

www.arsanjan.blogfa.com



فیزیک کوانتومی



استیوان گازیو و ویج

ترجمه: محی الدین شیخ الاسلام

فیزیک کو انتومی

استیون گازیروویچ

ترجمہ محی الدین شیخ الاسلامی

مرکز نشر دانشگاهی، تهران



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

فیزیک کوانتومی
تألیف استیون گازیورویچ
ترجمه محی الدین شیخ الاسلامی
ویراسته دکتر منیژه رهبر
نسخه پرداز: زهرا رحیمدل قادر
حروفچین: پروین حاج اسماعیل زنجانی
مرکز نشر دانشگاهی، تهران
چاپ اول ۱۳۷۸
چاپ پنجم ۱۳۸۴
تعداد ۴۰۰۰
چاپ: محمدامین
حق چاپ برای مرکز نشر دانشگاهی محفوظ است

فهرست نویسی پیش از انتشار کتابخانه ملی جمهوری اسلامی ایران

گازیورویچ، استیون، ۱۹۲۸ -
فیزیک کوانتومی / استیون گازیورویچ؛ ترجمه محی الدین شیخ الاسلامی؛ ویراسته
منیژه رهبر - تهران: مرکز نشر دانشگاهی، ۱۳۷۸.
چهار، ۵۹۹ ص. : مصور، جدول، نمودار. - (مرکز نشر دانشگاهی؛ ۹۵۲. فیزیک؛ ۸۷)
ISBN 964-01-0952-5

فهرست نویسی بر اساس اطلاعات فیبا.
عنوان اصلی: Quantum Physics, 2nd ed. 1996.
این کتاب با ناشران و مترجمان مختلف در سالهای متفاوت نیز منتشر شده است.
واژنامه.
کتابنامه.
نمایه.
چاپ پنجم: ۱۳۸۴.
۱. کوانتوم، الف. شیخ الاسلامی، محی الدین، مترجم. ب. مرکز نشر دانشگاهی، ج. عنوان.
۵۳۰/۱۲ QC۱۷۴/۱۲/گ۲/۹۴
کتابخانه ملی ایران ۷۸ - ۱۵۵۰۶

بسم الله الرحمن الرحيم

فهرست

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

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

پیشگفتار ویرایش اول

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

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

۲. هر جنبه‌ای از مکانیک کوانتومی در درک دست‌کم یکی از پدیده‌های فیزیکی مفید بوده است. در هر مرحله از شرح و بسط موضوع، روی کاربردها تأکید کرده‌ام. اگرچه هیچ مبحثی از فیزیک کوانتومی به‌طور کامل تشریح نشده است، اما هدف من پرکردن فاصله میان درس فیزیک نوین و بین صورتی‌تر مکانیک کوانتومی است. از این‌رو، کاربردهای بسیاری را بررسی کرده‌ام، و بر برآورد مرتبه بزرگی و اهمیت اعداد تأکید کرده‌ام.

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

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

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

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

در شرح و بسط موضوع اصلی طبعاً بعضی مباحث حاشیه‌ای پیش می‌آیند. به جای طولانی‌تر کردن فصلها، بخش جداگانه "مباحث ویژه" را اضافه کرده‌ام. در اینجا سینماتیک نسبیتی، اصل هم‌ارزی، تقریب WKB، بحث مفصلی در طول عمر، پهنای خط و تشدید پراکندگی، و نظریه یوکاوا برای نیروهای هسته‌ای بیان می‌شوند. به همان دلیل، درآمد کوتاهی بر انتگرال فوریه، تابع دلتای دیراک، و چند مطلب صوری درباره عملگرها در پیوستهای ریاضی آخر کتاب گنجانده شده‌اند. *خاطر بحثهای بسیار درباره موضوع مکانیک کوانتومی، خود را مدیون همکارانم در دانشگاه مینه‌سوتا، مخصوصاً بنجامین بیمن و دونالد گفن، می‌دانم. از یوجین مرزباخر که دست‌نوشته‌ام را خوانده است و پیشنهادهای مفید بسیاری برای اصلاح آن داده است سپاسگزاری می‌کنم. همچنین از دانشجویانم در درس مکانیک کوانتومی مقدماتی که چندین سال درس داده‌ام تشکر می‌کنم. علاقه آشکار آنها به موضوع مرا بر آن داشت تا یادداشتهای مکملی بنویسم که بعداً به صورت کتاب حاضر درآمد.

پیشگفتار ویرایش دوم

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

آموزش

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

کاربردها

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

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

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

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

استیون گاز یوروویچ



محدودیت‌های فیزیک کلاسیک

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

۱. گزارش جالب توجهی از تکوین و تکامل نظریه کوانتومی را می‌توان در کتاب زیر یافت.

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

همچنین مراجعه کنید به

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

تابش جسم سیاه

تابش جسم سیاه کلاسیک

وقتی جسمی گرم می‌شود تابش می‌کند. در حالت تعادل، نور گسیل شده تمام طیف بسامدهای λ را با یک توزیع طیفی در بر می‌گیرد، که هم به بسامد نور، یا معادل آن طول موج λ ، بستگی دارد و هم به دما. می‌توان کمیت توان گسیل $E(\lambda, T)$ را به صورت انرژی گسیل شده در طول موج λ در واحد سطح و در واحد زمان تعریف کرد. پژوهش نظری در حوزه تابش گرمایی در سال ۱۸۵۹ با کار گوستاو کیرشهوف شروع شد که نشان داد به ازای یک λ ی معین نسبت توان گسیل E به ضریب جذب A ، که بنا به تعریف کسر تابش فرودی با طول موج λ است که جسم جذب می‌کند، برای تمام جسمها یکسان است. کیرشهوف دو صفحه گسیلنده و جذب‌کننده موازی در نظر گرفت و از شرط تعادل نشان داد که (به ازای هر λ) انرژی گسیل شده با انرژی جذب شده برابر است، یعنی نسبت‌های E/A باید برای این دو صفحه یکسان باشند. اندکی پس از آن، او دریافت که برای جسم سیاه، که بنابه تعریف به سطحی گفته می‌شود که تمام تابش فرودی را کاملاً جذب می‌کند و در نتیجه برای آن $A = 1$ ، تابع $E(\lambda, T)$ یک تابع جهانی است.

برای مطالعه این تابع، لازم است که بهترین چشمه ممکن تابش جسم سیاه را به دست آوریم. یک حل عملی این مسئله بررسی تابش گسیل شده از یک روزنه کوچک در محفظه‌ای است که تا دمای T گرم شده است. با توجه به ناکاملیهای سطح داخلی کاواک، واضح است که هر تابشی که به روزنه فرود می‌آید دیگر نمی‌تواند از آن خارج شود. بدین ترتیب، سطح روزنه تقریباً یک "جذب‌کننده کامل" است، و در نتیجه تابش ناشی از آن واقعاً "تابش جسم سیاه" است. اگر روزنه به اندازه کافی کوچک باشد، این تابش همان تابشی است که به دیواره‌های کاواک فرود می‌آید. بنابراین، دانستن توزیع تابش داخل کاواکی که دیواره‌های آن در دمای T هستند ضروری است. کیرشهوف نشان داد که، بنابه قانون دوم ترمودینامیک، تابش داخل کاواک — برای هر طول موج — باید همسانگرد باشد، یعنی شار مستقل از راستا است؛ باید همگن باشد، یعنی در هر نقطه یکسان؛ است و باید برای تمام کاواک‌های با دمای مساوی یکسان باشد.^۲ با استدلال‌های ساده هندسی می‌توان نشان داد که توان گسیل با چگالی انرژی $u(\lambda, T)$ در کاواک ارتباط دارد (مسئله ۱-۱). این رابطه به صورت زیر است

$$u(\lambda, T) = \frac{4E(\lambda, T)}{c} \quad (1-1)$$

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

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

کار ویلهلم وین حاصل شد که www.arsanjaniblogfa.com،^۳ نشان داد چگالی انرژی باید به صورت زیر باشد

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

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

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

قانون وین به صورت زیر در می آید

$$u(\nu, T) = \nu^3 g\left(\frac{\nu}{T}\right) \quad (۴-۱)$$

این قانون، که تجربه آن را تأیید کرده است (شکل ۱-۱)، مستلزم دو پیامد زیر است:

۱. با داشتن توزیع طیفی تابش جسم سیاه در یک دمای معین، می توان توزیع در هر دمای دیگر را با استفاده از روابط بالا به دست آورد.

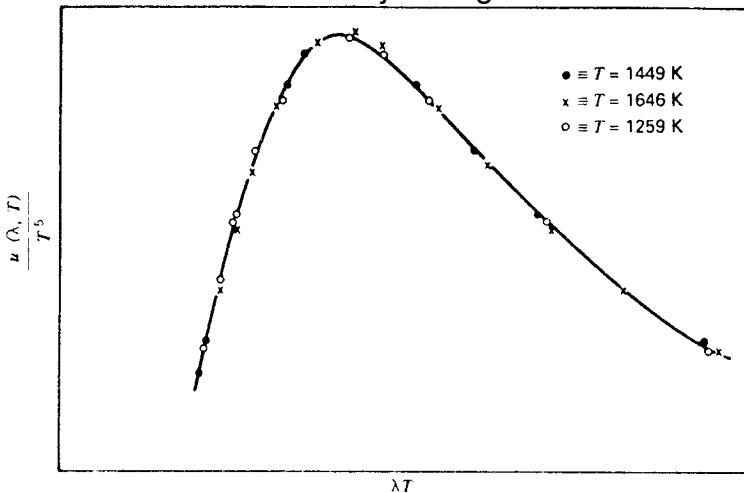
۲. اگر تابع $f(x)$ یا معادل آن، تابع $g(x)$ به ازای یک مقدار $x > 0$ بیشینه ای داشته باشد، طول موج $\lambda_{(\max)}$ که در آن چگالی انرژی و در نتیجه توان گسیل بیشینه است با رابطه زیر داده می شود

$$\lambda_{(\max)} = \frac{b}{T} \quad (۵-۱)$$

که در آن b یک ثابت جهانی است. مقدار این ثابت، بنابه آزمایشهای اوتولومر و ای پرینگنرهایم (۱۸۹۷)، برابر است با $b = ۲۸۹۸ \text{ cm K}$.

۳. وین یک کاواک کروی کاملاً بازتابنده را در نظر گرفت که به طور بی دررو متقبض می شود. تغییر توزیع انرژی برحسب λ باید به علت انتقال دوپلر در بازتاب باشد. به فصل ۵ از کتاب زیر مراجعه کنید

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



شکل ۱-۱ تأیید تجربی رابطه ۲-۱ به صورت $u(\lambda, T)/T^5$ که یک تابع جهانی برحسب λT است.

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

$$g\left(\frac{\nu}{T}\right) = C e^{-\beta \nu/T} \quad (۶-۱)$$

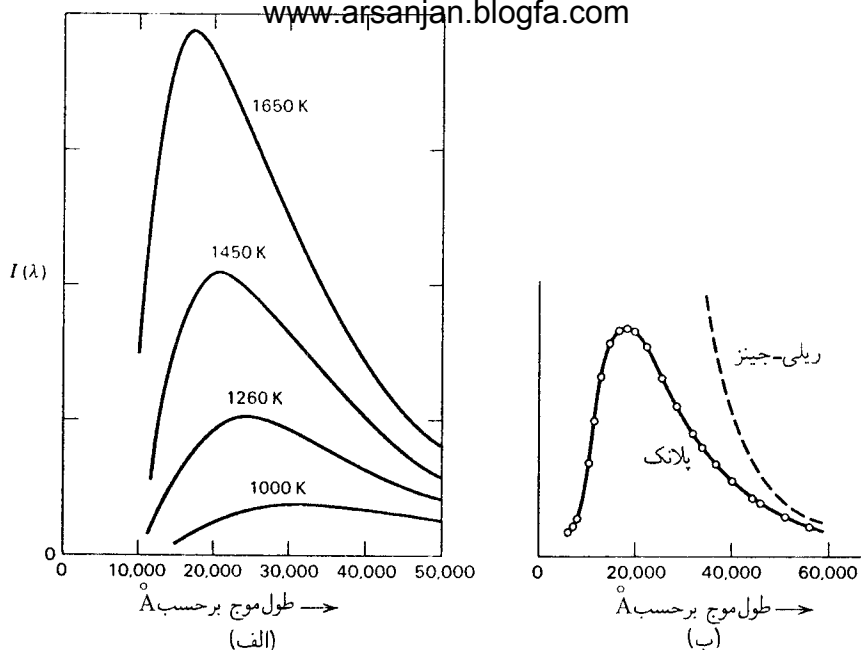
و بسیار عجیب است که این تابع، که حاوی دو پارامتر قابل تنظیم است، با داده‌های بسامد زیاد (طول موج کم) کاملاً جور در می‌آید، اما با بعضی از مفاهیم بسیار کلی فیزیک کلاسیک سازگار نیست. جان ویلیام استروت ریلی، در سال ۱۹۰۰، نتیجهٔ زیر را به دست آورد

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi \nu^2}{c^3} kT \quad (۷-۱)$$

که در آن k ثابت بولتزمن (1.38×10^{-17} erg/K) و c سرعت نور است، $(3 \times 10^{10}$ cm/s) است. محاسبهٔ فرمول ۷-۱ شامل دو قسمت بود: (۱) تعیین انرژی میانگین به ازای هر درجهٔ آزادی برای یک دستگاه دینامیکی در حال تعادل گرمایی بر مبنای قانون کلاسیک همپاری انرژی،^۴ و (۲) تعیین تعداد مدها (یعنی درجه‌های آزادی) برای تابش الکترومغناطیسی محبوس در یک کاواک با بسامدی در بازهٔ $(\nu, \nu + d\nu)$.^۵

۴. قانون همپاری پیش‌بینی می‌کند که انرژی میانگین به ازای هر درجهٔ آزادی $kT/2$ است. برای یک نوسانگر — و مدهای میدان الکترومغناطیسی نوسانگرهای هماهنگ ساده هستند — یک سهم $kT/2$ از انرژی جنبشی با یک سهم مساوی از انرژی پتانسیل جمع می‌شود و نتیجه kT است.

۵. تعداد این مدها $4\pi \nu^2/c^3$ است که باید در ۲ ضرب شود زیرا امواج الکترومغناطیسی، که عرضی‌اند، متناظر با



شکل ۲-۱ (الف) توزیع توان تابیده از جسم سیاه در دماهای مختلف. (ب) مقایسه داده‌های تجربی در 1600 K با فرمولهای پلانک و ریلی-جینز.

قانون ریلی-جینز ۷-۱ (جینز یک اشتباه جزئی در محاسبه ریلی را تصحیح کرد) در بسامدهای زیاد، برخلاف فرمول وین، با آزمایش توافق ندارد اما در بسامدهای کم بر منحنی تجربی منطبق است (شکل ۲-۱). قانون ریلی-جینز اساساً نمی‌تواند درست باشد، زیرا چگالی انرژی کل (انتگرال چگالی انرژی روی تمام بسامدها) را بینهایت پیش‌بینی می‌کند.

توزیع پلانک و کوانتوم انرژی

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

$$u(\nu, T) = \frac{\lambda \pi^2 h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad (\lambda-1)$$

در این فرمول، h ، ثابت پلانک، یک پارامتر قابل تنظیم است که معلوم شد مقدار آن برابر است با $6.63 \times 10^{-27} \text{ erg s}$. این قانون به‌ازای $h\nu/kT \ll 1$ به‌صورت قانون ریلی-جینز در می‌آید،

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

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

$$\begin{aligned}
 u(\nu, T) &= \frac{\lambda \pi h}{c^3} \nu^2 e^{-h\nu/kT} (1 - e^{-h\nu/kT})^{-1} \\
 &\cong \frac{\lambda \pi h}{c^3} \nu^2 e^{-h\nu/kT}
 \end{aligned} \quad (9-1)$$

اگر رابطه ۸-۱ را به صورت حاصلضرب تعداد مدها (که می‌توان آن را از تقسیم چگالی انرژی ۷-۱ بر kT به دست آورد) و عامل دیگری، که می‌توان آن را انرژی متوسط به ازای هر درجه آزادی تعبیر کرد، درآوریم:

$$\begin{aligned}
 u(\nu, T) &= \frac{\lambda \pi \nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} \\
 &= \frac{\lambda \pi \nu^2}{c^3} kT \frac{h\nu/kT}{e^{h\nu/kT} - 1}
 \end{aligned} \quad (10-1)$$

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

$$\begin{aligned}
 U(T) &= \frac{\lambda \pi h}{c^3} \int_0^\infty d\nu \frac{\nu^2}{e^{h\nu/kT} - 1} \\
 &= \frac{\lambda \pi h}{c^3} \left(\frac{kT}{h} \right)^3 \int_0^\infty \frac{(h\nu/kT)^2 d(h\nu/kT)}{e^{h\nu/kT} - 1} \\
 &= \frac{\lambda \pi k^3}{h^3 c^3} T^3 \int_0^\infty dx \frac{x^2}{e^x - 1}
 \end{aligned} \quad (11-1)$$

انتگرال را می‌توان محاسبه کرد،^۶ و نتیجه عبارت است از رابطه استفان-بولتزمن برای انرژی تابش کل در واحد حجم:

$$U(T) = aT^4 \quad (12-1 \text{ الف})$$

6. $\int_0^\infty dx x^2 (e^x - 1)^{-1} = \int_0^\infty dx x^2 e^{-x} \sum_{n=0}^\infty e^{-nx} = \sum_{n=0}^\infty \frac{1}{(n+1)^3} \int_0^\infty dy y^2 e^{-y} = 6 \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^3} = \frac{\pi^2}{15}$

که در آن $10^{15} \text{ erg/cm}^2 \text{K}^4$ www.sarsanjian-blogfa.com الف مدتها قبل با استفاده از استدلال ترمودینامیکی به دست آمده بود. این نتیجه را می توان به صورت توان گسیل کل جسم سیاه نیز نوشت:

$$E(T) = \sigma T^4 \quad (12-ب)$$

که در آن $\sigma = 5.67 \times 10^{-5} \text{ erg/cm}^2 \text{s K}^4$.

انحراف از قانون همپاری محض کاملاً هم غیرمنتظره نبود: یک پیامد قانون همپاری قانون گرمای ویژهٔ دولون-پتی بود که بنابه آن حاصلضرب وزن اتمی (یا مولکولی) و گرمای ویژه برای تمام جامدها مقداری ثابت است. اما انحرافهایی از پیش بینی های دولون-پتی از سال ۱۸۷۲ به بعد مشاهده شدند.^۷ این انحرافها نشان می دادند که گرمای ویژه در دماهای کم کاهش می یابد.^۸

موفقیت بی چون و چرای رابطهٔ ۸-۱ باعث شد که پلانک به جستجوی منشأ آن بپردازد و پس از دو ماه به این نتیجه رسید که می توان آن را با این فرض به دست آورد که انرژی وابسته به هر مد میدان الکترومغناطیسی به طور پیوسته (با مقدار میانگین kT) تغییر نمی کند بلکه مضرب درستی از یک کوانتوم انرژی کمینهٔ ϵ است. در این شرایط، با استفاده از توزیع احتمال بولتزمن برای دستگاهی در تعادل گرمایی در دمای T

$$P(E) = \frac{e^{-E/kT}}{\sum_E e^{-E/kT}} \quad (13-۱)$$

انرژی میانگین وابسته به هر مد را محاسبه می کنیم:

$$\begin{aligned} \bar{E} &= \sum_E E P(E) \\ &= \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n \epsilon e^{-n \epsilon / kT}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n \epsilon / kT}} \end{aligned}$$

۷. بنابه قانون همپاری، مجموعه ای از N نوسانگر — و شبکه ای از اتمها با نیروهای کشسان بین آنها را می توان چنین در نظر گرفت — دارای انرژی $3NkT$ است که در آن ضریب ۳ ناشی از این است که برخلاف نوسانگرهای مربوط به میدان تابش در کاواک که دوبعدی هستند، در یک جسم جامد نوسانگرها سه بعدی اند. گرمای ویژه برای یک مول از مشتق گیری نسبت به T و قرار دادن $N = N_0$ ، عدد آووگادرو، به دست می آید: $3R = 3N_0 k = C_v$ که در آن $R = 8.31 \times 10^7 \text{ erg/K}$.

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

$$\text{www.arsanjan.blogfa.com}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{-\epsilon \frac{d}{dx} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx}} \bigg|_{x=\epsilon/kT} \\ &= \epsilon \frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}} \bigg|_{x=\epsilon/kT} \\ &= \frac{\epsilon}{e^{\epsilon/kT} - 1} \quad (14-1) \end{aligned}$$

که با ۱-۱۰ سازگار است به شرط اینکه فرض کنیم

$$\epsilon = h\nu \quad (15-1)$$

و تعداد مدها را تغییر ندهیم.

پلانک استدلال کرد که به دلیل ناشناخته‌ای آنها در دیواره‌های کاواک تابش را به صورت "کوانتومهایی" با انرژی $n h \nu$ ($n = 1, 2, 3, \dots$) گسیل می‌کنند، اما به موجب سازگاری، چنانکه اینشتین چند سال بعد نشان داد، تابش الکترومغناطیسی به گونه‌ای رفتار می‌کند که انگار از مجموعه‌ای از کوانتومهای انرژی با انرژی $h\nu$ تشکیل شده است.^۹ انرژی که هر کوانتوم حمل می‌کند فوق‌العاده کم است. برای نور در ناحیه اپتیکی، با مثلاً $\lambda = 6000 \text{ \AA}$ داریم

$$h\nu = h \frac{c}{\lambda} = \frac{6.63 \times 10^{-27} \times 3.00 \times 10^{10}}{6 \times 10^{-5}} \simeq 3.3 \times 10^{-12} \text{ erg}$$

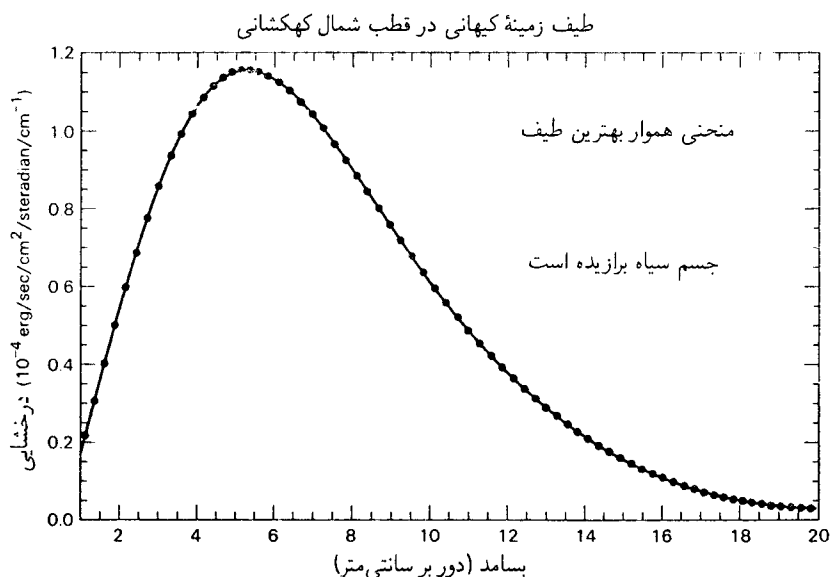
و در نتیجه تعداد کوانتومهای نور با این طول موج که به عنوان مثال از یک چشمه 100 واتی گسیل می‌شوند برابر است با

$$N = \frac{100 \times 10^7}{3.3 \times 10^{-12}} \simeq 3 \times 10^{19} \text{ quanta/s}$$

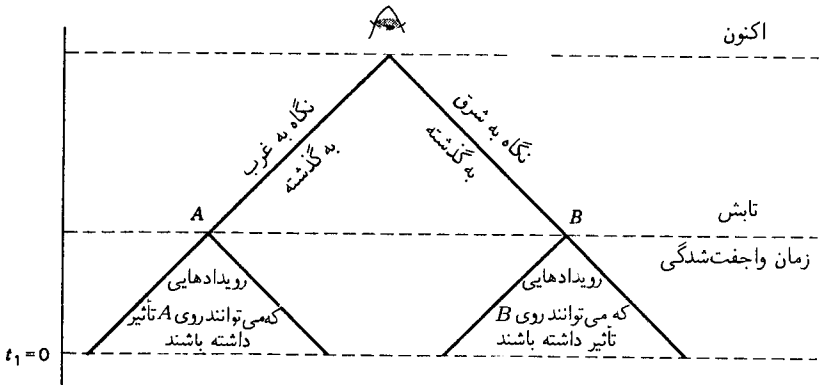
با این تعداد زیاد کوانتوم، شاید عجیب نباشد که ماهیت ذره‌ای نور را مستقیماً احساس نمی‌کنیم؛ خواهیم دید که در مقیاس ماکروسکوپی نباید هیچ انحرافی از اپتیک کلاسیک وجود داشته باشد. با این همه، تعبیری که پلانک از فرمول خود ارائه کرد در تصویری که از تابش داریم تغییر اساسی به وجود می‌آورد.

۹. به ازای یک بسامد معین ν ، کوانتومها می‌توانند با هر تعداد درست موجود باشند و در نتیجه انرژی می‌تواند مقادیر $n h \nu$ با $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ داشته باشد.

به علت پیشرفتهای ناشی از کشف زمینه‌ای در تابش کیهانی در ناحیه میکروموج توسط پنزیاس و ویلسون در سال ۱۹۶۴، تابش جسم سیاه در خط مقدم فیزیک قرار گرفته است. در اواخر دهه ۱۹۴۰، جورج گاموف، رالف آلفر، و رابرت هرمن بعضی از پیامدهای الگوی مهبانگ آفرینش جهان را مطالعه کردند. کار آنها، و محاسباتی که بعداً پیلس انجام داد، نشان داد که فراوانی کنونی هیدروژن در جهان را تنها به شرطی می‌توان درک کرد که مقدار زیادی تابش در مراحل کاملاً اولیه جهان وجود می‌داشت. انبساط جهان باعث سرد شدن ماده و تابش موجود در جهان شد، و وقتی دما به حدود 3000K رسید تابش دیگر برهم‌کنش عمده‌ای با ماده جهان نداشت زیرا الکترونهای آزاد توانستند با نوکلونها ترکیب شوند و آنها را تشکیل دهند. از آن زمان جهان نسبت به تابش شفاف شد، و دمای تابش با اندازه "جعبه"‌ای که حاوی این تابش است، یعنی جهان، به‌طور خطی افت کرد. مانده فعلی تابش در چند سال اخیر توسط ماهواره ناسای کوبه (کاوشگر زمینه کیهانی) مطالعه شده است. چنانکه شکل ۳-۱ نشان می‌دهد، طیف با دقت زیاد با توزیع جسم سیاه، مربوط به دمای کنونی 2.735K ، مطابقت دارد. این زمینه تابش جسم سیاه کیهانی داستان مهبانگ را تأیید می‌کند، و اطلاعاتی درباره انبساط جهان و همچنین شرایطی که در زمان واجفت‌شدگی ایجاد شدند به دست می‌دهد. تغییرات جزئی دما به صورت تابعی از راستا با حرکت منظومه شمسی نسبت به مرکز کهکشان، که با حرکت کهکشان ما به سمت خوشه کهکشانهای ویرگو (توده‌ای از ماده در فاصله حدود 50



شکل ۳-۱ نتایج اندازه‌گیریهای کوبه روی تابش زمینه.



شکل ۴-۱ مسئله افق: ناظری که تابش جسم سیاه زمینه را با نگاه کردن به شرق و غرب اندازه‌گیری می‌کند اثر شرایط در A و B در زمان واجفت‌شدگی را می‌بیند. در الگوی مهبانگ مرسوم، برابری دماها در A و B را نمی‌توان درک کرد زیرا در زمان مهبانگ ($t_1 = 0$) مخروطهای نور گذشته A و B روی هم نمی‌افتند. داستان تورم فرض می‌کند که در نخستین دوره پس از مهبانگ جهان متحمل یک انبساط انفجاری نمایی شده است، و در نتیجه هر دو ناحیه در گذشته A و B از یک ناحیه قدیمی‌تر و بسیار کوچکتر ناشی شده‌اند که در آن هیچ‌یک از این دو ناحیه خارج از قلمرو تأثیر یکدیگر نبوده‌اند. در نمودار بالا مقیاس ثابتی برای زمان رعایت نشده است زیرا بازه بین مهبانگ و اکنون از مرتبه 10^5 بار بزرگتر از بازه بین مهبانگ و زمان واجفت‌شدگی است.

میلیون سال نوری) ترکیب شده است، سازگار هستند. سرعت این حرکت از مرتبه 370 km/s است و ناهمگنی را می‌توان به انتقال دوپلر وابسته به این حرکت نسبت داد. اگر این اثر را حذف کنیم، دما با دقتی بهتر از 10^5 روی یک‌نواخت می‌شود. این همگنی کیهانشناسان را با مسئله‌ای مواجه کرده است. تابش جسم سیاه دریافت شده از یک راستای خاص در آسمان تابش از آن قسمت آسمان در زمان واجفت‌شدگی است (که البته به علت انبساط جهان از آن زمان انتقال به سرخ یافته است). یکسانی طیفهای تابش در قسمتهای کاملاً مختلف آسمان نشان‌دهنده برابری دماها در این قسمتهای آسمان در زمان واجفت‌شدگی است، اما چنین ناحیه‌هایی خارج از افق تأثیر یکدیگر هستند (به شکل ۴-۱ مراجعه کنید). در سال ۱۹۸۱ آلان گوت نظر داد که مراحل کاملاً اولیه مهبانگ شامل دوره‌ای با افزایش نمایی واقعاً سریع بوده‌اند، به طوری که می‌توانیم قسمتهای مختلف آسمان در زمان واجفت‌شدگی را به یک مبدأ مشترک منسوب کنیم مشکل همگنی فوق‌العاده تا اندازه‌ای کم شد، اما هنوز به‌سختی می‌شد تصور کرد که از ناهمگنیهایی که باید وجود می‌داشتند تا بذریه هم پیوستن ماده برای تشکیل کهنترین کهکشانها را بپاشند نباید ردهایی وجود داشته باشد. بنابراین، وقتی به کیهانشناسان از طرف گروه کوبه مژده رسید که ناهمگنیهایی در سطح $10^{-6} \times 5$ در دما یافت شده‌اند آنها نفسی به‌آسودگی کشیدند. باید امید داشت که اندازه‌گیریهای دقیقتر برای کمک به درک جزئیات جهان اولیه ادامه یابد.

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

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

۱. وقتی یک صفحه فلزی صیقلی شده در معرض نور قرار می‌گیرد ممکن است الکترون گسیل کند،^{۱۰} اما هیچ یون مثبتی گسیل نمی‌کند.

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

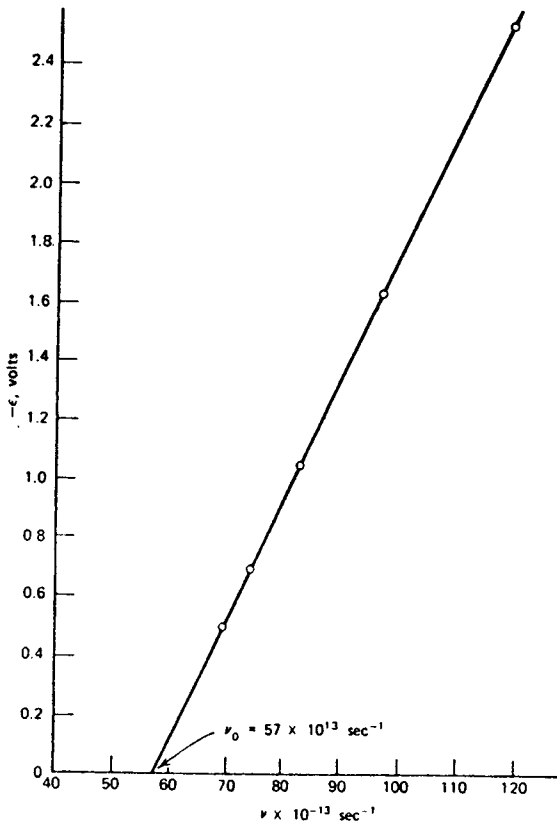
۳. بزرگی این جریان، اگر تولید شود، متناسب با شدت چشمه نور است.

۴. انرژی فوتوالکترون‌ها مستقل از شدت چشمه نور است اما با بسامد نور فرودی به صورت خطی تغییر می‌کند.

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

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

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



شکل ۵-۱ داده‌های اثر فوتوالکتریک در نموداری از پتانسیل بازدارنده لازم برای متوقف کردن شارش الکترون‌ها از یک فلز (لیتیم)، یا معادل آن انرژی جنبشی الکترون‌ها، برحسب بسامد نور فرودی. شیب خط h/e است.

سرعت الکترون v و بسامد نور ν برقرار باشد

$$\frac{1}{2}mv^2 = h\nu - W \quad (۱۶-۱)$$

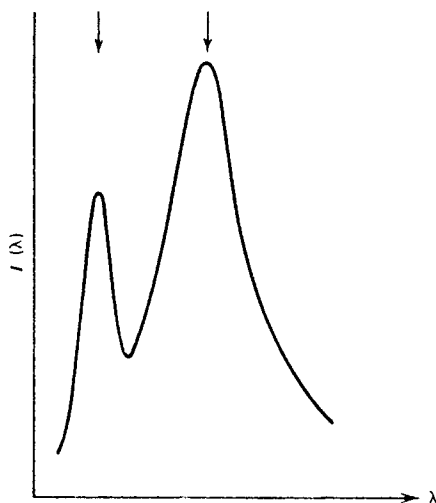
این فرمول متضمن وجود آستانه و رابطه خطی بین انرژی جنبشی الکترون و بسامد است. تناسب میان جریان و شدت چشمه را نیز می‌توان برحسب این کوانتومهای نور، که بعداً فوتون نامیده شدند، توضیح داد: چشمه نور هر چه شدیدتر باشد فوتونهای بیشتری گسیل می‌کند، و این فوتونها به نوبه خود می‌توانند الکترونهای بیشتری آزاد کنند.

رابرت آندروز میلیکان آزمایشهای مفصلی انجام داد و درستی فرمول اینشتین را به اثبات رساند (شکل ۵-۱). آنچه آزمایشهای میلیکان و بیش از او نشان دادند این بود که اولاً نورگاهی مانند مجموعه‌ای

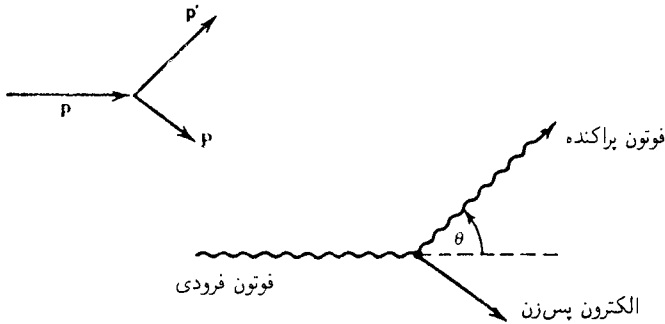
از ذره‌ها رفتار می‌کند، و ثانیاً این "ذرات" می‌توانند منفرداً عمل کنند، و در نتیجه می‌توان وجود یک فوتون منفرد را پذیرفت و خواص آن را بررسی کرد. معلوم شده است که تابع کار W از مرتبه چند الکترون ولت است ($1\text{eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{erg}$)، و این نتیجه را می‌توان به خواص دیگر فلزات مربوط کرد.

اثر کامپتون

آزمایشی که سراسر ترین مدرک ماهیت ذره‌ای تابش را در اختیار می‌گذارد اثر کامپتون است. آرتور هولی کامپتون کشف کرد تابشی با یک طول موج معین (در ناحیه پرتو x) که از یک ورقه فلزی می‌گذرد به گونه‌ای پراکنده می‌شود که با نظریه تابش کلاسیک سازگار نیست. بنابه نظریه کلاسیک، سازوکار این اثر عبارت است از تابش مجدد نور توسط الکترونهايي که با تابش فرودی به نوسان واداشته شده‌اند، و این منجر می‌شود به پیش‌بینی شدت مشاهده شده در زاویه θ به صورت $(1 + \cos^2 \theta)$ که به طول موج تابش فرودی بستگی ندارد. کامپتون دریافت که تابش پراکنده در یک زاویه معین عملاً از دو مؤلفه تشکیل می‌شود: مؤلفه‌ای که طول موج آن همان طول موج تابش فرودی است، و مؤلفه دیگری که طول موج آن نسبت به طول موج فرودی به مقداری که بستگی به زاویه دارد انتقال پیدا کرده است (شکل ۱-۶). کامپتون با در نظر گرفتن تابش فرودی به صورت باریکه‌ای از فوتونها که هر یک از آنها دارای انرژی $h\nu$ است و باعث پراکندگی کشسان یک الکترون منفرد می‌شود، توانست مؤلفه "تغییر یافته" را توضیح دهد. در یک برخورد کشسان، هم تکانه و هم انرژی باید پایسته باشند، و از این رو باید ابتدا تکانه‌ای به فوتون نسبت دهیم. با مقایسه با سینماتیک



شکل ۱-۶ طیف تابش پراکنده از کربن، نشاندهنده خط تغییر یافته در 0.708Å (که طول موج تابش اولیه است) در سمت چپ و خط انتقال یافته در 0.7214Å در سمت راست.



شکل ۷-۱ سینماتیک اثر کامپتون.

نسبیتی، نشان می‌دهیم که

$$p = \frac{h\nu}{c} \quad (۱۷-۱)$$

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

$$E = [(m_0 c^2)^2 + (pc)^2]^{1/2} \quad (۱۸-۱)$$

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

$$v = \frac{dE}{dp} = \frac{pc^2}{E} = \frac{pc^2}{(m_0^2 c^4 + p^2 c^2)^{1/2}} \quad (۱۹-۱)$$

برای فوتون این سرعت همیشه c است، و در نتیجه جرم سکون فوتون باید صفر باشد. بنابراین، رابطه ۱۸-۱ به صورت زیر در می‌آید

$$E = pc \quad (۲۰-۱)$$

که با جاگذاری $E = h\nu$ رابطه ۱۷-۱ را به دست می‌دهد. همچنین می‌توان ۲۰-۱ را از بررسی انرژی و تکانه موج الکترومغناطیسی به دست آورد اما اثبات قیاسی ساده‌تر است.

اکنون فوتونی با تکانه اولیه p در نظر بگیرید که با یک الکترون ساکن برخورد می‌کند. پس از برخورد، تکانه فوتون p' است و الکترون با تکانه P پس می‌زند. از پایستگی تکانه داریم (شکل ۷-۱)

که از آن به دست می آوریم

$$P^2 = (\mathbf{p} - \mathbf{p}')^2 = \mathbf{p}^2 + \mathbf{p}'^2 - 2\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}' \quad (22-1)$$

رابطه پایستگی انرژی به صورت زیر است

$$h\nu + mc^2 = h\nu' + (m^2c^4 + P^2c^2)^{1/2} \quad (23-1)$$

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

$$\begin{aligned} m^2c^4 + P^2c^2 &= (h\nu - h\nu' + mc^2)^2 \\ &= (h\nu - h\nu')^2 + 2mc^2(h\nu - h\nu') + m^2c^4 \end{aligned}$$

از طرف دیگر، ۲۲-۱ را می توان به صورت زیر نوشت

$$P^2 = \left(\frac{h\nu}{c}\right)^2 + \left(\frac{h\nu'}{c}\right)^2 - 2\frac{h\nu}{c} \cdot \frac{h\nu'}{c} \cos \theta$$

یا

$$P^2c^2 = (h\nu - h\nu')^2 + 2(h\nu)(h\nu')(1 - \cos \theta) \quad (24-1)$$

که در آن θ زاویه پراکندگی فوتون است. بنابراین،

$$h\nu'(1 - \cos \theta) = mc^2(\nu - \nu')$$

یا، هم ارز آن

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos \theta) \quad (25-1)$$

اندازه گیرهای مؤلفه تغییر یافته با این پیش بینی کاملاً توافق دارند. خط تغییر یافته ناشی از پراکندگی از تمام اتم است؛ اگر به جای m جرم اتم را قرار دهیم، انتقال طول موج بسیار کوچک می شود زیرا

جرم اتم چندین هزار برابر جرم الکترون است. کمیت h/mc که بعد طول دارد، طول موج کامپتون الکترون نامیده می‌شود، و اندازه آن برابر است با

$$\frac{h}{mc} \cong 2.4 \times 10^{-10} \text{ cm} \quad (26-1)$$

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

خواص موجی و پراش الکترون

در سال ۱۹۲۳، دوپروی از شباهت اصل فرما در اپتیک و اصل کمترین کنش در مکانیک به این نتیجه رسید که ماهیت دوگانه موجی-ذره‌ای تابش باید همتایی به‌صورت ماهیت دوگانه ذره‌ای-موجی ماده داشته باشد. بنابراین، ذرات باید در شرایط خاصی خواص موجی داشته باشند، و دوپروی رابطه‌ای برای طول موج وابسته به ذره به‌صورت زیر به‌دست آورد^{۱۱}

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (27-1)$$

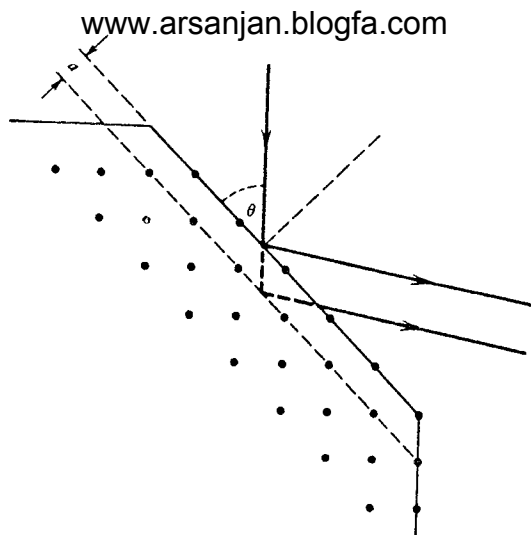
که در آن h ثابت پلانک و p تکانه ذره است. کار دوپروی توجه بسیاری را به‌خود جلب کرد، و اشخاصی بر آن شدند تا با مشاهده پراش الکترون آن را تأیید کنند.^{۱۲} مشاهده تجربی این اثر در آزمایشهای کلینتون جوزف دیویسون و گرم‌ر صورت گرفت. دیویسون و گرم‌ر دریافتند که در پراکندگی الکترونها از سطح یک بلور، پراکندگی ممتازی در بعضی راستاها دیده می‌شود.

شکل ۸-۱ تصویر ساده شده‌ای است از آنچه اتفاق می‌افتد. در پراکندگی امواج از یک ساختار دوره‌ای، اختلاف فازی بین امواجی که از “صفحه‌های” پراکننده مجاور می‌آیند ایجاد می‌شود که مقدار آن $2a \sin \theta$ ($2\pi/\lambda$) است. اگر این اختلاف فاز برابر با $2\pi n$ باشد، که در آن n یک عدد درست است، تداخل سازنده روی می‌دهد، یعنی وقتی که

$$\lambda = \frac{2a \sin \theta}{n} \quad (28-1)$$

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

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

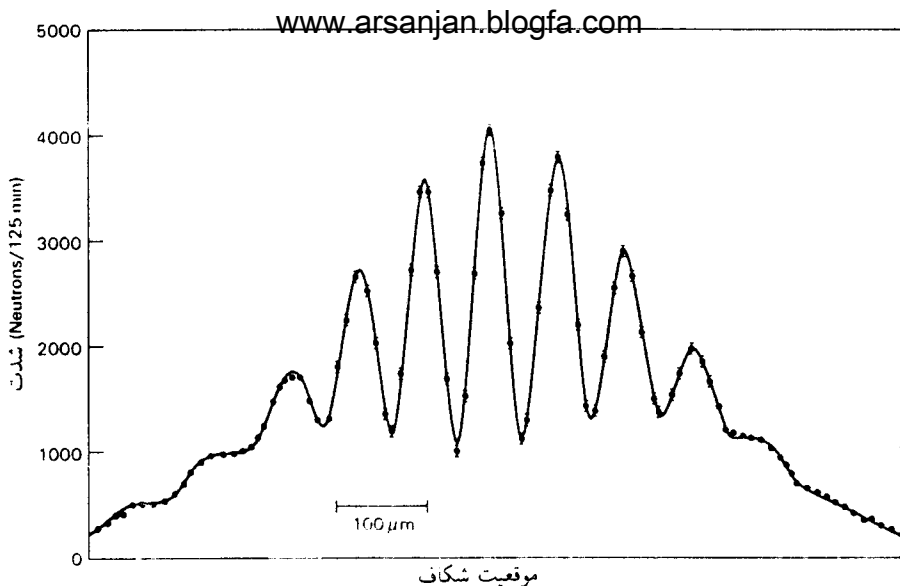


شکل ۸-۱ طرح کلی هندسه پراکندگی الکترون.

نقش تداخلی را که دیویسون و گرمر در پراکندگی الکترون مشاهده کردند می‌توان با توجه به رابطه ۲۷-۱ به فرمول بالا مربوط کرد. این تأیید گام مهمی در تکوین مکانیک موجی بود. آزمایشهای پراش ذره از آن پس با باریکه‌های مولکول هیدروژن و هلیوم، و با نوترونهای کند (شکل ۸-۱)، صورت گرفته‌اند. پراش نوترون مخصوصاً در مطالعه ساختار بلورها مفید است. برای اینکه تصویری از نوع انرژی‌هایی که برای این آزمایشهای پراش لازم‌اند به دست آوریم، متذکر می‌شویم که فاصله‌های بلوری از مرتبه آنگستروم هستند. این ثابت توری در آزمایش دیویسون-گرمر، که در آن از نیکل استفاده شد، برابر بود با $a = 2.15 \text{ \AA}$. بنابراین، λ از مرتبه 10^{-8} cm است، و در نتیجه $p = h/\lambda \cong 6.6 \times 10^{-19} \text{ gm cm/s}$. بدین ترتیب، انرژی جنبشی الکترون برابر است با $p^2/2m_e = (6.6 \times 10^{-19})^2 / (2 \times 9.1 \times 10^{-28}) \cong 2.5 \times 10^{-10} \text{ ergs}$ داریم

$$p^2/2m_n = (m_e/m_n) \times (\text{انرژی الکترون}) \cong (1/1836) \times 2.5 \times 10^{-10} \text{ ergs} \\ \cong 1.3 \times 10^{-13} \text{ ergs}$$

این انرژی‌ها برحسب واحد مناسبتر الکترون ولت به ترتیب تقریباً برابر با 16 eV و 8 eV هستند. در یک مقیاس ماکروسکوپی، جنبه‌های موجی ذره‌ها را نمی‌توان مشاهده کرد. طول موج دوپروی برای قطره‌ای به اندازه 1 mm که با سرعت 10 cm/s حرکت می‌کند برابر است با 10^{-12} cm و $10^{-27} / (4 \times 10^{-5}) \cong 6.6 \times 10^{-23} \text{ cm}$ چون "اندازه" پروتون حدود 10^{-12} cm



شکل ۹-۱ نقش پراش دوشکافی با طول موج $\lambda \approx 185 \text{ \AA}$.

است، بدیهی است که هیچ راهی برای مشاهده خواص موجی جسمی که اندازه آن بسیار بیشتر از 10^{-10} cm است وجود ندارد. در مورد خواص ذره‌ای تابش، این کوچکی λ است که ویژگیهای کلاسیک را تعیین می‌کند، به این معنی که جنبه‌های دوگانه تنها وقتی ظاهر می‌شوند که حاصلضرب تکانه و اندازه از مرتبه λ باشد. خواهیم دید که صورتبندی مکانیک کوانتومی بین وضعیت r به خور نوصیف می‌کند.

