه مقادیر - در مثال‌ها، p یا y - در حالت کلی با یک متغیر پیوسته \mathcal{Z} به ترتیبی که در ادامه می‌آید برچسب می‌خورند)، ویژه توابع قابل بهنجارش نیستند، آنها در فضای هیلبرت قرار ندارند و نمایانگر حالت‌های فیزیکی ممکن هم نمی‌باشند؛ در هر صورت، ویژه توابعی که ویژه مقادیر حقیقی دارند راست هنجار دیراک بوده و کامل محسوب می‌شوند (با در نظر گرفتن اینکه اکنون حاصل جمع انتگرال شده). از بخت خوب، این همه آنچیزی است که نیاز داریم.

مساله ۹.۳

(الف) به یک هامیلتونی از فصل ۲ (به جز نوسانگر هماهنگ) استناد کنید که فقط یک طیف گسسته دارد.

(ب) به یک هامیلتونی از فصل ۲ (به جز ذره آزاد) استناد کنید که فقط یک طیف پیوسته دارد.

(پ) به یک هامیلتونی از فصل ۲ (به جز چاه مربعی) استناد کنید که در طیفش هر دو بخش پیوسته و گسسته وجود دارد.

مساله ۱۰.۳ آیا حالت پایه چاه مربعی نامتناهی ویژه تابعی از تکانه محسوب می‌شود؟ اگر چنین است، تکانه آن چیست؟ اگر اینطور نیست، دلیل بیاورید.

۴.۳ تعبیر آماری تعمیم یافته

در فصل ۱ به شما نشان دادم چگونه احتمال آنکه ذره‌ای در مکان بخصوصی یافت شود و نیز مقدار چشمداشتی هر کمیت مشاهده‌پذیر را محاسبه کنید. در فصل ۲ یادگرفتید چگونه نتایج ممکن یک اندازه‌گیری انرژی و احتمال‌های آنها را بدست آورید. اکنون در موقعیتی هستیم تا به بیان تعبیر آماری تعمیم یافته بپردازم که همه اینها را در خود گنجانده و ما را قادر می‌سازد تا نتایج ممکن هر اندازه‌گیری و همچنین احتمال‌های آنها را دریابیم. تعبیر آماری تعمیم یافته همراه با معادله شرودینگر (که می‌گوید تابع موج چگونه با زمان متحول می‌شود) اساس مکانیک کوانتومی است.

تعبیر آماری تعمیم یافته: اگر مشاهده‌پذیر $Q(x, p)$ را روی ذره‌ای در حالت $\Psi(x, p)$ اندازه بگیرید، بی‌شک یکی از ویژه مقادیر عملگر هرمیتی $Q(x, -i\hbar d/dx)$ را بدست می‌آورید. اگر طیف \hat{Q} گسسته باشد، احتمال بدست آوردن ویژه مقدار به خصوص q_n مربوط به ویژه تابع $f_n(x)$ عبارت است از:

$$|c_n|^2, \quad c_n = \langle f_n | \Psi \rangle \quad [۴۳.۳]$$

اگر طیف پیوسته بوده و ویژه مقدارهای حقیقی $q(z)$ هم مربوط به ویژه توابع راست هنجار $f_z(x)$ باشند، احتمال بدست آوردن نتیجه‌ای در محدوده dz برابر است با

$$|c(z)|^2 dz, \quad c(z) = \langle f_z | \Psi \rangle \quad [۴۴.۳]$$

پس از اندازه‌گیری، تابع موج روی ویژه حالت متناظر «فرومی‌افتد».^{۱۴}

تعبیر آماری از اساس با هر چیز دیگری که در فیزیک کلاسیک به آن برخوردیم فرق دارد. دورنمایی نسبتاً متفاوت می‌تواند به موجه کردن آن کمک کند: ویژه توابع یک عملگر مشاهده‌پذیر کامل هستند، از اینرو تابع موج را می‌توان به صورت ترکیبی خطی از آنها نوشت:

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n(t) f_n(x) \quad [۴۵.۳]$$

(برای سادگی، اینطور فرض می‌کنم که طیف گسسته است؛ تعمیم این بحث به حالت پیوسته ساده است.) چون ویژه توابع راست هنجار هستند، ضرائب از لم فوریه بدست می‌آیند:^{۱۵}

$$c_n = \langle f_n | \Psi \rangle = \int f_n(x)^* \Psi(x, t) dx \quad [۴۶.۳]$$

به بیان کیفی، c_n به شما می‌گوید Ψ شامل چه مقدار f_n است و با علم به اینکه اندازه‌گیری باید یکی از ویژه مقادیرهای \hat{Q} را بازگرداند، به نظر منطقی است که احتمال بدست آوردن ویژه مقدار به خصوص q_n با «مقدار f_n موجود در Ψ » تعیین شود. اما چون احتمال‌ها با مربع قدر مطلق تابع موج تعیین می‌شوند، معیار دقیق در واقع $|c_n|^2$ است. این امر موضوع اصلی و جان کلام تعبیر آماری تعمیم یافته است.^{۱۶}

^{۱۴} در حالت طیف پیوسته فروافت در محدوده باریکی پیرامون مقدار اندازه‌گیری رخ می‌دهد که به دقت دستگاه اندازه‌گیری بستگی دارد.

^{۱۵} توجه داشته باشید بستگی زمانی - که اینجا مورد بحث نیست - در دل ضرائب است؛ برای نمایان کردن این مطلب، در واقع باید بنویسیم $c_n(t)$.

^{۱۶} باز هم، با دودلی و تردید از به کار بردن این بیان زیاده از حد متداول که می‌گوید « $|c_n|^2$ احتمال آن است که ذره در حالت f_n باشد» دوری می‌کنم. ذره در حالت Ψ قرار دارد، همین و بس. در عوض، $|c_n|^2$ عبارت است از احتمال آنکه اندازه‌گیری Q مقدار q_n را بدست دهد. این درست است که چنین اندازه‌گیری باعث فروافت حالت روی ویژه مقدار f_n می‌شود، برای همین می‌توان به درستی اینطور گفت که « $|c_n|^2$ عبارت است از احتمال آنکه ذره‌ای که اکنون در حالت Ψ قرار دارد پس از اندازه‌گیری Q در حالت f_n باشد» ... با این حال این بیان کاملاً متفاوتی است.

البته، احتمال کل (که حاصلجمع همه نتایج ممکن است) باید یک باشد:

$$\sum_n |c_n|^2 = 1 \quad [۴۷.۳]$$

و با اطمینان کامل باید گفت که این نتیجه پیایند بهنجارش تابع موج است:

$$\begin{aligned} 1 = \langle \Psi | \Psi \rangle &= \left\langle \left(\sum_{n'} c_{n'} f_{n'} \right) \middle| \left(\sum_n c_n f_n \right) \right\rangle = \sum_{n'} \sum_n c_{n'}^* c_n \langle f_{n'} | f_n \rangle \\ &= \sum_{n'} \sum_n c_{n'}^* c_n \delta_{n'n} = \sum_n c_n^* c_n = \sum_n |c_n|^2 \end{aligned} \quad [۴۸.۳]$$

به همین شکل، مقدار چشمداشتی Q باید برابر باشد با حاصلجمع روی تمام نتایج ممکن ویژه مقدار ضریب احتمال بدست آمدن آن ویژه مقدار:

$$\langle Q \rangle = \sum_n q_n |c_n|^2 \quad [۴۹.۳]$$

قدر مسلم

$$\langle Q \rangle = \langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle = \left\langle \left(\sum_{n'} c_{n'} f_{n'} \right) \middle| \left(\sum_n c_n f_n \right) \right\rangle \quad [۵۰.۳]$$

اما $\hat{Q} f_n = q_n f_n$ است، از اینرو

$$\langle Q \rangle = \sum_{n'} \sum_n c_{n'}^* c_n q_n \langle f_{n'} | f_n \rangle = \sum_{n'} \sum_n c_{n'}^* c_n q_n \delta_{n'n} = \sum_n q_n |c_n|^2 \quad [۵۱.۳]$$

دست کم تا اینجا که به نظر همه چیز با هم جور درمی آید.

با این زبان، آیا می توانیم تعبیر آماری اولیه را برای اندازه گیری های مکانی بازتولید کنیم؟ چرا که نه - این کار واقعا زیاده روی است، اما ارزش بررسی را دارد. اندازه گیری x روی ذره ای در حالت Ψ باید یکی از ویژه مقادیر عملگر مکان را بازگرداند. خوب، در مثال ۳.۳ دریافتیم که هر عدد (حقیقی) y یک ویژه مقدار x است و ویژه تابع (راست هنجار دیراک) متناظر آن هم عبارت است از

$$g_y(x) = g(x - y) \quad \text{اینطور که بعدا ستادیم}$$

$$c(y) = \langle g_y | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - y) \Psi(x, t) dx = \Psi(y, t) \quad [۵۲.۳]$$

از اینرو احتمال بدست آوردن نتیجه‌ای در محدوده dy برابر است با $|\Psi(y, t)|^2 dy$ که دقیقاً همان تعبیر آماری تعمیم یافته است.

وضع تکانه چگونه است؟ در مثال ۲.۲ دیدیم که ویژه تابع‌های عملگر تکانه

$$f_p(x) = (1/\sqrt{2\pi\hbar}) \exp(ipx/\hbar)$$

هستند، پس:

$$c(p) = \langle f_p | \Psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \Psi(x, t) dx \quad [۵۳.۳]$$

این کمیت آنقدر مهم است که نام و نماد خاصی به آن اختصاص می‌دهیم: تابع موج فضای تکانه،

$\Phi(p, t)$. این تابع اساساً برابر است با تبدیل فوریه تابع موج (فضای مکان) $\Psi(x, t)$ - که، بنابر

قضیه پلانشرل، وارون تبدیل فوریه محسوب می‌شود:

$$\Phi(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \Psi(x, t) dx \quad [۵۴.۳]$$

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar} \Phi(p, t) dp \quad [۵۵.۳]$$

بنابر تعبیر آماری تعمیم یافته، احتمال آنکه اندازه‌گیری تکانه در محدوده dp نتیجه‌ای بدست دهد برابر است با:

$$|\Phi(p, t)|^2 dp \quad [۵۶.۳]$$

مثال ۴.۳ ذره‌ای به جرم m مقید به چاه تابع دلتا $V(x) = -\alpha\delta(x)$ است. احتمال آنکه

اندازه‌گیری تکانه آن مقداری بزرگتر از $p_0 = m\alpha/\hbar$ را بدست دهد چقدر است؟

پاسخ. تابع موج (فضای مکان) عبارت است از (رابطه ۱۲۹.۲)

$$\Psi(x, t) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-m\alpha|x|/\hbar^2} e^{-iEt/\hbar}$$

(که در آن $E = -m\alpha^2/2\hbar^2$ است). بنابراین تابع موج فضای تکانه عبارت است از

$$\Phi(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-iEt/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar} e^{-m\alpha|x|/\hbar^2} dx = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{p_0^{3/2} e^{-iEt/\hbar}}{p^2 + p_0^2}$$

(انتگرال را از یک کتاب راهنمای ریاضی پیدا کردم). به این ترتیب احتمال برابر است با

$$\begin{aligned} \frac{2}{\pi} p_0^3 \int_{p_0}^{\infty} \frac{1}{(p^2 + p_0^2)^2} dp &= \frac{1}{\pi} \left[\frac{pp_0}{p^2 + p_0^2} + \tan^{-1} \left(\frac{p}{p_0} \right) \right] \Big|_{p_0}^{\infty} \\ &= \frac{1}{4} - \frac{1}{2\pi} = 0.0908 \end{aligned}$$

(باز هم، انتگرال را از کتاب راهنمای ریاضی پیدا کردم).

مساله ۱۱.۳ تابع موج فضای تکانه، $\Phi(p, t)$ ، را برای ذره‌ای در حالت پایه نوسانگر هماهنگ بدست آورید. احتمال (تا دو رقم اعشار) آنکه اندازه‌گیری p روی ذره‌ای در این حالت مقداری خارج از محدوده کلاسیکی (به ازای همان انرژی) را بدهد چقدر است؟ راهنمایی: در یک کتاب راهنمای ریاضی زیر عنوان «توزیع نرمال» یا «تابع خطا» برای قسمت عددی بگردید - یا از نرم‌افزار Mathematica استفاده کنید.

مساله ۱۲.۳ نشان دهید

$$\langle x \rangle = \int \Phi^* \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \right) \Phi dp \quad [57.3]$$

راهنمایی: توجه داشته باشید که $x \exp(ipx/\hbar) = -i\hbar(d/dp) \exp(ipx/\hbar)$.

به این ترتیب، در فضای تکانه عملگر مکان $i\hbar \partial/\partial p$ است. به عبارت کلی‌تر،

$$\langle Q(x, p) \rangle = \begin{cases} \int \Psi^* \hat{Q} \left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi dx, & \text{در فضای مکان} \\ \int \Phi^* \hat{Q} \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p}, p \right) \Phi dp, & \text{در فضای تکانه} \end{cases} \quad [58.3]$$

در عمل می‌توانید همه این محاسبات را در فضای تکانه هم درست همانند (هر چند نه به سادگی) فضای مکان انجام دهید.

۵.۳ اصل عدم قطعیت

پیشتر در بخش ۶.۱ اصل عدم قطعیت (به شکل $\sigma_x \sigma_p \geq \hbar/2$) را بیان کردم و چندین بار هم در مسائل آنرا مورد بررسی قرار داده‌ایم. اما هرگز به واقع آنرا اثبات نکردیم. در این قسمت نسخه عمومی‌تری از اصل عدم قطعیت را اثبات کرده و برخی از پیامدهای آن را با دقت واریسی خواهم کرد. برهان ارائه شده زیباست اما انتزاعی‌تر است، پس خوب به آن دقت کنید.

۱.۴.۳ اثبات اصل عدم قطعیت تعمیم یافته

برای هر مشاهده‌پذیر A (با تکرار رابطه ۲۱.۳) داریم

$$\sigma_A^2 = \langle (\hat{A} - \langle A \rangle \Psi) | (\hat{A} - \langle A \rangle \Psi) \rangle = \langle f | f \rangle$$

که در آن $f \equiv (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi$. به علاوه، برای هر مشاهده‌پذیر دیگر B

$$\sigma_B^2 = \langle g | g \rangle$$

که در آن $g \equiv (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi$. بنابراین (عطف به نامساوی شوارتز، رابطه ۷.۳) داریم

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 = \langle f | f \rangle \langle g | g \rangle \geq |\langle f | g \rangle|^2 \quad [۵۹.۳]$$

اکنون برای هر عدد مختلط z داریم

$$|z|^2 = (\operatorname{Re}(z))^2 + (\operatorname{Im}(z))^2 \geq (\operatorname{Im}(z))^2 = \left[\frac{1}{2i} (z - z^*) \right]^2 \quad [۶۰.۳]$$

به این ترتیب، اگر قرار دهیم $z = \langle f | g \rangle$ آنگاه می‌رسیم به

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} [\langle f | g \rangle - \langle g | f \rangle] \right)^2 \quad [۶۱.۳]$$

اما

$$\begin{aligned}
 \langle f|g\rangle &= \langle (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi | (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi \rangle = \langle \Psi | (\hat{A} - \langle A \rangle) (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi \rangle \\
 &= \langle \Psi | (\hat{A}\hat{B} - \hat{A}\langle B \rangle - \hat{B}\langle A \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle) \Psi \rangle \\
 &= \langle \Psi | \hat{A}\hat{B} \Psi \rangle - \langle B \rangle \langle \Psi | \hat{A} \Psi \rangle - \langle A \rangle \langle \Psi | \hat{B} \Psi \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle \langle \Psi | \Psi \rangle \\
 &= \langle \hat{A}\hat{B} \rangle - \langle B \rangle \langle A \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle \\
 &= \langle \hat{A}\hat{B} \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle
 \end{aligned}$$

به طور مشابه

$$\langle g|f\rangle = \langle \hat{B}\hat{A} \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle$$

بنابراین

$$\langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle = \langle \hat{A}\hat{B} \rangle - \langle \hat{B}\hat{A} \rangle = \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle$$

که در آن

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

جابجاگر دو عملگر (رابطه ۴۸.۲) است. نتیجه گیری:

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right)^2$$

[۶۲.۳]

عبارت فوق کلی‌ترین شکل اصل عدم قطعیت (تعمیم یافته) است. شاید فکر کنید وجود \hat{t} این عبارت را کم اهمیت می‌کند - آیا طرف راست این رابطه منفی نیست؟ نه، زیرا جابه‌جاگر دو عملگر هرمیتی عامل \hat{t} خودش را منتقل می‌کند و به این ترتیب این دو \hat{t} همدیگر را حذف می‌کنند.^{۱۷}

برای مثال، فرض کنید مشاهده‌پذیر اول مکان ($\hat{A} = x$) و مشاهده‌پذیر دوم تکانه ($\hat{B} = (\hbar/i) d/dx$) است. پیشتر در فصل ۲ (رابطه ۵۱.۲) جابجاگر آنها را حساب کردیم:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

از اینرو

$$\sigma_x^2 \sigma_p^2 \geq \left(\frac{1}{2i} i\hbar \right)^2 = \left(\frac{\hbar}{2} \right)^2$$

یا، از آنجا که انحراف معیار استاندارد به خاطر سرشت آنها مثبت است، پس

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2} \quad [۶۳.۳]$$

عبارت فوق اصل عدم قطعیت هایزنبرگ اصلی است، اما حالا می‌بینیم که این تنها یک کاربرد از قضیه‌ای بسیار عمومی‌تر است.

در واقع، برای هر جفت مشاهده‌پذیر که عملگرهای مانسته آنها با هم جابه‌جا نشود، یک «اصل عدم قطعیت» وجود خواهد داشت - اینها را مشاهده‌پذیرهای ناسازگار می‌نامیم. مشاهده‌پذیرهای ناسازگار ویژه بردارهای مشترک ندارند - دست کم، نمی‌توانند مجموعه کاملی از ویژه توابع داشته باشند (مساله ۱۵.۳ را ملاحظه کنید). در مقابل، مشاهده‌پذیرهای سازگار

^{۱۷} به بیان دقیق‌تر، جابجاگر دو عملگر هرمیتی خودش پاد هرمیتی است ($\hat{Q}^\dagger = -\hat{Q}$) برای همین مقدار چشمداشتی آن موهومی است (مساله ۲۶.۳).

(جایجا شونده) قطعا مجموعه‌های کامل ویژه توابع همزمان را می‌پذیرند.^{۱۸} مثلا، در مورد اتم هیدروژن (همانطور که در فصل ۴ خواهیم دید) هامیلتونی، بزرگی تکانه زاویه‌ای و نیز مولفه z تکانه زاویه‌ای دو به دو مشاهده‌پذیرهای سازگار به شمار می‌روند، برای همین با استفاده از این سه عملگر ویژه توابع همزمان درست می‌کنیم که به ترتیب با سه ویژه مقدارشان برچسب می‌خورند. اما هیچ ویژه تابعی از مکان وجود ندارد که ویژه تابع تکانه هم باشد، زیرا این دو عملگر ناسازگارند.

دقت کنید که اصل عدم قطعیت یک پیش فرض اضافی در مکانیک کوانتومی محسوب نمی‌شود، بلکه در عوض پیامدی از تعبیر آماری است. شاید از خودتان بپرسید این اصل چگونه در آزمایشگاه تأیید می‌شود - به چه دلیل نمی‌توانید (به فرض) هم مکان و هم تکانه یک ذره را تعیین کنید؟ بی‌تردید می‌توانید مکان ذره را اندازه بگیرید، اما عمل اندازه‌گیری منجر به فروافت تابع موج ذره روی قله‌ای باریک می‌شود که لزوما حامل بازه گسترده‌ای از طول موج‌ها (و از آنجا گشتاورها) در تجزیه فوریه آن است. پس اگر حالا تکانه را اندازه بگیرید، حالت روی موج سینوسی بلندی فرومی‌افتد که (در این مورد) طول موج خوش تعریفی دارد - ولی ذره دیگر واجد مکانی که در اندازه‌گیری اول بدست آوردید نمی‌باشد.^{۱۹} پس مساله از این قرار است که اندازه‌گیری دوم نتایج حاصل از اندازه‌گیری اول را بی‌استفاده می‌کند. تنها اگر تابع موج به طور همزمان ویژه حالت هر دو مشاهده‌پذیر باشد این امکان وجود دارد که اندازه‌گیری دوم را بدون ایجاد اختلال در حالت ذره

^{۱۸} این امر مانسته این است که ماتریس‌های غیر جایجا شونده را نمی‌توان به طور همزمان قطری کرد (به عبارت دیگر، نمی‌توان هر دوی آنها را با استفاده از یکجور تبدیل به شکل خطی برد)، درحالی‌که ماتریس‌های هرمیتی جایجا شونده را می‌توان به طور همزمان قطری کرد. بخش ۵ از ضمیمه را ملاحظه کنید.

^{۱۹} نیلز بور در بررسی دقیق سازوکاری که با آن اندازه‌گیری x (برای نمونه) مقدار از پیش موجود p را از بین می‌برد در دسرهای زیادی متحمل شد. اصل مطلب این است که به منظور تعیین مکان ذره چاره‌ای جز سیخونک زدن به آن ندارید - به فرض باید به آن نور بتابانید. اما این فوتون‌ها تکانه‌ای به ذره می‌دهند که شما قادر به کنترل آن نیستید. حال مکان ذره را می‌دانید، اما دیگر از تکانه آن اطلاعی ندارید. بحث‌های معروف او با اینشتین شامل مثال‌های بسیار دلچسبی است که به تفصیل نشان می‌دهد چگونه قیده‌های تجربی اصل عدم قطعیت را تقویت می‌کنند. روایت انگیزه‌بخشی در مقاله *Albert Einstein: Philosopher-Scientist* به قلم بور و ویرایش P. A. Schlipp در مجله

Tudor، نیویورک (۱۹۴۹) آمده است.

انجام داد (دومین فروافت در اینحالت چیزی را عوض نمی‌کند). با این وجود، در کل، این امر به شرطی امکان‌پذیر است که دو مشاهده‌پذیر سازگار باشند.

مساله ۱۳.۳

(الف) تساوی جابجایی زیر را ثابت کنید:

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C] \quad [۶۴.۳]$$

(ب) نشان دهید

$$[x^n, p] = i\hbar x^{n-1}$$

(پ) در حالت کلی‌تر نشان دهید به ازای هر تابع $f(x)$ داریم:

$$[f(x), p] = i\hbar \frac{df}{dx} \quad [۶۵.۳]$$

مساله ۱۴.۳ * «اصل عدم قطعیت (نام خودتان)» معروف را ثابت کنید که عدم قطعیت در

مکان ($A = x$) را به عدم قطعیت در انرژی ($B = p^2/2m + V$) ربط می‌دهد:

$$\sigma_x \sigma_H \geq \frac{\hbar}{2m} |\langle p \rangle|$$

به ازای حالت‌های مانا این عبارت چیز زیادی در اختیاران قرار نمی‌دهد - چرا؟

مساله ۱۵.۳ نشان دهید دو عملگر غیر جابجا شونده نمی‌توانند مجموعه کاملی از ویژه توابع

مشترک داشته باشند. راهنمایی: نشان دهید چنانچه \hat{P} و \hat{Q} مجموعه کاملی از ویژه توابع

مشترک داشته باشند، در آنصورت به ازای هر تابعی در فضای هیلبرت داریم $[\hat{P}, \hat{Q}] = 0$.

۲.۴.۳ بسته موج با عدم قطعیت کمینه

تا اینجا دو بار با تابع موج مواجه شده‌ایم که به اصل عدم قطعیت مکان - تکانه رسیده است

(مساله ۱۱.۲) و بسته موج گاوسی برای ذره آزاد ($\sigma_x \sigma_p = \hbar/2$): حالت پایه نوسانگر هماهنگ (مساله ۱۱.۲) و بسته موج گاوسی برای ذره آزاد

(مساله ۲۲.۲). این امر به سوال جالب توجهی منتهی می‌شود: عمومی‌ترین بسته موج با کمینه عدم

قطعیت چیست؟ اگر نگاهی رو به عقب به اثبات اصل عدم قطعیت بیندازیم، ملاحظه می‌کنیم که

در دو نقطه نامساوی‌ها وارد بحث می‌شدند: روابط ۵۹.۳ و ۶۰.۳. فرض کنید ملزم می‌کنیم که اینها یک برابری باشند و آنگاه ببینید که این الزام بیانگر چه مطلبی درباره Ψ است.

نامساوی شوارتز زمانی یک برابری (تساوی) می‌شود که یک تابع مضربی از تابع دیگر باشد: $\langle f|f \rangle = \langle g|g \rangle$ به ازای یک ثابت عددی مختلط (مساله ۵ بخش ضمیمه را ملاحظه کنید). در این بین، در رابطه ۶۰.۳ بخش حقیقی z را کنار گذاشتیم؛ تساوی در صورتی بدست می‌آید که $\text{Re}(z) = 0$ باشد؛ مثل آنکه بگوئیم $\text{Re}(f|g) = \text{Re}(c\langle f|f \rangle) = 0$. حالا که $\langle f|f \rangle$ حقیقی است، پس این بدان معنی است که ثابت c باید فقط موهومی باشد - بیاید آنرا ia بنامیم. به این ترتیب، شرط لازم و کافی برای کمینه عدم قطعیت عبارت است از

$$g(x) = iaf(x) \quad [۶۶.۳]$$

که a در آن حقیقی است.

برای اصل عدم قطعیت مکان - تکانه این معیار به این شکل می‌شود

$$\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} - \langle p \rangle \right) \Psi = ia(x - \langle x \rangle) \Psi \quad [۶۷.۳]$$

که معادله دیفرانسیلی برحسب Ψ به عنوان تابعی از x است. جواب عمومی آن (مساله ۱۶.۳) عبارت است از:

$$\Psi(x) = Ae^{-a(x-\langle x \rangle)^2/2\hbar} e^{i\langle p \rangle x/\hbar} \quad [۶۸.۳]$$

آشکار است که بسته موج با کمینه عدم قطعیت بسته موج گاوسی است - و با اطمینان کامل می‌توان گفت دو مثالی که قبلاً با آنها برخورد کردیم هر دو گاوسی^{۲۰} بودند.

^{۲۰} دقت کنید که این تنها بستگی Ψ به x است که اینجا مورد بحث است - «ثوابت» a ، A ، $\langle x \rangle$ و $\langle p \rangle$ ممکن است توابعی از زمان باشند و به این ترتیب با گذشت زمان احتمال دارد Ψ از حالت کمینه متحول شود. همه آنچه روی آن تاکید داریم این است که، در یک لحظه، تابع موج در x گاوسی است، بنابراین (در همان لحظه) حاصلضرب عدم قطعیت کمینه است.

مساله ۱۶.۳ رابطه ۶۷.۳ را برای $\Psi(x)$ حل کنید. (توجه داشته باشید که (x) و (p) ثابت‌های عددی هستند).

۳.۴.۳ اصل عدم قطعیت انرژی-زمان

اصل عدم قطعیت مکان - تکانه را عموماً به این صورت می‌نویسیم

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad [۶۹.۳]$$

Δx «عدم قطعیت» در (x) نمادگذاری غیر دقیق (به زبانی نامناسب) برای بیان انحراف معیار استاندارد نتایج اندازه‌گیریهای تکراری روی سیستم‌هایی است که به صورت همانند تدارک دیده شده‌اند.^{۲۱} رابطه ۶۹.۳ را اغلب با اصل عدم قطعیت انرژی - زمان جفت می‌کنند

$$\Delta t \Delta E \geq \frac{\hbar}{2} \quad [۷۰.۳]$$

قدر مسلم، به سیاق نسبیت خاص، می‌توان شکل انرژی - زمان را پیامدی از نسخه مکان - تکانه دانست زیرا x و t (یا به بیان دقیقتر، ct) در چهار بردار مکان - زمان به هم می‌خورند در حالیکه p و E (یا به بیان درست‌تر، E/c) در چهار بردار انرژی - تکانه به هم می‌خورند (با هم می‌آیند). در یک نظریه نسبیتی رابطه ۷۰.۳ پیوستی الزامی برای رابطه ۶۹.۳ خواهد بود. اما ما که روی مکانیک کوانتومی نسبیتی کار نمی‌کنیم. معادله شرودینگر صراحتاً غیر نسبیتی است: مکانیک کوانتومی غیر نسبیتی t و x را در وضعیتی بسیار غیر همانند تلقی می‌کند (به عنوان یک معادله دیفرانسیل نسبت به t از درجه اول است اما نسبت به x از درجه ۲) و رابطه ۷۰.۳ موکداً مستلزم رابطه ۶۹.۳ نیست. اکنون قصد داریم اصل عدم قطعیت انرژی - زمان را استخراج کنیم و در حین آن

^{۲۱} بسیاری از کاربردهای گاه به گاه و غیر رسمی اصل عدم قطعیت در حقیقت (اغلب به طور ناخواسته) مبتنی بر معیاری کاملاً متفاوت - و گاه هم بسیار غیر موجه - از «عدم قطعیت» هستند. مقاله Jan Hilgevoord در مجله *Am. J. Phys.* 70, 983 (2002) را ملاحظه کنید.

مشتق گیری شما را متقاعد کنم که این رابطه رویهمرفته واقعا جانور دیگری است که تشابه ظاهریش با اصل عدم قطعیت مکان - تکانه در حقیقت کاملا گمراه کننده است.

هر چه باشد، مکان، تکانه و انرژی همگی متغیرهای دینامیکی هستند - ویژگی‌های مشخصه قابل اندازه گیری سامانه، در یک لحظه مشخص. اما خود زمان یک متغیر دینامیک نیست (نه، به هیچ میزان، در یک نظریه غیر نسبیتی): راه نمی‌افتید دوره که «زمان» یک ذره را اندازه بگیرید بلکه در عوض عموما مکان یا انرژی آنرا می‌سنجید. زمان از آن دست متغیرهای مستقلى است که متغیرهای دینامیکی در آن تابع هستند. به طور خاص، Δt در اصل عدم قطعیت انرژی - زمان انحراف معیار استاندارد از مجموعه‌ای از اندازه گیریهای زمانی نیست؛ به بیان کلی‌تر (کمی بعد آنرا دقیقتر می‌کنم)، نشان دهنده زمانی است که طول می‌کشد تا سامانه به طور اساسی و واقعی تغییر کند.

بیائید به عنوان معیاری از میزان سرعت تغییر یک سامانه، مشتق زمانی مقدار چشمداشتی عملگری مثل $Q(x, p, t)$ را محاسبه کنیم:

$$\frac{d}{dt} \langle Q \rangle = \frac{d}{dt} \langle \Psi | \hat{Q} | \Psi \rangle = \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial t} | \hat{Q} | \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi | \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} | \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi | \hat{Q} | \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\rangle$$

اکنون معادله شرودینگر حاکی از آن است که

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$$

($H = p^2/2m + V$) هامیلتونی است. بنابراین

$$\frac{d}{dt} \langle Q \rangle = -\frac{1}{i\hbar} \langle \hat{H} \Psi | \hat{Q} | \Psi \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi | \hat{Q} | \hat{H} \Psi \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \right\rangle$$

اما \hat{H} هرمیتی است، بنابراین $\langle \hat{H} \Psi | \hat{Q} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{H} | \hat{Q} | \Psi \rangle$ و در نتیجه

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle Q \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{Q}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \right\rangle} \quad [۷۱.۳]$$

این نتیجه به خودی خود دستاورد جالب و سودمندی است (مسائل ۱۷.۳ و ۳۱.۳ را ملاحظه کنید). در حالت معمول، که عملگر صریحا به زمان^{۲۲} بستگی ندارد، این رابطه حاکی از آن است که آهنگ تغییر مقدار چشمداشتی توسط جابه‌جاگر آن عملگر با هامیلتونی تعیین می‌شود. به خصوص، اگر \hat{Q} با \hat{H} جابه‌جا شود در آنصورت $\langle Q \rangle$ ثابت است، برای همین به این مفهوم Q یک کمیت پایسته است.

حال، فرض کنید در اصل عدم قطعیت تعمیم یافته (رابطه ۶۲.۳) بگیریم $A = H$ و $B = Q$ و فرض کنیم Q صراحتا به زمان بستگی ندارد:

$$\sigma_H^2 \sigma_Q^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle [\hat{H}, \hat{Q}] \rangle \right)^2 = \left(\frac{1}{2i} \frac{\hbar d\langle Q \rangle}{dt} \right)^2 = \left(\frac{\hbar}{2} \right)^2 \left(\frac{d\langle Q \rangle}{dt} \right)^2$$

یا، به بیان ساده‌تر

$$\sigma_H \sigma_Q \geq \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d\langle Q \rangle}{dt} \right| \quad [۷۲.۳]$$

بیانید بگیریم $\Delta E \equiv \sigma_H$ و

$$\Delta t \equiv \frac{\sigma_Q}{|d\langle Q \rangle/dt|} \quad [۷۳.۳]$$

در آنصورت

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad [۷۴.۳]$$

که اصل عدم قطعیت انرژی - زمان است. اما توجه کنید که اینجا منظور از Δt چیست: از آنجائیکه

^{۲۲} عملگرهایی که بستگی صریح زمانی دارند نادرند، از اینرو اغلب همیشه داریم $\partial \hat{Q} / \partial t = 0$. به عنوان مثالی از بستگی صریح زمانی، انرژی پتانسیل یک نوسانگر هماهنگ را در نظر بگیرید که ثابت فتر آن متغیر است (شاید دما در حال افزایش باشد که در نتیجه فتر انعطاف‌پذیرتر می‌شود): $Q = (1/2)m[\omega(t)]^2 x^2$

$$\sigma_Q = \left| \frac{d\langle Q \rangle}{dt} \right| \Delta t$$

Δt نمایشگر آن مقدار زمانی است که طول می‌کشد تا مقدار چشمداشتی Q از یک انحراف معیار استاندارد تغییر کند.^{۲۳} در عمل، Δt تماما به مشاهده‌پذیر (Q) بستگی دارد که متوجه نگریستن به آن هستید - این تغییر شاید برای یک مشاهده‌پذیر سریع و برای دیگری آهسته باشد. اما اگر ΔE کوچک باشد، آنگاه آهنگ تغییر تمام مشاهده‌پذیرها باید بسیار تدریجی باشد؛ یا، به یک بیان دیگر، اگر مشاهده‌پذیر به سرعت تغییر کند، «عدم قطعیت» در انرژی هم باید بزرگ باشد.

مثال ۵.۳ در وضعیت فرین حالت پایه که برای آن انرژی به طور یکتا تعیین می‌شود، تمام مقادیر چشمداشتی در زمان ثابت هستند ($\Delta E = 0 \Rightarrow \Delta t \rightarrow \infty$) - در واقع، همانطور که کمی پیشتر به آن اشاره کردیم (رابطه ۹.۲ را ببینید). حالا برای آنکه کاری کرده باشید، باید یک ترکیب خطی از دست کم دو حالت پایه را بگیرید، مثل رابطه زیر

$$\Psi(x, t) = a\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + b\psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}$$

اگر a و b و ψ_1 و ψ_2 حقیقی باشند داریم

$$|\Psi(x, t)|^2 = a^2(\psi_1(x))^2 + b^2(\psi_2(x))^2 + 2ab\psi_1(x)\psi_2(x) \cos\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar}t\right)$$

دوره نوسان عبارت است از $\tau = 2\pi\hbar/(E_2 - E_1)$. در اینصورت به طور غیر دقیق $\Delta E = E_2 - E_1$ و $\Delta t = \tau$ است (برای محاسبه دقیق، مساله ۱۸.۳ را ببینید)، به این ترتیب

$$\Delta E \Delta t = 2\pi\hbar$$

که مسلما بزرگتر از یا مساوی با $\hbar/2$ است.

^{۲۳} این را گاهی فرمولاسیون «مندیلسام-تام» از اصل عدم قطعیت انرژی - زمان می‌نامند. برای یک بازنگری از رهیافت‌های جایگزین مقاله Paul Busch در مجله Found. Phys. 20, 1 (1990) را ملاحظه کنید.

مثال ۶.۳ چقدر طول می‌کشد تا بسته موج یک ذره آزاد از یک نقطه به خصوص عبور کند (شکل ۱.۳)؟ به طور کیفی (نسخه دقیق در مساله ۱۹.۳ مورد بررسی قرار گرفته است) داریم $\Delta t = \Delta x / v = m \Delta x / p$ اما $E = p^2 / 2m$ ، پس $\Delta E = p \Delta p / m$. به این ترتیب

$$E \Delta t = \frac{p \Delta p}{m} \frac{m \Delta x}{p} = \Delta x \Delta t$$

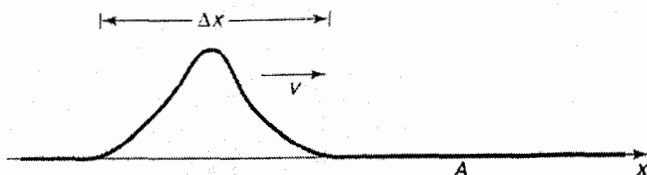
که بنابر اصل عدم قطعیت تکانه - مکان بزرگتر از یا مساوی با $\hbar/2$ است.

مثال ۷.۳ ذره Δ تقریباً 10^{-23} پیش از واپاشی دوام می‌آورد. اگر نموداری ستونی از تمام اندازه‌گیریهای انجام شده روی جرم آن تهیه کنید، نوعی نمودار بل بدست می‌آورید که مرکز در $1232 \text{ MeV}/c^2$ بوده و پهنای آن هم حدود $120 \text{ MeV}/c^2$ می‌باشد (شکل ۲.۳). چرا انرژی سکون (mc^2) گاهی بالاتر از ۱۲۳۲ و گاهی پائین‌تر از آن است؟ آیا این یک خطای تجربی است؟ نه، زیرا:

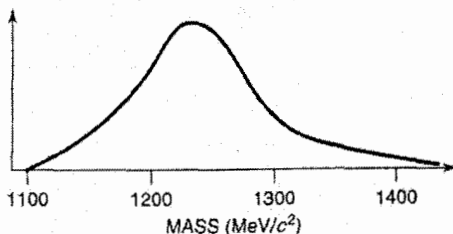
$$\Delta E \Delta t = \left(\frac{120}{2} \text{ MeV} \right) (10^{-23} \text{ sec}) = 6 \times 10^{-22} \text{ MeV sec}$$

نظر به اینکه $\hbar/2 = 3 \times 10^{-22} \text{ MeV sec}$ ، پس گسترش (پهن شدگی) m به اندازه حدودی اصل عدم قطعیت مجاز است - ذره‌ای با چنین طول عمر کوتاهی به واقع جرم بسیار خوش تعریفی ندارد.^{۲۴}

^{۲۴} در حقیقت، مثال ۷.۳ کمی گول زننده است. زمانی به اندازه 10^{-23} ثانیه را که نمی‌توانید با کروномتر اندازه بگیرید و در عمل طول عمر چنین ذره کم پایداری از پهنای نمودار جرم با استفاده از اصل عدم قطعیت به عنوان ورودی استنباط می‌شود. با این حال، این نکته حتی اگر منطق به کار رفته قهقراپی باشد هم معتبر است. به علاوه، اگر فرض کنید Δ تقریباً هم اندازه یک پروتون باشد ($\sim 10^{-15} \text{ m}$) در آنصورت 10^{-23} ثانیه به طور غیر دقیق زمانی است که طول می‌کشد تا نور فاصله‌ای به درازای این ذره را پیماید و تصور اینکه این طول عمر بتواند از این هم کمتر باشد دیگر خیلی دشوار است.



شکل ۱.۲: بسته موج یک ذره آزاد به نقطه A نزدیک می‌شود (مثال ۶.۳).



شکل ۲.۲: نمودار اندازه‌گیری‌های جرم ذره Δ (مثال ۷.۳).

به گوناگونی معانی خاصی که در این مثال‌ها به عبارت Δt اطلاق شد توجه کنید: در مثال ۵.۳ این عبارت یک دوره نوسان است؛ در مثال ۶.۳ زمانی است که طول می‌کشد ذره از یک نقطه عبور کند؛ در مثال ۷.۳ طول عمر یک ذره ناپایدار است. با این حال در هر مورد، Δt زمانی است که در آن سامانه مورد نظر دچار تغییری «اساسی» می‌شود.

اغلب می‌گوئیم اصل عدم قطعیت به این معنی است که انرژی در مکانیک کوانتومی به طور کامل پایسته نیست - یعنی اینکه مجازید انرژی ΔE را «قرض بگیرید» تا هنگامیکه در مدت زمانی معادل با $\Delta t \approx \hbar/2\Delta E$ آنرا «پس بدهید» هرچه نقض بزرگتر باشد، دوره تناوبی که در آن این اتفاق بتواند رخ دهد کوتاه‌تر می‌شود. خاطر نشان می‌شود که برداشت‌های منطقی و پذیرفتنی بسیاری درباره اصل عدم قطعیت انرژی - زمان وجود دارد، اما این یکی از آنها نیست. مکانیک کوانتومی در هیچ کجا نقض پایستگی انرژی را مجاز نمی‌شمارد و بی‌شک هیچ مجوزی هم برای این منظور در استخراج رابطه ۷۴.۳ صادر نشده است. اما اصل عدم قطعیت به شکلی خارق‌العاده نیرومند است: می‌توان بدون آنکه به نتایج نادرست جدی منتهی شود از آن استفاده نابجا کرد و به عنوان یک نتیجه و پیامد فیزیکدانان برای آن به شکلی سهل انگارانه‌تر به کار برند.

مساله ۱۷.۳* رابطه ۷۱.۳ را به موارد خاص زیر اعمال کنید: (الف) $Q = 1$ ؛ (ب) $Q = H$ ؛ (پ) $Q = x$ ؛ (ت) $Q = p$. در هر مورد نتیجه حاصل را با توجه به روابط ۲۷.۱، ۳۳.۱، ۳۸.۱ و پایستگی انرژی تفسیر کنید (اظهارات رابطه ۴۰.۲ را ملاحظه کنید).

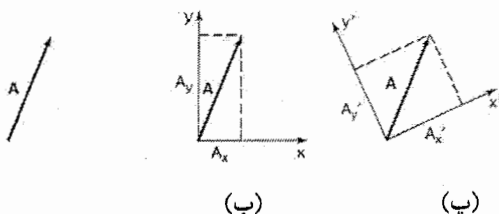
مساله ۱۸.۳ با محاسبه دقیق σ_H ، σ_x و $d\langle x \rangle / dt$ ، اصل عدم قطعیت انرژی - زمان را در مورد بسته موج مساله ۵.۲ و مشاهده پذیر x بیازمائید.

مساله ۱۹.۳ با محاسبه دقیق σ_H ، σ_x و $d\langle x \rangle / dt$ ، اصل عدم قطعیت انرژی - زمان را در مورد بسته موج ذره آزاد در مساله ۴۳.۲ و مشاهده پذیر x بیازمائید.

مساله ۲۰.۳ نشان دهید اصل عدم قطعیت انرژی - زمان هنگامیکه مشاهده‌پذیر سوال x است به اصل عدم قطعیت «نام خودتان» خلاصه می‌شود (مساله ۱۴.۳).

۶.۳ نمادگذاری دیراک

بردار معمولی A را در دو بعد (شکل ۳.۳ آ)) تصور کنید. چگونه این بردار را برای یک نفر تشریح می‌کنید؟ راحت‌ترین راه برپا کردن یک دستگاه مختصات، x و y و مشخص کردن مولفه‌های A است: $A_x = \hat{i} \cdot A$ ، $A_y = \hat{j} \cdot A$ (شکل ۳.۳ ب)). بی‌گمان، خواهر شما هم احتمالاً مجموعه متفاوتی از محورها، x' و y' را رسم می‌کند (شکل ۳.۳ پ)). اما همه اینها یک بردار هستند - ما فقط داریم آنها را نسبت به دو پایه متفاوت $\{\hat{i}, \hat{j}\}$ و $\{\hat{i}', \hat{j}'\}$ بیان می‌کنیم. خود بردار «در آن بیرون در فضا» قرار دارد، مستقل از انتخاب دلخواه هر کس از دستگاه مختصات.



شکل ۳.۲: (آ) بردار A . (ب) مولفه‌های بردار A نسبت به محورهای xy . (پ) مولفه‌های بردار A نسبت به محورهای $x'y'$.

همین وضع برای حالت یک سامانه در مکانیک کوانتومی هم صادق است. حالت با یک بردار، $|\delta(t)\rangle$ ، نمایش داده می‌شود که «آن بیرون در فضای هیلبرت قرار دارد» اما می‌توانیم آنرا نسبت به هر تعداد پایه متفاوت بیان کنیم. تابع موج $\Psi(x, t)$ در حقیقت عبارت است از ضریب بسط $|\delta\rangle$ در پایه ویژه توابع مکان:

$$\Psi(x, t) = \langle x | \delta(t) \rangle \quad [۷۵.۳]$$

(با در نظر گرفتن این مطلب که $\langle x |$ نشانه ویژه تابع \hat{x} با ویژه مقدار x است)^{۲۵}، درحالی‌که تابع موج فضای تکانه $\Phi(p, t)$ عبارت است از بسط $|\delta\rangle$ در پایه ویژه توابع تکانه:

$$Q(p, t) = \langle p | \delta(t) \rangle \quad [۷۶.۳]$$

(با در نظر گرفتن این مطلب که $\langle p |$ نشانه ویژه تابع \hat{p} با ویژه مقدار p است)^{۲۶}، درغیر اینصورت می‌توانیم $|\delta\rangle$ را در پایه ویژه توابع انرژی (با این فرض برای سادگی که طیف گسسته است) بسط دهیم:

$$c_n(t) = \langle n | \delta(t) \rangle \quad [۷۷.۳]$$

^{۲۵} نمی‌خواهم آنرا δ بنامم (مساله ۳۹.۳)، زیرا آن نماد شکل پایه مکان آن است برای همین اصل مطلب اینجا این است که خودمان را از دست هر پایه خاصی رها کنیم. قدر مسلم، وقتی ابتدا فضای هیلبرت را به صورت مجموعه‌ای از توابع انتگرال‌پذیر مجذوری - روی x - شرح دادم که بسیار هم دست و پا گیر بود، خواهی نخواهی خودمان را به نمایش خاصی (در پایه مکان) محدود کردم. حال می‌خواهم آنرا به عنوان فضای تابعی مجردی در نظر بگیرم که می‌توان اعضایش را نسبت به هر پایه‌ای که دوست دارید بیان کرد.

^{۲۶} در فضای مکان به صورت $f_x(p)$ خواهد بود (رابطه ۳۲.۳).

(با در نظر گرفتن این مطلب که $|n\rangle$ نشانه n امین ویژه تابع \hat{H} است) - رابطه ۴۶.۳. اما این که دقیقاً همان حالت است؛ توابع Ψ و Φ و نیز مجموعه ضرائب $\{c_n\}$ دقیقاً محتوی یک اطلاعات هستند - آنها به سادگی عبارتند از سه راه مختلف برای توصیف یک بردار:

$$\begin{aligned}\Psi(x, t) &= \int \Psi(y, t) \delta(x - y) dy = \int \Phi(p, t) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} dp \\ &= \sum c_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(x)\end{aligned}\quad [۷۸.۳]$$

عملگرها (که نمایانگر مشاهده‌پذیرها هستند) ترکیباتی خطی به شمار می‌روند - آنها یک بردار را به برداری دیگر «تبدیل» می‌کنند:

$$|\beta\rangle = \hat{Q}|\alpha\rangle\quad [۷۹.۳]$$

درست مثل بردارها که نسبت به یک پایه خاص $\{|e_n\rangle\}$ ^{۲۷} با مولفه‌هایشان نشان داده می‌شوند،

$$|\alpha\rangle = \sum_n a_n |e_n\rangle, \quad \text{با } a_n = \langle e_n | \alpha \rangle; \quad |\beta\rangle = \sum_n b_n |e_n\rangle, \quad \text{با } b_n = \langle e_n | \beta \rangle\quad [۸۰.۳]$$

عملگرها هم (نسبت به یک پایه خاص) با مولفه‌های ماتریسی‌شان نشان داده می‌شوند^{۲۸}

$$\langle e_m | \hat{Q} | e_n \rangle = Q_{mn}\quad [۸۱.۳]$$

در این نمادگذاری رابطه ۷۹.۳ شکل زیر را به خود می‌گیرد

$$\sum_n b_n |e_n\rangle = \sum_n a_n \hat{Q} |e_n\rangle\quad [۸۲.۳]$$

یا، با گرفتن ضرب داخلی در $|e_m\rangle$ داریم

^{۲۷} فرض من بر این است که پایه گسسته است؛ در غیر اینصورت n به شناسه پیوسته‌ای تبدیل می‌شود و جمع‌ها هم جای خود را به انتگرال‌ها می‌دهند.

^{۲۸} این واژه گذاری به وضوح از حالت با ابعاد متناهی الهام گرفته شده، اما ماتریس در اینجا به طور نوعی بینهایت مولفه (که شاید حتی غیر قابل شمارش باشند) دارد.

$$\sum_n b_n \langle e_m | e_n \rangle = \sum_n a_n \langle e_m | \hat{Q} | e_n \rangle \quad [۸۳.۳]$$

و در نتیجه

$$b_m = \sum_n Q_{mn} a_n \quad [۸۴.۳]$$

بدین ترتیب عناصر ماتریس به شما می‌گویند که مولفه‌ها چگونه تبدیل می‌شوند.

در ادامه با سامانه‌هایی برخورد می‌کنیم که تنها تعداد محدودی (N) حالت مستقل خطی را می‌پذیرند. در آنحالت $|\delta(t)\rangle$ در یک فضای برداری N بعدی جای دارد؛ می‌توان آنرا به صورت ستونی از (N) مولفه (نسبت به پایه مفروض) نمایش داد، برای همین عملگرها شکل ماتریس‌های معمولی ($N \times N$) را به خود می‌گیرند. اینها ساده‌ترین سامانه‌های کوانتومی محسوب می‌شوند - اینجا خبری از هیچیک از ریزه کاری‌های مربوط به فضاهای برداری بینهایت بعدی نیست. ساده‌ترین آنها سامانه دو حالتی است که در مثال پیش رو آنرا بررسی می‌کنیم.

مثال ۸.۳ سامانه‌ای را تصور کنید که در آن تنها دو حالت مستقل خطی وجود دارد:^{۲۹}

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{و} \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

عمومی‌ترین حالت یک ترکیب خطی بهنجار شده است:

$$|\delta\rangle = a|1\rangle + b|2\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \quad |a|^2 + |b|^2 = 1$$

می‌توان هامیلتونی را با یک ماتریس (هرمیتی) نمایش داد؛ فرض کنید هامیلتونی واجد شکل خاص زیر است

^{۲۹} به بیان فنی، نمادهای «تساوی» اینجا به معنی «با ... نمایش داده می‌شوند» هستند، اما من فکر نمی‌کنم اگر خودمان را

با نمادگذاری غیر رسمی متداول منطبق کنیم اختلالی در کار پیش آید.

$$H = \begin{pmatrix} h & g \\ g & h \end{pmatrix}$$

که در آن h و g ثابت‌های عددی حقیقی هستند. اگر سامانه (در لحظه $t = 0$) در حالت $|1\rangle$ باشد، حالت آن در لحظه t چیست؟

پاسخ: معادله شرودینگر (مستقل از زمان) می‌گوید

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\mathcal{S}\rangle = H |\mathcal{S}\rangle \quad [۸۵.۳]$$

به عبارت دیگر، بدنبال ویژه بردارها و ویژه مقادیر H هستیم. معادله مشخصه ویژه مقادیر را تعیین می‌کند:

$$\det \begin{pmatrix} h-E & g \\ g & h-E \end{pmatrix} = (h-E)^2 - g^2 = 0 \Rightarrow h-E = \mp g \Rightarrow E_{\pm} = h \pm g$$

اینطور که پیداست انرژی‌های مجاز عبارتند از $(h+g)$ و $(h-g)$. برای تعیین ویژه بردارها، می‌نویسیم

$$\begin{pmatrix} h & g \\ g & h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = (h \pm g) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \Rightarrow h\alpha + g\beta = (h \pm g)\alpha \Rightarrow \beta = \pm \alpha$$

از اینرو ویژه بردارهای بهنجار شده عبارتند از:

$$|\mathcal{S}_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}$$

در گام بعدی حالت اولیه را به صورت ترکیبی خطی از ویژه بردارهای هامیلتونی بسط می‌دهیم:

$$|\mathcal{S}(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\mathcal{S}_{+}\rangle + |\mathcal{S}_{-}\rangle)$$

سرانجام، بستگی زمانی استاندارد $\exp(-iE_n t/\hbar)$ را الصاق می‌کنیم:

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{-i(h+g)t/\hbar} |\mathcal{S}_{+}\rangle + e^{-i(h-g)t/\hbar} |\mathcal{S}_{-}\rangle] |\mathcal{S}(t)\rangle \\ &= \frac{1}{2} e^{-iht/\hbar} \left[e^{-igt/\hbar} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + e^{igt/\hbar} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right] \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2} e^{-iht/\hbar} \begin{pmatrix} e^{-igt/\hbar} + e^{igt/\hbar} \\ e^{-igt/\hbar} - e^{igt/\hbar} \end{pmatrix} = e^{-iht/\hbar} \begin{pmatrix} \cos(gt/\hbar) \\ -i \sin(gt/\hbar) \end{pmatrix}$$

اگر به این نتایج شک دارید، به هر شکل که درست می‌دانید آنرا بررسی کنید: آیا این نتیجه در معادله شرودینگر وابسته به زمان صدق می‌کند؟ آیا با حالت اولیه در $t = 0$ همخوانی دارد؟ این مدلی ابتدایی و ناسره برای نوسانهای نوترینو به شمار می‌رود. در آنحالت $\langle 1 |$ نوترینوی الکترون و $\langle 2 |$ نوترینوی موئون را نمایش می‌دهد؛ چنانچه هامیلتونی دارای یک جمله غیر قطری غیر از میان رونده (g) باشد، درآنصورت در طول زمان نوترینوی الکترون به نوترینوی موئون تبدیل می‌شود (و دوباره به حالت قبل باز می‌گردد).

دیراک پیشنهاد کرد نمادگذاری براکت برای ضرب داخلی، $\langle \alpha | \beta \rangle$ ، به دو بخش بریده شود که وی آنها را برا، $\langle \alpha |$ ، و کت، $|\beta \rangle$ نامید (نمی‌دانم چه بلایی سر c آمد). دومی یک بردار است، اما اولی دقیقاً چیست؟ اولی تابعی خطی از بردارها به این مفهوم است که وقتی به برداری می‌رسد (به سمت راست آن) یک عدد (مختلط) بدست می‌دهد - ضرب داخلی. (وقتی عملگری به یک بردار می‌رسد، بردار دیگری را می‌دهد؛ وقتی یک برا به یک بردار می‌رسد، یک عدد می‌دهد.) در یک فضای تابعی می‌توان برا را به عنوان دستورالعملی برای انتگرال گیری در نظر گرفت:

$$\langle f | = \int f^*[\dots] dx$$

که در آن منظور از $[\dots]$ هر تابعی است که برا در کتی که در سمت راست آن قرار می‌گیرد با آن مواجه می‌شود. در یک فضای برداری با ابعاد متناهی، که در آن بردارها با ماتریس‌های ستونی نمایش داده می‌شوند،

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \quad [۸۷.۳]$$

برا متناظر یک بردار سطری است:

$$\langle \alpha | = (\alpha_1^* \quad \alpha_2^* \quad \dots \quad \alpha_n^*) \quad [۸۸.۳]$$

آزادی عمل در گرفتن براها به عنوان کمیت‌های جدا از هم، بدون اتکا به دیگران، نمادگذاری توانمند و زیبایی را منظور می‌کند (هرچند من در این کتاب از آن استفاده نمی‌کنم). مثلاً، اگر $|\alpha\rangle$ یک بردار بهنجار شده باشد، عملگر

$$\hat{P} \equiv |\alpha\rangle\langle\alpha| \quad [۸۹.۳]$$

قسمت هر بردار دیگری که در ادامه $|\alpha\rangle$ قرار بگیرد را! سوا می‌کند:

$$\hat{P}|\beta\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle|\alpha\rangle$$

این را عملگر تصویرگر روی زیر فضای یک بعدی پوشانده شده با $|\alpha\rangle$ می‌نامیم. اگر $\{|e_n\rangle\}$ پایه راست هنجار گسسته‌ای باشد،

$$\langle e_m|e_n\rangle = \delta_{mn} \quad [۹۰.۳]$$

در آنصورت

$$\sum_n |e_n\rangle\langle e_n| = 1 \quad [۹۱.۳]$$

(عملگر همانی). چون اگر بگذاریم این عملگر روی هر بردار $|\alpha\rangle$ عمل کند، بسط $|\alpha\rangle$ در پایه $\{|e_n\rangle\}$ را بدست می‌آوریم:

$$\sum_n |e_n\rangle\langle e_n|\alpha\rangle = |\alpha\rangle \quad [۹۲.۳]$$

به همین ترتیب، اگر $\{|e_z\rangle\}$ پایه پیوسته راست هنجار شده دیراک باشد،

$$\langle e_z|e_{z'}\rangle = \delta(z - z') \quad [۹۳.۳]$$

در آنصورت

$$\int |e_z\rangle\langle e_z|dz = 1 \quad [۹۴.۳]$$

روابط ۹۱.۳ و ۹۴.۳ مناسبترین روش‌های بیان کاملیت هستند.

مساله ۲۱.۳ نشان دهید عملگرهای تصویرگر همانی هستند: $\hat{P}^2 = \hat{P}$. ویژه مقادیر \hat{P} را تعیین کرده و ویژه بردارهای آنرا مشخص کنید.

مساله ۲۲.۳ فضای برداری سه بعدی را تصور کنید که پایه راست هنجار $|1\rangle$ ، $|2\rangle$ و $|3\rangle$ آنرا می پوشاند. کت های $|\alpha\rangle$ و $|\beta\rangle$ از رابطه زیر بدست می آیند.

$$|\alpha\rangle = i|1\rangle - 2|2\rangle - i|3\rangle, |\beta\rangle = i|1\rangle + 2|3\rangle$$

(الف) $|\beta\rangle$ و $|\alpha\rangle$ را (برحسب پایه های همزاد $|1\rangle$ و $|2\rangle$ و $|3\rangle$) درست کنید.
 (ب) $\langle\alpha|\beta\rangle$ و $\langle\beta|\alpha\rangle$ را بدست آورده و اطمینان حاصل کنید که رابطه $\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^*$ برقرار است.

(ج) تمام نه عنصر ماتریس عملگر $\hat{A} \equiv |\alpha\rangle\langle\beta|$ را در این پایه بدست آورده و ماتریس A را تشکیل دهید. آیا این ماتریس هرمیتی است؟

مساله ۲۳.۳ هامیلتونی یک سامانه بخصوص دو سطحی عبارت است از

$$\hat{H} = \epsilon(|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2| + |1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|)$$

که در آن $|1\rangle$ و $|2\rangle$ پایه راست هنجار و ϵ عددی با بعد انرژی است. ویژه مقادیر و ویژه بردارهای این هامیلتونی را (به صورت ترکیباتی خطی از $|1\rangle$ و $|2\rangle$) بدست آورید. ماتریس H که نمایشگر \hat{H} نسبت به این پایه است چیست؟

مساله ۲۴.۳ بگذارید \hat{Q} عملگری با یک مجموعه کامل از ویژه بردارهای کامل باشد:

$$\hat{Q}|e_n\rangle = q_n|e_n\rangle \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

نشان دهید \hat{Q} را می توان برحسب تجزیه طیفی آن نوشت:

$$\hat{Q} = \sum_n q_n |e_n\rangle\langle e_n|$$

راهنمایی: یک عملگر با اثرش روی تمام بردارهای ممکن شناخته می شود، پس آنچه باید ثابت کنید این است که برای هر بردار $|\alpha\rangle$ داریم

$$\hat{Q}|\alpha\rangle = \left\{ \sum_n q_n |e_n\rangle \langle e_n| \right\} |\alpha\rangle$$

مسائل دیگری برای فصل ۳

مساله ۲۵.۳ چند جمله‌ای‌های لژاندر^{۳۰} با استفاده از روش گرام - اشمیت (مساله ۴ بخش ضمیمه) توابع $1, x, x^2, x^3$ را روی بازه $-1 \leq x \leq 1$ راست هنجار کنید. شاید جواب‌ها را تشخیص دهید - آنها (سوی از بهنجارش)^{۳۰} چند جمله‌ای‌های لژاندر (جدول ۱۰.۴) هستند.

مساله ۲۶.۳ یک عملگر پاد هرمیتی (یا هرمیتی بی‌تقارن) برابر است با منفی مزدوج هرمیتی خودش:

$$\hat{Q}^\dagger = -\hat{Q} \quad [95.3]$$

(الف) نشان دهید مقدار چشمداشتی یک عملگر پاد هرمیتی موهومی است.

(ب) نشان دهید جابجاگر دو عملگر هرمیتی پاد هرمیتی است. وضع جابجاگر دو عملگر پاد هرمیتی چگونه است؟

مساله ۲۷.۳ اندازه‌گیرهای پی در پی. عملگر \hat{A} ، که نمایشگر مشاهده‌پذیر A می‌باشد، دارای دو ویژه حالت ψ_1 و ψ_2 ، به ترتیب با ویژه مقدارهای a_1 و a_2 است. عملگر \hat{B} که نمایشگر مشاهده‌پذیر B می‌باشد، دو ویژه حالت بهنجار شده ϕ_1 و ϕ_2 با ویژه مقادیر b_1 و b_2 دارد. ویژه حالت‌ها با رابطه زیر به هم مربوط می‌شوند

$$\psi_1 = (3\phi_1 + 4\phi_2)/5, \psi_2 = (4\phi_1 - 3\phi_2)/5$$

(الف) مشاهده‌پذیر A را اندازه می‌گیریم که حاصل آن مقدار a_1 است. حالت سامانه (بلافاصله) پس از این اندازه‌گیری چیست؟

^{۳۰} لژاندر نمی‌دانست بهترین روش چیست؛ او عامل کلی را برداشت تا تمام توابعش در $x = 1$ به سمت ۱ میل کنند، برای همین ما هم انتخاب بد اقبال او را دنبال می‌کنیم.

(ب) حالا اگر B را اندازه بگیریم، نتایج ممکن چه هستند و احتمال‌های متناظر با آنها چیست؟
 (پ) درست بعد از اندازه‌گیری B ، دوباره A اندازه گرفته می‌شود. احتمال بدست آمدن a_1 چقدر است؟ (دقت کنید که پاسخ باید کاملاً نسبت به وقتی که به شما می‌گفتم اندازه‌گیری روی B انجام شده متفاوت باشد).

مساله ۲۸.۳* تابع موج فضای تکانه $\Phi_n(p, t)$ را برای n امین چاه پتانسیل نامتناهی بدست آورید. نمودارهای $|\Phi_1(p, t)|^2$ و $|\Phi_2(p, t)|^2$ را به صورت توابعی از p رسم کنید (به خصوص به نقاط $p = \pm n\pi\hbar/a$ دقت کنید). از $\Phi_n(p, t)$ برای محاسبه مقدار چشمداشتی p^2 استفاده کنید. پاسخ خود را با جواب مساله ۴.۲ مقایسه کنید.

مساله ۲۹.۳ تابع موج زیر را در نظر بگیرید.

$$\Psi(x, 0) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2n\lambda}} e^{i2\pi x/\lambda}, & -n\lambda < x < n\lambda \\ 0 & \text{بقیه نقاط} \end{cases}$$

که در آن n یک عدد صحیح مثبت است. این تابع روی بازه $-n\lambda < x < n\lambda$ کاملاً سینوسی است (با طول موج λ)، اما باز هم دارای بازه‌ای از تکانه‌ها است، زیرا نوسان‌ها تا بینهایت ادامه پیدا نمی‌کنند. تابع موج فضای تکانه $\Phi(p, 0)$ را بدست آورید. نمودارهای $|\Psi(p, 0)|^2$ و $|\Phi(x, 0)|^2$ را رسم کرده و پهنای آنها، w_x و w_p را رسم کنید (فاصله میان صفرهای طرفین تا قله نمودار). دقت کنید وقتی $n \rightarrow \infty$ می‌رود چه اتفاقی برای هر پهنای رخ می‌دهد. با استفاده از w_x و w_p به عنوان تقریب‌هایی از Δx و Δp ، بررسی کنید آیا اصل عدم قطعیت صادق است. هشدار: اگر بکشید σ_p را محاسبه کنید، کارتان بدجوری مایه تعجب می‌شود. می‌توانید مشکل را تشخیص دهید؟

مساله ۳۰.۳ فرض کنید

$$\Psi(x, 0) = \frac{A}{x^2 + a^2}, \quad (-\infty < x < \infty)$$

که A و a در آن ثابت‌های

(الف) با بهنجار کردن $\Psi(x, 0)$ ثابت A را تعیین کنید.

(ب) $\langle x \rangle$ ، $\langle x^2 \rangle$ و σ_x را (در لحظه $t = 0$) بدست آورید.

(پ) تابع موج فضای تکانه $\Phi(p, 0)$ را بدست آورده و بررسی کنید آیا بهنجار هست.

(ت) از $\Phi(p, 0)$ برای محاسبه $\langle p \rangle$ ، $\langle p^2 \rangle$ و σ_p (در لحظه $t = 0$) استفاده کنید.

(ث) اطمینان حاصل کنید که آیا اصل عدم قطعیت برای این حالت برقرار است.

مساله ۳۱.۳* قضیه ویریا. با استفاده از رابطه ۷۱.۳ نشان دهید

$$\frac{d}{dt} \langle xp \rangle = 2 \langle T \rangle - \langle x \frac{dV}{dx} \rangle \quad [۹۶.۳]$$

که در آن T انرژی جنبشی ($H = T + V$) است. در یک حالت مانا سمت چپ صفر است (چرا؟) از اینرو:

$$2 \langle T \rangle = \langle x \frac{dV}{dx} \rangle \quad [۹۷.۳]$$

این رابطه را قضیه ویریا می‌نامند. با استفاده از این قضیه ثابت کنید برای حالت‌های مانای نوسانگر هماهنگ $\langle T \rangle = \langle V \rangle$ است و بررسی کنید آیا این نتیجه با نتایجی که در مسائل ۱۱.۲ و ۱۲.۲ بدست آوردید سازگاری دارد.

مساله ۳۲.۳** در نسخه جالبی از اصل عدم قطعیت^{۳۱} انرژی - زمان $\Delta t = \tau / \pi$ است که در

آن عبارت است از زمانی که طول می‌کشد تا $\Psi(x, t)$ به حالتی راست هنجار نسبت به $\Psi(x, 0)$ متحول شود. با استفاده از تابع موجی که ترکیبی برابر از دو حالت مانای (راست هنجار) یک پتانسیل نوعی است، این مساله را بررسی کنید:

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(x) + \psi_2(x)]$$

^{۳۱} مقاله Lev Vaidman در مجله *Am. J. Phys.* 60, 182 (1992) را برای یک اثبات ملاحظه کنید.

مساله ۳۳.۳** عناصر ماتریسی $\langle n|x|n' \rangle$ و $\langle p|x|p' \rangle$ را در پایه (راست هنجار) حالت‌های مانا برای نوسانگر هماهنگ $(|n\rangle \equiv \psi_n(x))$ ، رابطه ۶۷.۲ بدست آورید. پیشتر در مساله ۱۲.۲ عناصر «قطری» $(n = n')$ را محاسبه کردید؛ از همان تکنیک برای حالت کلی استفاده کنید. ماتریس‌های (نامتناهی) متناظر، \mathbf{X} و \mathbf{P} را تشکیل دهید. نشان دهید عبارت زیر در این پایه قطری است:

$$\frac{1}{2m}P^2 + \frac{m\omega^2}{2}X^2 = H$$

آیا عناصر قطری همانهایی هستند که انتظار داشتید؟ پاسخ جزئی:

$$\langle n|x|n' \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n'}\delta_{n,n'-1} + \sqrt{n}\delta_{n',n-1}) \quad [98.3]$$

مساله ۳۴.۳ یک نوسانگر هماهنگ در حالتی قرار دارد به گونه‌ای که اندازه‌گیری انرژی روی آن مقدار $(1/2)\omega\hbar$ یا $(3/2)\omega\hbar$ را بدست می‌دهد. بزرگترین مقدار ممکن برای $\langle p \rangle$ در این حالت چقدر است؟ اگر فرض بر این باشد که این مقدار بیشینه مربوط به لحظه $t = 0$ است، $\Psi(x, t)$ چیست؟

مساله ۳۵.۳*** حالت‌های همدوس نوسانگر هماهنگ. در میان حالت‌های مانای نوسانگر هماهنگ $(|n\rangle \equiv \psi_n(x))$ ، رابطه ۶۷.۲ تنها حالت $n = 0$ است که حد عدم قطعیت را می‌زند $(\sigma_x \sigma_p = \hbar/2)$ ؛ به طور کلی، $\sigma_x \sigma_p = (2n+1)\hbar/2$ است، همانطور که در مساله ۱۲.۲ دریافتید. اما ترکیبات خطی مشخصی (موسوم به حالت‌های همدوس) هم وجود دارند که حاصلضرب عدم قطعیت را کمینه می‌کنند. آنها (همانطور که در ادامه معلوم می‌شود) ویژه توابع عملگر پائین آورنده هستند: ۳۲

$$a_-|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$$

(ویژه مقدار α می‌تواند عددی مختلط باشد).

(الف) مقادیر $\langle x \rangle$ ، $\langle x^2 \rangle$ ، $\langle p \rangle$ ، $\langle p^2 \rangle$ را در حالت $|\alpha\rangle$ محاسبه کنید. راهنمایی: از تکنیک

مساله ۵.۲ استفاده کرده و به یاد بیاورید که a_+ مزدوج هرمیتی a_- است. α را حقیقی بگیرید.

(ب) مانند هر تابع موج دیگری، یک حالت همدوس را می‌توان برحسب ویژه حالت‌های انرژی

بسط داد:

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle$$

نشان دهید ضرایب بسط عبارتند از:

$$c_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} c_0$$

(پ) ضریب c_0 را با بهنجار کردن $|\alpha\rangle$ تعیین کنید. پاسخ: $\exp(-|\alpha|^2/2)$.

(ت) حال بستگی زمانی را وارد کنید:

$$|n\rangle \rightarrow e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle$$

نشان دهید $\langle \alpha(t) | \alpha(t) \rangle$ ویژه مقدار a_- باقی می‌ماند، اما ویژه مقادیر در زمان تحول می‌یابند:

$$\alpha(t) = e^{-i\omega t} \alpha$$

از اینرو یک حالت همدوس همانطور همدوس باقی مانده و به کمینه کردن عدم قطعیت ادامه می‌دهد.

(ث) آیا حالت پایه ($|n=0\rangle$) خودش یک حالت همدوس است؟ اگر چنین است، ویژه مقدار آن چیست؟

مساله ۳۶.۳ اصل عدم قطعیت توسعه یافته.^{۳۳} اصل عدم قطعیت تعمیم یافته (رابطه ۶۲.۳) حاکی از آن است که

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \frac{1}{4} \langle C \rangle^2$$

که در آن $\hat{C} \equiv -i[\hat{A}, \hat{B}]$ است.

(الف) نشان دهید اگر رابطه را به شکل زیر بخوانیم قوی تر می شود.

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \frac{1}{4} (\langle C \rangle^2 + \langle D \rangle^2) \quad [۹۹.۳]$$

که در آن $\hat{D} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} - 2\langle A \rangle \cdot \langle B \rangle$ است. راهنمایی: جمله $\text{Re}(z)$ در رابطه ۶۰.۳ را نگاه دارید.

(ب) رابطه ۹۹.۳ را برای حالت $B = A$ بررسی کنید (در این حالت چون $\hat{C} = 0$ است، اصل عدم قطعیت استاندارد اهمیت چندانی ندارد؛ متأسفانه، اصل عدم قطعیت توسعه یافته هم کمک زیادی نمی کند).

مساله ۳۷.۳ هامیلتونی یک سامانه سه سطحی بخصوص با ماتریس زیر نمایش داده می شود.

$$H = \begin{pmatrix} a & 0 & b \\ 0 & c & 0 \\ b & 0 & a \end{pmatrix}$$

که در آن a, b و c اعداد حقیقی هستند (فرض کنید $a - c \neq \pm b$)

(الف) اگر سامانه ابتدا در حالت زیر باشد

$$|s(0)\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$|s(t)\rangle$ چیست؟

^{۳۳} برای تفسیر و منابع جالب، مقاله R. R. Pauri در مجله (Phys. Rev. A 49, 2178 (1994)) را مطالعه کنید.

(ب) اگر سیستم ابتدا در حالت زیر باشد

$$|s(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$|s(t)\rangle$ چیست؟

مساله ۳۸.۳ هامیلتونی یک سامانه سه سطحی به خصوص با ماتریس زیر نشان داده می‌شود.

$$H = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

دو مشاهده‌پذیر دیگر A و B با ماتریس‌های زیر نشان داده می‌شوند

$$A = \lambda \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, B = \mu \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

که در آنها λ ، μ و ω اعداد حقیقی هستند.

(الف) ویژه مقادیر و ویژه بردارهای (بهنجار) H ، A و B را بدست آورید.

(ب) فرض کنید سیستم ابتدا در حالت کلی زیر قرار دارد

$$|s(0)\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}$$

به طوریکه $|c_1|^2 + |c_2|^2 + |c_3|^2 = 1$. مقادیر چشمداشتی H ، A و B را (در لحظه $t = 0$) بدست آورید.

(پ) $|s(t)\rangle$ چیست؟ اگر انرژی این حالت را (در لحظه $t = 0$) اندازه می‌گرفتید، احتمالا چه مقادیری بدست می‌آوردید و احتمال هر کدام چقدر می‌بود؟ همین سوال را درباره مشاهده‌پذیرهای A و B هم پاسخ دهید.

مساله ۳۹.۳ **

(الف) چون می‌توان تابع $f(x)$ را به صورت یک سری تیلور بسط داد، نشان دهید

$$f(x + x_0) = e^{t\hat{p}x_0/\hbar} f(x)$$

(که در آن x_0 یک فاصله ثابت دلخواه است). به همین دلیل، \hat{p}/\hbar را مولد انتقال‌های فضایی می‌نامند. توجه: قسمت نمایی عملگر با بسط سری‌های توانی تعریف می‌شود:

$$e^{\hat{Q}} \equiv 1 + \hat{Q} + (1/2)\hat{Q}^2 + (1/3!)\hat{Q}^3 + \dots$$

(ب) اگر $\Psi(x, t)$ در معادله شرودینگر (مستقل از زمان) صدق کند، نشان دهید

$$\Psi(x, t + t_0) = e^{-i\hat{H}t_0/\hbar}\Psi(x, t)$$

(که در آن t_0 یک زمان ثابت دلخواه است)؛ $-\hat{H}/\hbar$ را مولد انتقال‌های زمانی می‌نامند.

(پ) نشان دهید مقدار چشمداشتی متغیر دینامیکی $Q(x, p, t)$ در لحظه $t + t_0$ را می‌توان به این شکل نوشت^{۳۴}

$$\langle Q \rangle_{t+t_0} = \langle \Psi(x, t) | e^{i\hat{H}t_0/\hbar} \hat{Q}(\hat{x}, \hat{p}, t + t_0) e^{-i\hat{H}t_0/\hbar} | \Psi(x, t) \rangle$$

از این رابطه برای بدست آوردن دوباره رابطه ۷۱.۳ استفاده کنید. راهنمایی: بگذارید $t_0 = dt$ باشد و آنرا تا مرتبه اول dt بسط دهید.

مساله ۴۰.۳**

(الف) «معادله شرودینگر» وابسته به زمان را در فضای تکانه برای یک ذره آزاد نوشته و حل کنید. پاسخ:

^{۳۴} به ویژه، اگر زمان را $t = 0$ بگیریم و اندیس پائین t_0 را هم برداریم،

$$\langle Q(t) \rangle = \langle \Psi(x, t) | \hat{Q} | \Psi(x, t) \rangle = \langle \Psi(x, t) | \hat{U}^{-1} \hat{Q} \hat{U} | \Psi(x, 0) \rangle$$

که در آن $\hat{U} \equiv \exp(-i\hat{H}t/\hbar)$. این عبارت حاکی از آن است که می‌توانید مقدار چشمداشتی Q را با ساندویچ کردن \hat{Q} در میان $\Psi(x, t)^*$ و $\Psi(x, t)$ محاسبه کنید، همانطور که همیشه اینکار را کرده‌ایم (بستگی زمانی را به دوش توابع موج می‌اندازیم)، یا در غیر اینصورت، با ساندویچ کردن $\hat{U}^{-1} \hat{Q} \hat{U}$ در میان $\Psi(x, 0)^*$ و $\Psi(x, 0)$ اینکار را انجام می‌دهیم که آنوقت بستگی زمانی روی عملگر می‌افتد. اولی را تصویر شرودینگر و دومی را تصویر هایزنبرگ می‌نامند.

$$\exp\left(\frac{-ip^2 t}{2m\hbar}\right) \Phi(p, 0)$$

(ب) $\Phi(p, 0)$ را برای بسته موج گاوسی متحرک (مساله ۴۳.۲) بدست آورده و $\Phi(p, t)$ را برای این حالت تعیین کنید. همچنین $|\Phi(p, t)|^2$ را بدست آورده و دقت کنید که مستقل از زمان است.

(پ) $\langle p \rangle$ و $\langle p^2 \rangle$ را با حل عددی مناسب انتگرال Φ بدست آورده و پاسخ‌های خود را با مساله ۴۳.۲ مقایسه کنید.

(ت) نشان دهید $\langle H \rangle = \langle p \rangle^2 / 2m + \langle H \rangle_0$ است (که در آن شاخص پائین ۰ نشان دهنده بسته موج گاوسی مانا است) و آنرا تفسیر کنید.

فصل چهارم

مکانیک کوانتومی در سه بعد

۱.۴ معادله شرودینگر در مختصات کروی

تعمیم به سه بعد سر راست و واضح است. معادله شرودینگر می‌گوید

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi \quad [۱.۴]$$

عملگر هامیلتونی H از رابطه انرژی کلاسیک بدست می‌آید

$$\frac{1}{2}mv^2 + V = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V$$

به روال استاندارد (که حالا علاوه بر x به y و z هم اعمال می‌شود):

$$p_x \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, p_y \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, p_z \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \quad [۲.۴]$$

یا به طور خلاصه

$$p \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla \quad [۳.۴]$$

از این رو

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi \quad [۴.۴]$$

که در آن

$$\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad [۵.۴]$$

لاپلاسی (عملگر لاپلاس) در مختصات دکارتی است.

^۱ آنجا که ممکن بود اشتباهی رخ دهد، «کلاهک‌هایی» روی عملگرها قرار دادم تا آنها را از مشاهده‌پذیرهای کلاسیکی مانسته‌شان تفکیک کنم. فکر نمی‌کنم در این فصل دلیلی برای بروز ابهام یا تناقض وجود داشته باشد، برای همین چون کلاهک‌ها دست و پاگیر می‌شوند، دیگر روی عملگرها کلاه نمی‌گذارم.

انرژی پتانسیل V و تابع موج ψ حالا دیگر توابعی از $(x, y, z) = r$ و t هستند. احتمال یافتن ذره در حجم بسیار کوچک $d^3r = dx dy dz$ برابر است با $|\Psi(r, t)|^2 d^3r$ و برای شرط بهنجارش هم داریم:

$$\int |\Psi|^2 d^3r = 1 \quad [۶.۴]$$

که انتگرال آن روی تمام فضا گرفته می‌شود. اگر پتانسیل مستقل از زمان باشد، مجموعه کاملی از حالت‌های مانا وجود خواهد داشت

$$\Psi_n(r, t) = \psi_n(r) e^{-iE_n t/\hbar} \quad [۷.۴]$$

که در آن تابع موج ψ_n کروی در معادله شرودینگر مستقل از زمان صدق می‌کند:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi = E_n \psi \quad [۸.۴]$$

جواب عمومی معادله شرودینگر (وابسته به زمان) عبارت است از

$$\Psi(r, t) = \sum c_n \psi_n(r) e^{-iE_n t/\hbar} \quad [۴.۹]$$

ثابت c_n در رابطه بالا از روی تابع موج اولیه، $\Psi(x, 0)$ ، به روش متداول تعیین می‌شود. (اگر پتانسیل حالت‌های پیوسته را جایز بشمارد در آن صورت حاصل جمع رابطه ۹.۴ به انتگرال تبدیل می‌شود).

مساله ۱.۴*

(الف) تمام روابط جابه‌جایی کانونیک (بندادی) را برای مولفه‌های عملگرهای p و r بدست آورید: $[x, y]$ ، $[x, p_y]$ ، $[x, p_x]$ ، $[p_x, p_y]$ و الی آخر. پاسخ:

$$[r_i, r_j] = [p_i, p_j] = 0 \quad [r_i, p_i] = -[p_i, r_i] = i\hbar \delta_{ij} \quad [۱۰.۴]$$

که در آن شاخص‌ها نشان دهنده x ، y یا z بوده و داریم $r_x = x$ ، $r_y = y$ و $r_z = z$.

(ب) درستی قضیه اهرنفت در سه بعد را نشان دهید:

$$\frac{d}{dt}\langle r \rangle = \frac{1}{m}\langle p \rangle \quad \text{و} \quad \frac{d}{dt}\langle p \rangle = \langle -\nabla V \rangle \quad [11.4]$$

(طبیعتاً هر یک از اینها نشانه سه معادله است - یکی برای هر مولفه) راهنمایی: توجه کنید رابطه ۷۱.۳ در سه بعد معتبر است.

رابطه اصل عدم قطعیت هایزنبرگ در سه بعد را مشخص کنید. پاسخ:

$$\sigma_x \sigma_{p_x} \geq \hbar/2, \sigma_y \sigma_{p_y} \geq \hbar/2, \sigma_z \sigma_{p_z} \geq \hbar/2 \quad [12.4]$$

از سوی دیگر، هیچ قیدی روی به فرض $\sigma_x \sigma_{p_y}$ نیست.

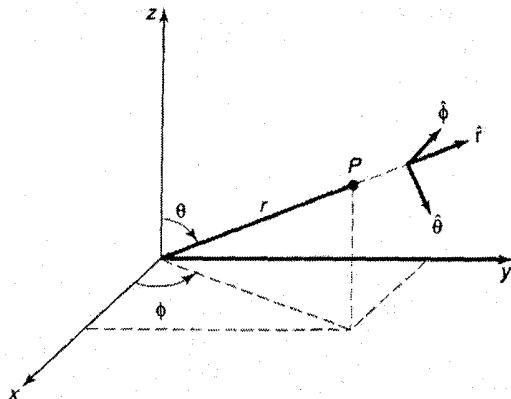
۱.۱.۴ تفکیک متغیرها

به طور معمول پتانسیل تنها تابع فاصله از مبدا است. در این حالت طبیعی است که مختصات

کروی، (r, θ, ϕ) ، را انتخاب کنیم (شکل ۱.۴ را ببینید).

در مختصات کروی لاپلاسی به این شکل درمی آید^۲

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \quad [13.4]$$



شکل ۱.۴: مختصات کروی: شعاع r ، زاویه قطبی θ و زاویه سمتی ϕ .

^۲ در عمل، این رابطه را می‌توان با تغییر متغیرها از صورت دکارتی (رابطه ۵.۴) بدست آورد. با این حال، روش‌های

بسیار موثرتری برای بدست آوردن آن وجود دارند؛ برای نمونه، کتاب *Mathematical Methods in Physical Sciences* اثر M. Boas، ویرایش دوم، فصل ۱۰، بخش ۹ را ملاحظه کنید.

بنابراین در مختصات کروی معادله شرودینگر عبارت است از

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right) \right] \quad [۱۴.۴]$$

کار را با جستجوی جوابهای قابل تفکیک به صورت حاصلضرب آغاز می‌کنیم

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) Y(\theta, \phi) \quad [۱۵.۴]$$

با قرار دادن آن در رابطه ۱۴.۴ داریم

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{Y}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{R}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{R}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right) \right] + VRY = ERY$$

طرفین را به $Y R$ تقسیم کرده و در $-2mr^2/\hbar^2$ ضرب می‌کنیم:

$$\left\{ \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V(r) - E] \right\} + \frac{1}{Y} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right\} = 0$$

عبارت درون آکولاد اول فقط به r بستگی دارد، در حالیکه باقی رابطه فقط به θ و ϕ ؛ از این رو، هر یک باید معادل مقدار ثابتی باشد. به دلتای که در ادامه به آنها اشاره خواهیم کرد، این «ثابت تفکیک» را به صورت $l(l+1)$ ^۳ می‌نویسم:

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V(r) - E] \right) = l(l+1) \quad [۱۶.۴]$$

$$\frac{1}{Y} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right) \right\} = -l(l+1) \quad [۱۷.۴]$$

^۳ توجه کنید اینجا کلیت مبحث را از دست نمی‌دهیم - در این مرحله l می‌تواند هر عدد مختلطی باشد. بعداً درمی‌یابیم که l در واقع باید عددی صحیح باشد و به سبب پیش‌بینی آن نتیجه است که از هم اکنون ثابت تفکیک را به شکلی نوشتیم که به نظر غیر عادی می‌آید.

مساله ۲.۴* با استفاده از روش تفکیک متغیرها در مختصات دکارتی، مساله چاه مکعبی نامتناهی (یا «ذره در جعبه») را حل کنید:

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0, & \text{اگر } x, y, z \text{ همگی بین } 0 \text{ و } a \text{ باشند} \\ \infty & , \text{ غیر از این} \end{cases}$$

(الف) توابع موج حالت مانا و انرژی‌های مانسته آنها را بدست آورید.

(ب) انرژی‌های مجزا را به ترتیب افزایش انرژی‌ها E_1, E_2, E_3 و ... بنامید. E_1 تا E_6 را بدست آورید. تبهگنی هر یک از این انرژی‌ها را تعیین کنید (یعنی، تعداد حالات مختلفی که انرژی‌های یکسان دارند). به یاد بیاورید (مساله ۴۵.۲) را ملاحظه کنید) که حالت‌های مقید تبهگن در یک بعد یافت نمی‌شوند، اما در سه بعد رایج هستند.

(پ) تبهگنی E_{14} چقدر است و چرا این مورد حائز اهمیت است؟

۲.۱.۴ معادله زاویه‌ای

رابطه ۱۷.۴ بستگی ψ به θ و ϕ را تعیین می‌کند؛ اگر آنرا در $Y \sin^2 \theta$ ضرب کنیم عبارت زیر

حاصل می‌شود

$$\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} = -l(l+1) \sin^2 \theta Y \quad [18.4]$$

احتمالا پیشتر با این رابطه برخورد کرده‌اید - رابطه فوق در جواب معادله لاپلاس در الکتروستاتیک

کلاسیک یافت می‌شود. مثل همیشه، سعی می‌کنیم متغیرها را از هم جدا کنیم:

$$Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta) \Phi(\phi) \quad [19.4]$$

آنرا در رابطه قبلی قرار داده و حاصل را بر $\Theta \Phi$ تقسیم می‌کنیم

$$\frac{1}{\Theta} \left[\sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \right] + l(l+1) \sin^2 \theta + \frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = 0$$

عبارت اول فقط تابعی از θ و عبارت دوم هم تنها تابعی از ϕ است، پس هر کدام از آنها باید برابر با یک مقدار ثابت باشد. این بار ثابت تفکیک را m^2 می‌نامیم:^۴

$$\frac{1}{\theta} \left[\sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \right] + l(l+1) \sin^2 \theta = m^2 \quad [۲۰.۴]$$

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = -m^2 \quad [۲۱.۴]$$

رابطه شامل ϕ ساده است:

$$\frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = -m^2 \Phi \Rightarrow \Phi(\phi) = e^{im\phi} \quad [۲۲.۴]$$

(در واقع، دو جواب وجود دارد: $\exp(-im\phi)$ و $\exp(im\phi)$ ، اما من دومی را با منفی کردن m پنهان می‌کنم. ممکن است یک مقدار ثابت در مقابل وجود داشته باشد، اما می‌توانیم آنرا هم در Θ جذب کنیم. ضمناً، در الکتروپدینامیک تابع سمتی (Φ) برحسب سینوس‌ها و کسینوس‌ها نوشته می‌شود زیرا پتانسیل‌های الکتریکی باید حقیقی باشند. در مکانیک کوانتومی چنین قیدی نداریم و به همین دلیل کار کردن با نمایی‌ها به مراتب ساده‌تر است.) باید توجه داشت که وقتی ϕ به اندازه 2π پیش برود، به همان نقطه در فضا بازمی‌گردیم (شکل ۱.۴ را ببینید) پس بدیهی است اینطور حکم کنیم که^۵

^۴ باز هم کلیت مسأله از بین نمی‌رود زیرا در این مرحله m می‌تواند هر عدد مختلطی باشد؛ در هر حال، کمی بعد درمی‌یابیم که m باید در حقیقت یک عدد صحیح باشد. مراقب باشید: حرف m حالا دیگر وظیفه‌ای دوگانه بر عهده دارد چون از یک طرف جرم است و از طرف دیگر یک ثابت تفکیک است. هیچ روش مشخصی برای اجتناب از این دوگانگی وجود ندارد چرا که هر دو کاربرد استاندارد هستند. برخی نویسندگان امروزه از M یا μ برای جرم استفاده می‌کنند، اما من از تغییر نمادگذاری آن‌هم در میانه راه بیزارم، برای همین فکر نمی‌کنم تا وقتی از مسأله آگاه باشید اشتباهی بروز کند.

^۵ این بیان، نکته‌ای به مراتب ظریف‌تر و پیچیده‌تر از آنچه‌ی است که به نظر می‌رسد. با همه این حرف‌ها، چگالی احتمال $(|\Phi|^2)$ با وجود m عبارتی تک مقداری است. در بخش ۳.۴ با توسل به استدلالی کاملاً متفاوت - و قانع‌کننده‌تر - شرطی برای m بدست می‌آوریم.

$$\Phi(\phi + 2\pi) = \Phi(\phi) \quad [۲۳.۴]$$

به عبارت دیگر، $\exp[im(\phi + 2\pi)] = \exp(im\phi)$ یا $\exp(2\pi im) = 1$ است. از این رابطه اینطور نتیجه می‌شود که m باید عدد صحیحی باشد:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad [۲۴.۴]$$

رابطه شامل θ

$$\left[\sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \right] + [l(l+1)\sin^2 \theta - m^2]\Theta = 0 \quad [۲۵.۴]$$

احتمالا چندان برایتان آشنا نیست. جواب آن عبارت است از

$$\Theta(\theta) = A p_l^m(\cos \theta) \quad [۲۶.۴]$$

که در آن p_l^m تابع لژاندر وابسته است و به صورت زیر تعریف می‌شود^۶

$$p_l^m(x) \equiv (1-x^2)^{|m|/2} \left(\frac{d}{dx} \right)^{|m|} p_l(x) \quad [۲۷.۴]$$

همچنین $p_l(x)$ چند جمله‌ای l ام لژاندر است که با استفاده از فرمول رودریگز تعریف می‌شود:

$$p_l(x) \equiv \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx} \right)^l (x^2 - 1)^l \quad [۲۸.۴]$$

به عنوان مثال

$$p_0(x) = 1, \quad p_1(x) = \frac{1}{2} \frac{d}{dx} (x^2 - 1) = x$$

$$p_2(x) = \frac{1}{4 \cdot 2} \left(\frac{d}{dx} \right)^2 (x^2 - 1)^2 = \frac{1}{2} (3x^2 - 1)$$

^۶ توجه کنید که $p_l^{-m} = p_l^m$. برخی نویسندگان علامت متفاوتی را برای مقدار منفی m برمی‌گزینند؛ کتاب Boas

و الی آخر. تعدادی از نخستین چند جمله‌ایهای لژاندر در جدول ۱.۴ فهرست شده‌اند. همانطور که از اسم آن برمی‌آید، $p_l(x)$ یک چند جمله‌ای (از درجه l) برحسب x است و براساس پاریتته l زوج و فرد می‌شود. اما $p_l^m(x)$ قاعدتا یک چند جمله‌ای نیست - اگر m فرد باشد این چند جمله‌ای یک عامل $\sqrt{1-x^2}$ با خود دارد:

$$p_2^0(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$$

$$p_2^1(x) = (1-x^2)^{1/2} \frac{d}{dx} \left[\frac{1}{2}(3x^2 - 1) \right] = 3x\sqrt{1-x^2}$$

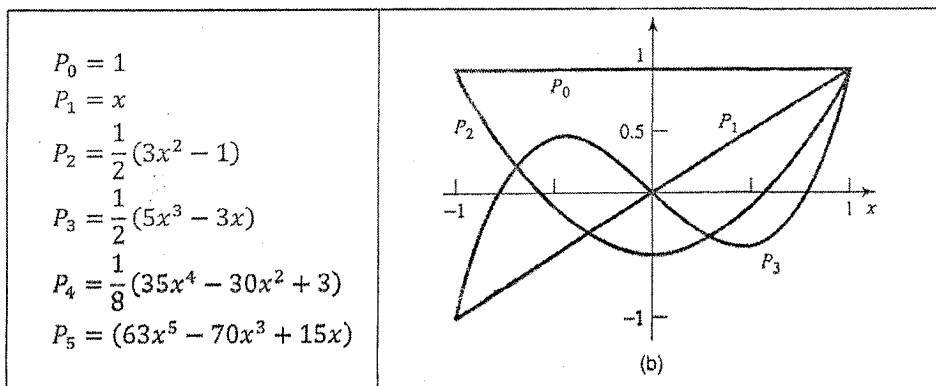
$$p_2^2(x) = (1-x^2) \left(\frac{d}{dx} \right)^2 \left[\frac{1}{2}(3x^2 - 1) \right] = 3(1-x^2)$$

و غیره. (به بیان دیگر، آنچه نیاز داریم $p_l^m(\cos \theta)$ است و چون $\sqrt{1-\cos^2 \theta} = \sin \theta$ است پس $p_l^m(\cos \theta)$ همیشه یک چند جمله‌ای برحسب $\cos \theta$ است که - اگر m فرد باشد - در $\sin \theta$ ضرب می‌شود. تعدادی از توابع لژاندر وابسته برحسب $\cos \theta$ در جدول ۱.۴ فهرست شده‌اند.)

توجه داشته باشید که در فرمول رودریگز l باید یک عدد صحیح غیر منفی باشد تا رابطه معنی بدهد؛ به علاوه، اگر $|m| > l$ باشد، آنگاه از رابطه ۲۷.۴ اینطور برمی‌آید که $p_l^m = 0$ است. بنابراین، به ازای هر l مفروض، تعداد $(2l+1)$ حالت ممکن برای m وجود دارد:

$$l = 0, 1, 2, \dots; m = -l, -l+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l-1, l \quad [۲۹.۴]$$

جدول ۱.۴: تعدادی از توابع لژاندر وابسته، $p_l^m(\cos \theta)$: (آ) شکل تابعی، (ب) نمودارها.



اما صبر کنید! رابطه ۲۵.۴ یک معادله دیفرانسیل درجه دو است: باید به ازای هر l و m قبلی دو جواب مستقل خطی داشته باشد. پس بقیه جواب‌ها کجا هستند؟ پاسخ: آنها طبعاً به عنوان جواب‌های معادله وجود دارند، اما به طور فیزیکی قابل قبول نیستند زیرا در $\theta = 0$ و $\theta = \pi$ بینهایت می‌شوند پس توابع موج قابل بهنجاری بدست نمی‌دهند (مساله ۴.۴ را ملاحظه کنید).

از آنجا که مولفه‌های حجمی در مختصات کروی^۷ عبارتند از

$$d^3r = r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\phi \quad [30.4]$$

بنابراین شرط بهنجارش (رابطه ۶.۴) به این ترتیب می‌شود

$$\int |\psi|^2 r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\phi = \int |R|^2 r^2 \, dr \int |Y|^2 \sin \theta \, d\theta \, d\phi = 1$$

مناسب‌تر است که R و Y را جداگانه بهنجار کنیم:

$$\int_0^\infty |R|^2 r^2 \, dr = 1 \quad \text{و} \quad \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |Y|^2 \sin \theta \, d\theta \, d\phi = 1 \quad [31.4]$$

توابع موج بهنجار شده را **همانگ‌های کروی**^۸ می‌نامیم:

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \epsilon \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} e^{im\phi} p_l^m(\cos \theta) \quad [32.4]$$

که در آن $\epsilon = (-1)^m$ است برای $m \geq 0$ و $\epsilon = 1$ برای $m \leq 0$. همانطور که بعداً ثابت خواهیم کرد، آنها به طور خودکار متعامدند، از اینرو

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi [Y_l^m(\theta, \phi)]^* [Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi)] \sin \theta \, d\theta \, d\phi = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad [33.4]$$

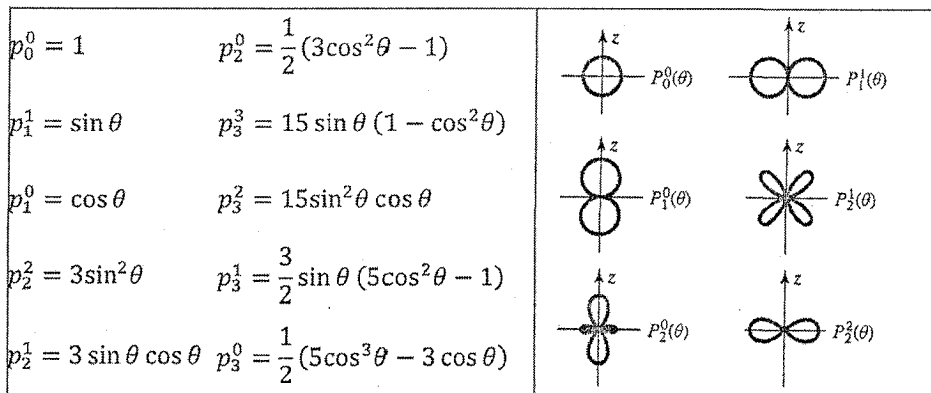
در جدول ۳.۴ تعدادی از نخستین همانگ‌های کروی را فهرست کرده‌ام. به دلایل تاریخی ۱ را عدد کوانتومی سمتی و m را عدد کوانتومی مغناطیسی می‌نامند.

^۷ برای نمونه، کتاب Boas (زیرنویس ۲) فصل ۵، بخش ۴ را ملاحظه کنید.

^۸ عامل بهنجارش در مساله ۵۴.۴ استخراج شده است. عامل ϵ برای سازگاری با نمادگذاری انتخاب می‌شود که در نظریه تکانه زاویه از آن استفاده خواهیم کرد؛ به طرز معقول استاندارد است، هرچند بعضی از کتابهای قدیمی‌تر آداب و رسوم دیگری را به کار می‌برند. توجه داشته باشید که

$$Y_l^{-m} = (-1)^m (Y_l^m)^*$$

جدول ۲.۴: تعدادی از توابع لژاندر وابسته، $(l): p_l^m(\cos \theta)$ شکل تابعی، (ب) نمودارهای $r = p_l^m(\cos \theta)$ در این طرح‌ها r بیانگر بزرگی تابع در جهت θ است؛ هر شکل باید پیرامون محور z چرخانده شود.



(ا)

(ب)

جدول ۳.۴: تعدادی از هماهنگ‌های کروی، $Y_l^m(\theta, \phi)$.

$Y_0^0 = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$	$Y_2^{\pm 2} = \left(\frac{15}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2\theta e^{\pm 2i\phi}$
$Y_1^0 = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos\theta$	$Y_3^0 = \left(\frac{7}{16\pi}\right)^{1/2} (5\cos^3\theta - 3\cos\theta)$
$Y_1^{\pm 1} = \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin\theta e^{\pm i\phi}$	$Y_3^{\pm 1} = \mp \left(\frac{21}{64\pi}\right)^{1/2} \sin^2\theta (5\cos^2\theta - 1) e^{\pm i\phi}$
$Y_2^0 = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3\cos^2\theta - 1)$	$Y_3^{\pm 2} = \left(\frac{105}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2\theta \cos\theta e^{\pm 2i\phi}$
$Y_2^{\pm 1} = \mp \left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2} \sin\theta \cos\theta e^{\pm i\phi}$	$Y_3^{\pm 3} = \mp \left(\frac{35}{64\pi}\right)^{1/2} \sin^3\theta e^{\pm 3i\phi}$

مساله ۳.۴* از روابط ۲۷.۴، ۲۸.۴ و ۳۲.۴ برای درست کردن Y_0^0 و Y_2^1 استفاده کنید. بررسی کنید که آیا بهنجار و متعامد هستند.

مساله ۴.۴ نشان دهید رابطه

$$\Theta(\theta) = A \ln[\tan(\theta/2)]$$

به ازای $l = m = 0$ در معادله θ (رابطه ۲۵.۴) صدق می‌کند. این «دومین جواب» غیر قابل قبول است - اشکال آن چیست؟

مساله ۵.۴* با استفاده از رابطه ۳۲.۴، عبارت‌های $Y_l^l(\theta, \phi)$ و $Y_3^2(\theta, \phi)$ را بدست آورید. (می‌توانید Y_3^2 را از جدول ۲.۴ بردارید، اما باید حتماً Y_l^l را از رابطه ۲۷.۴ و ۲۸.۴ بدست آورید.) ببینید آیا در معادله زوایه‌ای (رابطه ۱۸.۴) به ازای مقادیر مناسب پارامترهای l و m صدق می‌کنند.

مساله ۶.۴** از فرمول رودریگز شروع کرده و شرط راست هنجاری برای چند جمله‌ایهای لژاندر را استخراج کنید:

$$[۳۴.۴]$$

راهنمایی: از انتگرال گیری جزء به جزء استفاده کنید.

۳.۱.۴ معادله زوایه‌ای

توجه داشته باشید که قسمت زوایه‌ای تابع موج یعنی $Y(\theta, \phi)$ برای تمام پتانسیل‌هایی که دارای تقارن کروی هستند یکسان است؛ شکل واقعی پتانسیل، $V(r)$ ، تنها روی بخش شعاعی تابع موج، $R(r)$ ، اثر می‌گذارد که با رابطه ۱۶.۴ تعریف می‌شود:

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V(r) - E] R = l(l+1)R \quad [۳۵.۴]$$

اگر متغیرهای این رابطه را عوض کنیم، ساده‌تر می‌شود: بگذارید

$$u(r) \equiv rR(r) \quad [۳۶.۴]$$

تسا در آن صورت داشته باشیم $R = u/r$ ، $dR/dr = [r(du/dr) - u]/r^2$ ، و در نتیجه

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[V + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u = Eu} \quad [37.4]$$

این رابطه را معادله شعاعی^۹ می‌نامند؛ شکل آن همانند معادله شرودینگر یک بعدی (رابطه ۵.۲) است، به جز آنکه پتانسیل موثر یعنی

$$V_{\text{eff}} = V + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \quad [38.4]$$

شامل یک بخش اضافی است که اصطلاحاً آنرا جمله شعاعی (مرکزگرا)، $\hbar^2/2m [l(l+1)/r^2]$ ، می‌نامیم. جمله شعاعی می‌خواهد ذره را به دور (خارج از مرکز) پرتاب کند، درست مثل نیروی (شبه) مرکزگرا در مکانیک کلاسیک. در این بین، شرط بهنجارش (رابطه ۳۱.۴) تبدیل می‌شود به

$$\int_0^\infty |u|^2 dr = 1 \quad [39.4]$$

دیگر نمی‌توانیم از این جلوتر برویم تا وقتی یک پتانسیل خاص در اختیار داشته باشیم.

مثال ۱.۴ چاه کروی نامتناهی را در نظر بگیرید

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r \leq a \\ \infty, & r > a \end{cases} \quad [40.4]$$

توابع موج و انرژی‌های مجاز را بدست آورید.

پاسخ: در خارج از چاه تابع پتانسیل صفر است؛ داخل چاه معادله شعاعی می‌گوید

$$\frac{d^2 u}{dr^2} = \left[\frac{l(l+1)}{r^2} - k^2 \right] u \quad [41.4]$$

که در آن طبق معمول داریم

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad [42.4]$$

مساله عبارت است از حل این معادله، منوط به شرط مرزی $u(a) = 0$. حالت $l = 0$ ساده است:

$$\frac{d^2 u}{dr^2} = -k^2 u \Rightarrow u(r) = A \sin(kr) + B \cos(kr)$$

اما به خاطر داشته باشید، تابع موج شعاعی واقعی $R(r) = u(r)/r$ است، ضمن آنکه $[\cos(kr)]/r$ به ازای $r \rightarrow 0$ بینهایت می‌شود. پس^۱ باید انتخاب کنیم $B = 0$. به این ترتیب شرط مرزی حکم می‌کند که $\sin(ka) = 0$ باشد، یعنی برای هر عدد صحیح n داشته باشیم $ka = n\pi$. انرژی‌های مجاز آشکارا عبارتند از

$$E_{n0} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad [43.4]$$

که درست مانند چاه مربعی نامتناهی یک بعدی هستند (رابطه ۲۷.۲). بهنجار کردن $u(r)$ می‌دهد $A = \sqrt{2/a}$ ؛ با لحاظ کردن قسمت زاویه‌ای (که در این مثال به خاطر آنکه داریم $Y_0^0(\theta, \phi) = 1/\sqrt{4\pi}$ مقدار آن ثابت است)، به این نتیجه می‌رسیم که

$$\psi_{n00} = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \frac{\sin(n\pi r/a)}{r} \quad [44.4]$$

^۱ در واقع، همه آنچه نیاز داریم این است که تابع موج قابل بهنجارش باشد، نه آنکه متناهی باشد: تابع $R(r) \sim 1/r$ در مبدا قابل بهنجارش است (به خاطر r^2 در رابطه ۳۱.۴). برای یک اثبات قانع کننده‌تر از اینکه چرا باید $B = 0$ باشد به کتاب *Principles of Quantum Mechanics* اثر R. Shankar (ویرایش دوم، انتشارات Plenum، نیویورک، ۱۹۹۴) صفحه ۳۴۲ مراجعه کنید.

دقت کنید که حالت‌های مانا را با سه عدد کوانتومی n ، l و m برچسب می‌زنیم: ψ_{nlm} . با این حال، انرژی فقط به n و l بستگی دارد: E_{nl} .

جواب عمومی معادله ۴۱.۴ (برای هر عدد صحیح l دلخواه) چندان آشنا نیست:

$$u_r(r) = A r j_l(kr) + B r n_l(kr) \quad [45.4]$$

که در آن $j_l(x)$ را تابع بسل کروی از مرتبه l و $n_l(x)$ را تابع نویمان کروی از مرتبه l می‌نامند. این توابع به شکل زیر تعریف می‌شوند:

$$n_l(x) \equiv -(-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\cos x}{x} \quad j_l(x) \equiv (-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\sin x}{x}; \quad [46.4]$$

برای مثال

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}; \quad n_0(x) = -\frac{\cos x}{x}$$

$$j_1(x) = (-x) \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \left(\frac{\sin x}{x} \right) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}$$

$$\begin{aligned} j_2(x) &= (-x)^2 \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^2 \left(\frac{\sin x}{x} \right) = x^2 \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right) \frac{x \cos x - \sin x}{x^3} \\ &= \frac{3 \sin x - 3x \cos x - x^2 \sin x}{x^3} \end{aligned}$$

و الی آخر. تعدادی از نخستین توابع بسل و نویمان کروی در جدول ۴.۴ فهرست شده‌اند. توجه داشته باشید که به ازای x های کوچک (یعنی مقادیری که به ازای آنها بتوانیم داشته باشیم $\sin x \approx x - x^3/3! + x^5/5! - \dots$ و نیز $\cos x \approx 1 - x^2/2! + x^4/4! - \dots$) روابط بالا به این صورت ساده می‌شوند

$$j_0(x) \approx 1; n_0(x) \approx \frac{1}{x}; j_1(x) \approx \frac{x}{3}; n_1(x) \approx -\frac{1}{x^2}$$

و غیره. نکته اینجاست که توابع بسل در مبداء متناهی هستند، اما توابع نویمان در مبداء بسیار بزرگ می‌شوند. بنابراین، باید بگذاریم $B_l = 0$ و در نتیجه برسیم به

$$R(r) = A r j_l(kr) \quad [۴۷.۴]$$

شرط مرزی $R(a) = 0$ باقی می‌ماند. از ظواهر پیداست که باید k را طوری انتخاب کرد تا

$$j_l(ka) = 0 \quad [۴۸.۴]$$

یعنی (ka) یک صفر تابع بسل کروی مرتبه l ام است. باید توجه داشت که توابع بسل نوسانی هستند (شکل ۲.۴ را ملاحظه کنید)؛ هر کدام بینهایت صفر دارد. اما (متأسفانه برای ما) آنها در نقاط بسیار منطقی و معقولی (مانند n یا $n\pi$ یا دیگر) قرار دارند؛ باید آنها را به صورت عددی و با استفاده از کامپیوتر تعیین کرد.^{۱۱} به هر صورت، شرط مرزی حکم می‌کند

$$k = \frac{1}{a} \beta_{nl} \quad [۴۹.۴]$$

که در آن β_{nl} برابر است با n امین صفر تابع بسل کروی l ام. پس انرژی‌های مجاز به این ترتیب بدست می‌آیند

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \beta_{nl}^2 \quad [۵۰.۴]$$

و توابع موج عبارتند از

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = A_{nl} j_l(\beta_{nl} r/a) Y_l^m(\theta, \phi) \quad [۵۱.۴]$$

ثابت A_{nl} را باید از طریق بهنجارش تعیین کرد. هر سطح انرژی دارای تبهگنی $(2l+1)$ - تایی است زیرا $(2l+1)$ مقدار مختلف m برای هر مقدار l وجود دارد (رابطه ۲۹.۴ را ملاحظه کنید).

^{۱۱} کتاب *Handbook of Mathematical Functions* نوشته Abramowitz و Stegun (انتشارات Dover، ۱۹۶۵)

جدول ۴.۴: نخستین چند تابع کروی بسل و نویمان، $j_l(x)$ و $n_l(x)$: اشکال مجانبی به ازای x های کوچک.

$$j_0 = \frac{\sin x}{x}$$

$$n_0 = -\frac{\cos x}{x}$$

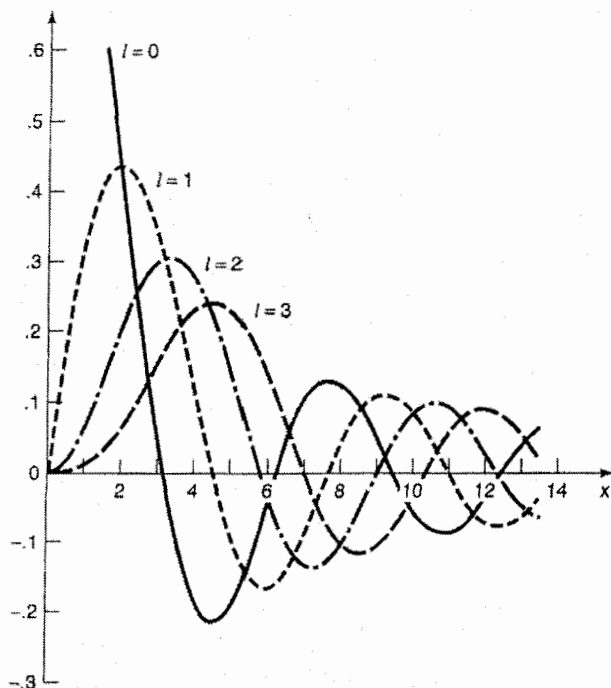
$$j_1 = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}$$

$$n_1 = -\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x}$$

$$j_2 = \left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right) \sin x - \frac{3}{x^2} \cos x$$

$$n_2 = -\left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right) \cos x - \frac{3}{x^2} \sin x$$

$$j_l \rightarrow \frac{x^l}{(2l+1)!!} \quad n_l \rightarrow -\frac{(2l-1)!!}{x^{l+1}}, \quad x \ll 1$$



شکل ۴.۴: نمودارهای نخستین چهار تابع بسل کروی.

مساله ۷.۴

(الف) با استفاده از تعاریف (رابطه ۴۶.۴) عبارت‌های $n_1(x)$ و $n_2(x)$ را بسازید.

(ب) با بسط سینوس‌ها و کسینوس‌ها، فرمول‌های تقریبی $n_1(x)$ و $n_2(x)$ را به ازای $x \ll 1$ بدست آورید. اطمینان حاصل کنید که در مبداء بینهایت می‌شوند.

مساله ۸.۴

(الف) بررسی کنید آیا $Arj_l(kr)$ به ازای $V(r) = 0$ و $l = 1$ در معادله شعاعی صدق می‌کند.

(ب) از روی نمودار انرژی‌های مجاز چاه کروی نامتناهی را به ازای $l = 1$ تعیین کنید. نشان دهید برای مقادیر بزرگ n داریم $E_{n1} \approx (\hbar^2 \pi^2 / 2ma^2)(n + 1/2)^2$. راهنمایی: ابتدا نشان دهید $j_1(x) = 0 \Rightarrow x = \tan x$ است. x و $\tan x$ را روی یک نمودار رسم کرده و نقاط تلاقی آنها را مشخص کنید.

مساله ۹.۴** ذره‌ای به جرم m داخل یک پتانسیل کروی متناهی به شکل زیر قرار داده می‌شود:

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r \leq a \\ \infty, & r > a \end{cases}$$

حالت پایه را با حل معادله شعاعی به ازای $l = 0$ بیابید. نشان دهید اگر $V_0 a^2 < \pi^2 \hbar^2 / 8m$ هیچ حالت مقیدی وجود ندارد.

۲.۴ اتم هیدروژن

اتم هیدروژن متشکل است از یک پروتون سنگین و اساساً بدون حرکت (که شاید آنرا در مبداء هم قرار دهیم) با بار e به همراه یک الکترون (با بار $-e$) که بسیار سبکتر از آن بوده، بدور آن می‌چرخد و به جاذبه متقابل بارهای مخالف در مدار مقید است (شکل ۳.۴). از قانون کولن، انرژی پتانسیل عبارت است از

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad [۵۲.۴]$$

و معادله شعاعی هم نشان می‌گوید

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} \right] u = Eu \quad [۵۳.۴]$$

مساله ما عبارت است از حل این معادله برای $u(r)$ و تعیین انرژی‌های E مجاز. اتم هیدروژن چنان مورد مهمی است که قصد ندارم این بار حل معادله آنرا به دست خودتان بسپارم - آنها را با جزئیات و از طریق روشی که در بدست آوردن جواب تحلیلی نوسانگر هماهنگ به کار بردیم محاسبه خواهیم کرد. (اگر هر مرحله در این فرایند روشن نیست، می‌توانید برای توضیح کامل‌تر به بخش ۲.۳.۲ باز گردید). ضمناً، پتانسیل کولن (رابطه ۵۲.۴) حالت‌های پیوسته (با $E > 0$) را جایز شمرده و پراش الکترون - پروتون، به علاوه حالت‌های مقید را توضیح داده و اتم هیدروژن را نمایش می‌دهد، با این حال توجه خود را به مورد آخر معطوف خواهیم کرد.

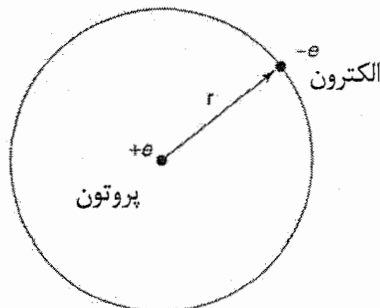
۱۰.۲.۴ تابع موج شعاعی

اولین کارمان مرتب کردن و سر و سامان دادن به وضع نمادگذاری است. قرار دهید

$$\kappa \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \quad [۵۴.۴]$$

(برای حالت‌های مقید که در آنها E منفی است، κ حقیقی است.) با تقسیم رابطه ۵۳.۴ به E داریم:

$$\frac{1}{\kappa^2} \frac{d^2 u}{dr^2} = \left[1 - \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2 \kappa} \frac{1}{(\kappa r)} + \frac{l(l+1)}{(\kappa r)^2} \right] u$$



شکل ۳.۴: اتم هیدروژن

$$\rho \equiv kr, \quad \text{و} \quad \rho_0 \equiv \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2K} \quad [55.4]$$

که در نتیجه داریم:

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} = \left[1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u \quad [56.4]$$

پس از این، شکل مجانبی جواب‌ها را بررسی می‌کنیم. وقتی $\rho \rightarrow \infty$ می‌رود، عبارت ثابت در پرانتزها غالب می‌شود، از این رو (به طور تقریبی)

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} = u$$

جواب عمومی از این قرار است

$$u(\rho) = Ae^{-\rho} + Be^{\rho} \quad [57.4]$$

اما e^{ρ} همچنانکه $\rho \rightarrow \infty$ می‌رود بینهایت می‌شود، پس $B = 0$ است. از قرار معلوم، برای ρ های بزرگ

$$u(\rho) \sim Ae^{-\rho} \quad [58.4]$$

از سوی دیگر، وقتی $\rho \rightarrow 0$ می‌رود عبارت مرکزگرا مسلط می‌شود^{۱۲}؛ پس به طور تقریبی

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} = \frac{l(l+1)}{\rho^2} u$$

جواب عمومی (خودتان بررسی کنید!) عبارت است از

$$u(\rho) = C\rho^{l+1} + D\rho^{-l}$$

^{۱۲} این استدلال زمانی که $l = 0$ است به کار نمی‌آید (گرچه نتیجه، رابطه ۵۹.۴، در واقع برای آن مورد هم برقرار است). اما اهمیتی ندارد: همه آنچه سعی داریم انجام دهیم این است که انگیزه‌ای برای تغییر بقیه متغیرها بوجود آوریم (رابطه ۶۰.۴).

اما ρ^{-l} وقتی $\rho \rightarrow 0$ می‌رود بینهایت می‌شود، پس $D = 0$ است. از اینرو برای ρ های کوچک داریم

$$u(\rho) \sim C\rho^{l+1} \quad [۵۹.۴]$$

مرحله بعدی این است که رفتار مجانبی را از تابع خارج کنیم، به همین خاطر تابع جدید $v(\rho)$ را معرفی می‌کنیم:

$$u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} v(\rho) \quad [۶۰.۴]$$

به این امید که $v(\rho)$ از $u(\rho)$ ساده‌تر شود. نشانه‌های اولیه که چندان خوش یمن نیستند:

$$\frac{du}{d\rho} = \rho^l e^{-\rho} \left[(l+1-\rho) + \rho \frac{dv}{v\rho} \right]$$

و

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} = \rho^l e^{-\rho} \left\{ \left[-2l - 2 + \rho + \frac{l(l+1)}{\rho} \right] v + 2(l+1-\rho) \frac{dv}{d\rho} + \rho \frac{d^2 v}{d\rho^2} \right\}$$

به این ترتیب معادله شعاعی (رابطه ۵۶.۴) برحسب $v(\rho)$ به این شکل درمی‌آید

$$\rho \frac{d^2 v}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho) \frac{dv}{d\rho} + [\rho_0 - 2(l+1)v] = 0 \quad [۶۱.۴]$$

سرانجام، اینطور فرض می‌کنیم که جواب، $v(\rho)$ ، را می‌توان به صورت یک سری توانی از ρ بیان کرد:

$$v(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j \rho^j \quad [۶۲.۴]$$

مساله ما تعیین ثوابت (c_0, c_1, c_2, \dots) است. اگر جمله به جمله از عبارت بالا مشتق بگیریم

می‌رسیم به

$$\frac{dv}{d\rho} = \sum_{j=0}^{\infty} j c_j \rho^{j-1} = \sum_{j=0}^{\infty} (j+1) c_{j+1} \rho^j$$

(در حاصل جمع دوم نام «شاخص بدل» را تغییر داده‌ام: $j \rightarrow j+1$. اگر این کار شما را به دردرس می‌اندازد، چند عبارت اول را صراحتاً بنویسید و آنرا بررسی کنید. شاید بگوئید حاصلجمع فوق باید از $j = -1$ شروع شود اما عامل $(j+1)$ آن عبارت را به هر صورت از بین می‌برد، پس می‌توان از همان صفر هم آغاز کرد.) با انتگرال گیری مجدد می‌رسیم به

$$\frac{d^2 v}{d\rho^2} = \sum_{j=0}^{\infty} j(j+1) a_{j+1} \rho^{j-1}$$

اگر این نتیجه را در رابطه ۶۱.۴ قرار دهیم، داریم

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{\infty} j(j+1) c_{j+1} \rho^j + 2(l+1) \sum_{j=0}^{\infty} (j+1) c_{j+1} \rho^j \\ - 2 \sum_{j=0}^{\infty} j c_j \rho^j + [\rho_0 - 2(l+1)] \sum_{j=0}^{\infty} c_j \rho^j = 0 \end{aligned}$$

برابر قرار دادن ضرایب توان‌های مشابه نتیجه می‌دهد که

$$j(j+1)c_{j+1} + 2(l+1)(j+1)c_{j+1} - 2jc_j + [\rho_0 - 2(l+1)]c_j = 0$$

یا

$$c_{j+1} = \left\{ \frac{2(j+l+1) - \rho_0}{(j+1)(j+2l+2)} \right\} c_j \quad [۶۳.۴]$$

فرمول بازگشتی حاصل، ضرایب و در نتیجه تابع $v(\rho)$ را تعیین می‌کند: کار را با c_0 شروع می‌کنیم (این یک ثابت کلی می‌شود که باید از طریق بهنجارش تعیین شود)، سپس رابطه ۶۳.۴ مقدار c_1 را بدست می‌دهد؛ آنرا در رابطه قبلی می‌گذاریم و c_2 را بدست می‌آوریم و همین طور تا آخر.^{۱۳}

^{۱۳} شاید تعجب کنید چرا مستقیماً از روش سریها روی $u(\rho)$ استفاده نکردم - چرا رفتار مجانبی را قبل از به کارگیری این روش خارج کردم؟ دلیل بیرون آوردن ρ^{l+1} تا حد زیادی یکجور سلیقه وابسته به زیباشناسی است: بدون این، دنباله با رشته بلندی از صفرها شروع می‌شود (اولین ضریب غیر صفر می‌شود c_{l+1} ؛ با خارج کردن ρ^{l+1} سری‌ای

حال بیایید ببینیم شکل این ضرایب به ازای z های بزرگ چگونه می شود (این معادل است با ρ بزرگ، جاییکه توانهای بالاتر تسلط دارند). در این نظام فرمول بازگشتی می گوید^{۱۴}

$$c_{j+1} \cong \frac{2j}{j(j+1)} c_j = \frac{2}{j+1} c_j$$

برای یک لحظه فرض کنید این رابطه دقیقاً (نه با تقریب) درست می بود. در آن صورت

$$c_j = \frac{2^j}{j!} c_0 \quad [۶۴.۴]$$

پس

$$v(\rho) = A \sum_{j=0}^{\infty} \frac{2^j}{j!} \rho^j = c_0 e^{2\rho}$$

و از این جا

$$u(\rho) = c_0 \rho^{l+1} e^{\rho} \quad [۶۵.۴]$$

که در ρ بینهایت بزرگ می شود. نمایی مثبت دقیقاً رفتار مجانبی است که در رابطه ۵۷.۴ آنرا نمی خواستیم. (این تصادفی نیست که اینجا هم ظاهر شد؛ هر چه باشد شکل مجانبی جواب یکسانی از معادله شعاعی را به نمایش می گذارد - آنها فقط همانهایی نمی شوند که مایلیم زیرا

بدست می آوریم که با ρ^0 شروع می شود. عامل $e^{-\rho}$ مهم تر است - اگر آنرا بیرون نبرید، یک فرمول بازگشتی سه جمله ای نصیب تان می شود که شامل c_j ، c_{j+1} و c_{j+2} است (امتحان کنید!) و این یعنی داشتن چیزی که کار کردن با آن بینهایت دشوار است.

^{۱۴} احتمالاً می پرسید چرا ۱ را در $j+1$ برنداشتیم - هر چه باشد، داریم از $2(l+1)$ چشم پوشی می کنیم - ρ_0 در صورت و نیز $2l+2$ در منخرج. در این تقریب برداشتن ۱ هم ایرادی ندارد، اما نگه داشتن آن استدلال را کمی روشن تر می کند. سعی کنید اینکار را بدون ۱ انجام دهید و خواهید دید که ۱ چه معنایی دارد.

بهنجار پذیر نیستند.) تنها یک روش برای خلاصی از این مخمصه وجود دارد: سری‌ها باید قطع شوند. باید یک عدد صحیح بیشینه مانند j_{max} وجود داشته باشد به طوریکه

$$c_{(j_{max}+1)} = 0 \quad [۶۶.۴]$$

(که بعد از آن تمام ضرایب به طور خودکار از بین بروند). اینطور که پیداست (از رابطه ۶۳.۴)

$$2(j_{max} + l + 1) - \rho_0 = 0$$

با تعریف

$$n \equiv j_{max} + l + 1 \quad [۶۷.۴]$$

(که آنرا اصطلاحاً عدد کوانتومی اصلی می‌نامند)، داریم

$$\rho_0 = 2n \quad [۶۸.۴]$$

از سوی دیگر ρ_0 تعیین کننده E است (رابطه ۵۴.۴ و ۵۵.۴):

$$E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = -\frac{me^4}{8\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 \rho_0^2} \quad [۶۹.۴]$$

پس انرژی‌های مجاز از این قرارند

$$E_n = -\left[\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \right] \frac{1}{n^2} = \frac{E_1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad [۷۰.۴]$$

این همان فرمول بور معروف است - هر طور حساب کنید، این مهم‌ترین نتیجه در تمام مکانیک کوانتومی است. بور آنرا در سال ۱۹۱۳ از روی یک معجون بخت‌آور از فیزیک کلاسیک غیر قابل انطباق و مکانیک کوانتومی نارس بدست آورد (معادله شرودینگر تکوین نیافت، تا سال ۱۹۲۴). با ترکیب روابط ۵۵.۴ و ۶۸.۴ درمی‌یابیم

$$\kappa = \left(\frac{me^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \right) \frac{1}{n} = \frac{1}{an} \quad [۷۱.۴]$$

که در آن

$$a \equiv \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0.529 \times 10^{-10}m \quad [۷۲.۴]$$

اصطلاحاً شعاع بور است.^{۱۵} (باز هم از رابطه ۵۵.۴) نتیجه می‌شود

$$\rho = \frac{r}{an} \quad [۷۳.۴]$$

توابع موج فضایی هیدروژن با سه عدد کوانتومی (n ، l و m) برچسب خورده‌اند:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}Y_l^m(\theta, \phi) \quad [۷۴.۴]$$

که در آن (عطف توجه به روابط ۳۶.۴ و ۶۰.۴)

$$R_{nl}(r) = \frac{1}{r}\rho^{l+1}e^{-\rho}v(\rho) \quad [۷۵.۴]$$

$v(\rho)$ یک چند جمله‌ای از درجه $j_{max} = n - l - 1$ در ρ است که ضرایب آن با فرمول بازگشتی

زیر تعیین می‌شوند (همانند عامل بهنجارش کلی)

$$c_{j+1} = \frac{2(j+l+1-n)}{(j+1)(j+2l+2)}c_j \quad [۷۶.۴]$$

حالت پایه (یعنی حالت مربوط به کمترین انرژی) وضعیتی است که در آن $n = 1$ باشد؛ با

جاگذاری مقادیر پذیرفته شده برای ثابت‌های فیزیکی، به نتیجه زیر می‌رسیم

$$E_1 = -\left[\frac{m}{2\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2\right] = -13.6 \text{ eV} \quad [۷۷.۴]$$

^{۱۵} رسم قدیم بر این است که شعاع بور را با شاخص پائین می‌نویسند: a_0 . اما اینکار دست و پا گیر است و ضرورتی

آشکار است که انرژی بستگی هیدروژن (میزان انرژی که باید در حالت پایه به الکترون بدهید تا اتم را یونیزه کنید، یعنی همان انرژی یونش) برابر است با 13.6 eV . رابطه ۶۷.۴ ما را وامی‌دارد قرار دهیم $l = 0$ و از آنجائیکه $m = 0$ است، لذا

$$\psi_{100}(r, \theta, \phi) = R_{10}(r)Y_0^0(\theta, \phi) \quad [۷۸.۴]$$

فرمول بازگشتی بعد از اولین جمله (رابطه ۷۶.۴ به ازای $j = 0$ نتیجه می‌دهد $c_1 = 0$) قطع می‌شود، از این رو $v(\rho)$ یک ثابت (c_0) است و

$$R_{10}(r) = \frac{c_0}{a} e^{-r/a} \quad [۷۹.۴]$$

اگر آنرا بهنجار کنیم مطابق با رابطه ۳۱.۴ داریم

$$\int_0^\infty |R_{10}|^2 r^2 dr = \frac{|c_0|^2}{a^2} \int_0^\infty e^{-2r/a} r^2 dr = |c_0|^2 \frac{a}{4} = 1$$

پس $c_0 = 2/\sqrt{a}$. در این بین، $Y_0^0 = 1/\sqrt{4\pi}$ و در نتیجه حالت پایه هیدروژن عبارت است از

$$\psi_{100}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}$$

[۸۰.۴]

اگر $n = 2$ باشد، انرژی برابر است با

$$E_2 = \frac{-13.6 \text{ eV}}{4} = -3.4 \text{ eV} \quad [۸۱.۴]$$

این اولین حالت برانگیخته است - یا به بیان دقیقتر حالت‌ها، چراکه یا $l = 0$ است (که در آن حالت همچنین $m = 0$ است) یا $l = 1$ (با $m = -1, 0, +1$)، پیداست که چهار حالت مختلف وجود دارد که در این انرژی سهیم‌اند. اگر $l = 0$ باشد، رابطه بازگشتی (رابطه ۷۶.۴) می‌دهد

$$c_1 = -c_0 \quad (j = 0 \text{ با استفاده از}) \quad \text{و} \quad c_2 = 0 \quad (j = 1 \text{ با استفاده از})$$

در اینصورت $v(\rho) = c_0(1 - \rho)$ است و در نتیجه

$$R_{20}(r) = \frac{c_0}{2a} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/2a} \quad [۸۲.۴]$$

دقت کنید که ضرایب بسط $\{c_n\}$ برای اعداد کوانتومی n و l کاملاً با هم تفاوت دارند. اگر $l = 1$ باشد فرمول بازگشتی سری را بعد از یک تک جمله قطع می‌کند؛ $v(\rho)$ یک ثابت است و می‌رسیم به اینکه

$$R_{21}(r) = \frac{c_0}{4a^2} r e^{-r/2a} \quad [۸۳.۴]$$

(در هر حالت ثابت c_0 از راه بهنجارش تعیین می‌شود - مساله ۱۱.۴ را ملاحظه کنید).

به ازای هر n دلخواه، مقادیر ممکن l (مطابق با رابطه ۶۷.۴) عبارتند از

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1 \quad [۸۴.۴]$$

به ازای هر l تعداد $(2l+1)$ مقدار برای m وجود دارد (رابطه ۲۹.۴)، بدین نحو تبهگنی کل سطح انرژی E_n عبارت است از

$$d(n) = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad [۸۵.۴]$$

چند جمله‌ای $v(\rho)$ (که از روی فرمول بازگشتی، رابطه ۷۶.۴، تعریف می‌شود) در ریاضیات کاربردی تابع شناخته شده‌ای است؛ صرفنظر از بهنجارش، می‌توان آنرا به این صورت نوشت

$$v(\rho) = L_{n-l-1}^{2l+1}(2\rho) \quad [۸۶.۴]$$

که در آن

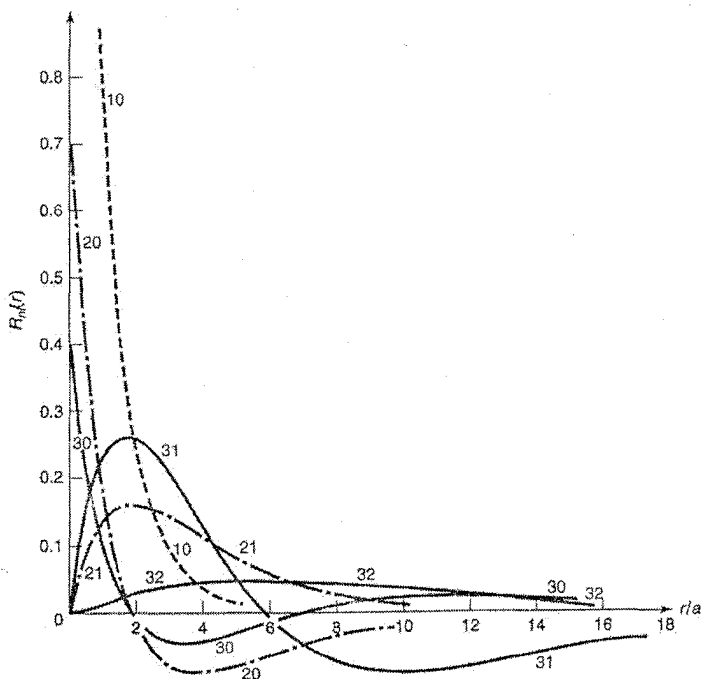
$$L_{q-p}^p(x) \equiv (-1)^p \left(\frac{d}{dx}\right)^p L_q(x) \quad [۸۷.۴]$$

چند جمله‌ای لاگر وابسته و

$$L_q(x) \equiv e^x \left(\frac{d}{dx}\right)^q (e^{-x} x^q) \quad [۸۸.۴]$$

هم q امین چند جمله‌ای لژاندر است.^{۱۶} (تعدادی از نخستین چند جمله‌ای‌های لژاندر در جدول ۵.۴ فهرست شده‌اند؛ بعضی از چند جمله‌ای‌های لژاندر وابسته هم در جدول ۶.۴ آمده‌اند. تعدادی از اولین توابع موج شعاعی در جدول ۷.۴ فهرست شده و در شکل ۴.۴ هم ترسیم شده‌اند.) توابع موج بهنجار شده هیدروژن عبارتند از^{۱۷}

$$\psi_{nlm} = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} e^{-r/na} \left(\frac{2r}{na}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right) Y_l^m(\theta, \phi) \quad [۸۲.۴]$$



شکل ۴.۴: نمودارهای شماری از اولین توابع موج شعاعی هیدروژن، $R_{nl}(r)$.

^{۱۶} مثل همیشه، راه و رسم‌های بهنجارش رقیبی در متون مختلف وجود دارد؛ من کمابیش استاندارد ترین را برگزیده‌ام.

^{۱۷} اگر می‌خواهید عامل بهنجارش را حساب کنید، (برای مثال) کتاب *Quantum Mechanics* اثر L. Schiff (انتشارات McGraw-Hill، ۱۹۶۸)، صفحه ۹۳ را مطالعه کنید.

جدول ۵.۴: تعدادی از نخستین چند جمله‌ای‌های لژاندر، $L_q(x)$.

$$L_0 = 1$$

$$L_1 = -x + 1$$

$$L_2 = x^2 - 4x + 2$$

$$L_3 = -x^3 + 9x^2 - 18x + 6$$

$$L_4 = x^4 - 16x^3 + 72x^2 - 96x + 24$$

$$L_5 = -x^5 + 25x^4 - 200x^3 + 600x^2 - 600x + 120$$

$$L_6 = x^6 - 36x^5 + 450x^4 - 2400x^3 + 5400x^2 - 4320x + 720$$

جدول ۶.۴: تعدادی از نخستین چند جمله‌ای‌های وابسته لژاندر، $L_{q-p}^p(x)$.

$$L_0^0 = 1$$

$$L_0^2 = 2$$

$$L_1^0 = -x + 1$$

$$L_1^2 = -6x + 18$$

$$L_2^0 = x^2 - 4x + 2$$

$$L_2^2 = 12x^2 - 96x + 144$$

$$L_0^1 = 1$$

$$L_0^3 = 6$$

$$L_1^1 = -2x + 4$$

$$L_1^3 = -24x + 96$$

$$L_2^1 = 3x^2 - 18x + 18$$

$$L_2^3 = 60x^2 - 600x + 1200$$

جدول ۷.۴: تعدادی از نخستین توابع موج شعاعی هیدروژن، $R_{nl}(r)$.

$R_{10} = 2a^{-3/2}\exp(-r/a)$
$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}}a^{-3/2}\left(1 - \frac{1}{2}\frac{r}{a}\right)\exp(-r/2a)$ $R_{21} = \frac{1}{\sqrt{24}}a^{-3/2}\frac{r}{a}\exp(-r/2a)$
$R_{30} = \frac{2}{\sqrt{27}}a^{-3/2}\left(1 - \frac{2}{3}\frac{r}{a} + \frac{2}{27}\left(\frac{r}{a}\right)^2\right)\exp(-r/3a)$ $R_{31} = \frac{8}{27\sqrt{6}}a^{-3/2}\left(1 - \frac{1}{6}\frac{r}{a}\right)\left(\frac{r}{a}\right)\exp(-r/3a)$ $R_{32} = \frac{4}{81\sqrt{30}}a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^2\exp(-r/3a)$
$R_{40} = \frac{1}{4}a^{-3/2}\left(1 - \frac{3}{4}\frac{r}{a} + \frac{1}{8}\left(\frac{r}{a}\right)^2 - \frac{1}{192}\left(\frac{r}{a}\right)^3\right)\exp(-r/4a)$ $R_{41} = \frac{\sqrt{5}}{16\sqrt{3}}a^{-3/2}\left(1 - \frac{1}{4}\frac{r}{a} + \frac{1}{80}\left(\frac{r}{a}\right)^2\right)\frac{r}{a}\exp(-r/4a)$ $R_{42} = \frac{1}{64\sqrt{5}}a^{-3/2}\left(1 - \frac{1}{12}\frac{r}{a}\right)\left(\frac{r}{a}\right)^2\exp(-r/4a)$ $R_{43} = \frac{1}{768\sqrt{35}}a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^3\exp(-r/4a)$

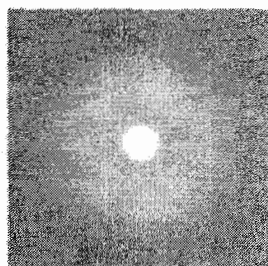
قشنگ نیستند اما گله نکنید - این تنها یکی از معدود سامانه‌های واقعی‌ای است که اصلاً می‌توان آنرا به شکلی دقیقاً قطعی حل کرد. دقت کنید درحالی‌که توابع موج وابسته به سه عدد کوانتومی هستند، انرژی‌ها (رابطه ۷.۴) تنها با n تعیین می‌شوند. این صفت مشخصه پتانسیل

کولنی است؛ در حالت چاه کروی، احتمالاً به یاد می‌آورید، انرژی‌ها به l بستگی دارند (رابطه ۵۰.۴).
توابع موج دو به دو متعامدند:

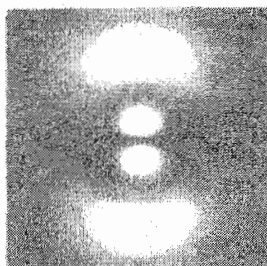
$$\int \psi_{nlm}^* \psi_{n'l'm'} r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\phi = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad [90.4]$$

این پیامد تعامد نوسانگر کروی است (رابطه ۳۳.۴) و (چون $n \neq n'$ است) از این حقیقت هم ناشی می‌شود که آنها ویژه توابع H با ویژه مقدارهای گسسته هستند.

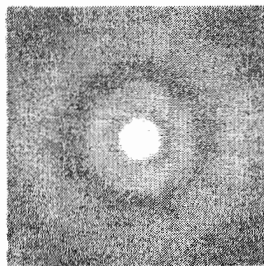
مجسم کردن اتم هیدروژن ساده نیست. شیمیدان‌ها علاقمند به رسم «طرح‌های چگالی» هستند که در آنها روشنی ابر متناظر است با $|\psi|^2$ (شکل ۵.۴). سطوح چگالی ثابت (شکل ۶.۴) کمی تر (اما شاید برای خواندن دشوارتر) هستند.



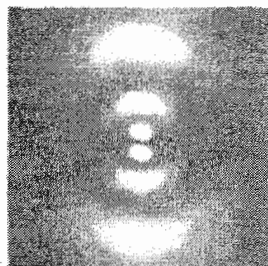
(2,0,0)



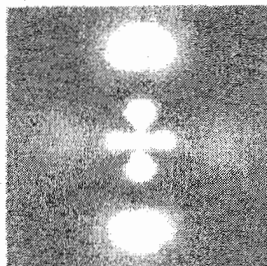
(3,1,0)



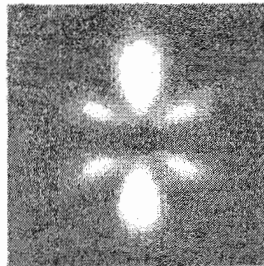
(4,0,0)



(4,1,0)

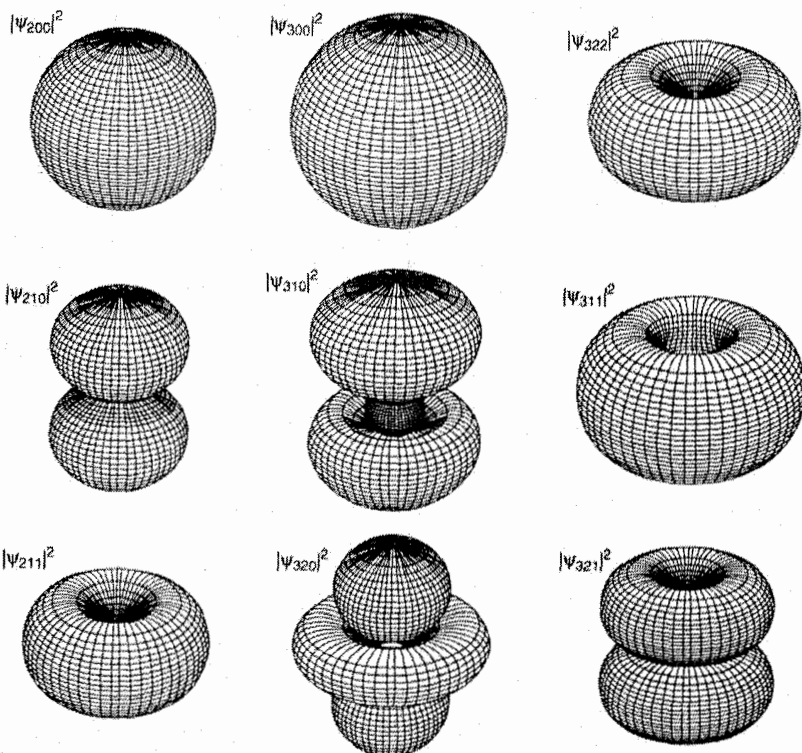


(4,2,0)



(4,3,0)

شکل ۵.۴: طرح‌های چگالی توابع موج هیدروژن (n, l, m). تصور کنید هر طرح حول محور عمودی z چرخانده شود. تصاویر با اجازه از روی «اتم‌ها در جعبه» نسخه ۱.۰.۸ کاری از Dauger Research چاپ شده‌اند.



شکل ۶.۴: سطوح $|\psi|^2$ ثابت برای چند تابع موج اول هیدروژن. چاپ مجدد با اجازه Hans و Sigmund Brandt و Dieter Dahmen از کتاب Book of Quantum Mechanics ویرایش سوم، انتشارات Springer، نیویورک (۲۰۰۱) انجام شده است.

مساله ۱۰.۴* توابع موج شعاعی R_{30} ، R_{31} و R_{32} را با استفاده از فرمول بازگشتی (رابطه ۷۶.۴) محاسبه کنید. خودتان را برای بهنجار کردن به زحمت نیندازید.

مساله ۱۱.۴*

(الف) R_{20} (رابطه ۸۲.۴) را بهنجار کرده و تابع ψ_{200} را درست کنید.

(ب) R_{21} (رابطه ۸۳.۴) را بهنجار کرده و توابع ψ_{210} ، ψ_{211} و ψ_{21-1} را درست کنید.

مساله ۱۲.۴*

(الف) با استفاده از رابطه ۸۸.۴، چهار چند جمله‌ای اول لژاندر را محاسبه کنید.

(ب) با استفاده از روابط ۸۶.۴ ، ۸۷.۴ و ۸۸.۴ عبارت $v(p)$ را برای حالت $n = 5$ و $l = 2$ بدست آورید.

(پ) عبارت $v(p)$ را (برای حالت $n = 5$ و $l = 2$) بدست آورید اما اینبار از فرمول بازگشتی (رابطه ۷۶.۴) استفاده کنید.

مساله ۱۳.۴*

(الف) $\langle r \rangle$ و $\langle r^2 \rangle$ را برای الکترونی در حالت پایه هیدروژن بیابید. پاسخ‌های خود را برحسب شعاع بور بیان کنید.

(ب) $\langle x \rangle$ و $\langle x^2 \rangle$ را برای الکترونی در حالت پایه هیدروژن بیابید. راهنمایی: این کار نیازمند هیچ انتگرال‌گیری جدیدی نیست - توجه کنید که $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ و از تقارن حالت پایه بهره‌برداری کنید.

(پ) $\langle x^2 \rangle$ را در حالت $n = 2$ ، $l = 1$ و $m = 1$ بیابید. هشدار: این حالت در x ، y ، z متقارن نیست. از $x = r \sin \theta \cos \theta$ استفاده کنید.

مساله ۱۴.۴ محتمل‌ترین مقدار r در حالت پایه هیدروژن چیست؟ (جواب صفر نیست!) راهنمایی: باید ابتدا احتمال آن که الکترون در فاصله‌ای میان r و $r + dr$ یافت شود را بدست آورید.

مساله ۱۵.۴ یک اتم هیدروژن در ترکیب خطی زیر از حالت‌های مانای $n = 2$ ، $l = 1$ ، $m = 1$ و $m = -1$ قرار دارد:

$$\Psi(r, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{211} + \psi_{21-1})$$

(الف) $\Psi(r, t)$ را بدست آورید. تا آنجا که می‌توانید آنرا ساده کنید.

(ب) مقدار چشمداشتی انرژی پتانسیل، $\langle V \rangle$ ، را بدست آورید. (آیا به زمان بستگی دارد؟) هم فرمول و هم عدد واقعی را برحسب الکترون ولت بیان کنید.

۲.۲.۴ طیف هیدروژن

از نظر تئوری، اگر یک اتم هیدروژن را در یکجور حالت مانای Ψ_{nlm} قرار دهیم، برای همیشه در آن حالت خواهد ماند. با این حال، اگر آنرا اندکی تحریک کنید (مثلا از طریق برخورد دادن آن با یک اتم دیگر یا با تاباندن نور به آن) آنوقت است که اتم ما ممکن است دچار یک گذار به حالت مانای دیگری شود - چه از راه جذب انرژی و حرکت رو با بالا به سمت حالتی با انرژی بیشتر و چه از طریق بیرون دادن انرژی (معمولا به شکل تابش الکترومغناطیسی) و حرکت به سمت پائین.^{۱۸} در عمل این قبیل اختلالات همیشه وجود دارند؛ گذارها (یا آنگونه که بعضی اوقات آنها را می‌نامیم، «پرش‌های کوانتومی» پیوسته رخ می‌دهند که در نتیجه آن محفظه‌ای از هیدروژن نور (فوتون‌ها) بیرون می‌دهد، نوری که انرژی‌اش مانسته اختلاف انرژی میان حالت‌های اولیه و نهایی است:

$$E_{\gamma} = E_i - E_f = -13.6 \text{ eV} \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) \quad [91.4]$$

خاطر نشان می‌شود که براساس فرمول پلانک،^{۱۹} انرژی یک فوتون متناسب است با فرکانس آن

$$E_{\gamma} = h\nu \quad [92.4]$$

در این بین، طول موج از رابطه $\lambda = c/\nu$ بدست می‌آید، از این رو

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad [93.4]$$

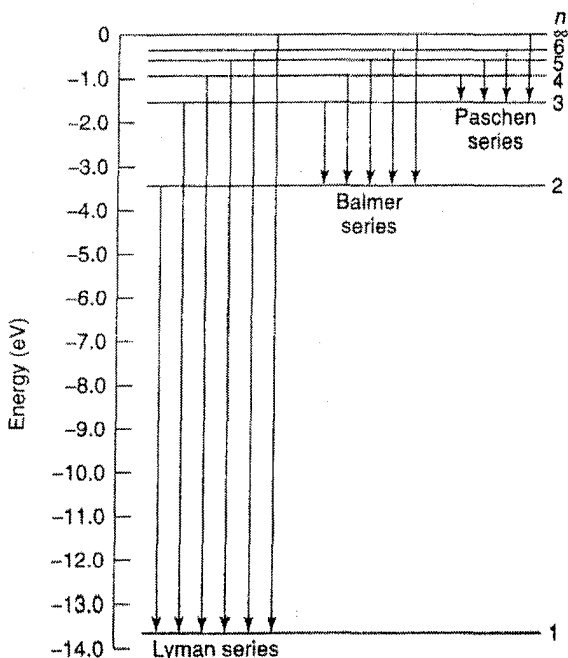
که در آن

$$R \equiv \frac{m}{4\pi c \hbar^3} \left(\frac{e^2}{4\pi \epsilon_0} \right)^2 = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1} \quad [94.4]$$

^{۱۸} این کار ذاتا شامل یک تعامل وابسته به زمان است که جزئیات آن در فصل ۹ ارائه خواهد شد؛ برای مقصود فعلی ما سازوکار واقعی درگیر در این مسئله اهمیتی ندارد.

^{۱۹} فوتون کوانتوم تابش الکترومغناطیسی است؛ شبی نیستی است و بنابراین خارج از حوزه مکانیک کوانتومی غیر نیستی قرار دارد. صحبت کردن درباره فوتون‌ها و به کار گرفتن فرمول پلانک برای انرژی‌های آنها چند جا سودمند است، اما لطفا به خاطر داشته باشید که این خارج از نظریه‌ایست که در حال شرح و بسط آن هستیم.

R به ثابت ریدبرگ معروف است و رابطه ۹۳.۴ هم فرمول ریدبرگ برای طیف هیدروژن؛ این رابطه به طور تجربی در قرن نوزدهم کشف شد و بزرگترین موفقیت نظریه بور توانایی آن در توجیه این نتیجه بود - به علاوه آنکه توانست R را برحسب ثوابت بنیادی طبیعت محاسبه کند. گذارهای معطوف به حالت پایه ($n_f = 1$) در بخش ماوراء بنفش هستند؛ نزد متخصصین طیف نگاری این گذارها به سری لیمان معروفند. گذارهای معطوف به اولین حالت برانگیخته ($n_f = 2$) در محدوده مرئی می‌افتند؛ این گذارها سری بالمر را تشکیل می‌دهند. گذارهایی که در آنها $n_f = 3$ است (سری پاشن) در محدوده فرو سرخ طیف هستند و همین طور تا آخر (شکل ۷.۴ را ملاحظه کنید). (در دمای اتاق، اکثر اتم‌های هیدروژن در حالت پایه قرار دارند؛ برای بدست آوردن طیف تابشی باید اول آنها را به حالت‌های برانگیخته مختلف برانیم؛ به طور نوعی این کار از طریق عبور دادن یک جرقه الکتریکی از میان گاز انجام می‌شود).



شکل ۷.۴: سطوح انرژی و گذارها در طیف هیدروژن.

مساله ۱۶.۴* اتم هیدروژنی متشکل است از تک الکترونی که بدور هسته‌ای با Z پروتون می‌چرخد ($Z = 1$) خود هیدروژن، $Z = 2$ هلیوم یونیزه شده، $Z = 3$ لیتیم دو بار یونیزه شده و الی آخر). انرژی بور $E_n(Z)$ ، انرژی بستگی $E_1(Z)$ ، شعاع بور $a(Z)$ و ثابت ریدبرگ $R(Z)$ را برای یک اتم هیدروژنی بدست آورید. (پاسخ‌های خود را به صورت مضارب مناسبی از مقادیر هیدروژن بیان کنید). سری لیمان برای $Z = 2$ و $Z = 3$ کجای طیف الکترومغناطیسی جای می‌گیرد؟ راهنمایی: اینجا چیز زیادی برای محاسبه وجود ندارد - در پتانسیل (رابطه ۵۲.۴) $e^2 \rightarrow Ze^2$ تغییر می‌کند، از اینرو همه کاری که باید انجام دهید عبارت است از همین جاگذاری در نتایج پایانی.

مساله ۱۷.۴ سامانه زمین - خورشید را به صورت سامانه‌ای گرانشی متناظر با اتم هیدروژن در نظر بگیرید.

(الف) تابع انرژی پتانسیل (به جای رابطه ۵۲.۴) چیست؟ (بگذارید m جرم زمین و M جرم خورشید باشد).

(ب) «شعاع بور»، a_g ، این سیستم چیست؟ عدد واقعی را بدست آورید.

(پ) «فرمول بور» گرانشی را نوشته و با برابر قرار دادن E_n با انرژی کلاسیکی سیاره‌ای در مداری دایره‌ای به شعاع r_0 ، نشان دهید $n = \sqrt{r_0/a_g}$ است. از اینجا، عدد کوانتومی n زمین را تخمین بزنید.

(ت) فرض کنید زمین گذاری به حالت پائین بعدی $(n - 1)$ انجام می‌دهد. چه مقدار انرژی (برحسب ژول) آزاد خواهد شد؟ طول موج فوتون گسیل شده (یا، به احتمال بیشتر، گراویتون) چقدر خواهد بود؟ (پاسخ خود را برحسب سال نوری بیان کنید - آیا این جواب شایان توجه^{۲۰} تنها یک تصادف است؟

^{۲۰}از John Meyer برای اشاره به این موضوع تشکر می‌کنم.

۳.۴. تکانه زاویه‌ای

همانطور که دیدیم، حالت‌های مانای اتم هیدروژن با سه عدد کوانتومی n ، l و m برچسب می‌خورند. عدد کوانتومی اصلی (n) انرژی حالت را تعیین می‌کند (رابطه ۷۰.۴)؛ اینطور که پیداست، l و m نیز به تکانه زاویه‌ای مربوط می‌شوند. در نظریه کلاسیکی نیروهای مرکزی، انرژی و تکانه زاویه‌ای کمیت‌های بنیادی پایسته‌ای هستند، برای همین تعجبی ندارد که تکانه زاویه‌ای نقش مهمی (در واقع، حتی بیشتر از مهم) در نظریه کوانتومی ایفا می‌کند.

به بیان کلاسیکی، تکانه زاویه‌ای یک ذره (نسبت به مبدأ) از فرمول زیر بدست می‌آید

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad [95.4]$$

که به عبارت دیگر می‌شود گفت

$$L_x = y p_z - z p_y, L_y = z p_x - x p_z, L_z = x p_y - y p_x \quad [96.4]$$

عملگرهای کوانتومی متناظر از دستور استاندارد زیر بدست می‌آیند:

$$p_x \rightarrow -i\hbar \partial / \partial x, p_y \rightarrow -i\hbar \partial / \partial y, p_z \rightarrow -i\hbar \partial / \partial z$$

در این بخش ویژه مقادیر عملگرهای تکانه زاویه‌ای را از طریق تکنیکی کاملاً جبری بدست می‌آوریم که یادآور همان تکنیکی است که در فصل ۲ برای بدست آوردن انرژی‌های مجاز نوسانگر هماهنگ به کار بردیم؛ کل کار مبتنی است بر کاربرد هوشمندانه روابط جابجایی. پس از آن به مساله دشوارتر تعیین ویژه توابع باز می‌گردیم.

۱.۳.۴. ویژه مقادیر

عملگرهای L_x و L_y با هم جابجا نمی‌شوند؛ در حقیقت^{۲۱}

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= [y p_z - z p_y, z p_x - x p_z] \\ &= [y p_z, z p_x] - [y p_z, x p_z] - [z p_y, z p_x] + [z p_y, x p_z] \end{aligned} \quad [97.4]$$

^{۲۱} توجه کنید که همه عملگرهایی که در مکانیک کوانتومی به آنها برمی‌خوریم (زیرنویس ۱۵، فصل ۱) نسبت به جمع خاصیت انجمنی دارند: $[A, B + C] = [A, B] + [A, C]$.

از روابط جابجایی کانونیک (رابطه ۱۰.۴) می‌دانیم که تنها عملگرهایی که اینجا با هم جابجا نمی‌شوند عبارتند از x با p_x ، y با p_y و z با p_z . بنابراین دو جمله میانی حذف می‌شوند و آنچه باقی می‌ماند از این قرار است

$$[L_x, L_y] = y p_x [p_z, z] + x p_y [z, p_z] = i\hbar(x p_y - y p_x) = i\hbar L_z \quad [98.4]$$

البته، می‌توانستیم از $[L_y, L_z]$ یا $[L_z, L_x]$ هم شروع کنیم، اما نیازی به محاسبه جداگانه اینها نیست - می‌توانیم بلافاصله آنها را با جایگشت دوره‌ای شاخص‌ها ($x \rightarrow y, y \rightarrow z, z \rightarrow x$) تعیین کنیم:

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z, [L_y, L_z] = i\hbar L_x, [L_z, L_x] = i\hbar L_y \quad [99.4]$$

برای تکانه زاویه‌ای روابط جابجایی بنیادینی وجود دارد؛ بقیه از آنها پیروی می‌کنند.

توجه داشته باشید که L_x ، L_y و L_z مشاهده‌پذیرهایی ناسازگار به شمار می‌روند. بنابراین اصل عدم قطعیت تعمیم یافته (رابطه ۶۲.۳)،

$$\sigma_{L_x}^2 \sigma_{L_y}^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle i\hbar L_z \rangle \right)^2 = \frac{\hbar^2}{4} \langle L_z \rangle^2$$

یا

$$\sigma_{L_x} \sigma_{L_y} \geq \frac{\hbar}{2} |\langle L_z \rangle| \quad [100.4]$$

به این ترتیب جستجوی حالت‌هایی که به طور همزمان ویژه تابع‌های L_x و L_y هستند بی‌حاصل خواهد بود. از سوی دیگر، مربع تکانه زاویه‌ای کل،

$$L^2 \equiv L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \quad [101.4]$$

قطعا با L_x جابجا می‌شود:

$$\begin{aligned} [L^2, L_x] &= [L_x^2, L_x] + [L_y^2, L_x] + [L_z^2, L_x] \\ &= L_y [L_y, L_x] + [L_y, L_x] L_y + L_z [L_z, L_x] + [L_z, L_x] L_z \\ &= L_y (-i\hbar L_z) + (-i\hbar L_z) L_y + L_z (i\hbar L_y) + (i\hbar L_y) L_z \\ &= 0 \end{aligned}$$

(از رابطه ۶۴.۳ برای ساده کردن جابجاگرها استفاده کردم؛ این را هم در نظر داشته باشید که هر عملگری با خودش جابجا می‌شود). طبعاً، به این نتیجه می‌رسیم که L^2 با L_y و L_z هم جابجا می‌شود:

$$[L^2, L_x] = 0, [L^2, L_y] = 0, [L^2, L_z] = 0 \quad [۱۰۲.۴]$$

یا به صورت فشرده‌تر،

$$[L^2, L] = 0 \quad [۱۰۳.۴]$$

پس L^2 با هر یک از مولفه‌های L سازگار است، برای همین می‌توانیم به یافتن ویژه حالت‌های همزمان L^2 و L_z (به فرض) امید داشته باشیم:

$$L^2 f = \lambda f \text{ و } L_z f = \mu f \quad [۱۰۴.۳]$$

از تکنیک عملگر نردبانی، بسیار شبیه به همانی که در بخش ۱.۳.۲ در مورد نوسانگر هماهنگ به کار بردیم، استفاده می‌کنیم. بگذارید

$$L_{\pm} \equiv L_x \pm iL_y \quad [۱۰۵.۴]$$

جابجاگر آن با L_z بدین ترتیب است

$$[L_z, L_{\pm}] = [L_z, L_x] \pm i[L_z, L_y] = i\hbar L_y \pm i(-i\hbar L_x) = \pm\hbar(L_x \pm iL_y)$$

از اینرو

$$[L_z, L_{\pm}] = \pm\hbar L_{\pm} \quad [۱۰۶.۴]$$

و طبعاً

$$[L^2, L_{\pm}] = 0 \quad [۱۰۷.۴]$$

ادعا می‌کنم اگر f ویژه تابع L^2 و L_z باشد، ویژه تابع $L_{\pm} f$ هم هست؛ رابطه ۱۰۷.۴ می‌گوید

$$L^2(L_{\pm} f) = L_{\pm}(L^2 f) = L_{\pm}(\lambda f) = \lambda(L_{\pm} f) \quad [۱۰۸.۴]$$

بنابراین $L_{\pm}f$ یک ویژه تابع L^2 است، با همان ویژه مقدار λ ، به همین خاطر رابطه ۱۰۶.۴ این را می‌رساند که

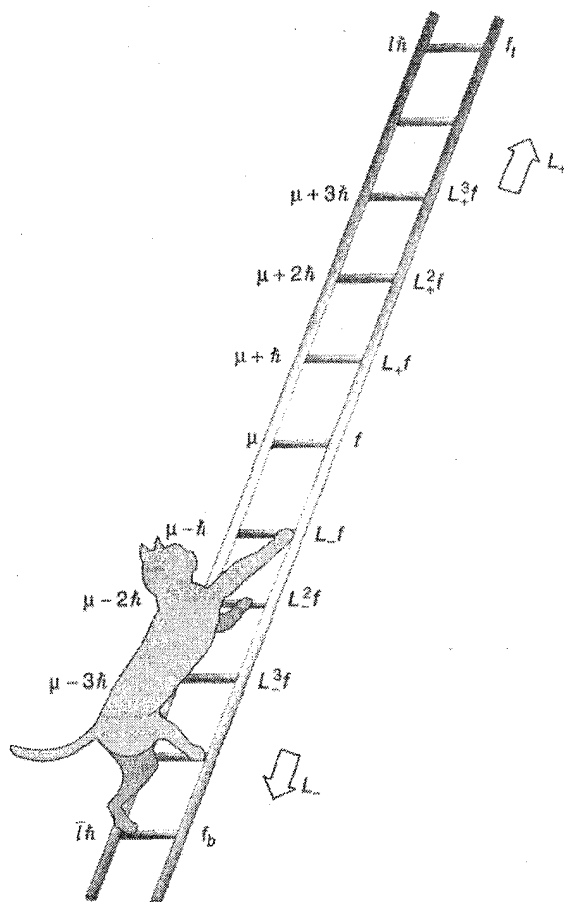
$$\begin{aligned} L_z(L_{\pm}f) &= (L_zL_{\pm} - L_{\pm}L_z)f + L_{\pm}L_zf = \pm\hbar L_{\pm}f + L_{\pm}(\mu f) \\ &= (\mu \pm \hbar)(L_{\pm}f) \end{aligned} \quad [10.9.4]$$

پس $L_{\pm}f$ یک ویژه تابع L_z با ویژه مقدار جدید $\mu \pm \hbar$ است. L_+ را عملگر «بالا برنده» (افزاینده) می‌نامیم، زیرا ویژه مقدار L_z را به اندازه \hbar بالا می‌برد، همچنین L_- را عملگر «پائین آورنده» (کاهنده) می‌نامیم، زیرا ویژه مقدار را به اندازه \hbar پائین می‌آورد.

به این ترتیب، به ازای مقدار مفروض λ ، «نردبانی» از حالت‌ها بدست می‌آوریم که در آن هر «پله» از ویژه مقدار L_z به اندازه یک واحد \hbar از همسایه‌اش فاصله دارد (شکل ۸.۴ را ملاحظه کنید). برای بالا رفتن از نردبان عملگر بالا برنده و برای پائین آمدن از آن عملگر کاهنده را اعمال می‌کنیم. اما این فرایند نمی‌تواند تا همیشه ادامه داشته باشد: اینطور که پیداست سرانجام به حالتی می‌رسیم که مولفه L_z آن از کل بیشتر است، چنین اتفاقی که نمی‌تواند رخ دهد.^{۲۲} باید یک «گام فرازین»، f_{\uparrow} ، وجود داشته باشد به طوریکه^{۲۳}

$$L_+f_{\uparrow} = 0 \quad [11.0.4]$$

^{۲۲} به بیان صوری، $\langle L^2 \rangle = \langle L_x^2 \rangle + \langle L_y^2 \rangle + \langle L_z^2 \rangle$ ، اما $\langle L_x^2 \rangle = \langle f | L_x^2 f \rangle = \langle L_x f | L_x f \rangle \geq 0$ (و به همین ترتیب برای L_y)، از اینرو داریم $\mu^2 \geq \mu^2 + \langle L_x^2 \rangle + \langle L_y^2 \rangle$.
^{۲۳} در حقیقت، همه آنچه می‌توانیم نتیجه بگیریم این است که L_+f_{\uparrow} قابل بهنجارش نیست - نرم آن به جای آنکه صفر باشد، بینهایت است. مساله ۱۸.۴ این جایگزین را بررسی می‌کند.



شکل ۸.۴: «نردبان» حالت‌های تکانه زاویه‌ای.

بگذارید $\hbar l$ ویژه مقدار L_z در گام فرازین باشد (تناسب حرف l کمی جلوتر نمایان می‌شود):

$$L_z f_t = \hbar l f_t \quad ; \quad L_z^2 f_t = \lambda f_t \quad [۱۱۱.۴]$$

پس حالا داریم

$$\begin{aligned} L_{\pm} L_{\mp} &= (L_x \pm iL_y)(L_x \mp iL_y) = L_x^2 + L_y^2 \mp i(L_x L_y - L_y L_x) \\ &= L^2 - L_z^2 \mp i(i\hbar L_z) \end{aligned}$$

یا، با جابجا کردن طرفین تساوی،

$$L^2 = L_{\pm}L_{\mp} + L_z^2 \mp \hbar L_z \quad [۱۱۲.۴]$$

می‌توان چنین نتیجه گرفت که

$$L^2 f_t = (L_- L_+ + L_z^2 + \hbar L_z) f_z = (0 + \hbar^2 l^2 + \hbar^2 l) f_t = \hbar^2 l(l+1) f_t$$

و در نتیجه

$$\lambda = \hbar^2 l(l+1) \quad [۱۱۳.۴]$$

این عبارت ویژه مقدار L^2 را برحسب ویژه مقدار بیشینه L_z برایمان بیان می‌کند.

در این بین، (به دلیل مشابه) یک پله پایینی، f_b ، هم وجود دارد به نحوی که

$$L_- f_b = 0 \quad [۱۱۵.۴]$$

بگذارید $\hbar \bar{l}$ ویژه مقدار L_z در این گام زیرین (پله پایینی) باشد:

$$L_z f_b = \hbar \bar{l} f_b; L^2 f_b = \lambda f_b \quad [۱۱۵.۴]$$

با استفاده از رابطه ۱۱۲.۴، داریم

$$L^2 f_b = (L_+ L_- + L_z^2 - \hbar L_z) f_b = (0 + \hbar^2 \bar{l}^2 - \hbar^2 \bar{l}) f_b = \hbar^2 \bar{l}(\bar{l}-1) f_b$$

و بدین ترتیب

$$\lambda = \hbar^2 \bar{l}(\bar{l}-1) \quad [۱۱۶.۴]$$

با مقایسه روابط ۱۱۳.۴ و ۱۱۶.۴، ملاحظه می‌کنیم که $\bar{l}(\bar{l}-1) = l(l+1)$ ، پس یا $\bar{l} = l+1$

است (که بی معنی است - پایین‌ترین پله بالاتر از بالاترین پله است) یا در غیر اینصورت

$$\bar{l} = -l \quad [۱۱۷.۴]$$

پیداست که ویژه مقادیر L_z عبارتند از $m\hbar$ که m (تناسب این حرف کمی جلوتر مشخص می‌شود)

در آن مقادیر از $-l$ تا $+l$ را در N گام صحیح می‌پذیرد. به ویژه، می‌توان چنین نتیجه گرفت که

$l = -l + N$ و از آنجا اینکه $l = N/2$ ، به همین دلیل l باید یک عدد صحیح یا نیم صحیح باشد. ویژه توابع با اعداد l و m مشخص می‌شوند:

$$L^2 f_l^m = \hbar^2 l(l+1) f_l^m; L_z f_l^m = \hbar m f_l^m \quad [۱۱۸.۴]$$

که در آن

$$l = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots; m = -l, -l+1, \dots, l-1, l \quad [۱۱۹.۴]$$

به ازای مقدار مشخص l ، تعداد $2l+1$ مقدار مختلف m وجود دارد (یعنی $2l+1$ «پله» روی «نردبان»)

برخی دوست دارند این نتیجه را با نمودار شکل ۹.۴ به تصویر بکشند (که برای حالت $l=2$ رسم شده است). نمودارها باید تکانه‌های زاویه‌ای ممکن را نشان دهنده - در واحدهای \hbar تایی همه آنها طولی برابر با $\sqrt{l(l+1)}$ دارند (در این حالت $\sqrt{6} = 2.45$)، همچنین مولفه‌های z آنها برابر است با مقادیر مجاز m (یعنی، $-2, -1, 0, 1, 2$). توجه کنید که بزرگی بردارها (شعاع کره) بزرگتر از مولفه z بیشینه است! (به طور کلی، $\sqrt{l(l+1)} > l$ است، مگر به ازای حالت «بدیهی» $l=0$). اینطور که پیداست نمی‌توانید هیچ تکانه زاویه‌ای بدست آورید که کاملاً جهت z را نشانه رفته باشد. این بیان در نگاه اول بی معنی به نظر می‌رسد. «چرا نمی‌توانم محورهایم را جوری انتخاب کنم که z در امتداد جهت بردار تکانه زاویه‌ای باشد؟» عرض شود که، برای انجام اینکار باید هر سه مولفه را به طور همزمان بدانید، که اصل عدم قطعیت (رابطه ۱۰۰.۴) می‌گوید چنین چیزی غیر ممکن است. «بسیار خوب، قبول، اما حتماً هر از چند گاهی، با خوش شانسی، تصادفاً محور z ام را در امتداد جهت L هدف می‌گیرم». نه، نه! متوجه منظورم نشدید. نکته فقط این نیست که سه مولفه L را به طور همزمان بدانید؛ واضح است که سه مولفه در کار نیست - یک ذره که نمی‌تواند همینجوری یک بردار تکانه زاویه‌ای معین داشته باشد، مثل آنکه نمی‌تواند مکان و تکانه معین همزمان داشته باشد. اگر مقدار L_z معلوم باشد، آنوقت L_x و L_y مقادیر معلومی ندارند. این امر حتی

هنگام رسم بردارهای شکل ۹.۴ فریبده است - در بهترین حالت این بردارها می‌بایست پیرامون خطوط عرضی مشخص شوند تا نشان دهند که L_x و L_y غیر قابل تعیین هستند.

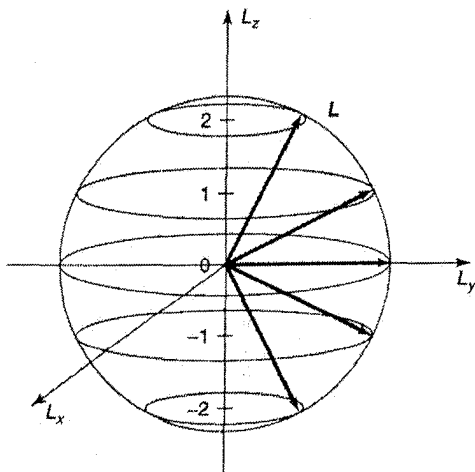
امیدوارم برای همیشه در خاطرتان بماند: به شیوه‌ای کاملاً جبری، با شروع از روابط جابجایی بنیادی برای تکانه زاویه‌ای (رابطه ۹.۴)، ویژه مقادیرهای L^2 و L_z را تعیین کردیم - حتی بدون دیدن خود ویژه توابع! حال به مساله ساخت ویژه توابع باز می‌گردیم، اما لازم به یادآوری است که این یکی کار بسیار آشفته‌تری است. از آن جهت که می‌دانید برنامه بعدی‌مان چیست، کار را با بخش اصلی بحث آغاز می‌کنم: $f_l^m = Y_l^m$ - ویژه توابع L^2 و L_z چیزی نیستند به جز همان هماهنگ‌های کروی قدیمی، که از مسیر کاملاً متفاوتی در بخش ۲.۱.۴ به آنها رسیدیم (برای همین است که حروف l و m را انتخاب کردم). خلاصه اینکه اکنون می‌توانم به شما بگویم چرا هماهنگ‌های کروی متعامد هستند: آنها ویژه توابع عملگرهای هرمیتی (L^2 و L_z) هستند که به ویژه مقادیر متفاوتی تعلق دارند (قضیه ۲، بخش ۱.۳.۳).

مساله ۱۸.۴ * عملگرهای بالابرنده و پائین آورنده مقدار m را به اندازه یک واحد تغییر

می‌دهند:

[۱۲۰.۴]

$$L_{\pm} f_l^m = (A_l^m) f_l^{m \pm 1}$$



شکل ۹.۴: حالت‌های تکانه زاویه‌ای (به ازای $l = 2$).

که در آن A_l^m مقداری ثابت است. سوال: اگر قرار باشد ویژه توابع بهنجار باشند، A_l^m چیست؟ راهنمایی: ابتدا نشان دهید L_z مزدوج هرمیتی L_{\pm} است (از آنجا که L_x و L_y مشاهده پذیر هستند، می توانید فرض را بر این بگذارید که هرمیتی اند ... با این حال اگر دوست دارید آنرا ثابت کنید؛ سپس از رابطه ۱۱۲.۴ استفاده کنید. پاسخ:

$$A_l^m = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} = \hbar \sqrt{l(l \mp m)(m \pm m + 1)} \quad [121.4]$$

به آنچه در فراز و فرود نردبان رخ می دهد توجه داشته باشید (یعنی، زمانی که L_+ را به f_l^l یا L_- را به f_l^{-l} اعمال می کنید).

مساله ۱۹.۴*

(الف) با شروع از روابط جابجایی کانونیک برای مکان و تکانه (رابطه ۱۰.۴)، جابجاگرهای زیر را بدست آورید:

$$[L_z, x] = i\hbar y, \quad [L_z, y] = -i\hbar x, \quad [L_z, z] = 0 \quad [122.4]$$

$$[L_z, p_x] = i\hbar p_y, \quad [L_z, p_y] = -i\hbar p_x, \quad [L_z, p_z] = 0$$

(ب) با استفاده از این نتایج عبارت $[L_z, L_x] = i\hbar L_y$ را مستقیماً از رابطه ۹۶.۴ بدست آورید.
(پ) عبارت های مناسب برای جابجاگرهای $[L_z, p^2]$ و $[L_z, r^2]$ را بدست آورید که طبعاً در آن داریم:

$$p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 \quad \text{و} \quad r^2 = x^2 + y^2 + z^2$$

(ت) نشان دهید هامیلتونی $H = (p^2/2m) + V$ با هر سه مولفه L جابجا می شود، به شرط آنکه V فقط به r بستگی داشته باشد. (بدین ترتیب H و L^2 و L_z دو به دو مشاهده پذیرهای سازگارند.

مساله ۲۰.۴**

(الف) ثابت کنید برای ذره ای در پتانسیل $V(r)$ آهنگ تغییر مقدار چشمداشتی تکانه زاویه ای مداری L برابر است با مقدار چشمداشتی گشتاور:

$$\frac{d}{dt}\langle L \rangle = \langle N \rangle$$

که در آن

$$N = \mathbf{r} \times (-\nabla)$$

(این مانسته دورانی قضیه اهرنفست است).

(ب) نشان دهید برای هر پتانسیل متقارن کروی داریم $dL/dt = 0$. (این شکلی از بیان کوانتومی پایستگی تکانه زاویه‌ای است).

۲.۳.۴ ویژه توابع

پیش از هر چیز باید L_x ، L_y و L_z را در مختصات کروی بازنویسی کنیم. باید توجه داشت که $L = (\hbar/i)(\mathbf{r} \times \nabla)$ و نیز اینکه گرادیان در مختصات کروی عبارت است از^{۲۴}

$$\nabla = \hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\phi} \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad [۱۲۳.۴]$$

در این بین، $\mathbf{r} = r\hat{r}$ ، از اینرو

$$L = \frac{\hbar}{i} \left[r(\hat{r} \times \hat{r}) \frac{\partial}{\partial r} + (\hat{r} \times \hat{\theta}) \frac{\partial}{\partial \theta} + (\hat{r} \times \hat{\phi}) \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right]$$

اما $(\hat{r} \times \hat{r}) = 0$ ، $(\hat{r} \times \hat{\theta}) = \hat{\phi}$ و $(\hat{r} \times \hat{\phi}) = -\hat{\theta}$ (شکل ۱.۴ را ملاحظه کنید) و در نتیجه

$$L = \frac{\hbar}{i} \left(\hat{\phi} \frac{\partial}{\partial \theta} - \hat{\theta} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad [۱۲۴.۴]$$

بردارهای $\hat{\theta}$ و $\hat{\phi}$ را می‌توان به مولفه‌های کارتزین آنها تجزیه کرد:

$$\hat{\theta} = (\cos \theta \cos \phi) \hat{i} + (\cos \theta \sin \phi) \hat{j} - (\sin \theta) \hat{k} \quad [۱۲۵.۴]$$

$$\hat{\phi} = -(\sin \phi) \hat{i} + (\cos \phi) \hat{j} \quad [۱۲۶.۴]$$

^{۲۴} کتاب *Mathematical Methods for Physicists* نوشته George Arfken و Hans Weber ویرایش پنجم،

بدین ترتیب

$$L = \frac{\hbar}{i} \left[(-\sin \phi \hat{i} + \cos \phi \hat{j}) \frac{\partial}{\partial \theta} - (\cos \theta \cos \phi \hat{i} + \cos \theta \sin \phi \hat{j} - \sin \theta \hat{k}) \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right]$$

در ضمن

$$L_x = \frac{\hbar}{i} \left(-\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cos \phi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad [۱۲۷.۴]$$

$$L_y = \frac{\hbar}{i} \left(+\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin \phi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad [۱۲۸.۴]$$

و سرانجام

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad [۱۲۹.۴]$$

به عملگرهای بالابرنده و پائین آورنده هم نیاز داریم:

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y = \frac{\hbar}{i} \left[(-\sin \phi \pm i \cos \phi) \frac{\partial}{\partial \theta} - (\cos \phi \pm i \sin \phi) \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right]$$

اما $\cos \phi \pm i \sin \phi = e^{\pm i\phi}$ ، از اینرو

$$L_{\pm} = \pm \hbar e^{\pm i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \pm i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad [۱۳۰.۴]$$

به ویژه (مساله ۲۱.۴ الف):

$$L_+ L_- = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + i \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad [۱۳۱.۴]$$

و در نتیجه (مساله ۲۱.۴ ب):

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \quad [۱۳۲.۴]$$

حال در موقعیتی هستیم که $f_l^m(\theta, \phi)$ را تعیین کنیم. این ویژه تابعی از L^2 با ویژه مقدار $\hbar^2 l(l+1)$ است:

$$L^2 f_l^m = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] f_l^m = \hbar^2 l(l+1) f_l^m$$

اما این دقیقاً «معادله زاویه‌ای» است (رابطه ۱۸.۴). از اینها گذشته ویژه تابع L_z با ویژه مقدار $m\hbar$ هم هست:

$$L_z f_l^m = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} f_l^m = \hbar m f_l^m$$

اما این معادل است با معادله سمتی (رابطه ۲۱.۴). معادلات این سامانه را پیشتر حل کرده‌ایم: نتیجه (که به شکل مناسبی بهنجار شده) عبارت است از هماهنگ‌های کروی، $Y_l^m(\theta, \phi)$. نتیجه‌گیری: هماهنگ‌های کروی ویژه توابع L_z و L^2 هستند. وقتی معادله شرودینگر را در بخش ۱.۴ به روش تفکیک متغیرها حل کردیم، ناخواسته داشتیم ویژه توابع همزمان سه عملگر جابجا پذیر H ، L^2 و L_z را می‌ساختیم:

$$H\psi = E\psi, L^2\psi = \hbar^2 l(l+1)\psi, L_z\psi = \hbar m\psi \quad [۱۳۳.۴]$$

در ضمن، می‌توانیم از رابطه ۱۳۲.۴ برای بازنویسی معادله شرودینگر (رابطه ۱۴.۴) به شکلی فشرده‌تر هم استفاده کنیم:

$$\frac{1}{2mr^2} \left[-\hbar^2 \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + L^2 \right] \psi + V\psi = E\psi$$

این هم از آخرین بخش این داستان مهیج، چون نظریه جبری تکانه زاویه‌ای می‌گذارد l (و در نتیجه m)، در حالیکه روش تفکیک متغیرها فقط ویژه توابع مربوط به اعداد صحیح را بدست می‌دهد (رابطه ۲۹.۴). شاید فکر کنید جواب‌های نیم صحیح ساختگی هستند، اما از این چنین برمی‌آید که آنها اتفاقاً حائز اهمیت فراوانی هستند، همانطور که در بخش‌های پیش رو خواهیم دید.

مساله ۲۱.۴ *

(الف) رابطه ۱۳۱.۴ را از روی رابطه ۱۳۰.۴ استخراج کنید. راهنمایی: از یک تابع آزمون استفاده کنید؛ در غیر اینصورت به احتمال زیاد چند جمله را جا می‌اندازید.

(ب) رابطه ۱۳۲.۴ را از روی روابط ۱۲۹.۴ و ۱۳۱.۴ استخراج کنید. راهنمایی: از رابطه ۱۱۲.۴ استفاده کنید.

مساله ۲۲.۴ *

(الف) عبارت $L_+ Y_l^l$ چیست؟ (مجاز به انجام هیچ محاسبه‌ای نمی‌باشید!)

(ب) از نتیجه بخش (الف) همراه با رابطه ۱۳۰.۴ و این حقیقت که $L_z Y_l^l = \hbar l Y_l^l$ است برای تعیین $Y_l^l(\theta, \phi)$ تا مرحله تعیین ثابت بهنجارش استفاده کنید.

(پ) ثابت بهنجارش را با انتگرال‌گیری مستقیم تعیین کنید. جواب نهایی خود را با آنچه در مساله ۵.۴ بدست آوردید مقایسه کنید.

مساله ۲۳.۴ در مساله ۳.۴ نشان دادید که

$$Y_2^1(\theta, \phi) = -\sqrt{15/8\pi} \sin \theta \cos \theta e^{i\theta}$$

عملگر بالابرنده را برای بدست آوردن $Y_2^2(\theta, \phi)$ روی این عبارت اعمال کنید. از رابطه ۱۲۱.۴ برای بدست آوردن بهنجارش استفاده کنید.

مساله ۲۴.۴ دو ذره به جرم m به دو انتهای میله صلب بدون جرمی به طول a متصل شده‌اند. سامانه مذکور آزاد است در سه بعد حول مرکز دوران کند (اما خود نقطه مرکزی ثابت است).

(الف) نشان دهید انرژی‌های مجاز این چرخنده صلب عبارتند از

$$E_n = \frac{\hbar^2 n(n+1)}{ma^2}, n = 0, 1, 2, \dots$$

راهنمایی: ابتدا انرژی (کلاسیکی) را برحسب تکانه زاویه‌ای کل بیان کنید.

(ب) ویژه توابع بهنجار شده Y_n امین سطح انرژی چقدر است؟

۴.۴ اسپین

در مکانیک کلاسیک، جسم صلب دو نوع تکانه زاویه‌ای را به خود می‌پذیرد: مداری ($L = r \times p$) که به حرکت مرکز جرم مربوط می‌شود و اسپینی ($S = I\omega$) که به حرکت حول مرکز جرم مربوط می‌شود. مثلاً زمین تکانه زاویه‌ای مداری دارد که به گردش سالانه‌اش حول خورشید وابسته بوده و یک تکانه زاویه‌ای اسپینی هم دارد که از چرخش روزانه حول قطب شمال خودش ناشی می‌شود. به مفهوم کلاسیکی این تمایز اساساً به سهولت و آسانی کاربرد مربوط می‌شود، چون وقتی با دقت نگاه می‌کنیم می‌بینیم که S چیزی نیست مگر جمع کل تکانه‌های زاویه‌ای تمام سنگ‌ها و سنگریزه‌هایی که بدور محور زمین می‌چرخند و زمین از آنها تشکیل شده است. در مکانیک کوانتومی هم چیز مشابهی رخ می‌دهد، اما اینجا تمایز مساله‌ای کاملاً بنیادین است. علاوه بر تکانه زاویه‌ای مداری که (در مورد هیدروژن) به حرکت الکترون حول هسته مربوط می‌شود، خود الکترون هم حامل شکل دیگری از تکانه زاویه‌ای است که ربطی به حرکتش در فضا ندارد (و در نتیجه با هیچ تابعی از متغیرهای مکانی r, θ, ϕ هم توصیف نمی‌شود) اما چیزی است مانسته اسپین کلاسیکی (و به همین دلیل واژه یکسانی را برای هر دو به کار می‌بریم). اصرار بیش از حدی برای تاکید روی این شباهت نیست: الکترون (تا آنجا که می‌دانیم) ذره نقطه‌ای بدون ساختاری است، برای همین تکانه زاویه‌ای اسپینی‌اش را نمی‌توان به تکانه‌های زاویه‌ای مداری اجزای تشکیل دهنده‌اش تجزیه کرد (مساله ۲۵.۴ را ملاحظه کنید).^{۲۵} همین قدر بس که بگوییم ذرات بنیادی علاوه بر تکانه زاویه‌ای غیر ذاتی (L)، حامل تکانه زاویه‌ای ذاتی (S) نیز هستند.

نظریه جبری اسپین رونوشتی از نظریه تکانه زاویه‌ای مداری است که با روابط جابجایی اصلی زیر آغاز می‌شود:^{۲۶}

^{۲۵} برای تعبیری متفاوت، مقاله *What is Spin?* نوشته Hans C. Ohanian در مجله *Am. J. Phys.* **54**, 500 (1986) را مطالعه کنید.

^{۲۶} می‌توانیم این روابط را به مثابه اصول موضوعه نظریه اسپین بگیریم؛ فرمول‌های مشابه برای تکانه زاویه‌ای مداری (رابطه ۹۹.۴) از اشکال شناخته شده عملگرها (رابطه ۹۶.۴) استخراج شدند. در روندی پیچیده‌تر می‌توان هر دوی آنها را از ناوردایی چرخشی در سه بعد هم بدست آورد (برای مثال، کتاب *Quantum Mechanics: A Modern Development* نوشته Leslie E. Ballentine از انتشارات World Scientific، سنگاپور (۱۹۸۸)، بخش ۳.۳ را

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z, [S_y, S_z] = i\hbar S_x, [S_z, S_x] = i\hbar S_y \quad [۱۳۴.۴]$$

می‌توان (مانند گذشته) چنین نتیجه گرفت که ویژه بردارهای S^2 و S_z در روابط زیر صدق می‌کنند^{۲۷}

$$S^2|sm\rangle = \hbar^2 s(s+1)|sm\rangle; S_z|sm\rangle = \hbar m|sm\rangle \quad [۱۳۵.۴]$$

9

$$S_{\pm}|sm\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1)-m(m\pm 1)}|s(m\pm 1)\rangle \quad [۱۳۶.۴]$$

که در آن $S_{\pm} = S_x \pm iS_y$. اما اینبار ویژه بردارها دیگر هماهنگ‌های کروی نیستند (آنها به هیچ وجه تابعی از θ و ϕ نمی‌باشند)، برای همین هیچ استدلال از علت به معلولی برای طرد مقادیر نیم صحیح s و m وجود ندارد:

$$s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots; m = -s, -s+1, \dots, s-1, s \quad [۱۳۷.۴]$$

اگر قرار بر این باشد که هر ذره بنیادین واجد مقدار مشخص و تغییر ناپذیری باشد که ما آنرا اسپین آن گونه ذره‌ای خاص می‌نامیم، پس: مزون‌های پی اسپین 0؛ الکترون‌ها اسپین 1/2؛ فوتون‌ها اسپین 1؛ ذرات دلتا اسپین 3/2؛ گراویتون‌ها اسپین 2 دارند و الی آخر. در مقابل، عدد کوانتومی تکانه زاویه‌ای مداری l (به فرض برای هر الکترون در اتم هیدروژن) می‌تواند هر مقدار

مطالعه کنید). قدر مسلم، این روابط جابجایی بنیادی به همه اشکال تکانه زاویه‌ای، چه اسپینی و چه مداری و تکانه زاویه‌ای ترکیبی یک سامانه مرکب که می‌تواند شامل هر دو تکانه اسپینی و مداری باشد، اعمال می‌شود.

^{۲۷} به خاطر آنکه ویژه حالت‌های اسپین تابع به شمار نمی‌روند، من از نماد «کت» برای نمایش آنها استفاده خواهم کرد. (می‌توانستم همین کار را در بخش ۳.۴ با نوشتن $|lm\rangle$ به جای Y_l^m انجام دهم، اما به آن مفهوم نمادگذاری تابع به نظر طبیعی‌تر می‌آید.) در ضمن، دیگر حروفم دارند تمام می‌شوند، برای همین از حرف m برای ویژه مقدار S_z استفاده می‌کنم، همان کاری که در مورد L_z انجام دادم (بعضی نویسندگان در این مرحله می‌نویسند m_l و m_s که آن هم کاملاً درست است).

(صحیحی) را که بخواهید داشته باشد، برای همین وقتی سامانه دچار اختلال می‌شود از یک مقدار به مقدار دیگر تغییر می‌کند. اما s برای هر ذره مفروض ثابت است، به همین خاطر نظریه اسپین نسبتاً ساده است.^{۲۸}

مساله ۲۵.۴ اگر الکترون کره جامد کلاسیکی با شعاع زیر می‌بود،

$$r_c = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 mc^2} \quad [۱۳۸.۴]$$

(که معروف است به شعاع کلاسیکی الکترون و با این فرض حاصل می‌شود که جرم الکترون از طریق رابطه $E = mc^2$ به انرژی ذخیره شده در میدان الکتریکی آن وابسته است) و تکانه زاویه‌ای هم $(1/2)\hbar$ در نظر گرفته می‌شد، در آنصورت یک نقطه روی «استوا» با چه سرعتی حرکت خواهد کرد؟ آیا این مدل معقول است؟ (در حقیقت، با داده‌های تجربی می‌دانیم که شعاع الکترون بسیار کمتر از r_c است، اما این فقط اوضاع را بدتر می‌کند).

۱.۴.۴ اسپین 1/2

تا اینجا مهم‌ترین حالت $s = 1/2$ است، چون این اسپین ذراتی است که سازنده ماده معمولی (پروتون‌ها، نوترون‌ها و الکترون‌ها) به علاوه کوارک‌ها و تمام انواع لپتون‌ها هستند. از این گذشته، با درک اسپین $1/2$ ، محاسبه صورت‌بندی ریاضی برای سامانه‌هایی با اسپین‌های بالاتر کار ساده‌ای خواهد بود. اینجا فقط دو حالت داریم: $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ که آنرا اسپین بالا (یا به طور غیر رسمی، \uparrow) نامیده و

^{۲۸} مسلم است که به مفهوم ریاضی، اسپین $1/2$ ساده‌ترین سامانه کوانتومی ممکن محسوب می‌شود زیرا تنها دو حالت پایه را مجاز می‌شمارد. به جای فضای هیلبرت نامتناهی، با در نظر گرفتن تمام ظرافت‌ها و پیچیدگی‌هایش، خود را در حال کار در یک فضای برداری دو بعدی می‌یابیم؛ به جای معادلات دیفرانسیل نا آشنا و توابع بسیار دشوار و گراف، با ماتریس‌های 2×2 و بردارهای 2 مولفه‌ای مواجهیم. به همین دلیل بعضی از نویسندگان مکانیک کوانتومی را با مطالعه اسپین آغاز می‌کنند. (نمونه برجسته‌ای در کتاب *A Modern Approach to Quantum Mechanics* نوشته John S. Townsend از انتشارات University Books، کالفرنیا، ۲۰۰۰ آمده است.) با این حال هزینه سادگی ریاضی انتزاع معنایی است، برای همین من ترجیح می‌دهم کار را به همان روش انجام دهم.

دیگری $\left|\frac{1}{2}\frac{-1}{2}\right\rangle$ که آنرا اسپین پائین (\downarrow) می‌نامیم. با استفاده از این بردارهای پایه، حالت عمومی ذره‌ای با اسپین $\frac{1}{2}$ را می‌توان با یک ماتریس ستونی دو مولفه‌ای (یا اسپینور) بیان کرد:

$$\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a\chi_+ + b\chi_- \quad [۱۳۹.۴]$$

با در نظر گرفتن

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad [۱۴۰.۴]$$

که نمایشگر اسپین بالا است و

$$\chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad [۱۴۱.۴]$$

که اسپین پائین را نشان می‌دهد.

در این بین، عملگرهای اسپین ماتریس‌هایی 2×2 هستند که می‌توانیم آنها را با توجه به تاثیرشان روی χ_+ و χ_- بدست آوریم. رابطه ۱۳۵.۴ حاکی از آن است که

$$S^2\chi_+ = \frac{3}{4}\hbar^2\chi_+ \quad \text{و} \quad S^2\chi_- = \frac{3}{4}\hbar^2\chi_- \quad [۱۴۲.۴]$$

اگر S^2 را به صورت ماتریسی با عناصر (هنوز) نامعلوم بنویسیم،

$$S^2 = \begin{pmatrix} c & d \\ e & f \end{pmatrix}$$

به این ترتیب از رابطه اول اینطور برمی‌آید که

$$\begin{pmatrix} c & d \\ e & f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{یا} \quad \begin{pmatrix} c \\ e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{4}\hbar^2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

از اینرو $c = (3/4)\hbar^2$ و $e = 0$ است. رابطه دوم می‌گوید

$$\begin{pmatrix} c & d \\ e & f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \text{یا} \quad \begin{pmatrix} d \\ f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{3}{4}\hbar^2 \end{pmatrix}$$

پس $d = 0$ و $f = (3/4)\hbar^2$ است. نتیجه گیری:

$$S^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad [۱۴۳.۴]$$

به طور مشابه،

$$S_z \chi_+ = \frac{\hbar}{2} \chi_+, S_z \chi_- = -\frac{\hbar}{2} \chi_- \quad [۱۴۴.۴]$$

که می توان از آن چنین نتیجه گرفت

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad [۱۴۵.۴]$$

در این بین، بنابر رابطه ۱۳۶.۴ داریم

$$S_+ \chi_- = \hbar \chi_+, S_- \chi_+ = -\hbar \chi_-, S_+ \chi_+ = S_- \chi_- = 0$$

پس

$$S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad [۱۴۶.۴]$$

خاطر نشان می شود که $S_{\pm} = S_x \pm iS_y$ است، بنابراین

$$S_x = \frac{1}{2}(S_+ + S_-), S_y = \frac{1}{2i}(S_+ - S_-)$$

و در نتیجه

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad [۱۴۷.۴]$$

از آنجا که S_x ، S_y و S_z همگی دارای یک عامل $\frac{\hbar}{2}$ می باشند، بسامان تر آن است که بنویسیم

$S = (\hbar/2)\sigma$ که در آن

$$\sigma_x \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad [۱۴۸.۴]$$

اینها به ماتریس‌های اسپین پائولی معروف هستند. توجه کنید که S_x ، S_y ، S_z و S^2 همگی هرمیتی هستند (چنانکه باید باشند، زیرا نمایشگر مشاهده‌پذیرها هستند). از سوی دیگر، S_+ و S_- هرمیتی نیستند - از قرار معلوم آنها مشاهده‌پذیر نیستند.

ویژه اسپینورهای S_z (طبعاً) عبارتند از

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \left(+\frac{\hbar}{2} \text{ مقدار} \right); \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \left(-\frac{\hbar}{2} \text{ مقدار} \right) \quad [۱۴۹.۴]$$

چنانچه S_z را روی ذره‌ای در حالت عمومی χ اندازه بگیرید (رابطه ۱۳۹.۴)، ممکن است مقدار $+\hbar/2$ را با احتمال $|a|^2$ و $-\hbar/2$ را با احتمال $|b|^2$ بدست آورید. از آنجا که اینها فقط احتمال هستند، پس

$$|a|^2 + |b|^2 = 1 \quad [۱۵۰.۴]$$

(یعنی، اسپینور باید بهنجار باشد).^{۲۹}

اما در عوض اگر بخواهید S_x را اندازه بگیرید چه؟ نتایج ممکن چه هستند و احتمال‌های مربوط به هر کدام چقدر است؟ بنابر تعبیر آماری، باید ویژه مقادیر و ویژه حالت‌های S_x را بدانیم. معادله مشخصه عبارت است از

$$\begin{vmatrix} -\lambda & \hbar/2 \\ \hbar/2 & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \Rightarrow \lambda = \pm \frac{\hbar}{2}$$

تعجبی ندارد، مقادیر ممکن S_x مشابه مقادیر مربوط به S_z هستند. ویژه اسپینورها به روش معمول بدست می‌آیند:

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \pm \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

پس $\beta = \pm \alpha$ است. اینطور که پیداست ویژه اسپینورهای (بهنجار شده) S_x برابرند با

^{۲۹} افراد اغلب می‌گویند $|a|^2$ «احتمال آن است که ذره در حالت اسپین بالا باشد» اما این بیان دقیقی نیست؛ منظور آنها این است که اگر S_x اندازه گرفته شود، $|a|^2$ احتمال آن است که مقدار $\hbar/2$ بدست آید. زیرنویس ۱۶ فصل ۳ را ملاحظه کنید.

$$\chi_+^{(x)} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right), \left(+\frac{\hbar}{2} \text{ مقدار} \right); \chi_-^{(x)} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right), \left(-\frac{\hbar}{2} \text{ مقدار} \right) \quad [151.4]$$

همانند ویژه بردارهای یک ماتریس هرمیتی، آنها هم فضا را می پوشانند؛ اسپینور عام χ (رابطه ۱۳۹.۴) را می توان به صورت ترکیبی خطی از آنها نوشت:

$$\chi = \left(\frac{a+b}{\sqrt{2}} \right) \chi_+^{(x)} + \left(\frac{a-b}{\sqrt{2}} \right) \chi_-^{(x)} \quad [152.4]$$

چنانچه S_x را اندازه بگیرید، احتمال بدست آمدن $\hbar/2$ برابر با $1/2|a+b|^2$ و احتمال بدست آمدن $-\hbar/2$ برابر با $1/2|a-b|^2$ است. (بهتر است خودتان اطمینان حاصل کنید که جمع این مقادیر برابر با 1 می شود).

مثال ۲.۴ فرض کنید ذره‌ای با اسپین 1/2 در حالت زیر قرار دارد

$$\chi = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1+i \\ 2 \end{pmatrix}$$

احتمال‌های بدست آمدن مقادیر $\hbar/2$ و $-\hbar/2$ از اندازه‌گیری S_z و S_x چقدر است؟

پاسخ: در این مساله $a = (1+i)/\sqrt{6}$ و $b = 2/\sqrt{6}$ است، پس برای S_z احتمال بدست آمدن $\hbar/2$ برابر با $1/3$ و $| (1+i)/\sqrt{6} |^2$ و احتمال بدست آمدن $-\hbar/2$ هم برابر است با $2/3$ و $| 2/\sqrt{6} |^2$. برای S_x احتمال بدست آمدن $\hbar/2$ برابر با $1/2$ و $| (3+i)/\sqrt{6} |^2$ و $5/6$ احتمال بدست آمدن $-\hbar/2$ برابر است با $1/6$ و $| (-1+i)/\sqrt{6} |^2$. در ضمن، مقدار چشمداشتی S_x برابر است با:

$$\frac{5}{6} \left(+\frac{\hbar}{2} \right) + \frac{1}{6} \left(-\frac{\hbar}{2} \right) = \frac{\hbar}{3}$$

که می‌شد آنرا سراسرتر هم بدست آورد:

$$\langle S_x \rangle = \chi^\dagger S_x \chi = \begin{pmatrix} \frac{(1-i)}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \hbar/2 \\ \hbar/2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (1+i)/\sqrt{6} \\ 2/\sqrt{6} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{3}$$

حال مایلم شما را همراه خود به گردشی در یک سناریوی اندازه‌گیری تخیلی بهرم که شامل اسپن $1/2$ می‌شود، چرا که برای به تصویر کشیدن برخی از ایده‌های انتزاعی که پیشتر در فصل ۱ پیرامون آنها بحث کردیم بسیار به درد می‌خورد. بیایید به فرض کار را با ذره‌ای شروع کنیم که در حالت χ_+ قرار دارد. اگر کسی بپرسد «مولفه \hat{S}_z تکانه زاویه‌ای اسپینی ذره چیست؟» بدون هیچ ابهامی به او چنین پاسخ می‌دهیم: $+\hbar/2$. اندازه‌گیری \hat{S}_z بی‌تردید آن مقدار را بدست می‌دهد. اما اگر پرسشگر ما در عوض سوال قبلی، حالا بپرسد «مولفه \hat{S}_x تکانه زاویه‌ای اسپینی این ذره چیست؟» چاره‌ای جز مبهم گویی نداریم: اگر S_x را اندازه بگیرد، احتمال‌های بدست آوردن $\hbar/2$ یا $-\hbar/2$ پنجاه - پنجاه است. اگر پرسشگر یک فیزیکدان کلاسیکی یا یک «واقع‌گرا» (به مفهوم بخش ۲.۱) باشد، این پاسخ را کافی - نه کلاً بی ربط - قلمداد نمی‌کند: «یعنی به من می‌گویید که حالت درست ذره را نمی‌دانید؟» کاملاً برعکس؛ من دقیقاً می‌دانم حالت ذره چیست: χ_+ . «خب، پس چگونه است که نمی‌توانی به من بگویی مولفه \hat{S}_x تکانه زاویه‌ای چیست؟» زیرا اسپین ذره به وضوح یک مولفه \hat{S}_x معلوم ندارد. قدر مسلم، نمی‌تواند هم داشته باشد، چرا که اگر هم S_x و هم S_z کاملاً معلوم باشند، اصل عدم قطعیت نقض می‌شود.

در این مرحله پرسشگر ما شیشه آزمایشی را برداشته و مولفه \hat{S}_x اسپین آنرا اندازه می‌گیرد؛ بیایید فرض کنیم مقدار $+\hbar/2$ را بدست می‌آورد. «آهان» (او فریادی از سر پیروزی برمی‌آورد)، «دروغ گفتید! مقدار S_x این ذره که کاملاً معلوم است: $\hbar/2$ ، خب، البته که هست - یعنی الان هست، اما این ثابت نمی‌کند که قبل از اندازه‌گیری هم مقدارش همین بوده. «مثل روز روشن است که مو را از ماست کشیده‌اید. خب حالا بگذاریم، اصل عدم قطعیت تان چه شد؟ من حالا هم S_x را می‌دانم و هم S_z را.» متأسفم، اما اینطور نیست: آن زمان که اندازه‌گیری می‌کردید، حالت ذره را دستکاری کردید؛ ذره حالا در حالت $\chi_+^{(x)}$ قرار دارد، و درحالی‌که مقدار S_x را می‌دانید، دیگر اطلاعی از مقدار S_z ندارید. «ولی من که خیلی مراقب بودم تا هنگام اندازه‌گیری S_x چیزی را بهم نریزم.» بسیار خوب، اگر باورتان نمی‌شود، خودتان بررسی کنید: S_z را اندازه گرفته و ببینید چه بدست

می‌آورید. (طبعاً، این احتمال وجود دارد که $\hbar/2 +$ را بدست آورده و باعث خجالت من شود - اما اگر کل این داستان را بارها و بارها تکرار کنیم، نیمی از مواقع هم مقدار $\hbar/2 -$ بدست می‌آید).

از دید یک آدم غیر متخصص، یک فیلسوف یا یک فیزیکدان کلاسیک گزاره‌ای به شکل «این ذره مکان معینی ندارد» (یا تکانه یا مولفه x تکانه زاویه‌ای اسپینی یا هر چیز دیگر) مبهم، ناکامل یا (بدتر از همه) بسیار پر محتوا به نظر می‌رسد. اما هیچیک از اینها نیست. به عقیده من معنی دقیق این گزاره تقریباً برای هر کس که مطالعات عمیقی در حوزه مکانیک کوانتومی نداشته واقعا غیر ممکن است. اگر گاه و بیگاه می‌بینید درک‌تان از این مقوله لنگ می‌زند، سری به مطالب مربوط به سامانه اسپین $1/2$ بزنید (اگر اینطور نیست، به احتمال زیاد اصلاً مساله را درک نکرده‌اید): این سامانه ساده‌ترین و بی‌آلایش‌ترین نمونه برای اندیشیدن درباره پارادوکس‌های مفهومی مکانیک کوانتومی است.

مساله ۲۶.۴

(الف) بررسی کنید آیا ماتریس‌های اسپین (روابط ۱۴۵.۴ و ۱۴۷.۴) از روابط جابجایی اصلی برای تکانه زاویه‌ای (رابطه ۱۳۴.۴) پیروی می‌کنند.

(ب) نشان دهید ماتریس‌های اسپین پائولی (رابطه ۱۴۸.۴) در رابطه مربوط به قاعده ضرب صدق می‌کنند

$$\sigma_j \sigma_k = \delta_{jk} + i \sum_l \epsilon_{jkl} \sigma_l \quad [153.4]$$

که در آن اندیس‌ها نشانه x ، y و z و ϵ_{jkl} هم نماد لوی - چریتا است: $+1$ اگر 312 یا $123, 231, 321$ ؛ -1 اگر $132, 213$ یا 321 ؛ و 0 در غیر اینصورت.

مساله ۲۷.۴ * الکترونی در حالت اسپینی زیر قرار دارد

$$\chi = A \begin{pmatrix} 3i \\ 4 \end{pmatrix}$$

(الف) ثابت بهنجارش A را تعیین کنید.

(ب) مقادیر چشمداشتی S_x ، S_y و S_z را بدست آورید.

(پ) «عدم قطعیت‌های» σ_x ، σ_y و σ_z را بدست آورید. (توجه: این سیگماها انحراف معیارهای استاندارد محسوب می‌شوند، نه ماتریس‌های پائولی!)
 (ت) تایید کنید که نتایج شما با هر سه اصل عدم قطعیت سازگارند (رابطه ۱۰۰.۴ و جایگشت‌های گردشی آن - البته تنها با S به جای L).

مساله ۲۸.۴* برای عمومی‌ترین اسپینور بهنجار شده χ (رابطه ۱۳۹.۴) این مقادیر را محاسبه کنید: $\langle S_x \rangle$ ، $\langle S_y \rangle$ ، $\langle S_z \rangle$ ، $\langle S_x^2 \rangle$ ، $\langle S_y^2 \rangle$. رابطه زیر را بررسی کنید:

$$\langle S_x^2 \rangle + \langle S_y^2 \rangle + \langle S_z^2 \rangle = \langle S^2 \rangle$$

مساله ۲۹.۴*

(الف) ویژه مقدارها و ویژه اسپینورهای S_y را بدست آورید.

(ب) اگر S_y را روی ذره‌ای در حالت عمومی χ (رابطه ۱۳۹.۴) اندازه گرفته بودید، احتمالاً چه مقادیری بدست می‌آوردید و احتمال هر کدام چقدر می‌بود؟ بررسی کنید آیا جمع احتمال‌ها روی هم ۱ می‌شود. توجه: لازم نیست a و b حقیقی باشند!

(پ) اگر S_y^2 را اندازه گرفته بودید، احتمالاً چه مقادیری با چه احتمال‌هایی بدست می‌آوردید؟

مساله ۳۰.۴** ماتریس S_r که نمایشگر مولفه تکانه زاویه‌ای اسپینی در امتداد جهت دلخواه

\hat{r} می‌باشد را درست کنید. از مختصات کروی استفاده کنید که در آن

$$\hat{r} = \sin \theta \cos \phi \hat{i} + \sin \theta \sin \phi \hat{j} + \cos \theta \hat{k} \quad [154.4]$$

ویژه مقادیر و ویژه اسپینورهای (بهنجار شده) S_r را بدست آورید. پاسخ:

$$\chi_+^{(r)} = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ e^{i\phi} \sin(\theta/2) \end{pmatrix} ; \quad \chi_-^{(r)} = \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \sin(\theta/2) \\ -\cos(\theta/2) \end{pmatrix} \quad [155.4]$$

توجه: همیشه برای ضرب در یک عامل فاز دلخواه - مثلاً، $e^{i\phi}$ - مختارید، از اینرو جوابتان ممکن است دقیقاً شبیه جواب من نباشد.

مسئله ۳۱.۴ ماتریس‌های اسپین (S_x ، S_y و S_z) را برای ذره‌ای با اسپین 1 درست کنید. راهنمایی: S_z چند ویژه حالت دارد؟ عمل S_z ، S_+ و S_- روی هر یک از آن حالت‌ها را تعیین کنید. رهیافت به کار رفته در متن برای اسپین 1/2 را دنبال کنید.

۲.۴.۴ الکترون در میدان مغناطیسی

ذره بارداری با حرکت اسپینی یک دوقطبی مغناطیسی بوجود می‌آورد. گشتاور دوقطبی مغناطیسی آن، μ ، متناسب است با تکانه زاویه‌ای اسپینی آن، S :

$$\mu = \gamma S \quad [156.4]$$

ثابت تناسب، γ ، را نسبت ژیرومغناطیسی می‌نامند.^{۳۰} وقتی یک دوقطبی مغناطیسی در میدان مغناطیسی B قرار داده می‌شود، در معرض گشتاور $\mu \times B$ قرار می‌گیرد که می‌خواهد آنرا موازی با میدان به خط کند (درست مانند عقربه قطب‌نما). انرژی وابسته به این گشتاور عبارت است از^{۳۱}

$$H = -\mu \cdot B \quad [157.4]$$

از اینرو هامیلتونی ذره باردار با حرکت اسپینی، در حال سکون در میدان مغناطیسی B ، برابر است با

$$H = -\gamma B \cdot S \quad [158.4]$$

مثال ۳.۴ حرکت تقدیمی لارمور: ذره‌ای با اسپین 1/2 و در حال سکون^{۳۲} در یک میدان مغناطیسی یکنواخت را تصور کنید که در جهت z قرار دارد:

^{۳۰} برای مثال، کتاب *Introduction to Electrodynamics* اثر David J. Griffiths (انتشارات Prentice Hall، نیوجرسی، ۱۹۹۹) صفحه ۲۵۲ را ملاحظه کنید. به بیان کلاسیکی، نسبت ژیرومغناطیسی جسمی که در آن بار و جرم به طور یکنواخت توزیع شده برابر است با $q/2m$ که در آن q بار و m جرم آن ذره است. به دلایلی که فقط در نظریه کوانتوم نسبیتی به طور کامل توضیح داده می‌شوند، نسبت ژیرومغناطیسی الکترون به طور (تقریباً) دقیق دو برابر مقدار کلاسیکی آن است: $\gamma = -e/m$.

^{۳۱} زیر نویس ۳۰، صفحه ۲۸۱

$$\mathbf{B} = B_0 \hat{k} \quad [۱۵۹.۴]$$

هامیلتونی (رابطه ۱۵۸.۴)، در شکل ماتریسی، عبارت است از

$$\mathbf{H} = -\gamma B_0 \mathbf{S}_z = -\frac{\gamma B_0 \hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad [۱۶۰.۴]$$

ویژه حالت‌های \mathbf{H} همان ویژه حالت‌های \mathbf{S}_z هستند:

$$\begin{cases} \chi_+, E_+ = -\frac{(\gamma B_0 \hbar)}{2} & \text{با انرژی} \\ \chi_-, E_- = +\frac{(\gamma B_0 \hbar)}{2} & \text{با انرژی} \end{cases} \quad [۱۶۱.۴]$$

از قرار معلوم انرژی زمانی کمترین مقدار خود را دارد که دوقطبی مغناطیسی موازی با میدان باشد - درست مانند حالت کلاسیکی.

از آنجا که هامیلتونی مستقل از زمان است، جواب عمومی معادله شرودینگر وابسته به زمان،

$$i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = \mathbf{H} \chi \quad [۱۶۲.۴]$$

را می‌توان برحسب حالت‌های مانا بیان کرد:

$$\chi(t) = a\chi_+ e^{-iE_+ t/\hbar} + b\chi_- e^{-iE_- t/\hbar} = \begin{pmatrix} a e^{i\gamma B_0 t/2} \\ b e^{-i\gamma B_0 t/2} \end{pmatrix}$$

ثابت‌های a و b از روی شرایط اولیه تعیین می‌شوند:

$$\chi(0) = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

^{۳۳} اگر ذره مجاز به حرکت کردن باشد، انرژی جنبشی را هم باید منظور کرد؛ به علاوه، ذره در معرض نیروی لورنتس ($q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$) نیز قرار می‌گیرد که از تابع انرژی پتانسیل برنمی‌آید و در نتیجه با آن معادله شرودینگری که تاکنون صورت‌بندی کرده‌ایم همخوانی ندارد. در ادامه نشان‌تان می‌دهم که چگونه به این مورد پردازید (مساله ۵۹.۴)، اما فعلاً بیا باید فقط فرض را بر این بگذاریم که ذره قرار است در یک پتانسیل مرکزی قرار گیرد. این صورت مانا است.

(طبعاً، $|a|^2 + |b|^2 = 1$ است). بدون از دست دادن هیچ بخشی از عمومیت مساله^{۳۳} می‌نویسم
 $a = \cos(\alpha/2)$ و $b = \sin(\alpha/2)$ که در آنها α زاویه ثابتی است که اهمیت فیزیکی آن کمی
 بعد روشن می‌شود. بدین ترتیب

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2) e^{i\gamma B_0 t/2} \\ \sin(\alpha/2) e^{-i\gamma B_0 t/2} \end{pmatrix} \quad [۱۶۳.۴]$$

برای آنکه درکی از آنچه اینجا در حال وقوع است بدست آوریم، بیایید مقدار چشمداشتی S را
 به صورت تابعی از زمان محاسبه کنیم:

$$\begin{aligned} = \chi(t)^\dagger S_x \chi(t) &= (\cos(\alpha/2) e^{-i\gamma B_0 t/2} \quad \sin(\alpha/2) e^{i\gamma B_0 t/2}) \quad [۱۶۴.۴] \\ &\times \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2) e^{i\gamma B_0 t/2} \\ \sin(\alpha/2) e^{-i\gamma B_0 t/2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2} \sin \alpha \cos(\gamma B_0 t) \end{aligned}$$

به همین شکل،

$$\langle S_y \rangle = \chi(t)^\dagger S_y \chi(t) = \frac{\hbar}{2} \sin \alpha \cos(\gamma B_0 t) \quad [۱۶۵.۴]$$

و

$$\langle S_z \rangle = \chi(t)^\dagger S_z \chi(t) = \frac{\hbar}{2} \cos \alpha \quad [۱۶۶.۴]$$

اینطور که پیداست $\langle S \rangle$ در یک زاویه ثابت α نسبت به z دارای انحنای است و پیرامون میدان با
 بسامد لارمور حرکت تقدیمی انجام می‌دهد

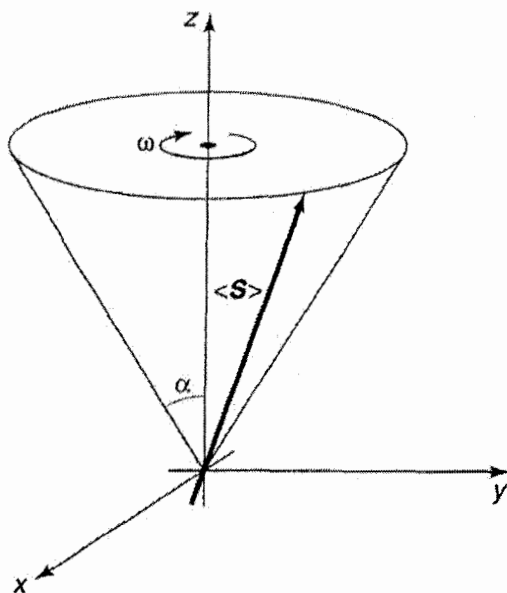
$$\omega = \gamma B_0 \quad [۱۶۷.۴]$$

^{۳۳} به این ترتیب پیش فرض مان این می‌شود که a و b حقیقی هستند؛ می‌توانید در صورت تمایل خودتان حالت کلی
 را محاسبه کنید، اما همه کاری که در محاسبات مربوط به حالت کلی صورت می‌گیرد این است که یک ثابت به t
 اضافه می‌شود.

مانند حالت کلاسیکی^{۳۴} (شکل ۱۰.۴ را ببینید). جای هیچ تعجبی نیست - قضیه اهرنفس (به شکلی که در مساله ۲۰.۴ استخراج شد) تضمین می‌کند که $\langle S \rangle$ براساس قوانین کلاسیکی تحول می‌یابد. اما بهتر است ببینیم این استدلال درباره یک موضوع خاص چگونه عمل می‌کند.

مثال ۴.۴ آزمایش اشترن - گزلاخ: در یک میدان مغناطیسی غیر یکنواخت، تنها یک گشتاور وجود دارد، اما یک نیرو هم هست که روی دوقطبی مغناطیسی اعمال می‌شود:^{۳۵}

$$\mathbf{F} = \nabla(\boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B}) \quad [168.4]$$



شکل ۱۰.۴: حرکت تقدیمی $\langle S \rangle$ در یک میدان مغناطیسی یکنواخت

^{۳۴} برای نمونه، کتاب *The Feynman Lectures on Physics* (انتشارات Addison-Wesley، Reading، ۱۹۶۴) جلد دوم بخش ۳.۳۴ را ملاحظه کنید. البته، در حالت کلاسیکی این خود بردار تکانه زاویه‌ای است، نه فقط مقدار چشمداشتی آن، که پیرامون میدان مغناطیسی حرکت تقدیمی انجام می‌دهد.

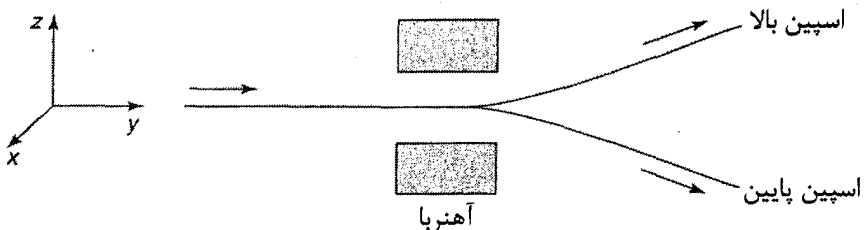
^{۳۵} زیرنویس ۳۰، دقت کنید \mathbf{F} گرادیان میدان است.

می‌توان از این نیرو برای جدا کردن ذرات با جهت‌های اسپینی مختلف، همانطور که در ادامه تشریح شده، استفاده کرد. باریکه‌ای از اتم‌های خنثی با هسته‌های نسبتاً سنگین^{۳۶} را تصور کنید که در حال حرکت در جهت z بوده و از منطقه‌ای با یک میدان مغناطیسی غیر یکنواخت مانند میدان زیر عبور می‌کند (شکل ۱۱.۴ را ملاحظه کنید)

$$\mathbf{B}(x, y, z) = -\alpha x \hat{i} + (B_0 + \alpha z) \hat{k} \quad [169.4]$$

که در آن B_0 یک میدان قوی یکنواخت بوده و ثابت α هم توصیف‌کننده انحراف کوچکی از یکنواختی است. (در حقیقت، تنها بدنبال مولفه z هستیم، اما متأسفانه غیر ممکن است - به این ترتیب قانون الکترومغناطیسی $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ نقض می‌شود؛ چه خوشمان بیاید چه نه، سروکله یک مولفه x هم برای سواری پیدا می‌شود که دست از سرمان بر نمی‌دارد.) نیروی اعمال شده روی این اتم‌ها عبارت است از $\mathbf{F} = \gamma \alpha (-S_x \hat{i} + S_z \hat{k})$ اما چون حرکت تقدیمی لارمور پیرامون B_0 است، S_x به سرعت نوسان می‌کند، برای همین میانگینش صفر است؛ نیروی خالص در جهت z برابر است با

$$F_z = \gamma \alpha S_z \quad [170.4]$$



شکل ۱۱.۴: دستگاه اشترن - گراخ

^{۳۶} آنها را خنثی می‌کنیم تا از انحراف بزرگ مقیاسی که نتیجه اجتناب ناپذیر نیروی لورنتس خواهد بود پرهیز کنیم، همچنین سنگینی هم از آن روست که بتوانیم بسته‌های موج جایگزیده داشته و حرکت را برحسب پرتابه‌های ذره‌ای کلاسیکی مورد بررسی قرار دهیم. در عمل، آزمایش اشترن - گراخ برای مثال در مورد باریکه‌ای از الکترون‌های آزاد به کار نمی‌آید.

و باریکه متناسب با مولفه z تکانه زاویه‌ای اسپینی رو به بالا و پائین منحرف می‌شود. به بیان کلاسیکی انتظار یک لکه را داریم (زیرا S_z کوانتیزه نخواهد بود)، اما در واقع باریکه به $2s + 1$ رشته تفکیک می‌شود که به زیبایی کوانتش تکانه زاویه‌ای را نشان می‌دهد. (چنانچه، برای مثال، از اتم‌های نقره استفاده کنید، تمام الکترون‌های درونی به گونه‌ای جفت می‌شوند که تکانه‌های اسپینی و مداری شان یکدیگر را حذف می‌کنند. اسپین باقی مانده خالص به سادگی مربوط است به بیرونی‌ترین الکترون (جفت نشده)، پس در اینحالت $s = 1/2$ است، برای همین باریکه به دو رشته شکافته می‌شود).

باید توجه داشت که استدلال ارائه شده تا مرحله آخر کاملاً کلاسیکی بود؛ نیرو جایی در محاسبه کوانتومی صحیح ندارد، بنابراین ممکن است ترجیح دهید رهیافت زیر را در پیش بگیرید.^{۳۷} ما این فرایند را از دورنمای چارچوب مرجعی مورد آزمون قرار می‌دهیم که در امتداد باریکه حرکت می‌کند. در این چارچوب هامیلتونی ابتدا صفر است، در مدت زمان T (همچنانکه ذره از میان آهنربا عبور می‌کند) برقرار شده و سپس دوباره خاموش می‌شود:

$$H(t) = \begin{cases} 0, & t < 0 \\ -\gamma(B_0 + \alpha z)S_z, & 0 \leq t \leq T \\ 0, & t > T \end{cases} \quad [۱۷۱.۴]$$

(از مولفه x مزاحم میدان B چشم پوشی می‌کنم که - به دلایلی که در بالا ذکر شد - ربطی به مساله ندارد). فرض کنید اتم اسپین $1/2$ دارد و ابتدا در حالت زیر است

$$\chi(t) = a\chi_+ + b\chi_-, \quad t \leq 0$$

درحالیکه هامیلتونی عمل می‌کند، $\chi(t)$ مثل همیشه متحول می‌شود

$$\chi(t) = a\chi_+ e^{-iE_+ t/\hbar} + b\chi_- e^{-iE_- t/\hbar}, \quad 0 \leq t \leq T$$

که در آن (از رابطه ۱۵۸.۴)

$$E_{\pm} = \mp \gamma(B_0 + \alpha z) \frac{\hbar}{2} \quad [۱۷۲.۴]$$

و در نتیجه ذره در حالت زیر قرار می گیرد

$$\chi(t) = (ae^{i\gamma TB_0/\hbar}\chi_+)e^{i(\alpha\gamma T/2)z} + (be^{-i\gamma TB_0/\hbar}\chi_-)e^{-i(\alpha\gamma T/2)z} \quad [173.4]$$

(در بازه $t \geq T$). خاطر نشان می شود که این دو جمله حامل تکانه زاویه ای در جهت z هستند

(رابطه ۳۲.۳ را ملاحظه کنید)؛ مولفه اسپین بالا واجد تکانه زیر است

$$p_z = \frac{\alpha\gamma T\hbar}{2} \quad [174.4]$$

برای همین در جهت مثبت z حرکت می کند؛ مولفه اسپین پائین تکانه مخالف دارد، برای همین در جهت منفی z حرکت می کند. (توجه داشته باشید که رابطه ۱۷۴.۴ با نتیجه پیشین (رابطه

۱۷۰.۴) در حالت $S_z = \hbar/2$ و $p_z = F_z T$ سازگار است).

آزمایش اشترن - گِرلاخ نقش مهمی در فلسفه مکانیک کوانتومی ایفا کرده تا جاییکه هم پیش نمونه ای برای تدارک یک حالت کوانتومی مناسب بوده و هم مدلی روشنگر برای نوع مشخصی از اندازه گیری کوانتومی محسوب می شود. گاه و بیگاه دوست داریم فرض را بر این بگذاریم که حالت ابتدایی یک سامانه معلوم است (معادله شرودینگر بیانگر آن است که پس از آن سامانه چگونه تحول می یابد) - اما بدیهی است از خودمان بپرسیم یک سامانه چگونه در ابتدا حالت به خصوصی کسب می کند. عرض شود که اگر بخواهید باریکه ای از اتم ها را در یک پیکربندی اسپینی مشخص تدارک ببینید، باید باریکه غیر قطبیده ای را از میان آهنربای اشترن - گِرلاخ عبور داده و رشته خروجی را که می خواهید انتخاب کنید (بقیه خروجی ها را با سپرها و دریچه های مناسب ببوشانید). در مقابل، اگر می خواهید مولفه z اسپین یک اتم را اندازه بگیرید، باید آنرا به میان دستگاه اشترن - گِرلاخ فرستاده و ثبت کنید که در کدام فرود می آید. ادعا نمی کنم که همیشه این عملی ترین راه ممکن برای انجام اینکار است، اما از نظر مفهومی روش بسیار درست و بی آلاچی است و به همین دلیل هم موردی کاربردی است که در آن مسائل مربوط به آماده سازی و اندازه گیری حالت مورد کاوش قرار می گیرد.

مساله ۳۲.۴ در مثال ۳.۴:

(الف) اگر مولفه تکانه زاویه‌ای اسپینی در جهت x را در زمان t اندازه بگیرید، احتمال بدست آوردن مقدار $\hbar/2 + \hbar/2$ چقدر است؟

(ب) قسمت (الف) را برای مولفه y پاسخ دهید.

(پ) قسمت (الف) را برای مولفه z پاسخ دهید.

مساله ۳۳.۴** الکترونی در حال سکون در یک میدان مغناطیسی نوسانی به شکل زیر قرار دارد

$$\mathbf{B} = B_0 \cos(\omega t) \hat{k}$$

که در آن B_0 و ω ثابت‌های عددی هستند.

(الف) ماتریس هامیلتونی این سامانه را تشکیل دهید.

(ب) الکترون (در لحظه $t = 0$) در حالت اسپین بالا نسبت به محور x قرار دارد (به عبارت

دیگر: $\chi(0) = \chi_+^{(x)}$ است). $\chi(t)$ را در یک زمان دیگر پس از آغاز تعیین کنید. مراقب باشید:

این یک هامیلتونی وابسته به زمان است، از اینرو نمی‌توانید $\chi(t)$ را به روش مرسوم از روی

حالت‌های مانا بدست آورید. خوشبختانه، در اینحالت می‌توانید معادله شرودینگر وابسته به

زمان (رابطه ۱۶۲.۴) را به طور مستقیم حل کنید.

(پ) احتمال بدست آوردن $\hbar/2 - \hbar/2$ در صورت اندازه‌گیری S_x را بدست آورید. پاسخ:

$$\sin^2 \left(\frac{\gamma B_0}{2\omega} \sin(\omega t) \right)$$

(ت) کمترین مقدار میدان (B_0) مورد نیاز برای آنکه نیرو یک رفت و برگشت را در S_x کامل

کند چقدر است؟

۳.۴.۴ جمع تکانه‌های زاویه‌ای

حال فرض کنید دو ذره با اسپین $1/2$ در اختیار داریم - مثلاً، الکترون و پروتون در حالت پایه^{۳۸} هیدروژن. هر ذره می‌تواند در حالت اسپین بالا یا پائین باشد، پس در کل چهار امکان وجود دارد:^{۳۹}

$$\uparrow\uparrow, \uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow, \downarrow\downarrow \quad [۱۷۵.۴]$$

که در آن ردیف اول به الکترون و ردیف دوم به پروتون اشاره دارد. سوال: تکانه زاویه‌ای کل این اتم چیست؟ بگذارید

$$\mathbf{S} \equiv \mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)} \quad [۱۷۶.۴]$$

هر یک از این چهار حالت مرکب یک ویژه حالت S_z است - مولفه‌های \hat{S}_z به سادگی با هم جمع می‌شوند:

$$\begin{aligned} S_z \chi_1 \chi_2 &= (S_z^{(1)} + S_z^{(2)}) \chi_1 \chi_2 = (S_z^{(1)} \chi_1) \chi_2 + \chi_1 (S_z^{(2)} \chi_2) \\ &= (\hbar m_1 \chi_1) \chi_2 + \chi_1 (\hbar m_2 \chi_2) = \hbar(m_1 + m_2) \chi_1 \chi_2 \end{aligned}$$

(دقت کنید $S^{(1)}$ فقط روی χ_1 و $S^{(2)}$ فقط روی χ_2 عمل می‌کند؛ شاید این نمادگذاری خیلی عالی نباشد، اما از پس کار ما بر می‌آید.) پس M (عدد کوانتومی سامانه مرکب) درست برابر است با $m_1 + m_2$:

$$\uparrow\uparrow: m = 1$$

$$\uparrow\downarrow: m = 0$$

$$\downarrow\uparrow: m = 0$$

$$\downarrow\downarrow: m = -1$$

^{۳۸} آنها را در حالت پایه می‌گذاریم تا دیگر هیچ تکانه زاویه‌ای مداری نباشد که بخواهیم نگرانش نباشیم.

^{۳۹} به بیان دقیقتر، هر ذره در ترکیبی خطی از اسپین بالا و اسپین پائین است، برای همین سامانه مرکب در ترکیبی خطی از چهار حالت فهرست شده قرار دارد.

در نگاه نخست، به نظر درست نمی‌آید: M قرار است در گام‌های صحیح جابجا شود، از $-s$ تا $+s$ ، پس به نظر می‌رسد $s = 1$ است. اما حالت «اضافه‌ای» با $m = 0$ هم وجود دارد. یک راه برای خلاصی از مشکل اعمال عملگر کاهنده، $S_- = S_-^{(1)} + S_-^{(2)}$ ، به حالت $\uparrow\uparrow$ با استفاده از رابطه ۱۴۶.۴ است:

$$\begin{aligned} S_-(\uparrow\uparrow) &= (S_-^{(1)} \uparrow) \uparrow + \uparrow (S_-^{(2)} \uparrow) \\ &= (\hbar \downarrow) \uparrow + \uparrow (\hbar \downarrow) = \hbar(\downarrow\uparrow + \uparrow\downarrow) \end{aligned}$$

از قرار معلوم سه حالتی که در آنها $s = 1$ است (با نمادگذاری $|sm\rangle$) عبارتند از:

$$\left\{ \begin{array}{l} |11\rangle = \uparrow\uparrow \\ |10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow) \\ |1-1\rangle = \downarrow\downarrow \end{array} \right\} s = 1 \quad (\text{سه تایه}) \quad [177.4]$$

(در مقام بررسی، سعی کنید عملگر کاهنده را به حالت $|10\rangle$ اعمال کنید؛ باید چه نتیجه‌ای بدست آورید؟ مساله ۳۴.۴ (الف) را ملاحظه کنید.) این را ترکیب سه تایی (سه تایه) می‌نامند، که دلیل آن کاملاً روشن است. در این بین، حالت متعامد با $m = 0$ می‌گوید $s = 0$ است:

$$\left\{ |00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow) \right\} s = 0 \quad (\text{تک تایه}) \quad [178.4]$$

(اگر عملگر افزایشنده یا کاهنده را به این حالت اعمال کنید، نتیجه صفر خواهد بود. مساله ۳۴.۴ (ب) را ملاحظه کنید.)

به این ترتیب، من مدعی‌ام ترکیب دو ذره با اسپین $1/2$ می‌تواند حامل اسپین کل ۱ یا ۰ باشد، بسته به اینکه آیا پیکربندی سه تایی یا تک تایی را. برای اثبات این مدعی،

باید ثابت کنیم حالت‌های سه تایی ویژه بردارهای S^2 با ویژه مقدار $2\hbar^2$ هستند و حالت تک‌تایی هم ویژه بردار S^2 با ویژه مقدار 0 است. پس حالا،

$$S^2 = (S^{(1)} + S^{(2)}) \cdot (S^{(1)} + S^{(2)}) = (S^{(1)})^2 + (S^{(2)})^2 + 2S^{(1)} \cdot S^{(2)} \quad [۱۷۹.۴]$$

با استفاده از روابط ۱۴۵.۴ و ۱۴۷.۴ داریم

$$\begin{aligned} S^{(1)} \cdot S^{(2)}(\uparrow\downarrow) &= (S_x^{(1)}\uparrow)(S_x^{(2)}\downarrow) + (S_y^{(1)}\uparrow)(S_y^{(2)}\downarrow) + (S_z^{(1)}\uparrow)(S_z^{(2)}\downarrow) \\ &= \left(\frac{\hbar}{2}\downarrow\right)\left(\frac{\hbar}{2}\uparrow\right) + \left(\frac{i\hbar}{2}\downarrow\right)\left(\frac{-i\hbar}{2}\uparrow\right) + \left(\frac{\hbar}{2}\uparrow\right)\left(\frac{-\hbar}{2}\downarrow\right) \\ &= \frac{\hbar^2}{4}(2\downarrow\uparrow - \uparrow\downarrow) \end{aligned}$$

به همین ترتیب،

$$S^{(1)} \cdot S^{(2)}(\downarrow\uparrow) = \frac{\hbar^2}{4}(2\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow)$$

می‌توان اینطور نتیجه گرفت که

$$S^{(1)} \cdot S^{(2)}|10\rangle = \frac{\hbar^2}{4} \frac{1}{\sqrt{2}}(2\downarrow\uparrow - \uparrow\downarrow + 2\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow) = \frac{\hbar^2}{4}|10\rangle \quad [۱۸۰.۹]$$

و

$$S^{(1)} \cdot S^{(2)}|00\rangle = \frac{\hbar^2}{4} \frac{1}{\sqrt{2}}(2\downarrow\uparrow - \uparrow\downarrow + 2\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow) = -\frac{3\hbar^2}{4}|10\rangle \quad [۱۸۱.۴]$$

اگر به رابطه ۱۷۹.۴ بازگشته و از رابطه ۱۴۲.۴ هم استفاده کنیم، به این نتیجه می‌رسیم که

$$S^2|10\rangle = \left(\frac{3\hbar^2}{4} + \frac{3\hbar^2}{4} + 2\frac{\hbar^2}{4}\right)|10\rangle = 2\hbar^2|10\rangle \quad [۱۸۲.۴]$$

پس $|10\rangle$ هم در عمل ویژه حالتی برای S^2 با ویژه مقدار $2\hbar^2$ است؛ همچنین

$$S^2|00\rangle = \left(\frac{3\hbar^2}{4} + \frac{3\hbar^2}{4} + 2\frac{\hbar^2}{4}\right)|00\rangle = 0 \quad [۱۸۳.۴]$$

به این ترتیب $|00\rangle$ هم یک ویژه تابع S^2 با ویژه مقدار 0 است. (اثبات درستی این مطلب که $|11\rangle$ و $|1-1\rangle$ ویژه توابع S^2 با ویژه مقادیر مناسب هستند را به خودتان واگذار می‌کنم - مساله ۳۴.۴ (پ) را ملاحظه کنید).

آنچه انجام دادیم (یعنی ترکیب یک اسپین $1/2$ با یک اسپین $1/2$ دیگر برای بدست آوردن اسپین 1 و اسپین 0) ساده‌ترین نمونه از یک مساله بزرگتر است: اگر اسپین s_1 را با اسپین s_2 ترکیب کنید، اسپین‌های کل s که می‌توان بدست آورد چیست؟^{۴۰} پاسخ^{۴۱} این است که تمام اسپین‌ها از $(s_1 + s_2)$ تا $(s_1 - s_2)$ - یا تا $(s_2 - s_1)$ اگر $s_2 > s_1$ باشد - را در گام‌های صحیح بدست می‌آورید:

$$s = (s_1 + s_2), (s_1 + s_2 - 1), (s_1 + s_2 - 2), \dots, |s_1 - s_2| \quad [184.4]$$

(به بیان کلی، بالاترین اسپین کل زمانی بوجود می‌آید که اسپین‌های منفرد با یکدیگر موازی باشند، پس پایین‌ترین اسپین هم زمانی رخ می‌دهد که منفردها پاد موازی یکدیگر باشند). مثلاً، اگر ذره‌ای با اسپین $3/2$ را با ذره‌ای با اسپین 2 همراه کنید، بسته به پیکربندی موجود می‌توانید اسپین کل $7/2, 5/2, 3/2$ یا $1/2$ را بدست آورید. یک مثال دیگر: اگر یک اتم هیدروژن در حالت ψ_{nlm} باشد، تکانه زاویه‌ای نهایی (اسپینی به اضافه مداری) برابر است با $l + 1/2$ یا $l - 1/2$ ؛ اگر اسپین پروتون را اضافه کنید، عدد کوانتومی تکانه زاویه‌ای کل اتم عبارت است از $l + 1, l$ یا $l - 1$ (در ضمن l را می‌توان به دو روش مجزا بدست آورد، بسته به اینکه آیا الکترون به تنهایی در پیکربندی $l + 1/2$ قرار دارد یا $l - 1/2$).

^{۴۰} برای سادگی می‌گویم اسپین‌های، اما هریک از آنها (یا هر دو شان) می‌تواند دقیقاً تکانه زاویه‌ای مداری هم باشد (که به هر حال برای آن از حرف l استفاده می‌کنیم).

^{۴۱} برای مطالعه یک اثبات باید به متن پیشرفته‌تری مراجعه کنید؛ برای نمونه، کتاب *Quantum Mechanics* نوشته Claude Cohen Tannoudji (۱۹۷۴) ، جلد ۲، فصل ۱۰ را ملاحظه کنید.

حالت ترکیبی $|sm\rangle$ با اسپین کل s و مولفه z تکانه زاویه‌ای m ترکیبی خطی از حالت‌های مرکب $|s_1 m_1\rangle |s_2 m_2\rangle$ است:

$$|sm\rangle = \sum_{m_1+m_2=m} C_{m_1 m_2 m}^{s_1 s_2 s} |s_1 m_1\rangle |s_2 m_2\rangle \quad [۱۸۵.۴]$$

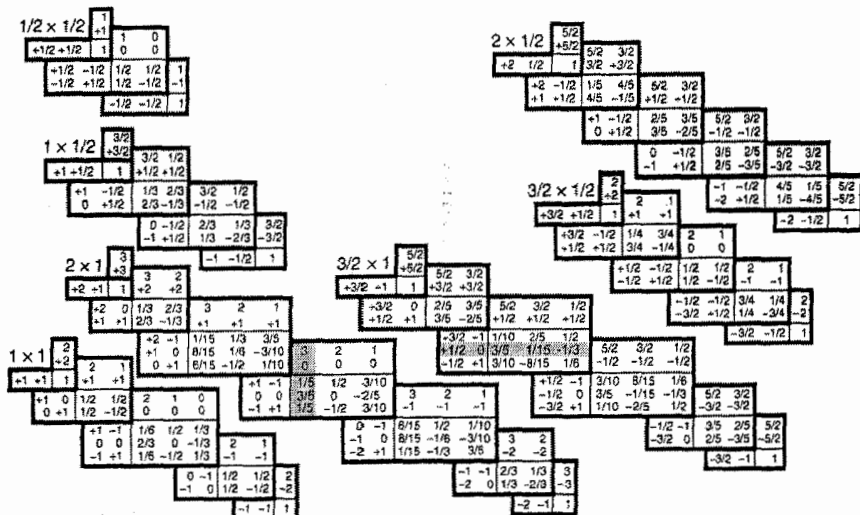
(چون مولفه‌های z با هم جمع می‌شوند، تنها حالت‌های مرکبی که سهم دارند آنهایی هستند که برایشان $m_1 + m_2 = m$ باشد). روابط ۱۷۷.۴ و ۱۷۸.۴ حالت‌های خاص این شکل عمومی هستند که در آن $s_1 = s_2 = 1/2$ است (از نمادگذاری غیر رسمی $\uparrow = |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle$ و $\downarrow = |\frac{1}{2} (-\frac{1}{2})\rangle$ استفاده کردم). ثابت‌های $C_{m_1 m_2 m}^{s_1 s_2 s}$ را ضرایب کلبش-گوردون می‌نامند. تعدادی از ساده‌ترین حالت‌ها در جدول ۸.۴ فهرست شده‌اند.^{۴۲} مثلاً، ستون حاشور خورده جدول 2×1 بیانگر آن است که

$$|30\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} |21\rangle |1-1\rangle + \sqrt{\frac{3}{5}} |20\rangle |10\rangle + \frac{1}{\sqrt{5}} |2-1\rangle |11\rangle$$

به ویژه، اگر دو ذره (با اسپین‌های ۲ و ۱) بی حرکت در جعبه‌ای قرار داشته باشند و اسپین کل ۳ و مولفه z تکانه زاویه‌ای ۰ باشد، آنگاه اندازه‌گیری $s_z^{(1)}$ ممکن است مقدار \hbar (با احتمال $1/5$) یا مقدار $-\hbar$ (با احتمال $1/5$) را باز گردانند. توجه داشته باشید که جمع احتمال‌ها یک است (جمع مربعات هر ستون روی جدول کلبش-گوردون برابر است با ۱).

^{۴۲} فرمول عمومی در کتاب *Quantum Mechanics: Foundations and Applications* نوشته Arno Bohm

ویرایش دوم (انتشارات Springer، ۱۹۸۶) صفحه ۱۷۲ استخراج شده است.



جدول ۸.۴: ضرایب کلیش - گوردون. (برای هر ورودی یک علامت جذر در نظر گرفته شده است؛ علامت منفی هر جا ظاهر شد از رادیکال بیرون می‌آید).

این جداول به شکل دیگری هم به کار می‌آیند:

$$|s_1 m_1\rangle |s_2 m_2\rangle = \sum_s C_{m_1 m_2 m}^{s_1 s_2 s} |s m\rangle \quad [۱۸۶.۴]$$

مثلاً، ردیف هاشور خورده در جدول $3/2 \times 1$ بیانگر آن است که

$$|\frac{3}{2} \frac{1}{2}\rangle |1 0\rangle = \sqrt{\frac{3}{5}} |\frac{5}{2} \frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{1}{15}} |\frac{3}{2} \frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle$$

اگر ذراتی با اسپین $3/2$ و اسپین 1 را در جعبه قرار داده و بدانید برای اولی $m_1 = 1/2$ و برای دومی $m_2 = 0$ است (پس m لزوماً $1/2$ می‌شود) و اسپین کل s را اندازه‌گیری کنید، ممکن است مقدار $5/2$ (با احتمال $3/5$)، مقدار $3/2$ (با احتمال $1/15$) و یا مقدار $1/2$ (با احتمال $1/3$) را بدست آورید. مجدداً، جمع احتمال‌ها 1 می‌شود (جمع مربعات هر ردیف در جدول کلیش-گوردون 1 است).

اگر فکر می‌کنید این شروعی بر یکجور طالع‌بینی اعداد و ارقامی اسرارآمیز است، سرزنش‌تان نمی‌کنم. در ادامه این کتاب دیگر جداول گوردون استفاده نمی‌کنیم، اما خواستم

بدانید کجاها با اوضاع و احوال مسائل جور درمی آیند، مبدا جایی بعدا با آنها برخورد کنید. به بیان ریاضی همه آنچه گفتیم را نظریه گروه کاربردی می نامند - آنچه از آن سخن می گوئیم تجزیه ضرب مستقیم دو نمایش تحویل ناپذیر از گروه چرخش به جمع مستقیم نمایش های تحویل ناپذیر است (می توانید با بازگو کردن آن دوستانتان را تحت تاثیر قرار دهید).

مساله ۳۴.۴ *

(الف) S_- را به حالت $|10\rangle$ (رابطه ۱۷۷.۴) اعمال کرده و کسب نتیجه $(1 - \sqrt{2}\hbar)$ را تایید کنید.

(ب) S_{\pm} را به حالت $|00\rangle$ (رابطه ۱۷۸.۴) اعمال کرده و کسب نتیجه صفر را تایید کنید.

(پ) نشان دهید حالت های $|11\rangle$ و $|1 - 1\rangle$ (رابطه ۱۷۷.۴) ویژه حالت های عملگر S^2 با ویژه مقدار مناسب هستند.

مساله ۳۵.۴ کوارک ها حامل اسپین $1/2$ هستند. سه کوارک با هم پیوند می خورند تا یک باریون (مانند پروتون یا نوترون) را تشکیل دهند؛ دو کوارک (یا به بیان دقیقتر یک کوارک و یک پاد کوارک) با هم پیوند خورده و یک مزون (مانند پيون یا کائون) را بوجود می آورند. فرض کنید کوارک ها در حالت پایه هستند (پس تکانه زاویه ای مداری صفر است).

(الف) چه اسپین هایی برای باریون ها امکان پذیر است؟

(ب) چه اسپین هایی برای مزون ها امکان پذیر است؟

مساله ۳۶.۴

(الف) ذره ای با اسپین 1 و ذره دیگری با اسپین 2 در حال سکون در یک پیکربندی قرار دارند بطوریکه اسپین کل آنها 3 و مولفه S_z هم \hbar است. اگر مولفه S_z تکانه زاویه ای ذره ای که اسپینش $1/2$ است را اندازه می گرفتید، احتمالا چه مقادیری بدست می آوردید و احتمال هر کدام چقدر می بود؟

(ب) الکترونی با اسپین رو به پائین در حالت ψ_{510} اتم هیدروژن قرار دارد. اگر می‌توانستید مربع تکانه زاویه‌ای کل الکترون را به تنهایی اندازه بگیرید (یعنی اسپین پروتون در آن نباشد)، احتمالاً چه مقادیری بدست می‌آوردید و احتمال هر کدام چقدر می‌بود؟

مساله ۳۷.۴ جابجاگر S^2 با $S_z^{(1)}$ را بدست آورید (که در آن داریم $S \equiv S^{(1)} + S^{(2)}$). نتیجه خود را تعمیم دهید تا نشان دهید

$$[S^2, S^{(1)}] = 2i\hbar(S^{(1)} \times S^{(2)}) \quad [187.4]$$

توضیح: از آنجائیکه $S_z^{(1)}$ با S^2 جابجا نمی‌شود، نمی‌توان به یافتن حالت‌هایی امید داشت که ویژه بردارهای همزمان هر دو باشند. به منظور شکل دادن ویژه حالت‌های S^2 نیازمند ترکیبات خطی ویژه حالت‌های $S_z^{(1)}$ هستیم. این دقیقاً همان کاری است که ضرایب کلبش-گوردون (در رابطه ۱۸۵.۴) برایمان انجام می‌دهند. از سوی دیگر، می‌توان از برداشت واضحی که از رابطه ۱۸۷.۴ بدست می‌آید چنین نتیجه گرفت که جمع $S^{(1)} + S^{(2)}$ حتماً با S^2 جابجا می‌شود، که حالت خاصی از چیزی به شمار می‌رود که از پیش آنرا می‌دانستیم (رابطه ۱۰۳.۴ را ملاحظه کنید).

مسائل دیگری برای فصل ۴

مساله ۳۸.۴* نوسانگر هماهنگ سه بعدی را در نظر بگیرید که پتانسیل آن عبارت است از

$$V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 \quad [188.4]$$

(الف) نشان دهید تفکیک متغیرها در مختصات دکارتی این رابطه را به سه نوسانگر یک بعدی مبدل می‌کند و با بهره‌گیری از دانش خود درباره دومی انرژی‌های مجاز را بدست آورید. پاسخ:

$$E_n = (n + 3/2)\hbar\omega \quad [189.4]$$

(ب) $d(n)$ تبهگنی E_n را دقیقاً برآورد کنید.

مساله ۳۹.۴*** چون پتانسیل نوسانگر هماهنگ سه بعدی (رابطه ۱۸۸.۴) دارای تقارن

کروی است، می‌توان معادله شرودینگر را به سه متغیر r, θ, ϕ تبدیل کرد. snap.sellfile.ir

اضافه بر مختصات دکارتی مورد بررسی قرار داد. از روش سری‌های توانی برای حل معادله شعاعی استفاده کنید. فرمول بازگشتی برای ضرایب را یافته و انرژی‌های مجاز را دقیقاً برآورد کنید. پاسخ خود را در مقایسه با رابطه ۱۸۹.۴ بررسی کنید.

مساله ۴۰.۴**

(الف) قضیه ویريال سه بعدی را (برای حالت‌های مانا) ثابت کنید

$$2\langle T \rangle = \langle \mathbf{r} \cdot \nabla V \rangle \quad [190.4]$$

راهنمایی: بازگردید به مساله ۳۱.۳.

(ب) قضیه ویريال را به مورد اتم هیدروژن اعمال کرده و نشان دهید

$$\langle T \rangle = -E_n; \langle V \rangle = 2E_n \quad [191.4]$$

(پ) قضیه ویريال را در مورد نوسانگر هماهنگ سه بعدی (مساله ۳۸.۴) به کار برده و نشان دهید در اینحالت

$$\langle T \rangle = \langle V \rangle = E_n/2 \quad [192.4]$$

مساله ۴۱.۴*** (سعی کنید این مساله را تنها در صورتی حل کنید که با حساب دیفرانسیل

برداری آشنا هستید.) جریان احتمال (سه بعدی) را با تعمیم مساله ۱۴.۱ تعریف کنید:

$$\mathbf{J} \equiv \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \quad [193.4]$$

(الف) نشان دهید \mathbf{J} در معادله پیوستگی صدق می‌کند

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = -\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 \quad [194.4]$$

که بیانگر پایستگی موضعی احتمال است. می‌توان (از قضیه واگرایی) اینطور نتیجه گرفت که

$$\int_S \mathbf{J} \cdot d\mathbf{a} = -\frac{d}{dt} \int_V |\Psi|^2 d^3\mathbf{r} \quad [۱۹۵.۴]$$

که در آن V یک حجم (ثابت) و S هم سطح مرزی است. به طور خلاصه: شار احتمالی که از سطح خارج می‌شود معادل است با کاهش احتمال یافتن ذره در حجم متناظر.

(ب) \mathbf{J} را برای اتم هیدروژن در حالت $n = 2$, $l = 1$, $m = 1$ بدست آورید. پاسخ:

$$\frac{\hbar}{64\pi m a^5} r e^{-r/a} \sin \theta \hat{\phi}$$

(پ) اگر m را به عنوان شار جرم تعبیر کنیم، تکانه زاویه‌ای برابر می‌شود با

$$\mathbf{L} = m \int (\mathbf{r} \times \mathbf{J}) d^3\mathbf{r}$$

از این رابطه برای محاسبه L_z برای حالت ψ_{211} استفاده کرده و نتیجه را توضیح دهید.

مساله ۴۲.۴ *** تابع موج فضای تکانه (مستقل از زمان) در سه بعد با تعمیم متعارف رابطه

۵۴.۳ مشخص می‌شود:

$$\Phi(\mathbf{p}) \equiv \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int e^{-i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})/\hbar} \psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad [۱۹۶.۴]$$

(الف) تابع موج فضای تکانه را برای حالت پایه هیدروژن (رابطه ۸۰.۴) بدست آورید. راهنمایی:

از مختصات کروی استفاده کرده و محور قطبی را در جهت \mathbf{p} بگیرید. ابتدا انتگرال برحسب θ

را محاسبه کنید. پاسخ:

$$\Phi(\mathbf{p}) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{2a}{\hbar} \right)^{3/2} \frac{1}{[1 + (ap/\hbar)^2]^2} \quad [۱۹۷.۴]$$

(ب) بررسی کنید که $\Phi(\mathbf{p})$ بهنجار باشد.

(پ) با استفاده از $\Phi(\mathbf{p})$ مقدار $\langle p^2 \rangle$ را در حالت پایه هیدروژن محاسبه کنید.

(ت) مقدار چشمداشتی انرژی جنبشی در این حالت چقدر است؟ پاسخ خود را به صورت

ضریبی از E_1 بیان کرده و ببینید آیا این پاسخ با قضیه ویرال (رابطه ۱۹۱.۴) سازگاری دارد.

مساله ۴۳.۴

(الف) تابع موج فضایی (ψ) برای هیدروژن در حالت $n = 3$ ، $l = 2$ و $m = 1$ را تشکیل دهید. پاسخ‌تان را تنها به صورت تابعی از r ، θ ، ϕ و a (شعاع بور) بیان کنید. از متغیرهای دیگری همچون ρ ، z و غیره و یا توابعی مانند Y ، v و ... یا ثابت‌هایی مثل A ، a_0 و چیزهای دیگر یا سایر انواع مشتقات استفاده نکنید (π ، e ، 2 و مشابه آنها مجازند).

(ب) ببینید آیا این تابع موج با انتگرال‌گیری صحیح روی r ، θ و ϕ به درستی بهنجار می‌شود.

(پ) مقدار چشمداشتی r^s را در این حالت بیابید. پاسخ بدست آمده در چه بازه‌ای متناهی است؟

مساله ۴۴.۴

(الف) تابع موج هیدروژن در حالت $n = 4$ ، $l = 3$ ، $m = 3$ را تشکیل دهید. پاسخ خود را به صورت تابعی از مختصات کروی r ، θ و ϕ بیان کنید.

(ب) مقدار چشمداشتی r را در این حالت بدست آورید. (مثل همیشه، سری به انتگرال‌های نه چندان معمول بزنید).

(پ) اگر می‌توانستید به طریقی مشاهده‌پذیر $L_y^2 + L_x^2$ را روی اتمی در این حالت اندازه بگیرید، چه مقدار (یا مقادیری) بدست می‌آوردید و احتمال هر کدام چقدر می‌بود؟

مساله ۴۵.۴ احتمال آنکه الکترونی در حالت پایه هیدروژن درون هسته یافت شود چقدر است؟

(الف) ابتدا پاسخ دقیق را با فرض آنکه تابع موج (رابطه ۸۰.۴) به ازای تمام نقاط تا $r = 0$ صحیح است محاسبه کنید. b را شعاع هسته بپذیرید.

(ب) نتیجه خود را به صورت یک سری توانی برحسب عدد کوچک $2b/a \equiv \epsilon$ بسط داده و نشان دهید جمله‌ای که پائین‌ترین مرتبه را دارد جمله‌ای مکعبی است: $P \approx (4/3)(b/a)^3$. این به شرطی می‌تواند تقریب مناسبی باشد که $a \gg b$ باشد (که اتفاقاً همینطور هم هست).

(پ) به طور جایگزین، می‌توانیم فرض را بر این بگذاریم که $\psi(r)$ لزوماً روی حجم (بسیار کوچک) هسته ثابت است، به طوریکه $|\psi(0)|^2 \approx (4/3)\pi b^3 P$. بررسی کنید آیا همان جواب قبلی را از این راه هم بدست می‌آورید.

(ت) با استفاده از $b \approx 10^{-5} \text{ m}$ و $a \approx 0.5 \times 10^{-10} \text{ m}$ تخمینی عددی برای P بدست آورید. به بیان کلی، به این ترتیب «کسری از زمانی که الکترون داخل هسته سپری می‌کند» نشان داده می‌شود.

مساله ۴۶.۴

(الف) از معادله بازگشتی (رابطه ۷۶.۴) برای تایید این مطلب استفاده کنید که وقتی

$$l = n - 1$$

است تابع موج شعاعی شکل زیر را به خود می‌گیرد

$$R_{n(n-1)} = N_n r^{n-1} e^{-r/na}$$

ثابت بهنجارش N_n را با انتگرال‌گیری مستقیم تعیین کنید.

(ب) مقادیر $\langle r \rangle$ و $\langle r^2 \rangle$ را برای حالت‌هایی به شکل $\psi_{n(n-1)m}$ محاسبه کنید.

(پ) نشان دهید برای چنین حالت‌هایی «عدم قطعیت» در r (یعنی σ_r) برابر است با

$$\sigma_r / \sqrt{2n+1} \langle r \rangle$$

این مفهوم که سامانه به ازای n های بزرگ، همراه با مدارهای دایره‌ای قابل شناسایی، کم کم ظاهر کلاسیکی به خود می‌گیرد. برای نشان دادن این نقطه، توابع موج شعاعی را برای چندین مقدار از n رسم کنید.

مساله ۴۷.۴ خطوط طیفی انطباقی (هم فرود)^{۴۳}. بنابر فرمول ری‌دبرگ (رابطه ۹۳.۴) طول

موج هر خطی در طیف هیدروژن با اعداد کوانتومی اصلی حالت‌های ابتدایی و انتهایی تعیین می‌شود. دو جفت مجزا از هم $\{n_i, n_f\}$ را بدست آورید که یک مقدار λ را بدست می‌دهند. مثلاً، $\{6851, 6409\}$ و $\{15283, 11687\}$ چنین خاصیتی دارند، با این حال مجاز به استفاده از آنها نیستید!

^{۴۳} برگرفته از مقاله *Coincident Spectral Lines*، پژوهش منتشر نشده‌ای از Nicholas Wheeler، (کالج رید،

مساله ۴۸.۴ مشاهده پذیرهای $A = x^2$ و $B = L_z$ را در نظر بگیرید.

(الف) اصل عدم قطعیت را برای $\sigma_A \sigma_B$ تشکیل دهید.

(ب) مقدار σ_B را برای هیدروژنی در حالت ψ_{nlm} بدست آورید.

(پ) درباره $\langle xy \rangle$ در این حالت چه نتیجه‌ای می‌توان گرفت؟

مساله ۴۹.۴ الکترونی در حالت اسپینی زیر قرار دارد

$$\chi = A \begin{pmatrix} 1 - 2i \\ 2 \end{pmatrix}$$

(الف) با بهنجار کردن χ ثابت A را تعیین کنید.

(ب) اگر S_z را روی این الکترون اندازه بگیرید، احتمالاً چه مقادیری بدست می‌آورید و احتمال

هر کدام چقدر است؟ مقدار چشمداشتی S_z چقدر است؟

(پ) اگر S_x را روی این الکترون اندازه بگیرید، احتمالاً چه مقادیری بدست می‌آورید و احتمال

هر کدام چقدر است؟ مقدار چشمداشتی S_x چقدر است؟

(ت) اگر S_y را روی این الکترون اندازه بگیرید، احتمالاً چه مقادیری بدست می‌آورید و احتمال

هر کدام چقدر است؟ مقدار چشمداشتی S_y چقدر است؟

مساله ۵۰.۴ *** فرض کنید دو ذره با اسپین $1/2$ در پیکربندی تکتایی (رابطه ۱۷۸.۴) قرار

دارند. بگذارید $S_a^{(1)}$ مولفه تکانه زاویه‌ای اسپینی ذره شماره ۱ در جهتی باشد که از روی بردار

یکه \hat{a} تعریف می‌شود. به طور مشابه، بگذارید $S_b^{(2)}$ مولفه تکانه زاویه‌ای ذره ۲ در جهت \hat{b} باشد.

نشان دهید

$$\langle S_a^{(1)} S_b^{(2)} \rangle = -\frac{\hbar^2}{4} \cos \theta \quad [۱۹۸.۴]$$

که در آن θ برابر است با زاویه میان \hat{a} و \hat{b} .

*** مساله ۵۱.۴

(الف) ضرایب کلبش - گوردون را برای حالت $s_1 = 1/2$ و هر مقدار دلخواه s_2 محاسبه کنید. راهنمایی: در این مساله بدنبال ضرائبی مثل A و B می‌گردید به طوریکه

$$|sm\rangle = A \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle |s_2 (m - \frac{1}{2})\rangle + B \left| \frac{1}{2} (-\frac{1}{2}) \right\rangle |s_2 (m + \frac{1}{2})\rangle$$

$|sm\rangle$ ویژه حالت s^2 است. از روش رابطه ۱۷۹.۴ برای رابطه ۱۸۲.۴ استفاده کنید. اگر قادر به درک (مثلاً) عمل $S_x^{(2)}$ روی $|s_2 m_2\rangle$ نیستید، به رابطه ۱۳۶.۴ و یک خط قبل از رابطه ۱۴۷.۴ بازگردید. پاسخ:

$$A = \sqrt{\frac{s_2 \pm m + 1/2}{2s_2 + 1}}; B = \pm \sqrt{\frac{s_2 \mp m + 1/2}{2s_2 + 1}}$$

که در آنها علامت‌ها از روی $s = s_2 \pm 1/2$ تعیین می‌شوند.

(ب) این نتیجه کلی را در مقایسه سه یا چهار ورودی در جدول ۸.۴ مورد بررسی قرار دهید.

مساله ۵۲.۴ ماتریس نمایشگر S_x را برای ذره‌ای با اسپین $1/2$ (مثل همیشه، با استفاده از پایه ویژه حالت‌های S_z) بیابید. معادله مشخصه را برای تعیین ویژه مقادیر S_x حل کنید.

مساله ۵۳.۴ *** با تعمیم اسپین $1/2$ (روابط ۱۴۵.۴ و ۱۴۷.۴)، اسپین ۱ (مساله ۳۱.۴) و

اسپین $3/2$ (مساله ۵۲.۴) ماتریس‌های اسپین را برای اسپین دلخواه s محاسبه کنید. پاسخ:

$$S_z = \hbar \begin{pmatrix} s & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & s-1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & s-2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -s \end{pmatrix}$$

$$S_x = \hbar \begin{pmatrix} 0 & b_s & 0 & \dots & 0 & 0 \\ b_s & 0 & b_{s-1} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & b_{s-1} & 0 & b_{s-2} & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b_{s-2} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & b_{-s+1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & b_{-s+1} & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_y = \hbar \begin{pmatrix} 0 & -ib_s & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ ib_s & 0 & -ib_{s-1} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & ib_{s-1} & 0 & -ib_{s-2} & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & ib_{s-2} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -ib_{-s+1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & ib_{-s+1} & 0 \end{pmatrix}$$

که در آن داریم

$$b_j \equiv \sqrt{(s+j)(s+1-j)}$$

مساله ۵۴.۴*** عامل بهنجارش را برای هماهنگ‌های کروی به صورت زیر محاسبه کنید. از

بخش ۲.۱.۴ می‌دانیم که

$$Y_l^m = B_l^m e^{im\phi} P_l^m(\cos \theta)$$

مساله عبارت است از تعیین عامل B_l^m (که به آن اشاره کردم اما در رابطه ۳۲.۴ آنرا استخراج نکردم). از روابط ۱۲۰.۴، ۱۲۱.۴ و ۱۳۰.۴ برای بدست آوردن یک فرمول بازگشتی که B_l^{m+1} را برحسب B_l^m بدست دهد استفاده کنید. آنرا از راه استقراء روی m برای بدست آوردن B_l^m تا یک ثابت کلی $C(l)$ حل کنید. در نهایت، از نتیجه مساله ۲۲.۴ برای تعیین این ثابت استفاده کنید. شاید فرمول ذیل برای مشتق یک تابع لژاندر وابسته مناسب باشد:

$$(1-x^2) \frac{dp_l^m}{dx} = \sqrt{1-x^2} p_l^{m+1} - m x p_l^m \quad [۱۹۹.۴]$$

مساله ۵۵.۴ الکترون در یک اتم هیدروژن اسپین ترکیبی دارد و حالت مکان آن به شکل زیر است.

$$R_{21} \left(\sqrt{1/3} Y_1^0 \chi_+ + \sqrt{2/3} Y_1^1 \chi_- \right)$$

(الف) اگر مربع تکانه زاویه‌ای مداری (L^2) را اندازه بگیرید، امکان دارد چه مقادیری را بدست آورید و احتمال هر مقدار چقدر خواهد بود؟

(ب) همان سوال برای مولفه z تکانه زاویه‌ای مداری (L_z).

(پ) همان سوال برای مربع تکانه زاویه‌ای اسپینی (S^2).

(ت) همان سوال برای مولفه z تکانه زاویه‌ای اسپینی (S_z).

بگذارید $\mathbf{J} \equiv \mathbf{L} + \mathbf{S}$ تکانه زاویه‌ای کل باشد.

(ث) اگر J^2 را اندازه بگیرید، امکان دارد چه مقادیری بدست آورید و احتمال هر مقدار چقدر خواهد بود؟

(ج) همان سوال برای J_z .

(چ) اگر مکان ذره را اندازه بگیرید، چگالی احتمال یافتن آن در r ، θ و ϕ چقدر است؟

(ح) اگر هم مولفه z اسپین و هم فاصله از مبدا (توجه کنید که هر دوی اینها مشاهده پذیرند) را اندازه بگیرید، چگالی احتمال یافتن ذره با اسپین بالا در شعاع r چقدر است؟

مساله ۵۶.۴ ***

(الف) برای تابع $f(\phi)$ که می‌توان آنرا به صورت بسط یک سری تیلور بیان کرد، نشان دهید

$$f(\phi + \varphi) = e^{iL_z\varphi/\hbar} f(\phi)$$

(که در آن φ می‌تواند هر زاویه دلخواهی باشد). به همین دلیل، L_z/\hbar را مولد چرخش حول محور z می‌نامند. راهنمایی: از رابطه ۱۲۹.۴ استفاده کرده و به مساله ۳۹.۳ بازگردید.

در حالت کلی‌تر، $\mathbf{L} \cdot \hat{n}/\hbar$ مولد چرخش حول \hat{n} است، به این مفهوم که $\exp(i\mathbf{L} \cdot \hat{n}\varphi/\hbar)$ روی چرخشی به اندازه زاویه φ (به قاعده دست راست) حول محور \hat{n} اثر می‌گذارد. در مورد اسپین، مولد چرخش‌ها عبارت است از $\mathbf{S} \cdot \hat{n}/\hbar$. به ویژه برای اسپین ۱/۲ رابطه

$$\chi' = e^{i(\sigma \cdot \hat{n})\varphi/2} \chi \quad [۲۰۰.۴]$$

بیانگر چگونگی دوران اسپینورها است.

(ب) ماتریس 2×2 که نمایشگر چرخشی به اندازه 180° حول محور x می‌باشد را تشکیل داده و نشان دهید همانطور که انتظار دارید حالت «اسپین بالا» (χ_+) را به حالت «اسپین پائین» (χ_-) می‌برد.

(پ) ماتریس نمایشگر چرخشی به اندازه 90° حول محور y را درست کرده و ببینید حاصل اثردهی آن روی χ_+ چه می‌شود.

(ت) ماتریس نمایشگر چرخشی به اندازه زاویه 360° حول محور \vec{z} را تشکیل دهید. اگر پاسختان دقیقاً همانی نیست که انتظار داشتید، درباره پیامدها و معنای ضمنی آن بحث کنید.

(ث) نشان دهید

$$e^{i(\vec{\sigma} \cdot \vec{n})\varphi/2} = \cos(\varphi/2) + i(\vec{n} \cdot \vec{\sigma}) \sin(\varphi/2) \quad [۲۰۱.۴]$$

مساله ۵۷.۴** روابط جابه‌جایی اساسی برای تکانه زاویه‌ای (رابطه ۹۹.۴) امکان می‌دهند تا ویژه مقادیر نیم صحیح (به علاوه صحیح) داشته باشیم، اما در مورد تکانه زاویه‌ای مداری فقط مقادیر صحیح وجود دارد. باید نوعی قید اضافی روی شکل خاص $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ وجود داشته باشد که مقادیر نیم صحیح را وارد نکند.^{۴۴} بگذارید a یک مقدار ثابت با بعد طول باشد (مثلاً، اگر درباره هیدروژن حرف می‌زنیم باشد شعاع بور) و عملگرهای زیر را تعریف کنید

$$q_1 \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}[x + (a^2/\hbar)p_y], p_1 \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}[p_x - (\hbar/a^2)y]$$

$$q_2 \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}[x - (a^2/\hbar)p_y], p_2 \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}[p_x + (\hbar/a^2)y]$$

(الف) درستی این روابط را بررسی کنید: $[q_1, p_1] = [q_2, p_2] = [q_1, q_2] = [p_1, p_2] = 0$ و $i\hbar$ بدین ترتیب q ها و p ها در روابط جابه‌جایی کانونیک صدق می‌کنند و آنهایی که شاخص 1 دارند با آنهایی که شاخص 2 دارند سازگارند.

(ب) نشان دهید

$$L_z = \frac{\hbar}{2a^2}(q_1^2 - q_2^2) + \frac{a^2}{2\hbar}(p_1^2 - p_2^2)$$

(پ) بررسی کنید آیا $L_z = H_1 - H_2$ است که در آن H هامیلتونی نوسانگر هماهنگی به جرم $m = \hbar^2/a$ و فرکانس $\omega = 1$ است.

(ت) می‌دانیم ویژه مقادیر هامیلتونی نوسانگر هماهنگ عبارتند از $(n + 1/2)\omega\hbar$ که در آن n می‌تواند هر عدد صحیح باشد (در نظریه جبری بخش ۱.۳.۲، این نتیجه از شکل هامیلتونی و روابط جابه‌جایی کانونیک بدست آمد). از این نتیجه استفاده کرده و استنباط کنید که ویژه مقادیر L_z باید اعداد صحیح باشند.

مساله ۵۸.۴ شرایط لازم برای کمینه عدم قطعیت در S_x و S_y (به عبارت دیگر، حالت تساوی در عبارت $|\langle S_z \rangle| \geq (\hbar/2) \sigma_{S_x} \sigma_{S_y}$) را برای ذره‌ای با اسپین ۱/۲ در حالت کلی (رابطه ۱۳۹.۴) استنباط کنید. پاسخ: بدون از دست دادن عمومیت مساله می‌توانیم a را حقیقی بگیریم؛ در آن صورت شرط کمینه شدن عدم قطعیت این است که b یا کاملاً حقیقی یا کاملاً موهومی باشد.

مساله ۵۹.۴*** در الکتروپدینامیک کلاسیک نیروی وارد شده روی ذره‌ای با بار q که در حال حرکت با سرعت \mathbf{v} از میان میدان‌های الکتریکی \mathbf{E} و مغناطیسی \mathbf{B} می‌باشد، از قانون نیروی لورنتز بدست می‌آید:

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad [۲۰۲.۴]$$

این نیرو را نمی‌توان به صورت گرادیان یک تابع انرژی پتانسیل اسکالر بیان کرد و به همین خاطر معادله شروودینگر در شکل اصلی‌اش (رابطه ۱.۱) با آن سازگاری ندارد. اما در شکل پیچیده‌تر

$$[۲۰۳.۴]$$

مشکلی وجود ندارد؛ هامیلتونی کلاسیک^{۴۵} عبارت است از

$$[۲۰۴.۴]$$

که در آن \mathbf{A} پتانسیل برداری ($\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$) بوده و φ یک پتانسیل اسکالر

^{۴۵} برای مثال، کتاب *Classical Mechanics* اثر H. Goldstein ویرایش سوم از انتشارات Addison-Wesley

$(E = -\nabla\phi - \partial A/\partial t)$ است، پس معادله شرودینگر (با کانونیک کردن آن از طریق جاگذاری $(p \rightarrow (i/\hbar)\nabla)$ می‌شود

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A} \right)^2 + q\phi \right] \Psi \quad [۲۰.۵.۴]$$

(الف) نشان دهید

$$\frac{d\langle r \rangle}{dt} = \frac{1}{m} \langle (\mathbf{p} - q\mathbf{A}) \rangle \quad [۲۰.۶.۴]$$

(ب) مثل همیشه (رابطه ۳۲.۱ را ببینید) عبارت $d\langle r \rangle/dt$ را برابر با $\langle v \rangle$ می‌دانیم. نشان دهید

$$m \frac{d\langle v \rangle}{dt} = q\langle \mathbf{E} \rangle + \frac{q}{2m} \langle (\mathbf{p} \times \mathbf{B} - \mathbf{B} \times \mathbf{p}) \rangle - \frac{q^2}{m} \langle (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \rangle \quad [۲۰.۷.۴]$$

(پ) به ویژه اگر میدان‌های \mathbf{E} و \mathbf{B} در تمام حجم بسته موج یکنواخت باشند، نشان دهید

$$m \frac{d\langle v \rangle}{dt} = q(\mathbf{E} + \langle \mathbf{v} \rangle \times \mathbf{B}) \quad [۲۰.۸.۴]$$

به این دلیل مقدار چشمداشتی \mathbf{v} همانطور که از قضیه اهرنفتست انتظار آن می‌رفت براساس قانون نیروی لورنتز حرکت می‌کند.

مساله ۶۰.۴*** (برای یادآوری و پیش زمینه، بازگردید به مساله ۵۹.۴) فرض کنید

$$\mathbf{A} = \frac{B_0}{2}(x\hat{j} - y\hat{i}) \quad \text{و} \quad \phi = Kz^2$$

که در آن B_0 و K مقادیر ثابتی هستند.

(الف) \mathbf{E} و \mathbf{B} را بدست آورید.

(ب) انرژی‌های مجاز را برای ذره‌ای به جرم m و بار q در این میدان‌ها بیابید. پاسخ:

$$E(n_1, n_2) = \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_1 + \left(n_2 + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_2, \quad (n_1, n_2 = 0, 1, 2, \dots) \quad [۲۰.۹.۴]$$

که در آن $\omega_1 \equiv qB_0/m$ و $\omega_2 \equiv \sqrt{2qK/m}$ است. توضیح: اگر $K = 0$ باشد، مانسته حرکت سیکلوترونی را داریم؛ ω_1 فرکانس سیکلوترونی کلاسیکی است و این هم یک ذره آزاد در جهت z محسوب می‌شود. انرژی‌های مجاز، $(n_1 + \frac{1}{2})\hbar\omega_1$ ، را ترازهای لاندائو می‌نامند.^{۴۶}

مساله ۶۱.۴ (برای یادآوری و پیش زمینه، بازگردید به مساله ۵۱.۴) در الکتروپنایمیک کلاسیک پتانسیل‌های A و ϕ به طور یکتا تعریف نمی‌شوند^{۴۷}؛ کمیت‌های فیزیکی میدان‌های E و B هستند.

(الف) نشان دهید پتانسیل‌های

$$\phi' \equiv \phi - \frac{\partial \Lambda}{\partial t}, \quad A' \equiv A + \nabla \Lambda \quad [۲۱۰.۴]$$

(که در آن Λ تابع حقیقی دلخواهی از مکان و زمان است) همان میدان‌های A و ϕ را بدست می‌دهند. رابطه ۲۱۰.۴ را تبدیل پیمانه‌ای نامیده و این نظریه را هم ناوردایی پیمانه‌ای می‌نامند.

(ب) در مکانیک کوانتومی پتانسیل‌ها نقش مستقیم‌تری ایفا می‌کنند و شایان توجه است بدانیم

که آیا نظریه‌ای تحت تبدیلات پیمانه‌ای ناوردا می‌ماند یا خیر. نشان دهید

$$\Psi' \equiv e^{iq\Lambda/\hbar}\Psi \quad [۲۱۱.۴]$$

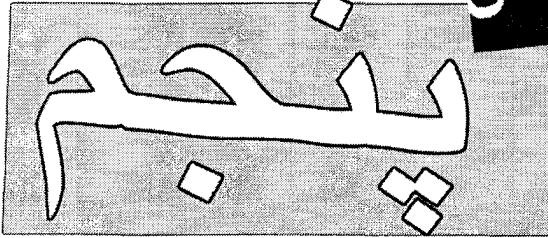
در معادله شرودینگر (رابطه ۲۰۵.۴) با پتانسیل‌های تبدیل پیمانه‌ای ϕ' و A' صدق می‌کند. از آنجا که Ψ' با Ψ تنها در یک عامل فازی فرق دارد، نشانگر همان حالت فیزیکی است^{۴۸} و بنابراین این نظریه ناوردای پیمانه‌ای محسوب می‌شود (برای بحث بیشتر بخش ۱۰.۲.۳ را ببینید).

^{۴۶} برای مثال، کتاب Ballentine (زیرنویس ۲۶) بخش ۳.۱۱ را ملاحظه کنید.

^{۴۷} برای نمونه، Griffiths (زیرنویس ۲۷) بخش ۴.۲.۱۰ را ببینید.

^{۴۸} این یعنی بگوئیم $\langle r \rangle$ ، $d\langle r \rangle/dt$ و غیره بدون تغییر هستند. چون Λ به مکان وابسته است، $\langle p \rangle$ (با p که توسط عملگر $(\hbar/i)\nabla$ نشان داده می‌شود) قطعاً تغییر می‌کند، با این حال تا جایی که می‌دانیم در رابطه ۲۰۶.۴، p نمایشگر تکانه کلاسیکی (mv) در این معنی نیست (از مکانیک کوانتومی به تکانه کوانتومیک معروف است).

فصل



ذرات یکسان

۱.۵ سیستم‌های دو ذره‌ای

برای یک تک ذره، تابع موج $\Psi(r, t)$ تابعی از مختصات فضایی r و زمان t است (فعلاً اسپین را در نظر نمی‌گیریم). تابع موج یک سیستم دو ذره‌ای تابعی از مختصات ذره اول (r_1)، مختصات ذره دوم (r_2) و زمان است:

$$\Psi(r_1, r_2, t) \quad [۵.۱]$$

تحول زمانی آن (مانند همیشه) با معادله شرودینگر تعریف می‌شود:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi \quad [۵.۲]$$

که در آن H هامیلتونی کل سامانه است:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 + V(r_1, r_2, t) \quad [۳.۵]$$

(شاخص پائین ∇ بسته به حالت، نشانه مشتق‌گیری نسبت به مختصات ذره ۱ یا ۲ است). تعبیر آماری به طور بدیهی پا بر جا می‌ماند:

$$|\Psi(r_1, r_2, t)|^2 d^3r_1 d^3r_2 \quad [۴.۵]$$

این رابطه احتمال یافتن ذره ۱ در حجم d^3r_1 و ذره ۲ در حجم d^3r_2 است؛ آشکار است که Ψ باید به گونه‌ای بهنجار شود که

$$\int |\Psi(r_1, r_2, t)|^2 d^3r_1 d^3r_2 = 1 \quad [۵.۵]$$

برای پتانسیل‌های مستقل از زمان، مجموعه کاملی از جواب‌ها را به روش تفکیک متغیرها بدست می‌آوریم:

$$\Psi(r_1, r_2, t) = \psi(r_1, r_2) e^{-iEt/\hbar} \quad [۶.۵]$$

که در آن تابع موج فضایی (ψ) در معادله شرودینگر مستقل از زمان صدق می‌کند:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 \psi - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 \psi + V\psi = E\psi \quad [۷.۵]$$

مساله ۱.۵* به طور نوعی، پتانسیل برهم کنش تنها به بردار $\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ بستگی دارد که دو ذره را از هم تفکیک می کند. در آن صورت معادله شرودینگر تفکیک می شود؛ در صورتیکه متغیرها را از \mathbf{r}_1 و \mathbf{r}_2 به $\mathbf{R} \equiv (\mathbf{r}_1 m_1 + \mathbf{r}_2 m_2)/(m_1 + m_2)$ و \mathbf{r} تغییر دهیم (مختصات مرکز جرم)

(الف) نشان دهید $\mathbf{r}_1 = \mathbf{R} + (\mu/m_1)\mathbf{r}$ ، $\mathbf{r}_2 = \mathbf{R} - (\mu/m_2)\mathbf{r}$ ، $\nabla_1 = (\mu/m_2)\nabla_R + \nabla_r$ و $\nabla_2 = (\mu/m_1)\nabla_R - \nabla_r$ که در آن

$$\mu \equiv \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad [۸.۵]$$

جرم کاهیده این سامانه است.

(ب) نشان دهید معادله شرودینگر (مستقل از زمان) می شود

$$-\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \nabla_R^2 \psi - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 \psi + V(r)\psi = E\psi$$

(پ) به روش تفکیک متغیرها و با قرار دادن $\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \psi_R(\mathbf{R}) \psi_r(\mathbf{r})$ این معادله را حل کنید. توجه داشته باشید که ψ_R در معادله شرودینگر تک ذره‌ای با جرم کل $m_1 + m_2$ به جای m ، پتانسیل صفر و انرژی E_R صدق می کند، در حالیکه ψ_r در معادله شرودینگر تک ذره‌ای با جرم کاهیده به جای m ، پتانسیل $V(r)$ و انرژی کل E_r صدق می کند. انرژی کل حاصل جمع دو انرژی است: $E = E_R + E_r$. این رابطه حاکی از آن است که مرکز جرم مانند یک ذره آزاد حرکت می کند و اینکه حرکت نسبی (یعنی حرکت ذره ۲ نسبت به ذره ۱) درست مثل آن است که تک ذره‌ای با جرم کاهیده در اختیار داشته باشیم به طوریکه در معرض

پتانسیل V باشد. همین تفکیک دقیقاً در مکانیک کلاسیک هم وجود دارد^۱؛ این کار مساله دو جسمی را به معادل یک جسمی آن ساده می‌کند.