اتم بور

الگوی سیاره‌ای رادرفورد

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

۱۳. اهناس مجاز از مقاله

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

که به طور شگفت‌انگیزی بزرگ بود در زاویه‌های بزرگ پراکنده می‌شود، و این نتیجه با پیش‌بینیهای مبتنی بر الگوی اتمی تامسون کاملاً ناسازگار بود. در الگوی تامسون فرض شده است که الکترون‌ها در توزیعی از بار مثبت که حجم تمام اتم را تشکیل می‌دهد غوطه‌ور هستند. الکترون‌ها ذرات e^- را منحرف نمی‌کنند زیرا جرم آنها 10^4 بار کوچکتر است. بنابراین، بار مثبت باید باعث انحراف ذرات e^- باشد، و انحراف بزرگ‌زاویه ایجاد می‌کند که پتانسیل در سطح توزیع بار بزرگ باشد. این به نوبه خود ایجاد می‌کند که بار مثبت به ناحیه‌ای بسیار کوچکتر از حجم اتم محدود باشد. رادفورد الگوی جدیدی را پیشنهاد کرد که این داده‌ها را توجیه می‌کرد. در این الگو، تمام بار مثبت (و تقریباً تمام جرم) اتم در ناحیه کوچکی در وسط اتم متمرکز شده است. این هسته باردار مثبت الکترون‌های باردار منفی را جذب می‌کند و چون قانون نیرو به صورت $1/r^2$ است الکترون‌ها در مدارهای دایره‌ای یا بیضوی حول هسته حرکت می‌کنند.

این الگو اگرچه توجیه کمی مناسبی برای داده‌های پراکندگی ذرات e^- به دست می‌داد اما با دو مشکل حل‌نشدنی مواجه بود. از آنجا که این الگو مستلزم حرکتی دوره‌ای برای الکترون‌ها بود نمی‌توانست طیفهای تابش ناشی از آنها را توضیح دهد، که ساختار همافنگ منتظره‌ای (در قیاس با ریسمان مرتعش) ندارند و ساختار آنها به صورت زیر است

$$\frac{1}{\lambda} = \text{const.} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (29-1)$$

که در آن n_1 و n_2 اعداد درست هستند. این الگو همچنین سازوکاری برای پایداری آنها نداشت: یک الکترون در مدار دایره‌ای یا بیضوی دائماً شتاب دارد و بنابه نظریه الکترومغناطیس باید تابش کند. اتلاف مداوم انرژی با سقوط الکترون‌ها به درون هسته در مدت زمان بسیار کوتاهی (از مرتبه 10^{-18} s) به رمبش اتم منجر می‌شود.

اصول موضوعه بور

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

۱. الکترون‌ها در مدارهایی حرکت می‌کنند که مقید به این شرط هستند که تکانه زاویه‌ای آنها مضربی درستی از $h/2\pi$ باشد، یعنی، برای مدارهای دایره‌ای به شعاع r ، سرعت v الکترون‌ها محدود به رابطه زیر است

$$mvr = \frac{nh}{2\pi} \quad (30-1)$$

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

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

$$\nu = \frac{E - E'}{h} \quad (31-1)$$

اتم می‌تواند با جذب تابش الکترونهای خود را وادار به گذار به مداری با انرژی بیشتر کند. اگر مدارهای دایره‌ای را در نظر بگیریم،^{۱۴} پیامدهای این اصول برای اتمهای تک‌الکترونی مانند هیدروژن، هلیوم یک بار یونیده، و غیره را می‌توان به آسانی به دست آورد. اگر بار هسته Ze ، بار الکترون $-e$ ، و شعاع مدار r باشد، و اگر جرم هسته را بینهایت بگیریم، از موازنه نیروی کولن با نیروی مرکزگیز داریم

$$\frac{Ze^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} \quad (32-1)$$

از ترکیب این رابطه با ۱-۳۰ به رابطه‌های زیر می‌رسیم

$$v = \frac{2\pi e^2 Z}{hn} \quad (33-1)$$

و

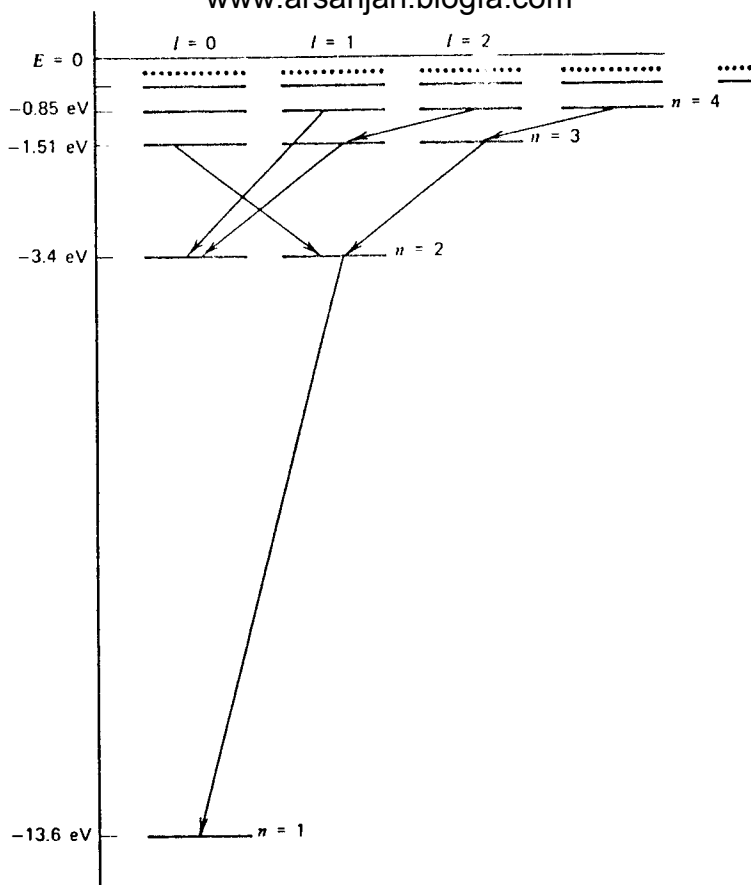
$$r = \frac{1}{4\pi^2} \frac{n^2 h^2}{Ze^2 m} \quad (34-1)$$

انرژی برابر است با

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{Ze^2}{r} = -\frac{2\pi^2 e^4 Z^2 m}{h^2 n^2} \quad (35-1)$$

که از آن با توجه به اصل موضوعه ۲ بلافاصله رابطه کلی ۱-۲۹ به دست می‌آید (شکل ۱-۱۰). پیش از محاسبه این کمیتها برای به دست آوردن تصویری از اندازه آنها، بعضی نمادهای بسیار مفید را معرفی می‌کنیم. اولاً، در اکثر فرمولهای مکانیک کوانتومی $h/2\pi$ بیشتر از h ظاهر می‌شود،

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



شکل ۱-۱۰ طیف اتم هیدروژن براساس الگوی اتمی بور. وجود اعداد کوانتومی l از بحث مدارهای بیضوی نتیجه می‌شود. خطهای واصل ترازهای انرژی بعضی از گذارهای اتمی غالب را نشان می‌دهند.

و از این رو آن را با یک نماد خاص نشان می‌دهیم:

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.0545 \times 10^{-27} \text{ erg s} \quad (36-1)$$

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

$$\omega = 2\pi\nu \quad (37-1)$$

بنابراین، ۱۳-۱ به صورت زیر در می‌آید

$$\omega = \frac{E - E'}{h} \quad (38-1)$$

همچنین، کوانتوم تابش حامل انرژی زیر است

$$E = h\omega \quad (39-1)$$

ثالثاً، گاهی مناسبتر است از "طول موج کاهیده" استفاده کنیم:

$$\lambda = \frac{\lambda}{2\pi} = \frac{c}{\omega} \quad (40-1)$$

بنابراین، رابطه دوبروی به صورت زیر نوشته می‌شود

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (41-1)$$

شرط کوانتش تکانه زاویه‌ای بور به صورت زیر در می‌آید

$$mvr = nh (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (42-1)$$

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

$$\alpha = \frac{e^2}{hc} = \frac{1}{137.0388} \quad (43-1)$$

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

$$\frac{v}{c} = \frac{Z\alpha}{n} \quad r = \frac{n^2}{Z\alpha} \frac{h}{mc} \quad (44-1)$$

و

$$E = -\frac{1}{2} mc^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \quad (45-1)$$

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

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

$$\begin{aligned} mc^2 &\cong 0.51 \times 10^6 \text{ eV} \\ &\cong 0.51 \text{ MeV} \\ \frac{h}{mc} &\cong 3.9 \times 10^{-11} \text{ cm} \\ \frac{h}{mc^2} &\cong 1.3 \times 10^{-21} \text{ s} \end{aligned} \quad (46-1)$$

نتیجه می‌گیریم که

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

$$a_0 = \frac{137}{Z} \frac{h}{mc} = \frac{0.53}{Z} \text{ \AA} \quad (47-1)$$

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

$$E = \frac{1}{2} mc^2 (Z\alpha)^2 = 13.6 Z^2 \text{ eV} \quad (48-1)$$

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

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

طول موج متناظر با آن برابر است با

$$\lambda = 2\pi \frac{c}{\omega} = \frac{16\pi}{3\alpha^2} \frac{h}{mc} \\ \cong 1200 \text{ \AA}$$

که در ناحیه فرابنفش قرار دارد.

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

$$\int_{\text{مسیر بسته}} p \, dq = nh \quad (1-49)$$

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

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

اصل تطابق

نیز بور از این فکر که نظریه کوانتومی او باید هر جا نظریه کلاسیک کارایی دارد در آن ادغام شود بهره فراوان گرفت. این فکر به صورت اصل تطابق فرمولبندی شد. به زبان فنی، این اصل می‌گوید وقتی "اعداد کوانتومی" بزرگ باشند، مثلاً به ازای n بزرگ در اتم بور، حد کلاسیک باید احراز شود. البته همینکه یک نظریه سازگار برای پدیده‌های کوانتومی ساخته شد خود به خود فیزیک کلاسیک را به عنوان یک حد در بر دارد، اما این اصل در راهنمایی به حدسه‌های نظری بسیار مفید بوده است، و همین اصل بود که هاینبرگ را به مرحله‌ای رهنمون شد که توانست پرش غول‌آسای خود را به سمت مکانیک کوانتومی انجام دهد. برای اینکه نشان دهیم چگونه اصل تطابق برای الگوی اتمی بور صادق است، بسامد تابش گسیل‌شده را وقتی الکترون از مداری با عدد کوانتومی $n+1$ ، که در آن n بسیار بزرگ است، به مداری با عدد کوانتومی n "جهش" می‌کند در نظر می‌گیریم. این زمینه مناسبی برای جستجوی حد کلاسیک است، زیرا تکانه زاویه‌ای nh واقعاً بسیار بزرگتر از h است. اگر لحظه کلاسیک، الکترونی که با سرعت v در مدار دایره‌ای حرکت می‌کند باید با بسامد

$$\nu_{cl} = \frac{v}{2\pi r} = \frac{Z\alpha c}{n} \frac{Z\alpha mc}{2\pi n^2 \hbar} = \frac{(Z\alpha)^2 mc^2}{2\pi \hbar} \frac{1}{n^2} \quad (۵۰-۱)$$

از طرف دیگر، بسامد تابش وابسته به این گذار، بنابه ۱-۳۱، برابر است با

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

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

مسئله ذره-موج

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

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

۱۵. آزمایش ذهنی آزمایشی است که می‌توان آن را به تصور درآورد، یعنی آزمایشی که با قوانین شناخته فیزیک سازگار است اما از لحاظ فنی نمی‌توان آن را انجام داد. به عنوان مثال، اندازه‌گیری شتاب ناشی از گرانی در سطح خورشید یک آزمایش ذهنی است، در حالی که اندازه‌گیری انتقال دوپلری برای نور خورشید در سفینه‌ای که با دو برابر سرعت نور حرکت می‌کند بی‌معنی است.

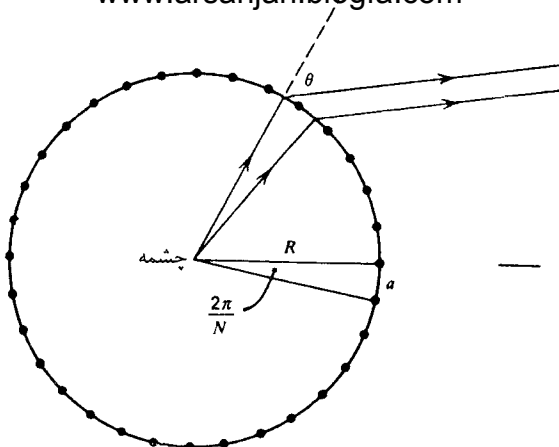
“۲”، می‌توانیم فوتون‌ها را به دو دسته، وابسته به دو شکاف، تقسیم کنیم. برای دسته اول، می‌توانستیم شکاف ۲ را ببندیم، زیرا فوتون از آن نمی‌گذشت؛ برای دسته دوم، می‌توانستیم شکاف ۱ را ببندیم. بنابراین، اگر آزمایش را با یک شکاف بسته در نیمی از زمان، و شکاف بسته دیگر در نیمه دیگر زمان، تکرار کنیم انتظار داریم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

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

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

۴. گاهی ممکن است یک آزمایش معین را هم به زبان ذره‌ای و هم به زبان موجی تعبیر کرد، اما ارتباط میان این دو توصیف مکمل یک جنبه غیرکلاسیک در جای دیگری وارد می‌کند. دیکی و ویتکه^{۱۶} آزمایش ذهنی زیر را ابداع کرده‌اند (شکل ۱-۱۱). یک قفس استوانه‌ای در نظر بگیرید که میله‌های آن به‌طور منظم و با فاصله زیر از یکدیگر قرار گرفته‌اند

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



شکل ۱۱-۱ مقطع عرضی "قفس" دیکی-ویتکه، که میله‌های هم‌فاصله و کمیتهای هندسی مربوط به آنرا نشان می‌دهد.

که در آن R شعاع استوانه و N تعداد میله‌ها است. تابش گسیل شده از چشمه‌ای روی محور استوانه را در نظر بگیرید. میله‌ها به صورت توری پراش عمل می‌کنند. اگر باریکه در زاویه θ نسبت به راستای اولیه‌اش خارج شود، شدت به شرطی بیشینه است که زاویه و طول موج در رابطه زیر صدق کنند

$$a \sin \theta = n\lambda \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

یعنی

$$\lambda = \frac{2\pi R \sin \theta}{Nn} \quad (52-1)$$

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

$$L = pR \sin \theta \quad (53-1)$$

اما اگر از رابطه دوبروی، $p = 2\pi h/\lambda$ ، استفاده کنیم به دست می‌آوریم

$$L = \frac{2\pi h N n}{2\pi R \sin \theta} \cdot R \sin \theta = N n h \quad (54-1)$$

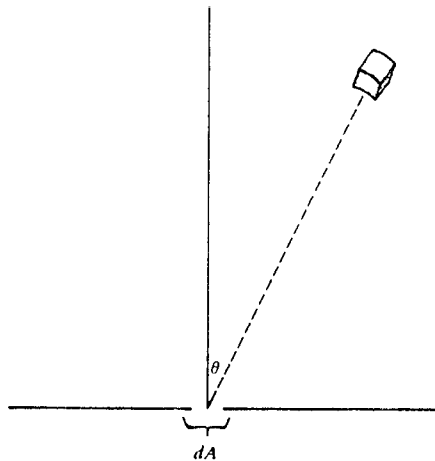
یعنی، تکانه زاویه‌ای کوانتیده است! عامل N ، چنانکه بعداً روشن خواهد شد، به این واقعیت مربوط می‌شود که اگر قفس را به اندازه زاویه $2\pi/N$ بچرخانیم تغییری در وضعیت آن داده نمی‌شود.

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

مسائل

۱-۱ رابطه ۱-۱ میان چگالی انرژی در کاواک و توان گسیل را ثابت کنید.

[راهنمایی: برای این کار، از شکل زیر استفاده کنید. بزرگی جزء حجم dV برابر است با $d\phi \sin\theta \, d\theta \, dr$ که در آن r فاصله از مبدأ (واقع در روزه‌ای به مساحت dA)، θ زاویه با محور قائم، و ϕ زاویه سمتی حول محور عمود بر روزه است. انرژی موجود در این جزء حجم برابر است با dV ضرب در چگالی انرژی. تابش همسانگرد است، بنابراین آنچه خارج می‌شود حاصلضرب زاویه فضایی $dA \cos\theta / 4\pi r^2$ در انرژی است. از این رابطه باید روی زاویه‌های ϕ و θ ، و اگر شارش انرژی در زمان Δt مورد نظر باشد، روی r از 0 تا $c\Delta t$ — فاصله‌ای که تابش در این بازه می‌پیماید — انتگرال گرفت.]



۲-۱ با استفاده از ۱-۱ و ۱۲-۱، فرمولی برای آهنگ کل تابش در واحد سطح جسم سیاه به دست آورید. فرض کنید خورشید مانند جسم سیاه تابش می‌کند. شعاع خورشید $R_{\odot} = 7 \times 10^8 \text{ cm}$ ، فاصله متوسط خورشید از زمین $d_{\odot} = 1.5 \times 10^{12} \text{ cm}$ ، و ثابت خورشیدی، یعنی مقدار انرژی

که از خورشید وقتی بالای سر است به زمین می‌رسد، برابر است با $1.4 \times 10^6 \text{ erg/cm}^2 \text{ s}$. با توجه به این اطلاعات، دمای سطح خورشید را برآورد کنید.

۳-۱ با استفاده از $\lambda - 1$ ، چگالی انرژی در بازه طول موج $\Delta\lambda$ را به دست آورید. با استفاده از این جواب، مقدار $\lambda = \lambda_{(\max)}$ را، که به ازای آن این چگالی بیشینه است، محاسبه کنید. نشان دهید $\lambda_{(\max)}$ به صورت b/T است، و b را به دست آورید. با استفاده از برآورد دمای سطح خورشید، $\lambda_{(\max)}$ را برای تابش خورشیدی تعیین کنید.

[راهنمایی: در محاسبه b به جواب معادله $(\lambda - x) = \lambda e^{-x}$ نیاز دارید. این معادله را به روش نموداری یا روش تقریبهای متوالی، که در آن ابتدا قرار می‌دهید $x = 5 - \epsilon$ (با $\epsilon \ll 1$)، حل کنید.]

۴-۱ نور فرابنفش با طول موج 3500 \AA به سطح پتاسیم می‌تابد. بیشینه انرژی فوتوالکترونها 1.6 eV است. مقدار تابع کار پتاسیم را محاسبه کنید؟

۵-۱ بیشینه انرژی فوتوالکترونها ناشی از آلومینیم برای تابش 2000 \AA برابر با 2.3 eV و برای تابش 2580 \AA برابر با 0.9 eV است. با استفاده از این داده‌ها، ثابت پلانک و تابع کار آلومینیم را به دست آورید.

۶-۱ یک فوتون 100 MeV به یک پروتون ساکن برخورد می‌کند. بیشترین اتلاف انرژی ممکن برای این فوتون چقدر است؟

۷-۱ یک فوتون 100 keV با یک الکترون ساکن برخورد می‌کند و در زاویه 90° پراکنده می‌شود. انرژی فوتون بعد از پراکندگی چقدر است؟ راستای پس‌زدن الکترون و انرژی جنبشی آن را برحسب الکترون ولت به دست آورید.

۸-۱ الکترونی با انرژی 100 MeV با فوتونی به طول موج 10^4 \AA $3 \times$ (مربوط به زمینه جهانی تابش جسم سیاه) برخورد می‌کند. بیشترین انرژی که این الکترون از دست می‌دهد چقدر است؟

۹-۱ باریکه‌ای از پرتوهای x توسط الکترونها ساکن پراکنده می‌شود. اگر طول موج پرتوهای x که در زاویه 60° نسبت به محور باریکه پراکنده شده‌اند 35 \AA باشد، انرژی پرتوهای x باریکه را به دست آورید.

۱۰-۱ یک هسته نیتروژن (با جرم تقریبی $14 \times$ جرم پروتون) فوتونی با انرژی 6.2 MeV گسیل می‌کند. اگر این هسته در ابتدا ساکن باشد، انرژی پس‌زنی هسته (برحسب الکترون ولت) چقدر است؟

۱۱-۱ بلوری با فاصله صفحات 3.2 \AA را در نظر بگیرید. مقدار انرژی (الف) الکترونها و (ب) هسته‌های هلیوم (با جرم تقریبی $4 \times$ جرم پروتون) چقدر باید باشد تا حداکثر سه بیشینه تداخل را مشاهده کنیم؟

۱۲-۱ کوچکترین فاصله تفکیک‌پذیر برای میکروسکوپ از مرتبه بزرگی طول موج به کار رفته است. در یک میکروسکوپ الکترونی، مقدار انرژی الکترونها چقدر باید باشد تا فاصله‌های (الف) 150 \AA و (ب) 5 \AA را تفکیک کند؟

۱۳-۱ اگر فرض کنیم که در یک حالت مانای اتم هیدروژن الکترون در مداری دایره‌ای قرار می‌گیرد که محیط آن مضرب درستی از طول موج الکترون است، می‌توان نتایج نظریه بور را به دست آورد. این کار را انجام دهید.

۱۴-۱ می‌خواهیم فاصله میان صفحه‌های مجاور در یک بلور را اندازه بگیریم. اگر پرتوهای x با طول موج 5\AA در زاویه 5° آشکارسازی شوند، این فاصله چقدر است؟ بیشینه دوم در چه زاویه‌ای مشاهده می‌شود؟

۱۵-۱ با استفاده از قاعده‌های کوانتش بور، ترازهای انرژی یک نوسانگر هماهنگ را، که برای آن انرژی $2, p^2/2m + m\omega^2 r^2$ یعنی نیرو $m\omega^2 r$ است، به دست آورید. تنها مدارهای دایره‌ای را در نظر بگیرید. مانسته فرمول ری‌دبرگ را تعیین کنید. نشان دهید که اصل تطابق برای تمام مقادیر عدد کوانتومی n که در کوانتش تکانه زاویه‌ای به کار می‌رود صادق است.

۱۶-۱ با استفاده از قاعده‌های کوانتش بور، حالت‌های انرژی را به ازای پتانسیل زیر محاسبه کنید

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

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

۱۷-۱ در نظریه کلاسیک، توان، تابش شده توسط بار شتابدار e با فرمول کلاسیک زیر داده می‌شود

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

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

۱۸-۱ آهنگ واپاشی برای الکترون در یک مدار را می‌توان به صورت توان تابیده P تقسیم بر انرژی گسیل شده در واپاشی تعریف کرد. با استفاده از رابطه انرژی تابیده در نظریه بور و رابطه P از مسئله ۱۷، مقدار "تطابق" آهنگ واپاشی را وقتی الکترون یک گذار از مدار n به مدار $n-1$ انجام می‌دهد به دست آورید. مقدار این آهنگ واپاشی را برای $n=2$ محاسبه کنید. (این مقدار با نتیجه واقعی نظریه کوانتومی دقیقاً توافق ندارد، زیرا اصل تطابق برای مقادیر کوچک عدد کوانتومی صادق نیست.) آهنگ واپاشی را برای گذار از مدار n به مدار $n-m$ به دست آورید. طول عمر را، که مساوی با معکوس آهنگ واپاشی است، تعیین کنید.

۱۹-۱ انرژی کلاسیک برای یک چرخنده تخت برابر است با

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

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

۱-۲ مولکول‌ها گاهی مانند چرخنده‌ها رفتار می‌کنند. اگر طیفهای دورانی با تابشی مشخص شوند که طول موج آن از مرتبه 10^7 \AA است و این مشخصه برای برآورد فاصله‌های بین اتمی در مولکول مانند H_2 به کار رود، چه نوع فاصله‌هایی را (برحسب \AA) به دست می‌آوریم.

مراجع

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

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

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

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

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

بسته‌های موج و رابطه‌های عدم قطعیت

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

بسته‌های موج جایگزیده

تصور بیکر بندی ذراتی که به نحوی رفتار موجی از خود نشان می‌دهند مشکل است. به همین دلیل بود که آزمایشهای کلاسیک پراش فرنل و یانگ باعث پذیرش همگانی نظریه موجی نور شدند. از

۱. رهیافت دیگری را می‌توان در کتاب زیر یافت

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

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

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk \, g(k) e^{ikx} \quad (۱-۲)$$

قسمت حقیقی $f(x)$ با $\int_{-\infty}^{\infty} dk \, g(k) \cos kx$ داده می‌شود که برهم‌نهی خطی امواجی با طول موج $\lambda = 2\pi/k$ است، زیرا به‌ازای یک k ی معین وقتی x به $x + 2\pi/k$ تغییر می‌کند هر موج مجدداً تکرار می‌شود. برای روشن شدن مطلب، $g(k)$ را به‌صورت زیر انتخاب می‌کنیم

$$g(k) = e^{-\alpha(k-k_0)^2} \quad (۲-۲)$$

انتگرال ۱-۲ را می‌توان محاسبه کرد. با $k' = k - k_0$ داریم

$$\begin{aligned} f(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} dk \, g(k) e^{i(k-k_0)x} e^{ik_0 x} \\ &= e^{ik_0 x} \int_{-\infty}^{\infty} dk' \, e^{ik'x} e^{-\alpha k'^2} \\ &= e^{ik_0 x} \int_{-\infty}^{\infty} dk' \, e^{-\alpha[k' - (ix/2\alpha)]^2} e^{-(x^2/4\alpha)} \end{aligned}$$

در گام آخر عمل کامل کردن مجذور را انجام داده‌ایم. می‌توان نوشت $q = k' - (ix/2\alpha)$ و باز هم انتگرال را روی محور حقیقی نگه داشت.^۲ با استفاده از

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk \, e^{-\alpha k^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad (۳-۲)$$

به‌دست می‌آوریم

$$f(x) = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{ik_0 x} e^{-(x^2/4\alpha)} \quad (۴-۲)$$

۲. برای خواننده‌ای که با نظریه متغیرهای مختلط آشنا باشد توجه این کار چندان مشکل نیست.

$e^{ik \cdot x}$ را “عامل فاز” می‌نامیم، زیرا $|e^{ik \cdot x}|^2 = 1$. بنابراین، مجذور قدرمطلق $f(x)$ برابر است با

$$|f(x)|^2 = \frac{\pi}{\alpha} e^{-x^2/\alpha} \quad (5-2)$$

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

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

$$\Delta k \Delta x \sim \frac{2}{\sqrt{2\alpha}} \cdot 2\sqrt{2\alpha} = 4 \quad (6-2)$$

مقدار دقیق ثابت عددی اهمیت ندارد؛ آنچه اهمیت دارد این است که این مقدار به α بستگی ندارد و از مرتبه واحد است. این یک ویژگی کلی توابعی است که تبدیلیهای فوری یکدیگرند (شکل ۱-۲). این نتیجه را با فرمول زیر نشان می‌دهیم

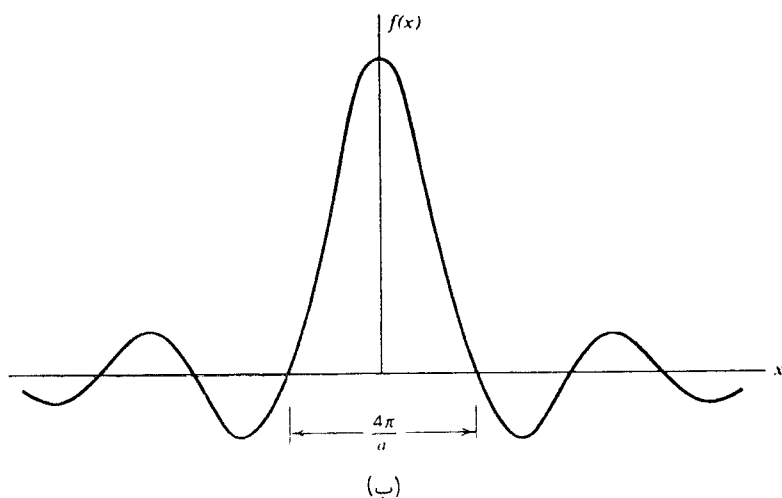
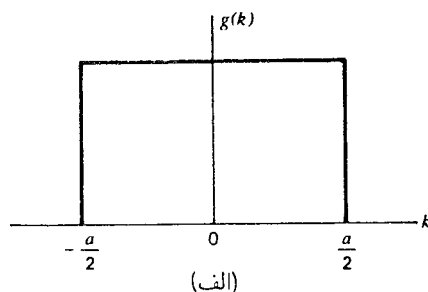
$$\Delta x \Delta k \gtrsim O(1) \quad (7-2)$$

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

انتشار بسته‌های موج

در رابطه ۱-۲ تابع $f(x)$ از برهم‌نهی پیوسته‌ای از امواج ساده e^{ikx} ساخته شده است. این بسته موج چگونه در زمان منتشر می‌شود؟ پاسخ این سؤال به چگونگی انتشار تک‌تک امواج بستگی دارد. موج تخت ساده را عموماً به صورت زیر خواهیم نوشت (این نامگذاری به این دلیل است که تغییر فضایی موج تنها در راستای x است و به دو مختصه دیگر y و z بستگی ندارد)

$$e^{ikx - i\omega t} \quad (8-2)$$



شکل ۱-۲ رابطه میان بسته موج و تبدیل فوری آن برای یک بسته موج مربعی شکل.

در اینجا $\omega = 2\pi\nu$ بسامد زاویه‌ای است. رابطه کمیت k با طول موج عبارت است از $k = 2\pi/\lambda$. بنابراین، می‌توان موج ساده بالا را به صورت

$$e^{2\pi i[(x/\lambda) - \nu t]} \quad (۹-۲)$$

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

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

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

$$f(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk g(k) e^{ik(x-ct)} = f(x-ct) \quad (۱۰-۲)$$

این بسته موج همان شکلی را دارد که در $t = 0$ داشت، بجز اینکه اکنون به جای جایگزیدگی در $x = 0$ در $x - ct = 0$ جایگزیده است. بنابراین، بسته موج نور با سرعت نور c در خلا بدون واپس‌چسب منتشر می‌شود.

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

$$f(x, t) = \int dk g(k) e^{ikx - i\omega(k)t} \quad (۱۱-۲)$$

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

بسته موجی را در نظر می‌گیریم که در فضای k حول مقدار k_0 ، شدیداً جایگزیده است. این بسته موج متناظر با انتخاب تابعی مانند ۲-۲ با ω بزرگ است. البته این بسته موج در فضای x دقیقاً جایگزیده نیست، اما محاسبه ما آسانتر می‌شود، و علاوه بر این می‌خواهیم حدسهای هوشمندانه‌ای بزنیم. چون سهم عمده انتگرال ۱۱-۲ بیشتر در اطراف $k = k_0$ است، $\omega(k)$ را حول k_0 بسط می‌دهیم و فرض می‌کنیم $\omega(k)$ برحسب k به سرعت تغییر نمی‌کند. بنابراین، می‌توان نوشت

$$\omega(k) \approx \omega(k_0) + (k - k_0) \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} + \frac{1}{2} (k - k_0)^2 \left(\frac{d^2\omega}{dk^2} \right)_{k_0} \quad (۱۲-۲)$$

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

$$\left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} = v_g \quad (۱۳-۲)$$

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

$$\frac{1}{2} \left(\frac{d^2 \omega}{dk^2} \right)_{k_0} = \beta \quad (۱۴-۲)$$

و با $k - k_0 = k'$ وابستگی زمانی این بسته موج به صورت زیر در می‌آید

$$\begin{aligned} f(x, t) &= e^{ik_0 x - i\omega(k_0)t} \int_{-\infty}^{\infty} dk' e^{-\alpha k'^2} e^{ik'(x - v_g t)} e^{-ik'^2 \beta t} \\ &= e^{ik_0 x - i\omega(k_0)t} \int_{-\infty}^{\infty} dk' e^{ik'(x - v_g t)} e^{-(\alpha + i\beta t)k'^2} \end{aligned} \quad (۱۵-۲)$$

این درست همان انتگرالی است که به ۴-۲ منجر شد و در آن $x - v_g t$ به جای x و $\alpha + i\beta t$ به جای α نشسته است. بنابراین، داریم

$$f(x, t) = e^{i[k_0 x - \omega(k_0)t]} \left(\frac{\pi}{\alpha + i\beta t} \right)^{1/2} e^{-[(x - v_g t)^2 / 2(\alpha + i\beta t)]} \quad (۱۶-۲)$$

مجذور قدرمطلق این تابع به صورت زیر است

$$|f(x, t)|^2 = \left(\frac{\pi}{\alpha^2 + \beta^2 t^2} \right)^{1/2} e^{-[\alpha(x - v_g t)^2 / 2(\alpha^2 + \beta^2 t^2)]} \quad (۱۷-۲)$$

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

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

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

از بسته موج تا معادله شرودینگر
مهمترین نتیجه بحث بالا این است که اگر بخواهیم ۱۱-۲ ذره‌ای با تکانه p و انرژی جنبشی $p^2/2m$ را نشان دهد باید داشته باشیم

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{p}{m} \quad (۱۸-۲)$$

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

$$E = h\omega \quad (۱۹-۲)$$

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

$$\omega = \frac{p^2}{2mh} \quad (۲۰-۲)$$

آنگاه سازگاری ایجاب می‌کند رابطه زیر برقرار باشد

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{h} \quad (۲۱-۲)$$

که دوبروی اولین بار آن را به روش کم و بیش مشابهی به دست آورد.
رابطه ۱۱-۲ را می‌توان برحسب p به صورت زیر نوشت^۴

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi h}} \int dp \phi(p) e^{i(px - Et)/h} \quad (۲۲-۲)$$

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

$$\begin{aligned} ih \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi h}} \int dp \phi(p) E e^{i(px - Et)/h} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi h}} \int dp \phi(p) \frac{p^2}{2m} e^{i(px - Et)/h} \\ &= \frac{h^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} \end{aligned} \quad (۲۳-۲)$$

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

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

هنوز هم با مشکل پهن شدن بسته‌های موج روبه‌رو هستیم. اگر بستهٔ گاوسی ۱۷-۲ را در نظر بگیریم، می‌بینیم که هر قدر هم α بزرگ باشد زمانی خواهد رسید که این پهن‌شدگی قابل توجه می‌شود. اما این نتیجه مغایر تجربه است، که به روشنی نشان می‌دهد که، به عنوان مثال، هسته‌ها که بسیار ریز هستند طی مدت 3×10^9 سال (10^{17} ثانیه) تغییری نکرده‌اند. در فصل ۳ خواهیم دید که مفهوم احتمال، که در فصل ۱ به آن اشاره شد، در اینجا دخالت می‌کند، و پهن‌شدگی واقعاً به این احتمال فزاینده مربوط می‌شود که ذره دور از جایی باشد که در $t = 0$ جایگزیده بود.

رابطه‌های عدم قطعیت

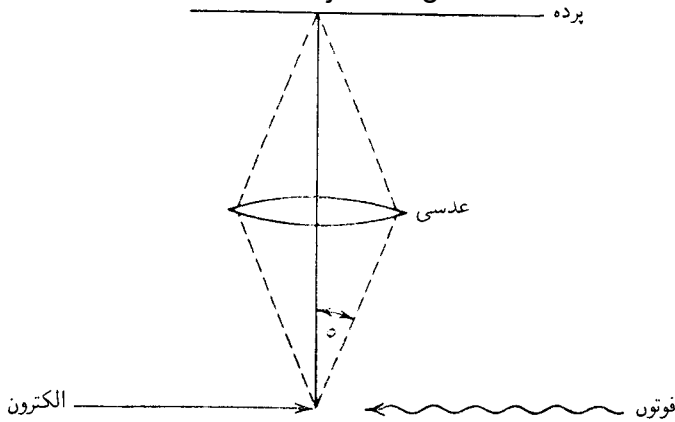
یکی از مهمترین مشاهد‌های کیفی که در بحث بستهٔ موج داشتیم رابطهٔ دوجانبگی میان پهن‌ها در فضاها x و p است:

$$\Delta k \Delta x \gtrsim 1 \quad (24-2)$$

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

$$\Delta p \Delta x \gtrsim \hbar \quad (25-2)$$

چون پهن‌ها معرف ناحیه‌ای در فضای x یا فضای تکانه است که محتمل است ذره در آن باشد، رابطهٔ ۲۵-۲ نشان می‌دهد اگر سعی کنیم بستهٔ موج بسیار جایگزیده‌ای در فضای x بسازیم آنگاه، برخلاف آنچه در فیزیک کلاسیک مسلم فرض می‌شود، نسبت دادن یک تکانه کاملاً معین به آن غیرممکن می‌شود. به همین نحو، بستهٔ موجی که با تکانه‌ای مشخص می‌شود که در یک محدودهٔ باریک تعریف شده است باید از لحاظ فضایی بسیار پهن باشد. این محدودیتی است که مکانیک کوانتومی بر استفاده از مفاهیم کلاسیک برای توصیف یک دستگاه فیزیکی تحمیل می‌کند. مفاهیم کلاسیک مکان و تکانه مستقل از یکدیگر هستند: آنها به درجه‌های آزادی متفاوتی مربوط می‌شوند. در مکانیک کوانتومی، چنانکه در فصل ۶ با تفصیل بیشتری خواهیم دید، مکان و تکانهٔ یک دستگاه ویژگیهای مکمل یکدیگر هستند و نظریه هیچ آزمایشی را ممکن نمی‌داند که در آن بتوان هر دو را همزمان تعیین کرد. کوچکی \hbar باعث می‌شود که مفاهیم متداول فیزیک کلاسیک



شکل ۲-۲ طرح کلی میکروسکوپ هایزنبرگ برای اندازه‌گیری مکان الکترون.

تنها برای دستگاه‌های میکروسکوپی کارایی نداشته باشند. به عنوان مثال، برای ذره غباری به جرم 10^{-2} و سرعت 10^2 cm/s ، عدم قطعیت یک قسمت در میلیون در حاصلضرب آنها ایجاب می‌کند که $\Delta p \sim 10^{-6} \text{ gcm/s}$ و در نتیجه $\Delta x \sim 10^{-21} \text{ cm}$ ، که 10^8 بار کوچکتر از شعاع پروتون است! این وضعیت برای الکترونی که در یک مدار بور حرکت می‌کند صادق نیست. اگر بگیریم $\Delta p \sim p \sim mc\alpha$ ، آنگاه $\Delta x \sim \hbar/mc\alpha$ که از مرتبه بزرگی شعاع مدارهای بور است. اکنون چند آزمایش ذهنی را بررسی می‌کنیم که در آنها به تفصیل نشان خواهیم داد چگونه دوگانگی موج-ذره نمی‌گذارد رابطه ۲-۲۵ نقض شود.

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

$$\Delta x \sim \frac{\lambda}{\sin \phi} \quad (26-2)$$

که در آن λ طول موج نور است. به نظر می‌رسد که با کوچک کردن λ و یا بزرگ کردن $\sin \phi$ ، می‌توانیم Δx را هر اندازه بخواهیم کوچک کنیم. اما اکنون نشان می‌دهیم که این کار تنها به‌بهای از دست دادن اطلاع درباره مؤلفه x تکانه الکترون امکانپذیر است. نظریه کوانتومی به ما می‌گوید که آنچه روی پرده پشت عدسی ثبت می‌شود در واقع فوتونهای منفردی هستند که به این علت به آنجا

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

$$\Delta p_x \sim 2 \frac{h\nu}{c} \sin \phi \quad (27-2)$$

بنابراین،

$$\Delta p_x \Delta x \sim 2 \frac{h\nu}{c} \sin \phi \frac{\lambda}{\sin \phi} \sim 2\pi \hbar \quad (28-2)$$

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

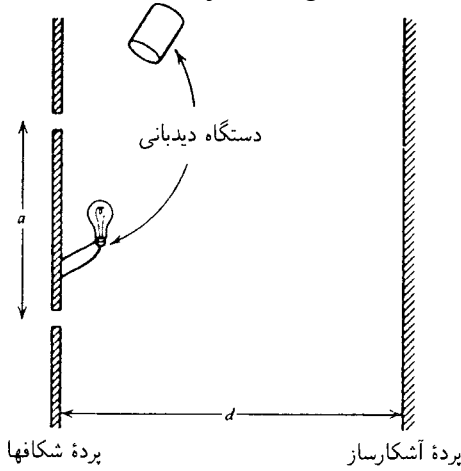
(ب) آزمایش دوشکافی. در فصل ۱ دیدیم که نقش تداخلی که در عبور الکترون^۵ از دو شکاف مشاهده می‌شود منطقاً با توانایی ما برای دانستن اینکه الکترون از کدام شکاف عبور می‌کند ناسازگار است، زیرا این آگاهی ایجاب می‌کند که این نقش نتیجه برهم‌نهی الکترونیایی باشد که از این یا آن شکاف آمده‌اند. اما این برهم‌نهی نمی‌تواند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

$$\sin \theta = n \frac{\lambda}{a} \quad (29-2)$$

و در نتیجه فاصله بین بیشینه‌های مجاور روی پرده برابر است با $d \sin \theta_{n+1} - d \sin \theta_n = d\lambda/a$. دیدبانی را در نظر بگیرید که مکان یک الکترون را درست پشت شکاف با دقت $\Delta y < a/2$ تعیین می‌کند، یعنی نشان می‌دهد الکترون از کدام شکاف گذشته است (شکل ۲-۳). در این کار، دیدبان باید تکانه‌ای در راستای y (موازی با پرده شکافها) به الکترون بدهد که مقدار آن به اندازه

$$\Delta p_y > \frac{2\hbar}{a} \quad (30-2)$$

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



شکل ۲-۲ آزمایش دوشکافی با دیدبان.

نادقیق است. در نتیجه

$$\frac{\Delta p_y}{p} > \frac{2}{a} \frac{h}{p} = \frac{2\lambda}{a} \quad (۲-۳۱)$$

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

$$\Delta p_y \Delta y > h \quad (۲-۳۲)$$

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

$$\Delta x \ll R_n - R_{n-1} \cong \frac{\hbar n}{\alpha m c} \quad (۲-۳۳)$$

این کار باعث انتقال مهارشدنی تکانه با بزرگی $\Delta p \gg m c \alpha / 2n$ به الکترون می‌شود، و این به نوبه

خود عدم قطعیتی را در انرژی الکترون ایجاد می‌کند که مقدار آن از رابطه زیر به دست می‌آید

$$\Delta E \simeq \frac{p\Delta p}{m} \gg \frac{mc\alpha}{n} \cdot \frac{\alpha c}{2n} = \frac{1}{2} \frac{mc^2\alpha^2}{n^2} \quad (34-2)$$

که بسیار بزرگتر از انرژی بستگی الکترون در مدار است. در نتیجه، این اندازه‌گیری به احتمال زیاد الکترون را از مدار خارج می‌کند، و از این رو نمی‌توان تصویری از مدار به دست آورد. (د) رابطه عدم قطعیت انرژی-زمان. با نوشتن رابطه ۲-۲۵ به صورت

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

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

$$\Delta E \Delta t \gtrsim \hbar \quad (35-2)$$

این رابطه را می‌توان از صورت بسته موج ۲-۲۲ هم به دست آورد، زیرا E و t در رابطه دوجانبه‌ای همانند مورد x و p ظاهر می‌شوند؛ و همچنین می‌توان آن را از نظریه نسبیت هم نتیجه گرفت، زیرا فضا و زمان، و تکانه و انرژی، ارتباط بسیار نزدیکی با هم دارند.^۶ در واقع، فضا و زمان در مکانیک کوانتومی غیرنسبیتی نقشهای نسبتاً متفاوتی دارند، و در حالی که می‌توان رابطه ۲-۲۵ را از صورتبندی مکانیک کوانتومی به دست آورد برای رابطه ۲-۳۵ این کار ممکن نیست. با وجود این، رابطه عدم قطعیت انرژی-زمان به همان اندازه رابطه ۲-۲۵ قسمتی از ساختار کیفی مکانیک کوانتومی است. در این باره، به مبحث ویژه ۴، "طول عمر، پهنای خط، و تشدید"، مراجعه کنید.

برآوردهای مرتبه بزرگی

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

$$pr \sim \hbar \quad (36-2)$$

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

از اینجا می‌توان انرژی را برحسب r بیان کرد:

$$\begin{aligned} E &= \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \\ &= \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r} \end{aligned} \quad (37-2)$$

مقدار کمینه انرژی از رابطه زیر به دست می‌آید

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

بنابراین،

$$r = \frac{\hbar^2}{me^2} = \frac{\hbar}{mc\alpha} \quad (38-2)$$

و مقدار E متناظر برابر است با

$$E = -\frac{1}{2}mc^2\alpha^2 \quad (39-2)$$

البته، به دست آوردن این مقدار دقیق برای انرژی به این دلیل است که طرف راست ۳۶-۲ را مخصوصاً \hbar گرفتیم. در واقع، به جای ۳۶-۲ می‌شد نوشت $pr \sim \hbar$ ، که به همان اندازه اعتبار دارد، و نتیجه دیگری به دست آورد. اما، تفاوت این مقدار جدید E با مقدار درست آن تنها در یک ضریب عددی است، و مرتبه بزرگی عمومی باید باز هم همان باشد (یعنی، $E \sim mc^2\alpha^2$). نکته مهم این است که، برخلاف نظریه کلاسیک، انرژی به موجب اصل عدم قطعیت از پایین کراندار است: افزایش انرژی پتانسیل (منفی)، که از کاهش r یعنی نزدیکتر شدن الکترون به هسته حاصل می‌شود، الزاماً باعث افزایش انرژی جنبشی می‌شود.

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

$$\frac{p^2}{2M} \sim \frac{10^{-28}}{3.2 \times 10^{-24}} \sim 3 \times 10^{-5} \text{ ergs} \quad (40-2)$$

که در آن M جرم نوکلئون (پروتون یا نوترون) و برابر است با $g = 10^{-24} \times 1.6$. چون پتانسیلی که باعث بستگی می‌شود باید بیشتر از این مقدار باشد، نتیجه می‌گیریم که

$$|V| \gtrsim 3 \times 10^{-5} \text{ ergs} \gtrsim 20 \text{ MeV} \quad (41-2)$$

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

یک مثال دیگر از نظریه مزون یوکاوا برای نیروهای هسته به‌دست می‌آید. در سال ۱۹۳۵ یوکاوا نظر داد که نیروهای هسته‌ای از گسیل یک کوانتوم جدید (مزون یا پیون) توسط یکی از نوکلئونها و جذب آن توسط یک نوکلئون دیگر ناشی می‌شوند. اگر جرم این کوانتوم را با μ نشان دهیم، گسیل آن باعث عدم موازنه‌ای در انرژی به مقدار $\Delta E \sim \mu c^2$ می‌شود که تنها می‌تواند در مدت $c\Delta t \sim \hbar/\mu c$ روی دهد. برد متناظر با این زمان حرکت ذره از مرتبه $\Delta t \sim \hbar/E \sim \hbar/\mu c^2$ است. اگر این برد را برابر با $r_0 = 1.4 \times 10^{-13} \text{ cm}$ بگیریم، به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \mu c^2 &\cong \frac{\hbar c}{r_0} = \frac{10^{-27} \times 3 \times 10^{10}}{1.4 \times 10^{-13}} \text{ ergs} \\ &\simeq 130 \text{ MeV} \end{aligned} \quad (42-2)$$

وقتی سرانجام پیون کشف شد، معلوم شد که این برآورد دقت قابل ملاحظه‌ای دارد، زیرا برای پیون $\mu c^2 \simeq 140 \text{ MeV}$.

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

مسائل

۱-۲ بسته موج ۱-۲ را در نظر بگیرید که در آن $g(k)$ به‌صورت زیر تعریف می‌شود

$$\begin{aligned} g(k) &= 0 & k &< -K/2 \\ &= N & -K/2 &< k < K/2 \\ &= 0 & K/2 &< k \end{aligned}$$

(الف) تابع $f(x)$ را به‌دست آورید.

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |f(x)|^2 = 1$$

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

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk |g(k)|^2 = \frac{1}{2\pi}$$

(د) نشان دهید که تعریف موجی برای Δx ، پهنای $f(x)$ در قسمت (الف)، رابطه زیر را

به دست می‌دهد

$$\Delta k \Delta x > 1$$

که به مقدار K بستگی ندارد.

۲-۲ با فرض اینکه

$$g(k) = \frac{N}{k^2 + \alpha^2}$$

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

$$\Delta k \Delta x > 1$$

که مستقل از مقدار α است.

۳-۲ مسئله پهن شدن بسته موج گاوسی مربوط به ذره آزاد را در نظر بگیرید که برای آن رابطه زیر

برقرار است

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

با استفاده از ۲-۱۷، تغییر نسبی اندازه بسته موج در یک ثانیه را برای موارد زیر محاسبه کنید

(الف) بسته موجی که نمایشگر یک الکترون با اندازه 10^{-4} cm و 10^{-8} cm است.

(ب) بسته موجی که جسمی به جرم 1 g و با اندازه 1 cm را نمایش می‌دهد.