مساله ۲.۵ از منظر مساله ۱.۵، می‌توانیم حرکت هسته در هیدروژن را به سادگی از طریق جابه‌جا کردن جرم الکترون با جرم کاهیده تصحیح کنیم:

(الف) درصد خطا در انرژی بستگی هیدروژن را (تا دو رقم معنی‌دار) بیابید که با کاربری خودمان از m به جای μ ارائه شود.

(ب) تفکیک در طول موج میان خطوط بالمر قرمز ($n = 3 \rightarrow n = 2$) را برای هیدروژن و دوتریوم بدست آورید.

(پ) انرژی بستگی پوزیترونیم (که در آن جای پروتون با پوزیترون عوض می‌شود - پوزیترون جرمی مشابه الکترون اما باری مخالف با آن دارد).

(ت) فرض کنید می‌خواستید وجود **هیدروژن موئونی** را تأیید کنید که در آن جای الکترون با موئون (با همان بار اما جرم 206.77 برابر) عوض می‌شود. در آنصورت کجا (یعنی در چه طول موجی) به دنبال خط « α لیمان» ($n = 2 \rightarrow n = 1$) می‌گشتید؟

مساله ۳.۵ کلر دارای دو ایزوتوپ طبیعی، Cl^{35} و Cl^{37} ، است. نشان دهید طیف نوسانی HCl باید متشکل از جفت‌هایی به فاصله فضایی کم، با شکافتگی مفروض $\Delta v = 7.51 \times 10^{-4} v$ باشد که در آن v فرکانس فوتون تابیده شده است. راهنمایی: این سامانه را نوسانگری هماهنگ با فرکانس زاویه‌ای $\omega = \sqrt{k/\mu}$ در نظر بگیرید که در آن μ جرم کاهیده (رابطه ۸.۵) و k پارامتری است که برای هر دو ایزوتوپ یکسان است.

^۱ برای مثال، کتاب *Classical Dynamics of Particles and Systems* اثر Jerry Marmon، ویرایش دوم نیویورک، انتشارات Academic Press، ۱۹۷۰.

۱۰.۱.۵ بوزون‌ها و فرمیون‌ها

فرض کنید ذره ۱ در حالت (تک ذره‌ای) $\psi_a(r)$ و ذره ۲ در حالت $\psi_b(r)$ قرار دارد. (به یاد داشته باشید: فعلا اسپین را در نظر نمی‌گیریم.) در آن صورت $\psi(r_1, r_2)$ یک حاصلضرب ساده است:^۲

$$\psi(r_1, r_2) = \psi_a(r_1) \psi_b(r_2) \quad [۹.۵]$$

البته، این فرض یعنی اینکه می‌توانیم ذرات را جدا از هم بگیریم - در غیر اینصورت بی‌معنی است ادعا کنیم که شماره ۱ در حالت ψ_a و شماره ۲ در حالت ψ_b قرار دارد، همه آنچه می‌توانیم بگوییم این است که یکی از آنها در حالت ψ_a و دیگری در حالت ψ_b قرار دارد، اما نمی‌دانیم کدام ذره در کدام حالت قرار دارد. اگر بحثمان درباره مکانیک کلاسیک می‌بود، این اعتراض غیر منطقی به شمار می‌رفت: از نظر اصولی، همیشه می‌توانید ذرات را از هم تمیز دهید - کافی است یکی از آنها را قرمز و دیگری را آبی کرده یا آنها را با یک شماره شناسایی از یکدیگر مشخص کرده یا چند کارآگاه خصوصی استخدام کنید تا آنها را تحت نظر بگیرند. با این حال در مکانیک کوانتومی اوضاع از بیخ و بن با این حکایت فرق می‌کند: نمی‌توانید الکترون را قرمز کرده یا به آن برچسبی بزنید و حتی مشاهدات یک کارآگاه هم بلافاصله و بی‌برو برگرد حالت آنرا تغییر داده و باعث می‌شود تردیده‌ها نسبت به اینکه نکند این دو ذره جایشان با هم عوض شده باشد را بالا می‌برد. واقعیت این است که تمام الکترون‌ها به غایت با هم یکسانند، به نحوی که هیچ دو شیء کلاسیکی نمی‌توانند تا این حد به هم شبیه باشند. این یکسانی صرفا از آن رو نیست که مثلا برحسب اتفاق نمی‌شود گفت کدام

^۲ تاکید می‌کنم این درست نیست که هر تابع موج دو ذره‌ای حاصلضرب توابع موج تک ذره‌ای باشد. یکجور به اصطلاح حالت‌های در هم تافته وجود دارند که نمی‌توان آنها را به این شکل تجزیه کرد. با این وجود: اگر ذره ۱ در حالت a و ذره ۲ در حالت b باشد، در آنصورت حالت دو ذره برابر است با یک حاصلضرب. می‌دانم به چه چیز فکر می‌کنید: «چطور ممکن است ذره ۱ در یک حالت و ذره ۲ هم در یک حالت دیگر باشد؟» مثال کلاسیکی این وضعیت پیکربندی اسپن تکتابی است (رابطه ۱۷۸.۴) - نمی‌توانم حالت ذره ۱ را به خودی خود به شما بگویم زیرا این ذره با حالت ذره ۲ «درهم تافته» شده است (واژه‌ای که مورد علاقه شروودینگر بود). اگر ۲ را اندازه بگیریم و آنرا در حالت اسپین بالا بباییم، آنگاه ۱ در حالت اسپین پائین خواهد بود، اما اگر ۲ در حالت اسپین پائین باشد آنوقت ۱ در حالت اسپین بالا خواهد بود.

الکترون کدام است؛ خداوند هم نمی‌داند کدام به کدام است، زیرا اساسا هیچ چیزی به عنوان «این» الکترون یا «آن» الکترون وجود ندارد؛ همه آنچه به نحوی معقول می‌توان اظهار کرد عبارت است از «یک» الکترون.

مکانیک کوانتومی به گونه‌ای عالی وجود ذراتی که اصولا غیر قابل تشخیص از یکدیگر هستند را تعدیل کرده و تبیین می‌کند: ما صرفا تابع موجی می‌سازیم که هیچ تعهدی در بیان اینکه کدام ذره در کدام حالت است ندارد. در حقیقت دو راه برای این کار وجود دارد:

$$\psi_{\pm}(r_1, r_2) = A [\psi_a(r_1)\psi_b(r_2) \pm \psi_b(r_1)\psi_a(r_2)] \quad [10.5]$$

به این ترتیب نظریه دو نوع ذره یکسان را جایز می‌شمارد: **بوزون‌ها** که از علامت مثبت برای آنها استفاده می‌کنیم و **فرمیون‌ها** که برای آنها علامت منفی را به کار می‌بریم. فوتون‌ها و مزون‌ها، بوزون هستند؛ پروتون‌ها و الکترون‌ها، فرمیون هستند. همچنین اینگونه است که

$$\left. \begin{array}{l} \text{تمام ذرات با عدد اسپین صحیح بوزون هستند؛} \\ \text{تمام ذرات با عدد اسپین نیم صحیح فرمیون هستند} \end{array} \right\} \quad [11.5]$$

ارتباط میان اسپین و علم آمار (همانطور که خواهیم دید، بوزون‌ها و فرمیون‌ها ویژگیهای آماری کاملا متفاوتی دارند) را می‌توان در مکانیک کوانتومی نسبیتی ثابت کرد؛ در نظریه غیر نسبیتی باید آنرا یک اصل موضوعه دانست.^۳

به ویژه، می‌توان چنین نتیجه گرفت که دو فرمیون یکسان (برای مثال، دو الکترون) نمی‌توانند حالت یکسانی را اشغال کنند. چون که اگر $\psi_a = \psi_b$ ، در آنصورت

$$\psi_{-}(r_1, r_2) = A [\psi_a(r_1)\psi_b(r_2) - \psi_b(r_1)\psi_a(r_2)] = 0$$

^۳ عجیب و باورنکردنی است که نسبت باید ربطی به این قضیه داشته باشد، برای همین اخیرا بحث‌های متعددی در اینباره صورت گرفته که آیا ممکن است بتوان ارتباط میان اسپین و علم آمار را از راه‌های (ساده‌تر) دیگر هم اثبات کرد. به عنوان مثال، مقاله Robert C. Hilborn در *Am. J. Phys.* 63, 298 (1995) و نیز کتاب *Pauli and Spin-Statistics Theorem* اثر Ian Duck و E. C. G. Sudarshan از انتشارات World Scientific، سنگاپور (۱۹۹۷) را مطالعه کنید.

که در نتیجه هیچ تابع موجی باقی نمی‌ماند.^۴ این همان اصل طرد پائولی معروف است. این واقعیت (همچنانکه احتمالاً آنرا باور خواهید کرد) فرض خلق الساعه شگفت‌آوری نیست که تنها برای الکترون به کار رود، بلکه در عوض پیامدی از قواعد ساخت توابع موج دو ذره‌ای است که در مورد تمام فرمیون‌ها یکسان به کار می‌رود.

در راستای بحثمان، فرض می‌کنم یک ذره در حالت ψ_α و ذره دیگر در حالت ψ_β باشد، اما روش عمومی‌تر (و پیچیده‌تری) هم برای بیان این مساله وجود دارد. بیا بیاید عملگر تبادلی P را تعریف کنیم که دو ذره را با هم معاوضه می‌کند:

$$Pf(r_1, r_2) = f(r_2, r_1) \quad [12.5]$$

واضح است که $P^2 = 1$ بوده (آنرا برای خودتان اثبات کنید) و از اینرو ویژه مقادیر P عبارتند از ± 1 . پس حالا، اگر دو ذره یکسان باشند، هامیلتونی باید یکجور روی آنها اثر کند: $m_1 = m_2$ و $V(r_1, r_2) = V(r_2, r_1)$ می‌توان اینطور نتیجه گرفت که P و H مشاهده‌پذیرهای سازگار هستند، یعنی

$$[P, H] = 0 \quad [13.5]$$

و از این جا می‌توانیم مجموعه توابعی که به طور همزمان ویژه حالت‌های هر دو هستند را بیابیم. به عبارت دیگر، می‌توانیم پاسخ‌های معادله شرودینگری را بدست آوریم که تحت عمل تبادل، یا متقارن (با ویژه مقدار +1) هستند یا نامتقارن (با ویژه مقدار -1):

$$\psi(r_1, r_2) = \pm \psi(r_2, r_1) \quad [14.5]$$

به علاوه، اگر سامانه‌ای ابتدا در چنین حالتی قرار داشته باشد، در همین حالت باقی می‌ماند. قانون جدید (که من آنرا شرط متقارن‌سازی می‌نامم) این است که برای ذرات یکسان تابع موج نه تنها

^۴ فراموش نکنید، من هنوز هم دارم اسپین را نادیده می‌گیرم - اگر اینطوری راحت نیستید (هر چه باشد، یک فرمیون بی اسپین در بیان یکجور تناقض است)، فرض را بر این بگذارید که در حالت اسپینی یکسانی قرار دارند. کمی بعد اسپین را صراحتاً به مساله اضافه می‌کنم.

مجاز است در رابطه ۱۴.۵ صدق کند، بلکه الزاما باید با علامت مثبت برای بوزون ها و علامت منفی برای فرمیون ها شرایط آنرا برآورده سازد.^۵ این بیانی عمومی است که رابطه ۱۰.۵ حالت خاصی از آن محسوب می شود.

مثال ۱.۵ فرض کنید دو ذره در اختیار داریم که با هم برهم کنشی ندارند - از میان یکدیگر عبور می کنند ... فکرش را نکنید که چطور چنین چیزی در عمل رخ می دهد - هر دو جرم m داشته و در چاه مربعی نامتناهی (بخش ۲.۲) قرار دارند. حالت های تک ذره ای از این قرارند

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right), E_n = n^2 K$$

(که در آن داریم $K \equiv \pi^2 \hbar^2 / 2ma^2$). چنانچه ذرات غیر قابل تفکیک از یکدیگر باشند بطوریکه #1 در حالت n_1 و #2 در حالت n_2 باشد، تابع موج ترکیبی یک حاصلضرب ساده است:

$$\psi_{n_1 n_2}(x_1, x_2) = \psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2), E_{n_1 n_2} = (n_1^2 + n_2^2) K$$

مثلا، حالت پایه عبارت است از

$$\psi_{11} = \frac{2}{a} \sin(\pi x_1 / a) \sin(\pi x_2 / a), E_{11} = 2K$$

نخستین حالت برانگیخته تبهنگی دو گانه دارد:

^۵ گاهی اینطور به فکر می رسد که شرط (بایستگی) مقارن سازی (رابطه ۱۴.۵) چیز جدیدی نیست - برای آنکه این قانون الزامی است ناشی از این واقعیت که P و H با هم جابه جا می شوند. اما اشتباه است: تجسم سامانه ای از دو ذره غیر قابل تفکیک از یکدیگر کاملا امکان پذیر است (به فرض، یک الکترون و یک پوزیترون) که برای آن هامیلتونی مقارن باشد، حال آنکه هیچ الزامی در کار نیست که تابع موج مقارن (یا نامقارن) باشد. اما ذرات یکسان باید حالت های مقارن و پاد مقارنی را اشغال کنند که این یک قانون بنیادی کاملا جدید است - به طور منطقی، در حد معمول با معادله شرودینگر و تعبیر آماری. البته، الزامی به وجود چنین چیزهایی به عنوان ذرات یکسان نبود؛ می شد اینطور باشد که هر تک ذره در طبیعت به وضوح از ذره دیگر تفکیک پذیر باشد. مکانیک کوانتومی وجود ذرات یکسان را امکان پذیر می سازد و طبیعت (با آن تبلی اش) به سرعت از این فرصت استفاده می کند. (با این حال شکایتی ندارم -

$$\psi_{12} = \frac{2}{a} \sin(\pi x_1/a) \sin(2\pi x_2/a), E_{12} = 5K$$

$$\psi_{21} = \frac{2}{a} \sin(2\pi x_1/a) \sin(\pi x_2/a), E_{21} = 5K$$

و الی آخر. اگر این دو ذره دو بوزون یکسان باشند، حالت پایه بدون تغییر می‌ماند، اما نخستین برانگیختگی غیر تبهگن می‌شود:

$$\frac{\sqrt{2}}{a} [\sin(\pi x_1/a) \sin(2\pi x_2/a) + \sin(2\pi x_1/a) \sin(\pi x_2/a)]$$

(که هنوز انرژی آن $5K$ است). همچنین اگر این دو ذره یکسان فرمیون باشند، هیچ حالتی با انرژی $2K$ وجود ندارد؛ حالت پایه عبارت است از

$$\frac{\sqrt{2}}{a} [\sin(\pi x_1/a) \sin(2\pi x_2/a) - \sin(2\pi x_1/a) \sin(\pi x_2/a)]$$

و انرژی هم $5K$ است.

مساله ۴.۵*

(الف) اگر ψ_a و ψ_b متعامد باشند، ثابت A در رابطه ۱۰.۵ چیست؟

(ب) اگر $\psi_a = \psi_b$ باشد (و بهنجار هم شده باشد)، A چیست؟ (البته این حالت تنها برای بوزون‌ها اتفاق می‌افتد).

مساله ۵.۵

(الف) هامیلتونی دو ذره یکسان که با هم برهم‌کنش نداشته و در چاه مربعی نامتناهی قرار دارند را بنویسید. درستی این مطلب را ثابت کنید که حالت پایه فرمیون که در مثال آمده یک ویژه تابع H با ویژه مقدار مناسب است.

(ب) دو حالت برانگیخته بعدی را بدست آورید (علاوه بر آنهایی که در مثال آمده‌اند) - توابع موج و انرژی‌ها - برای هر یک از سه حالت (بوزون‌ها و فرمیون‌های یکسان غیر قابل تفکیک).

۲.۱.۵ نبروهای تبدلی

برای آنکه آنچه بایستگی مقارن سازی دقیقاً انجام می دهد را کمی معنی دارتر کنم، یک مثال ساده یک بعدی را حل می کنم. فرض کنید یک ذره در حالت $\psi_a(x)$ و ذره دیگر در حالت $\psi_b(x)$ قرار داشته و نیز اینکه این دو حالت متعامد و بهنجار شده هستند. اگر دو ذره ما غیر قابل تفکیک از همدیگر بوده و شماره 1 برای ذره ای باشد که در حالت ψ_a قرار دارد در آنصورت تابع موج ترکیبی عبارت است از

$$\psi(x_1, x_2) = \psi_a(x_1)\psi_b(x_2) \quad [15.5]$$

اگر آنها بوزن های یکسان باشند، تابع موج مرکب برابر است با (مساله ۴.۵ را برای بهنجارش ببینید)

$$\psi_+(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) + \psi_b(x_1)\psi_a(x_2)] \quad [16.5]$$

و اگر فرمیون های یکسان باشند داریم

$$\psi_-(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) - \psi_b(x_1)\psi_a(x_2)] \quad [17.5]$$

بباید مقدار چشمداشتی مربع فاصله تفکیک میان این دو ذره را محاسبه کنیم

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \langle x_1^2 \rangle + \langle x_2^2 \rangle - 2\langle x_1 x_2 \rangle \quad [18.5]$$

حالت ۱: ذرات قابل تفکیک از یکدیگر. برای تابع موج رابطه ۱۵.۵، داریم

$$\langle x_1^2 \rangle = \int x_1^2 |\psi_a(x_1)|^2 dx_1 \int |\psi_b(x_2)|^2 dx_2 = \langle x^2 \rangle_a$$

(مقدار چشمداشتی x^2 در حالت تک ذره ای ψ_a)

$$\langle x_2^2 \rangle = \int |\psi_a(x_1)|^2 dx_1 \int x_2^2 |\psi_b(x_2)|^2 dx_2 = \langle x^2 \rangle_b$$

و

$$\langle x_1 x_2 \rangle = \int x_1 |\psi(x_1)|^2 dx_1 \int x_2 |\psi(x_2)|^2 dx_2 = \langle x \rangle_a \langle x \rangle_b$$

بنابراین، در این حالت

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle_d = \langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b - 2\langle x \rangle_a \langle x \rangle_b \quad [۱۹.۵]$$

(ضمناً، اگر ذره ۱ در حالت ψ_b و ذره ۲ در حالت ψ_a می‌بودند، جواب طبیعتاً همین می‌شد).

حالت ۲: ذرات یکسان. برای توابع موج در رابطه‌های ۱۶.۵ و ۱۷.۵ داریم

$$\begin{aligned} \langle x_1^2 \rangle &= \frac{1}{2} \left[\int x_1^2 |\psi_a(x_1)|^2 dx_1 \int |\psi_b(x_2)|^2 dx_2 \right. \\ &\quad + \int x_1^2 |\psi_b(x_1)|^2 dx_1 \int |\psi_a(x_2)|^2 dx_2 \\ &\quad \pm \int x_1^2 \psi_a(x_1)^* \psi_b(x_1) dx_1 \int \psi_b(x_2)^* \psi_a(x_2) dx_2 \\ &\quad \left. \pm \int x_1^2 \psi_b(x_1)^* \psi_a(x_1) dx_1 \int \psi_a(x_2)^* \psi_b(x_2) dx_2 \right] \\ &= \frac{1}{2} [\langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b \pm 0 \pm 0] = \frac{1}{2} (\langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b) \end{aligned}$$

به همین شکل

$$\langle x_2^2 \rangle = \frac{1}{2} (\langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b)$$

طبیعتاً، $\langle x_1^2 \rangle = \langle x_2^2 \rangle$ است، (نظر به اینکه نمی‌توانید آنها را از هم جدا کنید) اما

$$\begin{aligned} \langle x_1 x_2 \rangle &= \frac{1}{2} \left[\int x_1 |\psi_a(x_1)|^2 dx_1 \int x_2 |\psi_b(x_2)|^2 dx_2 \right. \\ &\quad + \int x_1 |\psi_b(x_1)|^2 dx_1 \int x_2 |\psi_a(x_2)|^2 dx_2 \\ &\quad \pm \int x_1 \psi_a(x_1)^* \psi_b(x_1) dx_1 \int x_2 \psi_b(x_2)^* \psi_a(x_2) dx_2 \\ &\quad \left. \pm \int x_1 \psi_b(x_1)^* \psi_a(x_1) dx_1 \int x_2 \psi_a(x_2)^* \psi_b(x_2) dx_2 \right] \\ &= \frac{1}{2} [\langle x \rangle_a \langle x \rangle_b + \langle x \rangle_b \langle x \rangle_a \pm \langle x \rangle_{ab} \langle x \rangle_{ba} \pm \langle x \rangle_{ba} \langle x \rangle_{ab}] \\ &= \langle x \rangle_a \langle x \rangle_b \pm |\langle x \rangle_{ab}|^2 \end{aligned}$$

که در آن

$$\langle x \rangle_{ab} \equiv \int x \psi_a(x)^* \psi_b(x) dx \quad [20.5]$$

بدیهی است که

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle_{\pm} = \langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b - 2\langle x \rangle_a \langle x \rangle_b \mp 2|\langle x \rangle_{ab}|^2 \quad [21.5]$$

با مقایسه روابط ۱۹.۵ و ۲۱.۵، ملاحظه می‌کنیم که اختلافی در جمله آخر وجود دارد

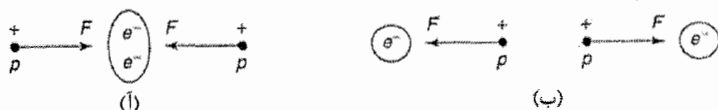
$$\langle (\Delta x)^2 \rangle_{\pm} = \langle (\Delta x)^2 \rangle_a \mp 2|\langle x \rangle_{ab}|^2 \quad [22.5]$$

نسبت به ذرات قابل تفکیک از یکدیگر، بوزون‌های یکسان (علامت‌های بالا) به نوعی می‌خواهند به یکدیگر نزدیک‌تر باشند در حالیکه فرمیون‌های یکسان (علامت‌های پایین) تا اندازه‌ای مایل‌اند از یکدیگر دورتر باشند. دقت کنید که $\langle x \rangle_{ab}$ حذف می‌شود مگر آنکه دو تابع موج در واقع با هم همپوشانی کنند (اگر $\psi_a(x)$ در جاهایی که $\psi_b(x)$ صفر نیست، صفر باشد، خود انتگرال رابطه ۲۰.۵ هم صفر می‌شود). به این ترتیب چنانچه ψ_a نمایشگر الکترون یک اتم در شیکاگو بوده و ψ_b هم نمایشگر الکترون یک اتم در سیاتل، هیچ فرقی نمی‌کند که آیا تابع موج را یاد متقارن می‌کنید یا نمی‌کنید. بنابراین، در قالب یک مساله تجربی، ایرادی ندارد اگر وانمود کنید که الکترون‌ها با توابع موج غیر همپوشان قابل تفکیک از یکدیگر هستند. (قدر مسلم، این تنها چیزی است که فیزیکدان‌ها و شیمیدان‌ها را قادر به پیشرفت و ادامه مسیر تحقیقاتشان می‌سازد، چرا که اصولاً هر الکترونی در عالم از طریق یاد متقارن‌سازی توابع موج، به تمام الکترون‌های دیگر متصل است و اگر این قضیه جداً صحت داشته باشد، دیگر نمی‌توانید درباره یک تک الکترون صحبت کنید تا وقتی آماده پرداختن به همه آنها باشید.

حالت جالب توجه زمانی است که مقداری همپوشانی توابع موج وجود داشته باشد. سامانه طوری رفتار می‌کند انگار یکجور «نیروی جاذبه» بین بوزون‌های یکسان آنها را به سمت یکدیگر هل می‌دهد و یک «نیروی دافعه» هم فرمیون‌های یکسان را از هم دور می‌کند. ما آن را نیروی تبدالی می‌نامیم، اگرچه به واقع اصلاً یک نیرو نیست. هیچ عامل فیزیکی برای هل دادن ذرات در کار

نیست؛ به بیان دقیقتر، این یک پیامد کاملاً هندسی از بایستگی متقارن سازی است. این نیرو همچنین پدیده‌ای مطلقاً کوانتومی است که هیچ نظیر کلاسیکی ندارد. با این وجود، حاوی پیامدهای بسیار عمیق و بنیادینی است. برای مثال، مولکول هیدروژن (H_2) را تصور کنید. به بیان کلی، حالت پایه آن متشکل است از یک الکترون در حالت پایه اتمی (رابطه ۸۰.۴) که روی هسته ۱ متمرکز است و یک الکترون در حالت پایه اتمی که روی هسته ۲ متمرکز است. اگر الکترون‌ها بوزون بودند، بایستگی متقارن سازی (یا اگر دوست دارید همان نیروی تبادلی) تمایل داشت الکترون‌ها را در حوالی میانه فاصله بین دو پروتون (شکل ۱.۵ آ) متمرکز سازد که در نتیجه، انبارش بار منفی پروتون‌ها را به طرف داخل جذب کرده و منجر به بروز پیوند کووالانسی^۶ می‌شد که مولکول‌ها را در کنار یکدیگر نگاه می‌دارد. متأسفانه، الکترون‌ها بوزون نیستند، آنها فرمیون هستند و این بدان معنی است که تمرکز بار منفی در واقع باید به جناحین منتقل شده (شکل ۶.۱ ب) و مولکول را متلاشی کند!

اما دست نگهدارید! ما اسپین را در نظر نگرفته بودیم. حالت کامل الکترون فقط شامل تابع موج مکانی آن که نیست، یک اسپینور هم وجود دارد که سمگیری اسپین آنرا مشخص می‌کند^۷:



شکل ۱.۵: نموداری تصویری از پیوند کووالانسی: (آ) پیکربندی متقارن نیروی جاذبه تولید می‌کند؛ (ب) پیکربندی پادمتقارن نیروی دافعه تولید می‌کند.

^۶ یک پیوند کووالانس زمانی بوجود می‌آید که الکترون‌های به اشتراک گذاشته شده بین هسته‌ها دور هم جمع شوند و اتم‌ها را به سمت یکدیگر بکشند. لازم نیست دو الکترون برای تشکیل این پیوند وجود داشته باشد - در بخش ۳.۷ با پیوند کووالانسی مواجه می‌شویم که فقط یک الکترون دارد.

^۷ در غیاب جفت‌شدگی اسپین و مکان، مختار بودیم فرض کنیم که حالت از نظر اسپینی و مختصات فضایی تفکیک‌پذیر است. این دقیقاً حاکمی از آن است که احتمال بدست آوردن اسپین بالا مستقل از مکان ذره است. در حضور جفت‌شدگی، حالت عمومی شکل یک ترکیب خطی به این صورت را به خود می‌گیرد:

$$\psi_+(\mathbf{r})\chi_+ + \psi_-(\mathbf{r})\chi_-$$

مانند مساله ۵۵.۴.

$$\psi(r)\chi(s)$$

هنگامیکه حالت دو الکترونی را با هم بیان می‌کنیم، این کل اثرات است، نه آنکه تنها بخش فضایی را در نظر گرفته باشیم؛ کلی که باید نسبت به تبادل پاد متقارن باشد. اکنون نگاه اجمالی عقبگردی به حالت‌های اسپینی مرکب (روابط ۱۷۷.۴ و ۱۷۸.۴) نشان از آن دارد که ترکیب تکتایی پاد متقارن است (و در نتیجه باید به یک تابع فضایی متقارن وصل باشد)، در حالیکه سه حالت سه تایی همگی متقارن هستند (و نیازمند تابع فضایی پاد متقارن). پس می‌توان اینطور نتیجه گرفت که حالت تکتایی باید به پیوند منجر شده و حالت سه‌تایی به پادپیوند. درست مطابق انتظار، شیمی‌دان‌ها به ما می‌گویند که پیوند کووالانس مستلزم دو الکترون برای اشغال حالت تکتایی با اسپین کل صفر است.^۸

مساله ۶.۵* دو ذره بدون برهم‌کنش را در نظر بگیرید که جرم هر کدام m بوده و در چاه مربعی نامتناهی قرار دارند. اگر یکی از آنها در حالت ψ_n (رابطه ۲۸.۲) و دیگری در حالت ψ_m باشد که نسبت به اولی متعامد است، مقدار $\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle$ را با این فرض که (الف) آنها ذرات تفکیک‌ناپذیری هستند و (ب) آنها بوزون‌های یکسانی هستند و (پ) آنها فرمیون‌های یکسانی هستند محاسبه کنید.

مساله ۷.۵ فرض کنید سه ذره در اختیار داشتید، یکی در حالت $\psi_a(x)$ ، یکی در حالت $\psi_b(x)$ و دیگری در حالت $\psi_c(x)$. با فرض آنکه این سه حالت متعامدند، حالت‌های سه ذره‌ای (مشابه رابطه‌های ۱۵.۵، ۱۶.۵ و ۱۷.۵) را درست کنید به طوریکه نمایانگر (الف) ذرات تفکیک‌پذیر، (ب) بوزون‌های یکسان و (پ) فرمیون‌های یکسان باشند. به خاطر داشته باشید که (ب) باید تحت هر جفت معاوضه‌ای از ذرات کاملاً متقارن بوده و (پ) باید (در همان حال) کاملاً پاد متقارن باشد. توضیح: ترفند بامزه‌ای برای درست کردن توابع موج کاملاً پاد متقارن

^۸ به زبان خودمانی، اغلب گفته می‌شود که الکترون‌ها «پاد هم راستا» هستند (یکی با اسپین بالا و دیگری با اسپین پایین). این یکجور ساده سازی بیش از حد است چون همین را برای مورد $m = 0$ از حالت سه تایی هم می‌توان

وجود دارد: دترمینان اسلاتر را تشکیل دهید که ردیف اول آن $\psi_a(x_1)$ و $\psi_b(x_1)$ و $\psi_c(x_1)$ ، ردیف دوم آن $\psi_a(x_2)$ و $\psi_b(x_2)$ و $\psi_c(x_2)$ و همین‌طور تا آخر است (این ترفند برای تعدادی از ذرات به کار می‌آید).

۲.۵ اتم‌ها

یک اتم طبیعی با عدد اتمی Z متشکل از هسته‌ای سنگین با بار الکتریکی Ze است که توسط Z الکترون (هر یک به جرم m و بار $-e$) احاطه شده است. هامیلتونی این سامانه از این قرار است^۹

$$H = \sum_{j=1}^Z \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_j^2 - \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{Ze^2}{r_j} \right\} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \sum_{j \neq k}^Z \frac{e^2}{|r_j - r_k|} \quad [24.5]$$

عبارت داخل آکولاد نمایشگر انرژی جنبشی به علاوه پتانسیل Z امین الکترون در میدان الکتریکی هسته است؛ حاصلجمع دوم (که روی تمام مقادیر j و k به جز $j = k$ گرفته می‌شود) انرژی مربوط به دافعه متقابل الکترون‌هاست (عامل $1/2$ در مقابل آن تصحیحی است برگرفته از این نکته که این حاصلجمع هر جفت را دو بار حساب می‌کند). مساله، حل معادله شرودینگر است.

$$H\psi = E\psi \quad [25.5]$$

(برای تابع موج $(\psi(r_1, r_2, \dots, r_Z))$ با این همه، چون الکترون‌ها فرمیون‌های یکسان هستند تمام جواب‌ها قابل قبول نیستند؛ تنها آنهایی قابل قبول اند که برای آنها حالت کامل (مکان و اسپین)

$$\psi(r_1, r_2, \dots, r_Z) \chi(s_1, s_2, \dots, s_Z)$$

^۹فرض می‌کنم هسته بی حرکت است. ترفند به حساب آوردن حرکت هسته از راه استفاده از جرم کاهیده (مساله ۱.۵) تنها در مورد مساله دو جسمی به کار می‌آید - هیدروژن؛ خوشبختانه، هسته آنقدر سنگین‌تر از الکترون‌ها است که تصحیح حتی در آن حالت نیز بسیار کوچک است (مساله ۲.۵ الف را ببینید) و در مورد اتم‌ها از این هم کوچک‌تر است. اثرات جالب توجه‌تر دیگری هم به سبب برهم‌کنش‌های مغناطیسی مرتبط با اسپین الکترون، تصحیحات نسیتی و اندازه محدود هسته وجود دارند. در فصل‌های بعدی نگاهی به این موارد می‌اندازیم، اما همه آنها تصحیحات بسیار کوچکی برای اتم «کاملاً کولنی» هستند که با رابطه ۲۴.۵ توصیف می‌شود.

متاسفانه، معادله شرودینگر با هامیلتونی رابطه ۲۴.۵ را نمی‌توان به طور دقیق حل کرد (دست کم تا امروز که نشده) مگر برای ساده‌ترین حالت، $Z = 1$ (هیدروژن). در عمل، باید دست به دامن روش‌های تقریب‌زنی پیچیده شد. بعضی از اینها را در بخش دوم کتاب دقیقاً بررسی خواهیم کرد؛ فعلاً فقط قصد دارم برخی از ویژگیهای کیفی این جواب‌ها را ترسیم کنم که از نادیده انگاشتن یکسره جمله دافعه‌ای الکترون بدست می‌آیند. در بخش ۱.۲.۵ حالت‌های پایه و اولین برانگیختگی هلیوم و در بخش ۲.۲.۵ نیز حالت‌های پایه اتم‌های بالاتر را بررسی خواهیم کرد.

مساله ۸.۵ فرض کنید می‌توانید جواب $(\psi(r_1, r_2, \dots, r_Z))$ معادله شرودینگر (رابطه ۲۵.۵) را به ازای هامیلتونی رابطه ۲۴.۵ بدست آورید. توصیف کنید چگونه یک تابع کاملاً متقارن و یک تابع کاملاً پادمتقارن می‌سازید که با همان انرژی در معادله شرودینگر هم صدق کنند.

۱.۲.۵ هلیوم

پس از هیدروژن، ساده‌ترین اتم هلیوم است ($Z = 2$). هامیلتونی

$$H = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2e^2}{r_1} \right\} + \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2e^2}{r_2} \right\} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} \quad [27.5]$$

تشکیل شده از هامیلتونی هیدروژنی (با بار هسته $2e$)، یکی برای الکترون ۱ و یکی برای الکترون ۲ که روی هم با جمله آخر دافعه دو الکترون را توصیف می‌کنند. این جمله آخر است که باعث بروز تمام مشکلات می‌شود. اگر کاملاً از آن صرف‌نظر کنید، معادله شرودینگر تفکیک می‌شود و آنوقت است که می‌توان جواب‌ها را به صورت حاصلضرب توابع موج هیدروژنی نوشت:

$$\psi(r_1, r_2) = \psi_{nlm}(r_1) \psi_{n'l'm'}(r_2) \quad [28.5]$$

لیکن با نصف شعاع بور (رابطه ۷۲.۴) و چهار برابر انرژی‌های بور (رابطه ۷۰.۴) - اگر متوجه دلیل آن نمی‌شوید، بازگردید به مساله ۱۶.۴ - انرژی کل می‌شود

$$E = 4(E_n + E_{n'}) \quad [29.5]$$

که در آن $E_n = -13.6 \text{ eV}/n^2$ است. به ویژه، حالت پایه بدین ترتیب است

$$\psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{100}(\mathbf{r}_1)\psi_{100}(\mathbf{r}_2) = \frac{8}{\pi a^3} e^{-2(r_1+r_2)/a} \quad [۳۰.۵]$$

(رابطه ۸۰.۴ را ببینید) و انرژی آن هم بدین شکل است

$$E_0 = 8(-13.6 \text{ eV}) = -109 \text{ eV} \quad [۳۱.۵]$$

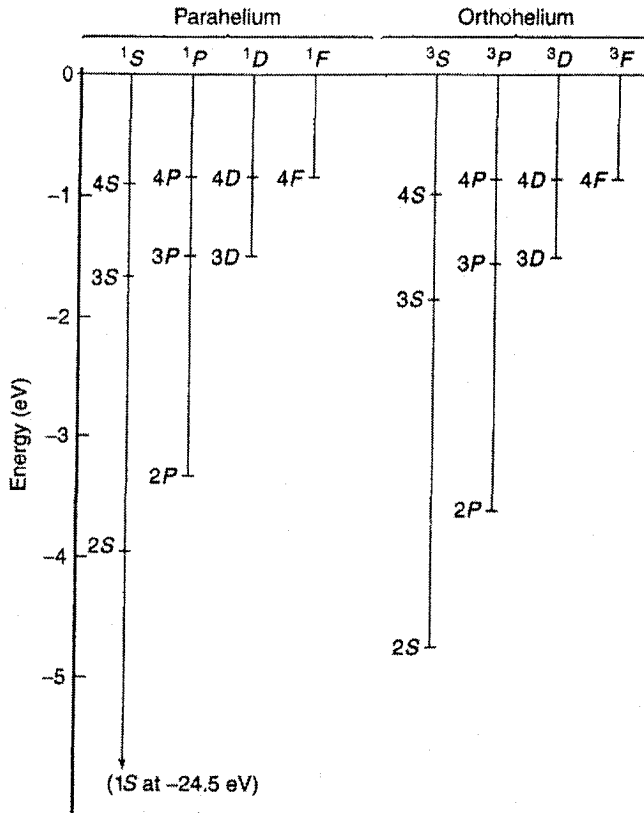
چون ψ_0 تابعی متقارن است، حالت اسپین باید پادمتقارن باشد، از این رو حالت پایه هلیوم یک پیکربندی تکتایی است که در آن اسپین‌ها «غیر هم راستا» هستند. حالت پایه حقیقی هلیوم در واقع یک تکتایی است، اما انرژی بدست آمده تجربی برابر است با -78.975 eV ، پس سازگاری اصلا خوب نیست. اما چندان تعجبی هم ندارد: ما دافعه الکترون را در نظر نگرفتیم که بی شک سهم کوچکی نیست. این مقدار به وضوح مثبت است (مساله ۲۷.۵ را ببینید) که تسلی بخش است - اینطور که پیداست انرژی کل را از -109 eV به -79 eV می‌آورد (مساله ۱۱.۵ را ببینید).

حالت‌های برانگیخته هلیوم متشکل‌اند از یک الکترون در حالت پایه هیدروژنی و یک الکترون دیگر که در حالت برانگیخته قرار دارد:

$$\psi_{nlm}\psi_{100} \quad [۳۲.۵]$$

(اگر سعی کنید هر دو الکترون را در حالت برانگیخته قرار دهید، یکی از آنها بلافاصله به حالت پایه افتاده و انرژی کافی برای ضربه زدن به آن دیگری درون پیوستار ($E > 0$) را آزاد کرده و برایتان یون هلیوم (He^+) و الکترون آزاد بر جای می‌گذارد. حاصل این فرایند به خودی خود سامانه جالب توجهی است - مساله ۸.۵ را ببینید - اما فعلا موضوع بحث ما نیست.) می‌توانیم به روال معمول، از روی این هر دو ترکیب متقارن و پاد متقارن را بسازیم (رابطه ۱۰.۵)؛ اولی با یک پیکربندی اسپینی پادمتقارن همراه است (تکتایی) که آنها را هلیوم پارا می‌نامند، در حالیکه دومی مستلزم یک پیکربندی اسپینی متقارن است (سه تایی) که آنها را هلیوم اورتو می‌نامند. حالت پایه لزوماً هلیوم پارا است؛ حالت‌های برانگیخته به هر دو شکل وجود دارند. چون حالت فضایی متقارن الکترون‌ها را در فاصله نزدیکتری نسبت به همدیگر نگاه می‌دارد (همانطور که در بخش ۲۰.۵ دریافتیم)، انتظار انرژی برهم‌کنشی بالاتری را در هلیوم پارا داریم و در واقع به طور

تجربی هم تأیید شده که حالت‌های پارا هلیوم تا اندازه‌ای انرژی بالاتری نسبت به هم‌تاهای هلیوم ارتوی خود دارند (شکل ۲.۵ را ببینید).



شکل ۲.۵: نمودار سطح انرژی هلیوم (نمادگذاری در بخش ۲.۲.۵ توضیح داده شده است). توجه کنید که انرژی‌های هلیوم پارا بالاتر از هم‌تاهای هلیوم ارتوشان است. مقادیر عددی روی مقیاس عمودی نسبت به حالت پایه هلیوم یونیزه (He^+) هستند: $4 \times (-13.6 \text{ eV}) = -54.4 \text{ eV}$ ؛ برای بدست آوردن انرژی کل، 54.4 eV را از آن کم کنید.

مساله ۹.۵

(الف) فرض کنید هر دو الکترون یک اتم هلیوم را در حالت $n = 2$ قرار داده‌اید؛ انرژی الکترون بازتابیده چقدر خواهد بود؟

(ب) (به طور کیفی) طیف یون هلیوم، He^+ ، را تشریح کنید.

مساله ۱۰.۵ (به طور کیفی) درباره آرایش سطح انرژی هلیوم (الف) اگر الکترون‌ها بوزون‌های یکسان بودند و (ب) اگر الکترون‌ها ذرات تفکیک‌پذیر (اما با همان جرم و بار) بودند بحث کنید. وانمود کنید الکترون‌ها هنوز اسپین $1/2$ دارند، پس پیکربندی‌های اسپینی عبارتند از تکتایی و سه تایی.

مساله ۱۱.۵**

(الف) مقدار $\langle (1/|r_1 - r_2|) \rangle$ را برای حالت ψ_0 (رابطه ۳۰.۵) محاسبه کنید. راهنمایی: اول انتگرال d^3r را با استفاده از مختصات کروی و قرار دادن محور قطبی در امتداد r_1 بگیرید تا آنکه

$$|r_1 - r_2| = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta_2}$$

انتگرال روی θ_2 ساده است، با این حال مراقب باشید که ریشه مثبت را بگیرید. باید انتگرال روی r_2 را به دو بخش تقسیم کنید، یکی از صفر تا r_1 و دیگری از r_1 تا بینهایت. پاسخ: $5/4a$.
 (ب) از نتیجه قسمت (الف) استفاده کرده و انرژی برهم‌کنش الکترون در حالت پایه هلیوم را تخمین بزنید. جوابتان را برحسب الکترون ولت بیان کرده و آنرا با E_0 جمع کنید (رابطه ۳۱.۵) تا تخمین صحیح‌تری از انرژی حالت پایه بدست آورید. آنرا با مقدار تجربی مقایسه کنید. (البته، کماکان مشغول کار با یک تابع موج تقریبی هستیم، پس انتظار سازگاری کامل نداشته باشید).

۲.۲.۵ جدول تناوبی

پیکربندی‌های الکترون حالت پایه برای اتم‌های سنگین‌تر را می‌توان به روشی کاملاً یکسان کنار یکدیگر قرار داد. برای تقریب اول (با نادیده گرفتن یکسره دافعه متقابل آنها)، الکترون‌های منفرد حالت‌های هیدروژنی تک ذره‌ای (n, l, m) را اشغال می‌کنند که آنها را اربیتال می‌نامند، در پتانسیل کولنی یک هسته با بار ne . چنانچه الکترون‌ها بوزون (یا ذرات تفکیک‌پذیر بودند همگی روی حالت پایه $(1, 0, 0)$ فرود آمده و دانش شیمی عملاً بی‌کار می‌شد. اما الکترون‌ها در حقیقت فرمیون‌های یکسانی هستند که تابع اصل طرد پائولی‌اند، به همین دلیل فقط دو الکترون می‌توانند یک اربیتال مشخص را اشغال کنند (یکی با اسپین بالا و دیگری با اسپین پائین - یا به بیان دقیق‌تر، در پیکربندی تکتایی). n^2 تابع موج هیدروژنی وجود دارد که همگی به ازای مقدار مشخص n انرژی یکسان E_n دارند، پس پوسته $n = 1$ فضا برای دو الکترون دارد، پوسته $n = 2$ هشت الکترون را در خود نگاه می‌دارد، $n = 3$ هجده الکترون می‌گیرد و به طور کلی n امین پوسته $2n^2$ الکترون در خود جای می‌دهد. به طور کیفی، ردیف‌های افقی در جدول تناوبی مطابقت با پر کردن هر پوسته (اگر این تمام داستان می‌بود، آنها طول‌های ۲، ۸، ۱۸، ۳۲، ۵۰ و غیره به جای ۲، ۸، ۱۸، ۱۸ و ... می‌داشتند؛ کمی بعد خواهیم دید که دافعه الکترون - الکترون نحوه شمارش را تغییر می‌دهد.

درباره هلیوم، پوسته $n = 1$ پر می‌شود، پس اتم بعدی، لیتیم ($Z = 3$)، باید یک الکترون در پوسته $n = 2$ قرار دهد. باید توجه داشت که برای $n = 2$ می‌توانیم داشته باشیم $l = 0$ یا $l = 1$ ؛ الکترون سوم کدام یک از اینها را برمی‌گزیند؟ در غیاب برهم‌کنش‌های الکترون - الکترون، هر دوی آنها انرژی یکسانی دارند (به یاد بیاورید که انرژی‌های بور به n وابسته‌اند نه l). اما اثر دافعه الکترون این است که کمترین مقدار l را ترجیح می‌دهد که دلیل آن از این قرار است: تکانه زاویه‌ای می‌خواهد الکترون را به بیرون پرتاب کند (به بیان رسمی‌تر، به ازای یک n مفروض، با افزایش l مقدار چشمداشتی r افزایش می‌یابد) و هرچه الکترون دورتر برود، الکترون‌های درونی هسته را به نحو موثرتری استتار می‌کنند (به بیان کلی، داخلی‌ترین الکترون کل بار هسته که Ze است را «می‌بیند» اما خارجی‌ترین الکترون به سختی بار موثری بزرگتر از e را می‌بیند. بنابراین درون یک

پوسته مشخص، حالت پائین‌ترین انرژی (یعنی مقیدترین الکترون) عبارت است از $l = 0$ و انرژی با افزایش l زیاد می‌شود. در نتیجه الکترون سوم در لیتیوم اربیتال $(2, 0, 0)$ را اشغال می‌کند. اتم بعدی (بریلیوم، با $Z = 4$) نیز با این حالت جور است (تنها با «اسپین متضاد») اما بور ($Z = 5$) باید از $l = 1$ استفاده کند.

اگر این مسیر را همین‌طور ادامه دهیم، به نئون ($Z = 10$) می‌رسیم که در آن نقطه پوسته $n = 2$ پر می‌شود و می‌رسیم به ردیف بعدی جدول تناوبی و شروع به اشغال کردن پوسته $n = 3$ می‌کنیم. نخست دو اتم وجود دارد (سدیم و منیزیم) که در آنها $l = 0$ صفر است و سپس شش اتم داریم که در آنها $l = 1$ است (آلومینیم تا آرگون). پس از آرگون «باید» ۱۰ اتم با $n = 3$ و $l = 2$ وجود داشته باشد، با این حال، اینبار اثر استتار آنقدر قوی است که با پوسته بعدی هم‌پوشانی می‌کند، لذا پتاسیم ($Z = 19$) و کلسیم ($Z = 20$) به عوض $n = 3$ و $l = 2$ مقادیر $n = 4$ و $l = 0$ را برمی‌گزینند. پس از آنکه به عقب می‌رویم تا کار را از $n = 3$ و $l = 2$ از سر بگیریم (از اسکاندیم تا روی) می‌رسیم به $n = 4$ و $l = 1$ (از کالیوم تا کریپتون) که در آن نقطه مجدداً پرش ناهنگامی به پوسته بعدی ($n = 5$) انجام می‌دهیم. برای جزئیات بیشتر درباره این پاد نکته پیچیده و تو در تو، به یک کتاب دلخواه درباره فیزیک اتمی مراجعه کنید.^{۱۰}

اگر در بیان فهرست نامهای منسوخ و از مد افتاده حالت‌های اتمی ناتوان بودم که [از خجالت] آب می‌شدم، چون شیمیدانها و اکثر فیزیکدانها از آن استفاده می‌کنند (و آنهايي که *Graduate Record Examination* (آزمون ورودی دوره تحصیلات تکمیلی برای اکثر دانشگاههای آمریکای شمالی و برخی دانشگاههای اروپایی که توسط موسسه *Education Testing Service* آمریکا برگزار شده و امتیاز آن در کنار آزمون *TOEFL* برای اخذ پذیرش بعضی از رشته‌ها از جمله علوم و مهندسی حائز اهمیت است - م) را برگزار می‌کنند «عاشق» اینجور چیزها هستند). به دلایلی که متخصصین طیف‌سنجی در قرن نوزدهم هم به خوبی با آنها آشنا بودند، $l = 0$ را s (حرف اول

^{۱۰} برای مثال، کتاب *Basic Physics of Atoms and Molecules* اثر U. Fano و L. Fano (نیویورک، انتشارات John Wiley & Sons، ۱۹۵۹) فصل ۱۸ یا اثر کلاسیک *Atomic Spectra and Atomic Structure* نوشته G. Hertzberg (نیویورک، انتشارات Dover، ۱۹۴۴) را ببینید.

کلمه *Sharp*، $l = 1$ را p (اول کلمه *Principal*)، $l = 2$ را d (اول کلمه *Diffuse*) و $l = 3$ را f (اول کلمه *Fundamental*) می‌نامند؛ پس از آن به نظم تخیلشان ته کشید چون این فهرست از آنجا به بعد به ترتیب حروف الفبا پیش رفت (g, h, i, \dots) ^{۱۱}. حالت یک الکترون بخصوص با جفت nl نمایش داده می‌شود که در آن n (عدد) پوسته را داده و l (حرف) تکانه زاویه‌ای مداری را مشخص می‌سازد؛ عدد کوانتومی مغناطیسی m ذکر نمی‌شود اما از یک نما برای اشاره به تعداد الکترون‌هایی که حالت مورد بررسی را اشغال کرده‌اند استفاده می‌شود. در نتیجه پیکربندی

$$[۳۳.۵] \quad (1s)^2(2s)^2(2p)^2$$

حاکی از آن است که دو الکترون در اربیتال $(1,0,0)$ ، دو الکترون در اربیتال $(2,0,0)$ و دو الکترون در یکجور ترکیب از اربیتال‌های $(2,1,1)$ ، $(2,1,-1)$ و $(2,1,0)$ وجود دارد. این همان حالت پایه اتم کربن است.

در آن مثال دو الکترون با عدد کوانتومی تکانه زاویه‌ای مداری 1 وجود داشت، لذا L عدد کوانتومی تکانه زاویه‌ای مداری کل (حرف بزرگ به جای l برای نشان دادن تکانه کل، نه فقط یک ذره) می‌تواند 2، 1 یا 0 باشد. در این بین، دو الکترون $(1s)$ در حالت تکتایی به هم قفل می‌شوند در حالیکه اسپین کل صفر است و دو الکترون $(2s)$ هم همینطور، اما دو الکترون $(2p)$ می‌توانند در پیکربندی تکتایی یا سه تایی قرار داشته باشند. پس S عدد کوانتومی اسپینی کل (باز هم حرف بزرگ، زیرا اشاره به اسپین کل است) می‌تواند 1 یا 0 باشد. معلوم است که J جمع کل (اسپینی به علاوه مداری) می‌تواند 3، 2، 1 یا 0 باشد. رسوم و تشریفاتی برای پی بردن به این اینکه این کل‌ها برای یک اتم خاص چه هستند وجود دارد (قواعد هوند). نتیجه با نماد تصویری زیر نشان داده می‌شود

$$[۳۴.۵] \quad 2s+1L_J$$

^{۱۱} به خود پوسته‌ها نیز به طور دلخواه اسامی مستعاری اختصاص می‌دهیم که (نپرسید چرا) از K شروع می‌شود: پوسته K عبارت است از $n = 1$ ، پوسته L عبارت است از $n = 2$ ، پوسته M عبارت است از $n = 3$ و همین طور تا آخر (دست کم آنها به ترتیب حروف الفبا مشخص شده)

(که در آن S و I عدد هستند اما L یک حرف است - اینبار با حرف بزرگ زیرا بحثمان درباره کل‌ها است). حالت پایه کربن می‌شود 3P_0 : اسپین کل 1 است (3 از اینجا می‌آید)، تکانه زاویه‌ای مداری کل هم 1 است (P از اینجا می‌آید) و جمع کل تکانه زاویه‌ای صفر است (0 از اینجا می‌آید). در جدول ۱.۵ پیکربندی‌های مجزا و تکانه‌های زاویه‌ای کل (با نمادگذاری به کار رفته در رابطه ۳۴.۵) برای چهار ردیف اول جدول تناوبی فهرست شده‌اند.^{۱۲}

مساله ۱۲.۵*

(الف) پیکربندی‌های الکترون (با نمادگذاری رابطه ۳۳.۵) را برای دو ردیف اول جدول تناوبی (تا نئون) محاسبه کرده و نتایج‌تان را با جدول ۱.۵ مقایسه کنید.

(ب) تکانه‌های زاویه‌ای کل متناظر با نمادگذاری رابطه ۳۴.۵ برای چهار عنصر اول را محاسبه کنید. همه امکان‌ها را برای بور، کربن و نیتروژن فهرست کنید.

مساله ۱۳.۵*

(الف) **قانون اول هوند** می‌گوید، سازگار با اصل پائولی، حالتی که بالاترین اسپین کل (S) را داراست کمترین انرژی را خواهد داشت. این قانون در مورد حالت‌های برانگیخته هلیوم چه پیش‌بینی می‌کند؟

(ب) **قانون دوم هوند** می‌گوید، به ازای یک اسپین مفروض، حالتی که بالاترین تکانه زاویه‌ای مداری (L) را دارا بوده و با پادمتقارن‌سازی کلی سازگار است، پائین‌ترین انرژی را خواهد داشت. چرا کربن $L = 2$ ندارد؟ راهنمایی: دقت کنید که «اوج نردبان» ($M_L = L$) متقارن است.

(پ) **قانون سوم هوند** می‌گوید اگر زیرپوسته (n, l) کمتر نیمه پر است، آنگاه در پائین‌ترین سطح انرژی داریم $J = |L - S|$ ؛ اگر بیش از نیمه پر است، در آن صورت $J = L + S$ کمترین انرژی را داراست. از این قانون برای رفع تناقض عنصر بور در مساله ۱۲.۵ (ب) استفاده کنید.

^{۱۲} پس از کریتون - عنصر ۳۶ - اوضاع پیچیده‌تر می‌شود (ساختار ریز شروع به ایفای نقش مهمی در ترتیب حالت‌ها می‌کند) پس اینکه جدول اینجا قطع می‌شود به خاطر نیاز به فضای بیشتر نیست.

جدول ۱.۵: پیکربندی‌های حالت پایه الکترون برای چهار ردیف اول جدول تناوبی

Z	عنصر	پیکربندی
۱	H	$1s$
۲	He	$(1s)^2$
۳	Li	$(He)(2s)$
۴	Be	$(He)(2s)^2$
۵	B	$(He)(2s)^2(2p)$
۶	C	$(He)(2s)^2(2p)^2$
۷	N	$(He)(2s)^2(2p)^3$
۸	O	$(He)(2s)^2(2p)^4$
۹	F	$(He)(2s)^2(2p)^5$
۱۰	Ne	$(He)(2s)^2(2p)^6$
۱۱	Na	$(Ne)(3s)$
۱۲	Mg	$(Ne)(3s)^2$
۱۳	Al	$(Ne)(3s)^2(3p)$
۱۴	Si	$(Ne)(3s)^2(3p)^2$
۱۵	P	$(Ne)(3s)^2(3p)^3$
۱۶	S	$(Ne)(3s)^2(3p)^4$
۱۷	Cl	$(Ne)(3s)^2(3p)^5$
۱۸	Ar	$(Ne)(3s)^2(3p)^6$
۱۹	K	$(Ar)(4s)$
۲۰	Ca	$(Ar)(4s)^2$
۲۱	Sc	$(Ar)(4s)^2(3d)$
۲۲	Ti	$(Ar)(4s)^2(3d)^2$
۲۳	V	$(Ar)(4s)^2(3d)^3$
۲۴	Cr	$(Ar)(4s)(3d)^5$
۲۵	Mn	$(Ar)(4s)^2(3d)^5$
۲۶	Fe	$(Ar)(4s)^2(3d)^6$
۲۷	Co	$(Ar)(4s)^2(3d)^7$
۲۸	Ni	$(Ar)(4s)^2(3d)^8$
۲۹	Cu	$(Ar)(4s)(3d)^{10}$
۳۰	Zn	$(Ar)(4s)^2(3d)^{10}$
۳۱	Ga	$(Ar)(4s)^2(3d)^{10}(4p)$
۳۲	Ge	$(Ar)(4s)^2(3d)^{10}(4p)^2$
۳۳	As	$(Ar)(4s)^2(3d)^{10}(4p)^3$
۳۴	Se	$(Ar)(4s)^2(3d)^{10}(4p)^4$
۳۵	Br	$(Ar)(4s)^2(3d)^{10}(4p)^5$
۳۶	Kr	$(Ar)(4s)^2(3d)^{10}(4p)^6$

(ت) از قوانین هوند و این نکته که حالت اسپینی متقارن باید با یک حالت فضایی پادمتقارن همراه باشد (و برعکس) استفاده کرده و تناقض کربن و نیتروژن در قسمت (ب) را برطرف کنید. راهنمایی: همیشه برای تشخیص تقارن یک حالت بروید به «اوج نردبان».

مساله ۱۴.۵ حالت پایه دیسپروزیوم (عنصر ۶۶ در ردیف ششم جدول تناوبی ۹ به صورت $^{51}\text{I}_8$ ذکر می شود. اعداد کوانتومی اسپینی کل، مداری کل و جمع کل آن چقدر هستند؟ بیکربندی الکترونی مناسبی برای دیسپروزیوم پیشنهاد کنید.

۳.۵ جامدات

در حالت جامد، تعدادی الکترون والانس خارجی با پیوند ضعیف در هر اتم جدا شده و در سرتاسر ماده آزادانه و بی هدف می گردند و در این وضعیت دیگر تنها در معرض میدان کولنی یک هسته «مادر» بخصوص نیستند، بلکه در عوض در معرض پتانسیلی ترکیبی از کل شبکه بلور قرار می گیرند. در این قسمت دو مدل بسیار ابتدایی را با هم بررسی می کنیم: نخست، نظریه گاز الکترونی زومرفلد که تمام نیروها (به جز مرزهای محصور کننده) را نادیده گرفته و این الکترون های سرگردان را ذرات آزادی درون یک جعبه فرض می کند (مانسته سه بعدی چاه مربعی نامتناهی)؛ و دوم، **نظریه بلوخ** است که پتانسیلی تناوبی را معرفی می کند که نشانگر جاذبه الکتریکی هسته های با بار مثبتی است که در فاصله های منظم از یکدیگر قرار گرفته اند (با این حال، کماکان دافعه الکترون - الکترون را در نظر نمی گیرد). این مدل ها چیزی بیشتر از اولین قدم های لنگان به سوی نظریه کوانتومی جامدات نیستند، اما فعلا نقش حیاتی اصل طرد پائولی در توجیه «سختی» جامدات را آشکار کرده و بینشی روشنگر رو به خصوصیات الکتریکی شایان توجه رساناها، نیمه رسانا و نارساناها بدست می دهد.

۱.۳.۵ گاز الکترون آزاد

فرض کنید شیء مورد سوال جامدی مستطیلی شکل به ابعاد l_x ، l_y و l_z بوده و تصور کنید الکترونی درون آن وجود دارد که تحت تاثیر هیچ نیرویی نیست مگر دیواره های غیر قابل نفوذ:

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0, & 0 < z < l_z \text{ و } 0 < y < l_y, 0 < x < l_x \\ \infty & \text{بقیه نقاط} \end{cases} \quad [۳۵.۵]$$

معادله شرودینگر

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = E \psi$$

در مختصات دکارتی تفکیک می‌شود: $\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$ با در نظر گرفتن آنکه

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 X}{dx^2} = E_x X, -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 Y}{dy^2} = E_y Y, -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 Z}{dz^2} = E_z Z$$

و همچنین اینکه $E = E_x + E_y + E_z$. اگر قرار دهیم

$$k_x \equiv \frac{\sqrt{2mE_x}}{\hbar}, k_y \equiv \frac{\sqrt{2mE_y}}{\hbar}, k_z \equiv \frac{\sqrt{2mE_z}}{\hbar}$$

جواب‌های عمومی را بدست می‌آوریم

$$X(x) = A_x \sin(k_x x) + B_x \cos(k_x x), Y(y) = A_y \sin(k_y y) + B_y \cos(k_y y)$$

$$Z(z) = A_z \sin(k_z z) + B_z \cos(k_z z)$$

شرایط مرزی حکم می‌کنند که $X(0) = Y(0) = Z(0) = 0$ ، لذا $B_x = B_y = B_z = 0$ وبنابراین $X(l_x) = Y(l_y) = Z(l_z) = 0$ است،

$$k_x l_x = n_x \pi, k_y l_y = n_y \pi, k_z l_z = n_z \pi \quad [۳۶.۵]$$

که در آن هر n یک عدد صحیح مثبت است:

$$n_x = 1, 2, 3, \dots, n_y = 1, 2, 3, \dots, n_z = 1, 2, 3, \dots, \quad [۳۷.۵]$$

توابع موج (پهنجار شده) عبارتند از

$$\psi_{n_x n_y n_z} = \sqrt{\frac{8}{l_x l_y l_z}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{l_x} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{l_y} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{l_z} z\right) \quad [۳۸.۵]$$

و انرژی‌های مجاز هم از این قرارند

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{l_x^2} + \frac{n_y^2}{l_y^2} + \frac{n_z^2}{l_z^2} \right) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad [۳۹.۵]$$

که در آن k بزرگی بردار موج $k = (k_x, k_y, k_z)$ است.

اگر فضایی سه بعدی با محورهای k_x, k_y, k_z و صفحاتی که در نقاط

$$k_x = (\pi/l_x), (2\pi/l_x), (3\pi/l_x), \dots \quad \text{و} \quad k_y = (\pi/l_y), (2\pi/l_y), (3\pi/l_y), \dots$$

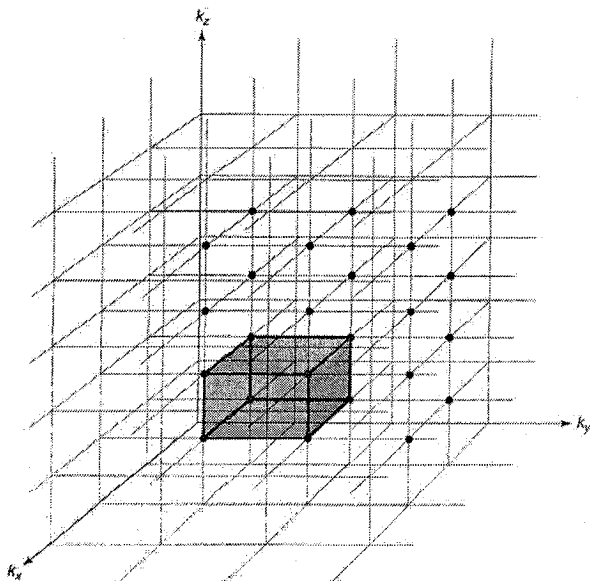
$k_z = (\pi/l_z), (2\pi/l_z), (3\pi/l_z), \dots$ کشیده شده‌اند را تصور کنید، هر نقطه تقاطع نشان

دهنده یک حالت مانای (تک ذره‌ای) است (شکل ۳.۵). هر بلوک در این شبکه و در نتیجه هر

حالت، حجمی به اندازه زیر از فضای k را اشغال می‌کند

$$\frac{\pi^3}{l_x l_y l_z} = \frac{\pi^3}{V} \quad [۴۰.۵]$$

که در آن $V = l_x l_y l_z$ حجم فضایی خود شیء است.



شکل ۳.۵: گاز الکترون آزاد. هر نقطه تقاطع روی این شبکه نشان دهنده یک حالت مانا است. حجم سایه‌دار یک «بلوک» را نشان می‌دهد؛ به ازای هر بلوک یک حالت وجود دارد.

فرض کنید نمونه ما محتوی N اتم بوده و هر اتم نیز متشکل از q الکترون آزاد باشد. (در عمل، N بسیار زیاد خواهد بود - برای شیئی در اندازه ماکروسکوپی، از مرتبه عدد آووگادرو است - نظر به اینکه q عدد کوچکی است - 1 و 2 به طور نوعی) اگر الکترون‌ها بوزون (یا ذرات تفکیک‌پذیر بودند) همگی‌شان در حالت پایه، ψ_{111} می‌نشستند.^{۱۳} اما الکترون‌ها در حقیقت فرمیون‌های یکسانی هستند که تابع اصل طرد پائولی‌اند، به همین دلیل تنها دو تا از آنها می‌توانند هر حالت مفروضی را اشغال کنند. آنها یک هشتم یک کره در فضای k را پر می‌کنند^{۱۴} که شعاع k_F آن با توجه به این نکته تعریف می‌شود که هر جفت الکترون نیازمند حجمی معادل با π^3/V است (رابطه ۴۰.۵):

$$\frac{1}{8} \left(\frac{4}{3} \pi k_F^3 \right) = \frac{Nq}{2} \left(\frac{\pi^3}{V} \right)$$

از این رو

$$k_F = (3\rho\pi^2)^{1/3} \quad [۴۱.۵]$$

که در آن

$$\rho \equiv \frac{Nq}{V} \quad [۴۲.۵]$$

چگالی الکترون آزاد (تعداد الکترون‌های آزاد در واحد حجم) است.

حالت‌های اشغال شده و اشغال نشده جدا کننده مرزی، در فضای k ، را **سطح فرمی** می‌نامیم (شاخص پائین F از این جهت انتخاب شد). بیشترین انرژی اشغال شده را **انرژی فرمی** E_F می‌نامند؛ چنین پیداست که برای یک گاز الکترون آزاد داریم

^{۱۳} فرض من بر این است که هیچ برانگیختگی حرارتی قابل ملاحظه‌ای وجود ندارد که جامد را از حالت پایه جمعی آن خارج کند. اگر خوششان می‌آید، باید بگویم که دارم درباره یک جامد «سرد» صحبت می‌کنم، گرچه (همانطور که در مساله ۱۶.۵ (پ) نشان خواهید داد) جامدات معمولی به این مفهوم حتی خیلی بالاتر از دمای اتاق باز هم «سرد» هستند.

^{۱۴} چون N عدد فوق العاده بزرگی است، نیازی نیست نگران تمایز میان لبه‌های ناصاف حقیقی شبکه و سطح کروی صافی باشیم که آنرا تقریب می‌زنند.

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\rho\pi^2)^{2/3} \quad [۴۳.۵]$$

انرژی کل گاز الکترون آزاد را می‌توان به این ترتیب محاسبه کرد: پوسته‌ای به ضخامت dk (شکل ۴.۵) محتوی حجم زیر است

$$\frac{1}{8}(4\pi k^2)dk$$

پس تعداد حالت‌های الکترونی در این پوسته عبارت است از

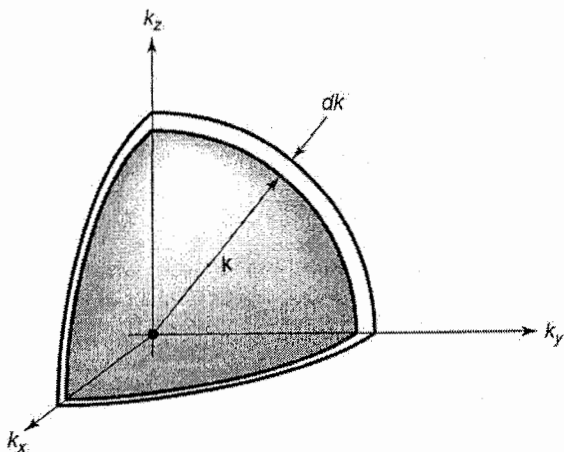
$$\frac{2[(1/2)\pi k^2 dk]}{(\pi^3/V)} = \frac{V}{\pi^2} k^2 dk$$

هر یک از این حالتها انرژی معادل با $\hbar^2 k^2 / 2m$ (رابطه ۳۹.۵) دارد، بدینسان انرژی پوسته عبارت است از

$$dE = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \frac{V}{\pi^2} k^2 dk \quad [۴۴.۵]$$

و در نتیجه انرژی کل برابر است با

$$E_{\text{کل}} = \frac{\hbar^2 V}{2\pi^2 m} \int_0^{k_F} k^4 dk = \frac{\hbar^2 k_F^5 V}{10\pi^2 m} = \frac{\hbar^2 (3\pi^2 Nq)^{5/3}}{10\pi^2 m} V^{-2/3} \quad [۴۵.۵]$$



شکل ۴.۵: یک هشتم یک پوسته در فضای k .

این انرژی مکانیک کوانتومی نقشی بسیار شبیه به انرژی گرمایی درونی (U) یک گاز معمولی ایفا می‌کند. به ویژه، فشاری را به دیواره‌ها وارد می‌کند، چون اگر جعبه به میزان dV منبسط شود، انرژی کل کاهش می‌یابد:

$$dE_{\text{کل}} = -\frac{2}{3} \frac{\hbar^2 (3\pi^2 Nq)^{5/3}}{10\pi^2 m} V^{-5/3} dV = -\frac{2}{3} E_{\text{کل}} \frac{dV}{V}$$

این رابطه در قالب کار انجام شده توسط فشار کوانتومی p روی فضای خارج ($dW = P dV$) نمایان می‌شود. آشکارا داریم

$$P = \frac{2}{3} \frac{E_{\text{کل}}}{V} = \frac{2}{3} \frac{\hbar^2 k_F^5}{10\pi^2 m} = \frac{(3\pi^2)^{2/3} \hbar^2}{5m} \rho^{5/3} \quad [۴۶.۵]$$

پس این پاسخی جزئی به این پرسش است که چرا شیء جامد سرد به آسانی فرو نمی‌افتد (نمی‌رمبد): چون یک فشار متوازن کننده درونی وجود دارد که هیچ ارتباطی با دافعه الکترون - الکترون (که از آن صرف‌نظر کردیم) یا حرکت (که آنرا در نظر نگرفتیم) ندارد بلکه مطلقاً پدیده‌ای مکانیک کوانتومی است و نهایتاً از روی بایستگی پاد متقارن‌سازی برای توابع موج فرمیون‌های یکسان مشتق می‌شود. گاهی آنرا **فشار تبه‌گنی** می‌نامند، اگرچه ممکن است «فشار طرد» عبارت مناسب‌تری باشد.^{۱۵}

مساله ۱۵.۵ انرژی میانگین به ازای الکترون آزاد (E/Nq) را به صورت تابعی از انرژی فرمی بدست آورید. پاسخ: $(3/5)E_F$.

مساله ۱۶.۵ چگالی مس 8.96 gm/cm^3 و عدد اتمی آن نیز 63.5 gm/mole است. (الف) انرژی فرمی را برای مس (رابطه ۴۳.۵) محاسبه کنید. فرض کنید $q = 1$ بوده و پاسخ‌تان را برحسب الکترون ولت ارائه دهید.

^{۱۵} معادلات ۴۱.۵، ۴۳.۵، ۴۵.۵ و ۴۶.۵ را برای حالت کروی یک چاه متعارف نامتناهی استخراج کردیم؛ اما آنها برای محفظه‌هایی با هر شکل دلخواه دیگر هم به کار می‌روند منوط به آنکه تعداد ذرات بسیار زیاد باشد.

(ب) سرعت متناظر الکترون چقدر است؟ راهنمایی: بگذارید $E_F = (1/2)mv^2$. اشکالی ندارد اگر فرض کنیم الکترون‌های مس غیر نسبیته هستند؟

(پ) در چه دمایی انرژی حرارتی مشخصه $k_B T$ که در آن k_B ثابت بولتزمن و T دمای کلوین است) با انرژی فرمی مس برابر می‌شود؟ توضیح: این دما را دمای فرمی می‌نامند. تا وقتی دمای واقعی بسیار پائین‌تر از دمای فرمی باشد، می‌توان ماده را «سرد» دانست به طوریکه اکثر الکترون‌های آن در پیکربندی حالت پایه هستند. از آنجا که نقطه ذوب مس 1356 K است، مس جامد همیشه سرد است.

(ت) فشار واگنی (رابطه ۴۶.۵) مس را در مدل گاز الکترونی محاسبه کنید.

مسئله ۱۷.۵ مدول کپه‌ای یک ماده عبارت است از نسبت یک کاهش کوچک در فشار به افزایش جزئی حاصل از آن در حجم:

$$B = -V \frac{dP}{dV}$$

نشان دهید در یک گاز الکترون آزاد $B = (5/3)P$ است و از نتیجه مسئله ۱۳.۵ (ت) برای تخمین مدول کپه‌ای مس استفاده کنید. توضیح: مقدار مشاهده شده برابر با $13.4 \times 10^{10} \text{ N/m}^2$ است، با این حال انتظار سازگاری کامل نداریم - هرچه باشد، تمام نیروهای الکترون - هسته و الکترون - الکترون را نادیده می‌گیریم! در حقیقت، واقعا شگفت‌آور است که این محاسبه به مقدار تجربی نزدیک است.

۲.۳.۵ ساختار نواری

حالا می‌خواهیم مدل الکترون آزاد را با وارد کردن نیروهای اعمال شده روی الکترون‌ها توسط هسته‌های اساسا بدون حرکت و بار مثبتی که به طور منظم در فضا قرار گرفته‌اند اصلاح کنیم. این حقیقت محض که پتانسیل مذکور تناوبی است رفتار کیفی جامدات را به مقدار زیادی به آنها دیکته می‌کند - شکل واقعی آن تنها به جزئیات دقیقتر مربوط است. برای آنکه چگونگی این امر را به شما نشان دهم قصد دارم ساده‌ترین مثال ممکن را بررسی کنم: یک شانه دیراک یک بعدی، متشکل

از چاه‌های پتانسیلی که به طور یکنواخت و با فاصله برابر از یکدیگر فاصله گذاری شده‌اند (شکل ۵.۵).^{۱۶} اما قبل از پرداختن به آن، باید کمی درباره نظریه عمومی پتانسیل‌های تناوبی بدانیم.

پتانسیل تناوبی پتانسیلی است که پس از یک فاصله ثابت a خودش را تکرار می‌کند:

$$V(x+a) = V(x) \quad [۴۷.۵]$$

قضیه بلوخ می‌گوید برای چنین پتانسیلی جواب‌های معادله شرودینگر،

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi \quad [۴۸.۵]$$

را می‌توان به گونه‌ای در نظر گرفت که شرط زیر را برآورده سازد (منظورم از «ثابت» این است که از x مستقل است؛ ممکن است به E بستگی داشته باشد).

$$\psi(x+a) = e^{iKa} \psi(x) \quad [۴۹.۵]$$

که در آن K یک مقدار ثابت است.

اثبات: D را عملگر «جابه‌جایی» بگیرید:

$$Df(x) = f(x+a) \quad [۵۰.۵]$$



شکل ۵.۵: شانه دیراک، رابطه ۵۷.۵

^{۱۶} طبیعی‌تر است که تابع دل‌تا را نزولی بگیریم، به این ترتیب نیروی جاذبه هسته‌ها به طرز مناسب‌تری نمایش داده می‌شود. اما در آن صورت جواب‌های انرژی منفی را هم علاوه بر جوابهای انرژی مثبت خواهیم داشت که محاسبات را کمی دست و پا گیر تر می‌کند (مساله ۲۰.۵ را ملاحظه کنید). از آنجا که آنچه اینجا می‌کوشیم انجام دهیم بررسی دقیق پیامدهای تناوب است، ساده‌تر آن است که این شکل کمتر موجه را اختیار کنیم؛ اگر اینطور آسوده می‌شوید، هسته‌ها را مقیم در نقاط $\pm a/2, \pm 3a/2, \pm 5a/2, \dots$ قرار دهید.

برای یک پتانسیل نوسانی (رابطه ۴۷.۵)، D با هامیلتونی جابه‌جا می‌شود:

$$[D, H] = 0 \quad [51.5]$$

و از این رو مختاریم ویژه توابع H را طوری انتخاب کنیم که به طور همزمان ویژه توابع D هم باشند: $D\psi = \lambda\psi$ یا

$$\psi(x+a) = \lambda \psi(x) \quad [52.5]$$

باید خاطر نشان کرد که λ مقداری غیر صفر است (اگر صفر بود - از آنجا که معادله ۵۲.۵ برای تمام مقادیر x برقرار است - بلافاصله به این نتیجه می‌رسیدیم که $\psi(x) = 0$ است که ویژه تابع مجازی به شمار نمی‌رود)، لذا، مثل هر عدد مختلط غیر صفری، می‌توان آنرا در قالب یک نمایی بیان کرد:

$$\lambda = e^{iKa} \quad [53.5]$$

که در آن K مقدار ثابتی است. به همان صورت که باید ثابت می‌شد.

در این مرحله معادله ۵۳.۵ روشی کاملاً غیرعادی و نا آشنا در نوشتن ویژه مقدار λ است، با این حال کمی جلوتر درمی‌یابیم که K در واقع مقداری حقیقی است، بنابراین گرچه خود $\psi(x)$ تناوبی نیست، اما $|\psi(x)|^2$ تناوبی است:

$$|\psi(x+a)|^2 = |\psi(x)|^2 \quad [54.5]$$

همانطور که انتظارش می‌رفت.^{۱۷}

البته، هیچ جامد واقعی برای همیشه اینطور نمی‌ماند چراکه لبه‌ها تناوبی بودن $V(x)$ را از بین برده و قضیه بلوخ را غیر قابل اطلاق می‌سازند. با این وجود، برای هر بلور ماکروسکوپیکی که

^{۱۷} قدر مسلم، ممکن است وسوسه شوید تا استدلال را برعکس کرده و کار را از رابطه ۵۴.۵ به عنوان روشی برای اثبات قضیه بلوخ شروع کنید. ولی عملی نیست، چون رابطه ۵۴.۵ به تنهایی مجاز می‌شمارد که عامل فاز در رابطه ۴۹.۵ تابعی از x باشد.

محتوی تعداد اتم‌هایی از مرتبه عدد آووگادرو باشد، تصور آنکه اثرات لبه‌ای بتوانند به طور چشمگیر روی رفتار الکترون‌های بسیار درونی تاثیر بگذارند دشوار است. این امر ترفند زیر را برای نجات قضیه بلوخ پیشنهاد می‌کند: محور x را بدور دایره‌ای پیچیده و پس از تعداد بسیار زیاد $N \approx 10^{23}$ تناوب، آنرا به انتهای آن متصل می‌کنیم؛ به طور رسمی شرط مرزی را اعمال می‌کنیم

$$\psi(x + Na) = \psi(x) \quad [55.5]$$

می‌توان (از رابطه ۴۹.۵) اینطور نتیجه گرفت که

$$e^{iNka}\psi(x) = \psi(x)$$

پس $e^{iKa} = 1$ است یا $NKa = 2\pi n$ یا به عبارت دیگر

$$K = \frac{2\pi n}{Na}, (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad [56.5]$$

به ویژه، برای این آرایش K لزوماً حقیقی است. حسن قضیه بلوخ آن است که معادله شرودینگر را فقط باید درون یک تک سلول (به فرض، بازه $0 < x < a$) حل کنیم؛ کاربری بازگشتی رابطه ۴۹.۵ جواب را در سایر نقاط تولید می‌کند.

حالا فرض کنید پتانسیل متشکل است از دنباله بلندی از چاه‌های تابع دلتا (شانه دیراک):

$$V(x) = \alpha \sum_{j=0}^{N-1} \delta(x - ja) \quad [57.5]$$

همانطور که در پاراگراف قبل گفته شد، در شکل ۵.۵ باید تصور کنید محور x «بدور چیزی پیچیده شده» پس N امین چاه در واقع در نقطه $x = -a$ نمایان می‌شود. هیچکس وانمود نمی‌کند که این یک مدل واقعی است، اما به یاد داشته باشید اینجا تنها اثر تناوبی بودن مد نظر ماست؛ بررسی کلاسیکی^{۱۸}

از یک الگوی مستطیلی تکرار شونده استفاده کرده و بسیاری از نویسندگان هنوز هم آنرا ترجیح می‌دهند.^{۱۹}

پتانسیل در محدوده $0 < x < a$ صفر است، بنابراین

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

به عبارت دیگر

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi$$

که در آن طبق روال معمول داریم

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad [58.5]$$

جواب عمومی عبارت است از

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx), \quad (0 < x < a) \quad [59.5]$$

براساس قضیه بلوخ، تابع موج در سلول که یکسره در سمت چپ مبداء قرار دارد عبارت است از

$$\psi(x) = e^{-iKa} [A \sin k(x+a) + B \cos k(x+a)], \quad (-a < x < 0) \quad [60.5]$$

ψ باید در نقطه $x = 0$ پیوسته باشد، لذا

$$B = e^{-iKa} [A \sin(ka) + B \cos(ka)] \quad [61.5]$$

مشتق آن دستخوش یک ناپیوستگی می‌شود که با توان تابع دلتا متناسب است (رابطه ۱۰۷.۲، با

در نظر گرفتن عوض شدن علامت α ، چون اینها در عوض چاه، قله هستند):

$$kA - e^{-iKa} k [A \sin(ka) + B \cos(ka)] = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} B \quad [62.5]$$

^{۱۹} برای نمونه، کتاب *Introduction to Quantum Theory* نوشته D. Park (نیویورک، انتشارات McGraw-Hill،

حل رابطه ۶۱.۵ برای $A \sin(ka)$ می‌دهد

$$A \sin(ka) = [e^{ika} - \cos(ka)]B \quad [۶۳.۵]$$

با جاگذاری این نتیجه در رابطه ۶۲.۵ و حذف kB می‌رسیم به

$$[e^{ika} - \cos(ka)][1 - e^{-ika} \cos(ka)] + e^{-ika} \sin^2(ka) = -\frac{2ma}{\hbar^2 k} \sin(ka)$$

که به صورت زیر ساده می‌شود

$$\cos(Ka) = \cos(ka) + \frac{ma}{\hbar^2 k} \sin(ka) \quad [۶۴.۵]$$

این نتیجه بنیادینی است که بقیه هم آنرا دنبال می‌کنند. برای پتانسیل کرونیک - پنی (زیرنویس ۱۸ را ببینید)، این فرمول پیچیده‌تر است، با این حال ویژگیهای کیفی را به اشتراک می‌گذارد که آنها را بررسی می‌کنیم.

رابطه ۶۴.۵ مقادیر ممکن k و در نتیجه انرژی‌ها مجاز را مشخص می‌کند. برای ساده کردن

نمادگذاری، بگذارید

$$z \equiv ka, \beta = \frac{maa}{\hbar^2} \quad [۶۵.۵]$$

پس می‌توان طرف راست تساوی در رابطه ۶۴.۵ را اینطور نوشت

$$f(z) = \cos(z) - \beta \frac{\sin(z)}{z} \quad [۶۶.۵]$$

ثابت β معیاری بدون بعد از «توان» تابع دلتا است. در شکل ۶.۵ تابع $f(z)$ را برای حالت $\beta = 10$

رسم کرده‌ام. آنچه توجه به آن حائز اهمیت است این است که $f(z)$ در خارج از بازه $(-1, +1)$ از

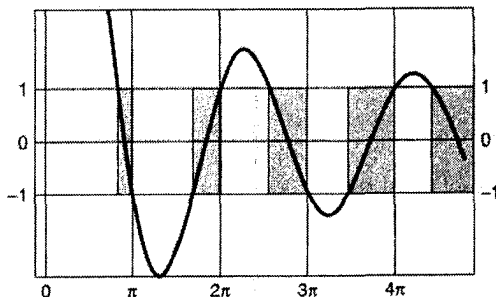
محدوده خارج می‌شود که در این مناطق دیگر امیدی برای حل رابطه ۶۴.۵ وجود ندارد زیرا

$|\cos(Ka)| \leq 1$ می‌شود. این گاف‌ها نشان دهنده انرژی‌های ممنوع هستند؛ نوارهای انرژی‌های

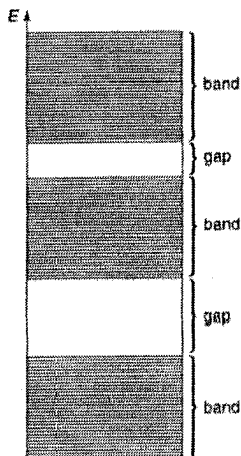
مجاز این گاف‌ها را از یکدیگر جدا می‌کنند. درون یک نوار مفروض، چون براساس رابطه ۵۶.۵ داریم

$Ka = 2\pi n/N$ که در آن N عدد بسیار بزرگی است، n می‌تواند هر مقدار صحیحی داشته باشد.

می‌توانید ترسیم N خط افقی در مقادیر $\cos(2\pi n/N)$ در بازه‌ای از $1 + (n = 0)$ تا $(n = \frac{N}{2}) - 1$ و بازگشت تقریباً تا $1 + (n = N - 1)$ روی شکل ۶.۵ را تصور کنید - در این نقطه بلوخ فاز e^{iKa} بازیافت می‌شود، لذا هیچ جواب جدیدی با افزایش بیشتر n تولید نمی‌شود. نقطه تقاطع این خطوط با $f(x)$ یک انرژی مجاز می‌دهد. پیداست که تعداد $N/2$ حالت ممکن انرژی در اولین نوار وجود دارد (که به $N/2$ حالت انرژی منفی متصل می‌شود) و N حالت هم در کل نوارهای بالاتر، آنها آنقدر به هم نزدیکند که برای اغلب مقاصد می‌توانیم آنها را اشکالی از یک پیوستار در نظر بگیریم (شکل ۷.۵)



شکل ۶.۵: نمودار $f(x)$ (رابطه ۶.۵) به ازای $\beta = 10$ که نوارهای مجاز جدا شده توسط گاف‌های ممنوع را به نمایش می‌گذارد (چونکه $|f(x)| > 1$ است).



شکل ۷.۵: انرژی‌های مجاز برای یک پتانسیل تناوبی نوارهای اساسا پیوسته‌ای را شکل می‌دهند.

تا اینجا، فقط یک الکترون را در پتانسیل مان قرار دادیم. در عمل تعداد Nq از آنها در کار است، که در آن q باز هم تعداد الکترون‌های «آزاد» به ازای اتم است. به سبب اصل طرد پائولی، تنها دو الکترون می‌توانند یک حالت فضایی مفروض را اشغال کنند، به همین جهت اگر $q = 1$ باشد آنها فقط انرژی منفی نیمی از نوار اول را پر می‌کنند، اگر $q = 2$ باشد آنها تمام نوار اول را پر می‌کنند، اگر $q = 3$ باشد یک نیمه دیگر را هم پر می‌کنند و همینطور تا آخر - در حالت پایه. (در سه بعد و با در نظر گرفتن پتانسیل‌های واقعی‌تر، ساختار نواری ممکن است پیچیده‌تر شود اما وجود نوارهایی که توسط گاف‌های ممنوع از هم جدا شده‌اند ادامه می‌یابد - ساختار نواری علامت مشخصه پتانسیل تناوبی است). حالا، اگر یک نوار کاملاً پر شده باشد، انرژی بسیار زیادی لازم است تا یک الکترون از آنرا برانگیخته کرد زیرا آن الکترون باید از روی منطقه ممنوع بپرد. این قبیل موارد از نظر الکتریکی نارسانا هستند. از سوی دیگر، چنانچه از یک نوار تنها کمی پر شده باشد انرژی بسیار کمی برای برانگیختن یک الکترون لازم بوده و از این رو این قبیل مواد را رسانا می‌نامند. اگر به نارسانایی چند اتم دیگر که دارای q کوچکتر یا بزرگتر هستند بیفزایید، تعدادی الکترون «اضافی» در نوار بالاتر بعدی قرار می‌گیرد یا به عبارت دیگر تعدادی حفره در نواری که پیشتر پر بود بوجود می‌آید که شارش جریان‌های ضعیف الکتریکی را ممکن می‌سازد؛ چنین موادی را نیمه رسانا می‌نامند. در مدل الکترون آزاد تمام جامدات باید رساناهایی عالی باشند، چراکه هیچ گاف بزرگی در طیف انرژی‌های آنها وجود ندارد. با این حساب نظریه نواری محدوده جالب توجهی از رسانندگی‌های الکتریکی را توضیح می‌دهد که در طبیعت توسط جامدات به نمایش درمی‌آید.

مساله ۱۸.۵

(الف) با استفاده از روابط ۵۹.۵ و ۶۳.۵ نشان دهید تابع موج یک ذره در پتانسیل تناوبی تابع دلتا را می‌توان به شکل زیر نوشت

$$\psi(x) = C[\sin(kx) + e^{-ika} \sin k(a-x)], (0 \leq x \leq a)$$

(خودتان را برای تعیین ثابت بهنجارش C به زحمت نیندازید).

(ب) یک استثناء وجود دارد: در پائین‌ترین قسمت نوار جائیکه z مضرب صحیحی از π است (شکل ۶.۵)، قسمت (الف) به $\psi(x) = 0$ منجر می‌شود. تابع موج صحیح را برای اینحالت بدست آورید. توجه کنید در هر تابع دلتا چه اتفاقی برای ψ می‌افتد.

مساله ۱۹.۵ انرژی بالاترین بخش از اولین نوار مجاز را برای حالت $\beta = 10$ بدست آورده و آنرا تا سه رقم معنی‌دار تصحیح کنید. فرض کنید $\alpha/a = 1 \text{ eV}$ باشد.

مساله ۲۰.۵** فرض کنید به جای توابع دلتای بسیار تیز از چاه‌های پتانسیل دلتا استفاده کنیم (یعنی علامت α در رابطه ۵۷.۵ را برعکس کنیم). این حالت را تجزیه و تحلیل کرده و مانسته شکل ۶.۵ را برای آن رسم کنید. این مساله مستلزم هیچ محاسبه تازه‌ای نیست، چون جواب‌های انرژی مثبت (به استثنای اینکه β حالا منفی است؛ از $\beta = -1.5$ برای نمودار استفاده کنید)، اما حتماً باید جواب‌های انرژی منفی را محاسبه کنید (بگذارید $\kappa \equiv \sqrt{-2mE}/\hbar$ و $z \equiv -\kappa a$ ، به ازای $E < 0$). چند حالت در اولین باند مجاز وجود دارد؟

مساله ۲۱.۵ نشان دهید بیشتر انرژی‌هایی که با معادله ۶۴.۵ مشخص می‌شوند دارای تپه‌گنی دوگانه هستند. حالت‌های استثناء کدامند؟ راهنمایی: آن را برای $N = 1, 2, 3, \dots$ امتحان کنید تا علت آنرا دریابید. مقادیر ممکن برای $\cos(Ka)$ در هر حالت چه هستند؟

۴.۵ مکانیک آماری کوانتومی

در دمای صفر مطلق، یک سامانه فیزیکی پیکربندی مربوط به پائین‌ترین انرژی‌اش را اشغال می‌کند. با بالا بردن دما، فعالیت حرارتی کاتوره‌ای شروع به اشغال حالت‌های برانگیخته می‌کند که در نتیجه آن این سوال به میان می‌آید که: چنانچه تعداد بسیار زیاد N از ذرات را در اختیار داشته باشیم که در تعادل حرارتی در دمای T به سر می‌برند، احتمال آنکه یک ذره مفروض در حالی یافت شود که دارای انرژی خاص E_i باشد چقدر است؟ توجه کنید که «احتمال» در این سوال ربطی به ابهام کوانتومی ندارد - این سوال دقیقاً به همین شکل در مکانیک آماری کلاسیک هم مطرح

می‌شود. دلیل آنکه باید به یک پاسخ احتمالاتی قناعت کنیم این است که ما نوعاً با تعداد بسیار زیادی از ذرات سروکار داریم و به همین خاطر احتمالاً نمی‌توانیم به طور دقیق از وضع هر ذره به طور جداگانه آگاه باشیم، حالا چه مکانیک زیربنایی موجبیتی باشد و چه نباشد.

فرض بنیادین در مکانیک آماری این است که در تعادل حرارتی هر حالت کاملاً متمایز با انرژی کل یکسان E به یک اندازه محتمل است. حرکت‌های حرارتی کاتوره‌ای انرژی را از یک ذره به ذره دیگر و از یک صورت (چرخشی، جنبشی، نوسانی و غیره) به صورت دیگر تبدیل می‌کنند، اما (بدون توجه به اثرات خارجی) انرژی کل به واسطه قانون پایستگی انرژی ثابت می‌ماند. فرض مذکور (که بسیار اساسی بوده و قابل بررسی و اندیشیدن است) آن است که این بازتوزیع پیوسته انرژی برای هیچ حالت خاصی تبعیض قائل نمی‌شود. دمای T به وضوح معیاری از انرژی کل برای سامانه‌ای در تعادل حرارتی به شمار می‌رود. تنها چیز غیر طبیعی و دستکاری شده‌ای که مکانیک کوانتومی وارد این ماجرا می‌کند به چگونگی شمارش حالت‌های مجزا بازمی‌گردد و این هم به شکل بسیار مهمی به این وابسته است که آیا ذرات موجود بوزن‌های یکسان تفکیک‌پذیر هستند یا فرمیون‌های یکسان. بحث‌ها و استدلال‌ها به نسبت سر راست و واضحند، با این حال حساب و ریاضیات کار تا اندازه قابل ملاحظه‌ای انبوه و فشرده می‌شود، به همین جهت می‌خواهم کار را با مثال ساده پوچ و محالی شروع کنم، تا وقتی وارد حالت عمومی می‌شویم حس روشن و واضحی از آنچه مورد بحث است داشته باشید.

۱.۴.۵ یک مثال

فرض کنید فقط سه ذره بدون برهم کنش (همگی به جرم m) در اختیار داریم که در یک چاه مربعی نامتناهی یک بعدی (بخش ۲.۲) قرار دارند. انرژی کل عبارت است از

$$E = E_A + E_B + E_C = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_A^2 + n_B^2 + n_C^2) \quad [۶۷.۵]$$

(رابطه ۲۷.۲ را ببینید)، که در آن n_A ، n_B و n_C اعداد صحیح مثبت هستند. حالا در راستای

بحثمان، فرض کنید که $E = 363(\pi^2 \hbar^2 / 2ma^2)$ ، یعنی بگوئیم

$$n_A^2 + n_B^2 + n_C^2 = 668 \quad [۶۸.۵]$$

تصادفا 13 ترکیب از اعداد صحیح مثبت وجود دارد که حاصلجمع توان‌های دوی آنها برابر با 363 می‌شود: یا همه 11 باشند، یا دو تا 13 و یکی 5 باشد (با جایگشت سه تایی)، یا یکی 19 و دو تا 1 (باز هم، سه جایگشت) و یا یکی 17 و یکی 7 و یکی 5 باشد (با جایگشت ۶ تایی). بدین ترتیب $(n_A^2 + n_B^2 + n_C^2)$ یکی از حالات زیر است

$$\begin{aligned} & (11,11,11) \\ & (13,13,5)(13,5,13)(5,13,13) \\ & (1,1,19)(1,19,1)(19,1,1) \\ & (5,7,17)(5,17,7)(7,5,17)(7,17,5)(17,5,7)(17,7,5) \end{aligned}$$

چنانچه ذرات تفکیک‌پذیر باشند، هریک از اینها نشان دهنده یک حالت کوانتومی مجزا است و فرض بنیادین مکانیک آماری حکایت از آن دارد که در تعادل حرارتی^{۲۰} همه آنها به یک اندازه محتمل اند. با این حال من که علاقه چندانی به دانستن اینکه کدامیک از این ذرات در کدام حالت (تک ذره‌ای) قرار دارد ندارم، برای من فقط تعداد کل ذرات در هر حالت حائز اهمیت است - عدد اشغال N_n حالت ψ_n . مجموعه اعداد اشغال برای یک حالت سه ذره‌ای را پیکربندی می‌نامم. اگر هر سه ذره در ψ_{11} قرار داشته باشند، پیکربندی عبارت است با

$$(0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,3,0,0,0,0,0,0, \dots) \quad [۶۹.۵]$$

(به این معنی که $N_{11} = 3$ بوده و بقیه صفر هستند). اگر دو ذره در ψ_{13} و یکی در ψ_5 قرار داشته باشد، پیکربندی عبارت است از

$$(0,0,0,0,1,0,0,0,0,0,0,0,2,0,0,0,0, \dots) \quad [۷۰.۵]$$

^{۲۰} اینکه اگر ذرات به هیچ وجه با یکدیگر برهم‌کنش نداشته باشند چگونه تعادل حرارتی را حفظ می‌کنند مساله‌ایست که ترجیح می‌دهم نگرانش نباشم - شاید خداوند به تناوب دستش را دراز می‌کند و اوضاع را برمی‌انگیزاند (البته دقت می‌کند که ذره‌ای انرژی کم و زیاد نشود). البته در واقعیت بازتوزیع پیوسته انرژی دقیقاً به سبب برهم‌کنش‌های بین ذرات بوجود می‌آید، پس اگر مداخله قدسی را قبول ندارید به جای آن برهم‌کنش‌های بینهایت ضعیف را قرار دهید - که برای حرارت دادن به سامانه کفایت می‌کنند (دست کم، در تناوب‌های طولانی مدت) اما برای دستکاری و ایجاد اختلال در حالت‌های پایه و انرژی‌های مجاز بیش از حد کوچک‌اند.

(به این معنی که $N_5 = 1$ ، $N_{13} = 2$ و بقیه صفر هستند). اگر یک ذره در ψ_1 ، یک ذره در ψ_{19} و یک ذره هم در ψ_{13} باشد، پیکربندی عبارت است از

$$(2, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, \dots) \quad [۷۱.۵]$$

(یعنی $N_1 = 2$ ، $N_{19} = 1$ و بقیه صفر هستند). و بالاخره اگر یک ذره در ψ_5 ، یک ذره در ψ_7 و یکی هم در ψ_{17} باشد، پیکربندی عبارت است از

$$(0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, \dots) \quad [۷۲.۵]$$

(به این معنی که $N_5 = N_7 = N_{17} = 1$ بوده و بقیه صفر هستند). البته پیکربندی سوم محتملترین پیکربندی است زیرا می توان آنرا از شش راه مختلف بدست آورد، در حالیکه دوتای میانی به سه صورت و پیکربندی اول تنها به یک شکل وجود دارند.

حال باز می گردیم به سوال اصلی مان که اگر یکی از این سه ذره را انتخاب کنیم، احتمال (P_n) بدست آوردن یک انرژی (مجاز) خاص E_n چقدر است؟ تنها راه بدست آوردن E_1 در صورتی است که در پیکربندی سوم (رابطه ۷۱.۵) نباشد؛ احتمال آنکه سامانه در آن پیکربندی باشد ۳ به ۱۳ است، همچنین در آن پیکربندی دیگر احتمال بدست آوردن E_1 برابر است با $2/3$ ، از اینرو $P_1 = (3/13) \times (2/3) = 2/13$ است. می توانستید E_5 را یا از پیکربندی ۲ (رابطه ۷۰.۵) - که احتمال بودن در آن ۳ به ۶ است - با احتمال $1/3$ یا از پیکربندی ۴ (رابطه ۷۲.۵) - که احتمال بودن سامانه در آن ۶ به ۱۳ است - با احتمال $1/3$ بدست آورید، بنابراین

$$P_5 = \left(\frac{3}{13}\right) \times \left(\frac{1}{3}\right) + \left(\frac{6}{13}\right) \times \left(\frac{1}{3}\right) = \frac{3}{13}$$

است. E_7 را فقط می توانید از پیکربندی ۴ بدست آورید: $P_7 = (6/13) \times (1/3) = 2/13$

است. به همین ترتیب، E_{11} تنها از پیکربندی نخست (رابطه ۶۹.۵) - که احتمال بودن سامانه در

آن ۱ به ۱۳ است - با احتمال ۱ حاصل می شود: $P_{11} = 1/13$. به طور مشابه، $P_{13} = (3/13) \times$

$(2/13) = 2/13$ ، $P_{17} = (6/13) \times (1/3) = 2/13$ و $P_{19} = (3/13) \times (1/13) = 1/13$

است. برای اطمینان، دقت کنید که

$$P_1 + P_5 + P_7 + P_{11} + P_{13} + P_{17} + P_{19} = \frac{2}{13} + \frac{3}{13} + \frac{2}{13} + \frac{1}{13} + \frac{2}{13} + \frac{2}{13} + \frac{1}{13} = 1$$

این مربوط به زمانی است که ذرات تفکیک پذیرند. اگر در واقع آنها فرمیون‌های یکسانی باشند، بایستگی پادمتقارن‌سازی (برای سادگی، اسپین را کنار می‌گذاریم) پیکربندی‌های اول و دوم را طرد می‌کند (که به دو یا بدتر از آن سه ذره یک حالت یکسان را نسبت می‌دهد) به علاوه فقط یک حالت در پیکربندی سوم وجود خواهد داشت (مساله ۲۲.۵ (الف) را ملاحظه کنید). پس برای فرمیون‌های یکسان داریم $P_5 = P_7 = P_{17} = 1/3$ (که باز هم حاصلجمع احتمالات برابر با 1 می‌شود). از سوی دیگر، اگر این ذرات بوزون‌های یکسان باشند، بایستگی متقارن‌سازی یک حالت به ازای هر پیکربندی را مجاز می‌شمارد (مساله ۲۲.۵ (ب) را ببینید)، لذا

$$P_5 = (1/4) \times (1/3) + (1/4) \times (1/3) = 1/6, \quad P_1 = (1/4) \times (2/3) = 1/6$$

$$P_{13} = (1/4) \times (2/3) = 1/6, \quad P_{11} = (1/4) \times (1) = 1/4, \quad P_7 = (1/4) \times (1/3) = 1/12$$

$$1/6, \quad P_{17} = (1/4) \times (1/3) = 1/12 \text{ و } P_{19} = (1/4) \times (1/3) = 1/12 \text{ طبق معمول،}$$

حاصلجمع احتمالات 1 است.

هدف از این مثال این بود که نشان دهم آمارگیری حالت‌ها چگونه به طبیعت ذرات وابسته است. از یک جهت این کار در واقع دشوارتر از وضعیت حقیقی بود چرا که در آن N عدد فوق‌العاده بزرگی است. هر چه N بزرگتر می‌شود، محتمل‌ترین پیکربندی (که در این مثال برای مورد ذرات تفکیک‌پذیر $N_5 = N_7 = N_{17} = 1$ است) نسبت به رقابیش به شکلی فراگیر محتمل‌تر می‌شود، لذا برای مقاصد آماری می‌توانیم بدون مواجهه با عواقب ناخوشایند، بقیه را یکسره نادیده بگیریم. توزیع انرژی‌های ذره منفرد، در حال تعادل، به وضوح عبارت است از توزیع آنها در محتمل‌ترین پیکربندی. (اگر به ازای $N = 3$ - که در آن به روشنی اینطور نیست - این بیان درست می‌بود آنگاه نتیجه می‌گرفتیم که برای حالت ذرات تفکیک‌پذیر داریم $P_5 = P_7 = P_{13} = 1/3$). در بخش ۳.۴.۵ مجدداً به این موضوع بازمی‌گردم، اما اول باید رهیافت شمارش و آمارگیری را تعمیم دهیم.

مساله ۲۲.۵

(الف) تابع موج کاملاً پادمتقارن $\psi(x_A, x_B, x_C)$ را برای سه فرمیون یکسان درست کنید به طوریکه یکی در ψ_5 ، یکی در ψ_7 و یکی هم در ψ_{17} باشد.

(ب) تابع موج کاملاً متقارن $\psi(x_A, x_B, x_C)$ را برای سه بوزون یکسان درست کنید (۱) اگر هر سه در حالت ψ_{11} باشند، (۲) اگر دو تا در حالت ψ_1 و یکی در حالت ψ_{19} باشد و (۳) اگر یکی در حالت ψ_5 ، یکی در حالت ψ_7 و یکی هم در حالت ψ_{17} باشد.

مساله ۲۳.۵ فرض کنید سه ذره (غیر برهم کنش کننده)، در حال تعادل گرمایی، در اختیار داشتید که در پتانسیل نوسانگر هماهنگ یک بعدی در تعادل حرارتی با انرژی $E = (9/2)\hbar\omega$ بودند.

(الف) اگر آنها ذرات تفکیک پذیری بودند (البته با جرم برابر)، پیکربندی‌های عدد اشغال احتمالی چه بوده و چه تعداد حالت (سه ذره‌ای) مجزا برای هر کدام وجود می‌داشت؟ محتمل‌ترین پیکربندی کدام است؟ اگر ذره‌ای را به طور تصادفی انتخاب کرده و انرژی آنرا اندازه می‌گرفتید، ممکن بود چه مقادیری بدست آورده و احتمال هر کدام چقدر می‌بود؟ محتمل‌ترین انرژی چقدر است؟

(ب) همین کار را برای مورد فرمیون‌های یکسان (با نادیده گرفتن اسپین مانند مثال بخش ۱.۴.۵) انجام دهید.

۲.۴.۵ حالت کلی

اکنون پتانسیل دلخواهی را تصور کنید که برای آن انرژی‌های تک ذره‌ای E_1, E_2, E_3, \dots و با تبهگنی‌های d_1, d_2, d_3, \dots و ... هستند (به این معنی که d_n حالت مجزای تک ذره‌ای با یک انرژی E_n وجود دارد). فرض کنید N ذره (که همگی جرم یکسانی دارند) را درون این پتانسیل قرار می‌دهیم؛ توجه‌مان به پیکربندی (N_1, N_2, N_3, \dots) است که برای آن N_1 ذره با انرژی E_1 ، N_2 ذره با انرژی E_2 و همین طور تا آخر قرار دارند. سوال: از چند راه مختلف می‌توان این پیکربندی را بدست آورد (یا به بیان دقیق‌تر، چند حالت مجزا مانسته این پیکربندی خاص است)؟ پاسخ،

$Q(N_1, N_2, N_3, \dots)$ ، به این بستگی دارد که آیا ذرات فرمیون‌های یکسان تفکیک‌پذیر هستند یا بوزون‌های یکسان، به این خاطر هر سه حالت را جداگانه مورد بررسی قرار می‌دهیم.^{۲۱}

نخست، فرض کنید ذرات تفکیک‌پذیرند. چند روش برای انتخاب (از میان N کاندیدای حاضر) N_1 به گونه‌ای وجود دارد که در اولین «صندوقچه» قرار داشته باشد؟ جواب: ضریب دو جمله‌ای، انتخاب می‌کند N_1 از N

$$\binom{N}{N_1} = \frac{N!}{N_1!(N - N_1)!} \quad [۷۳.۵]$$

چون N راه برای برگزیدن اولین ذره وجود دارد، $(N - 1)$ راه هم برای دومی می‌ماند و همین طور تا آخر:

$$N(N - 1)(N - 2) \dots (N - N_1 + 1) = \frac{N!}{(N - N_1)!}$$

با این وجود، به این ترتیب $N_1!$ جایگشت متفاوت از N_1 ذره به طور جداگانه شمرده می‌شود، در حالیکه اهمیتی ندارد که عدد ۳۷ در اولین انتخاب برگزیده شده یا در انتخاب بیست و نهم؛ بنابراین رابطه را به $N_1!$ تقسیم می‌کنیم که صدق رابطه ۷۳.۵ را اثبات می‌کند. حالا، آن N_1 ذره به چند روش متفاوت می‌توانند در اولین صندوقچه ردیف شوند؟ عرض شود، درون صندوقچه d_1 حالت وجود دارد، پس هر ذره به همین تعداد انتخاب دارد؛ بدیهی است که $(d_1)^{N_1}$ امکان در مجموع وجود دارد. بدین ترتیب تعداد راه‌های قرار دادن N_1 ذره، که از جمعیت کل N انتخاب شده‌اند، درون صندوقچه‌ای محتوی d_1 گزینه مجزا، عبارت است از

$$\frac{N! d_1^{N_1}}{N_1!(N - N_1)!}$$

طبیعتاً همین وضع برای صندوقچه دوم هم پیش می‌آید، با این استثنا که تنها $(N - N_1)$ ذره در ادامه کار باقی می‌ماند:

^{۲۱} آنچه اینجا ارائه می‌شود بحث کتاب *An Introduction to Theory and Application of Quantum*

$$\frac{(N - N_1)! d_2^{N_2}}{N_2! (N - N_1 - N_2)!}$$

و همینطور تا آخر. منطقی است که

$$\begin{aligned} Q(N_1, N_2, N_3, \dots) &= \frac{N! d_1^{N_1}}{N_1! (N - N_1)!} \frac{(N - N_1)! d_2^{N_2}}{N_2! (N - N_1 - N_2)!} \frac{(N - N_1 - N_2)! d_3^{N_3}}{N_3! (N - N_1 - N_2 - N_3)!} \dots \\ &= N! \frac{d_1^{N_1} d_2^{N_2} d_3^{N_3} \dots}{N_1! N_2! N_3! \dots} = N! \prod_{n=1}^{\infty} \frac{d_n^{N_n}}{N_n!} \quad [74.5] \end{aligned}$$

(بهتر است همینجا کمی توقف کرده و این نتیجه را برای مثال بخش ۱.۴.۵ بررسی کنید - مساله ۲۴.۵ را ملاحظه کنید).

مساله برای فرم‌یون‌های یکسان به مراتب آسانتر است. چون آنها غیر قابل تفکیک هستند، اهمیتی ندارد کدام ذره در کدام حالت قرار دارد - بایستگی پادمقارن‌سازی به این معنی است که تنها یک حالت N ذره‌ای وجود دارد که در آن مجموعه خاصی از حالت‌های تک ذره‌ای اشغال می‌شود. علاوه بر این، فقط یک ذره می‌تواند هر حالت مفروضی را اشغال کند. تعداد

$$\binom{d_n}{N_n}$$

راه برای انتخاب N_n حالت اشغال شده در n امین صندوقچه وجود دارد،^{۲۲} از این رو

$$Q(N_1, N_2, N_3, \dots) = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{d_n!}{N_n! (d_n - N_n)!} \quad [75.5]$$

(این را برای مثال بخش ۱.۴.۵ بررسی کنید - مساله ۲۴.۵ را ملاحظه کنید).

محاسبه برای مورد بوزون‌های یکسان سخت‌ترین است. باز هم، بایستگی مقارن‌سازی به آن معنی است که تنها یک حالت N ذره‌ای وجود دارد که در آن مجموعه خاصی از حالت‌های یک

^{۲۲} طبیعتاً اگر $d_n > N_n$ باشد این باید صفر شود که خوب همینطور هم هست اما به این شرط که فاکتوریل یک عدد

ذره‌ای اشغال می‌شوند، اما اینبار قیدی روی تعداد ذراتی که می‌توانند حالت تک ذره‌ای یکسانی را با هم به اشتراک بگذارند وجود ندارد. برای n امین صندوقچه، سوال به این شکل درمی‌آید: چه تعداد راه متفاوت را می‌توانیم به N_n ذره یکسان در d_n شکاف متفاوت نسبت دهیم؟ راههای زیادی برای حل این مساله ترکیبی وجود دارد؛ یک روش هوشمندانه بخصوص وجود دارد که دربرگیرنده ترفند زیر است: بگذارید نقطه‌ها نمایش دهنده ذرات و ضربدرها نمایش دهنده افزایش باشند جوری که مثلاً اگر $d_n = 5$ و $N_n = 7$ باشد، نما

• • × • × • • • × • ×

حاکمی از آن باشد که دو ذره در اولین حالت، یک ذره در دومین، سه ذره در سومین، یک ذره در چهارمین و نه ذره در پنجمین حالت وجود دارد. دقت کنید که N_n نقطه و $(d_n - 1)$ ضربدر وجود دارد (که نقطه‌ها را در d_n گروه افزایش می‌کنند). اگر نقاط و ضربدرهای منفرد برچسب‌گذاری می‌شدند، $(N_n + d_n - 1)!$ راه مختلف برای مرتب کردن آنها وجود می‌داشت. اما برای مقاصد فعلی ما نقاط همگی با هم معادل هستند - جایگشت کردن آنها (در $N_n!$ راه) تغییری در حالت بوجود نمی‌آورد. همچنین، ضربدرها هم همگی با هم معادلند - جایگشت کردن آنها (در $(d_n - 1)!$ راه) چیزی را عوض نمی‌کند. از این رو در واقع تعداد

$$\frac{(N_n + d_n - 1)!}{N_n! (d_n - 1)!} = \binom{N_n + d_n - 1}{N_n} \quad [۷۶.۵]$$

راه متمایز برای نسبت دادن N_n ذره به d_n حالت تک ذره‌ای در n امین صندوقچه وجود دارد که در نتیجه می‌دهد

$$\mathcal{Q}(N_1, N_2, N_3, \dots) = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{(N_n + d_n - 1)!}{N_n! (d_n - 1)!} \quad [۷۷.۵]$$

(آنرا برای مثال بخش ۱.۴.۵ بررسی کنید - مساله ۲۴.۵ را ملاحظه کنید).

مساله ۲۵.۵** رابطه ۲۶.۵ را از طریق استقراء بدست آورید. سوال ترکیبی این است: به چند روش متفاوت می‌توانید N گوی یکسان را در d سبد بیندازید (برای این مساله نیازی به شاخص پائین n نیست). می‌توانید تمام N آنها را در سومین سبد انداخته یا فقط یکی را در سبد دوم و یکی در سبد پنجم، یا دو تا را در اولی و سه تا را در سومی و بقیه را در هفدهمی و الی آخر بیندازید. موارد مربوط به $N = 1$ ، $N = 2$ ، $N = 3$ و $N = 4$ را صراحتاً محاسبه کنید؛ تا آن مرحله می‌بایست قادر به استنتاج فرمول عمومی باشید.

۳.۴.۵ محتمل ترین پیگریندی

در تعادل حرارتی، هر حالت با انرژی کل مفروض E و تعداد ذره مشخص N به یک اندازه محتمل است. بنابراین محتمل‌ترین پیکربندی (N_1, N_2, N_3, \dots) همانی است که بتوان آنرا در بیشترین تعداد از راههای مختلف بدست آورد - این همان پیکربندی خاصی است که برای آن بیشترین تعداد $Q(N_1, N_2, N_3, \dots)$ بیشینه بوده و تحت قیدهای زیر قرار دارد

$$\sum_{n=1}^{\infty} N_n = N \quad [\gamma\lambda, \Delta]$$

2

$$\sum_{n=1}^{\infty} N_n E_n = E \quad [V9.5]$$

مساله پیشینه کردن $F(x_1, x_2, x_3, \dots)$ که تابعی از متغیرهای متعدد بوده و منوط به $f_1(x_1, x_2, x_3, \dots) = 0$ ، $f_2(x_1, x_2, x_3, \dots) = 0$ و الی آخر می‌باشد، به ساده‌ترین روش توسط مضارب لژاندر قابل پرداختن است.^{۲۳} : تابع جدید

$$G(x_1, x_2, x_3, \dots, \lambda_1, \lambda_2, \dots) \equiv F + \lambda_1 f_1 + \lambda_2 f_2 + \dots \quad [\lambda \cdot \Delta]$$

را معرفی کرده و تمام مشتقات آنرا برابر با صفر می‌گیریم:

برای مثال، کتاب *Mathematical Methods in Physical Sciences* اثر Mary Boas، ویرایش دوم (نیویورک،

$$\frac{\partial G_n}{\partial x_n} = 0, \frac{\partial G_n}{\partial \lambda_n} = 0 \quad [۸۱.۵]$$

در موردی که مشغول بررسی آن هستیم، کار کردن با لگاریتم Q کمی ساده‌تر از کار کردن با خود آن است - به این ترتیب حاصلضرب‌ها به حاصلجمع تبدیل می‌شوند. از آنجا که لگاریتم تابعی یکنوا از آرگومان خودش است، بیشینه‌های Q و $\ln(Q)$ در یک نقطه بروز می‌کنند. به این جهت قرار می‌دهیم

$$G \equiv \ln(Q) + \alpha \left[N - \sum_{n=1}^{\infty} N_n \right] + \beta \left[E - \sum_{n=1}^{\infty} N_n E_n \right] \quad [۸۲.۵]$$

که در آن α و β ضرایب لاگرانژ هستند. تنظیم مشتقات به گونه‌ای که نسبت به α و β صفر باشند فقط محدودیت‌هایی بوجود می‌آورد (روابط ۷۸.۵ و ۷۹.۵)؛ پس می‌ماند تنظیم مشتقات به گونه‌ای که نسبت به N_n هم صفر شوند.

اگر ذرات تفکیک‌پذیر باشند، آنگاه Q از رابطه ۷۴.۵ بدست آمده و در نتیجه داریم

$$G = \ln(N!) + \sum_{n=1}^{\infty} [N_n \ln(d_n) - \ln(N_n!)] + \alpha \left[N - \sum_{n=1}^{\infty} N_n \right] + \beta \left[E - \sum_{n=1}^{\infty} N_n E_n \right] \quad [۸۳.۵]$$

با فرض آنکه اعداد اشغال مربوطه (N_n) بزرگ باشند، می‌توانیم تقریب استرلینگ را به کار بگیریم^{۲۴}:

^{۲۴} تقریب استرلینگ را می‌توان با لحاظ کردن جملات بیشتر در سری استرلینگ بهبود بخشید، با این وجود دو جمله اول برای منظور ما کافی هستند. کتاب *Mathematical Methods for Physicists* اثر George Arfken، ویرایش سوم (اورلاندو، انتشارات Academic Press، ۲۰۰۰) بخش ۳.۱۰ را ملاحظه کنید. چنانچه اعداد اشغال مربوطه بزرگ نباشند - مانند مثال بخش ۱.۴.۵ - آنگاه مکانیک آماری دیگر به کار نمی‌آید. تمام قضیه عبارت است از کار کردن با چنین اعداد فوق‌العاده بزرگی که مداخله آماری در آن شرایط یک پیشگوی قابل اعتماد محسوب می‌شود. البته، همواره حالت‌های تک ذره‌ای با انرژی بالایی وجود دارند که هیچ وقت اشغال نمی‌شوند؛ خوشبختانه، تقریب

$$\ln(z!) \approx z \ln(z) - z \quad \text{ازای } z \gg 1 \quad [۸۴.۵]$$

برای نوشتن

$$G \approx \sum_{n=1}^{\infty} [N_n \ln(d_n) - N_n \ln(N_n) + N_n - \alpha N_n - \beta E_n N_n] + \ln(N!) + \alpha N + \beta E_n \quad [۸۵.۵]$$

منطقی است که

$$\frac{\partial G}{\partial N_n} = \ln(d_n) - \ln(N_n) - \alpha - \beta E_n \quad [۸۶.۵]$$

با برابر قرار دادن این رابطه با صفر و حل آن برای N_n ، نتیجه می گیریم محتمل ترین اعداد اشغال برای ذرات تفکیک پذیر عبارتند از

$$N_n = d_n e^{-(\alpha + \beta E_n)} \quad [۸۷.۵]$$

اگر ذرات فرمیون های یکسان باشند، در آن صورت Q از رابطه ۷۵.۵ بدست می آید و در نتیجه داریم

$$G = \sum_{n=1}^{\infty} \{ \ln(d_n!) - \ln(N_n!) - \ln[(d_n - N_n)!] \} + \alpha \left[N - \sum_{n=1}^{\infty} N_n \right] + \beta \left[E - \sum_{n=1}^{\infty} N_n E_n \right] \quad [۸۸.۵]$$

اینبار باید فرض کنیم که نه تنها N_n بزرگ است، بلکه $d_n \gg N_n$ است،^{۲۵} تا آنکه تقریب روی هر دو جمله به کار برده شود. در آن صورت

استرلینگ حتی به ازای $z = 0$ هم برقرار است. من از واژه «مربوطه» برای مستثنی کردن هر حالت هرز درست در حاشیه استفاده کردم که برای آن N_n نه خیلی بزرگ است و نه صفر.

^{۲۵} در یک بعد انرژی ها غیر تبهن هستند (مساله ۴۵.۲ را ببینید) اما در سه بعد d_n نوعاً با افزایش n به سرعت زیاد می شود (مثلاً در مورد هیدروژن، n^2 snap.sellfile.ir اکثر حالت های اشغال شده $d_n \gg 1$ است)

$$G \approx \sum_{n=1}^{\infty} [\ln(d_n!) - N_n \ln(N_n!) + N_n - (d_n - N_n) \ln(d_n - N_n) + (d_n - N_n) - \alpha N_n - \beta E_n N_n] + \alpha N + \beta E \quad [۸۹.۵]$$

از اینرو

$$\frac{\partial G}{\partial N_n} = -\ln(N_n) + \ln(d_n - N_n) - \alpha - \beta E_n \quad [۹۰.۵]$$

با برابر قرار دادن این رابطه با صفر و حل آن برای N_n ، محتمل‌ترین اعداد اشغال را برای فرمیون‌های یکسان بدست می‌آوریم:

$$N_n = \frac{d_n}{e^{(\alpha + \beta E_n)} + 1} \quad [۹۱.۵]$$

در نهایت، چنانچه ذرات بوزون‌های یکسان باشند، آنگاه Q از رابطه ۷۷.۵ بدست آمده و بنابراین داریم

$$G \approx \sum_{n=1}^{\infty} \{ \ln[(N_n + d_n - 1)!] - \ln(N_n!) - \ln[(d_n - 1)!] \} + \alpha \left[N - \sum_{n=1}^{\infty} N_n \right] + \beta \left[E - \sum_{n=1}^{\infty} N_n E_n \right] \quad [۹۲.۵]$$

(طبق معمول) با فرض آنکه $N_n \gg 1$ است و استفاده از تقریب استیرلینگ:

$$G \approx \sum_{n=1}^{\infty} \{ (N_n + d_n - 1) \ln(N_n + d_n - 1) - (N_n + d_n - 1) - N_n \ln(N_n) \}$$

فرض غیر معقولی نیست. به عبارت دیگر، d_n در دمای صفر مطلق مسلماً خیلی از N_n بزرگتر نیست چون در این دما تمام حالت‌ها تا سطح فرمی پر شده‌اند و در نتیجه $d_n = N_n$ است. اینجا باز هم کار را با این نکته ساده می‌کنیم که فرمول استیرلینگ حتی به ازای $z = 0$ هم برقرار است.

$$+N_n - \ln[(d_n - 1)!] - \alpha N_n - \beta E_n N_n\} + \alpha N + \beta E \quad [۹۳.۵]$$

بنابراین

$$\frac{\partial G}{\partial N_n} = \ln(N_n + d_n - 1) - \ln(N_n) - \alpha - \beta E_n \quad [۹۴.۵]$$

با برابر قرار دادن این رابطه با صفر و حل آن برای N_n ، محتمل ترین اعداد اشغال را برای بوزون های یکسان بدست می آوریم:

$$N_n = \frac{d_n - 1}{e^{(\alpha + \beta E_n)} - 1} \quad [۹۵.۵]$$

برای سازگاری با تقریب هایی که پیشتر آنها را به کار گرفته ایم، باید در واقع 1 را از صورت کسر بالا برداریم و من هم از حالا به بعد این کار را خواهیم کرد).

مساله ۲۶.۵ از روش مضارب لاگرانژ برای یافتن مساحت بزرگترین مستطیلی که ضلع های آن موازی محورها بوده و می توان آنرا درون بیضی $1 = (x/a)^2 + (y/b)^2$ محاط کرد استفاده کنید. بیشینه مساحت چقدر است؟

مساله ۲۷.۵

(الف) درصد خطا در تقریب استرلینگ را به ازای $z = 10$ بدست آورید.
(ب) کوچکترین عدد صحیح z که به ازای آن خطا کمتر از 1% باشد چیست؟

۴.۴.۵ اهمیت فیزیکی α و β

پارامترهای α و β که از سر ضرایب لاگرانژ وارد بحث شدند به ترتیب به تعداد کل ذرات و انرژی کل مربوط می شوند. از نظر ریاضی، آنها را از طریق جاگذاری اعداد اشغال (روابط ۸۷.۵، ۹۱.۵ و ۹۵.۵ در معادلات قیدی (روابط ۷۸.۵ و ۷۹.۵) بدست می آوریم. با این حال، برای محاسبه حاصلجمع، باید انرژی های مجاز (E_n) و تبهگنی آنها (d_n) را به ازای پتانسیلی که در مساله مطرح است بدانیم. به عنوان یک مثال، مورد یک گاز ایده آل - تعداد بسیار زیادی ذره غیر برهم کنش

کننده که همگی جرم یکسان داشته و در یک چاه مربعی نامتناهی سه بعدی قرار دارند - را حل می‌کنم؛ این مثال انگیزه نهفته در پس تعبیر فیزیکی α و β را برمی‌انگیزاند.

در بخش ۱.۳.۵ انرژی‌های مجاز را بدست آوردیم (رابطه ۳۹.۵):

$$E_k = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \quad [۹۶.۵]$$

که در آن

$$k = \left(\frac{\pi n_x}{l_x}, \frac{\pi n_y}{l_y}, \frac{\pi n_z}{l_z} \right)$$

مانند قبل، حاصلجمع را به انتگرال تبدیل کرده و k را متغیر پیوسته‌ای در نظر می‌گیریم با یک حالت (یا برای اسپین s با حالت‌های $2s + 1$) به ازای حجم π^3/V از فضای k . اگر «صندوقچه‌های» مان را پوسته‌هایی کروی در یک هشتم اول بگیریم (شکل ۴.۵) «تبهگنی» (یعنی، تعداد حالت‌های موجود در صندوقچه) برابر است با

$$d_k = \frac{1}{8} \frac{4\pi k^2 dk}{(\pi^3/V)} = \frac{V}{2\pi^2} k^2 dk \quad [۹۷.۵]$$

به ازای ذرات قابل تفکیک (رابطه ۸۷.۵)، اولین قید (رابطه ۷۸.۵) می‌شود

$$N = \frac{V}{2\pi^2} e^{-\alpha} \int_0^\infty e^{-\beta \hbar^2 k^2 / 2m} k^2 dk = V e^{-\alpha} \left(\frac{m}{2\pi\beta \hbar^2} \right)^{3/2}$$

لذا

$$e^{-\alpha} = \frac{N}{V} \left(\frac{2\pi\beta \hbar^2}{m} \right)^{3/2} \quad [۹۸.۵]$$

قید دوم (رابطه ۷۹.۵) می‌گوید

$$E = \frac{V}{2\pi^2} e^{-\alpha} \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty e^{-\beta \hbar^2 k^2 / 2m} k^4 dk = \frac{3V}{2\beta} e^{-\alpha} \left(\frac{m}{2\pi\beta \hbar^2} \right)^{3/2}$$

به عبارت دیگر، با قرار دادن در رابطه ۹۸.۵ برای $e^{-\alpha}$ داریم

$$E = \frac{3N}{2\beta} \quad [۹۹.۵]$$

(اگر در رابطه ۹۷.۵ عامل اسپین، $2s + 1$ ، را هم لحاظ کنید در این مرحله موازنه می‌شود، لذا رابطه ۹۹.۵ بدون در نظر گرفتن اسپین هم درست است).

رابطه ۹۹.۵ یادآور فرمول کلاسیک انرژی جنبشی میانگین یک اتم در دمای T است^{۲۶}:

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{2} k_B T \quad [۱۰۰.۵]$$

که در آن k_B ثابت بولتزمن است. این رابطه حاکی از آن است که β به دما مربوط می‌شود:

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \quad [۱۰۱.۵]$$

برای اثبات این مطلب که رابطه مذکور در حالت کلی صادق است یعنی نه فقط برای ذرات تفکیک‌پذیر در چاه مربعی نامتناهی سه بعدی، باید نشان دهیم که مواد مختلف در تعادل حرارتی با یکدیگر مقدار β یکسانی دارند. این استدلال در کتاب‌های متعددی آمده است^{۲۷} با این حال در این قسمت آنرا تکرار نمی‌کنم - به سادگی رابطه ۱۰۱.۵ را به عنوان تعریف T اختیار می‌کنم.

مرسوم است که α (که همانطور که از مورد رابطه ۹۸.۵ واضح است، تابعی از T به شمار می‌رود) را با چیزی موسوم به پتانسیل شیمیایی جابه‌جا می‌کنند

$$\mu(T) \equiv -\alpha k_B T \quad [۱۰۲.۵]$$

سپس روابط ۸۷.۵، ۹۱.۵ و ۹۵.۵ را به صورت فرمول‌هایی برای محتمل‌ترین اعداد اشغال در یک حالت (تک ذره‌ای) به خصوص با انرژی ϵ بازنویسی می‌کنند (برای آنکه از تعداد ذرات با انرژی مشخص برسیم به تعداد ذرات در یک حالت به خصوص با آن انرژی، تنها کافی است تقسیمی بر تبهگنی آن حالت انجام دهیم):

^{۲۶} برای مثال، کتاب *Fundamentals of Physics* نوشته David Haliday و Robert Resnick، ویرایش سوم

(نیویورک، انتشارات John Wiley & Sons، ۱۹۹۷) بخش ۵.۲۱ را ملاحظه کنید.

^{۲۷} مثلاً، Yariv، زیرنویس ۲۲، بخش snap.sellfile.ir

$$n(\epsilon) = \begin{cases} e^{-(\epsilon-\mu)/k_B T}, & \text{ماکسول - بولتزمن} \\ \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/k_B T} + 1}, & \text{فرمی - دیراک} \\ \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/k_B T} - 1}, & \text{بوز - اینشتین} \end{cases} \quad [۱۰.۳.۵]$$

توزیع ماکسول - بولتزمن نتیجه کلاسیکی برای ذرات تفکیک‌پذیر است؛ **توزیع فرمی - دیراک** برای فرمیون‌های یکسان به کار می‌رود و **توزیع بوز - اینشتین** مربوط است به بوزون‌های یکسان.

توزیع فرمی - دیراک به ازای $T \rightarrow 0$ رفتار ساده خاصی دارد

$$e^{(\epsilon-\mu)/k_B T} \rightarrow \begin{cases} 0, & \epsilon < \mu(0) \\ \infty, & \epsilon > \mu(0) \end{cases} \quad \text{اگر}$$

از این رو

$$n(\epsilon) \rightarrow \begin{cases} 1, & \epsilon < \mu(0) \\ 0, & \epsilon > \mu(0) \end{cases} \quad \text{اگر} \quad [۱۰.۴.۵]$$

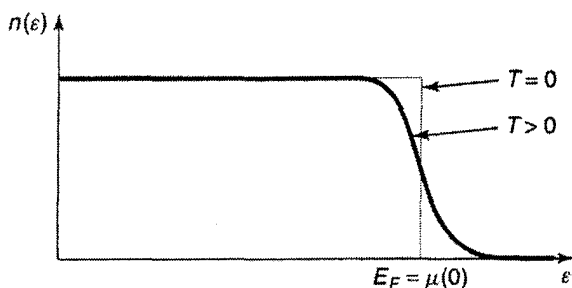
تمام حالت‌ها تا انرژی $\mu(0)$ پر هستند و هیچ حالتی با انرژی بالاتر از این اشغال نشده است (شکل ۸.۵). پیداست که پتانسیل شیمیایی در صفر مطلق دقیقاً برابر است با انرژی فرمی:

$$\mu(0) = E_F \quad [۱۰.۵.۵]$$

با افزایش دما، توزیع فرمی - دیراک نقطه قطع را «تعدیل می‌کند» همانطور که منحنی گرد شده شکل ۸.۵ نشان داده است.

کمی قبل با برگشتن به مورد یک گاز ایده‌آل، برای ذرات قابل تفکیک دریافتیم (رابطه ۹۹.۵) که انرژی کل در دمای T عبارت است از

$$E = \frac{3}{2} N k_B T \quad [۱۰.۶.۵]$$



شکل ۸.۵: توزیع فرمی - دیراک به ازای $T = 0$ و T کمی بالاتر از صفر.

در حالیکه (از رابطه ۹۸.۵) پتانسیل شیمیایی عبارت است از

$$\mu(T) = k_B T \left[\ln \left(\frac{N}{V} \right) + \frac{3}{2} \ln \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right) \right] \quad [۱۰۷.۵]$$

می‌خواهم فرمول مانسته فرمیون‌ها و بوزون‌های یکسان را با استفاده از روابط ۹۱.۵ و ۹۵.۵ به جای ۸۷.۵ محاسبه کنم. قید اول (رابطه ۷۸.۵) می‌شود

$$N = \frac{V}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{k^2}{e^{[(\hbar^2 k^2/2m) - \mu]/k_B T} \pm 1} dk \quad [۱۰۸.۵]$$

(علامت مثبت برای فرمیون‌ها و علامت منفی برای بوزون‌ها) همچنین برای قید دوم (رابطه ۷۹.۵) داریم

$$E = \frac{V}{2\pi^2} \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty \frac{k^4}{e^{[(\hbar^2 k^2/2m) - \mu]/k_B T} \pm 1} dk \quad [۱۰۹.۵]$$

قید اول $\mu(T)$ و قید دوم $E(T)$ را تعیین می‌کند (مثلاً از روی قید دوم ظرفیت گرمایی $C = \partial E / \partial T$ را بدست می‌آوریم). متأسفانه، نمی‌توان این انتگرال‌ها را برحسب توابع ساده حل کرد، اما آن را به عهده خودتان می‌گذارم تا بیشتر درباره آن بررسی کنید (مسائل ۲۸.۵ و ۲۹.۵ را ملاحظه کنید).

مساله ۲۸.۵

برای مورد فرمیون‌های یکسان، انتگرال‌های ۵-۱۰۸ و ۵-۱۰۹ را در صفر مطلق ارزیابی کنید. نتایج‌تان را با روابط ۵-۴۳ و ۵-۴۵ مقایسه کنید. (توجه کنید که برای الکترون‌ها ضریب اضافی ۲ در روابط ۵-۱۰۸ و ۵-۱۰۹ ظاهر می‌شود که ناشی از تبهگنی اسپینی است.)

*** مساله ۲۹.۵

(الف) نشان دهید برای بوزون‌های یکسان پتانسیل شیمیایی می‌بایست همیشه کمتر از کمترین انرژی مجاز باشد. راهنمایی: $n(\epsilon)$ نمی‌تواند منفی باشد.

(ب) به خصوص، برای گاز بوز ایده‌آل (بوزون‌های یکسان در چاه مربعی نامتناهی سه بعدی)، به ازای تمام دماها داریم $\mu(T) < 0$. نشان دهید در این حالت $\mu(T)$ به طور یکنوا با کاهش دما افزایش می‌یابد، با فرض آنکه N و V ثابت نگاه داشته شوند. راهنمایی: رابطه ۵-۱۰۸ را با علامت منفی بررسی کنید.

(پ) نقطه عطفی (موسوم به چگالش بوز) آن هنگام (هرچه دما را پائین‌تر می‌آوریم) بروز می‌کند که $\mu(T)$ به صفر می‌رسد. انتگرال را به ازای $\mu = 0$ برآورد کرده و فرمول دمای بحرانی T_c که آن نقطه عطف در آن رخ می‌دهد را بدست آورید. پائین‌تر از دمای بحرانی، ذرات روی حالت پایه ازدحام می‌کنند به همین خاطر ترفند محاسباتی آن است که حاصلجمع (رابطه ۷۸.۵) را با یک انتگرال پیوسته جابه‌جا کنیم، رابطه ۵-۱۰۸ اعتبار خود را از دست می‌دهد.^{۲۸} راهنمایی:

$$\int_0^\infty \frac{x^{s-1}}{e^x - 1} dx = \Gamma(s)\zeta(s) \quad [۱۱۰.۵]$$

که در آن Γ تابع گامای اولر و ζ تابع زتای ریمان است. بدنبال مقادیر عددی مناسب بگردید. (ت) دمای بحرانی را برای ${}^4\text{He}$ بدست آورید. چگالی آن در این دما برابر است با 0.15 gm/cm^3 . توجه: مقدار تجربی دمای بحرانی برای ${}^4\text{He}$ برابر است با 2.17 K .

^{۲۸} کتاب *Statistical Physics* نوشته F. Mandl (لندن، انتشارات John Wiley & Sons، ۱۹۷۱) بخش ۵.۱۱ را

ویژگیهای قابل توجه ^4He در همسایگی T_c در مرجع ذکر شده در زیرنویس ۲۹ مورد بحث و بررسی قرار گرفته است.

۵.۴.۵ طیف جسم سیاه

فوتون‌ها (کوانتاهای میدان الکترومغناطیسی) بوزون‌های یکسانی با اسپین ۱ هستند، اما بسیار خاص‌اند زیرا آنها ذراتی بدون جرم بوده و در نتیجه ذاتا نسبیتی محسوب می‌شوند. می‌توانیم در این قسمت آنها را به شمار آوریم، به شرط آنکه آماده پذیرفتن یک مجموعه تبصره چهارتایی باشید که به مکانیک کوانتومی غیر نسبیتی تعلق ندارد:

(۱) انرژی یک فوتون از طریق رابطه پلانک $E = h\nu = \hbar\omega$ به فرکانس آن مربوط می‌شود.

(۲) عدد موج k از طریق رابطه $k = 2\pi/\lambda = \omega/c$ به فرکانس مربوط می‌شود که در آن c سرعت نور است.

(۳) تنها دو حالت اسپینی (عدد کوانتومی m می‌تواند ۱+ و ۱- باشد، اما نمی‌تواند ۰ باشد) وجود دارند.

(۴) تعداد فوتون‌ها کمیت پایسته‌ای نیست؛ وقتی دما افزایش می‌یابد تعداد فوتون‌ها (به ازای واحد حجم) افزایش می‌یابد.

از منظر مورد شماره ۴، نخستین رابطه قیدی (رابطه ۷۸.۵) به کار نمی‌آید. می‌توانیم با معلوم کردن $0 \rightarrow \alpha$ در رابطه ۸۲.۵ و هر آنچه در ادامه آن می‌آید این مورد را به حساب آوریم. بدین ترتیب محتمل‌ترین عدد اشغال برای فوتون‌ها (رابطه ۹۵.۵) عبارت است از

$$N_\omega = \frac{d_k}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \quad [111.5]$$

d_k برای فوتون‌های محصور در جعبه‌ای به حجم V از رابطه ۹۷.۵ بدست می‌آید^{۲۹} که به خاطر اسپین (مورد شماره ۳) در یک ۲ هم ضرب شده و برحسب ω به جای k بیان می‌شود (مورد شماره ۲):

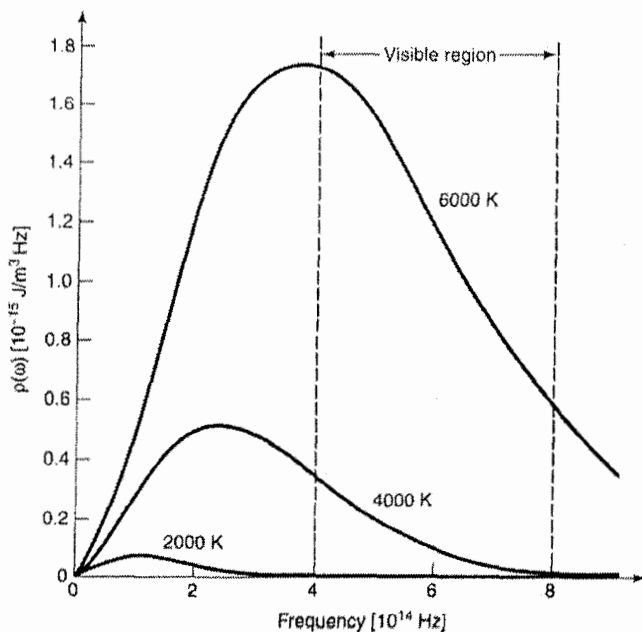
^{۲۹} به واقع، اجازه نداریم از این فرمول که از معادله شرودینگر (غیر نسبیتی) می‌آید استفاده کنیم؛ خوشبختانه، تبهگنی

$$d_k = \frac{V}{\pi^2 c^3} \omega^2 d\omega \quad [۱۱۲.۵]$$

بدینسان چگالی انرژی $N_\omega \hbar \omega / V$ ، در محدوده فرکانسی $d\omega$ عبارت است از $\rho(\omega) d\omega$ که در آن

$$\rho(\omega) = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3 (e^{\hbar \omega / k_B T} - 1)} \quad [۱۱۳.۵]$$

این طیف جسم سیاه معروف پلانک است که انرژی را به ازای واحد حجم، به ازای واحد فرکانس در یک میدان الکترومغناطیسی در حال تعادل در دمای T بدست می‌دهد. این طیف برای سه دمای مختلف در شکل ۹.۵ رسم شده است.



شکل ۹.۵: فرمول پلانک برای طیف جسم سیاه، رابطه ۱۱۳.۵

مساله ۳۰.۵

(الف) از رابطه ۱۱۳.۵ استفاده کرده و چگالی انرژی در بازه طول موجی $d\lambda$ را بدست آورید.

راهنمایی: قرار دهید $\rho(\omega)d\omega = \bar{\rho}(\lambda)d\lambda$ و رابطه را برای $\bar{\rho}(\lambda)$ حل کنید.

(ب) قانون جابه‌جایی وین را برای طول موجی که در آن چگالی انرژی جسم سیاه بیشینه باشد

استخراج کنید:

$$\lambda_{\max} = \frac{2.90 \times 10^{-3} \text{ mK}}{T} \quad [114.5]$$

راهنمایی: باید رابطه متعالی $(5-x) = 5e^{-x}$ را با استفاده از ماشین حساب (یا کامپیوتر) حل

کنید؛ جواب عددی را تا سه رقم معنی‌دار بدست آورید.

مساله ۳۱.۵ فرمول استفان – بولتزمن را برای چگالی انرژی کل در تابش جسم سیاه بدست

آورید:

$$\frac{E}{V} = \left(\frac{\pi^2 k_B^4}{15 \hbar^3 c^3} \right) T^4 = (7.57 \times 10^{-16} \text{ J m}^{-3} \text{ K}^{-4}) T^4 \quad [115.5]$$

راهنمایی: از رابطه ۱۱۰.۵ برای حل انتگرال استفاده کنید. در نظر داشته باشید که

$$\zeta(4) = \pi^4/90$$

مسائل دیگری برای فصل ۵

مساله ۳۲.۵ دو ذره بدون برهم‌کنش هر کدام به جرم m را در پتانسیل نوسانگر هماهنگ یک

بعدی (رابطه ۴۳.۲) تصور کنید. اگر یکی در حالت پایه و دیگری در اولین حالت برانگیختگی

باشد، مقدار $\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle$ را محاسبه کنید، با این فرض که (الف) آنها ذرات غیر قابل تفکیک

هستند، (ب) آنها بوزون‌های یکسان هستند، و (پ) آنها فرمیون‌های یکسان هستند. از اسپین

صرف‌نظر کنید (اگر با این وضع راحت نیستید، فقط فرض را بر این بگذارید که هر دو در حالت

اسپینی یکسانی قرار دارند).

مساله ۳۳.۵ فرض کنید سه ذره در اختیار دارید و سه حالت تک ذره‌ای $\psi_a(x)$ ، $\psi_b(x)$ و

$\psi_c(x)$ هم محیاست. چه تعداد حالت سه ذره‌ای متفاوت را می‌توان ساخت (الف) در صورتیکه

آنها ذرات تفکیک پذیر باشند، (ب) چنانچه بوزون های یکسان باشند و (پ) اگر فرمیون های یکسان باشند؟ (نیازی نیست این ذرات در حالت های مختلفی قرار داشته باشند - $\psi_a(x_1)\psi_a(x_2)\psi_a(x_3)$ یک امکان است به شرط آنکه ذرات تفکیک پذیر باشند).

مساله ۳۴.۵ انرژی فرمی را برای الکترون ها در یک چاه مربعی نامتناهی دو بعدی حساب کنید. σ را تعداد الکترون های آزاد به ازای واحد سطح بگیرید.

مساله ۳۵.۵ *** ستاره های سرد به خصوصی (موسوم به کوتوله های سفید) از طریق فشار واگنی الکترون های شان (رابطه ۴۶.۵) در برابر رمبش گرانشی خود را پابرجا نگاه می دارند. با فرض آنکه چگالی ثابتی دارند، شعاع R چنین اجسامی را می توان به صورت زیر محاسبه کرد:

(الف) انرژی کل الکترون (رابطه ۴۵.۵) را برحسب این شعاع، تعداد نوکلئون ها (پروتون ها و نوترون ها) N ، تعداد الکترون ها به ازای نوکلئون q و جرم الکترون m بنویسید.

(ب) انرژی گرانشی یک کره چگال یکنواخت را حساب کنید. پاسخ تان را بر حسب G (ثابت جهانی گرانش)، R ، N و M (جرم نوکلئون) بیان کنید. توجه کنید که انرژی گرانشی منفی است.

(پ) شعاعی را بیابید که برای آن انرژی کل، (الف) به علاوه (ب)، کمینه باشد. پاسخ:

$$R = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3} \frac{\hbar^2 q^{5/3}}{GmM^2 N^{1/3}}$$

(دقت کنید که شعاع با افزایش جرم کل کاهش می یابد!) اعداد واقعی را برای همه به جز N با استفاده از $q = 1/2$ در رابطه قرار دهید (در واقع، q با افزایش عدد اتمی مقدار کمی کاهش می یابد، اما برای مقاصد ما به اندازه کافی نزدیک هست). پاسخ:

$$R = 7.6 \times 10^{25} N^{-1/3} m$$

(ت) شعاع یک کوتوله سفید با جرمی به اندازه خورشید را به کیلومتر تعیین کنید.

(ث) انرژی فرمی کوتوله سفید در قسمت (ت) را برحسب الکترون ولت تعیین کرده و آنرا با انرژی سکون یک الکترون مقایسه کنید. توجه کنید که این سامانه به طرز خطرناکی نسبیتی است (مساله ۳۶.۵ را ملاحظه کنید).

مساله ۳۶.۵*** می‌توانیم نظریه گاز الکترون آزاد (بخش ۱.۳.۵) را از طریق جابه‌جایی انرژی جنبشی $E = p^2/2m$ با فرمول نسبیتی آن، $E = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} - mc^2$ ، به محدوده نسبیتی توسعه دهیم. تکانه به روش مرسوم به بردار موج مربوط می‌شود: $p = \hbar k$. به ویژه، در حد کاملاً نسبیتی، $E \approx pc = \hbar ck$.

(الف) $\hbar^2 k^2/2m$ در رابطه ۴۴.۵ را با عبارت فوق نسبیتی $\hbar ck$ جابه‌جا کرده و E را در این نظام محاسبه کنید.

(ب) بخش‌های (الف) و (ب) مساله ۳۵.۵ را به ازای گاز الکترونی فوق نسبیتی تکرار کنید. توجه داشته باشید که در این حالت بدون توجه به اندازه شعاع، هیچ کمینه پایداری وجود ندارد؛ اگر انرژی کل مثبت باشد، نیروهای واگنی از نیروهای گرانشی بیشتر شده و ستاره منبسط خواهد شد، در حالیکه اگر کل منفی باشد، برد با نیروهای گرانشی بوده و ستاره می‌رمبد. تعداد بحرانی نوکلئون‌ها N_c را به گونه‌ای بیابید که رمبش گرانشی به ازای $N > N_c$ رخ دهد. این را حد چاندراشکار می‌نامند. پاسخ: 2.0×10^{57} . جرم ستاره متناظر چقدر است (جوابتان را به صورت مضربی از جرم خورشید ارائه کنید)؟ ستاره‌های سنگین‌تر از این، کوتوله سفید شکل نمی‌دهند، اما بیشتر رمبیده و (چنانچه شرایط مساعد باشد) به ستاره‌های نوترونی تبدیل می‌شوند.

(پ) در چگالی فوق‌العاده بالا، معکوس واپاشی بتا، $e^- + p^+ \rightarrow n + \nu$ ، به طور مجازی تمام پروتون‌ها و الکترون‌ها را به نوترون‌ها تبدیل می‌کند (نوترون آزاد می‌کند، که به تولید انرژی در این فرایند منجر می‌شود). به تدریج فشار واگنی نوترون رمبش را پایا می‌سازد، درست همانطور که واگنی الکترون کوتوله سفید را متوازن می‌کند (مساله ۳۵.۵ را ببینید). شعاع ستاره‌ای نوترونی با جرم خورشید را حساب کنید. همچنین انرژی فرمی (نوترون) را حساب

کرده و آنرا با انرژی سکون یک نوترون مقایسه کنید. آیا منطقی است که چنین ستاره‌ای را غیر نسبیتی بگیریم؟

مساله ۳۷.۵ ***

(الف) پتانسیل شیمیایی و انرژی کل را برای ذرات تفکیک‌پذیر به ازای پتانسیل نوسانگر هماهنگ سه بعدی (مساله ۳۸.۴) بدست آورید. راهنمایی: حاصلجمع‌های روابط ۷۸.۵ و ۷۹.۵ را می‌توان به طور دقیق در این حالت حساب کرد - نیازی به استفاده از یک تقریب انتگرالی مثل کاری که در مورد چاه مربعی نامتناهی کردیم وجود ندارد. دقت داشته باشید که با مشتق‌گیری از سری‌های هندسی به شکل

$$\frac{1}{1-x} = \sum_{n=0}^{\infty} x^n \quad [116.5]$$

رابطه زیر بدست می‌آید

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{x}{1-x} \right) = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)x^n$$

پاسخ:

$$E = \frac{3}{2} N \hbar \omega \left(\frac{1 + e^{-\hbar \omega / k_B T}}{1 - e^{-\hbar \omega / k_B T}} \right) \quad [117.5]$$

(ب) درباره حالت محدود کننده $k_B T \ll \hbar \omega$ بحث کنید.

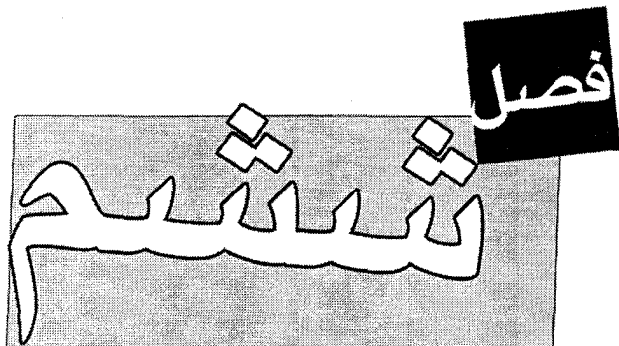
(پ) درباره حد کلاسیکی، $k_B T \gg \hbar \omega$ ، با در نظر گرفتن قضیه همپاری^{۳۰} بحث کنید. ذره‌ای

در نوسانگر هماهنگ سه بعدی دارای چند درجه آزادی است؟

^{۳۰} برای مثال، Haliday, Resnik and Walker (زیرنویس ۲۷)، بخش ۹.۲۰ را مطالعه کنید.

بخش دوم

کاربرد



نظریه اختلال مستقل از زمان

۱.۶ نظریه اختلال غیر تبهگن

۱.۱.۶ فرمول بندی عمومی

فرض کنید معادله شرودینگر (مستقل از زمان) را برای پتانسیلی (به فرض، چاه مربعی نامتناهی یک بعدی) حل کرده ایم:

$$H^0 \psi_n^0 = E_n^0 \psi_n^0 \quad [۱.۶]$$

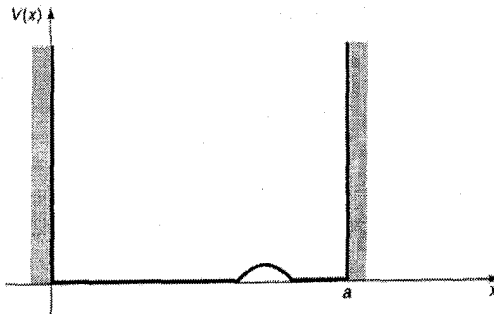
که در نتیجه مجموعه کاملی از ویژه توابع راست هنجار ψ_n^0 ،

$$\langle \psi_n^0 | \psi_m^0 \rangle = \delta_{nm} \quad [۲.۶]$$

و ویژه مقادیر متناظر E_n^0 از آنها بدست آمده اند. اکنون این پتانسیل را کمی مختل می کنیم (به فرض، با قرار دادن یک برآمدگی کوچک در پائین چاه - شکل ۱.۶). می خواهیم ویژه توابع و ویژه بردارهای جدید را بدست آوریم:

$$H \psi_n = E_n \psi_n \quad [۳.۶]$$

با این حال برخلاف قبل که در حل معادله شرودینگر خوش شانس بودیم، اینبار دیگر شانس برای حل صریح آن که حال پتانسیلش پیچیده شده نداریم. نظریه اختلال رهیافتی روشمند برای بدست آوردن جواب های تقریبی مساله مختل شده بر مبنای جواب های شناخته شده دقیق حالت مختل نشده است.



شکل ۱.۶: چاه مربعی نامتناهی دارای یک اختلال کوچک

در آغاز، هامیلتونی جدید را به صورت حاصلجمع دو عبارت می‌نویسیم:

$$H = H^0 + \lambda H' \quad [۴.۶]$$

که در آن H' همان اختلال است (اندیس بالای ۰ همیشه مشخص کننده کمیت مختل نشده است). فعلاً λ را عدد کوچکی در نظر می‌گیریم؛ بعداً آنرا به ۱ می‌رسانیم و H هم که هامیلتونی واقعی و دقیق خواهد بود. با نوشتن ψ_n و E_n به صورت یک سری توانی برحسب λ ، داریم

$$\psi_n = \psi_n^0 + \lambda \psi_n^1 + \lambda^2 \psi_n^2 + \dots \quad [۵.۶]$$

$$E_n = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots \quad [۶.۶]$$

اینجا E_n^1 تصحیح مرتبه اول n امین ویژه مقدار و ψ_n^1 تصحیح مرتبه اول n امین ویژه تابع است؛ E_n^2 و ψ_n^2 تصحیحات مرتبه دوم هستند و همین‌طور تا آخر. با قرار دادن روابط ۵.۶ و ۶.۶ در رابطه ۳.۶ داریم

$$\begin{aligned} (H^0 + \lambda H')[\psi_n^0 + \lambda \psi_n^1 + \lambda^2 \psi_n^2 + \dots] \\ = (E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots)[\psi_n^0 + \lambda \psi_n^1 + \lambda^2 \psi_n^2 + \dots] \end{aligned}$$

یا (با مرتب‌سازی برحسب توان‌های λ):

$$\begin{aligned} H^0 \psi_n^0 + \lambda(H^0 \psi_n^1 + H' \psi_n^0) + \lambda^2(H^0 \psi_n^2 + H' \psi_n^1) + \dots \\ = E_n^0 \psi_n^0 + \lambda(E_n^0 \psi_n^1 + E_n^1 \psi_n^0) + \lambda^2(E_n^0 \psi_n^2 + E_n^1 \psi_n^1 + E_n^2 \psi_n^0) + \dots \end{aligned}$$

در پائین‌ترین مرتبه^۱ (λ^0) از این رابطه می‌رسیم به $H^0 \psi_n^0 = E_n^0 \psi_n^0$ که چیز جدیدی نیست (همان رابطه ۱.۶ است). برای مرتبه اول (λ^1):

$$H^0 \psi_n^1 + H' \psi_n^0 = E_n^0 \psi_n^1 + E_n^1 \psi_n^0 \quad [۷.۶]$$

برای مرتبه دو (λ^2)

^۱مانند همیشه (فصل ۲، زیرنویس ۲۵) بی‌مانندی بسط‌های سری‌های توانی تضمین می‌کند که ضرایب توان‌های مشابه با هم برابر باشند.

$$H^0 \psi_n^2 + H' \psi_n^1 = E_n^0 \psi_n^2 + E_n^1 \psi_n^1 + E_n^2 \psi_n^0 \quad [۸.۶]$$

و همین‌طور تا آخر. (اکنون دیگر کارم با λ تمام شده است - λ ابزاری برای دنبال کردن مرتبه‌های مختلف بود - بنابراین آنرا به 1 می‌رسانیم).

۲.۱.۶ نظریه مرتبه اول

حاصلضرب داخلی رابطه ۷.۶ در ψ_n^0 (یعنی، ضرب کردن آن در $(\psi_n^0)^*$ و سپس انتگرال‌گیری) را در نظر می‌گیریم.

$$\langle \psi_n^0 | H^0 \psi_n^1 \rangle + \langle \psi_n^0 | H' \psi_n^0 \rangle = E_n^0 \langle \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle + E_n^1 \langle \psi_n^0 | \psi_n^0 \rangle$$

اما H^0 هرمیتی است، پس

$$\langle \psi_n^0 | H^0 \psi_n^1 \rangle = \langle H^0 \psi_n^1 | \psi_n^1 \rangle = \langle E_n^0 \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle = E_n^0 \langle \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle$$

که آن هم عبارت اول سمت راست را حذف می‌کند. به علاوه، $\langle \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle = 1$ ، لذا^۲

$$E_n^1 = \langle \psi_n^0 | H' | \psi_n^0 \rangle \quad [۹.۶]$$

این نتیجه اصلی و بنیادی نظریه اختلال مرتبه اول است؛ در قالب یک مساله عملی، می‌توان آنرا مهم‌ترین رابطه در مکانیک کوانتومی قلمداد کرد. رابطه حاکی از آن است که تصحیح مرتبه اول انرژی برابر است با مقدار چشمداشتی اختلال در حالت مختل نشده.

مثال ۱.۶ توابع موج مختل نشده چاه مربعی نامتناهی (رابطه ۲۸.۲) از این قرارند

$$\psi_n^0(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

^۲ در این متن اهمیتی ندارد که بنویسیم $\langle \psi_n^0 | H' | \psi_n^0 \rangle$ یا $\langle \psi_n^0 | H' \psi_n^0 \rangle$ (با علامت بار عمودی) زیرا در حال استفاده از خود تابع موج برای «برچسب‌زنی» حالت هستیم. با این حال نمادگذاری اولی ارجح‌تر است زیرا ما را از این آداب و رسوم خاص رها می‌سازد.

فرض کنید این سامانه را از طریق بالا بردن «کف» چاه به مقدار ثابت V_0 مختل می‌کنیم (شکل ۲.۶).
تصحیح مرتبه اول انرژی‌ها را بدست آورید.

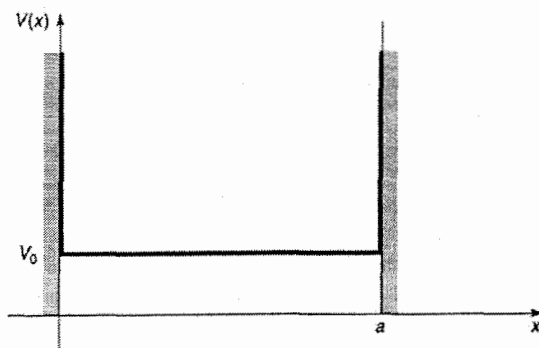
پاسخ. در اینصورت $H' = V_0$ است و تصحیح مرتبه اول انرژی n امین حالت عبارت است از

$$E_n^1 = \langle \psi_n^0 | V_0 | \psi_n^0 \rangle = V_0 \langle \psi_n^0 | \psi_n^0 \rangle = V_0$$

در اینصورت، سطوح انرژی اصلاح شده عبارتند از $E_n \cong E_n^0 + V_0$ ؛ این انرژی‌ها به سادگی به مقدار V_0 بالا آمده‌اند. البته! تنها نکته غیر منتظره این است که در این حالت نظریه مرتبه اول جواب دقیق را بدست می‌دهد. آشکار است که به ازای یک اختلال ثابت تمام تصحیحات بالاتر از بین می‌روند.^۳ از سوی دیگر، چنانچه اختلال تنها به مقدار نیمی از عرض چاه پهن شود (شکل ۳.۶)، آنگاه

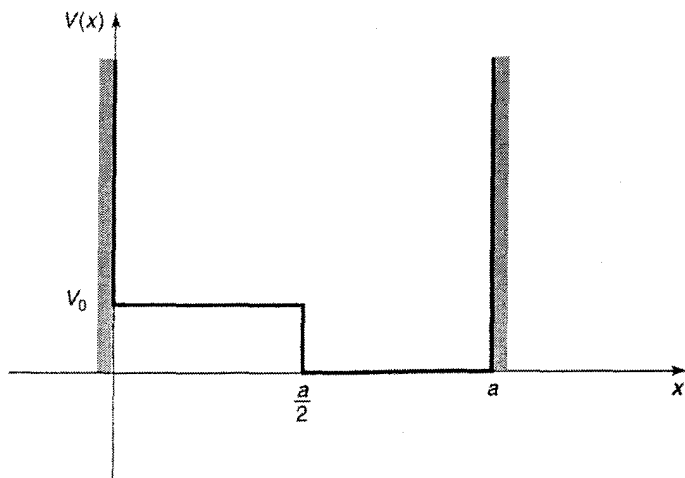
$$E_n^1 = \frac{2V_0}{a} \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx = \frac{V_0}{2}$$

در اینحالت هر سطح انرژی به اندازه $V_0/2$ بالا می‌آید. آنچه محرز است این است که نتیجه بدست آمده دقیق نیست با این حال به عنوان تقریب مرتبه اول به نظر منطقی می‌آید.



شکل ۲.۶: اختلال ثابت روی کل چاه.

^۳در ضمن، اینجا هیچ چیز به سرشت خاص چاه مربعی نامتناهی مربوط نیست - به شرط آنکه اختلال ثابت باشد، همین نتیجه برای هر پتانسیل دیگر نیز بدست می‌آید.



شکل ۳.۶: اختلال ثابت روی نیمی از چاه.

رابطه ۹.۶ تصحیح مرتبه اول انرژی است؛ برای یافتن تصحیح مرتبه اول تابع موج رابطه ۷.۶ را بازنویسی می‌کنیم:

$$(H^0 - E_n^0)\psi_n^1 = -(H' - E_n^1)\psi_n^0 \quad [۱۰.۶]$$

سمت راست یک تابع شناخته شده است، پس رابطه فوق به مثابه یک معادله دیفرانسیل غیریکنواخت برای ψ_n^1 است. باید توجه داشت که توابع موج مختل نشده مجموعه کاملی را می‌سازند، از اینرو ψ_n^1 را (مانند هر تابع دیگری) می‌توان به صورت ترکیبی خطی از آنها بیان کرد:

$$\psi_n^1 = \sum_{m \neq n} c_m^{(n)} \psi_m^0 \quad [۱۱.۶]$$

نیازی به بحساب آوردن حالت $m = n$ در این حاصلجمع نیست، چراکه اگر ψ_n^1 رابطه ۱۰.۶ را برآورده سازد، بنابراین در $(\psi_n^1 + \alpha \psi_n^0)$ هم به ازای هر مقدار ثابتی از α صدق می‌کند و به همین

خاطر می‌توانیم از این آزادی عمل برای تفریق عبارت ψ_n^0 استفاده کنیم.^۴ اگر می‌توانستیم ثابت‌های $c_m^{(n)}$ را تعیین کنیم، کارمان تمام بود.

خب، با قرار دادن رابطه ۱۱.۶ در رابطه ۱۰.۶ و استفاده از این نکته که ψ_m^0 در معادله شرودینگر مختل نشده (رابطه ۱.۶) صدق می‌کند، داریم

$$\sum_{m \neq n} (E_m^0 - E_n^0) c_m^{(n)} \psi_m^0 = -(H' - E_n^1) \psi_n^0$$

ضرب داخلی آن در ψ_l^0 را که در نظر بگیریم می‌رسیم به

$$\sum_{m \neq n} (E_m^0 - E_n^0) c_m^{(n)} \langle \psi_l^0 | \psi_m^0 \rangle = -\langle \psi_l^0 | H' | \psi_n^0 \rangle + E_n^1 \langle \psi_l^0 | \psi_n^0 \rangle$$

اگر $l = n$ باشد، عبارت سمت چپ برابر با صفر می‌شود و رابطه ۹.۶ را مجدداً بدست می‌آوریم؛ اما اگر $l \neq n$ باشد می‌رسیم به

$$(E_l^0 - E_n^0) c_l^{(n)} = -\langle \psi_l^0 | H' | \psi_n^0 \rangle$$

یا

$$c_m^{(n)} = \frac{\langle \psi_m^0 | H' | \psi_n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} \quad [۱۲.۶]$$

لذا

$$\psi_n^1 = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_l^0 | H' | \psi_n^0 \rangle}{(E_n^0 - E_m^0)} \psi_m^0 \quad [۱۳.۶]$$

^۴ از دیگر سو، نگاهی اجمالی به رابطه ۵.۶ نشان از آن دارد که هر مولفه ψ_n^0 در ψ_n^1 را همچنین می‌توان بیرون آورده و با جمله اول ترکیب کرد. در واقع، انتخاب $c_n^{(n)} = 0$ مسلم می‌کند که $\psi_n - \psi_n^0$ با در نظر گرفتن 1 به عنوان ضریب ψ_n^0 در رابطه ۵.۶- (تا مرتبه اول λ) بهنجار باشد؛

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle = \langle \psi_n^0 | \psi_n^0 \rangle + \lambda (\langle \psi_n^1 | \psi_n^0 \rangle + \langle \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle) + \lambda^2 (\dots) + \dots$$

اما راست هنجاری حالت‌های مختل نشده به این معنی است که نخستین جمله 1 و $\langle \psi_n^1 | \psi_n^0 \rangle = \langle \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle = 0$ است تا زمانی که ψ_n^1 هیچ مولفه ψ_n^0 نداشته باشد.

توجه داشته باشید که تا وقتی ثابتی به ازای $m = n$ نداریم یعنی تا زمانی که طیف انرژی مختل نشده غیر تبهگن است، مشکلی هم با مخرج نداریم. اما اگر دو حالت مختل نشده دارای یک انرژی باشند، آن وقت است که حسابی به دردسر می‌افتیم (برای بدست آوردن رابطه ۱۲.۶ به صفر تقسیم کرده‌ایم)؛ در آنصورت به نظریه اختلال تبهگن نیاز داریم که در بخش ۲.۶ به سراغ آن خواهیم رفت. در اینجا نظریه اختلال مرتبه اول کامل می‌شود؛ تصحیح مرتبه اول انرژی، E_n^1 ، از رابطه ۹.۶ و تصحیح مرتبه اول تابع موج، ψ_n^1 ، هم از رابطه ۱۳.۶ بدست می‌آید. باید اخطار کنم که چون نظریه اختلال اغلب انرژی‌های شگفت‌آوری بدست می‌دهد (یعنی $E_n^0 + E_n^1$ خیلی به E_n نزدیک است)، توابع موجی که بدست می‌دهد به ضعیفی شهره‌اند.

مساله ۱.۶* فرض کنید یک برآمدگی به شکل تابع دلتا را در مرکز چاه مربعی نامتناهی قرار می‌دهیم

$$H' = \alpha \delta(x - a/2)$$

که در آن α یک ثابت است.

(الف) تصحیح مرتبه اول انرژی‌های مجاز را بدست آورید. توضیح دهید چرا این انرژی‌ها برای n های زوج مختل شده نیستند.

(ب) اولین سه جمله غیر صفر در بسط (رابطه ۱۳.۶) تصحیح تا حالت پایه، ψ_1^1 ، را بدست آورید.

مساله ۲.۶* برای نوسانگر هماهنگ $[V(x) = (1/2)kx^2]$ ، انرژی‌های مجاز عبارتند از

$$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega, (n = 0, 1, 2, \dots)$$

که در آن $\omega = \sqrt{k/m}$ بسامد کلاسیکی است. اکنون فرض کنید ثابت فنر کمی افزایش پیدا می‌کند: $k \rightarrow (1 + \epsilon)k$. (شاید فنر را سرد کرده باشیم، پس انعطاف‌پذیری آن کمتر شده است).

(الف) انرژی‌های جدید را به طور دقیق بیابید (که در اینحالت کم اهمیت هستند). فرمول خود را به صورت یک سری توانی برحسب ϵ تا مرتبه دوم بسط دهید.

(ب) اکنون اختلال مرتبه اول در انرژی را با استفاده از رابطه ۹.۶ حل کنید. در این حالت H' چیست؟ نتیجه خود را با قسمت (الف) مقایسه کنید. راهنمایی: محاسبه انتگرال در حل این مساله ضرورتی ندارد - در حقیقت مجاز نیست.

مساله ۳.۶ دو بوزون یکسان را در یک چاه مربعی نامتناهی (رابطه ۱۹.۲) قرار می‌دهیم. آنها از طریق پتانسیل زیر با یکدیگر برهم‌کنش ضعیفی دارند

$$V(x_1, x_2) = -aV_0\delta(x_1 - x_2)$$

(که در آن V_0 ثابتی با بعد انرژی و a هم پهنای چاه است).

(الف) نخست، از برهم‌کنش بین ذرات صرف‌نظر کرده و حالت پایه و اولین حالت برانگیختگی را بیابید - هم توابع موج و هم انرژی‌های مجاز.

(ب) از نظریه اختلال مرتبه اول برای محاسبه اثر برهم‌کنش ذره - ذره روی انرژی‌های حالت‌های برانگیخته و پایه استفاده کنید.

۳.۱.۶ انرژی‌های مرتبه دوم

کار را مانند قبل پی می‌گیریم؛ اینبار حاصلضرب داخلی رابطه مرتبه دوم (رابطه ۸.۶) در ψ_n^0 را مد نظر قرار می‌دهیم:

$$\langle \psi_n^0 | H^0 \psi_n^2 \rangle + \langle \psi_n^0 | H' \psi_n^1 \rangle = E_n^0 \langle \psi_n^0 | \psi_n^2 \rangle + E_n^1 \langle \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle + E_n^2 \langle \psi_n^0 | \psi_n^0 \rangle$$

مجدداً، از هرمیتی بودن H^0 بهره‌برداری می‌کنیم:

$$\langle \psi_n^0 | H^0 \psi_n^2 \rangle = \langle H^0 \psi_n^0 | \psi_n^2 \rangle = E_n^0 \langle \psi_n^0 | \psi_n^2 \rangle$$

از اینرو جمله اول سمت چپ، جمله اول سمت راست را حذف می‌کند. در این بین، $\langle \psi_n^0 | \psi_n^0 \rangle = 1$ است و به همین خاطر یک فرمول برای E_n^2 برآیمان باقی می‌ماند:

$$E_n^2 = \langle \psi_n^0 | H' \psi_n^1 \rangle - E_n^1 \langle \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle \quad [۱۴.۶]$$

اما

$$\langle \psi_n^0 | \psi_m^1 \rangle = \sum_{m \neq n} c_m^{(n)} \langle \psi_n^0 | \psi_m^0 \rangle = 0$$

(چون جمع حالت $m = n$ را طرد می‌کند و بقیه موارد هم راست هنجار هستند) از اینرو

$$E_n^2 = \langle \psi_n^0 | H' | \psi_n^1 \rangle = \sum_{m \neq n} c_m^{(n)} \langle \psi_n^0 | H' | \psi_m^0 \rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^0 | H' | \psi_n^0 \rangle \langle \psi_n^0 | H' | \psi_m^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0}$$

یا، در نهایت

$$E_n^2 = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_m^0 | H' | \psi_n^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} \quad [15.6]$$

این نتیجه اصلی و بنیادی نظریه اختلال مرتبه دوم است.

می‌توانستیم کار را تا محاسبه تصحیح مرتبه دوم تابع موج (ψ_n^2) ، تصحیح مرتبه سوم انرژی و همینطور تا آخر ادامه دهیم، اما در عمل رابطه ۱۵.۶ برحسب معمول بالاترین مرتبه سودمندی است که از طریق این روش مورد توجه قرار می‌گیرد.^۵

مساله ۴.۶**

(الف) تصحیح مرتبه دوم انرژی‌های (E_n^2) مساله ۱.۶ را بدست آورید. توضیح: می‌توانید صریحاً سری را برای بدست آوردن نتیجه با $-2m(\alpha/\pi\hbar n)^2$ به ازای n های فرد جمع بزنید.

^۵ در نمادگذاری کوتاه نویسی $\Delta_{mn} \equiv E_m^0 - E_n^0$ ، تصحیح‌های مرتبه n ام انرژی عبارتند از

$$E_n^1 = V_{nn}, E_n^2 = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{nm}|^2}{\Delta_{nm}}, E_n^3 = \sum_{l, m \neq n} \frac{V_{nl} V_{lm} V_{mn}}{\Delta_{nl} \Delta_{nm}} - V_{nn} \sum_{m \neq n} \frac{|V_{nm}|^2}{\Delta_{nm}^2}$$

تصحیح مرتبه سوم در کتاب *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory* اثر Landau & Lifschitz ویرایش سوم، انتشارات Pergamon، آکسفورد (۱۹۷۷) صفحه ۱۳۶ آمده است؛ مرتبه‌های چهارم و پنجم (همراه با تکنیک عمومی توانمندی برای بدست آوردن مرتبه‌های بالاتر) در مقاله *Higher-Order Spectral Perturbation* (گزارش منتشر نشده‌ای مربوط به کالج Reed، ۲۰۰۰) نوشته Nicholas Wheeler معرفی شده است. توضیح صورت‌بندی‌های جایگزین نظریه اختلال مستقل از زمان حاوی روش Delgarno-Lewis بوده و ارتباط نزدیکی با نظریه اختلال لگاریتمی دارد (برای مثال، مقاله U. Sukhatne و T. Imbo در مجله *Am. J. Phys.*, **52**, 140 (1984) در مجله *Am. J. Phys.*, **52**, 140 (1984) برای Delgarno-Lewis و مقاله H. Mavromatis در *Phys. Rev. Lett.*, **30**, 136 (1973) برای LPT و مقاله H. Mavromatis در *Phys. Rev. Lett.*, **30**, 136 (1973) برای snap.sellfile.ir).

(ب) تصحیح مرتبه دوم انرژی حالت پایه (E_0^2) را برای پتانسیل مساله ۲.۶ محاسبه کنید. ببینید آیا نتیجه شما با جواب دقیق سازگاری دارد.

مساله ۵.۶** ذره بارداری در پتانسیل نوسانگر هماهنگ یک بعدی را تصور کنید. فرض کنید میدان الکتریکی ضعیفی (E) را باز می‌کنیم تا اینکه انرژی پتانسیل به میزان $H' = -qEx$ انتقال پیدا کند.

(الف) نشان دهید که هیچ تغییر مرتبه اولی در سطوح انرژی بوجود نیامده و سپس تصحیح مرتبه دوم را محاسبه کنید. راهنمایی: مساله ۳۳.۳ را ببینید.

(ب) می‌توان معادله شرودینگر را به طور دقیق در اینحالت از طریق تغییر متغیر $x' = x - (qE/m\omega^2)$ حل کرد. انرژی‌های دقیق را بدست آورده و نشان دهید با تقریب نظریه اختلال سازگاری دارند.

۲.۶ نظریه اختلال تبهگن

اگر حالت‌های مختل نشده تبهگن باشند - یعنی اگر دو (یا بیشتر) حالت مجزا (ψ_a^0 و ψ_b^0) دارای یک انرژی باشند - در آنصورت نظریه اختلال متعارف با ناکامی مواجه می‌شود: $c_a^{(b)}$ (رابطه ۱۲.۶ و E_a^2 (رابطه ۱۵.۶) بینهایت می‌شود (مگر آنکه احتمالاً صورت حذف شود، $\langle \psi_a^0 | H' | \psi_b^0 \rangle = 0$ راه گریزی که بعداً برایمان حائز اهمیت خواهد بود). بنابراین در حالت تبهگن، هیچ دلیلی حتی برای اعتماد داشتن به تصحیح مرتبه دوم انرژی (رابطه ۹.۶) هم وجود ندارد و به همین خاطر باید در جستجوی روش دیگری برای پرداختن به این مساله باشیم.

۱.۲.۶ تبهگنی دوگانه

فرض کنید که

$$H^0 \psi_a^0 = E^0 \psi_a^0, H^0 \psi_b^0 = E^0 \psi_b^0, \langle \psi_a^0 | \psi_b^0 \rangle = 0 \quad [۱۶.۶]$$

با در نظر گرفتن این مطلب که ψ_a^0 و ψ_b^0 هر دو بهنجار هستند. دقت کنید هر ترکیب خطی از این حالت‌ها،

$$\psi^0 = \alpha\psi_a^0 + \beta\psi_b^0 \quad [۱۷.۶]$$

کماکان ویژه حالتی از H^0 با ویژه مقدار E^0 است:

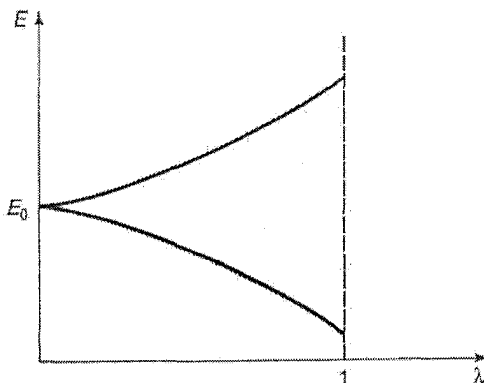
$$H^0\psi^0 = E^0\psi^0 \quad [۱۸.۶]$$

معمولا، اختلال (H') تبهگنی را «خراب» (یا «برطرف») می‌کند: همچنانکه λ را افزایش می‌دهیم (از ۰ تا ۱)، انرژی مختل نشده مشترک E^0 به دو انرژی شکافته می‌شود (شکل ۴.۶).

با رفتن به سمت دیگر، هنگامیکه اختلال را برمی‌داریم، حالت «بالایی» به یک ترکیب خطی از ψ_b^0 و ψ_a^0 حالت «پائینی» هم به یک ترکیب خطی متعامد تبدیل می‌شود، با این حال بدون بررسی کردن نمی‌دانیم این ترکیبات خطی «خوب» چه خواهند بود. به همین دلیل حتی نمی‌توانیم انرژی مرتبه اول (رابطه ۹.۶) را محاسبه کنیم زیرا نمی‌دانیم باید از کدام حالت‌های مختل نشده استفاده کنیم.

بنابراین در حال حاضر بیا باید فقط حالت‌های مختل نشده «خوب» را در شکل کلی (رابطه ۱۷.۶)

بنویسیم و ضرائب α و β را هم تطبیق‌پذیر بگیریم. می‌خواهیم معادله شرودینگر زیر را حل کنیم



شکل ۴.۶: «برطرف شدن» تبهگنی توسط یک اختلال

$$H\psi = E\psi \quad [۱۹.۶]$$

که در آن $H = H^0 + \lambda H'$ و

$$E = E^0 + \lambda E^1 + \lambda^2 E^2 + \dots, \psi = \psi^0 + \lambda \psi^1 + \lambda^2 \psi^2 + \dots \quad [۲۰.۶]$$

با قرار دادن این روابط در رابطه ۱۹.۶ و مرتب‌سازی توانها برحسب λ ، مانند قبل، درمی‌یابیم که

$$H^0 \psi^0 + \lambda (H' \psi^0 + H^0 \psi^1) + \dots = E^0 \psi^0 + \lambda (E^1 \psi^0 + E^0 \psi^1) + \dots$$

اما $H^0 \psi^0 = E^0 \psi^0$ است (رابطه ۱۸.۶)، از اینرو جملات اول حذف می‌شوند؛ در مرتبه λ^1 داریم

$$H^0 \psi^1 + H' \psi^0 = E^0 \psi^1 + E^1 \psi^0 \quad [۲۱.۶]$$

ضرب داخلی این رابطه در ψ_a^0 می‌دهد

$$\langle \psi_a^0 | H^0 \psi^1 \rangle + \langle \psi_a^0 | H' \psi^0 \rangle = E^0 \langle \psi_a^0 | \psi^1 \rangle + E^1 \langle \psi_a^0 | \psi^0 \rangle$$

چون H^0 هرمیتی است، جمله اول سمت چپ جمله اول سمت راست را حذف می‌کند. با قرار دادن

حاصل در رابطه ۱۷.۶ و استفاده از از شرط راست هنجاری رابطه ۱۶.۶، داریم

$$\alpha \langle \psi_a^0 | H' | \psi_a^0 \rangle + \beta \langle \psi_a^0 | H' | \psi_b^0 \rangle = \alpha E^1$$

یا به شکل فشرده‌تر

$$\alpha W_{aa} + \beta W_{ab} = \alpha E^1 \quad [۲۲.۶]$$

که در آن

$$W_{ij} \equiv \langle \psi_i^0 | H' | \psi_j^0 \rangle, (i, j = a, b) \quad [۲۳.۶]$$

به همین شکل، حاصلضرب داخلی در ψ_b^0 می‌دهد

$$\alpha W_{ba} + \beta W_{bb} = \beta E^1 \quad [۲۴.۶]$$

توجه داشته باشید که W ها (اصولا) معلوم اند - آنها دقیقا همان «عناصر ماتریسی» H' مربوط به توابع موج مختل نشده ψ_a^0 و ψ_b^0 هستند. با ضرب رابطه ۲۴.۶ در W_{ab} و استفاده از رابطه ۲۲.۶ برای حذف βW_{ab} ، درمی یابیم که

$$\alpha[W_{ab}W_{ba} - (E^1 - W_{aa})(E^1 - W_{bb})] = 0 \quad [25.6]$$

اگر α صفر نباشد، رابطه ۲۵.۶ معادله ای برای E^1 بدست می دهد:

$$(E^1)^2 - E^1(W_{aa} + W_{bb}) + (W_{aa}W_{bb} - W_{ab}W_{ba}) = 0 \quad [26.6]$$

با توسل به فرمول درجه دوم و توجه به این نکته (از رابطه ۲۳.۶) که $W_{ba} = W_{ab}^*$ ، به این نتیجه می رسیم که

$$E_{\pm}^1 = \frac{1}{2} [W_{aa} + W_{bb} \pm \sqrt{(W_{aa} - W_{bb})^2 + 4|W_{ab}|^2}] \quad [27.6]$$

این نتیجه اصلی و بنیادی نظریه اختلال تبهگن است؛ دو ریشه متناظرند با دو انرژی مختل شده.

اما اگر α صفر باشد چه؟ در آن صورت $\beta = 1$ است، رابطه ۲۲.۶ حاکی از آن است که $W_{ab} = 0$ است و رابطه ۲۴.۶ هم می دهد $E^1 = W_{bb}$. این وضع در حقیقت در نتیجه کلی (رابطه ۲۷.۶) با علامت منفی (چون فرض بر این است که $W_{aa} > W_{bb}$ ؛ علامت مثبت متناظر است با $\alpha = 1$ و $\beta = 0$) به حساب آورده می شود. به اضافه آنکه جوابها،

$$E_+^1 = W_{aa} = \langle \psi_a^0 | H' | \psi_a^0 \rangle, E_-^1 = W_{bb} = \langle \psi_b^0 | H' | \psi_b^0 \rangle$$

دقیقا همانهایی هستند که با استفاده از نظریه اختلال غیر تبهگن (رابطه ۹.۶) بدست می آوردیم - اینطور که معلوم است بخت با ما یار بوده: حالت های ψ_a^0 و ψ_b^0 از پیش، ترکیبات خطی «خوب» بودند. آشکار است که اگر می توانستیم به نوعی حالت های «خوب» را از همان ابتدا بدرستی حدس بزنیم، حسایی به نفع مان می شد. در عمل، اغلب این امکان را داریم که با استفاده از

قضیه زیر چنین حدسی بزنیم:

قضیه: بگذارید A یک عملگر هرمیتی باشد که با H^0 و H' جابه‌جا می‌شود. اگر ψ_a^0 و ψ_b^0 (ویژه توابع تبه‌گن H^0) ویژه توابع A با ویژه مقادیر مجزای زیر هم باشند،

$$A\psi_a^0 = \mu\psi_a^0, A\psi_b^0 = \nu\psi_b^0, \mu \neq \nu$$

در آن صورت $W_{ab} = 0$ بوده (و در نتیجه ψ_a^0 و ψ_b^0 حالت‌های «خوبی» برای استفاده در نظریه اختلال محسوب می‌شوند).

اثبات. از فرض مساله داریم $[A, H'] = 0$ ، بنابراین

$$\begin{aligned} \langle \psi_a^0 | [A, H'] | \psi_b^0 \rangle &= 0 \\ &= \langle \psi_a^0 | A H' | \psi_b^0 \rangle - \langle \psi_a^0 | H' A | \psi_b^0 \rangle \\ &= \langle A \psi_a^0 | H' | \psi_b^0 \rangle - \langle \psi_a^0 | H' \nu \psi_b^0 \rangle \\ &= (\mu - \nu) \langle \psi_a^0 | H' | \psi_b^0 \rangle = (\mu - \nu) W_{ab} \end{aligned}$$

اما چون $\mu \neq \nu$ است، لذا $W_{ab} = 0$ می‌شود. همانطور که باید اثبات می‌شد.

برداشت. اگر با حالت‌های تبه‌گن مواجه هستید، ویژه توابع عملگری هرمیتی مانند A را جستجو کنید که با H^0 و H' جابه‌جا می‌شود؛ حالت‌های مختل نشده را طوری انتخاب کنید که به طور همزمان ویژه توابع H^0 و A باشند. اگر نمی‌توانید چنین عملگری را بیابید، می‌بایست دست به دامن رابطه ۲۷.۶ شوید، با این حال در عمل به ندرت چنین الزامی پیش می‌آید.

مساله ۶.۶ بگذارید حالت‌های مختل نشده «خوب» اینها باشند

$$\psi_{\pm}^0 = \alpha_{\pm} \psi_a^0 + \beta_{\pm} \psi_b^0$$

که در آن α_{\pm} و β_{\pm} (تا بهنجار شدن) از رابطه ۲۲.۶ (یا رابطه ۲۴.۶) تعیین می‌شوند. صراحتاً نشان دهید که

$$(الف) \quad \langle \psi_+^0 | \psi_-^0 \rangle = 0$$

$$(ب) \quad \langle \psi_+^0 | H' | \psi_-^0 \rangle = 0$$

$$(پ) \quad \langle \psi_{\pm}^0 | H' | \psi_{\pm}^0 \rangle = E_{\pm}^1, \text{ با در نظر گرفتن اینکه } E_{\pm}^1 \text{ از رابطه ۲۶.۶ بدست می‌آید.}$$

مساله ۷.۶ ذره‌ای به جرم m را تصور کنید که آزاد است در منطقه‌ای یک بعدی به طول L حرکت کند که نزدیک به ابعاد خودش است (برای نمونه، ذره مذکور مهره‌ای است که بدون اصطکاک روی سیمی دایره‌ای شکل به محیط L می‌لغزد؛ مساله ۴۶.۲).

(الف) نشان دهید حالت‌های مانا را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{2\pi i n x / L}, (-L/2 < x < L/2)$$

که در آن $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ است و انرژی‌های مجاز نیز از این قرارند

$$E_n = \frac{2}{m} \left(\frac{n\pi\hbar}{L} \right)^2$$

دقت کنید که - به استثناء حالت پایه ($n = 0$) - همه این حالت‌ها تبهگنی دوگانه دارند.

(ب) حالا فرض کنید اختلالی به شکل زیر را معرفی کنیم

$$H' = -V_0 e^{-x^2/a^2}$$

که در آن $a \ll L$ است. (این اختلال «برآمدگی» کوچکی را در نقطه $x = 0$ قرار می‌دهد، چنانچه گویی سیم را کمی خم کنیم تا یک «دام» درست شود.) تصحیح مرتبه اول E_n را با استفاده از رابطه ۲۷.۶ بدست آورید. راهنمایی: برای محاسبه انتگرال‌ها، از این نکته بهره‌برداری کنید که $a \ll L$ است که از حدود $\pm L/2$ به $\pm \infty$ تجاوز می‌کند؛ هر چه باشد، H' اساساً خارج از بازه $a < x < a$ - صفر است.

(پ) ترکیبات خطی «خوب» ψ_n و ψ_{-n} برای این مساله چه هستند؟ راهنمایی: از رابطه ۲۲.۶ استفاده کنید. نشان دهید با این حالت‌ها تصحیح مرتبه اول را با استفاده از رابطه ۹.۶ بدست می‌آورید.

(ت) عملگر هرمیتی A را به گونه‌ای پیدا کنید که با شرایط قضیه همخوانی داشته و آنگاه نشان دهید که ویژه حالت‌های همزمان H^0 و A دقیقاً همانهایی هستند که در قسمت (پ)

بدست آوردید.

۲.۲.۶ تبهگنی مراتب بالاتر

در بخش گذشته فرض کردم تبهگنی دوتایه است، با این حال پی بردن به اینکه روش مذکور چگونه تعمیم می‌یابد نیز آسان است. روابط ۲۲.۶ و ۲۴.۶ را مجدداً به شکل ماتریسی بازنویسی می‌کنیم:

$$\begin{pmatrix} W_{aa} & W_{ab} \\ W_{ba} & W_{bb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = E^1 \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad [۲۸.۶]$$

بدیهی است که E^1 ها چیزی نیستند مگر ویژه مقادیر ماتریس W ؛ رابطه ۲۶.۶ معادله مشخصه این ماتریس بوده و از آنجا ترکیبات خطی «خوب» حالت‌های مختل نشده ویژه بردارهای W هستند.

در مورد تبهگنی n تایه، ویژه مقادیر ماتریس $n \times n$ زیر را جستجو می‌کنیم

$$W_{ij} = \langle \psi_i^0 | H' | \psi_j^0 \rangle \quad [۲۹.۶]$$

به زبان جبر خطی، یافتن توابع موج مختل نشده «خوب» به مثابه آن است که پایه‌ای در زیرفضای تبهگنی بسازیم که ماتریس W را قطری می‌کند. یکبار دیگر، اگر عملگر A را به گونه‌ای تصور می‌کنید که با H' جابه‌جا می‌شود، از ویژه توابع همزمان A و H^0 استفاده کنید که در آن صورت ماتریس W به طور خودکار قطری بوده و از آنجا دیگر مجبور نیستید بهانه حل معادله مشخصه را بگیرید.^۶ (اگر تعمیم سطحی و بی‌دقت من از تبهگنی ۲ تایه به تبهگنی n تایه به مذاقتان خوش نمی‌آید، مساله ۱۰.۶ را حل کنید).

مثال ۲.۶ چاه مکعبی نامتناهی سه بعدی را در نظر بگیرید (مساله ۲.۴):

$$(x, y, z) = \begin{cases} 0, & \text{اگر } 0 < x < a, \quad 0 < y < a, \quad 0 < z < a \\ \infty, & \text{بقیه نقاط} \end{cases} \quad [۳۰.۶]$$

حالت‌های مانا عبارتند از

^۶نظریه اختلال تبهگن به مثابه قطری کردن قسمت تبهگن هامیلتونی است. قطری کردن ماتریس‌ها (و قطری شوندگی همزمان ماتریس‌های جابجا شونده) در ضمیمه (بخش ۵) مورد بحث و بررسی قرار گرفته است.

$$\psi_{n_x, n_y, n_z}^0(x, y, z) = \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2} \sin\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{a} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{a} z\right) \quad [31.6]$$

که در آن n_x ، n_y و n_z اعداد صحیح مثبت هستند. انرژی‌های مجاز متناظر عبارتند از

$$E_{n_x, n_y, n_z}^0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad [32.6]$$

توجه داشته باشید که حالت پایه (ψ_{111}) غیر تبهگن است؛ انرژی آن برابر است با

$$E_0^0 \equiv 3 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad [33.6]$$

اما اولین حالت برانگیخته تبهگنی سه تاییه دارد

$$\psi_a \equiv \psi_{112}, \quad \psi_b \equiv \psi_{121} \text{ و } \psi_c \equiv \psi_{211} \quad [34.6]$$

که همگی دارای انرژی مشترک زیر هستند

$$E_0^1 \equiv 3 \frac{\pi^2 \hbar^2}{ma^2} \quad [35.6]$$

اکنون بیاید اختلال زیر را معرفی کنیم

$$H' = \begin{cases} V_0 & 0 < x < a/2 \text{ و } 0 < y < a/2 \\ 0, & \text{بقیه نقاط} \end{cases} \quad [36.6]$$

این اختلال پتانسیل را به اندازه یک چهارم جعبه بالا می‌برد (شکل ۵.۶ را ببینید). تصحیح

مرتبه اول انرژی حالت پایه از رابطه ۹.۶ بدست می‌آید:

$$\begin{aligned} E_0^1 &= \langle \psi_{111} | H' | \psi_{111} \rangle = \left(\frac{2}{a}\right)^3 V_0 \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{\pi}{a} x\right) dx \\ &\times \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{\pi}{a} y\right) dy \int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi}{a} z\right) dz = \frac{1}{4} V_0 \end{aligned} \quad [37.6]$$

که درست همانی است که انتظارش را داشتیم.

برای نخستین حالت برانگیختگی به مکانیسم کامل نظریه اختلال تبهگن نیاز داریم. گام نخست ساختن ماتریس W است. عناصر قطری همانهایی هستند که برای حالت پایه داشتیم (به استثناء آرگومان یکی از سینوس‌ها که دو برابر می‌شود)؛ برای خودتان بررسی کنید که

$$W_{aa} = W_{bb} = W_{cc} = \frac{1}{4}V_0$$

عناصر غیر قطری جالب توجه‌ترند:

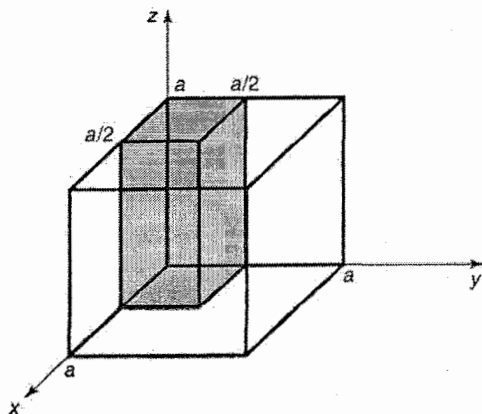
$$W_{ab} = \left(\frac{2}{a}\right)^3 V_0 \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx \\ \times \int_0^{a/2} \sin\left(\frac{\pi}{a}y\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}y\right) dy \int_0^a \sin\left(\frac{2\pi}{a}z\right) \sin\left(\frac{\pi}{a}z\right) dz$$

اما انتگرال روی z صفر است (برای W_{ac} هم همینطور خواهد بود)، لذا

$$W_{ab} = W_{ac} = 0$$

در نهایت،

$$W_{bc} = \left(\frac{2}{a}\right)^3 V_0 \int_0^{a/2} \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) dx \\ \times \int_0^{a/2} \sin\left(\frac{2\pi}{a}y\right) \sin\left(\frac{\pi}{a}y\right) dy \int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi}{a}z\right) dz = \frac{16}{9\pi^2}V_0$$



شکل ۵.۶: اختلال پتانسیل را به مقدار V_0 در پخش سایه‌دار افزایش می‌دهد.

در نتیجه

$$W = \frac{V_0}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \kappa \\ 0 & \kappa & 1 \end{pmatrix} \quad [۳۸.۶]$$

که در آن $\kappa \equiv (8/3\pi^2)^2 \approx 0.7205$ است.

معادله مشخصه برای W (یا به بیان دقیقتر، $4W/V_0$)، که کار کردن با آن راحتتر است) عبارت است از

$$(1-w)^3 - \kappa^2(1-w) = 0$$

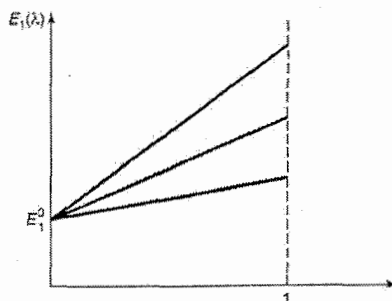
و ویژه مقادیر هم برابرند با

$$W_1 = 1; W_2 = 1 + \kappa \approx 1.7205; W_3 = 1 - \kappa \approx 0.2795$$

به این ترتیب، مرتبه اول برحسب λ از این قرار است

$$E_1(\lambda) = \begin{cases} E_1^0 + \lambda V_0/4 \\ E_1^0 + \lambda(1+\kappa)V_0/4 \\ E_1^0 + (1-\kappa)V_0/4 \end{cases} \quad [۳۹.۶]$$

که در آن E_1^0 انرژی مختل نشده (مشترک) (رابطه ۳۵.۶) است. اختلال تبهگنی را برطرف کرده و E_1^0 را به سه سطح انرژی متمایز می شکافد (شکل ۶.۶ را ببینید). دقت داشته باشید که اگر ساده لوحانه نظریه اختلال غیر تبهگن را برای این مساله به کار برده بودیم، آنوقت به این نتیجه می رسیدیم که تصحیح مرتبه اول (رابطه ۹.۶) برای هر سه حالت یکسان و برابر با $V_0/4$ است - این مساله در حقیقت تنها برای حالت میانی صحیح است.



شکل ۶.۶: برطوطی (۳۹.۶) رابطه ۳۹.۶.

در این بین، حالت‌های مختل نشده «خوب» ترکیباتی خطی به این شکل هستند:

$$\psi^0 = \alpha\psi_a + \beta\psi_b + \gamma\psi_c \quad [۴۰.۳]$$

که در آن ضرایب (α و β و γ) ویژه بردارهای ماتریس W را شکل می‌دهند:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \kappa \\ 0 & \kappa & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = w \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix}$$

به ازای $w = 1$ مقادیر $\alpha = 1$ و $\beta = \gamma = 0$ و به ازای $w = 1 \pm \kappa$ مقادیر $\alpha = 0$ و $\beta = \pm\gamma = 1/\sqrt{2}$ را بدست می‌آوریم (آنها را بهنجار کردم). بدین ترتیب حالت‌های «خوب» عبارتند از^۷

$$\psi^0 = \begin{cases} \psi_a \\ (\psi_b + \psi_c)/\sqrt{2} \\ (\psi_b - \psi_c)/\sqrt{2} \end{cases} \quad [۴۱.۶]$$

مساله ۸.۶ فرض کنید چاه مکعبی نامتناهی (رابطه ۳۰.۶) را از طریق قرار دادن یک «برآمدگی» در نقطه $(a/4, a/2, 3a/4)$ مختل می‌کنیم:

$$H' = a^3 V_0 \delta(x - a/4) \delta(y - a/2) \delta(z - 3a/4)$$

تصحیحات مرتبه اول انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته (که دارای تبهگنی سه گانه است) را بیابید.

مساله ۹.۶* یک سامانه کوانتومی با تنها سه حالت مستقل خطی را در نظر بگیرید. فرض کنید شکل ماتریسی هامیلتونی آن به صورت زیر است

^۷ ممکن بود این نتیجه را بدرستی از همان اول ضمن توجه به این مطلب حدس بزنیم که عملگر P_{xy} که جای x و y را با هم عوض می‌کند، با H' جابه‌جا می‌شود. ویژه مقادیر آن عبارتند از $+1$ (برای توابعی که تحت معاوضه زوج هستند) و -1 (برای توابعی که تحت معاوضه فرد هستند). در این حالت ψ_a که از پیش زوج بود، $(\psi_b + \psi_c)$ زوج و $(\psi_b - \psi_c)$ فرد است. اما چنانچه از عملگر Q استفاده کنیم، که z را به $a - z$ می‌برد، و نیز توجه داشته باشیم که ψ_a ویژه تابعی با ویژه مقدار -1 است، درحالی‌که دو ویژه تابع دیگر ویژه مقدار $+1$ دارند، ابهام از بین می‌رود. اینجا عملگرهای P_{xy} و Q با هم نقش A را در قضیه بخش ۱.۲.۶ بازی می‌کنند.

$$H = V_0 \begin{pmatrix} (1 - \epsilon) & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \epsilon \\ 0 & \epsilon & 2 \end{pmatrix}$$

که در آن V_0 یک ثابت و ϵ هم عدد بسیار کوچکی است ($\epsilon \ll 1$).

(الف) ویژه بردارها و ویژه مقادیر هامیلتونی مختل نشده را بنویسید ($\epsilon = 0$).

(ب) ویژه مقادیر دقیق H را پیدا کنید. هر یک از آنها را به صورت یک سری توانی برحسب ϵ تا مرتبه دوم بسط دهید.

(پ) نظریه اختلال غیر تبهگن مرتبه اول و دوم را برای یافتن ویژه مقدار تقریبی حالتی که ناشی از ویژه مقدار غیر تبهگن H^0 است به کار بگیرید. با نتیجه دقیق قسمت (ب) مقایسه کنید.

(ت) از نظریه اختلال تبهگن برای یافتن تصحیح مرتبه اول دو ویژه مقداری که از آغاز تبهگن بودند استفاده کنید. با نتایج دقیق مقایسه کنید.

مساله ۱۰.۶ در متن تاکید کردم که تصحیحات مرتبه اول یک انرژی تبهگن n تابه ویژه مقدارهای ماتریس W هستند و این مدعی را به صورت تعمیم طبیعی حالت $n = 2$ توجیه کردم. آنرا با انجام مجدد مراحل بخش ۱۰.۲.۶ و با شروع از رابطه زیر ثابت کنید

$$\psi^0 = \sum_{j=1}^n \alpha_j \psi_j^0$$

(با تعمیم رابطه ۱۷.۶) و با نشان دادن اینکه مانسته رابطه ۲۲.۶ را می توان به عنوان معادله ویژه مقداری برای ماتریس W تعبیر کرد، به انتها برسانید.

۳.۶ ساختار ریز هیدروژن

در مطالعه ای که روی اتم هیدروژن (بخش ۲.۴) داشتیم، هامیلتونی را به این شکل در نظر گرفتیم

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad [۴۲.۶]$$

(انرژی جنبشی الکترون به علاوه انرژی پتانسیل کولنی). اما این تمام ماجرا نیست. پیشتر فرا گرفتیم که چگونه حرکت هسته را تصحیح کنیم: کافی است به جای m از جرم کاهیده استفاده کنید (مساله ۱.۵). از این مهمتر چیزی است موسوم به ساختار ریز که در واقع [وجود آن] به دلیل دو سازوکار متمایز است: تصحیح نسبیتی و جفت‌شدگی اسپین - مدار. ساختار ریز در مقایسه با انرژی‌های بور (رابطه ۷۰.۴) اختلال بسیار کوچکی محسوب می‌شود - کوچکتر از سازه α^2 که در آن

$$\alpha \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \cong \frac{1}{137.036} \quad [۴۳.۶]$$

به ثابت ساختار ریز معروف است. باز هم کوچکتر (با سازه دیگری از α) انتقال لمب نام دارد که به کوانتش میدان کولنی مربوط می‌شود و یک مرتبه بزرگی از آن هم کوچکتر ساختار فوق ریز است که وجودش ناشی از برهم‌کنش مغناطیسی میان گشتاورهای دوقطبی الکترون و پروتون است. سلسله مراتب مربوطه در جدول ۱.۶ خلاصه شده است.

در این بخش ساختار ریز هیدروژن را به عنوان کاربردی از نظریه اختلال مستقل از زمان مورد بررسی قرار خواهیم داد.

مساله ۱۱.۶

(الف) انرژی‌های بور را برحسب ثابت ساختار ریز و انرژی سکون (mc^2) الکترون بیان کنید.
 (ب) ثابت ساختار ریز را از روی اجزای اصلی (یعنی بدون استفاده از مقادیر e ، ϵ_0 ، \hbar و c) محاسبه کنید. توضیح: ثابت ساختار ریز بی‌شک بنیادی‌ترین عدد محض (بدون بعد) در تمام فیزیک به شمار می‌رود. این عدد ثوابت اصلی الکترومغناطیس (بار الکترون)، نسبیت (سرعت نور) و مکانیک کوانتومی (ثابت پلانک) را به یکدیگر مربوط می‌سازد. اگر بتوانید پاسخ قسمت (ب) را بدست آورید مطمئن باشید که قطعا یک جایزه نوبل در انتظار شماست. اما توصیه نمی‌کنم الان وقت زیادی روی آن بگذارید؛ افراد باهوش زیادی تاکنون تلاش کرده‌اند اما از آن دست کشیده‌اند.

جدول ۱.۶: سلسله مراتب تصحیحات انرژی‌های بور هیدروژن.

$\alpha^2 mc^2$	از مرتبه	انرژی‌های بور :
$\alpha^4 mc^2$	از مرتبه	ساختار ریز :
$\alpha^5 mc^2$	از مرتبه	انتقال لمب :
$(m/m_p)\alpha^4 mc^2$	از مرتبه	شکافت فوق ریز :

۱.۳.۶ تصحیح نسبیتی

فرض بر آن است که جمله اول در هامیلتونی نشان دهنده انرژی است:

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} \quad [۴۴.۶]$$

همچنین جاگذاری کانونیک $p \rightarrow (\hbar/i)\nabla$ شکل عملگری را بدست می‌دهد

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \quad [۴۵.۶]$$

اما رابطه ۴۴.۶ رابطه کلاسیکی انرژی جنبشی است؛ فرمول نسبیتی آن از این قرار است

$$T = \frac{mc^2}{\sqrt{1-(v/c)^2}} - mc^2 \quad [۴۶.۶]$$

جمله اول انرژی کل نسبیتی است (بدون به حساب آوردن انرژی پتانسیل که فعلاً برایمان اهمیتی

ندارد) و جمله دوم نیز انرژی سکون است - اختلاف بر سر انرژی وابسته به حرکت است.

باید T را به جای سرعت بر حسب تکانه (نسبیتی) بیان کنیم

$$p = \frac{mv}{\sqrt{1-(v/c)^2}} \quad [۴۷.۶]$$

توجه داشته باشید که

$$p^2 c^2 + m^2 c^4 = \frac{m^2 v^2 c^2 + m^2 c^4 [1 - (v/c)^2]}{1 - (v/c)^2} = \frac{m^2 c^4}{1 - (v/c)^2} = (T + mc^2)^2$$

از اینرو

$$T = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} - mc^2 \quad [۴۸.۶]$$

رابطه نسبیتی انرژی جنبشی (طبیعتاً) در حد $mc \ll p$ به نتیجه کلاسیکی (رابطه ۴۴.۶) ساده می‌شود؛ چنانچه بخواهیم آنرا به صورت بسطی از توانهای عدد کوچک (p/mc) بیان کنیم، داریم

$$T = mc^2 \left[\sqrt{1 + \left(\frac{p}{mc}\right)^2} - 1 \right] = mc^2 \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{p}{mc}\right)^2 - \frac{1}{8} \left(\frac{p}{mc}\right)^4 \dots - 1 \right]$$

$$= \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2} + \dots \quad [۴۹.۶]$$

اینطور که پیداست پائین‌ترین مرتبه^۸ سهم نسبیتی هامیلتونی از این قرار است

$$H'_r = -\frac{p^4}{8m^3 c^2} \quad [۵۰.۶]$$

در نظریه اختلال مرتبه اول، تصحیح E_n از روی مقدار چشمداشتی H' در حالت مختل نشده (رابطه ۹.۶) بدست می‌آید:

$$E_r^1 = \langle H'_r \rangle = -\frac{1}{8m^3 c^2} \langle \psi | p^4 | \psi \rangle = -\frac{1}{8m^3 c^2} \langle p^2 \psi | p^2 \psi \rangle \quad [۵۱.۶]$$

خاطر نشان می‌شود که معادله شرودینگر (برای حالت‌های مختل نشده) حاکی از آن است که

$$p^2 \psi = 2m(E - V)\psi \quad [۵۲.۶]$$

و در نتیجه^۹

^۸ انرژی جنبشی الکترون در هیدروژن از مرتبه 10 eV است که در مقایسه با انرژی سکون آن (500 MeV) بی اندازه کوچک است، از اینرو اتم هیدروژن در اساس غیر نسبیتی است و به همین خاطر است که می‌توانیم بدون بروز هیچ نتیجه ناخوشایندی تنها پائین‌ترین مرتبه تصحیح را نگاه داریم. در رابطه ۴۹.۶، p تکانه نسبیتی (رابطه ۴۷.۶) است نه تکانه کلاسیکی mv . اکنون مناسبتر است که از عملگر کوانتومی $-i\nabla\hbar$ در رابطه ۵۰.۶ استفاده کنیم.

^۹ در این شگرد یکجور تردستی پنهان است که از هرمیتی بودن p^2 و $(E - V)$ بهره می‌گیرد. به واقع، عملگر p^4 به ازای حالتی که در آن $l = 0$ است هرمیتی نیست (مساله ۱۵.۶ را ملاحظه کنید) و بنابراین به کار بردن نظریه اختلال برای معادله ۵۰.۶ زیر سوال است و باید آنرا مورد تردید قرار داد (برای حالت $l = 0$). خوشبختانه، این مورد را

$$E_r^1 = -\frac{1}{2mc^2} \langle (E - V)^2 \rangle = -\frac{1}{2mc^2} [E^2 - 2E\langle V \rangle + \langle V^2 \rangle] \quad [۵۳.۶]$$

کارمان تا اینجا کاملاً کلی بود؛ اما اساساً به مورد هیدروژنی علاقمندیم که در آن

$$V(r) = -(1/4\pi\epsilon_0) e^2/r$$

$$E_r^1 = -\frac{1}{2mc^2} \left[E_n^2 + 2E_n \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle + \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle \right] \quad [۵۴.۶]$$

که در آن E_n انرژی بور حالت مورد بررسی است.

برای تکمیل کار، به مقادیر چشمداشتی $1/r$ و $1/r^2$ در حالت (مختل نشده) ψ_{nlm} (رابطه

(۲۱.۴) نیاز داریم. نخستین انرژی ساده است (مساله ۱۲.۶ را ببینید):

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{1}{n^2 a} \quad [۵۵.۶]$$

که در آن a شعاع بور (رابطه ۷۲.۴) است. استخراج انرژی دوم دیگر چندان آسان نیست (مساله

۲۸.۶ را ببینید)، با این حال پاسخ عبارت است از^{۱۰}

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{1}{(l + 1/2)n^3 a^2} \quad [۵۶.۶]$$

می‌توان چنین نتیجه گرفت که

$$E_r^1 = -\frac{1}{2mc^2} \left[E_n^2 + 2E_n \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{1}{n^2 a} + \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{(l + 1/2)n^3 a^2} \right]$$

می‌توان از معادله (نسبیتی) دیراک به جای معادله (غیرنسبیتی) شرودینگر بدست آورد که نتایج بدست آمده در اینجا را با دقت کمتری تأیید می‌نماید. (مساله ۱۹.۶ را ملاحظه کنید)

^{۱۰}فرمول کلی مقدار چشمداشتی هر توانی از r در کتاب *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms* اثر Hans Bethe و Salpeter (۱۹۷۷، Plenum Press) موجود است.

یا آنکه، با حذف a (با استفاده از رابطه ۷۲.۴) و بیان تمام عبارات برحسب E_n (با استفاده از رابطه ۷۰.۴) می‌رسیم به

$$E_r^1 = -\frac{(E_n)^2}{2mc^2} \left[\frac{4}{l+1/2} - 3 \right] \quad [۵۷.۶]$$

دقت کنید که تصحیح نسبیتی به اندازه $2 \times 10^{-5} E_n/mc^2$ از خود E_n کوچکتر است. احتمالاً متوجه شده‌اید در این محاسبه (رابطه ۵۱.۶) از نظریه اختلال غیر نسبیتی استفاده کرده‌ام علی‌رغم این واقعیت که اتم هیدروژن به شدت تبهگن است. اما اختلال آن دارای تقارن کروی است، از اینرو با L^2 و L_z جابه‌جا می‌شود. به علاوه، ویژه توابع این عملگرها (وقتی آنها را با هم بگیریم) ویژه مقادیر متمایزی برای آن n^2 حالتی دارند که انرژی مفروض E_n دارند. بنابراین بخت با ما یار است که توابع موج ψ_{nlm} حالت‌های «خوب» این مساله هستند (یا، همانطور که گفتیم، n و l اعداد کوانتومی خوب هستند)، پس از این رو بود که نظریه اختلال غیر تبهگن ایده‌ای پذیرفتنی به شمار رفت («برداشت» بخش ۱.۲.۶ را ملاحظه کنید).

مساله ۱۲.۶* از قضیه ویریال (مساله ۴۰.۴) برای اثبات رابطه ۵۵.۶ استفاده کنید.

مساله ۱۳.۶ در مساله ۴۳.۴ مقدار چشمداشتی r^s را در حالت ψ_{321} محاسبه کنید. پاسخ‌تان را برای حالت کروی $s = 0$ (که اهمیت چندانی هم ندارد)، $s = -1$ (رابطه ۵۵.۶)، $s = -2$ (رابطه ۵۶.۶) و $s = -3$ (رابطه ۶۴.۶) بررسی کنید. در مورد $s = -7$ اظهار نظر کنید.

مساله ۱۴.۶** (پائین‌ترین) تصحیح نسبیتی سطوح انرژی یک نوسانگر هماهنگ یک بعدی را بدست آورید. راهنمایی: از تکنیک مثال ۵.۲ استفاده کنید.

مساله ۱۵.۶*** نشان دهید برای حالت‌های هیدروژنی با در نظر گرفتن $l = 0$ ، عملگر p^2 هرمیتی است، اما p^4 هرمیتی نیست. راهنمایی: برای چنین حالت‌هایی ψ مستقل از θ و ϕ است، بنابراین

$$p^2 = -\frac{\hbar^2}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right)$$

(رابطه ۱۳.۴). با استفاده از انتگرال گیری جزء به جزء، نشان دهید

$$\langle f | p^2 g \rangle = -4\pi\hbar^2 \left(r^2 f \frac{dg}{dr} - r^2 g \frac{df}{dr} \right) \Big|_0^\infty + \langle p^2 f | g \rangle$$

بررسی کنید آیا جمله مرزی برای ψ_{n00} که شکل کلی آن مانند رابطه زیر است، در نزدیکی مبدأ حذف می شود

$$\psi_{n00} \sim \frac{1}{\sqrt{n}(\pi a)^{3/2}} \exp(-r/na)$$

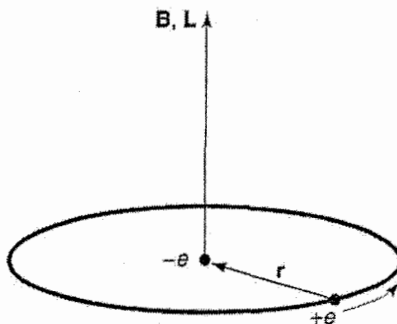
حالا همین کار را برای p^4 انجام داده و نشان دهید جملات مرزی حذف نمی شوند. در واقع:

$$\langle \psi_{n00} | p^4 | \psi_{m00} \rangle = \frac{8\hbar^4}{a^4} \frac{(n-m)}{(nm)^{5/2}} + \langle p^4 \psi_{n00} | \psi_{m00} \rangle$$

۲.۳.۶ جفت شدگی اسپین-مدار

الکترونی را در اطراف یک هسته تجسم کنید؛ از دید الکترون، پروتون در حال چرخش به دور خود است (شکل ۷.۶). این بار مثبت در حال چرخش میدانی مغناطیسی مانند B در چارچوب الکترون بوجود می آورد که گشتاوری را روی الکترون در حال چرخش بدور خود اعمال می کند که می خواهد گشتاور مغناطیسی (μ) را با میدان هم جهت کند. هامیلتونی (رابطه ۱۵۷.۴) عبارت است از

$$H = -\mu \cdot B \quad [58.6]$$



شکل ۷.۶: اتم هیدروژن، از دید الکترون.

در ابتدا، باید میدان مغناطیسی پروتون (B) و گشتاور دو قطبی الکترون (μ) را تعیین کنیم. میدان مغناطیسی پروتون. اگر پروتون را (از دید الکترون) به صورت یک حلقه جریان پیوسته تصویر کنیم (شکل ۷.۶)، میدان مغناطیسی را می‌توان با استفاده از قانون بیو - ساوار محاسبه کرد:

$$B = \frac{\mu_0 I}{2r}$$

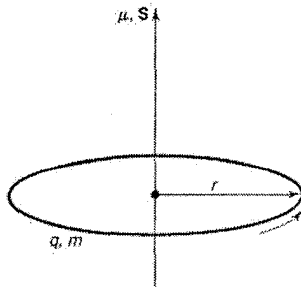
در این رابطه $I = e/T$ جریان موثر است که در آن e بار الکترون و T تناوب مداری است. از سوی دیگر، تکانه زاویه‌ای مداری الکترون (در چارچوب بدون حرکت هسته) عبارت است از $L = r m v = 2\pi m r^2 / T$. به علاوه، B و L هم راستا هستند (هر دو رو به بالا، شکل ۷.۶) از اینرو

$$B = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e}{m c^2 r^3} L \quad [59.6]$$

(از $c = 1/\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}$ برای حذف μ_0 به نفع ϵ_0 استفاده کردم).

گشتاور دو قطبی مغناطیسی الکترون. گشتاور دو قطبی مغناطیسی یک بار چرخان بدور خود به تکانه زاویه‌ای (اسپینی) آن مربوط می‌شود؛ ضریب تناسب نسبت ژیرومغناطیسی است (که پیشتر در بخش ۲.۴.۴ با آن مواجه شدیم). بیایید آنرا با استفاده از الکترومغناطیس کلاسیک استخراج کنیم. نخست فرض کنید بار q اطراف حلقه‌ای به شعاع r را فراگرفته است و حلقه هم با دوره تناوب T بدور محورش در حال چرخش است (شکل ۸.۶). گشتاور دو قطبی مغناطیسی حلقه به صورت جریان (q/T) ضربدر مساحت (πr^2) تعریف می‌شود:

$$\mu = \frac{q \pi r^2}{T}$$



شکل ۸.۶: حلقه بار که بدور محورش می چرخد

اگر جرم حلقه m باشد، تکانه زاویه‌ای آن برابر است با گشتاور لختی (mr^2) ضربدر سرعت زاویه‌ای آن ($2\pi/T$):

$$S = \frac{2\pi mr^2}{T}$$

نسبت ژیرومغناطیسی برای این پیکربندی از قرار معلوم برابر است با $\mu/S = q/2m$. دقت کنید که این رابطه مستقل از r (و البته T) است. اگر جسم پیچیده‌تری مانند یک کره در اختیار داشتیم (همه آنچه نیاز داریم این است که جسم دارای یکجور گردش باشد، مثلاً چرخش بدور محورش)، در آنصورت می‌توانستیم μ و S را از طریق خرد کردن آن به شکل حلقه‌های کوچک و جمع کردن سهم‌های هرکدام از آنها با یکدیگر بدست آوریم. تا وقتی جرم و بار به طور یکسان توزیع شده باشند (بطوریکه نسبت بار به جرم یکنواخت باشد)، نسبت ژیرومغناطیسی برای هر حلقه یک مقدار خواهد داشت و در نتیجه کل جسم هم دارای همان نسبت خواهد بود. به علاوه، μ و S هم جهت هستند (یا خلاف جهت یکدیگرند، اگر بار منفی باشد)، لذا،

$$\mu = \left(\frac{q}{2m}\right) S$$

آنچه بدست آوردیم یک نتیجه کاملاً کلاسیکی بود؛ اینطور که معلوم است، گشتاور مغناطیسی الکترون دو برابر پاسخ کلاسیکی است که بدست آوردیم:

$$\mu_e = -\frac{e}{m} S \quad [۶.۶]$$

دیراک در نظریه نسبیتی الکترونش، وجود ضریب «اضافه»^{۱۱} ۲ را توضیح می‌دهد.

با کنار هم قرار دادن تمام این مطالب، داریم

$$H = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{1}{m^2 c^2 r^3} S \cdot L$$

اما فریبکاری جدی و خطرناکی در این محاسبه نهفته است: من تحلیل را در چارچوب ساکن برای الکترون انجام دادم، با این حال در آن چارچوب الکترون سامانه لختی نیست - این سامانه با چرخش الکترون بدور هسته شتاب می‌گیرد. اگر تصحیح سینماتیکی مناسبی موسوم به حرکت تقدیمی توماس^{۱۲} را در مورد آن به کار ببرید، از مشکل رهایی می‌یابید. در این متن تصحیح مذکور یک سازه ۱/۲ را به رابطه اضافه می‌کند:^{۱۳}

^{۱۱} پیشتر اشاره کردم که تصویر کردن الکترون به صورت کره‌ای در حال چرخش بدور خود (مساله ۲۵.۴ را ببینید) ممکن است خطرناک باشد و چندان هم جای تعجب ندارد که این مدل کلاسیکی ساده‌انگارانه نسبت ژیرومغناطیسی را اشتباه بدست می‌دهد. انحراف از مقدار چشم‌داشتی کلاسیکی به عامل g معروف است: $\mu = g(q/2m)S$. بدین ترتیب عامل g الکترون، در نظریه دیراک، دقیقاً برابر است با ۲. اما الکتروینامیک کوانتومی تصحیحات بسیار کوچکی را درباره این عامل آشکار می‌سازد: g_e در حقیقت برابر است با $2.002 \dots = 2 + (\alpha/\hbar) + \dots$. محاسبه و اندازه‌گیری به اصطلاح گشتاور مغناطیسی ناهنجار (که با دقت عالی همخوان است) الکترون در زمره بزرگترین دستاوردهای فیزیک قرن بیستم بود.

^{۱۲} یک راه در نظر گرفتن این حرکت آن است که فرض کنیم الکترون به طور پیوسته از یک سامانه لخت به سامانه لخت دیگر می‌رود؛ حرکت تقدیمی توماس به مثابه اثر جمعی تمام تبدیلات لورنتس است. البته می‌توانستیم با ماندن در چارچوب آزمایشگاه که در آن هسته در حال سکون است، این مساله را نادیده بگیریم. در آنصورت میدان پروتون کاملاً الکتریکی می‌بود و ممکن بود از خودتان بپرسید که چرا این میدان مقداری گشتاور به الکترون اعمال می‌کند. خب عرض شود نکته اینجاست که دو قطبی مغناطیسی متحرک یک گشتاور دوقطبی الکتریکی کسب می‌کند و در چارچوب آزمایشگاه جفت‌شدگی اسپین - مدار نتیجه برهم‌کنش میدان الکتریکی هسته با گشتاور دوقطبی الکتریکی الکترون است. چون این تحلیل مستلزم دانش بیشتری درباره الکتروینامیک است، به نظر بهترین کار آن است که زاویه دید الکترون را اختیار کنیم، جایی که در آن سازوکار فیزیکی واضح‌تر است.

^{۱۳} به بیان دقیقتر، حرکت تقدیمی توماس عدد ۱ را از عامل g کسر می‌کند. مقاله R. R. Haar و L. J. Curtis در

$$H'_{\text{اسپین-مدار}} = \left(\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \right) \frac{1}{m^2 c^2 r^3} S \cdot L \quad [۶۱.۶]$$

این برهم‌کنش اسپین - مدار است؛ جدا از دو تصحیح (نسبت ژیرومغناطیسی اصلاح شده برای الکترون و سازه حرکت تقدیمی توماس - که به طور تصادفی دقیقاً یکدیگر را حذف می‌کنند) این درست همان چیزی است که بر پایه یک مدل کلاسیکی ساده‌انگارانه انتظار آن را می‌داشتید. از نظر فیزیکی، این امر وابسته است به گشتاور اعمال شده از طریق میدان مغناطیسی پروتون روی گشتاور دوقطبی مغناطیسی الکترونی که بدور خود می‌چرخد، در چارچوب ساکن لحظه‌ای الکترون. حالا نوبت می‌رسد به نسخه مکانیک کوانتومی آن. در حضور جفت‌شدگی اسپین - مدار، هامیلتونی دیگر با L و S جابه‌جا نمی‌شود، بنابراین تکانه‌های زاویه‌ای به طور جداگانه پایسته نیستند (مساله ۱۶.۶ را ببینید). با این حال، اسپین-مدار H' حتماً با L^2 و S^2 جابه‌جا می‌شود و جمع تکانه‌های زاویه‌ای عبارت است از

$$J \equiv L + S \quad [۶۲.۶]$$

و در نتیجه این کمیت‌ها پایسته‌اند (رابطه ۷۱.۳). برای آنکه به یک بیان دیگر هم مطلب را گفته باشیم، ویژه حالت‌های L_z و S_z حالت‌های «خوبی» برای استفاده در نظریه اختلال به شمار نمی‌روند، اما ویژه حالت‌های L^2 ، S^2 ، J^2 اینطورند. باید توجه داشت که

$$J^2 = (L + S) \cdot (L + S) = L^2 + S^2 + 2L \cdot S$$

بنابراین

$$L \cdot S = \frac{1}{2} (J^2 - L^2 - S^2) \quad [۶۳.۶]$$

و از آنجا ویژه مقادیر $L \cdot S$ عبارتند از

$$\frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]$$

در این حالت طبیعتاً $s = 1/2$ است. در این بین، مقدار چشمداشتی $1/r^3$ (مساله ۳۵.۶ پ) را ببینید) عبارت است از

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{1}{l(l+1/2)(l+1)n^3a^3} \quad [۶۴.۶]$$

و نتیجه می‌گیریم که

$$E_{\text{اسپین-مدار}}^1 = \langle H'_{\text{اسپین-مدار}} \rangle = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 m^2 c^2} \frac{(\hbar^2/2)[j(j+1) - l(l+1) - 3/4]}{l(l+1/2)(l+1)n^3a^3}$$

یا آنکه، آنرا برحسب E_n بیان می‌کنیم:^{۱۴}

$$E_{\text{اسپین-مدار}}^1 = \frac{(E_n)^2}{mc^2} \left\{ \frac{n[j(j+1) - l(l+1) - 3/4]}{l(l+1/2)(l+1)} \right\} \quad [۶۵.۶]$$

شایان توجه است که با در نظر گرفتن سازوکارهای فیزیکی کاملاً متفاوتی که در کارند، تصحیحات نسبیتی و جفت‌شدگی اسپین - مدار مرتبه یکسانی دارند (E_n^2/mc^2). با جمع آنها با یکدیگر، فرمول کامل ساختار ریز را بدست می‌آوریم (مساله ۱۷.۶ را ببینید):

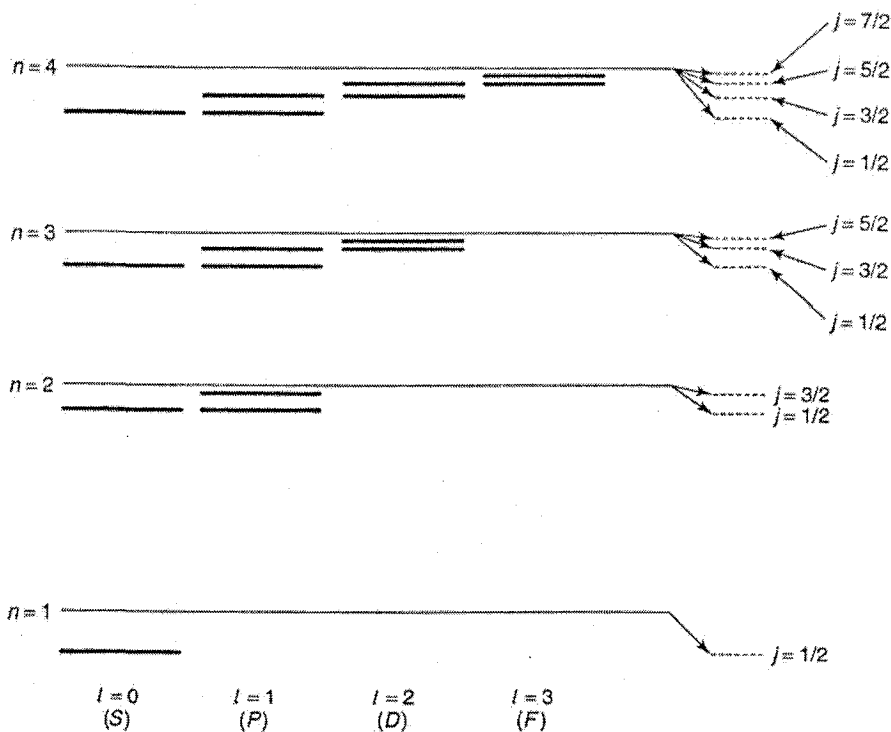
$$E_{\text{ساختار ریز}}^1 = \frac{(E_n)^2}{2mc^2} \left(3 - \frac{4n}{j+1/2} \right) \quad [۶۶.۶]$$

با ترکیب این نتایج با فرمول بور، نتیجه جواب اصلی سطوح انرژی هیدروژن را بدست می‌آوریم که دربرگیرنده ساختار ریز است:

$$E_{nj} = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right] \quad [۶۷.۶]$$

^{۱۴} یکبار دیگر، حالت $l = 0$ مشکل‌ساز است، چون اینطور که پیداست با تقسیم بر صفر مواجهیم. از سوی دیگر، صورت هم صفر است، چون در این حالت $j = s$ است، از اینرو رابطه ۶۵.۶ نامعلوم است. از دیدگاه فیزیکی وقتی $l = 0$ است نباید جفت‌شدگی اسپین - مدار داشته باشیم. یک راه رفع این ابهام وارد کردن به اصطلاح جمله داروین است (برای نمونه، کتاب *Elementary Atomic Structure* نوشته G. K. Woodgate، ویرایش دوم، آکسفورد (۱۹۸۳) صفحه ۶۳ را ملاحظه کنید). خوشبختانه، هرچند هم تصحیح نسبیتی (رابطه ۵۷.۶) و هم جفت‌شدگی اسپین - مدار (رابطه ۶۵.۶) در حالت $l = 0$ نامعلوم هستند، جمع آنها (رابطه ۶۶.۶) برای تمام l ها صحیح است (مساله ۱۹.۶ را ملاحظه کنید).

ساختار ریز تبه‌گنی در l را از میان برمی‌دارد (بدان معنی که به ازای n مفروض، مقادیر متفاوت مجاز l دیگر دارای انرژی یکسانی نخواهند بود)، اما باز هم تبه‌گنی در j را حفظ می‌کند (شکل ۹.۶ را ملاحظه کنید). مولفه z ویژه تابع‌های تکانه زاویه‌ای مداری و اسپینی (m_l و m_s) دیگر اعداد کوانتومی «خوبی» به شمار نمی‌روند - حالت‌های مانا ترکیب‌های خطی حالت‌هایی با مقادیر متفاوت از این کمیت‌ها هستند؛ اعداد کوانتومی «خوب» عبارتند از n, l, s, j و m_j .^{۱۵}



شکل ۹.۶: سطوح انرژی هیدروژن، شامل ساختار زیر (به مقیاس نیست).

^{۱۵} برای نوشتن $|jm\rangle$ (برای l و s مفروض) به صورت ترکیبی خطی از $|lm_l\rangle|sm_s\rangle$ از ضرایب مناسب کلبش - گوردون (رابطه ۱۸۵.۴) استفاده خواهیم کرد.

مسئله ۱۶.۶ جابه‌جاگرهای داده شده را محاسبه کنید: (الف) $[L \cdot S, L]$ ، (ب) $[L \cdot S, S]$ ، (پ) $[L \cdot S, J]$ ، (ت) $[L \cdot S, L^2]$ ، (ث) $[L \cdot S, S^2]$ ، (ج) $[L \cdot S, J^2]$. راهنمایی: L و S در روابط جابه‌جایی اصلی برای تکانه زاویه‌ای (روابط ۹۹.۴ و ۱۳۴.۴) صدق می‌کنند اما با هم جابه‌جا می‌شوند.

مسئله ۱۷.۶* فرمول ساختار ریز (رابطه ۶۶.۶) را از تصحیح نسبیتی (رابطه ۵۷.۶) و جفت‌شدگی اسپین - مدار (رابطه ۶۵.۶) استخراج کنید. راهنمایی: دقت کنید که $j = l \pm 1/2$ ؛ علامت مثبت و علامت منفی را جدا از هم بررسی کنید تا در آنصورت دریابید که به هر شکل جواب نهایی که بدست می‌آورید یکسان خواهد بود.

مسئله ۱۸.۶ مهم‌ترین ویژگی طیف هیدروژن در منطقه مرئی خط بالمر قرمز است که از گذار $n = 3$ به $n = 2$ می‌آید. پیش از هر چیز، طول موج و فرکانس این خط را براساس نظریه بور محاسبه کنید. ساختار ریز این خط را به چندین خط که بسیار نزدیک به هم هستند می‌شکافد؛ سوال اینجاست که آنها چه تعداد هستند و فاصله میان آنها چقدر است؟ راهنمایی: اول تعیین کنید سطح اصلی $n = 2$ به چه تعداد زیر سطح شکافته می‌شود و سپس ساختار ریز E^1 را برای هر یک از آنها به eV بدست آورید. سپس، همین کار را برای $n = 3$ انجام دهید. یک نمودار سطح انرژی رسم کنید که نشان دهنده تمام گذارهای ممکن از $n = 3$ به $n = 2$ باشد. انرژی آزاد شده (به صورت یک فوتون) برابر است با $\Delta E = (E_3 - E_2)$ ، بخش اول برای همه مشترک است ولی ΔE (به سبب ساختار ریز) از یک گذار به گذار دیگر تغییر می‌کند. ΔE را (به eV) برای هر گذار تعیین کنید. درنهایت، محاسبات انجام شده را به فرکانس فوتون برگردانده و فاصله میان خطوط طیفی مجاور را (به Hz) مشخص کنید - نه بازه فرکانسی میان هر خط و خط مختل نشده (که طبیعتاً غیر قابل مشاهده است)، بلکه بازه فرکانسی بین هر خط و خط بعدی. جواب نهایی تان این شکلی است که «خط بالمر قرمز به (؟؟؟) خط شکافته می‌شود. بنا به افزایش فرکانس، آنها از گذارهای (۱) $= (؟؟؟) z$ به $(؟؟؟) z$ ، (۲) $= (؟؟؟) z$ به $(؟؟؟) z$ و همینطور تا آخر می‌آیند. فاصله فرکانسی میان خط (۱) و خط (۲) برابر است با Hz (؟؟؟)، فاصله فرکانسی میان خط (۲) و خط (۳) برابر است با Hz (؟؟؟) و الی آخر».

مسئله ۱۹.۶ فرمول دقیق ساختار ریز هیدروژن (که از معادله دیراک بدون ذکر نظریه اختلال بدست می آید) عبارت است از^{۱۶}

$$E_{nj} = mc^2 \left\{ \left[1 + \left(\frac{\alpha}{n - (j + 1/2) + \sqrt{(j + 1/2)^2 - \alpha^2}} \right)^2 \right]^{-1/2} - 1 \right\}$$

این رابطه را تا مرتبه α^4 (با توجه به آنکه $\alpha \ll 1$ است) بسط داده و نشان دهید که معادله ۶۶.۶ را مجدداً بدست می آورید.

۴.۶ اثر زیمان

وقتی اتمی در یک میدان مغناطیسی خارجی یکنواخت B_{ext} قرار داده می شود، سطوح انرژی آن انتقال می یابند. این پدیده به اثر زیمان معروف است. برای یک تک الکترون، اختلال از این قرار است

$$H'_Z = -(\mu_l + \mu_s) \cdot B_{\text{ext}} \quad [۶۸.۶]$$

که در آن

$$\mu_s = -\frac{e}{m} S \quad [۶۹.۶]$$

گشتاور دوقطبی مغناطیسی وابسته به اسپین الکترون و

$$\mu_l = -\frac{e}{2m} L \quad [۷۰.۶]$$

گشتاور مغناطیسی وابسته به حرکت مداری است.^{۱۷} بدین ترتیب

$$H'_Z = \frac{e}{2m} (L + 2S) \cdot B_{\text{ext}} \quad [۷۱.۶]$$

^{۱۶}Bethe & Salpeter (زیرنویس ۱۰)، صفحه ۲۳۸.

^{۱۷}نسبت ژیرومغناطیسی برای حرکت مداری دقیقاً همان مقدار کلاسیکی ($q/2m$) را دارد - فقط برای اسپین است که

سرشت اثر شکافندگی زیمان به شکلی حیاتی به توان میدان خارجی در مقایسه با میدان داخلی (رابطه ۵۹.۶) وابسته است که از جفت‌شدگی اسپین - مدار می‌آید. زیرا چنانچه $B_{\text{ext}} \ll B_{\text{int}}$ باشد، در آن صورت ساختار ریز حکمفرمایی می‌کند و H'_Z را می‌توان اختلال کوچکی در نظر گرفت، درحالی‌که اگر $B_{\text{ext}} \gg B_{\text{int}}$ باشد، آنگاه اثر زیمان حاکم بوده و ساختار ریز اختلال مساله می‌شود. در منطقه میانی، آنجا که دو میدان با هم قابل مقایسه می‌شوند، به ساختار کامل نظریه اختلال نیاز داریم، چراکه قطری کردن آن بخش مرتبط از هامیلتونی «به صورت دستی» ضروری است. در بخش‌های پیش رو هر یک از این نظام‌ها را برای هیدروژن به طور خلاصه مورد بررسی قرار می‌دهیم.

مساله ۲۰.۶ از رابطه ۵۹.۶ برای حذف میدان داخلی در هیدروژن استفاده کرده و ویژگی‌های میدان زیمان «قوی» و «ضعیف» را به طور کیفی بیان کنید.

۱.۴.۶ اثر زیمان میدان ضعیف

اگر $B_{\text{ext}} \ll B_{\text{int}}$ باشد، ساختار ریز حکمفرماست (رابطه ۶۷.۶)؛ اعداد کوانتومی «خوب» عبارتند از n, l, m_l و m_s در این زمره قرار ندارند زیرا - در حضور جفت‌شدگی اسپین - مدار L و S به طور مجزا پایسته نیستند.^{۱۸} در نظریه اختلال مرتبه اول، تصحیح زیمان انرژی عبارت است از:

$$E_Z^1 = \langle nljm_l | H'_Z | nljm_l \rangle = \frac{e}{2m} B_{\text{ext}} \cdot (L + 2S) \quad [۷۲.۶]$$

باید توجه داشت که $L + 2S = J + S$ ؛ متأسفانه، به طور آنی مقدار چشمداشتی S را نمی‌دانیم. با این حال می‌توانیم به این صورت به آن پی ببریم: تکانه زاویه‌ای کل $J = L + S$ ثابت است (شکل

^{۱۸} در این مساله اختلالی (شکافنگی زیمان) داریم که بالادست یک اختلال (ساختار ریز) است. اعداد کوانتومی «خوب» آنهایی هستند که مناسب اختلال غالب می‌باشند - در این حالت منظور ساختار ریز است. اختلال مرتبه دوم (شکافنگی زیمان) تبهگنی باقیمانده در J_Z را از بین می‌برد، که اینجا نقش عملگر A در قضیه بخش ۱.۲.۶ را ایفا می‌کند. به بیان فنی، J_Z با H'_Z جابجا نمی‌شود، اما به مفهوم میانگین زمانی رابطه ۷۳.۶ این جابجایی صورت می‌پذیرد.

۱۰.۶؛ L و S به سرعت حول این بردار ثابت حرکت تقدیمی انجام می‌دهند. بخصوص، مقدار میانگین (زمانی) S درست برابر است با تصویر آن در امتداد J :

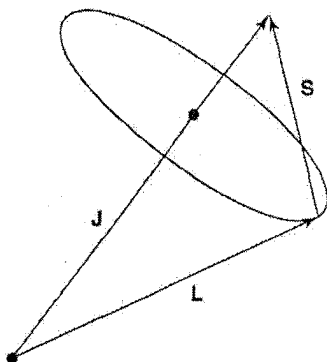
$$S_{\text{avg}} = \frac{(S \cdot J)}{J^2} \cdot J \quad [۷۳.۶]$$

اما $L = J - S$ ، از اینرو $L^2 = J^2 + S^2 - 2J \cdot S$ و در نتیجه

$$S \cdot J = \frac{1}{2}(J^2 + S^2 - L^2) = \frac{\hbar^2}{2}[j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)] \quad [۷۴.۶]$$

که از آن می‌توان چنین نتیجه گرفت که

$$\langle L + 2S \rangle = \left\langle \left(1 + \frac{S \cdot J}{J^2} \right) J \right\rangle = \left[1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + 3/4}{2j(j+1)} \right] \langle J \rangle \quad [۷۵.۶]$$



شکل ۱۰.۶: در حضور جفت‌شدگی اسپین-مدار، S و L به طور جداگانه پایسته نیستند؛ آنها حول محور ثابت تکانه زاویه‌ای کل J حرکت تقدیمی انجام می‌دهند.

عبارت داخل پرانتز مربعی را عامل g ی لاندé، g_J ، می‌نامند.

همچنین می‌توانیم محور z را در امتداد B_{ext} انتخاب کنیم؛ در آنصورت

$$E_z^1 = \mu_B g_J B_{\text{ext}} m_J \quad [۷۶.۶]$$

که در آن

$$\mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m} = 5.788 \times 10^{-5} \text{ eV/T} \quad [۷۷.۶]$$

را مگنتون بور می نامند. انرژی کل حاصل جمع بخش ساختار ریز (رابطه ۶۷.۶) و سهم زیمان (رابطه ۷۶.۶) است. برای مثال، حالت پایه $n = 1, l = 0, j = 1/2$ و از آنجا $g_j = 2$ به دو سطح شکافته می شود:

$$-13.6 \text{ eV} (1 + \alpha^2/4) \pm \mu_B B_{\text{ext}} \quad [۷۸.۶]$$

علامت مثبت برای $m_j = 1/2$ و علامت منفی برای $m_j = -1/2$ است. این انرژی ها (به صورت تابعی از B_{ext}) در شکل ۱۱.۶ رسم شده اند.

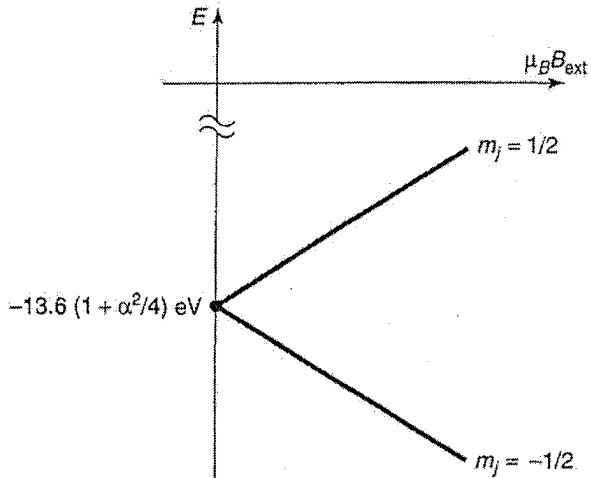
مساله ۲۱.۶* (هشت) حالت $n = 2$ ، $|2ljm_j\rangle$ ، را در نظر بگیرید. انرژی هر حالت را تحت شکافت زیمان میدان ضعیف بدست آورده و نموداری مانند شکل ۱۱.۶ برای نشان دادن چگونگی تحول انرژی ها به ازای افزایش B_{ext} رسم کنید. هر خط را به طور واضح برچسب گذاری کرده و شیب آنرا مشخص کنید.

۲۰.۴.۶ اثر زیمان میدان قوی

اگر $B_{\text{ext}} \gg B_{\text{int}}$ باشد، اثر زیمان حاکم است^{۱۹}

^{۱۹} در این نظام اثر زیمان را با عنوان اثر پاشن - باخ نیز می شناسند.

$$H'_Z = \frac{e}{2m} B_{\text{ext}} (L_z + 2S_z),$$



شکل ۱۱.۶: شکافتگی زیمان میدان ضعیف مربوط به حالت پایه؛ خط بالایی $(m_j = 1/2)$ شیب ۱ و خط پایینی $(m_j = -1/2)$ شیب -۱ دارد.

B_{ext} را در جهت محور z می‌گیریم، آنگاه اعداد کوانتومی «خوب» عبارتند از n, l, m_l و m_s اما j و m_j در زمره این اعداد نیستند.

$$H'_z = \frac{e}{2m} B_{ext} (L_z + 2S_z)$$

زیرا - در حضور گشتاور خارجی - تکانه زاویه‌ای کل پایسته نیست، درحالی‌که L_z و S_z پایسته هستند). هامیلتونی زیمن عبارت است از

و انرژی‌های «مختل نشده» هم به شرح زیرند

$$E_{nm_l m_s} = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} + \mu_B B_{ext} (m_l + 2m_s) \quad [۷۹.۶]$$

اگر کلا ساختار ریز را در نظر نگیریم، جواب همین است. اما می‌شود کار بهتری انجام داد.

در نظریه اختلال مرتبه اول، تصحیح ساختار ریز برای این سطوح از این قرار است

$$E_{fs}^1 = \langle nlm_l m_s | (H'_r + H'_{so}) | nlm_l m_s \rangle \quad [۸۰.۶]$$

سهم نسبیتی مانند قبل است (رابطه ۵۷.۶)؛ برای جمله اسپین - مدار (رابطه ۶۱.۶) لازم است که

$$\langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \rangle = \langle S_x \rangle \langle L_x \rangle + \langle S_y \rangle \langle L_y \rangle + \langle S_z \rangle \langle L_z \rangle = \hbar^2 m_l m_s \quad [۸۱.۶]$$

دقت کنید که برای ویژه مقادیر S_z و L_z داریم $\langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle = \langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$. با کنار هم

قرار دادن همه این روابط (مساله ۲۴.۶) به این نتیجه می‌رسیم که

$$E_{fs}^1 = \frac{13.6 \text{ eV}}{n^3} \alpha^2 \left\{ \frac{3}{4n} - \left[\frac{l(l+1) - m_l m_s}{l(l+1/2)(l+1)} \right] \right\} \quad [۸۲.۶]$$

(جمله داخل پرانتز مربعی به ازای $l = 0$ نامشخص است؛ مقدار صحیح آن در اینحالت برابر است

با ۱ - مساله ۲۲.۶ را ملاحظه کنید). انرژی کل برابر است با حاصلجمع بخش زیمن (رابطه ۷۹.۶)

و سهم ساختار ریز (رابطه ۸۲.۶).

مساله ۲۲.۶ با شروع از رابطه ۸۰.۶ و استفاده از روابط ۵۷.۶، ۶۱.۶، ۶۴.۶ و ۸۱.۶، رابطه ۸۲.۶ را استخراج کنید.

مساله ۲۳.۶** هشت حالت $|2lm_l m_s\rangle$ ، $n = 2$ را در نظر بگیرید. انرژی هر حالت را تحت شکافت زیمان میدان قوی بدست آورید. جوابهایتان را به صورت حاصلجمع سه جمله مثل رابطه ۷۷.۶ بیان کنید: انرژی بور، ساختار ریز (متناسب با α^2) و سهم زیمان (متناسب با $\mu_B B_{\text{ext}}$). چنانچه ساختار ریز را یکسره نادیده بگیرید، چه تعداد سطح مجزا وجود دارد و تبهگنی‌ها از چه مرتبه‌ای هستند؟

مساله ۲۴.۶ اگر $l = 0$ باشد در آن صورت $m_j = m_s$ ، $j = s$ بوده و حالت‌های «خوب» برای میدان‌های ضعیف و قوی یکسان ($|nm_s\rangle$) هستند. E_Z^1 (از روی رابطه ۷۲.۶) و انرژی‌های ساختار ریز (از روی رابطه ۶۷.۶) را تعیین کرده و نتیجه کلی را برای اثر زیمان به ازای $l = 0$ بنویسید - بدون توجه به توان میدان. نشان دهید که فرمول میدان قوی (رابطه ۸۲.۶) این نتیجه را به آن شرط بدست می‌دهد که آن عبارت نامعلوم در پرانتز مربعی را ۱ بگیریم.

۳.۴.۶ اثر زیمان متوسط

در یک نظام میانی، نه H'_Z و نه H'_{fs} هیچکدام حاکم نیستند و از اینرو باید آنها را در قالب اوضاعی معادل به عنوان اختلالات اعمال شده بر روی هامیلتونی بور (رابطه ۴۲.۶) در نظر بگیریم:

$$H' = H'_Z + H'_{fs} \quad [۸۳.۶]$$

در این بخش توجهم را به مورد $n = 2$ معطوف کرده و آنرا به عنوان پایه نظریه اختلال تبهگن برای حالت‌هایی برمی‌گزینم که با l ، j و m_j مشخص می‌شوند.^{۲۰} با استفاده از ضرایب کلبش -

^{۲۰} اگر ترجیح می‌دهید می‌توانید از حالت‌های l ، m_l و m_s استفاده کنید - با این کار عناصر ماتریسی H'_Z ساده‌تر می‌شوند اما عناصر H'_{fs} برعکس دشوار می‌شوند؛ ماتریس W پیچیده‌تر می‌شود اما ویژه مقادیر (که مستقل از پایه هستند) در هر حال یکجور خواهند بود.

گوردون (مساله ۴۵.۴ یا جدول ۷.۴) برای بیان $|jm_j\rangle$ به صورت ترکیبی خطی از $|l m_l\rangle |s m_s\rangle$ داریم

$$l=0 \quad \begin{cases} \psi_1 \equiv |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle = |00\rangle |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle \\ \psi_2 \equiv |\frac{1}{2} \frac{-1}{2}\rangle = |00\rangle |\frac{1}{2} \frac{-1}{2}\rangle \end{cases}$$

$$l=1 \quad \begin{cases} \psi_3 \equiv |\frac{3}{2} \frac{3}{2}\rangle = |1 \ 1\rangle |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle \\ \psi_4 \equiv |\frac{3}{2} \frac{-3}{2}\rangle = |1 \ -1\rangle |\frac{1}{2} \frac{-1}{2}\rangle \\ \psi_5 \equiv |\frac{3}{2} \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{2/3} |1 \ 0\rangle |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle + \sqrt{1/3} |1 \ 1\rangle |\frac{1}{2} \frac{-1}{2}\rangle \\ \psi_6 \equiv |\frac{3}{2} \frac{-1}{2}\rangle = -\sqrt{1/3} |1 \ 0\rangle |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle + \sqrt{2/3} |1 \ 1\rangle |\frac{1}{2} \frac{-1}{2}\rangle \\ \psi_7 \equiv |\frac{3}{2} \frac{-1}{2}\rangle = \sqrt{1/3} |1 \ -1\rangle |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle + \sqrt{2/3} |1 \ 1\rangle |\frac{1}{2} \frac{-1}{2}\rangle \\ \psi_8 \equiv |\frac{3}{2} \frac{-1}{2}\rangle = -\sqrt{2/3} |1 \ -1\rangle |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle + \sqrt{1/3} |1 \ 1\rangle |\frac{1}{2} \frac{-1}{2}\rangle \end{cases}$$

در این پایه عناصر غیر صفر ماتریس H'_{fs} تمامی روی قطر قرار دارند و از رابطه ۶۶.۶ هم بدست می‌آیند؛ H'_Z چهار عنصر غیر قطری دارد و به این ترتیب ماتریس کامل W عبارت است از (مساله ۲۵.۶ را ملاحظه کنید)

$$\begin{pmatrix} 5\gamma - \beta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 5\gamma + \beta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma - 2\beta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma + 2\beta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma - 2/3\beta & \sqrt{2/3}\beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2/3}\beta & 5\gamma - 1/3\beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma + 2/3\beta & \sqrt{2/3}\beta \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2/3}\beta & 5\gamma + 1/3\beta \end{pmatrix}$$

که در آن $\beta \equiv \mu_B B_{ext}$ و $\gamma \equiv (\alpha/8)^2 13.6 \text{ eV}$ است.

چهار ویژه مقدار اول در امتداد قطر نمایش داده شده‌اند؛ تنها می‌ماند ویژه مقادیر دو

بلوک 2×2 . معادله مشخصه برای اولی عبارت است از

$$\lambda^2 - \lambda(6\gamma - \beta) + \left(5\gamma^2 - \frac{11}{3}\gamma\beta\right) = 0$$

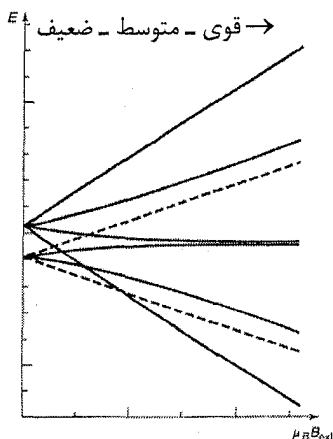
جدول ۲.۶: سطوح انرژی برای حالت‌های $n = 2$ هیدرون به همراه ساختار ریز و شکافت زیمن

$$\begin{aligned}
 \epsilon_1 &= E_2 - 5\gamma + \beta \\
 \epsilon_2 &= E_2 - 5\gamma - \beta \\
 \epsilon_3 &= E_2 - \gamma + 2\beta \\
 \epsilon_4 &= E_2 - \gamma - 2\beta \\
 \epsilon_5 &= E_2 - 3\gamma + \beta/2 + \sqrt{4\gamma^2 + (2/3)\gamma\beta + \beta^2/4} \\
 \epsilon_6 &= E_2 - 3\gamma + \beta/2 - \sqrt{4\gamma^2 + (2/3)\gamma\beta + \beta^2/4} \\
 \epsilon_7 &= E_2 - 3\gamma - \beta/2 + \sqrt{4\gamma^2 - (2/3)\gamma\beta + \beta^2/4} \\
 \epsilon_8 &= E_2 - 3\gamma - \beta/2 - \sqrt{4\gamma^2 - (2/3)\gamma\beta + \beta^2/4}
 \end{aligned}$$

در نتیجه معادله درجه دو ویژه مقادیر را بدست می‌دهد:

$$\lambda_{\pm} = 3\gamma - (\beta/2) \pm \sqrt{4\gamma^2 + (2/3)\gamma\beta + (\beta^2/4)} \quad [۸۴.۶]$$

ویژه مقادیر بلوک دوم همانند هستند اما علامت β آنها برعکس است. هشت انرژی در جدول ۲.۶ فهرست شده و در شکل ۱۲.۶ هم در مقابل B_{ext} رسم شده‌اند. در حد میدان صفر ($\beta = 0$) این انرژی‌ها به مقادیر ساختار ریز ساده می‌شوند؛ به ازای میدان‌های ضعیف ($\beta \ll \gamma$) این انرژی‌ها به همان نتیجه‌ای منجر می‌شوند که در مساله ۲۱.۶ بدست آوردید؛ به ازای میدان‌های قوی ($\beta \gg \gamma$) این انرژی‌ها همان نتیجه‌ای که در مساله ۲۳.۶ بدست آوردیم را باز تولید می‌کنند.



شکل ۱۲.۶: شکافت زیمن حالت‌های $n = 2$ هیدروژن در نظام‌های میدان ضعیف، متوسط و قوی. (به همسانی پنج سطح انرژی مجزا، در میدان‌های بسیار بالا، آنگونه که در مساله ۲۳.۶

مساله ۲۵.۶ عناصر ماتریس H'_Z و H'_{fs} را محاسبه کرده و ماتریس W داده شده در متن را به ازای $n = 2$ تشکیل دهید.

مساله ۲۶.۶*** اثر زیمان را برای حالت‌های $n = 3$ هیدروژن در نظام‌های میدان ضعیف، متوسط و قوی تحلیل و بررسی کنید. جدولی از انرژی‌ها (مانند جدول ۲.۶) تشکیل داده، آنها را به صورت توابعی از میدان خارجی (مانند شکل ۱۲.۶) رسم کرده و بررسی کنید آیا نتایج میدان متوسط به طور مناسب به دو مورد محدود کننده تحویل می‌یابند.

۵.۶ شکافت فوق ریز در هیدروژن

پروتون خود متشکل است از یک دوقطبی مغناطیسی، گرچه گشتاور دوقطبی آن نسبت به الکترون به خاطر جرم در مخرج (رابطه ۶۰.۶) بسیار کوچکتر است:

$$\mu_p = \frac{ge}{2m_p} S_p, \quad \mu_e = -\frac{e}{m_e} S_e \quad [۸۵.۶]$$

(پروتون ساختاری ترکیبی دارد که از سه کوارک درست شده و نسبت ژئرومغناطیسی آن نیز به سادگی الکترون نیست - همینطور هم عامل g آن که مقدار اندازه‌گیری شده‌اش ۵.۵۹ است و با مقدار الکترون یعنی ۲.۰۰ یکسان نیست.) بنابر الکترودینامیک کلاسیک، یک دوقطبی μ باعث بوجود آمدن میدان مغناطیسی زیر می‌شود^{۲۱}

$$B = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} [3(\mu \cdot \hat{r})\hat{r} - \mu] + \frac{2\mu_0}{3} \mu \delta^3(r) \quad [۸۶.۶]$$

از اینرو هامیلتونی الکترون در میدان مغناطیسی‌ای که به سبب گشتاور دوقطبی مغناطیسی پروتون بوجود آمده، عبارت است از (رابطه ۵۸.۶)

$$H'_{hf} = \frac{\mu_0 g_p e^2}{8\pi m_p m_e} \frac{[3(S_p \cdot \hat{r})(S_e \cdot \hat{r}) - S_p \cdot S_e]}{r^3} + \frac{\mu_0 g_p e^2}{3m_p m_e} S_p \cdot S_e \delta^3(r) \quad [۸۷.۶]$$

^{۲۱} چنانچه با عبارت تابع دلتا در رابطه ۸۶.۶ آشنایی ندارید، می‌توانید آنرا با فرض دوقطبی به عنوان یک پوسته کروی باردار در حال چرخش بدور خود در حد شعاعی که به سمت صفر میل می‌کند و باری که به سمت بینهایت می‌رود (با فرض ثابت بودن μ) استخراج کنید. مقاله D. J. Griffiths در مجله *Am. J. Phys.* شماره ۵۰، ۶۹۸ (۱۹۸۲) را ببینید.

براساس نظریه اختلال، تصحیح مرتبه اول انرژی (رابطه ۹.۶) برابر است با مقدار چشمداشتی هامیلتونی اختلالی:

$$E_{\text{hf}}^1 = \frac{\mu_0 g_p e^2}{8\pi m_p m_e} \left\langle \frac{3(S_p \cdot \hat{r})(S_e \cdot \hat{r}) - S_p \cdot S_e}{r^3} \right\rangle + \frac{\mu_0 g_p e^2}{3m_p m_e} \langle S_p \cdot S_e \rangle \quad [۸۸.۶]$$

در حالت پایه (یا هر حالت دیگری که برای آن $l = 0$ باشد) تابع موج دارای تقارن کروی است و اولین مقدار چشمداشتی حذف می‌شود (مساله ۲۷.۶ را ببینید). در این بین، از رابطه ۸۰.۴ درمی‌یابیم که $|\psi_{100}(0)|^2 = 1/(\pi a^3)$ ، لذا

$$E_{\text{hf}}^1 = \frac{\mu_0 g e^2}{3\pi m_p m_e a^3} \langle S_p \cdot S_e \rangle |\psi(0)|^2 \quad [۸۹.۶]$$

این را جفت‌شدگی اسپین - اسپین می‌نامند زیرا دربرگیرنده ضرب نقطه‌ای دو اسپین است (برخلاف جفت‌شدگی اسپین - مدار که شامل $S \cdot L$ است).

در حضور جفت‌شدگی اسپین - اسپین، تکانه‌های زاویه‌ای اسپینی منفرد دیگر پایسته نیستند؛ حالت‌های «خوب» ویژه بردارهای اسپین کل هستند

$$S \equiv S_e + S_p \quad [۹۰.۶]$$

مانند قبل، این رابطه را به توان دو می‌رسانیم نتیجه زیر را بدست آوریم

$$S_e \cdot S_p = \frac{1}{2}(S^2 - S_e^2 - S_p^2) \quad [۹۱.۶]$$

اما الکترون و پروتون هر دو اسپین $1/2$ دارند، لذا $S_e^2 = S_p^2 = (3/4)\hbar^2$. در حالت سه‌تایه (که اسپین‌ها «موازی» هستند) اسپین کل ۱ است و در نتیجه $S^2 = 2\hbar^2$ ؛ در حالت تک‌تایه اسپین کل ۰ است پس $S^2 = 0$ خواهد بود. بدین ترتیب

$$E_{\text{hf}}^1 = \frac{4g_p \hbar^4}{3m_p m_e^2 c^2 a^4} \begin{cases} +1/4, (\text{سه تاییه}) \\ -3/4, (\text{تکتاییه}) \end{cases} \quad [۹۲.۶]$$

جفت‌شدگی اسپین - اسپین تبه‌گنی اسپینی حالت پایه را خراب کرده، پیکربندی سه‌تایه را از بین برده و حالت تک‌تایه را می‌شکند (شکل ۱۳.۶ را ببینید).

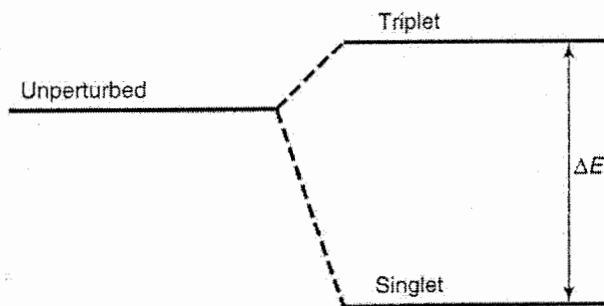
گاف انرژی آشکارا عبارت است از

$$\Delta E = \frac{4g_p \hbar^4}{3m_p m_e^2 c^2 a^4} = 5.88 \times 10^{-6} \text{ eV} \quad [۹۳.۶]$$

فرکانس فوتون ساطع شده در گذاری از حالت سه‌تایه به حالت تک‌تایه برابر است با

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = 1420 \text{ MHz} \quad [۹۴.۶]$$

و طول موج متناظر آن نیز $c/\nu = 21 \text{ cm}$ است که در محدوده مایکرو ویو قرار می‌گیرد. این خط ۲۱ سانتی‌متر معروف در زمره فراگیرترین و نافذترین اشکال تابش در عالم است.



شکل ۱۳.۶: شکافت فوق ریز در حالت پایه هیدروژن.

مساله ۲۷.۶ بگذارید a و b دو بردار ثابت باشند. نشان دهید

$$\int (a \cdot \hat{r})(b \cdot \hat{r}) \sin \theta \, d\theta \, d\phi = \frac{4\pi}{3} (a \cdot b) \quad [۹۵.۶]$$

(انتگرال گیری روی بازه معمول $0 < \theta < \pi$ و $0 < \phi < 2\pi$ است.) از این نتیجه برای اثبات

رابطه زیر در حالت‌هایی که در آنها $l = 0$ است استفاده کنید

$$\left\langle \frac{3(S_p \cdot \hat{r})(S_e \cdot \hat{r}) - S_p \cdot S_e}{r^3} \right\rangle = 0$$

راهنمایی: $\hat{r} = \sin \theta \cos \phi \hat{i} + \sin \theta \sin \phi \hat{j} + \cos \theta \hat{k}$

مساله ۲۸.۶ با اصلاح مناسب فرمول هیدروژن، شکافت فوق ریز در حالت پایه برای (الف) هیدروژن موثونی (که در آن یک موئون - با بار و عامل g ی یکسان با الکترون اما با جرمی 207 بار سنگین تر - جای الکترون را می گیرد، (ب) پوزیترونیم (که در آن یک پوزیترون - با جرم و عامل g ی یکسان با الکترون اما بار مخالف - جای الکترون را می گیرد و (پ) موئونیم (که در آن یک پادموئون - با جرم و عامل g ی یکسان با موئون اما بار مخالف - جای پروتون را می گیرد) را تعیین کنید.

راهنمایی: فراموش نکنید از جرم کاهیده (مساله ۱.۵) در محاسبه «شعاع بور» این «اتم‌های نامتعرف» استفاده کنید. ضمناً، پاسخی که برای پوزیترونیم بدست می آورید

$(4.82 \times 10^{-4} \text{ eV})$ بسیار دورتر از مقدار تجربی آن $(8.41 \times 10^{-4} \text{ eV})$ است؛ این تفاوت زیاد به جهت نابودی زوج $(e^+ + e^- \rightarrow \gamma + \gamma)$ است که یک مقدار اضافه $(3/4)\Delta E$ را ارزانی کرده و (طبعاً) در هیدروژن معمولی، هیدروژن موثونی و موئونیم وجود ندارد.

مسائل دیگری برای فصل ۶

مساله ۲۹.۶ تصحیح انرژی حالت پایه هیدروژن به واسطه اندازه محدود هسته‌ها را تخمین بزنید. پروتون را یک پوسته کروی باردار به شعاع b بگیرید تا انرژی پتانسیل یک الکترون داخل پوسته ثابت باشد: $-e^2/(4\pi\epsilon_0 b)$ ؛ البته خیلی ایده‌آل نیست، اما ساده‌ترین مدل ممکن است، برای همین مرتبه بزرگی را بدرستی بدست می‌دهد. نتیجه خود را در توان‌های پارامتر کوچک b/a ، که در آن a شعاع بور است، بسط دهید و تنها جملات اصلی را نگاه دارید تا جواب نهایی‌تان به شکل زیر شود

$$\frac{\Delta E}{E} = A(b/a)^n$$

کار شما این است که ثابت A و توان n را تعیین کنید. سرانجام، مقدار $b \approx 10^{-15} \text{m}$ (که شعاع تقریبی پروتون است) را در رابطه قرار داده و عدد واقعی را محاسبه کنید. چطور این مقدار را با ساختار ریز و فوق ریز مقایسه می‌کنید؟

مساله ۳۰.۶ نویسانگر هماهنگ سه بعدی همسانگرد (مساله ۳۸.۴) را در نظر بگیرید. درباره اثر اختلال (مرتبه اول)

$$H' = \lambda x^2 y z$$

(به ازای مقدار ثابت λ) روی

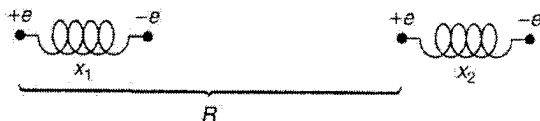
(الف) حالت پایه؛

(ب) نخستین حالت برانگیخته (با تبهگنی سه تاییه) بحث کنید. راهنمایی: از جواب‌های مسائل ۱۲.۲ و ۳۳.۳ استفاده کنید.

مساله ۳۱.۶*** برهم‌کنش وان در والس، دو اتم به فاصله R از یکدیگر را در نظر بگیرید. چون از نظر الکتریکی خنثی هستند می‌توانید فرض کنید هیچ نیرویی بین آنها وجود ندارد، اما اگر بشود آنها را قطبی کرد آنوقت جاذبه ضعیفی بین شان وجود خواهد داشت. برای مدل کردن این سامانه، هر اتم را به صورت الکترونی (به جرم m و بار $-e$) تصویر کنید که به

فنی (با ثابت فنر k) مانند شکل ۱۴.۶ به هسته متصل است. فرض را بر این می‌گذاریم که هسته‌ها سنگین هستند، پس اساساً حرکت نمی‌کنند. هامیلتونی این سامانه غیر اختلالی عبارت است از

$$H^0 = \frac{1}{2m} p_1^2 + \frac{1}{2} k x_1^2 + \frac{1}{2m} p_2^2 + \frac{1}{2} k x_2^2 \quad [۹۶.۶]$$



شکل ۱۴.۶: دو اتم قطبش پذیر مجاور (مساله ۳۱.۶).

برهم‌کنش کولنی میان اتم‌ها عبارت است از

$$H' = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{R-x_1} - \frac{e^2}{R+x_2} + \frac{e^2}{R-x_1+x_2} \right) \quad [۹۷.۶]$$

(الف) رابطه ۹۷.۶ را توضیح دهید. با این فرض که $|x_1|$ و $|x_2|$ هر دو کوچکتر از R هستند، نشان دهید

$$H' \cong -\frac{e^2 x_1 x_2}{2\pi\epsilon_0 R^3} \quad [۹۸.۶]$$

(ب) نشان دهید هامیلتونی کل (رابطه ۹۶.۶ به علاوه ۹۸.۶) به دو هامیلتونی نوسانگر هماهنگ جدا می‌شود:

$$H = \left[\frac{1}{2m} p_+^2 + \frac{1}{2} \left(k - \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 R^3} \right) x_+^2 \right] + \left[\frac{1}{2m} p_-^2 + \frac{1}{2} \left(k + \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 R^3} \right) x_-^2 \right] \quad [۹۹.۶]$$

با تغییر متغیرهای

$$x_{\pm} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (x_1 \pm x_2) \text{ و } p_{\pm} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (p_1 \pm p_2) \quad [۱۰۰.۶]$$

پیدااست که انرژی حالت پایه برای این هامیلتونی برابر است با

$$E = \frac{1}{2} \hbar (\omega_+ + \omega_-) \omega_{\pm} = \sqrt{k \mp (e^2/2\pi\epsilon_0 R^3)} \quad [۱۰۱.۶]$$

بدون برهم کنش کولنی این مقدار برابر می‌شد با $E_0 = \hbar\omega_0$ که در آن $\omega_0 = \sqrt{k/m}$. با فرض آنکه $k \gg (e^2/2\pi\epsilon_0 R^3)$ نشان دهید

$$\Delta V \equiv E - E_0 \cong -\frac{\hbar}{8\pi^2\omega_0^3} \left(\frac{e^2}{2\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{1}{R^6} [۱۰.۲.۶]$$

نتیجه‌گیری: مابین اتم‌ها یک نیروی جاذبه وجود دارد که متناسب است با عکس توان ششم فاصله جدایی‌شان. این همان برهم کنش وان در والس بین دو اتم خنثی است.

(ت) حال همین محاسبه را با استفاده از نظریه اختلال مرتبه دوم انجام دهید. راهنمایی: حالت‌های مختل نشده به شکل $\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2)$ هستند که در آن $\psi_n(x)$ یک تابع موج نوسانگر تک ذره‌ای به جرم m و ثابت فنر k است؛ ΔV تصحیح مرتبه دوم انرژی حالت پایه برای اختلال رابطه ۹.۶ است (توجه داشته باشید که تصحیح مرتبه اول صفر است).

مساله ۳۲.۶ فرض کنید هامیلتونی H برای یک سامانه کوانتومی بخصوص تابعی از یک پارامتر λ باشد؛ بگذارید $E_n(\lambda)$ و $\psi_n(\lambda)$ ویژه مقادیر و ویژه توابع $H(\lambda)$ باشند. قضیه فاینمن-هلمن^{۲۲} اظهار می‌دارد که

$$\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \left\langle \psi_n \left| \frac{\partial H}{\partial \lambda} \right| \psi_n \right\rangle [۱۰.۳.۶]$$

(با فرض آنکه یا E_n غیر تبهگن باشد یا - اگر تبهگن است - ψ_n ها ترکیبات «خوبی» از ویژه توابع تبهگن باشند).

(الف) قضیه فاینمن - هلمن را ثابت کنید. راهنمایی: از رابطه ۹.۶ استفاده کنید.

(ب) این قضیه را در مورد نوسانگر هماهنگ یک بعدی (۱) با استفاده از $\lambda = \omega$ (این فرمولی برای مقدار چشمداشتی V بدست می‌دهد)، (۲) با استفاده از $\lambda = \hbar$ (که $\langle T \rangle$ را می‌دهد) و (۳)

^{۲۲}فاینمن رابطه ۱۰.۳.۶ را هنگام کار بر روی پایان نامه دوره کارشناسی‌اش در MIT آمریکا بدست آورد (R. P. Feynman, *Phys. Rev.* 56, 340, 1939)؛ کار هلمن چهار سال زودتر در یک نشریه روسی گمنام به چاپ رسیده بود.

با استفاده از $\lambda = m$ (که رابطه‌ای میان $\langle T \rangle$ و $\langle V \rangle$ را نتیجه می‌دهد) به کار بگیرید. جواب‌هایتان را با مساله ۱۲.۲ و پیش‌بینی‌های قضیه ویرال (مساله ۳۱.۳) مقایسه کنید.

مساله ۳۳.۶** می‌توان قضیه فاینمن - هلمن (مساله ۳۲.۶) را برای تعیین مقادیر چشمداشتی $1/r$ و $1/r^2$ هیدروژن به کار برد.^{۲۳} هامیلتونی موثر برای توابع موج شعاعی (رابطه ۵۳.۴) عبارت است از

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

و ویژه مقادیر (بیان شده برحسب l) (رابطه ۷۰.۴) هم از این قرارند

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2(j_{\max} + l + 1)^2}$$

(الف) از $\lambda = e$ در قضیه فاینمن - هلمن برای بدست آوردن $\langle 1/r \rangle$ استفاده کنید. جوابتان را در مقایسه با رابطه ۵۵.۶ بررسی کنید.

(ب) از $\lambda = l$ برای بدست آوردن $\langle 1/r^2 \rangle$ استفاده کنید. جوابتان را در مقایسه با رابطه ۵۶.۶ بررسی کنید.

مساله ۳۴.۶ رابطه کرامرز را اثبات کنید:^{۲۴}

$$\frac{s+1}{n^2} \langle r^s \rangle - (2s+1)a \langle r^{s-1} \rangle + \frac{s}{4} [(2l+1)^2 - s^2] a^2 \langle r^{s-2} \rangle = 0 \quad [۱۰.۴.۶]$$

^{۲۳} مقاله C. Sanchez del Rio در مجله *Am. J. Phys.* شماره ۵۰، ۵۵۶ (۱۹۸۲) و H. S. Valk در همان مجله شماره

۵۴، ۹۲۱ (۱۹۸۶)

^{۲۴} این رابطه به (دومین) رابطه پاسترناک هم معروف است. مقاله H. Beker در *Am. J. Phys.* 65, 1118 (1997) را ملاحظه کنید. برای اثباتی از قضیه فاینمن - هلمن (مساله ۳۲.۶)، مقاله S. Balasubramanian در *Am. J. Phys.* 68,

که مقادیر چشمداشتی r برای تابع موج ψ_{nlm} الکترونی در اتم هیدروژن را به سه توان متفاوت ($s-1$ ، s و $s-2$) پیوند می‌دهد. راهنمایی: رابطه شعاعی (رابطه ۵۳.۴) را مجدداً به این شکل بازنویسی کرده

$$u'' = \left[\frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2}{ar} + \frac{1}{n^2 a^2} \right] u$$

و از آن برای بیان $\int (ur^s u'') dr$ برحسب $\langle r^s \rangle$ ، $\langle r^{s-1} \rangle$ و $\langle r^{s-2} \rangle$ استفاده کنید. سپس انتگرال‌گیری جزء به جزء را برای ساده کردن مشتق دوم به کار بگیرید. نشان دهید که $\int (ur^s u') dr = -(s/2) \langle r^{s-1} \rangle$ و $\int (u'' r^{s+1} u') dr = -[2/(s+1)] \int (u'' r^{s+1} u') dr$. نتیجه را از آنجا بدست آورید.

مساله ۳۵.۶

(الف) $s=0$ ، $s=1$ ، $s=2$ و $s=3$ را در رابطه کرامرز (رابطه ۱۰۴.۶) قرار دهید تا فرمول‌های $\langle r^{-1} \rangle$ ، $\langle r \rangle$ ، $\langle r^2 \rangle$ و $\langle r^3 \rangle$ را بدست آورید. دقت کنید که می‌توانستید این کار را برای یافتن هر توان مثبتی تا بینهایت ادامه دهید.

(ب) با این حال، در جهت دیگر دزدسر درست کردید. $s=-1$ را در رابطه قرار داده و نشان دهید تمام آنچه بدست می‌آورید رابطه‌ای میان $\langle r^{-2} \rangle$ و $\langle r^{-3} \rangle$ است.

(پ) اما چنانچه $\langle r^{-2} \rangle$ را به هر روش دیگری بدست آورید، می‌توانید رابطه کرامرز را برای بدست آوردن بقیه توان‌های منفی به کار بگیرید. از رابطه ۵۶.۶ (که در مساله ۳۳.۶ استخراج شد) برای تعیین $\langle r^{-3} \rangle$ استفاده کرده و جوابتان را در مقایسه با رابطه ۶۴.۶ بررسی کنید.

مساله ۳۶.۶ *** وقتی اتمی را در میدان الکتریکی یکنواخت خارجی E_{ext} قرار می‌دهیم،

سطوح انرژی انتقال پیدا می‌کنند - پدیده‌ای موسوم به اثر اشتارک. در این مساله اثر اشتارک را برای حالت‌های $n=1$ و $n=2$ هیدروژن تحلیل می‌کنیم. بگذارید میدان در جهت محور z باشد، بنابراین انرژی پتانسیل الکترون عبارت است از

$$H'_S = -eE_{\text{ext}}z = -eE_{\text{ext}}r \cos \theta$$

این انرژی را اختلالی روی هامیلتونی بور (رابطه ۴۲.۶) بگیرید؛ اسپین در این مساله جایی ندارد، لذا از آن صرفنظر کرده و توجهی به ساختار ریز نکنید.

(الف) نشان دهید انرژی حالت پایه توسط این اختلال در مرتبه اول هیچ تاثیری نمی‌پذیرد.

(ب) اولین حالت برانگیختگی دارای تبهگنی چهارتایه است: ψ_{200} ، ψ_{211} ، ψ_{210} و ψ_{21-1} . با استفاده از نظریه اختلال تبهگن، تصحیحات مرتبه اول انرژی را بدست آورید. E_2 به چند سطح شکافته می‌شود؟

(پ) توابع موج «خوب» برای قسمت (ب) کدامند؟ مقدار چشمداشتی گشتاور دوقطبی الکتریکی $(p_e = -e\mathbf{r})$ در هر یک از این حالت‌های «خوب» را بیابید. توجه کنید که جوابها از میدان اعمال شده مستقلند - اینطور که پیداست هیدروژن در نخستین حالت برانگیختگی خود قادر است گشتاور دوقطبی الکتریکی دایمی داشته باشد.

راهنمایی: در این مساله انتگرال‌های زیادی وجود دارد، با این حال تقریباً همه آنها صفر هستند. پس پیش از انجام هرگونه محاسبه، هر کدام را به دقت مطالعه کنید: اگر انتگرال ϕ حذف می‌شود، دیگر جایی برای محاسبه انتگرال‌های r و θ باقی نمی‌ماند. پاسخ جزئی: $W_{13} = W_{31} = 3eaE_{ext}$ ؛ بقیه عناصر صفر هستند.

مساله ۳۷.۶*** اثر اشتارک (مساله ۳۶.۶) را برای حالت‌های $n = 3$ هیدروژن در نظر بگیرید. از ابتدا نه حالت تبهگن، ψ_{3lm} ، وجود دارد (البته با نادیده گرفتن اسپین). میدانی الکتریکی در جهت محور z را به این مساله اضافه می‌کنیم.

(الف) ماتریسی 9×9 بسازید که نشان دهنده هامیلتونی اختلالی باشد. پاسخ جزئی: $\langle 310|z|310 \rangle = -3\sqrt{6}a$ ، $\langle 300|z|310 \rangle = -3\sqrt{3}a$ ، $\langle 310|z|320 \rangle = -3\sqrt{3}a$ ، $\langle 31 \pm 1|z|32 \pm 1 \rangle = -(9/2)a$.

(ب) ویژه مقادیر و تبهگنی‌های آنها را بدست آورید.

مساله ۳۸.۶ طول موج فوتون ساطع شده تحت یک گذار فوق ریز در حالت پایه ($n = 1$) دوتریوم را به سانتی‌متر محاسبه کنید. **مساله ۳۸.۷** دوتریوم «سنگین» است که هسته‌اش یک

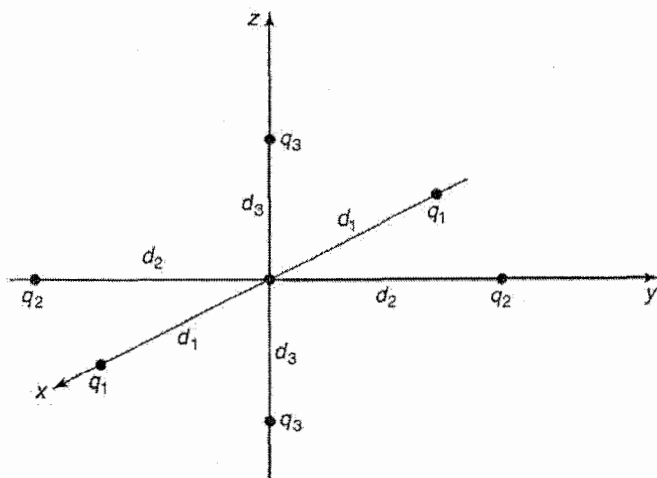
نوترون اضافی دارد. پروتون و نوترون به یکدیگر می پیوندند تا یک دوترون را بوجود آورند که اسپینش 1 و گشتاور مغناطیسی اش نیز

$$\mu_d = \frac{g_d e}{2m_d} S_d$$

است. عامل g دوترون هم برابر است با 1.71.

مساله ۳۹.۶*** در یک بلور، میدان الکتریکی یون های همسایه سطوح انرژی اتم را مختل می کند. به عنوان مثالی بسیار ابتدایی، اتم هیدروژنی را در نظر بگیرید که با سه جفت بار نقطه ای آنطور که در شکل ۱۵.۶ نشان داده شده، احاطه گردیده است. (اسپین در این مساله جایی ندارد، لذا از آن صرف نظر کنید).