بهتر است پهنای \hbar/mc بیان کنید، که در آن m جرم ذره‌ای است که با بسته موج

نمایش داده می‌شود.

۴-۲ می‌خواهیم یک باریکه الکترونی را به هدفی در فاصله 10^4 km بتابانیم. اگر اندازه بسته موج اولیه 1 mm باشد، اندازه آن را پس از رسیدن به هدف به‌ازای انرژی جنبشی (الف) 13.6 eV و (ب) 100 MeV به‌دست آورید.

[تذکر: رابطه میان انرژی جنبشی و تکانه همیشه $p^2/2m$ نیست!]
۵-۲ رابطه میان طول موج و بسامد در یک موجبر به‌صورت زیر است

$$\lambda = \frac{c}{\sqrt{\nu^2 - \nu_0^2}}$$

سرعت گروه این امواج را تعیین کنید.

۶-۲ برای امواج کشش سطحی در آب کم‌عمق، رابطه میان بسامد و طول موج عبارت است از

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

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

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

سرعت گروه و سرعت فاز را تعیین کنید.

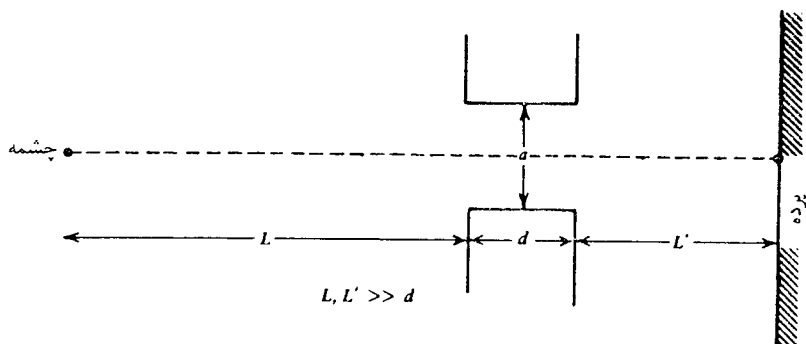
۷-۲ انرژی حالت پایه نوسانگر هماهنگ را با استفاده از رابطه عدم قطعیت برآورد کنید. انرژی نوسانگر هماهنگ برابر است با

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

۸-۲ با استفاده از رابطه عدم قطعیت، انرژی حالت پایه ذره‌ای در پتانسیل $V(x) = gx^4$ را برآورد کنید. ابعاد جواب خود را واریسی کنید.

۹-۲ بعضی هسته‌ها، با اندازه نوعی 10^{-12} cm ، الکترونهایی با انرژی ۱ تا 10 MeV گسیل می‌کنند. با استفاده از اصل عدم قطعیت نشان دهید که الکترون با انرژی 1 MeV نمی‌تواند قبل از واپاشی در هسته وجود داشته باشد.

۱۰-۲ به نظر می‌رسد دستگاهی که در زیر ترسیم شده است نقض رابطه عدم قطعیت را ممکن می‌سازد. موقعیت عرضی را می‌توان با دقت $\Delta y \sim a$ تعیین کرد، و تکانه عرضی باریکه فرودی را می‌توان با بزرگ کردن اختیاری L تا حد امکان کوچک کرد. این دستگاه را به تفصیل تحلیل کنید، نکات پنهان فرضهای بالا را روشن کنید، و نشان دهید که رابطه عدم قطعیت نقض نمی‌شود.



۱۱-۲ عدم قطعیت انرژی (پهنای خط) را برای حالتی که طول عمر آنها برابر است با (الف) 10^{-10} s ، $2.6 \times 10^{-10} \text{ s}$ ، (ب) 10^{-23} s ، و (ج) ۱۲ دقیقه (برحسب الکترون ولت) به دست آورید. ۱۲-۲ نور تکفامی به طول موج 6000 \AA از یک بستاور سریع که برای 10^{-9} s باز است عبور می‌کند. پهن شدگی طول موجهای نور (ناتکفام) عبور کرده را تعیین کنید.

مراجع

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

پاول جی، ال و ب کریسمن، مکانیک کوانتومی، ترجمه پاشایی راد و سعادت، تهران مرکز نشر دانشگاهی، ۱۳۶۸، ۵۴۸ صفحه.

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

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

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

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

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

معادله موج شرودینگر و تعبیر احتمالاتی

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

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} \quad (۱-۳)$$

که آن را معادله درست برای توصیف ذره آزاد می‌گیریم.

با وارون کردن روندی که با آن به ۲-۲۳ رسیدیم، می‌بینیم که عمومی‌ترین جواب این معادله عبارت است از

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \phi(p) e^{i[p x - (p^2/2m)t]/\hbar} \quad (۲-۳)$$

(دلیل ضریب بهنجارش در جلواتتگرال را در ۲۷-۳ خواهیم دید.) قبل از اینکه به بحث بسیار مهم تعبیر جواب معادله ۱-۳ یعنی $\psi(x, t)$ بپردازیم، باید تأکید کنیم که این معادله برحسب مشتق

زمانی از مرتبه اول است. بنابراین، اگر مقدار اولیه $\psi(x, 0)$ ، مثلاً $\psi(x, 0)$ معلوم باشد، می توان مقدار آن را در همه زمانهای دیگر به دست آورد. این امر از صورت معادله برای کار با کامپیوتر^۱

$$\psi(x, t + \Delta t) = \psi(x, t) + \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} \Delta t \quad (3-3)$$

یا از صورت عمومی ترین جواب آشکار است. با داشتن $\psi(x, 0)$ می توان تابع $\phi(p)$ را از ۳-۲ به دست آورد. انتگرال فوری^۲

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \phi(p) e^{ipx/\hbar} \quad (4-3)$$

را می توان وارون کرد، و با معلوم شدن $\phi(p)$ جواب به ازای تمام مقادیر t معلوم می شود. توجه کنید که در این معادله دیفرانسیل “عدم قطعیت” وجود ندارد: همینکه حالت اولیه بسته موج مشخص شد — و تاکنون هیچ محدودیتی برای $\psi(x, 0)$ در نظر نگرفته ایم — آنگاه این بسته موج در تمام زمانهای بعدی کاملاً مشخص می شود.

تعبیر احتمالاتی

در جستجوی تعبیری برای $\psi(x, t)$ باید به خاطر داشته باشیم که اولاً $\psi(x, t)$ به طور کلی یک تابع مختلط (مانند تابع ۱۶-۲) است، و ثانیاً تابع $|\psi(x, t)|$ در جایی که باید ذره وجود داشته باشد بزرگ و در جاهای دیگر کوچک است. این تابع همچنین دارای ویژگی پهن شدن است، که در فصل ۲ بررسی شد. تقریباً بلافاصله پس از کشف معادله شرودینگر (که تنها شش ماه پس از کشف مکانیک کوانتومی توسط هایزنبرگ در سال ۱۹۲۵ صورت گرفت)، ماکس بورن پراکندگی باریکه ای از الکترونها توسط یک هدف را مطالعه کرد، و از اینجا به تعبیر درست تابع موج پی برد. او نظر داد که کمیت

$$P(x, t)dx = |\psi(x, t)|^2 dx \quad (5-3)$$

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

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

صرفاً به این معنا است که با گذشت زمان احتمال یافتن ذره در جایی که در $t = 0$ قرار داشته است کمتر می‌شود.

برای صادق بودن این تعبیر باید شرط زیر برقرار باشد

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x, t) dx = 1 \quad (6-3)$$

زیرا ذره باید به هر حال در جایی باشد. در یک معادله خطی مانند ۳-۱، جواب $\psi(x, t)$ را می‌توان در یک ثابت ضرب کرد و نتیجه باز هم یک جواب خواهد بود. بنابراین، رابطه ۳-۶ جوابهای $\psi(x, t)$ را به دسته‌ای از توابع محدود می‌کند که انتگرال‌پذیری مجذوری هستند. بعداً خواهیم دید که کافی است شرط زیر برقرار باشد

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, 0)|^2 < \infty \quad (7-3)$$

یعنی توابع موج حالت اولیه باید انتگرال‌پذیر مجذوری باشند. وقتی بازه انتگرال‌گیری نامتناهی است، این شرط ایجاب می‌کند که $\psi(x, 0)$ سریعتر از $x^{-1/2}$ به صفر میل کند. همچنین ضروری است که توابع موج $\psi(x, t)$ نسبت به x پیوسته باشند.

اهمیت فازها

چون کمیتی که معنای فیزیکی دارد $|\psi(x, t)|^2$ است، به نظر می‌رسد که فاز جواب معادله به نحوی بی‌اهمیت است. این نتیجه‌گیری نادرست است! چون معادله ۳-۱ خطی است، اگر $\psi_1(x, t)$ و $\psi_2(x, t)$ جواب باشند، ترکیب خطی زیر نیز یک جواب است

$$\psi(x, t) = \psi_1(x, t) + \psi_2(x, t) \quad (8-3)$$

اگر $\psi_1(x, t) = R_1 e^{i\theta_1}$ و $\psi_2(x, t) = R_2 e^{i\theta_2}$ که در آنها R_1, R_2, θ_1 و θ_2 حقیقی هستند، آنگاه

$$\begin{aligned} |\psi(x, t)|^2 &= |e^{i\theta_1}(R_1 + R_2 e^{i(\theta_2 - \theta_1)})|^2 \\ &= R_1^2 + R_2^2 + 2R_1 R_2 \cos(\theta_1 - \theta_2) \end{aligned} \quad (9-3)$$

که نشان می‌دهد فاز نسبی مهم است. از فاز کل در $\psi(x, t)$ می‌توان صرف‌نظر کرد؛ تنها فاز نسبی $\theta_1 - \theta_2$ بین توابع موج ψ_1 و ψ_2 در $|\psi|^2$ ظاهر می‌شود.

توجه کنید که سمت راست ۳-۹ درست همان چیزی است که در بررسی برهم‌نهی امواج می‌بینیم. در واقع، این خطی بودن توابع موج است که باعث نقش تداخلی می‌شود که ناشی از وجود کسینوس در این رابطه است، و وقتی از "رفتار موجی" الکترون‌ها یا فوتون‌ها صحبت می‌کنیم بیش از هر چیز منظور همین خطی بودن است.

جریان احتمال

اکنون نشان می‌دهیم که شرط ۳-۶، که در $t = 0$ تحمیل شده است، در همه زمانها برقرار است. باید از رابطه ۳-۱ و همیوگ مختلط آن

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*(x, t)}{\partial x^2} \quad (10-3)$$

در مشتق زمانی چگالی جاگذاری کنیم:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P(x, t) &= \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \psi - \frac{\hbar^2}{2m} \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) \\ &= -\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\hbar}{2im} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right) \right] \end{aligned}$$

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

$$j(x, t) = \frac{\hbar}{2im} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right) \quad (11-3)$$

می‌بینیم که

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} j(x, t) = 0 \quad (12-3)$$

با انتگرال‌گیری به دست می‌آوریم

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} dx P(x, t) = - \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\partial}{\partial x} j(x, t) = 0 \quad (13-3)$$

زیرا برای توابع انتگرال پذیر مجذوری $j(x, t)$ در بینهایت صفر می شود. در ضمن، اگر ناپوستگیهایی برای $\psi(x)$ در نظر می گرفتیم به تکنیکهایی به صورت تابع دلتا^۲ در شار، و در نتیجه در چگالی احتمال، می رسیدیم که برای یک کمیت فیزیکی مشاهده پذیر قابل قبول نیست. رابطه ۱۲-۳ یک قانون پایستگی است، و این واقعیت را بیان می کند که هر تغییری در چگالی در ناحیه ای از x با تغییری در شار خالص به درون این ناحیه جبران می شود:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_a^b dx P(x, t) &= - \int_a^b dx \frac{\partial}{\partial x} j(x, t) \\ &= j(a, t) - j(b, t) \end{aligned} \quad (۱۴-۳)$$

اگر معادله ۱-۳ را به صورت زیر بنویسیم

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x, t) \quad (۱۵-۳)$$

تعریف $P(x, t)$ و $j(x, t)$ و قانون پایستگی بالا برقرار می مانند به شرط اینکه $V(x)$ حقیقی باشد. این نتیجه مهم است، زیرا چنانکه بعداً نشان خواهیم داد، ۱۵-۳ معادله شرودینگر برای ذره در پتانسیل $V(x)$ است. تعمیم به سه بعد ساده است. معادله ۱۵-۳ تبدیل می شود به

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi(x, y, z, t)}{\partial t} &= - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z, t) \\ &+ V(x, y, z)\psi(x, y, z, t) \end{aligned}$$

یعنی

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t) \quad (۱۶-۳)$$

و تعمیم معادله ۱۲-۳ عبارت است از

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (۱۷-۳)$$

که در آن

$$P(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (۱۸-۳)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{i m} [\psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t) - \nabla \psi^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t)] \quad (19-3)$$

مقادیر انتظاری، و تکانه ذره

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

$$\langle f(x) \rangle = \int dx f(x) P(x, t) = \int dx \psi^*(x, t) f(x) \psi(x, t) \quad (20-3)$$

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

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

$$p = mv = m \frac{dx}{dt} \quad (21-3)$$

می‌نویسیم

$$\langle p \rangle = m \frac{d}{dt} \langle x \rangle = m \frac{d}{dt} \int dx \psi^*(x, t) x \psi(x, t) \quad (22-3)$$

یا

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

توجه کنید که dx/dt زیر انتگرال وجود ندارد. تنها کمیتی که با زمان تغییر می‌کند $\psi(x, t)$ است، و همین تغییر ψ است که باعث تغییر $\langle x \rangle$ با زمان می‌شود. با استفاده از ۱-۳ و همیوگ مختلط آن، به دست می‌آوریم

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

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

بنابراین، انتگرالده به صورت زیر است

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

و در نتیجه

$$\langle p \rangle = \int dx \psi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) \quad (23-3)$$

زیرا انتگرال مشتقهای توابع انتگرال پذیر مجذوری صفر می شود. از ۲۳-۳ نتیجه می گیریم که تکانه با عملگر زیر نمایش داده می شود

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad (24-3)$$

با پذیرفتن این نتیجه، به نتیجه کلی تر زیر می رسیم

$$\langle f(p) \rangle = \int dx \psi^*(x, t) f \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x, t) \quad (25-3)$$

بنابراین، به عنوان مثال داریم

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

تابع موج در فضای تکانه

با این نمایش اکنون می‌توان درباره معنای فیزیکی $\phi(p)$ ، که در ۲-۳ ظاهر می‌شود، بحث کرد. ابتدا متذکر می‌شویم که کافی است این معادله را تنها در $t = 0$ در نظر بگیریم، زیرا $\phi(p)$ وابستگی زمانی ندارد. با

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \phi(p) e^{ipx/\hbar} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\pi}} \int dk \phi(\hbar k) e^{ikx}$$

و با استفاده از فرمول وارون انتگرال فوریه، به دست می‌آوریم

$$\phi(\hbar k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \psi(x) e^{-ikx}$$

یا

$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \psi(x) e^{-ipx/\hbar} \quad (26-3)$$

بنابراین، داریم

$$\begin{aligned} \int dp \phi^*(p) \phi(p) &= \int dp \phi^*(p) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \psi(x) e^{-ipx/\hbar} \\ &= \int dx \psi(x) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \phi^*(p) e^{-ipx/\hbar} \\ &= \int dx \psi(x) \psi^*(x) = 1 \end{aligned} \quad (27-3)$$

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

$$\begin{aligned}
 \langle p \rangle &= \int dx \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{d\psi(x)}{dx} \\
 &= \int dx \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \phi(p) e^{ipx/\hbar} \\
 &= \int dp \phi(p) p \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \psi^*(x) e^{ipx/\hbar} \\
 &= \int dp \phi(p) p \phi^*(p)
 \end{aligned} \quad (28-3)$$

این نتیجه، همراه با ۲۷-۳، به‌وضوح نشان می‌دهد که $\phi(p)$ را باید تابع موج در فضای تکانه تعبیر کرد، و از این رو $|\phi(p)|^2$ چگالی احتمال یافتن ذره با تکانه p را به‌دست می‌دهد. اگر $\psi(x, t)$ جواب معادله ۱۵-۳ باشد، می‌توان $\phi(p, t)$ را با رابطه زیر تعریف کرد

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \phi(p, t) e^{ipx/\hbar} \quad (29-3)$$

این واقعیت که به‌طور کلی $\phi(p, t)$ دارای وابستگی زمانی است رابطه‌های ۲۷-۳ و ۲۸-۳ یا تعبیر آن‌را تغییر نمی‌دهد. برای اینکه این توهم پیش نیاید که با وجود تقارنی که میان فضاهای x و p ، $p = (\hbar/i)(\partial/\partial x)$ عملگر است اما x عملگر نیست، متذکر می‌شویم که x هم در واقع یک عملگر است اما اتفاقاً صورت کاملاً ساده‌ای در فضای x دارد. برای محاسبه $\langle f(x) \rangle$ در فضای تکانه، می‌توان با روشی بسیار شبیه به روش بالا نشان داد که

$$\langle x \rangle = \int dp \psi^*(p, t) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right) \phi(p, t) \quad (30-3)$$

به عبارت دیگر، نمایش عملگر x در فضای تکانه به صورت زیر است

$$x = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \quad (31-3)$$

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

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

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

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

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

یعنی در $x = 1/\alpha$.

(ب)

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

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

(ج) احتمال مزبور برابر است با

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

(د)

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

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

که از آن به‌دست می‌آوریم

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

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

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

معادله شرودینگر برای ذره در یک پتانسیل

معادله

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

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

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \frac{p_{op}^2}{2m} \psi(x, t) \quad (32-3)$$

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

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left[\frac{p_{op}^2}{2m} + V(x) \right] \psi(x, t) \quad (33-3)$$

یا به طور صریحتر

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \psi(x, t) \quad (34-2)$$

این معادله، که تعمیم ۱-۳ است، معادله اساسی مکانیک کوانتومی غیرنسبیتی است. معادله شرودینگر، اکنون به دست آوردیم، می‌توان به صورت زیر نیز نوشت

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = H \psi(x, t) \quad (35-3)$$

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

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

۱. برخلاف اعداد معمولی، عملگرها همیشه جابه جا نمی شوند. اگر تعریف کنیم

$$[A, B] = AB - BA \quad (36-3)$$

آنگاه

$$\begin{aligned} [p, x]\psi(x, t) &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} x\psi(x, t) - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \\ &= \frac{\hbar}{i} \psi(x, t) \end{aligned} \quad (37-3)$$

بنابراین، رابطه جابه جایی زیر را به دست می آوریم

$$[p, x] = \frac{\hbar}{i} \quad (38-3)$$

این جابه جاناپذیری در تبدیل یک تابع کلاسیک $f(x, p)$ به صورت عملگری آن ابهام به وجود می آورد، و این قاعده را می پذیریم که $f(x, p)$ باید نسبت به x و p متقارن شود. برای مثال

$$\begin{aligned} xp &\rightarrow \frac{1}{2}(xp + px) \\ x^2 p &\rightarrow \frac{1}{4}(x^2 p + 2xpx + px^2) \end{aligned} \quad (39-3)$$

و غیره. بعداً خواهیم دید که رابطه عدم قطعیت میان x و p ناشی از همین جابه جاناپذیری این دو متغیر است.

۲. وجود i در عملگر p ممکن است باعث تردید درباره حقیقی بودن مقدار انتظاری p شود. اما می توان واریسی کرد که $\langle p \rangle$ حقیقی است. داریم

$$\begin{aligned} \langle p \rangle - \langle p \rangle^* &= \int dx \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} - \int dx \psi(x) \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) \\ &= \frac{\hbar}{i} \int dx \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right) \\ &= \frac{\hbar}{i} \int dx \frac{\partial}{\partial x} (\psi^* \psi) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (40-3)$$

و این به شرطی است که تابع موج در بینهایت صفر شود، که برای هر تابع انتگرال پذیر مجذوری صدق می کند. گاهی از تابعهایی استفاده می کنیم که انتگرال پذیر مجذوری نیستند اما شرایط دوره ای مشخصی دارند، برای مثال

$$\psi(x) = \psi(x + L) \quad (۴۱-۳)$$

اگر کار را به ناحیه $0 \leq x \leq L$ محدود کنیم آنگاه $(h/i)d/dx$ باز هم دارای مقدار انتظاری حقیقی است، زیرا در ۳-۴۰ داریم

$$\begin{aligned} \langle p \rangle - \langle p \rangle^* &= \frac{h}{i} \int_0^L dx \frac{\partial}{\partial x} (\psi^*(x) \psi(x)) \\ &= \frac{h}{i} |\psi(L)|^2 - \frac{h}{i} |\psi(0)|^2 = 0 \end{aligned} \quad (۴۲-۳)$$

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

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (۴۳-۳)$$

به طور خلاصه:

۱. وابستگی زمانی تابع موج با معادله دیفرانسیل جزئی مرتبه اول زیر داده می شود

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = H \psi(x, t) \quad (۴۴-۳)$$

که در آن H عملگر $p^2/2m + V(x)$ است.

۲. تابعهای موج به تابعهای انتگرال پذیر مجذوری محدود می شوند.

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

$$P(x, t) = |\psi(x, t)|^2 \quad (۴۵-۳)$$

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

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

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

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \phi(p, t) e^{ipx/\hbar} \quad (۴۶-۳)$$

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

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

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad (۴۷-۳)$$

و در فضای p ، صورت عملگر x عبارت است از

$$x = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \quad (۴۸-۳)$$

و هر دو با رابطه جابه‌جایی اساسی زیر سازگار هستند

$$[p, x] = \frac{\hbar}{i} \quad (۴۹-۳)$$

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

مسائل

۱-۳ با محاسبه صریح نشان دهید

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

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

۲-۳ نشان دهید قانون پایستگی ۱-۳، که در آن $\psi(x, t)$ جواب معادله شرودینگر ۱۵-۳ با

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

۴-۳ فرض کنید

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

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

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

۵-۳ (الف) تابع $\phi(p)$ را برای دستگاهی که با تابع موج مسئله ۳-۴ توصیف می‌شود محاسبه کنید. (ب) مقدار $\langle p^n \rangle$ را محاسبه کنید و نشان دهید که به‌ازای n های فرد صفر می‌شود.

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

(د) با استفاده از نتیجه بالا و مقدار Δx که در مسئله ۳-۴ محاسبه کرده‌اید مقدار حاصلضرب $\Delta p \Delta x$ را تعیین کنید.

۶-۳ مقادیر $\langle x \rangle$ ، $\langle x^2 \rangle$ و Δx ، و همچنین $\langle p \rangle$ ، $\langle p^2 \rangle$ و Δp ، را برای دستگاهی محاسبه کنید که با تابع موج بهنجار شده زیر توصیف می‌شود

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

با استفاده از این نتیجه‌ها، $\Delta p \Delta x$ را به‌دست آورید.
 [تذکر: با استفاده از انتگرالهای پربندی می‌توان نشان داد

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

از این نتیجه، یا

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

(و مشتقهای آن نسبت به a^2) می‌توان برای محاسبه انتگرالها استفاده کرد.]

۷-۳ مقادیر $\langle p \rangle$ و $\langle p^2 \rangle$ را برای تابع موج $\psi(x) = R(x)e^{iS(x)/\hbar}$ که در آن $R(x)$ و $S(x)$ توابع حقیقی از x هستند، به دست آورید.

۸-۳× نشان دهید رابطه عملگری زیر برقرار است

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

عملگر e^A با رابطه زیر تعریف می‌شود

$$e^A = \sum_{n=0}^{\infty} A^n/n!$$

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

۹-۳ $\psi(\theta)$ را که تابعی از متغیر زاویه‌ای θ است و به بازه $-\pi \leq \theta \leq \pi$ محدود می‌شود در نظر بگیرید. اگر شرط $\psi(\pi) = \psi(-\pi)$ برقرار باشد، نشان دهید عملگر

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

دارای مقدار انتظاری حقیقی است.

۱۰-۳ $\phi(p)$ را که تابع موج یک ذره در فضای تکانه است در نظر بگیرید. اگر $\phi(p)$ تنها برای مقادیر مثبت p تعریف شده باشد، این تابع باید چه شرایطی را برآورده کند تا مقدار انتظاری حقیقی باشد؟ (از ۳-۱ استفاده کنید.)



ویژه تابعها و ویژه مقدارها

معادله شرودینگر وابسته به زمان را که در فصل ۳ به دست آوردیم در نظر بگیرید:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \psi(x, t) \quad (۱-۴)$$

این معادله را با تبدیل به یک جفت معادله دیفرانسیل معمولی بر حسب یک متغیر می توان حل کرد. می نویسیم

$$\psi(x, t) = T(t)u(x) \quad (۲-۴)$$

که ایجاب می کند

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

با تقسیم بر $u(x) T(t)$ به دست می آوریم

$$i\hbar \frac{dT(t)/dt}{T(t)} = \frac{-(\hbar^2/2m)(d^2 u(x)/dx^2) + V(x)u(x)}{u(x)} \quad (۳-۴)$$

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

$$i\hbar \frac{dT(t)}{dt} = ET(t) \quad (4-4)$$

عبارت است از

$$T(t) = Ce^{-iEt/\hbar} \quad (5-4)$$

که در آن C یک ثابت است. معادله دیگر به صورت زیر است

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + V(x)u(x) = Eu(x) \quad (6-4)$$

این معادله را غالباً معادله شرودینگر مستقل از زمان می‌نامند، و دارای سرشتی کاملاً متفاوت از معادله ۱-۴ است. معادله ۱-۴ تحول زمانی $\psi(x, t)$ را توصیف می‌کند؛ ۶-۴ یک معادله ویژه‌مقداری است.

معادله‌های ویژه‌مقداری

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

$$\begin{aligned} Of(x) &= f(x) + x^2 \\ Of(x) &= [f(x)]^2 \\ Of(x) &= f(3x^2 + 1) \\ Of(x) &= [df(x)/dx]^2 \\ Of(x) &= df(x)/dx - 2f(x) \\ Of(x) &= \lambda f(x) \end{aligned} \quad (7-4)$$

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

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

$$L[f_1(x) + f_2(x)] = Lf_1(x) + Lf_2(x) \quad (۸-۴)$$

و، به‌ازای عدد مختلط اختیاری c ,

$$Lcf(x) = cLf(x) \quad (۹-۴)$$

بنابراین، در چند مثال بالا عملگرهای سوم، پنجم و ششم خطی هستند. یک عملگر خطی یک تابع را به تابع دیگری تبدیل می‌کند، برای مثال،

$$Lf(x) = \frac{df(x)}{dx} - 2f(x)$$

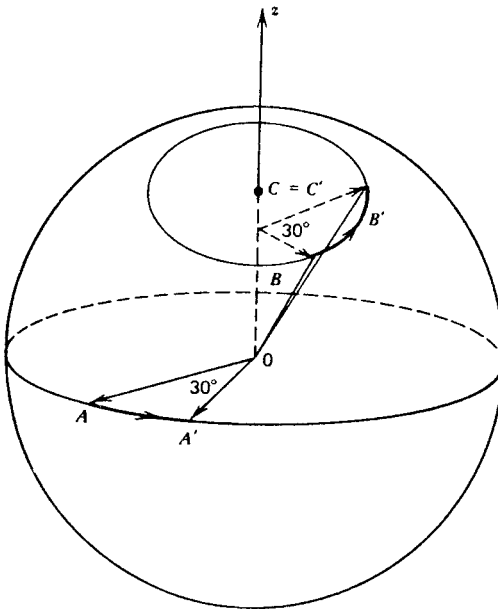
آموخته است که تابعها را مانسته بردارهای فضای سه‌بعدی در نظر بگیریم. در اینجا کار یک عملگر تبدیل یک بردار به بردار دیگری است. در مورد خاصی که تمام بردارها دارای طول واحد هستند، یک عملگر یک نقطه روی کره واحد را به نقطه دیگری روی این کره تبدیل می‌کند. در این مثال خاص (و بسیار مناسب)، عملگر می‌تواند چرخش حول یک محور باشد. فرض کنید عملگر مزبور چرخشی به اندازه مثلاً 30° حول محور z است. به آسانی می‌توان دید که برای بردارهای مختلف تحت این عمل چه روی می‌دهد (شکل ۴-۱). دو بردار با ویژگی خاص وجود دارند: بردارهای یکی به سمت قطبهای شمال و جنوب تحت این چرخش به خودشان تبدیل می‌شوند. این یک مثال خاص از یک معادله عملگری مانند ۴-۶ است، که می‌توان آن را به صورت زیر نوشت

$$Hu_E(x) = Eu_E(x) \quad (۱۰-۴)$$

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

مثال: مسئله ویژه‌مقداری $Lf(x) = \lambda f(x)$ را حل کنید که در آن، در ناحیه $-a \leq x \leq a$ داریم

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



شکل ۱-۴ نمایش عمنگری که تمام بردارهای واقع بر کره واحد را 30° می‌چرخاند: برای بردارهای روی استوا $(A \rightarrow A')$ ، در یک عرض میانه $(B \rightarrow B')$ ، و در قطب $(C \rightarrow C' = C)$.

و شرط مرزی $f(a) = f(-a)$ برقرار است
حل: این معادله را می‌توان به صورت زیر درآورد

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

یا

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

جواب عبارت است از

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

یا

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

شرط $f(a) = f(-a)$ اینجاست $e^{i\lambda a} = e^{-i\lambda a}$. بنابراین، ویژه مقادارها با رابطه زیر داده می‌شوند

$$\lambda = \pm \frac{n\pi}{a} \quad (n = 0, 1, 2, 3, \dots)$$

جواب ۲-۴ به صورت $u_E(x)e^{-iEt/\hbar}$ است. چون معادله ۱-۴ خطی است، مجموعی از این نوع جوابها، مربوط به مقادیر مجاز E ، باز هم یک جواب است. بنابراین، عمومی‌ترین جواب معادله ۱-۴ عبارت است از

$$\psi(x, t) = \sum_n C_n u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} + \int dE C(E) u_E(x) e^{-iEt/\hbar} \quad (11-4)$$

که در آن $u_n(x)$ ها مجموعه کامل ویژه تابعهای مربوط به ویژه مقادارهای گسسته E_n و $u_E(x)$ ها ویژه تابعهای مربوط به ویژه مقادارهای پیوسته E هستند. C_n ها ثابتهای اختیاری و $C(E)$ ها تابعهای اختیاری از E هستند. این ضرایب به این قید وابسته‌اند که $\psi(x, t)$ باید انتگرال پذیر مجذوری باشد. ویژه مقادارهای عملگر H را ویژه مقادارهای انرژی می‌نامند، و دلیل آن را می‌توان از تعریف زیر استنباط کرد

$$H = \frac{p_{op}^2}{2m} + V(x) \quad (12-4)$$

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

مسئله ویژه مقاداری برای ذره در جعبه

۶-۴ را با پتانسیل زیر در نظر می‌گیریم

$$\begin{aligned} V(x) &= \infty & x < 0 \\ &= 0 & 0 < x < a \\ &= \infty & a < x \end{aligned} \quad (13-4)$$

از ۶-۴ دیده می‌شود که

$$\begin{aligned} u(x) &= 0 & x < 0 \\ &= 0 & a < x \end{aligned} \quad (14-4)$$

و داخل چاه، که در آن $V(x) = 0$ ، معادلهٔ ۱۵-۴ را به صورت زیر می‌نویسیم

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} u(x) = 0 \quad (15-4)$$

ابتدا توجه کنید که اگر $E < 0$ ، این معادله به صورت زیر در می‌آید

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} - \kappa^2 u(x) = 0$$

که در آن $\kappa^2 = 2m|E|/\hbar^2$. عمومی‌ترین جواب یک ترکیب خطی از $e^{\kappa x}$ و $e^{-\kappa x}$ است، و در حالی که $\sinh \kappa x$ در $x = 0$ صفر می‌شود در $x = a$ صفر نیست. بنابراین، E نمی‌تواند منفی باشد. با E مثبت و نمادنگاری

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (16-4)$$

معادلهٔ ۱۵-۴ به صورت زیر در می‌آید

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + k^2 u(x) = 0 \quad (17-4)$$

عمومی‌ترین جواب به صورت $A \sin kx + B \cos kx$ است، اما از شرط $u(0) = 0$ نتیجه می‌گیریم که جواب تنها عبارت است از

$$u(x) = A \sin kx \quad (18-4)$$

شرط $u(a) = 0$ ایجاب می‌کند که

$$ka = n\pi \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (19-4)$$

بنابراین، ویژه‌مقدارهای انرژی با رابطهٔ زیر داده می‌شوند

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (20-4)$$

به سادگی می‌توان دید که جوابها به ازای $A = \sqrt{2/a}$ بهنجار شده‌اند:

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \quad (21-4)$$

$$\begin{aligned}
 \int_0^a dx u_n^*(x) u_m(x) &= \int_0^a dx \frac{2}{a} \sin \frac{n\pi x}{a} \sin \frac{m\pi x}{a} \\
 &= \frac{1}{a} \int_0^a dx \left\{ \cos \frac{(n-m)\pi x}{a} - \cos \frac{(n+m)\pi x}{a} \right\} \\
 &= \frac{\sin(n-m)\pi}{(n-m)\pi} - \frac{\sin(n+m)\pi}{(n+m)\pi} \quad (22-4) \\
 &= 0, \quad n \neq m \quad \text{به‌ازای} \\
 &= 1, \quad n = m \quad \text{به‌ازای}
 \end{aligned}$$

این نتیجه که

$$\int_0^a dx u_n^*(x) u_m(x) = \delta_{mn} \quad (23-4)$$

شان می‌دهد ویژه‌تابعهای مربوط به ویژه‌مقادیرهای مختلف متعامد هستند. اگر ویژه‌تابعها درست به‌هم‌جار شده باشند، چنانکه در اینجا هستند، ۲۳-۴ را شرط راست‌هنجاری می‌نامند. چون جوابهای بالا حقیقی‌اند، همیوگ‌گیری مختلط در این معادله واقعاً لازم نیست، اما آن را برای سازگاری با بیان عامتر درج کرده‌ایم که وقتی به‌کار می‌رود که ویژه‌تابعها مختلط هستند. این مورد را در فصل ۶ نشان می‌دهیم.

بعضی اطلاعات فیزیکی را می‌توان از ویژه‌جوابها به‌دست آورد:

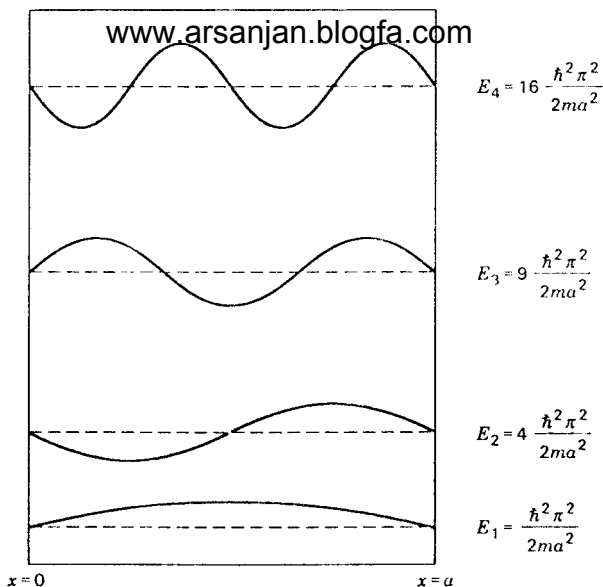
۱. حالت مربوط به کمترین انرژی، حالت پایه، با $u_1(x)$ توصیف می‌شود، و کمترین انرژی برابر است با

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (24-4)$$

توجه کنید که از دیدگاه کلاسیک کمترین انرژی باید مربوط به ذره ساکن در چاه باشد، و با $p = 0$ و $V(x) = 0$ مجموع انرژیهای جنبشی و پتانسیل باید صفر باشد. اما در اینجا می‌بینیم یک انرژی کمینه وجود دارد.

۲. چون جوابها حقیقی هستند داریم

$$\langle p \rangle = 0 \quad (25-4)$$



شکل ۲-۴ ویژه‌جوابها برای ذره در جعبه.

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

$$\langle p^2 \rangle = 2mE_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{a^2} \quad (۲۶-۴)$$

۳. چنانکه از شکل ۲-۴ می‌توان دید، هر چه تعداد گره‌ها (صفرها) در یک جواب بیشتر باشد انرژی مربوط به آن بیشتر است. این موضوع قابل درک است، زیرا انرژی جنبشی با خمیدگی جوابها زیاد می‌شود. مقدار انتظاری انرژی جنبشی عبارت است از

$$\begin{aligned} \langle K \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int dx u^*(x) \frac{d^2 u(x)}{dx^2} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int dx \left[\frac{d}{dx} \left(u^*(x) \frac{du(x)}{dx} \right) - \frac{du^*(x)}{dx} \frac{du(x)}{dx} \right] \end{aligned} \quad (۲۷-۴)$$

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

$$\langle K \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \int dx \left| \frac{du(x)}{dx} \right|^2 \quad (28-4)$$

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

اصل بسط و تعبیر فیزیکی آن

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

$$\psi(x) = \sum C_n \sin \frac{n\pi x}{a} \quad (29-4)$$

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

$$\psi(x) = \sum A_n u_n(x) \quad (30-4)$$

ضرایب A_n را می‌توان از رابطه راست‌هنگاری ۲۳-۴ به دست آورد. در واقع، داریم

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

و بنابراین،

$$A_n = \int_0^a dx u_n^*(x) \psi(x) \quad (31-4)$$

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

$$\psi(x, t) = \sum A_n u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (32-4)$$

می‌توان ویژه‌تابعها را به‌مثابه مجموعه کاملی از بردارهای یک‌متعام \mathbf{i}_k در یک فضای برداری در نظر گرفت. هر بردار \mathbf{a} را می‌توان به‌صورت $\mathbf{a} = a_1 \mathbf{i}_1 + a_2 \mathbf{i}_2 + \dots$ نوشت، و ضریبهای a_k با استفاده از راست‌هنجاری بردارهای یک‌متعام $(\mathbf{i}_k \cdot \mathbf{i}_m = \delta_{km})$ از $a_k = \mathbf{a} \cdot \mathbf{i}_k$ به‌دست می‌آیند. برای تعبیر ضریبهای A_n ، مقدار انتظاری انرژی را در یک حالت اختیاری $\psi(x)$ محاسبه می‌کنیم. چون داخل جعبه داریم $H = p^2/2m$ و خارج از آن $\psi(x) = 0$ و از آنجا که

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

به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \int_0^a dx \psi^*(x) H \psi(x) = \int_0^a dx \psi^*(x) H \sum A_n u_n(x) \\ &= \sum A_n \int_0^a dx \psi^*(x) E_n u_n(x) \quad (33-4) \\ &= \sum E_n |A_n|^2 \end{aligned}$$

علاوه بر این، شرط

$$\int_0^a dx \psi^*(x) \psi(x) = 1 \quad (34-4)$$

ایجاب می‌کند که

$$1 = \int_0^a dx \psi^*(x) \sum A_n u_n(x) = \sum A_n A_n^* = \sum |A_n|^2 \quad (35-4)$$

از معادله ۳۳-۴ و شرط بهنجارش ۳۵-۴ استنباط می‌شود که $|A_n|^2$ که در آن

$$A_n = \int dx u_n^*(x) \psi(x) \quad (36-4)$$

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

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

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

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

مثال: ذره‌ای را در یک جعبه در نظر بگیرید. تابع موج ذره به صورت زیر است

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

که در آن $A = \sqrt{2/a}$ ، و در نتیجه $\int_0^a dx |\psi(x)|^2 = 1$. این احتمال را محاسبه کنید که اندازه‌گیری انرژی ویژه مقدار E_n را به دست دهد.
حل: باید ضریب بسط A_n را محاسبه کنیم:

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

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

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

با توجه به عبارت داخل پرانتز، می‌بینیم که A_n به ازای n های زوج صفر می‌شود. انتگرال را می‌توان

به آسانی محاسبه کرد، و در نتیجه تنها برای n های فرد داریم

$$A_n = \frac{\sqrt{24}}{\pi} 2 \frac{1}{\pi n^2} (-1)^{n+1}$$

بنابراین،

$$|A_n|^2 = \frac{96}{\pi^4 n^4} \quad \text{به‌ازای } n \text{ فرد،}$$

$$= 0 \quad \text{به‌ازای } n \text{ زوج،}$$

با استفاده از این واقعیت که $\sum_{\text{همه}} n^{-4} = \pi^4/96$ و

$$\sum_{\text{همه}} n^{-4} = \sum_{\text{زوج}} n^{-4} + \sum_{\text{فرد}} n^{-4} = \sum_{\text{فرد}} n^{-4} + (1/16) \sum_{\text{همه}} n^{-4}$$

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

$$\frac{96}{\pi^4} \sum_{\text{فرد}} n^{-4} = \frac{96}{\pi^4} \left(1 - \frac{1}{16} \right) \sum_{\text{همه}} n^{-4} = \frac{96}{\pi^4} \cdot \frac{15}{16} \cdot \frac{\pi^4}{96} = 1$$

ویژه‌تابع تکانه، و ذره آزاد

عملگر انرژی H تنها عملگری نیست که دارای ویژه‌تابع و ویژه‌مقدار است. می‌خواهیم معادله ویژه‌مقداری برای عملگر تکانه، یعنی معادله

$$p_{\text{op}} u_p(x) = p u_p(x) \quad (37-4)$$

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

$$\frac{du_p(x)}{dx} = \frac{ip}{h} u_p(x) \quad (38-4)$$

و جواب آن عبارت است از

$$u_p(x) = C e^{ipx/h} \quad (39-4)$$

که در آن C ثابتی است که باید با بهنجارش به دست آوریم، و ویژه‌مقدار p حقیقی است، که در نتیجه ویژه‌تایع در $+\infty$ یا $-\infty$ نامتناهی نمی‌شود. این تنها قید روی p است: می‌گوییم p_{op} دارای طیف پیوسته است. بنابه تشابه با ۲۳-۴، می‌توان انتظار داشت که ویژه‌تایعها از یک شرط راست‌هنجاری پیروی کنند. می‌بینیم که

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx u_{p'}^*(x) u_p(x) &= |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i(p-p')x/\hbar} \\ &= 2\pi |C|^2 \hbar \delta(p-p') \end{aligned} \quad (40-4)$$

با انتخاب

$$u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \quad (41-4)$$

۴۰-۴ به صورت زیر در می‌آید

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx u_{p'}^*(x) u_p(x) = \delta(p-p') \quad (42-4)$$

تفاوت این نتیجه با ۲۳-۴ تنها در آن است که دلتای کرونکر δ_{mn} ، که برای شاخصهای گسسته مناسب است، با تابع دلتای دیراک $\delta(p-p')$ برای شاخصهای پیوسته تعویض شده است.

این حکم که هر بسته موج $\psi(x)$ را می‌توان برحسب مجموعه کاملی از ویژه‌تایعها بسط داد در اینجا نیز قابل اثبات است. برای به دست آوردن مانسته ۴-۳۰، باید در نظر داشت که روی شاخص پیوسته p جمع می‌زنیم، و از این رو می‌نویسیم

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dp \phi(p) \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad (43-4)$$

بنابه تعبیر تلویحی در ۴-۳۶، مجذور قدرمطلق

$$\phi(p) = \int dx \left(\frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right)^* \psi(x) \quad (44-4)$$

یعنی $|\phi(p)|^2$ این احتمال را تعیین می‌کند که از اندازه‌گیری تکانه برای بسته موج اختیاری $\psi(x)$ ویژه‌مقدار p به دست آید. بدین ترتیب، حدسی که در فصل ۳ درباره $\phi(p)$ زدیم توجیه می‌شود.

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

حل: تابع موج اولیه به صورت زیر است

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

چنانکه در ۴-۴۴ دیدیم، دامنه احتمال اینکه ذره در این حالت دارای تکانه p باشد با رابطه زیر داده می‌شود

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

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

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

و در نتیجه

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

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

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

اکنون به هامیلتونی ذره آزاد برمی‌گردیم. وقتی $\psi(x)$ همه جا صفر است، معادله ویژه‌مقداری انرژی به صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + k^2 u(x) = 0 \quad (45-4)$$

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

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

$$\begin{aligned} u_n(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi(x - a/2)}{a} \\ &= \sqrt{\frac{2}{a}} \left\{ \sin \frac{n\pi x}{a} \cos \frac{n\pi}{2} - \cos \frac{n\pi x}{a} \sin \frac{n\pi}{2} \right\} \end{aligned} \quad (46-4)$$

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

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \quad (n = 2, 4, 6, \dots) \quad (47-4)$$

اگر n فرد باشد، به روش مشابه به دست می‌آوریم

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{n\pi x}{a} \quad (n = 1, 3, 5, \dots) \quad (48-4)$$

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

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

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

$$k = \frac{n\pi}{a} \quad (49-4)$$

در این مورد، جوابها عبارت‌اند از

$$\sqrt{\frac{2}{a}} \sin kx; \sqrt{\frac{2}{a}} \cos kx \quad (50-4)$$

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

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

$$\psi(x) = e^{ikx} \quad (51-4)$$

یک مورد خاص از ۴۳-۴ است که در آن

$$\phi(p) = \sqrt{2\pi\hbar} \delta(p - \hbar k) \quad (52-4)$$

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

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \int dp e^{ipx/\hbar} g(p - \hbar k) \\ &= e^{ikx} \int dq e^{iqx/\hbar} g(q) \end{aligned} \quad (53-4)$$

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

مرتبه بزرگی \hbar تقسیم بر پهنای بسته موج در فضای x است، و اگر اندازه این پهنای ماکروسکوپی باشد عدم قطعیت در تکانه قابل چشمپوشی است. بدین ترتیب، شرایط ریاضی بدون هیچ گونه تغییری در فیزیک مسئله برآورده می‌شوند. این توصیف بسته‌موجی در واقع به آنچه از لحاظ فیزیکی روی می‌دهد از همه نزدیکتر است، زیرا هیچ راهی برای آماده‌سازی حالت اولیه، به عنوان مثال شلیک یک تفنگ الکترونی، هرگز نمی‌تواند در عمل یک ویژه‌حالت دقیق تکانه به وجود آورد.

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

$$j(x) = \frac{\hbar}{im} \left[\psi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx} - \frac{d\psi^*(x)}{dx} \psi(x) \right] \quad (54-4)$$

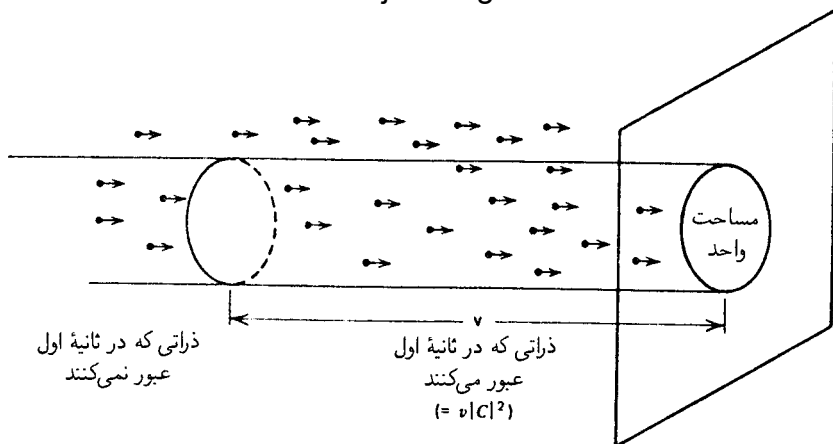
است که در اوایل فصل ۳ معرفی کردیم. برای تابع موج $Ce^{ipx/\hbar}$ ، شار برابر است با $|C|^2 p/m$ ؛ برای تابع موج $Ce^{-ipx/\hbar}$ ، شار برابر است با $-|C|^2 p/m$. با توجه به اینکه در یک مسئله یک بعدی، شار ذرات با چگالی ۱ ذره بر سانتی‌متر که با سرعت $v = p/m$ حرکت می‌کنند — یعنی تعدادی که از یک نقطه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

$$u_p(\mathbf{r}) = C e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / \hbar} \quad (55-4)$$

شار برابر است با $|C|^2 \mathbf{p}/m$ که به شارش ذراتی مربوط می‌شود که با چگالی $|C|^2$ بر سانتی‌متر مکعب با سرعت $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$ از واحد سطح عمود بر \mathbf{p} می‌گذرند (شکل ۴-۳).

واگنی

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



شکل ۴-۳ رابطه میان سرعت ذرات و شار، یعنی تعداد ذراتی که از واحد سطح عمود بر سرعت در واحد زمان می‌گذرند.

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

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx (e^{-ikx})^* e^{ikx} = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i2kx} = 0$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \sin kx \cos kx = 0 \quad (56-4)$$

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

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

$$p_{op} e^{\pm ikx} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} e^{\pm ikx} = \pm \hbar k e^{\pm ikx} \quad (57-4)$$

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

پاریته

ویژه‌تابعهای ذره آزاد $(\sin kx, \cos kx)$ و همچنین ویژه‌تابعهای ذره در جعبه‌ای بین $-a/2$ تا $a/2$ که با ۴۷-۴ و ۴۸-۴ داده شده‌اند، تحت تعویض $x \rightarrow -x$ یا زوج هستند یا فرد. ذره را

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

$$\psi(x) = \sum A_n \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{n\pi x}{a} \quad (58-4)$$

که در آن جمع روی $n = 1, 3, 5, \dots$ گرفته می‌شود. در زمانهای بعد این تابع موج به صورت زیر درمی‌آید

$$\psi(x, t) = \sum A_n \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{n\pi x}{a} e^{-iE_n t/\hbar} \quad (59-4)$$

یعنی تابع موج در زمانهای بعد باز هم نسبت به x زوج است. به همین ترتیب، تابع موجی که ابتدا فرد است فرد باقی می‌ماند. بنابراین، برای جعبه‌ی مزبور که حول $x = 0$ تقارن دارد، زوجیت و فردیت ویژگی‌هایی مستقل از زمان هستند. می‌توان گفت که زوجیت و فردیت ثابت‌های حرکت‌اند. چون هر ثابت حرکتی برای ما مهم است، این بحث را تا اندازه‌ای فرمولبندی می‌کنیم. این کار را با معرفی عملگر پاریته انجام می‌دهیم که قاعده‌ی عمل آن انعکاس $x \rightarrow -x$ است. بنابراین، برای هر تابع موج $\psi(x)$ داریم

$$P\psi(x) = \psi(-x) \quad (60-4)$$

در نتیجه، برای تابع موج زوج می‌توان نوشت

$$P\psi^{(+)}(x) = \psi^{(+)}(x) \quad (61-4)$$

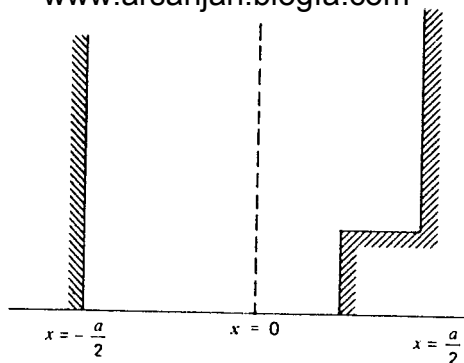
و برای تابع موج فرد

$$P\psi^{(-)}(x) = -\psi^{(-)}(x) \quad (62-4)$$

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

مقادیر ± 1 تنها ویژه‌مقدارهای ممکن‌اند. فرض کنید

$$Pu(x) = \lambda u(x) \quad (63-4)$$



شکل ۴-۴ جعبه‌ای که تحت انعکاس تقارن ندارد.

با اعمال دوباره P ، به دست می‌آوریم

$$P^2 u(x) = P \lambda u(x) = \lambda^2 u(x) \quad (۴-۴۴)$$

اما $P^2 u(x) = u(x)$ ، زیرا دو انعکاس متوالی نباید چیزی را تغییر دهند. در نتیجه، $\lambda^2 = ۱$ ، یعنی $\lambda = \pm ۱$. هر تابع اختیاری را می‌توان به صورت مجموع یک تابع زوج و یک تابع فرد نوشت:

$$\psi(x) = \frac{1}{2}[\psi(x) + \psi(-x)] + \frac{1}{2}[\psi(x) - \psi(-x)] \quad (۴-۴۵)$$

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

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

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

$$\psi(x, \circ) = \psi(-x, \circ) \equiv \psi^{(+)}(x) \quad (۶۶-۴)$$

تحول زمانی با معادله زیر داده می‌شود

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = H\psi(x, t) \quad (۶۷-۴)$$

اگر P را بر این معادله اعمال کنیم به دست می‌آوریم

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} P\psi(x, t) = PH\psi(x, t) \quad (۶۸-۴)$$

تحت شرایط خاصی که

$$PH\psi(x, t) = HP\psi(x, t) \quad (۶۹-۴)$$

که وقتی برقرار است که H تحت $x \rightarrow -x$ زوج باشد، یعنی وقتی که $V(x)$ یک تابع زوج باشد (زیرا d^2/dx^2 زوج است)، داریم

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [P\psi(x, t)] = H[P\psi(x, t)] \quad (۷۰-۴)$$

بنابراین، توابع

$$\psi^{(+)}(x, t) = \frac{1}{2}(\mathbf{1} + P)\psi(x, t) \quad (۷۱-۴)$$

و

$$\psi^{(-)}(x, t) = \frac{1}{2}(\mathbf{1} - P)\psi(x, t) \quad (۷۲-۴)$$

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

$$(PH - HP)\psi(x, t) = 0 \quad (۷۳-۴)$$

یعنی اگر P و H با هم جابه‌جا شوند:

$$[P, H] = 0 \quad (۷۴-۴)$$

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

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

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

مسائل

۱-۴ از میان عملگرهای زیر آنهایی را که خطی هستند مشخص کنید:

$$O_1\psi(x) = x(d/dx)\psi(x) \quad (\text{ب}) \quad O_2\psi(x) = x^2\psi(x) \quad (\text{الف})$$

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

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

۲-۴ مسئله ویژه‌مقداری زیر را حل کنید

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

به‌ازای چه مقادیری از ویژه‌مقدار λ ویژه‌تابعها انتگرال‌پذیر مجذوری هستند؟

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

۳-۴ جابه‌جاگرهای زیر را به‌دست آورید: (الف) $[O_2, O_6]$ ؛ (ب) $[O_1, O_2]$. روش محاسبه $[A, B]$ نوشتن $A(B\psi) - B(A\psi)$ به‌صورت $C\psi$ است.

۴-۴ عدم قطعیت

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle}$$

را برای $u_n(x)$ که در ۲۱-۴ داده شده است محاسبه کنید. با استفاده از $\langle p^2 \rangle$ که با ۲۸-۴ داده شده است حاصلضرب

$$\Delta p \Delta x$$

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

۵-۴ ذره‌ای در حالت پایهٔ جعبه‌ای است که دیواره‌های آن در $x = \pm a$ قرار دارند. دیواره‌های جعبه ناگهان به $x = \pm b$ (که در آن $b > a$) برده می‌شوند. احتمال اینکه ذره در پتانسیل جدید در حالت پایه یافت شود چقدر است؟ احتمال اینکه ذره در اولین حالت برانگیخته باشد چقدر است؟ جواب سادهٔ این مورد توضیح ساده‌ای دارد. این توضیح چیست؟

۶-۴ فرض کنید ذره‌ای با تابع موج

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} & -\frac{a}{2} < x < 0 \\ 0 & 0 < x < \frac{a}{2} \end{cases}$$

در نیمهٔ چپ جعبه‌ای که دیواره‌های آن در $x = \pm a/2$ هستند جایگزین شده است.

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

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

احتمالی به‌دست می‌آیند؟

۷-۴ برای پتانسیلی به‌صورت

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0; \quad x > a \\ 0 & 0 < x < a \end{cases}$$

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$$

فرض کنید تابع موج اولیه بهنجارشده ذره‌ای در این پتانسیل به صورت زیر باشد

$$\psi(x, 0) = A \sin^5 \left(\frac{\pi x}{a} \right)$$

(الف) $\psi(x, t)$ را تعیین کنید.

(ب) A را بدون محاسبه انتگرال $\int d\theta \sin^5 \theta$ به دست آورید.

(ج) اگر $E_n = n^2 \pi^2 \hbar^2 / 2ma^2$ ، احتمال به دست آمدن E_3 در اندازه‌گیری انرژی چقدر

است؟

[راهنمایی: $(e^{i\theta} - e^{-i\theta})/2i$] را به صورت رشته توانی $e^{5i\theta} + \dots - e^{-5i\theta}$ بسط دهید

و آن را به یک رشته شامل $\sin 5\theta$ و غیره تبدیل کنید.]

۸-۴ محاسبه‌های مثال صفحه ۸۲ را برای ذره‌ای که ابتدا در n امین ویژه‌حالت است تکرار کنید.

نشان دهید احتمال مربوط عبارت است از

$$\frac{2n^2 \pi}{\hbar a^3} \frac{1 - (-1)^n \cos pa/h}{[(p/h)^2 - (n\pi/a)^2]^2}$$

این توزیع را ترسیم کنید و نشان دهید که با رابطه عدم قطعیت و به ازای n بزرگ با اصل تطابق سازگار است.

۹-۴ ذره‌ای در فضای آزاد ابتدا به صورت بسته موجی است که با رابطه زیر توصیف می‌شود

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

(الف) احتمال اینکه تکانه ذره در بازه $(p, p + dp)$ باشد چقدر است؟

(ب) مقدار انتظاری انرژی را به دست آورید. آیا می‌توانید با استدلالی تقریبی، بر مبنای “اندازه”

تابع موج و اصل عدم قطعیت، نشان دهید که چرا این جواب باید تقریباً همین باشد.

۱۰-۴ تابع موج ذره‌ای به صورت زیر است

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

شار مربوط به آن را به دست آورید.
۱۱-۴ شار وابسته به ذره‌ای را تعیین کنید که با تابع موج زیر توصیف می‌شود

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

که در آن $u(x)$ یک تابع حقیقی است.

۱۲-۴ ویژه‌تابعهای مربوط به جعبه‌ای را که دیواره‌های آن در $x = \pm a$ هستند در نظر بگیرید. بدون محاسبه انتگرال، نشان دهید مقدار انتظاری کمیت

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

برای تمام ویژه‌تابعها صفر می‌شود.

۱۳-۴ ثابت کنید عملگر پاریته، که با رابطه زیر تعریف می‌شود

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

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

۱۴-۴ با استفاده از مفهوم پاریته، نشان دهید که در مثال صفحه ۷۹ ضرایب A_n برای n های زوج باید همگی صفر شوند.

۱۵-۴ ویژه‌حالت‌های ذره‌ای در جعبه نامتناهی را، که با ۲۱-۴ داده می‌شوند، در نظر بگیرید. $\langle x^2 \rangle$ و $\langle x \rangle$ را محاسبه کنید. با استفاده از این نتایج، کمیت $\Delta x \equiv \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$ را برای ویژه‌حالت $u_n(x)$ به دست آورید. Δx نمایشگر عدم قطعیت در عملگر x است، و باید به برآورد ساده $\Delta x \approx a$ نزدیک باشد.

مراجع

بحث مفصلی درباره خواص معادله‌های دیفرانسیل مرتبه دوم در مکانیک کوانتومی را می‌توان در کتابهای زیر یافت.

پاول ج ل؛ کریسمن ب، مکانیک کوانتومی، ترجمه پاشایی راد و سعادت، تهران، مرکز نشر دانشگاهی، ۱۳۶۸؛ و

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

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



پتانسیلهای یک بعدی

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

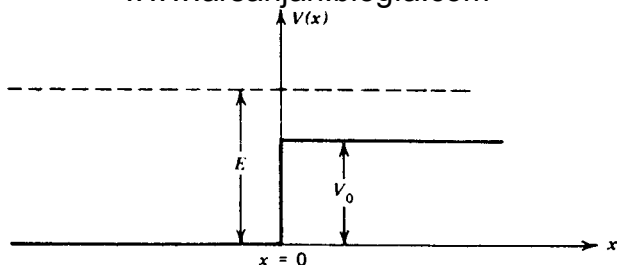
پله پتانسیل

در این مسئله پتانسیل عبارت است از (شکل ۱-۵)

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 & x < 0 \\ &= V_0 & x > 0 \end{aligned} \quad (1-5)$$

معادله شرودینگر

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + V(x)u(x) = Eu(x) \quad (2-5)$$



شکل ۱-۵ پله پتانسیل.

را به صورت زیر می نویسیم

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] u(x) = 0 \quad (3-5)$$

مطابق معمول، قرار می دهیم

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2 \quad (4-5)$$

و همچنین می نویسیم

$$\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} = q^2 \quad (5-5)$$

عمومی ترین جواب معادله ۳-۵ به ازای $x < 0$ که در آن $V(x) = 0$ ، عبارت است از

$$u(x) = e^{ikx} + R e^{-ikx} \quad (6-5)$$

اندازه شار خالص در جهت مثبت x برابر است با

$$\begin{aligned} j &= \frac{\hbar}{2im} [(e^{-ikx} + R^* e^{ikx})(ik e^{ikx} - ik R e^{-ikx}) - \text{همیوگ مختلط}] \\ &= \frac{\hbar k}{m} (1 - |R|^2) \end{aligned} \quad (7-5)$$

e^{ikx} با شار $\hbar k/m$ را می توان یک موج ورودی در نظر گرفت. اگر هیچ پتانسیلی وجود نداشت، می توانستیم e^{ikx} را برای تمام x ها به عنوان جواب انتخاب کنیم، و از این رو R را به وجود پتانسیل نسبت

می‌دهیم. این پتانسیل باعث به وجود آمدن موج بازتابیده $\text{www.arsanjan.blogfa.com}$ با شار بازتابیده $hk|R|^2/m$ می‌شود.

برای $x > 0$ ، جواب را به صورت زیر می‌نویسیم

$$u(x) = T e^{iqx} \quad (۸-۵)$$

البته عمومی‌ترین جواب برای $x > 0$ یک ترکیب خطی از e^{iqx} و e^{-iqx} است، اما جمله‌ای شامل e^{-iqx} موجی را نشان می‌دهد که از $+\infty$ در جهت منفی حرکت می‌کند، و در این "آزمایش" که موج از سمت چپ فرستاده شده است تنها یک موج تراکسیلیده می‌تواند در سمت راست وجود داشته باشد. شار مربوط به ۸-۵ برابر است با

$$j = \frac{\hbar q}{m} |T|^2 \quad (۹-۵)$$

چون در این مسئله وابستگی زمانی نداریم، قانون پایستگی ۱۲-۳ ایجاب می‌کند که $j(x)$ مستقل از x باشد. بنابراین، شار در طرف راست پله باید برابر با شار در طرف چپ باشد، یعنی

$$\frac{\hbar k}{m} (1 - |R|^2) = \frac{\hbar q}{m} |T|^2 \quad (۱۰-۵)$$

پیوستگی تابع موج ایجاب می‌کند که

$$1 + R = T \quad (۱۱-۵)$$

که از تطبیق دو جواب در $x = 0$ به دست آمده است. با وجود ناپیوستگی در پتانسیل، شیب تابع موج نیز پیوسته است. این را می‌توان با انتگرال گرفتن از ۳-۵ از $-\epsilon$ تا $+\epsilon$ (که ϵ کوچک اختیاری و مثبت است) و با استفاده از پیوستگی تابع موج نشان داد:

$$\begin{aligned} \left(\frac{du}{dx} \right)_\epsilon - \left(\frac{du}{dx} \right)_{-\epsilon} &= \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \frac{d}{dx} \frac{du}{dx} \\ &= \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \frac{\hbar m}{\hbar^2} [V(x) - E] u(x) = 0 \end{aligned} \quad (۱۲-۵)$$

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

www.arsanjan.blogfa.com
 انتگرال گیری از معادله ۱۳-۵ از $a - \epsilon$ تا $a + \epsilon$ به دست می آوریم

$$\begin{aligned} \left(\frac{du}{dx}\right)_{a+\epsilon} - \left(\frac{du}{dx}\right)_{a-\epsilon} &= \frac{2m}{\hbar^2} \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx V_0 \delta(x-a) u(x) \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} V_0 u(a) \end{aligned} \quad (13-5)$$

پیوستگی مشتق تابع موج در $x = 0$ ، برای این مسئله، ایجاب می کند که

$$ik(1-R) = iqT \quad (14-5)$$

بنابراین، می توان R و T را از ۱۱-۵ و ۱۴-۵ به دست آورد:

$$\begin{aligned} R &= \frac{k-q}{k+q} \\ T &= \frac{2k}{k+q} \end{aligned} \quad (15-5)$$

با استفاده از این رابطه ها می توان شارهای بازتابیده و تراگسیلیده را محاسبه کرد:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar k}{m} |R|^2 &= \frac{\hbar k}{m} \left(\frac{k-q}{k+q} \right)^2 \\ \frac{\hbar q}{m} |T|^2 &= \frac{\hbar k}{m} \frac{4kq}{(k+q)^2} \end{aligned} \quad (16-5)$$

متذکر می شویم که:

۱. برخلاف مکانیک کلاسیک، که بنابر آن ذره درگذر از یک پله پتانسیل کند می شود (به دلیل پایداری انرژی) اما هرگز بازتابیده نمی شود، در اینجا کسری از ذرات فرودی بازتابیده می شوند، که این البته پیامد ویژگیهای موجی ذره است. بازتاب جزئی نور از فصل مشترک دو محیط یک پدیده آشنا است.

۲. با استفاده از ۱۶-۵ می توان به آسانی واری کرد که قانون پایداری ۱۰-۵ واقعاً صادق است.

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

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

$$u(x) = T e^{-|q|x} \quad (۱۷-۵)$$

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

$$|R|^2 = \left(\frac{k - i|q|}{k + i|q|} \right) \left(\frac{k - i|q|}{k + i|q|} \right)^* = 1 \quad (۱۸-۵)$$

بنابراین، مانند مکانیک کلاسیک، اکنون بازتاب کلی داریم. اما توجه کنید که ضریب

$$T = \frac{2k}{k + i|q|} \quad (۱۹-۵)$$

صفر نیست، و قسمتی از موج به درون ناحیه ممنوع نفوذ می‌کند. این پدیده نفوذ نیز مشخصه امواج است، و به زودی خواهیم دید که "تونل زدن" در سدهایی را امکانپذیر می‌سازد که در توصیف کلاسیک باید کاملاً مانع عبور ذرات باشند. هیچ شاری به طرف راست وجود ندارد، زیرا $j(x)$ برای جواب حقیقی صفر می‌شود حتی اگر ضریب جلو آن را مختلط بگیریم. پدیده بازتاب کلی از لحاظ ریاضی همان پدیده‌ای است که برای نور روی می‌دهد وقتی نور با زاویه‌ای بزرگتر از زاویه حد به فصل مشترک دو محیط (از محیطی با n بزرگتر به محیطی با n کمتر) می‌تابد. این نور بازتاب داخلی کلی می‌یابد، اما در واقع یک میدان الکترومغناطیسی که به طور نمایی کاهش می‌یابد به درون ناحیه ممنوع نفوذ می‌کند.

۵. یک ویژگی پتانسیل فوق‌العاده نیز این است که R و T را می‌توان تنها برحسب E و $(E - V_0)$ نوشت، یعنی مستقل از \hbar که ظاهراً می‌توانیم آن را در اینجا برابر با صفر بگیریم. به نظر می‌رسد که با یک تناقض روبه‌رو هستیم، زیرا $\hbar = 0$ را به حد کلاسیک مربوط می‌کنیم. آیا این وضعیت به معنای آن است که می‌توانستیم برای چنین پتانسیلی بازتاب جزئی را در حد کلاسیک به دست آوریم؟ تناقضی در کار نیست، زیرا یک شرط رسیدن به حد کلاسیک این است که طول موج دوبروی $(\lambda = 2\pi\hbar/p)$ در مقایسه با اندازه‌های مربوط دستگاه کوچک باشد. در این مثال، اندازه مربوط پهنای ناحیه‌ای است که در آن پتانسیل از صفر تا V_0 تغییر می‌کند، و این پهنای وضعیت حادی صفر است. بنابراین، برای این پتانسیل ایده‌آل ناحیه کلاسیک وجود ندارد. اگر این پتانسیل را گرد می‌کردیم آنگاه در انرژی‌های به اندازه کافی زیاد شرط مربوط به رفتار کلاسیک را واقعاً به دست می‌آوردیم، اما چنانکه قبلاً گفتیم اگر انرژی به اندازه کافی زیاد باشد بازتابی وجود ندارد.

اکنون پتانسیل زیر را در نظر می‌گیریم (شکل ۲۰-۵)

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 & x < -a \\ &= -V_0 & -a < x < a \\ &= 0 & a < x \end{aligned} \quad (20-5)$$

با در نظر گرفتن مورد $E > 0$ ، باز هم می‌نویسیم

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (21-5)$$

و

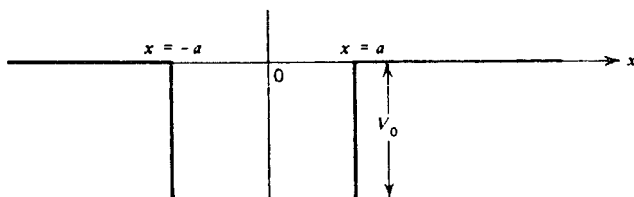
$$q^2 = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2} \quad (22-5)$$

جوابهای معادله شرودینگر در سه ناحیه متمایز برای ذره‌ای که از سمت چپ می‌آید به صورت زیر هستند

$$\begin{aligned} u(x) &= e^{ikx} + R e^{-ikx} & x < -a \\ u(x) &= A e^{iqx} + B e^{-iqx} & -a < x < a \\ u(x) &= T e^{ikx} & a < x \end{aligned} \quad (23-5)$$

این جوابها به ترتیب به شار ورودی $\hbar k/m$ از سمت چپ، شار بازتابیده $\hbar k|R|^2/m$ و شار تراکسیلیده $\hbar k|T|^2/m$ به سمت راست مربوط‌اند. در داخل چاه امواجی هستند که به علت بازتاب در دو ناپوستگی در $\pm a$ در دو جهت حرکت می‌کنند. بنابه پایداری شار باید داشته باشیم

$$\frac{\hbar k}{m}(1 - |R|^2) = \frac{\hbar q}{m}(|A|^2 - |B|^2) = \frac{\hbar k}{m}|T|^2 \quad (24-5)$$



شکل ۲۰-۵ چاه پتانسیل.

با جور کردن توابع موج و همچنین مسطهای آنها، چهار معادله زیر به دست می آیند

$$\begin{aligned} e^{-ika} + R e^{ika} &= A e^{-iq a} + B e^{iq a} \\ ik(e^{-ika} - R e^{ika}) &= iq(A e^{-iq a} - B e^{iq a}) \\ A e^{iq a} + B e^{-iq a} &= T e^{ika} \\ iq(A e^{iq a} - B e^{-iq a}) &= ikT e^{ika} \end{aligned} \quad (25-5)$$

که از آنها، با کمی عملیات جبری، به نتایج زیر می رسیم

$$\begin{aligned} R &= i e^{-2ika} \frac{(q^2 - k^2) \sin 2qa}{2kq \cos 2qa - i(q^2 + k^2) \sin 2qa} \\ T &= e^{-2ika} \frac{2kq}{2kq \cos 2qa - i(q^2 + k^2) \sin 2qa} \end{aligned} \quad (26-5)$$

باز هم، اگر $E \gg V_0$ ، عملاً هیچ بازتابی وجود ندارد زیرا $q^2 - k^2 \ll 2kq$ ؛ و وقتی $q^2 - k^2 \rightarrow 0$ ، تراگسیل به صفر نزدیک می شود. یک نکته مخصوصاً جالب توجه این است که در مورد خاصی که $\sin 2qa = 0$ ، یعنی برای انرژیهای مثبتی که از رابطه زیر به دست می آیند

$$E = -V_0 + \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{4ma^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (27-5)$$

هیچ بازتابی وجود ندارد. این در واقع الگویی است برای آنچه در پراکندگی الکترونهاى کم انرژی (10^{-9} eV) از اتمهای گاز خنثی، مانند نئون و آرگون، روی می دهد که در آن تراگسیل به طور غیرعادی بزرگ است. این اثر، که رامسائر و تاونزند آن را کشف کردند، به عنوان تشدید در تراگسیل توصیف می شود. البته در بحث دقیقتر باید ملاحظات سه بعدی را دخالت داد. به زبان موجی، این اثر ناشی از تداخل ویرانگر بین موج بازتابیده در $x = -a$ و موجی است که یک بار، دو بار، سه بار، ... در لبه $x = a$ بازتابیده می شود. شرط تشدید $2qa = n\pi$ ، که می توان آن را به صورت زیر نوشت

$$\lambda = \frac{2\pi}{q} = \frac{4a}{n} \quad (28-5)$$

درست همان شرطی است که تداخل سنج فابری-پرو را توصیف می کند.

سد پتانسیل

در اینجا پتانسیل عبارت است از

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 & x < -a \\ &= V_0 & -a < x < a \\ &= 0 & a < x \end{aligned} \quad (29-5)$$

تنها انرژیهای $E < V_0$ را در نظر می‌گیریم، یعنی انرژیهایی که به‌ازای آنها در فیزیک کلاسیک هیچ نفوذی به درون سد صورت نمی‌گیرد (شکل ۳-۵). در داخل سد معادله زیر را داریم

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) u(x) = 0$$

یعنی

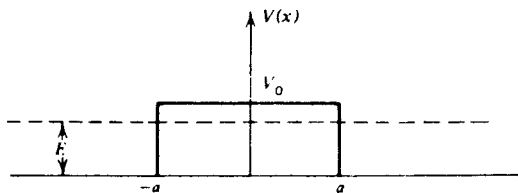
$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} - \kappa^2 u(x) = 0 \quad (30-5)$$

جواب عمومی

$$u(x) = A e^{-\kappa x} + B e^{\kappa x} \quad |x| < a \quad (31-5)$$

را با جوابهای زیر جور می‌کنیم

$$\begin{aligned} u(x) &= e^{ikx} + R e^{-ikx} & x < -a \\ &= T e^{ikx} & x > a \end{aligned} \quad (32-5)$$



شکل ۳-۵ سد پتانسیل. انرژی به گونه‌ای است که ذره کلاسیک کاملاً توسط سد بازتابیده می‌شود.

عملاً لزومی ندارد که معادله‌های مربوطه را حل کنیم، زیرا می‌توان سایج را از ۵-۲۶ با جاگذاری زیر به دست آورد

$$q \rightarrow i\kappa = i\sqrt{(2m/\hbar^2)(V_0 - E)} \quad (33-5)$$

بنابراین، برای مثال داریم

$$T = e^{-2ika} \frac{2k\kappa}{2k\kappa \cosh 2\kappa a + i(k^2 - \kappa^2) \sinh 2\kappa a} \quad (34-5)$$

و در نتیجه

$$|T|^2 = \frac{(2k\kappa)^2}{(k^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2 2\kappa a + (2k\kappa)^2} \quad (35-5)$$

اگرچه انرژی کمتر از ارتفاع سد است اما تراگسیل وجود دارد. این یک پدیده موجی است، و در مکانیک کوانتومی نیز ذرات همین پدیده را از خود نشان می‌دهند. اغلب با این پدیده تونل‌زنی ذره در سد مواجه می‌شویم، و بعضی کاربردهای آن را بعداً بررسی خواهیم کرد. در اینجا لختی به تحلیل یک مشکل ظاهری می‌پردازیم. تابع موج در داخل سد صفر نمی‌شود، و از این رو به نظر می‌رسد احتمالی برای یافتن ذره با انرژی جنبشی منفی وجود دارد. این را چگونه می‌توان تعبیر کرد؟ برای اجتناب از تناقض با فیزیک کلاسیک باید از رابطه عدم قطعیت استفاده کنیم. هر آزمایشی برای مطالعه ذره در داخل سد پتانسیل باید مکان آن را با دقت زیر مشخص کند

$$\Delta x \ll 2a \quad (36-5)$$

این اندازه‌گیری باعث می‌شود تکانه‌ای با عدم قطعیت زیر به ذره منتقل شود

$$\Delta p \gg \hbar/2a \quad (37-5)$$

که متناظر است با انتقال انرژی

$$\Delta E \gg \hbar^2/\lambda m a^2 \quad (38-5)$$

برای مشاهده انرژی جنبشی منفی، این عدم قطعیت باید بسیار کوچکتر از $|E - V_0|$ باشد، و در نتیجه داریم

$$\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \gg E \gg \frac{\hbar^2}{\lambda m a^2} \quad (39-5)$$

که ایجاب می‌کند $\kappa a \gg 1$ ، و تحت این شرایط احتمال نفوذ به درون سد، که از رابطه زیر به دست می‌آید

$$|T|^2 \simeq \left(\frac{4\kappa}{k^2 + \kappa^2} \right)^2 e^{-2\kappa a} \quad (40-5)$$

تا حد صفر کوچک می‌شود (به عنوان مثال، به ازای $\kappa a = 10$ داریم $e^{-2\kappa a} = 10^{-18}$).
رابطه تقریبی برای نسبت شار تراگسیلیده به شار فرودی، $|T|^2$ ، تابع فوق‌العاده حساسی از پهنای سد و اختلاف میان ارتفاع سد و انرژی فرودی است، زیرا

$$\kappa a = \left[\frac{2ma^2}{\hbar^2} (V_0 - E) \right]^{1/2} \quad (41-5)$$

به‌طور کلی، سدهای موجود در پدیده‌های فیزیکی مستطیلی نیستند، و برای بررسی بعضی از کاربردها باید ابتدا رابطه‌ای تقریبی برای ضریب تراگسیل $|T|^2$ از سدی که شکل نامنظم دارد به دست آورد. راه درست انجام این کار، با توجه به این واقعیت که برای اکثر پتانسیلها جواب دقیقی وجود ندارد، استفاده از روش تقریب وتزل-کرامرز-بریلوئن (WKB) است.^۱ بحثی که در اینجا بیان می‌کنیم کمتر ریاضی است.

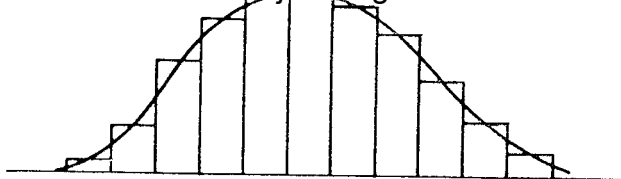
چنانکه دیده می‌شود رابطه ۴۰-۵ حاصلضرب دو جمله است که در آن جمله‌نمایی اهمیت بسیار بیشتری دارد. اگر بنویسیم

$$\ln|T|^2 \simeq -2\kappa(2a) + 2 \ln \frac{2(k a)(\kappa a)}{(k a)^2 + (\kappa a)^2}$$

می‌بینیم که در اکثر شرایط جمله اول به‌ازای هر مقدار معقولی برای κa بر جمله دوم غلبه دارد. روشی که در اینجا به‌کار می‌بریم این است که یک سد خمیده هموار را به‌صورت تعدادی سد مستطیلی در نظر می‌گیریم که کنار هم قرار گرفته‌اند (شکل ۴-۵). چون ضریبهای تراگسیل را وقتی کوچک باشند می‌توان در هم ضرب کرد^۲ (در واقع، وقتی بیشتر شار بازتابیده می‌شود، تراگسیل از

۱. برای تقریب WKB به مبحث ویژه ۳ مراجعه کنید.

۲. این حکم تنها برای قسمت‌نمایی که بیشترین اهمیت را دارد درست است، زیرا می‌توان دید که با دو برابر کردن پهنای ضریب تراگسیل $|T|^2$ تقریباً مجذور می‌شود.



شکل ۴-۵ تقریب سد خمیده هموار با سدهای پتانسیل مستطیلی کنار هم.

هر لایه یک رویداد مستقل و نامحتمل است، می‌توان با تقریب نوشت

$$\begin{aligned} \ln|T|^2 &\approx \sum_{\text{سدهای جزئی}} \ln|T_{\text{جزئی}}|^2 \\ &\approx -2 \sum \Delta x \langle \kappa \rangle \\ &\approx -2 \int_{\text{سد}} dx \sqrt{(2m/\hbar^2)[V(x) - E]} \end{aligned} \quad (42-5)$$

در هر سد جزئی، Δx پهنای سد و $\langle \kappa \rangle$ مقدار میانگین κ مربوط به این سد است. در آخرین گام، حد سدهای بینهایت باریک را گرفته‌ایم. در عبارت بالا واضح است که این تقریب در نزدیکی "نقاط برگشت" که در آنها انرژی و پتانسیل تقریباً برابرند کمترین دقت را دارد، زیرا در این نقاط رابطه ۴۰-۵ تقریب خوبی برای ۳۵-۵ نیست. همچنین مهم است که $V(x)$ تابع کند تغییری از x باشد، زیرا در غیر این صورت تقریب سد منحنی با تعدادی سد مستطیلی تنها هنگامی ممکن است که این سدها باریک باشند، و در اینجا باز هم ۴۰-۵ تقریب بدی است. بررسی مناسب، با استفاده از تقریب WKB، متضمن بحث درباره رفتار در نزدیکی نقاط برگشت است. با وجود این، برای اکثر کاربردها، با تقریب خوب می‌توان نوشت

$$|T|^2 \approx e^{-2 \int dx \sqrt{(2m/\hbar^2)[V(x) - E]}} \quad (43-5)$$

که در آن انتگرال روی ناحیه‌ای گرفته می‌شود که ریشه دوم حقیقی است.

پدیده‌های تونل‌زنی

پدیده تونل‌زنی ذره در فیزیک اتمی و هسته‌ای کاملاً متداول است، و در اینجا چند مثال از آن را بررسی می‌کنیم.

الکترونهاى درون یک فلز را در نظر بگیرید. چنانکه در بحث اثر فوتوالکتریک در فصل ۱ گفته شد، این الکترونها را پتانسیلی در فلز نگه می‌دارد که در تقریب اول می‌توان آن را با جعبه‌ای به ارتفاع متناهی، مطابق شکل ۵-۵الف، نشان داد. این الکترونها عملاً در ترازهای انرژی انباشته شده‌اند که بسیار چگال‌اند، زیرا جعبه بسیار پهن است. ویژگی الکترونها این است که بیشتر از دو الکترون نمی‌توانند یک تراز معین انرژی را اشغال کنند^۳؛ بنابراین، در پایینترین حالت انرژی فلز، تمام ترازها تا یک انرژی مشخص که انرژی فرمی نامیده می‌شود (و به چگالی الکترونهاى آزاد بستگی دارد) پر شده‌اند. وقتی دما از صفر مطلق بیشتر است، تعداد کمی از الکترونها به علت برانگیختگی گرمایی به ترازهای بالاتر می‌روند، اما این تعداد حتی در دمای اتاق هم کم است. اختلاف میان انرژی فرمی و لبهٔ چاه انرژی لازم برای خارج ساختن یک الکترون است؛ این انرژی را تابع کار می‌نامند، که در بحث مربوط به اثر فوتوالکتریک گفته شد. الکترونها را می‌توان با انتقال انرژی به آنها، توسط فوتون یا با گرم کردن، از فلز خارج کرد. همچنین می‌توان آنها را با اعمال یک میدان الکتریکی خارجی \mathcal{E} از فلز جدا کرد. این گسیل سرد به این دلیل روی می‌دهد که میدان خارجی پتانسیلی را که الکترون "می‌بیند"، اگر این الکترون در سطح "دریا"ی ترازها باشد، از W به $(W - e\mathcal{E}x)$ تغییر می‌دهد (شکل ۵-۵ب). در این مورد، ضریب تراگسیل عبارت است از

$$|T|^2 = e^{-2} \int_0^{\infty} dx [\gamma m(W - e\mathcal{E}x)/\hbar^2]^{1/2} \quad (44-5)$$

که چون

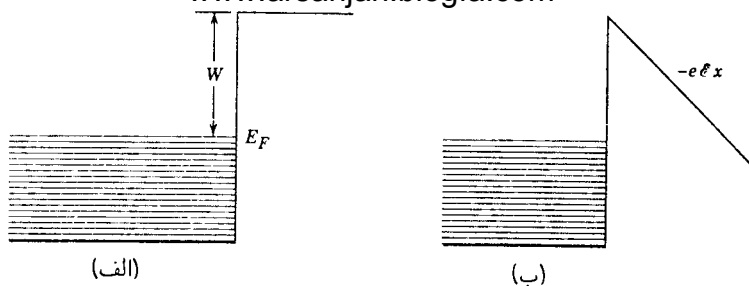
$$\int dx (A + Bx)^{1/2} = \frac{(A + Bx)^{3/2}}{3B/2}$$

به صورت زیر در می‌آید

$$|T|^2 = e^{-4\sqrt{2/3}\sqrt{mW/\hbar^2}(W/e\mathcal{E})} \quad (45-5)$$

این رابطه، که فرمول فاؤلر-نوردهایم نامیده می‌شود، تنها یک توصیف تقریبی از گسیل سرد است. یک اثر اضافی، که به آسانی می‌توان آن را در محاسبه وارد کرد، جذب الکترون به صفحه توسط بار تصویر است. یک اثر دیگر، که بررسی آن بسیار مشکل‌تر است، این است که ناکاملیهایی در سطح فلز وجود دارند که میدان الکتریکی را به صورت موضعی تغییر می‌دهند، و چون \mathcal{E} در نما ظاهر می‌شود این تغییر می‌تواند تفاوت زیادی به وجود آورد. در ضمن، می‌بینیم که نما را می‌توان برحسب ضخامت سد در سطح دریای فرمی نوشت، زیرا این ضخامت از رابطهٔ زیر به دست می‌آید

۳. این ویژگی الکترونها را اصل طرد پاؤلی توصیف می‌کند که آن را در فصل ۸ بررسی می‌کنیم.



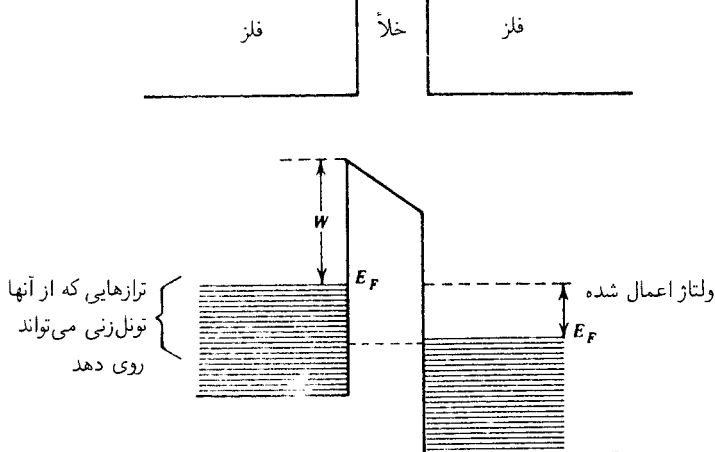
شکل ۵-۵ (الف) ترازهای انرژی الکترون در فلز: E_F انرژی فرمی و W تابع کار است. (ب) پتانسیل به علت وجود میدان الکتریکی خارجی تغییر کرده است.

$$a = \frac{W}{e\mathcal{E}} \quad (۴۶-۵)$$

در پانزده سال گذشته نوعی گسیل سرد کاربرد مهمی در میکروسکوپ تونل زنی روبشی (STM) یافته است. این ابزار مبتنی بر حساسیت بسیار زیاد گسیل سرد به فاصله است. جریان الکتریکی حاصل از اختلاف پتانسیل الکتریکی بین سطح یک فلز و نوک یک میله بسیار تیز تنگستن بالای سطح برحسب فاصله از سطح به طور نمایی تغییر می کند، و از این راه مطالعه بسیار تفصیلی توپوگرافی سطح فلز ممکن می شود. کار STM به بعضی پدیده های غیرمنتظره و پیشرفتهای فناوری بستگی دارد.

قبل از هر چیز، برای به دست آوردن تفکیک ۱ آنگسترومی (یا کمتر) حد پراش متداول ایجاب می کند تابشی از مرتبه ۱۰ keV به کار ببریم. مطالعه غیرتخریبی سطح با این انرژی ممکن نیست. در یک میکروسکوپ الکترونی به الکترونیایی از مرتبه ۱۵۰ eV نیاز داریم، که باز هم برای روبش سطوح بیش از حد زیاد است. چنانکه اوکیف در سال ۱۹۵۶ بیان داشته است، می توان با نوعی میکروسکوپ جدید از حد پراش اجتناب کرد. در این نوع میکروسکوپ، نور از یک حفره کوچک به شیئی که مستقیماً جلو حفره قرار دارد می تابد، و این شیئی نور تراگسیلیده یا بازتابیده را تغییر می دهد. در این میکروسکوپ جدید، این اندازه حفره است که توان تفکیک میکروسکوپ را تعیین می کند. STM بر این اساس کار می کند. نوک تنگستن، که پتانسیل به آن اعمال می شود، به منزله "حفره" عمل می کند.

اختلاف پتانسیل ۱۰ ولتی در بازه حدود 5\AA میدانهای الکتریکی بسیار بزرگی به وجود می آورد، و این میدانها تعدادی اتم از نوک، برای تیز کردن آن، "بیرون می کشند". برای مثال، یک نوک که شعاع آن با ماشینکاری به 1000\AA رسیده است به طور کاملاً عادی باید بتواند، به علت حساسیت جریان به فاصله از سطح نمونه، فاصله های عرضی تا 45\AA را تفکیک کند. برآمدگیهای اتمی ریز این توان تفکیک را به ۱ تا ۲ آنگستروم کاهش می دهند.



شکل ۶-۵ نمودار انرژی برای تونل‌زنی بین دو فلز که با خلأ از هم جدا شده‌اند. تونل‌زنی بین فلزها تنها وقتی ممکن است که حالت‌های خالی در طرف راست وجود داشته باشند. این حالت‌های خالی وقتی به وجود می‌آیند که برای پایین آوردن تراز فرمی در طرف راست ولتاژ eV اعمال شود.

مفید بودن STM به توانایی آزمایشگر برای ثابت نگه داشتن فاصله از سطح، یا به عبارتی جریان، بستگی دارد. اکنون این کار را می‌توان با پایه‌های سرامیکی (پیزوالکتریک) انجام داد، که وقتی میدان الکتریکی به آنها اعمال می‌شود منبسط یا منقبض می‌شوند. محل آنها را می‌توان با دقت بسیار زیاد با تداخل‌سنج تعیین کرد، و از این راه می‌توان فاصله ثابتی بین نوک و سطح روئیده برقرار کرد.

از STM برای مطالعه سطوح فلزات و بعضی نیمرساناها استفاده کرده‌اند. به تازگی، آنها و مولکول‌ها را روی سطوح، یا با لغزاندن آنها توسط نوک یا با بلند کردن آنها از سطح و نشان دادن آنها در جای دیگر توسط نوک، جابه‌جا کرده‌اند.

پدیده تونل‌زنی همچنین وقتی روی می‌دهد که دو صفحه فلزی را به هم نزدیک کنیم. شکل ۶-۵ وضعیت را بدون اختلاف پتانسیل و با اختلاف پتانسیل نشان می‌دهد. بدون اختلاف پتانسیل، تونل‌زنی ممکن نیست زیرا ترازها در دو طرف سد پر هستند. اعمال حتی یک میدان الکتریکی ضعیف باعث تغییر شکل جزئی سد — اثری که قابل چشم‌پوشی است — و پایین رفتن دریا فرمی در یک طرف سد می‌شود. در نتیجه، چند تراز خالی متناظر با ترازهای پر در طرف دیگر سد به وجود می‌آیند، و اکنون تونل‌زنی می‌تواند با ضریب تراکسیل زیر روی دهد

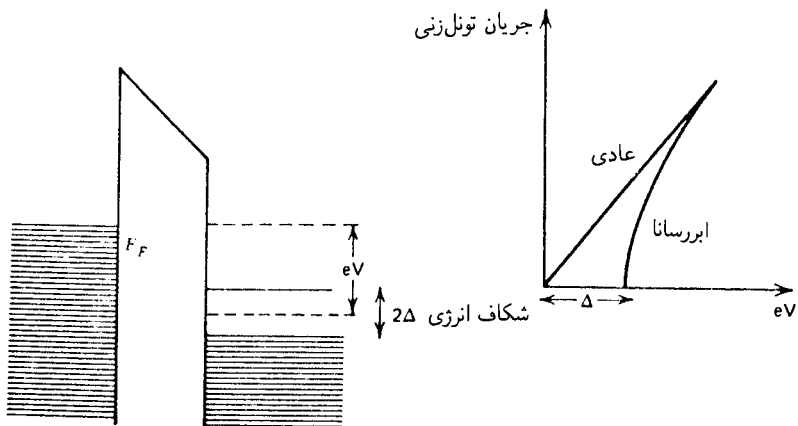
$$|T|^2 \simeq e^{-2\sqrt{(2mW/\hbar^2)a}} \quad (۴۷-۵)$$

این عامل مانند مقاومت عمل می‌کند. متأسفانه این رابطه به عرض گاف a بسیار حساس است، و چون برای تابع کاری از مرتبه چند الکترون ولت این عرض باید از مرتبه چند آنگستروم باشد، صاف کردن و موازی کردن صفحه‌های فلزی به اندازه کافی امکانپذیر نیست. این فرمول برای توضیح جریانهایی به کار می‌رود که بین دو صفحه‌ای برقرارند که با یک اکسید از هم جدا شده‌اند ($\text{Ni} - \text{NiO} - \text{Pb}$) و فاصله آنها را می‌توان تا 5 \AA کوچک کرد، و در این مورد با آزمایش توافق دارد.

تونل زنی در ابررساناها

یک اثر جالب توجه وقتی روی می‌دهد که فلز طرف راست در حالت ابررسانایی باشد. یک مشخصه چنین حالتی این است که در بالای تراز فرمی گافی در چگالی تراز وجود دارد، یعنی بین انرژیهای $E_F - \Delta$ و $E_F + \Delta$ ، که در آنها Δ از مرتبه 10^{-2} eV و انرژی فرمی E_F از مرتبه 10 eV است، هیچ حالت مجازی وجود ندارد. این ترازها از بین نمی‌روند بلکه به بالا و پایین فشرده می‌شوند، و در نتیجه چگالی تراز درست در پایین و بالای گاف بسیار زیاد است. اگر میدان الکتریکی به اندازه کافی کوچک باشد، یعنی اگر $a\mathcal{E} \leq \Delta/e$ ، تونل زنی روی نخواهد داد زیرا الکترونها جایی برای رفتن ندارند. ویژگیهای کیفی رابطه جریان-ولتاژ و نمودار انرژی در شکل ۷-۵ نشان داده شده‌اند. این ویژگیها با آزمایشهایی که جیاتور برای نخستین بار در سال ۱۹۶۰ انجام داد. به خوبی توافق دارند.

از این آزمایشهای تونل زنی می‌توان برای مطالعه جزئیات حالت ابررسانایی استفاده کرد. اعتقاد بر این است که گاف موجود در چگالی تراز انرژی در بالای دریای فرمی ناشی از جاذبه میان



شکل ۷-۵ نمودار انرژی برای تونل زنی از فلز به ابررسانا. در اینجا، برخلاف تونل زنی فلز-فلز در شکل ۶-۵، تونل زدن به درون گاف انرژی مجاز نیست. این وضعیت، چنانکه نشان داده شده است، بر مشخصه جریان-ولتاژ تأثیر می‌گذارد.