(الف) پائین ترین مرتبه تصحیح انرژی حالت پایه را بدست آورید.
 (ب) تصحیحات مرتبه اول انرژی نخستین حالت های برانگیختگی ($n = 2$) را محاسبه کنید.
 این سامانه تبهگن چهارتایه (۱) در حالت تقارن مکعبی، $\beta_1 = \beta_2 = \beta_3$ ؛ (۲) در حالت تقارن راست گوشه، $\beta_1 = \beta_2 \neq \beta_3$ ؛ (۳) در حالت کلی تقارن چارگوشی، (هر سه متفاوت هستند) به چند سطح شکافته می شود؟



شکل ۱۵.۶: اتم هیدروژنی که شش بار نقطه ای آنرا احاطه کرده اند (مدلی ابتدایی برای یک شبکه بلوری)؛ مساله ۳۹.۶.

مساله ۴۰.۶*** گاهی حل مستقیم رابطه ۱۰.۶ بدون نیاز به بسط ψ_n^1 بر حسب توابع موج مختل نشده (رابطه ۱۱.۶) امکان پذیر است. اینجا دو مثال خاص مناسب آورده شده است.

(الف) اثر اشتارک در حالت پایه هیدروژن.

(۱) تصحیح مرتبه اول برای حالت پایه هیدروژن را در حضور میدان الکتریکی خارجی یکنواخت E_{ext} بدست آورید (اثر اشتارک - مساله ۳۶.۶ را ملاحظه کنید). راهنمایی: جوابی به شکل زیر را امتحان کنید.

$$(A + Br + Cr^2)e^{-r/a} \cos \theta$$

مشکل شما پیدا کردن ثابت‌های A ، B و C است که رابطه ۱۰.۶ را به جواب می‌رسانند.

(۲) از رابطه ۱۴.۶ برای تعیین تصحیح مرتبه دوم انرژی حالت پایه استفاده کنید (تصحیح مرتبه اول صفر است، همانطور که در مساله ۳۶.۶ (آ) بدست آوردید). پاسخ: $-m(3a^2 e E_{\text{ext}} / 2\hbar)^2$

(ب) اگر پروتون یک گشتاور دوقطبی الکتریکی p می‌داشت، انرژی پتانسیل الکترون در هیدروژن به مقدار زیر مختل می‌شد

$$H' = -\frac{ep \cos \theta}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

۱- رابطه ۱۰.۶ را برای تصحیح مرتبه اول حالت پایه تابع موج حل کنید.

۲- نشان دهید گشتاور دوقطبی الکتریکی کل اتم (در کمال تعجب) برای این مرتبه صفر است.

۳- از رابطه ۱۴.۶ برای تعیین تصحیح مرتبه دوم انرژی حالت پایه استفاده کنید. تصحیح مرتبه اول چیست؟

فصل

هفتم

اصل وردش

۱.۷ نظریه

فرض کنید می‌خواهید انرژی حالت پایه E_g سامانه‌ای که با هامیلتونی H توصیف می‌شود را محاسبه کنید، اما قادر به حل معادله شرودینگر (مستقل از زمان) نیستی. اصل وردش کران بالای E_{gs} را در اختیار شما می‌گذارد که گاهی اوقات تمام آنچیزی است که نیاز دارید، برای همین اغلب اگر ماهرانه آنرا به کار بگیرید، به مقدار دقیق بسیار نزدیک می‌شوید. حال ببینیم این اصل چگونه کار می‌کند: هر تابع ψ بهنجار شده‌ای را که دوست دارید انتخاب کنید؛ من ادعا می‌کنم

$$E_{gs} \leq \langle \psi | H | \psi \rangle \equiv \langle H \rangle \quad (1.7)$$

- به این معنی که مقدار چشمداشتی H در این حالت (فرضا نادرست) ψ به حتم برآوردی خوش‌بینانه از انرژی حالت پایه بدست می‌دهد. البته، اگر ψ درست برابر با یکی از حالت‌های برانگیخته باشد، آنگاه واضح است که $\langle H \rangle$ از E_{gs} بیشتر می‌شود؛ نکته اینجاست که این اصل برای هر ψ مفروض به همین شکل صادق است.

اثبات: از آنجاییکه ویژه توابع (نامعلوم) H مجموعه کاملی تشکیل می‌دهند، می‌توانیم ψ را به صورت ترکیبی خطی از آنها بیان کنیم^۱:

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n, \quad \text{با } H\psi_n = E_n \psi_n$$

چون ψ بهنجار شده است،

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \left\langle \sum_m c_m \psi_m \left| \sum_n c_n \psi_n \right. \right\rangle = \sum_m \sum_n c_m^* c_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \sum_n |c_n|^2$$

(با این فرض که ویژه توابع راست هنجار بوده‌اند: $\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{mn}$). در این بین،

$$\langle H \rangle = \left\langle \sum_m c_m \psi_m \left| H \sum_n c_n \psi_n \right. \right\rangle = \sum_m \sum_n c_m^* E_n c_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \sum_n E_n |c_n|^2$$

^۱ اگر هامیلتونی حالت‌های پراکنده را به انضمام حالت‌های مقید جایز بشمارد، آنگاه علاوه بر حاصلجمع به انتگرال نیز

اما انرژی حالت پایه از روی تعریف برابر است با کوچکترین ویژه مقدار، لذا $E_g \leq E_n$ است و در نتیجه

$$\langle H \rangle \geq E_{gs} \sum_n |c_n|^2 = E_{gs}$$

که همان چیزی بود که در پی اثبات آن بودیم.

مثال ۱.۷ فرض کنید می‌خواهیم انرژی حالت پایه را برای نوسانگر هماهنگ یک بعدی بدست آوریم:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

طبعاً، از پیش جواب دقیق را برای این مورد می‌دانیم (رابطه ۶۱.۲): $E_{gs} = (1/2)\omega\hbar$ ؛ اما با حل مجدد آن آزمون خوبی روی این روش انجام می‌گیرد. می‌توانیم تابع موج «آزمون» مان را تابع گاوسی بگیریم

$$\psi(x) = A e^{-bx^2} \quad [2.7]$$

که در آن b یک مقدار ثابت بوده و A هم از طریق بهنجارش تعیین می‌شود:

$$1 = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2} dx = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi}{2b}} \Rightarrow A = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/4} \quad [3.7]$$

باید در نظر داشت که

$$\langle H \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle \quad [4.7]$$

که در آن در این حالت

$$\langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-bx^2} \frac{d^2}{dx^2} (e^{-bx^2}) dx = \frac{\hbar^2 b}{2m} \quad [5.7]$$

و

$$\langle V \rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2} x^2 dx = \frac{m \omega^2}{8b} \quad [6.7]$$

در نتیجه

$$\langle H \rangle = \frac{\hbar^2 b}{2m} + \frac{m\omega^2}{8b} \quad [۶.۷]$$

بنابر رابطه ۱.۷، مقدار این چشمداشتی به ازای هر b از E_{gs} بیشتر می‌شود؛ برای بدست آوردن قاطع‌ترین کران، بیایید $\langle H \rangle$ را کمینه کنیم:

$$\frac{d}{db} \langle H \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m\omega^2}{8b^2} = 0 \Rightarrow b = \frac{m\omega}{2\hbar}$$

با قرار دادن این رابطه در $\langle H \rangle$ درمی‌یابیم که

$$\langle H \rangle_{\min} = \frac{1}{2} \hbar \omega \quad [۷.۷]$$

در اینحالت، درست می‌رسیم به انرژی حالت پایه - زیرا (به وضوح) تصادفاً تابع آزمونی را انتخاب کردم که شکل آن دقیقاً حالت پایه واقعی (رابطه ۵۹.۲) بود. اما کار با تابع گاوسی بسیار ساده است، از اینرو حتی وقتی که تشابه کمی با حالت پایه واقعی داشته باشد، تابع آزمون همه پسندی به شمار می‌رود.

مثال ۲.۷ فرض کنید در جستجوی انرژی حالت پایه پتانسیل تابع دلتا هستیم:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \alpha \delta(x)$$

مجدداً، از پیش جواب دقیق را می‌دانیم (رابطه ۱۲۹.۲): $E_{gs} = -m\alpha^2/2\hbar^2$. مانند قبل، از تابع آزمون گاوسی (رابطه ۲.۷) استفاده خواهیم کرد. پیشتر بهنجارش را مشخص کرده و $\langle T \rangle$ را محاسبه کردیم؛ همه آنچه نیاز داریم عبارت است از

$$\langle V \rangle = -\alpha |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2} \delta(x) dx = -\alpha \sqrt{\frac{2b}{\pi}}$$

اینطور که پیداست

$$\langle H \rangle = \frac{\hbar^2 b}{2m} - \alpha \sqrt{\frac{2b}{\pi}} \quad [۸.۷]$$

همچنین می‌دانیم که این به ازای تمام b ها از E_{gs} بیشتر می‌شود. با کمینه کردن آن،

$$\frac{d}{db}\langle H \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi b}} = 0 \Rightarrow b = \frac{2m^2 \alpha^2}{\pi \hbar^4}$$

لذا

$$\langle H \rangle_{\min} = -\frac{m\alpha^2}{\pi \hbar^2} \quad [9.7]$$

که قدر مسلم چیزی بیشتر از E_{gs} است چرا که $\pi > 2$ است.

گفتم می‌توانید از هر تابع آزمون (بهنجار شده) ψ استفاده کنید که به این مفهوم کار درستی است. با این حال، این روش برای توابع ناپیوسته مستلزم چالاکي ماهرانه‌ای برای نسبت دادن یک معنی معقول به مشتق دوم (که به آن برای محاسبه $\langle T \rangle$ نیاز دارید) است. با این حال، توابع پیوسته‌ای که واجد نقایص و پیچ و تاب خوردگی‌هایی هستند آزمون‌های بحقی به شمار می‌روند: مثال بعدی نشان می‌دهد که چگونه می‌توانیم از پس آنها برآیم.^۲

مثال ۳.۷ کران بالای انرژی حالت پایه چاه مربعی نامتناهی یک بعدی (رابطه ۱۹.۲) را با استفاده از تابع موج آزمون «مثلثی» (شکل ۱.۷) بدست آورید:^۳

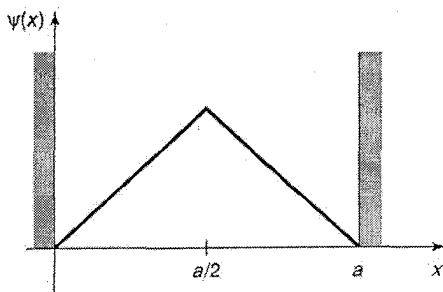
$$\psi(x) = \begin{cases} Ax, & 0 \leq x \leq a/2 \text{ اگر} \\ A(a-x), & a/2 \leq x \leq a \text{ اگر} \\ 0, & \text{بقیه نقاط} \end{cases} \quad [10.7]$$

که در آن A از طریق بهنجارش تعیین می‌شود:

$$1 = |A|^2 \left[\int_0^{a/2} x^2 dx + \int_{a/2}^a (a-x)^2 dx \right] = |A|^2 \frac{a^3}{12} \Rightarrow A = \frac{2}{a} \sqrt{\frac{3}{a}} \quad [11.7]$$

^۲ برای مطالعه مجموعه‌ای از مثال‌های شایان توجه، مقاله W. N. Mei در مجله *J. Math. Educ. Sci. Tech.* **30**, (1999) 513 را ملاحظه کنید.

^۳ تلاش برای استفاده از تابعی (مانند تابع گوسی) که به بیرون از چاه «نشت کند» کار بیپرده‌ای است، زیرا مقدار $\langle V \rangle = \infty$ را بدست خواهید آورد و رابطه ۱.۷ هم حاوی هیچ اطلاعاتی نخواهد بود.



شکل ۱۰.۷: تابع موج آزمون مثلثی برای چاه مربعی نامتناهی (رابطه ۱۰.۷).

در اینحالت

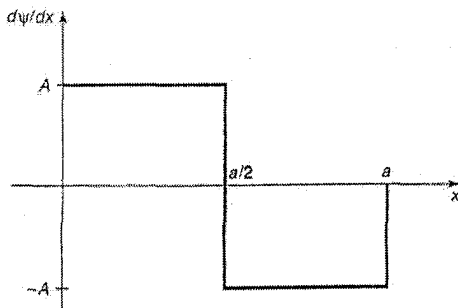
$$\frac{d\psi}{dx} = \begin{cases} A, & \text{اگر } 0 < x < a/2 \\ -A, & \text{اگر } a/2 < x < a \\ 0, & \text{بقیه نقاط} \end{cases}$$

همانطور که در شکل ۲.۷ نشان داده شده است. باید توجه داشت که مشتق یک تابع پله‌ای یک تابع دلتا است (مساله ۲۴.۲ (ب) را ملاحظه کنید):

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = A\delta(x) - 2A\delta(x - a/2) + A\delta(x - a) \quad [12.7]$$

و در نتیجه

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= -\frac{\hbar^2 A}{2m} \int [\delta(x) - 2\delta(x - a/2) + \delta(x - a)] \psi(x) dx \\ &= -\frac{\hbar^2 A}{2m} [\psi(0) - 2\psi(a/2) + \psi(a)] = \frac{\hbar^2 A^2 a}{2m} = \frac{12\hbar^2}{2ma^2} \end{aligned} \quad [13.7]$$



حالت پایه دقیق عبارت است از $E_{gs} = \pi^2 \hbar^2 / 2ma^2$ (رابطه ۲۷.۲)، از اینرو قضیه نتیجه بخش است ($12 > \pi^2$).

اصل وردش بسیار توانمند است و استفاده از آن نیز به طرز شرم‌آوری ساده است. آنچه یک شیمی فیزیکدان برای یافتن انرژی حالت پایه نوعی مولکول پیچیده انجام می‌دهد، نوشتن یک تابع موج آزمون با تعداد بسیار زیادی پارامتر تطبیق‌پذیر، محاسبه $\langle H \rangle$ و اعمال تغییرات جزئی روی پارامترها برای بدست آوردن پایین‌ترین مقدار ممکن است. حتی اگر ψ مشابهت اندکی به تابع موج واقعی داشته باشد، اغلب به طرز معجزه‌آسا مقدار دقیق E_{gs} بدست می‌آید. به طور طبیعی، اگر راهی برای حدس یک ψ واقع بینانه در اختیار داشته باشید، وضعیتان بسیار بهتر خواهد بود. تنها مشکل با این روش این است که هیچگاه با اطمینان نمی‌فهمید چقدر به هدف نزدیک هستید - همه آنچه می‌توانید درباره‌اش مطمئن باشید این است که کران بالایی را بدست آورده‌اید.^۴ به علاوه، این تکنیک فقط برای حالت پایه به کار می‌رود (با این حال، مساله ۴.۷ را ملاحظه کنید).^۵

مساله ۱.۷* از تابع آزمون گاوسی (رابطه ۲.۷) برای بدست آوردن پایین‌ترین کرانی که می‌توانید روی انرژی حالت پایه در (الف) پتانسیل خطی: $V(x) = a|x|$ ؛ (ب) پتانسیل درجه چهار: $V(x) = ax^4$ داشته باشید، استفاده کنید.

مساله ۲.۷** بهترین کران روی E_{gs} برای نوسانگر هماهنگ یک بعدی را با استفاده از تابع آزمونی به این شکل بدست آورید

$$\psi(x) = \frac{A}{x^2 + b^2}$$

^۴ در عمل این را نوعی محدودیت به شمار نمی‌آوریم، چون گاهی راه‌هایی برای تخمین میزان دقت وجود دارد. هلیوم حالت پایه به این روش تا چندین رقم معنی‌دار محاسبه شده است - برای مثال مقاله G. W. Drake et al. در مجله *Phys. Rev. A* 65, 054501 (2002) یا مقاله Vladimir I. Korobov در مجله *Phys. Rev. A* 66, 024501 (2002) را ملاحظه کنید.

^۵ برای یک بسط روشمند از اصل وردش در مورد محاسبه انرژی‌های حالت پایه، برای مثال، کتاب *Introduction to quantum Mechanics, With Applications to Chemistry* اثر Linus Pauling و E. Bright Wilson از انتشارات McGraw-Hill، نیویورک ۱۹۸۵، بخش ۲۶ را ملاحظه کنید.

که در آن A از طریق بهنجارش تعیین شده و b یک پارامتر تطبیق پذیر است.

مساله ۳.۷ بهترین کران روی E_{gs} برای پتانسیل تابع دلتای $V(x) = -\alpha\delta(x)$ با استفاده از تابع آزمون مثلثی (رابطه ۱۰.۷ فقط مرکز آن در مبدا باشد) را بدست آورید. این بار α یک پارامتر تطبیق پذیر است.

مساله ۴.۷

(الف) قضیه تبعی زیر را که از اصل وردش منتج شده اثبات کنید: اگر $\langle\psi|\psi_{gs}\rangle = 0$ باشد، در آن صورت $\langle H \rangle \geq E_{fe}$ که در آن انرژی نخستین حالت برانگیختگی است. بدین ترتیب، چنانچه بتوانیم تابع آزمونی بیابیم که با حالت پایه راست هنجار باشد، می توانیم کران بالایی برای نخستین حالت برانگیختگی بدست آوریم. در حالت کلی، سخت است اطمینان حاصل کنیم که ψ نسبت به ψ_{gs} راست هنجار است، چراکه (فرض بر این است که) دومی را نمی دانیم. با این حال، اگر پتانسیل $V(x)$ تابع زوجی از x باشد، آنگاه حالت پایه هم زوج بوده و در نتیجه تابع آزمون فرد به طور خودکار شرط قضیه تبعی را برآورده می سازد.

(ب) بهترین کران روی نخستین حالت برانگیختگی نوسانگر هماهنگ یک بعدی را با استفاده از تابع آزمون زیر بدست آورید

$$\psi(x) = Axe^{-bx^2}$$

مساله ۵.۷

(الف) از اصل وردش برای اثبات اینکه نظریه اختلال غیر تبهگن مرتبه اول همیشه انرژی حالت پایه را خوش بینانه حدس می زند (یا به هر میزان هرگز آنرا کم اهمیت رها نمی کند) استفاده کنید.

(ب) از منظر بخش (الف)، انتظار دارید تصحیح مرتبه دوم حالت پایه همیشه منفی باشد. با آزمودن رابطه ۱۵.۶ اطمینان حاصل کنید که دقیقاً همینطور است.

۲.۷ حالت پایه هلیوم

اتم هلیوم (رابطه ۳.۷) متشکل است از دو الکترون در مداری بدور یک هسته که محتوی دو پروتون (و همچنین چند نوترون که ربطی به بحث فعلی ما ندارند) می باشد. هامیلتونی این سامانه (با صرف نظر از ساختار ریز و تصحیحات کوچکتر) عبارت است از

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{2}{r_1} + \frac{2}{r_2} - \frac{1}{|r_1 - r_2|}\right) \quad [۱۴.۷]$$

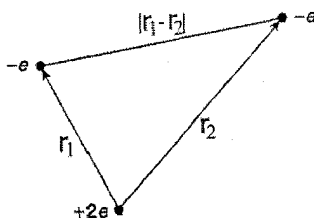
مساله ما عبارت است از محاسبه انرژی حالت پایه، E_{gs} . به بیان فیزیکی، رابطه فوق بیانگر مقدار انرژی مورد نیاز برای کند کردن دو الکترون است. (با داشتن E_{gs} ، پی بردن به «انرژی یونیزاسیون» لازم برای خارج کردن یک الکترون کار آسانی است - مساله ۶.۷ را ملاحظه کنید) انرژی حالت پایه در آزمایشگاه به طور دقیق اندازه گیری شده است:

$$E_{gs} = -78.975 \text{ eV} \quad (\text{تجربی}) \quad [۱۵.۷]$$

این عددی است که می خواهیم آنرا به صورت نظری هم بدست آوریم.

عجیب است که چنین مساله ساده و مهمی هیچ جواب دقیقی ندارد.^۶ مشکل از رانش الکترون - الکترون ناشی می شود،

$$V_{ee} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|r_1 - r_2|} \quad [۱۶.۷]$$



شکل ۳.۷: اتم هلیوم

^۶ مسایل سه جسمی قابل حل دقیقی به همراه ویژگیهای کیفی بسیاری از اتم هلیوم وجود دارند، اما به شرط آنکه از پتانسیل های غیر کولنی استفاده شود (مساله ۱۷.۷ را ملاحظه کنید).

اگر این جمله را یکسره نادیده بگیریم، H به دو هامیلتونی هیدروژنی مستقل شکافته می شود (تنها با یک بار $2e$ به جای e)؛ جواب دقیق درست برابر است با حاصلضرب توابع موج:

$$\psi_0(r_1, r_2) \equiv \psi_{100}(r_1)\psi_{100}(r_2) = \frac{8}{\pi a^3} e^{-2(r_1+r_2)/a} \quad [17.7]$$

و انرژی نیز برابر است با $8E_1 = -109 \text{ eV}$ (رابطه ۳۱.۵).^۷ این مقدار فاصله زیادی تا -79 eV دارد اما خوب فعلا در آغاز راهیم.

برای بدست آوردن تقریب بهتری برای E_{gs} ، ضمن استفاده از ψ_0 به عنوان تابع موج آزمون، اصل وردش را به کار می گیریم. این انتخاب مناسب بخصوصی است زیرا این تابع ویژه تابع اکثر هامیلتونی هاست:

$$H\psi_0 = (8E_1 + V_{ee})\psi_0 \quad [18.7]$$

بدین ترتیب

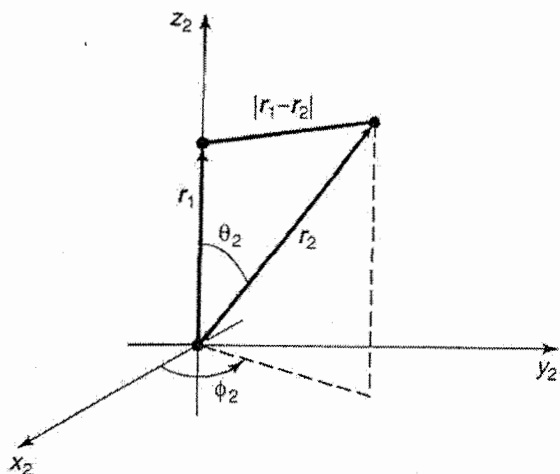
$$\langle H \rangle = 8E_1 + \langle V_{ee} \rangle \quad [19.7]$$

که در آن^۸

$$\langle V_{ee} \rangle = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left(\frac{8}{\pi a^3} \right)^2 \int \frac{e^{-4(r_1+r_2)/a}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \quad [20.7]$$

^۷ اینجا A شعاع بور معمول و $E_n = -13.6/n^2 \text{ eV}$ هم n امین انرژی بور است؛ به یاد بیاورید که برای هسته‌ای با عدد اتمی Z داریم $E_n \rightarrow Z^2 E_n$ و $a \rightarrow a/Z$ (مساله ۱۶.۴). پیکربندی اسپین وابسته به رابطه ۱۷.۷ پادمقارن (تک تایی) خواهد بود.

^۸ اگر مایل باشید می‌توانید رابطه ۲۰.۷ را به عنوان نظریه اختلال مرتبه اول با V_{ee} به عنوان H' تعبیر کنید. با این حال، من این را استفاده ناهبه‌جا از روش مذکور به حساب می‌آورم، زیرا اختلال به سختی معادل است با اندازه پتانسیل مختل نشده. ترجیح می‌دهم آنرا محاسبه‌ای و **snap.sellfile.ir** کران بالایی روی E_{gs} هستیم.


 شکل ۴.۷: انتخاب مختصات برای انتگرال r_2 (رابطه ۲۰.۷).

انتگرال r_2 را اول حساب می‌کنم؛ برای این منظور r_1 ثابت است و همچنین می‌توانیم دستگاه مختصات r_2 را به سمتی متوجه کنیم که محور قطبی در امتداد r_1 قرار بگیرد (شکل ۴.۷ را ببینید). از قانون کسینوس‌ها داریم.

$$|r_1 - r_2| = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta_2} \quad [۲۱.۷]$$

و در نتیجه

$$I_2 \equiv \int \frac{e^{-4r_2/a}}{|r_1 - r_2|} d^3r_2 = \int \frac{e^{-4r_2/a}}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta_2}} r_2^2 \sin \theta_2 dr_2 d\theta_2 d\phi_2 \quad [۲۲.۷]$$

انتگرال روی ϕ_2 پیش پا افتاده و ساده است (2π)؛ انتگرال روی θ_2 برابر است با

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \frac{\sin \theta_2}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta_2}} d\theta_2 &= \left. \frac{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta_2}}{r_1r_2} \right|_0^\pi \\ &= \frac{1}{r_1r_2} \left(\sqrt{r_1^2 + r_2^2 + 2r_1r_2} - \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2} \right) \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{r_1 r_2} [(r_1 + r_2) - |r_1 - r_2|] = \begin{cases} 2/r_1, & r_2 < r_1 \text{ اگر} \\ 2/r_2, & r_2 > r_1 \text{ اگر} \end{cases} \quad [۲۳.۷]$$

بدین ترتیب

$$I_2 = 4\pi \left(\frac{1}{r_1} \int_0^{r_1} e^{-4r_2/a} r_2^2 dr_2 + \int_{r_1}^{\infty} e^{-4r_2/a} r_2 dr_2 \right)$$

$$= \frac{\pi a^3}{8r_1} \left[1 - \left(1 + \frac{2r_1}{a} \right) e^{-4r_1/a} \right] \quad [۲۴.۷]$$

می‌توان چنین نتیجه گرفت که $\langle V_{ee} \rangle$ برابر است با

$$\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left(\frac{8}{\pi a^3} \right) \int \left[1 - \left(1 + \frac{2r_1}{a} \right) e^{-4r_1/a} \right] e^{-4r_1/a} r_1 \sin \theta_1 dr_1 d\theta_1 d\phi_1$$

انتگرال‌های زاویه‌ای ساده‌اند (4π) و از آنجا انتگرال r_1 می‌شود

$$\int_0^{\infty} \left[r e^{-4r/a} - \left(r + \frac{2r^2}{a} \right) e^{-8r/a} \right] dr = \frac{5a^2}{128}$$

به این ترتیب در نهایت می‌رسیم به

$$\langle V_{ee} \rangle = \frac{5}{4a} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) = -\frac{5}{2} E_1 = 34 \text{ eV} \quad [۲۵.۷]$$

و بنابراین

$$\langle H \rangle = -109 \text{ eV} + 34 \text{ eV} = -75 \text{ eV} \quad [۲۶.۷]$$

بد نبود (به یاد بیاورید که مقدار تجربی -79 eV بود). با این حال می‌توانیم این محاسبه را بهتر از این هم انجام دهیم.

باید تابع آزمون بهتری را نسبت به ψ_0 (که دو الکترون را طوری می‌گیرد انگار هیچ برهم‌کنشی با هم ندارند) در نظر بگیریم. به جای کاملاً نادیده گرفتن تاثیر الکترون دیگر، بیایید اینطور بگوییم که به طور میانگین هر الکترون نشان دهد که به طور پاره‌ای هسته‌ای را

می‌پوشاند، طوریکه الکترون دیگری در حقیقت بار موثر هسته (Z) را می‌بیند که کمی کمتر از ۲ است. این برداشت حاکی از آن است که از تابع آزمونی به شکل زیر استفاده کنیم

$$\psi(r_1, r_2) \equiv \frac{Z^3}{\pi a^3} e^{-Z(r_1+r_2)/a} \quad [27.7]$$

Z را پارامتری وردشی گرفته و مقدار آنرا طوری در نظر می‌گیریم که H را کمینه کند. (لطفا توجه داشته باشید که در روش وردشی هرگز با خود هامیلتونی کار نداریم - هامیلتونی هلیوم رابطه ۱۴.۷ است و همان هم می‌ماند. اما بسیار عالی است که به تخمین زدن هامیلتونی به عنوان روشی برای انگیزاندن انتخاب تابع موج آزمون بیندیشیدیم.

این تابع موج ویژه حالتی از هامیلتونی «مختل نشده» (با لحاظ نکردن رانش الکترونی) است، اما با Z ، به جای ۲، در جمله‌های کولنی. با در نظر گرفتن این مساله، H (رابطه ۱۴.۷) را به این صورت بازنویسی می‌کنیم:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2}\right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{(Z-2)}{r_1} + \frac{(Z-2)}{r_2} + \frac{1}{|r_1 - r_2|}\right) \quad [7.28]$$

مقدار چشمداشتی H آشکارا عبارت است از

$$\langle H \rangle = 2Z^2 E_1 + 2(Z-2) \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle + \langle V_{ee} \rangle \quad [29.7]$$

در اینجا $\langle 1/r \rangle$ مقدار چشمداشتی $1/r$ در حالت پایه هیدروژنی (تک ذره‌ای) ψ_{100} است (اما با بار هسته Z)؛ بنابراین رابطه ۵۵.۶،

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{Z}{a} \quad [30.7]$$

مقدار چشمداشتی V_{ee} مانند قبل است (رابطه ۲۵.۷)، به جز آنکه به جای $Z = 2$ حالا یک Z دلخواه می‌خواهیم - پس آنرا در $2/Z$ ضرب می‌کنیم:

$$\langle V_{ee} \rangle = \frac{5Z}{8a} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) = -\frac{5Z}{4} E_1 \quad [31.7]$$

با کنار هم قرار دادن تمام اینها، درمی‌یابیم که

$$\langle H \rangle = [2Z^2 - 4Z(Z-2) - (5/4)Z] E_1 = [-2Z^2 + (27/4)Z] E_1 \quad [32.7]$$

براساس اصل وردش، این کمیت به ازای هر مقدار Z از E_{gs} بیشتر می‌شود. پایین‌ترین کران

بالایی زمانی یافت می‌شود که $\langle H \rangle$ کمینه باشد:

$$\frac{d}{dZ} \langle H \rangle = [-4Z + (27/4)] E_1 = 0$$

که می‌توان از آن چنین نتیجه گرفت که

$$Z = \frac{27}{16} = 1.69 \quad [33.7]$$

به نظر نتیجه معقولی است؛ آنچه بدست آمد حاکی از آن است که الکترون دیگر به طور پاره‌ای هسته را استتار می‌کند و اثر بار موثر آنرا از 2 به 1.69 کاهش می‌دهد. با قرار دادن این مقدار برای

Z ، درمی‌یابیم

$$\langle H \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{3}{2} \right)^6 E_1 = -77.5 \text{ eV} \quad [34.7]$$

حالت پایه هلیوم از این روش با دقت بالایی محاسبه شده که در آن از توابع موج آزمون پیچیده‌ای با پارامترهای هر چه تطبیق‌پذیرتر استفاده گردیده است.^۹ اما هنوز 2% تا جواب صحیح باقی مانده است و صادقانه بگویم که در این مرحله دیگر علاقه چندانی به این مساله ندارم.^{۱۰}

^۹ بررسی‌های کلاسیک در این زمینه را می‌توانید در مقاله E. A. Hylleraas مجله *Z. Phys.* 65, 209 (1930) و مقاله

C. L. Pekeris مجله *Phys. Rev.* 115, 1216 (1959) یابید.

^{۱۰} اولین حالت برانگیختگی هلیوم را می‌توان به همین ترتیب با استفاده از یک تابع موج آزمون متعامد با حالت پایه محاسبه کرد. کتاب *Quantum Mechanics* اثر P. J. E. Peebles از انتشارات Princeton University، نیوجرسی

مساله ۶.۷ با استفاده از $E_{gs} = -79 \text{ eV}$ برای انرژی حالت پایه هلیوم، انرژی یونش (انرژی مورد نیاز برای خارج ساختن یک الکترون) را محاسبه کنید. راهنمایی: ابتدا انرژی حالت پایه یون هلیوم، He^+ را با یک تک الکترون که بدور هسته در حال چرخش است محاسبه کنید؛ سپس دو انرژی را از هم کسر کنید.

مساله ۷.۷* تکنیک‌های این بخش را به یونهای H^- و Li^+ (که هر کدام مانند هلیوم، دو الکترون دارند اما بارهای هسته آنها به ترتیب $Z = 1$ و $Z = 2$ است) اعمال کنید. بار موثر (جزئی پوشش داده) هسته را یافته و بهترین کران بالا روی E_{gs} را برای هر حالت بدست آورید. توضیح: در مورد H^- باید برسید به $-13.6 \text{ eV} < \langle H \rangle$ که ظاهراً نشان از آن دارد که در اساس هیچ حالت مقیدی وجود ندارد، زیرا برای یک تک الکترون از نظر انرژی بهتر آن است که به سرعت دور شده و یک اتم هیدروژن خنثی را بر جای بگذارد. این آنقدرها هم تعجب برانگیز نیست، چراکه الکترون‌ها با قدرت کمتری به هسته جذب می‌شوند تا در هلیوم و همچنین رانش الکترونی می‌خواهد اتم را متلاشی کند. با این وجود، اشتباه از آب درمی‌آید. با یک تابع موج به مراتب پیچیده‌تر (مساله ۱۸.۷) می‌توان نشان داد که $E_{gs} < -13.6 \text{ eV}$ است و در نتیجه باید حتماً یک حالت مقید وجود داشته باشد. با این حال، این حالت به سختی یکجور تقید است و هیچ حالت برانگیخته‌ای هم در کار نیست،^{۱۱} پس H^- هیچ طیف گسسته‌ای ندارد (تمام گذارهای ورودی و خروجی پیوسته هستند). نتیجه آنکه مطالعه آن در آزمایشگاه کار دشواری است، اگرچه این ساختار به وفور در اطراف سطح خورشید یافت می‌شود.^{۱۲}

^{۱۱} مقاله Robert N. Hill در مجله *J. Math. Phys.* **18**, 2316 (1977).

^{۱۲} برای بحث بیشتر کتاب *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms* اثر Hans. A. Bethe و Edwin E. Salpeter (نیویورک، انتشارات Plenum، ۱۹۷۷) بخش ۳۴ را ملاحظه کنید.

۳.۷ یون مولکول هیدروژن

یک کاربرد کلاسیکی دیگر اصل وردش در مورد یون مولکول هیدروژن، H_2^+ ، است که متشکل از یک تک الکترون در میدان کولنی دو پروتونی (شکل ۵.۷) می‌باشد. فرض ما فعلاً بر این است که پروتون‌ها در جای خود ثابت بوده و به اندازه R از یکدیگر فاصله دارند، اگرچه یکی از جالب‌ترین پیامدهای محاسبه یافتن مقدار واقعی همین فاصله است. هامیلتونی عبارت است از

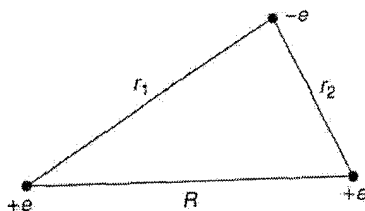
$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \quad [۳۵.۷]$$

که در آن r_1 و r_2 فواصل الکترون‌ها از پروتون‌های مربوطه هستند. مثل همیشه، استراتژی از این قرار است که تابع موج آزمون معقولی را حدس بزنیم و اصل وردش را برای یافتن یک کران روی انرژی حالت پایه به کار بگیریم. (در حقیقت، علاقه اصلی‌مان پی بردن به این نکته است که آیا این سامانه اصلاً کرانی دارد یا خیر - یعنی، آیا انرژی‌اش کمتر از انرژی یک اتم هیدروژن به اضافه یک الکترون است. اگر تابع موج آزمون ما نشان از آن داشته باشد که یک حالت مقید وجود دارد، یک تابع آزمون بهتر تنها می‌تواند کران را قاطع‌تر کند).

برای درست کردن این تابع آزمون، تصور کنید که یون مذکور با گرفتن اتم هیدروژن در حالت پایه‌اش (رابطه ۸۰.۴) درست می‌شود،

$$\psi_0(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a} \quad [۳۶.۷]$$

و سپس یک پروتون را از «بینهایت» آورده و آنرا در فاصله R متمرکز می‌کنیم. اگر R به اندازه کافی از شعاع بور، a ، بزرگتر باشد تابع موج الکترون احتمالاً تغییر زیادی نمی‌کند.



شکل ۵.۷: یون مولکول هیدروژن، H_2^+

با این حال می‌خواهیم دو پروتون را در یک وضعیت همانند بگیریم طوری‌که الکترون احتمال یکسانی برای وابسته بودن به هر یک از آنها داشته باشد. این امر بیانگر این مطلب است که تابع آزمونی به شکل زیر را در نظر می‌گیریم.

$$\psi = A[\psi_0(r_1) + \psi_0(r_2)] \quad [۳۷.۷]$$

(شیمیدانان کوانتومی این را تکنیک LCAO می‌نامند برای آن که تابع موج مولکولی را ترکیبی خطی از اربیتال‌های اتمی می‌گیریم).

اولین کارمان این است که تابع آزمون فوق را بهنجار کنیم:

$$\begin{aligned} 1 = \int |\psi|^2 d^3\mathbf{r} &= |A|^2 \left[\int |\psi_0(r_1)|^2 d^3\mathbf{r} \right. \\ &\quad \left. + \int |\psi_0(r_2)|^2 d^3\mathbf{r} + 2 \int \psi_0(r_1)\psi_0(r_2) d^3\mathbf{r} \right] \end{aligned} \quad [۳۸.۷]$$

دو انتگرال نخست برابرند با 1 زیرا ψ_0 خودش بهنجار شده است؛ انتگرال سوم مستلزم دقت بیشتری است. بگذارید

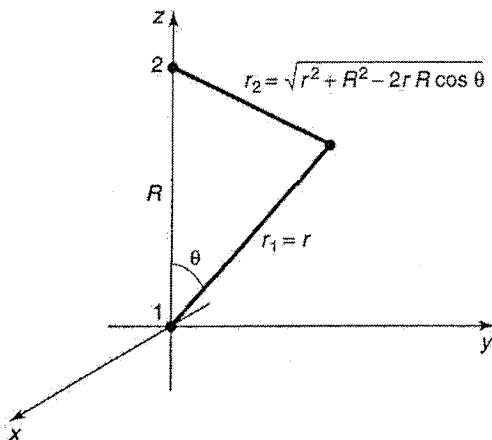
$$I \equiv \langle \psi_0(r_1) | \psi_0(r_2) \rangle = \frac{1}{\pi a^3} \int e^{-(r_1+r_2)/a} d^3\mathbf{r} \quad [۳۹.۷]$$

مختصات را طوری انتخاب می‌کنیم که پروتون 1 در مبدا و پروتون 2 در امتداد محور z روی نقطه R (شکل ۶.۷) قرار داشته باشند. در اینصورت داریم

$$r_1 = r \quad \text{و} \quad r_2 = \sqrt{r^2 + R^2 - 2rR \cos \theta} \quad [۴۰.۷]$$

و از آنجا

$$I = \frac{1}{\pi a^3} \int e^{-r/a} e^{-\sqrt{r^2 + R^2 - 2rR \cos \theta}/a} r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\phi \quad [۴۱.۷]$$



شکل ۶.۷: مختصات در نظر گرفته شده برای محاسبه I (رابطه ۳۹.۷)

انتگرال روی ϕ ساده است (2π). برای انتگرال گیری روی θ ، بگذارید

$$y \equiv \sqrt{r^2 + R^2 - 2rR \cos \theta}, \quad \text{به طوریکه} \quad d(y^2) = 2y dy = 2rR \sin \theta d\theta$$

بدین ترتیب

$$\begin{aligned} \int_0^\pi e^{-\sqrt{r^2 + R^2 - 2rR \cos \theta}/a} \sin \theta d\theta &= \frac{1}{rR} \int_{|r-R|}^{r+R} e^{-y/a} y dy \\ &= -\frac{a}{rR} [e^{-(r+R)/a} (r+R+a) - e^{-|r-R|/a} (|r-R|+a)] \end{aligned}$$

حالا انتگرال روی r سر راست می شود

$$\begin{aligned} I &= \frac{2}{a^2 R} \left[-e^{-R/a} \int_0^\infty (r+R+a) e^{-2r/a} r dr + e^{-R/a} \int_0^R (R-r-a) r dr \right. \\ &\quad \left. + e^{-R/a} \int_R^\infty (r-R+a) e^{-2r/a} r dr \right] \end{aligned}$$

با شماریابی (حل عددی) انتگرال، (پس از کمی ساده سازی جبری) درمی یابیم که

$$I = e^{-R/a} \left[1 + \left(\frac{R}{a}\right) + \frac{1}{3} \left(\frac{R}{a}\right)^2 \right] \quad [۴۲.۷]$$

I را انتگرال همپوش می نامند؛ این انتگرال مقداری را بدست می دهد که به آن میزان $\psi_0(r_1)$ و

$\psi_0(r_2)$ همپوشانی می کنند (دقت کنید مقدار I به ازای $R \rightarrow 0$ به 1 و به ازای $R \rightarrow \infty$ به صفر

میل می کند). سازه بهنجارش (رابطه ۴۲.۷) است از snap.sellfile.ir

$$|A|^2 = \frac{1}{2(1+I)} \quad [۴۳.۷]$$

پس از این باید مقدار چشمداشتی H در حالت آزمون ψ را محاسبه کنیم. توجه کنید که

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1}\right)\psi_0(r_1) = E_1\psi_0(r_1)$$

(که در آن $E_1 = -13.6 \text{ eV}$ انرژی حالت پایه هیدروژن اتمی است) - همین وضع برای r_2 به جای

r_1 هم وجود دارد - داریم

$$\begin{aligned} H\psi &= A \left[\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \right] [\psi_0(r_1) + \psi_0(r_2)] \\ &= E_1\psi - A \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left[\frac{1}{r_1}\psi_0(r_1) + \frac{1}{r_2}\psi_0(r_2) \right] \end{aligned}$$

منطقی است که

$$\langle H \rangle = E_1 - 2|A|^2 \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left[\left\langle \psi_0(r_1) \left| \frac{1}{r_2} \right| \psi_0(r_1) \right\rangle + \left\langle \psi_0(r_1) \left| \frac{1}{r_1} \right| \psi_0(r_2) \right\rangle \right] \quad [۴۴.۷]$$

محاسبه دو کمیت باقیمانده را بر عهده خودتان می‌گذارم که اولی را به اصطلاح انتگرال مستقیم

می‌نامیم

$$D \equiv a \left\langle \psi_0(r_1) \left| \frac{1}{r_2} \right| \psi_0(r_1) \right\rangle \quad [۴۵.۷]$$

و دومی که انتگرال تبادلی نام دارد

$$X \equiv a \left\langle \psi_0(r_1) \left| \frac{1}{r_1} \right| \psi_0(r_2) \right\rangle \quad [۴۶.۷]$$

جواب‌ها (مساله ۸.۷ را ملاحظه کنید) عبارتند از

$$D = \frac{a}{R} - \left(1 + \frac{a}{R}\right) e^{-2R/a} \quad [۴۷.۷]$$

و

$$X = \left(1 + \frac{R}{a}\right) e^{-R/a} \quad [۴۸.۷]$$

با کنار هم قرار دادن تمام این یافته‌ها و به یادآوری این نکته (از روی روابط ۷۰.۴ و ۷۲.۴) که

$$E_1 = -(e^2/4\pi\epsilon_0)(1/2a) \quad \text{به این نتیجه می‌رسیم که}$$

$$\langle H \rangle = \left[1 + 2 \frac{(D+X)}{(1+I)} \right] E_1 \quad [49.7]$$

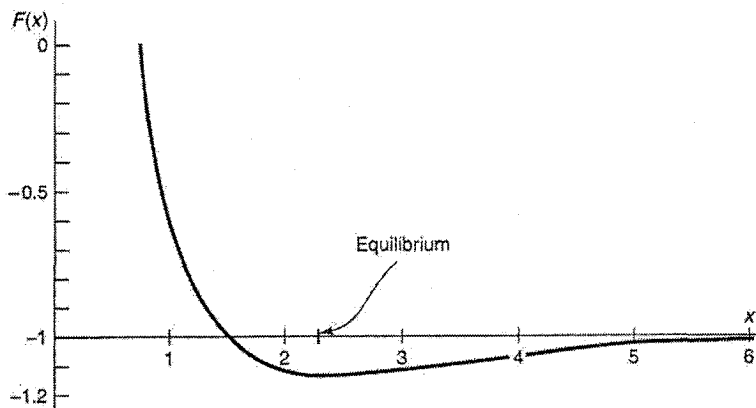
براساس اصل وردش، انرژی حالت پایه کمتر از $\langle H \rangle$ است. طبیعتاً، این فقط انرژی الکترون است - انرژی پتانسیلی وابسته به رانش پروتون - پروتون هم وجود دارد:

$$V_{pp} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} = -\frac{2a}{R} E_1 \quad [50.7]$$

بنابراین انرژی کل سامانه برحسب واحدهای $-E_1$ که به صورت تابعی از $x \equiv R/a$ بیان می‌شود، کوچکتر است از

$$F(x) = -1 + \frac{2}{x} \left\{ \frac{(1 - (2/3)x^2)e^{-x} + (1+x)e^{-2x}}{1 + (1+x + (1/3)x^2)e^{-x}} \right\} \quad [51.7]$$

این تابع در شکل ۷.۷ رسم شده است. اینطور که پیداست کرانی بوجود می‌آید، زیرا محدوده‌ای وجود دارد که در آن نمودار به زیر -1 می‌رود و حاکی از آن است که انرژی کمتر از انرژی یک اتم خنثی به اضافه یک پروتون آزاد است (یعنی، -13.6 eV). این یک پیوند کووالانس است که یک الکترون را به طور مساوی میان دو پروتون به اشتراک می‌گذارد. فاصله تفکیک تعادلی پروتونی در حدود 2.4 \AA شعاع بور یا 1.24 \AA است (مقدار تجربی برابر است با 1.06 \AA). انرژی بستگی محاسبه شده 1.08 \AA است، در صورتیکه مقدار تجربی 2.8 \AA است (اصل وردش مثل همیشه انرژی حالت پایه - و در نتیجه توان پیوند - را زیادی تخمین می‌زند، اما مهم نیست: نکته اساسی این بود که ببینیم آیا اصلاً پیوندی رخ می‌دهد یا نه؛ یک تابع وردشی بهتر تنها می‌تواند چاه پتانسیل عمیقتری ایجاد کند.



شکل ۷.۷: نمودار تابع $F(x)$ ، رابطه ۵۱.۷، که نشان دهنده یک حالت مقید است (با واحد شعاع بور، x فاصله میان پروتون‌ها است)

مسئله ۸.۷* مقدار عددی D و X (روابط ۴۵.۷ و ۴۶.۷) را بدست آورید. جوابهایتان را در مقایسه با رابطه‌های ۴۷.۷ و ۴۸.۷ بررسی کنید.

مسئله ۹.۷*** فرض کنید از علامت منفی در تابع موج آزمون‌مان (رابطه ۳۷.۷) استفاده کرده‌ایم:

$$\psi = A[\psi_0(r_1) - \psi_0(r_2)] \quad [۵۲.۷]$$

بدون حل هیچ انتگرال تازه‌ای، تابع $F(x)$ (مانسته رابطه ۵۱.۷) را برای این حالت بدست آورده و همچنین نمودار آن را نیز رسم کنید. نشان دهید هیچ مدرکی دال بر وجود پیوند در دست نیست.^{۱۳} (از آنجا که اصل وردش تنها کران بالا را بدست می‌دهد، این امر اثباتی بر این نیست که برای چنین حالتی نمی‌توان پیوند داشت، بلکه بی‌شک امیدوار کننده به نظر نمی‌رسد). توضیح: در حقیقت، هر تابع به شکل

$$\psi = A[\psi_0(r_1) + e^{i\phi}\psi_0(r_2)] \quad [۵۳.۷]$$

^{۱۳} بستگی زمانی رخ می‌دهد که الکترون «ترجیح دهد» بین پروتون‌ها بوده و آنها را به سمت داخل جذب کند. اما ترکیب خطی فرد (رابطه ۵۲.۷) در مرکز یک گره دارد، برای همین تعجبی ندارد که این پیکربندی پروتون‌ها را از هم دور می‌کند.

ویژگی توصیف شده‌ای دارد که براساس آن الکترون با احتمال برابر به هر یک از پروتون‌ها مربوط می‌شود. با این حال، از آنجا که هامیلتونی (رابطه ۳۵.۷) تحت جابجایی $P: r_1 \rightarrow r_2$ ناورد می‌ماند، ویژه توابع آن را می‌توان طوری انتخاب کرد که به طور همزمان ویژه تابع‌های P هم باشند. علامت مثبت (رابطه ۳۷.۷) با ویژه مقدار $+1$ و علامت منفی (رابطه ۵۲.۷) با ویژه مقدار -1 همراه است؛ در نظر گرفتن وائمودین یک حالت کلی‌تر (رابطه ۵۳.۷) هم چیزی بدست نمی‌دهد، گرچه من با اینکه خودتان آنرا بررسی کنید مشکلی ندارم، البته اگر مایل باشید.

مساله ۱۰.۷*** مشتق دوم $F(x)$ ، در نقطه تعادل، را می‌توان برای تخمین فرکانس طبیعی نوسان (ω) دو پروتون در یون مولکول هیدروژن مورد استفاده قرار داد (بخش ۳.۲ را ببینید). اگر انرژی حالت پایه ($\hbar\omega/2$) این نوسانگر از انرژی بستگی سامانه بیشتر شود، از هم فرو می‌پاشد. نشان دهید در واقع انرژی نوسانگر به آن اندازه کوچکتر هست که چنین چیزی رخ ندهد و برآورد کنید که چند سطح نوسانی مقید وجود دارد. توضیح: قرار نیست مکان کمینه را به صورت تحلیلی بدست آورید - که هنوز پایین‌تر از مشتق دوم در آن نقطه است. این کار را به صورت عددی، یعنی با استفاده از کامپیوتر انجام دهید.

مسائل دیگری برای فصل ۷

مساله ۱۱.۷

(الف) از تابع موج آزمونی به شکل

$$\psi(x) = \begin{cases} A \cos(\pi x/a), & -a/2 < x < a/2 \\ 0 & \text{بقیه نقاط} \end{cases}$$

برای بدست آوردن انرژی حالت پایه نوسانگر هماهنگ یک بعدی استفاده کنید. «بهترین» مقدار برای a چیست؟ مقدار $\langle H \rangle_{\min}$ را با مقدار دقیق انرژی مقایسه کنید. توجه: این تابع آزمون یک پیچ خوردگی (ناپیوستگی مشتق) در نقطه $\pm a/2$ در خود دارد. آیا همانطور که من در مثال

(ب) از تابع $\psi(x) = B \sin(\pi x/a)$ در بازه $(-a, a)$ برای بدست آوردن کرانی روی اولین حالت برانگیخته استفاده کنید. نتیجه را با جواب دقیق مقایسه کنید.

مساله ۱۲.۷**

(الف) مساله ۲.۷ را با استفاده از تابع موج زیر تعمیم دهید^{۱۴}

$$\psi(x) = \frac{A}{(x^2 + b^2)^n}$$

که n در آن عدد دلخواهی است. پاسخ جزئی: بهترین مقدار برای b به این ترتیب بدست می‌آید

$$b^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \left[\frac{n(4n-1)(4n-3)}{2(2n+1)} \right]^{1/2}$$

(ب) کمترین کران بالا روی اولین حالت برانگیخته نوسانگر هماهنگ را با استفاده از تابع آزمونی به شکل زیر بدست آورید.

$$\psi(x) = \frac{Bx}{(x^2 + b^2)^n}$$

پاسخ جزئی: بهترین مقدار برای b به این ترتیب بدست می‌آید

$$b^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \left[\frac{n(4n-5)(4n-3)}{2(2n+1)} \right]^{1/2}$$

(پ) دقت کنید که کران‌ها به ازای $n \rightarrow \infty$ به سمت مقدار دقیق انرژی‌ها میل می‌کنند. چرا؟ راهنمایی: تابع موج آزمون را به ازای $n=2$ ، $n=3$ و $n=4$ رسم کرده و آنها را با توابع موج واقعی (روابط ۵۹.۲ و ۶۲.۲) مقایسه کنید. برای آنکه اینکار را به صورت تحلیلی انجام دهید، از تساوی زیر شروع کنید

$$e^z = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{z}{n} \right)^n$$

مساله ۱۳.۷ پایین ترین کران حالت پایه هیدروژن را بیابید که می توانید آنرا با استفاده از یک تابع موج آزمون گاوسی به صورت زیر بدست آورید

$$\psi(r) = Ae^{-br^2}$$

که در آن A بوسیله بهنجارش تعیین شده و b هم یک پارامتر تطبیق پذیر است. پاسخ: -11.5 eV

مساله ۱۴.۷ *** اگر فوتون جرم غیر صفر می داشت ($m_\gamma \neq 0$)، پتانسیل کولنی را می شد با پتانسیل یوکاوا جابه جا کرد

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{-\mu r}}{r} \quad [54.7]$$

که در آن $\mu = m_\gamma c / \hbar$ است. با یک تابع موج آزمون به انتخاب خودتان، انرژی بستگی اتم «هیدروژن» را با این پتانسیل برآورد کنید. فرض کنید $1 \ll \mu a$ باشد و جوابتان را تا مرتبه $(\mu a)^2$ تصحیح کنید.

مساله ۱۵.۷ فرض کنید سامانه ای کوانتومی در اختیار دارید که هامیلتونی آن H_0 تنها دو ویژه حالت را جایز می شمارد، ψ_a (با انرژی E_a) و ψ_b (با انرژی E_b). این دو راست هنجار، بهنجار شده و غیر تبهگن هستند (فرض کنید E_a کوچکتر از آن دو انرژی دیگر است). حالا اختلال H' را اعمال می کنیم که عناصر ماتریسی آن از این قرارند:

$$\langle \psi_a | H' | \psi_a \rangle = \langle \psi_b | H' | \psi_b \rangle = 0; \quad \langle \psi_a | H' | \psi_b \rangle = \langle \psi_b | H' | \psi_a \rangle = h \quad [55.7]$$

(الف) ویژه مقادیر دقیق هامیلتونی مختل شده را بیابید.

(ب) انرژی های سامانه مختل شده را با استفاده از نظریه اختلال مرتبه دوم برآورد کنید.

(پ) انرژی حالت پایه سامانه مختل شده را با استفاده از اصل وردش با تابع آزمونی به شکل زیر برآورد کنید

$$\psi = (\cos \phi) \psi_a + (\sin \phi) \psi_b \quad [56.7]$$

که در آن ϕ یک پارامتر تطبیق پذیر است. توجه: نوشتن ترکیب خطی به این شکل تضمین می‌کند که ψ بهنجار شود).

(ت) جواب‌های (الف) و (ب) و (پ) را با هم مقایسه کنید. چرا اصل وردش در این مورد اینقدر دقیق است؟

مساله ۱۶.۷ به عنوان یک مثال صریح از روشی که در مساله ۱۵.۷ ارائه شد، الکترونی در حال سکون در میدان مغناطیسی یکنواخت $\mathbf{B} = B_z \hat{k}$ را در نظر بگیرید که هامیلتونی آن عبارت است از (رابطه ۱۵۸.۴):

$$H_0 = \frac{eB_z}{m} S_z \quad [57.7]$$

(الف) عناصر ماتریس H' را بدست آورده و اطمینان حاصل کنید که آنها دارای ساختار رابطه ۵۵.۷ هستند. h چیست؟

(ب) با استفاده از نتیجه بدست آمده در مساله ۱۵.۷ (ب)، انرژی حالت پایه جدید را در نظریه اختلال مرتبه دوم بدست آورید.

(پ) با استفاده از نتیجه بدست آمده در مساله ۱۵.۷ (پ)، کران اصل وردش روی انرژی حالت پایه را بدست آورید.

مساله ۱۷.۷*** اگرچه نمی‌توان خود معادله شرودینگر برای هلیوم را به طور دقیق حل کرد، اما سامانه‌های «هیدروژن گونه‌ای» وجود دارند که جواب‌های دقیقی را جایز می‌شمارند. یک مثال ساده^{۱۵} مدل «هلیوم نوار لاستیکی» است که در آن نیروهای کولنی جایشان را به نیروهای قانون هوک می‌دهند:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(r_1^2 + r_2^2) - \frac{\lambda}{4}m\omega^2|r_1 - r_2|^2 \quad [59.7]$$

^{۱۵} برای مدلی پیچیده‌تر، مقاله R. Crandall ، R. Whitenell و R. Bettge در مجله *Am. J. Phys.* **52**, 438 (1984) را ملاحظه کنید.

(الف) نشان دهید تغییر متغیرها از r_1 و r_2 به

$$u \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(r_1 + r_2), v \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(r_1 - r_2) \quad [۶۰.۷]$$

هامیلتونی را به هامیلتونی یک نوسانگر هماهنگ سه بعدی تبدیل می‌کند:

$$H = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_u^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 u^2 \right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_v^2 + \frac{1}{2} (1 - \lambda) m \omega^2 v^2 \right] \quad [۶۱.۷]$$

(ب) انرژی حالت پایه دقیق این سامانه چقدر است؟

(پ) اگر جواب دقیق را نمی‌دانستیم، ممکن بود بخواهیم روش بخش ۲.۷ را به هامیلتونی در شکل اصلی‌اش (رابطه ۵۹.۷) اعمال کنیم. این کار را انجام دهید (اما خودتان را برای استتار به زحمت نیندازید). نتیجه‌ای که بدست می‌آورید در مقایسه با جواب دقیق چگونه است؟ پاسخ: $\langle H \rangle = 3\hbar\omega(1 - \lambda/4)$

مساله ۱۸.۷*** در مساله ۷.۷ دریافتیم که تابع موج آزمون با استتار (رابطه ۲۷.۷) که برای هلیوم بسیار مناسب است، برای تایید وجود یک حالت مقید به ازای یون هیدروژن منفی بسنده نیست. چاندراشکار^{۱۶} از تابع موج آزمونی به شکل زیر استفاده کرد

$$\psi(r_1, r_2) = A[\psi_1(r_1)\psi_2(r_2) + \psi_2(r_1)\psi_1(r_2)] \quad [۶۲.۷]$$

که در آن

$$\psi_1(r) \equiv \sqrt{\frac{Z_1^3}{\pi a^3}} e^{-Z_1 r/a} \quad \text{و} \quad \psi_2(r) \equiv \sqrt{\frac{Z_2^3}{\pi a^3}} e^{-Z_2 r/a} \quad [۶۳.۷]$$

در نتیجه، وی دو عامل پوششی متفاوت را مجاز دانسته که بیانگر این امر است که یک الکترون به طور نسبی به هسته نزدیکتر و الکترون دیگر دورتر است. (چون الکترون‌ها ذرات یکسانی هستند، تابع موج فضایی باید نسبت به معاوضه متقارن باشد. حالت اسپین - که در این

محاسبه تأثیری ندارد - از قرار معلوم پاد متقارن است.) نشان دهید با انتخاب زیرکانه پارامترهای تطبیق‌پذیر Z_1 و Z_2 می‌توانید $\langle H \rangle$ را کمتر از -13.6 eV بدست آورید.

پاسخ:

$$\langle H \rangle = \frac{E_1}{x^6 + y^6} \left(-x^8 + 2x^7 + \frac{1}{2}x^6y^2 - \frac{1}{2}x^5y^2 - \frac{1}{8}x^3y^4 + \frac{11}{8}xy^6 - \frac{1}{2}y^8 \right)$$

که در آن $x \equiv Z_1 + Z_2$ و $y \equiv Z_1 - Z_2$ است. چاندراشکار از $Z_1 = 1.039$ (از آنجا که این مقدار از 1 بزرگتر است، تعبیر انگیزه‌بخش به عنوان بار هسته موثر را نمی‌توان حفظ کرد، اما اهمیتی ندارد - هنوز هم تابع موج آزمون قابل قبولی است.) و $Z_2 = 0.283$ استفاده کرد.

مساله ۱۹.۷ مساله اساسی در یکارگیری همجوشی هسته‌ای عبارت است از بدست آوردن ذراتی (به فرض، دو دوترون) که آنقدر به هم نزدیک باشند تا نیروی جاذبه (با برد کوتاه) هسته‌ای بر رانش کولنی غلبه کند. روش «نیروی بی‌تمایز» از این قرار است که ذرات را تا دماهای غیرواقعی گرم کرده و می‌گذاریم برخوردی کاتوره‌ای آنها را کنار یکدیگر جمع کند. یک ایده عجیب و غریب‌تر به فروکافت موئونی موسوم است که در آن یک «یون مولکول هیدروژن» را درست می‌کنیم، تنها با این تفاوت که به جای پروتون‌ها از دوترون‌ها و به جای الکترون از موئون استفاده می‌کنیم. فاصله تفکیک تعادلی میان دوترون‌ها در چنین ساختاری را پیش‌بینی کرده و توضیح دهید چرا موئون‌ها برای این منظور بر الکترون‌ها مقدم‌ترند.^{۱۷}

مساله ۲۰.۷*** نقاط کوانتومی. ذره‌ای مقید به حرکت در دو بعد در منطقه‌ای صلیبی شکل به صورت شکل ۸.۷ را در نظر بگیرید. بازوهای صلیب تا بینهایت ادامه دارند. پتانسیل درون

^{۱۷} مقاله کلاسیکی درباره همجوشی فروکافت شده با موئون اثر J. D. Jackson در مجله *Phys. Rev.* **106**, 330 (1957) است؛ برای یک مرور عمومی که به تازگی انجام شده، مقاله J. Rafelski و S. Jones در مجله *Scientific American* شماره نوامبر ۱۹۸۷ صفحه ۸۴ را ببینید.

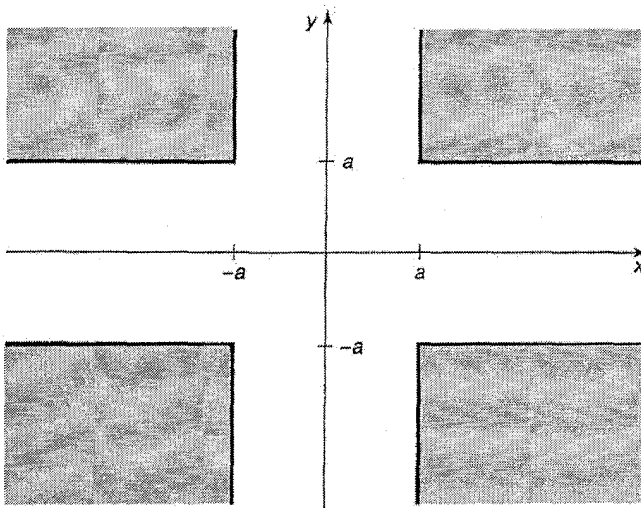
صلیب صفر و در مناطق هاشور خورده خارج بینهایت است. در کمال تعجب، این پیکربندی حالت مقید با انرژی مثبت را مجاز می‌شمارد.^{۱۸}

(الف) نشان دهید کمترین انرژی که می‌تواند تا بینهایت منتشر شود برابر است با

$$E_{\text{آستانه}} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$$

هر جوابی با انرژی کمتر از آن باید یک حالت مقید باشد. راهنمایی: از یک بازو خارج شده (یعنی، $x \gg a$) و معادله شرودینگر را از راه تفکیک متغیرها حل کنید؛ اگر تابع موج تا بینهایت منتشر شود، بستگی به x باید شکل $\exp(ik_x x)$ با در نظر گرفتن $k_x > 0$ را به خود بگیرد.

(ب) حالا از اصل وردش استفاده کرده و نشان دهید حالت پایه دارای انرژی کمتر از $E_{\text{آستانه}}$ است. از تابع موج آزمون زیر (که کریشنا راجاگوپال آنرا پیشنهاد کرده) استفاده کنید:



شکل ۸.۷: منطقه صلیبی شکل مساله ۲۰.۷

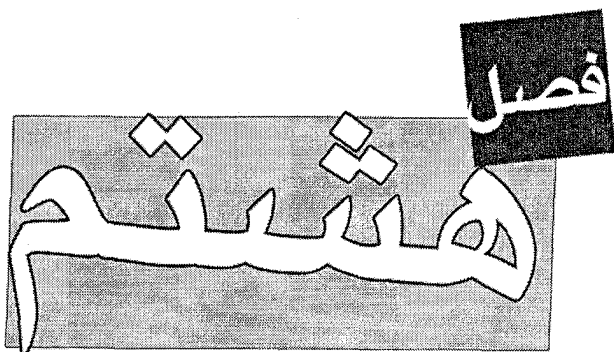
^{۱۸} این مدل از مقاله R. L. Schult et al در مجله *Phys. Rev. B* 39, 5476 (1989) گرفته شده است. در حضور اثر تونل‌زنی کوانتومی یک حالت مقید کلاسیکی غیر مقید می‌شود؛ این برعکس است: یک حالت غیر مقید کلاسیکی به

$$\psi(x) = A \begin{cases} (1 - |xy|/a^2)e^{-\alpha}, & |x| \leq a \text{ و } |y| \leq a \\ (1 - |x|/a)e^{-\alpha|y|/a}, & |x| \leq a \text{ و } |y| > a \\ (1 - |y|/a^2)e^{-\alpha|x|/a}, & |x| > a \text{ و } |y| \leq a \\ 0 & \text{بقیه نقاط,} \end{cases}$$

این تابع را بهنجار کنید تا از آن A بدست آید و سپس مقدار چشمداشتی H را محاسبه کنید.
پاسخ:

$$\langle H \rangle = \frac{3\hbar^2}{ma^2} \left(\frac{\alpha^2 + 2\alpha + 3}{6 + 11\alpha} \right)$$

حالا نتیجه را نسبت به α کمینه کرده و نشان دهید حاصل کمتر از $E_{\text{آستانه}}$ است. راهنمایی: از تقارن مساله استفاده کنید - فقط باید روی $1/8$ منطقه باز انتگرال گیری کنید، چون بقیه $7/8$ انتگرال با آن یکی هستند. در هر حال دقت کنید علی رغم آنکه تابع موج آزمون پیوسته است، مشتق آن پیوسته نیست - یکسری خطوط تاکی در نقاط $x = 0$ ، $x = \pm a$ ، $y = 0$ وجود دارد که در آن لازم است از تکنیک به کار رفته در مساله ۳.۷ استفاده کنید.



تقریب WKB

روش (Wentzel, Kramers, WKB (Brillouin^۱ تکنیکی است برای بدست آوردن جوابهای تقریبی معادله شرودینگر در یک بعد (ایده اصلی مشابهی را می توان برای بسیاری از دیگر معادلات دیفرانسیل و همچنین بخش شعاعی معادله شرودینگر در سه بعد به کار گرفت). این تکنیک به طور جزئی برای محاسبه انرژی های حالت مقید و آهنگ های تونل زنی از میان سدهای پتانسیل سودمند است.

ایده اساسی از این قرار است: ذره ای با انرژی E را تصور کنید که در حال حرکت از میان محدوده ای است که در آنجا پتانسیل $V(x)$ مقدار ثابتی است. اگر $E > V$ باشد، تابع موج به این شکل است.

$$\psi(x) = Ae^{\pm ikx}, \text{ با } k \equiv \sqrt{2m(E - V)}/\hbar$$

علامت مثبت دلالت بر این دارد که ذره در حال حرکت به سمت راست و علامت منفی به این معنی است که ذره دارد به طرف چپ می رود (البته جواب عمومی ترکیبی خطی از این هر دو است). تابع موج نوسانی بوده، طول موج ثابتی به اندازه $\lambda = 2\pi/k$ و دامنه ای به اندازه A دارد. حالا فرض کنید $V(x)$ ثابت نباشد بلکه نسبت به λ کمی تغییر کند، به طوریکه در محدوده ای شامل تعداد زیادی طول موج پتانسیل در اساس ثابت باشد. پس این فرض که ψ به طور تجربی سینوسی باقی می ماند پذیرفتنی است، سوای از آنکه طول موج و دامنه نسبت به x کمی تغییر می کنند. این نقطه شروع و انگیزه اصلی در تقریب WKB است. در عمل، تقریب مذکور دو سطح متفاوت بستگی به x را تداعی می کند: نوسانهای سریع که با تغییر در دامنه و طول موج مدوله شده اند.

با در نظر گرفتن همان حالت فرض شده در مساله، اگر $E < V$ باشد (و V را ثابت بگیریم)، در آنصورت ψ نمایا است:

$$\psi(x) = Ae^{\pm \kappa x}, \text{ با } \kappa \equiv \sqrt{2m(V - E)}/\hbar$$

^۱ در هلند آنرا KWB، در فرانسه آنرا BWK و در انگلستان آنرا JWKB (برای Jeffrey) می نامند.

به علاوه اگر $V(x)$ ثابت نباشد بلکه به آرامی در مقایسه با $1/\kappa$ تغییر کند، جواب به طور تجربی نمایی می ماند، سوای از آنکه A و K توابع متغیر کندی از x هستند. باید توجه داشت که کل این برنامه در یک جا با شکست مواجه می شود و آنجا مجاورت بلافاصل نقطه عطف کلاسیکی است، جاییکه در آن $V \approx E$. چون در این نقطه λ (یا $1/\kappa$) به سمت بینهایت می رود، به سختی می توان گفت که $V(x)$ در مقایسه به «آرامی» تغییر می کند. همانطور که در ادامه خواهیم دید، پرداختن مناسب به نقطه عطف دشوارترین جنبه از تقریب WKB است، گرچه بیان جواب های نهایی ساده و به کار بستن آنها نیز آسان است.

۱.۸ محدوده «کلاسیکی»

معادله شرودینگر،

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi$$

را می توان به شکل زیر نوشت:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi \quad [۱.۸]$$

که در آن

$$p(x) \equiv \sqrt{2m[E - V(x)]} \quad [۲.۸]$$

فرمول کلاسیک تکانه ذره ای با انرژی کل E و انرژی پتانسیل $V(x)$ است. فعلا، فرض می کنم $E > V(x)$ است به طوریکه $p(x)$ حقیقی است؛ این را محدوده «کلاسیکی» می نامیم که دلیل آن نیز واضح است - ذره به طور کلاسیکی مقید به بودن در این بازه از x است (شکل ۱.۸). به طور کلی، ψ یکجور تابع مختلط است؛ می توانیم آنرا برحسب دامنه، $A(x)$ و فازش، $\phi(x)$ ، بیان کنیم - که هر دو آنها حقیقی اند:

$$\psi(x) = A(x)e^{i\phi(x)} \quad [۳.۸]$$

$$\frac{d\psi}{dx} = (A' + iA\phi')e^{i\phi}$$

و

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = [A'' + 2iA'\phi' + iA\phi'' - A(\phi')^2]e^{i\phi} \quad [۴.۸]$$

با قرار دادن این روابط در رابطه ۱.۸،

$$A'' + 2iA'\phi' + iA\phi'' - A(\phi')^2 = -\frac{p^2}{\hbar^2}A \quad [۵.۸]$$

رابطه فوق معادل است با دو معادله حقیقی، یکی برای بخش حقیقی و دیگری برای بخش موهومی:

$$A'' - A(\phi')^2 = -\frac{p^2}{\hbar^2}A, \text{ یا } A'' = A\left[(\phi')^2 - \frac{p^2}{\hbar^2}\right] \quad [۶.۸]$$

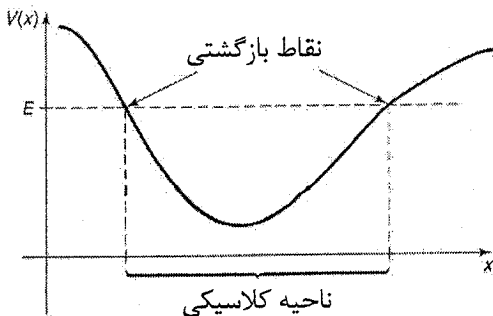
و

$$2A'\phi' + A\phi'' = 0, \text{ یا } (A^2\phi')' = 0 \quad [۷.۸]$$

رابطه‌های ۶.۸ و ۷.۸ کاملاً هم‌ارز معادله شرودینگر هستند. رابطه دوم به سادگی حل می‌شود:

$$A^2\phi' = C^2, \text{ یا } A = \frac{C}{\sqrt{\phi}} \quad [۸.۸]$$

که در آن C یک ثابت (حقیقی) است. رابطه اول (رابطه ۶.۹) را نمی‌توان در حالت کلی حل کرد - برای همین سروکله تقریب پیدا می‌شود: اینطور فرض می‌کنیم که دامنه A به آرامی تغییر می‌کند،



شکل ۱.۸: ذره‌ای که به طور کلاسیکی مقید به حضور در محدوده‌ای است که در آن $E \geq V(x)$ است.

به طوریکه می‌توان از جمله A'' صرف‌نظر کرد. (به بیان دقیقتر، فرض ما بر این است که A''/A بسیار کوچکتر از $(\phi')^2$ و p^2/\hbar^2 است.) در آنصورت می‌توانیم سمت چپ رابطه ۶.۸ را برداریم که آنچه می‌ماند به این شکل است

$$(\phi')^2 = \frac{p^2}{\hbar^2}, \quad \text{یا} \quad \frac{d\phi}{dx} = \pm \frac{p}{\hbar}$$

و بنابراین

$$\phi(x) = \pm \frac{1}{\hbar} \int p(x) dx \quad [۹.۸]$$

(فعلا این رابطه را به صورت یک انتگرال نامعین می‌نویسم - هر ثابت انتگرال‌گیری را می‌توان در C جذب کرد که از آن طریق مختلط می‌شود.) پس می‌توان اینطور نتیجه گرفت که

$$\psi(x) \cong \frac{C}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int p(x) dx} \quad [۱۰.۸]$$

به این ترتیب راه حل (تقریبی) عمومی ترکیبی خطی از دو عبارت خواهد بود که هر کدام یک علامت دارد.

توجه کنید که

$$|\psi(x)|^2 \cong \frac{|C|^2}{p(x)} \quad [۱۱.۸]$$

که می‌گوید احتمال یافتن ذره در نقطه x به طور معکوس با تکانه (کلاسیکی) آن (و در نتیجه با سرعتش) در آن نقطه متناسب است. این دقیقا همان چیزی است که انتظار داشتیم - ذره مدت زمان زیادی را در نقاطی که با سرعت زیاد از آنها عبور می‌کند سپری نمی‌کند، پس احتمال گیر انداختن آن در آن نقاط هم بسیار کم است. در واقع، تقریب WKB را گاهی اوقات با شروع از این مشاهده «شبه کلاسیکی» به جای برداشتن جمله A'' از معادله دیفرانسیل شروع می‌کنند. رهیافت ثانوی از نظر ریاضی بی‌کم و کاست‌تر است اما اولی پایه منطقی و توضیح فیزیکی موجه‌تری

مثال ۱.۸ چاه پتانسیل با دو دیوار عمودی. فرض کنید چاه مربعی نامتناهی در اختیار داریم که در انتهایش چند برآمدگی وجود دارد (شکل ۲.۸):

$$V(x) = \begin{cases} \text{یک تابع خاص} & 0 < x < a \\ \infty & \text{در غیر اینصورت} \end{cases} \quad [۱۲.۸]$$

درون چاه [با فرض آنکه در سرتاسر آن $E > V(x)$ باشد] داریم

$$\psi(x) \cong \frac{1}{\sqrt{p(x)}} [C_+ e^{i\phi(x)} + C_- e^{-i\phi(x)}]$$

یا به شکلی مناسبتر،

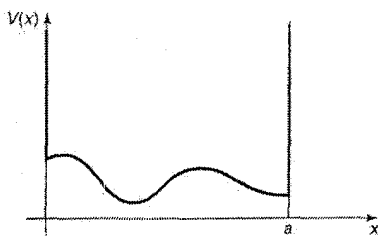
$$\psi(x) \cong \frac{1}{\sqrt{p(x)}} [C_1 \sin \phi(x) + C_2 \cos \phi(x)] \quad [۱۳.۸]$$

که در آن (با بهره‌گیری از آزادی که پیشتر به آن برای تحمیل یک حد پائین‌تر روی انتگرال اشاره شد)

$$\phi(x) = \frac{1}{\hbar} \int_0^x p(x') dx' \quad [۱۴.۸]$$

توجه داشته باشید که $\psi(x)$ می‌بایست در نقطه $x = 0$ به سمت صفر میل کند، لذا، از آنجائیکه $\phi(0) = 0$ است C_2 هم صفر است. همچنین، $\psi(x)$ در نقطه $x = a$ هم به سمت صفر می‌رود، پس

$$\phi(a) = n\pi (n = 1, 2, 3, \dots) \quad [۱۵.۸]$$



شکل ۲.۸: چاه مربعی نامتناهی با کف ناصاف

نتیجه گیری:

$$\int_0^a p(x) dx = n\pi\hbar \quad [۱۶.۸]$$

این شرط کوانتوش نتیجه اصلی ماست؛ این شرط انرژی‌های مجاز (تقریبی) را تعیین می‌کند. برای نمونه، اگر چاه مذکور کف صافی می‌داشت ($V(x) = 0$)، آنگاه $p(x) = \sqrt{2mE}$ می‌بود (مقدار ثابت) و از آنجا رابطه ۱۶.۸ هم حاکی از آن بود که $pa = n\pi\hbar$ یا

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

که دقیقاً سطوح انرژی چاه مربعی نامتناهی اصلی هستند (رابطه ۲۷.۲). در اینحالت تقریب WKB جواب دقیق را بدست می‌دهد (دامنه تابع موج واقعی، صحیح است، بنابراین برداشتن A'' مشکلی بر ایمان بوجود نمی‌آورد).

مساله ۱۰.۸* تقریب WKB را برای یافتن انرژی‌های مجاز (E_n) یک چاه مربعی نامتناهی با «پله‌ای» به ارتفاع V_0 که به اندازه نیمی از عرض پهن شده (شکل ۳.۶ را ملاحظه کنید) به کار ببرید:

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & 0 < x < a/2 \\ 0, & a/2 < x < a \\ \infty, & \text{در غیر اینصورت} \end{cases}$$

پاسخ خود را برحسب V_0 و $E_n^0 \equiv (n\pi\hbar)^2/2ma^2$ امین انرژی مجاز برای چاه پتانسیل نامتناهی «مختل نشده» که هیچ تاقچه‌ای هم ندارد، اینطور در نظر بگیرید که $E_1^0 > V_0$ است اما دیگر $E_n \gg V_0$ نیست. جوابتان را با آنچه در بخش ۲.۱.۶ با استفاده از نظریه اختلال مرتبه اول بدست آوردید، مقایسه کنید. توجه داشته باشید که چه V_0 بسیار کوچک باشد (نظام نظریه اختلال) و چه n خیلی بزرگ (نظام WKB شبه کلاسیک) آنها با هم در توافق هستند.

مساله ۲.۸ یک فراگرد (اشتقاق) جایگزین آموزنده از فرمول WKB (رابطه ۱۰.۸) مبتنی بر بسط توانهای \hbar است. با انگیزه تابع موج ذره آزاد، $\psi = A \exp(\pm ipx/\hbar)$ ، می‌نویسیم

$$\psi(x) = e^{if(x)/\hbar}$$

که در آن $f(x)$ تابع مختلطی است. (دقت کنید اینجا عمومیت را از دست نمی‌دهیم - هر تابع غیر صفری را می‌توان به این روش نوشت)

(الف) این تابع را در معادله شرودینگر (به شکل رابطه ۱.۸) قرار داده و نشان دهید

$$i\hbar f'' - (f')^2 + p^2 = 0$$

(ب) $f(x)$ را به صورت توانی برحسب \hbar بنویسید:

$$f(x) = f_0(x) + \hbar f_1(x) + \hbar^2 f_2(x) + \dots$$

و با مرتب‌سازی توان‌های مشابه \hbar ، نشان دهید

$$(f_0')^2 = p^2, \quad if_0'' = 2f_0'f_1', \quad if_1'' = 2f_0'f_2' + (f_1')^2, \text{ آلی آخر}$$

(پ) $f_0(x)$ و $f_1(x)$ را بدست آورده و نشان دهید - تا مرتبه اول \hbar - رابطه ۱۰.۸ را دوباره بدست آورده‌اید. توجه: لگاریتم یک عدد منفی با رابطه $\ln(-z) = \ln(z) + i\pi$ تعریف می‌شود که در آن n یک عدد صحیح فرد است. اگر این فرمول برایتان تازگی دارد، تلاش کنید هر دو طرف را به صورت نمایی بنویسید، در آن صورت متوجه می‌شوید از کجا حاصل شده است.

۲.۸ تونل‌زنی

تا اینجا، اینطور فرض کرده‌ام که $E > V$ است به طوریکه $p(x)$ حقیقی است. اما می‌توانیم به سادگی جواب متناظر در محدوده غیر کلاسیکی ($E < V$) را نیز بنویسیم - این هم مانند قبل است (رابطه ۱۰.۸)، تنها با این تفاوت که حالا $p(x)$ موهومی^۲ است:

^۲در این صورت تابع موج حقیقی است و به مانند روابط ۶.۸ و ۷.۸ لزوماً رابطه ۵.۸ را دنبال نمی‌کند، اگرچه آنها هنوز هم کافی هستند. اگر این شما را آزار می‌دهد، فراگرد جایگزین در مساله ۲.۸ را مطالعه کنید.

$$\psi(x) \cong \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\pm \frac{1}{\hbar} \int |p(x)| dx} \quad [17.8]$$

به عنوان مثال، مساله پراکندگی از یک سد مستطیلی با یک برآمدگی روی آن (شکل ۳.۸) را در نظر بگیرید. برای سمت راست سد ($x < 0$),

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad [18.8]$$

که در آن A دامنه [موج] ورودی، B دامنه بازتابیده و $k \equiv \sqrt{2mE}/\hbar$ است (بخش ۵.۲ را ببینید). برای سمت راست سد ($x > a$),

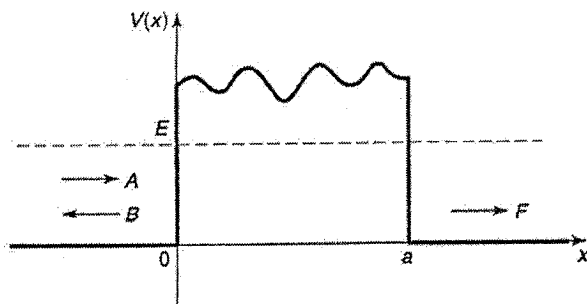
$$\psi(x) = Fe^{ikx} \quad [19.8]$$

F دامنه عبوری است و احتمال تونل زدن برابر است با

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} \quad [20.8]$$

در محدوده تونل زنی ($0 \leq x \leq a$) تقریب WKB می دهد

$$\psi(x) \cong \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_0^x |p(x')| dx'} + \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^x |p(x')| dx'} \quad [21.8]$$



شکل ۳.۸: پراکندگی از یک سد مستطیلی با رویه‌ای دارای برآمدگی

اما اگر سد خیلی بالا و یا خیلی عریض باشد (یعنی اگر احتمال تونل زنی کم باشد)، آنگاه ضریب جمله‌ای که به طور نمایی در حال افزایش است (C) باید کوچک باشد (در واقع، اگر سد تا بینهایت گسترده شده باشد این ضریب صفر خواهد بود) و تابع موج هم چیزی شبیه^۳ به شکل ۴.۸ می‌شود. دامنه‌های نسبی امواج ورودی و عبور کرده اساساً از طریق کاهش کلی نمایی در محدوده غیر کلاسیکی تعیین می‌شوند:

$$\frac{|F|}{|A|} \sim e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^x |p(x')| dx'}$$

به طوریکه

$$T \cong e^{-2\gamma}, \text{ با } \gamma \equiv \frac{1}{\hbar} \int_0^a |p(x)| dx \quad [22.8]$$

مثال ۲.۸ نظریه واپاشی آلفازای گاموف.^۴ جورج گاموف (و مستقل از او، کاندون و گورنی) در سال ۱۹۲۸ از این نتیجه برای فراهم آوردن نخستین توضیح نظری از واپاشی آلفا (تابش خودبخودی یک ذره آلفا شامل دو پروتون و دو نوترون توسط هسته‌های رادیواکتیو) استفاده کردند.^۵ از آنجاییکه ذره آلفا حامل بار مثبت ($2e$) است، از نظر الکتریکی توسط هسته‌های به جای مانده (با بار Ze) به محض آنکه فاصله‌اش برای فرار از قید نیروی بستگی هسته‌ای به اندازه کافی زیاد شد، رانده می‌شود. اما ابتدا باید سد پتانسیلی را مورد بحث و بررسی قرار داد که از پیش (در مورد اورانیوم) می‌دانیم بیش از دو برابر انرژی ذره آلفای تابیده شده است. گاموف منحنی انرژی پتانسیل برای ذره آلفا را به صورت یک چاه مربعی متناهی تقریب زده (که نشان‌دهنده نیروی هسته‌ای جاذب است)، آنرا تا r_1 (شعاع هسته) گسترش داده و دنباله

^۳ این بحث آروینی (وابسته به آزمون و خطا) را می‌توان موشکافانه‌تر بررسی کرد - مساله ۱۰.۸ را ببینید.

^۴ برای بحث کامل‌تر و صورتبندی جایگزین، مقاله Barry Holstein در مجله *Am. J. Phys.* 64, 1061 (1996) را ملاحظه کنید.

^۵ برای یک تاریخچه مختصر جالب، مقاله *The Early History of Quantum Tunneling* نوشته Eugen Merzbacher در مجله *Physics Today*، آگوست ۲۰۰۲، صفحه ۴۴ را ملاحظه کنید.

کولنی رانشی به انتهای آن اضافه کرد (شکل ۵.۸) و سازوکار فرار را با تونل زنی کوانتومی یکی گرفت (در ضمن، این روش نخستین بار در فیزیک هسته‌ای به کار گرفته شد).

اگر E انرژی ذره آلفای تابیده باشد، نقطه عطف (r_2) به این ترتیب تعیین می‌شود

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2Ze^2}{r_2} = E \quad [۲۳.۸]$$

نمای γ (رابطه ۲۲.۸) آشکارا برابر است با^۶

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{2m \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2Ze^2}{r} - E \right)} dr = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{\frac{r_2}{r} - 1} dr$$

انتگرال را می‌توان با جاگذاری $r \equiv r_2 \sin^2 u$ حل کرد

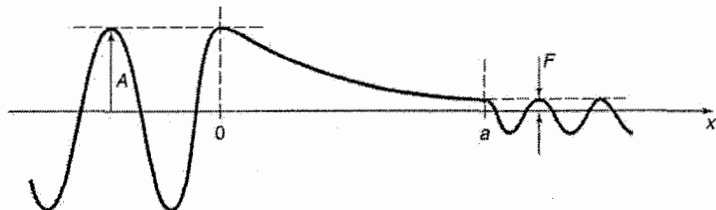
$$\gamma = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \left[r_2 \left(\frac{\pi}{2} - \sin^{-1} \sqrt{\frac{r_1}{r_2}} \right) - \sqrt{r_1(r_2 - r_1)} \right] \quad [۲۴.۸]$$

به طور معمول، $r_1 \ll r_2$ بوده و به همین خاطر می‌توان رابطه فوق را با استفاده از تقریب زاویه کوچک ($\sin \epsilon \cong \epsilon$) ساده‌تر کرد.

$$\gamma \cong \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \left[\frac{\pi}{2} r_2 - 2\sqrt{r_1 r_2} \right] = K_1 \frac{Z}{\sqrt{E}} - K_2 \sqrt{Z r_1} \quad [۲۵.۸]$$

که در آن

$$K_1 \equiv \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{\pi\sqrt{2m}}{\hbar} = 1.980 \text{ MeV}^{1/2} \quad [۲۶.۸]$$



شکل ۴.۸: ساختار کیفی تابع موج، برای پراکندگی از یک سد پهن بلند

^۶ در این حالت پتانسیل در هر دو سوی سد صفر نمی‌شود (به علاوه، این در واقع یک مساله سه بعدی است)، اما انگیزش اساسی که در رابطه ۲۲.۸ لحاظ شده، برای پراکندگی از یک سد پهن بلند آن نیاز داریم.

$$K_2 \equiv \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^{1/2} \frac{4\sqrt{m}}{\hbar} = 1.485 fm^{1/2} \quad [27.8]$$

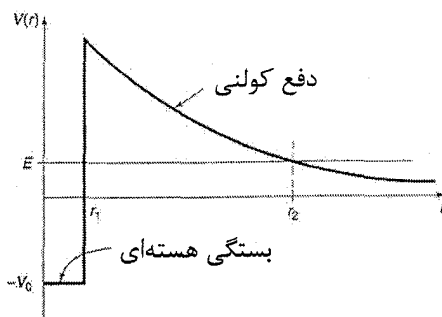
(یک فرمی، fm، برابر است با 10^{-15} m که اندازه یک هسته نوعی است).

اگر ذره آلفا را در حالی تصور کنیم که با سرعت میانگین v این طرف و آن طرف می‌رود، میانگین زمان برخوردهای آن با دیواره‌ها $2r_1/v$ بوده و در نتیجه فرکانس برخوردها $v/2r_1$ است.

احتمال فرار در هر برخورد $e^{-2\gamma}$ است، به طوریکه احتمال تابش به ازای زمان $(v/2r_1)e^{-2\gamma}$ شده و بدین ترتیب نیمه عمر هسته مادر حدودا برابر است با:

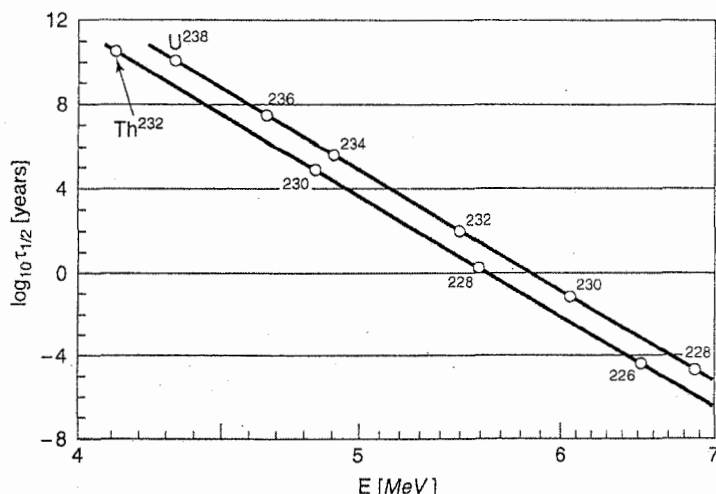
$$\tau = \frac{2r_1}{v} e^{2\gamma} \quad [28.8]$$

متأسفانه، مقدار v را نمی‌دانیم - اما اهمیت چندانی هم ندارد، زیرا وقتی از یک هسته رادیواکتیو به هسته دیگر می‌رویم عامل نمایی در بازه‌ای تخیلی تغییر می‌کند (۲۵ مرتبه بزرگی)؛ نسبت به این، تغییر در v بسیار کم اهمیت است. بخصوص، اگر لگاریتم نیمه عمر اندازه‌گیری شده در آزمایشگاه را در مقابل $1/\sqrt{E}$ رسم کنیم، نتیجه خط مستقیم زیبایی است (شکل ۶.۸)،^۷ درست همانطور که روابط ۲۵.۸ و ۲۸.۸ انتظار داشتید.



شکل ۵.۸: مدل گاموف برای انرژی پتانسیل یک ذره آلفا درون هسته‌ای رادیواکتیو

^۷ از کتاب *Introduction to the Quantum Mechanics* اثر David Park، ویرایش سوم از انتشارات McGraw-Hill (۱۹۹۲)؛ اقتباس شده از کتاب *Encyclopedia of Physics* بخش Alpha Radioactivity جلد ۴۲ از انتشارات Springer (۱۹۵۷). این مطلب با اجازه شرکت‌های McGraw-Hill مجدداً مورد استفاده قرار گرفته است.



شکل ۶.۸: نمودار لگاریتم نیمه عمر ($\tau_{1/2} = \tau \ln 2$) بر حسب $1/\sqrt{E}$ برای چندین تابشگر آلفای اورانیوم و توریم (که در آن E انرژی ذره آلفای تابیده است)

مساله ۳.۸ از رابطه ۲۲.۸ برای محاسبه احتمال عبور تقریبی ذره‌ای با انرژی E که با سد مربعی متناهی به ارتفاع $V_0 > E$ و عرض $2a$ برخورد کرده استفاده کنید. جواب دقیق (مساله ۳۳.۲) را با رژیم WKB به ازای $T \ll 1$ مقایسه کنید.

مساله ۴.۸ نیمه عمر U^{238} و Po^{212} را با رابطه ۲۵.۸ برای γ محاسبه کنید. راهنمایی: چگالی ماده هسته‌ای به طور نسبی ثابت است (به این معنی که برای تمام هسته‌ها یکسان است)، لذا $(r_1)^3$ متناسب است با A (تعداد نوترون‌ها به اضافه پروتون‌ها) و به طور تجربی،

$$r_1 \cong (1.07 \text{ fm}) A^{1/3} \quad [۲۹.۸]$$

انرژی ذره آلفای ساطع شده از فرمول اینشتین ($E = mc^2$) بدست می‌آید:

$$E = m_p c^2 - m_d c^2 - m_\alpha c^2 \quad [۳۰.۸]$$

که در آن m_p جرم هسته مادر، m_d جرم هسته دختر و m_α جرم ذره آلفا است (مثل این است که بگوئیم هسته He^4). برای پی بردن به اینکه هسته دختر چیست، دقت کنید که ذره آلفا حامل دو پروتون و دو نوترون است. بنابراین به اندازه ۴ کاهش پیدا می‌کنند.

جرم‌های هسته‌ای مربوطه را جستجو کنید. برای تخمین زدن v ، از $E = (1/2)m_\alpha v^2$ استفاده کنید؛ به این ترتیب انرژی پتانسیل (منفی) داخل هسته نادیده گرفته شده و خود v هم کم اهمیت پنداشته می‌شود، اما این تقریباً بهترین کاری است که می‌توانیم در این مرحله انجام دهیم. ضمناً، نیمه عمر آزمایشگاهی به ترتیب 6×10^9 سال و 0.5 میکرو ثانیه است.

۳.۸ فرمول‌های هموستار

در بحثمان تا اینجا اینطور فرض کرده‌ام که «دیواره‌های» چاه پتانسیل (یا سد) عمودی هستند، طوریکه جواب «بیرونی» ساده بوده و شرایط مرزی هم کم اهمیت هستند. اینطور که پیداست، جواب اصلی ما (روابط ۱۶.۸ و ۲۲.۸) به طور معقولی دقیق‌اند حتی وقتی لبه‌ها شیب کمی دارند (قدر مسلم، در نظریه گاموف آنها را تنها به چنین حالتی اعمال کردیم). با این وجود، علاقمندی قابل توجهی به مطالعه نزدیکتر آنچه برای تابع موج در نقطه عطف ($E = V$) اتفاق می‌افتد وجود دارد، جایی که در آن محدوده «کلاسیکی» به محدوده «غیر کلاسیکی» ملحق شده و تقریب WKB کارایی‌اش را از دست می‌دهد. در این بخش به مساله حالت مقید (شکل ۱.۸) می‌پردازم؛ مساله پراکندگی (مساله ۱۰.۸) را بر عهده خودتان می‌گذارم.^۸

برای سادگی، بیایید محورها را طوری انتقال دهیم که نقطه عطف در $x = 0$ رخ دهد (شکل ۷.۸). در تقریب WKB داریم

$$\psi(x) \cong \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \left[B e^{\frac{i}{\hbar} \int_x^0 p(x') dx'} + C e^{-\frac{i}{\hbar} \int_x^0 p(x') dx'} \right], & x < 0 \\ \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} D e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^0 |p(x')| dx'}, & x > 0 \end{cases} \quad [3.1.8]$$

(با این فرض که $V(x)$ به ازای تمام $x > 0$ ها بزرگتر از E می‌ماند، می‌توانیم توان مثبت را در این محدوده در نظر نگیریم، زیرا به ازای $x \rightarrow \infty$ مقدار آن بسیار بزرگ می‌شود). کارمان از این قرار

^۸ هشدار: بحثی که در ادامه می‌آید کاملاً تکنیکی است و به همین خاطر شاید دوست داشته باشید در دور اول مطالعه از آن عبور کنید.

است که دو جواب را در مرز به هم متصل کنیم. اما اینجا یک مشکل جدی داریم: در تقریب WKB، ψ در نقطه عطف به سمت بینهایت می‌رود (چونکه در آن $p(x) \rightarrow 0$ میل می‌کند).

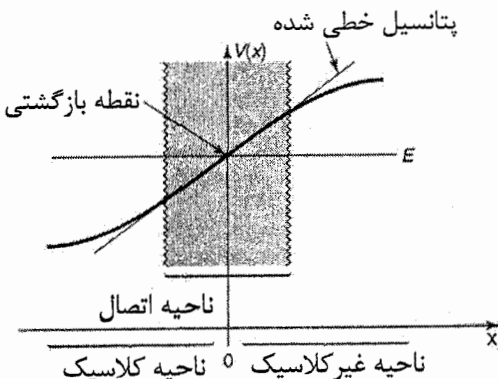
طبعاً تابع موج حقیقی چنین رفتار غیر واقع بینانه‌ای ندارد - همانطور که انتظار داشتیم، روش WKB به وضوح در مجاورت نقطه عطف کارایی‌اش را از دست می‌دهد. و بالاخره، این تقریب دقیقاً شرایط مرزی در نقاط عطفی را باز نمی‌نماید که انرژی‌های مجاز را تعیین می‌کنند. پس آنچه باید انجام دهیم تقسیم کردن دو جواب WKB به یکدیگر با استفاده از یک تابع موج «همبند کننده» است که نقطه عطف را از هم باز می‌کند.

از آنجا که تنها به همبند کردن تابع موج (ψ_p) در همسایگی مبداء نیاز داریم، پتانسیل را با یک خط راست تقریب زده:

$$V(x) \cong E + V'(0)x \quad [۳۲.۸]$$

و معادله شرودینگر را به ازای پتانسیل خطی شده V حل می‌کنیم:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_p}{dx^2} + (E + V'(0)x) \psi_p = E \psi_p$$



شکل ۷.۸: نمای بزرگ شده‌ای از نقطه عطف

یا

$$\frac{d^2\psi_p}{dx^2} = \alpha^3 x \psi_p \quad [۳۳.۸]$$

که در آن

$$\alpha \equiv \left[\frac{2m}{\hbar^2} V'(0) \right]^{1/3} \quad [۳۴.۸]$$

α ها را می‌توان در متغیر مستقلی با تعریف زیر جذب کرد

$$z \equiv \alpha x \quad [۳۵.۸]$$

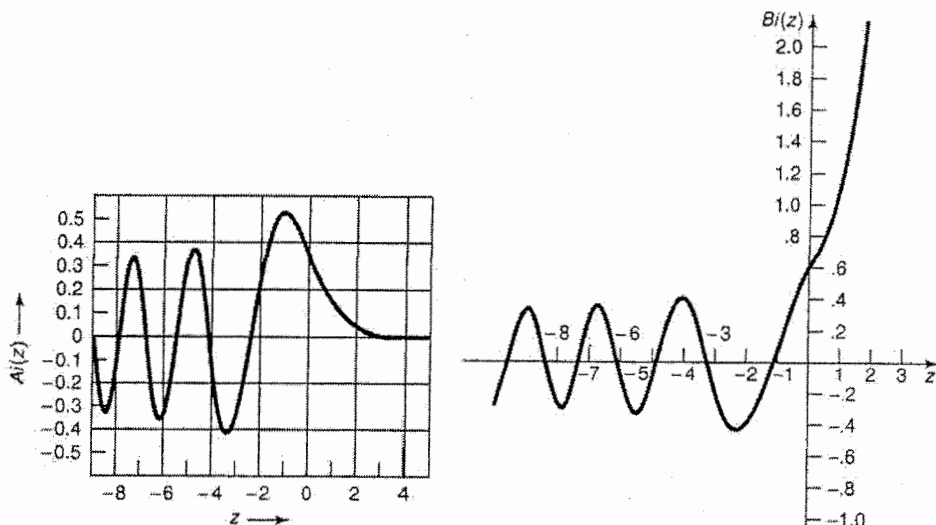
به طوریکه

$$\frac{d^2\psi_p}{dx^2} = z \psi_p \quad [۳۶.۸]$$

نتیجه بالا را معادله آیری می‌نامند که جوابهای آن نیز توابع آیری خوانده می‌شوند.^۹ از آنجا که معادله آیری یک معادله دیفرانسیل مرتبه دو می‌باشد، دو تابع مستقل خطی آیری، $Ai(z)$ و $Bi(z)$ ، جواب عمومی ترکیبی خطی از این دو هستند. Ai و Bi منسوبند به توابع بسل از مرتبه $1/3$ ؛ برخی از ویژگیهای آنها در جدول ۱.۸ فهرست و در شکل ۸.۸ نیز رسم شده است. اینطور که پیداست تابع موج همبند به ازای ثوابت مناسب a و b عبارت است از

$$\psi_p(x) = aAi(ax) + bBi(ax) \quad [۳۷.۸]$$

^۹ از نظر کلاسیکی، یک پتانسیل به معنای یک نیروی ثابت است و در نتیجه یک شتاب ثابت - ساده‌ترین حرکت با اهمیت ممکن، و نقطه شروع برای مکانیک بنیادی. جالب است که همان پتانسیل در مکانیک کوانتومی می‌تواند توابع متعالی ناآشنایی را بوجود آورده و تنها نقشی فرعی در این نظریه ایفا کند.



شکل ۸.۸: نمودار توابع آیری

جدول ۸.۸: برخی از ویژگیهای توابع آیری

$$\frac{d^2 y}{dz^2} = zy$$

معادله دیفرانسیل:

 ترکیباتی خطی از توابع آیری، $Ai(z)$ و $Bi(z)$

جوابها:

$$Ai(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \cos\left(\frac{s^3}{3} + sz\right) ds$$

نمایش انتگرالی:

$$Bi(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \left[e^{-\frac{s^3}{3} + sz} + \sin\left(\frac{s^3}{3} + sz\right) \right] ds$$

اشکال مجانبی:

$$\left. \begin{aligned} Ai(z) &\sim \frac{1}{2\sqrt{\pi} z^{1/4}} e^{-\frac{2}{3} z^{3/2}} \\ Bi(z) &\sim \frac{1}{\sqrt{\pi} z^{1/4}} e^{\frac{2}{3} z^{3/2}} \end{aligned} \right\} z \gg 0$$

$$\left. \begin{aligned} Ai(z) &\sim \frac{1}{\sqrt{\pi} (-z)^{1/4}} \sin\left[\frac{2}{3} (-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right] \\ Bi(z) &\sim \frac{1}{\sqrt{\pi} (-z)^{1/4}} \cos\left[\frac{2}{3} (-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right] \end{aligned} \right\} z \ll 0$$

باید توجه داشت که ψ_p تابع موج (تقریبی) در همسایگی مبداء است؛ کار ما جور کردن آن با جواب‌های WKB در مناطق همپوشان هر یک از طرفین است (شکل ۹.۸ را ببینید). این مناطق هم پوشان آنقدر به نقطه عطف نزدیکند که پتانسیل خطی شده به شکلی منطقی و پذیرفتنی صحیح است (به طوریکه ψ_p تقریب مناسبی برای تابع موج حقیقی است)، و بالاخره آنقدر از نقطه عطف دور هست که تقریب WKB قابل اطمینان باشد.^{۱۰} در مناطق همپوشان رابطه ۳۲.۸ برقرار می‌ماند و به این ترتیب (در نمادگذاری رابطه ۳۴.۸)

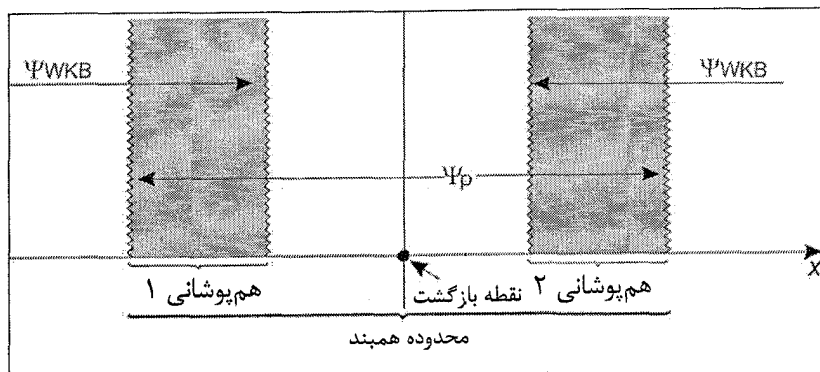
$$p(x) \cong \sqrt{2m(E - E - V'(0)x)} = \hbar\alpha^{3/2}\sqrt{-x} \quad [38.8]$$

بخصوص، در منطقه همپوشانی ۲،

$$\int_0^x |p(x')| dx' \cong \hbar\alpha^{3/2} \int_0^x \sqrt{x'} dx' = \frac{2}{3} \hbar(\alpha x)^{3/2}$$

و بنابراین تابع موج WKB (رابطه ۳۱.۸) را می‌توان به این صورت نوشت

$$\psi(x) \cong \frac{D}{\sqrt{\hbar}\alpha^{3/4}x^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} \quad [39.8]$$



شکل ۹.۸: محدوده همبند و دو منطقه همپوشان

^{۱۰} این یک الزام و قید ظریف دو سویه است که آمیختن و بر ساختن پتانسیلهای ناسالمی را ممکن می‌سازد که به ازای آنها هرگز چنین مناطق همپوشانی یافت نمی‌شود. با این حال، در کاربردهای عملی چنین چیزی به ندرت رخ می‌دهد. مساله ۸.۸ را ببینید.

در این بین، با استفاده از اشکال مجانبی در z های بزرگ^{۱۱} توابع آیری (از جدول ۱.۸)، تابع موج همبند (رابطه ۳۷.۸) در منطقه هم‌پوشان^۲ می‌شود

$$\psi_p(x) \cong \frac{a}{2\sqrt{\pi}(\alpha x)^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} + \frac{b}{\sqrt{\pi}(\alpha x)^{1/4}} e^{\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} \quad [۴۰.۸]$$

با مقایسه دو جواب، ملاحظه می‌کنیم که

$$a = \sqrt{\frac{4\pi}{\alpha\hbar}} D \quad \text{و} \quad b = 0 \quad [۴۱.۸]$$

اکنون به عقب بازگشته و رهیافت منطقه همپوشان ۱ را تکرار می‌کنیم. یکبار دیگر، $p(x)$ از رابطه ۳۸.۸ بدست می‌آید اما اینبار x منفی است، لذا

$$\int_x^0 p(x') dx' \cong \frac{2}{3} \hbar (-\alpha x)^{3/2} \quad [۴۲.۸]$$

و تابع موج WKB (رابطه ۳۱.۸) عبارت است از

$$\psi(x) \cong \frac{1}{\sqrt{\pi\alpha^{3/4}(-x)^{1/4}}} \left[B e^{i\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} + C e^{-i\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} \right] \quad [۴۳.۸]$$

در این بین، با استفاده از شکل مجانبی تابع آیری برای z های بزرگ منفی (جدول ۱.۸)، تابع همبند (رابطه ۳۷.۸ با $b = 0$) می‌دهد

$$\begin{aligned} \psi_p(x) &\cong \frac{a}{\sqrt{\pi}(-\alpha x)^{1/4}} \sin \left[\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right] \\ &= \frac{a}{\sqrt{\pi}(-\alpha x)^{1/4}} \frac{1}{2i} \left[e^{i\pi/4} e^{i\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} - e^{-i\pi/4} e^{-i\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} \right] \quad [۴۴.۸] \end{aligned}$$

^{۱۱} در نگاه اول استفاده از تقریب Z های بزرگ در این منطقه نامعقول به نظر می‌رسد، که هر چه باشد قرار است به شکلی پذیرفتنی و منطقی به نقطه عطف در $z = 0$ نزدیک باشد (طوری‌که تقریب خطی پتانسیل معتبر باشد). اما توجه داشته باشید که در اینجا آرگومان αx است که اگر موضوع را با دقت مطالعه کنید (مساله ۸۸ را ببینید) درمی‌یابید (به طور نوعی) محدوده‌ای وجود دارد که در آن αx بزرگ است، با این حال، در همان لحظه تقریب‌زنی $V(x)$ با یک خط مستقیم منطقی است.

از مقایسه توابع موج WKB و همبند در منطقه هم پوشان ۱، درمی یابیم که

$$\frac{a}{2i\sqrt{\pi}} e^{i\pi/4} = \frac{B}{\sqrt{\hbar\alpha}} \quad \text{و} \quad \frac{-a}{2i\sqrt{\pi}} e^{-i\pi/4} = \frac{C}{\sqrt{\hbar\alpha}}$$

یا، با قرار دادن آن در معادله ۴۱.۸ برای a ،

$$B = -ie^{i\pi/4}D \quad \text{و} \quad C = ie^{-i\pi/4}D \quad [۴۵.۸]$$

اینها را فرمول های هموستار (رابطه ای) می نامند که جواب های WKB در طرفین نقطه عطف را به هم متصل می سازند. کارمان در این قسمت با تابع موج همبند تمام می شود - تنها هدف آن پر کردن این فاصله بود. اگر همه روابط را برحسب یک ثابت بهنجارش D بیان کرده و نقطه عطف را به قبلتر از مبدا در نقطه دلخواه x_2 انتقال دهیم، تابع موج WKB (رابطه ۳۱.۸) می شود

$$\psi(x) \cong \begin{cases} \frac{2D}{\sqrt{p(x)}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right], & x < x_2 \\ \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left[\int_x^{x_2} p(x') dx' \right], & x > x_2 \end{cases} \quad [۴۶.۸]$$

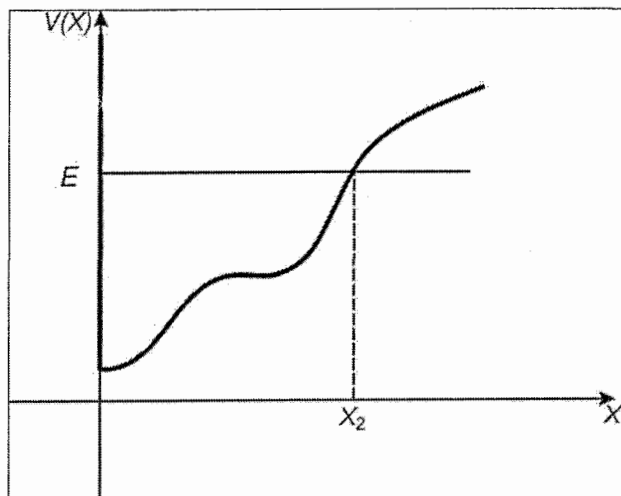
مثال ۳.۸ چاه پتانسیل با یک دیواره عمودی. چاه پتانسیلی را فرض کنید که یک سمت آن (در $x = 0$) دیواره ای عمودی و در سمت دیگر آن دیواره ای مایل قرار دارد (شکل ۱۰.۸). در این حالت $\psi(0) = 0$ است، از اینرو رابطه ۴۶.۸ گویای این مطلب است که

$$\frac{1}{\hbar} \int_0^{x_2} p(x) dx + \frac{\pi}{4} = n\pi, (n = 1, 2, 3, \dots) \quad [۴۷.۸]$$

یا

$$\int_0^{x_2} p(x) dx = \left(n - \frac{1}{4} \right) \pi \hbar$$

برای نمونه، «نوسانگر نیم هماهنگ» را در نظر بگیرید،



شکل ۱۰.۸: چاه پتانسیل با یک دیوار عمودی

$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, & x > 0 \\ \infty, & \text{بقیه نقاط} \end{cases} \quad [۴۸.۸]$$

در اینحالت

$$p(x) = \sqrt{2m[E - (1/2)m\omega^2 x^2]} = m\omega \sqrt{x_2^2 - x^2}$$

که در آن

$$x_2 = \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{2E}{m}}$$

نقطه عطف است، از اینرو

$$\int_0^{x_2} p(x) dx = m\omega \int_0^{x_2} \sqrt{x_2^2 - x^2} dx = \frac{\pi}{4} m\omega x_2^2 = \frac{\pi E}{2\omega}$$

و شرط کوانتس از رابطه ۴۷.۸ می‌دهد

$$E_n = \left(2n - \frac{1}{2}\right) \hbar \omega = \left(\frac{3}{2}, \frac{7}{2}, \frac{11}{2}, \dots\right) \hbar \omega \quad [۴۹.۸]$$

در این مورد خاص، تقریب WKB در واقع انرژی‌های مجاز دقیق را می‌رساند (که دقیقا انرژی‌های فرد نوسانگر هماهنگ کامل هستند - مساله ۴۲.۲ را ملاحظه کنید).

مثال ۴.۸ چاه پتانسیل بدون دیواره‌های عمودی. رابطه ۴۶.۸ توابع موج WKB را در نقطه عطف به هم متصل می‌کند جاییکه پتانسیل شیب رو به بالا دارد (شکل ۱۱.۸ آ)؛ استدلال مشابه در مورد نقطه عطف با شیب رو به پایین (شکل ۱۱.۸ ب)، می‌دهد (رابطه ۹.۸)

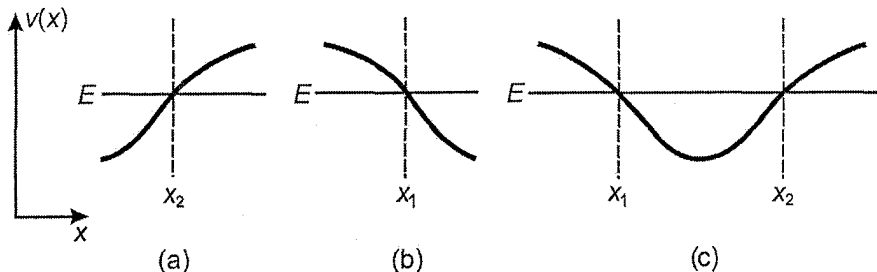
$$\psi(x) \cong \begin{cases} \frac{D'}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_1} |p(x')| dx'}, & x < x_1 \\ \frac{2D'}{\sqrt{p(x)}} \sin \left[\int_{x_1}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right], & x > x_1 \end{cases} \quad [۵۰.۸]$$

بخصوص، اگر بحث‌مان درباره چاه پتانسیل باشد (شکل ۱۱.۸ پ)، تابع موج در منطقه «درونی» ($x_1 < x < x_2$) را می‌توان به یکی از این دو صورت نوشت

$$\psi(x) \cong \frac{2D}{\sqrt{p(x)}} \sin \theta_2(x) \quad \text{که در آن} \quad \theta_2 \equiv \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4}$$

(رابطه ۴۶.۸)، یا به صورت

$$\psi(x) \cong \frac{2D'}{\sqrt{p(x)}} \sin \theta_1(x) \quad \text{که در آن} \quad \theta_1 \equiv -\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4}$$



شکل ۱۱.۸: نقاط عطف با شیب رو به بالا و شیب رو به پایین

(رابطه ۵۰.۸). اینطور که پیداست آرگومانهای توابع سینوسی باید به پیمانه π با هم متناسب باشند:^{۱۲} $\theta_2 = \theta_1 + n\pi$ ، که می‌توان از آن اینطور نتیجه گرفت که

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = \left(n - \frac{1}{2}\right)n\pi \quad \text{با } n = 1, 2, 3, \dots \quad [51.8]$$

شرط کوانتس فوق انرژی‌های مجاز برای حالت «نوعی» یک چاه پتانسیل با دیواره‌های شیبدار را بدست می‌دهد. توجه داشته باشید که این با فرمول مربوط به دو دیواره عمودی (رابطه ۱۶.۸) یا تک دیواره عمودی (رابطه ۴۷.۸) تنها در عددی که از n کسر می‌شود ($1/2$ یا $0, 1/4$) تفاوت می‌کند. از آنجا که تقریب WKB در نظام شبه کلاسیکی (با n بزرگ) بسیار خوب عمل می‌کند، تمایز در ظاهر به نسبت محتوا بیشتر است. در هر رویدادی، جواب به طرز چشمگیری توانمند است، چراکه ما را قادر می‌سازد انرژی‌های مجاز (تقریبی) را بدون حل معادله شرودینگر و تنها با عددیابی یک انتگرال محاسبه کنیم. تابع موج خودش از کانون توجه حذف می‌شود.

مساله ۵.۸** مانسته مکانیک کوانتومی توپی (به جرم m) را که به طور کشسان پس از برخورد به سطح از آن وامی‌جهد در نظر بگیرید.^{۱۳}

(الف) انرژی پتانسیل به صورت تابعی از ارتفاع x بالاتر از سطح برخورد چیست؟ (به ازای x منفی، پتانسیل بینهایت است - گوی اصلاً نمی‌تواند به آن محدوده برسد.

(ب) معادله شرودینگر را برای این پتانسیل حل کنید و جواب خود را برحسب تابع آیری مناسب ارایه دهید (توجه کنید که $Bi(z)$ به ازای z های بزرگ بینهایت می‌شود و در نتیجه

^{۱۲} نه 2π - علامت منفی کلی را می‌توان در عامل‌های بهنجارش D و D' جذب کرد.

^{۱۳} برای اطلاعات بیشتر درباره گوی جهنده کوانتومی مقاله J. Gea-Banacloche در Am. J. Phys. 67, 776

(1999) و گزارش منتشر نشده Classical/quantum dynamics in a uniform gravitational fields اثر N.

Wheeler از کالج Reed (۲۰۰۲) را ملاحظه کنید. شاید مساله نسبتاً عجیبی به نظر آید، اما این آزمایش در حقیقت با استفاده از نوترون‌ها به انجام رسیده است. V. V. Nesvizhskiy et al. در مجله (Nature 415, 297 (2002)).

تابع موج قابل بهنجاری بدست نمی‌دهد). خودتان را برای بهنجار کردن $\psi(x)$ به زحمت نیندازید.

(پ) با استفاده از $g = 9.80 \text{ m/s}^2$ و $m = 0.100 \text{ kg}$ ، چهار انرژی مجاز نخست را برحسب ژول بدست آورده و آنها را تا سه رقم معنی‌دار تصحیح کنید. راهنمایی: کتاب Handbook of Mathematical Functions اثر Irene A. Stegun (نیویورک، انتشارات Dover، ۱۹۷۰) صفحه ۴۷۸ را ببینید؛ نمادگذاری در صفحه ۴۵۰ توضیح داده شده است.

(ت) انرژی حالت پایه یک الکترون در این میدان گرانشی برحسب eV چقدر است؟ این الکترون به طور میانگین تا چه ارتفاعی بالا خواهد رفت؟ راهنمایی: از قضیه ویرال برای تعیین $\langle x \rangle$ استفاده کنید.

مساله ۶.۸* گوی جهنده (مساله ۵.۸) را با استفاده از تقریب WKB بررسی کنید.

(الف) انرژی‌های مجاز E_n را برحسب m ، g و \hbar بدست آورید.

(ب) اکنون مقادیر خاص داده شده در مساله ۵.۸ (پ) را در رابطه قرار داده و تقریب WKB را با چهار انرژی نخست «دقیق» مقایسه کنید.

(پ) عدد کوانتومی n تقریباً باید با چه بزرگی باشد تا به گوی مورد نظر ارتفاع میانگینی فرضاً به اندازه یک متر از سطح زمین بدهد؟

مساله ۷.۸* از تقریب WKB برای یافتن انرژی‌های مجاز نوسانگر هماهنگ استفاده کنید.

مساله ۸.۸ ذره‌ای به جرم m را در n امین حالت نوسانگر هماهنگ (با فرکانس زاویه‌ای ω) در نظر بگیرید.

(الف) نقطه عطف x_2 را بیابید.

(ب) پیش از آنکه خطای پتانسیل خطی شده (رابطه ۳۲.۸، اما با نقطه عطف در x_2) به ۱ درصد برسد، تا چه مسافتی (d) بالاتر از سطح می‌توانید بروید؟ یعنی، اگر

$$\frac{V(x_2 + d) - V_{lin}(x_2 + d)}{V(x_2)} = 0.01$$

مقدار d چقدر است؟

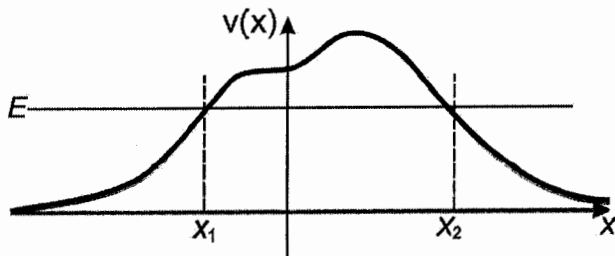
(پ) شکل مجانبی $Ai(z)$ تا وقتی $z \geq 5$ باشد به میزان 1% دقیق است. به ازای d در بخش (ب) کوچکترین مقدار n را طوری تعیین کنید که $\alpha d \geq 5$ باشد. (برای هر n که بزرگتر از این باشد، محدوده هم پوشانی وجود دارد که در آن پتانسیل خطی شده تا 1% مناسب بوده و شکل تابع آیری هم تا همان مقدار به ازای z های بزرگ مناسب است.

مساله ۹.۸*** فرمول های هموستار را در نقطه عطفی با شیب رو به پایین استخراج کرده و رابطه ۵۰.۸ را تائید کنید.

مساله ۱۰.۸*** با استفاده از فرمول های هموستار مساله پراکندگی از سدی با دیواره شیبدار (شکل ۱۲.۸) را بررسی کنید. راهنمایی: کار را با نوشتن تابع موج WKB به شکل زیر شروع کنید.

$$\psi(x) \cong \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \left[A e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx'} + B e^{\frac{i}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx'} \right] & , \quad (x < x_1) \\ \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \left[C e^{\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x |p(x')| dx'} + D e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x |p(x')| dx'} \right] & , \quad (x_1 < x < x_2) \\ \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \left[F e^{\frac{i}{\hbar} \int_{x_2}^x p(x') dx'} \right] & , \quad (x > x_2) \end{cases} \quad [52.8]$$

حالت $C = 0$ را در نظر بگیرید. احتمال تونل زنی، $T = |F|^2 / |A|^2$ ، را محاسبه کرده و نشان دهید جوابتان به معادله ۲۲.۸ در مورد یک سد پهن با ارتفاع زیاد ساده می شود.



شکل ۱۲.۸: سدی با دیواره های شیبدار

مسائل دیگری برای فصل ۸

مساله ۱۱.۸** از تقریب WKB برای یافتن انرژی‌های مجاز پتانسیل زیر استفاده کنید:

$$V(x) = \alpha|x|^v$$

که در آن v عدد مثبتی است. پاسخ خود را به ازای حالت $v = 2$ بررسی کنید. پاسخ: ^{۱۴}

$$E_n = \alpha \left[(n - 1/2) \hbar \sqrt{\frac{\pi}{2m\alpha}} \frac{\Gamma(\frac{1}{v} + \frac{3}{2})}{\Gamma(\frac{1}{v} + 1)} \right]^{\frac{2v}{v+2}} \quad [53.8]$$

مساله ۱۲.۸** از تقریب WKB برای یافتن انرژی حالت پایه پتانسیل مساله ۵۱.۲ استفاده

کنید. آنرا با جواب دقیق مقایسه کنید.

پاسخ:

$$-[(9/8) - (1/\sqrt{2})] \hbar^2 a^2 / m$$

مساله ۱۳.۸ می‌توانیم برای پتانسیلهایی که دارای تقارن کروی هستند تقریب WKB برای

معادله شعاعی (رابطه ۳۷.۴) را به کار بگیریم. در حالت $l = 0$ ، استفاده از رابطه ۴۷.۸ به شکل

زیر منطقی است: ^{۱۵}

$$\int_0^{r_0} p(r) dr = (n - 1/4) \pi \hbar \quad [54.8]$$

که در آن r_0 نقطه عطف است (در عمل، آنرا مانند یک دیوار بینهایت در $r = 0$ می‌گیریم).

این فرمول را برای برآورد انرژی‌های مجاز ذره‌ای در پتانسیل لگاریتمی زیر به کار بگیرید

$$V(r) = V_0 \ln(r/a)$$

^{۱۴} مانند همیشه، نتیجه WKB در نظام شبه کلاسیکی (با n بزرگ) دقیقترین پاسخ را بدست می‌دهد. به خصوص،

رابطه ۵۳.۸ برای حالت پایه ($n = 1$) اصلاً خوب نیست. مقاله W. N. Mei در مجله *Am. J. Phys.* 66, 541 (1998) را ملاحظه کنید.

^{۱۵} کاربری تقریب WKB برای معادله شعاعی کمی مشکلات پیچیده و ظریف به همراه می‌آورد که اینجا نمی‌خواهم به آنها بپردازم. مقاله کلاسیک در اینباره توسط R. Langer در مجله *Phys. Rev.* 51, 669 (1937) به چاپ رسیده است.

(به ازای مقادیر ثابت برای V_0 و a). فقط به مورد $l = 0$ پردازید. نشان دهید فاصله میان سطوح مستقل از جرم است. پاسخ جزئی:

$$E_{n+1} - E_n = V_0 \ln \left(\frac{n + 3/4}{n - 1/4} \right)$$

مساله ۱۴.۸** از تقریب WKB به شکل

$$\int_{r_1}^{r_2} p(r) dr = (n - 1/2)\pi\hbar \quad [55.8]$$

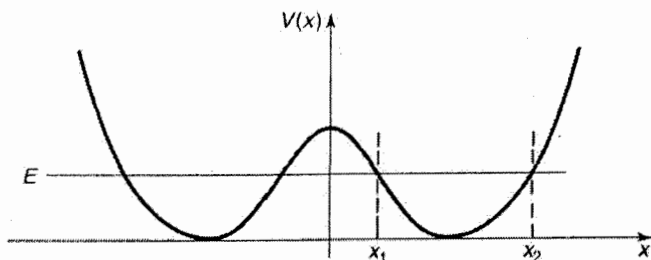
برای برآورد انرژی‌های حالت مقید هیدروژن استفاده کنید. انتگرال زیر می‌تواند سودمند باشد:

$$\int_a^b \frac{1}{x} \sqrt{(x-a)(b-x)} dx = \frac{\pi}{2} (\sqrt{b} - \sqrt{a})^2 \quad [56.8]$$

توجه کنید با اینکار سطوح بور را برای زمانی که $l \gg n$ و $n \gg 1/2$ است بازیابی کرده‌اید. پاسخ:

$$E_{nl} \cong \frac{-13.6 \text{ eV}}{\left[n - (1/2) + \sqrt{l(l+1)} \right]^2} \quad [57.8]$$

مساله ۱۵.۸*** مورد چاه دوگانه متقارن را مانند همانی که در شکل ۱۳.۸ نمایش یافته در نظر بگیرید. در این مورد به حالت‌های مقیدی با $E < V_0$ علاقمندیم.



شکل ۱۳.۸: چاه دوگانه متقارن؛ مساله ۱۵.۸

(الف) توابع موج WKB در محدوده‌های (۱) $x > x_2$ ، (۲) $x_1 < x < x_2$ و (۳) $0 < x < x_1$ را بنویسید. فرمول هموستار مناسب را به x_1 و x_2 بقبولانید (اینکار پیشتر انجام شده، در

معادله ۴۶.۸ برای x_2 ؛ باید مورد x_1 را به دست آورید) تا نشان دهید

$$\psi(x) \cong \begin{cases} \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x |p(x')| dx'} & , \quad (1) \\ \frac{2D}{\sqrt{p(x)}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right] & , \quad (2) \\ \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} \left[2 \cos \theta e^{\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} |p(x')| dx'} + \sin \theta e^{\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x |p(x')| dx'} \right] & , \quad (3) \end{cases}$$

که در آن

$$\theta \equiv \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx \quad [58.8]$$

(ب) از آنجائیکه $V(x)$ متقارن است، تنها لازم است تا توابع موج زوج (+) و فرد (-) را در نظر بگیریم. در حالت اول $\psi'(0) = 0$ است و در حالت دوم $\psi(0) = 0$. نشان دهید این نکته ما را به شرط کوانتش زیر می‌رساند:

$$\tan \theta = \pm 2e^{\phi} \quad [59.8]$$

که در آن

$$\phi \equiv \frac{1}{\hbar} \int_{-x_1}^{x_1} |p(x')| dx' \quad [60.8]$$

رابطه ۵۹.۸ انرژی‌های مجاز (تقریبی) را تعیین می‌کند (دقت کنید که E به x_1 و x_2 داخل می‌شود، از اینرو θ و ϕ هر دو توابعی از E هستند).

(پ) به طور اخص به سدی مرکزی با ارتفاع و یا پهنای زیاد علاقمندیم که در آن حالت ϕ بزرگ بوده و e^{ϕ} فوق‌العاده بزرگ است. پس رابطه ۵۹.۸ حاکی از آن است که θ باید بسیار نزدیک به مضرب نیم صحیحی از π باشد. با در نظر داشتن این نکته، بنویسید $\theta = (n + 1/2)\pi + \epsilon$ که در آن $|\epsilon| \ll 1$ است و نشان دهید شرط کوانتش می‌شود.

$$\theta \cong \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi \mp \frac{1}{2}e^{-\phi} \quad [61.8]$$

(ت) فرض کنید هر چاه یک سهموی است^{۱۶}:

$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega^2(x+a)^2, & x < a \\ \frac{1}{2}m\omega^2(x-a)^2, & x > a \end{cases} \quad [۶۲.۸]$$

این پتانسیل را رسم کرده، θ را بدست آورده (رابطه ۵۸.۸) و نشان دهید که

$$E_n^{\pm} \cong \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \mp \frac{\hbar\omega}{2\pi} e^{-\phi} \quad [۶۳.۸]$$

توضیح: چنانچه سد مرکزی غیر قابل نفوذ باشد ($\phi \rightarrow \infty$)، به سادگی دو نوسانگر هماهنگ از هم باز شده و غیر متصل داریم که انرژی‌های $E_n = (n + 1/2)\omega\hbar$ در آن دارای تبهگنی دوگانه خواهند بود، زیرا ذره می‌تواند در سمت چپ یا راست چاه باشد. وقتی سد متناهی می‌شود، با قرار دادن این دو چاه در «تماس» با یکدیگر، تبهگنی از بین می‌رود. حالت‌های زوج (ψ_n^+) کمی انرژی‌شان کاهش یافته و حالت‌های فرد (ψ_n^-) کمی انرژی‌شان افزایش می‌یابد.

(ث) فرض کنید ذره از سمت راست چاه آغاز می‌کند - یا، به بیان دقیقتر، در حالتی به شکل

زیر

$$\square(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_n^+ + \psi_n^-)$$

که، با این فرض که فازها به طور «طبیعی» برگزیده می‌شوند، در چاه سمت راستی متمرکز خواهد بود. نشان دهید ذره مذکور بین چاه‌ها نوسانی می‌کند که دوره تناوب آن عبارت است از

$$\tau = \frac{2\pi^2}{\omega} e^{\phi} \quad [۶۴.۸]$$

^{۱۶} حتی اگر $V(x)$ در هر چاه دقیقا هم سهموی نباشد، محاسبه θ و در نتیجه جواب (رابطه ۶۳.۸) به مفهومی که در

بخش ۳.۲ آمد و با در نظر گرفتن \hbar/m و \hbar/m در نظر گرفتن \hbar/m تقریبا صحیح خواهد بود.

(ج) ϕ را برای پتانسیل ویژه بخش (ت) محاسبه کرده و نشان دهید که به ازای $V(0) \gg E$ داریم $\phi \sim m\omega a^2 / \hbar$.

مساله ۱۶.۸ تونل زنی در اثر اشتراک. وقتی یک میدان الکتریکی خارجی را برقرار می کنید، الکترون اتم در عمل می تواند به بیرون تونل زده و اتم را یونیزه کند. سوال: آیا احتمال دارد چنین اتفاقی در آزمایش اثر اشتراک رخ دهد؟ می توانیم این احتمال را با استفاده از یک مدل یک بعدی ابتدایی به شرح زیر تخمین بزنیم. ذره ای را در یک چاه مربعی متناهی بسیار عمیق (بخش ۶.۲) تصور کنید.

(الف) انرژی حالت پایه که از انتهای چاه اندازه گیری می شود چقدر است؟ اینطور فرض کنید که $V_0 \gg \hbar^2/ma^2$ است. راهنمایی: این دقیقاً انرژی حالت پایه چاه مربعی نامتناهی (به طول $2a$) است.

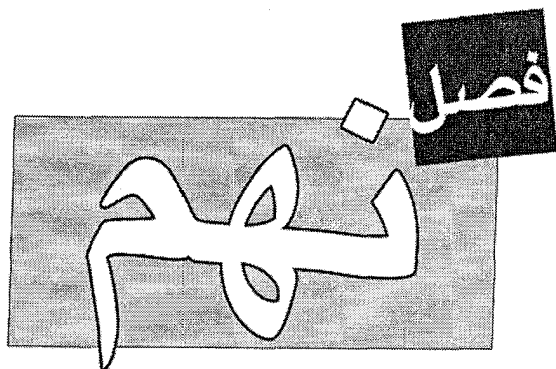
(ب) حال اختلال $H' = -\alpha x$ را وارد کنید (برای الکترونی در میدان الکتریکی $E = -E_{\text{ext}}\hat{x}$ باید داشته باشیم $\alpha = eE_{\text{ext}}$). فرض را بر این بگذارید که اختلال به نسبت ضعیف است ($\alpha a \ll \hbar^2/ma^2$). پتانسیل کل را رسم کرده و دقت کنید که اکنون ذره می تواند به بیرون در جهت مثبت x تونل بزند.

(پ) فاکتور تونل زنی γ (رابطه ۲۲.۸) را محاسبه کرده و زمانی که به طول می انجامد تا ذره فرار کند (رابطه ۲۸.۸) را تخمین بزنید. پاسخ:

$$\gamma = \sqrt{8mV_0^3/3\alpha\hbar} \quad \text{و} \quad \tau = (8ma^2/\pi\hbar)e^{2\gamma}$$

(ت) چند عدد معقول را در نتیجه قسمت قبل بگذارید: $V_0 = 20 \text{ eV}$ (انرژی بستگی نوعی یک الکترون بیرونی)، $a = 10^{-10} \text{ m}$ (شعاع اتمی نوعی)، $E_{\text{خارجی}} = 7 \times 10^6 \text{ V/m}$ (میدان قوی آزمایشگاهی)، e و m هم بار و جرم الکترون باشند. τ را محاسبه کرده و آنرا با سن عالم مقایسه کنید.

مساله ۱۷.۸ برای یک قوطی نوشیدنی در دمای اتاق تقریباً چقدر طول می‌کشد تا در نتیجه تونل‌زنی کوانتومی به طور خودبخود واژگون شود؟ راهنمایی: قوطی را استوانه یکنواختی به جرم m ، شعاع R و طول h بگیرید. از آنجا که قوطی واژگون می‌شود، x را ارتفاع مرکز بالای موقعیت تعادل ($h/2$) بگیرید. انرژی پتانسیل برابر است با mgx ، برای همین وقتی x به مقدار بحرانی $x_0 = \sqrt{R^2 + (h/2)^2} - h/2$ می‌رسد قوطی واژگون می‌شود. احتمال تونل‌زنی (رابطه ۲۲.۸) را به ازای $E = 0$ محاسبه کنید. از رابطه ۲۸.۸ با در نظر گرفتن انرژی گرمایی $(1/2)k_B T = (1/2)mv^2$ برای تخمین زدن سرعت استفاده کنید. اعداد معقولی را در پاسخ بدست آمده قرار داده و جواب نهایی‌تان را برحسب سال ارائه دهید.



نظريه اختلال وابسته به زمان

تا این مرحله، در عمل هر کاری انجام دادیم متعلق به گزاره‌ای بود که می‌توان آنرا استاتیک کوانتومی نامید، موضوعی که در آن تابع انرژی پتانسیل مستقل از زمان است: $V(r, t) = V(r)$. در این حالت معادله شرودینگر (وابسته به زمان)،

$$H\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

را می‌توان به روش تفکیک متغیرها حل کرد:

$$\Psi(r, t) = \psi(r)e^{-iEt/\hbar}$$

که در آن $\psi(r)$ در معادله شرودینگر مستقل از زمان صدق می‌کند،

$$H\psi = E\psi$$

از آنجا که وابستگی زمانی جواب‌های تفکیک‌پذیر در عامل نمایی ($e^{-iEt/\hbar}$) لحاظ می‌شود، که با درست کردن کمیت مرتبط فیزیکی $|\Psi|^2$ حذف می‌گردد، تمامی احتمالات و مقادیر چشمداشتی در زمان ثابت هستند. با شکل دادن ترکیبات خطی این حالت‌های مانا توابع موجی با بستگی زمانی جالب توجه‌تر بدست می‌آوریم، اما حتی در آنصورت هم مقادیر ممکن انرژی و احتمالات مربوط به آنها ثابت هستند.

اگر نیاز باشد که گذارهای میان یک سطح انرژی و سطح دیگر (که گاهی آنها را پرش‌های کوانتومی هم می‌نامند) را جایز بشماریم، می‌بایست یک پتانسیل وابسته به زمان (دینامیک کوانتومی) را معرفی کنیم. تعداد انگشت شماری مساله با ارزش قابل حل در دینامیک کوانتومی وجود دارد. با این حال، چنانچه بخش وابسته به زمان هامیلتونی در مقایسه با بخش مستقل از زمان آن کوچک باشد، می‌توان آنرا نوعی اختلال در نظر گرفت. هدفم در این فصل توسعه نظریه اختلال وابسته به زمان و مطالعه مهم‌ترین کاربرد آن است: گسیل و جذب تابش توسط یک اتم.

۱.۹ سامانه‌های دو سطحی

در آغاز، بیائید فرض کنیم سامانه (مختل نشده) تنها دو حالت دارد، ψ_a و ψ_b . آنها ویژه

$$H^0\psi_a = E_a\psi_a \quad \text{و} \quad H^0\psi_b = E_b\psi_b \quad [۱.۹]$$

این ویژه حالت‌ها همچنین راست هنجار هم هستند:

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij} (i, j = a, b) \quad [۲.۹]$$

هر حالتی را می‌توان به صورت ترکیبی خطی از آنها نوشت؛ به ویژه آنکه،

$$\Psi(0) = c_a\psi_a + c_b\psi_b \quad [۳.۹]$$

حالت‌های ψ_a و ψ_b ممکن است توابع موج فضای مکان، اسپینور یا هر چیز عجیب و غریب‌تر دیگری باشند - اهمیتی ندارد. آنچه در این قسمت به آن توجه داریم وابستگی زمانی است، از اینرو وقتی می‌نویسم $\Psi(t)$ ، خیلی ساده منظورم حالت سامانه در زمان t است. در غیاب هر نوع اختلالی، هر مولفه با عامل نمایی مشخصه خودش متحول می‌شود:

$$\Psi(t) = c_a\psi_a e^{-iE_a t/\hbar} + c_b\psi_b e^{-iE_b t/\hbar} \quad [۴.۹]$$

می‌گوئیم $|c|^2$ «احتمال آن است که ذره در حالت ψ_a قرار داشته باشد» - که از آن طریق دقیقاً منظورمان احتمالی است که یک اندازه‌گیری از انرژی مقدار E_a را بدست دهد. بهنجارش Ψ طبعاً مستلزم آن است که

$$|c_a|^2 + |c_b|^2 = 1 \quad [۵.۹]$$

۱.۱.۹ سامانه مختل شده

اکنون فرض کنید یک اختلال وابسته به زمان $H'(t)$ را برقرار می‌کنیم. از آنجا که ψ_a و ψ_b مجموعه کاملی را تشکیل می‌دهند، تابع موج $\Psi(t)$ را کماکان می‌توان به صورت ترکیبی خطی از آنها نوشت. تنها تفاوت در این است که c_a و c_b توابعی از t محسوب می‌شوند:

$$\Psi(t) = c_a(t)\psi_a e^{-iE_a t/\hbar} + c_b(t)\psi_b e^{-iE_b t/\hbar} \quad [۶.۹]$$

(می‌توانستیم عوامل نمایی را در $c_a(t)$ و $c_b(t)$ جذب کنیم، چرا که برخی افراد اینطور ترجیح می‌دهند، اما به نظرم نمایان نگاه داشتن آن قسمت از وابستگی زمانی که حتی بدون وجود اختلال

نیز حضور خواهد داشت زیباتر است). کل مساله عبارت است از تعیین c_a و c_b به صورت توابعی از زمان. برای مثال، چنانچه ذره ابتدا در حالت ψ_a باشد ($c_a(0) = 1$ و $c_b(0) = 0$) و کمی بعد در لحظه t_1 دریابیم که $c_a(t_1) = 0$ و $c_b(t_1) = 1$ است، اینطور می‌گوییم که سامانه دستخوش گذاری از ψ_a به ψ_b شده است.