زوجهای الکترون است، و برابر است با انرژی لازم برای شکستن این زوج. با این تصویر، می‌توان انتظار داشت که پرتوهی به "ساندویچ" ابررسانا-اکسید-ابررسانا بعضی از زوجها را بشکند، و تک‌الکترونیایی که از فوتونها انرژی جنبشی می‌گیرند می‌توانند به ناحیه ترازهای اشغال‌نشده در بالای گاف بروند، و سپس در گاف تونل بزنند، و در نتیجه جریان افزایش می‌یابد. این تونل‌زنی "فوتون-یاری" مشاهده شده است. در مثالهای دیگر تونل‌زنی در ابررساناها اتصالهای جوزفسون دخالت دارند.^۴

تونل‌زنی در فیزیک هسته‌ای

پدیده تونل‌زنی در فیزیک هسته‌ای نیز اهمیت دارد. هسته‌ها دستگاههای بسیار پیچیده‌ای هستند، اما در شرایط خاصی می‌توان آنها را به‌صورت ذرات مستقلى در نظر گرفت که ترازهای یک چاه پتانسیل را اشغال کرده‌اند. با این تصویر ذهنی، واپاشی یک هسته به ذره α (هسته هلیوم با $Z = 2$) و هسته فرزند را می‌توان تونل‌زنی ذره α در سدی توصیف کرد که از پتانسیل کولنی میان هسته فرزند و ذره α ناشی می‌شود. ذره α را نباید در حالت مقید در نظر گرفت؛ اگر چنین بود، هسته نمی‌توانست واپاشد. در واقع، باید انرژی این ذره را مثبت گرفت، و تنها مانع واپاشی آن وجود سد است.^۵

می‌نویسیم

$$|T|^2 = e^{-G} \quad (48-5)$$

که در آن

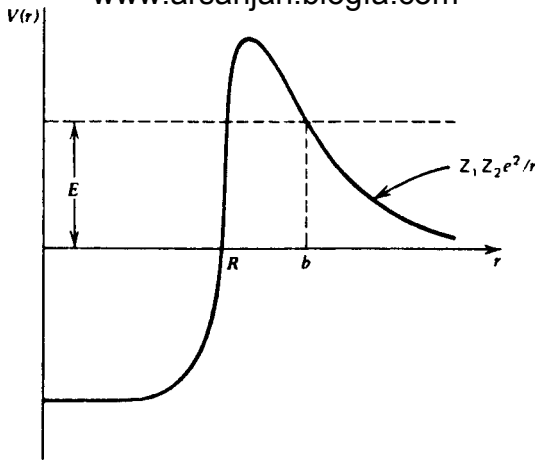
$$G = 2 \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{1/2} \int_R^b dr \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} - E \right)^{1/2} \quad (49-5)$$

R شعاع هسته است،^۶ و b نقطه برگشت است که از صفر شدن انتگرالده به‌دست می‌آید (شکل ۸-۵)؛ A_1 بار هسته فرزند، و Z_2 بار ذره‌ای است که گسیل می‌شود (در اینجا برابر با ۲ است). انتگرال را

۴. بحث زیبایی درباره ابررسانایی و اثرهای مختلف جوزفسون را می‌توان در فصل ۲۱ از جلد سوم کتاب زیر یافت: R H Feynman, R B Leighton and M Sands, *Feynman Lectures on Physics*, Addison-Wesley, Reading Mass, 1965.

۵. اگر تصور این امر برای شما مشکل است که دافعه مانع جدا شدن دو جسم می‌شود، فرایند وارون، یعنی گیراندازی α را در نظر بگیرید. بدیهی است که سد می‌خواهد ذره α را دور نگه دارد.

۶. در واقع، اولین برآوردهای شعاع هسته از مطالعه واپاشی آلفا به‌دست آمدند. امروزه از اندازه توزیع بار که با پراکندگی الکترون‌ها از هسته‌ها به‌دست می‌آید برای تعیین شعاع هسته‌ها استفاده می‌کنند. البته نباید انتظار داشت که این دو رهیافت دقیقاً نتیجه یکسانی به‌دست دهند.



شکل ۵-۸ سد پتانسیل برای واپاشی آلفا.

می توان دقیقاً محاسبه کرد:

$$\int_R^b dr \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{b} \right)^{1/2} = \sqrt{b} \left[\cos^{-1} \left(\frac{R}{b} \right)^{1/2} - \left(\frac{R}{b} - \frac{R^2}{b^2} \right)^{1/2} \right] \quad (50-5)$$

در انرژیهای کم (نسبت به ارتفاع سد کولنی در $r = R$) داریم $b \gg R$ ، و در نتیجه

$$G \simeq 2 \left(\frac{2mZ_1 Z_2 e^2 b}{h^2} \right)^{1/2} \left[\frac{\pi}{2} - \left(\frac{R}{b} \right)^{1/2} \right] \quad (51-5)$$

که در آن $b = Z_1 Z_2 e^2 / E$. اگر برای انرژی ذره α بنویسیم $E = mv^2/2$ که در آن v سرعت نهایی ذره است، به دست می آوریم

$$G \simeq \frac{2\pi Z_1 Z_2 e^2}{h v} = 2\pi \alpha Z_1 Z_2 \left(\frac{c}{v} \right) \quad (52-5)$$

زمانی را که طول می کشد تا ذره α از هسته خارج شود می توان به روش زیر برآورد کرد: احتمال عبور از سد در هر برخورد e^{-G} است. بنابراین، تعداد برخوردهای لازم برای خروج برابر است با $n \simeq e^G$. زمان بین برخوردها از مرتبه $2R/v$ است که در آن R شعاع هسته و v سرعت ذره α در داخل هسته است. بنابراین، طول عمر برابر است با

$$\tau \simeq \frac{2R}{v} e^G \quad (53-5)$$

سرعت ذره α در داخل هسته مفهوم مبهمی است، و کل تصویر در واقع کلاسیک است، و از این‌رو عامل جلو e^G را نمی‌توان بدون یک نظریه مناسب‌تر به‌درستی پیش‌بینی کرد. از ملاحظات بالا تنها مرتبه بزرگی آن را به‌دست می‌آوریم. برای ذره α با انرژی 1MeV داریم

$$v = \sqrt{\frac{2E}{m}} = c \sqrt{\frac{2E}{mc^2}} = 3 \times 10^{10} \sqrt{\frac{2}{4 \times 940}} \simeq 7.0 \times 10^8 \text{ cm/s}$$

علاوه بر این، برای R می‌گیریم

$$R \simeq 1.5 \times 10^{-12} A^{1/2} \text{ cm} \quad (54-5)$$

و به‌ازای $A = 216$ ، عامل مزبور را $10^{-21} \times 2.6$ به‌دست می‌آوریم. همچنین، می‌توان G را به‌صورت زیر نوشت

$$G \simeq 4 \frac{Z_1}{\sqrt{E(\text{MeV})}} \quad (55-5)$$

بنابراین، برای α های کم‌انرژی، خط راست زیر به‌دست می‌آید

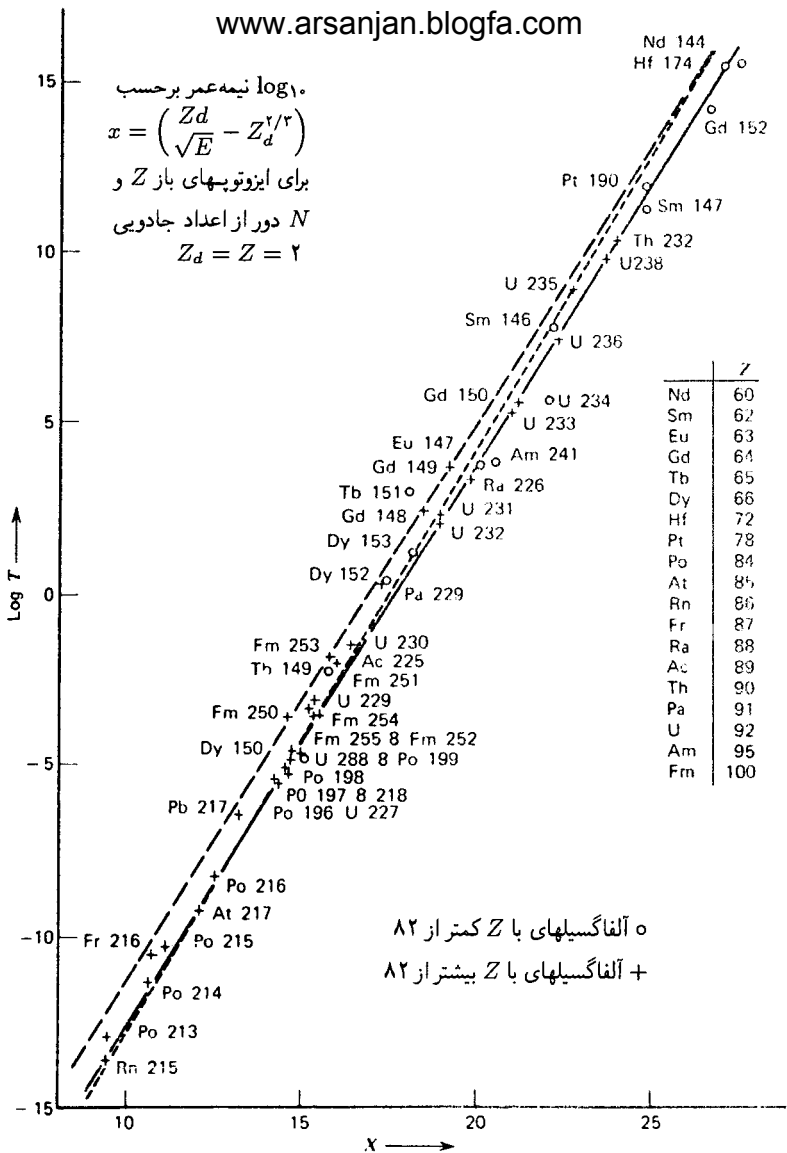
$$\log_{10} \frac{1}{\tau} \simeq \text{const.} - 1.73 \frac{Z_1}{\sqrt{E(\text{MeV})}} \quad (56-5)$$

که ثابت آن، وقتی τ به‌جای ثانیه برحسب سال سنجیده می‌شود، از مرتبه ۲۷ تا ۲۸ است. شکل ۵-۹ نشان می‌دهد که با داده‌های مربوط به طول عمر تعداد زیادی گسیلنده‌های α برازش خوبی با فرمول زیر به‌دست می‌آید

$$\log_{10} \frac{1}{\tau} = C_2 - C_1 \frac{Z_1}{\sqrt{E}}$$

که در آن $C_1 = 1.61$ و $C_2 = 28.9 + 1.6 Z_1^{3/2}$. بدین‌ترتیب، ملاحظات بسیار ساده برازش نسبتاً چشمگیری با داده‌ها به‌دست می‌دهند.

برای انرژی‌های بزرگتر α ، عامل G تابع R است، و با $R = r_0 A^{1/2}$ می‌بینیم که r_0 ثابت است، یعنی این تصور که یک سد کولنی جای پتانسیل واقعی را در خارج از هسته به‌عهده گرفته است چندان بی‌اعتبار نیست. در اینجا نیز با بررسی‌های ساده کیفی می‌توان داده‌ها را توجیه کرد. این واقعیت که احتمال یک واکنش (مثلاً گیراندازی) بین هسته‌ها با عامل $e^{-2(Z_1 Z_2 / \sqrt{E})}$ (برای α ، $Z_2 = 2$) کاهش می‌یابد ایجاب می‌کند که در انرژی‌های کم و یا برای Z های بزرگ این

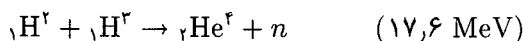
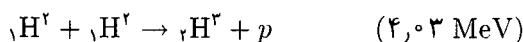
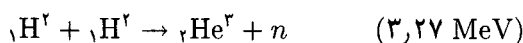


شکل ۹-۵ نمودار $\log_{10} T / \tau$ بر حسب $C_2 - C_1 Z_1 / \sqrt{E}$ با $C_1 = 1.61$ و $C_2 = 28.9 + 1.6 Z_1^{2/3}$ که کند تغییر است.^۷

واکنشها نادر باشند. به همین دلیل است که تمام کوششها برای ساختن رآکتورهای گرمابهسته‌ای را

7. E. K. Hyde, I. Perlman, and G. T. Seaborg, *The Nuclear Properties of the Heavy Elements*, Vol. 1, Prentice Hall, Englewood Cliffs, N. J. (1964), reprinted by permission.

روی سوختن هیدروژن (در واقع هیدروژن سنگین — دوتریم) متمرکز می‌کنند: www.arsanjan.blogfa.com



زیرا واکنشهایی که در آنها عناصری با Z های بزرگتر دخیل‌اند به انرژیهای بسیار بیشتر، یعنی دماهای بسیار زیادتر، نیاز دارند، و از این‌رو مسائل محصورسازی آنها جدی‌تر است. به همین دلیل، در رآکتورهای هسته‌ای برای شکافت عناصر سنگین از نوترون استفاده می‌کنند. پروتونها، در انرژیهای کم موجود، نمی‌توانند برای انجام واکنش با هسته‌ها به اندازه کافی به آنها نزدیک شوند.

حالت‌های مقید در چاه پتانسیل

علاوه بر جوابهای مربوط به $E > 0$ که در بخش چاه پتانسیل بررسی کردیم، جالب توجه است که برای پتانسیل منفی، یعنی $V_0 < 0$ در $0 < x < a$ ، جوابهایی به‌ازای $E < 0$ نیز وجود دارند. خواهیم دید که این جوابها گسسته‌اند. با نمادنگاری

$$\kappa^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} \quad (57-5)$$

جوابهای مربوط به ناحیه‌های خارج از چاه که در بینهایت کراندار هستند عبارت‌اند از

$$\begin{aligned} u(x) &= C_1 e^{\kappa x} & x < -a \\ u(x) &= C_2 e^{-\kappa x} & a < x \end{aligned} \quad (58-5)$$

چون با تابعهای حقیقی سروکار داریم، بهتر است جواب داخل چاه را به‌صورت زیر بنویسیم

$$u(x) = A \cos qx + B \sin qx \quad -a < x < a \quad (59-5)$$

توجه کنید که

$$q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - |E|) > 0 \quad (60-5)$$



از جور کردن جوابها و مشتقها در لبه‌های $x = \pm a$ داریم

$$\begin{aligned} C_1 e^{-\kappa a} &= A \cos qa - B \sin qa \\ \kappa C_1 e^{-\kappa a} &= q(A \sin qa + B \cos qa) \\ C_2 e^{-\kappa a} &= A \cos qa + B \sin qa \\ -\kappa C_2 e^{-\kappa a} &= -q(A \sin qa - B \cos qa) \end{aligned} \quad (61-5)$$

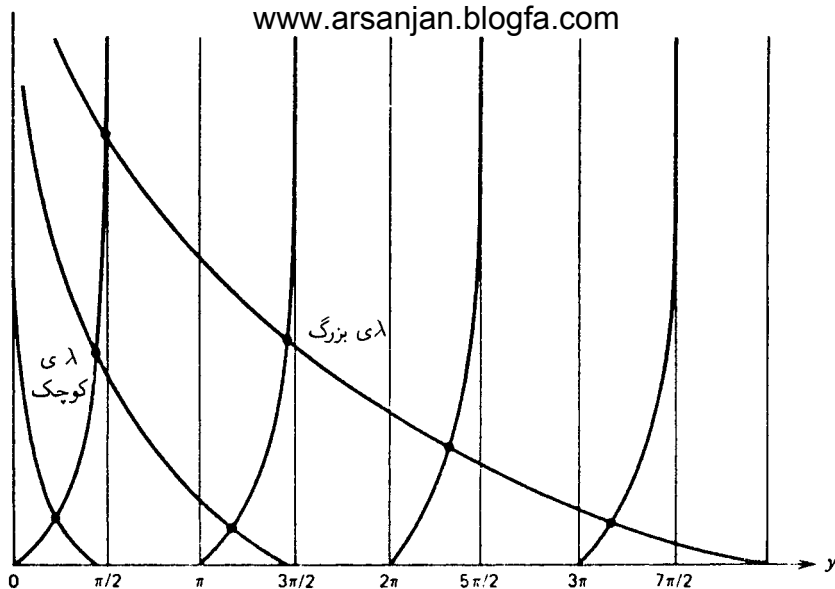
از ترکیب این معادله‌ها به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \kappa &= q \frac{A \sin qa - B \cos qa}{A \cos qa + B \sin qa} \\ &= q \frac{A \sin qa - B \cos qa}{A \cos qa + B \sin qa} \end{aligned} \quad (62-5)$$

این تساوی ایجاب می‌کند که $AB = 0$ ، یعنی جوابها نسبت به x یا زوج‌اند ($B = 0$) یا فرد ($A = 0$). این توابع موج تقریباً به صورتی هستند که در شکل ۱۰-۵ نشان داده شده‌اند. حالت پایه، که گره ندارد، زوج است. این یک ویژگی کلی دستگاههای ساده است. شرایط تعیین‌کننده انرژی از ۶۲-۵ به دست می‌آیند:

$$\begin{aligned} \kappa &= q \tan qa \quad \text{جوابهای زوج} \\ \kappa &= -q \cot qa \quad \text{جوابهای فرد} \end{aligned} \quad (63-5)$$

این رابطه‌ها را جدا از هم بررسی می‌کنیم.



شکل ۱۱-۵ موقعیت ویژه‌مقدارهای گسسته برای جوابهای زوج در چاه مربعی. منحنیهای صعودی نمودار $\tan y$ هستند؛ منحنیهای نزولی تابع $\sqrt{\lambda - y^2}/y$ را به‌ازای مقادیر مختلف λ نمایش می‌دهند.

(الف) جوابهای زوج:

با نمادنگاری

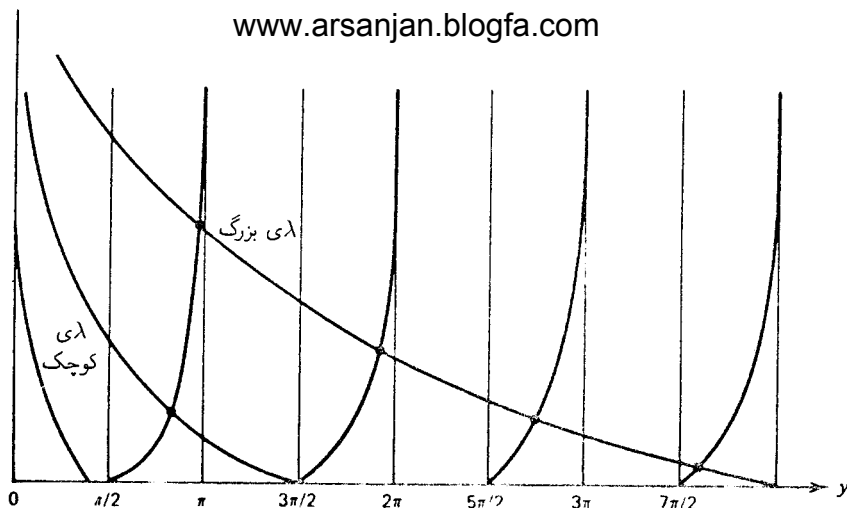
$$\lambda = \frac{2mV_0 a^2}{h^2} \quad (۶۴-۵)$$

$$y = qa$$

اولین رابطه از ۶۳-۵ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y} = \tan y \quad (۶۵-۵)$$

اگر $\tan y$ و $\sqrt{\lambda - y^2}/y$ را برحسب y ترسیم کنیم (شکل ۱۱-۵)، نقاط تلاقی آنها ویژه‌مقدارها را تعیین می‌کنند. این ویژه‌مقدارها یک مجموعه گسسته تشکیل می‌دهند. هر چه λ بزرگتر باشد، منحنیهای مربوط به $\sqrt{\lambda - y^2}/y$ دورتر می‌روند، یعنی پتانسیل عمیقتر و یا پهنتر است تعداد حالت‌های مقید بیشتر است. این شکل همچنین نشان می‌دهد که هر قدر هم که λ کوچک باشد، همیشه دست‌کم یک حالت مقید وجود دارد. این مشخصه چاه جاذب یک‌بعدی است و برای



شکل ۱۲-۵ موقعیت ویژه مقدارهای گسسته برای جوابهای فرد در چاه مربعی. منحنیهای صعودی نمودار $-\cot y$ هستند؛ منحنیهای نزولی تابع $\sqrt{\lambda - y^2}/y$ را به ازای مقادیر مختلف λ نمایش می‌دهند. توجه کنید که به ازای $(\pi/2)^2 < \lambda$ هیچ ویژه مقدار فردی وجود ندارد.

پتانسیلهای سه بعدی، که رفتاری بسیار شبیه به مسئله جوابهای فرد دارند که بعداً بررسی می‌کنیم، صادق نیست. با بزرگتر شدن λ ، فاصله ویژه مقدارها برحسب y به مقدار ثابتی میل می‌کند، و نقاط تلاقی از رابطه تقریبی زیر به دست می‌آیند

$$y \simeq \left(n + \frac{1}{4}\right) \pi \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (۶۶-۵)$$

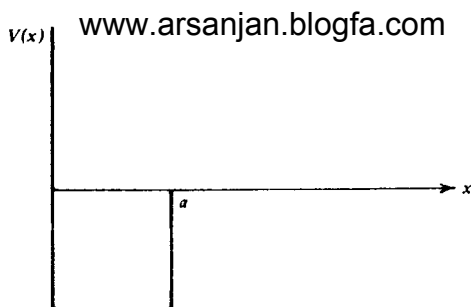
که همان رابطه ویژه مقدار برای جوابهای زوج در یک چاه نامتناهی است که مرکز آن در مبدأ است (ویژه تابعها در ۴-۴۸ داده شده‌اند). این نتیجه غیرمنتظره نیست، زیرا برای حالتی که در اعماق چاه قرار دارند نامتناهی نبودن آن اهمیت چندانی ندارد.

(ب) جوابهای فرد:

در اینجا رابطه ویژه مقدار به صورت زیر است

$$\frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y} = -\cot y \quad (۶۷-۵)$$

چون $-\cot y = \tan(\pi/2 + y)$ ، نمودار شکل ۱۲-۵ همان نمودار شکل ۱۱-۵ است با این تفاوت که منحنیهای تانژانت به اندازه $\pi/2$ جابه‌جا شده‌اند. رفتار λ بزرگ کم و بیش یکسان است،



شکل ۵-۱۳ پتانسیل معادل برای جوابهای فرد مسئله حالت مقید چاه مربعی.

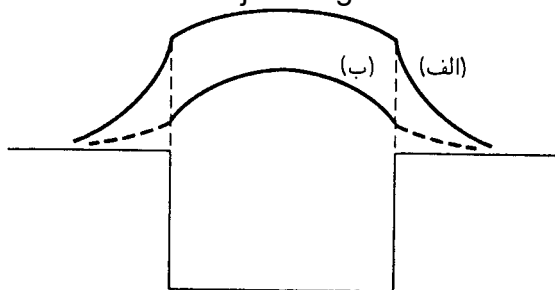
و به جای ۵-۶۶ داریم

$$y \simeq n\pi \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (5-68)$$

برخلاف مورد جوابهای زوج، در اینجا به شرطی تلاقی روی می‌دهد که $\sqrt{\lambda^2 - \pi^2/4} > 0$ ، یعنی اگر

$$\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} \geq \frac{\pi^2}{4} \quad (5-69)$$

جوابهای فرد همگی در $x = 0$ صفر می‌شوند، و در نتیجه مسئله حالت مقید برای جوابهای فرد با مورد چاه پتانسیل شکل ۵-۱۳ یکسان است، زیرا برای این چاه باید شرط $u(0) = 0$ را اعمال کنیم. خواهیم دید که چنین شرایطی بر توابع موج در جهان سه‌بعدی اعمال می‌شوند. محاسبات مفصلی که انجام دادیم به درک کیفی علت وجود ویژه‌مقدارهای گسسته کمک می‌کنند. این ویژه‌مقدارها از این‌رو ظاهر می‌شوند که توابع موج باید در بینهایت صفر شوند. این را می‌توان به صورت نموداری در شکل ۵-۱۴ دید. تابع موج حالت پایه زوج-پاریته در داخل چاه، که به صورت $\cos qx$ است، باید به طور پیوسته به یک نمایی نزولی $e^{-\alpha|x|}$ با $\alpha^2 = 2mE_B/\hbar^2$ متصل شود. انرژی بستگی بزرگ به معنای یک نمایی است که به سرعت افت می‌کند. چون $q^2 = (2mV_0/\hbar^2 - \alpha^2)$ ، انرژی بستگی بزرگ به معنای q^2 کوچک است، یعنی تابع موج کاملاً تخت است: بنابراین، جور کردن ناممکن است. به تدریج که E_B آزمونی را کاهش می‌دهیم، نمایی با سرعت کمتری افت می‌کند و تابع موج داخل چاه خمیدگی بیشتری می‌یابد، و در نتیجه در یک نقطه جور کردن (شیب پیوسته) ممکن می‌شود. اگر مقدار α را از این نقطه کمتر کنیم، منحنی خارجی تخت‌تر از آن خواهد بود که با تابع موج خمیده‌تر داخلی جور شود. برای اولین حالت برانگیخته، تابع موج فرد-پاریته در مبدأ صفر می‌شود، و در نتیجه اگر بتواند در داخل چاه پتانسیل به طرف محور افقی برگردد تنها می‌تواند به یک نمایی نزولی متصل شود. شرط برگشت آن درست



شکل ۱۴-۵ (الف) ناچوری با E_B بیش از حد بزرگ. (ب) ناچوری با E_B بیش از حد کوچک.

به اندازه‌ای که بتواند به یک خط راست ($\alpha = 0$) متصل شود این است که $\sin qa = 1$ ، و در نتیجه $qa = \pi/2$ ، که با شرط ۶۹-۵ متناظر است.

پتانسیلهای تابع دلتا

پتانسیلی را در نظر می‌گیریم که رفتار فضایی آن به صورت $\delta(x)$ است. چون $\delta(x)$ دارای بعد عکس طول است، بهتر است که پتانسیل جاذب $V(x)$ را به صورت زیر بنویسیم

$$V(x) = -\frac{\hbar^2 \lambda}{2ma} \delta(x) \quad (70-5)$$

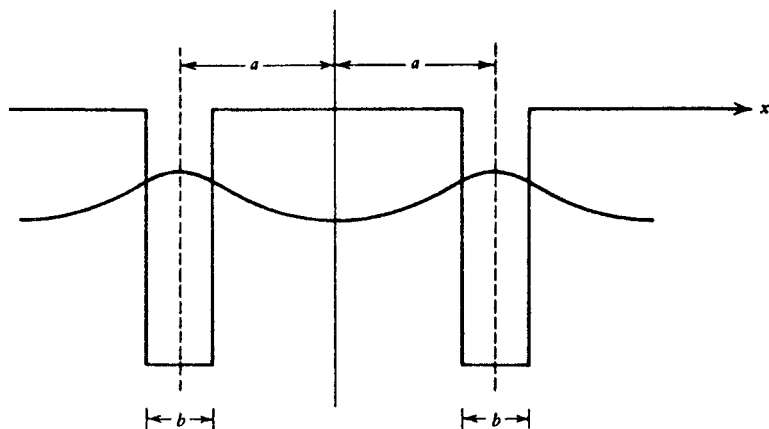
در اینجا a یک کمیت اختیاری با بعد طول است، و در نتیجه λ کمیت بی‌بعدی است که آن را برای مشخص کردن قدرت پتانسیل نوشته‌ایم. معادله‌ای که باید حل کنیم، به‌ازای $E < 0$ ، عبارت است از

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} - \kappa^2 u(x) = -\frac{\lambda}{a} \delta(x) u(x) \quad (71-5)$$

که در آن $\kappa^2 = 2m|E|/\hbar^2$. جواب باید در همه جا، بجز $x = 0$ ، در معادله $d^2 u/dx^2 - \kappa^2 u = 0$ صدق کند، و اگر بخواهیم در $x \rightarrow \pm\infty$ صفر شود باید بنویسیم

$$\begin{aligned} u(x) &= e^{-\kappa|x|} & x > 0 \\ &= e^{\kappa x} & x < 0 \end{aligned} \quad (72-5)$$

به دلیل پیوستگی تابع موج، ضرایب جوابهای دو ناحیه یکسان هستند (و در اینجا آنها را برابر با ۱ گرفته‌ایم — می‌توان بعداً تابع را بهنجار کرد). مشتق تابع موج در این مورد پیوسته نیست. چنانکه



شکل ۱۵-۵ چاه پتانسیل یک بعدی دوگانه. تابع موج یک حالت مقید ترسیم شده است. وضعیت حدی ۷۵-۵ را در نظر می گیریم.

قبلاً گفتیم (معادله ۱۳-۵)، داریم

$$\left(\frac{du}{dx}\right)_{x=0+} - \left(\frac{du}{dx}\right)_{x=0-} = -\frac{\lambda}{a}u(0) \quad (۷۳-۵)$$

از اینجا رابطه ویژه مقدار به دست می آید:

$$-\kappa - \kappa = -\frac{\lambda}{a}$$

یعنی

$$\kappa = \frac{\lambda}{2a} \quad (۷۴-۵)$$

پتانسیل تابع دلتای دوگانه جالبتر است زیرا راه سریعی برای مطالعه خواص چاه دوگانه عمیق و کم عرض، که در شکل ۱۵-۵ نشان داده شده است، فراهم می کند. می نویسیم

$$(2m/\hbar^2)V(x) = -\frac{\lambda}{a}[\delta(x-a) + \delta(x+a)] \quad (۷۵-۵)$$

در اینجا a در توصیف بزرگی پتانسیل دیگر یک طول اختیاری نیست، بلکه به شکل پتانسیل بستگی دارد. چون پتانسیل تحت تعویض $x \rightarrow -x$ متقارن است، جوابها باید پاریته معین داشته باشند، و ابتدا جوابهای زوج را در نظر می گیریم.

www.arsanjan.blogfa.com

۱. برای جواب زوج می‌نویسیم

$$\begin{aligned} u(x) &= e^{-\kappa x} & x > a \\ &= A \cosh \kappa x & a > x > -a \\ &= e^{\kappa x} & x < -a \end{aligned} \quad (۷۶-۵)$$

و از پیوستگی تابع موج به دست می‌آوریم

$$e^{-\kappa a} = A \cosh \kappa a \quad (۷۷-۵)$$

به علت تقارن، کافی است شرط ناپیوستگی برای مشتق در $x = a$ را به کار ببریم. چیز جدیدی از $x = -a$ حاصل نمی‌شود. به دست می‌آوریم

$$-\kappa e^{-\kappa a} - \kappa A \sinh \kappa a = -\frac{\lambda}{a} e^{-\kappa a} \quad (۷۸-۵)$$

و رابطه ویژه مقدار عبارت است از

$$\tanh \kappa a = \frac{\lambda}{\kappa a} - 1 \quad (۷۹-۵)$$

این رابطه را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\frac{\lambda}{\kappa a} - 1 = \frac{e^{\kappa a} - e^{-\kappa a}}{e^{\kappa a} + e^{-\kappa a}} = \frac{1 - e^{-2\kappa a}}{1 + e^{-2\kappa a}}$$

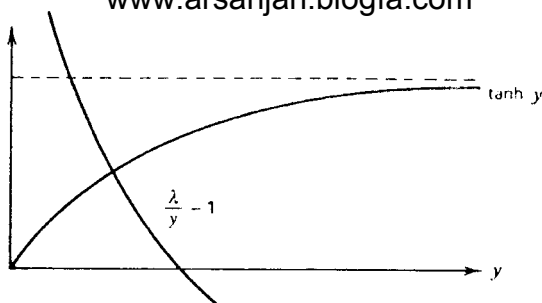
که از آن به دست می‌آوریم

$$e^{-2\kappa a} = \frac{2\kappa a}{\lambda} - 1 \quad (۸۰-۵)$$

برای λ بزرگ باید $2\kappa a$ اندکی بزرگتر از λ باشد. اگر $2\kappa a = \lambda + \epsilon$ را امتحان کنیم، معادله ۸۰-۵ تا مرتبه ϵ به صورت $\epsilon/\lambda \approx e^{-\lambda}$ در می‌آید، و بنابراین

$$2\kappa a = \lambda + \lambda e^{-\lambda} \quad (۸۱-۵)$$

می‌توان دید که برای جواب زوج همواره یک تک حالت مقید وجود دارد. شکل ۱۶-۵ نمودار معادله


 شکل ۱۶-۵ حل معادله ویژه مقدار $\lambda/y - 1 = \tanh y$

ویژه مقدار ۷۹-۵ را با $y = \kappa a$ نشان می‌دهد. از این شکل واضح است که، منحنی $\tanh y$ با $\lambda/y - 1$ تنها در یک نقطه تلاقی می‌کند. بدیهی است که در $y = \lambda$ طرف راست ۷۹-۵ صفر می‌شود، در حالی که $\tanh y > 0$. بنابراین، تلاقی به‌ازای $y < \lambda$ روی می‌دهد. از طرف دیگر، چون $\tanh y < 1$ باید در نقطه تلاقی داشته باشیم $\lambda/y < 2$ ، یعنی

$$\kappa > \frac{\lambda}{2a} \quad (۸۲-۵)$$

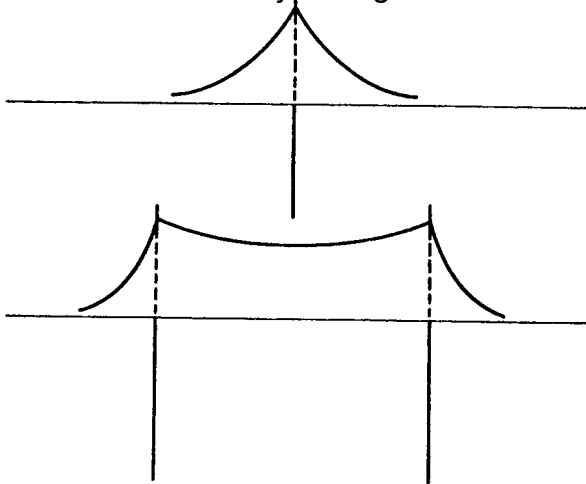
از مقایسه این رابطه با ۷۴-۵ می‌بینیم که انرژی برای چاه دوگانه عدد منفی بزرگتری است، یعنی انرژی در این مورد کمتر است. توجه کنید که علت این امر این نیست که قدرت یک جفت پتانسیل از قدرت یک تک پتانسیل بیشتر است، چنانکه برای یک الکترون مقید به دو پروتون در مقایسه با یک الکترون مقید به یک پروتون صادق است. علت وابستگی شدیدتر آن است که، همان‌طور که شکل ۱۷-۵ نشان می‌دهد، همساز کردن یک نمایی سریعاً نزولی به یک تابع متقارن (در اینجا $\cosh x$) با یک ناپیوستگی در شیب به‌صورتی که داده شده است، آسانتر از همساز کردن آن با یک نمایی به همان اندازه نزولی در طرف دیگر پتانسیل است. در جهان واقعی، انرژی یک تک الکترون مقید به دو پروتون که فاصله کمی از یکدیگر دارند کمتر از انرژی یک تک پروتون به‌علاوه یک اتم هیدروژن در دور دست است، اگرچه برای مورد اول دافعه مؤثرتری بین پروتونها وجود دارد. در اینجا نیز اثر غالب، نحوه همسازی تابع موج با وضعیت هندسی است.

۲. جواب فرد به‌صورت زیر است

$$\begin{aligned} u(x) &= e^{-\kappa x} & x > a \\ &= A \sinh \kappa x & -a > x > -a \\ &= -e^{\kappa x} & x < -a \end{aligned} \quad (۸۳-۵)$$

باز هم، به‌دلیل یاد تقارن، کافی است شرایط را در مثلاً $x = a$ به‌کار ببریم. از پیوستگی تابع موج

www.arsanjan.blogfa.com



شکل ۱۷-۵ توابع موج مقید برای پتانسیلهای تابع دلتای جاذب تک و دوگانه. قدرت پتانسیل را ناپیوستگی شیبهای تابع موج در پتانسیلهای تعیین می‌کند. این در هر سه مورد یکسان است و نشان می‌دهد که برای پتانسیل دوگانه افت با شیب تندتر به طرف راست و به طرف چپ امکانپذیر است.

داریم

$$A \sinh \kappa a = e^{-\kappa a} \quad (۸۴-۵)$$

و معادله ناپیوستگی عبارت است از

$$-\kappa e^{-\kappa a} - \kappa A \cosh \kappa a = -\frac{\lambda}{a} e^{-\kappa a} \quad (۸۵-۵)$$

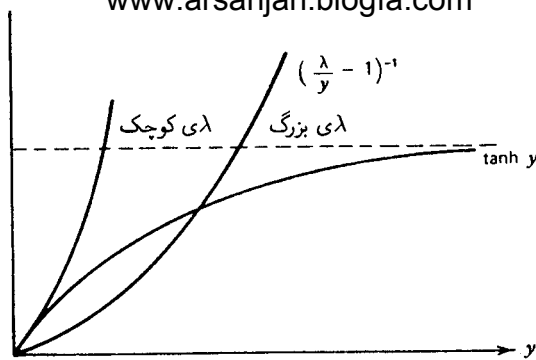
از ترکیب این دو معادله شرط ویژه مقدار به دست می‌آید:

$$\coth \kappa a = \frac{\lambda}{\kappa a} - 1 \quad (۸۶-۵)$$

این معادله را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\frac{\lambda}{\kappa a} - 1 = \frac{e^{\kappa a} + e^{-\kappa a}}{e^{\kappa a} - e^{-\kappa a}} = \frac{1 + e^{-2\kappa a}}{1 - e^{-2\kappa a}}$$

درست مانند مورد ویژه مقدار حالت پایه، می‌توان جواب را به ازای $\lambda \gg 1$ تعیین کرد. این جواب



شکل ۱۸-۵ حل رابطه ویژه مقدار $\tanh y = (\lambda/y - 1)^{-1}$.

از تغییر علامت $e^{-2\kappa a}$ به دست می‌آید، و در نتیجه داریم

$$2\kappa a = \lambda - \lambda e^{-\lambda} \quad (۸۷-۵)$$

می‌توان نشان داد که این جواب فرد حداکثر یک حالت مقید دارد. شکل ۱۸-۵ نمودار عکس معادله ویژه مقدار یعنی

$$\tanh \kappa a = \left(\frac{\lambda}{\kappa a} - 1 \right)^{-1}$$

را با $y = \kappa a$ نشان می‌دهد.

تنها در صورتی یک نقطه تلاقی وجود دارد که در مبدأ شیب $\tanh y$ بزرگتر از شیب $(\lambda/y - 1)^{-1}$ باشد، یعنی اگر

$$\lambda > 1 \quad (۸۸-۵)$$

در $y = \lambda/2$ ، جمله $(\lambda/y - 1)^{-1}$ برابر با ۱ است، در نتیجه تلاقی باید به ازای $y < \lambda/2$ روی دهد، یعنی

$$\kappa < \frac{\lambda}{2a} \quad (۸۹-۵)$$

بنابراین، جواب فرد، اگر حالت مقیدی وجود داشته باشد، نسبت به جواب زوج با شدت کمتری مقید است. تابع موج، که باید از صفر بگذرد، باید بین دیواره‌ها شیب تندی داشته باشد، و از این رو

تنها می‌تواند به یک نمایی همساز شود که با سرعت کمتری افت می‌کند. بسته به اندازه λ ، ممکن است یک حالت مقید با پارتیه فرد وجود داشته باشد یا نداشته باشد. اکنون برهم‌نهی از حالت پایه $u_e(x)$ با انرژی E_e و حالت برانگیخته $u_o(x)$ با انرژی E_o را به صورت زیر در نظر می‌گیریم (e و o به ترتیب معرف زوج و فرد هستند)

$$\psi(x) = \frac{u_e(x) + \alpha u_o(x)}{\sqrt{1 + \alpha^2}} \quad (90-5)$$

که در آن α را به گونه‌ای انتخاب می‌کنیم که $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2$ تا حد امکان کوچک شود، یعنی "الکترون" در دورترین فاصله ممکن در طرف راست جایگزیده باشد. پس از زمان t ، تابع موج به صورت زیر درمی‌آید

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= (u_e(x)e^{-iE_e t/\hbar} + \alpha u_o(x)e^{-iE_o t/\hbar}) / \sqrt{1 + \alpha^2} \\ &= e^{-iE_e t/\hbar} [u_e(x) + \alpha e^{-i(E_o - E_e)t/\hbar} u_o(x)] / \sqrt{1 + \alpha^2} \end{aligned} \quad (91-5)$$

یعنی رابطه فاز میان دو قسمت تغییر می‌کند. به ویژه، در زمانی که به ازای آن

$$e^{-i(E_o - E_e)t/\hbar} = -1 \quad (92-5)$$

"الکترون"، دقیقاً همان گونه که در $t = 0$ در طرف راست جایگزیده بود، در طرف چپ جایگزیده می‌شود. بنابراین، الکترون رفتاری نوسانی دارد که می‌توان آن را با رفت و برگشت الکترون بین دو پتانسیل با بسامد زیر بیان کرد

$$\omega = \omega_{oe} = \frac{E_o - E_e}{\hbar} \quad (93-5)$$

با استفاده از مقادیر انرژی به ازای λ بزرگ به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{1}{\hbar} \frac{\hbar^2}{2ma^2} (-(\kappa_o a)^2 - (-(\kappa_e a)^2)) \\ &= \frac{\hbar}{\lambda ma^2} ((\lambda + \lambda e^{-\lambda})^2 - (\lambda - \lambda e^{-\lambda})^2) \\ &= \frac{\hbar \lambda^2}{2ma^2} e^{-\lambda} \\ &= \frac{\hbar}{2ma^2} e^{-\lambda + 2 \ln \lambda} \end{aligned} \quad (94-5)$$

که در آن عامل $\hbar/2ma^2$ دارای ابعاد بسامد است، و عامل نمایی نشاندهنده وابستگی پارامتری به λ است. می توان ثابت کرد که دوره نوسانی که در بالا توصیف کردیم تقریباً برابر با زمان تونل زنی در سدی است که دو چاه را از هم جدا می کند.^۸

الگوی کرونیک-پنی

فلزات معمولاً دارای ساختار بلوری هستند، یعنی یونها آرایشی دارند که از لحاظ فضایی دوره ای است. این دوره بندی بر حرکت الکترونها آزاد در فلز تأثیر می گذارد، و این اثر با الگوی ساده ای نشان داده می شود که اکنون بررسی می کنیم. دوره بندی ساختار بلوری موجب می شود پتانسیل نیز دوره ای باشد، و از این رو می توان نوشت

$$V(x+a) = V(x) \quad (95-5)$$

چون جمله انرژی جنبشی $-(\hbar^2/2m)(d^2/dx^2)$ با تبدیل $x \rightarrow x+a$ تغییر نمی کند، تمام هامیلتونی تحت جابه جایی $x \rightarrow x+a$ ناورد است. برای مورد پتانسیل صفر، یعنی وقتی جواب مربوط به یک انرژی معین $E = \hbar^2 k^2/2m$ به صورت زیر است

$$\psi(x) = e^{ikx} \quad (96-5)$$

جابه جایی ایجاب می کند

$$\psi(x+a) = e^{ik(x+a)} = e^{ika} \psi(x) \quad (97-5)$$

که جواب اصلی ضرب در یک عامل فاز است، و در نتیجه

$$|\psi(x+a)|^2 = |\psi(x)|^2 \quad (98-5)$$

بنابراین، مشاهده پذیرها در x و $x+a$ یکسان هستند، یعنی نمی توان گفت در x هستیم یا در $x+a$. همچنین در این مثال تأکید می کنیم که تفاوت $\psi(x)$ با $\psi(x+a)$ تنها در یک عامل فاز است، اما این عامل الزاماً به صورت e^{ika} نخواهد بود.

در اینجا به اختصار به بررسی صوری ترین شرط می پردازیم. ناوردایی هامیلتونی در جابه جایی $x \rightarrow x+a$ را می توان به صورت زیر بررسی کرد. فرض کنید D_a عملگری است که قاعده عمل

۸. این را می توان برای پتانسیلهای شکل ۱۵-۵ توجیه کرد. رابطه های تقریبی که برای احتمال تراگسیل به دست آورده ایم در مورد پتانسیلهای تابع دلتا قابل استفاده نیستند.

$$D_a f(x) = f(x+a) \quad (۹۹-۵)$$

ناوردایی مزبور ایجاب می کند که

$$[H, D_a] = 0 \quad (۱۰۰-۵)$$

اکنون به تعیین ویژه مقدارهای عملگر D_a می پردازیم. از معادله ویژه مقداری

$$D_a \psi(x) = \lambda_a \psi(x) \quad (۱۰۱-۵)$$

و با توجه به

$$D_{-a} D_a f(x) = D_a D_{-a} f(x) = f(x) \quad (۱۰۲-۵)$$

می بینیم که $\lambda_a \lambda_{-a} = 1$ ، و در نتیجه λ_a باید به صورت $e^{\sigma a}$ باشد. اکنون $\psi(x)$ ، ویژه تابع همزمان H و D_a ، را در نظر می گیریم و تابع زیر را تعریف می کنیم

$$u(x) = e^{-\sigma x} \psi(x) \quad (۱۰۳-۵)$$

با اعمال D_a به دست می آوریم

$$\begin{aligned} D_a u(x) &= u(x+a) = e^{-\sigma(x+a)} D_a \psi(x) \\ &= e^{-\sigma(x+a)} e^{\sigma a} \psi(x) \\ &= e^{-\sigma x} \psi(x) = u(x) \end{aligned} \quad (۱۰۴-۵)$$

بنابراین، $u(x)$ یک تابع دوره ای با دوره a است:

$$u(x+a) = u(x) \quad (۱۰۵-۵)$$

و $\psi(x) = e^{\sigma x} u(x)$. باید توجه کرد که انتگرال پذیری مجذوری ایجاب می کند که قسمت حقیقی σ صفر باشد، و در نتیجه ویژه تابع همزمان H و D_a باید به صورت زیر باشد

$$\psi(x) = e^{i \text{Im} \sigma x} u(x) \quad (۱۰۶-۵)$$

که در آن $u(x) = u(x+a)$. بهتر است بنویسیم $\text{Im}\sigma = \phi/a$. رابطه ۵-۱۰۶ را، که قضیه بلوخ نامیده می‌شود، نخستین بار فلیکس بلوخ در مکانیک کوانتومی به کار برد، اما آن را در متون ریاضی قضیه فلوکه می‌نامند.

برای ساده کردن جبر مسئله، پتانسیل $V(x)$ را به صورت رشته‌ای از پتانسیلهای تابع دلتای دافعه می‌گیریم:

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\lambda}{a} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na) \quad (107-5)$$

در غیر از نقاط $x = na$ ، جواب عبارت است از جواب معادله ذره آزاد است، یعنی ترکیبی خطی از $\sin kx$ و $\cos kx$ است (برای سادگی با توابع حقیقی کار می‌کنیم). در ناحیه R_n که با $na \leq x \leq (n+1)a$ تعریف می‌شود، فرض می‌کنیم

$$\psi(x) = A_n \sin k(x - na) + B_n \cos k(x - na) \quad (108-5)$$

و در ناحیه R_{n+1} که با $na \leq x \leq (n+1)a$ تعریف می‌شود داریم

$$\psi(x) = A_{n+1} \sin k[x - (n+1)a] + B_{n+1} \cos k[x - (n+1)a] \quad (109-5)$$

پیوستگی تابع موج (در $x = na$) ایجاب می‌کند که

$$-A_{n+1} \sin ka + B_{n+1} \cos ka = B_n \quad (110-5)$$

و شرط ناپیوستگی ۵-۱۳ در اینجا به صورت زیر در می‌آید

$$kA_{n+1} \cos ka + kB_{n+1} \sin ka - kA_n = \frac{\lambda}{a} B_n \quad (111-5)$$

از این دو معادله به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} A_{n+1} &= A_n \cos ka + (g \cos ka - \sin ka) B_n \\ B_{n+1} &= (g \sin ka + \cos ka) B_n + A_n \sin ka \end{aligned} \quad (112-5)$$

که در آنها $g = \lambda/ka$.

$$\psi(x+a) = e^{i(x+a)\text{Im}\sigma} u(x+a) = e^{i\phi} e^{ix\text{Im}\sigma} u(x) = e^{i\phi} \psi(x) \quad (۱۱۳-۵)$$

که ایجاب می‌کند

$$\psi(R_{n+1}) = e^{i\phi} \psi(R_n) \quad (۱۱۴-۵)$$

این در صورتی صادق است که

$$\begin{aligned} A_{n+1} &= e^{i\phi} A_n \\ B_{n+1} &= e^{i\phi} B_n \end{aligned} \quad (۱۱۵-۵)$$

با جاگذاری در ۱۱۲-۵، یک شرط سازگاری به دست می‌آوریم که عبارت است از

$$(e^{i\phi} - \cos ka)(e^{i\phi} - g \sin ka - \cos ka) = \sin ka(g \cos ka - \sin ka)$$

یعنی

$$e^{2i\phi} - e^{i\phi}(2 \cos ka + g \sin ka) + 1 = 0$$

با ضرب کردن در $e^{-i\phi}$ ، به رابطه زیر می‌رسیم

$$\cos \phi = \cos ka + \frac{1}{2} g \sin ka \quad (۱۱۶-۵)$$

اگر شرایط مرزی دوره‌ای برای "بلور" را به گونه‌ای بگیریم که

$$\psi(R_{n+N}) = \psi(R_n) \quad (۱۱۷-۵)$$

آنگاه از ۱۱۴-۵ به این نتیجه می‌رسیم که $e^{iN\phi} = 1$ ، یعنی

$$\phi = \frac{2\pi}{N} m \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (۱۱۸-۵)$$

با استفاده از انتگرال‌پذیری مجددوری نشان دادیم که σ باید انگاری باشد. اگر مقادیر x تا بینهایت ادامه نداشته باشند، باید بنویسیم $(e^{\sigma a})^N = 1$ و در نتیجه باید $\sigma a = i\phi$ ، که باز هم یک عدد انگاری محض است.

ϕ را با qa نشان می‌دهیم که در آن q عدد موج الکترون در جعبه‌ای است به طول Na با شرایط مرزی دوره‌ای و بدون پتانسیل، یعنی وقتی هیچ یونی وجود ندارد. بنابراین، رابطه ۵-۱۱۶ باید به صورت زیر نوشته شود

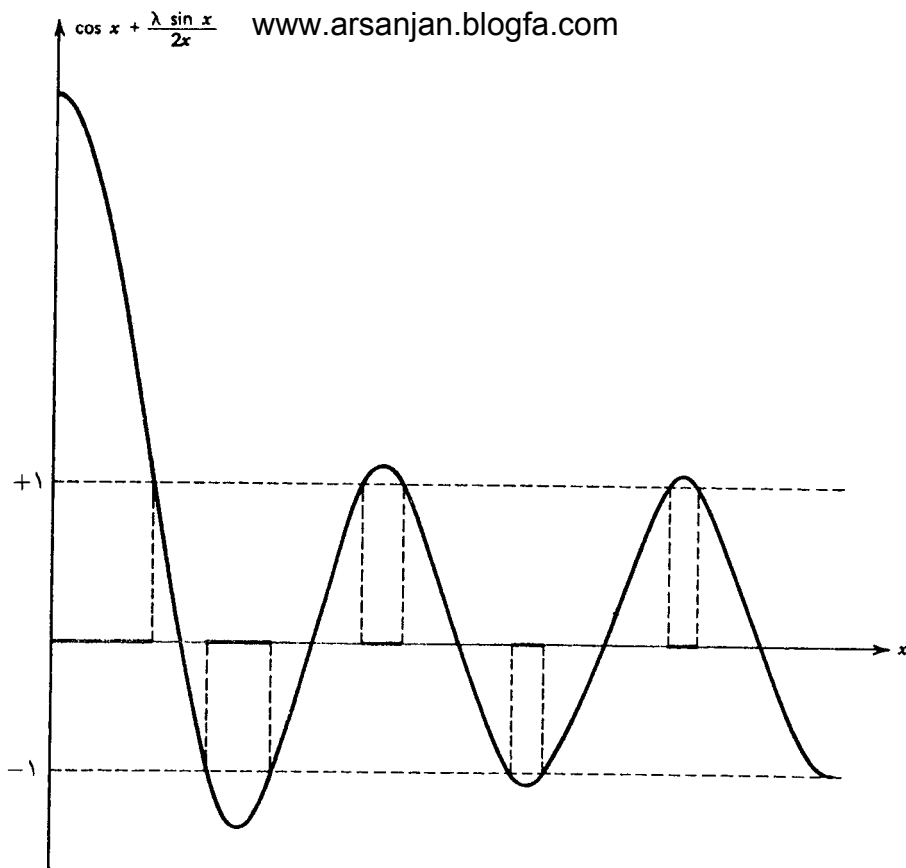
$$\cos qa = \cos ka + \frac{1}{2} \lambda \frac{\sin ka}{ka} \quad (5-119)$$

این نتیجه بسیار جالب توجه است زیرا نشان می‌دهد قدرمطلق طرف راست نمی‌تواند از ۱ بزرگتر باشد، یعنی روی گستره‌های ممکن انرژی $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ محدودیتهایی وجود دارند که تابع پارامترهای "بلور" هستند. شکل ۵-۱۹ نمودار $\cos x + \lambda(\sin x)/2$ را برحسب $x = ka$ نشان می‌دهد. خطهای افقی کرانه‌های $\cos qa$ هستند، و ناحیه‌هایی از x که در آنها منحنی خارج از این محدوده می‌افتد ناحیه‌های ممنوع هستند. بنابراین، نوارهای انرژی مجازی وجود دارند که با ناحیه‌های ممنوع از هم جدا شده‌اند. توجه کنید که آغاز یک نوار ممنوع متناظر است با شرط

$$qa = n\pi \quad n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (5-120)$$

اما این رابطه دقیقاً شرط بازتاب براگ در فرود عمودی است. وجود گافهای انرژی را می‌توان به‌طور کیفی درک کرد. در تقریب اول، الکترون‌ها آزاد هستند مگر اینکه بازتاب براگ، وقتی اختلاف فاز امواجی که از اتمهای متوالی بازتابیده می‌شوند مضرب درستی از 2π است روی دهد، یعنی وقتی شرط ۵-۱۲۰ برقرار است. این بازتابها امواج ساکن، با موجهای زوج و فردی که به ترتیب به صورت $\cos \pi x/a$ و $\sin \pi x/a$ هستند، به وجود می‌آورند. ترازهای انرژی متناظر با این امواج ساکن واگن‌اند. هرگاه برهم‌کنش جاذبه میان الکترون‌ها و یونهای مثبت در $x = ma$ (که در آن m عدد درست است) را منظور کنیم، انرژی حالت‌های زوج که در محل یونها به اوج می‌رسد افت می‌کند و انرژی حالت‌های فرد که بین آنها حداکثر است افزایش می‌یابد. بنابراین، واگنی انرژی در $k = n\pi/a$ شکافته می‌شود که نتیجه آن، چنانکه در شکل ۵-۱۹ نشان داده شده است، گافهای انرژی است.

الگوی کرونیگ-پنی به نظریه فلزها، عایقها، و نیمرساناها مربوط می‌شود، زیرا (چنانکه بعداً خواهیم دید) ترازهای انرژی اشغال شده توسط الکترون‌ها نمی‌توانند الکترونهای دیگری بپذیرند. در واقع، یک فلز می‌تواند نوار انرژی داشته باشد که کاملاً پر نشده است. با اعمال میدان الکتریکی خارجی، الکترون‌ها شتاب می‌گیرند و اگر حالت‌های تکانه‌ای برای آنها موجود باشند این الکترون‌ها تحت تأثیر میدان الکتریکی این حالت‌های تکانه را اشغال می‌کنند. اما عایقها دارای نوارهای کاملاً پر

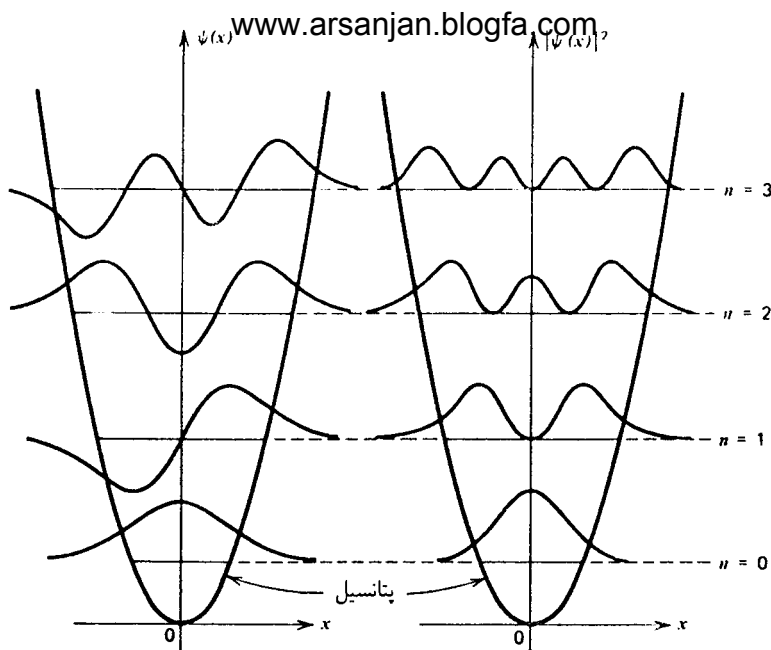


شکل ۱۹-۵ نمودار $\cos x + (\lambda \sin x) / 2x$ بر حسب x . خطهای افقی کرانه‌های ± 1 را نشان می‌دهند. ناحیه‌هایی از x که در آنها منحنی خارج از باریکه $(-1, +1)$ قرار می‌گیرد ممنوع هستند.

هستند، و الکترون‌ها نمی‌توانند در میدان الکتریکی شتاب بگیرند زیرا هیچ حالت خالی نزدیکی وجود ندارد. اگر میدان الکتریکی به اندازه کافی شدید باشد، این الکترون‌ها می‌توانند از گاف انرژی ممنوع “بجهند” و به یک نوار انرژی مجاز خالی بروند. این جهش متناظر است با خراب شدن عایق. نیمرسانا عایقی است که گاف ممنوع آن بسیار باریک است. در اینجا، تغییر وضعیت کوچکی، مثلاً افزایش دما، می‌تواند باعث “جهش” شود و عایق به رسانا تبدیل می‌شود.

نوسانگر هماهنگ

به عنوان آخرین مثال، نوسانگر هماهنگ را در نظر می‌گیریم (شکل ۵-۲۰). برخلاف مثالهایی که تاکنون بررسی کردیم، حل معادله دیفرانسیل نوسانگر هماهنگ چندان ساده نیست، و یک دلیل



شکل ۵-۲۰ ویژه تابعهای نوسانگر هماهنگ، و چگالیهای احتمال برای چهار ویژه مقدار اول. به زوج و فرد بودن ویژه تابعها توجه کنید.

بررسی این مسئله یادگیری روش حل این نوع معادلات است. هامیلتونی کلاسیک برای نوسانگر هماهنگ عبارت است از

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} kx^2 \quad (۱۲۱-۵)$$

و در نتیجه معادله ویژه مقداری آن به صورت زیر است

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2 u(x) = E u(x) \quad (۱۲۲-۵)$$

با استفاده از بسامد نوسانگر

$$\omega = \sqrt{k/m} \quad (۱۲۳-۵)$$

و با معرفی

$$\epsilon = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (۱۲۴-۵)$$

$$y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad (۱۲۵-۵)$$

صورت ساده‌تر زیر را برای معادله به‌دست می‌آوریم

$$\frac{d^2 u}{dy^2} + (\epsilon - y^2)u = 0 \quad (۱۲۶-۵)$$

که در آن تمام کمیت‌ها بی‌بعد هستند.

وقتی $y^2 \rightarrow \infty$ ، جمله شامل ϵ به‌ازای هر ویژه‌مقدار ϵ قابل چشم‌پوشی است، و از این رو $u(y)$ باید در معادلهٔ مجانبی زیر صدق کند

$$\frac{d^2 u_0(y)}{dy^2} - y^2 u_0(y) = 0 \quad (۱۲۷-۵)$$

که با ضرب کردن در du_0/dy می‌توان آن را به‌صورت زیر نوشت

$$\frac{d}{dy} \left(\frac{du_0}{dy} \right)^2 - y^2 \frac{d}{dy} (u_0^2) = 0 \quad (۱۲۸-۵)$$

یا

$$\frac{d}{dy} \left[\left(\frac{du_0}{dy} \right)^2 - y^2 u_0^2 \right] = -2y u_0^2 \quad (۱۲۹-۵)$$

اگر جملهٔ طرف راست را حذف کنیم این معادله تا حد زیادی ساده می‌شود. فرض می‌کنیم این کار را می‌توان انجام داد، و سپس درستی این فرض را واریسی می‌کنیم. با حذف طرف راست به‌دست می‌آوریم

$$\frac{du_0}{dy} = (C + y^2 u_0^2)^{1/2}$$

که در آن C ثابت انتگرال‌گیری است. چون $u_0(y)$ و du_0/dy باید در بینهایت صفر شوند، باید داشته باشیم $C = 0$. بنابراین،

$$\frac{du_0}{dy} = \pm y u_0 \quad (۱۳۰-۵)$$

که جواب آن، که در بینهایت قابل قبول است، عبارت است از

$$u_0(y) = e^{-y^2/2} \quad (۱۳۱-۵)$$

اکنون می توان دید که جمله $2yu_0'' = 2ye^{-y^2/2}$ در مقایسه با

$$\frac{d}{dy}(y^2 u_0'') = \frac{d}{dy}(y^2 e^{-y^2/2}) \simeq -4y^2 e^{-y^2/2}$$

به ازای y های بزرگ واقعاً قابل چشمپوشی است. اگر تابع جدیدی مانند $h(y)$ را وارد کنیم به طوری که

$$u(y) = h(y)e^{-y^2/2} \quad (۱۳۲-۵)$$

آنگاه معادله دیفرانسیل به صورت زیر درمی آید

$$\frac{d^2 h(y)}{dy^2} - 2y \frac{dh(y)}{dy} + (\epsilon - 1)h(y) = 0 \quad (۱۳۳-۵)$$

این نتیجه ممکن است ساده سازی چندانی به نظر نرسد، اما اکنون می توان با دانستن رفتار جواب در بینهایت رفتار آن را در نزدیکی $y = 0$ بررسی کرد. رشته توانی زیر را امتحان می کنیم

$$h(y) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m y^m \quad (۱۳۴-۵)$$

با قرار دادن این رشته در معادله ۱۳۳-۵، معلوم می شود که ضرایب y^m در رابطه بازگشتی زیر صدق می کنند

$$(m+1)(m+2)a_{m+2} = (2m - \epsilon + 1)a_m \quad (۱۳۵-۵)$$

بنابراین، با داشتن a_0 و a_1 ، می توان رشته های زوج و فرد جداگانه ای به دست آورد. اینکه این رشته ها با هم مخلوط نمی شوند نتیجه ناوردایی هامیلتونی تحت بازتاب است. به ازای یک مقدار اختیاری ϵ ، برای m های بزرگ (مثلاً $m > N$) به دست می آوریم

$$a_{m+2} \simeq \frac{2}{m} a_m \quad (۱۳۶-۵)$$

بنابراین، جواب تقریباً برابر است با www.arsanjan.blogfa.com

$$h(y) = (y \text{ چند جمله‌ای بر حسب } y) + \\ + a_N \left[y^N + \frac{2}{N} y^{N+2} + \frac{2^2}{N(N+2)} y^{N+4} + \frac{2^3}{N(N+2)(N+4)} y^{N+6} + \dots \right]$$

در اینجا برای سادگی تنها جواب زوج را در نظر گرفته‌ایم. رشته نامتناهی را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$A_N y^2 \left(\frac{N}{2} - 1 \right)! \left[\frac{(y^2)^{N/2-1}}{(N/2-1)!} + \frac{(y^2)^{N/2}}{(N/2)!} + \frac{(y^2)^{N/2+1}}{(N/2+1)!} + \dots \right]$$

بهرتر است قرار می‌دهیم $N = 2k$ ، و در نتیجه رشته به صورت زیر درمی‌آید

$$y^2 (k-1)! \left[\frac{(y^2)^{k-1}}{(k-1)!} + \frac{(y^2)^k}{k!} + \frac{(y^2)^{k+1}}{(k+1)!} + \dots \right] \\ = y^2 (k-1)! \left[e^{y^2} - \left\{ 1 + y^2 + \frac{(y^2)^2}{2!} + \dots + \frac{(y^2)^{k-2}}{(k-2)!} \right\} \right]$$

که به صورت یک چند جمله‌ای + یک ثابت $\times e^{y^2}$ است. وقتی این را در ۵-۱۳۲ می‌گذاریم جوابی به دست می‌آوریم که در بینهایت صفر نمی‌شود. جواب قابل قبول وقتی به دست می‌آید که رابطه بازگشتی ۳-۱۳۵ در جایی قطع شود. بنابراین، باید

$$\epsilon = 2.N + 1 \quad (137-5)$$

به ازای این مقدار خاص ϵ ، از ترکیب روابط بازگشتی به دست می‌آوریم

$$a_{2k} = (-2)^k \frac{N(N-2) \dots (N-2k+4)(N-2k+2)}{(2k)!} a_0. \quad (138-5)$$

$$a_{2k+1} = (-2)^k \frac{(N-1)(N-3) \dots (N-2k+3)(N-2k+1)}{(2k+1)!} a_1 \quad (139-5)$$

بنابراین، به نتیجه‌های زیر می‌رسیم:

۱. ویژه‌مقدارها گسسته و هم‌فاصله هستند. معادله ۱۳۷-۵ تبدیل می‌شود به

$$E = h\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (140-5)$$

که صورت آشنایی دارد، زیرا این رابطه میان انرژی و بسامد همان رابطه‌ای است که پلانک برای مدهای میدان تابش کشف کرد. این نتیجه اتفاقی نیست، زیرا تجزیه میدان الکترومغناطیسی به مدهای بهنجار اساساً تجزیه به نوسانگرهای هماهنگی است که واجتیده‌اند.

۲. چندجمله‌ایهای $h(y)$ ، با تقریب ثابتهای بهنجارش، چندجمله‌ایهای هرمیت $H_n(y)$ هستند که ویژگیهای آنها را می‌توان در بیشتر کتابهای درسی ریاضی فیزیک یافت. در اینجا تنها به بیان کلی ویژگیهای آنها بسنده می‌کنیم:

$H_n(y)$ در معادله دیفرانسیل زیر صدق می‌کند

$$\frac{d^2 H_n(y)}{dy^2} - 2y \frac{dH_n(y)}{dy} + 2n H_n(y) = 0 \quad (141-5)$$

رابطه‌های بازگشتی برای چندجمله‌ایهای هرمیت عبارت‌اند از

$$H_{n+1} - 2y H_n + 2n H_{n-1} = 0 \quad (142-5)$$

$$H_{n+1} + \frac{dH_n}{dy} - 2y H_n = 0 \quad (143-5)$$

همچنین داریم

$$\sum_n H_n(y) \frac{z^n}{n!} = e^{yz - z^2/2} \quad (144-5)$$

و

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2} \quad (145-5)$$

بهنجارش چندجمله‌ایهای هرمیت به‌گونه‌ای است که

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2} H_n(y) = 2^n n! \sqrt{\pi} \quad (146-5)$$

www.arsanjan.blogfa.com
 صورت صریح تعدادی از چند جمله‌ایهای هرمیت را در اینجا می‌نویسیم

$$\begin{aligned} H_0(y) &= 1 \\ H_1(y) &= 2y \\ H_2(y) &= 4y^2 - 2 \\ H_3(y) &= 8y^3 - 12y \\ H_4(y) &= 16y^4 - 48y^2 + 12 \\ H_5(y) &= 32y^5 - 160y^3 + 120y \end{aligned} \quad (۱۴۷-۵)$$

تعامد ویژه‌تابه‌های متناظر با مقادیر مختلف n را می‌توان به‌سادگی اثبات کرد. اگر معادله‌های ویژه‌مقداری

$$\frac{d^2 u_n}{dx^2} = \frac{mk}{\hbar^2} x^2 u_n - \frac{2mE_n}{\hbar^2} u_n$$

و

$$\frac{d^2 u_n^*}{dx^2} = \frac{mk}{\hbar^2} x^2 u_n^* - \frac{2mE_n}{\hbar^2} u_n^*$$

را به‌ترتیب در u_n و u_n^* ضرب کنیم و سپس معادلهٔ دوم را از معادلهٔ اول کم کنیم، به‌دست می‌آوریم

$$\frac{d}{dx} \left(u_n^* \frac{du_n}{dx} - \frac{du_n^*}{dx} u_n \right) = \frac{2m}{\hbar^2} (E_l - E_n) u_l^* u_n$$

با انتگرال‌گیری از این معادله روی x از $-\infty$ تا $+\infty$ ، طرف چپ صفر می‌شود زیرا ویژه‌تابه‌ها و مشتق‌های آنها در $x = \pm\infty$ صفر می‌شوند. بنابراین، داریم

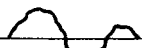
$$(E_l - E_n) \int_{-\infty}^{\infty} dx u_l^*(x) u_n(x) = 0 \quad (۱۴۸-۵)$$

که نشان می‌دهد ویژه‌تابه‌هایی که برای آنها $E_l \neq E_n$ متعامد هستند. دلیل اهمیت نوسانگر هماهنگ در مکانیک کوانتومی، همچون در مکانیک کلاسیک، این است که هراختلال کوچک دستگاه از حالت تعادل آن باعث نوسانهایی کوچکی می‌شود که در نهایت به مدهای بهنجار، یعنی نوسانگرهای مستقل، قابل تجزیه‌اند.

۳. چنانکه ۵-۱۴۰ نشان می‌دهد، حتی پایینترین حالت دارای مقداری انرژی است، که انرژی نقطه صفر نامیده می‌شود. وجود این انرژی یک اثر صرفاً کوانتوم-مکانیکی است، و می‌توان آن را با توجه به اصل عدم قطعیت تعبیر کرد. همین انرژی نقطه صفر است که باعث می‌شود هلیوم در دماهای فوق‌العاده کم "منجمد" نشود بلکه در فشارهای عادی تا دماهایی از مرتبه $10^{-2} K$ مایع باقی بماند. برای اتمهای سبکتر بسامد ω بزرگتر است، و به همین دلیل این اثر برای مثلاً نیتروژن روی نمی‌دهد. این اثر همچنین به جزئیات نیروهای میان اتمی نیز بستگی دارد، و از این رو است که هیدروژن مایع منجمد می‌شود.

مسائل

۵-۱ یک پتانسیل اختیاری جایگزیده در یک بخش متناهی از محور x را در نظر بگیرید. جوابهای معادله شرودینگر در ناحیه‌های چپ و راست این پتانسیل در شکل زیر داده شده‌اند

$$Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad \text{و} \quad Ce^{ikx} + De^{-ikx}$$


نشان دهید اگر بنویسیم

$$C = S_{11}A + S_{12}D$$

$$B = S_{21}A + S_{22}D$$

یعنی امواج "ورودی" و امواج "خروجی" را با معادله ماتریسی زیر به هم مربوط کنیم

$$\begin{pmatrix} C \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix}$$

آنگاه رابطه‌های زیر برقرارند

$$|S_{11}|^2 + |S_{21}|^2 = 1$$

$$|S_{12}|^2 + |S_{22}|^2 = 1$$

$$S_{11}S_{12}^* + S_{21}S_{22}^* = 0$$

با استفاده از این رابطه‌ها نشان دهید ماتریس پراکندگی

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}$$

و ترانهاد آن یکانی هستند. www.arsanjan.blogfa.com

[راهنمایی: از پایستگی شار و اینکه A و B می توانند اعداد مختلط اختیاری باشند استفاده کنید.]

۲-۵ عناصر ماتریسی پراکندگی S_{11}, S_{12}, S_{21} و S_{22} را برای پتانسیل زیر محاسبه کنید

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 & x < -a \\ &= V_0 & -a < x < a \\ &= 0 & x > a \end{aligned}$$

و نشان دهید شرایط کلی مسئله ۱-۵ واقعاً برقرار هستند.

۳-۵ عناصر ماتریسی $S_{11}, S_{12}, S_{21}, S_{22}$ توابعی از k هستند. نشان دهید

$$S_{11}(-k) = S_{11}^*(k)$$

$$S_{22}(-k) = S_{22}^*(k)$$

$$S_{12}(-k) = S_{12}^*(k)$$

یعنی ماتریس S دارای خاصیت زیر است

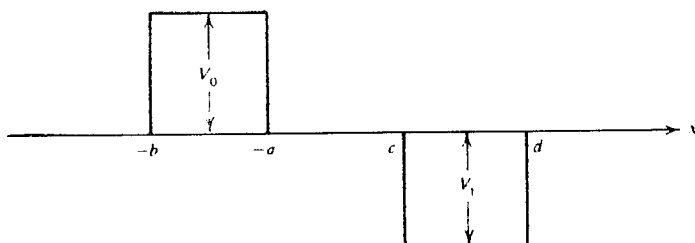
$$S(-k) = S^+(k)$$

۴-۵ جواب فرد مربوط به چاه پتانسیل (مثلاً معادله ۶۷-۵) را در نظر بگیرید، که می توان از آن به عنوان الگو برای پتانسیل سه بعدی با تکانه زاویه ای صفر استفاده کرد. اگر عرض چاه را $1.4 \times 10^{-12} \text{ cm}$ و انرژی بستگی دستگاه را 22 MeV بگیریم، و اگر جرم مربوط $8 \times 10^{-24} \text{ g}$ باشد، عمق چاه پتانسیل را بر حسب MeV به دست آورید.

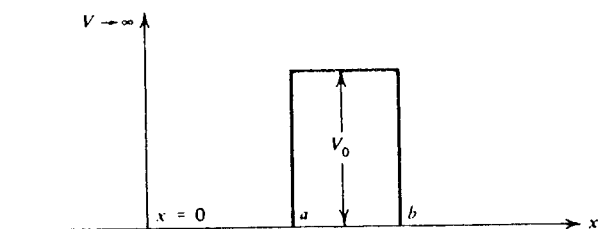
[راهنمایی: (۱) ابتدا فاصله ها و جرمها را بر حسب جرمی بیان کنید، که در نتیجه عرض چاه به صورت $d(h/\mu c)$ و انرژی بستگی به صورت $\epsilon(\mu c^2)$ درآید. جرم داده شده می تواند جرم مناسبی باشد. (۲) انرژی بستگی بسیار کوچک، تقریباً برابر با صفر، است. اگر این انرژی صفر می بود ۵-۶ مقدار V_0 را به دست می داد. حول این مقدار بسط دهید.]

۵-۵ بدون حل معادله شرودینگر جوابها را برای موارد زیر به دست آورید به طوری که تنها جور

کردن ویژه تابعها و مشتقهای آنها باقی بماند.



(الف) اگر پتانسیل نبود شار $\hbar k/m$ از سمت چپ می آمد؛ فرض کنید $E < V_0$.



(ب) اگر پتانسیل نبود شار $\hbar k/m$ از سمت راست می آمد؛ فرض کنید $E < V_0$.

۵-۶ نشان دهید شرایط مربوط به حالت مقید ۵-۶۳ را می توان با صفر کردن مخرج کسرها در

۵-۲۶ به ازای $k = i\kappa$ به دست آورد. ثابت کنید که این نتیجه اتفاقی نیست.

۵-۷ نشان دهید که برای پتانسیل

$$\frac{\gamma m}{\hbar^2} V(x) = \frac{\lambda}{a} \delta(x-b)$$

ماتریس پراکندگی به صورت زیر است

$$\begin{pmatrix} \frac{\gamma i k a}{\gamma i k a - \lambda} & \frac{\lambda}{\gamma i k a - \lambda} e^{-\gamma i k b} \\ \frac{\lambda}{\gamma i k a - \lambda} e^{\gamma i k b} & \frac{\gamma i k a}{\gamma i k a - \lambda} \end{pmatrix}$$

ثابت کنید این ماتریس یکانی است، و اگر عناصر آن بینهایت شوند شرط مربوط به حالت های مقید به دست می آید. (این نتیجه تنها برای $\lambda < 0$ برقرار است.)

۵-۸ مقدار γ در ۵-۹۰ را چنان محاسبه کنید که ذره تا حد امکان دور از مبدأ و در سمت راست آن جایگزین شود.

۵-۹ توابع موج مربوط به سه ویژه مقدار اول نوسانگر هماهنگ را به تفصیل محاسبه کنید.

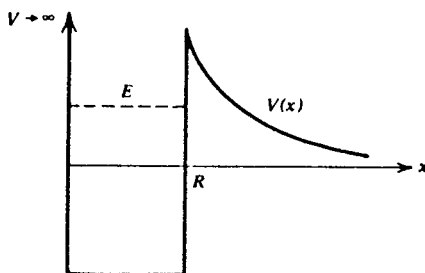
۱۰-۵ پتانسیل نوسانگر هماهنگ ساده را که با یک جمله کوچک درجه سوم مختل شده است در نظر بگیرید:

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 \left(x^2 - \frac{1}{a}x^3 \right)$$

اگر a در مقایسه با اندازه مشخصه $(\hbar/m\omega)^{1/2}$ بزرگ باشد، مدت زمانی را برآورد کنید که طول می‌کشد تا ذره‌ای در حالت پایه به ناحیه دور در سمت راست "نشت" کند. توجه کنید که فقط با این اختلال حالت کمترین انرژی وجود ندارد، زیرا به ازای x های به اندازه کافی بزرگ پتانسیل بینهایت عمیق می‌شود.

۱۱-۵ پتانسیلی را که با شکل زیر نشان داده شده است در نظر بگیرید، که در آن

$$V(x) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m x^2} \quad x > R.$$



طول عمر ذره‌ای با انرژی E را در این چاه پتانسیل برآورد کنید. (پتانسیل $V(x)$ نمایشگر یک سد مرکزگریز در جهان سه بعدی است.) نتیجه را برحسب کمیت بی بعد l/kR بیان کنید، که در آن $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ و $l \gg 1$.

۱۲-۵ پتانسیل کرونیک-پنی را با شرط زیر در نظر بگیرید

$$\lambda = 3\pi$$

(الف) نمودار تفصیلی

$$\cos x + \frac{\lambda}{2} \frac{\sin x}{x}$$

را برحسب $x = ka$ ترسیم کنید.

(ب) نشان دهید نوارهای انرژی ممنوع درست بالاتر از $ka = n\pi$ شروع می‌شوند.

(ج) نشان دهید با افزایش λ نوارهای انرژی مجاز باریکتر می‌شوند.

(د) انرژی $\hbar^2 k^2 / 2m$ را برحسب q ترسیم کنید.

۱۳-۵ پتانسیل زیر را در نظر بگیرید

$$\begin{aligned} V(x) &= \infty & x < 0 \\ &= -V_0 & 0 < x < a \\ &= 0 & a < x \end{aligned}$$

فرض کنید موج تختی با تکانه $\hbar k$ و شار $\hbar k/m$ از $+\infty$ فرستاده شده است. (الف) نشان دهید دامنه موج بازتابیده را می‌توان به صورت $Ce^{i\delta}$ نوشت. (ب) C را محاسبه کنید و رابطه‌ای به دست آورید که از آن بتوان δ را تعیین کرد.

۱۴-۵ استدلال زیر را در نظر بگیرید: اگر الکترونی در پتانسیلی به عرض a داشته باشیم، انرژی جنبشی آن بنابه اصل عدم قطعیت بزرگتر از $\hbar^2 / 2ma^2$ است. بنابراین، برای اینکه حالت مقیدی وجود داشته باشد، انرژی پتانسیل نه تنها باید منفی باشد بلکه قدرمطلق آن باید بزرگتر از $\hbar^2 / 2ma^2$ باشد. از طرف دیگر، چنانکه دیدیم، برای چاه یک‌بعدی هر قدر هم که عمق چاه کم باشد همیشه یک حالت مقید وجود دارد. در این استدلال چه چیزی غلط است؟

۱۵-۵ پتانسیل زیر را در نظر بگیرید

$$\begin{aligned} V(x) &= \infty & x < 0 \\ &= 0 & x > a \\ &= a & \text{یک تابع منفی از } x \end{aligned}$$

فرض کنید تابع موج داخلی به‌گونه‌ای است که

$$\frac{1}{u} \frac{du}{dx} \Big|_{x=a} = f(E)$$

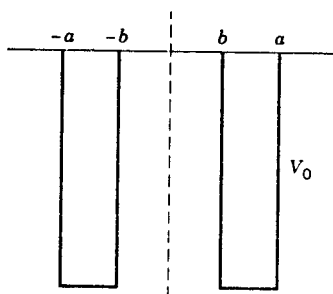
(الف) انرژی بستگی یک حالت مقید را برحسب $f(E_B)$ تعیین کنید.

(ب) فرض کنید $f(E)$ برحسب E به‌کندی تغییر می‌کند به‌طوری که می‌توان آن را ثابت گرفت.

اگر تابع موج برای $x > a$ به‌صورت $e^{-ikx} + R(k)e^{ikx}$ باشد، دامنه موج بازتابیده $R(k)$ را

www.arsanjan.blogfa.com

به دست آورید، و تحقیق کنید که $|R(x)| = 1$.
 ۱۶-۵ ذره‌ای را در چاه دوگانه شکل زیر در نظر بگیرید



نشان دهید شرایط ویژه مقدار را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\tan q(a-b) = \frac{q\alpha(1 + \tanh \alpha b)}{q^2 - \alpha^2 \tanh \alpha b}$$

و

$$\tan q(a-b) = \frac{q\alpha(1 + \coth \alpha b)}{q^2 - \alpha^2 \coth \alpha b}$$

که به ترتیب مربوط به جوابهای زوج و فرد هستند، و در آنها

$$E + V_0 = \hbar^2 q^2 / 2m \quad \text{و} \quad -E = \hbar^2 \alpha^2 / 2m$$

۱۷-۵ مثال مسئله ۱۶-۵ را در نظر بگیرید.

(الف) نشان دهید وقتی $b \rightarrow 0$ شرایط ویژه مقدار به شرایط مربوط به چاه منفرد میل می‌کنند.
 (ب) موردی را در نظر بگیرید که فاصله بین مراکز چاهها زیاد می‌شود اما عرض چاهها ثابت می‌ماند. نشان دهید ویژه مقدارهای زوج و فرد به یکدیگر نزدیک می‌شوند. اختلاف انرژی میان کمترین ویژه مقدارهای زوج و فرد را برآورد کنید.
 [راهنمایی: به ازای مقادیر بزرگ z داریم $\tanh z = 1 - 2e^{-2z}$ را تا کمترین مرتبه در نظر بگیرید.]

۱۸-۵ قضیهٔ ویریال را ثابت کنید، که در یک بعد به صورت زیر است

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \frac{1}{2} \left\langle x \frac{dV}{dx} \right\rangle$$

www.arsanjan.blogfa.com
 برای این کار (الف) نشان دهید برای توابع موج حقیقی $\psi(x)$ داریم

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x) x \frac{dV(x)}{dx} \psi(x) = -\langle V \rangle + 2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{d\psi}{dx} x V(x) \psi(x)$$

(ب) با استفاده از معادله ویژه‌مقداری انرژی ثابت کنید

$$2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{d\psi}{dx} x V(x) \psi(x) = E + \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{d\psi}{dx} \right)^2$$

مراجع

الگوی کرونیگ-پنی در کتاب زیر نیز به تفصیل بررسی شده است

E Merzbacher, *Quantum Mechanics* (2nd edition), John Wiley & Sons, New York, 1970.

برای بحث مفصلتری درباره "نظریه نواری" مراجعه کنید به

C Kittel, *Introduction to Solid State Physics* (6th edition), John Wiley & Sons, New York, 1986, Chapter 9.

برای بحث کاملتری درباره نفوذ در سد، با استفاده از تقریب WKB، به کتابهای پیشرفته‌تری که در آخر این کتاب معرفی شده‌اند مراجعه کنید.



ساختار کلی مکانیک موجی

در این فصل به گردآوری و تشریح مفصل اصول و مفاهیمی می‌پردازیم که قبلاً در ضمن حل چند مسئله خاص به تدریج بیان کردیم. اصل موضوعه بسط و معنای فیزیکی آن، عملگرها، بردارهای حالت، واگتی، و حد کلاسیک از این جمله هستند. در این فصل نمادنگاری دیراک را نیز معرفی می‌کنیم. از این نمادنگاری گاهی در بقیه کتاب استفاده خواهیم کرد، اما موجز بودنش ارزش ارائه در این مرحله از مطالعه مکانیک کوانتومی را به آن می‌دهد.

ویژه تابعها و ویژه مقدارها عملگر هامیلتونی

حالت یک دستگاه فیزیکی با یک تابع موج توصیف می‌شود که حاوی تمام اطلاعات درباره دستگاه است. تابع موج به زمان وابسته است، و تحول زمانی آن با معادله زیر داده می‌شود

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = H\psi(x, t) \quad (۱-۶)$$

عملگر H ، هامیلتونی، که در مکانیک کوانتومی دارای نقشی اساسی است، روی تابع موج $\psi(x, t)$ عمل می‌کند. این عملگر برای دستگاه ساده متشکل از یک ذره در پتانسیل V به صورت زیر است

$$H = \frac{p_{\text{op}}^2}{2m} + V(x) \quad (2-6)$$

اگر $V(x)$ بستگی صریح به زمان نداشته باشد، می‌توان جواب معادله ۱-۶ را به صورت زیر نوشت

$$\psi(x, t) = u_E(x) e^{-iEt/\hbar} \quad (3-6)$$

که در آن $u_E(x)$ جواب معادله زیر است

$$H u_E(x) = E u_E(x) \quad (4-6)$$

$u_E(x)$ را ویژه تابع هامیلتونی و E را ویژه مقدار می‌نامند.

در این فصل روی دو ویژگی مهم ویژه‌تابعهای H تأکید می‌کنیم:

۱. ویژه‌تابعهای مربوط به ویژه‌مقدارهای مختلف (یعنی مقادیر مختلف ثابت E) متعامدند — به این معنی که

$$\int dx u_E^*(x) u_{E'}(x) = 0 \quad E \neq E' \quad (5-6)$$

۲. این ویژه‌تابعها یک مجموعه کامل تشکیل می‌دهند — به این معنی که تابع اختیاری $\psi(x)$ را که انتگرال پذیر مجذوری است به طوری که

$$\int dx \psi^*(x) \psi(x) < \infty \quad (6-6)$$

می‌توان برحسب ویژه‌تابعهای هامیلتونی بسط داد:

$$\psi(x) = \sum_E C_E u_E(x) \quad (7-6)$$

طیف H ممکن است گسسته باشد، مانند مورد چاه نامتناهی و نوسانگر هماهنگ. اگر وقتی $x \rightarrow \infty$ پتانسیل $V(x)$ به صفر میل کند، ویژه‌مقدارها می‌توانند هم گسسته باشند و هم یک پیوستار تشکیل دهند. این وضعیت برای پتانسیل جاذبه‌ای روی می‌دهد که به اندازه کافی عمیق

است تا یک یا چند حالت مقید ایجاد کنند در این مورد، مجموعه کامل از تمام ویژه تابعهای گسسته و پیوستار تشکیل می‌شود، و باید به جای ۶-۷ نوشت

$$\psi(x) = \sum_n C_n u_n(x) + \int dp C(p) u_p(x) \quad (۸-۶)$$

در اینجا عدد درست n معرف حالت‌های مقید و p معرف حالت‌های پیوستار است. این نشانگذاری به این مناسبت است که به ازای مقادیر بزرگ x انرژی پتانسیل صفر می‌شود و ویژه مقدار انرژی با رابطه $E = p^2/2m$ به مقدار تکانه مربوط می‌شود. ویژه تابعها را می‌توان در ثابت‌هایی ضرب کرد تا بهنجار شوند. شرایط راست‌هنجاری عبارت‌اند از

$$\begin{aligned} \int dx u_m^*(x) u_n(x) &= \delta_{mn} \\ \int dx u_q^*(x) u_p(x) &= \delta(p - q) \\ \int dx u_n^*(x) u_p(x) &= 0 \end{aligned} \quad (۹-۶)$$

با توجه به اینکه هر ویژه تابع وابستگی زمانی ساده‌ای دارد که با رابطه زیر داده می‌شود

$$u_E(x, t) = u_E(x) e^{-iEt/\hbar} \quad (۱۰-۶)$$

می‌توان تابع موج $\psi(x, t)$ را تعیین کرد. بنابراین، به دست می‌آوریم

$$\psi(x, t) = \sum_E C_E u_E(x) e^{-iEt/\hbar} \quad (۱۱-۶)$$

که صورت کلی‌تر آن عبارت است از

$$\psi(x, t) = \sum_n C_n u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} + \int dp C(p) u_p(x) e^{-ip^2 t/2m\hbar} \quad (۱۲-۶)$$

مشاهده پذیرهای دیگر

انرژی تنها یکی از ویژگیهای قابل مشاهده یک دستگاه است. درباره مشاهده پذیرهای دیگر مانند تکانه قبلاً بحث کردیم، و تکانه زاویه‌ای را در یک فصل بعد بررسی می‌کنیم. درست همان‌طور که

انرژی ویژه مقدار عملگر انرژی (هامیلتونی H)، تکانه نیز ویژه مقدار عملگر تکانه p_{op} است. معادله ویژه مقدار عملگر تکانه به صورت زیر است

$$p_{op} u_p(x) \equiv \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} u_p(x) = p u_p(x) \quad (۱۳-۶)$$

ویژه مقدارها یک پیوستار تشکیل می دهند $(-\infty < p < \infty)$ ، و ویژه تابعها به صورت زیر هستند

$$u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \quad (۱۴-۶)$$

این ویژه تابعها یک مجموعه راست هنجار تشکیل می دهند:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx u_{p_1}^+(x) u_{p_2}(x) = \delta(p_1 - p_2) \quad (۱۵-۶)$$

قضیه بسط معمولاً به صورت زیر نوشته می شود

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dp \phi(p) u_p(x) \quad (۱۶-۶)$$

عملگر تکانه، مانند هامیلتونی، دارای ویژه مقدارهای حقیقی است. عملگرهایی که تمام ویژه مقدارهای آنها حقیقی هستند عملگرهای هرمیتی نامیده می شوند. چون تمام مشاهده پذیرهای فیزیکی در این خاصیت شریک اند، باید آنها را با عملگرهای هرمیتی توصیف کرد.

اصل موضوعه بسط و مانستگی برداری

برای یک مشاهده پذیر اختیاری، که با A نشان می دهیم، ویژه تابعهایی متناظر با ویژه مقدارهای حقیقی a وجود دارند:

$$A u_a(x) = a u_a(x) \quad (۱۷-۶)$$

ویژه تابعهای $u_a(x)$ یک مجموعه متعامد تشکیل می دهند، و می توان آنها را بهنجار کرد:

$$\int dx u_{a_1}^*(x) u_{a_2}(x) = \delta_{a_1 a_2} \quad (۱۸-۶)$$

در اینجا $\delta_{a_1 a_2}$ دلتای کرونکر برای ویژه‌مقدارهای متعلق به دلتای دیراک برای ویژه‌مقدارهای پیوسته است.

ویژه‌تابعهای $u_a(x)$ نیز یک مجموعه کامل تشکیل می‌دهند؛ به عبارت دیگر، یک تابع (انتگرال پذیر مجذوری) اختیاری $\psi(x)$ را می‌توان برحسب ویژه‌تابعهای $u_a(x)$ بسط داد:

$$\psi(x) = \sum_a C_a u_a(x) \quad (۱۹-۶)$$

از شرط راست‌هنجاری نتیجه می‌گیریم که

$$C_a = \int dx u_a^*(x) \psi(x) \quad (۲۰-۶)$$

تعبیر ضرایب بسط

تعبیر ضرایب بسط C_a به صورت زیر است: اگر مشاهده‌پذیر A را برای مجموعه‌ای از دستگاه‌های اندازه‌گیری کنیم که هر یک از آنها با تابع موج $\psi(x)$ توصیف می‌شوند که به یک بهنجار شده است، یعنی

$$\int dx \psi^*(x) \psi(x) = 1 \quad (۲۱-۶)$$

آنگاه

۱. نتیجه هر اندازه‌گیری تنها می‌تواند یکی از ویژه‌مقدارهای a باشد.

۲. احتمال اینکه ویژه‌مقدار a به دست آید، یا به عبارت دیگر معلوم شود چه کسری از دستگاه‌ها در این مجموعه دارای ویژه‌مقدار a هستند، برابر است با $|C_a|^2$.

۳. اگر از اندازه‌گیری روی یک عضو این مجموعه یک ویژه‌مقدار معین مثلاً a_1 به دست آمده باشد، این اندازه‌گیری باید حالت این دستگاه خاص را روی ویژه‌حالت $u_{a_1}(x)$ تصویر کرده باشد. تنها از این راه است که می‌توان اطمینان یافت که اندازه‌گیری بعدی مشاهده‌پذیر A همین نتیجه را می‌دهد.

یک پیامد این تعبیر این است که احتمال اینکه مقدار مشاهده‌پذیر A برای یک دستگاه یکی از ویژه‌مقدارهای آن باشد برابر با یک است، یعنی

$$\sum_a |C_a|^2 = 1 \quad (۲۲-۶)$$

$$\begin{aligned} 1 &= \int dx \psi^+(x) \psi(x) = \int dx \left(\sum_a C_a^* u_a^*(x) \right) \psi(x) \\ &= \sum_a C_a^* C_a \end{aligned}$$

از این فرمول نتیجه می‌گیریم

$$\begin{aligned} \sum_a C_a C_a^* &= \sum_a \int dx u_a^*(x) \psi(x) \int dy u_a(y) \psi^*(y) \\ &= \iint dx dy \psi^*(y) \psi(x) \sum_a u_a(y) u_a^*(x) = 1 \end{aligned} \quad (23-6)$$

که نشان می‌دهد

$$\sum_a u_a(y) u_a^*(x) = \delta(x - y) \quad (24-6)$$

این خاصیت ویژه تابعها را رابطه تمامیت می‌نامیم، و با حکم قضیه بسط هم‌ارز است.

مانستگی با فضای برداری

قضیه بسط را می‌توان تعمیمی از بسط یک بردار \mathbf{A} بر حسب بردارهای یکه راست‌هنگار در یک فضای برداری N بعدی دانست:

$$\mathbf{A} = A_1 \mathbf{i}_1 + A_2 \mathbf{i}_2 + \dots + A_N \mathbf{i}_N \quad (25-6)$$

بردارهای یکه در رابطه راست‌هنگاری زیر صدق می‌کنند

$$\mathbf{i}_k \cdot \mathbf{i}_l = \delta_{kl} \quad (26-6)$$

و مانسته ویژه تابعهای $u_n(x)$ هستند. ضرایب A_n با رابطه زیر داده می‌شوند

$$A_n = \mathbf{i}_n \cdot \mathbf{A} \quad (27-6)$$

و مانسته C_a هستند. غالباً در بحثهای ریاضیاتی زبان فضاهای برداری را به کار می‌بریم. به عنوان مثال، ضرایب C_a را تصاویر $\psi(x)$ روی بردارهای پایه $u_a(x)$ می‌نامیم، و کمیت

$$C_a = \int dx u_a^*(x) \psi(x)$$

را حاصلضرب نرده‌ای u_a و ψ می‌گوییم.

در واقع، مانستگی میان توابع موج $\psi(x)$ و بردارهای N بعدی کاملاً عمیق است. در هر دو مورد، با فضاهای خطی سروکار داریم: درست همان‌طور که از جمع دو بردار در فضای برداری یک بردار به دست می‌آید،

$$\mathbf{A} + \mathbf{B} = \mathbf{C}$$

مجموع دو تابع موج نیز یک تابع موج قابل قبول است، و در هر دو مورد یک ضرب نرده‌ای تعریف می‌کنیم.

تفاوت میان فضای برداری مکانیک کوانتومی و یک فضای برداری ساده N بعدی در این است که فضای برداری در مکانیک کوانتومی به صورت پیوسته بینهایت بعدی است. بنابراین، جمع گسسته در حاصلضرب نرده‌ای $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = \sum_i A_i B_i$ به انتگرال در $\int dx \phi^*(x) \psi(x)$ تبدیل می‌شود. این نشان می‌دهد که در مکانیک کوانتومی باید به همگرایی انتگرالها توجه کنیم، و اثبات قضیه بسط بسیار پیچیده می‌شود. در زبان ریاضی، فضای برداری در مکانیک کوانتومی را فضای هیلبرت می‌نامند. در توضیح مکانیک کوانتومی، هرگاه بتوانیم از پیچیدگیهای ریاضی صرفنظر می‌کنیم و از شباهت با فضای برداری معمولی آزادانه استفاده می‌کنیم.