$c_a(t)$ و $c_b(t)$ را با واخواهی این مهم که $\Psi(t)$ در معادله شرودینگر وابسته به زمان صدق کند بدست می‌آوریم،

$$H\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad \text{که در آن } H = H_0 + H'(t) \quad [۷.۹]$$

از روابط ۶.۹ و ۷.۹ درمی‌یابیم که

$$\begin{aligned} c_a[H^0\psi_a]e^{-iE_at/\hbar} + c_b[H^0\psi_b]e^{-iE_bt/\hbar} + c_a[H'\psi_a]e^{-iE_at/\hbar} \\ + c_b[H'\psi_b]e^{-iE_bt/\hbar} = i\hbar[\dot{c}_a\psi_a e^{-iE_at/\hbar} + \dot{c}_b\psi_b e^{-iE_bt/\hbar} \\ + c_a\psi_a\left(-\frac{iE_a}{\hbar}\right)e^{-iE_at/\hbar} + c_b\psi_b\left(-\frac{iE_b}{\hbar}\right)e^{-iE_bt/\hbar}] \end{aligned}$$

از منظر رابطه ۱.۹، دو جمله نخست سمت چپ، دو جمله آخر سمت راست را حذف می‌کنند و در نتیجه

$$c_a[H'\psi_a]e^{-iE_at/\hbar} + c_b[H'\psi_b]e^{-iE_bt/\hbar} = i\hbar[\dot{c}_a\psi_a e^{-iE_at/\hbar} + \dot{c}_b\psi_b e^{-iE_bt/\hbar}] \quad [۸.۹]$$

برای جدا کردن \dot{c}_a ، از همان ترفند همیشگی استفاده می‌کنیم: ضرب داخلی آن با ψ_a را در نظر گرفته و از شرط تعامد ψ_a و ψ_b (رابطه ۲.۹) بهره برداری کنید:

$$c_a\langle\psi_a|H'|\psi_a\rangle e^{-iE_at/\hbar} + c_b\langle\psi_a|H'|\psi_b\rangle e^{-iE_bt/\hbar} = i\hbar\dot{c}_a e^{-iE_at/\hbar}$$

برای اختصار، رابطه زیر را تعریف می‌کنیم،

$$H'_{ij} \equiv \langle\psi_i|H'|\psi_j\rangle \quad [۹.۹]$$

توجه کنید که هامیلتونی بودن H' به $H'_{ji} = (H'_{ij})^*$ می‌انجامد. با ضرب کردن کل رابطه در $-(i/\hbar)e^{-iE_at/\hbar}$ نتیجه می‌گیریم،

$$\dot{c}_a = -\frac{i}{\hbar} [c_a H'_{aa} + c_b H'_{ab} e^{-i(E_b - E_a)t/\hbar}] \quad [۱۰.۹]$$

به طور مشابه، ضرب داخلی در ψ_b ضریب \dot{c}_b را حذف می‌کند:

$$c_a \langle \psi_b | H' | \psi_a \rangle e^{-iE_a t/\hbar} + c_b \langle \psi_b | H' | \psi_b \rangle e^{-iE_b t/\hbar} = i\hbar \dot{c}_b e^{-iE_b t/\hbar}$$

و در نتیجه

$$\dot{c}_b = -\frac{i}{\hbar} [c_b H'_{bb} + c_a H'_{ba} e^{-i(E_b - E_a)t/\hbar}] \quad [۱۱.۹]$$

رابطه‌های ۱۰.۹ و ۱۱.۹ را مشخص می‌نمایند؛ اگر آنها را یکجا در نظر بگیریم، کاملاً با معادله شرودینگر (وابسته به زمان) برای یک سامانه دو سطحی معادل هستند. به طور نوعی، مولفه‌های ماتریس قطری H' از میان می‌روند (مساله ۴.۹ مربوط به حالت کلی‌تری که در آن جمله‌های قطری صفر نیستند را ببینید):

$$H'_{aa} = H'_{bb} = 0 \quad [۱۲.۹]$$

روابط به صورت زیر ساده می‌شوند:

$$\begin{aligned} \dot{c}_a &= -\frac{i}{\hbar} H'_{ab} e^{-i\omega_0 t} c_b \\ \dot{c}_b &= -\frac{i}{\hbar} H'_{ba} e^{-i\omega_0 t} c_a \end{aligned}$$

[۱۳.۹]

که در آن

$$\omega_0 \equiv \frac{E_a - E_b}{\hbar} \quad [۱۴.۹]$$

(فرض را بر این می‌گذارم که $E_b > E_a$ است و لذا $\omega_0 > 0$ است).

مساله ۱.۹* یک اتم هیدروژن را درون میدان الکتریکی (وابسته به زمان) $E = E(t)\hat{k}$ قرار می‌دهیم. تمام چهار مولفه ماتریس H'_{ij} مربوط به اختلال $H' = -eEz$ مابین حالت پایه ($n = 1$) و اولین حالت‌های برانگیخته (با تبهگنی چهار گانه) ($n = 2$) را محاسبه کنید. همچنین نشان دهید که $H'_{ii} = 0$ ، برای تمام پنج حالت. توجه: چنانچه در این قسمت از فرد بودن نسبت به z استفاده کنید، تنها یک انتگرال برای حل کردن خواهید داشت. در نتیجه فقط یکی از حالت‌های $n = 2$ و در نتیجه توابع سامانه به عنوان یک پیکربندی دو سطحی از طریق اختلالی با این شکل از روی حالت پایه «قابل دستیابی» هستند - می‌توان از فرض گذارهای صورت گرفته به حالت‌های برانگیخته بالاتر صرف نظر کرد.

مساله ۲.۹* رابطه ۱۳.۹ را برای مورد یک اختلال مستقل از زمان با این فرض که $c_a(0) = 1$ و $c_b(0) = 0$ باشند حل کنید. بررسی کنید آیا $|c_a(t)|^2 + |c_b(t)|^2 = 1$ است. توضیح: واضح است که این سامانه مابین « ψ_a ناب» و «یک ψ_b نوسان می‌کند. آیا این با تصریح اکید من نسبت به اینکه هیچ گذاری در مورد اختلالات مستقل از زمان رخ نمی‌دهد در تضاد نیست؟ خیر، اما دلیل آن بسیار پیچیده و ظریف است: در این حالت ψ_a و ویژه حالت‌های هامیلتونی نبوده و هرگز هم نبوده‌اند - اندازه‌گیری انرژی هرگز مقدار E_a یا E_b را بدست نخواهد داد. در نظریه اختلال وابسته به زمان به منظور آزمودن سامانه، به طور نوعی اینطور در نظر می‌گیریم که اختلال برای مدتی برقرار بوده و سپس دوباره قطع می‌شود. در آغاز و در انتها، ψ_a و ψ_b ویژه حالت‌های هامیلتونی دقیق هستند و تنها در این متن است که بیان اینکه سامانه از یکی به دیگری دستخوش یک گذار شده معنی دارد. پس در مورد مساله حاضر، اینطور فرض کنید که اختلال در لحظه $t = 0$ اعمال شده و دوباره در لحظه t قطع می‌شود - این کار تاثیری روی محاسبات ندارد، اما به این ترتیب تعبیر و توضیح منطقی‌تری از نتیجه منظور می‌گردد.

مساله ۳.۹** فرض کنید اختلال به شکل یک تابع دلتا (در زمان) باشد:

$$H' = U\delta(t)$$

اینطور فرض کنید که $U_{aa} = U_{bb} = 0$ ، است و بگذارید $U_{ab} = U_{ba}^* \equiv \alpha$ باشد. اگر $c_a(\infty) = 1$ و $c_b(-\infty) = 0$ باشند، $c_a(t)$ و $c_b(t)$ را بدست آورده و بررسی کنید آیا $|c_a(t)|^2 + |c_b(t)|^2 = 1$ است. احتمال $(p_{a \rightarrow b})$ آنکه یک گذار رخ دهد چقدر است؟ راهنمایی: می‌توانید تابع دلتا را حد دنباله‌ای از مستطیل‌ها بدانید. پاسخ:

$$p_{a \rightarrow b} = \sin^2(|\alpha|/\hbar)$$

۲.۱.۹ نظریه اختلال وابسته به زمان

تا اینجا، همه چیز دقیق و صحیح است: هیچ پیش فرضی درباره اندازه اختلال نداشته‌ایم. با این حال چنانچه H' «کوچک» باشد، می‌توان رابطه ۱۳.۹ را از طریق فرایند تقریب‌های متوالی مانند زیر حل کرد. فرض کنید ذره ابتدا در حالت پائین‌تر باشد:

$$c_a(0) = 1, \quad c_b(0) = 0 \quad [15.9]$$

اگر به هیچ وجه اختلالی در کار نباشد، آنها تا ابد به همین شکل باقی می‌مانند:

مرتبه صفرم:

$$c_a^{(0)}(t) = 1, \quad c_b^{(0)}(t) = 0 \quad [16.9]$$

(از شاخص بالا در پیرانتزها برای مشخص کردن تقریب استفاده می‌کنم).

برای محاسبه تقریب مرتبه اول، این مقادیر را در سمت راست رابطه ۱۳.۹ قرار می‌دهیم:

$$\frac{dc_a^{(1)}}{dt} = 0 \Rightarrow c_a^{(1)}(t) = 1 \quad [17.9]$$

مرتبه اول:

$$\frac{dc_b^{(1)}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} H'_{ba} e^{i\omega_0 t} \Rightarrow c_b^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t H'_{ba}(t') e^{i\omega_0 t'} dt'$$

اکنون عبارات فوق را در سمت راست قرار می‌دهیم تا تقریب مرتبه دوم بدست آید:

مرتبه دوم:

$$\frac{dc_a^{(2)}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} H'_{ab} e^{-i\omega_0 t} \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \int_0^t H'_{ba}(t') e^{i\omega_0 t'} dt' \Rightarrow \quad [18.9]$$

$$c_a^{(2)}(t) = 1 - \frac{1}{\hbar} \int_0^t H'_{ab}(t') e^{-i\omega_0 t'} \left[\int_0^{t'} H'_{ba}(t'') e^{i\omega_0 t''} dt'' \right] dt'$$

در حالیکه c_b بدون تغییر است، $c_b^{(2)}(t) = c_b^{(1)}(t)$ است. (دقت کنید که در نماد گذاری من، $c_b^{(2)}(t)$ شامل جمله مرتبه صفرم هم می باشد؛ تصحیح مرتبه دوم یک جمله انتگرالی تنها خواهد بود.)

اصولا می توانستیم این داستان را تا بینهایت با گذاردن تقریب مرتبه n ام در سمت راست معادله ۱۳.۹ ادامه داده و جواب مرتبه $(n+1)$ ام را بدست آوریم. توجه داشته باشید که c_a در هر مرتبه زوج مقدار کمی تغییر می کند و c_b در هر مرتبه فرد.^۱ ضمناً، وجود خطا در تقریب مرتبه اول آشکار است چرا که $|c_a^{(1)}(t)|^2 + |c_b^{(1)}(t)|^2 \neq 1$ است (طبعاً ضریب دقیق و صحیح باید از رابطه ۵.۹ تبعیت کند). با این حال، $|c_a^{(1)}(t)|^2 + |c_b^{(1)}(t)|^2$ در مرتبه اول در H' برابر با ۱ است که همه آنجیزی است که می توانیم از یک تقریب مرتبه اول انتظار داشته باشیم. همین روال برای مراتب بالاتر هم وجود دارد.

مساله ۴.۹** فرض کنید اینطور نمی پندارید که $H'_{aa} = H'_{bb} = 0$.

(الف) $c_a(t)$ و $c_b(t)$ را در نظریه اختلال مرتبه اول برای حالتی بدست آورید که در آن $c_a(0) = 1$ و $c_b(0) = 0$ باشند. نشان دهید برای مرتبه اول در H' داریم $|c_a^{(1)}(t)|^2 + |c_b^{(1)}(t)|^2 = 1$.

(ب) روش مناسبتری برای پرداختن به این مساله وجود دارد. بگذارید

$$d_a \equiv e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t H'_{aa}(t') dt'} c_a, \quad d_b \equiv e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t H'_{bb}(t') dt'} c_b \quad [۱۹.۹]$$

نشان دهید

$$\dot{d}_a = -\frac{i}{\hbar} e^{i\phi} H'_{ab} e^{-i\omega_0 t} d_b; \quad \dot{d}_b = -\frac{i}{\hbar} e^{-i\phi} H'_{ba} e^{i\omega_0 t} d_a \quad [۲۰.۹]$$

^۱ دقت کنید که c_a در هر مرتبه زوج اصلاح می شود و c_b هم در هر مرتبه فرد؛ اگر اختلال شامل جملات قطری باشد یا اگر سامانه ابتدا در ترکیبی خطی از دو حالت اول باشد، این ادعا درست نخواهد بود.

که در آن

$$\phi(t) \equiv \frac{1}{\hbar} \int_0^t [H'_{aa}(t') - H'_{bb}(t')] dt' \quad [21.9]$$

از اینرو روابط مربوط به d_a و d_b از نظر ساختاری با رابطه ۱۳.۹ معادلند (با یک عامل $e^{i\phi}$ اضافی که به H' چسبیده است).

(پ) از روش بخش (ب) برای بدست آوردن $c_a(t)$ و $c_b(t)$ در نظریه اختلال مرتبه اول استفاده کرده و پاسخ خود را با جواب قسمت (الف) مقایسه کنید. ناهمخوانی‌های موجود را توضیح دهید.

مساله ۵.۹* رابطه ۱۳.۹ را تا مرتبه دوم برای اختلال در مساله ۲.۹ حل کنید. پاسخ خود را با جواب دقیق مقایسه کنید.

مساله ۶.۹** $c_a(t)$ و $c_b(t)$ را تا مرتبه دوم برای اختلال مساله ۲.۹ محاسبه کنید. پاسخ خود را با جواب دقیق مقایسه کنید.

۳.۱.۹ اختلال‌های سینوسی

فرض کنید اختلال وابستگی زمانی سینوسی داشته باشد:

$$H'(r, t) = V(r) \cos(\omega t) \quad [22.9]$$

پس

$$H'_{ab} = V_{ab} \cos(\omega t) \quad [23.9]$$

که در آن

$$V_{ab} \equiv \langle \psi_a | V | \psi_b \rangle \quad [24.9]$$

(مانند گذشته، اینطور فرض می‌کنیم که مولفه‌های ماتریس قطری از بین می‌روند، چون این وضعیتی است که تقریباً همیشه در عمل اتفاق می‌افتد). برای مرتبه اول (از حالا به بعد به طور اختصاصی در حوزه مرتبه اول کار می‌کنیم) داریم (رابطه ۱۷.۹)

$$c_b(t) \cong -\frac{i}{\hbar} V_{ba} \int_0^t \cos(\omega t') e^{i\omega_0 t'} dt' = -\frac{iV_{ba}}{2\hbar} \int_0^t [e^{i(\omega_0+\omega)t'} + e^{i(\omega_0-\omega)t'}] dt'$$

$$= -\frac{V_{ba}}{2\hbar} \left[\frac{e^{i(\omega_0+\omega)t} - 1}{\omega_0 + \omega} + \frac{e^{i(\omega_0-\omega)t} - 1}{\omega_0 - \omega} \right] \quad [25.9]$$

پاسخ این است، با این حال کار کردن با آن کمی دست و پا گیر و سخت است. اگر توجه‌مان را به استخراج فرکانس‌هایی (ω) محدود کنیم که به فرکانس گذار (ω_0) بسیار نزدیک باشند اوضاع ساده‌تر می‌شود، از اینرو جمله دوم در براکت‌ها چیره می‌شود: به ویژه، فرض می‌کنیم

$$\omega_0 + \omega \gg |\omega_0 - \omega| \quad [26.9]$$

این محدودیت زیادی نیست، چون احتمال بسیار کمی وجود دارد که اختلال‌های مربوط به سایر فرکانس‌ها به هر شکل مسبب بروز یک گذار شوند.^۲ با حذف جمله اول، داریم

$$c_b(t) \cong -\frac{V_{ba}}{2\hbar} \frac{e^{i(\omega_0-\omega)t/2}}{\omega_0 - \omega} [e^{i(\omega_0-\omega)t/2} - e^{-i(\omega_0-\omega)t/2}]$$

$$= -i \frac{V_{ab}}{\hbar} \frac{\sin[(\omega_0 - \omega)t/2]}{\omega_0 - \omega} e^{i(\omega_0-\omega)t/2} \quad [27.9]$$

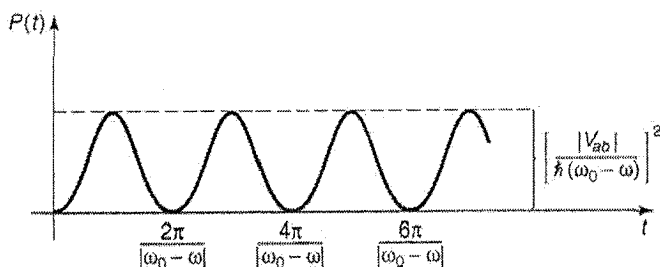
احتمال گذار - احتمال آنکه ذره‌ای که از حالت ψ_a آغاز کرده در لحظه t در حالت ψ_b یافت شود - عبارت است از

$$P_{a \rightarrow b} = |c_a(t)|^2 \cong \frac{|V_{ab}|^2 \sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{\hbar^2 (\omega_0 - \omega)^2} \quad [28.9]$$

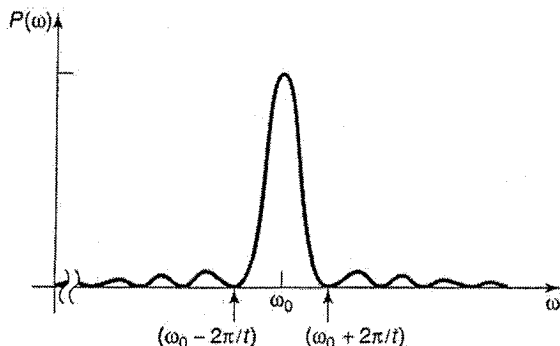
^۲ در بخش‌هایی که در ادامه می‌آیند این نظریه را در مورد نور هم به کار خواهیم برد که برای آن $10^{14} \text{ Hz} \sim \omega$ است، به این ترتیب منجر در هر دو جمله بسیار بزرگ می‌شود. **snapsellfile.ir** (برای دومی).

شایان توجه‌ترین خصوصیت این نتیجه آن است که به عنوان تابعی از زمان، احتمال گذار به طور سینوسی نوسان می‌کند (شکل ۱.۹). پس از رسیدن به مقدار بیشینه $|V_{ab}|^2/\hbar^2(\omega_0 - \omega)^2$ که لزوماً از ۱ کوچکتر است چون در غیر اینصورت فرض اینکه اختلال «کوچک» است دیگر پذیرفتنی نخواهد بود - دوباره به صفر بازمی‌گردد! در زمانهای $t_n = 2\pi n/|\omega_0 - \omega|$ که در آن $n = 1, 2, 3, \dots$ است، ذره به طور حتم به حالت پایین‌تر بازمی‌گردد. اگر بخواهید احتمال‌های ایجاد و برانگیختن یک گذار را بیشینه کنید، نباید اختلال را برای مدت زمان زیادی برقرار نگاه دارید: بهتر است آنرا پس از مدت زمان $\pi/|\omega_0 - \omega|$ قطع کرده و امیدوار باشید سامانه را در حالت بالاتر «گیر بیندازید». در مساله ۷.۹ نشان داده شده است که این «واگردانی» به سبب نظریه اختلال نیست - در پاسخ دقیق هم رخ می‌دهد، هر چند فرکانس واگردانی قدری اصلاح می‌شود.

همانطور که پیشتر ذکر کردم، احتمال یک گذار زمانی که فرکانس عامل به «فرکانس طبیعی» ω_0 بسیار نزدیک باشد، دارای بیشترین مقدار خواهد بود. این مساله در شکل ۲.۹ نمایش یافته که در آن $P_{a \rightarrow b}$ به صورت تابعی از ω رسم شده است. قله، ارتفاعی برابر با $(|V_{ab}|t/2\hbar)^2$ و پهنایی به اندازه $4\pi/t$ دارد؛ آشکار است که با گذشت زمان بالاتر رفته و نازکتر می‌شود. (به وضوح پیداست که مقدار بیشینه بدون هیچ محدودیتی افزایش می‌یابد. با این حال، پیش فرض اختلال پیش از آنکه به ۱ نزدیک شود از بین می‌رود، از اینرو می‌توانیم این جواب را تنها به ازای t نسبتاً کوچک بپذیریم. در مساله ۷.۹ خواهید دید که جواب دقیق و صحیح هرگز از ۱ فراتر نمی‌رود.



شکل ۱.۹: احتمال گذار به صورت تابعی از زمان، برای یک اختلال سینوسی (رابطه ۲۸.۹).



شکل ۲.۹: احتمال گذار به صورت تابعی از فرکانس عامل (رابطه ۲۸.۹).

مساله ۷.۹** جمله اول در رابطه ۲۵.۹ از بخش $e^{i\omega t}/2$ عبارت $\cos(\omega t)$ می‌آید و جمله دوم آن هم از $e^{-i\omega t}/2$. بدین ترتیب حذف جمله اول به طور صوری معادل است با نوشتن $H' = (V/2)e^{-i\omega t}$ که بیانگر آن است که

$$H'_{ba} = \frac{V_{ba}}{2} e^{-i\omega t} \quad , \quad H'_{ab} = \frac{V_{ba}}{2} e^{i\omega t} \quad [۲۹.۹]$$

(عبارت دوم برای هرمیتی کردن ماتریس هامیلتونی مورد نیاز است - یا، اگر اینطور ترجیح می‌دهید، برای شناختن جمله بارز در فرمولی که مشابه رابطه ۲۵.۹ برای $c_a(t)$ است). رابی دریافت چنانچه این به اصطلاح تقریب موج چرخان در آغاز محاسبه انجام شود، رابطه ۱۳.۹ را می‌توان به طور دقیق حل کرد به طوریکه هیچ نیازی به نظریه اختلال و نیز هیچ فرضی درباره توان میدان نخواهد بود.

(الف) رابطه ۱۳.۹ را با استفاده از تقریب موجی چرخان (رابطه ۲۹.۹) به ازای شرایط اولیه معمول حل کنید: $c_a(0) = 1$ و $c_b(0) = 0$. جواب‌ها $c_a(t)$ و $c_b(t)$ را برحسب فرکانس واگردانی رابی بیان کنید.

$$\omega_r \equiv \frac{1}{2} \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + (|V_{ab}|/\hbar)^2} \quad [۳۰.۹]$$

(ب) احتمال گذار، $P_{a \rightarrow b}$ ، را تعیین کرده و نشان دهید هرگز از ۱ فراتر نمی‌رود. اطمینان

حاصل کنید که $|c_a(t)|^2 + |c_b(t)|^2 = 1$ است
snap.sellfile.ir

(پ) بررسی کنید آیا $P_{a \rightarrow b}$ زمانی که اختلال «کوچک» باشد به جواب نظریه اختلال (رابطه ۲۸.۹) ساده می شود و دقیقاً بگوئید در این متن کوچکی به عنوان قیدی روی V چه معنایی دارد.

(ت) در چه لحظه ای سامانه نخستین بازگشت خود به حالت پایه را انجام می دهد؟

۲.۹ گسیل و جذب تابش

۱.۲.۹ امواج الکترومغناطیسی

یک موج الکترومغناطیسی (ترجیح می دهیم اینطور بیان کنیم تا بگوئیم «نور» هرچند می تواند ماوراء بنفش، مادون قرمز، مایکرو ویو، اشعه X و غیره باشد؛ اینها تنها در فرکانس با هم اختلاف دارند) تشکیل شده از پس و پیش رفتن میدان های الکتریکی و مغناطیسی نوسانی (و متقابلاً عمود بر هم) (شکل ۳.۹). یک اتم در حضور یک موج نورانی در حال عبور، در درجه اول به مولفه میدان الکتریکی واکنش نشان می دهد. اگر طول موج (در مقایسه با اندازه اتم) بلند باشد، می توانیم از دگرسانی فضایی در میدان صرف نظر کنیم^۳؛ بنابراین اتم ما در معرض یک میدان الکتریکی نوسانی سینوسی قرار دارد

$$E = E_0 \cos(\omega t) \hat{k} \quad [۳۱.۹]$$

(فعلاً اینطور فرض می کنیم که نور تک رنگ بوده و در امتداد محور z قطبیده است). هامیلتونی اختلال از این قرار است^۴

$$H' = -qE_0 z \cos(\omega t) \quad [۳۲.۹]$$

^۳ برای نور مرئی $\lambda \sim 5000 \text{ \AA}$ است در حالیکه قطر اتم در حدود 1 \AA است، از اینرو تقریب مذکور پذیرفتنی است؛ با این حال برای اشعه ایکس مناسب نخواهد بود. مساله ۲۰.۹ اثر دگرسانی فضایی روی میدان را مورد بررسی قرار می دهد.

^۴ انرژی یک بار q در میدان استاتیکی E برابر است با $-q \int E \cdot d\mathbf{r}$. شاید با استفاده از یک فرمول الکترواستاتیکی برای میدانی که آشکارا وابسته به زمان است چندان موافق نباشید. من به طور تلویحی اینطور فرض می کنم که دوره تناوب نوسان در مقایسه با زمانی که به طول می انجامد تا بار به اطراف (درون اتم) حرکت کند کوچک است.

که در آن که در آن q بار الکترون است.^۵ اینطور که پیداست^۶

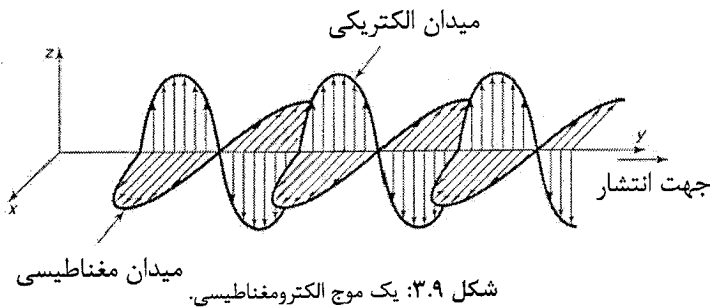
$$H'_{ba} = -pE_0 \cos(\omega t), \text{ که در آن } p \equiv q\langle\psi_b|z|\psi_a\rangle \quad [۳۳.۹]$$

به طور نوعی، ψ تابع فردی از z است؛ در هر دو حالت $z|\psi|^2$ فرد است و انتگرال‌ها هم صفر می‌شوند (مساله ۱.۹ را به عنوان مثال ملاحظه کنید). این پیش فرض همیشگی مان که مولفه‌های قطری ماتریس H' حذف می‌شوند را مجاز می‌کند. بدین ترتیب برهم‌کنش نور با ماده تحت سلطه دقیقاً نوعی اختلال نوسانی است که آنرا در بخش ۳.۱.۹ مطالعه کردیم به طوریکه

$$V_{ba} = -pE_0 \quad [۳۴.۹]$$

۲.۲.۹ جذب، گسیل القایی و گسیل خودبخودی

اگر اتم ابتدا در حالت «پائین‌تر» ψ_a بوده و بعد باریکه نورانی تک رنگ قطبیده‌ای را به آن بتابانید، احتمال یک گذار به حالت «بالا تر» ψ_a از رابطه ۲۸.۹ بدست می‌آید که (از منظر رابطه ۳۴.۹) شکل زیر را به خود می‌گیرد



^۵ مثل همیشه، اینطور در نظر می‌گیریم که هسته سنگین بوده و ساکن است؛ این تابع موج الکترون است که در پی آن هستیم.

^۶ قرار بر این است که حرف p برای شما یادآور گشتاور دوقطبی الکتریکی باشد (که برای آن در الکتروپنایمیک حرف p به طور متداول مورد استفاده قرار می‌گیرد - در این متن آنرا به صورت p ارائه می‌دهم تا آنرا با تکانه اشتباه نگیرید). در حقیقت p عنصر غیر قطری ماتریس مولفه z عملگر تکانه دوقطبی qr است. (آنرا پی - اسکریپت کوچک بخوانید - م)

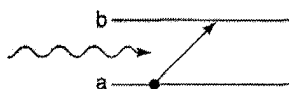
$$P_{a \rightarrow b}(t) = \left(\frac{|\langle b | E_0 \rangle|^2}{\hbar} \right) \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2} \quad [۳۵.۹]$$

در این فرایند اتم انرژی $E_b - E_a = \hbar\omega_0$ را از میدان الکترومغناطیسی جذب می‌کند. می‌گوئیم اتم یک «فوتون جذب شده» دارد (شکل ۴.۹ آ). (همانطور که پیشتر ذکر کردم، واژه «فوتون» به واقع متعلق است به الکترودینامیک کوانتومی (نظریه کوانتومی میدان الکترومغناطیسی)، در حالیکه ما داریم به صورت کلاسیکی به خود میدان می‌پردازیم. اما این نامگذاری مناسب است، تا آن زمان که قرائت دیگری به جز آنچه واقعا هست از آن نداشته باشید).

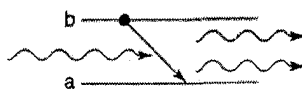
طبیعتاً می‌توانستیم به عقب بازگشته و کل استخراج را برای سامانه‌ای انجام دهیم که از یک حالت بالاتر $c_b(0) = 1$ و $c_a(0) = 0$ آغاز می‌کند. اگر مایلید خودتان اینکار را انجام دهید؛ به نتیجه دقیقاً یکسانی می‌رسید - به جز آنکه اینبار در حال محاسبه $P_{b \rightarrow a} = |c_b(t)|^2$ هستیم، احتمال آنکه گذاری رو به پائین به سطح پائین‌تر انجام شود:

$$p_{b \rightarrow a}(t) = \left(\frac{|\langle b | E_0 \rangle|^2}{\hbar} \right) \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2} \quad [۳۶.۹]$$

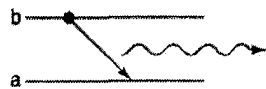
(باید هم چنین نتیجه‌ای حاصل می‌شد - تمام کاری که می‌کنیم جابجا کردن $a \leftrightarrow b$ است که جای $\omega_0 -$ را با ω عوض می‌کند. وقتی به رابطه ۲۵.۹ می‌رسیم جمله اول را نگاه می‌داریم که در آن $\omega_0 + \omega$ در مخرج قرار دارد و بقیه کار مانند گذشته است.) اما وقتی برای اندیشیدن به آن درنگ می‌کنید، این را نتیجه‌ای کاملاً حیرت‌انگیز می‌یابید: اگر ذره در حالت بالا قرار داشته باشد و به آن نور بتابانید، می‌تواند گذاری به حالت پائین‌تر انجام دهد که در حقیقت احتمال چنین گذاری دقیقاً مانند احتمال گذاری رو به بالا از حالت پائین‌تر است. این فرایند که نخستین بار اینشتین آنرا کشف کرد گسیل القایی نامیده می‌شود.



(آ) جذب



(ب) گسیل القایی



(پ) گسیل خودبخودی

شکل ۴.۹: راهپایی وجود دارد که در آنها نور با اتم‌ها برهم‌کنش می‌کند: (آ) جذب، (ب) گسیل القایی،

(پ) گسیل خودبخودی

در مورد گسیل القایی میدان الکترومغناطیسی انرژی $\hbar\omega_0$ را از اتم کسب می‌کند؛ می‌گوییم یک فوتون به داخل رفته و دو فوتون بیرون آمدند - فوتون اصلی که باعث بروز گذار و تولید یک فوتون دیگر از خود گذار شد (شکل ۴.۹ ب). به این ترتیب امکان تقویت مهیا می‌شود، چراکه اگر می‌توانستیم اتم‌ها را در یک بطری در اختیار داشته باشیم به طوریکه همه آنها در حالت بالاتر باشند و بعد آنها را با یک فوتون فرودی تحریک می‌کردم، واکنشی زنجیره‌ای براه می‌افتاد که در آن فوتون اولی 2 تا، این دو تا روی هم 4 تا و همین طور تا آخر فوتون تولید می‌کردند. شمار بسیار زیادی فوتون در اختیار می‌داشتیم که بیرون می‌آمدند در حالیکه همگی بسامد یکسان داشته و کمابیش در یک لحظه هم بوجود می‌آمدند. این بی‌گمان همان اصلی است که در پس لیزر (تقویت نور توسط گسیل القایی تابش) قرار دارد. توجه داشته باشید که این اصل (برای کارکرد لیزر) به منظور بدست آوردن بیشینه اتم‌ها در حالت بالاتر (یک به اصطلاح وارونی جمعیت) ضرورت دارد، زیرا جذب (که به قیمت یک فوتون تمام می‌شود) با گسیل القایی (که یک فوتون تولید می‌کند) در تعارض است؛ چنانچه با آمیزه زوجی از دو حالت آغاز کنید، هیچ تقویتی بدست نمی‌آورید.

سازوکار سومی هم (علاوه بر جذب و گسیل القایی) در بین است که از طریق آن تابش با ماده برهم‌کنش انجام می‌دهد؛ آنرا **گسیل خودبخودی** می‌نامند. اتمی داریم که یک حالت بالاتر قرار داشته و گذاری رو به پایین انجام می‌دهد و ضمن آن یک فوتون آزاد می‌کند اما اینبار هیچ میدان الکترومغناطیسی برای راه‌اندازی فرایند در کار نیست (شکل ۴.۹ پ). این سازوکاری است که به مثابه واپاشی یک حالت برانگیخته اتمی است. در نگاه نخست بدرستی نمی‌دانیم که اصلاً چرا گسیل خودبخودی باید رخ دهد. اگر اتم در حالت مانا قرار دارد (به رغم آنکه یک حالت برانگیخته است) و هیچ اختلال خارجی هم در میان نیست، پس باید برای همیشه در همان حال بماند. تازه، باید هم آن زمان که خبری از هیچ اختلال خارجی نیست اینطور باشد. با این حال، در الکترودینامیک کوانتومی میدان‌ها حتی در حالت پایه هم صفر نیستند - درست مثل نوسانگر هماهنگ (برای مثال) که انرژی حالت پایه‌اش (یعنی $\hbar\omega/2$) صفر نیست. می‌توانید تمام چراغ‌ها را خاموش کرده و اتاق را تا صفر مطلق سرد کنید، اما باز هم تابش الکترومغناطیسی وجود خواهد داشت و همین تابش «نقطه صفر» است که گسیل خودبخودی را کاتالیز می‌کند. وقتی دقیق به آن

می‌نگرید درمی‌یابید که اتفاقاً گسیل مذکور اصلاً گسیلی خودبخودی نیست: آن هم به تمامی گسیلی القایی است. تنها وجه تمایزی که باید به آن اشاره کرد این است که آیا میدانی که القا را موجب می‌شود همانی است که شما اعمال کرده‌اید یا همانی است که خداوند آنجا قرار داده است. به این معنی این دقیقاً عکس فرایند پرتوژی کلاسیک است که در آن فرایند به تمامی خودبخودی بوده و به هیچ وجه چنین گسیل القایی در کار نیست.

الکترودینامیک کوانتومی فراتر از محدوده این کتاب است،^۷ با این حال بحثی دوست داشتنی به واسطه اینشتین وجود دارد که این سه فرایند (جذب، گسیل القایی و گسیل خودبخودی) را به هم مربوط می‌سازد. اینشتین^۸ سازوکار مسبب گسیل خودبخودی (اختلال حالت پایه توسط میدان مغناطیسی) را مشخص نکرد، اما نتایج وی با این همه ما را قادر می‌سازند تا آهنگ گسیل خودبخودی و از آنجا نیمه عمر طبیعی یک حالت اتمی برانگیخته را محاسبه کنیم.^۹ با این حال، پیش از رسیدن به آن مرحله، لازم است واکنش اتم با امواج الکترومغناطیسی غیر تکفام، ناقطبیده و غیر همدوسی را که از جهات گوناگون می‌آیند - مثل آنکه اتم در محدوده‌ای با تابش گرمایی قرار داده شود - بررسی کنیم.

۳.۲.۹ اختلالات ناهمدوس

جگالی انرژی در یک موج الکترومغناطیسی برابر است با^{۱۰}

^۷ برای یک پرداخت مناسب بخصوص، کتاب *The Quantum Theory of Light* اثر Rodney Loudon ویرایش دوم (آکسفورد، انتشارات Clarendon، ۱۹۸۳) را ملاحظه کنید.

^۸ مقاله اینشتین در ۱۹۱۷ به چاپ رسید که خب پیش از معرفی معادله شرودینگر بوده است. پای الکترودینامیک کوانتومی از فرمول جسم سیاه پلانک (رابطه ۱۱۲.۵) وارد بحث می‌شود که تاریخ آن نیز به سال ۱۹۰۰ بازمی‌گردد.

^۹ برای مطالعه یک روش استخراج جایگزین جالب با استفاده از الکترودینامیک کوانتومی «مبتنی بر ابتکار و مهارت فردی» مساله ۹.۹ را ملاحظه کنید.

^{۱۱} برای مثال، کتاب *Introduction to Electrodynamics* اثر D. Griffiths ویرایش سوم (انتشارات Prentice Hall، ۱۹۸۸) بخش ۳.۲.۹ را ملاحظه کنید. به طور کلی، انرژی به ازای واحد حجم در میدان‌های الکترومغناطیسی عبارت است از

$$u = (\epsilon_0/2)E^2 + (1/2\mu_0)B^2$$

$$u = \frac{\epsilon_0}{2} E_0^2 \quad [37.9]$$

که در آن E_0 (مانند گذشته) دامنه میدان الکتریکی است. بنابراین (جای شگفتی ندارد که) احتمال گذار (رابطه ۳۶.۹) با چگالی انرژی میدان متناسب است:

$$P_{b \rightarrow a}(t) = \frac{2u}{\epsilon_0 \hbar^2} |\rho|^2 \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2} \quad [38.9]$$

اما این مربوط است به یک موج تکفام که متشکل است از یک تک بسامد ω . در اکثر کاربردها سامانه را در معرض گستره کاملی از فرکانس‌های امواج الکترومغناطیسی قرار می‌دهند؛ در آن صورت $\rho(\omega) d\omega \rightarrow u$ که در آن $\rho(\omega) d\omega$ چگالی انرژی در بازه فرکانس $d\omega$ است و به این ترتیب است که احتمال گذار خالص شکل یک انتگرال را پیدا می‌کند:^{۱۱}

$$P_{b \rightarrow a}(t) = \frac{2}{\epsilon_0 \hbar^2} |\rho|^2 \int_0^\omega \rho(\omega) \left\{ \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2} \right\} d\omega \quad [39.9]$$

جمله داخل آکولاد در حوالی ω_0 نشانگر یک قله تیز است (شکل ۲.۹)، در حالیکه $\rho(\omega)$ نسبتاً پهن است؛ در آن صورت می‌توانیم براحتی $\rho(\omega)$ را با $\rho(\omega_0)$ جابجا کرده و آنرا از انتگرال خارج کنیم:

$$P_{b \rightarrow a}(t) \cong \frac{2|\rho|^2}{\epsilon_0 \hbar^2} \rho(\omega_0) \int_0^\infty \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2} d\omega \quad [40.9]$$

برای امواج الکترومغناطیسی، سهم‌های الکتریکی و مغناطیسی با هم برابرند، لذا

$$u = \epsilon_0 E^2 = \epsilon_0 E_0^2 \cos^2(\omega t)$$

که میانگین روی یک چرخه کامل $(\epsilon_0/2)E^2$ است، زیرا میانگین \cos^2 (یا \sin^2) برابر با $1/2$ است.

^{۱۱} رابطه ۳۹.۹ اینطور فرض می‌کند که اختلالات در فرکانس‌های مختلف مستقل هستند، به طوریکه احتمال گذار کل حاصل جمعی از احتمالات مستقل است. چنانچه بخش‌های سازنده گوناگون همدوس باشند (یعنی با همبستگی فازی)، بنابراین می‌بایست دامنه‌ها $[c_b(t)]$ نه احتمالات $[|c_b(t)|^2]$ را با هم جمع کنیم که در حاصل جملات

با استفاده از تغییر متغیر $x \equiv (\omega_0 - \omega)t/2$ و گسترش حدود انتگرال تا $x = \pm\infty$ (زیرا تابع تحت انتگرال لزوماً در هر نقطه‌ای خارج از آن صفر است) و استفاده از انتگرال معین

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \pi \quad [۴۱.۹]$$

می‌رسیم به

$$P_{b \rightarrow a} \equiv \frac{\pi |\rho|^2}{\epsilon_0 \hbar^2} \rho(\omega_0) t \quad [۴۲.۹]$$

اینبار احتمال گذار با t متناسب است. ویژگی شگفت‌آور پدیده «واگردانی» یک اختلال تکفام آن زمان که با گستره‌ای از بسامدها به سامانه ضربه می‌زنیم «حذف می‌شود». بخصوص، آهنگ گذار ($R \equiv dP/dt$) اکنون ثابت است:

$$R_{b \rightarrow a} = \frac{\pi}{\epsilon_0 \hbar^2} |\rho|^2 \rho(\omega_0) \quad [۴۳.۹]$$

تا اینجا اینطور فرض کردیم که موج مختل‌کننده در امتداد محور x وارد شده (شکل ۳.۹) و در جهت z قطبیده است. اما در ادامه به موردی توجه خواهیم کرد که در آن اتمی در حمامی از تابش قرار داده می‌شود که از تمام جهات به آن رسیده و تمام قطبش‌های ممکن را نیز در بر دارد؛ انرژی میدان ($\rho(\omega)$) به طور مساوی میان این مدهای متفاوت بخش می‌شود. آنچه به عوض $|\rho|^2$ به آن نیاز داریم میانگین $|\hat{n} \cdot \rho|^2$ است که در آن

$$\rho \equiv q \langle \psi_b | \mathbf{r} | \psi_a \rangle \quad [۴۴.۹]$$

(که رابطه ۳۳.۹ را تعمیم می‌دهد) میانگینی که هم روی قطبش و هم روی جهت‌های ورودی است.

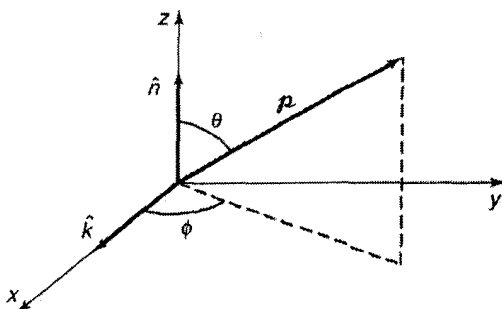
میانگین‌گیری را می‌توان به شکل زیر انجام داد: مختصات کروی را به گونه‌ای انتخاب کنید که جهت انتشار (\hat{k}) در امتداد x ، قطبش (\hat{n}) در امتداد z و بردار ρ زوایای θ و ϕ را تعریف کند

(شکل ۵.۹).^{۱۲} در واقع، p اینجا ثابت است، ما هم روی تمام \hat{k} و \hat{n} هایی میانگین می گیریم که با $\hat{k} \perp \hat{n}$ سازگارند - یعنی روی تمام θ و ϕ ها. اما این به واقع دستگاه مختصات است، نه بردار p ، که در حال تغییر است. پس

$$p \cdot \hat{n} = p \cos \theta \quad [۴۵.۹]$$

و

$$\begin{aligned} |p \cdot \hat{n}|^2_{\text{میانگین}} &= \frac{1}{4\pi} \int |p|^2 \cos^2 \theta \sin \theta \, d\theta d\phi \\ &= \frac{|p|^2}{4\pi} \left(-\frac{\cos^3 \theta}{3} \right) \bigg|_0^\pi (2\pi) = \frac{1}{3} |p|^2 \end{aligned} \quad [۴۷.۹]$$



شکل ۵.۹: محورهای میانگین گیری $|p \cdot \hat{n}|^2$.

^{۱۲} من p را طوری می گیرم انگار حقیقی است، هرچند در کل مختلط است. از آنجا که

$$|p \cdot \hat{n}|^2 = |\text{Re}(p) \cdot \hat{n} + i \text{Im}(p) \cdot \hat{n}|^2 = |\text{Re}(p) \cdot \hat{n}|^2 + |\text{Im}(p) \cdot \hat{n}|^2$$

می توانیم کل محاسبه را برای قسمت های حقیقی و موهومی به طور جداگانه انجام دهیم. در رابطه ۴۷.۹ علامت قدر مطلق خدمتی دو جانبه می کند، از یک طرف بزرگی بردار و از سوی دیگر دامنه مختلط را نشان می دهد:

$$|p|^2 = |p_x|^2 + |p_y|^2 + |p_z|^2$$

نتیجه‌گیری: آهنگ گذار برای گسیل القایی از حالت b به حالت a ، تحت تاثیر نور غیر همدوس و ناقطبیده فرودی از تمام جهات عبارت است از:

$$R_{b \rightarrow a} = \frac{\pi}{3\epsilon_0 \hbar^2} |\mathcal{P}|^2 \rho(\omega_0) \quad [۴۷.۹]$$

که در آن \mathcal{P} مولفه ماتریسی گشتاور دو قطبی الکتریکی میان دو حالت (رابطه ۴۴.۹) بوده و $\rho(\omega_0)$ چگالی انرژی در میدان‌ها به ازای واحد بسامد است که از روی $\omega_0 = (E_b - E_a)/\hbar$ برآورد می‌شود.^{۱۳}

۳.۹ گسیل خودبخودی

۱.۳.۹ ضرائب A و B اینشتین

محفظه‌ای از اتم‌ها را مجسم کنید که تعداد N_a از آنها در حالت پائین‌تر (ψ_a) و تعداد N_b از آنها در حالت بالاتر (ψ_b) قرار دارند. بگذارید A آهنگ گسیل خودبخودی باشد،^{۱۴} به طوریکه تعداد ذراتی که حالت بالاتر را از طریق این فرایند ترک می‌کنند به ازای واحد زمان برابر است با $N_b A$.^{۱۵} آهنگ گذار برای گسیل خودبخودی، همانطور که دیده‌ایم (رابطه ۴۷.۹)، متناسب است با چگالی انرژی میدان الکترومغناطیسی - آنرا $B_{ba} \rho(\omega_0)$ بنامید. تعداد ذراتی که با این سازوکار حالت بالاتر را ترک می‌کنند به ازای واحد زمان $N_b B_{ba} \rho(\omega_0)$ است. آهنگ جذب هم به همین شکل متناسب است با $\rho(\omega_0)$ - آنرا $B_{ab} \rho(\omega_0)$ بنامید؛ بنابراین تعداد ذراتی که به ازای واحد زمان به سطح بالاتر می‌پیوندند $N_a B_{ab} \rho(\omega_0)$ است. پس رویهمرفته،

^{۱۳} این حالت خاصی از قاعده طلایی فرمی برای نظریه اختلال وابسته به زمان است که می‌گوید آهنگ گذار متناسب است با مربع مولفه ماتریس پتانسیل اختلالی و توان اختلال در بسامد گذار.

^{۱۴} به طور معمول از R برای یک آهنگ گذار استفاده کرده‌ام، اما در این متن همه از نمادگذاری اینشتین استفاده می‌کنند.

^{۱۵} اینطور فرض کنید که N_a و N_b بسیار بزرگ هستند، از اینرو می‌توانیم آنها را توابع پیوسته‌ای از زمان گرفته و از نوسانات آماری صرف‌نظر کنیم.

$$\frac{dN_b}{dt} = -N_b A - N_b B_{ba} \rho(\omega_0) + N_a B_{ab} \rho(\omega_0) \quad [۴۸.۹]$$

فرض کنید این اتم‌ها در تعادل گرمایی با میدان فراگیر باشند، به طوریکه تعداد ذرات در هر سطح ثابت باشد. در آنصورت $dN_b/dt = 0$ است و چنین نتیجه می‌شود که

$$\rho(\omega_0) = \frac{A}{(N_a/N_b) B_{ab} - B_{ba}} \quad [۴۹.۹]$$

از سوی دیگر، از مکانیک آماری مقدماتی^{۱۶} می‌دانیم که تعداد ذرات با انرژی E که در دمای T در تعادل حرارتی به سر می‌برند با عامل بولتزمن، $\exp(-E/k_B T)$ ، متناسب است، لذا

$$\frac{N_a}{N_b} = \frac{e^{-E_a/k_B T}}{e^{-E_b/k_B T}} = e^{\hbar\omega_0/k_B T} \quad [۵۰.۹]$$

و در نتیجه

$$\rho(\omega_0) = \frac{A}{e^{\hbar\omega_0/k_B T} B_{ab} - B_{ba}} \quad [۵۱.۹]$$

اما فرمول جسم سیاه پلانک رابطه ۱۱۲.۵ بیانگر این مطلب است که چگالی انرژی تابش حرارتی عبارت است از

$$\rho(\omega) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \quad [۵۲.۹]$$

با مقایسه این دو عبارت، به این نتیجه می‌رسیم که

$$B_{ab} = B_{ba} \quad [۵۳.۹]$$

و نیز

$$A = \frac{\omega_0^3 \hbar}{\pi^2 c^3} B_{ba} \quad [۵۴.۹]$$

^{۱۶} برای مثال، کتاب *Thermal Physics* نوشته Charles Kittel و Herbert Kroemer ویرایش دوم (نیویورک:

رابطه ۵۳.۹ آنچه از پیش می‌دانستیم را تایید می‌کند: اینکه آهنگ گذار برای گسیل القایی مانند آهنگ جذب است. اما این نتیجه در سال ۱۹۱۷ دستاورد حیرت‌انگیزی به شمار می‌رفت - قدر مسلم، اینشتین مجبور شد گسیل القایی را به منظور بازفرآوری فرمول پلانک «ابداع کند». با این وجود، توجه حال حاضر ما روی رابطه ۵۴.۹ است زیرا این رابطه آهنگ گسیل خودبخودی (A) - که همان چیزی است که در پی آن هستیم - را برحسب آهنگ گسیل القایی ($B_{ba}\rho(\omega_0)$) - که آنرا از پیش می‌دانستیم بیان می‌کند. از رابطه ۴۷.۹ اینطور قرائت می‌کنیم که

$$B_{ba} = \frac{\pi}{3\epsilon_0\hbar^2} |\mathcal{P}|^2 \quad [۵۵.۹]$$

و می‌توان چنین نتیجه گرفت که آهنگ گسیل خودبخودی برابر است با

$$A = \frac{\omega_0^3 |\mathcal{P}|^2}{3\pi\epsilon_0\hbar c^3} \quad [۵۶.۹]$$

مساله ۸.۹ گسیل خودبخودی به عنوان سازوکاری برای گذارهای عقبگرد با گسیل القایی در تعارض قرار دارد (منظور آن گسیل القایی است که منبعش تابش پلانک است). نشان دهید در دمای اتاق ($T = 300 \text{ K}$) القای حرارتی برای بسامدهای خیلی پائین‌تر از $5 \times 10^{12} \text{ Hz}$ چیره است درحالی‌که گسیل خودبخودی برای فرکانس‌هایی خیلی بالاتر از $5 \times 10^{12} \text{ Hz}$ چیره است. کدام مکانیزم برای نور مرئی حاکم است؟

مساله ۹.۹ می‌توانید آهنگ گسیل خودبخودی (رابطه ۵۶.۹) را بدون عبور از بیراهه ضرائب A و B اینشتین هم استخراج کنید به شرط آنکه چگالی انرژی حالت پایه میدان الکترومغناطیسی، $\rho_0(\omega)$ ، را بدانید که در آن صورت مساله به سادگی یک گسیل خودبخودی خواهد بود (رابطه ۴۷.۹). انجام درست این کار نیازمند الکتروپنایمیک کوانتومی است، اما اگر آماده پذیرش این نکته هستید که حالت پایه متشکل است از یک پروتون در هر مد، در آن صورت استخراج آن بسیار ساده است:

(الف) رابطه ۱۱۱.۵ را با عبارت $N_{\omega} = d_k$ جابجا کرده و $\rho_0(\omega)$ را نتیجه بگیرید. (از قرار معلوم این رابطه در بسامد بالا کارایی ندارد، در غیر اینصورت انرژی خلاء بینهایت می شد ... که بررسی آن باشد برای وقتی دیگر).

(ب) از نتیجه بدست آمده همراه با رابطه ۴۷.۹ برای بدست آوردن آهنگ گسیل خودبخودی استفاده کنید. حاصل را با رابطه ۵۶.۹ مقایسه کنید.

۲.۳.۹ طول عمر حالت برانگیخته

رابطه ۵۶.۹ جواب اصلی ما است؛ این رابطه آهنگ گذار برای گسیل خودبخودی را بدست می دهد. اکنون فرض کنید یک بطری پر از اتم در اختیار دارید که به شکلی تعداد زیادی اتم را به حالت برانگیخته پمپ می کند. در نتیجه گسیل خودبخودی این تعداد با گذشت زمان کاهش پیدا می کند؛ به ویژه، در باره زمانی dt کسری معادل با $A dt$ از آنها را از دست می دهید:

$$dN_b = -AN_b dt \quad [57.9]$$

(اینطور فرض کنید که هیچ سازوکاری برای دوباره پر کردن انباره وجود ندارد).^{۱۷} با حل رابطه برای N_b درمی یابیم که

$$N_b(t) = N_b(0)e^{-At} \quad [58.9]$$

از قرار معلوم تعداد اتم های باقیمانده در حالت برانگیخته همراه با یک ثابت زمانی به طور نمایی افزایش می یابد

$$\tau = \frac{1}{A} \quad [59.9]$$

این زمان را طول عمر این حالت می نامیم - به بیان فنی، این زمانی است که طول می کشد تا $N_b(t)$ به مقدار $0.368 \approx 1/e$ مقدار اولیه اش برسد.

^{۱۷} این وضعیت با مورد تعادل گرمایی که آنرا در قسمت قبلی در نظر گرفتیم اشتباه نمی شود. اینجا فرض مان بر این است که اتم ها از حالت تعادل خارج شده اند و در حین حرکت آشکاری رو به عقب به سمت سطوح تعادلی شان

از ابتدا فرض من بر این بوده که تنها دو حالت برای این سامانه وجود دارد، اما این تنها برای ساده‌سازی نمادگذاری بود - فرمول گسیل خودبخودی (رابطه ۵۶.۹) آهنگ گذار برای $\psi_a \rightarrow \psi_b$ را بدون توجه به هیچ حالت مجاز دیگری بدست می‌دهد (مساله ۱۵.۹ را ملاحظه کنید). به طور نوعی، یک اتم برانگیخته مدهای واپاشی بسیار مختلفی دارد (یعنی، ψ_b می‌تواند به تعداد زیادی حالت با انرژی پائین‌تر $\psi_{a_1}, \psi_{a_2}, \psi_{a_3}, \dots$ واپاشیده شود). در آنصورت آهنگ‌های گذار با هم جمع می‌شوند و نیمه عمر نهایی برابر است با

$$\tau = \frac{1}{A_1 + A_2 + A_3 + \dots} \quad [۶۰.۹]$$

مثال ۱.۹ فرض کنید بار q به فنی متصل شده و مقید به نوسان در امتداد محور x می‌باشد. اینطور بپذیرید که سامانه از حالت $|n\rangle$ آغاز کرده (رابطه ۵۰.۲) و به سبب گسیل خودبخودی به حالت $|n'\rangle$ واپاشی می‌کند. از رابطه ۴۴.۹ داریم

$$p = q \langle n|x|n'\rangle \hat{i}$$

در مساله ۳۳.۳ مولفه‌های ماتریس x را محاسبه کردید:

$$\langle n|x|n'\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n'} \delta_{n,n'-1} + \sqrt{n} \delta_{n',n-1})$$

که در آن ω بسامد طبیعی نوسانگر است (دیگر نیازی به این حرف برای نشان دادن بسامد تابش القایی ندارم). اما بحثمان درباره گسیل است، ازاینرو n' باید پائین‌تر از n باشد؛ بنابراین برای مقصود فعلی‌مان

$$p = q \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \delta_{n',n-1} \hat{i} \quad [۶۱.۹]$$

همانطور که پیداست گذار تنها در مورد حالت‌هایی رخ می‌دهد که یک گام پائین‌تر از «نردبان» هستند که در نتیجه بسامد فوتون گسیل شده برابر می‌شود با:

$$\omega_0 = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} = \frac{(n + 1/2)\hbar\omega - (n' + 1/2)\hbar\omega}{\hbar} = (n - n')\omega = \omega \quad [۶۲.۹]$$

تعجبی ندارد که سامانه در بسامد نوسانگر کلاسیکی پرتو افکنی می‌کند. آهنگ گذار (رابطه ۵۶.۹) برابر است با:

$$A = \frac{nq^2\omega^2}{6\pi\epsilon_0 mc^3} \quad [۶۳.۹]$$

و از آنجا نیمه عمر n امین حالت مانا برابر است از:

$$\tau_n = \frac{6\pi\epsilon_0 mc^3}{nq^2\omega^2} \quad [۶۴.۹]$$

در این بین، هر فوتون تابیده شده حامل انرژی $\hbar\omega$ است، لذا توان تابیده شده برابر است با $A\hbar\omega$

$$P = \frac{q^2\omega^2}{6\pi\epsilon_0 mc^3} (n\hbar\omega)$$

یا، از آنجا که انرژی یک نوسانگر در حالت n ام برابر است با $E = (n + 1/2)\hbar\omega$

$$P = \frac{q^2\omega^2}{6\pi\epsilon_0 mc^3} \left(E - \frac{1}{2}\hbar\omega\right) \quad [۶۵.۹]$$

این توان تابیده شده میانگین توسط یک نوسانگر کوانتومی با انرژی (اولیه) E است.

برای مقایسه، بیایید توان تابیده شده میانگین توسط یک نوسانگر کلاسیکی با همان انرژی را هم بدست آوریم. براساس الکترودینامیک کلاسیک، توان تابیده شده توسط یک بار شتابدار q از فرمول لارمور^{۱۸} بدست می‌آید:

$$P = \frac{q^2 a^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} \quad [۶۶.۹]$$

برای نوسانگر هماهنگ با دامنه x_0 ، $x(t) = x_0 \cos(\omega t)$ است و شتاب هم برابر است با $a = -x_0 \omega^2 \cos(\omega t)$. میانگین گیری روی یک چرخه کامل می‌دهد

$$P = \frac{q^2 x_0^2 \omega^2}{12\pi\epsilon_0 c^3}$$

اما انرژی نوسانگر برابر است با $E = (1/2)m\omega^2 x_0^2$ ، از اینرو $x_0^2 = 2E/m\omega^2$ و در نتیجه

$$P = \frac{q^2 \omega^2}{6\pi\epsilon_0 mc^3} E \quad [۶۷.۹]$$

این توان تابیده شده میانگین توسط یک نوسانگر کلاسیکی با انرژی E است. در حد کلاسیکی ($\hbar \rightarrow 0$) فرمول‌های کلاسیکی و کوانتومی با هم توافق دارند^{۱۹}؛ با این حال، فرمول کوانتومی (رابطه ۶۵.۹) از حالت پایه حفاظت می‌کند: اگر $E = (1/2)m\omega^2$ باشد نوسانگر پرتو افکنی نمی‌کند.

مساله ۱۰.۹ نیمه عمر $\langle t_{1/2} \rangle$ یک حالت برانگیخته زمانی است که بطول می‌انجامد تا نیمی از اتم‌ها در یک نمونه بزرگ گذاری را انجام دهند. رابطه میان $t_{1/2}$ و τ ("طول عمر" حالت) را بدست آورید.

مساله ۱۱.۹ *** طول عمر (برحسب ثانیه) هر یک از چهار حالت $n = 2$ هیدروژن را بدست آورید. راهنمایی: لازم است مولفه‌های ماتریسی به صورت $\langle \psi_{100} | x | \psi_{200} \rangle$ ، $\langle \psi_{100} | y | \psi_{211} \rangle$ و غیره را بدست آورید. به یاد داشته باشید که $x = r \sin \theta \cos \phi$ ، $y = r \sin \theta \sin \phi$ و $z = r \cos \theta$. بیشتر این انتگرال‌ها صفر می‌شوند، پس پیش از شروع به محاسبه آنها را بررسی کنید. پاسخ: $s: 1.60 \times 10^{-9}$ برای تمام حالت‌ها به جز ψ_{200} که بینهایت است.

۳.۳.۹ قواعد گزینش

محاسبه آهنگ‌های گسیل خودبخودی در حد برآورد مولفه‌های ماتریسی به شکل زیر ساده شده است

$$\langle \psi_b | \mathbf{r} | \psi_a \rangle$$

همانطور که اگر روی مساله ۱۱.۹ کار کرده باشید در ادامه پی خواهید برد (اگر مساله مذکور را حل نکرده‌اید، همین حالا برگشته و حتما آنرا حل کنید!)، این کمیت‌ها در اغلب مواقع صفر

^{۱۹} در حقیقت، اگر P را برحسب انرژی بالای حالت پایه بیان کنیم، دو فرمول با هم یکسان می‌شوند.

هستند و دانستن پیشاپیش این که چه موقع چنین چیزی بروز می کند سودمند است، از اینرو زمان زیادی را برای برآورد انتگرال های غیر ضروری به هدر نمی دهیم. فرض کنید متوجه سامانه هایی مانند هیدروژن هستیم که برای آنها هامیلتونی دارای تقارن کروی است. در آن صورت می توانیم حالت ها را با اعداد کوانتومی معمول n, l, m مشخص کنیم که به این ترتیب مولفه های ماتریسی عبارتند از:

$$\langle n'l'm' | \mathbf{r} | nlm \rangle$$

بهره برداری هوشمندانه از رابطه های جابه جایی تکانه زاویه ای و هرمیتی بودن عملگرهای تکانه زاویه ای مجموعه توانمندی از قیدها و الزامات را روی این کمیت بدست می دهد.

قواعد گزینش شامل m و m' : پیش از هر چیز جابه جاگرهای L_z با x و y و z را در نظر بگیرید که در فصل ۴ روی آنها کار کردیم (رابطه ۱۲۲.۴ را ببینید):

$$[L_z, x] = i\hbar y, [L_z, y] = -i\hbar x, [L_z, z] = 0 \quad [۶۸.۹]$$

از رابطه سوم می توان چنین نتیجه گرفت که

$$0 = \langle n'l'm' | [L_z, z] | nlm \rangle = \langle n'l'm' | (L_z z - z L_z) | nlm \rangle$$

$$= \langle n'l'm' | [(m'\hbar)z - z(m\hbar)] | nlm \rangle = (m' - m)\hbar \langle n'l'm' | z | nlm \rangle$$

نتیجه گیری:

$$\langle n'l'm' | z | nlm \rangle = 0 \quad \text{یا در غیر این صورت} \quad m' = m \quad [۶۹.۹]$$

پس به جز آنکه $m' = m$ باشد، مولفه های ماتریس z همیشه برابر با صفر هستند.

در این بین، از جابه جاگر L_z با x می رسیم به:

$$\langle n'l'm' | [L_z, x] | nlm \rangle = \langle n'l'm' | (L_z x - x L_z) | nlm \rangle$$

$$= (m' - m)\hbar \langle n'l'm' | x | nlm \rangle = i\hbar \langle n'l'm' | y | nlm \rangle$$

نتیجه گیری:

$$(m' - m)\langle n'l'm'|x|nlm\rangle = i\langle n'l'm'|y|nlm\rangle \quad [۷۰.۹]$$

بنابراین هرگز ملزم به محاسبه مولفه‌های ماتریس y نیستید - همیشه می‌توانید آنها را از روی مولفه‌های ماتریس متناظر x بدست آورید.

در نهایت، جابه‌جاگر L_z با y می‌دهد

$$\langle n'l'm'|[L_z, y]|nlm\rangle = \langle n'l'm'|(L_z y - y L_z)|nlm\rangle$$

$$= (m' - m)\hbar\langle n'l'm'|y|nlm\rangle = i\hbar\langle n'l'm'|x|nlm\rangle$$

نتیجه گیری:

$$= (m' - m)\langle n'l'm'|y|nlm\rangle = i\langle n'l'm'|x|nlm\rangle \quad [۷۱.۹]$$

بخصوص، با ترکیب رابطه‌های ۷۰.۹ و ۷۱.۹،

$$(m' - m)^2\langle n'l'm'|x|nlm\rangle = i(m' - m)\langle n'l'm'|y|nlm\rangle = \langle n'l'm'|x|nlm\rangle$$

و در نتیجه

$$\langle n'l'm'|y|nlm\rangle = \langle n'l'm'|x|nlm\rangle = 0 \quad [۷۲.۹]$$

یا $(m' - m)^2 = 1$ در غیر اینصورت،

از روابط ۶۹.۹ و ۷۲.۹ قاعده گزینش برای m را بدست می‌آوریم:

$$\Delta m = \pm 1 \quad \text{یا} \quad 0 \quad \text{هیچ گذاری رخ نمی‌دهد مگر آنکه} \quad [۷۳.۹]$$

اگر به خاطر بیاورید که فوتون حامل اسپین ۱ بوده و در نتیجه مقادیر m برای آن عبارتند از ۱، ۰، -۱ درک این جواب ساده است؛ تبدیل معکوس (مولفه z) تکانه زاویه‌ای نیازمند آن است که اتم از هر آنچه فوتون بدست می‌آورد دست بردارد.

قواعد گزینش شامل l و l' : در مساله ۱۲.۹ از شما خواسته شده تا رابطه جابه‌جاگری زیر را

استخراج کنید:

^{۲۰} وقتی محور قطبی در امتداد جهت انتشار است، مقدار میانه‌ای یافت نمی‌شود و اگر تنها به تعداد حالت‌های فوتونی مستقل خطی توجه داشته باشید، جواب ۲ است نه ۳. با این حال، در اینصورت فوتون باید در جهت محور z حرکت کند و تمام سه مقدار هم امکان‌پذیر هستند.

$$[L^2, [L^2, r]] = 2\hbar^2(rL^2 + L^2r) \quad [۷۴.۹]$$

مانند گذشته، این جابه‌جاگر را میان $|nlm\rangle$ و $|n'l'm'\rangle$ ساندویچ می‌کنیم تا قاعده گزینش را بدست آوریم:

$$\begin{aligned} \langle n'l'm' | [[L^2, [L^2, r]] | nlm \rangle &= 2\hbar^2 \langle n'l'm' | (rL^2 + L^2r) | nlm \rangle \\ &= 2\hbar^4 [l(l+1) + l'(l'+1)] \langle n'l'm' | r | nlm \rangle \\ &= \langle n'l'm' | (L^2[L^2, r] - [L^2, r]L^2) | nlm \rangle \\ &= \hbar^2 [l'(l'+1) - l(l+1)] \langle n'l'm' | [L^2, r] | nlm \rangle \\ &= \hbar^2 [l'(l'+1) - l(l+1)] \langle n'l'm' | (L^2r - rL^2) | nlm \rangle \\ &= \hbar^4 [l'(l'+1) - l(l+1)]^2 \langle n'l'm' | r | nlm \rangle \end{aligned} \quad [۷۵.۹]$$

نتیجه‌گیری:

$$\begin{aligned} 2[l(l+1) + l'(l'+1)] &= [l'(l'+1) - l(l+1)]^2 \\ \langle n'l'm' | r | nlm \rangle &= 0 \quad \text{یا در غیر اینصورت} \end{aligned} \quad [۷۶.۹]$$

اما

$$[l'(l'+1) - l(l+1)] = (l' + l + 1)(l' - l)$$

و

$$2[l(l+1) + l'(l'+1)] = (l' + l + 1)^2 + (l' - l)^2 - 1$$

بنابراین نخستین شرط در رابطه ۷۶.۹ را می‌توان به این صورت نوشت.

$$[(l' + l + 1)^2 - 1][(l' - l)^2 - 1] = 0 \quad [۷۷.۹]$$

عامل نخست نمی‌تواند صفر باشد (مگر آنکه $l = l' = 0$ باشد - این شکاف در مساله ۱۲.۹ بسته می‌شود)، پس شرط ساده می‌شود به $l' = l \pm 1$. بدین ترتیب قاعده گزینش برای l را بدست آورده‌ایم:

[۷۸.۹]

 $\Delta l = \pm 1$ هیچ گذاری رخ نمی‌دهد مگر آنکه

دوباره، این نتیجه (هرچند استخراج آن به هیچ وجه پیش پا افتاده نیست) تعبیر ساده‌ای دارد: فوتون حامل اسپین ۱ است، پس این قاعده برای جمع تکانه زاویه‌ای باید $l' = l + 1$ ، $l' = l$ یا $l' = l - 1$ را جایز بشمارد (برای تابش دو قطبی الکتریکی امکان میانه - هرچند قانون پایستگی تکانه زاویه‌ای آنرا مجاز بشمارد - رخ نمی‌دهد).

واضح است که تمام گذارهای صورت گرفته به حالت‌های با انرژی پائین‌تر نمی‌توانند توسط گسیل خودبخودی دنبال شوند؛ قواعد گزینش برخی از آنها را ممنوع می‌سازند. آرایش گذارهای مجاز برای چهار حالت نخست بور اتم هیدروژن در شکل ۵.۹ به نمایش در آمده‌اند. توجه کنید که حالت ψ_{200} (2S) «گیر کرده است»: نمی‌تواند دچار واپاشی شود، زیرا طول عمرش به واقع بسیار طولانی‌تر از مثلاً حالت‌های ψ_{21-1} و ψ_{210} و ψ_{211} (2P) است. حالت‌های مانای بینابینی حتماً به تدریج دچار واپاشی می‌شوند که یا از طریق برخورد صورت می‌گیرد، یا توسط آنچه (به طور گمراه کننده‌ای) گذارهای ممنوع خوانده می‌شود (مساله ۲۰.۹) و یا بوسیله گسیل چند فوتونی.

مساله ۱۲.۹* رابطه جابه‌جاگری ۷۴.۹ را اثبات کنید. راهنمایی: نخست نشان دهید

$$[L^2, z] = 2i\hbar(xL_y - yL_x - i\hbar z)$$

از رابطه فوق و این نکته که $\mathbf{r} \cdot \mathbf{L} = \mathbf{r} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{P})$ است برای تعیین رابطه زیر استفاده کنید

$$[L^2, [L^2, z]] = 2\hbar^2(zL^2 + L^2z)$$

شکل کلی z و r اهمیتی ندارد.

مساله ۱۳.۹ «شکاف» رابطه ۷۸.۹ را با نشان دادن اینکه اگر $l' = l = 0$ باشد آنگاه

$$\langle n'l'm' | r | nlm \rangle = 0$$

است مسدود کنید.

مساله ۱۴.۹** الکترونی در حالت $n = 3$ ، $l = 0$ و $m = 0$ هیدروژن از طریق دنباله‌ای از

گذارهای (دوقطبی الکتریکی) به حالت پایه و می‌باشد.

(الف) کدام مسیرهای واپاشی به روی آن باز هستند؟ آنها را به روش زیر مشخص کنید:

$$|300\rangle \rightarrow |nlm\rangle \rightarrow |n'l'm'\rangle \rightarrow \dots \rightarrow |100\rangle$$

(ب) اگر یک بطری پر از اتم‌هایی در این حالت در اختیار می‌داشتید، چه کسری از آنها از طریق این مسیر دچار واپاشی می‌شد؟

(پ) طول عمر این حالت چقدر است؟ راهنمایی: هرگاه نخستین گذار به حالت پایه را انجام دهد، دیگر حالت $|300\rangle$ نیست، پس فقط گام نخست در هر دنباله به محاسبه طول عمر مربوط می‌شود. وقتی بیش از یک مسیر واپاشی باز باشد، آهنگ‌های گذار با هم جمع می‌شوند.

مسائل دیگری برای فصل ۹

مساله ۱۵.۹** نظریه اختلال وابسته به زمان را برای یک سامانه چند سطحی توسعه دهید.

کار را با تعمیم روابط ۱.۹ و ۲.۹ آغاز کنید:

$$H_0\psi_n = E_n\psi_n, \langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{nm} \quad [۷۹.۹]$$

در لحظه $t = 0$ اختلال $H'(t)$ را به کار می‌اندازیم، در نتیجه هامیلتونی کل عبارت می‌شود از:

$$H = H_0 + H'(t) \quad [۸۰.۹]$$

(الف) رابطه ۹.۶ را تعمیم دهید تا به قرائت زیر برسید.

$$\psi(t) = \sum c_n(t)\psi_n e^{-iE_n t/\hbar} \quad [۸۱.۹]$$

و نشان دهید که

$$\dot{c}_m = -\frac{i}{\hbar} \sum_n c_n H'_{mn} e^{-i(E_m - E_n)/\hbar} \quad [۸۲.۹]$$

که در آن

$$H'_{mn} \equiv \langle\psi_m|H'|\psi_n\rangle \quad [۸۳.۹]$$

(ب) اگر سامانه از حالت ψ_N آغاز کند، نشان دهید که (در نظریه اختلال مرتبه اول)

$$c_N(t) \cong 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t H'_{NN}(t') dt' \quad [۸۴.۹]$$

و

$$c_m(t) \cong -\frac{i}{\hbar} \int_0^t H'_{mN}(t') e^{-i(E_m - E_N)t'/\hbar} dt', (m \neq N) \quad [۸۵.۹]$$

(پ) اکنون فرض کنید H' ثابت است (به استثنای آنکه در لحظه $t = 0$ به کار انداخته شد و دوباره در لحظه t قطع می‌شود). احتمال گذار از حالت N به حالت m ($m \neq N$) را به صورت تابعی از زمان t بدست آورید. پاسخ:

$$4|H'_{MN}|^2 \frac{\sin^2[(E_N - E_M)t/2\hbar]}{(E_N - E_M)^2} \quad [۸۶.۹]$$

(پ) حالا فرض کنید H' تابعی سینوسی از زمان است: $H' = V \cos(\omega t)$. با در نظر گرفتن پیش فرض‌های همیشگی، نشان دهید گذار تنها برای حالت‌هایی اتفاق می‌افتد که در آنها انرژی $E_m = E_N \pm \hbar\omega$ بوده و از آنجا احتمال گذار برابر می‌شود با

$$P_{N \rightarrow M} = |V_{MN}|^2 \frac{\sin^2[(E_N - E_M \pm \hbar\omega)t/2\hbar]}{(E_N - M \pm \hbar\omega)^2} \quad [۸۷.۹]$$

(ت) فرض کنید یک سامانه چند سطحی در تابش الکترومغناطیسی غیر همدوس کاملاً فرو می‌رود. با استفاده از بخش ۲.۳.۹ به عنوان راهنما، نشان دهید که آهنگ گذار برای گسیل القایی از همان فرمولی (رابطه ۴۷.۹) بدست می‌آید که برای سامانه دو سطحی استخراج شد.

مساله ۱۶.۹ برای مثال‌های مساله ۱۵.۹ (پ) و (ت)، $c_m(t)$ را تا مرتبه اول محاسبه کنید. شرط بهنجارش را بررسی کنید:

$$\sum_m |c_m(t)|^2 = 1 \quad [۸۸.۹]$$

و در صورت وجود هرگونه اختلاف آنرا توضیح دهید. فرض کنید می‌خواستید احتمال باقی ماندن در حالت اصلی ψ_N را محاسبه کنید؛ آیا بهتر بود از $|c_N(t)|^2$ استفاده می‌کردید یا $1 - \sum_{m \neq N} |c_m(t)|^2$ ؟

مساله ۱۷.۹ ذره‌ای (در لحظه $t = 0$) ابتدا در N امین حالت چاه مربعی نامتناهی قرار دارد. اکنون آب به داخل چاه نفوذ می‌کند و سپس دوباره بتدریج از آن خارج می‌شود، به طوریکه کف چاه در پتانسیل یکنواخت $V_0(t)$ می‌ماند در حالیکه $V_0(0) = V_0(T) = 0$ است. (الف) معادله دقیق (رابطه ۸۲.۹) را برای $c_m(t)$ حل کرده و نشان دهید که تابع موج فاز را تغییر می‌دهد، اما گذاری به حالت‌های دیگر صورت نمی‌پذیرد. تغییر فاز $\phi(T)$ را برحسب تابعی از $V_0(t)$ بدست آورید.

(ب) همین مساله را با نظریه اختلال مرتبه اول بررسی کنید و پاسخ‌های خود را با هم مقایسه نمایید.

توجه: جواب زمانی یکسان است که اختلال به سادگی ثابتی (یعنی ثابت نسبت به x نه t) را به پتانسیل اضافه کند؛ این به خودی خود هیچ ربطی به چاه مربعی نامتناهی ندارد. با مساله ۱.۸ مقایسه کنید.

مساله ۱۸.۹* ذره‌ای به جرم m از ابتدا در حالت پایه چاه مربعی نامتناهی (یک بعدی) قرار دارد. در لحظه $t = 0$ «آجری» به داخل چاه انداخته می‌شود به طوریکه پتانسیل را به این شکل در می‌آورد.

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & 0 \leq x \leq a/2 \\ 0, & a/2 < x \leq a \\ \infty, & \text{در غیر اینصورت} \end{cases}$$

که در آن $E_1 \ll V_0$ است. پس از گذشت زمان T ، آجر برداشته شده و انرژی ذره اندازه گرفته می‌شود. احتمال (در نظریه اختلال مرتبه اول) آنکه انرژی ذره اکنون E_2 باشد را بدست آورید.

مساله ۱۹.۹ در این فصل با گسیل القایی، جذب (القایی) و گسیل خودبخودی برخورد کردیم. چگونه است که چیزی مثل جذب خودبخودی وجود ندارد؟

مساله ۲۰.۹*** ذره‌ای با اسپین $1/2$ و نسبت ژیرومغناطیسی γ در حال سکون در یک میدان مغناطیسی ایستا به صورت $B_0 \hat{k}$ در فرکانس لارمور $\omega_0 = \gamma B_0$ (مثال ۳.۴) حرکت تقدیمی می‌کند. حال میدان عرضی کوچکی در بسامد رادیویی (rf) به صورت $B_{rf}[\cos(\omega t) \hat{i} - \sin(\omega t) \hat{j}]$ را برقرار می‌کنیم به طوریکه میدان کل به شکل زیر در می‌آید

$$B = B_{rf} \cos(\omega t) \hat{i} + B_{rf} \sin(\omega t) \hat{j} + B_0 \hat{k} \quad [۹۹.۹]$$

(الف) ماتریس هامیلتونی 2×2 (رابطه ۱۵۸.۴) را برای این سامانه تشکیل دهید.

(ب) اگر $\chi(t) = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}$ حالت اسپینی در لحظه t باشد، نشان دهید

$$\dot{a} = \frac{i}{2}(\Omega e^{i\omega t} b + \omega_0 a); \quad \dot{b} = \frac{i}{2}(\Omega e^{-i\omega t} a + \omega_0 b) \quad [۹۰.۹]$$

که در آن $\Omega = \gamma B_{rf}$ به توان میدان rf مربوط می‌شود.

(پ) بررسی کنید آیا جواب عمومی $a(t)$ و $b(t)$ ، برحسب مقادیر اولیه آنها، a_0 و b_0 ، عبارت است از:

$$a(t) = \left\{ a_0 \cos(\omega' t/2) + \frac{i}{\omega'} [a_0(\omega_0 - \omega) + b_0 \Omega] \sin(\omega' t/2) \right\} e^{i\omega t/2}$$

$$b(t) = \left\{ b_0 \cos(\omega' t/2) + \frac{i}{\omega'} [b_0(\omega - \omega_0) + a_0 \Omega] \sin(\omega' t/2) \right\} e^{-i\omega t/2}$$

که در آن:

$$\omega' \equiv \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \Omega^2} \quad [۹۱.۹]$$

(ت) اگر ذره ابتدا در حالت اسپین بالا باشد (یعنی $a_0 = 1$ و $b_0 = 0$)، احتمال گذاری به

اسپین پائین، به صورت تابعی از زمان را بدست آورید. پاسخ:

$$P(t) = \{\Omega^2 / [(\omega - \omega_0)^2 + \Omega^2]\} \sin^2(\omega' t/2)$$

(ث) خم تشدید،

$$P(t) = \frac{\Omega^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \Omega^2} \quad [۹۲.۹]$$

را به صورت تابعی از بسامد رانشگر ω (به ازای ω_0 و Ω ثابت) رسم کنید. توجه داشته باشید که بیشینه به ازای $\omega = \omega_0$ رخ می‌دهد. «پهنای کامل در نصف بیشینه» را بدست آورید.

(ج) از آنجاکه $\omega_0 = \gamma B_0$ ، می‌توانیم از تشدید که در آزمایشگاه مشاهده شده برای تعیین گشتاور دوقطبی مغناطیسی ذره استفاده کنیم. در یک آزمایش تشدید مغناطیسی هسته‌ای (NMR) فاکتور g پروتون پارامتری است که با استفاده از یک میدان ایستا به بزرگی 10000 گاوس و یک میدان rf به بزرگی 0.01 گاوس اندازه‌گیری می‌شود. بسامد تشدید چه مقدار خواهد بود؟ (بخش ۵.۶ را برای گشتاور مغناطیسی پروتون ملاحظه کنید.) پهنای منحنی تشدید را بدست آورید. (جواب را بر حسب هرتز بیان کنید).

مساله ۲۱.۹*** در رابطه ۳۱.۹ اینطور فرض کردیم که اتم (در مقایسه با طول موج نور) آنقدر کوچک است که می‌توان از تغییرات فضایی در میدان صرف‌نظر کرد. میدان الکتریکی صحیح به این شکل خواهد بود.

$$E(r, t) = E_0 \cos(k \cdot r - \omega t) \quad [93.9]$$

اگر اتم را در مبداء متمرکز بگیریم، آنگاه $k \cdot r \ll 1$ روی حجم مربوطه ($|k| = 2\pi/\lambda$)، از اینرو $k \cdot r \sim r/\lambda \ll 1$ و به همین دلیل است که می‌توانیم این جمله را بدون برزو هیچ مشکلی حذف کنیم. فرض کنید تصحیح مرتبه اول را می‌گیریم:

$$E(r, t) = E_0 [\cos(\omega t) + (k \cdot r) \sin(\omega t)] \quad [94.9]$$

جمله نخست از گذارهای مجاز (دوقطبی الکتریکی) که در متن در نظر گرفتیم می‌آید؛ جمله دوم از گذارهای به اصطلاح ممنوع (دوقطبی مغناطیسی و چهارقطبی الکتریکی) حاصل می‌شود (توانهای بالاتر $k \cdot r$ به گذارهای حتی «ممنوع‌تری» منجر می‌شوند که با گشتاورهای چندقطبی بالاتر در ارتباطند^{۲۱}).

^{۲۱} برای یک بحث روشمند (مشمعل بر قاعده میدان مغناطیسی)، کتاب *Introduction to Quantum Theory* نوشته David Park ویرایش سوم (نیویورک: snap.scifile.ir فصل ۱۱ را ببینید).

(الف) آهنگ گسیل خودبخودی برای گذارهای ممنوع را بدست آورید (خودتان را برای میانگین گیری روی قطبش و جهت های انتشار به زحمت نیندازید، هرچند برای یک محاسبه کامل باید اینکار را انجام داد). پاسخ:

$$R_{b \rightarrow a} = \frac{q^2 \omega^5}{\pi \epsilon_0 \hbar c^5} |\langle a | (\hat{n} \cdot \mathbf{r}) (\hat{k} \cdot \mathbf{r}) | b \rangle|^2 \quad [95.9]$$

(ب) نشان دهید برای یک نوسانگر یک بعدی گذارهای ممنوع از سطح n به سطح $n-2$ می روند و آهنگ گذار (که به طور مناسب روی \hbar و \hat{k} میانگین گیری شده) برابر است با:

$$R = \frac{\hbar q^2 \omega^3 n(n-1)}{15 \pi \epsilon_0 \hbar c^5} \quad [96.9]$$

نسبت آهنگ «ممنوع» به آهنگ «مجاز» را بدست آورده و وجه تسمیه آنرا توجیه کنید. (توجه: ω بسامد فوتون است نه نوسانگر).

(پ) نشان دهید گذار $2S \rightarrow S$ در هیدروژن امکان پذیر نیست حتی با یک گذار «ممنوع». (همچنانکه پیداست، این امر برای تمام چند قطبی های بالاتر هم صادق است؛ واپاشی حاکم در حقیقت یک گسیل دو فوتونی است و طول عمر هم در حدود یک دهم ثانیه است.^{۲۲})

مساله ۲۲.۹*** نشان دهید آهنگ گسیل خودبخودی (رابطه ۵۶.۹) برای گذاری از n, l به n', l' در هیدروژن برابر است با:

$$\frac{e^2 \omega^3 I^2}{3 \pi \epsilon_0 \hbar c^3} \times \begin{cases} \frac{l+1}{2l+1}, & l' = l+1 \\ \frac{l}{2l-1}, & l' = l-1 \end{cases} \quad [97.9]$$

که در آن

$$I \equiv \int_0^\infty r^3 R_{nl}(r) R_{n'l'}(r) dr \quad [98.9]$$

(اتم ابتدا در مقدار خاصی از m قرار دارد و در ادامه به هر حالت m' که با قواعد انتخاب $m' = m + 1, m, m - 1$ سازگار باشد می‌رود. توجه داشته باشید که پاسخ مستقل از m است). راهنمایی: ابتدا تمام مولفه‌های x, y و z غیر صفر ماتریس بین $|nlm\rangle$ و $|n'l'm'\rangle$ را برای حالت $l' = l + 1$ محاسبه کنید. از اینجا، کمیت زیر را تعیین کنید.

$$|\langle n', l + 1, m + 1 | r | nlm \rangle|^2 + |\langle n', l + 1, m | r | nlm \rangle|^2 + |\langle n', l + 1, m - 1 | r | nlm \rangle|^2$$

سپس همین کار را برای $l' = l - 1$ هم انجام دهید.

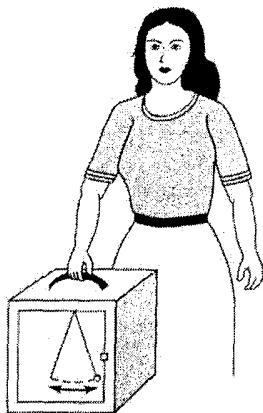
فصل نهم

تقریب بی‌درو

۱.۱۰ قضیه بی‌دررو

۱.۱.۱۰ فرایندهای بی‌دررو

آونگ کاملی را مجسم کنید که بدون هیچ اصطکاکی بدور از مقاومت هوا در صفحه‌ای عمودی رو به عقب و جلو تاب می‌خورد. اگر پایه نگهدار را گرفته و آنرا به شدت تکان بدهم، ریسمان به شکلی آشوبناک به اطراف پس و پیش رفته و تاب برمی‌دارد، اما اگر آنرا بسیار آرام و به طور یکنواخت حرکت دهم (شکل ۱.۱۰)، آونگ در همان صفحه (یا صفحه‌ای موازی با آن) و با همان دامنه به نوسان مناسب و روان خود ادامه می‌دهد. این تغییر تدریجی در شرایط خارجی تعیین کننده ویژگیهای یک فرایند بی‌دررو است. توجه داشته باشید که در این فرایند دو زمان مشخصه در کارند: T_i زمان «داخلی» که نشان دهنده حرکت خود سامانه است (در این مورد دوره تناوب نوسان‌های آونگ) و T_e زمان «خارجی» که در مدت آن پارامترهای سامانه به نحوی قابل اندازه‌گیری و سنجش‌پذیر تغییر می‌کنند (برای مثال اگر آونگ از یک سکوی نوسانی آویزان می‌بود، T_e دوره تناوب حرکت سکو محسوب می‌شد). فرایند بی‌دررو فرایندی است که در آن $T_e \gg T_i$ باشد.^۱



شکل ۱.۱۰: حرکت بی‌دررو: اگر جعبه به آرامی انتقال داده شود، آونگ داخل آن با همان دامنه به نوسانش در صفحه‌ای عمود بر آونگ اصلی ادامه می‌دهد.

^۱ برای یک بحث جالب درباره فرایندهای بی‌درروی کلاسیک مقاله Frank S. Crawford در مجله Am. J. Phys.

راهربرد اصولی در تجزیه و تحلیل یک فرایند بی دررو در وهله نخست حل مساله با فرض ثابت بودن پارامترهای خارجی است که فقط در پایان محاسبه تغییر آنها با زمان را جایز می‌شماریم. برای مثال، دوره تناوب کلاسیکی یک آونگ با طول (ثابت) L برابر است با $2\pi\sqrt{L/g}$ ؛ حالا اگر طول را به تدریج تغییر دهیم، دوره تناوب احتمالا به شکل $2\pi\sqrt{L(t)/g}$ در می‌آید. مثال بسیار ظریف‌تر و پیچیده‌تر در بحث‌مان درباره یون مولکول هیدروژن (بخش ۳.۷) مطرح شد. آنجا کار را با این فرض آغاز کردیم که هسته در فاصله ثابت R ساکن بود و آنگاه حرکت الکترون را بررسی کردیم. به محض آنکه انرژی حالت پایه سامانه را به صورت تابعی از R بدست آوردیم، فاصله تفکیک تعادلی را مکان‌یابی کرده و از روی منحنی نمودار حاصل بسامد نوسان هسته را تعیین کردیم (مساله ۱۰.۷). در فیزیک مولکولی این تکنیک (که با ساکن گرفتن هسته شروع شده، توابع موج الکترونی را محاسبه کرده و با استفاده از اینها اطلاعاتی درباره مکان‌ها و حرکت نسبتا کند هسته کسب می‌کند) به تقریب بورن - اپنهاایمر معروف است.

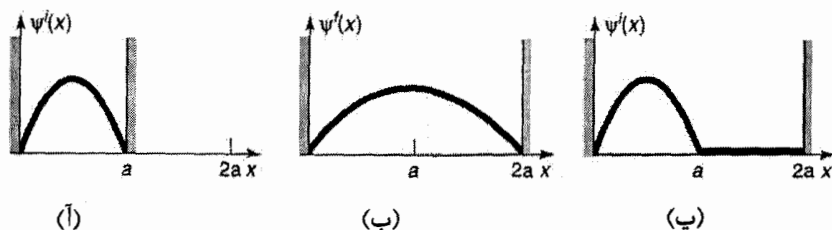
در مکانیک کوانتومی، مضمون بایسته تقریب بی دررو را می‌توان در قالب یک قضیه جمع بست. فرض کنید هامیلتونی اندک اندک از یک مقدار اولیه H^i تا یک مقدار نهایی H^f تغییر کند. قضیه بی دررو بیانگر این مطلب است که چنانچه ذره از ابتدا در n امین ویژه حالت H^i باشد، (تحت معادله شرودینگر) به n امین ویژه حالت H^f منتقل خواهد شد. (فرض من بر این است که طیف در سراسر گذار از H^i به H^f گسسته و غیر تبهگن است، از اینرو هیچ ابهامی درباره طرز قرارگیری حالت‌ها وجود ندارد؛ این شرایط را می‌توان با ارائه رهیافتی مناسب به منظور «رهگیری» ویژه توابع تقلیل داد، اما اینجا قصد دنبال کردن آنرا ندارم).

به عنوان مثال، فرض کنید ذره‌ای را در حالت پایه مربعی نامتناهی تدارک دیده‌ایم (شکل ۲.۱۰ (آ)):

$$\psi^i(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \quad [10.1]$$

حالا اگر دیواره سمت راست را به آهستگی به $2a$ ببریم، قضیه بی دررو حاکی از آن است که ذره کارش را در حالت پایه چاه پهن شده به اتمام می‌رساند (شکل ۲.۱۰ (ب)):

$$\psi^f(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} \sin\left(\frac{\pi}{2a}x\right) \quad [2.10]$$



شکل ۳.۱۰: (آ) ذره از حالت پایه چاه مربعی نامتناهی آغاز می‌کند. (ب) اگر چاه به آرامی جابه‌جا شود، ذره در حالت پایه باقی می‌ماند. (پ) اگر چاه به سرعت حرکت کند، ذره برای یک لحظه در حالت اولیه‌اش جا می‌ماند.

(شاید سوای از یک عامل فاز). دقت کنید که از تغییرات کوچک در هامیلتونی سخن نمی‌گوییم (آنطور که در نظریه اختلال مطرح بود) - این یکی تغییر بسیار بزرگی به شمار می‌رود. همه آنچه به آن نیاز داریم این است که این رویداد به آرامی اتفاق بیفتد. اینجا انرژی پایسته نیست: هر که در حال حرکت دادن دیوار است، دارد انرژی را از سامانه بیرون می‌کشد، درست مثل پیستونی روی سیلندر گازی که به آرامی منبسط می‌شود. در مقابل، چنانچه چاه به طور ناگهانی از هم باز شود، حالت حاصل کماکان $\psi^I(x)$ است (شکل ۳.۱۰ (پ))، که ترکیب خطی پیچیده‌ای از ویژه حالت‌های هامیلتونی جدید است (مساله ۳۸.۲). در این حالت انرژی پایسته است (دست کم، مقدار انبساطش اینطور است)؛ مانند انبساط آزاد یک گاز (به داخل خلاء) وقتی مانع ناگهان برداشته می‌شود، هیچ کاری انجام نمی‌شود.

مساله ۳۸.۱۰*** مورد یک چاه مربعی نامتناهی که دیواره سمت راستی آن با سرعت ثابت (v)

گسترش می‌یابد را می‌توان به طور دقیق حل کرد.^۲ مجموعه کامل جواب‌ها عبارتند از

$$\Phi_n(x, t) \equiv \sqrt{\frac{2}{w}} \sin\left(\frac{n\pi}{w}x\right) e^{i(mvx^2 - 2E_n^I t)/2\hbar w} \quad [3.10]$$

که در آن $w(t) \equiv a + vt$ پهنای (لحظه‌ای) چاه و $E_n^I \equiv n^2\pi^2\hbar^2/2ma^2$ عبارت است از n

امین انرژی مجاز چاه اصلی (با پهنای a). جواب عمومی ترکیبی خطی از Φ ها است:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Phi_n(x, t) \quad [۴.۱۰]$$

ضرایب c_n مستقل از t هستند.

(الف) بررسی کنید آیا رابطه ۳.۱۰ در معادله شرودینگر وابسته به زمان با شرایط مرزی مناسب صدق می‌کند.

(ب) فرض کنید ذره‌ای (در لحظه $t = 0$) از حالت پایه چاه اولیه آغاز می‌کند:

$$\psi(x, 0) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)$$

نشان دهید ضرایب را می‌توان به صورت زیر نوشت.

$$c_n = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} e^{-i\alpha z^2} \sin(nz) \sin(z) dz \quad [۵.۱۰]$$

که در آن $\alpha \equiv mva/2\pi^2\hbar$ معیار بدون بعدی از سرعتی است که چاه با آن گسترش می‌یابد. (متأسفانه، این انتگرال را نمی‌توان برحسب توابع پایه برآورد کرد).

(ب) فرض کنید می‌گذاریم چاه تا دو برابر پهنای اولیه‌اش گسترش پیدا کند، پس زمان «خارجی» از رابطه $w(T_e) = 2a$ بدست می‌آید. زمان «داخلی» دوره تناوب عامل نمایی وابسته به زمان در حالت پایه (اولیه) است. T_i و T_e را تعیین کرده و نشان دهید که نظام بی‌دررو مطابق است با $1 \ll \alpha$ ، به طوریکه روی بازه انتگرال‌گیری $1 \cong e^{-i\alpha z^2}$ است. از این عبارت برای تعیین ضرایب بسط c_n استفاده کنید. $\Psi(x, t)$ را درست کرده و اطمینان حاصل کنید که نتیجه با قضیه بی‌دررو سازگاری دارد.

(پ) نشان دهید عامل فاز در $\Psi(x, t)$ را می‌توان به شکل زیر نوشت

$$\theta(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_1(t') dt' \quad [۶.۱۰]$$

که در آن $E_n(t) \equiv n^2\pi^2\hbar^2/2ma^2$ عبارت است از n امین ویژه مقدار لحظه‌ای در زمان t . نتیجه بدست آمده را توجیه کنید.

۲۰.۱.۱۰ برهان قضیه بی‌دررو

قضیه بی‌دررو بیان ساده‌ای داشته و به نظر موجه می‌آید، اما اثبات آن کار ساده‌ای نیست.^۳

هامیلتونی مستقل از زمان است، بنابراین ذره‌ای که که ابتدا در n امین ویژه حالت، ψ_n ، قرار دارد^۴

$$H\psi_n = E_n\psi_n \quad [۷.۱۰]$$

به سادگی با برگزیدن یک عامل فاز، در n امین ویژه حالت باقی می‌ماند:

$$\Psi_n(t) = \psi_n e^{-iE_n t/\hbar} \quad [۸.۱۰]$$

اگر هامیلتونی با زمان تغییر کند، آنوقت ویژه توابع و ویژه مقادیر هم خودشان وابسته به زمان هستند:

$$H(t)\psi_n(t) = E_n(t)\psi_n(t) \quad [۹.۱۰]$$

اما آنها هنوز هم (در لحظه خاص) مجموعه راست هنجاری را تشکیل می‌دهند

$$\langle \psi_n(t) | \psi_m(t) \rangle = \delta_{nm} \quad [۱۰.۱۰]$$

در ضمن کامل هم هستند، از اینرو جواب عمومی معادله شرودینگر وابسته به زمان

^۳ قضیه بی‌دررو را عموماً به اهرنفت نسبت می‌دهند که فرایندهای بی‌دررو را در نسخه‌های اولیه نظریه کوانتومی مورد مطالعه قرار داد. نخستین برهان در مکانیک کوانتومی مدرن را Born و Fock در مقاله‌ای که به سال ۱۹۲۸ در مجله *Zeik. F. Physik*, 51, 165 به چاپ رساندند ارائه کردند. برهان‌های دیگر را می‌توان در کتاب *Quantum Mechanics* اثر Messisah (نیویورک: انتشارات John Wiley & Sons، ۱۹۶۲) جلد دوم، فصل هفدهم، بخش ۱۲ و نیز در مقاله Philip Pechukas و J-T. Hwang که به سال ۱۹۷۷ در مجله *J. Chem. Phys.* 67, 4640 منتشر شد یافت. استدلال ارائه شده در این قسمت از کتاب *Quantum Physics* نوشته Gasiorowicz (نیویورک: John Wiley & Sons، ۱۹۷۴) فصل ۲۲، مساله ۶ پیشنهاد شده است. استدلالی که اینجا ارائه شد مباحث کتاب *Introduction to Quantum Mechanics* اثر B. H. Bransden و C. J. Joachian و ویرایش دوم، انتشارات Addison-Wesley، بوستون (۲۰۰۰)، بخش ۴.۹ را دنبال می‌کند.

^۴ بستگی به مکان (یا اسپین و هر چه دیگر) را حذف می‌کنم؛ در این استدلال تنها بستگی زمانی است که مورد بحث

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t) = H(t) \Psi(t) \quad [۱۱.۱۰]$$

را می‌توان به صورت ترکیبی خطی از آنها نوشت:

$$\Psi(t) = \sum_n c_n(t) \psi_n e^{i\theta_n(t)} \quad [۱۲.۱۰]$$

که در آن

$$\theta_n(t) \equiv -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt' \quad [۱۳.۱۰]$$

عامل فاز «استاندارد» را به حالتی که در آن E_n با زمان تغییر می‌کند تعمیم می‌دهد. (مثل همیشه، می‌توانستم ضریب $c_n(t)$ را در آن لحاظ کنم، ولی راحت‌تر آن است که این قسمت از بستگی زمانی را فاکتور گرفته و بیرون آوریم، چون حتی برای یک هاملیتونی مستقل از زمان هم این قسمت وجود دارد).

با جاگذاری رابطه ۱۲.۱۰ در رابطه ۱۱.۱۰ می‌رسیم به

$$i\hbar \sum_n [\dot{c}_n \psi_n + c_n \dot{\psi}_n + i c_n \psi_n \dot{\theta}_n] e^{i\theta_n} = \sum_n c_n (H \psi_n) e^{i\theta_n} \quad [۱۴.۱۰]$$

(از علامت نقطه برای نشان دادن مشتق زمانی استفاده می‌کنم). از منظر روابط ۹.۱۰ و ۱۳.۱۰ دو جمله آخر حذف می‌شوند و این عبارت می‌ماند

$$\sum_n \dot{c}_n \psi_n e^{i\theta_n} = - \sum_n c_n \dot{\psi}_n e^{i\theta_n} \quad [۱۵.۱۰]$$

با گرفتن ضرب داخلی با ψ_m و بهره‌گیری از راست‌هنجاری ویژه توابع همزمان (رابطه ۱۰.۱۰)،

$$\sum_n \dot{c}_n \delta_{mn} e^{i\theta_n} = - \sum_n c_n \langle \psi_m | \dot{\psi}_n \rangle e^{i\theta_n}$$

یا

$$\dot{c}_m(t) = - \sum_n c_n \langle \psi_m | \dot{\psi}_n \rangle e^{i(\theta_n - \theta_m)} \quad [۱۶.۱۰]$$

باید توجه داشت که دیفرانسیل گیری از رابطه ۹.۱۰ نسبت به زمان می دهد

$$\dot{H}\psi_n + H\dot{\psi}_n = \dot{E}_n\psi_n + E_n\dot{\psi}_n$$

و در نتیجه (باز با گرفتن ضرب داخلی با ψ_m)

$$\langle\psi_m|\dot{H}|\psi_n\rangle + \langle\psi_m|H|\dot{\psi}_n\rangle = \dot{E}_n\delta_{mn} + E_n\langle\psi_m|\dot{\psi}_n\rangle \quad [۱۷.۱۰]$$

با بهره گیری از هرمیتی بودن H برای نوشتن $\langle\psi_m|H|\dot{\psi}_n\rangle = E_m\langle\psi_m|\dot{\psi}_n\rangle$ می توان اینطور نتیجه گرفت که به ازای $m \neq n$

$$\langle\psi_m|\dot{H}|\psi_n\rangle = (E_n - E_m)\langle\psi_m|\dot{\psi}_n\rangle \quad [۱۸.۱۰]$$

با قرار دادن آن در رابطه ۱۶.۱۰ (و این فرض، به خاطر داشته باشید، که انرژی ها غیر تبهگن هستند) به این نتیجه می رسیم که:

$$\dot{c}_m(t) = -c_m\langle\psi_m|\dot{\psi}_m\rangle - \sum_{n \neq m} c_n \frac{\langle\psi_m|\dot{H}|\psi_n\rangle}{E_n - E_m} e^{(-i/\hbar) \int_0^t [E_n(t') - E_m(t')] dt'} \quad [۱۹.۱۰]$$

این نتیجه دقیق است. حالا نوبت می رسد به تقریب بی دررو: اینطور فرض کنید که \dot{H} بی اندازه کوچک است و به این ترتیب جمله دوم را بردارید^۵ تا این عبارت باقی بماند

$$\dot{c}_m(t) = -c_m\langle\psi_m|\dot{\psi}_m\rangle \quad [۲۰.۱۰]$$

که جواب آن می شود

$$c_m(t) = c_m(0)e^{i\gamma_m(t)} \quad [۲۱.۱۰]$$

که در آن^۶

^۵ توجیه موشکافانه و دقیق این مرحله کار ساده ای نیست. مقاله A.C Aguiar Pinti *et al* در مجله *Am. J. Phys.* (2000) 68, 955 را ملاحظه کنید.

^۶ توجه داشته باشید که γ حقیقی است، چراکه بهنجارش ψ_m مستلزم رابطه زیر است.

$$(d/dt)\langle\psi_m|\psi_m\rangle = \langle\dot{\psi}_m|\psi_m\rangle + \langle\psi_m|\dot{\psi}_m\rangle = 0 \quad (\langle\psi_m|\psi_m\rangle)$$

$$\gamma_m(t) \equiv i \int_0^t \left\langle \psi_m(t') \left| \frac{\partial}{\partial t'} \psi_m(t') \right. \right\rangle dt' \quad [۲۲.۱۰]$$

به ویژه، اگر ذره ابتدا در n امین ویژه حالت باشد (به این معنی که به ازای $m \neq n$ داشته باشیم $c_m(0) = 0$ و $c_n(0) = 1$ در آن صورت (رابطه ۱۲.۱۰)

$$\Psi_n(t) = e^{i\theta_n(t)} e^{i\gamma_n(t)} \psi_n(t) \quad [۲۳.۱۰]$$

از اینرو در n امین ویژه حالت (هامیلتونی در حال تحول) باقی می ماند در حالیکه تنها یک جفت عامل فاز بدست می آورد. همانطور که می باید ثابت می شد.

مثال ۱.۱۰ الکترونی (با بار $-e$ و جرم m) را تصور کنید که در حال سکون در مبدا و در حضور یک میدان مغناطیسی قرار دارد که بزرگی اش (B_0) ثابت اما جهتش با سرعت زاویه ای ثابت ω مخروطی را می پیماید که زاویه گشودگی آن α است (شکل ۳.۱۰):

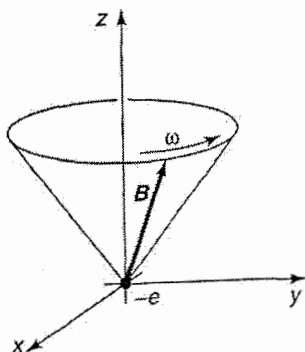
$$\mathbf{B}(t) = B_0 [\sin \alpha \cos(\omega t) \hat{i} + \sin \alpha \sin(\omega t) \hat{j} + \cos \alpha \hat{k}] \quad [۲۴.۱۰]$$

هامیلتونی (رابطه ۱۵۸.۴) عبارت است از:

$$\begin{aligned} H(t) &= \frac{e}{m} \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} = \frac{e\hbar B_0}{2m} [\sin \alpha \cos(\omega t) \sigma_x + \sin \alpha \sin(\omega t) \sigma_y + \cos \alpha \sigma_z] \\ &= -\frac{\hbar\omega_1}{2} \begin{pmatrix} \cos \alpha & e^{-i\omega t} \sin \alpha \\ e^{i\omega t} \sin \alpha & -\cos \alpha \end{pmatrix} \end{aligned} \quad [۲۵.۱۰]$$

که در آن

$$\omega_1 \equiv -\frac{eB_0}{m} \quad [۲۶.۱۰]$$



شکل ۳.۱۰: میدان مغناطیسی پیرامون یک مخروط را با سرعت زاویه‌ای ω جاروب می‌کند، رابطه ۲۴.۱۰

ویژه اسپینورهای بهنجار شده $H(t)$ عبارتند از:

$$\chi_+(t) = \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2) \\ e^{i\omega t} \sin(\alpha/2) \end{pmatrix} \quad [۲۷.۱۰]$$

و

$$\chi_-(t) = \begin{pmatrix} e^{i\omega t} \sin(\alpha/2) \\ -\cos(\alpha/2) \end{pmatrix} \quad [۲۸.۱۰]$$

آنها به ترتیب نمایانگر اسپین بالا و اسپین پایین در امتداد جهت لحظه‌ای $B(t)$ هستند (مساله ۳۰.۴ را ملاحظه کنید). ویژه مقادیر متناظر عبارتند از:

$$E_{\pm} = \pm \frac{\hbar\omega_1}{2} \quad [۲۹.۱۰]$$

فرض کنید الکترون از حالت اسپین بالا و در امتداد $B(0)$ آغاز می‌کند:^۷

$$\chi(0) = \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2) \\ \sin(\alpha/2) \end{pmatrix} \quad [۳۰.۱۰]$$

جواب دقیق معادله شرودینگر وابسته به زمان (مساله ۳.۱۰) از این قرار است

^۷ این اساساً مانند مساله ۲۰.۹ است، جز آنکه الکترون‌ها ابتدا در حالت اسپین بالا در امتداد B قرار دارند، درحالی‌که در

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} \left[\cos(\lambda t/2) - i \frac{(\omega_1 - \omega)}{\lambda} \sin(\lambda t/2) \right] \cos(\alpha/2) e^{-i\omega t/2} \\ \left[\cos(\lambda t/2) - i \frac{(\omega_1 + \omega)}{\lambda} \sin(\lambda t/2) \right] \sin(\alpha/2) e^{+i\omega t/2} \end{pmatrix} \quad [۳۱.۱۰]$$

که در آن

$$\lambda \equiv \sqrt{\omega^2 + \omega_1^2 - 2\omega\omega_1 \cos \alpha} \quad [۳۲.۱۰]$$

یا با نوشتن آن به صورت یک ترکیب خطی از χ_+ و χ_-

$$\begin{aligned} \chi(t) = & \left[\cos\left(\frac{\lambda t}{2}\right) - i \frac{(\omega_1 - \omega \cos \alpha)}{\lambda} \sin\left(\frac{\lambda t}{2}\right) \right] e^{-i\omega t/2} \chi_+(t) \\ & + i \left[\frac{\omega}{\lambda} \sin \alpha \sin\left(\frac{\lambda t}{2}\right) \right] e^{+i\omega t/2} \chi_-(t) \end{aligned} \quad [۳۳.۱۰]$$

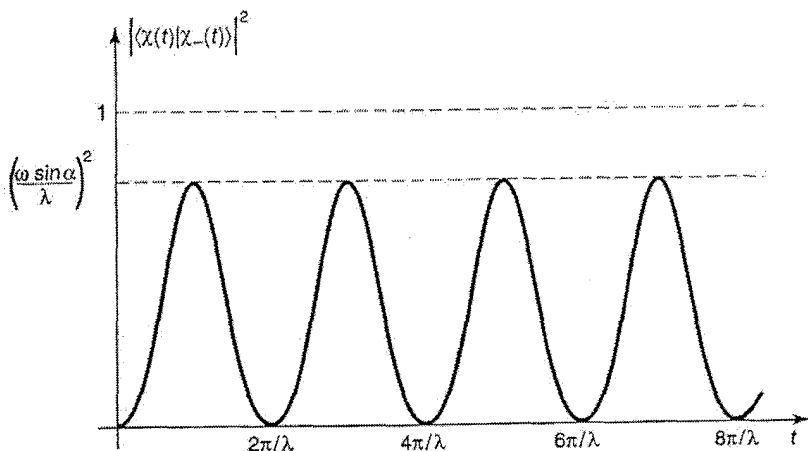
آشکارا احتمال (دقیق) گذاری با اسپین بالا (در امتداد جهت کنونی **B**) برابر است با:

$$|\langle \chi(t) | \chi_-(t) \rangle|^2 = \left[\frac{\omega}{\lambda} \sin \alpha \sin\left(\frac{\lambda t}{2}\right) \right]^2 \quad [۳۴.۱۰]$$

قضیه بی دررو می گوید این احتمال گذار می بایست در حد $T_e \gg T_i$ حذف شود، که در آن T_e زمان مشخصه برای بارها در هامیلتونی (در این مورد، $1/\omega$) و T_i زمان مشخصه برای بارها در تابع موج (در این مورد، $\hbar/(E_+ - E_-)$) است. بدین ترتیب تقریب بی دررو بدان معنی است که $\omega \ll \omega_1$: میدان در مقایسه با فاز توابع موج (مختل نشده) به آهستگی می چرخد. در نظام بی دررو $\omega_1 \cong \lambda$ است و از اینرو:

$$|\langle \chi(t) | \chi_-(t) \rangle|^2 \cong \left[\frac{\omega}{\omega_1} \sin \alpha \sin\left(\frac{\lambda t}{2}\right) \right]^2 \rightarrow 0 \quad [۳۵.۱۰]$$

میدان مغناطیسی الکترون را کمی به اطراف هدایت می کند در حالیکه اسپینش همواره در امتداد جهت **B** نشانه می رود. در مقابل، چنانچه $\omega \gg \omega_1$ باشد آنگاه $\omega \cong \lambda$ بوده و سامانه مابین اسپین بالا و اسپین پائین حرکت رفت و برگشتی انجام می دهد (شکل ۴.۱۰).



شکل ۴.۱۰: نمودار احتمال گذار، رابطه ۳۴.۱۰ در نظام غیر بی‌دررو ($\omega \ll \omega_1$)

مساله ۲.۱۰** بررسی کنید آیا رابطه ۳۱.۱۰ در معادله شرودینگر وابسته به زمان به جای هامیلتونی در رابطه ۲۵.۱۰ صدق می‌کند. همچنین اطمینان حاصل کنید که رابطه ۳۳.۱۰ صحیح است و نشان دهید حاصلجمع مربعات ضرایب برابر با ۱ می‌شود، آنطور که برای بهنجارش مورد نیاز است.

۲.۱۰ فاز پری

۱.۲.۱۰ فرایندهای غیر هولونومی

بیا بید بازگردیم به مدلی که (در بخش ۱.۱.۱۰) برای توسعه تصویر کلی یک فرایند بی‌دررو استفاده کردیم: یک آونگ کاملاً بدون اصطکاک که پایه نگهدار آن از جایی به جای دیگر حرکت داده می‌شود. آنجا مدعی شدیم که تا وقتی حرکت پایه نگهدار در مقایسه با دوره تناوب آونگ بسیار آرام باشد (به طوریکه آونگ پیش از آنکه مقدار قابل ملاحظه‌ای جابه‌جا شود تعداد زیادی نوسان را پشت سر بگذارد)، در همان صفحه (یا صفحه‌ای موازی با آن) و با همان دامنه (و طبعاً همان بسامد) به نوسانش ادامه خواهد داد.

اما چه می‌شود اگر این آونگ آرمانی را رو به سمت قطب شمال بگیریم، چه تغییری در نحوه نوسان آن بوجود می‌آید - یعنی، در جهت و فرکانس آن؟ (در حال حاضر، اینطور وانمود

می‌کنم که زمین در حال چرخش نیست.) آونگ را به آهستگی هر چه تمام‌تر (یعنی، به طور بی‌دررو) به پائین خط تفکیک طول جغرافیایی عبوری از پورتلند آورده و تا فراتر از آن تا استوا می‌آورم. در این مرحله آونگ در راستای شمال - جنوب تاب می‌خورد. حالا آنرا رو به بالا تا قطب شمال در امتداد یک طول جغرافیایی جدید بازمی‌گردانم. آشکار است که آونگ دیگر در همان صفحه‌ای که وقتی آنرا پائین می‌آوردم نوسان می‌کرد، تاب نمی‌خورد - قدر مسلم، صفحه جدید با صفحه قدیم زاویه Θ می‌سازد که در آن Θ برابر است با زاویه میان کران جنوبی و کران شمالی خطوط طول جغرافیایی.

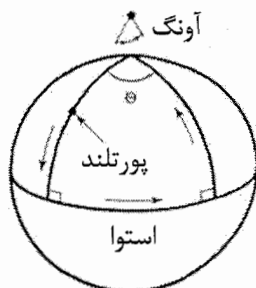
اتفاقاً، Θ برابر است با زاویه فضایی (Ω) که (در مرکز زمین) مسیری که آونگ را در اطراف آن حمل کردم را دربرمی‌گیرد. چون این مسیر کسری به اندازه $\Theta/2\pi$ از نیمکره شمالی را محاط می‌کند، پس مساحت آن برابر است با $A = (1/2)(\Theta/2\pi)4\pi R^2$ (که در آن R شعاع زمین است) و در نتیجه:

این روش، شیوه بسیار مناسبی برای بیان جواب است چراکه مستقل از شکل مسیر است (شکل

۶.۱۰^۸.)

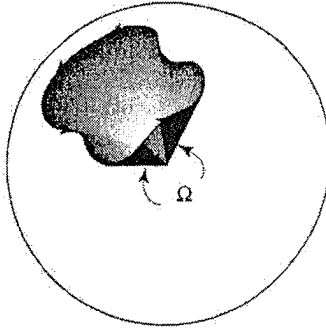
$$\Theta = A/R^2 \equiv \Omega$$

[۳۶.۱۰]



شکل ۵.۱۰: مسیر راهسپاری برای ترابری یک آونگ روی سطح زمین

^۸ اگر مایل باشید می‌توانید آنرا برای خودتان اثبات کنید. مسیر بسته را متشکل از بخش‌هایی از یک دایره بسیار بزرگ بگیرید (ژئودزیک کره)؛ آونگ زاویه ثابتی با هر بخش ژئودزیک می‌سازد، از اینرو انحراف زاویه‌ای خالص با حاصلجمع زوایای راسی چند ضلعی کروی ارتباط پیدا می‌کند.



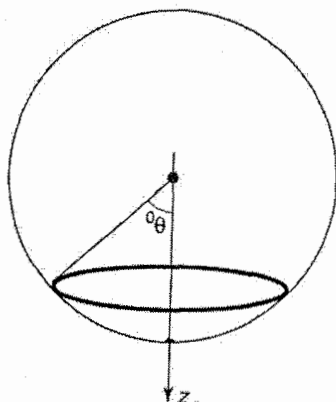
شکل ۶.۱۰: مسیر دلخواه روی سطح یک کره که زاویه فضایی Ω را دربرمی گیرد

اتفاقاً، آونگ فوکو نمونه یک چنین انتقال بی درروبی بدور یک مسیر بسته روی یک کره است - تنها اینبار به جای آنکه خودم آونگ را به اطراف حمل کنم، اجازه می‌دهم چرخش زمین اینکار را انجام دهد. زاویه فضایی دربرگرفته شده توسط یک خط تفکیک طول جغرافیایی (شکل ۷.۱۰) عبارت است از:

$$\Omega \equiv \int \sin \theta \, d\theta \, d\phi = 2\pi(-\cos \theta) \Big|_0^{\theta_0} = 2\pi(1 - \cos \theta_0) \quad [37.10]$$

حرکت تقدیمی روزانه نسبت به زمین (که در این بین زاویه 2π را طی می‌کند) برای آونگ فوکو برابر است با $2\pi \cos \theta_0$ - نتیجه‌ای که به طور معمول با توسل به نیروهای کوریولیس در چارچوب مرجع چرخان بدست می‌آید،^۹ اما در این متن می‌بینیم که نتیجه مذکور تعبیر ژئومتری کاملی را به خود می‌پذیرد.

^۹ برای مثال، کتاب *Classical Dynamics of Particles and Systems* اثر Jerry Marion، ویرایش دوم (نیویورک: انتشارات Academic، ۱۹۷۰) بخش ۴.۱۱ را ملاحظه کنید. جغرافی‌دانان عرض جغرافیایی (λ) را از استوا تا بالا اندازه می‌گیرند، به جای آنکه از قطب به پایین (برای همین $\cos \theta_0$).



شکل ۷.۱۰: مسیر یک آونگ فوکو در مدت زمان یک روز

سامانه‌هایی مانند این که وقتی بدور یک مسیر بسته ترابرد می‌شوند به حالت اولیه باز نمی‌گردند را **غیرهولونوم** می‌خوانند. «ترابرد» در این مساله مستلزم جابه‌جایی فیزیکی نیست: آنچه در نظر داریم این است که پارامترهای خارجی سامانه به نحوی تغییر داده شوند که به تدریج به مقادیر اولیه‌شان بازگردند. سامانه‌های غیرهولونوم همه جا در دسترس هستند - به این مفهوم، هر موتور چرخه‌ای یک دستگاه غیرهولونوم محسوب می‌شود: در پایان هر چرخه موتور کمی رو به جلو حرکت کرده، یا وزنه‌ای به مقدار کم بالا آورده شده و یا چیز دیگری رخ داده است. مدت‌هاست از این ایده برای ترابری میکروپها در مایعاتی با عدد رینولدز پائین استفاده می‌شود.^{۱۰} برنامه من برای بخش بعدی مطالعه فرایندهای غیرهولونوم بی‌دررو در مکانیک کوانتومی است. پرسش اساسی این است که: اگر پارامترهای هامیلتونی به طور بی‌دررو حول یک مسیر بسته ترابرد شوند، حالت نهایی چه فرقی با حالت اولیه می‌کند؟

^{۱۰} مثال آونگ کاربردی از زاویه هُنی است که مانسته کلاسیکی فاز بری به شمار می‌رود. برای مطالعه مجموعه‌ای از مقالات درباره هر دوی اینها، کتاب *Geometric phases in Physics* اثر Frank Wilczek (سنگاپور: انتشارات World Scientific، ۱۹۸۹) را ببینید.

۲۰.۲.۱۰ فاز هندسی

در بخش ۲.۱.۱۰ نشان دادیم ذره‌ای که ابتدا در n امین ویژه حالت $H(0)$ قرار دارد، تحت شرایط بی‌دررو، در n امین ویژه حالت $H(t)$ باقی می‌ماند و تنها یک عامل فاز وابسته به زمان بدست می‌آورد. به بیان ویژه، تابع موج (رابطه ۲۳.۱۰) عبارت است از

$$\psi_n(t) = e^{i[\theta_n(t) + \gamma_n(t)]} \psi_n(x) \quad [۳۸.۱۰]$$

که در آن

$$\theta_n(t) \equiv -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt' \quad [۳۹.۱۰]$$

فاز دینامیکی است (که این فاز عامل متداول $\exp(-iE_n t/\hbar)$ را به موردی تعمیم می‌دهد که در آن E_n تابعی از زمان است)، و

$$\gamma_n(t) \equiv i \int_0^t \left\langle \psi_n(t') \left| \frac{\partial}{\partial t'} \psi_n(t') \right. \right\rangle dt' \quad [۴۰.۱۰]$$

به اصطلاح فاز هندسی نامیده می‌شود.

باید توجه داشت که $\psi_n(x, t)$ وابسته به t است زیرا پارامتری مانند $R(t)$ در هامیلتونی وجود دارد که با زمان تغییر می‌کند. (در مساله ۱.۱۰، $R(t)$ پهنای چاه مربعی نامتناهی بود که دیواره سمت راستش گسترش پیدا می‌کرد.) بدین ترتیب

$$\frac{\partial \psi_n}{\partial t} = \frac{\partial \psi_n}{\partial R} \frac{dR}{dt} \quad [۴۱.۱۰]$$

از اینرو

$$\gamma_n(t) = i \int_0^t \left\langle \psi_n \left| \frac{\partial \psi_n}{\partial R} \right. \right\rangle \frac{dR}{dt'} dt' = i \int_{R_i}^{R_f} \left\langle \psi_n \left| \frac{\partial \psi_n}{\partial R} \right. \right\rangle dR \quad [۴۲.۱۰]$$

که در آن R_i و R_f مقادیر اولیه و نهایی $R(t)$ هستند. به خصوص، اگر هامیلتونی پس از زمان T به شکل اولیه‌اش بازگردد، به طوریکه $R_f = R_i$ شود، آنگاه $\gamma_n(T) = 0$ می‌شود - دیدید چندان هم

چیز جالب توجه‌ی نبود!

با این حال، (در رابطه ۴۱.۱۰) اینطور فرض کردم که فقط یک پارامتر در هامیلتونی وجود دارد که در حال تغییر کردن است. فرض کنید N تا از آنها داشته باشیم: $R_1(t), R_2(t), \dots$ و $R_N(t)$ ؛ در آنصورت

$$\frac{\partial \psi_n}{\partial t} = \frac{\partial \psi_n}{\partial R_1} \frac{dR_1}{dt} + \frac{\partial \psi_n}{\partial R_2} \frac{dR_2}{dt} + \dots + \frac{\partial \psi_n}{\partial R_N} \frac{dR_N}{dt} = (\nabla_R \psi_n) \cdot \frac{d\mathbf{R}}{dt} \quad [۴۳.۱۰]$$

که در آن $\mathbf{R} \equiv (R_1, R_2, \dots, R_N)$ بوده و ∇_R نیز گرادیان نسبت به این پارامترهاست. اینبار داریم

$$\gamma_n(t) = i \int_{R_i}^{R_f} \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle \cdot d\mathbf{R} \quad [۴۴.۱۰]$$

و چنانچه هامیلتونی پس از زمان T به شکل اول خود باز گردد، تغییر فاز هندسی نهایی عبارت است از

$$\gamma_n(T) = i \oint \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle \cdot d\mathbf{R} \quad [۴۵.۱۰]$$

این یک انتگرال بسته حول مسیر محصور در فضای پارامتر است که به طور کلی صفر نیست. رابطه ۴۹.۱۰ را نخستین بار مایکل بری در سال ۱۹۸۴ بدست آورد،^{۱۱} و $\gamma_n(T)$ را فاز بری می‌نامند. دقت کنید که $\gamma_n(T)$ تنها به مسیر پیموده شده بستگی دارد نه آنکه مسیر با چه سرعتی طی شده است (البته به شرط آنکه آنقدر کند انجام شود که فرض بی‌دررو بودن را معتبر کند). در مقابل، فاز دینامیکی انباشته،

$$\theta_n(T) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^T E_n(t') dt'$$

به شکلی بسیار حیاتی به زمان سپری شده وابسته است.

^{۱۱} مقاله M. V. Berry در مجله *Proc. R. Soc. Lond. A* 392, 45 (1984) که در مقاله Wilczek و Shapere

(زیرنویس ۹) مجدداً منتشر شد. با نگاهی به گذشته، حیرت‌انگیز است چنین نتیجه بنیادینی ۶۰ سال کشف نشده باقی مانده بود.

برحسب عادت فاز یک تابع موج را دلبخواه می‌گیریم - کمیت‌های فیزیکی با $|\Psi|^2$ سروکار دارند، برای همین عامل فازی حذف می‌شود. به این دلیل، اکثر افراد تا همین اواخر اینطور فرض می‌کردند که فاز هندسی اهمیت فیزیکی قابل تصویری ندارد - هر چه باشد، فاز $\psi_n(t)$ خودش اختیاری است. این بینش بری بود که اگر هامیلتونی را پیرامون حلقه بسته‌ای ترابرد کرده و آنرا دوباره به شکل اولش باز گردانید، فاز نسبی در ابتدا و انتهای فرایند دیگر دلبخواه و هر مقداری نیست، بلکه در حقیقت می‌توان آنرا اندازه گرفت.

برای مثال، فرض کنید باریکه‌ای از ذرات (که همگی در حالت Ψ باشند) را گرفته و آنرا به دو باریکه تفکیک می‌کنیم، به طوریکه یک باریکه از میان یک پتانسیل متغیر بی‌دررو عبور کند، در حالیکه دیگری اینطور نباشد. وقتی دو باریکه با هم باز ترکیب می‌شوند، تابع موج کل شکل زیر را دارد

$$\Psi = \frac{1}{2}\Psi_0 + \frac{1}{2}\Psi_0 e^{i\Gamma} \quad [46.10]$$

که در آن Ψ_0 تابع موج باریکه «مستقیم» و Γ فاز اضافی است (که از جهتی دینامیکی و از جهت دیگر هندسی است) که برای باریکه‌ای که در معرض یک H متغیر قرار دارد مورد نیاز است. در اینصورت

$$\begin{aligned} |\Psi|^2 &= \frac{1}{4}|\Psi_0|^2(1 + e^{i\Gamma})(1 + e^{-i\Gamma}) \\ &= \frac{1}{2}|\Psi_0|^2(1 + \cos \Gamma) = |\Psi_0|^2 \cos^2(\Gamma/2) \quad [47.10] \end{aligned}$$

پس با جستجوی نقاط تداخلی سازنده و ویرانگر (که در آنها Γ به ترتیب مضرب زوج و فردی از π است)، می‌توان Γ را به آسانی اندازه گرفت. (بری و دیگر نویسندگان پیشین، نگران این بودند که شاید یک فاز دینامیکی بزرگتر فاز هندسی را در خود فرا بگیرد، اما ثابت شده که ترتیب دادن اوضاع به شکلی که سهم‌های آن دو از هم تفکیک شوند امکان‌پذیر است).

وقتی فضای پارامتری سه بعدی باشد، $\mathbf{R} = (R_1, R_2, R_3)$ ، فرمول بری (رابطه ۴۵.۱۰) یادآور عبارت شار مغناطیسی در جملات پتانسیل برداری \mathbf{A} است. شار، Φ ، در سراسر سطح S که با محور C مقید شده (شکل ۸.۱۰) عبارت است از

$$\Phi \equiv \int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{a} \quad [۴۸.۱۰]$$

اگر میدان مغناطیسی را برحسب پتانسیل برداری ($\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$) بنویسیم و قضیه استوکس را اعمال کنیم:

$$\Phi = \int_S (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot d\mathbf{a} = \oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} \quad [۴۹.۱۰]$$

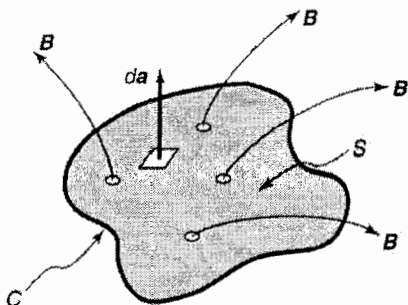
بدین ترتیب می‌توان فاز بری را «شار» میدان مغناطیسی در مسیر (حلقوی بسته) در فضای پارامتری دانست

$$“\mathbf{B}” = i \nabla_R \times \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle \quad [۵۰.۱۰]$$

پس سه بعد، می‌توان فاز بری را به صورت یک انتگرال سطحی نوشت،

$$\gamma_n(t) = i \int [\nabla_R \times \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle] \cdot d\mathbf{a} \quad [۵۱.۱۰]$$

مانسته مغناطیسی را می‌توان از این هم پیش‌تر برد، اما برای مقاصد فعلی ما رابطه ۵۱.۱۰ صرفاً عبارت جایگزین مناسبی برای $\gamma_n(t)$ است.



شکل ۸.۱۰: شار مغناطیسی در سراسر یک سطح S که توسط منحنی بسته C مقید شده است

مساله ۳.۱۰* از رابطه ۴۲.۱۰ استفاده کرده و تغییر فاز هندسی را زمانی که چاه مربعی نامتناهی به طور بی‌دررو از پهنای w_1 تا w_2 گسترش می‌یابد محاسبه کنید. نتیجه حاصل را توجیه کنید.

مساله ۴.۱۰ چاه تابع دلتا (رابطه ۱۱۴.۲) یک حالت مقید تکی را می‌پذیرد (رابطه ۱۲۹.۲). تغییر فاز هندسی زمانی که α به تدریج از α_1 تا α_2 افزایش می‌یابد را محاسبه کنید. اگر افزایش تحت آهنگ ثابتی صورت پذیرد ($d\alpha/dt = c$)، تغییر فاز دینامیکی برای این فرایند چیست؟

مساله ۵.۱۰ همانطور که در متن اشاره کردم (و مساله‌های ۳.۱۰ و ۴.۱۰ هم آنرا تایید می‌کنند)، اگر $\psi_n(x, t)$ حقیقی باشد، فاز هندسی ناپدید می‌شود. می‌توانید این نکته جدی را با گرفتن یک عامل فاز غیر ضروری (اما کاملاً قانونی) برای ویژه توابع به بوته آزمون بگذارید: $\psi'_n(t) \equiv e^{i\phi_n} \psi_n(t)$ که در آن $\phi_n(R)$ تابع (حقیقی) دلخواهی است. امتحان کنید. یک فاز هندسی غیر صفر بدست می‌آورید، بسیار خوب، اما توجه داشته باشید که چه اتفاقی می‌افتد وقتی آنرا در رابطه ۲۳.۱۰ قرار می‌دهید. به ازای یک حلقه بسته صفر می‌دهد. برداشت: برای فاز بری غیر صفر (۱) به چیزی بیشتر از یک پارامتر وابسته به زمان در هامیلتونی و (۲) یک هامیلتونی که ویژه توابع مختلط مهمی بدست دهد، نیاز دارید.

مثال ۲.۱۰ مثال کلاسیکی فاز بری الکترونی در مبداء است که در معرض یک میدان مغناطیسی با بزرگی ثابت اما جهت متغیر قرار دارد. نخستین مورد خاص (که در مثال ۱.۱۰ مورد بررسی قرار گرفت) را در نظر بگیرید که در آن $B(t)$ با سرعت زاویه‌ای ثابت ω در اطراف حرکت تقدیمی انجام داده و زاویه ثابتی مانند α با محور z می‌سازد. جواب قطعی (برای الکترونی که از حالت «اسپین بالا» در امتداد B آغاز می‌کند) از رابطه ۲۳.۱۰ بدست می‌آید. در نظام بی‌دررو، $\omega_1 \ll \omega$ است.

$$\lambda = \omega_1 \sqrt{1 - 2 \frac{\omega}{\omega_1} \cos \alpha + \left(\frac{\omega}{\omega_1}\right)^2} \approx \omega_1 \left(1 + \frac{\omega}{\omega_1} \cos \alpha\right) = \omega_1 - \omega \cos \alpha \quad [52.10]$$

و رابطه ۳۳.۱۰ مبدل می‌شود به

$$\chi(t) \cong e^{i\omega_1 t/2} e^{i(\omega \cos \alpha)t/2} e^{-i\omega t/2} \chi_+(t)$$

$$+ i \left[\frac{\omega}{\omega_1} \sin \alpha \sin \left(\frac{\omega_1 t}{2} \right) \right] e^{+i\omega t/2} \chi_-(t) \quad [۵۳.۱۰]$$

وقتی $\omega/\omega_1 \rightarrow 0$ میل می‌کند جمله دوم به طور کامل حذف می‌شود و نتیجه با شکل بی‌دررو

(رابطه ۲۳.۱۰) کاملاً همخوان می‌گردد. فاز دینامیکی برابر است با:

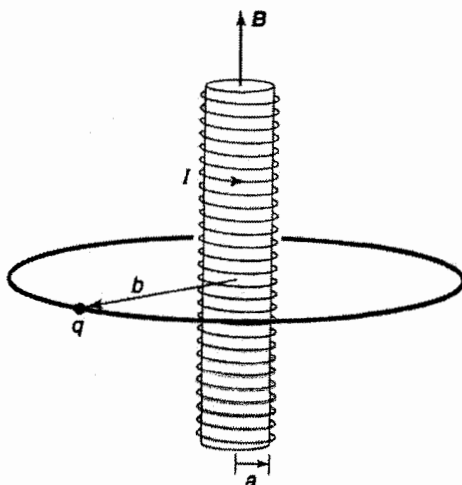
$$\theta_+(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_+(t') dt' = -\frac{\omega_1 t}{2} \quad [۵۴.۱۰]$$

(که در آن $E_+ = \hbar\omega_1/2$ از رابطه ۲۹.۱۰ برداشت می‌شود)، از اینرو فاز هندسی برابر است با:

$$\gamma_+(t) = (\cos \alpha - 1) \frac{\omega t}{2} \quad [۵۵.۱۰]$$

به ازای یک چرخه کامل $T = 2\pi/\omega$ است و بنابراین فاز بری عبارت است از:

$$\gamma_+(T) = \pi(\cos \alpha - 1) \quad [۵۶.۱۰]$$



شکل ۹.۱۰: میدان مغناطیسی با بزرگی ثابت اما جهت متغیر که حلقه بسته‌ای را جاروب می‌کند

حالا یک حالت کلی تر را در نظر بگیرید که در آن راس بردار میدان مغناطیسی منحنی بسته دلخواهی روی سطح کره‌ای به شعاع $r = B_0$ را جاروب می‌کند (شکل ۹.۱۰). ویژه حالت نمایش‌دهنده اسپین بالا در امتداد $B(t)$ به این شکل است (مساله ۳۰.۴ را ملاحظه کنید).

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ e^{i\phi} \sin(\theta/2) \end{pmatrix} \quad [۵۷.۱۰]$$

که در آن θ و ϕ (مختصات کروی B) اکنون هر دو تابعی از زمان هستند. با جستجوی رابطه گرادیان در مختصات کروی، درمی‌یابیم که

$$\nabla \chi_+ = \frac{\partial \chi_+}{\partial r} \hat{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \chi_+}{\partial \theta} \hat{\theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial \chi_+}{\partial \phi} \hat{\phi}$$

$$\frac{1}{r} \begin{pmatrix} -(1/2) \sin(\theta/2) \\ (1/2) e^{i\phi} \cos(\theta/2) \end{pmatrix} \hat{\theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \begin{pmatrix} 0 \\ i e^{i\phi} \sin(\theta/2) \end{pmatrix} \hat{\phi} \quad [۵۸.۱۰]$$

بدین دلیل

$$\begin{aligned} \langle \chi_+ | \nabla \chi_+ \rangle &= \frac{1}{2r} \left[-\sin(\theta/2) \cos(\theta/2) \hat{\theta} + \sin(\theta/2) \cos(\theta/2) \hat{\theta} \right. \\ &\quad \left. + 2i \frac{\sin^2(\theta/2)}{\sin \theta} \hat{\phi} \right] = i \frac{\sin^2(\theta/2)}{r \sin \theta} \hat{\phi} \end{aligned} \quad [۵۹.۱۰]$$

برای رابطه ۶۰.۱۰ به کرل این کمیت نیاز داریم:

$$\nabla \times \langle \chi_+ | \nabla \chi_+ \rangle = \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\sin \theta \left(\frac{i \sin^2(\theta/2)}{r \sin \theta} \right) \right] \hat{r} = \frac{i}{2r^2} \hat{r} \quad [۶۰.۱۰]$$

به این ترتیب، براساس رابطه ۵۱.۱۰،

$$\gamma_+(T) = -\frac{1}{2} \int \frac{1}{r^2} \hat{r} \cdot d\mathbf{a} \quad [۶۱.۱۰]$$

این انتگرال روی مساحت کره‌ای گرفته می‌شود که توسط B در حین چرخه جاروب می‌شود، لذا

$d\mathbf{a} = r^2 d\Omega \hat{r}$ است و در نتیجه

$$\gamma_+(T) = -\frac{1}{2} \int d\Omega = -\frac{1}{2} \Omega \quad [۶۲.۱۰]$$

که در آن Ω زاویه فضایی است که در مبداء در برگرفته می‌شود. این نتیجه ساده بسیار خوشایندی است و به نحوی وسوسه‌انگیز یادآورد مساله کلاسیکی است که با آن بحثمان را شروع کردیم (ترابرد یک آونگ بدون اصطکاک حول مسیر بسته‌ای روی سطح زمین). این نتیجه حکایت از آن دارد که اگر آهن ربایی را برداشته و اسپین الکترون را در اطراف یک مسیر بسته به صورت بی‌دررو هدایت کنید، تغییر فاز (هندسی) خالص منفی یک دوم زاویه فضایی خواهد بود که توسط بردار میدان مغناطیسی جاروب می‌شود. از منظر رابطه ۳۷.۱۰، نتیجه کلی با حالت خاص رابطه ۵۶.۱۰ سازگار است و طبعاً باید هم اینطور می‌بود.

مساله ۶.۱۰*** مانسته رابطه ۶۲.۱۰ را برای ذره‌ای با اسپین 1 بدست آورید. پاسخ: $-\Omega$ (ضمناً، برای اسپین s نتیجه عبارت می‌شود از $-s\Omega$).

۴.۲.۱۰ اثر آهارانوف - بوهم

در الکترودینامیک کلاسیک پتانسیل‌ها $(\varphi$ و A)^{۱۲} مستقیماً قابل اندازه‌گیری نیستند - کمیت‌های فیزیکی عبارتند از میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی:

$$E = -\nabla\varphi - \frac{\partial A}{\partial t}, B = \nabla \times A \quad [۶۳.۱۰]$$

قوانین بنیادین این نظریه (معادلات ماکسول و قانون نیروی لورنتز) اشاره به پتانسیل‌هایی ندارند که (از یک دیدگاه منطقی) نه تنها کار کردن با آنها راحت نیست بلکه چیزی نیستند به جز ساختارهای نظری غیر ضروری. قدر مسلم، کاملاً آزادید که پتانسیل‌ها را تغییر دهید:

$$\varphi \rightarrow \varphi' = \varphi - \frac{\partial \Lambda}{\partial t}, A \rightarrow A' = A + \nabla \Lambda \quad [۶۴.۱۰]$$

^{۱۲} در مکانیک کوانتومی معمول است که از حرف V برای انرژی پتانسیل استفاده می‌کنند، ولی در الکترودینامیک همین حرف مختص پتانسیل نرده‌ای است. برای اجتناب از اشتباه گرفتن من φ را به عنوان پتانسیل به کار می‌برم. مساله ۵۹.۴، ۶۰.۴ و ۶۱.۴ را به عنوان پیش زمینه‌ای برای این مطلب ملاحظه کنید.

که در آن Λ تابعی دلخواه از مکان و زمان است؛ این را یک تبدیل پیمانه‌ای می‌نامند که هیچ تاثیری روی میدان‌ها ندارد (می‌توانید با استفاده از رابطه ۶۳.۱۰ به آسانی آنرا بررسی کنید).