عملگرها و مشاهده‌پذیرها

عملگر در فضاهای برداری یک بردار را به بردار دیگری تبدیل می‌کند. عملگرهای خطی به گونه‌ای هستند که

$$A(\alpha_1 \psi_1(x) + \alpha_2 \psi_2(x)) = \alpha_1 A \psi_1(x) + \alpha_2 A \psi_2(x) \quad (28-6)$$

و اگر بخواهیم مشاهده‌پذیرها را نمایش دهند باید هرمیتی باشند. برای عملگرهای هرمیتی داریم

$$\langle A \rangle = \langle A \rangle^*$$

$$\int dx \Psi^*(x) A \Psi(x) = \int dx (A \Psi(x))^* \Psi(x) \quad (۲۹-۶)$$

از اینجا نتیجه می‌گیریم که برای عملگرهای هرمیتی، به ازای دو تابع اختیاری ϕ و ψ ، می‌توان نوشت

$$\int dx \phi^\dagger A \psi = \int dx (A \phi)^* \psi \quad (۳۰-۶)$$

برای اثبات، فرض کنید

$$\Psi(x) = \phi(x) + \lambda \psi(x) \quad (۳۱-۶)$$

که در آن λ یک ثابت مختلط اختیاری است. بنابراین، از ۲۹-۶ داریم

$$\begin{aligned} \int dx \Psi^\dagger A \Psi &= \int dx (\phi^\dagger + \lambda^\dagger \psi^\dagger) A (\phi + \lambda \psi) = \int dx \phi^\dagger A \phi \\ &+ |\lambda|^2 \int dx \psi^\dagger A \psi + \lambda \int dx \phi^\dagger A \psi + \lambda^\dagger \int dx \psi^\dagger A \phi \end{aligned} \quad (۳۲-۶)$$

که همیوگ مختلط آن به صورت زیر است

$$\begin{aligned} \int dx (A \Psi)^\dagger \Psi &= \int dx (A \phi)^* \phi + |\lambda|^2 \int dx (A \psi)^* \psi \\ &+ \lambda^\dagger \int dx (A \psi)^\dagger \phi + \lambda \int dx (A \phi)^* \psi \end{aligned}$$

برای عملگر هرمیتی، در دو معادله بالا طرفهای چپ و همچنین دو جمله اول طرفهای راست برابرند. چون λ یک پارامتر مختلط است، λ و λ^* مستقل از یکدیگرند و می‌توان ضریب آنها را جداگانه با هم برابر گرفت، و ۳۰-۶ به دست می‌آید.

اگر عملگر A هرمیتی نباشد، می‌توان عملگر همیوگ هرمیتی A^\dagger را، برای هر جفت تابع موج، با رابطه زیر تعریف کرد

$$\int dx (A \phi)^\dagger \psi = \int dx \phi^\dagger A^\dagger \psi \quad (۳۳-۶)$$

نمادنگاری دیراک

پل آدرین موریس دیراک یک نمادنگاری بسیار مختصر و مفید معمول کرد که هم برای فضاهای برداری با بعد متناهی و هم در مورد فضاهای هیلبرت به کار می‌رود. به هر تابع موج ψ یک بردار حالت، که با $|\psi\rangle$ نشان می‌دهیم و آن را کِت می‌نامیم، نسبت می‌دهیم. همچنین، به هر تابع موج همیوگ مختلط ϕ^* کمیت $\langle\phi|$ را نسبت می‌دهیم و آن را برا می‌نامیم. حاصلضرب نرده‌ای ϕ^* و ψ را با یک ”براکت“^۱ نشان می‌دهیم:

$$\int dx \phi^* \psi = \langle\phi|\psi\rangle \quad (۳۴-۶)$$

بلافاصله نتیجه می‌شود که

$$\langle\phi|\psi\rangle^* = \langle\psi|\phi\rangle \quad (۳۵-۶)$$

انتگرال شامل یک عملگر را می‌توان به دو طریق هم‌ارز زیر نوشت

$$\int dx \phi^* A \psi = \langle\phi|A\psi\rangle = \langle\phi|A|\psi\rangle \quad (۳۶-۶)$$

عملگر همیوگ هرمیتی برای هر جفت حالت با رابطه زیر تعریف می‌شود

$$\langle A\phi|\psi\rangle = \langle\phi|A^\dagger|\psi\rangle \quad (۳۷-۶)$$

اگر A یک عدد باشد می‌توان آن را از براکت خارج کرد:

$$\langle\phi|a\psi\rangle = a\langle\phi|\psi\rangle \quad (۳۸-۶)$$

و

$$\langle a\phi|\psi\rangle = a^* \langle\phi|\psi\rangle \quad (۳۹-۶)$$

معادله‌های ویژه‌مقداری به صورت زیر نوشته می‌شوند

$$A|a\rangle = a|a\rangle \quad (۴۰-۶)$$

۱. دیراک ”برا“ و ”کِت“ را از تقسیم واژه انگلیسی *bracket*، معادل واژه فرانسوی *کروشه*، گرفته است.

که در آن ویژه حالت را با ویژه مقدار خودش نشانگذاری کرده ایم. چگونگی تبدیل این معادله به یک معادله وابسته به x از نوع ۴-۶ را در فصل ۷ بیان می کنیم. شرط راست هنجاری در نمادنگاری دیراک به صورت زیر درمی آید

$$\langle a_1 | a_2 \rangle = \delta_{a_1 a_2} \quad (۴۱-۶)$$

و قضیه بسط به صورت زیر نوشته می شود

$$|\psi\rangle = \sum_a C_a |a\rangle \quad (۴۲-۶)$$

با ضرب کردن در یک ویژه حالت خاص از سمت چپ، به دست می آوریم

$$\langle b | \psi \rangle = \sum_a C_a \langle b | a \rangle = \sum_a C_a \delta_{ab} = C_b \quad (۴۳-۶)$$

بنابراین، می توان نوشت

$$\langle \phi | \psi \rangle = \sum_a C_a \langle \phi | a \rangle = \sum_a \langle \phi | a \rangle \langle a | \psi \rangle \quad (۴۴-۶)$$

چون این نتیجه برای هر ϕ و ψ صادق است، می توان رابطه بالا را ”تفکیک“ کرد و مانسته ۲۴-۶ در نمادنگاری دیراک را به دست آورد:

$$\sum_a |a\rangle \langle a| = 1 \quad (۴۵-۶)$$

این بخش را با مثالی درباره استفاده از نمادنگاری دیراک در اثبات تعامد ویژه تابعهای عملگرهای هرمیتی متناظر با ویژه مقدارهای مختلف به پایان می رسانیم. رابطه زیر را در نظر بگیرید

$$\langle b | A | a \rangle = a \langle b | a \rangle \quad (۴۶-۶)$$

از طرف دیگر، می توان نوشت

$$\langle b | A^\dagger | a \rangle = \langle A(b) | a \rangle = b^* \langle b | a \rangle \quad (۴۷-۶)$$

زیرا $|b\rangle$ یک ویژه حالت عملگر A با ویژه مقدار b است، و این کمیت در برا ظاهر می شود. اما برای عملگر هرمیتی داریم $A = A^\dagger$ ، و در نتیجه

$$a\langle b|a\rangle = b^*\langle b|a\rangle \quad (48-6)$$

اگر قرار دهیم $|b\rangle = |a\rangle$ ، بلافاصله می بینیم که ویژه مقدارها باید حقیقی باشند. بنابراین، $b = b^*$ و از 48-6 به رابطه زیر می رسم.

$$(a - b)\langle b|a\rangle = 0 \quad (49-6)$$

که همان چیزی است که می خواستیم ثابت کنیم، زیرا به ازای $a \neq b$ باید $\langle b|a\rangle$ صفر شود.

واگنی و مشاهده پذیرهای همزمان

در دو مسئله ای که در فصل ۴ بررسی کردیم، یعنی ذره در جعبه و ذره آزاد، دیدیم که ویژه تابعها به طور همزمان ویژه تابعهای H و یک عملگر دیگر، در مورد اول پارینه و در مورد دوم تکانه، بودند و دیدیم که در هر دو مورد H با عملگرهای مزبور جابه جا می شد. اکنون شرایط کلی امکان این جابه جایی را بررسی می کنیم.

ویژه تابعهای u_a مربوط به ویژه مقدار a ی عملگر A ،

$$Au_a(x) = au_a(x) \quad (50-6)$$

هنگامی ویژه تابعهای همزمان عملگر دیگری مانند B هستند که

$$Bu_a(x) = bu_a(x) \quad (51-6)$$

اما این ایجاب می کند که

$$ABu_a(x) = Abu_a(x) = bAu_a(x) = abu_a(x)$$

$$BAu_a(x) = Bau_a(x) = aBu_a(x) = abu_a(x)$$

$$(AB - BA)u_a(x) = 0 \quad (52-6)$$

اگر این رابطه تنها برای یک u_a برقرار باشد چندان جالب توجه نیست، اما اگر برای مجموعه کامل u_a صادق باشد به این معنی است که برای تمام تابعهای انتگرال‌پذیر مجذوری $\psi(x) = \sum_a C_a u_a(x)$ می‌توان نوشت

$$\begin{aligned} \sum_a C_a (AB - BA)u_a(x) &= (AB - BA) \sum_a C_a u_a(x) \\ &= (AB - BA) \psi(x) = 0 \end{aligned} \quad (53-6)$$

یعنی عملگرها جابه‌جا می‌شوند:

$$[A, B] = 0 \quad (54-6)$$

برعکس، اگر دو عملگر هرمیتی A و B جابه‌جا شوند، یعنی رابطه ۵۴-۶ برقرار باشد، آنگاه

$$\begin{aligned} ABu_a(x) &= BAu_a(x) \\ &= aBu_a(x) \end{aligned} \quad (55-6)$$

یعنی

$$A[Bu_a(x)] = a[Bu_a(x)] \quad (56-6)$$

بنابراین، تابع $Bu_a(x)$ نیز یک ویژه‌تابع A با ویژه‌مقدار a است. اگر به‌ازای هر ویژه‌مقدار a تنها یک ویژه‌تابع عملگر A وجود داشته باشد، آنگاه $Bu_a(x)$ باید متناسب با $u_a(x)$ باشد:

$$Bu_a(x) = bu_a(x) \quad (57-6)$$

بنابراین، $u_a(x)$ ویژه‌تابع همزمان A و B است. این وضعیت، که در آن ویژه‌تابعهای A واگن نیستند، موردی است که برای ذره در جعبه دیدیم. از طرف دیگر، اگر دو ویژه‌تابع A متناظر با ویژه‌مقدار a وجود داشته باشند، یعنی، چنانکه در مثال ذره آزاد دیدیم، واگنی دوگانه داشته باشیم:

$$\begin{aligned} Au_a^{(1)}(x) &= au_a^{(1)}(x) \\ Au_a^{(2)}(x) &= au_a^{(2)}(x) \end{aligned} \quad (58-6)$$

تنها می توان گفت که $Bu_a^{(1)}(x)$ و $Bu_a^{(r)}(x)$ باید ترکیبهای خطی $u_a^{(1)}(x)$ و $u_a^{(r)}(x)$ باشند:

$$\begin{aligned} Bu_a^{(1)}(x) &= b_{11}u_a^{(1)}(x) + b_{1r}u_a^{(r)}(x) \\ Bu_a^{(r)}(x) &= b_{r1}u_a^{(1)}(x) + b_{rr}u_a^{(r)}(x) \end{aligned} \quad (۵۹-۶)$$

اما بدیهی است که می توان از ترکیبهای خطی این دو معادله معادله هایی از نوع زیر به دست آورد

$$\begin{aligned} Bv_a^{(1)}(x) &= b_+v_a^{(1)}(x) \\ Bv_a^{(r)}(x) &= b_-v_a^{(r)}(x) \end{aligned} \quad (۶۰-۶)$$

برای مثال،

$$\begin{aligned} B(u_a^{(1)} + \lambda u_a^{(r)}) &= (b_{11} + \lambda b_{r1})u_a^{(1)} + (b_{1r} + \lambda b_{rr})u_a^{(r)} \\ &= b_{\pm}(u_a^{(1)} + \lambda u_a^{(r)}) \end{aligned}$$

با این شرط که λ را طوری انتخاب کنیم که

$$\frac{b_{1r} + \lambda b_{rr}}{b_{11} + \lambda b_{r1}} = \lambda$$

این یک معادله درجه دوم است، و دو مقدار برای λ ، متناظر با دو ویژه مقدار b_{\pm} ، وجود دارند. بهتر است که ویژه تابعهای همزمان A و B در ۶۰-۶ را با $u_{ab}^{(1)}(x)$ و $u_{ab}^{(r)}(x)$ نشان دهیم. چون این ویژه تابعها متناظر با ویژه مقدارهای مختلف عملگر B هستند با هم متعامدند. در عمل، برای واگنی دوگانه، اگر ویژه تابعهای واگن A را عمود بر یکدیگر بگیریم (مثلاً، e^{ikx} و e^{-ikx} برای ذره آزاد) خودبه خود ویژه تابعهای B نیز هستند.

حتی پس از یافتن ویژه تابعهای A و تعیین ترکیبهای خطی که ویژه تابعهای عملگر جابه جاشونده B هستند، ممکن است واگنی کاملاً از بین نرفته باشد، یعنی چند ویژه تابع همزمان A و B با همان a و b وجود داشته باشند. این نشان می دهد که باید عملگر سومی مانند C وجود داشته باشد که با A و B جابه جا شود و تابع را می توان چنان باز ترکیب کرد که ویژه تابعهای همزمان A و B و C باشد و ویژه مقدارهای آن ویژه تابعهای واگن A و B را متمایز کنند. این روند تا از بین رفتن کامل واگنی ادامه می یابد. مجموعه عملگرهای دو به دو جابه جاشونده A, B, C, \dots, M ، که ویژه تابعهای مشترک آنها را تعیین می کنیم، مجموعه کامل مشاهده پذیرهای جابه جاشونده نامیده

$$\begin{aligned} [A, B] &= [A, C] = \dots = [A, M] = 0 \\ [B, C] &= [B, D] = \dots = [B, M] = 0 \end{aligned} \quad (۶۱-۶)$$

و غیره، با ویژه‌تابعهای همزمان $u_{ab\dots m}(x)$:

$$\begin{aligned} Au_{ab\dots m}(x) &= au_{ab\dots m}(x) \\ Bu_{ab\dots m}(x) &= bu_{ab\dots m}(x) \\ Mu_{ab\dots m}(x) &= mu_{ab\dots m}(x) \end{aligned} \quad (۶۲-۶)$$

برای حالتی که با $u_{abc\dots m}(x)$ توصیف می‌شود مقادیر مشاهده‌پذیرهای A, B, C, \dots, M معین هستند. این بیشترین اطلاعاتی است که می‌توان یکباره راجع به دستگاه داشته باشیم، زیرا اگر عملگر دیگری را در نظر بگیریم که تابعی از A, B, \dots, M نباشد (چون اینها جابه‌جا می‌شوند، چنین تابعی بدون ابهام تعریف می‌شود) از اندازه‌گیری آن یک مقدار دقیق در حالت $u_{ab\dots m}(x)$ به‌دست نمی‌آید. به‌طور کلی، اگر دو عملگر با هم جابه‌جا نشوند نوعی رابطه عدم قطعیت برای دقتی که می‌توان این دو مشاهده‌پذیر را تعیین کرد وجود دارد.

رابطه‌های عدم قطعیت

یک راه ساده برای تعریف عدم قطعیت وابسته به یک عملگر A توصیف آن با استفاده از افت‌وخیز حول مقدار میانگین است. عملگر A و یک حالت بهنجارشده کلی را در نظر می‌گیریم که با ψ توصیف می‌شود. مقدار میانگین A همان مقدار انتظاری $\langle \psi | A | \psi \rangle$ است که آن را با نماد اختصاری $\langle A \rangle$ نشان می‌دهیم. مجذور انحراف از میانگین معیاری از افت‌وخیز است. با این کمیت است که مجذور عدم قطعیت $(\Delta A)^2$ را تعریف می‌کنیم:

$$\begin{aligned} (\Delta A)^2 &\equiv \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \rangle \\ &= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \end{aligned} \quad (۶۳-۶)$$

زیرا مقدار میانگین عددی مانند $\langle A \rangle^2$ درست برابر با همان عدد است.

در پیوست ب نشان می‌دهیم که اگر دو عملگر هرمیتی A و B جابه‌جا نشوند عدم قطعیت‌های ΔA و ΔB همبسته‌اند، و رابطه آنها به‌صورت زیر است

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4} \langle i[A, B] \rangle^2 \quad (۶۴-۶)$$

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن $[A, B] = AB - BA$ ، توجه کنید که اگر حالت ψ اتفاقاً یک ویژه حالت یکی از عملگرها، مثلاً A ، باشد آنگاه

$$\begin{aligned}(\Delta A)^2 &= \langle a|A^2|a\rangle - \langle a|A|a\rangle^2 \\ &= a^2 \langle a|a\rangle - [a \langle a|a\rangle]^2 = 0\end{aligned}\quad (65-6)$$

که برخلاف انتظار نیست، زیرا عدم قطعیتی وجود ندارد. بنابراین، طرف چپ ۶-۶۴ صفر می‌شود. در طرف راست هم صفر به دست می‌آید زیرا

$$\begin{aligned}\langle a|[A, B]|a\rangle &= \langle a|AB|a\rangle - \langle a|BA|a\rangle \\ &= \langle A(a)|B|a\rangle - \langle a|B|A(a)\rangle \\ &= a \langle a|B|a\rangle - a \langle a|B|a\rangle = 0\end{aligned}$$

برای عملگرهای x و p ، که برای آنها $[x, p] = i\hbar$ ، به دست می‌آوریم

$$(\Delta x)^2 (\Delta p)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (66-6)$$

توجه کنید که در محاسبه‌های بالا هیچ استفاده‌ای از ویژگیهای موجی، توابع موج فضای x و فضای p ، یا دوگانگی موج-ذره نشده است. نتیجه به دست آمده تنها به ویژگیهای عملگری مشاهده‌پذیرهای A و B بستگی دارد.

وابستگی زمانی و حد کلاسیک

اکنون به مسئله مهم حد کلاسیک نظریه کوانتومی می‌پردازیم. برای این کار ابتدا باید تغییرات زمانی مقدار انتظاری عملگرها را بررسی کنیم. به طور کلی، مقدار انتظاری یک عملگر با زمان تغییر می‌کند. این تغییر می‌تواند به دلیل وابستگی صریح خود عملگر به زمان باشد، مانند عملگر $x + pt/m$ و یا می‌تواند به این دلیل باشد که مقدار انتظاری نسبت به تابع موجی گرفته می‌شود که خودش با زمان تغییر می‌کند. اگر بنویسیم

$$\langle A \rangle_t = \int \psi^*(x, t) A \psi(x, t) dx \quad (67-6)$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle A \rangle_t &= \int \psi^*(x, t) \frac{\partial A}{\partial t} \psi(x, t) dx \\
&+ \int \frac{\partial \psi^*(x, t)}{\partial t} A \psi(x, t) dx \\
&+ \int \psi^*(x, t) A \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} dx \\
&= \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle_t + \int \left(\frac{\partial}{\partial t} H \psi(x, t) \right)^* A \psi(x, t) dx \\
&+ \int \psi^*(x, t) A \left(\frac{\partial}{\partial t} H \psi(x, t) \right) dx \\
&= \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle_t + \frac{i}{\hbar} \int \psi^*(x, t) H A \psi(x, t) dx \\
&- \frac{i}{\hbar} \int \psi^*(x, t) A H \psi(x, t) dx
\end{aligned}$$

بنابراین

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle_t = \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle_t + \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle_t \quad (۶۸-۶)$$

در این محاسبه از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که H یک عملگر هرمیتی است. نتیجه می‌گیریم که اگر A وابستگی صریح به زمان نداشته باشد، تغییر مقدار انتظاری برای هر حالتی به صورت زیر است

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle_t = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle_t \quad (۶۹-۶)$$

هرگاه این عملگر با H جابه‌جا شود، مقدار انتظاری آن همیشه ثابت است، و می‌توان گفت این مشاهده‌پذیر یک ثابت حرکت است. اگر H عضوی از مجموعه کامل مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده باشد، تمام مشاهده‌پذیرهای دیگر این مجموعه ثابتهای حرکت خواهند بود.

در اینجا به ترتیب $A = x$ و $A = p$ و در هر مورد می‌نویسیم www.arsanjan.blogfa.com

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle x \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle [H, x] \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \left\langle \left[\frac{p^2}{2m} + V(x), x \right] \right\rangle\end{aligned}$$

اما x با هر تابعی از x جابه‌جا می‌شود:

$$[V(x), x] = 0 \quad (۷۰-۶)$$

و از این رو تنها باید $[p^2, x]$ را محاسبه کنیم:

$$\begin{aligned}[p^2, x] &= p[p, x] + [p, x]p \\ &= \frac{2\hbar}{i}p\end{aligned} \quad (۷۱-۶)$$

بنابراین، به دست می‌آوریم

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \left\langle \frac{p}{m} \right\rangle \quad (۷۲-۶)$$

اکنون می‌نویسیم

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle p \rangle &= \frac{i}{\hbar} \left\langle \left[\frac{p^2}{2m} + V(x), p \right] \right\rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} \langle [p, V(x)] \rangle\end{aligned} \quad (۷۳-۶)$$

زیرا بدیهی است که p^2 با p جابه‌جا می‌شود. برای محاسبه آخرین جابه‌جاگر، می‌نویسیم

$$\begin{aligned}pV(x)\psi(x) - V(x)p\psi(x) &= \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} [V(x)\psi(x)] - \frac{\hbar}{i} V(x) \frac{d}{dx} \psi(x) \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{dV(x)}{dx} \psi(x)\end{aligned} \quad (۷۴-۶)$$

$$[p, V(x)] = \frac{\hbar}{i} \frac{dV(x)}{dx} \quad (۷۵-۶)$$

و در نتیجه

$$\frac{d}{dt} \langle p \rangle_t = - \left\langle \frac{dV(x)}{dx} \right\rangle_t \quad (۷۶-۶)$$

از ترکیب ۷۲-۶ و ۷۶-۶ به دست می آوریم

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle_t = - \left\langle \frac{dV(x)}{dx} \right\rangle_t \quad (۷۷-۶)$$

این رابطه بسیار شبیه معادله حرکت ذره کلاسیک در پتانسیل $V(x)$ است:

$$m \frac{d^2 x_{cl}}{dt^2} = - \frac{dV(x_{cl})}{dx_{cl}} \quad (۷۸-۶)$$

نهایتاً چیزی که ما را از پذیرفتن اتحاد

$$x_{cl} = \langle x \rangle \quad (۷۹-۶)$$

باز می دارد این است که

$$\left\langle \frac{dV}{dx} \right\rangle \neq \frac{d}{d\langle x \rangle} V(\langle x \rangle) \quad (۸۰-۶)$$

تحت شرایطی که نامساوی بالا به یک تساوی تقریبی تبدیل می شود، حرکت اساساً کلاسیک است، و اهرنفت برای نخستین بار متوجه این نکته شد. این تساوی تقریبی ایجاب می کند که پتانسیل تابعی کند تغییر از شناسه خود باشد. اگر بنویسیم

$$F(x) = - \frac{dV(x)}{dx} \quad (۸۱-۶)$$

$$F(x) = F(\langle x \rangle) + (x - \langle x \rangle)F'(\langle x \rangle) + \frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2!}F''(\langle x \rangle) + \dots$$

اگر عدم قطعیت $\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = (\Delta x)^2$ کوچک باشد، و بتوان از جمله‌های بالاتر در بسط صرف‌نظر کنیم، به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}\langle F(x) \rangle &\cong F(\langle x \rangle) + \langle x - \langle x \rangle \rangle F'(\langle x \rangle) \\ &\cong F(\langle x \rangle)\end{aligned}\quad (۸۲-۶)$$

این رابطه می‌تواند حتی برای الکترون‌ها و ذرات زیراتمی دیگر معتبر باشد، و برای میدانهای ماکروسکوپی تقریب خوبی است، و به این دلیل می‌توان مدار الکترون یا پروتون در شتابدهنده‌ها را با معادله‌های کلاسیک حرکت توصیف کرد.

مسائل

۱-۶ اگر A و B عملگرهای هرمیتی باشند، ثابت کنید (۱) عملگر AB تنها به شرطی هرمیتی است که A و B جابه‌جا شوند، یعنی $AB = BA$ ، و (۲) عملگر $(A + B)^n$ هرمیتی است. ۲-۶ ثابت کنید عملگر A هر چه باشد، $A + A^\dagger$ و $i(A - A^\dagger)$ ، و همچنین AA^\dagger ، هرمیتی هستند.

۳-۶ ثابت کنید اگر H عملگر هرمیتی باشد همیوگ هرمیتی عملگر e^{iH} (که با $\sum_{n=0}^{\infty} i^n H^n / n!$ تعریف می‌شود) به صورت e^{-iH} است. ۴-۶ نامساوی شوارتز را اثبات کنید:

$$\langle \psi | \psi \rangle \langle \phi | \phi \rangle \geq |\langle \psi | \phi \rangle|^2$$

توجه کنید که این نامساوی هم‌ارز $\cos^2 \theta \leq 1$ برای بردارهای سه‌بعدی است. [راهنمایی: $\langle \psi + \lambda \phi | \psi + \lambda \phi \rangle \geq 0$ را در نظر بگیرید و مقدار λ را که به‌ازای آن طرف چپ کمینه می‌شود محاسبه کنید.] ۵-۶ برای پتانسیل

$$\begin{aligned}V(x) &= \infty & x < 0 \\ &= 0 & 0 < x < a \\ &= \infty & a < x\end{aligned}$$

ویژه تابعهای بهنجار شده عبارتند از $u_n(x) = \sqrt{2/a} \sin(n\pi x/a)$. نشان دهید

$$\sum_n \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi y}{a} = \delta(x - y) \quad 0 \leq x, y \leq a$$

۶-۶ اگر A هرمیتی باشد، نشان دهید $\langle A^\dagger \rangle \geq 0$.

۷-۶ عملگر هرمیتی H دارای ویژگی زیر است

$$H^\dagger = \lambda$$

ویژه مقدارهای این عملگر H را به دست آورید. اگر H هرمیتی نباشد، ویژه مقدارهای آن را تعیین کنید.

۸-۶ عملگر U را یکانی می‌گوییم اگر دارای ویژگی زیر باشد

$$UU^\dagger = U^\dagger U = \lambda$$

نشان دهید اگر $\langle \psi / \psi \rangle = \lambda$ آنگاه $\langle U\psi / U\psi \rangle = \lambda$.

۹-۶ نشان دهید اگر A هرمیتی باشد e^{iA} یکانی است.

۱۰-۶ نشان دهید اگر مجموعه کامل $\{u_a\}$ راست‌هنجار باشد:

$$\langle u_a | u_b \rangle = \delta_{ab}$$

مجموعه بردارهای

$$|v_a\rangle = U|u_a\rangle$$

که در آن U یکانی است نیز راست‌هنجار است.

۱۱-۶ برای ذره‌ای در یک جعبه نامتناهی در حالتی که با عدد کوانتومی n مشخص می‌شود، نشان دهید

$$\Delta p \Delta x \sim \hbar n$$

۱۲-۶ با استفاده از رابطه جابه‌جایی میان تکانه p و مکان x ، معادله‌هایی را به دست آورید که

وابستگی زمانی $\langle x \rangle$ و $\langle p \rangle$ را به ازای هامیلتونیهای زیر بیان کنید
www.arsanjan.blogfa.com

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m(\omega_1^2 x^2 + \omega_2 x + \epsilon) \quad (\text{الف})$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - \frac{A}{x^2} \quad (\text{ب})$$

اولین مجموعه معادله‌ها (هامیلتونی الف) را حل کنید.
 ۱۳-۶ هامیلتونی الکترونی در یک میدان الکتریکی نوسانی به صورت زیر است

$$H = \frac{p^2}{2m} - (eE_0 \cos \omega t)x$$

(dx/dt) ، (dp/dt) ، و (dH/dt) را محاسبه کنید.

مراجع

ساختار کلی مکانیک موجی در تمام کتابهای مکانیک کوانتومی بررسی می‌شود. برای مثال، می‌توانید به کتابهای زیر مراجعه کنید
 پاول جی، ال و ب کریسمن، مکانیک کوانتومی، ترجمه پاشایی‌راد و سعادت، تهران، مرکز نشر دانشگاهی، ۱۳۶۸، ۵۴۸ صفحه.

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

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

و کتاب پیشرفته‌تر

E Merzbacher, *Quantum Mechanics*, John Wiley & Sons, New York, 1970.



روشهای عملگری در مکانیک کوانتومی

در بحث ساختار کلی مکانیک موجی، به عملگرهای معرف مشاهده پذیرها و ویژه تابعهای آنها به یک اندازه اهمیت دادیم. اگرچه در یک جا ویژه تابعها را همانند یک پایه راست هنجار از بردارهای یک در فضای برداری N بعدی توصیف کردیم — که مسلماً از اهمیت آنها می کاهد — اما به نظر می رسد که آنها، نه عملگرها، در بررسی مسائل فیزیکی در فصل ۵ نقش اول را به عهده دارند. در این فصل، با استفاده از یک مثال ساده، نشان خواهیم داد که (الف) برای یافتن طیف ویژه مقدار تنها با استفاده از عملگرها می توان نتیجه های بسیاری به دست آورد، و (ب) توصیف ویژه تابعها به عنوان پایه را می توان اندکی مجردتر کرد. این توصیف به این دلیل اهمیت دارد که تاکنون تنها توابعی را در نظر گرفته ایم که به n یا به n بستگی دارند، اما در آینده نشان خواهیم داد که مشاهده پذیرهایی وجود دارند که نمی توان آنها را مستقیماً به فضای n وابسته کرد، و برای آنها باید مفهوم مجردتر ویژه حالت را تعریف کرد. این نکات در جریان بررسی مثال مزبور، مسئله نوسانگر هماهنگ، روشنتر خواهند شد.^۱

۱. مسائلی که حل دقیق دارند، چه به صورت معادله های دیفرانسیل چه به صورت عملگری، اندک هستند. مسئله نوسانگر هماهنگ از همه ساده تر و از این رو برای اهداف ما از همه مناسبتر است.

طیف انرژی نوسانگر هماهنگ

هامیلتونی نوسانگر هماهنگ به صورت زیر است

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (۱-۷)$$

که در آن x و p عملگر هستند. بر نمایش p به صورت $(\hbar/i)(d/dx)$ تأکید نمی‌کنیم. تنها نتیجه این نمایش صریح، که در فصل ۳ به دست آوردیم، رابطه جابه‌جایی بنیادی زیر است

$$[p, x] = \frac{\hbar}{i} \quad (۲-۷)$$

به لحاظ کلاسیک، هامیلتونی نوسانگر هماهنگ را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$H = \omega \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2}} x - i \frac{p}{\sqrt{2m\omega}} \right) \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2}} x + i \frac{p}{\sqrt{2m\omega}} \right)$$

اما چون p و x جابه‌جا نمی‌شوند، داریم

$$\begin{aligned} & \omega \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2}} x - i \frac{p}{\sqrt{2m\omega}} \right) \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2}} x + i \frac{p}{\sqrt{2m\omega}} \right) \\ &= \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 - \frac{i\omega}{2} (px - xp) \\ &= H - \frac{1}{2} \hbar \omega \end{aligned} \quad (۳-۷)$$

در اینجا برای عملگرهایی که $H - \hbar\omega/2$ به آنها تجزیه شده است یک نمادنگاری خاص معرفی می‌کنیم:

$$\begin{aligned} A &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + i \frac{p}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \\ A^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - i \frac{p}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \end{aligned} \quad (۴-۷)$$

که در آنها عامل اضافی $\sqrt{1/\hbar}$ را برای این وارد کرده‌ایم که A و A^\dagger بی‌بعد باشند. چون x و p هرمیتی هستند، A^\dagger واقعاً همیوگ هرمیتی A است. توجه کنید که

$$[A, A^\dagger] = \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x, -i \frac{p}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \right] + \left[i \frac{p}{\sqrt{2m\omega\hbar}}, \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x \right] = 1 \quad (۵-۷)$$

$$H = \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + A^\dagger A \right) \quad (۶-۷)$$

این سادگی هامیلتونی موجب سادگی رابطه های جابه جایی A و A^\dagger با H می شود. داریم^۲

$$[H, A] = [\hbar\omega A^\dagger A, A] = \hbar\omega [A^\dagger, A]A = -\hbar\omega A \quad (۷-۷)$$

و

$$[H, A^\dagger] = [\hbar\omega A^\dagger A, A^\dagger] = \hbar\omega A^\dagger [A, A^\dagger] = \hbar\omega A^\dagger \quad (۸-۷)$$

توجه کنید که یک راه ساده برای به دست آوردن رابطه های جابه جایی شامل عملگرهای الحاقی هرمیتی استفاده از اتحاد زیر است

$$[A, B]^\dagger = (AB - BA)^\dagger = B^\dagger A^\dagger - A^\dagger B^\dagger = [B^\dagger, A^\dagger] \quad (۹-۷)$$

مخصوصاً داریم

$$\begin{aligned} [H, A]^\dagger &= [A^\dagger, H] = -[H, A^\dagger] \\ &= (-\hbar\omega A)^\dagger \end{aligned} \quad (۱۰-۷)$$

که از آن رابطه ۸-۷ به دست می آید.
اکنون معادله ویژه مقداری را می نویسیم:

$$H u_E = E u_E \quad (۱۱-۷)$$

در گذشته، هرگاه چنین معادله ای را می نوشتیم، منظور آن بود که H شامل عملگرهای دیفرانسیلی مانند d/dx است و u_E تابعی از x است. این فرض مناسب بود زیرا با عملگرهایی سروکار داشتیم

۲. از قاعده های جابه جایی که در پیوست ب نشان داده شده اند مکرراً استفاده خواهیم کرد، از جمله

$$[A + B, C] = [A, C] + [B, C] \quad \text{و} \quad [AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$$

بدیهی است که ترتیب عملگرها نباید به هم بخورد.

که مشخصاً به فضایی مربوط می‌شدند که با تمام تابعهای انتگرال‌پذیر مجذوری از x تعریف شده بود، اما در آنچه اکنون انجام می‌دهیم چیزهایی را که عملگرها روی آنها عمل می‌کنند چندان مشخص نمی‌کنیم. تنها فرض می‌کنیم که آنها در یک فضای برداری مجرد تعریف شده‌اند، و این فضا را بعداً به فضای توابع x مربوط خواهیم کرد. برای انتقال این تجرید به زبانی که برای توصیف معادله‌ها از آن استفاده می‌کنیم، به جای ویژه‌تابع از ویژه‌حالت صحبت می‌کنیم، و آنچه را تابع موج یا بسته‌موج نامیدیم اکنون بردار حالت می‌نامیم. بنابراین، به جای ویژه‌تابع $u_{ab\dots m}$ مربوط به بزرگترین مجموعه مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده می‌توان ویژه‌بردار یا ویژه‌حالت $u_{ab\dots m}$ را به کار برد؛ شاخصهای a, b, \dots, m معرف ویژه‌مقدارهای عملگرهای A, B, \dots, M هستند، و این توصیف، بدون x ، به روشنی حاوی بیشترین اطلاعات ممکن است.

اکنون ۷-۷ را بر u_E اعمال می‌کنیم:

$$H A u_E - A H u_E = -\hbar\omega A u_E$$

با استفاده از ۷-۱۱، به دست می‌آوریم

$$H A u_E = (E - \hbar\omega) A u_E \quad (۷-۱۲)$$

این معادله نشان می‌دهد که اگر u_E ویژه‌حالت H با ویژه‌مقدار E باشد، $A u_E$ نیز ویژه‌حالت H با ویژه‌مقدار $E - \hbar\omega$ است، یعنی متناظر با ویژه‌مقداری است که به اندازه یک

$$\epsilon = \hbar\omega \quad (۷-۱۳)$$

کمتر است. بنابراین، می‌توان نوشت

$$A u_E = c(E) u_{E-\epsilon} \quad (۷-۱۴)$$

وجود ثابت $c(E)$ لازم است، زیرا حتی اگر u_E به ۱ بهنجار شده باشد $A u_E$ الزاماً چنین نیست. در تأکید بر جدایی از وابستگی به x ، شرط بهنجارش که همیشه به صورت

$$\int u_E^*(x) u_E(x) dx = 1$$

نوشته می‌شد اکنون با استفاده از نمادنگاری دیراک به صورت زیر نوشته می‌شود

$$\langle u_E | u_E \rangle = 1 \quad (۷-۱۵)$$

ویژه حالتها را همیشه به ۱ به علاوه $\frac{1}{2}\hbar\omega$ برابر می‌کنیم. www.arsanjan.blogfa.com پیوستار باشند، که در این مورد

$$\langle u_E | u_{E'} \rangle = \begin{cases} \delta(E - E') \\ \text{یا} \delta(p - p') \end{cases} \quad (۱۶-۷)$$

اکنون اگر ۷-۷ را بر حالت $u_{E-\epsilon}$ اعمال کنیم، دقیقاً به همان طریق می‌بینیم که $Au_{E-\epsilon}$ ، یا معادل آن $A^\dagger u_E$ ، حالتی با انرژی $E - 2\epsilon$ را می‌دهد. بنابراین، با اعمال مکرر A روی یک u_E می‌توان حالت‌های با انرژی کمتر و کمتر را تولید کرد. عملگر A را به همین مناسبت عملگر کاهنده می‌نامند. حدی برای تکرار اعمال A وجود دارد زیرا یک پیامد ۷-۱ این است که مقدار انتظاری H باید همیشه مثبت باشد. در واقع، برای یک تابع موج اختیاری داریم

$$\begin{aligned} \langle \psi | p^\dagger | \psi \rangle &= \int \psi^*(x) p^\dagger \psi(x) dx = \int [p^\dagger \psi(x)]^* (p\psi) dx \\ &= \int [p\psi(x)]^* [p\psi(x)] dx \\ &= \hbar^2 \int |d\psi(x)/dx|^2 dx \geq 0 \end{aligned} \quad (۱۷-۷)$$

که در نمادنگاری بی‌مختصات به صورت زیر بیان می‌شود

$$\begin{aligned} \langle \psi | p^\dagger | \psi \rangle &= \langle p^\dagger \psi | p\psi \rangle \\ &= \langle p\psi | p\psi \rangle \geq 0 \end{aligned} \quad (۱۸-۷)$$

به همین ترتیب، چون x نیز یک عملگر هرمیتی است، داریم

$$\begin{aligned} \langle \psi | x^\dagger | \psi \rangle &= \langle x^\dagger \psi | x\psi \rangle \\ &= \langle x\psi | x\psi \rangle \geq 0 \end{aligned} \quad (۱۹-۷)$$

و حاصلضرب نرده‌ای هر بردار در خودش مجذور طول آن است که یک عدد مثبت است. بنابراین، روند کاهش باید در جایی که حالت پایه است قطع شود. یعنی، اگر حالت پایه را با u_0 نشان دهیم، باید

$$Au_0 = 0 \quad (۲۰-۷)$$

انرژی حالت پایه برابر است با $\text{www.arsanjan.blogfa.com}$

$$Hu_0 = (\hbar\omega A^\dagger A + \frac{1}{4}\hbar\omega)u_0 = \frac{1}{4}\hbar\omega u_0. \quad (21-7)$$

اکنون ۸-۷ را بر حالت پایه اعمال می‌کنیم:

$$HA^\dagger u_0 - A^\dagger Hu_0 = \hbar\omega A^\dagger u_0.$$

یعنی،

$$HA^\dagger u_0 = (\hbar\omega + \frac{1}{4}\hbar\omega)A^\dagger u_0. \quad (22-7)$$

انرژی به اندازه یک $\hbar\omega$ افزایش یافته است، و از این رو A^\dagger را عملگر افزایشده می‌نامند. نمادنگاری خود را اندکی تغییر می‌دهیم، به این معنی که هر حالت را با تعداد $\hbar\omega$ های افزون بر انرژی حالت پایه $\hbar\omega/2$ نشانگذاری می‌کنیم. بنابراین، می‌نویسیم

$$A^\dagger u_0 = cu_1 \quad (23-7)$$

توجه کنید که ۱۲-۷ ایجاب می‌کند که

$$Au_1 = c'u_0. \quad (24-7)$$

یعنی A^\dagger و A روی یک "نردبان" پله به پله حرکت می‌کنند. تمام حالتها را می‌توان با اعمال مکرر A^\dagger بر u_0 تولید کرد. در نتیجه، طیف انرژی با رابطه زیر داده می‌شود

$$E = \left(n + \frac{1}{4}\right) \hbar\omega \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (25-7)$$

بدین ترتیب، توانسته‌ایم طیف انرژی را بدون حل هیچ معادله دیفرانسیلی به دست آوریم. همچنین یک نمایش کلی از ویژه بردارها داریم:

$$u_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (A^\dagger)^n u_0. \quad (26-7)$$

که در آن ثابت درست بهنجارش را می توان به صورت $\frac{d}{dA^\dagger}$ نوشت و آوردن این ثابت این است که با توجه به رابطه جابه جایی

$$[A, A^\dagger] = 1$$

از تساوی صوری زیر استفاده کنیم

$$A = \frac{d}{dA^\dagger} \quad (27-7)$$

بنابراین، می توانیم بنویسیم

$$\langle u_0 | A^m (A^\dagger)^n | u_0 \rangle = \left\langle u_0 \left| \left(\frac{d}{dA^\dagger} \right)^m (A^\dagger)^n \right| u_0 \right\rangle$$

به ازای $m < n$ ، برای طرف راست به دست می آوریم

$$n(n-1)(n-2) \cdots (n-m+1) \langle u_0 | (A^\dagger)^{n-m} | u_0 \rangle$$

به آسانی دیده می شود که براکت برابر با صفر است:

$$\langle u_0 | (A^\dagger)^{n-m} | u_0 \rangle = \langle Au_0 | (A^\dagger)^{n-m-1} | u_0 \rangle = 0$$

زیرا $Au_0 = 0$. به ازای $m > n$ ، طرف چپ را به صورت زیر می نویسیم

$$\langle u_0 | A^m (A^\dagger)^n | u_0 \rangle = \left\langle u_0 \left| A^{m-n} \left(\frac{d}{dA^\dagger} \right)^n (A^\dagger)^n \right| u_0 \right\rangle$$

پس از مشتق گرفتن به این نتیجه می رسیم که $n! \langle u_0 | A^{m-n} | u_0 \rangle = 0$ به ازای $m = n$ داریم

$$\langle u_0 | A^n (A^\dagger)^n | u_0 \rangle = \left\langle u_0 \left| \left(\frac{d}{dA^\dagger} \right)^n (A^\dagger)^n \right| u_0 \right\rangle = n!$$

بنابراین، ضریب بهنجارش در ۲۶-۷ درست است، و همچنین نشان داده ایم که

$$\langle u_m | u_n \rangle = 0 \quad m \neq n \quad (28-7)$$

این حکم که هر بردار حالت اختیاری را می توان بر حسب ویژه حالت های H بسط داد اکنون به صورت مستقل از مختصات زیر نوشته می شود

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} C_n u_n \quad (29-7)$$

و چون $\langle u_m | u_n \rangle = \delta_{mn}$ داریم

$$C_m = \langle u_m | \psi \rangle \quad (30-7)$$

نمایشهای حالت های مجرد: از عملگرها تا معادله شرودینگر

نشان دادیم که می توان ویژه مقدارهای انرژی نوسانگر هماهنگ را تنها با استفاده از روشهای عملگری به دست آورد. در این مسئله تنها چیزی که برای تعیین ویژه حالتها به آن احتیاج داریم انرژی است، یعنی اعداد درست $n = 0, 1, 2, \dots$ که در رابطه زیر ظاهر می شوند

$$E = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

و از این رو مجموعه کامل مشاهده پذیرهای جابه جاشونده تنها شامل H است.^۲ بدین ترتیب، شاخص n در u_n تمام محتوای آن را توصیف می کند. بنابراین، می توانیم نقش ممتاز ویژه تابع در فضای x ، $u_n(x)$ را کنار بگذاریم، بجز اینکه: $u_n(x)$ اطلاعات بیشتری به ما می دهد زیرا چگالی احتمال یافتن ذره در x را (از طریق $|u_n(x)|^2$) تعیین می کند. با وجود این، آیا این مضمون اضافی می تواند تابع موج فضای x را ممتاز کند؟ برای مثال، نقش تابع موج $\phi(p)$ را در فضای تکانه یادآور می شویم. چنانکه در فصل ۳ دیدیم، $\phi(p)$ تبدیل فوریه تابع موج فضای x است و از این رو ممکن است برای آن نقش ممتازی در نظر بگیریم، اما بعداً توضیح دادیم که $\phi(p)$ ، مثلاً در ۴-۴، "صرفاً" یک ضریب بسط در بسط تابع موج اختیاری $\psi(x)$ بر حسب ویژه تابعهای عملگر تکانه است، و به همین دلیل مجذور قدر مطلق آن احتمال یافتن تکانه p برای آن حالت را به دست می دهد. به همین ترتیب، این واقعیت که $| \psi(x) |^2$ چگالی احتمال یافتن x برای مکان دستگاه است را می توان چنین تعبیر کرد که $\psi(x)$ ضریب بسط یک حالت مجرد اختیاری بر حسب ویژه حالت های عملگر مکان x_{op} است. معادله ویژه مقداری مربوط را به صورت زیر می نویسیم

$$x_{\text{op}} \phi_x = x \phi_x \quad (31-7)$$

۳. عدد n معرف پاریته نیز هست. حالت هایی که با اعداد زوج n مشخص می شوند پاریته مثبت و آنهایی که با اعداد فرد مشخص می شوند پاریته منفی دارند. این خاصیت از فرد بودن A و A^\dagger تحت انعکاس ناشی می شود.

که در آن x را به عنوان شاخص نوشتیم تا تأکید کنیم که ϕ_x ویژه حالت مربوط به x است، درست همان‌گونه که u_n ویژه حالت مربوط به n است. طیف عملگر هرمیتی x_{op} پیوسته است، به طوری که قضیهٔ بسط، به جای اینکه به صورت ۲۹-۷ باشد، در واقع به صورت زیر است

$$\psi = \int dx C(x) \phi_x \quad (۳۲-۷)$$

چون ویژه حالت‌هایی که در ۳۱-۷ آمده‌اند یک مجموعهٔ راست‌هنجار تشکیل می‌دهند، یعنی

$$\langle \phi_x | \phi_{x'} \rangle = \delta(x - x') \quad (۳۳-۷)$$

به دست می‌آوریم

$$C(x) = \langle \phi_x | \psi \rangle \quad (۳۴-۷)$$

و این کمیت دامنهٔ احتمال یافتن ذره در x است — یا به عبارت مشخص‌تر، از اندازه‌گیری مشاهده‌پذیر x ویژه مقدار x با احتمال $|C(x)|^2$ به دست می‌آید. کافی است نمادنگاری را تغییر دهیم و ۳۲-۷ را به صورت

$$\psi = \int dx \psi(x) \phi_x \quad (۳۵-۷)$$

بنویسیم تا نشان دهیم تابع موج فضای x نقش ممتازی ندارد، و استفاده از آن تنها برای آسانی است. اصول اساسی با عملگرها و ویژه بردارها و ویژه مقدارهای آنها در یک فضای مجرد سروکار دارند، و بقیهٔ چیزها به نمایش مربوط می‌شوند. البته این نمایش در به دست آوردن مقادیر عددی، که هدف فیزیک است، اهمیت فوق العاده‌ای دارد. به همین دلیل است که بر ساختار صوری نظریه تأکید چندانی نمی‌کنیم، و همچنان از توابع موج استفاده خواهیم کرد. بعداً با عملگرهایی سروکار خواهیم داشت که مانستهٔ کلاسیک ندارند، مانند اسپین الکترون و سایر ذرات، و در آنجا آزادی استفاده از نمایشهای دیگر را خواهیم دید.

برای مراجعهٔ آینده بهتر است دامنهٔ به دست آمدن مقدار x در اندازه‌گیری مکان را برای یک ویژه حالت تکانهٔ u_p محاسبه کنیم، یعنی می‌خواهیم $\psi(x)$ را که با رابطهٔ زیر تعریف می‌شود محاسبه کنیم

$$u_p = \int dx \psi(x) \phi_x \quad (۳۶-۷)$$

$$\psi(x) = \langle \phi_x | u_p \rangle \quad (۳۷-۷)$$

اما می‌دانیم که دامنه یافتن ذره‌ای با تکانه p در نقطه x با تابع موج ذره آزاد زیر داده می‌شود

$$\psi(x) = \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad (۳۸-۷)$$

بنابراین، به این نتیجه می‌رسیم که

$$\langle x | p \rangle = \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad (۳۹-۷)$$

که در آن برای ساده‌نویسی از تغییر نمادنگاری $|u_p\rangle \rightarrow |p\rangle, |\phi_x\rangle \rightarrow |x\rangle$ استفاده کرده‌ایم. توجه کنید که

$$\int dp \langle x | p \rangle \langle p | x' \rangle = \delta(x - x') \quad (۴۰-۷)$$

و

$$\int dx \langle p | x \rangle \langle x | p' \rangle = \delta(p - p') \quad (۴۱-۷)$$

با تعمیم رابطه کاملیت ۴۵-۶،

$$\sum_a |u_a\rangle \langle u_a| = ۱ \quad (۴۲-۷)$$

به متغیرهای پیوسته، به دست می‌آوریم

$$\int dp |p\rangle \langle p| = ۱ \quad (۴۳-۷)$$

و

$$\int dx |x\rangle \langle x| = ۱ \quad (۴۴-۷)$$

بنابراین، رابطه‌های ۴۰-۷ www.atsarjan.blogfa.com

$$\langle x|x' \rangle = \delta(x - x') \quad (۴۵-۷ \text{ الف})$$

و

$$\langle p|p' \rangle = \delta(p - p') \quad (۴۵-۷ \text{ ب})$$

توجه کنید که ۴۵-۷ الف همان ۳۳-۷ با نمادنگاری ساده است.