در مکانیک کوانتومی پتانسیل‌ها نقش بسیار با اهمیت‌تری ایفا می‌کنند، چون هامیلتونی برحسب φ و A بیان می‌شود نه E و B :

$$H = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - qA \right)^2 + q\varphi \quad [۶۵.۱۰]$$

با این وجود، نظریه کماکان تحت تبدیلات پیمانه‌ای ناورد می‌ماند (مساله ۶۱.۴ را ببینید) و تا مدتی طولانی تا همین اواخر مسلم پنداشته می‌شد که هیچ تاثیر الکترومغناطیسی در مناطقی که در آنها E و B صفر است وجود ندارد - نه بیشتر از آنکه می‌تواند در نظریه کلاسیکی وجود داشته باشد. اما در سال ۱۹۵۹ آهارانوف و بوهم^{۱۳} نشان دادند پتانسیل برداری می‌تواند رفتار کوانتومی یک ذره باردار را حتی آن زمانی تحت تاثیر قرار دهد که ذره در حال عبور از میان منطقه‌ای باشد که در آن میدان خودش صفر است. ابتدا مثالی ساده را بررسی کرده و سپس در باره خود اثر آهارانوف - بوهم بحث می‌کنم و در نهایت هم نشان می‌دهم چگونه می‌توان این اثر را به عنوان مثالی از فاز بری در نظر گرفت.

ذره‌ای را مجسم کنید که مقید به حرکت در دایره‌ای به شعاع b است (اگر دوست دارید، مهره‌ای روی یک حلقه سیمی را در نظر بگیرید). در امتداد محور آن دایره پیچه‌ای به شعاع $a < b$ وجود دارد که حامل جریان الکتریکی پایدار I است (شکل ۱۰.۱۰ را ملاحظه کنید). اگر پیچه بسیار بلند باشد، میدان داخل آن یکنواخت و میدان خارج آن صفر خواهد بود. اما پتانسیل برداری بیرون از پیچه صفر نیست؛ در حقیقت، (با اختیار کردن شرط پیمانه‌ای $\nabla \cdot A = 0$)^{۱۴}

$$A = \frac{\Phi}{2\pi r} \hat{\phi}, (r > a) \quad [۶۶.۱۰]$$

^{۱۳} مقاله Y. Aharonov و D. Bohm در مجله *Phys. Rev.* **115**, 485 (1959). برای یک پیش درآمد حائز اهمیت،

مقاله W. Ehrenberg و R. E. Siday را در مجله *Proc. Phys. Soc. London*, **B62**, 8 (1949) را ببینید.

^{۱۴} برای نمونه، کتاب *Introduction to Electrodynamics* اثر D. J. Griffiths ویرایش دوم (انگلرود کلیفز،

که در آن $\Phi = \pi a^2 B$ شار مغناطیسی در امتداد پیچه است. در این بین، پیچه بدون بار است، لذا پتانسیل اسکالر φ صفر است. در اینصورت هامیلتونی (رابطه ۶۵.۱۰) به این شکل درمی‌آید

$$H = \frac{1}{2m} [-\hbar^2 \nabla^2 + q^2 A^2 + 2i\hbar q \mathbf{A} \cdot \nabla] \quad [۶۷.۱۰]$$

اما تابع موج تنها به زاویه سمتی ϕ وابسته است ($r = b$ و $\theta = \pi/2$) بنابراین $\nabla \rightarrow (d/d\phi)(\hat{\phi}/b)$ بوده و معادله شرودینگر اینطور خوانده می‌شود

$$\frac{1}{2m} \left[-\frac{\hbar^2}{b^2} \frac{d^2}{d\phi^2} + \left(\frac{q\Phi}{2\pi b} \right)^2 + i \frac{\hbar q \Phi}{\pi b^2} \frac{d}{d\phi} \right] \psi(\phi) = E \psi(\phi) \quad [۶۸.۱۰]$$

این یک معادله دیفرانسیل خطی با ضرایب ثابت است:

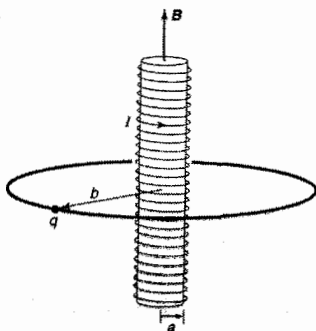
$$\frac{d^2 \psi}{d\phi^2} - 2i\beta \frac{d\psi}{d\phi} + \epsilon \psi = 0 \quad [۶۹.۱۰]$$

که در آن

$$\beta \equiv \frac{q\Phi}{2\pi\hbar} \quad \text{و} \quad \epsilon \equiv \frac{2mb^2 E}{\hbar^2} - \beta^2 \quad [۷۰.۱۰]$$

جواب‌های به این شکل هستند

$$\psi = A e^{i\lambda\phi} \quad [۷۱.۱۰]$$



شکل ۱۰.۱۰: مهره باردار روی یک حلقه دایره‌ای که از میان آن پیچه‌ای بلند عبور می‌کند

با در نظر گرفتن

$$\lambda = \beta \pm \sqrt{\beta^2 + \epsilon} = \beta \pm \frac{b}{\hbar} \sqrt{2mE} \quad [۷۲.۱۰]$$

پیوستگی $\psi(\phi)$ در $\phi = 2\pi$ مستلزم آن است که λ یک عدد صحیح باشد:

$$\beta \pm \frac{b}{\hbar} \sqrt{2mE} = n \quad [۷۳.۱۰]$$

سپس می‌توان چنین نتیجه گرفت که

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2mb^2} \left(n - \frac{q\Phi}{2\pi\hbar} \right)^2, (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad [۷۴.۱۰]$$

پیچه، تبهگنی دو تایه مهره روی حلقه را از بین می‌برد (مساله ۴۶.۲): n مثبت که نشان دهنده ذره‌ای در حال حرکت در همان جهتی است که جریان در پیچه طی می‌کند، یکجور انرژی پائین‌تر دارد (با این فرض که q مثبت است) نسبت به n منفی که ذره‌ای در حال حرکت در جهت مخالف را توصیف می‌کند. از این هم مهمتر آنکه انرژی‌های مجاز آشکارا به میدان داخل پیچه وابسته هستند، هرچند میدان در مکان ذره صفر باشد.^{۱۵}

به طور کلی‌تر، فرض کنید ذره‌ای در حال حرکت از میان منطقه‌ای است که در آن B صفر است (لذا $\nabla \times \mathbf{A} = 0$ است) اما خود \mathbf{A} صفر نیست. (فرض من بر این خواهد بود که \mathbf{A} ایستا است، اگر چه این روش را می‌توان به پتانسیل‌های وابسته به زمان تعمیم داد.) معادله شرودینگر (وابسته به زمان)،

$$\left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A} \right)^2 + V \right] \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad [۷۵.۱۰]$$

^{۱۵} این ویژگی منحصر به فرد حلقه‌های ابررسانا است که شار محاط شده کوانتیزه است: $\Phi = (2\pi\hbar/q)n'$ که در آن n' عددی صحیح است. در اینصورت نمی‌توان اثر را آشکار کرد، چراکه $E_n = (\hbar^2/2mb^2)(n + n')^2$ است و $(n + n')$ هم صرفاً عدد صحیح دیگری است. (ضمن آنکه، بار q در اینجا دو برابر بار الکترون است؛ الکترون‌های ابررسانا در ساختارهای جفتی به همدیگر قفل می‌شوند.) با این حال، این ابررسانا است که شار را به کوانتش وامی‌دارد (به طوریکه جریانهای پیچشی را وادار به ایجاد اختلاف می‌کند)، نه پیچه یا میدان الکترومغناطیسی که تازه آن هم در

مثالی که اینجا بررسی کردیم رخ نمی‌دهد. **snap.sellfile.ir**

را می‌توان با در نظر گرفتن انرژی پتانسیل V - که ممکن است شامل یک سهم الکتریکی $q\varphi$ بوده یا نباشد - به این صورت ساده کرد

$$\Psi = e^{ig}\Psi' \quad [۷۶.۱۰]$$

که در آن

$$g(r) \equiv \frac{q}{\hbar} \int_0^r \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' \quad [۷۷.۱۰]$$

که O یک نقطه مرجع (با انتخاب دلخواه) است. دقت کنید این تعریف تنها زمانی معنی دار است که در سراسر منطقه مورد سوال $\nabla \times \mathbf{A} = 0$ شود - در غیر اینصورت انتگرال بسته به تمامی وابسته به مسیر طی شده از O تا r خواهد بود و در نتیجه تعریف کننده تابعی از r نمی‌شود. گرادیان Ψ برحسب Ψ' عبارت است از

$$\nabla \Psi = e^{ig} (i\nabla g) \Psi' + e^{ig} (\nabla \Psi')$$

اما $\nabla g = (q/\hbar)\mathbf{A}$ است، لذا

$$\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - q\mathbf{A}\right)\Psi = \frac{\hbar}{i}e^{ig}\nabla\Psi' \quad [۷۸.۱۰]$$

و خلاصه می‌توان چنین نتیجه گرفت که

$$\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - q\mathbf{A}\right)^2 \Psi = -\hbar^2 e^{ig} \nabla^2 \Psi' \quad [۷۹.۱۰]$$

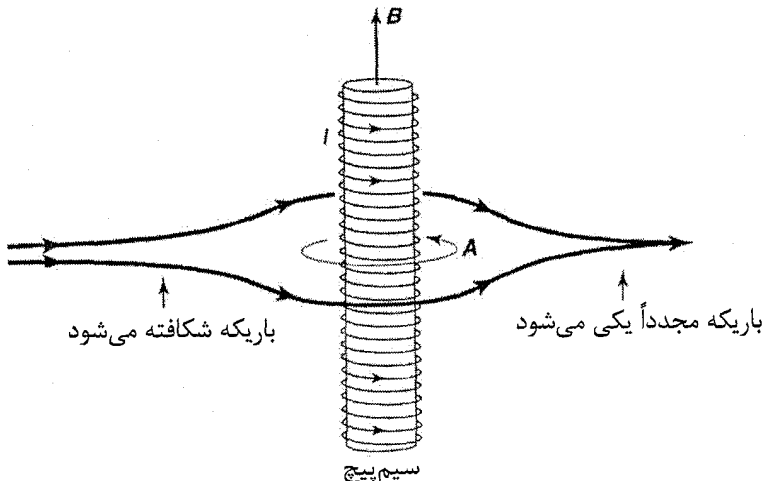
با قرار دادن این نتیجه در رابطه ۸۴.۱۰ و حذف عامل مشترک e^{ig} ، آنچه باقی می‌ماند عبارت است از

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi' + V\Psi' = i\hbar \frac{\partial \Psi'}{\partial t} \quad [۸۰.۱۰]$$

آشکار است که Ψ' در معادله شرودینگر بدون A صدق می‌کند. اگر بتوانیم رابطه ۸۹.۱۰ را حل کنیم، تصحیح حضور یک پتانسیل برداری (که کرل آن صفر است) اهمیت چندانی ندارد: تنها کافی است عامل فاز e^{ig} را به آن بیفزایید.

آهارانوف و بوهم آزمایشی را پیش کشیدند که در آن باریکه‌ای از الکترون‌ها به دو باریکه شکافته می‌شود و هر باریکه پیش از آنکه مجدداً ترکیب شود از یک سمت پیچه بلندی عبور می‌کند (شکل ۱۱.۱۰). این دو باریکه خودشان به خوبی از پیچه فاصله می‌گیرند، از اینرو تنها با منطقه‌ای مواجه می‌شوند که در آن $B = 0$ است. اما A که از رابطه ۷۵.۱۰ بدست می‌آید صفر نیست و به همین سبب (با این فرض که V در هر دو سمت یکسان است) دو باریکه با فازهای متفاوت به هم می‌رسند:

$$g = \frac{q}{\hbar} \int \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = \frac{q\Phi}{2\pi\hbar} \int \left(\frac{1}{r} \hat{\phi}\right) \cdot (r \hat{\phi} d\phi) = \pm \frac{q\Phi}{2\hbar} \quad [۱۱.۱۰]$$



شکل ۱۱.۱۰: اثر آهارانوف - بوهم: باریکه الکترونی شکافته می‌شود به طوریکه هر نیمه آن از یک سمت پیچه بلند عبور می‌کند

علامت مثبت برای الکترون‌هایی به کار می‌رود که هم جهت با A حرکت می‌کنند - مثل آن است که بگوییم، هم جهت با جریان پیچه. باریکه‌ها با فازهایی نابرابر به هم می‌رسند که میزان اختلافشان متناسب است با شار مغناطیسی که مسیرهایشان محاط می‌کنند:

$$[۸۲.۱۰] \quad \text{اختلاف فاز} = \frac{q\Phi}{\hbar}$$

این انتقال فاز به تداخلی قابل اندازه‌گیری منتهی می‌شود (همانطور که در رابطه ۴۷.۱۰ نشان داده شده) و توسط Chambers و دیگران در آزمایشگاه تأیید شده است.^{۱۶}

همانطور که بری در نخستین مقاله‌اش در اینباره اشاره کرد، اثر آهارانوف - بوهم را می‌توان مثالی از یک فاز هندسی دانست. فرض کنید ذره بارداری مقید به جعبه‌ای است (که مرکزش در نقطه‌ای مانند R در خارج از پیچه قرار داده می‌شود) همراه با یک پتانسیل $V(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ - شکل ۱۲.۱۰ را ملاحظه کنید. (می‌خواهیم در یک لحظه جعبه را حول پیچه ترابرد کنیم، لذا تابعی از زمان می‌شود اما فعلاً فقط یک بردار ثابت است.) ویژه توابع هامیلتونی به این ترتیب تعیین می‌شوند

$$[۸۳.۱۰] \quad \left\{ \frac{1}{2m} \left[\frac{\hbar}{i} \nabla - qA(\mathbf{r}) \right]^2 + V(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \right\} \psi_n = E_n \psi_n$$

پیشتر آموختیم که معادلاتی با این شکل را چگونه حل کنیم:

$$[۸۴.۱۰] \quad \psi_n = e^{iq\psi'_n}$$

که در آن^{۱۷}

^{۱۶} مقاله R. G. Chambers در مجله *Phys. Rev. Lett.* 5, 3 (1996) را ملاحظه کنید.

^{۱۷} آسان‌تر آن است که نقطه مرجع O را در مرکز جعبه تنظیم کنیم چون این کار تضمین می‌کند که وقتی حرکت بدور پیچه را به اتمام برسانیم، فاز اصلی مرسوم برای ψ_n را دوباره بدست آوریم. اگر برای مثال از یک نقطه ثابت در فضا استفاده کنید مجبورید فاز را در انتهای آن سو دوباره «به طور دستی» تنظیم کنید؛ این کار دقیقاً به همان جواب ختم می‌شود، اما شیوه‌ای ابتدایی برای انجام این کار است. به طور کلی، وقتی فاز مرسوم برای ویژه توابع در رابطه ۹.۱۰ را

$$g \equiv \frac{q}{\hbar} \int_R^r \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' \quad [۸۵.۱۰]$$

و ψ' هم در همان معادله ویژه مقداری صدق می‌کند، تنها با در نظر گرفتن $A \rightarrow 0$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \right] \psi'_n = E_n \psi'_n \quad [۸۶.۱۰]$$

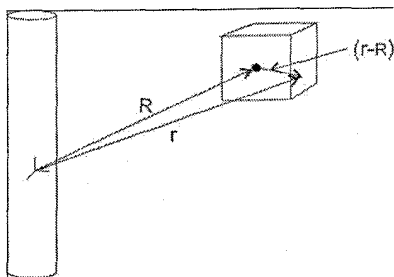
توجه داشته باشید که ψ'_n فقط تابعی از ترکیب $(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ است نه (مانند ψ_n) از \mathbf{r} و \mathbf{R} به طور جداگانه.

اکنون بیاید جعبه را حول پیچه جابه‌جا کنیم (در این مورد، این فرایند حتی نیازی به بی‌دررو بودن هم ندارد). برای تعیین فاز بری، می‌بایست پیش از هر چیز کمیت $\langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle$ را ارزیابی کنیم. با توجه به:

$$\nabla_R \psi_n = \nabla_R [e^{ig} \psi'_n(\mathbf{r} - \mathbf{R})] = -i \frac{q}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{R}) e^{ig} \psi'_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) + e^{ig} \nabla_R \psi'_n(\mathbf{r} - \mathbf{R})$$

در می‌یابیم که

$$\begin{aligned} \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle &= \int e^{-ig} [\psi'_n(\mathbf{r} - \mathbf{R})]^* e^{ig} \left[-i \frac{q}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \psi'_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) + \nabla_R \psi'_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \right] d^3r \\ &= -i \frac{q}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{R}) - \int [\psi'_n(\mathbf{r} - \mathbf{R})]^* \nabla \psi'_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) d^3r \end{aligned} \quad [۸۷.۱۰]$$



شکل ۱۲.۱۰: ذره مقید به جعبه‌ای است با پتانسیل $V(\mathbf{r} - \mathbf{R})$

انتخاب می‌کنید، می‌خواهید اطمینان حاصل کنید که $\psi_n(x, T) = \psi_n(x, 0)$ است به طوریکه هیچ تغییر فاز ساختگی

افزوده نشده باشد.

∇ بدون هیچ اندیسی نشانگر گرادینان نسبت به \mathbf{r} است و به علاوه از این حقیقت استفاده کردم که وقتی روی تابعی از $(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ کار می‌کنیم $\nabla_{\mathbf{R}} = -\nabla$ است. اما آخرین انتگرال برابر است با i/\hbar ضربدر مقدار چشمداشتی تکانه در یک ویژه حالت از هامیلتونی $-\hbar^2/2m \nabla^2 + V$ که از رابطه ۱.۲ می‌دانیم صفر است. بنابراین:

$$\langle \psi_n | \nabla_{\mathbf{R}} \psi_n \rangle = -i \frac{q}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \quad [۸۸.۱۰]$$

با قرار دادن این عبارت در فرمول فاز بری (رابطه ۴۹.۱۰) به این نتیجه می‌رسیم که:

$$\gamma_n(T) = \frac{q}{\hbar} \oint \mathbf{A}(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R} = \frac{q}{\hbar} \int (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot d\mathbf{a} = \frac{q\Phi}{\hbar} \quad [۸۹.۱۰]$$

که در نهایت نتیجه آهارانوف - بوهم (رابطه ۸۲.۱۰) را تایید کرده و نشان می‌دهد اثر آهارانوف - بوهم نمونه خاصی از فاز هندسی است.^{۱۸}

اثر آهارانوف - بوهم چه استفاده‌ای برای ما دارد؟ آشکار است که پیش پنداشت‌های کلاسیکی مان به وضوح نادرست هستند. اثرات الکترومغناطیسی می‌توانند در مناطقی که در آنها میدان‌ها صفر هستند وجود داشته باشند. با این حال، دقت کنید که به این ترتیب خود \mathbf{A} قابل اندازه‌گیری نمی‌شود - تنها شار محصور به جواب نهایی راه می‌یابد و نظریه هم ناوردای پیمانه‌ای می‌ماند.

مساله ۷.۱۰

(الف) رابطه ۶۷.۱۰ را از رابطه ۶۵.۱۰ استخراج کنید.

(ب) رابطه ۷۹.۱۰ را از رابطه ۷۸.۱۰ استخراج کنید.

^{۱۸} ضمناً، در این حالت مشابهت میان فاز بری و شار مغناطیسی (رابطه ۵۰.۱۰) تقریباً به یک برابری تبدیل می‌شود:

$$"B" = (q/\hbar)B$$

مسائل دیگری برای فصل ۱۰

مسئله ۸.۱۰*** ذره‌ای ابتدا در حالت پایه چاه مربعی نامتناهی (در بازه $0 \leq x \leq a$) قرار دارد. حال به آرامی دیواری کمی آنطرف تر از مرکز درست می‌شود:^{۱۹}

$$V(x) = f(t)\delta\left(x - \frac{a}{2} - \epsilon\right)$$

که در آن $f(t)$ به تدریج از صفر تا بینهایت افزایش می‌یابد. بنابر قضیه بی‌دررو، ذره در حالت پایه هامیلتونی در حال تحول باقی می‌ماند.

(الف) حالت پایه در $t \rightarrow \infty$ را بدست آورده و نمودار آنرا رسم کنید. راهنمایی: این باید حالت پایه چاه مربعی با یک سد غیر قابل نفوذ در $t/2 + \epsilon$ باشد. دقت کنید ذره مقید به «نیمه» چپ (کمی) بزرگتر چاه است.

(ب) معادله (متعالی) حالت پایه هامیلتونی را در لحظه t بدست آورید. پاسخ:

$$z \sin z = T[\cos z - \cos(z\delta)]$$

که در آن $k \equiv \sqrt{2mE}/\hbar$ و $\delta \equiv 2\epsilon/a$ ، $T \equiv maf(t)/\hbar^2$ ، $z \equiv ka$

(پ) با تنظیم $\delta = 0$ ، رابطه را از روی نمودار برای z حل کرده و نشان دهید کوچکترین

مقدار z به ازای تغییر T از ۰ تا ∞ تا π تا 2π می‌رود. نتیجه حاصل را توضیح دهید.

(ت) حالا قرار دهید $\delta = 0.01$ و رابطه را به صورت عددی برای z با استفاده از

$T = 0, 1, 5, 20, 100, 1000$ حل کنید.

(ث) احتمال P_T را که ذره در سمت «راست» چاه باشد به صورت تابعی از z و δ بدست آورید.

پاسخ:

$$P_T = 1/[1 + I_+/I_-]$$

^{۱۹} Julia Gea-Banacloche در مقاله‌اش در مجله *Am. J. Phys.*, **70**, 307 (2002) از دیواره مستطیلی استفاده

می‌کند؛ نسخه تابع دلتا را M. Lanker در *Am. J. Phys.*, **71**, 515 (1993) پیشنهاد کرد.

که در آن

$$I_{\pm} \equiv [1 \pm \delta - (1/z) \sin(z(1 \pm \delta))] \sin^2[z(1 \mp \delta)/2]$$

این عبارت را به صورت عددی برای T های بخش (پ) برآورد کنید. نتایج خود را توضیح دهید.
(ج) تابع موج حالت پایه را برای مقادیر یکسان T و δ بدست آورید. دقت کنید چطور این تابع با رشد مانع در نیمه سمت چپی چاه به هم فشرده می‌شود.^{۲۰}

مسئله ۹.۱۰*** فرض کنید نوسانگر هماهنگ یک بعدی (به جرم m و بسامد ω) در معرض نیروی رانش‌گری به شکل $F(t) = m\omega^2 f(t)$ قرار دارد که در آن $f(t)$ تابع ویژه‌ای است (برای راحتی نمادگذاری از $m\omega^2$ فاکتور گرفته و آنرا بیرون آورده‌ام؛ دقت کنید که $f(t)$ دارای ابعاد طول است). هامیلتونی از این قرار است

$$H(t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 - m\omega^2 x f(t) \quad [9.10]$$

اینطور فرض کنید که نیروی مذکور در آغاز از لحظه $t = 0$ اعمال می‌شود: برای $t \leq 0$ داریم $f(t) = 0$. می‌توان این سامانه را به طور دقیق هم در مکانیک کلاسیک و هم در مکانیک کوانتومی حل کرد.^{۲۱}

(الف) مکان کلاسیکی نوسانگر را با این فرض که نوسانگر از حالت سکون در مبداء $(x_0 = \dot{x}_0(0) = 0)$ است تعیین کنید. پاسخ:

$$x_c(t) = \omega \int_0^t f(t') \sin[\omega(t - t')] dt' \quad [9.10]$$

^{۲۰} Gea-Banacloche (زیرنویس ۱۹) تحول تابع موج را بدون فرض گرفتن قضیه بی‌دررو مورد بحث قرار داده و نتایج حد بی‌دررو را تصدیق می‌کند.

^{۲۱} مقاله Y. Nogami در مجله *Am. J. Phys.* 59, 64 (1991) و مراجع داخل آن را ملاحظه کنید.

(ب) نشان دهید جواب معادله شرودینگر (وابسته به زمان) برای این نوسانگر، با فرض آنکه در n امین حالت دست نخورده نوسانگر $\Psi(x, t) = \psi_n(x)$ که در آن از رابطه ۶۱.۲ بدست می‌آید) قرار دارد را می‌توان به این صورت نوشت

$$\Psi(x, t) = \psi_n(x - x_c) e^{\frac{i}{\hbar} \left[-\left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega t + m x_c \left(x - \frac{x_c}{2}\right) + \frac{m \omega^2}{2} \int_0^t f(t') x_c(t') dt' \right]} \quad [92.10]$$

(پ) نشان دهید ویژه توابع و ویژه مقادیر $H(t)$ عبارتند از

$$\psi_n(x, t) = \psi_n(x - f); E_n(t) = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega - \frac{1}{2} m \omega^2 f^2 \quad [93.10]$$

(ت) نشان دهید در تقریب بی‌دررو، مکان کلاسیکی (رابطه ۹۱.۱۰) به $x_c(t) \cong f(t)$ ساده می‌شود. راهنمایی: از ترفند انتگرال پاره‌ای بخش ۲.۱.۱۰ استفاده کنید. ملاک دقیق - مانسته رابطه ۱۵.۱۰ - را برای بی‌دررو بودن بیان کنید.

(ث) با استفاده از نتیجه بخش (پ) و (ت) و نشان دادن صحت رابطه زیر، قضیه بی‌دررو را برای این مثال بررسی کنید.

$$\Psi(x, t) \cong \psi_n(x, t) e^{i\theta_n(t)} e^{i\gamma_n(t)} \quad [94.10]$$

بررسی کنید آیا فاز دینامیکی شکل صحیح (رابطه ۳۹.۱۰) را دارد. آیا فاز هندسی همان چیزی است که انتظار داشتید؟

مساله ۱۰.۱۰ می‌توان تقریب بی‌دررو را به عنوان نخستین جمله در یک سری بی‌دررو برای ضرایب $c_m(t)$ در رابطه ۱۲.۱۰ گرفت. فرض کنید سامانه ابتدا در n امین حالت قرار دارد: در تقریب بی‌دررو، سامانه تنها با گرفتن یک عامل فاز هندسی وابسته به زمان (رابطه ۲۱.۱۰) در همان حالت n ام باقی می‌ماند:

$$c_m(t) = \delta_{mn} e^{i\gamma_n(t)}$$

(الف) این عبارت را در طرف راست رابطه ۱۶.۱۰ قرار دهید تا «اولین تصحیح» بی‌دررو بودن را بدست آورید:

$$c_m(t) = c_m(0) - \int_0^t \left(\psi_m(t') \left| \frac{\partial}{\partial t'} \psi_n(t') \right\rangle e^{-\gamma_n} e^{i(\theta_n(t') - \theta_m(t'))} \right) dt' \quad [95.10]$$

این رابطه ما را قادر می‌سازد احتمال‌های نزدیک به نظام بی‌دررو را محاسبه کنیم. برای بوجود آوردن «تصحیح دوم» رابطه ۹۵.۱۰ را در سمت راست رابطه ۱۶.۱۰ قرار می‌دهیم و همینطور تا آخر.

(ب) به عنوان یک مثال، رابطه ۹۵.۱۰ را در مورد نوسانگری که تحت رانش قرار دارد (مساله ۹.۱۰) به کار بگیرید. نشان دهید (در تقریب نزدیک به بی‌دررو) گذارها تنها برای دو سطح مجاور بلافصلی امکان‌پذیرند که برای آنها.

$$c_{n+1}(t) = i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\sqrt{n+1}\int_0^t \dot{f}(t')e^{i\omega t'}dt'$$

$$c_{n-1}(t) = i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\sqrt{n}\int_0^t \dot{f}(t')e^{-i\omega t'}dt'$$

(طبعاً احتمال‌های گذار مربعات کامل همین‌ها هستند).

پاز دهم

فصل

پراکندگی

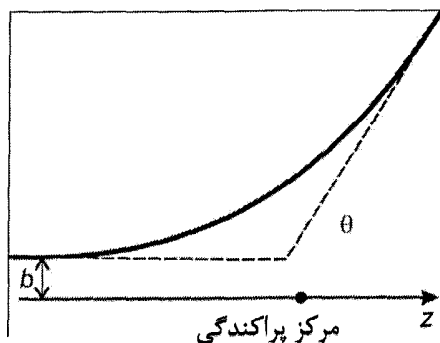
۱.۱.۱ مقدمه

۱.۱.۱.۱ نظریه پراکندگی کلاسیک

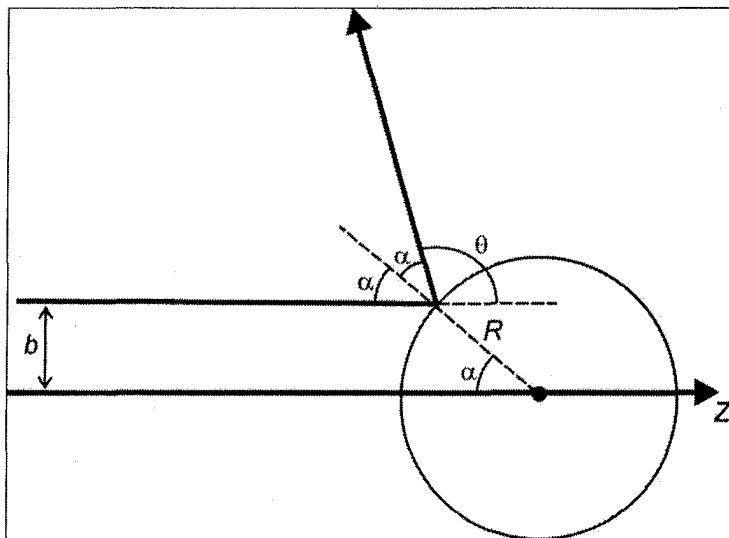
ذره‌ای را مجسم کنید که در مرکز یکجور پراکندگی (به فرض، پروتونی که به سمت یک هسته سنگین شلیک شده) قرار دارد. ذره با انرژی E و پارامتر برخورد b وارد شده و در زاویه پراکندگی θ نمایان می‌شود. شکل ۱.۱۱ را ببینید. (فرض من بر این خواهد بود که برای سادگی هدف به طور مجانبی متقارن است، لذا مسیر حرکت در یک صفحه باقی می‌ماند و نیز آنکه هدف بسیار سنگین است، به همین جهت پس‌زنی قابل چشم پوشی است.) مساله اصلی در پراکندگی کلاسیک این است: با داشتن پارامتر برخورد، زاویه پراکندگی را محاسبه کنید. طبعاً به طور معمول، هرچه پارامتر برخورد کوچکتر باشد، زاویه پراکندگی بزرگتر خواهد بود.

مثال ۱.۱۱ پراکندگی از گوی سخت. فرض کنید هدف گوی بیلیاردی به شعاع R است و ذره فرودی هم گلوله بسیار کوچکی است که به طور کشسان و امی‌جهد (شکل ۲.۱۱). پارامتر برخورد برحسب زاویه α برابر است با $b = R \sin \alpha$ و زاویه پراکندگی هم برابر است با $\theta = \pi - 2\alpha$ ، لذا:

$$b = R \sin \left(\frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2} \right) = R \cos \left(\frac{\theta}{2} \right) \quad [1.11]$$



شکل ۱.۱۱: مساله پراکندگی کلاسیکی که پارامتر برخورد b و زاویه پراکندگی θ را نمایش می‌دهد



شکل ۲.۱۱: پراکندگی کشسان از گوی سخت

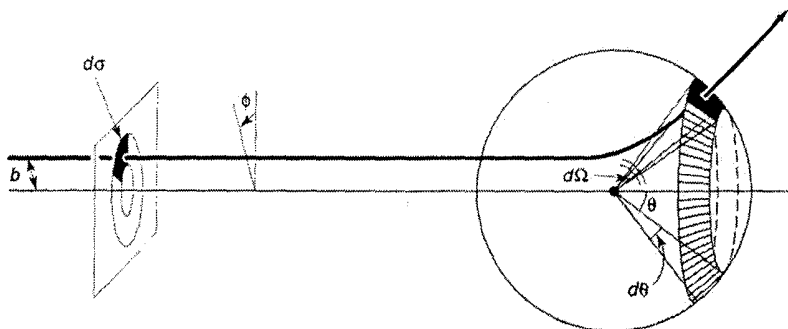
آشکار است که

$$\theta = \begin{cases} 2 \cos^{-1}(b/R), & b \leq R \\ 0, & b \geq R \end{cases} \quad [2.11]$$

به بیان کلی‌تر، ذرات فرودی به داخل تکه فوق‌العاده کوچکی از محدوده مقطع برخورد، $d\sigma$ ، به درون زاویه فضایی متناظر فوق‌العاده کوچک $d\Omega$ پراکنده می‌شوند (شکل ۳.۱۱). هرچه $d\sigma$ بزرگتر باشد، $d\Omega$ هم بزرگتر خواهد بود؛ عامل تناسب، $D(\theta) \equiv d\sigma/d\Omega$ ، را مقطع برخورد (پراکندگی) دیفرانسیلی^۱ می‌نامند:

$$d\sigma = D(\theta)d\Omega \quad [3.11]$$

^۱ بیان بسیار بدی است: D دیفرانسیل نیست و تازه مقطع برخورد هم نیست. با شنیدن واژه‌های «مقطع برخورد دیفرانسیلی» به طور معمول $d\sigma$ به ذهن متبادر می‌شود. اما متأسفم که گیرمان سر نکته‌ای مربوط به واژه‌گزینی است. همچنین باید متذکر شوم که نمادگذاری $D(\theta)$ استاندارد نیست: اکثر افراد صرفاً آنرا $d\sigma/d\Omega$ می‌خوانند - که کاری می‌کند رابطه ۳.۱۱ شبیه تکرار واضحات به نظر آید. به نظر من اگر به سطح مقطع دیفرانسیلی علامت خودش را بدهیم کمتر گیج می‌شویم.



شکل ۳.۱۱: ذرات فرودی به مساحت $d\sigma$ به درون زاویه فضایی $d\Omega$ پراکنده می‌شوند

برحسب پارامتر برخورد و زاویه سمتی ϕ داریم $d\sigma = b db d\phi$ و $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$ ، پس

$$D(\theta) = \frac{b}{\sin\theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right| \quad [۴.۱۱]$$

(از آنجاکه θ به طور نوعی و معمول تابعی نزولی از b است، مشتق آن در حقیقت منفی است - به این دلیل از علامت قدر مطلق استفاده می‌شود).

مثال ۲.۱۱ پراکندگی از گوی سخت (ادامه). در مورد پراکندگی از گوی سخت (رابطه ۱.۱۱) داریم

$$\frac{db}{d\theta} = -\frac{1}{2} R \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad [۵.۱۱]$$

پس

$$D(\theta) = \frac{R \cos(\theta/2)}{\sin\theta} \left(\frac{R \sin(\theta/2)}{2} \right) = \frac{R^2}{4} \quad [۶.۱۱]$$

این، مثالی غیرعادی است که در آن سطح مقطع دیفرانسیلی در واقع مستقل از θ است. سطح

مقطع کل برابر است با انتگرال $D(\theta)$ روی تمام زوایای فضایی:

$$\sigma \equiv \int D(\theta) d\Omega \quad [۷.۱۱]$$

به بیان کلی، مساحت کل باریکه فرودی توسط هدف پراکنده می‌شود. برای مثال، در مورد پراکندگی از گوی سخت،

$$\sigma \equiv (R^2/4) \int d\Omega = \pi R^2 \quad [۸.۱۱]$$

که دقیقاً همانی است که انتظار داشتیم: این مساحت سطح مقطع کره است؛ گلوله‌های بسیار کوچک وارد این محدوده شده و به هدف اصابت می‌کنند و آنهایی که دورتر هستند به طور کامل به خطا می‌روند. اما ارزش صورت‌بندی که اینجا توسعه یافت در این است که برای اهداف «نرم» (مانند میدان کولنی یک هسته) هم به خوبی به کار می‌رود که آنجا هم به وضوح اینطور نیست که «یا اصابت روی دهد یا ذرات به هدف برخورد نکنند».

در نهایت فرض کنید باریکه‌ای از ذرات فرودی در اختیار داریم که شدت آن یکنواخت است (یا به قول فیزیکدان‌ها، شیدزایی و درخشش آن):

$$\mathcal{L} \equiv \text{تعداد ذرات فرودی به ازای واحد سطح و واحد زمان} \quad [۹.۱۱]$$

تعداد ذراتی که وارد محدوده $d\sigma$ می‌شوند (و در نتیجه به درون زاویه فضایی $d\Omega$ پراکنده می‌شوند) به ازای واحد زمان برابر است با $dN = \mathcal{L} d\sigma = \mathcal{L} D(\theta) d\Omega$ ، از اینرو

$$D(\theta) = \frac{1}{\mathcal{L}} \frac{dN}{d\Omega} \quad [۱۰.۱۱]$$

این را اغلب به عنوان تعریف سطح مقطع دیفرانسیلی می‌گیرند زیرا تنها به کمیت‌هایی مربوط می‌شود که می‌توان آنها را به سادگی در آزمایشگاه اندازه‌گیری کرد: اگر آشکارساز ذراتی را که به درون زاویه فضایی $d\Omega$ پراکنده می‌شوند بپذیرد، به آسانی می‌توانیم تعداد ثبت شده‌ها به ازای واحد زمان را شمرده و بر $d\Omega$ تقسیم کنیم و با شیدزایی باریکه فرودی بهنجار کنیم.

مساله ۱.۱۱ پراکندگی رادرفورد. ذره‌ای فرودی با بار q_1 و انرژی پتانسیل E از ذره سنگین ساکنی با بار q_2 پراکنده می‌شود.

(الف) فرمولی را که پارامتر برخورد و زاویه پراکندگی را به هم مربوط می‌سازد بدست آورید.^۲
پاسخ:

$$b = (q_1 q_2 / 8\pi\epsilon_0 E) \cot(\theta/2)$$

(ب) سطح مقطع پراکندگی دیفرانسیلی را تعیین کنید. پاسخ:

$$D(\theta) = \left[\frac{q_1 q_2}{16\pi\epsilon_0 E \sin^2(\theta/2)} \right]^2 \quad [11.11]$$

(پ) نشان دهید سطح مقطع کل در پراکندگی رادفورد نامتناهی است. منظورمان این است که پتانسیل $1/r$ دارای «برد بینهایت» می‌باشد؛ نمی‌توانید از دست نیروی کولنی خلاص شوید.

۲.۱.۱۱ نظریه پراکندگی کوانتومی

در نظریه کوانتومی پراکندگی، موج صفحه‌ای ورودی به صورت $\psi(z) = A e^{ikz}$ را مجسم می‌کنیم که در جهت محور z حرکت می‌کند. ذره مذکور با یک پتانسیل پراکنده‌ساز برخورد کرده و موج کروی برون رویی را ایجاد می‌کند (شکل ۴.۱۱).^۳ این بدان معنی است که در جستجوی جوابهای معادله شرودینگر به شکل عمومی زیر خواهیم بود

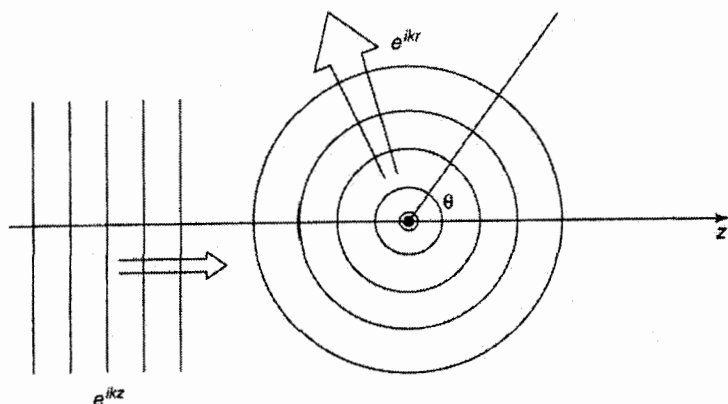
$$\psi(r, \theta) \approx A \left\{ e^{izk} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right\}, \quad \text{به ازای } r \text{ بزرگ} \quad [12.11]$$

^۲ کار ساده‌ای نیست و به همین خاطر می‌توانید به کتابی در حوزه مکانیک کلاسیک مانند *Classical Dynamics of Particles and Systems* اثر J. B. Marion و ویرایش دوم (نیویورک: انتشارات Academic، ۱۹۷۰)، بخش ۵.۹ مراجعه کنید.

^۳ در حال حاضر، این مساله خیلی هم مکانیک کوانتومی نیست؛ آنچه در واقع از آن صحبت می‌کنیم امواج پراکندگی است، برخلاف ذرات کلاسیکی، یا (بهتر بگوییم، از آن جهت که متوجه پراکندگی سه بعدی هستیم) امواج صوتی که از یک توپ بستکبالت هنگام برخورد با هر سطحی به گوش می‌رسند. در آنصورت تابع موج را به شکل حقیقی زیر می‌نویسیم

$$A[\cos(kz) + f(\theta) \cos(kr + \delta)/r]$$

و $f(\theta)$ هم نشان دهنده دامنه موج پراکنده شده در جهت θ است.



شکل ۴.۱۱: پراکندگی امواج؛ موج صفحه‌ای ورودی و موج کروی برون‌رو تولید می‌کند

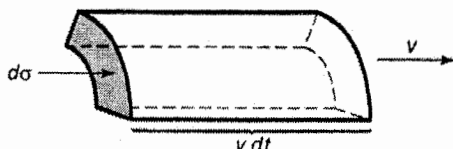
(موج کروی می‌بایست حامل عامل $1/r$ باشد، زیرا این بخش از $|\psi|^2$ باید مانند $1/r^2$ رفتار کند تا احتمال پایسته بماند.) عدد موج k طبق معمول به انرژی ذرات فرودی مربوط می‌شود:

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad [۱۳.۱۱]$$

مانند گذشته، فرض من بر این است که هدف به طور سمتی متقارن است؛ در حالت کلی‌تر دامنه f موج کروی برون‌رو می‌تواند علاوه بر ϕ به θ هم وابسته باشد.

کل مساله عبارت است از تعیین دامنه پراکندگی $f(\theta)$ ؛ این دامنه احتمال پراکندگی در جهت مفروض θ را بیان کرده و در نتیجه به سطح مقطع دیفرانسیلی مربوط می‌شود. قدر مسلم، احتمال آنکه ذره فرودی که با سرعت v حرکت می‌کند از میان محدوده فوق‌العاده کوچک $d\sigma$ عبور کند برابر است با (شکل ۵.۱۱ را ملاحظه کنید)

$$dP = \left| \psi_{\text{فرودی}} \right|^2 dV = |A|^2 (v dt) d\sigma$$



شکل ۵.۱۱: حجم dV از $d\sigma$ باید در مدت زمان dt عبور می‌کند

اما این برابر است با احتمال آنکه ذره در ادامه درون زاویه فضایی متناظر $d\Omega$ نمایان شود:

$$dP = \left| \psi_{\text{پراکنده}} \right|^2 dV = \frac{|A|^2 |f|^2}{r^2} (v dt) r^2 d\Omega$$

که از آن اینطور نتیجه می‌شود که $d\sigma = |f|^2 d\Omega$ ، بنابراین

$$D(\theta) = \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 \quad [14.11]$$

آشکار است که سطح مقطع دیفرانسیلی (که کمیت مورد علاقه و توجه آزمون‌گران است) برابر است با مربع قدر مطلق دامنه پراکندگی (که با حل معادله شرودینگر بدست می‌آید). در بخش‌های بعدی دو تکنیک را برای محاسبه دامنه پراکندگی مورد مطالعه قرار می‌دهیم: تحلیل موج پاره‌ای و تقریب بورن.

مسئله ۲.۱۱ مانسته رابطه ۱۲.۱۱ را برای پراکندگی یک و دو بعدی بدست آورید.

۲.۱۱ تحلیل پاره موجی

۱.۲.۱۱ صورت‌بندی

همانطور که در فصل ۴ دیدیم، معادله شرودینگر برای پتانسیلی با تقارن کروی $V(r)$ جواب‌های تفکیک‌پذیر را می‌پذیرد

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) Y_l^m(\theta, \phi) \quad [15.11]$$

که در آن Y_l^m هماهنگ کروی (رابطه ۳۲.۴) و $u(r) = rR(r)$ هم در معادله شعاعی (رابطه ۳۷.۴) صدق می‌کند:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} \right] u = Eu \quad [16.11]$$

این تابع به ازای r های بسیار بزرگ به سمت صفر میل می کند و جمله مرکززا هم قابل چشم پوشی می شود، از اینرو

$$\frac{d^2 u}{dr^2} \approx -k^2 u$$

جواب عمومی عبارت است از

$$u(r) = C e^{ikr} + D e^{-ikr}$$

جمله اول نشان دهنده موج کروی برون رو و جمله دوم بیانگر موج کروی ورودی است - برای موج دوم، واضح است که می خواهیم $D = 0$ باشد. پس در r های بسیار بزرگ،

$$R(r) \approx \frac{e^{ikr}}{r}$$

همانطور که پیشتر (بر یک اساس کیفی) در بخش گذشته (رابطه ۱۲.۱۱) آنرا برداشت کردیم.

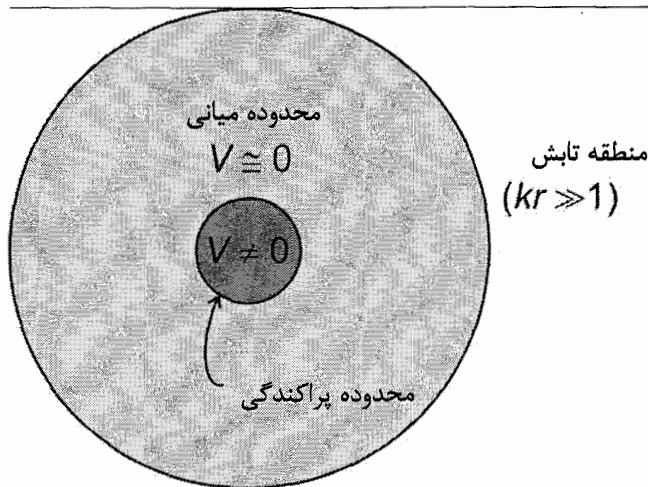
این برای r های بسیار بزرگ بود (به بیان دقیقتر، برای $kr \gg 1$ ؛ در نورشناخت این محدوده را منطقه تابش می نامند). همانطور که در نظریه پراکندگی یک بعدی دیدیم، فرض مان بر این است که پتانسیل «جایگزیده» است، به این مفهوم که در بیرون یک منطقه پراکندگی متناهی به طور بایسته $V = 0$ است (شکل ۶.۱۱). در منطقه میانی (که می توان در آن از V چشم پوشی کرد اما جمله مرکزگرا نادیده انگاشتنی نیست)،^۴ معادله شعاعی عبارت می شود از

$$\frac{d^2 u}{dr^2} - \frac{l(l-1)}{r^2} u = -k^2 u \quad [۱۷.۱۱]$$

و جواب عمومی (رابطه ۴۵.۴) ترکیبی خطی از توابع بسل کروی است:

$$u(r) = A r j_l(kr) + B r n_l(kr) \quad [۱۸.۱۱]$$

^۴ آنچه در پی می آید برای پتانسیل کولنی به کار نمی رود، چراکه وقتی $r \rightarrow \infty$ میل می کند، $1/r$ کندتر از $1/r^2$ به سمت صفر می رود و جمله مرکزگرا دیگر در این نظام چیره نیست. به این مفهوم پتانسیل کولنی جایگزیده نیست، برای همین تحلیل موج پاره ای به کار نمی آید.



شکل ۶.۱۱: پراکندگی از یک پتانسیل جایگزیده: منطقه پراکندگی (قسمت سایه‌دار)، منطقه میانی (که در آن $V = 0$ است) و منطقه تابش (که در آن $kr \gg 1$ است)

با این وجود، نه j_l (که چیزی شبیه به یک تابع سینوسی است) و نه n_l (که نوعی تابع کسینوسی تعمیم یافته است) نشان دهنده هیچ موج برون‌رو یا ورودی نیستند. آنچه نیاز داریم ترکیب‌هایی خطی از مانسته‌های e^{ikr} و e^{-ikr} است؛ این ترکیبات به توابع هنکل کروی معروفند:

$$h_l^{(1)}(x) \equiv j_l(x) + in_l(x); h_l^{(2)}(x) \equiv j_l(x) - in_l(x) \quad [۱۹.۱۱]$$

چند تابع هنکل نخست در جدول ۱۰.۱۱ فهرست شده‌اند. در r های بسیار بزرگ، $h_l^{(1)}(kr)$ «تابع هنکل نوع اول» مانند e^{ikr}/r رفتار می‌کند، درحالی‌که $h_l^{(2)}(kr)$ «تابع هنکل نوع دوم» رفتاری مشابه e^{-ikr}/r دارد؛ برای امواج برون‌رو آشکارا توابع هنکل باید از نوع اول باشند:

$$R(r) \sim h_l^{(1)}(kr) \quad [۲۰.۱۱]$$

جدول ۱.۱۱: توابع هنکل، $h_l^{(1)}(x)$ و $h_l^{(2)}(x)$

$h_0^{(1)} = -i \frac{e^{ix}}{x}$	$h_0^{(2)} = i \frac{e^{-ix}}{x}$
$h_1^{(1)} = \left(-\frac{i}{x^2} - \frac{1}{x}\right) e^{ix}$	$h_1^{(2)} = \left(\frac{i}{x^2} - \frac{1}{x}\right) e^{-ix}$
$h_2^{(1)} = \left(-\frac{3i}{x^3} - \frac{3}{x^2} + \frac{i}{x}\right) e^{ix}$	$h_2^{(2)} = \left(\frac{3i}{x^3} - \frac{3}{x^2} - \frac{i}{x}\right) e^{-ix}$
$\left. \begin{aligned} h_l^{(1)} &\rightarrow \frac{1}{x} (-i)^{l+1} e^{ix} \\ h_l^{(2)} &\rightarrow \frac{1}{x} (i)^{l+1} e^{-ix} \end{aligned} \right\} x \gg 1 \text{ ازای } 1$	

بدین ترتیب تابع موج صحیح، در منطقه بیرونی (که در آن $V(r) = 0$ است) عبارت می‌شود از

$$\psi(r, \theta, \phi) = A \left\{ e^{ikz} + \sum_{l,m} C_{l,m} h_l^{(1)}(kr) Y_l^m(\theta, \phi) \right\} \quad [21.11]$$

نخستین جمله مربوط به موج صفحه فرودی و حاصلجمع (با در نظر گرفتن ضرایب بسط $C_{l,m}$) نیز نمایشگر موج پراکنده شده است. اما چون فرض را بر این گذاشته‌ایم که پتانسیل دارای تقارن کروی است، تابع موج نمی‌تواند به ϕ بستگی داشته باشد.^۵ از اینرو تنها جمله‌ای که در آن $m = 0$ باقی می‌ماند (به خاطر بیاورید، $Y_l^m \sim e^{im\phi}$ است). پس حالا (از رابطه ۲۷.۴ و ۳۲.۴) داریم

$$Y_l^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta) \quad [22.11]$$

که P_l در آن l امین چند جمله‌ای لژاندر است. رسم بر این است که ضرایب بسط را با گرفتن $C_{l,0} \equiv i^{l+1} k \sqrt{4\pi(2l+1)} a_l$ از نو تعریف می‌کنند:

^۵ طبعاً مشکلی با بستگی به θ نداریم چون موج صفحه‌ای ورودی یک جهت \hat{z} را تعریف می‌کند که تقارن کروی را از بین می‌برد. اما تقارن سمتی باقی می‌ماند؛ موج صفحه‌ای فرودی هیچ بستگی به ϕ ندارد و به همین خاطر چیزی در فرایند پراکندگی نیست که بخواهد هرگاه ϕ را تغییر دهد. snap.sellfile.ir

$$\psi(r, \theta) = A \left\{ e^{ikz} + k \sum_{l=0}^{\infty} i^{l+1} (2l+1) a_l h_l^{(1)}(kr) P_l(\cos \theta) \right\} \quad [۲۳.۱۱]$$

کمی جلوتر خواهید دید چرا این نمادگذاری خاص مناسبتر است؛ a_l را l امین دامنه موج پاره‌ای می‌نامند.

باید توجه داشت که به ازای r بزرگ، تابع هنکل مانند $(-i)^{l+1} e^{ikr}/r$ رفتار می‌کند (جدول ۱.۱۱)، از اینرو

$$\psi(r, \theta) \approx A \left\{ e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right\} \quad [۲۴.۱۱]$$

که در آن

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) a_l P_l(\cos \theta) \quad [۲۵.۱۱]$$

این عبارت به شکلی دقیقتر ساختار کلی‌ای را که در رابطه ۱۲.۱۱ مبنا قرار دادیم تایید می‌کند و بیانگر این مطلب است که چگونه دامنه پراکندگی، $f(\theta)$ ، را برحسب دامنه‌های پاره موج a_l محاسبه کنیم. چنین پیداست که سطح مقطع دیفرانسیلی عبارت است از

$$D(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{1}{k^2} \sum_l \sum_{l'} (2l+1)(2l'+1) a_l^* a_{l'} P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \quad [۲۶.۱۱]$$

و به این شکل سطح مقطع کل عبارت می‌شود از:

$$\sigma = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |a_l|^2 \quad [۲۷.۱۱]$$

(از راست هنجاری هماهنگ‌های کروی، رابطه ۳۳.۴، در گام آخر استفاده کردم).

همه آنچه باقی می ماند این است که دامنه های موج پاره ای G_l را برای پتانسیل مساله ای که در اختیار داریم تعیین کنیم. این مهم با حل معادله شرودینگر در منطقه درونی (که در آن $V(r)$ آشکارا غیر صفر است) و تطبیق دادن آن با جواب بیرونی (رابطه ۲۳.۱۱) با استفاده از شرایط مرزی مناسب به انجام می رسد. اما پیش از همه باید کمی زیباسازی انجام دهم، چون وقتی کار انجام شود نمادگذاری ام کمی غیر یکدست خواهد بود: برای موج پراکنده شده از مختصات کروی استفاده کردم، در حالیکه برای موج فرودی مختصات دکارتی را به کار بردم. پیش از ادامه کار، بازنویسی تابع موج با نمادگذاری یکدست تر، سودمندتر است.

مسلم است که e^{ikz} در معادله شرودینگر با $V = 0$ صدق می کند. از سوی دیگر، کمی پیشتر نشان دادم که جواب عمومی معادله شرودینگر با $V = 0$ را می توان به این صورت نوشت

$$\sum_{l,m} [A_{l,m} j_l(kr) + B_{l,m} n_l(kr)] Y_l^m(\theta, \phi)$$

پس به ویژه، بیان e^{ikz} به این شکل باید امکان پذیر باشد. اما e^{ikz} در این منطقه متناهی است، پس هیچ تابع نویمانی در حاصل جمع مجاز شمرده نمی شود ($n_l(kr)$ در $r = 0$ بینهایت می شود)، و از آنجا که $z = r \cos \theta$ هیچ وابستگی به ϕ ندارد، تنها جملات $m = 0$ در رابطه نهایی یافت می شوند. توضیح یک موج صفحه ای بر حسب امواج کروی را گاهی اوقات فرمول رینولدز^۶ می نامند:

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad [28.11]$$

بدین ترتیب تابع موج در منطقه بیرونی را می توان به صورت یکدست تر زیر نوشت

$$\psi(r, \theta) = A \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) [j_l(kr) + ika_l h_l^{(1)}(kr)] P_l(\cos \theta) \quad [29.11]$$

^۶ جهت کسب راهنمایی برای اثبات، کتاب *Mathematical Methods for Physicists* اثر George Arfken

مثال ۳.۱۱ پراکندگی از گوی سخت کوانتومی. فرض کنید

$$V(r) = \begin{cases} \infty, & r \leq a \\ 0, & r > a \end{cases} \quad [۳۰.۱۱]$$

در آنصورت شرط مرزی از این قرار است

$$\psi(a, \theta) = 0 \quad [۳۱.۱۱]$$

پس، به ازای تمام مقادیر θ داریم

$$\sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) [j_l(ka) + ika_l h_l^{(1)}(ka)] P_l(\cos \theta) = 0 \quad [۳۲.۱۱]$$

که از آن می‌توان اینطور نتیجه گرفت که (مساله ۳.۱۱)

$$a_l = -i \frac{j_l(ka)}{kh_l^{(1)}(ka)} \quad [۳۳.۱۱]$$

بویژه، سطح مقطع کل برابر است با

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left| \frac{j_l(ka)}{h_l^{(1)}(ka)} \right|^2 \quad [۳۴.۱۱]$$

این جواب دقیق است، اما خیلی هم واضح نیست، پس بیایید مورد محدود کننده پراکندگی کم انرژی را در نظر بگیریم: $ka \ll 1$. (از آنجاییکه $k = 2\pi/\lambda$ است، این مقادیر حاکی از آنند که طول موج بسیار بزرگتر از شعاع کره است.) با مراجعه به جدول ۳.۴، مشاهده می‌کنیم که به ازای z های کوچک، $n_l(z)$ بسیار بزرگتر از $j_l(z)$ است، لذا

$$\begin{aligned} \frac{j_l(z)}{h_l^{(1)}(z)} &= \frac{j_l(z)}{j_l(z) + in_l(z)} \approx -i \frac{j_l(z)}{n_l(z)} \\ &\approx -i \frac{2^l l! z^l / (2l+1)!}{-(2l)! z^{-l-1} / 2^l l!} = \frac{i}{2l+1} \left[\frac{2^l l!}{(2l)!} \right]^2 z^{2l+1} \end{aligned} \quad [۳۵.۱۱]$$

و در نتیجه

$$\sigma \approx \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{2l+1} \left[\frac{2^l l!}{(2l)!} \right]^4 (ka)^{4l+2}$$

با این حال فرض ما بر این بود که $ka \ll 1$ است، از اینرو توانهای بالاتر قابل چشم پوشی هستند - در تقریب کم انرژی جمله $l = 0$ در پراکندگی چیره است. (این بدان معنی است که سطح مقطع دیفرانسیلی مستقل از θ است، درست همانطور که در حالت کلاسیک بود). آشکار است که برای پراکندگی کم انرژی از گوی سخت داریم.

$$\sigma \approx 4\pi a^2 \quad [۳۶.۱۱]$$

تعجب آور است که سطح مقطع پراکندگی چهار برابر سطح مقطع هندسی است - در واقع، σ مساحت سطح کل کره است. این «اندازه موثر بزرگتر» وجه مشخصه پراکندگی با طول موج بلند است (این نکته در نورشناخت هم صادق است)؛ به یک معنی، این امواج راهشان در اطراف کل کره را «حس» می کنند، در حالیکه ذرات کلاسیکی فقط سطح مقطع شاخ به شاخ را درک می کنند.

مساله ۳.۱۱ رابطه ۳۳.۱۱ را با شروع از رابطه ۳۲.۱۱ استخراج کنید. راهنمایی: راست هنجاری چند جمله ایهای لژاندر را به کار بگیرید تا نشان دهید ضرایبی که مقدار l آنها متفاوت است باید به طور جداگانه حذف شوند.

مساله ۴.۱۱** مورد پراکندگی کم انرژی از پوسته کروی تابع دلتا را در نظر بگیرید:

$$V(r) = \alpha \delta(r - a)$$

که در آن α و a ثابت هستند. دامنه پراکندگی $f(\theta)$ ، سطح مقطع دیفرانسیلی $D(\theta)$ و سطح مقطع کل σ را محاسبه کنید. اینطور فرض کنید که $ka \ll 1$ است تا فقط جمله $l = 0$ سهم با اهمیتی داشته باشد. (برای ساده کردن مطلب، تمام جملات $l \neq 0$ را از همان ابتدا حذف کنید. مسلماً مساله اصلی عبارت است از تعیین C_0). پاسخ خود را برحسب کمیت بدون بعد $\beta \equiv 2ma\alpha/\hbar^2$ بیان کنید. پاسخ: $\sigma = 4\pi a^2 \beta^2 / (1 + \phi)^2$.

۳.۱.۱ انتقال‌های فاز

ابتدا مساله پراکندگی یک بعدی از پتانسیل جایگزیده $V(x)$ را روی نیم خط $x < 0$ در نظر بگیرید (شکل ۷.۱۱). یک دیوار آجری را در نقطه $x = 0$ قرار می‌دهیم، از اینرو موج فرودی از سمت چپ

$$\psi_i(x) = Ae^{ikx} (x < -a) \quad [۳۷.۱۱]$$

کاملاً بازتابیده می‌شود

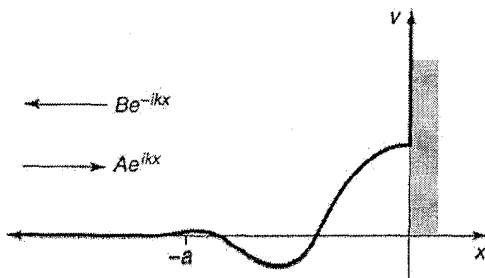
$$\psi_r(x) = Be^{-ikx} (x < -a) \quad [۳۸.۱۱]$$

هر اتفاقی در منطقه برهم‌کنش ($-a < x < 0$) رخ دهد، دامنه موج بازتابیده باید همان دامنه موج فرودی اولیه باشد، چون احتمال پایسته است. اما دیگر لازم نیست فازها هم یکسان باشند. اگر اصلاً پتانسیلی نداشته باشیم (فقط یک دیوار در $x = 0$)، در آنصورت $B = -A$ ، چون تابع موج کل (فرودی به علاوه بازتابیده) باید در مبدا حذف شود:

$$\psi_0(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx})(V(x) = 0) \quad [۳۹.۱۱]$$

اگر پتانسیل صفر نباشد، تابع موج (در $x < -a$) شکل زیر را به خود می‌گیرد

$$\psi(x) = A(e^{ikx} - e^{i(2\delta - kx)})(V(x) \neq 0) \quad [۴۰.۱۱]$$



شکل ۷.۱۱: پراکندگی یک بعدی از یک پتانسیل جایگزیده که در سمت راست توسط دیواری به طول بینهایت مقید شده است

کل نظریه پراکندگی به مساله محاسبه انتقال فاز δ^V (به صورت تابعی از k و در نتیجه تابعی از انرژی $E = \hbar^2 k^2 / 2m$) به ازای یک پتانسیل خاص خلاصه می‌شود. طبعاً این کار را با حل معادله شرودینگر در منطقه پراکندگی ($-a < x < 0$) و اعمال شرایط مرزی مناسب انجام می‌دهیم (مساله ۵.۱۱ را ملاحظه کنید). حسن کار با انتقال فاز (در مقابل دامنه مختلط B) این است که به این روش فیزیک مساله روشن می‌شود (چون به خاطر پایداری احتمال، همه کاری که پتانسیل قادر به انجام آن است عبارت است از انتقال فاز موج بازتابیده) و همچنین مکانیک هم ساده می‌شود (مبادله یک کمیت مختلط - دو عدد حقیقی - با یک کمیت حقیقی).

حال بیایید بازگردیم به حالت سه بعدی. موج صفحه‌ای فرودی (Ae^{ikx}) حامل هیچ تکانه زاویه‌ای در جهت z نیست (فرمول ریلی هیچ جمله‌ای با $m \neq 0$ ندارد)، با این حال شامل تمام مقادیر تکانه زاویه‌ای کل ($l = 0, 1, 2, \dots$) می‌شود. چون تکانه زاویه‌ای پایسته است (با پتانسیلی که تقارن کروی دارد)، هر موج پاره‌ای (که با یک l بخصوص برچسب می‌خورد) به طور مستقل پراکنده می‌شود، (باز هم) بدون هیچ تغییری در دامنه^۸ - بلکه فقط در فاز. اگر اصلاً پتانسیل نداشته باشیم، در آن صورت $\psi_0 = Ae^{ikx}$ و موج پاره‌ای l ام (رابطه ۲۸.۱۱) عبارت می‌شود از

$$\psi_0^{(l)} = A i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) (V(r) = 0) \quad [۴۱.۱۱]$$

اما (از رابطه ۱۹.۱۱ و جدول ۱.۱۱) داریم

$$j_l(x) = \frac{1}{2} [h^{(1)}(x) + h_l^{(2)}(x)] \approx \frac{1}{2x} [(-i)^{l+1} e^{ix} + i^{l+1} e^{-ix}] (x \gg 1) \quad [۴۲.۱۱]$$

بنابراین برای r های بزرگ

$$\psi_0^{(l)} \approx A \frac{(2l+1)}{2ikr} [e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr}] P_l(\cos \theta) (V(r) = 0) \quad [۴۳.۱۱]$$

^۸ ضریب ۲ در مقابل δ قراردادی است. ما موج فرودی را طوری در نظر می‌گیریم که یکبار موقع ورود و یکبار موقع خروج فازش تغییر می‌کند؛ منظورمان از δ انتقال فاز «در یک مسیر» است، برای همین انتقال فاز کل می‌شود 2δ .
^۹ یک دلیل اینکه این مطلب چندان سردرگم کننده نیست این است که در عمل می‌توانیم هر چیز را یک دامنه بنامیم: $f(\theta)$ دامنه پراکندگی، a_l دامنه موج پاره‌ای، اما اولی تابعی از θ است و هر دو عدد مختلط هستند. اینجا حرف ما

جمله دوم در کروه بالا نمایشگر یک موج ورودی است؛ وقتی پتانسیل پراکندگی را وارد می‌کنیم تغییری نمی‌کند. جمله اول موج خروجی است؛ انتقال فازی به صورت δ_l می‌گیرد:

$$\psi^{(l)} \approx A \frac{(2l+1)}{2ikr} [e^{i(kr+2\delta_l)} - (-1)^l e^{-ikr}] P_l(\cos \theta) (V(r) \neq 0) \quad [44.11]$$

این را یک موج کروی همگرا بگیرید (اختصاصاً به خاطر بخش $h_l^{(2)}$ در e^{ikz} که فاش به اندازه $2\delta_l$ انتقال یافته (زیرنویس ۷ را ملاحظه کنید) و حالا تبدیل شده به یک موج کروی خروجی (بخش $h_l^{(1)}$ در e^{ikz} به اضافه خود موج پراکنده شده).

در بخش ۱.۲.۱۱ کل نظریه برحسب دامنه‌های موج پاره‌ای a_l بیان شد؛ حال آنرا برحسب انتقال‌های فاز δ_l فرمول‌بندی کرده‌ایم. باید ارتباطی میان این دو وجود داشته باشد. قدر مسلم، با مقایسه شکل مجانبی (r بزرگ) رابطه ۲۳.۱۱

$$\psi^{(l)} \approx A \left\{ \frac{(2l+1)}{2ikr} [e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr}] + \frac{(2l+1)}{r} a_l e^{ikr} \right\} P_l(\cos \theta) \quad [45.11]$$

با بیان عمومی برحسب δ_l (رابطه ۴۴.۱۱)، می‌رسیم به^۹

$$a_l = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1) = \frac{1}{k} e^{i\delta_l} \sin(\delta_l) \quad [46.11]$$

بخصوص می‌توان چنین نتیجه گرفت که (رابطه ۲۵.۱۱)

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin(\delta_l) P_l(\cos \theta) \quad [47.11]$$

و (رابطه ۲۷.۱۱)

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2(\delta_l) \quad [48.11]$$

^۹ اگرچه از شکل مجانبی تابع موج برای ترسیم ارتباط میان a_l و δ_l استفاده کردم، نتیجه (رابطه ۴۶.۱۱) به هیچ وجه تقریبی نیست. هر دوی آنها ثابت هستند (مستقل از r)، برای همین δ_l یعنی انتقال فاز در منطقه مجانبی (جاییکه توابع هنکل به $e^{\pm ikr}/kr$ می‌رسند).

باز هم، مزیت کار با انتقال‌های فاز (در مقابل دامنه‌های موج پاره‌ای) این است که تفسیر فیزیکی آنها و در نتیجه ریاضیاتی آنها ساده‌تر است - صورت بندی ریاضی انتقال فاز پایداری تکانه زاویه‌ای را برای ساده کردن یک کمیت مختلط a_l (دو عدد حقیقی) به یک عدد حقیقی δ_l به کار می‌گیرد.

مساله ۵.۱۱ ذره‌ای به جرم m و انرژی E از سمت چپ روی پتانسیل زیر فرود می‌آید

$$V(x) = \begin{cases} 0 & , \quad (x < -a) \\ -V_0 & , \quad (-a \leq x \leq 0) \\ \infty & , \quad (x > 0) \end{cases}$$

(الف) اگر موج فرودی Ae^{ikx} باشد (که در آن $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ است)، موج بازتابیده را بدست آورید. پاسخ:

$$Ae^{-2ika} \left[\frac{k - ik' \cot(k'a)}{k + ik' \cot(k'a)} \right] e^{-ikx} , \quad k' = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar$$

(ب) اطمینان حاصل کنید که موج بازتابیده همان دامنه موج فرودی را دارد.

(پ) انتقال فاز δ (رابطه ۴۰.۱۱) را برای یک چاه بسیار عمیق ($E \ll V_0$) بدست آورید.

پاسخ: $\delta = -ka$

مساله ۶.۱۱ انتقال‌های فاز موج پاره‌ای (δ_l) در مورد پراکندگی از گوی سخت (مثال ۳.۱۱) چه هستند؟

مساله ۷.۱۱ موج $l=0$ انتقال فاز موج پاره‌ای $\delta_0(k)$ را برای پراکندگی از پوسته تابع دلتا (مساله ۴.۱۱) بدست آورید. فرض را بر این بگذارید که تابع موج شعاعی $u(r)$ با $r \rightarrow \infty$ به سمت صفر می‌رود. پاسخ:

$$-\cot^{-1} \left[\cot(ka) + \frac{ka}{\beta \sin^2(ka)} \right] , \quad \beta \equiv \frac{2ma a}{\hbar^2}$$

۴.۱۱ تقریب بورن

۱.۴.۱۱ شکل انتگرالی معادله شرودینگر

معادله شرودینگر مستقل از زمان،

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi \quad [۴۹.۱۱]$$

را می‌توان به شکلی واضحتر و مختصرتر به این صورت نوشت

$$(\nabla^2 + k^2)\psi = Q \quad [۵۰.۱۱]$$

که در آن

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{و} \quad Q \equiv \frac{2m}{\hbar^2}V\psi \quad [۵۱.۱۱]$$

این رابطه از صورت ظاهری و سطحی معادله هلمهولتز برخوردار است؛ با این حال، دقت کنید که جمله «غیر یکنواخت» (Q) خودش وابسته به ψ است.

فرض کنید می‌توانستیم تابعی مانند $G(r)$ بیابیم که حلی برای معادله هلمهولتز با «چشمه» یک تابع دلتا باشد:

$$(\nabla^2 + k^2)G(r) = \delta^3(r) \quad [۵۲.۱۱]$$

پس می‌توانیم ψ را به صورت یک رابطه انتگرالی بیان کنیم:

$$\psi(r) = \int G(r-r_0)Q(r_0)d^3r_0 \quad [۵۳.۱۱]$$

چون نشان دادن اینکه این رابطه در معادله شرودینگر به شکل رابطه ۵۰.۱۱ آسان است:

$$\begin{aligned} (\nabla^2 + k^2)\psi(r) &= \int [(\nabla^2 + k^2)G(r-r_0)]Q(r_0)d^3r_0 \\ &= \int \delta^3(r-r_0)Q(r_0)d^3r_0 = Q(r) \end{aligned}$$

$G(r)$ را تابع گرین معادله هلمهولتز می‌نامند. (به طور کلی، تابع گرین برای یک معادله مفروض نشان دهنده «واکنش» به منبع تابع دلتا است).

اولین کاری که باید انجام دهیم^{۱۰} این است که رابطه ۵۲.۱۱ را برای $G(r)$ حل کنیم. این کار به ساده‌ترین شکل با استفاده از تبدیل فوریه انجام می‌شود که معادله دیفرانسیل را به یک رابطه جبری تبدیل می‌کند. بگذارید

$$G(r) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{is.r} g(s) d^3s \quad [۵۴.۱۱]$$

بنابراین

$$(\nabla^2 + k^2)G(r) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int [(\nabla^2 + k^2)e^{is.r}]g(s)d^3s$$

اما

$$\nabla^2 e^{is.r} = -s^2 e^{is.r} \quad [۵۵.۱۱]$$

به علاوه (رابطه ۱۴۴.۲ را ببینید)

$$\delta^3(r) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{is.r} d^3s \quad [۵۶.۱۱]$$

پس رابطه ۵۲.۱۱ حاکی از آن است که

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int (-s^2 + k^2)e^{is.r} g(s) d^3s = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{is.r} d^3s$$

می‌توان چنین نتیجه گرفت^{۱۱} که

$$g(s) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}(k^2 - s^2)} \quad [۵۷.۱۱]$$

^{۱۰} هشدار: شما در حال نزدیک شدن به دو صفحه با تحلیل سنگین هستید که شامل انتگرال گیری کانتوری (پربندی) است؛ اگر مایلید، مستقیماً از آن عبور کرده و یگراست به سراغ پاسخ بروید، رابطه ۶۵.۱۱.

^{۱۱} این به وضوح کافی است، اما لازم هم هست، همانطور که می‌توانید با ترکیب این دو جمله در یک انتگرال منفرد و استفاده از قضیه پلاتشرل، رابطه ۱۰۲.۲ به راحتی ثابت کنید.

با قرار دادن این عبارت در رابطه ۵۴.۱۱، درمی‌یابیم که

$$G(r) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{isr} \frac{1}{(k^2 - s^2)} d^3s \quad [۵۸.۱۱]$$

باید توجه داشت تا آنجا که انتگرال‌گیری روی s مد نظر است، r ثابت است، از اینرو می‌توانیم به خوبی مختصات کروی (s, θ, ϕ) را به همراه محور قطبی در امتداد r برگزینیم (شکل ۸.۱۱). بنابراین $s \cdot r = sr \cos \theta$ ، انتگرال روی ϕ کم اهمیت (2π) بوده و در نهایت برای انتگرال روی θ داریم.

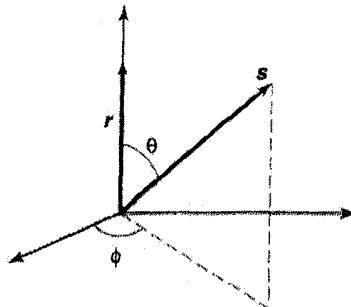
$$\int_0^\pi e^{isr \cos \theta} \sin \theta \, d\theta = -\frac{e^{isr \cos \theta}}{isr} \Big|_0^\pi = \frac{2 \sin(sr)}{sr} \quad [۵۹.۱۱]$$

در نتیجه

$$G(r) = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{2}{r} \int_0^\infty \frac{s \sin(sr)}{k^2 - s^2} ds = \frac{1}{4\pi^2 r} \int_{-\infty}^\infty \frac{s \sin(sr)}{k^2 - s^2} ds \quad [۶۰.۱۱]$$

انتگرال باقیمانده چندان ساده نیست. ارزش آن را دارد که به نمادگذاری نمایی بازگشته و از مخرج فاکتور بگیریم:

$$\begin{aligned} G(r) &= \frac{i}{8\pi^2 r} \left\{ \int_{-\infty}^\infty \frac{se^{isr}}{(s-k)(s+k)} ds - \int_{-\infty}^\infty \frac{se^{-isr}}{(s-k)(s+k)} ds \right\} \\ &= \frac{i}{8\pi^2 r} (I_1 - I_2) \end{aligned} \quad [۶۱.۱۱]$$



شکل ۸.۱۱: مختصات مناسب برای انتگرال در رابطه ۵۸.۱۱

این دو انتگرال را می‌توان با استفاده فرمول انتگرال کوشی عددیابی کرد:

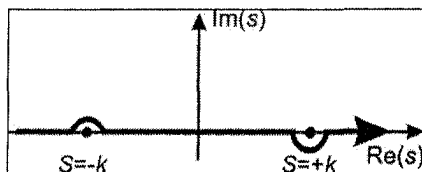
$$\oint \frac{f(z)}{(z - z_0)} dz = 2\pi i f(z_0) \quad [۶۲.۱۱]$$

اگر z_0 درون پربند قرار داشته باشد می‌توان از این رابطه بهره برد چون در غیر اینصورت مقدار انتگرال بالا صفر است. در مورد فعلی انتگرال گیری در امتداد محور حقیقی انجام می‌شود و دقیقاً از روی تکینگی‌های قطبی در $\pm k$ عبور می‌کند. باید تعیین کنیم که چگونه قطب‌ها را دور زده و از کنار آنها بگذریم - از روی اولی در $-k$ و از زیر دومی در $+k$ رد می‌شود (شکل ۹.۱۱). (اگر مایل باشید مختارید رسم دیگری را برگزینید - حتی پیش‌تر هفت باره بدور هر قطب را؛ تابع گرین متفاوتی بدست خواهید آورد، اما همانطور که کمی بعد نشان خواهیم داد، آنها همگی به یک اندازه قابل قبول هستند).

برای هر انتگرال در رابطه ۶۱.۱۱ باید «پربند را به نوعی ببندیم» که نیم‌دایره در بینهایت سهمی نداشته باشد. در مورد I_1 ، وقتی s بخش موهومی مثبت بزرگی داشته باشد، عامل e^{isr} به سمت صفر میل می‌کند؛ برای این یکی پربند را از رو می‌بندیم (شکل ۹.۱۱ آ). پربند تنها تکینگی در $s = +k$ را محاط می‌کند، پس

$$I_1 = \oint \left[\frac{se^{isr}}{s+k} \right] \frac{1}{s-k} ds = 2\pi i \left[\frac{se^{isr}}{s+k} \right] \Big|_{s=k} = i\pi e^{ikr} \quad [۶۳.۱۱]$$

در مورد I_2 ، هنگامیکه s بخش موهومی منفی بزرگی داشته باشد، عامل e^{-isr} به سمت صفر میل می‌کند، لذا پربند را از زیر می‌بندیم (شکل ۱۰.۱۱ ب)؛ اینبار پربند تکینگی در نقطه $s = -k$ را محاط می‌کند (و در جهت ساعتگرد دور می‌زند، از اینرو از یک علت منفی استفاده می‌کنیم):



شکل ۹.۱۱: عبور از کنار قطب‌ها در انتگرال پربندی (رابطه ۶۱.۱۱)

$$I_2 = - \oint \left[\frac{se^{-isr}}{s-k} \right] \frac{1}{s+k} ds = -2\pi i \left[\frac{se^{-isr}}{s-k} \right] \Big|_{s=-k} = -i\pi e^{ikr} \quad [۶۴.۱۱]$$

نتیجه گیری:

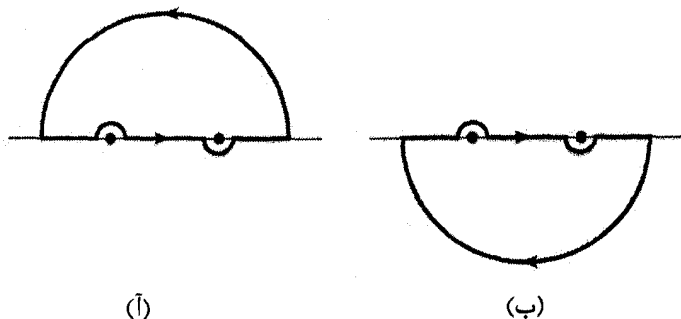
$$G(r) = \frac{i}{8\pi^2 r} [(i\pi e^{ikr}) - (-i\pi e^{ikr})] = -\frac{e^{ikr}}{4\pi r} \quad [۶۵.۱۱]$$

در نهایت، این تابع گرین برای معادله هلمهولتز است - جواب رابطه ۵۲.۱۱. (اگر تحلیل ارائه شده شما را گیج و سردرگم کرد، شاید بخواهید نتیجه را با مشتق گیری مستقیم امتحان کنید - مساله ۸.۱۱ را ملاحظه کنید.) یا به عبارت بهتر، این یک تابع گرین برای معادله هلمهولتز است چون می توان هر تابع دلخواه $G_0(r)$ که در معادله هلمهولتز یکنواخت صدق می کند را به $G(r)$ افزود:

$$(\nabla^2 + k^2)G_0(r) = 0 \quad [۶۶.۱۱]$$

پیداست که نتیجه $(G + G_0)$ کماکان در رابطه ۵۲.۱۱ صدق می کند. این ابهام دقیقاً متناظر است با ابهام در چگونگی عبور از کنار قطب ها - انتخاب متفاوت به مثابه برگزیدن تابع $G_0(r)$ متفاوت است.

با بازگشت به رابطه ۵۳.۱۱، جواب عمومی معادله شرودینگر شکل زیر را به خود می گیرد



شکل ۱۰.۱۱: بستن پربند در روابط ۶۳.۱۱ و ۶۴.۱۱

$$\psi(r) = \psi_0(r) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|r-r_0|}}{r-r_0} V(r_0) \psi(r_0) d^3r_0 \quad [۶۷.۱۱]$$

که در آن ψ_0 در معادله شرودینگر ذره آزاد صدق می‌کند،

$$(\nabla^2 + k^2)\psi_0 = 0 \quad [۶۸.۱۱]$$

رابطه ۶۷.۱۱ صورت انتگرالی معادله شرودینگر است؛ این رابطه کاملاً با شکل دیفرانسیلی آشنا تر آن معادل است. در نگاه نخست مانند جواب صریحی برای معادله شرودینگر (با هر پتانسیلی) به نظر می‌رسد - که البته بیش از اندازه برای درست بودن خوب است. اما گول نخورید: تحت انتگرال یک ψ در سمت راست وجود دارد، از اینرو نمی‌توانیم انتگرال را حل کنیم مگر آنکه از پیش جواب را بدانیم! با این وجود، شکل انتگرالی می‌تواند بسیار توانمند باشد و همانطور که در بخش بعدی خواهیم دید برای مسائل پراکندگی بسیار مناسب است.

مساله ۸.۱۱ بررسی کنید آیا رابطه ۶۵.۱۱ با جاگذاری مستقیم در رابطه ۵۲.۱۱ صدق می‌کند. راهنمایی: ^{۱۲}

$$\nabla^2(1/r) = -4\pi\delta^3(r)$$

مساله ۹.۱۱** نشان دهید حالت پایه هیدروژن (رابطه ۸۰.۴) در صورت انتگرالی معادله شرودینگر به ازای V و E مناسب صدق می‌کند (دقت کنید که E منفی است، پس $k = ik$ که در آن $\kappa \equiv \sqrt{-2mE}/\hbar$).

۲.۳.۱۱ تقریب بورن اول

فرض کنید $V(r_0)$ حول $r_0 = 0$ جایگزیده باشد (یعنی، پتانسیل بیرون منطقه متناهی صفر می‌شود، همانطور که برای یک مساله پراکندگی معمول است) و می‌خواهیم $\psi(r)$ را در نقطه‌ای دور از مرکز پراکندگی محاسبه کنیم. تا آن زمان که به ازای تمام نقاطی که در انتگرال رابطه ۶۷.۱۱ سهمیند داشته باشیم $|r_0| \gg |r|$ ، می‌توان نوشت

$$|r - r_0|^2 = r^2 + r_0^2 - 2r \cdot r_0 \cong r^2 \left(1 - 2 \frac{r \cdot r_0}{r^2}\right) \quad [۶۹.۱۱]$$

و در نتیجه

$$|r \cdot r_0| \cong r - \hat{r} \cdot r_0 \quad [۷۰.۱۱]$$

بگذارید

$$k \equiv k\hat{r} \quad [۷۱.۱۱]$$

آنگاه

$$e^{ik|r-r_0|} \cong e^{ikr} e^{-ik \cdot r_0} \quad [۷۲.۱۱]$$

و بنابراین

$$\frac{e^{ik|r-r_0|}}{|r-r_0|} \cong \frac{e^{ikr}}{r} e^{-ik \cdot r_0} \quad [۷۳.۱۱]$$

(در مخرج می‌توانیم بدون هیچ مشکلی از تقریب رادیکالی $|r - r_0| \cong r$ استفاده کنیم؛ در نما باید جمله بعدی را نگاه داریم. اگر این روال شما را سردرگم می‌کند، سعی کنید جمله بعدی را برحسب بسط مخرج بنویسید. آنچه در حال انجامش هستیم عبارت است از بسط دادن توانهای کمیت کوچک (r_0/r) و حذف همه به جز پائین‌ترین مرتبه).

در مورد پراکندگی، می‌خواهیم

$$\psi_0(r) = A e^{ikz} \quad [۷۴.۱۱]$$

نشان دهنده یک موج صفحه‌ای باشد. پس، به ازای r بزرگ داریم

$$\psi(r) \cong A e^{ikz} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{-ik \cdot r_0} V(r_0) \psi(r_0) d^3 r_0 \quad [۷۵.۱۱]$$

این در شکل استاندارد قرار دارد (رابطه ۱۲.۱۱) که می‌توانیم دامنه پراکندگی را از روی آن بخوانیم:

$$f(\theta, \phi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2 A} \int e^{-ik \cdot r_0} V(r_0) \psi(r_0) d^3 r_0 \quad [۶۶.۱۱]$$

تا اینجا همه چیز دقیق است. حالا تقریب بورن را به کار می‌بریم: فرض کنید موج صفحه‌ای فرودی به طور اساسی توسط پتانسیل دچار تغییر نشده است؛ در آنصورت استفاده از رابطه زیر داخل انتگرال معقول است

$$\psi(r) \approx \psi_0(r) = A e^{ikz_0} = A e^{ik' \cdot r_0} \quad [۷۷.۱۱]$$

که در آن

$$\mathbf{k}' \equiv k \hat{z} \quad [۷۸.۱۱]$$

(این در صورتی تابع موج دقیق می‌بود که V صفر می‌شد؛ این تقریب اساساً یک تقریب پتانسیلی ضعیف است.^{۱۳}) به این ترتیب، در تقریب بودن

$$f(\theta, \phi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}_0} V(\mathbf{r}_0) d^3 \mathbf{r}_0 \quad [۷۹.۱۱]$$

^{۱۳} در کل، تحلیل موج پاره‌ای زمانی سودمند است که ذره فرودی انرژی کمی دارد، چون آنوقت فقط چند جمله اول در سری به طرز چشمگیری سهم دارند؛ تقریب بورن زمانی به کار می‌رود که پتانسیل در مقایسه با انرژی فرودی ضعیف باشد، برای همین میزان انحراف snap.sellfile.ir

(اگر رد تعاریف k و k' را گم کرده‌اید، آنها هر دو دارای بزرگی k هستند اما اولی رو به سوی جهت باریکه فرودی دارد درحالیکه دومی به سمت آشکارساز است - شکل ۱۱.۱۱ را ملاحظه کنید؛ $\hbar(k - k')$ تکانه انتقال در این فرآیند است).

به ویژه، برای پراکندگی کم انرژی (با طول موج بلند)، عامل نمایی اساساً روی منطقه پراکندگی ثابت است و به همین خاطر تقریب بورن به این شکل ساده می‌شود

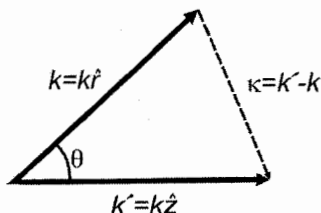
$$f(\theta, \phi) \cong -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int V(r) d^3r \quad [۸۰.۱۱]$$

(شاخص پائین r را برداشتم زیرا هیچ مناسبتی برای بروز اشتباه در این نقطه وجود ندارد).

مثال ۴.۱۱ پراکندگی کم انرژی از گوی نرم^{۱۴}. فرض کنید

$$V(r) = \begin{cases} V_0, & r \leq a \\ 0, & r > a \end{cases} \quad [۸۱.۱۱]$$

در اینصورت دامنه پراکندگی کم انرژی عبارت است از



شکل ۱۱.۱۱: دو بردار موج در تقریب بورن: k به سمت جهت فرودی است، k' به سمت جهت پراکنده

^{۱۴} نمی‌توانید تقریب بورن را برای پراکندگی از گوی سخت ($V_0 = \infty$) به کار ببرید - انتگرال بینهایت می‌شود. نکته اینجاست که فرض کردیم پتانسیل ضعیف است و به همین خاطر تابع موج در منطقه پراکندگی زیاد تغییر نمی‌کند. اما یک گوی سخت تابع موج را حسابی دگرگون می‌کند - از Ae^{ikz} به صفر می‌برد.

$$f(\theta, \phi) \cong -\frac{m}{2\pi\hbar^2} V_0 \left(\frac{4}{3}\pi a^3\right) \quad [۸۲.۱۱]$$

(مستقل از θ و ϕ)، سطح مقطع دیفرانسیلی عبارت است از

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 \cong \left(\frac{2mV_0 a^3}{3\hbar^2}\right)^2 \quad [۸۳.۱۱]$$

و در نهایت سطح مقطع کل برابر است با

$$\sigma \cong 4\pi \left(\frac{2mV_0 a^3}{3\hbar^2}\right)^2 \quad [۸۴.۱۱]$$

برای پتانسیلی با تقارن کروی، $V(r) = V(r)$ ، (اما نه لزوماً در انرژی کم)، تقریب بورن دوباره به صورتی ساده‌تر خلاصه می‌شود. اینطور تعریف کنید که

$$\kappa \equiv \mathbf{k}' - \mathbf{k} \quad [۸۵.۱۱]$$

و بگذارید محور قطبی برای انتگرال در r_0 در امتداد κ باشد، بطوریکه

$$(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}_0 = \kappa r_0 \cos \theta_0 \quad [۸۶.۱۱]$$

در آنصورت

$$f(\theta) \cong -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i\kappa r_0 \cos \theta_0} V(r_0) r_0^2 \sin \theta_0 dr_0 d\theta_0 d\phi_0 \quad [۸۷.۱۱]$$

انتگرال روی ϕ_0 ساده است (2π) اما انتگرال روی θ_0 از آنهایی است که پیشتر هم با آنها برخورد کرده‌ایم (رابطه ۵۹.۱۱ را ملاحظه کنید). با حذف شاخص پائین r ، آنچه برایمان باقی می‌ماند از این قرار است

$$f(\theta) \cong -\frac{2m}{\hbar^2 \kappa} \int_0^\infty r V(\kappa r) \sin(\kappa r) dr, \text{ (تقارن کروی)} \quad [۸۸.۱۱]$$

مثال ۵.۱۱ پراکندگی یوکاوا. پتانسیل یوکاوا (که مدلی ابتدایی برای نیروی بستگی در یک هسته اتمی بدست می‌دهد) به این شکل است

$$V(r) = \beta \frac{e^{-\mu r}}{r} \quad [۹۰.۱۱]$$

که در آن β و μ ثابت هستند. تقریب بورن رابطه زیر را نتیجه می‌دهد

$$f(\theta) \cong -\frac{2m\beta}{\hbar^2 \kappa} \int_0^\infty e^{-\mu r} \sin(\kappa r) dr = -\frac{2m\beta}{\hbar^2 (\mu^2 + \kappa^2)} \quad [۹۱.۱۱]$$

(باید خودتان انتگرال را در مساله ۱۱.۱۱ حل کنید).

مثال ۶.۱۱ پراکندگی رادرفورد. اگر در پتانسیل یوکاوا قرار دهیم $\beta = q_1 q_2 / 4\pi\epsilon_0$ و

$\mu = 0$ ، این پتانسیل به پتانسیل کولنی ساده می‌شود که توصیف کننده برهم‌کنش الکتریکی میان دو بار است. پیداست که دامنه پراکندگی برابر است با

$$f(\theta) \cong -\frac{2mq_1q_2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 \kappa^2} \quad [۹۲.۱۱]$$

یا (با استفاده از روابط ۸۹.۱۱ و ۵۱.۱۱)،

$$f(\theta) \cong -\frac{q_1 q_2}{16\pi\epsilon_0 E \sin^2(\theta/2)} \quad [۹۳.۱۱]$$

سطح مقطع دیفرانسیلی مربع این است:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left[\frac{q_1 q_2}{16\pi\epsilon_0 E \sin^2(\theta/2)} \right]^2 \quad [۹۴.۱۱]$$

که دقیقاً فرمول رادرفورد (رابطه ۱۱.۱۱) است. اتفاقاً این فرمول برای پتانسیل کولنی، مکانیک کلاسیکی، تقریب بورن و نظریه میدان کوانتومی نتیجه یکسانی بدست می‌دهد. به اصطلاح متخصصین کامپیوتر، فرمول رادرفورد به طرز شگفت‌انگیزی «نیرومند» است.

مسئله ۱۰.۱۱ * دامنه پراکندگی را در تقریب بورن برای پراکندگی از گوی نرم در یک انرژی دلخواه بدست آورید. نشان دهید که فرمول شما به رابطه ۸۲.۱۱ در حد انرژی کم ساده می شود.

مسئله ۱۱.۱۱ انتگرال رابطه ۹۱.۱۱ را برای تایید درستی عبارت عددیابی کنید.

مسئله ۱۲.۱۱ ** سطح مقطع کل را برای پراکندگی از یک پتانسیل یوکاوا در تقریب بورن محاسبه کنید. پاسخ خود را برحسب تابعی از E بیان کنید.

مسئله ۱۳.۱۱ * برای پتانسیل مساله ۴.۱۱،

(الف) $f(\theta)$ ، $D(\theta)$ و σ را در تقریب بورن کم انرژی محاسبه کنید.

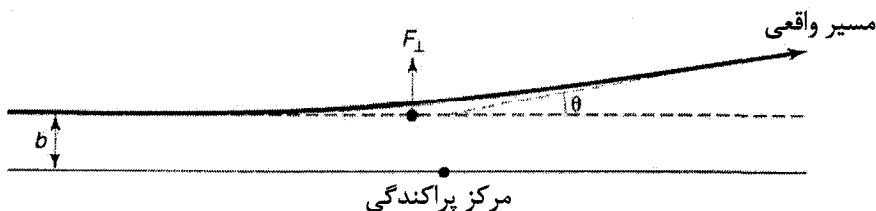
(ب) $f(\theta)$ را برای انرژی های دلخواه در تقریب بورن محاسبه کنید.

(پ) نشان دهید پاسخ های شما با جواب مساله ۴.۱۱ در نظام مناسب سازگار هستند.

۳.۳.۱۱ سری بورن

تقریب بورن از نظر ذات و ماهیت مشابه تقریب تکان در نظریه کلاسیکی پراکندگی است. در تقریب تکان با وانمود کردن به اینکه ذره به حرکتش در مسیر مستقیم ادامه می دهد کار را شروع کرده (شکل ۱۲.۱۱) و تکان (ضربه) عرضی را محاسبه می کنیم که در آن حالت زده می شود:

$$I = \int F_{\perp} dt \quad [95.11]$$



شکل ۱۲.۱۱: تقریب تکان اینطور فرض می کند که ذره بدون انحراف به حرکتش ادامه می دهد و تکانه عرضی زده شده

اگر ابیراهی به نسبت کوچک باشد، این باید تقریب خوبی برای تکانه عرضی داده شده به ذره باشد و در نتیجه زاویه پراکندگی برابر می شود با

$$\theta \cong \tan^{-1}(I/P) \quad [۹۶.۱۱]$$

که در آن P تکانه فرودی است. اگر اینطور دوست دارید، این تقریب تکان «مرتبه اول» است (مرتبه صفرم آنچیزی است که با آن شروع کردیم: به هیچ وجه ابیراهی نداشت). علاوه بر این، در تقریب بورن مرتبه صفرم موج صفحه‌ای فرودی بدون هیچ تغییر جزئی عبور می کند و آنچه در بخش پیشین مورد کاوش قرار دادیم به واقع تصحیح مرتبه اول این است. اما همین ایده را می توان برای ایجاد یک سری از تصحیح های مرتبه بالاتر مرتبا تکرار کرد، که احتمالا با جواب دقیق تلاقی می کند.

صورت انتگرالی معادله شرودینگر اینطور خوانده می شود

$$\psi(r) = \psi_0(r) + \int g(r-r_0)V(r_0)\psi(r_0)d^3r_0 \quad [۹۷.۱۱]$$

که در آن ψ_0 موج فرودی است،

$$g(r) \equiv -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \quad [۹۸.۱۱]$$

تابع حاصل تابع گرین است (که حالا برای راحتی، عامل $2m/\hbar^2$ را به آن ضمیمه کرده ام) و V پتانسیل پراکندگی است. به طور شماتیک،

$$\psi = \psi_0 + \int gV\psi \quad [۹۹.۱۱]$$

فرض کنید این عبارت را برای ψ در نظر گرفته و آنرا تحت انتگرال می بریم:

$$\psi = \psi_0 + \int gV\psi_0 + \int \int gVgV\psi \quad [۱۰۰.۱۱]$$

با تکرار این رهیافت، یک سری منظم برای ψ بدست می آوریم:

$$\psi = \psi_0 + \int gV\psi_0 + \int \int gVgV\psi_0 + \dots + \int \int \int gVgVgV\psi_0 + \dots \quad [۱۰۱.۱۱]$$

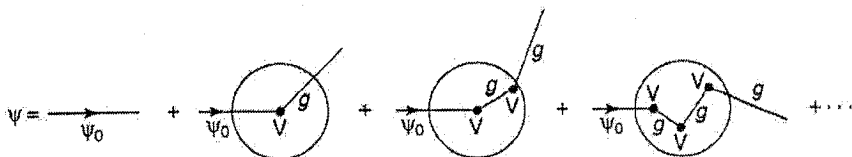
در هر جمله تنها تابع موج فرودی (ψ_0) نمایان می‌شود، به همراه توان‌های بیشتر و بیشتری از gV . تقریب بورن اول این سری را پس از جمله دوم قطع می‌کند، اما حالا دیگر روشن است که چطور یکی از تصحیحات مرتبه بالاتر را تولید می‌کند.

سری بورن را می‌توان به طور نموداری آنطور که در شکل ۱۳.۱۱ نمایش یافته نشان داد. در مرتبه صفرم، پتانسیل کاری به کار ψ ندارد؛ در مرتبه اول یکبار «ضربه خورده» و سپس در یک جهت جدید به بیرون «منتشر» می‌شود؛ در مرتبه دوم ضربه خورده، منتشر می‌شود، دوباره ضربه خورده و سپس به بیرون منتشر می‌شود؛ و همینطور تا آخر. در این متن تابع گرین را گاهی اوقات انتشارگر می‌نامند - این تابع به شما می‌گوید که آشفتگی چگونه بین یک برهم‌کنش با برهم‌کنش بعدی منتشر می‌شود. سری بورن الهام‌بخش صورت‌بندی فاینمن از مکانیک کوانتومی نسبیتی شد که به طور کامل برحسب عوامل راسی (V) و انتشارگرهای (g) به نمودارهای فاینمن مرتبط می‌شود.

مساله ۱۴.۱۱ θ را (به صورت تابعی از پارامتر برخورد) برای پراکندگی رادرفورد در تقریب تکان محاسبه کنید. نشان دهید پاسخ شما با عبارت دقیق (مساله ۱.۱۱ الف)) در حد مناسب سازگار است.

مساله ۱۵.۱۱ *** دامنه پراکندگی برای پراکندگی کم انرژی از گوی نرم در تقریب بورن مرتبه دوم را بیابید. پاسخ:

$$-(2mV_0a^3/3\hbar^2)[1 - (4mV_0a^2/5\hbar^2)]$$



شکل ۱۳.۱۱: تعبیر نموداری سری بورن، رابطه ۱۰.۱۱

مسائل دیگری برای فصل ۱۱

مساله ۱۶.۱۱ *** تابع گرین را برای معادله شرودینگر یک بعدی یافته و از آن برای ساختن صورت انتگرالی (مانسته رابطه ۶۷.۱۱) استفاده کنید. پاسخ:

$$\psi(x) = \psi_0(x) - \frac{im}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|x-x_0|} V(x_0) \psi(x_0) dx_0 \quad [۱۰.۲.۱۱]$$

مساله ۱۷.۱۱ *** از نتیجه مساله ۱۶.۱۱ به منظور توسعه تقریب بورن برای پراکندگی یک بعدی (روی بازه $-\infty < x < \infty$ ، بدون هیچ «دیواری» در مبداء) استفاده کنید. یعنی، اینطور برگزینید که $\psi_0(x) = Ae^{ikx}$ و فرض را بر این بگذارید که $\psi_0(x) \cong \psi_0(x_0)$ است تا انتگرال را عددیابی کنید. نشان دهید ضریب بازتاب به این شکل درمی آید

$$R \cong \left(\frac{m}{\hbar^2 k} \right)^2 \left| \int_{-\infty}^{\infty} e^{2ikx} V(x) dx \right|^2 \quad [۱۰.۳.۱۱]$$

مساله ۱۸.۱۱ از تقریب بورن یک بعدی (مساله ۱۷.۱۱) برای محاسبه ضریب عبور ($T = 1 - R$) برای پراکندگی از یک تابع دلتا (رابطه ۱۱۴.۲) و چاه مربعی متناهی (رابطه ۱۴۵.۲) استفاده کنید. پاسخ‌های خود را با جواب‌های دقیق (روابط ۱۴۱.۲ و ۱۶۹.۲) مقایسه کنید.

مساله ۱۹.۱۱ قضیه اپتیکی را ثابت کنید، که سطح مقطع کل را به بخش موهومی دامنه پراکندگی مقدم مربوط می‌سازد:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im}(f(0)) \quad [۱۰.۴.۱۱]$$

راهنمایی: از روابط ۴۷.۱۱ و ۴۸.۱۱ استفاده کنید.

مساله ۲۰.۱۱ از تقریب بورن برای تعیین سطح مقطع کل پراکندگی از یک پتانسیل گاوسی به صورت زیر استفاده کنید

$$V(r) = Ae^{-\mu r^2}$$

پاسخ خود را برحسب ثابت‌های A ، μ و m (جرم ذره فرودی) و $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ ، که در آن E انرژی فرودی است، بیان کنید.

فصل

دوازدهم

گفتار پایانی

اکنون که (امیدوارم) درک درستی از آنچه مکانیک کوانتومی بیانگر آن است بدست آوریده‌اید، مایلم به این پرسش بازگردم که منظور از مکانیک کوانتومی چیست - ادامه همان حکایتی که در بخش ۲.۱ آغاز کردم. منشاء این مساله ابهام مربوط به تعبیر آماری تابع موج است. این از آن روست که Ψ (یا به بیان کلی‌تر، یک حالت کوانتومی - که می‌تواند برای مثال یک اسپینور باشد) به شکلی منحصر به فرد خروجی یک اندازه‌گیری را تعیین نمی‌کند؛ تمام آنچه این حالت کوانتومی در اختیار می‌گذارد توزیعی آماری از تمام نتایج ممکن است. این وضع پرسشی ژرف و بسیار اساسی را به میان می‌آورد که: آیا سامانه فیزیکی به واقع پیش از اندازه‌گیری ویژگی مشخصی داشت (به اصطلاح دیدگاه واقع‌گرا) یا آنکه این خود عمل اندازه‌گیری بود که این ویژگی را «بوجود آورد» دیدگاهی که تنها الزام آماری تحمیل شده توسط تابع موج آنرا محدود می‌کند (موضع متداول) - یا آیا می‌توان با بیان اینکه مورد سوال در حیطه «متافیزیک» قرار می‌گیرد اساساً از زیر بار پاسخ دادن به آن شانه خالی کرد (پاسخ تجاهل‌گرایی یا آنچه فلاسفه آنرا مذهب نمی‌دانم می‌خوانند).

براساس دیدگاه واقع‌گرا، مکانیک کوانتومی نظریه ناکاملی است، این از آن روست که حتی اگر همه آنچه‌ی را که مکانیک کوانتومی می‌بایست درباره سامانه به شما بگوید بدانید (یعنی تابع موج سامانه را)، باز هم نمی‌توانید تمام ویژگی‌های آن سامانه را تعیین کنید. پیداست که اطلاعات دیگری در خارج از مکانیک کوانتومی وجود دارد که (به همراه Ψ) برای در اختیار داشتن توصیف کامل از واقعیت فیزیکی مورد نیاز است.

موضع متداول مسائلی به مراتب پریشان‌کننده‌تر را به میان می‌آورد چراکه اگر عمل اندازه‌گیری سامانه را وادارد تا «در وضعیت خاصی قرار بگیرد» یعنی به ایجاد یک ویژگی که قبلاً وجود نداشته کمک کند،^۱ درآنصورت مساله‌ای بسیار یگانه و غیر عادی درباره فرایند اندازه‌گیری در

^۱ شاید عجیب به نظر برسد، اما آنگونه که نویسندگان کتابها و مقالات همه‌پسند می‌خواهند القا کنند اسرارآمیز نیست. این به اصطلاح دوگانگی موج - ذره که نیلز بور آنرا به صورت حد اصلی بسیار بزرگ و پر جلال ارتقاء داد (مکملیت) کاری می‌کند که الکترون مانند نوجوان‌های کم تجربه و غیر قابل پیش‌بینی به نظر آید که گاهی مانند بزرگترها و گاهی هم بی هیچ دلیل خاصی مثل بچه‌ها رفتار می‌کند. ترجیح می‌دهم از به کار بردن چنین بیانی اجتناب کنم. وقتی می‌گویم ذره‌ای دارای ویژگی خاصی نیست تا آن زمان که یک اندازه‌گیری رخ دهد، برای مثال در ذهنم

بین است. به علاوه، برای توضیح این واقعیت که اندازه‌گیری‌های مکرر نتایج یکسانی به بار می‌آورند، ناگزیریم اینطور فرض کنیم که عمل اندازه‌گیری به گونه‌ای باعث فروافت تابع موج می‌شود که در بهترین حالت سازگار کردن آن با تحول عادی که معادله شرودینگر روا می‌دارد دشوار است.

نظر به این مهم، تعجبی ندارد که پشت در پشت فیزیکدانان به موضع نمی‌دانم بازگشتند و به دانشجویان‌شان هم توصیه می‌کردند که وقتشان را برای نگرانی درباره بنیادهای مفهومی این نظریه به هدر ندهند.

۱.۱۲ پارادوکس EPR

در سال ۱۹۳۵، اینشتین، پودولسکی و روزن^۲ پارادوکس (باطل‌نما) معروف EPR را منتشر کردند که (بر پایه‌ای کاملاً نظری) برای اثبات این مطلب که موضع واقع‌گرا تنها دیدگاه قابل پیگیری و تأیید می‌باشد طراحی شده بود. نسخه ساده شده‌ای از پارادوکس EPR را شرح می‌دهم که به دیوید بوهم منتسب است. واپاشی مزون پی به یک الکترون و یک پوزیترون را در نظر بگیرید:

$$\pi^0 \rightarrow e^- + e^+$$

با این فرض که پایون در حالت سکون بود، الکترون و پوزیترون در جهات مخالف یکدیگر به سرعت دور می‌شوند (شکل ۱.۱۲). باید توجه داشت که پایون دارای اسپین صفر است، پس پایداری تکانه زاویه‌ای ملزم می‌دارد که الکترون و پوزیترون در پیکربندی تک‌تایی قرار داشته باشند:

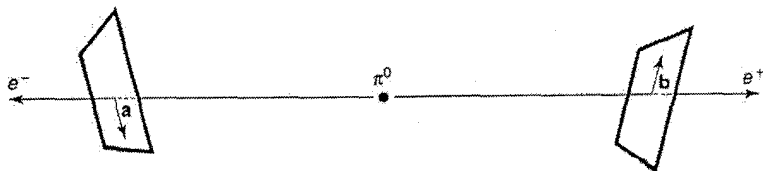
$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow_{-}\downarrow_{+} - \downarrow_{-}\uparrow_{+}) \quad [1.12]$$

الکترونی را مجسم می‌کنم که در حالت اسپینی $\chi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ قرار دارد؛ اندازه‌گیری مولفه x تکانه زاویه‌ای آن می‌تواند مقدار $\hbar/2$ یا $-\hbar/2$ (با احتمال برابر) مقدار $-\hbar/2$ را بازگرداند، اما تا اندازه‌گیری انجام نشده الکترون به وضوح مقدار معلومی برای y ندارد.

^۲ مقاله B. Podolsky, A. Einstein, *Phys. Rev.* 47, 770 (1935). snap.sellfile.ir

اگر الکترون درحالی یافت شود که در حالت اسپین بالا قرار دارد، پوزیترون باید در حالت اسپین پائین باشد و برعکس. مکانیک کوانتومی قادر نیست به شما بگوید که در هر واپاشی پایون خاص کدام ترکیب را بدست خواهید آورد، اما این را می‌گوید که اندازه‌گیری‌ها لازم و ملزوم خواهند بود یعنی در نیمی از دفعات یک پیکربندی و در نیمی دیگر پیکربندی دیگر را بدست می‌آورید (به طور میانگین). حالا فرض کنید می‌گذاریم الکترون و پوزیترون از هم دور شوند - در یک آزمایش خاص ۱۰ متر یا از نظر تئوری ۱۰ سال نوری - و آنگاه اسپین الکترون را اندازه می‌گیریم. فرض کنید حالت با اسپین بالا را بدست می‌آورید. بلافاصله می‌فهمید که اگر کسی ۲۰ متر (۲۰ سال نوری) آنطرف‌تر پوزیترون را اندازه بگیرد و اسپین پائین بدست می‌آورد.

از دید یک واقع‌گرا، هیچ چیز عجیب و غریبی در میان نیست - الکترون به واقع از همان زمان که خلق شده اسپین بالا داشته (و پوزیترون هم اسپین پائین) - موضوع فقط این است که مکانیک کوانتومی چیزی در اینباره نمی‌داند. اما دیدگاه «متداول» بر این نظر است که هیچ کدام از این دو ذره اسپین بالا یا پائین نداشته تا آنکه عمل اندازه‌گیری رخ داده است: اندازه‌گیری که روی الکترون انجام دادید باعث فروافت تابع موج آن شد و در دم اسپین پوزیترونی که ۲۰ متر (۳۰ سال نوری) آنطرف‌تر بود را «فراوری» کرد. اینشتین، پودولسکی و روزن چنین «کنش از راه دور اسرارآمیز» (آنطور که اینشتین آنرا می‌نامید) را چیز احمقانه و چرندی انگاشتند. آنها اینطور نتیجه گرفتند که موضع متداول توجیه‌ناپذیر است؛ الکترون و پوزیترون باید از ابتدا و در تمام مدت اسپین‌های معلومی داشته باشند، حالا چه مکانیک کوانتومی بتواند آنرا محاسبه کند و چه نتواند.



شکل ۱.۱۲: نسخه بوهوم از آزمایش EPR: π^0 در حال سکون به یک جفت الکترون - پوزیترون واهی باشد

فرض اساسی که مبنای برهان EPR قرار دارد این است که هیچ تاثیری نمی‌تواند سریعتر از سرعت نور منتشر شود. ما این را اصل جایگزیدگی (موضعیت) می‌نامیم. شاید به نوعی وسوسه شوید و پیشنهاد کنید که فروافت تابع موج آنی نیست بلکه به نحوی با سرعتی متناهی «حرکت» می‌کند. با این وجود، این بیان به نقض پایستگی تکانه زاویه‌ای منتهی می‌شود چرا که اگر اسپین پوزیترون را پیش از آنکه خبر فروافت تابع موج الکترون به آن برسد اندازه گرفته بودیم، احتمال ۵۰ - ۵۰ وجود می‌داشت که هر دو ذره را در حالت اسپین بالا بیابیم. فرقی نمی‌کند افراد به طور انتزاعی چه دیدگاهی درباره این نظریه دارند چون آزمایش‌ها عاری از هرگونه ابهام و تناقضند: چنین نقضی رخ نمی‌دهد. (پاد) همبستگی و ارتباط اسپین‌ها تمام عیار و بی‌کم و کاست است. از قرار معلوم فروافت تابع موج - بدون توجه به اینکه حالت اولیه‌اش چه بوده - آنی است. (برخی از فیزیکدانانی که در حوزه اطلاعات فعالیت می‌کنند معتقدند که اولاً نظریه کوانتومی در اساس نظریه‌ای درباره اطلاعات است و این اطلاعات است که حداکثر می‌تواند با سرعت نور جابه‌جا شود. پارادوکس EPR هم در این بین توجیه بسیار مناسبی یافته است. برای یک بحث کامل‌تر درباره این پارادوکس و جایگاه کنونی مکانیک کوانتومی کتاب‌های برنامه‌ریزی عالم (تهران: انتشارات کتاب پدیده، ۱۳۸۷) و کشف رمز عالم (تهران: انتشارات کتاب پدیده، ۱۳۸۸) از همین مترجم را بدقت مطالعه کنید - م)

مساله ۱.۱۲ حالت‌های درهم تافته. پیکربندی اسپین تک تایه (رابطه ۱۲.۱) مثالی کلاسیکی از یک حالت درهم تافته است - یک حالت دو ذره‌ای که نمی‌توان آنرا به صورت حاصلضرب دو حالت یک ذره‌ای بیان کرد، بنابراین نمی‌توان به واقع درباره «حالت» هر ذره به طور جداگانه سخن گفت. شاید از خودتان بپرسید آیا این مصنوعی برآمده از نمادگذاری نامناسب است - شاید یک ترکیب خطی از حالت‌های تک ذره‌ای سامانه را از درهم‌تافتگی درآورد. قضیه زیر را ثابت کنید:

سامانه‌ای دو سطحی، $|\phi_a\rangle$ و $|\phi_b\rangle$ ، را در نظر بگیرید به طوریکه $\langle\phi_a|\phi_b\rangle = \delta_{ij}$. (مثلاً $|\phi_a\rangle$ می‌تواند نشان دهنده اسپین بالا و $|\phi_b\rangle$ اسپین پائین باشد.) حالت دو ذره‌ای زیر را در نظر بگیرید.

$$\alpha|\phi_a(1)\phi_b(2)\rangle + \beta|\phi_b(1)\phi_a(2)\rangle$$

با در نظر گرفتن $\beta \neq \alpha$ و $\beta \neq 0$ نشان دهید عبارت بالا را نمی‌توان به صورت یک حاصلضرب به صورت

$$|\psi_r(1)\rangle|\psi_s(2)\rangle$$

به ازای هر دو حالت تک ذره‌ای $|\psi_r\rangle$ و $|\psi_s\rangle$ بیان کرد.
راهنمایی: $|\psi_r\rangle$ و $|\psi_s\rangle$ را به صورت ترکیبات خطی از $|\psi_a\rangle$ و $|\psi_b\rangle$ بنویسید.

۲.۱۲ قضیه بل

اینشتین، پودولسکی و روزن شک نداشتند که مکانیک کوانتومی تا آنجا که معلوم شده صحیح است؛ آنها تنها مدعی بودند که نظریه توصیف ناکاملی از واقعیت فیزیکی بدست می‌دهد: تابع موج تمام داستان نیست - کمیت دیگری، λ ، هم علاوه بر Ψ لازم است تا حالت یک سامانه به طور کامل مشخص شود. این کمیت λ را «متغیر پنهان» می‌نامیم زیرا در این مرحله، هیچ ایده‌ای نداریم که آنرا چگونه محاسبه کنیم.^۳ در طول سالیان، شماری از نظریه‌های متغیر پنهان پیشنهاد شده تا در مقام پشتیبانی از مکانیک کوانتومی برآیند؛^۴ این نظریه‌ها بیشتر دست و پاگیر بوده و نامعقول‌اند، اما مهم نیست - تا ۱۹۶۴ به شکل شایان توجهی ارزش پیگیری داشت. اما در آن سال J. S. Bell ثابت کرد هر نظریه متغیر پنهان موضعی با مکانیک کوانتومی همخوانی ندارد.^۵

بل تعمیمی از آزمایش EPR / Bohm را به میان کشید: به جای آنکه آشکارسازهای الکترون و پوزیترون در امتداد یک جهت سمتگیری کنند، او اجازه داد آنها مستقل از یکدیگر بچرخند. نخستین آشکارساز مولفه اسپین الکترون را در جهتی اندازه می‌گیرد که بردار یک‌ه آن a است و

^۳ متغیر پنهان می‌تواند یک عدد یا مجموعه‌ای از اعداد باشد؛ شاید λ را باید به نوعی از طریق نظریه‌ای که در آینده توسعه می‌یابد محاسبه کرد یا شاید به هر دلیل غیر قابل محاسبه باشد. خلاصه چندان هم اهمیت ندارد. تمام آنچه بر آن تاکید دارم این است که باید چیزی وجود داشته باشد - حتی اگر فهرستی از خروجی‌های هر آزمایش ممکن باشد - که به وضعیت سامانه پیش از اندازه‌گیری مربوط باشد.

^۴ مقاله D. Bohm در مجله (Phys. Rev. 85, 166, 180 (1952)).

^۵ مقاله اصلی بل (در مجله (Physics 1, 195 (1964)) متن بی‌اندازه ارزشمندی است: نگارش آن خلاصه، پذیرفتنی و واقعا زیباست.

دومی نیز مولفه اسپین پوزیترون در جهتی با بردار b را اندازه می‌گیرد (شکل ۲.۱۲). برای سادگی، بیایید اسپین‌ها را در واحدهای $\hbar/2$ ثبت کنیم؛ در آنصورت هر آشکارساز مقدار $+1$ (برای اسپین بالا) و -1 (برای اسپین پائین) را ثبت می‌کند که در امتداد جهت مورد سوال هستند. جدولی از نتایج برای تعداد زیادی واپاشی π^0 می‌تواند به صورت زیر باشد:

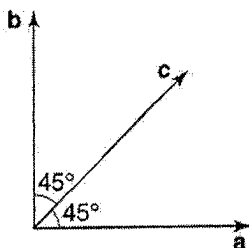
الکترون	پوزیترون	حاصلضرب
+1	-1	-1
+1	+1	+1
-1	+1	-1
+1	-1	-1
-1	-1	+1
:	:	:

بل طرحی برای محاسبه مقدار میانگین حاصلضرب اسپین‌ها برای مجموعه مفروضی از سمت‌گیرهای آشکارساز ارائه کرد. این مقدار میانگین را $P(a, b)$ بنامید. اگر آشکارسازها موازی با یکدیگر باشند ($a = b$) پیکربندی EPRB اصلی را بدست می‌آوریم؛ در اینصورت یک اسپین رو به بالا و دیگری رو به پایین است، از اینرو حاصلضرب همیشه -1 است و در نتیجه میانگین هم همین مقدار را دارد:

$$P(a, a) = -1 \quad [2.12]$$

با همان نمونه، اگر آشکارسازها در خلاف جهت هم باشند ($a = -b$) در آنصورت هر حاصلضربی $+1$ می‌شود، لذا

$$P(a, -a) = -1 \quad [3.12]$$



برای سمت گیری دلخواه، مکانیک کوانتومی پیش بینی می کند که

$$P(a, b) = -a \cdot b$$

[۴.۱۲]

(مساله ۵۰.۴ را ملاحظه کنید). آنچه بل کشف کرد این بود که این نتیجه در هر نظریه متغیر پنهان موضعی غیر ممکن است.

برهان این یافته به نحوی بسیار عالی و دلفریب ساده است. فرض کنید حالت «کامل» سامانه الکترون / پوزیترون توسط متغیر (یا متغیرهای) پنهان λ مشخص می شود؛ λ از یک واپاشی پایونی به واپاشی دیگر به نحوی تغییر می کند که هیچیک از ما نه آنرا درک می کنیم و نه کنترلی روی آن داریم. علاوه بر این فرض کنید که خروجی اندازه گیری الکترون مستقل از سمتگیری (b) آشکارساز پوزیترون باشد - که هرچه باشد ممکن است توسط آزمون گری که در محدوده پوزیترون قرار دارد درست پیش از آنکه اندازه گیری الکترون صورت پذیرد انتخاب شود و در نتیجه هر پیام ثانوی برای بازگشت به سمت آشکارساز الکترون بیش از اندازه تاخیر کند. (این پیش فرض جایگزیدگی است.) پس تابعی مانند $A(a, \lambda)$ وجود دارد که نتیجه اندازه گیری الکترون را بدست داده و تابع دیگری هم مانند $B(b, \lambda)$ برای اندازه گیری پوزیترون وجود دارد. این توابع تنها می توانند مقادیر ± 1 را بپذیرند:^۶

$$A(a, \lambda) = \pm 1; B(b, \lambda) = \pm 1$$

[۵.۱۲]

هرگاه آشکارسازها هم راستا شوند، نتایج به ازای تمام λ به طور کامل با هم همبسته هستند:

$$A(a, \lambda) = -B(b, \lambda)$$

[۶.۱۲]

^۶ این از پیش بر چیزی بسیار بیش از آنچه موجبیت کلاسیکی مهیا بودنش را مجاز می شمار اذعان دارد، چراکه هر پنداری که براساس آن ذرات بتوانند بردارهای تکانه زاویه معلومی با مولفه های قابل تعیین به طور همزمان داشته باشند را نفی می کند. اما مهم نیست - نکته استدلال بل عبارت است از اثبات اینکه مکانیک کوانتومی از منظر هر نظریه موجبیتی موضعی ناکامل است - حتی آنی که برای انعطاف پذیری بیشتر از هیچ اقدامی فروگذار نیست.

باید توجه داشت که میانگین حاصلضرب اندازه‌گیری‌ها از این قرار است

$$P(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \int \rho(\lambda) A(\mathbf{a}, \lambda) B(\mathbf{b}, \lambda) d\lambda \quad [7.12]$$

که در آن $\rho(\lambda)$ چگالی احتمال متغیر پنهان است. (مانند هر چگالی احتمال دیگر، این هم عددی غیر منفی است و در شرط بهنجارش $\int \rho(\lambda) d\lambda = 1$ صدق می‌کند، اما فراسوی این دیگر نمی‌توانیم هیچ پنداشتی درباره $\rho(\lambda)$ داشته باشیم؛ نظریه‌های مختلف متغیر پنهان به طور فرضی عبارات مختلفی برای ρ می‌دهند.) از منظر رابطه ۶.۱۲، می‌توانیم B را حذف کنیم:

$$P(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = - \int \rho(\lambda) A(\mathbf{a}, \lambda) A(\mathbf{b}, \lambda) d\lambda \quad [8.12]$$

اگر c بردار یک‌ه دیگری باشد،

$$P(\mathbf{a}, \mathbf{b}) - P(\mathbf{a}, \mathbf{c}) = - \int \rho(\lambda) [A(\mathbf{a}, \lambda) A(\mathbf{b}, \lambda) - A(\mathbf{a}, \lambda) A(\mathbf{c}, \lambda)] d\lambda \quad [9.12]$$

یا، چون $[A(\mathbf{b}, \lambda)]^2 = 1$:

$$P(\mathbf{a}, \mathbf{b}) - P(\mathbf{a}, \mathbf{c}) = - \int \rho(\lambda) [1 - A(\mathbf{a}, \lambda) A(\mathbf{c}, \lambda)] A(\mathbf{a}, \lambda) A(\mathbf{b}, \lambda) d\lambda \quad [10.12]$$

اما می‌توان از رابطه ۵.۱۲ چنین نتیجه گرفت که $-1 \leq A(\mathbf{a}, \lambda) A(\mathbf{b}, \lambda) \leq +1$ و نیز آنکه

$$[1 - A(\mathbf{a}, \lambda) A(\mathbf{c}, \lambda)] \geq \rho(\lambda) \quad \text{بنابراین}$$

$$|P(\mathbf{a}, \mathbf{b}) - P(\mathbf{a}, \mathbf{c})| \leq \int \rho(\lambda) [1 - A(\mathbf{a}, \lambda) A(\mathbf{c}, \lambda)] d\lambda \quad [11.12]$$

به بیان ساده‌تر،

$$|P(\mathbf{a}, \mathbf{b}) - P(\mathbf{a}, \mathbf{c})| \leq 1 + P(\mathbf{b}, \mathbf{c}) \quad [12.12]$$

این همان رابطه معروف نامساوی بل است. این رابطه برای هر نظریه متغیر پنهان موضعی صادق است (تنها منوط است به بایستگی‌های کمینه روابط ۴.۱۲ و ۵.۱۲)، چراکه هیچ فرضی مبنی بر شمار متغیرهای پنهان یا توزیع آنها (ρ) نداشتیم.

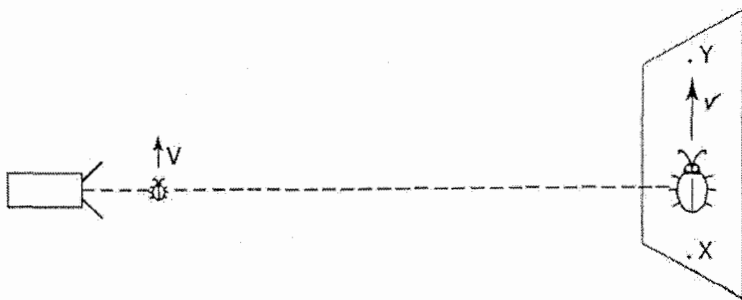
اما اثبات اینکه پیش‌بینی مکانیک کوانتومی ناکامل است با استفاده از نامساوی بل کار آسانی است. برای مثال، فرض کنید هر سه بردار در یک صفحه قرار دارند و c نسبت به a و b زاویه 45° می‌سازد (شکل ۳.۱۲)؛ در این حالت مکانیک کوانتومی حاکی از آن است که

$$P(a, b) = 0, P(a, c) = P(b, c) = -0.707$$

که آشکارا با نامساوی بل سازگار نیست:

$$0.707 \neq 1 - 0.707 = 0.293$$

اضافه بر آن، پارادوکس EPR با اصلاح بل چیزی به مراتب بنیان براندازتر از تصور مولفانش را ثابت می‌کند: اگر حق با آنها باشد، در آن صورت نه تنها مکانیک کوانتومی ناکامل است، بلکه یکسره اشتباه هم هست. به عبارت دیگر، اگر مکانیک کوانتومی درست باشد، پس هیچ نظریه متغیر پنهانی برای نجات ما از چنگ ناجایگزیدگی که اینشتین آنرا احمقانه و چرند می‌انگاشت وجود ندارد. به علاوه، آزمایش بسیار ساده‌ای هست که این قضیه را یک بار برای همیشه از پا در می‌آورد.



شکل ۳.۱۲: سمتگیری آشکارسازها که نقض‌های کوانتومی نامساوی بل را ثابت می‌کند

بسیاری از آزمایش‌ها برای آزمودن نامساوی بل در دهه ۱۹۶۰ و ۱۹۷۰ میلادی انجام شدند که با کارهای اسپکت، گرانژیو و راجر به اوج خود رسیدند.^۷ اینجا کاری با جزییات نداریم (آنها در واقع از گذارهای اتمی دو فوتونی استفاده کردند، نه واپاشی‌های پایونی). برای طرد این احتمال بعید که ممکن است آشکارساز پوزیترون به نوعی سم‌تگیری آشکارساز الکترون را «حس» کند پس از آنکه فوتون‌ها به حرکت درآمدند هر دو سم‌تگیری تا حدی تصادفی تنظیم شدند. نتایج در توافقی عالی با پیش‌بینی‌های مکانیک کوانتومی قرار داشته و آشکارا با نامساوی بل تناقض داشتند.^۸

جالب است که تایید آزمایشگاهی مکانیک کوانتومی برای جامعه علمی به منزله نوعی شوک بود. اما نه از آن رو که فانی «واقع‌گرایی» را به بار آورد - اکثر فیزیکدانان مدتهاست به این امر خو گرفته‌اند (و برای آنهایی که هنوز خود را با این اوضاع وفق نداده‌اند، امکان وجود نظریه‌های متغیر پنهان غیر موضعی باقی مانده که قضیه بل در مورد آنها به کار نمی‌رود^۹). این شوک واقعی اثباتی بر این مطلب بود که طبیعت خودش از اساس غیر موضعی است. ناجایگزیدی (عدم موضعییت) به

^۷ مقاله A. Aspect, P. Grangier, و G. Roger در مجله *Phys. Rev. Lett.* 49, 91 (1982). برای مطالعه آزمایش‌های اخیر تر، مقاله G. Weihs و دیگران در مجله *Phys. Rev. Lett.* 81, 5039 (1998) را ملاحظه کنید.

^۸ قضیه بل مشتمل بر میانگین‌هاست و می‌توان تصور کرد که ساز افزاری مانند نمونه اسپکت حاوی نوعی بایاس (سوگیری) مخفی باشد که نمونه غیر قابل نمایشی را انتخاب می‌کند، بدین ترتیب میانگین را نابهنجار می‌نماید. اخیراً، نسخه بهبود یافته‌ای از قضیه بل ارائه شده که در آن تضاد میان پیش‌بینی کوانتومی و هر نظریه متغیر پنهان به مراتب شگرف‌تر است. مقاله D. Greenberger, M. Horne, A. Shimony, و A. Zeilinger در مجله *Am. J. Phys.* 58, 1131 (1990) و مقاله David Mermin در همان مجله شماره ۵۸، ۷۳۱ (۱۹۹۰) را ملاحظه کنید.

^۹ پیچ و تاب شگرف تقدیر است که پارادوکس EPR که موضعییت را برای اثبات واقع‌گرایی مفروض گرفت، در نهایت به آنجا رهنمون شد که موضعییت را طرد کرده و موضوع واقع‌گرایی را غیر قابل تصمیم‌گیری گذارد - نتیجه غایی کار اینشتین (که بل آنرا برگرداند) کمترین را می‌پسندید. امروزه اکثر فیزیکدانان تصور می‌کنند اگر نتوانند واقع‌گرایی موضعی داشته باشند، پس اساساً نکته چندانی در واقع‌گرایی وجود ندارد و به همین دلیل نظریه‌های متغیر پنهان غیر موضعی در موقعیتی به مراتب فرعی‌تر قرار می‌گیرند. کماکان، برخی نویسندگان - به ویژه خود بل، در کتاب «گفتنی‌ها و ناگفتنی‌ها در مکانیک کوانتومی» (انتشارات دانشگاه کمبریج، کمبریج، ۱۹۸۷) - چنین بحث می‌کنند که این قبیل نظریه‌ها چیزی بالاتر از حد امیدواری برای پل زدن روی شکاف میان سامانه اندازه‌گیری شده و سازافزار اندازه‌گیری را پیشکش می‌کنند و تلاش شان بر این است تا سازوکاری قابل درک و فهمیدنی برای فروافت تابع موج فراهم نمایند.

شکل فروافت آنی تابع موج (و برای آن مطلب همچنین در بایستگی متقارن سازی برای ذرات یکسان) همیشه خصوصیتی از تعبیر متداول بود، اما پیش از آزمایش اسپکت این امکان وجود داشت که امیدوار باشیم ناجایگزیدگی مکانیک کوانتومی به نوعی ساخته ای فیزیکی برآمده از صورت بندی ریاضی باشد که هیچ پیامد قابل آشکار شدنی ندارد. آن امید دیگر وجود ندارد و ما نیز ملزم به باز آزمودن مخالفت خود با کنش آنی از راه دور هستیم.

چرا فیزیکدانها این همه درباره ایده تاثیرات مافوق سرعت نور هشدار می دهند؟ هر چه باشد، چیزهای زیادی وجود دارند که سریعتر از سرعت نور حرکت می کنند. اگر مگسی از عرض باریکه یک پروژکتور سینمایی عبور کند، سرعت سایه اش متناسب است با فاصله از پرده نمایش؛ از نظر اصولی، آن فاصله را می توان هرچه قدر که مایلید بزرگ فرض کرد و در نتیجه سایه می تواند با سرعت بسیار زیاد دلخواهی حرکت کند (شکل ۴.۱۲). با این حال، سایه حامل هیچ مقدار انرژی نیست؛ همچنین قادر به حمل هیچ پیامی از یک نقطه به نقطه دیگر پرده نمایش هم نمی باشد. شخصی که در نقطه X قرار دارد نمی تواند با دستکاری و ور رفتن به سایه در حال عبور باعث بروز رویدادی در نقطه Y شود.

از سوی دیگر، یک تاثیر علی که با سرعتی سریعتر از نور منتشر می شود حامل پیامدها و معانی ضمنی غیر قابل قبولی است. چون براساس نسبیت خاص چارچوب مرجع های لختی وجود دارد که در آنها چنین علامتی در زمان رو به عقب منتشر می شود - اثر مقدم بودن بر علت - و به ناهنجاری های منطقی غیر قابل گریزی منتهی می شود. (می توانید برای مثال، ترتیب کشتن پدر بزرگ تازه دنیا آمده خود را بدهید.) سوال اینجاست که آیا اثرات **فرانوری** (ما فوق سرعت نور) که مکانیک کوانتومی آنها را پیش بینی می کند و اسپکت هم آنها را آشکار ساخته، به این مفهوم، علی هستند یا آیا آنقدر فرازمینی و فضایی هستند (مانند حرکت سایه) که بدرگ گریز از مخالفت فلسفی بخورند؟

خب، بیایید آزمایش بل را تجسم کنیم. آیا اندازه گیری الکترون روی خروجی اندازه گیری پوزیترون اثر می گذارد؟ مسلم بدانید که تاثیر می گذارد - چون در غیر این صورت نمی توانستیم همبستگی و ارتباط داده ها را توجیه کنیم. اما آیا اندازه گیری الکترون باعث بروز نتیجه خاصی برای

پوزیترون می‌شود؟ به معنای معمول کلمه پاسخ خیر است. هیچ راهی وجود ندارد فردی که در حال کنترل و تنظیم آشکارساز است بتواند از اندازه‌گیری که انجام می‌دهد برای ارسال علامتی به شخص دیگری که در مکان آشکارساز پوزیترون قرار دارد استفاده نماید، زیرا او کنترلی روی خروجی اندازه‌گیری خودش ندارد (او نمی‌تواند کاری کند که الکترون مشخصی اسپینش بالا شود، مثل همان فردی که در مکان X قرار داشت و نمی‌توانست با استفاده از سایه مگس تاثیری بوجود آورد). این درست است که وی می‌تواند تصمیم بگیرد آیا اصلاً اندازه‌گیری انجام بشود یا نشود، اما کنترلگر پوزیترون که فقط به داده‌های پایانه خودش دسترسی دارد، نمی‌تواند بگوید که آیا الکترون اندازه‌گیری شده یا نشده است. چون فهرست‌های داده‌هایی که در دو انتها تدوین شده‌اند، با فرض جدا بودن از یکدیگر، کاملاً تصادفی است. فقط آن زمان که بعداً دو فهرست را با هم مقایسه می‌کنیم است که همبستگی‌ها و ارتباطات قابل توجهی را کشف می‌کنیم. در یک چارچوب مرجع دیگر، اندازه‌گیری‌های پوزیترون پیش از اندازه‌گیری‌های الکترون بوقوع می‌پیوندند و با این وجود این امر هیچ پارادوکس منطقی در بر ندارد - همبستگی مشاهده شده در رفتارشان کاملاً متقارن است و مساله بی‌اهمیتی است که بگوییم مشاهده الکترون روی اندازه‌گیری پوزیترون تاثیر می‌گذارد یا راه و روش دیگری در کار است. این به طرزی شگفت‌انگیز تاثیری از یک نوع بسیار ظریف است که تنها نمود آن همبستگی پیچیده و مبهم میان دو فهرست از داده‌های تصادفی غیر از این است.

بنابراین می‌رسیم به تفکیک دو نوع اثر: چندگونی «علی» که تغییراتی واقعی در یک ویژگی فیزیکی گیرنده ایجاد می‌کند به گونه‌ای با اندازه‌گیری‌هایی که تنها روی آن زیرسامانه انجام می‌شود قابل آشکارسازی است و تنها گواه آن در داده‌های بدست آمده از دو زیرسامانه جدا از هم است - یک همبستگی که به خاطر ماهیتش نمی‌توان آنرا با بررسی یکی از فهرست‌ها آشکارسازی کرد. اثرات علی نمی‌توانند سریعتر از سرعت نور منتشر شوند، اما هیچ دلیل الزام‌آوری وجود ندارد که بگوید چرا اثرات فزاینده نباید اینگونه باشند. اثرات وابسته به فروافت تابع موج از نوع دوم

هستند که در نتیجه این حقیقت که آنها با سرعتی بیشتر از سرعت نور حرکت می کنند می تواند تعجب برانگیز باشد، اما هر چه باشد فاجعه آمیز نیست.^{۱۰}

۳.۱۲ قضیه تکثیرناپذیری (نبود بدل)

اندازه گیری های کوانتومی معمولاً ویرانگر هستند، به این مفهوم که حالت سامانه اندازه گیری شده را دستکاری کرده و برهم می زنند. اصل عدم قطعیت بدین ترتیب در آزمایشگاه تقویت شده و پذیرانده می شود. شاید از خودتان بپرسید چرا همینجوری یک دسته کپی یکجور (کلون یا بافتزاد) از حالت اولیه درست نمی کنیم و آنها را اندازه نمی گیریم که سامانه به حال خودش واگذاشته شده و سالم باقی بماند. این کار نشدنی است. قدر مسلم، اگر می توانستید یک دستگاه تکثیر کننده (یک «دستگاه زیراکس کوانتومی») بسازید، ماشین های کوانتومی به هیچ دردی نمی خوردند.

برای مثال، آنوقت می شد با استفاده از آزمایش EPRB پیام هایی را با سرعت بیشتر از سرعت نور ارسال کرد. فرض کنید این پیامی که می خواستیم از اپراتور آشکارساز پوزیترون به اپراتور آشکار الکترون بفرستیم، یا «بله» و یا «خیر» بود. اگر پیام «بله» باشد، فرستنده S_z (پوزیترون) را اندازه می گیرد. مهم نیست او چه نتیجه ای بدست می آورد - آنچه اهمیت دارد این است که این خانم یک اندازه گیری را انجام می دهد، یعنی الکترون حالا در حالت مشخص و معلوم \uparrow یا \downarrow است (مهم نیست کدام). گیرنده بلافاصله یک میلیون کپی همانند از الکترون درست کرده و S_z را روی آنها اندازه می گیرد. اگر همه آنها به پاسخ یکسانی منجر شوند (مهم نیست کدام پاسخ)، می توانیم کاملاً مطمئن باشیم که الکترون به واقع اندازه گیری شده است، از اینرو پیام «بله» است. اگر نبی از آنها اسپین بالا و نبی دیگر اسپین پائین باشند، در آن صورت الکترون به طور مشخص اندازه گیری نشده و به همین خاطر پاسخ «نه» است.

^{۱۰} تاکنون مقالات بی شماری درباره قضیه بل نگاشته شده اند. مقاله ای که من شخصاً به آن علاقمندم رساله ای است به قلم David Mermin در مجله *Physics Today* (آوریل ۱۹۸۵، صفحه ۳۸). در مقاله L. E. Ballentine در مجله *Am. J. Phys.* 55, 785 (1987) نیز فهرستی وزین و پر تعداد از مراجع آمده است.

اما همانطور که Zurek ، Wootters و Dieks در ۱۹۸۲ ثابت کردند، نمی‌توانید ماشین زیراکس کوانتومی درست کنید.^{۱۱} به طور نمادین، ماشینی می‌خواهیم که در ورودی ذره‌ای در حالت $|\psi\rangle$ (همانی که باید کپی شود) را به علاوه ذره دومی در حالت $|X\rangle$ («کاغذ سفید») را گرفته و بعد دو ذره در حالت $|\psi\rangle$ را به بیرون بیافکند (ذره اصلی و ذره کپی):

$$|\psi\rangle|X\rangle \rightarrow |\psi\rangle|\psi\rangle \quad [۱۳.۱۲]$$

فرض کنید دستگاهی ساخته‌ایم که با موفقیت حالت $|\psi_1\rangle$ را تکثیر می‌کند:

$$|\psi_1\rangle|X\rangle \rightarrow |\psi_1\rangle|\psi_1\rangle \quad [۱۴.۱۲]$$

همچنین روی حالت $|\psi_2\rangle$ هم کار می‌کند:

$$|\psi_2\rangle|X\rangle \rightarrow |\psi_2\rangle|\psi_2\rangle \quad [۱۵.۱۲]$$

(اگر ذره برای مثال یک الکترون باشد، $|\psi_1\rangle$ و $|\psi_2\rangle$ ممکن است اسپین بالا یا پائین باشند). تا اینجا که خوب بود. اما وقتی ورودی را ترکیبی خطی به شکل $|\psi\rangle = \alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle$ می‌گیریم چه اتفاقی می‌افتد؟ از قرار معلوم می‌رسیم به^{۱۲}

$$|\psi\rangle|X\rangle \rightarrow \alpha|\psi_1\rangle|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle|\psi_2\rangle \quad [۱۶.۱۲]$$

که اصلاً آنچه‌ی نیست که می‌خواستیم - آنچه ما می‌خواستیم این بود

$$\begin{aligned} |\psi\rangle|X\rangle \rightarrow |\psi\rangle|\psi\rangle &= [\alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle][\alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle] \\ &= \alpha^2|\psi_1\rangle|\psi_1\rangle + \beta^2|\psi_2\rangle|\psi_2\rangle + \alpha\beta[|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle + |\psi_2\rangle|\psi_1\rangle] \end{aligned} \quad [۱۷.۱۲]$$

^{۱۱} مقاله W. H. Zurek ، W. K. Wootters در مجله 229, 802 (1982) Nature و D. Diek در مجله Phys Rev Lett. A 92, 271 (1982).