چگونه از این ساختار مجرد به معادله شرودینگر می‌رسیم؟ ابتدا ۲۰-۷ را در نظر بگیرید:

$$A|u_o \rangle = 0$$

بنابراین، داریم

$$\langle x|A|u_o \rangle = 0$$

یعنی

$$\left\langle x \left| \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x_{\text{op}} + i \frac{p_{\text{op}}}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \right| u_o \right\rangle = 0 \quad (۴۶-۷)$$

اکنون از اعمال عملگر x روی حالت $|x\rangle$ به دست می‌آوریم

$$x_{\text{op}}|x\rangle = x|x\rangle \quad (۴۷-۷)$$

و در نتیجه

$$\langle x|x_{\text{op}}|u_o \rangle = x\langle x|u_o \rangle = xu_o(x) \quad (۴۸-۷)$$

$$\begin{aligned}
 \langle x | p_{\text{op}} | u_o \rangle &= \int dp \langle x | p_{\text{op}} | p \rangle \langle p | u_o \rangle \\
 &= \int dp p \langle x | p \rangle \langle p | u_o \rangle \\
 &= \int dp p \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \langle p | u_o \rangle \\
 &= \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \int dp \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \langle p | u_o \rangle \\
 &= \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \int dp \langle x | p \rangle \langle p | u_o \rangle \\
 &= \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} u_o(x)
 \end{aligned} \tag{۴۹-۷}$$

بنابراین، رابطه $A | u_o \rangle = 0$ در فضای x به صورت معادله دیفرانسیل زیر درمی آید

$$\left(m\omega x + \hbar \frac{d}{dx} \right) u_o(x) = 0 \tag{۵۰-۷}$$

جواب این معادله دیفرانسیل ساده عبارت است از

$$u_o(x) = C e^{-m\omega x^2/2\hbar} \tag{۵۱-۷}$$

ثابت C از شرط بهنجارش $u_o(x)$ به ۱ به دست می آید:

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

یا

$$C = \left(\frac{m\omega}{h\pi} \right)^{1/2} \tag{۵۲-۷}$$

همچنین می‌توان حالت‌های بالا بر انرژی را مستقیماً با استفاده از رابطه زیر به دست آورد

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (A^\dagger)^n u_0(x) \quad (53-7)$$

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

به طور کلی، معادله

$$H|u_E\rangle = E|u_E\rangle \quad (54-7)$$

وقتی به صورت

$$\langle x|H|u_E\rangle = E\langle x|u_E\rangle \quad (55-7)$$

نوشته شود به معادله دیفرانسیل زیر برای $\langle x|u_E\rangle = u_E(x)$ تبدیل می‌شود

$$Hu_E(x) = Eu_E(x) \quad (56-7)$$

که در آن در H ، x به جای x_{op} و $(\hbar/i)(d/dx)$ به جای p_{op} گذاشته می‌شود.

وابستگی زمانی عملگرها

این فصل را با بررسی تحول زمانی یک دستگاه به روش مستقل از نمایش به پایان می‌رسانیم. معادله شرودینگر وابسته به زمان

$$i\hbar \frac{d\psi(t)}{dt} = H\psi(t) \quad (57-7)$$

در اینجا یک معادله عملگری در یک فضای مجرد است. $\psi(t)$ یک بردار است، و راستای آن تابع زمان است. این معادله را می‌توان به آسانی حل کرد. جواب آن، اگر H وابستگی صریح به زمان نداشته باشد، عبارت است از

$$\psi(t) = e^{-iHt/\hbar} \psi(0) \quad (58-7)$$

که در آن $\psi(\circ)$ بردار در زمان $t = \circ$ است، و عملگر $e^{-iHt/\hbar}$ با رابطه زیر تعریف می شود

$$e^{-iHt/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-iHt/\hbar)^n}{n!} \quad (59-7)$$

جواب ۵۸-۷ امکان توصیف تغییر زمانی مقدار انتظاری عملگری مانند B را، که وابستگی صریح به زمان نداشته باشد، فراهم می سازد:

$$\begin{aligned} \langle B \rangle_t &= \langle \psi(t) | B \psi(t) \rangle \\ &= \langle e^{-iHt/\hbar} \psi(\circ) | B e^{-iHt/\hbar} \psi(\circ) \rangle \\ &= \langle \psi(\circ) | e^{iHt/\hbar} B e^{-iHt/\hbar} \psi(\circ) \rangle \\ &= \langle \psi(\circ) | B(t) \psi(\circ) \rangle \\ &= \langle B(t) \rangle_{\circ} \end{aligned} \quad (60-7)$$

در اینجا از

$$(e^{-iHt/\hbar})^\dagger = e^{iH^\dagger t/\hbar} = e^{iHt/\hbar} \quad (61-7)$$

و از تعریف زیر استفاده کرده ایم

$$B(t) = e^{iHt/\hbar} B e^{-iHt/\hbar} \quad (62-7)$$

بنابه ۶۰-۷، مقدار انتظاری عملگر مستقل از زمان B را برای حالتی که به صورت ۵۸-۷ با زمان تغییر می کند می توان به صورت مقدار انتظاری عملگر وابسته به زمان $B(t)$ (که با ۶۲-۷ داده می شود) برای حالت مستقل از زمان $\psi(\circ)$ نوشت. این نتیجه در بررسی صوری مکانیک کوانتومی بسیار مفید است، زیرا به آسانی می توان یک بار برای همیشه پایه ای از ویژه بردارهای راست هنجار در فضای برداری مجرد ساخت و نگران این نبود که بردارهای پایه چگونه با زمان تغییر می کنند. این روش را نمایش هایزنبرگ می نامند، در حالی که اگر B را مستقل از زمان بگیریم در نمایش شرودینگر کار می کنیم. از هر نمایشی که استفاده کنیم، نتیجه یکی است: مانند این است که در توصیف چرخش یک جسم نسبت به یک دستگاه مختصات، جسم را بچرخانیم و دستگاه مختصات را ثابت بگیریم یا جسم را ساکن بگیریم و دستگاه مختصات را بچرخانیم. انتخاب به سهولت کار بستگی دارد. اگر با نمایش هایزنبرگ کار کنیم، بردارهای حالت ثابت اند، و در بررسی تحول زمانی

دستگاه احتیاجی به استفاده از این سیستم به صورتی میسر می‌شود که مشاهده‌پذیر با زمان از ۶۲-۷ به دست می‌آید:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}B(t) &= \frac{i}{\hbar}He^{iHt/\hbar}B e^{-iHt/\hbar} - \frac{i}{\hbar}e^{iHt/\hbar}BH e^{-iHt/\hbar} \\ &= \frac{i}{\hbar}HB(t) - \frac{i}{\hbar}B(t)H \\ &= \frac{i}{\hbar}[H, B(t)]\end{aligned}\quad (۶۳-۷)$$

که شباهت زیادی به ۶۹-۶ دارد. معادله ۶۹-۶ معادله‌ای برای مقدار انتظاری است، اما چون صورت آن مستقل از حالتی است که در آن مقدار انتظاری محاسبه می‌شود باید حاکی از خواص عملگر باشد، و معادله ۶۳-۷ این را صریحاً نشان می‌دهد. برای نوسانگر هماهنگ داریم

$$H = \hbar\omega A^\dagger A + \frac{1}{4}\hbar\omega$$

و چون H یک ثابت حرکت است، می‌توانیم بنویسیم

$$H = \hbar\omega A^\dagger(t)A(t) + \frac{1}{4}\hbar\omega \quad (۶۴-۷)$$

همچنین با استفاده از ۶۲-۷ می‌توان نشان داد که

$$[A(t), A^\dagger(t)] = 1 \quad (۶۵-۷)$$

بنابراین، ۷-۷ و ۸-۷ به همان صورت باقی می‌مانند، و به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}A(t) &= -i\omega A(t) \\ \frac{d}{dt}A^\dagger(t) &= i\omega A^\dagger(t)\end{aligned}\quad (۶۶-۷)$$

بدین ترتیب، وابستگی زمانی $A(t)$ و $A^\dagger(t)$ از حل ۶۶-۷ به دست می‌آید:

$$\begin{aligned}A(t) &= e^{-i\omega t}A(0) \\ A^\dagger(t) &= e^{i\omega t}A^\dagger(0)\end{aligned}\quad (۶۷-۷)$$

$$p(t) = p(\circ) \cos \omega t - m\omega x(\circ) \sin \omega t \quad (۶۸-۷)$$

$$x(t) = x(\circ) \cos \omega t + \frac{p(\circ)}{m\omega} \sin \omega t$$

که عملگرهای $x(t)$ و $p(t)$ را برحسب عملگرهای $x(\circ)$ و $p(\circ)$ بیان می کنند.

مسائل

۱-۷ با استفاده از رابطه جابه جایی ۵-۷ و تعریف حالت u_n که با ۲۶-۷ داده شده است، ثابت کنید

$$Au_n = \sqrt{n} u_{n-1}$$

[راهنمایی: از روش استقراء استفاده کنید، یعنی نشان دهید اگر این رابطه برای n برقرار باشد برای $n+1$ هم برقرار است، و آن را مستقیماً برای $n=1$ اثبات کنید].

۲-۷ با استفاده از رابطه قبل نشان دهید اگر $f(A^\dagger)$ یک چندجمله ای برحسب A^\dagger باشد، آنگاه

$$Af(A^\dagger)u_0 = \frac{df(A^\dagger)}{dA^\dagger}u_0.$$

توجه کنید که نمایش A به صورت

$$A = \frac{d}{dx}$$

با رابطه جابه جایی ۵-۷ سازگار است و کاملاً شبیه به نمایش زیر است

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$$

۳-۷ $\langle u_n | x | u_m \rangle$ را محاسبه کنید و نشان دهید که بجز برای $n = m \pm 1$ مقدار آن برابر صفر است.

[راهنمایی: با توجه به $\langle u_m | A | u_n \rangle^* = \langle Au_n | u_m \rangle = \langle u_n | A^\dagger | u_m \rangle$ ، کافی است $\langle u_n | A | u_m \rangle$ را به دست آورید. از نتایج مسئله ۱-۷ استفاده کنید].

۴-۷ $\langle u_n | p | u_m \rangle$ را محاسبه کنید: www.arsanjan.blogfa.com

۵-۷ با استفاده از نتایج مسئله‌های ۳-۷ و ۴-۷، $\langle u_m | p x | u_n \rangle$ را با محاسبه $\sum_k \langle u_m | p | u_k \rangle \langle u_k | x | u_n \rangle$ به دست آورید

۶-۷ $\langle u_m | x p | u_n \rangle$ را به روش مسئله ۵-۷ محاسبه کنید.

۷-۷ با استفاده از نتایج مسئله‌های ۵-۷ و ۶-۷ نشان دهید

$$\langle u_m | [p, x] | u_n \rangle = \frac{\hbar}{i} \delta_{mn}$$

۸-۷ $\langle u_n | x | u_n \rangle$ و $\langle u_n | x^2 | u_n \rangle$ را به دست آورید.

۹-۷ $\langle u_n | p | u_n \rangle$ و $\langle u_n | p^2 | u_n \rangle$ را محاسبه کنید.

۱۰-۷ با استفاده از تعریف متداول

$$(\Delta x)^2 = \langle u_n | x^2 | u_n \rangle - (\langle u_n | x | u_n \rangle)^2$$

$(\Delta x)^2 (\Delta p)^2$ را محاسبه کنید.

۱۱-۷ یک جفت عملگر A و A^\dagger را که در رابطه جابه‌جایی زیر صدق می‌کنند در نظر بگیرید

$$[A, A^\dagger] = 1$$

(الف) نشان دهید عملگر $N = A^\dagger A$ دارای ویژه‌مقدارهای $n = 0, 1, 2, \dots$ است.

(ب) نشان دهید هامیلتونی نوسانگر هماهنگ را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$H = \hbar \omega \left(N + \frac{1}{2} \right)$$

۱۲-۷ حالت $|\alpha\rangle$ را که در معادله زیر صدق می‌کند حالت همدوس می‌نامند

$$A|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$$

(الف) نشان دهید حالت $|\alpha\rangle$ را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$|\alpha\rangle = C e^{\alpha A^\dagger} |0\rangle$$

www.arsanjan.blogfa.com

(ب) C را با استفاده از نتیجه مسئله ۷-۲ به دست آورید.

(ج) حالت $|\alpha\rangle$ را برحسب ویژه‌حالت‌های عملگر شمار N ، $|n\rangle$ ، بسط دهید و با استفاده از آن احتمال این را که حالت همدوس حاوی n کوانتوم باشد به دست آورید. این توزیع را توزیع پواسون می‌نامند.

(د) $\langle \alpha | N | \alpha \rangle$ را که میانگین تعداد کوانتومها در حالت همدوس است محاسبه کنید.

۷-۱۳ با استفاده از معادله عمومی عملگری حرکت ۷-۶۳، وابستگی زمانی عملگر $x(t)$ را که در هامیلتونی زیر وارد می‌شود به دست آورید

$$H = \frac{p^2(t)}{2m} + mgx(t)$$

۷-۱۴ هامیلتونی توصیف‌کننده نوسانگر یک‌بعدی در میدان الکتریکی خارجی را در نظر بگیرید:

$$H = \frac{p^2(t)}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2(t) - e\mathcal{E}x(t)$$

معادله حرکت عملگرهای $p(t)$ و $x(t)$ را با استفاده از ۷-۶۳ و رابطه جابه‌جایی زیر به دست آورید

$$[p(t), x(t)] = \frac{\hbar}{i}$$

نشان دهید این معادله حرکت درست همان معادله کلاسیک حرکت است. $x(t)$ و $p(t)$ را برحسب $x(0)$ و $p(0)$ به دست آورید. ثابت کنید

$$[x(t_1), x(t_2)] \neq 0 \quad t_1 \neq t_2$$

این نتیجه نشان می‌دهد که عملگرهایی که در یک زمان جابه‌جا می‌شوند در زمانهای مختلف الزاماً جابه‌جا نمی‌شوند.

۷-۱۵ با استفاده از ۷-۵۳، ویژه‌تابعهای مربوط به n مساوی با ۱، ۲ و ۳ را محاسبه کنید. (تذکر:

ترتیب x و d/dx را در بسط دوجمله‌ای رعایت کنید.)

۷-۱۶ با استفاده از نتایج مسئله ۷-۲ نشان دهید

$$e^{\lambda A} f(A) u_0 = f(A + \lambda) u_0$$

www.arsanjan.blogfa.com
[راهنمایی: جمله‌نمایی را بسط دهید و از رابطه‌های

$$f(x+a) = \sum \frac{a^n}{n!} f^{(n)}(x)$$

$$f^{(n)}(x) = \frac{d^n}{dx^n} f(x)$$

در حل مسئله استفاده کنید.]

۱۷-۷ با استفاده از نتایج مسئله ۷-۱۶، رابطه عملگری زیر را ثابت کنید

$$e^{\lambda A} f(A^\dagger) e^{-\lambda A} = f(A^\dagger + \lambda)$$

توجه کنید که یک رابطه عملگری باید وقتی روی یک حالت اختیاری عمل می‌کند برقرار باشد. یک حالت اختیاری به صورت $g(A^\dagger)u_0$ در نظر بگیرید. بنابراین، باید نشان دهید

$$e^{\lambda A} f(A^\dagger) e^{-\lambda A} g(A^\dagger) u_0 = f(A^\dagger + \lambda) g(A^\dagger) u_0.$$

این رابطه را می‌توان از رابطه کلی زیر نیز به دست آورد

$$e^{\lambda A} A^\dagger e^{-\lambda A} = A^\dagger + \lambda [A, A^\dagger] + \frac{\lambda^2}{2!} [A, [A, A^\dagger]] + \dots$$

۱۸-۷ با استفاده از رابطه قبل نشان دهید

$$e^{aA+bA^\dagger} = e^{aA} e^{bA^\dagger} e^{-(1/2)ab}$$

روش اثبات این است که ابتدا فرض می‌کنیم

$$e^{\lambda(aA+bA^\dagger)} \equiv e^{\lambda aA} F(\lambda)$$

نسبت به λ مشتق می‌گیریم:

$$(aA + bA^\dagger) e^{\lambda(aA+bA^\dagger)} = aA e^{\lambda aA} F(\lambda) + e^{\lambda aA} \frac{dF}{d\lambda}$$

$$(aA + bA^\dagger)e^{\lambda aA}F(\lambda) = aA e^{\lambda aA}(F\lambda) + e^{\lambda aA}\frac{dF}{d\lambda}$$

با استفاده از مسئله ۷-۱۷، به دست می آوریم

$$\frac{dF}{d\lambda} = (bA^\dagger - \lambda ab)F(\lambda)$$

و در نتیجه

$$F(\lambda) = e^{\lambda bA^\dagger} e^{-(1/\lambda)\lambda^\dagger ab}$$

۷-۱۹ با استفاده از راهکار مسئله ۷-۱۷، نشان دهید

$$e^{\lambda A^\dagger} f(A) e^{-\lambda A^\dagger} = f(A - \lambda)$$

و از این رابطه، با استفاده از روشی که در مسئله ۷-۱۸ گفته شد، ثابت کنید

$$e^{aA+bA^\dagger} = e^{bA^\dagger} e^{aA} e^{(1/2)ab}$$

۷-۲۰ با استفاده از نتیجه بالا نشان دهید

$$e^{ikx} = e^{ik\sqrt{\hbar/2m\omega}} A^\dagger e^{ik\sqrt{\hbar/2m\omega}} A e^{-(\hbar k^2/2m\omega)}$$

با توجه به رابطه

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(A + A^\dagger)$$

$\langle u_0 | e^{ikx} | u_0 \rangle$ را محاسبه کنید.

۷-۲۱ نشان دهید نتیجه مسئله قبل درست همان است که از انتگرال زیر به دست می آید

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx u_0^*(x) e^{ikx} u_0(x)$$

مطالب این فصل تقریباً در تمام کتابهایی که در پایان کتاب معرفی شده‌اند یافت می‌شوند. توصیه می‌شود به چندتایی از آنها مراجعه کنید، زیرا مطالعه یک مبحث پایه از دیدگاههای مختلف همواره مفید است.



دستگاههای N ذره‌ای

بحث مربوط به ذره منفرد را می‌توان به آسانی به دستگاههای N ذره‌ای تعمیم داد. دستگاه N ذره‌ای با یک تابع موج $\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ توصیف می‌شود، که به صورت زیر بهنجار شده است

$$\int \dots \int dx_1 dx_2 \dots dx_N |\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)|^2 = 1 \quad (1-8)$$

تعبیر $|\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)|^2$ تعمیم تعبیر $|\psi(x)|^2$ است، یعنی این کمیت چگالی احتمال یافتن ذره ۱ در x_1 ، ذره ۲ در x_2 ، ... و ذره N در x_N است. تحول زمانی این تابع موج از حل معادله دیفرانسیل زیر به دست می‌آید

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x_1, \dots, x_N; t) = H \psi(x_1, \dots, x_N; t) \quad (2-8)$$

که در آن هامیلتونی باز هم مطابق صورت کلاسیک

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} + V(x_1, x_2, \dots, x_N) \quad (3-8)$$

$$H = -\hbar^2 \left(\frac{1}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \dots + \frac{1}{2m_N} \frac{\partial^2}{\partial x_N^2} \right) + V(x_1, \dots, x_N) \quad (4-8)$$

تمام صورتبندی مکانیک کوانتومی که قبلاً به دست آوریم به آسانی قابل تعمیم است، به شرطی که عملگرهایی که مشاهده پذیرهای تک ذره‌ای را توصیف می‌کنند وقتی به ذره‌های مختلف مربوط می‌شوند با هم جابه‌جا شوند؛ برای مثال

$$[p_i, x_j] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij} \quad (5-8)$$

اگر میدانهای خارجی، مانند میدان گرانش زمین یا میدانهای الکتریکی و مغناطیسی که از خارج اعمال می‌شوند، وجود نداشته باشند انرژی پتانسیل تنها به فاصله نسبی ذرات بستگی دارد:

$$V = V(x_1 - x_2, x_1 - x_3, \dots, x_{N-1} - x_N), \quad (6-8)$$

همین‌طور هم باید باشد، زیرا در غیاب عامل خارجی که به نحوی یک "مبدأ" تعیین می‌کند، جابه‌جایی کل دستگاه نباید هیچ یک از خواص فیزیکی آن را تغییر دهد. به عبارت دیگر، شکل پتانسیل ۶-۸ پیامد ناوردایی تمام کمیت‌های مهم فیزیکی تحت تبدیل زیر است

$$x_i \rightarrow x_i + a \quad (7-8)$$

یک مورد خاص بسیار مهم از ۶-۸، مورد نیروهای دوجسمی است که برای آن

$$V = \sum_{i>j} V(x_i - x_j) \quad (8-8)$$

جمع روی تمام شاخصهای i و j ، با قید $i > j$ برای اجتناب از دوباره‌شماری و شمارش $i = j$ انجام می‌شود. در واقع در توصیف الکترون‌ها در یک اتم، با پتانسیل کولنی مشترک و همچنین دافعه الکترون-الکترون سروکار خواهیم داشت، و در اینجا هسته یک مبدأ به وجود می‌آورد. پتانسیل در این مورد تعمیم سه‌بعدی کمیت زیر است

$$\sum_{i=1}^N W(x_i) + \sum_{i>j} V(x_i - x_j) \quad (9-8)$$

پایستگی تکانه کل

در مکانیک کلاسیک، وقتی نیروهای خارجی وجود ندارند تکانه کل پایسته است. این پایستگی از معادله‌های حرکت زیر به دست می‌آید

$$m_i \frac{d^2 x_i}{dt^2} = - \frac{\partial}{\partial x_i} V(x_1 - x_2, x_1 - x_3, \dots, x_{N-1} - x_N) \quad (10-8)$$

که یک پیامد آن عبارت است از

$$\frac{d}{dt} \sum_i m_i \frac{dx_i}{dt} = - \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} V(x_1 - x_2, \dots, x_{N-1} - x_N) \\ = 0 \quad (11-8)$$

دلیل صفر شدن طرف راست معادله بالا این است که به ازای هر شناسه در V از اعمال $\sum_i \partial/\partial x_i$ بر جمله‌های مساوی و مخالف به دست می‌آیند. برای مثال، با $u = x_1 - x_2$ ، $v = x_1 - x_3$ و $w = x_2 - x_3$ داریم

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x_2} + \frac{\partial}{\partial x_3} \right) V(u, v, w) = \frac{\partial V}{\partial u} + \frac{\partial V}{\partial v} - \frac{\partial V}{\partial u} + \frac{\partial V}{\partial w} - \frac{\partial V}{\partial v} - \frac{\partial V}{\partial w} \\ = 0$$

بنابراین، کمیت

$$P = \sum_i m_i \frac{dx_i}{dt} \quad (12-8)$$

یک ثابت حرکت است.

در مکانیک کوانتومی نیز همین نتیجه‌گیری صادق است. این مطلب را با استفاده از ناوردایی هامیلتونی تحت تبدیل ۷-۸ نشان می‌دهیم. این ناوردایی ایجاب می‌کند که هر دو معادله

$$Hu_E(x_1, x_2, \dots, x_N) = Eu_E(x_1, x_2, \dots, x_N) \quad (13-8)$$

و

$$Hu_E(x_1 + a, x_2 + a, \dots, x_N + a) = Eu_E(x_1 + a, x_2 + a, \dots, x_N + a) \quad (14-8)$$

برقرار باشند، a را بینهایت کوچک می‌گیریم. به‌طوری‌که بتوان از جمله‌های $O(a^2)$ را صرف‌نظر کرد. بنابراین،

$$\begin{aligned} u(x_1 + a, \dots, x_N + a) &\simeq u(x_1, \dots, x_N) + a \frac{\partial}{\partial x_1} u(x_1, \dots, x_N) \\ &\quad + a \frac{\partial}{\partial x_2} u(x_1, \dots, x_N) + \dots \\ &\simeq u(x_1, \dots, x_N) + a \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} u(x_1, \dots, x_N) \end{aligned}$$

با کم کردن ۸-۱۳ از ۸-۱۴ به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} aH \left(\sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial x_i} \right) u_E(x_1, \dots, x_N) &= aE \left(\sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial x_i} \right) u_E(x_1, \dots, x_N) \\ &= a \left(\sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial x_i} \right) E u_E(x_1, \dots, x_N) \quad (۱۵-۸) \\ &= a \left(\sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial x_i} \right) H u_E(x_1, \dots, x_N) \end{aligned}$$

اکنون اگر تعریف کنیم

$$P = \frac{\hbar}{i} \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial x_i} \equiv \sum_{i=1}^N p_i \quad (۱۶-۸)$$

به‌طوری‌که P عملگر تکانه کل است، می‌بینیم که نشان داده‌ایم

$$(HP - PH)u_E(x_1, \dots, x_N) = 0 \quad (۱۷-۸)$$

چون ویژه‌حالت‌های انرژی برای دستگاه N ذره‌ای یک مجموعه کامل تشکیل می‌دهند، به این معنی که هر تابعی از x_1, x_2, \dots, x_N را می‌توان برحسب تمام $u_E(x_1, \dots, x_N)$ ‌ها بسط داد، معادله بالا نشان می‌دهد که به‌ازای هر تابع اختیاری $\psi(x_1, \dots, x_N)$ می‌توان نوشت

$$[H, P]\psi(x_1, \dots, x_N) = 0 \quad (۱۸-۸)$$

$$[H, P] = 0 \quad (۱۹-۸)$$

اما این رابطه عملگری نشان می‌دهد که تکانه کل P مربوط به دستگاه N ذره‌ای یک ثابت حرکت است. این یک پیامد بسیار مهم حکمی درباره ماهیت فضا است. این حکم که مبدایی وجود ندارد، یعنی قوانین فیزیک تحت یک جابه‌جایی ثابت ناوردا هستند، به یک قانون پایستگی منجر می‌شود. در مکانیک کوانتومی نسبیتی هیچ پتانسیلی به‌صورتی که در اینجا در نظر می‌گیریم وجود ندارد؛ با این همه، این اصل ناوردایی باز هم به پایستگی تکانه کل منجر می‌شود.

دستگاه دو ذره‌ای

ما بیشتر با دستگاه دودره‌ای سروکار داریم که اکنون به بررسی آن می‌پردازیم. برای دو ذره بدون برهم‌کنش، هامیلتونی به‌صورت ساده زیر است

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} \quad (۲۰-۸)$$

چون این دو ذره کاملاً ناهمبسته‌اند، می‌توان احتمال یافتن یک ذره در x_1 و دیگری در x_2 را به‌صورت حاصلضرب دو احتمال مستقل نوشت:

$$P(x_1, x_2) = P(x_1)P(x_2) \quad (۲۱-۸)$$

بنابراین، جواب معادله

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) u(x_1, x_2) = Eu(x_1, x_2) \quad (۲۲-۸)$$

باید به‌صورت زیر قابل جداسازی باشد

$$u(x_1, x_2) = \phi_1(x_1)\phi_2(x_2) \quad (۲۳-۸)$$

با جاگذاری این جواب در ۲۲-۸ و تقسیم بر $u(x_1, x_2)$ ، به‌دست می‌آوریم

$$\frac{-(\hbar^2/2m_1)(d^2\phi_1(x_1)/dx_1^2)}{\phi_1(x_1)} + \frac{-(\hbar^2/2m_2)(d^2\phi_2(x_2)/dx_2^2)}{\phi_2(x_2)} = E \quad (۲۴-۸)$$

دو جمله این معادله به متغیرهای مختلفی بستگی دارند، و به این دلیل آنها را به ترتیب مساوی با ثابتهای E_1 و E_2 قرار می‌دهیم:

$$E = E_1 + E_2$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2 \phi_1(x_1)}{dx_1^2} = E_1 \phi_1(x_1) \quad (25-8)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{d^2 \phi_2(x_2)}{dx_2^2} = E_2 \phi_2(x_2)$$

این دو معادله به سادگی حل می‌شوند، و در نتیجه به دست می‌آوریم

$$u(x_1, x_2) = C e^{ik_1 x_1 + ik_2 x_2} \quad (26-8)$$

که در آن

$$k_1^2 = \frac{2m_1 E_1}{\hbar^2} \quad k_2^2 = \frac{2m_2 E_2}{\hbar^2} \quad (27-8)$$

اکنون می‌خواهیم این جواب را برحسب مختصات زیر بیان کنیم

$$\begin{aligned} x &= x_1 - x_2 \\ X &= \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2} \end{aligned} \quad (28-8)$$

که به ترتیب عبارت‌اند از فاصله میان دو ذره و مختصه مرکز جرم. می‌نویسیم

$$k_1 x_1 + k_2 x_2 = \alpha (x_1 - x_2) + \beta \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2}$$

و از آن، با توجه به مستقل بودن x_1 و x_2 ، به دست می‌آوریم

$$\beta = k_1 + k_2 \equiv K$$

$$\alpha = \frac{m_2 k_1 - m_1 k_2}{m_1 + m_2} \equiv k$$

بنابراین، جواب ۲۶-۸ به صورت زیر درمی‌آید

$$u(x_1, x_2) = C e^{iKX} e^{ikx} \quad (29-8)$$

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن $K = k_1 + k_2$ عدد موج مربوط به تکانه کل و k عدد موج مربوط به تکانه نسبی است. در ۸-۲۹، عامل اول حرکت مرکز جرم را نشان می‌دهد و عامل دوم تابع موج “داخلی” است. انرژی را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2(m_1 + m_2)} + \frac{\hbar^2 k^2}{2} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \quad (۸-۳۰)$$

که در آن جمله اول انرژی یک دستگاه دودره‌ای به جرم $m_1 + m_2$ است که آزادانه با تکانه کل حرکت می‌کند؛ جمله دوم انرژی داخلی است. اگر جرم کاهیده μ را با رابطه زیر تعریف کنیم

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \quad (۸-۳۱)$$

آنگاه انرژی داخلی به صورت $\hbar^2 k^2 / 2\pi$ درمی‌آید که عملاً یک انرژی تک‌ذره‌ای است، یعنی انرژی یک ذره آزاد به جرم μ و تکانه $\hbar k$ است.

اگر به هامیلتونی ۸-۲۰ پتانسیلی که تنها به $x_1 - x_2$ بستگی دارد افزوده شود، خواهیم داشت

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) u(x_1, x_2) + V(x_1 - x_2) u(x_1, x_2) = E u(x_1, x_2) \quad (۸-۳۲)$$

از روابط ۸-۲۸ داریم

$$\begin{aligned} x_1 &= X + \frac{\mu}{m_1} x \\ x_2 &= X - \frac{\mu}{m_2} x \end{aligned} \quad (۸-۳۳)$$

با استفاده از این مختصات و با اندکی محاسبه، معادله ۸-۳۲ به صورت زیر درمی‌آید

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) u(x, X) = E u(x, X) \quad (۸-۳۴)$$

اگر بنویسیم

$$u(x, X) = e^{iKX} \phi(x) \quad (۸-۳۵)$$

نتیجه می‌گیریم که معادلهٔ مربوط به $\phi(x)$ به صورت زیر است:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + V(x) \phi(x) = \epsilon \phi(x) \quad (۳۶-۸)$$

که یک معادلهٔ شرودینگر تک‌ذره‌ای با جرم کاهیده است، و در آن انرژی ϵ عبارت است از

$$\epsilon = E - \frac{\hbar^2 K^2}{2(m_1 + m_2)} \quad (۳۷-۸)$$

در فصل ۹ این جداسازی را از راه نسبتاً پیچیده‌تری به دست خواهیم آورد.

ذرات یکسان

شواهد قانع‌کننده‌ای وجود دارند که نشان می‌دهند الکترون‌ها تمایزناپذیرند. اگر الکترون‌ها تمایزپذیر بودند طیف یک اتم، مثلاً هلیوم، می‌بایست از یک آزمایش به آزمایش دیگر، بسته به اینکه ”چه نوع“ الکترونی‌هایی در اتم وجود می‌داشتند، تغییر می‌کرد. چنین تغییری هرگز مشاهده نشده است. به همین ترتیب، طیف‌های هسته‌ای نیز همیشه یکسان هستند، که نشان می‌دهد پروتون‌ها و همچنین نوترون‌ها تمایزناپذیرند. شواهد مشابهی از آزمایش‌های فیزیک انرژی زیاد قاطعانه نشان می‌دهند که سایر ذره‌ها، مثلاً مزون‌های پی، نیز تمایزناپذیر هستند. این یک ویژگی صرفاً کوانتوم-مکانیکی است: در مکانیک کلاسیک می‌توان (اصولاً) مسیر همهٔ ذرات را دنبال کرد، و در نتیجه آنها واقعاً تمایزپذیر هستند.

بعداً خواهیم دید که الکترون‌ها با یک عدد کوانتومی درونی که اسپین نامیده می‌شود مشخص می‌شوند. بنابراین، مجموعهٔ کامل اعداد کوانتومی برای توصیف الکترون باید شامل نشان اسپینی هم باشد، که آن را با σ مشخص می‌کنیم. در آینده (از فصل ۱۴ به بعد) خواهیم دید که این نشان اسپینی σ دومقداری است، یعنی دو الکترون را که از هر لحاظ (غیر از اسپین) یکسان هستند می‌توان از روی مقدار σ ی آنها از هم تمیز داد. یک الکترون سوم، با همان اعداد کوانتومی دو الکترون دیگر، باید یک نشان اسپینی داشته باشد که مقدار آن با مقدار نشان اسپینی یکی از دو الکترون اول مساوی است، زیرا σ تنها می‌تواند دو مقدار داشته باشد که آنها را معمولاً با (\pm) نشان خواهیم داد. وجود نشان اسپینی تأثیر دیگری بر پیامدهای تمایزناپذیری دارد که اکنون دربارهٔ آن بحث می‌کنیم.

هامیلتونی ذرات تمایزناپذیر باید نسبت به مختصات ذرات کاملاً متقارن باشد. برای دستگاه دودره‌ای، اگر پتانسیل به نشان اسپینی ذرات بستگی نداشته باشد، هامیلتونی به صورت زیر است

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + V(x_1, x_2) \quad (۳۸-۸)$$

$$V(x_1, x_2) = V(x_2, x_1) \quad (39-8)$$

این تقارن را به صورت نمادین زیر می‌نویسیم

$$H(1, 2) = H(2, 1) \quad (40-8)$$

و اگر هامیلتونی شامل عملگرهایی مربوط به اسپینهای دوزره باشد، باید آن را نیز در نشانگذاری “۱” و “۲” وارد کرد.

تابع موج دستگاه N ذره‌ای که، به عنوان مثال، با انرژی کل نشاندار شده است اکنون باید با نشانهای اسپینی $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N$ نیز نشاندار شود. بنابراین، برای یک دستگاه دوزره‌ای، معادله ویژه‌مقداری عبارت است از

$$H(1, 2)u_{E\sigma_1\sigma_2}(1, 2) = Eu_{E\sigma_1\sigma_2}(1, 2) \quad (41-8)$$

چون جای نشانها اهمیتی ندارد، می‌توان با تعویض نشانهای “۱” و “۲” معادله ۴۱-۸ را به صورت زیر نوشت

$$H(2, 1)u_{E\sigma_2\sigma_1}(2, 1) = Eu_{E\sigma_2\sigma_1}(2, 1) \quad (42-8)$$

از طرف دیگر، با توجه به ۴۰-۸ داریم

$$H(1, 2)u_{E\sigma_2\sigma_1}(2, 1) = Eu_{E\sigma_2\sigma_1}(2, 1) \quad (43-8)$$

اکنون از رهیافت صوری بحث پاریته استفاده می‌کنیم. با معرفی عملگر تبادل P_{12} که وقتی روی یک حالت عمل کند دو ذره یکسان را که با ۱ و ۲ نشاندار شده‌اند تعویض می‌کند:

$$P_{12}u_{E\sigma_1\sigma_2}(1, 2) = u_{E\sigma_2\sigma_1}(2, 1) \quad (44-8)$$

$$\begin{aligned}
 H(1, 2)P_{12}u_{E\sigma_1\sigma_2}(1, 2) &= Eu_{E\sigma_1\sigma_2}(2, 1) \\
 &= EP_{12}u_{E\sigma_1\sigma_2}(1, 2) \\
 &= P_{12}Eu_{E\sigma_1\sigma_2}(1, 2) \\
 &= P_{12}H(1, 2)u_{E\sigma_1\sigma_2}(1, 2)
 \end{aligned}
 \quad (45-8)$$

چون این نتیجه برای مجموعه کامل ویژه تابعهای همزمان H و عملگرهای اسپین $u_{E\sigma_1\sigma_2}(1, 2)$ برقرار است، رابطه عملگری زیر را به دست می آوریم

$$[H, P_{12}] = 0 \quad (46-8)$$

بنابراین، P_{12} نیز مانند پاریته یک ثابت حرکت است. علاوه بر این، چون با دو تبادل متوالی $1 \rightarrow 2$ و $2 \rightarrow 1$ به حالت اول برمی گردیم، داریم

$$(P_{12})^2 = 1 \quad (47-8)$$

که نشان می دهد ویژه مقدارهای P_{12} عبارت اند از ± 1 . درست همان طور که توابع زوج و فرد ویژه تابعهای عملگر پاریته هستند، ویژه تابعهای عملگر تبادل حالت های متقارن و پادمتقارن زیر هستند

$$\begin{aligned}
 \psi^{(S)}(1, 2) &= \frac{1}{N_{TS}}[\psi(1, 2) + \psi(2, 1)] \\
 \psi^{(A)}(1, 2) &= \frac{1}{N_{Ta}}[\psi(1, 2) - \psi(2, 1)]
 \end{aligned}
 \quad (48-8)$$

که در آنها N_T ها ثابت های بهنجارش اند. این واقعیت که P_{12} یک ثابت حرکت است ایجاب می کند که حالتی که در یک زمان اولیه متقارن است همواره متقارن بماند و یک حالت پادمتقارن همیشه پادمتقارن باشد.

اصل پاؤلی

تقارن یا پادمتقارن تحت تعویض دو ذره یک مشخصه ذرات است و چیزی نیست که بتوان آن را در آماده سازی حالت اولیه تدارک دید. بنابه این قانون مهم طبیعت، که پاؤلی آن را کشف کرد،

۱. دستگاههای متشکل از ذرات یکسان با اسپین نیم فرد (یعنی $۱/۲, ۳/۵, ۵/۲, \dots$) با توابع موج پادمقارن توصیف می‌شوند. این نوع ذرات را فرمیون می‌نامند. فرمیونها از آمار فرمی-دیراک پیروی می‌کنند.

۲. دستگاههای متشکل از ذرات یکسان با اسپین درست (یعنی $۰, ۱, ۲, \dots$) با توابع موج پادمقارن توصیف می‌شوند. این ذرات بوزون نامیده می‌شوند و از آمار بوز-اینشتین پیروی می‌کنند. ما بیشتر با الکترون‌ها، پروتون‌ها و نوترون‌ها که اسپین $۱/۲$ دارند و با بوزونهای اسپین ۰ ، که بدون نشان اسپینی هستند، سروکار داریم.

قانون بالا به حالت‌های N ذره‌ای گسترش می‌یابد. برای دستگاهی متشکل از N فرمیون یکسان، تابع موج تحت تعویض هر جفت ذره پادمقارن است. برای مثال، یک تابع موج سه ذره‌ای، که درست پادمقارن شده است، به صورت زیر است

$$\psi^{(A)}(۱, ۲, ۳) = \frac{1}{N_{ra}} [\psi(۱, ۲, ۳) - \psi(۲, ۱, ۳) + \psi(۲, ۳, ۱) - \psi(۳, ۲, ۱) + \psi(۳, ۱, ۲) - \psi(۱, ۳, ۲)] \quad (۴۹-۸)$$

در حالی که تابع موج سه بوزون یکسان عبارت است از

$$\psi^{(S)}(۱, ۲, ۳) = \frac{1}{N_{rs}} [\psi(۱, ۲, ۳) + \psi(۲, ۱, ۳) + \psi(۲, ۳, ۱) + \psi(۳, ۲, ۱) + \psi(۳, ۱, ۲) + \psi(۱, ۳, ۲)] \quad (۵۰-۸)$$

باید تأکید کنیم که برای بیشتر از دو ذره یکسان اصولاً می‌توان تقارن آمیخته داشت: به عنوان مثال، تابع موج تحت تبادلهای $(۱, ۲)$ و $(۱, ۳)$ پادمقارن اما تحت تبادل $(۲, ۳)$ مقارن است. اما اصل پاؤلی این حالت‌های مقارن آمیخته را رد می‌کند.

N فرمیون در یک چاه پتانسیل
اکنون یک مورد خاص بسیار جالب توجه را بررسی می‌کنیم که در آن N فرمیون با یکدیگر برهم‌کنش ندارند اما با یک پتانسیل مشترک برهم‌کنش می‌کنند. در این مورد داریم

$$H = \sum_{i=1}^N H_i \quad (۵۱-۸)$$

که در آن

$$H_i = \frac{p_i^2}{2m} + V(x_i) \quad (۵۲-۸)$$

ویژه حالت‌های هامیلتونی تک‌ذره‌ای را با $u_{E\sigma_k}(x_k)$ نشان می‌دهیم.

$$H_k u_{E\sigma_k}(x_k) = E_k u_{E\sigma_k}(x_k) \quad (۵۳-۸)$$

واضح است که به‌ازای هر مقدار E_k دو مقدار ممکن برای نشان اسپینی σ_k داریم. جواب معادله

$$Hu_E(1, 2, \dots, N) = Eu_E(1, 2, \dots, N) \quad (۵۴-۸)$$

عبارت است از

$$u_E(1, 2, 3, \dots, N) = u_{E_1\sigma_1}(x_1)u_{E_2\sigma_2}(x_2), \dots, u_{E_N\sigma_N}(x_N) \quad (۵۵-۸)$$

که با حذف نشانهای σ_i که با E_i همراه هستند، آن را به صورت زیر می‌نویسیم

$$u_E(1, 2, 3, \dots, N) = u_{E_1}(x_1)u_{E_2}(x_2), \dots, u_{E_N}(x_N) \quad (۵۶-۸)$$

همچنین داریم

$$E = E_1 + E_2 + \dots + E_N \quad (۵۷-۸)$$

اکنون باید تابع موج ۵۶-۸ را پادمتقارن کنیم. اگر تنها دو ذره داشته باشیم، بدیهی است که

$$u^{(A)}(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[u_{E_1}(x_1)u_{E_2}(x_2) - u_{E_1}(x_2)u_{E_2}(x_1)] \quad (۵۸-۸)$$

با سه ذره، تابع موج پادمتقارن شده به صورت زیر است

$$\begin{aligned} u^{(A)}(1, 2, 3) = & \frac{1}{\sqrt{6}}[u_{E_1}(x_1)u_{E_2}(x_2)u_{E_3}(x_3) - u_{E_1}(x_2)u_{E_2}(x_1)u_{E_3}(x_3) \\ & + u_{E_1}(x_2)u_{E_2}(x_3)u_{E_3}(x_1) - u_{E_1}(x_3)u_{E_2}(x_1)u_{E_3}(x_2) \\ & + u_{E_1}(x_3)u_{E_2}(x_2)u_{E_3}(x_1) - u_{E_1}(x_1)u_{E_2}(x_3)u_{E_3}(x_2)] \end{aligned} \quad (۵۹-۸)$$

برای N ذره، جواب را می‌توان در قالب یک دترمینان، که دترمینان اسلیتر نامیده می‌شود، نوشت:^۱

$$u^{(A)}(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} u_{E_1}(x_1) & u_{E_1}(x_2) & \cdots & u_{E_1}(x_N) \\ u_{E_2}(x_1) & u_{E_2}(x_2) & \cdots & u_{E_2}(x_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{E_N}(x_1) & u_{E_N}(x_2) & \cdots & u_{E_N}(x_N) \end{vmatrix} \quad (۶۰-۸)$$

توجه کنید که در سه معادله بالا نشان σ_k را که با E_k همراه است حذف کرده‌ایم. بدیهی است که تعویض دو ذره به معنای تعویض دو ستون در این دترمینان است و این به نوبه خود باعث تغییر علامت دترمینان می‌شود. اگر دو الکترون در ویژه‌حالت انرژی یکسانی باشند، به عنوان مثال $E_1 = E_2$ ، و اگر در یک حالت اسپینی باشند، یعنی $\sigma_1 = \sigma_2$ ، آنگاه دترمینان به ازای $x_1 = x_2$ صفر می‌شود، یعنی این دو الکترون نمی‌توانند در یک مکان باشند. بدین ترتیب، شرط پادتقارن عامل ایجاد یک برهم‌کنش مؤثر بین دو فرم‌یون است: می‌بینیم که دو ذره از این نوع می‌خواهند از یکدیگر دور بمانند، زیرا وقتی فاصله بین آنها به صفر میل می‌کند تابع موج مشترک صفر می‌شود. بنابراین، حتی ذرات بدون برهم‌کنش به گونه‌ای رفتار می‌کنند که انگار یک برهم‌کنش دافعه میان آنها وجود دارد. خواهیم دید که مجموعه کامل مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده برای الکترون‌ها شامل یک مشاهده‌پذیر اضافی و مقدار وابسته به اسپین نیز هست. پس حالتی که در آن انرژی، تکانه زاویه‌ای پاریته، و غیره معین هستند حداکثر با دو الکترون (با متغیر اسپینی مخالف) اشغال می‌شود. این مورد خاصی از اصل طرد پاولی است.

کی پادمتقارن‌سازی لازم است؟

این حکم که “دو الکترون نمی‌توانند در یک حالت کوانتومی باشند” ایجاب می‌کند که تابع موج دستگاه دو الکترونی نسبت به مختصات این دو الکترون پادمتقارن باشد. این سؤال پیش می‌آید که وقتی یک اتم هیدروژن را روی زمین و یک اتم هیدروژن دیگر را در ماه بررسی می‌کنیم باید نگران این موضوع باشیم؟ اگر این دو اتم در حالت پایه باشند آیا الزاماً باید حالت‌های اسپینی مخالف داشته باشند؟ اگر یک اتم هیدروژن سوم در حالت پایه را در نظر بگیریم چه پیش می‌آید؟ درک شهودی به ما می‌گوید که نگرانی بی‌مورد است، و اشتباه نمی‌کند. برای مشاهده درستی این نتیجه‌گیری، تفاوت میان استفاده از تابع موج کاملاً ناهمبسته دو الکترون

$$\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) \quad (۶۱-۸)$$

۱. برای N بوزون یکسان، تابع موج کاملاً متقارن است، و صورت کلی را می‌توان با بسط دترمینان ۶۰-۸ و تغییر تمام علامت‌های منفی به مثبت به دست آورد.

$$\frac{1}{N}(\psi_a(x_1) \psi_b(x_2) - \psi_a(x_2) \psi_b(x_1)) \quad (۶۲-۸)$$

را بررسی می‌کنیم. ضریب بهنجارش N از شرط زیر تعیین می‌شود

$$\frac{1}{N^2} \int dx_1 \int dx_2 |\psi_2(x_1) \psi_b(x_2) - \psi_a(x_2) \psi_b(x_1)|^2 = 1 \quad (۶۳-۸)$$

که با

$$\int dx |\psi_a(x)|^2 = \int dx |\psi_b(x)|^2 = 1 \quad (۶۴-۸)$$

به صورت زیر درمی‌آید

$$\begin{aligned} N^2 &= 2 \left(1 + \left| \int dx \psi_a^*(x) \psi_b(x) \right|^2 \right) \\ &\equiv 2(1 + |S_{ab}|^2) \end{aligned} \quad (۶۵-۸)$$

فرض کنید بخواهیم احتمال یافتن الکترون a را در یک ناحیه فضایی R محاسبه کنیم