^{۱۲} اینجا فرض بر این است که دستگاه به طور خطی روی حالت $|\psi\rangle$ عمل می‌کند، آنچنانکه باید باشد، چراکه معادله شرودینگر وابسته به زمان (که به حساب \hbar است) snap.sellfile.ir

می‌توانید ماشینی برای همانندسازی الکترون‌های اسپین - بالا و اسپین - پائین بسازید، اما وقتی پای ترکیبات خطی مهم در میان باشد این ماشین ناکام می‌ماند. مثل این است که ماشین زیراکسی خریده‌اید که خطوط عمودی و افقی را به شکلی عالی کپی می‌کند اما خطوط قطری را کاملاً کج و کوله می‌زند.

۴.۱۲ گربه شرودینگر

فرایند اندازه‌گیری نقشی شهرآشوب و فتنه‌آمیز در مکانیک کوانتومی ایفا می‌کند: اینجاست که ابهام، ناجایگزیدگی، فروافت تابع موج و تمام آن دشواریهای مفهومی همراه سر بر می‌آورند. در نبود اندازه‌گیری، تابع موج با آسودگی خاطر تام و به شیوه‌ای موجبیتی براساس معادله شرودینگر متحول شده و مکانیک کوانتومی هم مانند یک نظریه میدان معمولی به نظر می‌رسد (به مراتب ساده‌تر از مثلاً الکتروپنایمیک کلاسیک، چرا که اینجا فقط یک میدان Ψ وجود دارد، در عوض دو میدان (E و B) که تازه آن هم اسکالر است). این نقش خارق‌العاده و عجیب و غریب فرایند اندازه‌گیری است که به مکانیک کوانتومی آن پیچیدگی و شکوهمندی را می‌بخشد. اما اندازه‌گیری دقیقاً چیست؟ چه چیز آنرا تا این حد از سایر فرایندهای فیزیک متفاوت می‌سازد؟^{۱۳} و بالاخره اینکه چه وقت می‌توانیم بگوییم اندازه‌گیری رخ داده است؟

شرودینگر این سوال اساسی را در پارادوکس گربه معروفش با بیانی رک و آشکار اینطور پیش می‌کشد:^{۱۴}

^{۱۳} مکتب اندیشه‌ای وجود دارد که این تمایز را واپس می‌زند و بر این باور است که سامانه و سازافزار اندازه‌گیری را می‌بایست با یک تابع موج بزرگتر توصیف کرد که خودش براساس معادله شرودینگر متحول می‌شود. در چنین نظریه‌هایی خبری از فروافت تابع موج نیست، اما باید به طور نوعی از هرگونه امیدواری به تشریح رویدادهای منفرد در این دیدگاه دست کشید - مکانیک کوانتومی (در این دیدگاه) تنها برای مجموعه‌هایی آماری از سامانه‌های یکسان تدارک دیده شده به کار می‌آید. برای مثال، مقاله Philip Pearle در (1967) *Am. J. Phys.* 35, 742 یا کتاب *Quantum Mechanics: A Modern Development* اثر Leslie E. Ballentine، سنگاپور (۱۹۹۸) (World Scientific) را ملاحظه کنید.

^{۱۴} مقاله E. Schrodinger در مجله *Naturwiss.* 48, 52 (1935)؛ ترجمه آن توسط Josef M. Jauch در کتاب *Foundations of Quantum Mechanics*، انتشارات Addison-Wesley، (۱۹۶۸) صفحه ۱۸۵ آمده است.

گربه‌ای را در اتاقکی فولادی به همراه اسبابی اهریمنی قرار می‌دهیم ... در یک شمارشگر گایگر مقدار بسیار کمی ماده رادیواکتیو موجود است، آنقدر کم که شاید در مدت یک ساعت فقط یکی از اتم‌ها دچار واپاشی شود، اما با احتمال برابر هیچ یک از آنها واپاشیده نمی‌شود. اگر یک اتم واپاشیده شود در آنصورت محفظه به کار افتاده و از طریق یک رله چکش کوچکی را فعال می‌کند که محفظه محتوی سیانور را می‌شکند. اگر کل این سامانه را به مدت یک ساعت رها کنیم، آنگاه می‌گوییم گربه در صورتی زنده است که هیچ اتمی دچار واپاشی نشده باشد. اولین واپاشی گربه را مسموم می‌کند. تابع موج کل سامانه این وضع را با لحاظ کردن بخش‌های مساوی برای گربه زنده و مرده بیان می‌کند.

در پایان یک ساعت، تابع موج گربه شکل نمادین زیر را دارد

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{\text{زنده}} + \psi_{\text{مرده}}) \quad [18.12]$$

گربه نه مرده است و نه زنده بلکه در ترکیبی خطی از هر دو حالت قرار دارد، تا آن هنگام که اندازه‌گیری رخ دهد - تا به فرض وقتی که شما زیر چشمی از پنجره محفظه نگاهی به داخل می‌اندازید. در آن لحظه مشاهده شما گربه را وادار به «انتخاب یک وضعیت» می‌کند: مرده یا زنده. همچنین اگر گربه را مرده بیابید، در آنصورت به واقع این شما هستید که با نگاه کردن از پنجره محفظه او را کشته‌اید.

شرویدینگر این را بیان بی‌معنای آشکاری می‌دانست و اکثر فیزیکدان‌ها هم با او موافق هستند. نکته پوچ و نامعقولی درباره این مطلب وجود دارد که یک شیء ماکروسکوپی (بزرگ مقیاس) چگونه می‌تواند در ترکیبی خطی از دو حالت هویدا و قابل درک باشد. الکترون می‌تواند در ترکیبی خطی از حالت‌های با اسپین بالا و پائین قرار داشته باشد، اما یک گربه به وضوح نمی‌تواند در ترکیبی خطی از دو حالت مرده و زنده بودن قرار بگیرد. چگونه می‌توانیم این دو را با تعبیر متداول از مکانیک کوانتومی وفق دهیم؟

پذیرفته‌ترین پاسخ از این قرار است که راه‌اندازی شمارشگر گایگر به مفهوم تعبیر آماری نه مداخله مشاهده انسانی، یکجور فرایند اندازه‌گیری را براه می‌اندازد. این ماهیت اندازه‌گیری است که

یک سامانه ماکروسکوپی تحت تاثیر قرار می‌گیرد (در این مثال، شمارشگر گایگر). اندازه‌گیری در لحظه‌ای رخ می‌دهد که سامانه میکروسکوپی (که با قوانین مکانیک کوانتومی شرح داده می‌شود) با سامانه ماکروسکوپی (که با قوانین مکانیک کلاسیک توصیف می‌شود) برهم‌کنشی انجام می‌دهد به نحوی که ثبتي دائمي را بر جای می‌گذارد. خود سامانه ماکروسکوپی مجاز به اشغال هیچ ترکیب خطی از حالت‌های متمایز نیست.^{۱۵}

وانمود نمی‌کنم که این قطعنامه کاملاً رضایت بخشی است، اما دست کم از خودگرایی احمقانه و عبث و یگانه و دیگران بدور است که خودشان را اینطور قانع می‌کردند که مداخله شعور انسانی است که یک اندازه‌گیری را در مکانیک کوانتومی تشکیل می‌دهد. بخشی از مساله خود واژه «اندازه‌گیری» است که بی‌شک حامل پیشنهاد دست داشتن انسان در این فرایند است. هاینبرگ واژه «رویداد» را پیشنهاد کرد که می‌تواند سزاوارتر باشد. اما متأسفانه «اندازه‌گیری» آنچنان با متون فنی عجین شده که دیگر گرفتار آن هستیم. و بالاخره، هیچ شکلی از دستکاری در واژه‌گزینی نمی‌تواند به طور کامل این روح اسرارآمیز را جن‌گیری کند.

۵.۱۲ پارادوکس زنوی کوانتومی

فروافت تابع موج بی‌شک غیرعادی‌ترین خصوصیت کل این داستان است. این فرایند بر مبنایی کاملاً نظری ارائه گردید تا توجیهی برای این حقیقت باشد که یک اندازه‌گیری آنی مکرر مقدار یکسانی را به همراه می‌آورد. اما مسلماً چنین اصل موضوعه ناروایی باید به طور مستقیم پیام رسان

^{۱۵} البته، در یک معنای غایی سامانه ماکروسکوپی خودش هم توسط مکانیک کوانتومی توصیف می‌شود. اما توابع موج در مثال نخست، ذرات بنیادی منفرد را توصیف می‌کنند؛ تابع موج یک شیء ماکروسکوپی ترکیب پیچیده بسیار عظیمی است که از تمام توابع موج 10^{23} ذره تشکیل دهنده‌اش درست می‌شود. احتمالاً جایی در آمار اعداد بزرگ، ترکیبات خطی ماکروسکوپی بسیار نامحتمل می‌شوند. قدر مسلم، اگر می‌توانستید به نوعی یک آونگ میرا را (به فرض) به ترکیبی خطی از حالت‌های کوانتومی که از نظر ماکروسکوپی از هم مجزا هستند ببرید، در کسر بسیار اندکی از زمان میرایی به یک حالت کلاسیکی معمولی پسگشت می‌کرد. این پدیده را وادوسی می‌نامند. برای مثال، کتاب *Interpretation of Quantum Mechanics* اثر R. Omnes (پرینستون، ۱۹۹۴) فصل ۶ را ملاحظه کنید.

پیامدهای مشاهده‌پذیر باشد. در ۱۹۷۷ دو دانشمند به نامهای Misra و Sudarshan^{۱۶} چیزی تحت عنوان اثر زنوی کوانتومی را پیش کشیدند که اثبات تجربی شگرفی از فروافت تابع موج است. ایده ایشان بدین شرح بود که سامانه ناپایداری را گرفته (به فرض، اتمی در یک حالت برانگیخته) و آنرا در معرض اندازه‌گیری‌های مکرر قرار دهند. هر مشاهده به فروافت تابع موج منجر شده و ساعت را از نو تنظیم می‌کند بطوریکه از این طریق گذار مورد انتظار به حالت پائین‌تر را به نحو نامعلومی به تاخیر می‌اندازد.^{۱۷}

به ویژه، فرض کنید سامانه‌ای از یک حالت برانگیخته مانند ψ_2 آغاز می‌کند که طول عمر طبیعی آن برای گذار به حالت پایه ψ_1 برابر با τ است. به طور معمول، برای زمان‌هایی بسیار کوچکتر از τ ، احتمال گذار متناسب است با t (رابطه ۴۲.۹ را ببینید)؛ در واقع، از آنجاییکه آهنگ گذار $1/\tau$ است،

$$P_{2 \rightarrow 1} = \frac{t}{\tau} \quad [۱۹.۱۲]$$

اگر پس از زمان t اندازه‌گیری انجام دهیم، آنگاه احتمال آنکه سامانه کماکان در حالت بالاتر قرار داشته باشد عبارت است از

$$P_2(t) = 1 - \frac{t}{\tau} \quad [۲۰.۱۲]$$

فرض کنید حتماً آنرا در حالت بالاتر می‌یابیم. در آنصورت تابع موج روی ψ_2 فرومی‌افتد و فرایند دوباره از اول شروع می‌شود. اگر اندازه‌گیری دوم را انجام دهیم، در لحظه $2t$ ، احتمال آنکه سامانه هنوز در حالت بالاتر قرار داشته باشد آشکارا از این قرار است

$$\left(1 - \frac{t}{\tau}\right)^2 \approx 1 - \frac{2t}{\tau} \quad [۲۱.۱۲]$$

^{۱۶} مقاله B. Misra و E. C. G. Sudarshan در مجله *J. Math. Phys.* 18, 756 (1977).

^{۱۷} این اثر ربط چندانی به خود زنو ندارد، اما یادآور این ضرب‌المثل قدیمی است که می‌گوید «دیگی که مدام آنرا

که درست برابر است با آنچه باید می بود به شرط آنکه هرگز در لحظه t هیچ اندازه گیری انجام نمی دادیم. این به حتم نتیجه ای است که هر آدم زود باوری انتظارش را دارد؛ اگر همه داستان همین بود که دیگر چیزی از مشاهده سامانه بدست نمی آمد و اثر زنوی کوانتومی هم در کار نمی بود.

با این حال، برای زمان های بی اندازه کوچک، احتمال آنکه گذار به جای t متناسب با t^2 باشد (رابطه ۳۹.۹ را ملاحظه کنید)^{۱۸} عبارت است از:

$$P_{2 \rightarrow 1} = \alpha t^2 \quad [22.12]$$

در اینصورت احتمال آنکه سامانه پس از دو بار اندازه گیری هنوز در حالت بالاتر قرار داشته باشد عبارت است از

$$(1 - \alpha t^2)^2 \approx 1 - 2\alpha t^2 \quad [23.12]$$

در حالیکه اگر هرگز اندازه گیری اول را انجام نمی دادیم نتیجه این می بود

$$1 - \alpha(2t)^2 \approx 1 - 4\alpha t^2 \quad [24.12]$$

پیداست مشاهده ما از سامانه پس از زمان t احتمال نهایی گذاری به حالت پائین تر را کاهش داده است!

قدر مسلم، اگر سامانه را در n بازه مرتب، از $t = 0$ تا $t = T$ بررسی کنیم (یعنی اندازه گیری هایی در زمانهای $T/n, 2T/n, \dots, T$ انجام دهیم)، احتمال آنکه سامانه در پایان هنوز در حالت بالاتر قرار داشته باشد برابر است با

$$(1 - \alpha(T/n)^2)^n \approx 1 - \frac{\alpha}{n} T^2 \quad [25.12]$$

^{۱۸} در بحث منتهی به بستگی زمانی خطی، اینطور فرض کردیم که تابع $\sin^2(\Omega t/2)/\Omega^2$ در رابطه ۳۹.۹ برآمدگی تیزی بود. با این وجود، پهنای این «برآمدگی» از مرتبه $4\pi/t = \Delta\omega$ است و به ازای زمان بسیار بسیار کوچک t این تقریب به کار نمی آید و انتگرال به $\int \rho(\omega) d\omega$ (تبدیل می شود).

که در حد $n \rightarrow \infty$ به 1 میل می‌کند: سامانه‌ای که به طور دایم مورد مشاهده قرار گرفته باشد هرگز دچار واپاشی نمی‌شود! برخی از نویسندگان این را نتیجه‌ای پوچ و مهمل انگاشته و اثبات فروافت تابع موج را مغلطه می‌دانند. با این حال، بحث ایشان روی پایه تعبیری به مراتب ناپایدارتر و لجام گسیخته‌تر از آنچه متشکل از «اندازه‌گیری» است می‌چرخد. اگر رد ذره در اتاقک حباب به مثابه «اندازه‌گیری مکرر» باشد، در آنصورت پرونده بسته است، زیرا این قبیل ذرات بی تردید دچار واپاشی می‌شوند (در واقع، طول عمر آنها به طور متناوب به سبب حضور آشکارساز طولانی‌تر می‌شود). اما چنین ذره‌ای تنها به طور متناوب با اتم‌های اتاقک حباب برهم‌کنش می‌کند و برای آنکه اثر زنوی کوانتومی رخ دهد باید یک اندازه‌گیری پیاپی با سرعت زیاد انجام شود تا سامانه را در نظام t^2 گیر بیندازد.

اینطور که پیداست، آزمایش برای گذارهای خودبخودی بی فایده است، اما می‌توان آنرا با استفاده از گذارهای القایی انجام داد و نتایج در توافق کامل با پیش‌بینی‌های نظریه هستند.^{۱۹} متأسفانه، این آزمایش برای تایید فروافت تابع موج آنچنانکه طراحان آن انتظار داشتند قانع‌کننده نیست؛ اثر مشاهده شده را می‌توان از راههای دیگری توجیه کرد.^{۲۰}

در این کتاب تلاش کردم حکایتی همساز و منسجم ارائه نمایم: تابع موج (Ψ) نشان دهنده حالت یک ذره (یا سامانه) است؛ ذرات به طور کلی دارای ویژگیهای دینامیکی خاصی (مانند مکان، تکانه، انرژی، تکانه زاویه‌ای و غیره) نیستند تا آن هنگام که یک اندازه‌گیری رخ دهد؛ احتمال بدست آوردن یک مقدار خاص در هر آزمایش مفروض با تعبیر آماری Ψ تعیین می‌شود؛ پس از اندازه‌گیری تابع موج فرومی‌افتد، به طوریکه یک اندازه‌گیری مکرر آنی به حتم نتیجه یکسانی بدست می‌دهد. تعبیر ممکن دیگری هم وجود دارند - نظریه متغیرهای پنهان ناجایگزیده، تصویر

^{۱۹} مقاله D. J. Wineland و J. J. Bollinger ، D. J. Heinzen ، W. M. Itano در مجله *Phys. Rev A*, **41**, 2295 (1990).

^{۲۰} مقاله L. E. Ballentine در مجله *Found. Phys.* **20**, 1329 (1990)؛ مقاله S. Tasaki ، T. Petrosky و I. Prigogine در مجله *Phys. Rev A*, **41**, 109 (1990).

«چند جهانی»، مدل‌های مجموعه آماری و دیگران - اما به نظر من یکی از اینها به طور مفهومی ساده‌ترین تعبیر است و بی‌تردید همانی است که اکثر فیزیکدان امروزی به آن اذعان دارند. این تعبیر در برابر آزمون زمان ایستادگی کرد و از تمام چالش‌های تجربی سالم بیرون آمد. اما نمی‌توانم باور کنم که این پایان راه باشد؛ در انتها، باید مطالب زیادی درباره سرشت اندازه‌گیری و سازوکار فروافت فراگیریم. همچنین کاملاً امکان‌پذیر است که نسل‌های آینده از منظر یک نظریه پیچیده‌تر به گذشته نگاهی کرده و از خودشان بپرسند که ما چطور می‌توانسته‌ایم اینقدر زود باور و ساده دل باشیم.

ضمیمه

جبر خطی

جبر خطی حساب بردارهایی همانند آنهایی که در سال اول فیزیک با آنها برخورد می‌کنیم را خلاصه کرده و تعمیم می‌دهد. تعمیم در دو جهت است: (۱) اسکالرها را اعداد مختلط می‌گیریم و (۲) خودمان را به سه بعد محدود نمی‌کنیم.

بردارها

یک فضای برداری متشکل است از مجموعه‌ای از بردارها $\{|\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle, \dots\}$ در کنار مجموعه‌ای از اسکالرها $\{a, b, c, \dots\}$ ^۱ که تحت دو عمل ریاضی بسته^۲ هستند - جمع برداری و ضرب اسکالر (عددی):

جمع برداری

«حاصل جمع» دو بردار، بردار دیگری است به این صورت:

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle \quad [1]$$

جمع برداری تعویض پذیر بوده

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\beta\rangle + |\alpha\rangle \quad [2]$$

و نیز دارای خاصیت انجمنی است

$$|\alpha\rangle + (|\beta\rangle + |\gamma\rangle) = (|\alpha\rangle + |\beta\rangle) + |\gamma\rangle \quad [3]$$

^۱ برای مقاصد ما در این قسمت، اسکالرها اعداد مختلط معمولی هستند. ریاضیدانان می‌توانند چیزهایی درباره فضاهای برداری روی میدان‌های عجیب و غریب در اختیاران بگذارند اما این قبیل اشیاء (ریاضی) در مکانیک کوانتومی نقشی ایفا نمی‌کنند. توجه کنید که α, β, γ و ... اعداد (معمولی) نیستند؛ آنها یکسری اسم (برچسب) محسوب می‌شوند - برای نمونه، «چارلی» یا F43A-9GL یا هر چیز دیگری که برای مشخص کردن بردار در مساله برایتان اهمیت دارد.

^۲ به عبارت دیگر، این عمل‌های ریاضی همواره خوش تعریف‌اند و هرگز شما را به خارج از فضای برداری منتقل نمی‌کنند.

بردار صفر (یا تهی)^۳ وجود دارد، $|0\rangle$ ، با این ویژگی که برای هر بردار $|\alpha\rangle$ داریم

$$|\alpha\rangle + |0\rangle = |\alpha\rangle \quad [۴]$$

برای بردار $|\alpha\rangle$ یک بردار معکوس (وارون) وابسته $(1 - \alpha)$ ^۴ وجود دارد، به گونه‌ای که

$$|\alpha\rangle + |-\alpha\rangle = |0\rangle \quad [۵]$$

ضرب اسکالر

«حاصلضرب» هر اسکالری در هر بردار، بردار دیگری است:

$$\alpha|\alpha\rangle = |\gamma\rangle \quad [۶]$$

ضرب اسکالر نسبت به جمع برداری پخش پذیر است

$$a(|\alpha\rangle + |\beta\rangle) = a|\alpha\rangle + a|\beta\rangle \quad [۷]$$

این ضرب نسبت به جمع اسکالر هم پخش پذیر است

$$(a + b)|\alpha\rangle = a|\alpha\rangle + b|\alpha\rangle \quad [۸]$$

ضرب اسکالر همچنین نسبت به ضرب معمولی اسکالرها هم خاصیت انجمنی دارد:

$$a(b|\alpha\rangle) = (ab)|\alpha\rangle \quad [۹]$$

ضرب در اسکالرهایی 0 و 1 همان تاثیری را روی بردارها دارد که انتظار دارید:

$$0|\alpha\rangle = |0\rangle 1|\alpha\rangle = |\alpha\rangle \quad [۱۰]$$

واضح است که $|- \alpha\rangle = (-1)|\alpha\rangle$.

^۳ مرسوم است بردار صفر را هر جا که باعث بروز اشتباه نشود، بدون براکت تزئینی به کار می‌برند: $|0\rangle \rightarrow 0$.

^۴ نمادگذاری خنده‌داری است، چرا که α یک عدد نیست. من به سادگی با اسم «- چارلی» برای معکوس برداری که نام آن «چارلی» است کنار می‌آیم. در ادامه یک وارون نامی «بیچلی» را معرفی می‌کنم. پیشنهاد می‌کنم.

آنچه می‌بینیم بسیار کمتر از آنچه‌ی است که در واقع از این قواعد برمی‌آید - همه کاری که انجام داده‌ام این است که قواعد آشنای سازواری بردارها را به طور خلاصه نوشته‌ام. ارزش این خلاصه‌سازی آن است که قادریم دانش و قدرت درونی‌یابی‌مان را به رفتار بردارهای معمولی را به سایر سامانه‌هایی که در چنین ویژگیهای صوری با هم سهیم‌اند اعمال کنیم.

یک ترکیب خطی از بردارهای $|\alpha\rangle$ ، $|\beta\rangle$ ، و $|\gamma\rangle$ و ... عبارتی است به شکل زیر

$$a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle + c|\gamma\rangle + \dots \quad [11]$$

می‌گوییم بردار $|\lambda\rangle$ از مجموعه $|\alpha\rangle$ ، $|\beta\rangle$ ، $|\gamma\rangle$ و ... مستقل خطی است اگر و تنها اگر نتوان آنرا به صورت ترکیبی خطی از آنها نوشت. (مثلا در سه بعد، بردار یک \hat{k} از \hat{i} و \hat{j} مستقل خطی است اما هیچ برداری در صفحه xy نسبت به \hat{i} و \hat{j} مستقل خطی نیست.) با بسط این مطلب، مجموعه‌ای از بردارها را «مستقل خطی» می‌نامیم اگر هر کدام از آنها نسبت به بقیه اعضای مجموعه مستقل خطی باشد. می‌گوییم مجموعه‌ای از بردارها فضا را محاط می‌کنند (پوشش می‌دهند یا می‌پوشانند) چنانچه بتوان هر بردار را به صورت ترکیبی خطی از اعضای آن مجموعه نوشت.^۵ مجموعه‌ای از بردارهای مستقل خطی که فضا را محاط می‌کنند یک پایه خوانده می‌شود. تعداد بردارهای هر پایه‌ای را بُعد آن فضا می‌نامیم. فعلا اینطور فرض می‌کنیم که بعد (n) متناهی است. در مورد یک پایه مانند

$$|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle, \dots, |e_n\rangle \quad [12]$$

هر بردار مفروضی همانند

$$|\alpha\rangle = a_1|e_1\rangle + a_2|e_2\rangle + \dots + a_n|e_n\rangle \quad [13]$$

را منحصر با یک n تایی (منظم) از مولفه‌های آن به شکل زیر نمایش می‌دهند:

$$|\alpha\rangle \leftrightarrow (a_1, a_2, \dots, a_n) \quad [14]$$

^۵ مجموعه‌ای از بردارها که فضا را محاط می‌کنند معمولا مجموعه کامل خوانده می‌شود، گرچه من شخصا این کلمه را برای حالت بینهایت بُعدی نگاه می‌دارم که در آن مسائل پیچیده‌ای درباره همگرایی مطرح می‌شوند.

کار کردن با مولفه‌های بردارها به جای خود بردارهای انتزاعی اغلب ساده‌تر است. برای جمع کردن بردارها، مولفه‌های مانسته شان را جمع می‌کنید:

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = (a_1 + b_1, a_2 + b_2, \dots, a_n + b_n) \quad [15]$$

برای ضرب در یک اسکالر، آن اسکالر را در تمام مولفه‌ها ضرب می‌کنید:

$$c|\alpha\rangle \leftrightarrow (ca_1, ca_2, \dots, ca_n) \quad [16]$$

بردار صفر با دنباله‌ای از صفرها نشان داده می‌شود:

$$|0\rangle = (0, 0, \dots, 0) \quad [17]$$

و مولفه‌های بردار معکوس (وارون) برداری است که علامت تمام مولفه‌های آن معکوس شده باشد:

$$|-\alpha\rangle \leftrightarrow (-a_1, -a_2, \dots, -a_n) \quad [18]$$

تنها نقطه ضعف کار کردن با مولفه‌ها این است که مجبورید خودتان را به یک پایه خاص مقید کنید و مساله اینجاست که سازوکی‌های یکسان برای کسی که با پایه متفاوتی کار می‌کند یکسان به نظر نمی‌رسند.

مساله ۱. بردارهای متداول در سه بعد $(a_x\hat{i} + a_y\hat{j} + a_z\hat{k})$ با مولفه‌های مختلط را در نظر بگیرید.

(الف) آیا زیرمجموعه همه بردارهایی که در آنها $a_z = 0$ است یک فضای برداری تشکیل می‌دهد؟ اگر چنین است، آن فضا چند بعدی است؛ اگر اینطور نیست، دلیل بیاورید.

(ب) در مورد زیرمجموعه‌ای از تمام بردارهایی که مولفه z آنها ۱ است چطور؟ راهنمایی: آیا

جمع دو بردار از این دست در زیرمجموعه خواهد بود؟ بردار صفر (تهی) چطور؟

(پ) وضع زیرمجموعه‌ای از بردارهایی که تمام مولفه‌های آنها با هم برابرند چگونه است؟

مساله ۲.* دسته‌ای از چند جمله‌ایها (با ضرایب مختلط) که درجه x جملات آنها کوچکتر از N باشد را تصور کنید.

(الف) آیا این مجموعه یک فضای برداری تشکیل می‌دهد (که این چند جمله‌ایها در آن نقش «بردارها» را بازی کنند)؟ اگر چنین است، پایه مناسبی را پیشنهاد کرده و بُعد فضا را هم تعیین کنید. اگر اینگونه نیست، این مجموعه از کدامیک از ویژگیهای معرفه یک مجموعه به عنوان یک فضای برداری بی بهره است؟

(ب) چه می‌شود اگر بخواهیم چند جمله‌ایها را توابعی زوج بگیریم؟

(پ) چه می‌شود اگر بخواهیم ضرب اصلی (یعنی عددی که در x^{N-1} ضرب می‌شود) را بگیریم؟

(ت) چه می‌شود اگر بخواهیم چند جمله‌ایها در نقطه $x = 1$ مقدارشان ۰ باشد؟

(ث) چه می‌شود اگر بخواهیم چند جمله‌ایها در نقطه $x = 0$ مقدارشان ۱ باشد؟

مساله ۳. ثابت کنید مولفه‌های یک بردار نسبت به یک پایه مفروض منحصر به فرد هستند.

حاصلضرب‌های داخلی

در فضای سه بعدی با دو نوع ضرب برداری مواجه می‌شویم: حاصلضرب نقطه‌ای و حاصلضرب برداری (خارجی). حاصلضرب برداری را نمی‌توان به فضاهای برداری n بعدی تعمیم داد اما ضرب نقطه‌ای تعمیم‌پذیر است - در اینحالت اغلب آنرا ضرب داخلی می‌نامند. ضرب داخلی دو بردار $|\alpha\rangle$ و $|\beta\rangle$ عدد مختلطی است (که آنرا به صورت $\langle\alpha|\beta\rangle$ می‌نویسیم) دارای این ویژگیها:

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^* \quad [۱۹]$$

$$\langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0 \quad \langle\alpha|\alpha\rangle = 0 \Leftrightarrow |\alpha\rangle = 0 \quad [۲۰]$$

$$\langle\alpha|(b|\beta\rangle + c|\gamma\rangle) = b\langle\alpha|\beta\rangle + c\langle\alpha|\gamma\rangle \quad [۲۱]$$

جدا از تعمیم‌دهی به اعداد مختلط، این اصل موضوعه به وضوح رفتار ضرب‌های نقطه‌ای را مدون می‌سازد. یک فضای برداری با یک ضرب داخلی را فضای ضرب داخلی می‌نامیم.

چون ضرب داخلی هر بردار در خودش عددی غیر منفی است (رابطه ۲۰)، جذر مربعی آن حقیقی است - آنرا نرم (هنج) بردار می‌نامیم:

$$\| \alpha \| = \sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle} \quad [22]$$

از این رابطه ایده «طول» استنباط می‌شود. یک بردار یک (که نرم آن ۱ است) را بردار بهنجار می‌نامند. (واژه مناسب در واقع باید «طبیعی» باشد، اما به نظرم واژه طبیعی زیادی انسان انگارانه است). دو بردار که حاصلضرب داخلی آنها صفر باشد را بردارهای متعامد می‌نامند (که ایده کلی «عمود بودن» را تعمیم می‌دهد). دسته‌ای از بردارهای بهنجار دو به دو متعامد که در رابطه زیر صدق می‌کنند را یک مجموعه راست هنجار می‌نامند.

$$\langle a_i | a_j \rangle = \delta_{ij} \quad [23]$$

وجود چنین مجموعه‌ای همیشه امکان‌پذیر است (مساله ۴ را ببینید) و در واقع همیشه هم انتخاب پایه‌های راست هنجار کار ساده‌ای است؛ در این حالت حاصلضرب داخلی دو بردار را می‌توان به شکلی بسیار خوب و خوش ترکیب بر حسب مولفه‌هایشان نوشت:

$$\langle \alpha | \beta \rangle = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + \dots + a_n^* b_n \quad [24]$$

نرم (به توان دو) می‌شود

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = |\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 + \dots + |\alpha_n|^2 \quad [25]$$

همچنین خود مولفه‌ها عبارتند از

$$a_i = \langle e_i | \alpha \rangle \quad [26]$$

این نتایج فرمول‌های آشنای زیر در سه بعد با پایه‌های متعامد \hat{i} ، \hat{j} و \hat{k} را تعمیم می‌دهند

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

$$|\mathbf{a}|^2 = a_x^2 + a_y^2 + a_z^2$$

$$a_x = \hat{i} \cdot \mathbf{a}, a_y = \hat{j} \cdot \mathbf{a}, a_z = \hat{k} \cdot \mathbf{a}$$

از حالا به بعد همواره با پایه‌های راست هنجار کار خواهیم کرد مگر آنکه به صراحت خلاف آن ذکر شود.

کمیت هندسی دیگری که مایلیم آنرا تعمیم دهیم زاویه میان دو بردار است. در آنالیز برداری متداول داریم $\cos \theta = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) / |\mathbf{a}| |\mathbf{b}|$. اما چون حاصلضرب داخلی در حالت کلی یک عدد مختلط است، فرمول مشابه (در یک فضای ضرب داخلی دلخواه) زاویه (حقیقی) θ را معلوم نمی‌کند. با این وجود، هنوز هم درست است که قدر مطلق این کمیت عددی کوچکتر از ۱ است

$$|\langle \alpha | \beta \rangle|^2 \leq \langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle \quad [27]$$

(این نتیجه مهم به نامساوی شوارتز معروف است؛ اثبات در مساله ۵ آمده است.) پس اگر بخواهید می‌توانید زاویه میان $|\alpha\rangle$ و $|\beta\rangle$ را با این فرمول تعریف کنید

$$\cos \theta = \frac{\langle \alpha | \beta \rangle \langle \beta | \alpha \rangle}{\sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle}} \quad [28]$$

مساله ۴.* فرض کنید پایه‌ای $(|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots, |e_n\rangle)$ در اختیار دارید که راست هنجار نیست. روش گرام - اشمیت رهیافت روشمندی برای تعمیم یک پایه راست هنجار $(|e'_1\rangle, |e'_2\rangle, \dots, |e'_n\rangle)$ از روی پایه‌ای غیر راست هنجار است. اینکار به این ترتیب انجام می‌شود: اولین بردار پایه را بهنجار می‌کنیم (بر نرم خودش تقسیم می‌کنیم):

$$|e'_1\rangle = \frac{|e_1\rangle}{\|e_1\|}$$

تصویر بردار دوم روی اولی را بدست آورده و از آن کسر می‌کنیم:

$$|e_2\rangle - \langle e'_1 | e_2 \rangle |e'_1\rangle$$

این بردار نسبت به $|e'_1\rangle$ متعامد است؛ آنرا بهنجار می‌کنیم تا $|e'_2\rangle$ بدست آید.

از $|e_3\rangle$ هم تصویرش در امتداد $|e'_1\rangle$ و $|e'_2\rangle$ را کسر می‌کنیم:

$$|e_3\rangle - \langle e'_1|e_3\rangle|e'_1\rangle - \langle e'_2|e_3\rangle|e'_2\rangle$$

این عبارت نسبت به $|e'_1\rangle$ و $|e'_2\rangle$ متعامد است؛ آنرا بهنجار می‌کنیم تا $|e'_3\rangle$ بدست آید و همین طور الی آخر.

از روش گرام - اشمیت برای راست هنجار کردن پایه زیر در فضای سه بعدی استفاده کنید.

$$\begin{aligned} &= (1+i)\hat{i} + (1)\hat{j} + (i)\hat{k}|e_1\rangle \\ &= (i)\hat{i} + (3)\hat{j} + (1)\hat{k}|e_2\rangle \\ &= (0)\hat{i} + (28)\hat{j} + (0)\hat{k}|e_3\rangle \end{aligned}$$

مساله ۵. نامساوی شوارتز (رابطه ۲۷) را ثابت کنید. راهنمایی: قرار دهید $|\gamma\rangle = |\beta\rangle - \frac{\langle\alpha|\beta\rangle}{\langle\alpha|\alpha\rangle}|\alpha\rangle$ و از $\langle\gamma|\gamma\rangle \geq 0$ هم استفاده کنید.

مساله ۶. زاویه (به مفهوم رابطه ۲۸) میان بردارهای $(1+i)\hat{i} + (1)\hat{j} + (i)\hat{k}$ و $|\alpha\rangle = (1+i)\hat{i} + (1)\hat{j} + (i)\hat{k}$ را بدست آورید.

مساله ۷. نامساوی مثلثی را اثبات کنید:

$$\|(|\alpha\rangle + |\beta\rangle)\| \leq \|\alpha\| + \|\beta\|$$

ماتریس‌ها

فرض کنید بردار دلخواهی (در فضای سه بعدی) در اختیار دارید و آنرا در عدد ۱۷ ضرب می‌کنید یا آنرا به اندازه زاویه 39° حول محور z می‌چرخانید یا بازتاب آن بردار دلخواه از روی صفحه xy را مد نظر قرار می‌دهید - همه اینها مثال‌هایی از تبدیلات خطی هستند. یک تبدیل خطی^۶ (\hat{T}) بردار دلخواه در فضای برداری را گرفته و آنرا به بردار دیگری «تبدیل می‌کند» $\langle\alpha| \rightarrow \langle\alpha'| = \hat{T}|\alpha\rangle$ ، با این قید که به ازای هر بردار $|\alpha\rangle$ و $|\beta\rangle$ و هر اسکالر a و b عملگر خطی باشد:

^۶ در این فصل از نماد کلاه $(\hat{})$ برای نمایش تبدیلات خطی استفاده می‌کنم؛ این کار با قاعده سابق من (قرار دادن کلاه روی عملگرها) ناسازگار نیست، چون (همانطور که در ادامه خواهید دید) عملگرهای کوانتومی تبدیلات خطی هستند.

$$\hat{T}(a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle) = a(\hat{T}|\alpha\rangle) + b(\hat{T}|\beta\rangle) \quad [29]$$

اگر می‌دانید یک تبدیل خطی دقیقاً با مجموعه‌ای از بردارهای پایه چه می‌کند، می‌توانید به آسانی دریابید که با بردارهای معمولی چه می‌کند. فرض کنید این تبدیل روی بردارهای یک‌ه اینطور عمل می‌کند که

$$\hat{T}|e_1\rangle = T_{11}|e_1\rangle + T_{21}|e_2\rangle + \dots + T_{n1}|e_n\rangle$$

$$\hat{T}|e_2\rangle = T_{12}|e_1\rangle + T_{22}|e_2\rangle + \dots + T_{n2}|e_n\rangle$$

...

$$\hat{T}|e_n\rangle = T_{1n}|e_1\rangle + T_{2n}|e_2\rangle + \dots + T_{nn}|e_n\rangle$$

یا به طور فشرده‌تر

$$\hat{T}|e_j\rangle = \sum_{i=1}^n T_{ij}|e_i\rangle \quad (j = 1, 2, \dots, n) \quad [30]$$

اگر $|\alpha\rangle$ را بردار دلخواهی به صورت زیر در نظر بگیریم

$$|\alpha\rangle = a_1|e_1\rangle + a_2|e_2\rangle + \dots + a_n|e_n\rangle = \sum_{j=1}^n a_j|e_j\rangle \quad [31]$$

در آن صورت

$$\hat{T}|\alpha\rangle = \sum_{j=1}^n a_j(\hat{T}|e_j\rangle) = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n a_j T_{ij}|e_i\rangle = \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^n T_{ij} a_j \right) |e_i\rangle \quad [32]$$

همانطور که می‌بینید \hat{T} برداری با مولفه‌های a_1, a_2, \dots, a_n را گرفته و به مولفه‌های بردار جدیدی به صورت زیر تبدیل می‌کند^۷

^۷ به وارونی شاخص‌ها مابین روابط ۳۰ و ۳۳ توجه کنید. این یک اشتباه تایپی نیست. روش دیگر بیان این مطلب (استفاده از انتقال $j \leftrightarrow i$ در رابطه ۳۰) این است که اگر مولفه‌ها با T_{ij} تبدیل می‌شوند، پس بردارهای پایه هم با T_{ij} تبدیل می‌شوند.

$$a'_i = \sum_{j=1}^n T_{ij} a_j \quad [33]$$

در نتیجه عناصر n^2 از T_{ij} منحصر تبدیل خطی \hat{T} را (نسبت به یک پایه مفروض) مشخص می‌کنند، درست همانطور که مولفه‌های n از a_i منحصر بردار $|\alpha\rangle$ را (نسبت به همان پایه) مشخص می‌کنند:

$$\hat{T} \leftrightarrow (T_{11}, T_{12}, \dots, T_{nn}) \quad [34]$$

اگر پایه راست هنجار باشد، از معادله ۳۰ نتیجه می‌شود که

$$T_{ij} = \langle e_i | \hat{T} | e_j \rangle \quad [35]$$

نمایش این اعداد مختلط به شکل یک ماتریس^۸ کار آسان‌تری است:

$$T = \begin{pmatrix} T_{11} & \dots & T_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ T_{n1} & \dots & T_{nn} \end{pmatrix} \quad [36]$$

پس، بررسی تبدیلات خطی به نظریه ماتریس‌ها خلاصه می‌شود. حاصلجمع دو تبدیل خطی $(\hat{S} + \hat{T})$ به صورت قابل انتظار زیر تعریف می‌شود:

$$(\hat{S} + \hat{T})|\alpha\rangle = \hat{S}|\alpha\rangle + \hat{T}|\alpha\rangle \quad [37]$$

این با قاعده متوال جمع جور است (مولفه‌های مانسته آنها را با هم جمع می‌کنید):

$$U = S + T \Leftrightarrow U_{ij} = S_{ij} + T_{ij} \quad [38]$$

حاصلضرب دو تبدیل خطی $(\hat{S}\hat{T})$ برابر است با تاثیر ویژه اعمال آنها یکی پس از دیگری - اول \hat{T} بعد \hat{S} :

$$|\alpha\rangle \rightarrow |\alpha'\rangle = \hat{T}|\alpha\rangle \rightarrow |\alpha''\rangle = \hat{S}|\alpha'\rangle = \hat{S}(\hat{T}|\alpha\rangle) = \hat{S}\hat{T}|\alpha\rangle \quad [39]$$

^۸ از حروف درشت و سیاه برای اشاره به ماتریس‌های مربعی استفاده می‌شود. snap.sellfile.ir

ماتریس U برای تبدیل ترکیبی $\hat{S}\hat{T}$ چیست؟ بدست آوردن آن ساده است:

$$a_i'' = \sum_{j=1}^n S_{ij} a_j' = \sum_{j=1}^n S_{ij} \left(\sum_{k=1}^n T_{jk} a_k \right) = \sum_{k=1}^n \left(\sum_{j=1}^n S_{ij} T_{jk} \right) a_k = \sum_{k=1}^n U_{ik} a_k$$

واضح است که

$$U = ST \Leftrightarrow U_{ik} = \sum_{j=1}^n S_{ij} T_{jk} \quad [40]$$

این قاعده استاندارد برای ضرب ماتریسی است - برای یافتن مولفه ik ام حاصلضرب ST ، مولفه‌های متناظر سطر i ام ماتریس S و ستون k ام ماتریس T را در هم ضرب کرده و با هم جمع کنید. همین رهیافت شما را قادر می‌سازد ماتریس‌های مستطیلی را به شرط آنکه تعداد ستون‌های اولی با سطرهای دومی برابر باشد در هم ضرب کنید. به خصوص، اگر مولفه‌های n تایی بردار $|\alpha\rangle$ را به صورت یک ماتریس ستونی $1 \times n$ (یا بردار ستونی) بنویسیم:^۹

$$a \equiv \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \quad [41]$$

قاعده تبدیل (رابطه ۳۳) را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$a' = Ta \quad [42]$$

ترانهاد یک ماتریس (که آنرا با علامت تیلدا به صورت \tilde{T} نشان می‌دهیم) همان مجموعه از مولفه‌هاست با این اختلاف که جای سطرها و ستون‌هایش با هم عوض شده‌اند:

$$\tilde{T} = \begin{pmatrix} T_{11} & \cdots & T_{n1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ T_{1n} & \cdots & T_{nn} \end{pmatrix} \quad [43]$$

توجه داشته باشید که ترانهاد یک ماتریس ستونی یک ماتریس سطری است:

^۹ برای نمایش ماتریس‌های سطری یا ستونی از حروف کوچک سیاه استفاده می‌کنم.

$$\tilde{a} = (a_1 \quad \dots \quad a_n) \quad [44]$$

ماتریس مربعی متقارن است اگر با ترانهاد خود برابر باشد (یعنی بازتاب روی قطر اصلی - مولفه‌های بالای سمت چپ با مولفه‌های پائین سمت راست - ماتریس را بدون تغییر بگذارد)؛ اگر این عمل علامت را تغییر دهد ماتریس را پاد متقارن می‌نامیم:

$$\tilde{T} = T \quad \text{مقارن} : \quad \tilde{T} = -T \quad \text{پاد مقارن} \quad [45]$$

برای ساختن مزدوج (مختلط) یک ماتریس (که آنرا مثل همیشه با علامت آستریک به صورت T^* نمایش می‌دهیم) باید مزدوج مختلط هر مولفه را بدست آورید:

$$T^* = \begin{pmatrix} T_{11}^* & \dots & T_{1n}^* \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ T_{n1}^* & \dots & T_{nn}^* \end{pmatrix} \quad a^* = \begin{pmatrix} a_1^* \\ \vdots \\ a_n^* \end{pmatrix} \quad [46]$$

یک ماتریس حقیقی است اگر تمام مولفه‌های آن حقیقی بوده و موهومی است اگر تمام مولفه‌هایش موهومی باشند:

$$T^* = T \quad \text{حقیقی} \quad T^* = -T \quad \text{موهومی} \quad [47]$$

مزدوج هرمیتی (یا الحاقی) یک ماتریس (که آنرا با علامت دگر به صورت T^\dagger نمایش می‌دهیم) عبارت است از مزدوج ترانهاد آن ماتریس:

$$T^\dagger = \tilde{T}^* = \begin{pmatrix} T_{11}^* & \dots & T_{n1}^* \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ T_{1n}^* & \dots & T_{nn}^* \end{pmatrix} \quad a^\dagger \equiv \tilde{a}^* = (a_1^* \quad \dots \quad a_n^*) \quad [48]$$

یک ماتریس مربعی هرمیتی (یا خود الحاقی) است اگر با مزدوج هرمیتی‌اش برابر باشد؛ اگر مزدوج هرمیتی یک علامت منفی به دنبال بیاورد، ماتریس حاصل هرمیتی بی‌تقارن (یا پاد هرمیتی) است:

$$T^\dagger = T \quad \text{هرمیتی} \quad T^\dagger = -T \quad \text{پاد هرمیتی} \quad [49]$$

با این نمادگذاری حاصلضرب دو بردار (نسبت به یک پایه راست هنجار - رابطه ۲۴.۳) را می‌توان به

$$\langle \alpha | \beta \rangle = \mathbf{a}^\dagger \mathbf{b} \quad [50]$$

توجه داشته باشید سه عملی که در این پاراگراف درباره آنها بحث کردیم، چنانچه دو بار اعمال شوند، ماتریس اولیه را باز می گردانند.

ضرب ماتریسی در حالت کلی، تعویض پذیر نیست ($ST \neq TS$)؛ اختلاف میان دو حالت را جابه جاگر می نامند:^{۱۰}

$$[S, T] \equiv ST - TS \quad [51]$$

ترانهاد یک حاصلضرب برابر است با حاصلضرب ترانهادها به طور معکوس

$$(\bar{ST}) = \bar{T}\bar{S} \quad [52]$$

(مساله ۱۱ را ملاحظه کنید) و همین امر نیز برای مزدوج مختلط روی می دهد

$$(ST)^\dagger = T^\dagger S^\dagger \quad [53]$$

ماتریس یکانی (که نمایشگر تبدیل خطی بوده و می تواند هر برداری را در خود داشته باشد) متشکل است از تعدادی ۱ روی قطر اصلی و صفرهایی در بقیه نقاط:

$$\mathbf{I} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad [54]$$

به عبارت دیگر،

$$I_{ij} = \delta_{ij} \quad [55]$$

وارون یک ماتریس مربعی (که آنرا به شکل T^{-1} می نویسیم) صریحا به شکل زیر تعریف می شود:^{۱۱}

^{۱۰} طبیعا جابه جاگر فقط در مورد ماتریس های مربعی معنی دارد؛ برای ماتریس های مستطیلی دو آرایش حتی هم اندازه هم نیستند.

^{۱۱} دقت کنید که وارون چپ با وارون راست برابر است، چون اگر $\mathbf{AT} = \mathbf{I}$ و $\mathbf{TB} = \mathbf{I}$ باشد در آنصورت (با ضرب دومی در سمت چپ در \mathbf{A} و به کار بردن اولی) می رسیم به $\mathbf{B} = \mathbf{A}$.

$$T^{-1}T = TT^{-1} = I \quad [۵۶]$$

یک ماتریس وارون دارد اگر و تنها اگر دترمینان^{۱۲} آن صفر نباشد؛ در واقع

$$T^{-1} = \frac{1}{\text{دترمینان } T} \bar{C} \quad [۵۷]$$

که در آن C ماتریس هم‌عامل‌ها است (هم عامل مولفه T_{ij} برابر است با $(-1)^{i+j}$ ضربدر دترمینان زیرماتریسی که از روی T و با پاک کردن سطر i ام و ستون j ام بدست می‌آید). ماتریسی که وارون ندارد را ماتریس تکین می‌نامند. وارون یک حاصلضرب (با فرض آنکه وجود داشته باشد) برابر است با حاصلضرب وارون‌ها به طور معکوس:

$$(ST)^{-1} = T^{-1}S^{-1} \quad [۵۸]$$

یک ماتریس یکانی (همانی) است اگر وارونش با مزدوج مختلطش برابر باشد:^{۱۳}

$$U^\dagger = U^{-1} \quad \text{یکانی} \quad [۵۹]$$

با فرض آنکه پایه راست هنجار باشد، ستونها و سطرهاى یک ماتریس یکانی هر کدام یک مجموعه راست هنجار تشکیل می‌دهند (مساله ۱۲ را ببینید). تبدیلات خطی که با ماتریس‌های یکانی نشان داده می‌شوند ضرب‌های برداری را برقرار نگاه می‌دارند، زیرا (رابطه ۵۰)

$$\langle \alpha' | \beta' \rangle = a'^\dagger b' = (Ua)^\dagger (Ub) = a^\dagger U^\dagger U b = a^\dagger b = \langle \alpha | \beta \rangle \quad [۶۰]$$

مساله ۸. * با در نظر گرفتن دو ماتریس

^{۱۲} ایطور فرض می‌کنم که شما می‌دانید چگونه دترمینان یک ماتریس را محاسبه کنید. اگر بلد نیستید، کتاب Boas بخش ۳.۳ را ببینید.

^{۱۳} در فضای برداری حقیقی (یعنی فضایی که در آن اسکالرها حقیقی هستند) مزدوج هرمیتی همان ترانهاد است و یک ماتریس یکانی متعامد است: $\tilde{O} = O^{-1}$. مثلاً، دوران‌ها در فضای سه بعدی معمولی با ماتریس‌های متعامد نشان داده می‌شوند.

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 1 & i \\ 2 & 0 & 3 \\ 2i & -2i & 2 \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -i \\ 0 & 1 & 0 \\ i & 3 & 2 \end{pmatrix}$$

این عبارات را محاسبه کنید (الف) $A + B$ ، (ب) AB ، (پ) $[A, B]$ ، (ت) \tilde{A} ، (ث) A^* ، (ج) A^\dagger ، (چ) $\text{Tr}(B)$ ، (ح) $\det(B)$ ، (خ) B^{-1} . بررسی کنید که آیا رابطه $BB^{-1} = 1$ صحیح است. آیا A وارون دارد؟

مساله ۹.* با استفاده از ماتریس‌های مربعی در مساله ۹.۳ و ماتریس‌های ستونی

$$a = \begin{pmatrix} i \\ 2i \\ 2 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} 2 \\ 1-i \\ 0 \end{pmatrix}$$

این مقادیر را بیابید (الف) Aa ، (ب) $a^\dagger b$ ، (پ) $\tilde{a}Bb$ ، (ت) ab^\dagger

مساله ۱۰. با تشکیل صریح ماتریس‌های این سوال نشان دهید هر ماتریس T را می‌توان به شکلی نوشت که

(الف) حاصلجمع ماتریس S و یک ماتریس پاد متقارن A باشد.

(ب) حاصلجمع یک ماتریس حقیقی R و یک ماتریس موهومی M باشد.

(پ) حاصلجمع یک ماتریس هرمیتی H و یک ماتریس پاد هرمیتی K باشد.

مساله ۱۱. روابط ۵۲، ۵۳ و ۵۸ را ثابت کنید. نشان دهید حاصلضرب دو ماتریس یکانی، یکانی است. تحت چه شرایطی حاصلضرب دو ماتریس هرمیتی، هرمیتی است؟ آیا حاصلجمع دو ماتریس یکانی ماتریسی یکانی است؟ آیا حاصلجمع دو ماتریس هرمیتی ماتریسی هرمیتی است؟

مساله ۱۲. نشان دهید سطرها و ستون‌های یک ماتریس یکانی مجموعه‌ای راست هنجار می‌سازند.

مساله ۱۳. با توجه به این امر که $\det(\bar{T}) = \det(T)$ است، نشان دهید که دترمینان یک ماتریس هرمیتی حقیقی، دترمینان یک ماتریس یکانی دارای مدول 1 (به همین دلیل نامش یکانی است) و دترمینان یک ماتریس راست هنجار یا +1 است یا -1.

تغییر پایه‌ها

مولفه‌های یک بردار مفروض به انتخاب پایه‌های (دلخواه) شما بستگی دارند، همینطور هم مولفه‌های ماتریسی که نمایش دهنده یک تبدیل خطی هستند به این انتخاب وابسته‌اند. این مساله که وقتی به یک پایه دیگر منتقل می‌شویم این اعداد چگونه تغییر می‌کنند می‌تواند مورد سوال باشد. بردارهای پایه قدیمی $|e_i\rangle$ - مانند تمام بردارها - برابرند با ترکیب خطی بردارهای جدید:

$$|e_1\rangle = S_{11}|f_1\rangle + S_{21}|f_2\rangle + \dots + S_{n1}|f_n\rangle$$

$$|e_2\rangle = S_{12}|f_1\rangle + S_{22}|f_2\rangle + \dots + S_{n2}|f_n\rangle$$

...

$$|e_n\rangle = S_{n1}|f_1\rangle + S_{n2}|f_2\rangle + \dots + S_{nn}|f_n\rangle$$

(برای یک مجموعه از اعداد مختلط S_{ij}) یا به شکل فشرده‌تر

$$|e_j\rangle = \sum_{i=1}^n S_{ij}|f_i\rangle \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad [۶۱]$$

این خود یک تبدیل خطی است (با رابطه ۳۰ مقایسه کنید)،^{۱۴} و بلافاصله می‌فهمیم که مولفه‌ها چگونه تبدیل می‌شوند:

$$a_i^f = \sum_{j=1}^n S_{ij} a_j^e \quad [۶۲]$$

(که در آن شاخص‌های پایین نمایانگر پایه هستند). در شکل ماتریسی داریم

$$a^f = S a^e \quad [۶۳]$$

^{۱۴} با این حال به این دیدگاه اساساً متفاوت توجه داشته باشید: در اینحالت از یک بردار صحبت می‌کنیم که به دو پایه مختلف مربوط می‌شود، در حالیکه پیشتر از یک بردار صحبت می‌کردیم که به یک پایه یکسان مربوط بود.

وضع ماتریسی که نمایشگر یک تبدیل خطی مفروض مانند \hat{T} است چه می‌شود - چطور با تغییری در پایه آن هم تغییر می‌کند؟ در پایه قدیمی (رابطه ۴۲) داشتیم

$$a'^e = T^e a^e$$

و رابطه ۶۳ - ضرب دو طرف در S^{-1} - به $a^e = S^{-1} a'^e$ می‌انجامد^{۱۵}، لذا

$$a'^f = S a'^e = S(T^e a^e) = S T^e S^{-1} a^f$$

که آشکارا به این نتیجه منجر می‌شود

$$T^f = S T^e S^{-1} \quad [۶۴]$$

به طور کلی، دو ماتریس $(T_1$ و $T_2)$ را مشابه می‌نامیم اگر به ازای یک ماتریس (غیر تکیه) S داشته باشیم $T_2 = S T_1 S^{-1}$. آنچه در این مرحله بدست آورده‌ایم این است که ماتریس‌هایی که نمایانگر تبدیلات خطی یکسانی نسبت به پایه‌های مختلف می‌باشند، با هم یکسانند. ضمن آنکه اگر پایه اول راست هنجار باشد، دومی هم راست هنجار خواهد بود اگر و تنها اگر ماتریس S یکانی باشد (مساله ۱۶ را ملاحظه کنید). از آنجا که روی پایه‌های راست هنجار کار می‌کنیم، اساسا به سمت تبدیلات متشابه یکانی گرایش داریم.

هرچند مولفه‌های ماتریسی که نمایانگر یک تبدیل خطی مفروض است ممکن است در پایه جدید متفاوت به نظر برسند، دو عدد مرتبط با ماتریس‌ها تغییری نمی‌کنند: دترمینان و رد ماتریس. به آن دلیل که دترمینان یک حاصلضرب برابر است با حاصلضرب دترمینان‌ها، در نتیجه

$$\det(T^f) = \det(S T^e S^{-1}) = \det(S) \det(T^e) \det(S^{-1}) = \det T^e \quad [۶۵]$$

و رد که مجموع مولفه‌های قطری است برابر است با

$$\text{Tr}(T) \equiv \sum_{i=1}^m T_{ii} \quad [۶۶]$$

^{۱۵} دقت کنید که S^{-1} قطعا وجود دارد - اگر S تکیه نباشد، آنگاه $|f_i\rangle$ ها تمام فضا را نمی‌پوشانند، به همین خاطر یک پایه تشکیل نمی‌دهند.

و دارای این ویژگی است که (مساله ۱۷ را ملاحظه کنید)

$$\text{Tr}(\mathbf{T}_1 \mathbf{T}_2) = \text{Tr}(\mathbf{T}_2 \mathbf{T}_1) \quad [۶۷]$$

(برای هر ماتریس \mathbf{T}_1 و \mathbf{T}_2 به طوریکه

$$\text{Tr}(\mathbf{T}^f) = \text{Tr}(\mathbf{S} \mathbf{T}^e \mathbf{S}^{-1}) = \text{Tr}(\mathbf{T}^e \mathbf{S}^{-1} \mathbf{S}) = \text{Tr}(\mathbf{T}^e) \quad [۶۸]$$

مساله ۱۴. با استفاده از پایه‌های استاندارد $(\hat{l}, \hat{f}, \hat{k})$ برای بردارهای سه بعدی:

(الف) ماتریسی درست کنید که نشان دهنده یک چرخش به اندازه زاویه θ (به صورت پاد

ساعتگرد، رو به پایین محور به سوی مبدا) حول محور z باشد.

(ب) ماتریسی تشکیل دهید که نمایشگر چرخشی ۱۲۰° درجه‌ای (پاد ساعتگرد، رو به پایین

محور) حول محوری باشد که از نقطه $(1, 1, 1)$ عبور می‌کند.

(پ) ماتریسی تشکیل دهید که نمایشگر بازتاب از صفحه xy باشد

(ت) آیا انتقال‌های $x \rightarrow x + x_0$ ، $y \rightarrow y + y_0$ و $z \rightarrow z + z_0$ به ازای ثوابت x_0 و y_0 و z_0

تبدیلات خطی محسوب می‌شوند؟ اگر چنین است، ماتریسی را بیابید که نمایشگر آنها باشد؛

اگر اینطور نیست، توضیح دهید چرا؟

مساله ۱۵. در پایه متداول $(\hat{l}, \hat{f}, \hat{k})$ ماتریس \mathbf{T}_x را طوری تشکیل دهید که نمایشگر چرخشی

به اندازه زاویه θ حول محور x باشد. همچنین ماتریس \mathbf{T}_y را هم طوری درست کنید که

نمایشگر چرخشی به همان اندازه حول محور y باشد. اکنون فرض کنید پایه‌ها را به این صورت

تغییر دهیم: $f' = -f$ ، $l' = l$ و $k' = k$. ماتریس \mathbf{S} را طوری تشکیل دهید که این تغییر

پایه را نتیجه دهد (منجر به بوجود آمدن آن شود) و بررسی کنید که آیا $\mathbf{S} \mathbf{T}_x \mathbf{S}^{-1}$ و $\mathbf{S} \mathbf{T}_y \mathbf{S}^{-1}$

همانهایی هستند که انتظار داشتید.

مساله ۱۶. نشان دهید که تشابه ضرب ماتریسی را تغییر نمی‌دهد (یعنی اینکه

اگر $\mathbf{C}^e \mathbf{B}^e = \mathbf{A}^e \mathbf{B}^e = \mathbf{C}^f$ و $\mathbf{A}^f \mathbf{B}^f = \mathbf{C}^f$. تشابه به طور کلی تقارن، حقیقی بودن یا هرمیتی بودن را

هم دست نخورده می‌گذارد؛ با این حال، نشان دهید اگر \mathbf{S} یکانی باشد و \mathbf{H}^e هرمیتی در

آنصورت H^f هم هرمیتی است. نشان دهید S پایه راست هنجاری را به پایه راست هنجار دیگر منتقل می‌کند اگر و تنها اگر یکانی باشد.

مساله ۱۷.* ثابت کنید $\text{Tr}(T_1 T_2) = \text{Tr}(T_2 T_1)$. از اینجا بلافاصله نتیجه می‌شود که $\text{Tr}(T_1 T_2 T_3) = \text{Tr}(T_2 T_3 T_1)$ ، اما آیا به طور کلی این حالتی است که $\text{Tr}(T_1 T_2 T_3) = \text{Tr}(T_2 T_1 T_3)$ ؟ یا آنرا ثابت کنید یا نادرستی آنرا نشان دهید. راهنمایی: بهترین اثبات برای نادرستی همیشه آوردن یک مثال خلف است - و هرچه آن مثال ساده‌تر باشد بهتر است!

ویژه بردارها و ویژه مقادیر

تبدیلی خطی را در فضای سه بعدی در نظر بگیرید که متشکل از چرخشی به اندازه زاویه θ حول یک محور مشخص است. اکثر بردارها به شکلی کاملاً پیچیده [تحت این تبدیل] دچار تغییر می‌شوند (آنها حول راس یک مخروط حرکت می‌کنند) اما بردارهایی که در امتداد همان محور قرار دارند رفتار بسیار ساده‌ای دارند: به هیچ وجه تغییر نمی‌کنند ($T|\alpha\rangle = |\alpha\rangle$). اگر θ برابر با 180° درجه باشد آنگاه علامت بردارهایی که در صفحه استوایی قرار دارند معکوس می‌شود ($T|\alpha\rangle = -|\alpha\rangle$). در یک فضای برداری مختلط،^{۱۶} هر تبدیل خطی بردارهای «ویژه‌ای» مانند این دارد که به مضارب ساده‌ای از خودشان تبدیل می‌شوند:

$$T|\alpha\rangle = \lambda|\alpha\rangle \quad [۶۹]$$

این بردارهای خاص را ویژه بردارهای تبدیل مورد نظر و اعداد (مختلط) λ را هم ویژه مقادیر آنها می‌نامیم. (بردار صفر به حساب نمی‌آید، هرچند به طور معمول برای هر T و λ از رابطه ۶۹ تبعیت می‌کند؛ به بیان فنی، یک ویژه بردار عبارت است از هر بردار غیر صفری که در رابطه ۶۸.۳ صدق کند.) توجه داشته باشید که هر مضرب (غیر صفری) از یک ویژه بردار کماکان ویژه برداری با همان ویژه مقدار است.

^{۱۶} این بیان در یک فضای برداری حقیقی (که در آن اسکالرها مقید به داشتن مقادیر حقیقی هستند) همیشه درست نیست. مساله ۱۸ را ملاحظه کنید.

رابطه ویژه بردار نسبت به یک پایه به خصوص شکل ماتریسی زیر را به خود می‌گیرد

$$Ta = \lambda a \quad [70]$$

(به ازای a غیر صفر)، یا

$$(T - \lambda I)a = 0 \quad [71]$$

(اینجا 0 نماد ماتریس صفر است که تمام مولفه‌هایش صفر هستند). اکنون، اگر ماتریس $(T - \lambda I)$ وارون می‌داشت، می‌توانستیم هر دو طرف رابطه ۷۱ را در $(T - \lambda I)^{-1}$ ضرب کرده و به این نتیجه برسیم که $a = 0$. اما چون فرض کردیم a صفر نیست، پس ماتریس $(T - \lambda I)$ در واقع باید تکسین باشد، به این معنی که دترمینان آن صفر می‌شود:

$$\det(T - \lambda I) = \begin{vmatrix} (T_{11} - \lambda) & T_{12} & \cdots & T_{1n} \\ T_{21} & (T_{22} - \lambda) & \cdots & T_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ T_{n1} & T_{n2} & \cdots & (T_{nn} - \lambda) \end{vmatrix} = 0 \quad [72]$$

بسط این دترمینان به رابطه‌ای جبری برای λ به صورت زیر می‌انجامد:

$$C_n \lambda^n + C_{n-1} \lambda^{n-1} + \cdots + C_1 \lambda + C_0 = 0 \quad [73]$$

که در آن ضرایب C_i به عناصر ماتریس T وابسته‌اند (مساله ۲۰ را ملاحظه کنید). عبارت فوق را معادله مشخصه این ماتریس می‌نامند؛ جواب‌های آن ویژه بردارها را مشخص می‌کنند. دقت داشته باشید که این یک معادله درجه n است بنابراین (از نظریه اساسی جبر) n ریشه (مختلط) دارد.^{۱۷} با این وجود، برخی از اینها ممکن است ریشه‌های چندگانه باشند، پس تمام آنچه با اطمینان می‌توان گفت این است که یک ماتریس $n \times n$ حداقل یک و حداکثر n ویژه مقدار دارد. مجموعه تمام ویژه مقادیر یک ماتریس را طیف آن می‌نامند؛ اگر دو (یا تعداد بیشتری) ویژه بردار مستقل خطی یک ویژه مقدار را به اشتراک بگذارند، طیف حاصل را تبهگن می‌نامیم.

^{۱۷} اینجاست که حالت فضای برداری حقیقی عجیب و غریب‌تر می‌شود زیرا معادله مشخصه به داشتن هیچ جواب

برای درست کردن ویژه بردارها در کل ساده‌ترین راه آن است که هر λ را پشت رابطه ۷۰ قرار داده و «دستی» معادله حاصل را برای مولفه‌های a حل کنیم.

مثال ۱. ویژه مقادیر و ویژه بردارهای ماتریس زیر را بدست آورید:

$$M = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -2 \\ -2i & i & 2i \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad [۷۴]$$

پاسخ. معادله مشخصه عبارت است از

$$\begin{vmatrix} (2-\lambda) & 0 & -2 \\ -2i & (i-\lambda) & 2i \\ 1 & 0 & (-1-\lambda) \end{vmatrix} = -\lambda^3 + (1+i)\lambda^2 - i\lambda = 0 \quad [۷۵]$$

و ریشه‌های آن عبارتند از ۰، ۱ و i . اگر مولفه‌های اولین ویژه بردار را (a_1, a_2, a_3) بنامیم آنگاه

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & -2 \\ -2i & i & 2i \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = 0 \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

که به سه بردار زیر می‌انجامد:

$$-2a_1 - 2a_3 = 0$$

$$-2ia_1 + ia_2 + 2ia_3 = 0$$

$$a_1 - a_3 = 0$$

رابطه اول a_3 را (برحسب a_1) تعیین می‌کند: $a_3 = a_1$ ؛ رابطه دوم a_2 را معلوم می‌کند:

$a_2 = 0$ ؛ و رابطه سوم هم اضافی است. همچنین می‌توانیم بگیریم $a_1 = 1$ (چون هر مضربی

از ویژه بردار کماکان یک ویژه بردار خواهد بود): به ازای $\lambda_1 = 0$ داریم.

$$a^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad [۷۶]$$

برای دومین ویژه بردار (با تغییر و استفاده مجدد از همان نماد گذاری) داریم

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & -2 \\ -2i & i & 2i \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = 1 \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}$$

که به روابط زیر منتهی می‌شود

$$\begin{aligned} 2a_1 - 2a_3 &= a_1 \\ -2ia_1 + ia_2 + 2ia_3 &= a_2 \end{aligned}$$

$$a_1 - a_3 = a_3$$

که می‌دهد $a_3 = (1/2)a_1$ و $a_2 = [(1-i)/2]a_1$ ؛ اینبار می‌گیریم $a_1 = 2$ ، بنابراین به ازای $\lambda_2 = 1$

$$a^{(2)} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1-i \\ 1 \end{pmatrix} \quad [77]$$

در نهایت، برای سومین ویژه بردار داریم

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & -2 \\ -2i & i & 2i \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ia_1 \\ ia_2 \\ ia_3 \end{pmatrix}$$

که این معادلات را می‌دهد

$$\begin{aligned} 2a_1 - 2a_3 &= ia_1 \\ -2ia_1 + ia_2 + 2ia_3 &= ia_2 \end{aligned}$$

$$a_1 - a_3 = ia_3$$

که پاسخ آن عبارت است از $a_1 = a_3 = 0$ و a_2 که نامعین می‌ماند. با انتخاب $a_2 = 1$ به این نتیجه می‌رسیم که

$$a^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad [78]$$

اگر ویژه بردارها تمام فضا را پوشش دهند (همانطور که در مثال قبل اینگونه بودند) مختاریم از آنها به عنوان پایه استفاده کنیم:

$$\hat{T}|f_1\rangle = \lambda_1|f_1\rangle$$

$$\hat{T}|f_2\rangle = \lambda_2|f_2\rangle$$

$$\hat{T}|f_n\rangle = \lambda_n|f_n\rangle$$

در این پایه ماتریس نمایشگر \hat{T} شکل بسیار ساده‌ای به خود می‌گیرد به طوریکه ویژه مقادیر در امتداد قطر اصلی پشت سر هم به ترتیب به صف شده و باقی مولفه‌ها صفر می‌شوند:

$$T = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix} \quad [۷۹]$$

ویژه بردارهای بهنجار هم به یک اندازه ساده‌اند:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \cdots \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \quad [۸۰]$$

ماتریسی که می‌توان آنرا به شکل قطری درآورد (رابطه ۷۹) را قطری شونده می‌نامند (اینطور که پیداست یک ماتریس قطری شونده است اگر و تنها اگر ویژه بردارهای آن فضا را پوشش دهد). می‌توان با استفاده از ویژه بردارها (در پایه قدیمی) ماتریس تشابهی که این تبدیل را محقق می‌سازد را به صورت ماتریس ستونی S^{-1} نوشت:

$$(S^{-1})_{ij} = (a^{(j)})_i \quad [۸۱]$$

مثال ۲. در این مثال

$$S^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 0 & (1-i) & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

لذا (با استفاده از رابطه ۵۷)

$$S = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & -1 \\ (i-1) & 1 & (1-i) \end{pmatrix}$$

و خودتان می‌توانید بررسی کنید که

$$\mathbf{sa}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{sa}^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{sa}^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{SMS}^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & i \end{pmatrix}$$

نمایش یک ماتریس به شکل قطری مزیت بسیار آشکاری دارد: کار کردن با آن خیلی آسان‌تر است. متأسفانه، همه ماتریس‌ها را نمی‌توان قطری کرد - ویژه بردارها باید فضا را احاطه کنند. اگر معادله مشخصه n ریشه جدا از هم داشته باشد، در آن صورت ماتریس بی‌تردید قطری شونده است، اما این احتمال هم هست که با وجود داشتن ریشه‌های چندگانه باز هم قطری شونده باشد. (به عنوان مثالی از یک ماتریس که نمی‌توان آنرا قطری کرد مساله ۱۹ را ملاحظه کنید.) اینکه از پیش (قبل از بدست آوردن ویژه بردارها) بدانیم که آیا یک ماتریس مشخص قطری می‌شود یا نه موجب صرفه جویی در وقت است. یک حالت سودمند واجد شرایط (هرچند نه ضروری) از این قرار است: ماتریسی را نرمال می‌نامیم که با مزدوج هرمیتی خودش جابجا شود:

$$[N^\dagger, N] = 0 \quad [۸۲]$$

هر ماتریس نرمال قطری شونده است (ویژه بردارهایش فضا را می‌پوشانند). به ویژه، هر ماتریس هرمیتی و هر ماتریس یکانی هم قطری شونده هستند.

فرض کنید دو ماتریس قطری شونده در اختیار داریم؛ در کاربردهای کوانتومی اغلب این سوال پیش می‌آید که: آیا می‌توان آنها را به طور همزمان قطری کرد (با همان ماتریس تشابه S)؟ به عبارت دیگر، آیا پایه‌ای وجود دارد که در آن هر دوی آنها قطری باشند؟ پاسخ بلی است اگر و تنها اگر آن دو ماتریس با هم جابجا شوند (مساله ۲۲ را ملاحظه کنید).

مساله ۱۸. * ماتریس 2×2 نمایشگر چرخش صفحه xy عبارت است از

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$

نشان دهید (به استثنای بعضی زوایای مشخص - آنها چه زوایایی هستند؟) این ماتریس هیچ ویژه بردار حقیقی ندارد. (این بازتاب واقعیتی هندسی است که می‌گویید هیچ برداری در این صفحه تحت چنین چرخشی خودش را به خودش منتقل نمی‌کند؛ چرخش‌های پادما در سه بعد.) با این حال این ماتریس ویژه بردارها و ویژه مقادیر مختلط دارد. آنها را بیابید. ماتریس S که T را قطری می‌کند را تشکیل دهید. تبدیل تشابه SMS^{-1} را صراحتاً اجرا کرده و نشان دهید که T را به شکل قطری ساده می‌کند.

مساله ۱۹. ویژه مقادیر و ویژه بردارهای ماتریس زیر بدست آورید

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

آیا می‌توانید این ماتریس را قطری کنید؟

مساله ۲۰. نشان دهید اولین، دومین و آخرین ضرایب در معادله مشخصه (رابطه ۷۲.۳) عبارتند از

$$C_n = (-1)^n, \quad C_{n-1} = (-1)^n \text{Tr}(T), \quad C_0 = \det(T) \quad [۸۴]$$

برای یک ماتریس 3×3 با مولفه‌های T_{ij} مقدار C_1 چیست؟

مساله ۲۱. به وضوح آشکار است که رد یک ماتریس قطری حاصلجمع ویژه مقادیر بوده و درمیان آن حاصلضرب آنهاست (رابطه ۷۹ را ببینید). از روابط ۶۵ و ۶۸ نتیجه می‌شود که همین نکته برای هر ماتریس قطری شونده‌ای برقرار است. ثابت کنید برای هر ماتریسی داریم

$$\text{Tr}(T) = \lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_n \quad \det(T) = \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n \quad [۸۵]$$

(λ) ها n جواب معادله مشخصه هستند - در حالت ریشه‌های چند گانه ممکن است ویژه بردارهای مستقل خطی کمتری نسبت به جواب‌ها وجود داشته باشد اما هنوز هر λ را به هر تعداد که نمایان می‌شود به حساب می‌آوریم.) راهنمایی: معادله مشخصه را به این شکل

بنویسید

$$(\lambda_1 - \lambda)(\lambda_2 - \lambda) \dots (\lambda_n - \lambda) = 0$$

و از نتیجه مساله ۲۰ استفاده کنید.

مساله ۲۲.

(الف) نشان دهید اگر دو ماتریس در یک پایه جابجا شوند، در آنصورت در هر پایه دیگری هم جابجا می‌شوند. به عبارت دیگر:

$$[T_1^e, T_2^e] = 0 \Rightarrow [T_1^f, T_2^f] = 0 \quad [۸۶]$$

راهنمایی: از رابطه ۶۴ استفاده کنید.

(ب) نشان دهید چنانچه دو ماتریس به طور همزمان قطری شوند باشند، با هم جابجا می‌شوند.^{۱۸}

مساله ۲۳. ماتریس زیر را در نظر بگیرید

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & i \end{pmatrix}$$

(الف) آیا نرمال است؟

(ب) آیا قطری شونده است؟

تبدیلات هرمیتی

در رابطه ۴۸ مزدوج (یا «الحاقی») هرمیتی یک ماتریس را به صورت مزدوج ترانهاد آن تعریف کردیم: $T^\dagger = \tilde{T}^*$. اکنون می‌خواهم تعریف اساسی‌تری از مزدوج هرمیتی یک تبدیل خطی ارائه دهم: مزدوج هرمیتی یک تبدیل خطی تبدیلی با نماد \hat{T}^\dagger است که وقتی به اولین عضو یک ضرب داخلی اعمال شود همان نتیجه‌ای را بدست می‌دهد که اگر خود \hat{T} به دومین بردار اعمال شده بود، حاصل می‌شد:

$$\langle \hat{T}^\dagger \alpha | \beta \rangle = \langle \alpha | \hat{T} \beta \rangle \quad [۸۷]$$

^{۱۸} اثبات وارون این بیان (که اگر دو ماتریس قطری شونده با هم جابجا شوند در آنصورت به طور همزمان قطری شونده هستند) چندان ساده نیست. برای مثال کتاب *Quantum Mechanics* نوشته Eugen Merzbacher ویرایش سوم، انتشارات Wiley، نیویورک (۱۹۹۸)، بخش ۳.۱ را ببینید.

(برای تمام بردارهای $|\alpha\rangle$ و $|\beta\rangle$).^{۱۹} ناگزیرم به شما یادآور شوم که اگرچه همه از آن استفاده می‌کنند، اما رابطه فوق نمادگذاری خیلی بدی است. چون α و β بردار نیستند (بردارها $|\alpha\rangle$ و $|\beta\rangle$ هستند)، آنها را اسامی می‌دانیم. به خصوص، هیچ ویژگی ریاضی را به آنها نسبت نمی‌دهیم و از این رو عبارت « $\hat{T}\beta$ » واقعا بی معنی است: تبدیلات خطی روی بردارها عمل می‌کنند نه روی برچسب‌ها. اما به وضوح روشن است که این نمادگذاری چه معنایی دارد: $\hat{T}\beta$ نام بردار $\hat{T}|\beta\rangle$ است و $\langle\hat{T}^+\alpha|\beta\rangle$ ضرب داخلی بردار $|\hat{T}^+\alpha\rangle$ در بردار $|\beta\rangle$. به ویژه توجه داشته باشید که

$$\langle\alpha|c\beta\rangle = c\langle\alpha|\beta\rangle \quad [۸۸]$$

درحالیکه برای هر اسکالر c داریم

$$\langle c\alpha|\beta\rangle = c^*\langle\alpha|\beta\rangle \quad [۸۹]$$

اگر روی یک پایه راست هنجار کار می‌کنید (همانطور که همیشه اینطور بوده‌ایم)، مزدوج هرمیتی یک تبدیل خطی را با مزدوج هرمیتی ماتریس مانسته آن نشان می‌دهیم؛ چون (با استفاده از روابط ۵۰ و ۵۳) داریم

$$\langle\alpha|\hat{T}\beta\rangle = a^\dagger T b = (T^\dagger a)^\dagger b = \langle\hat{T}^+\alpha|\beta\rangle \quad [۹۰]$$

از اینرو واژه انتخاب شده مناسب است و می‌توانیم به صورت پایاپای یا به زبان تبدیلات و یا به زبان ماتریس‌ها صحبت کنیم.

در مکانیک کوانتومی، تبدیلات هرمیتی ($\hat{T}^\dagger = \hat{T}$) نقشی اساسی ایفا می‌کنند. ویژه بردارها و ویژه مقادیر یک تبدیل هرمیتی سه ویژگی بسیار مهم دارند:

۱. ویژه مقادیر یک تبدیل هرمیتی حقیقی هستند.

^{۱۹} احتمالا جوابی آن هستید که بدانید آیا چنین تبدیلی واقعا وجود دارد. سوال خوبی است! جواب آن مثبت است. برای نمونه، کتاب *Finite Dimensional Vector Spaces* نوشته P. R. Halmos ویرایش دوم، انتشارات van Nostrand پرنستون، بخش ۴۴ را ملاحظه کنید.

اثبات: فرض کنید λ ویژه مقدار \hat{T} باشد: به شرط آنکه $|\alpha\rangle \neq |0\rangle$ داریم $\hat{T}|\alpha\rangle = \lambda|\alpha\rangle$.

بنابراین

$$\langle\alpha|\hat{T}\alpha\rangle = \langle\alpha|\lambda\alpha\rangle = \lambda\langle\alpha|\alpha\rangle$$

در این بین، اگر \hat{T} هرمیتی باشد در آنصورت

$$\langle\alpha|\hat{T}\alpha\rangle = \langle\hat{T}\alpha|\alpha\rangle = \langle\lambda\alpha|\alpha\rangle = \lambda^*\langle\alpha|\alpha\rangle$$

اما چون $\langle\alpha|\alpha\rangle \neq 0$ است (رابطه ۲۰) پس $\lambda = \lambda^*$ بوده و در نتیجه λ حقیقی است. که می‌باید اثبات می‌شد.

۲. ویژه بردارهای یک تبدیل هرمیتی متعلق به ویژه مقادیر متفاوت راست هنجارند.

اثبات: فرض کنید $\langle\alpha|\alpha\rangle = \lambda|\alpha\rangle$ و $\langle\beta|\beta\rangle = \mu|\beta\rangle$ باشد با این شرط که $\lambda \neq \mu$. در اینصورت

$$\langle\alpha|\hat{T}\beta\rangle = \langle\alpha|\mu\beta\rangle = \mu\langle\alpha|\beta\rangle$$

و اگر \hat{T} هرمیتی باشد

$$\langle\alpha|\hat{T}\beta\rangle = \langle\hat{T}\alpha|\beta\rangle = \langle\lambda\alpha|\beta\rangle = \lambda^*\langle\alpha|\beta\rangle$$

اما $\lambda = \lambda^*$ (از ویژگی ۱) و $\lambda \neq \mu$ که فرض اول بود، بنابراین $\langle\alpha|\beta\rangle = 0$. که می‌باید اثبات می‌شد.

۳. ویژه بردارهای یک تبدیل هرمیتی فضا را احاطه می‌کنند.

همانطور که دیدیم، این بیان معادل است با این عبارت که می‌توان هر ماتریس هرمیتی را قطری کرد (رابطه ۸۲ را ملاحظه کنید). این نکته فنی‌تر، به یک مفهوم، حمایت ریاضی روی آنچیزی است که نقطه اتکای مکانیک کوانتومی محسوب می‌شود. ظاهراً بسیار ضعیف‌تر از آنی است که احتمالاً بشود به آن امید داشت، زیرا اثبات روی فضاهای برداری با ابعاد نامتناهی به انجام نمی‌رسد.

مساله ۲۴. یک تبدیل خطی هرمیتی باید به ازای تمام بردارهای $|\alpha\rangle$ و $|\beta\rangle$ در رابطه

$$\langle\alpha|\hat{T}\beta\rangle = \langle\hat{T}\alpha|\beta\rangle$$
 صدق کند. ثابت کنید (به شکلی شگفت‌آور) کافی است به ازای تمام

بردارهای $|\gamma\rangle$ داشته باشیم $\langle\gamma|\hat{T}\gamma\rangle = \langle\gamma|\gamma\rangle$. راهنمایی: اول قرار دهید

$$|\gamma\rangle = |\alpha\rangle + |\beta\rangle$$

مساله ۲۵. * ماتریس زیر را در نظر بگیرید

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 1-i \\ 1+i & 0 \end{pmatrix}$$

(الف) تحقیق کنید که آیا T هرمیتی است؟

(ب) ویژه مقادیر آنرا بدست آورید (توجه کنید که ویژه مقادیر حقیقی هستند).

(پ) ویژه بردارها را یافته و آنها را بهنجار کنید (توجه کنید که ویژه بردارها راست هنجار هستند).

(ت) ماتریس یکانی قطری کننده S را تشکیل داده و صراحتاً بررسی کنید که ماتریس حاصل T را قطری می‌کند.

(ث) بررسی کنید همانطور که $\det(T)$ و $\text{Tr}(T)$ برای T یکی هستند، برای شکل قطری شده T هم یکی هستند.

مساله ۲۶. ** ماتریس هرمیتی زیر را در نظر بگیرید:

$$T = \begin{pmatrix} 2 & i & 1 \\ -i & 2 & i \\ 1 & -i & 2 \end{pmatrix}$$

(الف) $\det(T)$ و $\text{Tr}(T)$ را محاسبه کنید.

(ب) ویژه مقادیر T را بدست آورید. بررسی کنید که آیا حاصلجمع و حاصلضرب آنها به مفهوم رابطه ۸۵ با قسمت (الف) سازگار است. نسخه قطری شده T را بنویسید.

(پ) ویژه بردارهای T را بدست آورید. داخل بخش تبه‌گن، دو ویژه بردار مستقل خطی بسازید (این مرحله است که همواره برای یک ماتریس هرمیتی امکان‌پذیر است اما نه برای هر ماتریس دلخواهی - متضاد مساله ۱۹). آنها را متعامد کرده و بررسی کنید که آیا هر دو نسبت به سومی متعامد هستند. هر سه ویژه بردار را بهنجار کنید.

(ت) ماتریس یکانی S که T را قطری می‌کند را تشکیل دهید و صراحتاً نشان دهید که تبدیل تشابه با استفاده از S ماتریس T را به شکل قطری مناسب تبدیل می‌کند.

مساله ۲۷. یک تبدیل یکانی تبدیلی است که برای آن داشته باشیم $\hat{U}^\dagger \hat{U} = 1$.

(الف) نشان دهید تبدیلات خطی ضرب داخلی را تغییر نمی‌دهند، به این مفهوم که به ازای

$$\langle \hat{U}\alpha | \hat{U}\beta \rangle = \langle \alpha | \beta \rangle \text{ داریم}$$

(ب) نشان دهید ویژه مقادیر یک تبدیل یکانی مدول ۱ دارند.

(پ) نشان دهید ویژه بردارهای یک تبدیل یکانی متعلق به ویژه مقادیر متمایز، متعامد هستند.

مساله ۲۸.*** توابع ماتریسی با بسط‌های سری تیلور شان تعریف می‌شوند؛ مثلاً

$$e^M = I + M + \frac{1}{2}M^2 + \frac{1}{3!}M^3 + \dots \quad [91]$$

(الف) عبارت $\exp(M)$ را با این شرط بدست آورید که

$$(i): M = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 4 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} ; \quad (ii): M = \begin{pmatrix} 0 & \theta \\ -\theta & 0 \end{pmatrix}$$

(ب) نشان دهید اگر M قطری شونده باشد، آنگاه

$$\det(e^M) = e^{\text{Tr}(M)} \quad [92]$$

توضیح: در حقیقت این رابطه حتی اگر M قطری شونده هم نباشد باز درست است، اما اثبات آن در حالت کلی دشوارتر است.

(پ) نشان دهید چنانچه ماتریس‌های M و N جابجا شوند، در آن صورت

$$e^{M+N} = e^M e^N \quad [93]$$

ثابت کنید (با ساده‌ترین مثال خلفی که می‌توانید در نظر بگیرید) که رابطه ۹۳ به طور کلی برای ماتریس‌هایی که جابجا نمی‌شوند درست نیست.

(ت) اگر H هرمیتی باشد، نشان دهید e^H یکانی است.

واژه‌نامه فارسی به انگلیسی

الف

Baryon	باریون	Quantum Indeterminacy	ابهام کوانتومی
Paradox	باطل نما، پارادوکس	Stark Effect	اثر اشتراک
Bra	برا	Paschen-Back Effect	اثر پاشن - بک
Wave Vector	بردار موج	Quantum Zeno Effect	اثر زنوی کوانتومی
Van der Waals Interaction	برهم کنش وان در والس	Zeeman Effect	اثر زیمان
Angular Frequency	بسامد زاویه‌ای	(Probability (Theory	احتمال (نظریه)
Wave Packet	بسته موج	Orbital	اربیتال
Gaussian Wave Packet	بسته موج گاوسی	Spin Up	اسپین بالا
Boson	بوزون	Spin Down	اسپین پایین
Normalized	بهنجار (تابع)	Spinor	اسپینور
Normalizable	بهنجار شدنی، قابل بهنجارش	Quantum Statics	استاتیک کوانتومی
Normalization	بهنجارش	Screen	استتار کردن
		Priori Reason	استدلال از علت به معلول
		Equator	استوا
		Pauli Exclusion Principle	اصل طرد پائولی
Anti Hermitian	پاد هرمیتی	Uncertainty Principle	اصل عدم قطعیت
Impact Parameter	پارامتر برخورد	Postulate	اصل موضوعه
Conservation of Energy	پایستگی انرژی	Variational Principle	اصل وردش
Conservation of Angular Momentum	پایستگی تکانه زاویه‌ای	Good Quantum Number	اعداد کوانتومی خوب
Chemical Potential	پتانسیل شیمیایی	Adjoint	الحاقی (مزدوج هرمیتی)
Effective Potential	پتانسیل موثر	Standing Waves	امواج ایستا
Yukawa Potential	پتانسیل یوکاوا	Propagating Waves	امواج منتشر شونده
Distributive	پخش پذیر	Propagator	انتشارگر
Spread	پخش شدگی، پهن شدگی	Lamb Shift	انتقال لمب
Watched Pot Phenomenon	پدیده دیگ پاییده شده	Square Integrable	انتگرال پذیر مجذوری
Quantum Jumps	پرش‌های کوانتومی	Exchange Integral	انتگرال تبادلی
Positronium	پوزیترونیم	Direct Integral	انتگرال مستقیم
Shell	پوسته	Overlap Integral	انتگرال همپوش
Envelope	پوش	Associative	انجمنی (خاصیت)
Span	پوشش دادن، پوشانیدن، فراگرفتن	Standard Deviation	انحراف معیار استاندارد
Configuration	پیکربندی	Measurement	اندازه‌گیری
Covalent Bond	پیوند کووالانسی	Sequential Measurement	اندازه‌گیری‌های پی در پی
Test Function	تابع آزمون	Binding Energy	انرژی بستگی
Spherical Bessel Function	تابع بسل کروی	Fermi Energy	انرژی فرمی
Step Function	تابع پله‌ای	Allowed Energy	انرژی مجاز
Riemann Zeta Function	تابع زتای ریمان	Stern-Gerlach Experiment	آزمایش اشترن - گرلاخ
Dirac Delta Function	تابع دلتای دیراک	Foucault Pendulum	آنگ فوکو
Even Function	تابع زوج	Transition Rate	آهنگ گذار
Error Function	تابع خطا		

Infinite Spherical Well	چاه کروی نامتناهی	Associated Legendre Function	تابع لژاندر وابسته
Bose Condensation	چگالش بوز	Wave Function	تابع موج
Probability Density	چگالی احتمال	Spherical Neumann Function	تابع نویمان کروی
Rigid Rotor	چرخنده صلب	Gauge Transformation	تبدیل پیمانه‌ای
Legendre Polynomials	چند جمله‌ای‌های لژاندر	Linear Transformation	تبدیل خطی
Hermit's polynomials	چند جمله‌ای‌های هرمیت	Fourier Transform	تبدیل فوریه
Sum of Reciprocal Powers	حاصلجمع توان‌های وارون	Inverse Fourier Transform	تبدیل فوریه معکوس
Excited State	حالت برانگیخته	Degenerate	تبهگن
Ground State	حالت پایه	Spectral Decomposition	تجزیه طیفی
Scattering State	حالت پراکنده	Partial Wave Analysis	تحلیل موج پاره‌ای
Singlet State	حالت تک‌تایی (یا تک‌تاییه)	Linear Combination	ترکیب خطی
Stationary State	حالت مانا	Triplet Combination	ترکیب سه تایی یا سه تاییه
Determinate State	حالت معین	Nuclear Magnetic Resonance	تشدید مغناطیسی هسته‌ای
Bound State	حالت مقید	First-Order Correction	تصحیح مرتبه اول
Entangled States	حالت‌های درهم‌تافته	Relativistic Correction	تصحیح نسبیتی
Metastable States	حالت‌های مانای بینایی	Schrodinger Picture	تصویر شرودینگر
Coherent States	حالت‌های همدوس	Heisenberg Picture	تصویر هایزنبرگ
Chandrasekhar Limit	حد چاندراشکار	Orthogonality	تعامد
Thomas Precession	حرکت تقدیمی توماس	Commutative	تعویض‌پذیر
Larmor Precession	حرکت تقدیمی لارمور	Separation of Variables	تفکیک متغیرها (روش)
Cyclotron Motion	حرکت سیکلوترونی	Stirling's Approximation	تقریب استرلینگ
Suburb	حومه	Impulse Approximation	تقریب تکان
Coincident Spectral Lines	خطوط طیفی انطباقی	Rotating Wave Approximation	تقریب موجی چرخان

د ذ

Scattering Amplitude	دامنه پراکندگی	Statistical Interpretation	تعبیر آماری
Slater Determinant	دترمینان اسلاتر	Generalized Statistical Interpretation	تعبیر آماری تعمیم یافته
Kronecker Delta	دلتای کرونگر	Copenhagen Interpretation	تعبیر کپنهاگی
Fermi Temperature	دمای فرمی	Generalized Distribution	توزیع (تابع) تعمیم یافته
Deuterium	دوتریوم	Normal Distribution	توزیع نرمال
Orthodox Position	دیدگاه متعارف	Tunneling	تونل زنی
Agnostic Position	دیدگاه نمی‌دانم، مذهب لادری	Plank Constant	ثابت پلانک
Realist Position	دیدگاه واقع‌گرا	Separation Constant	ثابت تفکیک
Quantum Dynamics	دینامیک کوانتومی	Rydberg Constant	ثابت ریدبرگ

ج چ ح خ

Pasternack Relation	رابطه پاسترناک	Commutator	جابجاکر
Dispersion Relation	رابطه پاشندگی	Localized	جایگزیده
Canonical Commutation Relation	رابطه جابجایی کانونیک	Linear Algebra	جبر خطی
Rodriguez Formula	رابطه رودریگز	Periodic Table	جدول تناوبی
de Broglie Formula	رابطه دوبروی	Reduced Mass	جرم کاهشیده
Kramer's Relation	رابطه کرامرز	Probability Current	جریان احتمال
Eigenvalue Equation	رابطه ویژه مقداری	Spin-Orbit Coupling	جفت‌شدگی اسپین - مدار
Orthonormal	رابطه ortonormal	Darwin Term	جمله داروین
			جمله شعاعی

Occupation Number	عدد اشغال	Dirac Orthonormality	راست هنجاری دیراک
Principal Quantum Number	عدد کوانتومی اصلی	Conductor	رسانا
Operator	عملگر	Canonical Commutation Relations	روابط جابجایی کانونیک
Raising Operator	عملگر بالا برنده (افزاینده)	Wag the Dog Method	روش دم جنباندن
Lowering Operator	عملگر پایین آورنده (کاهنده)	Frobenius Method	روش فروبنیوس
Projection Operator	عملگر تصویرگر	Gram-Schmidt Orthogonalization Procedure	روش متعامدسازی گرام - اشمیت
Ladder Operator	عملگر نردبانی	Ripple	ریز موج، موجک
Idempotent	عملگر همانی	Scattering Angle	زاویه پراکندگی

Orthogonal	عمود		
------------	------	--	--

Vertex Factors	عوامل راسی		س ش
----------------	------------	--	------------

Adiabatic Process	فرایند بی دررو	Fine Structure	ساختار ریز
-------------------	----------------	----------------	------------

Natural Frequency	فرکانس طبیعی	Hyperfine Structure	ساختار فوق ریز
-------------------	--------------	---------------------	----------------

Driving Frequency	فرکانس عامل	Nonholonomic Systems	سامانه‌های غیر هولونوم
-------------------	-------------	----------------------	------------------------

Rabi Flopping Frequency	فرکانس واگردانی رابی	Neutron Star	ستاره نوترونی
-------------------------	----------------------	--------------	---------------

Euler's Formula	فرمول اولر	Phase Velocity	سرعت فاز
-----------------	------------	----------------	----------

Recursion Formula	فرمول بازگشتی	Group Velocity	سرعت گروه
-------------------	---------------	----------------	-----------

Rodrigues Formula	فرمول رودریگز	Balmer Series	سری بالمر
-------------------	---------------	---------------	-----------

Connection Formulas	فرمول‌های هموستار	Paschen Series	سری پاشن
---------------------	-------------------	----------------	----------

Fermion	فرمیون	Power Series	سری توانی
---------	--------	--------------	-----------

Collapse	فروافت، رمبش	Taylor Series	سری تیلور
----------	--------------	---------------	-----------

Muon Catalysis	فروکافت موئونی	Fourier Series	سری فوریه
----------------	----------------	----------------	-----------

Degeneracy Pressure	فشار واکنی	Lyman Series	سری لیمان
---------------------	------------	--------------	-----------

Momentum Space	فضای تکانه	Fermi Surface	سطح فرمی
----------------	------------	---------------	----------

Inner Product Space	فضای ضرب داخلی	Landau Levels	سطوح لاندائو
---------------------	----------------	---------------	--------------

Position Space	فضای مکان	Buffon's Needle	سوزن بافون
----------------	-----------	-----------------	------------

Vector Space	فضای برداری	Dummy Index	شاخص بدل
--------------	-------------	-------------	----------

Hilbert Space	فضای هیلبرت	Dirac's Comb	شانه دیراک
---------------	-------------	--------------	------------

Rigged Hilbert Space	فضای هیلبرت مهیا	Boundary Conditions	شرایط مرزی
----------------------	------------------	---------------------	------------

Selection Rule	قاعده گزینش	Symmetrization Requirement	شرط متقارن سازی
----------------	-------------	----------------------------	-----------------

Wien Displacement Law	قانون جابجایی وین	Luminosity	شیدزایی
-----------------------	-------------------	------------	---------

Ehrenfest's Theorem	قضیه اهرنفتست		
---------------------	---------------	--	--

Bloch's Theorem	قضیه بلوخ		ص ض ط ظ
-----------------	-----------	--	----------------

Plancherel's Theorem	قضیه پلانشرل	Clebsch-Gordon Coefficients	ضرایب کلیش-گوردون
----------------------	--------------	-----------------------------	-------------------

No-Clone Theorem	قضیه تکثیرناپذیری	Reflection Coefficient	ضریب بازتاب
------------------	-------------------	------------------------	-------------

Dirichlet's Theorem	قضیه دیریکله	Binomial Coefficient	ضریب دو جمله‌ای
---------------------	--------------	----------------------	-----------------

Feynman-Hellmann Theorem	قضیه فاینمن - هلمن	Transmission Coefficient	ضریب عبور
--------------------------	--------------------	--------------------------	-----------

Virial Theorem	قضیه ویرال	Density Plots	طرح‌های چگالی
----------------	------------	---------------	---------------

Equipartition Theorem	قضیه همپاری	Continuous Spectrum	طیف پیوسته
-----------------------	-------------	---------------------	------------

Hund's Rules	قواعد هوند	Black Body Spectrum	طیف جسم سیاه
--------------	------------	---------------------	--------------

		Discrete Spectrum	طیف گسسته
--	--	-------------------	-----------

	ک گ		
--	------------	--	--

Completeness	کامل بودن		ع غ ف ق
--------------	-----------	--	----------------

Ket	کت	Shielding Factor	عامل حفاظ
-----	----	------------------	-----------

Spooky Action at a Distance	کنش از راه دور اسرار آمیز	Landed g-Factor	عامل g لاده
-----------------------------	---------------------------	-----------------	-------------

Generator of Rotations	مولد چرخش‌ها	Quark	کوارک
Muonium	موئونیم	White Dwarf	کوتوله سفید
Average, Mean	میانگین (نظریه احتمال)	Gap	گاف
Median	میانه (نظریه احتمال)	Run	گام (عملگر نردبانی)
Laplacian	لاپلاسی (عملگر)	Top Run	گام فرازین (بیشینه)
Fourier's Trick	لم فوریه	Transition	گذار
		Node	گره
	ن و	Stimulated Emission	گسیل القایی
Insulator	نارسانا	Spontaneous Emission	گسیل خودبخودی
Schwarz Inequality	نامساوی شوارتز	Magnetic Dipole Moment	گشتاور دو قطبی مغناطیسی
Gauge Invariant	ناوردایی پیمانه‌ای	Anomalous Magnetic Momentum	گشتاور مغناطیسی ناهنجار
Norm	نرم، هنجار		
Gyromagnetic Ratio	نسبت زیرومغناطیسی		ل م
Perturbation Theory	نظریه اختلال	Pauli Spin Matrices	ماتریس‌های اسپین پائولی
Group Theory	نظریه گروه	Orthogonal	متعامد (توابع)
Turning Points	نقاط بازگشتی	Hidden variable	متغیر پنهان
Quantum Dots	نقاط کوانتومی	Bulk Modulus	مدول کپهای
Spike	نقطه تیز، برآمدگی بلند، قله	Complex Conjugation	مزدوج مختلط
Turning Point	نقطه عطف	Hermitian Conjugate	مزدوج هرمیتی (الحاقی)
Levi-Civita Symbol	نماد لوی - چی ویتا	Meson	مزون
Band	نوار	Ensemble	مجموعه آماری
Simple Harmonic Oscillator	نوسانگر هماهنگ ساده	Most Probable	محتمل‌ترین
Neutrino Oscillations	نوسانهای نوترینو	Spherical Coordinates	مختصات کروی
Brute Force	نیروی بی‌تمايز	Modulate	مدوله شدن، پیمانه‌بندی شدن
Exchange Force	نیروی تبدالی	Decay Modes	مدهای واپاشی
Half Life	نیمه عمر	Observable	مشاهده‌پذیر
Decoherence	وادوسی	Incompatible Observables	مشاهده‌پذیرهای ناسازگار
Variance	واریانس، پراکندگی	Lagrange Multipliers	مضارب لاگرانژ
Eigenfunction	ویژه تابع	Airy's Equation	معادله آیری
Eigenstate	ویژه حالت	Continuum Equation	معادله پیوستگی
Eigenvalue	ویژه مقدار		معادله شرودینگر
	ه ی	Schrodinger Equation	مستقل از زمان
Hamiltonian	هامیلتونی	Time-dependent	وابسته به زمان
Hermitian	هرمیتی (عملگرها)	Time-independent	
Skew Hermitian	هرمیتی بی‌تقارن	Radial Equation	معادله شعاعی
Orthohelium	هلیوم ارتو	Expectation value	مقدار چشمداشتی، مقدار انتظاری
Parahelium	هلیوم پارا	Differential Cross-Section	مقطع برخورد دیفرانسیلی
Cofactors	هم‌عامل‌ها	Super-Symmetric Quantum Mechanics	مکانیک کوانتومی ابرتقارنی
(quod erat demonstrandum) (QED)	همانطور که باید ثابت می‌شد	Bohr's Magnetron	مگنتون بور
Spherical Harmonics	هماهنگ‌های کروی	Reflected Wave	موج بازتابیده
Patching	همبند کننده	Transmitted Wave	موج عبوری
Muonic Hydrogen	هیدروژن موونی	Incident Wave	موج فروودی
		Generator of Translations in Time	مولد انتقال‌های زمانی
		Generator of Translations in Space	مولد انتقال‌های فضایی

نمایه موضوعی

- ابر رسانا ۵۳۲
اتم نامتعارف ۳۹۸
اتم هیدروژن ۲۱۴-۲۲۹
انرژی بستگی ~ ۲۲۲
انرژی‌های مجاز ~ ۲۱۴
تابع موج شعاعی ~ ۲۱۵-۲۲۹
توابع موج ~ ۲۲۴-۲۲۶
حالت پایه ~ ۲۲۴
ساختار ریز ~ ۳۷۲-۳۸۶
ساختار فوق ریز ~ ۳۹۵-۳۹۸
شعاع ~ ۲۲۴
طیف ~ ۲۳۰-۲۳۲
اتم هیدروژنی ۲۳۲
اثر
- ~ اشتراک ۴۰۳-۴۶۶
~ آهارانوف-بوهم ۵۲۹-۵۳۷
~ پاشن-باخ ۳۸۹
~ رامسائر-تاوژند ۱۲۸
~ زنوی کوانتومی ۵۹۴-۵۹۸
~ زیمان ۳۸۶-۳۹۵
~ میدان ضعیف ۳۸۷-۳۸۹
~ میدان قوی ۳۸۹-۳۹۱
~ میدان متوسط ۳۹۲-۳۹۵
اثر فرانوری ۵۸۸
احتمال ۲۶-۳۵
~ بازتاب ۱۱۸-۱۱۹
پایستگی ~ ۴۸، ۲۷۲
جریان ~ ۴۷، ۱۰۶، ۲۷۲
~ عبور ۱۱۸
~ گذار ۴۷۸-۴۸۱
~ متغیرهای پیوسته ۲۶-۳۱
~ متغیرهای گسسته ۳۱-۳۵
- اختلال سینوسی ۴۷۷-۴۸۱
اختلال ناهمدوس ۴۸۵-۴۸۹
اربیتال ۳۰۴
اسپین ۲۴۶-۲۷۰
~ بالا ۲۴۸
~ پایین ۲۴۹
~ تک تابه ۲۶۵
~ حالت‌های در هم تنیده ۵۸۱
~ سه تابه ۲۶۵
~ صفر ۲۶۷
ماتریس ~ ۲۴۹، ۲۵۰، ۲۷۷
~ نیروهای تبادل ۲۹۶
~ و آمار ۲۹۰
~ یک ۲۵۲، ۲۷۷
~ یک دوم ۲۴۸-۲۵۶
اسپینور ۲۴۹، ۲۷۹
استاتیک کوانتومی ۴۷۰
استقلال خطی ۶۰۲
استتار کردن ۳۰۴
اصل
- ~ جایگزیدگی (وضعیت) ۵۸۱
~ طرد پائولی ۲۹۰، ۳۰۳، ۳۰۷، ۳۱۲، ۳۲۲
~ عدم قطعیت ۴۳-۴۵، ۱۶۷، ۱۷۰، ۱۷۸، ۲۰۰
~ انرژی-زمان ۱۷۷، ۱۷۴
~ بسته موج با کمینه عدم قطعیت ۱۷۳
~ تعمیم یافته ۱۶۷-۱۷۲
~ توسعه یافته ۱۹۳
~ مکان-تکانه ۱۷۰
~ موضوعه ۴۲
~ وردش ۴۰۸-۴۳۵
~ برای حالت‌های مقید ۴۱۵-۴۲۱
~ برای حالت پایه هلیوم ۴۱۵-۴۲۱

- ~ برای یون مولکول هیدروژن ۴۲۲-۴۲۶
الکتروپینامیک کوانتومی ۴۸۱، ۴۸۳-۴۸۵
الکترون
- پیکربندی ~ ۳۰۷
~ ظرفیت ۳۰۹
الگوی کرونیگ-پنی ۳۱۸
انتشارگر ۵۷۵
انتقال لمب ۳۷۴
انتگرال پذیر مجذوری ۳۶
انتگرال پربندی ۵۶۵
~ تبدالی ۴۲۶
~ مستقیم ۴۲۶
~ همپوش ۴۲۵
اندازه گیری ۲۱-۲۵، ۶۸
~ اصل عدم قطعیت ۱۷۱
~ پارادوکس گرینه ۵۹۲-۵۹۴
~ پی در پی ۱۸۸
~ تعبیر آماری تعمیم یافته ۱۶۲-۱۶۷
~ و حالت های معین ۱۵۲-۱۵۴
~ ویرانگر ۵۹۰
انرژی
- ~ بستگی ۲۲۲، ۲۸۸
~ پایستگی ۶۹، ۱۷۹
~ پتانسیل ۵۲۹-۵۳۷
~ جنبشی ۴۱، ۳۷۴-۳۷۸
~ دو قطبی مغناطیسی ۲۵۶
~ فرمی ۳۱۲، ۳۴۵
~ فوتون ۲۳۰، ۳۴۲
~ گرمایی ۳۱۴
~ مرتبه دوم ۳۵۹-۳۶۱
~ نسبیته ۳۷۵
~ یونش ۲۲۲، ۴۱۵، ۴۲۱
انرژی مجاز ۵۶، ۳۲۰
~ اتم هلیوم ۳۰۰-۳۰۳
~ اتم هیدروژن ۲۱۴، ۲۲۰، ۲۸۳، ۲۹۹
- ~ پتانسیل با توان عمومی ۴۶۲
~ توپ واجهنده ۴۵۹
~ چاه پتانسیل ۴۴۲، ۴۵۶-۴۵۹
~ چاه تابع دلتا ۱۱۱-۱۲۲
~ چاه کروی نامتناهی ۲۰۹-۲۱۳
~ چاه مربعی متناهی ۱۲۵-۱۲۸
~ چاه مربعی نامتناهی ۶۱
~ چاه مکعبی نامتناهی ۲۰۲، ۳۶۷-۳۷۱
~ ممنوع ۳۲۰
~ نوارها ۳۲۰
~ نوسانگر هماهنگ ۸۱، ۹۱، ۲۷۱، ۴۶۰
انرژی های بور ۲۲۱، ۳۷۳، ۳۷۶
اوربیتال ۳۰۴
آزمایش اشترن-گرلاخ ۲۵۹-۲۶۲
آلفا
ذره ~ ۴۴۶-۴۵۰
واپاشی ~ ۴۴۶-۴۵۰
آونگ فوکو ۵۲۰
آهنگ گذار ۴۸۷-۴۹۱
باریون ۲۷۰
برا ۱۸۵
بردار ۱۴۴، ۶۰۰
~ پوچ ۶۰۰
~ صفر ۶۰۰
~ معکوس ۶۰۳
~ موج ۳۱۱
~ یکه ۶۰۵
برهم کنش اسپین-مدار ۳۸۲
برهم کنش وان در والس ۳۹۹
بسامد لارمور ۲۵۸
بسته موج ۱۰۰-۱۰۵
~ با کمینه عدم قطعیت ۱۷۲-۱۷۴
~ گاوسی ۱۰۷، ۱۳۴، ۱۷۴، ۱۹۶
بلور ۳۱۷، ۴۰۵

- بهنجار (تابع) ۶۰۵
بهنجارش
~ اصل وردش ۴۱۴-۴۰۸
~ تابع موج ۳۵-۳۸
~ ذره آزاد ۹۹
~ سیستم‌های دو ذره‌ای ۲۸۶
~ مختصات کروی ۲۰۶
~ نوسانگر هماهنگ ۸۲
~ هیدروژن ۲۲۲
پارادوکس (باطل نما)
~ زنوی کوانتومی ۵۹۴-۵۹۷
~ گریه شرودینگر ۵۹۲-۵۹۴
~ EPR ۵۷۹-۵۸۲
پارامتر برخورد ۵۴۴
پایستگی
~ احتمال ۴۸، ۲۷۲
~ انرژی ۶۹، ۲۷۲
~ تکانه زاویه‌ای ۲۴۲
پتانسیل ۵۲
~ با تقارن کروی ۱۹۸، ۵۷۱
~ با توان عمومی ۴۶۲
~ بدون بازتاب ۱۳۸
~ برداری ۲۸۱
~ پله ۱۳۰
~ رادرفورد ۵۷۲
~ شیمیایی ۳۳۸
~ کرونیگ-پنی ۳۲۰
~ کوئلی ۲۱۴، ۲۲۶، ۲۹۹، ۵۵۱، ۵۷۲
~ موثر ۲۰۸
~ نرده‌ای ۵۲۹
~ یوکاوا ۴۳۰
پتانسیل تابع دلتا ۱۰۸-۱۲۲، ۳۱۶
~ برآمدگی ۳۵۸، ۳۷۱
~ پوسته‌ای ۵۵۷، ۵۶۱
چاه ~ ۱۱۱-۱۲۰
چشمه ~ ۵۶۲
~ حالت مقید ۱۰۹، ۱۱۳-۱۱۶
~ حالت‌های پراکنده ۱۰۹، ۱۱۶-۱۲۰
سد ~ ۱۲۰
~ متحرک ۱۳۷
پخش شدگی (پهن شدگی) ۳۸، ۴۵
پدیده انتظار ۵۹۵
پراکندگی ۵۴۴-۵۷۵
~ از کره سخت ۵۴۴-۵۴۹، ۵۵۵-۵۵۷
~ از کره نرم ۵۷۰
تحلیل پاره موجی ~ ۵۵۰-۵۵۷
تقریب بورن ~ ۵۶۲-۵۷۵
جابجایی فاز ~ ۵۵۷-۵۶۲
دامنه ~ ۵۴۹
~ در انرژی پایین ۵۷۱
~ رادرفورد ۵۷۲
زاویه ~ ۵۴۴-۵۴۶
ماتریس ~ ۱۳۸
نظریه کلاسیک ~ ۵۴۴-۵۴۶
~ یوکاوا ۵۷۲
پرش های کوانتومی ۲۳۰، ۴۷۰
پروتون
میدان مغناطیسی ~ ۳۷۹
پوزیترونیم ۲۸۸، ۳۹۸
پوسته‌ها ۳۰۴
پیکربندی ۳۰۱، ۳۰۸، ۳۲۵
پیوند کووالانسی ۲۹۸
تابش ۴۸۱-۴۸۹
~ دو قطبی الکتریکی ۴۸۲
تابع
~ انتگرال‌پذیر مجذوری ۳۶، ۱۴۵
~ آیری ۴۵۲-۴۵۹
~ بسل کروی ۲۱۱-۲۱۳، ۵۵۱
~ بهنجار نشدنی ۳۷، ۹۹، ۱۰۸
~ پله‌ای ۱۲۱، ۴۱۲

- ~ تعمیم یافته ۱۱۱
 ~ دلتای دیراک ۱۰۸-۱۲۲، ۱۲۹
 ~ زتای ریمان ۷۰، ۳۴۱
 ~ زوج ۶۲
 ~ فرد ۶۲
 ~ گامای اولر ۳۴۱
 ~ گرین ۵۶۲-۵۶۷، ۵۷۵
 ~ لژاندر ۲۰۴
 ~ لژاندر وابسته ۲۰۴، ۲۷۸
 ماتریس ~ ۶۲۹
 ~ مولد ۹۶
 ~ نویمان کروی ۲۱۱
 ~ هنکل کروی ۵۵۲
 تابع موج ~ ۲۰-۲۵، ۳۵، ۳۸
 ~ آزمون ۷۶، ۴۶۲
 ~ چاه مربعی نامتناهی ۶۱-۶۳
 ~ ذره آزاد ۹۷-۱۰۸
 ~ ذره ناپایدار ۴۷
 ~ شعاعی ۲۰۰، ۲۰۸، ۲۱۵-۲۲۹
 فروافت ~ ۲۵، ۱۶۳، ۲۵۳، ۵۷۸
 ~ فضای تکانه ۱۶۶، ۲۷۳
 ~ فضای مکان ۱۶۵
 ~ هیدروژن ۲۲۴-۲۳۱
 تاثیر علی ۵۸۹
 تبدیل
 ~ پیمانه‌ای ۲۸۳، ۵۳۰
 ~ خطی ۱۴۴، ۶۰۷، ۶۲۵
 ~ فوریه ۱۰۰، ۱۲۱، ۱۶۵
 ~ فوریه معکوس ۱۰۰، ۱۶۵
 ~ هرمیتی ۶۲۵-۶۲۹
 ~ یکانی ۶۲۹
 تبهنگی
 ~ الکترون ۲۹۲
 ~ دوگانه ۳۶۱
 فشار ~ ۳۱۴
 ~ مرتبه بالاتر ۳۶۷-۳۷۱
 تجزیه طیفی ۱۸۷
 تحلیل پاره موجی ۵۰۰-۵۵۷
 ترازهای لاندائو ۲۸۳
 ترانهاده (ماتریس) ۶۱۰
 ترکیب خطی ۵۶، ۶۰۲
 ~ اوربیتال‌های اتمی ۴۲۳
 تشدید مغناطیسی هسته ۵۰۳
 تصحیح
 ~ مرتبه اول ۳۵۳
 ~ مرتبه دوم ۳۵۳، ۳۵۹، ۴۷۶
 ~ نسبیتی ۳۷۴-۳۷۷
 تصویر شرودینگر ۱۹۵
 تصویر هاینبرگ ۱۹۵
 تعادل گرمایی ۳۲۳-۳۳۲
 تعامد ۶۳
 ~ بردارها ۶۰۵
 ~ توابع ۱۴۷
 ~ توابع موج هیدروژن ۲۲۷
 ~ گرام-اشمیت ۱۵۶، ۶۰۶
 ~ ویژه توابع ۱۵۶
 ~ هماهنگ‌های کروی ۲۲۷
 تعبیر آماری ۲۱-۲۵، ۱۶۲-۱۶۷
 تعبیر چند جهانی ۲۴، ۵۹۸
 تفسیر کپنهاگی ۲۳
 تفکیک متغیرها ۵۲، ۲۰۰-۲۱۴
 تقارن
 ~ چارگوشی ۴۰۵
 ~ راست گوشه ۴۰۵
 ~ مکعبی ۴۰۵
 تقریب
 ~ استرلینگ ۳۳۳
 ~ بورن ۵۶۲-۵۶۷
 ~ بورن-اپنهايمر ۵۰۹
 ~ دررو ۵۰۸-۵۴۱

- ~ تکان ۵۷۳
~ موج چرخان ۴۸۰
~ WKB ۴۳۸-۴۶۷
~ تونل زنی ۴۴۴-۴۵۰
~ فرمول‌های هموستار ۴۵۰-۴۶۱
~ محدوده کلاسیک ۴۳۹-۴۴۴
تکانه ۳۹-۴۳
~ انتقال ۵۷۰
~ زاویه‌ای ۲۳۳-۲۴۳
~ زاویه‌ای اسپینی ۲۴۲
~ زاویه‌ای ذاتی ۲۴۶
~ زاویه‌ای مداری ۲۴۶
عملگر ~ ۴۱، ۷۵، ۱۵۸
فرمول دوپروی ~ ۴۴، ۴۹
ویژه توابع / ویژه مقادیر ~ ۱۵۸
~ تکنیک LCAO ۴۲۳
توزیع ۱۱۱
~ بوز-اینشتین ۳۳۹
~ فرمی-دیراک ۳۳۹
~ ماکسول-بولتزمن ۳۳۹
تونل زنی ۱۰۹، ۱۲۰، ۴۴۴-۴۴۵
~ در اثر اشتراک ۴۶۶
ثابت
~ بولتزمن ۴۹، ۳۳۸
~ پلانک ۲۱
~ ریدبرگ ۳۳۱
~ ساختار ریز ۳۷۳
جامد سرد ۳۱۲، ۳۱۵
جامدات ۳۰۹، ۳۲۳-۴۹
ساختار نواری ~ ۳۱۵-۳۲۳
جبر خطی ۱۴۴، ۶۰۰-۶۲۹
~ بردارها ۶۰۰-۶۰۴
~ تغییر پایه‌ها ۶۱۵
~ حاصلضرب‌های داخلی ۶۰۴-۶۰۷
~ ماتریس‌ها ۶۰۷-۶۱۵
~ ویژه‌بردارها و ویژه‌مقادیر ۶۱۸-۶۲۵
جدول تناوبی ۳۰۴-۳۰۹
جذب ۴۸۱-۴۸۳، ۵۰۳
جرم کاهیده ۲۸۷
جفت شدگی
~ اسپین-اسپین ۳۹۶
~ اسپین-مدار ۳۷۳، ۳۷۸-۳۸۶
جمع تکانه‌های زاویه‌ای ۲۶۴-۲۷۱
جمله داروین ۳۸۳
جواب تفکیک‌پذیر ۵۲
چاه پتانسیل
~ با دو دیواره عمودی ۴۴۲
~ با یک دیواره عمودی ۴۵۶
~ بدون دیواره عمودی ۴۵۷
چاه دوگانه ۱۳۵
چاه کروی نامتناهی ۲۰۹-۲۱۳
چاه مربعی
~ متناهی ۱۲۲-۱۳۱
~ متناهی پهن، عمیق ۱۲۵
~ متناهی کم عمق، باریک ۱۲۶
~ نامتناهی ۵۹-۷۳
چرخنده صلب ۲۴۵
چگالش بوز ۳۴۱
چگالی احتمال ۳۵، ۵۸
چگالی الکترون آزاد ۳۱۲
چند جمله‌ای‌های لژاندر ۱۸۸، ۲۰۴، ۲۲۶
~ وابسته ۲۲۵
چند جمله‌ای هرمیت ۹۳، ۹۶
حالت
~ برانگیخته ۶۲
~ هلیوم ۳۰۱
~ پراکنده ۱۰۸، ۱۱۶
~ تابع دلتا ۱۰۸
~ تونل زنی ۴۴۴-۴۵۰
~ تکتابه ۲۶۵، ۲۹۸، ۳۹۷

- ~ مانا ۵۲-۵۹
 ~ چاه تابع دلتا ۱۱۸
 ~ چاه مربعی نامتناهی ۶۱
 ~ ذره آزاد ۹۸
 ~ قضیه ویریا ۱۹۰
 ~ نوسانگر هماهنگ ۸۱
 ~ معین ۱۵۲-۱۵۴
 ~ مقید ۱۰۸
 ~ تبهگن ۱۳۴
 حالت پایه ۶۲، ۲۲۱
 ~ اتم هیدروژن ۲۲۲
 ~ چاه کروی نامتناهی ۲۱۰
 ~ چاه مربعی نامتناهی ۶۲
 ~ عناصر ۳۰۸
 ~ کران بالا ۴۰۸
 ~ هلیوم ۴۱۵-۴۲۱
 ~ یون لیتیم ۴۲۱
 ~ یون مولکول هیدروژن ۴۲۲-۴۲۸
 حالت های
 ~ در هم تافته ۲۸۹، ۵۸۱
 ~ همدوس ۱۹۱
 حد چاندراشکار ۳۴۶
 حرکت
 ~ تقدیمی توماس ۳۸۱
 ~ تقدیمی لارمور ۲۵۶
 ~ سیکلوترونی ۲۸۳
 ~ هسته‌ای ۲۸۸، ۲۹۹
 حفره ۳۲۲
 حل نموداری ۱۲۷
 خط ۲۱ سانتی متر ۳۹۸
 خطوط طیفی انطباقی ۲۷۵
 خم تشدید ۵۰۳
 خود توانی ۱۸۶
 دافعه کولنی ۴۴۶
 دامنه پاره موج ۵۵۴
 دامنه پراکندگی ۵۴۹
 دترمینان اسلاتر ۲۹۹
 دستگاه تکثیر کوانتومی ۵۹۰
 درجه آزادی ۳۴۷
 دلتای کروئکر ۶۴
 دما ۳۳۴، ۳۳۸
 ~ بحرانی ۳۴۱
 ~ فرمی ۳۱۵
 دوترون ۴۰۵
 دوتریوم ۴۰۵
 دو قطبی مغناطیسی
 گشتاور ~ ۲۵۶، ۳۸۰
 گشتاور ناهنجار ~ ۳۸۰
 دوگانگی موج ذره ۵۷۸
 دیدگاه
 ~ متعارفی ۲۳
 ~ نمی دانم ۲۴
 ~ واقع گرایانه ۲۳
 دینامیک کوانتومی ۴۷۰
 ذره ناپایدار ۴۷
 ذرات تفکیک پذیر ۲۹۴
 ذرات تفکیک ناپذیر ۲۹۰
 ذرات یکسان ۲۸۶-۳۴۷
 ~ جامدات ۳۰۹-۳۲۳
 ~ سیستم‌های دو ذره‌ای ۲۸۶-۲۹۹
 مکانیک آماری ~ ۳۲۳-۳۴۴
 ذره آزاد ۹۷-۱۰۸
 ذره ناپایدار ۴۷
 رابطه
 ~ پاسترناک ۴۰۲
 ~ پاشندگی ۱۰۴
 ~ جایجایی کانونیک ۷۷
 ~ دوپروی ۴۴، ۹۶، ۱۵۹
 ~ رودریگز ۹۶
 ~ برز ۴۰۲

سطح فرمی ۳۱۲	راست هنجاری ۶۴، ۸۴
سطح مقطع پراکندگی ۵۴۶	~ بردارها ۶۰۵
شار مغناطیسی ۵۲۵، ۵۳۱	~ توابع ۱۴۷
شانه دیراک ۳۱۵-۳۲۳	~ دیراک ۱۵۹، ۱۸۶
شرایط مرزی ۶۰، ۱۱۳	~ ویژه توابع ۱۵۹
~ چاه تابع دلتا ۱۱۳	رد ۶۱۶
~ چاه مربعی متناهی ۱۲۴	رسانا ۳۲۲
شرط متقارن سازی ۲۹۱	روش دم جنباندن ۹۲
شعاع بور ۲۲۰، ۳۷۶	روش سری توانی ۷۴، ۸۸، ۲۱۷
شعاع کلاسیک الکترون ۲۴۸	روش فروبینوس ۸۸
شکافت فوق ریز ۳۹۵-۳۹۸	زاویه برخورد ۵۴۴
شیدزایی ۵۴۷	زاویه سمتی ۲۰۰
ضرایب کلبش-گوردن ۲۸۹	زاویه قطبی ۲۰۰
ضریب بازتاب ۱۱۸	زاویه هنی ۵۲۱
ضریب دو جمله‌ای ۲۳۹	ساختار ریز ۳۷۲-۳۸۶
ضریب عبور ۱۱۸	تصحیح نسبیتی ~ ۳۷۳-۳۷۷
طرح (نمودار) های چگالی ۲۲۷	~ جفت شدگی اسپین-مدار ۳۷۳-۳۷۸، ۳۸۵
طیف ۱۵۳، ۶۱۹	ساختار نواری ۳۱۵-۳۲۲
~ پیوسته ۱۵۴، ۱۵۸-۱۶۱	ساندویچ کردن ۴۱
~ جسم سیاه ۳۴۲	ستاره نوترونی ۳۴۶
~ گسسته ۱۵۴-۱۵۷	سد کولنی ۴۴۶
~ هیدروژن ۲۳۰-۲۳۲	سرعت ۴۱
عامل g	~ فاز ۱۰۳
~ الکترون ۳۷۹	~ کلاسیک ۹۸، ۱۰۵
~ پروتون ۳۹۵	~ گروه ۱۰۳
~ پوزیترون ۳۹۵	سری
~ دوترون ۴۰۵	~ استرلینگ ۳۳۳
~ لاندۀ ۳۸۸	~ بالمر ۲۳۱
~ موئون ۳۶۵	~ بورن ۵۷۳-۵۷۵
عدد اشغال ۳۲۵	~ بی دررو ۵۴۰
عدد کوانتومی	~ پاشن ۲۳۱
~ اصلی ۲۲۰	~ تیلور ۷۳
~ تکرانه زاویه‌ای ۲۳۳	~ فوریه ۶۴
~ سمتی ۲۰۶	~ لیمان ۲۳۱
~ مغناطیسی ۲۰۶	~ هندسی ۳۴۷

عدد موج ۵۴۹	~ ریلی ۵۵۵
عملگر ۴۱	~ لارمور ۴۹۴
~ انتقال ۱۹۵	~ هموستار ۴۶۱-۴۵۰
~ بالابرنده (افزاینده) ۲۳۶، ۷۹	فرمول بندی مندلسم-تام ۱۷۷
~ پاد هرمیتی ۱۸۸	فرمیون ۲۸۹-۲۹۹
~ پایین آورنده (کاهنده) ۲۳۶، ۷۹	فروافت تابع موج ۲۵، ۱۶۲، ۵۷۸
~ تبادل ۲۹۱	فضای
~ تصویرگر ۱۸۶	~ برداری ۶۰۰
~ تکانه ۴۱	~ دوگان ۱۸۶
~ جابجاگر ۷۶	~ ضرب داخلی ۶۰۴
~ خطی ۱۴۹	~ هیلبرت ۱۴۴-۱۴۸
~ مکان ۴۱	فوتون ۲۳۰، ۴۸۳
~ نردبانی ۲۳۶، ۷۹	قاعده طلایی فرمی ۴۸۹
~ هامیلتونی ۵۵	قانون
~ هرمیتی ۱۴۹-۱۵۱	~ استغنان-بولتزمن ۳۴۴
ویژه توابع ~ ۱۵۴-۱۶۲	~ بیو-ساوار ۳۷۹
ویژه مقادیر ~ ۱۵۴-۱۶۲	~ جابجایی وین ۳۴۴
~ همانی ۱۸۶	~ نیروی لورنتس ۲۸۱
عوامل راسی ۵۷۵	~ هوک ۷۳
فاز	قضیه
~ بری ۵۱۸-۵۳۷	~ اپتیکی ۵۷۶
~ دینامیکی ۵۲۲، ۵۴۰	~ اهرنفت ۴۳
~ هندسی ۵۲۲، ۵۴۰	مانسته دورانی ~ ۲۴۲
فرایند بی دررو ۵۰۸	~ بل ۵۸۲-۵۹۰
فرایند غیر هولونومی ۵۱۸-۵۲۱	~ بلوخ ۳۱۶
فرض بنیادی مکانیک آماری ۳۲۴	~ بنیادی جبر ۶۱۹
فرکانس طبیعی ۴۷۹	~ بی دررو ۵۱۰-۵۱۸
عامل واگردانی رابی ۴۸۰	~ پلاتشرل ۱۰۰
فرمول	~ تکثیر ناپذیری ۵۹۰-۵۹۲
~ انتگرال کوشی ۵۶۵	~ دیریکله ۶۴
~ بازگشتی ۲۱۸، ۹۰	~ فاینمن-هلمن ۴۰۲
~ بور ۲۲۰	~ ویریا ۱۹۰
~ جرم-انرژی اینشتین ۴۴۹	~ سه بعدی ۲۷۲
~ جسم سیاه پلانک ۳۴۳	~ همپاری ۳۴۷
~ رودریگز ۲۰۴	۳۴۵

- کامل بودن
~ توابع ۶۴
~ فضای هیلبرت ۱۴۶
~ مکانیک کوانتومی ۲۳
~ ویژه توابع ۶۴
کت ۱۸۵
کنش از راه دور اسرار آمیز ۵۸۰
کوارک ۲۷۰
کوانتش شار ۵۳۲
کوتوله سفید ۳۴۵
گاز الکترون آزاد ۳۰۹-۳۱۵
گاز کامل ۳۳۷
گاف ۳۲۰
گذار ۲۳۰
~ دو قطبی ۵۰۵
~ مجاز ۴۹۹
~ ممنوع ۴۹۹
گره شرودینگر ۵۹۲-۵۹۴
گسیل القایی ۴۸۳
گسیل خودبخودی ۴۸۱
گشتاور
~ دو قطبی الکتریکی ۴۸۲
~ دو قطبی مغناطیسی ۲۵۶، ۳۵۹
~ مغناطیسی ناهنجار ۳۸۱
لاپلاسی (عملگر) ۱۹۸
لم فوریه ۶۶
لیزر ۴۸۴
ماتریس
~ اسپین پائولی ۲۵۱
~ انتقال ۱۴۰
~ بهنجار ۶۲۳
~ پاد متقارن ۶۱۱
~ پاد هرمیتی ۶۱۱
~ تابع ۶۲۹
~ تبدیل هرمیتی ۶۲۵
~ ترانزاده ۶۱۰
~ تکین ۶۱۳
~ حقیقی ۶۱۲
~ دترمینان ۶۱۳
~ ستونی ۶۱۰
~ سطری ۶۱۰
شکل قطری ~ ۶۲۲
~ صفر ۶۱۹
طیف ۶۱۹~
~ متعامد ۶۱۲
~ متقارن ۶۱۲
معادله مشخصه ~ ۶۲۲
~ موهومی ۶۱۲
~ وارون ۶۱۲
~ یکانی ۶۱۳
~ یکه ۶۱۲
متغیر پنهان ۲۳، ۵۸۲
متغیرهای دینامیکی ۴۱
محتمل ترین پیکربندی ۳۳۲-۳۳۶
مختصات کروی ۱۹۸
تفکیک متغیرها در ~ ۲۰۰-۲۰۳
معادله زاویه ای در ~ ۲۰۲
معادله شعاعی در ~ ۲۰۸
مدول کپهای ۳۱۵
مدهای واپاشی ۴۹۳
مزون ۲۴۷، ۲۷۰، ۵۷۹
مشاهده پذیر ۱۴۹-۱۵۴
~ ناسازگار ۱۷۱
مضارب لاگرانژ ۳۳۳
معادلات ماکسول ۵۲۹
معادله
~ آیری ۴۵۲
~ پیوستگی ۲۷۲
~ دیراک ۲۸۶
~ زاویه ای ۲۰۲، ۲۴۴

- ~ شرودینگر ۲۰، ۱۹۸
 ~ برای هلیوم ۴۳۱
 ~ برای هیدروژن ۲۱۴
 ~ در تقریب WKB ۴۳۸-۴۶۷
 ~ در فضای تکانه ۱۹۵
 ~ در مختصات کروی ۱۹۸-۲۱۴
 شکل انتگرالی ~ ۵۶۲
 ~ مستقل از زمان ۵۴، ۱۹۹
 ~ وابسته به زمان ۲۰، ۳۷
 ~ شعاعی ۲۰۸
 ~ هلمهولتز ۵۶۲
 مقدار چشمداشتی ۲۸، ۳۹
 ~ تعبیر آماری تعمیم یافته ۱۶۲
 ~ حالت‌های مانا ۵۴
 ~ قضیه اهرنفت ۴۳
 مشتق زمانی ~ ۱۷۵
 ~ نوسانگر هماهنگ ۸۵
 ~ هامیلتونی ۷۰
 مکانیک آماری ۳
 ~ کوانتومی ۳۲۳
 ~ ابر متقارن ۷۵
 مگنتون بور ۳۸۹
 منطقه تابش ۵۵۱
 موج
 ~ الکترومغناطیسی ۴۸۱
 ~ بازتابیده ۱۱۷
 ~ سینوسی ۹۹
 ~ عبوری ۱۱۷
 ~ فرودی ۱۱۷
 موضعی (جایگزیدگی) ۵۸۱
 مولد
 ~ انتقال‌های زمانی ۱۹۵
 ~ انتقال‌های فضایی ۱۹۵
 ~ دوران‌ها ۲۷۹
 موئون ۴۳۳
 موئونوم ۴۳۳
 نارسانا ۳۲۲
 نامساوی
 ~ بل ۵۸۵
 ~ شوارتز ۱۴۶، ۶۰۶
 ~ مثلثی ۶۰۶
 نامعینی (ابهام) کوانتومی ۲۲-۲۳، ۱۵۲، ۲۵۴
 ناموضعی (ناجایگزیدگی) ۵۸۶
 ناوردایی پیمانه‌ای ۲۸۳
 نرم (هنج) ۶۰۵
 نسبت زیرمغناطیسی ۲۵۶
 نظریه
 ~ اختلال تبهگن ۳۵۷
 ~ مرتبه اول ۳۵۴، ۳۶۱
 ~ اختلال غیر تبهگن ۳۵۲
 ~ گروه ۲۷۰
 ~ واپاشی آلفازای گاموف ۴۴۶
 نظریه اختلال مستقل از زمان ۳۵۷
 نظریه اختلال وابسته به زمان ۴۷۰
 ~ در سیستم‌های دو سطحی ۵۱۸
 نظریه پراکندگی کلاسیک ۵۴۴، ۵۷۳
 نقاط بازگشتی ۱۱۰، ۴۳۸، ۴۵۷
 نماد لوی-چی ویتا ۲۵۴
 نمودارهای فاینمن ۵۷۵
 نوسانگر هماهنگ ۷۳-۹۷
 ~ انرژی‌های مجاز ۸۱
 ~ حالت‌های همدوس ۱۹۱
 ~ روش تحلیلی ۸۷
 ~ روش جبری ۷۵-۸۷
 ~ سه بعدی ۲۷۱
 ~ مختل شده ۳۵۷
 ~ نیمه ۱۳۳
 ویژه حالت‌های ~ ۸۱
 نوسانهای نوترینو ۱۸۵
 نوسانگر ۷۵

- نیروی تبادلۃ ۲۹۴
نیمه رسانا ۳۲۲
نیمه عمر ۴۹۵
واپاشی بتازای وارون ۴۴۶
وادوسی ۵۹۳
وارونی جمعیت ۴۸۴
ویژه اسپینور ۲۵۱
واریانس، پراکندگی ۳۰
ویژه تابع ۱۵۲
~ تکانه ۱۵۸
~ تکانه زاویه‌ای ۲۴۲
~ حالت‌های معین ۱۵۲-۱۵۴
~ عملگرهای هرمیتی ۱۵۵
~ مشاهده پذیرهای ناسازگار ۱۷۲
~ مکان ۱۶۰
ویژه مقادیر ۱۵۲، ۳۶۷
~ تبدیل‌های هرمیتی ۶۲۶
~ تکانه زاویه‌ای ۲۳۴
هلیوم ۳۰۰
~ ارتو ۳۰۱
~ پارا ۳۰۱
~ نوار لاستیکی ۴۳۱
یون ~ ۳۰۱
هم عامل‌ها ۶۱۳
همانگ‌های کروی ۲۰۶
همجوشی ۴۳۳
هیدروژن موثونی ۲۸۹، ۳۹۸
یون مولکول هیدروژن ۴۲۲

ثابت های بنیادی

$\hbar = 1.05457 \times 10^{-34} \text{ Js}$	ثابت پلانک:
$c = 2.99792 \times 10^8 \text{ m/s}$	سرعت نور:
$m_e = 9.10938 \times 10^{-31} \text{ kg}$	جرم الکترون:
$m_p = 1.67262 \times 10^{-27} \text{ kg}$	جرم پروتون:
$e = 1.60218 \times 10^{-19} \text{ C}$	بار پروتون:
$-e = -1.60218 \times 10^{-19} \text{ C}$	بار الکترون:
$\epsilon_0 = 8.85419 \times 10^{-12} \text{ C}^2/\text{Jm}$	گذردهی فضا:
$k_B = 1.38065 \times 10^{-23} \text{ J/K}$	ثابت بولتزمن:

اتم هیدروژن

$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} = \frac{1}{137.036}$	ثابت ساختار ریز:
$a = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} = \frac{\hbar}{am_e c} = 0.29177 \times 10^{-10}$	شعاع بور:
$E_n = -\frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2} \frac{E_1}{n^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$	انرژی های بور:
$-E_1 = \frac{\hbar^2}{2m_e a^2} = \frac{a^2 m_e c^2}{2} = 13.6057 \text{ eV}$	انرژی بستگی:
$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi a^2}} e^{-r/a}$	حالت پایه:
$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$	فرمول ریذبرگ:
$R = -\frac{E_1}{4\pi\hbar c} = 1.09737 \times 10^7 / \text{m}$	ثابت ریذبرگ:

فرمول‌های ریاضی

مثلاث:

$$\sin(a \pm b) = \sin a \cos b \pm \cos a \sin b$$

$$\cos(a \pm b) = \cos a \cos b \mp \sin a \sin b$$

$$c^2 = a^2 + b^2 - 2ab \cos \theta$$

قانون کسینوس‌ها:

$$\int x \sin(ax) dx = \frac{1}{a^2} \sin(ax) - \frac{x}{a} \cos(ax)$$

انتگرال‌ها:

$$\int x \cos(ax) dx = \frac{1}{a^2} \cos(ax) + \frac{x}{a} \sin(ax)$$

$$\int_0^\infty x^n e^{-x/a} dx = n! a^{n+1}$$

انتگرال نمایی:

$$\int_0^\infty x^{2n} e^{-x^2/a^2} dx = \sqrt{\pi} \frac{(2n)!}{n!} \left(\frac{a}{2}\right)^{2n+1}$$

انتگرال‌های گاوسی:

$$\int_0^\infty x^{2n+1} e^{-x^2/a^2} dx = \frac{n!}{2} a^{2n+2}$$

$$\int_a^b f \frac{dg}{dx} dx = - \int_a^b \frac{df}{dx} g dx + fg \Big|_a^b$$

انتگرال گیری جزء به جزء:

رابطه‌های بنیادی

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H \Psi$$

معادله شرودینگر:

$$H \Psi = E \Psi, \quad \Psi = \psi e^{-iEt/\hbar}$$

معادله شرودینگر مستقل از زمان:

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

عملگر هامیلتونی:

$$p = -i\hbar \nabla$$

عملگر تکانه:

$$\frac{d\langle Q \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [H, Q] \rangle + \langle \partial Q / \partial t \rangle$$

وابستگی زمانی مقدار چشم‌داشتی:

$$\sigma_A \sigma_B \geq \left| \frac{1}{i} \langle [A, B] \rangle \right|$$

اصل عدم قطعیت تعمیم‌یافته:

$$\sigma_x \sigma_y \geq \hbar/2$$

اصل عدم قطعیت هایزنبرگ:

$$[x, p] = i\hbar$$

جابجایی بنیادی:

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z, \quad [L_y, L_z] = i\hbar L_x, \quad [L_z, L_x] = i\hbar L_y$$

تکانه زاویه‌ای: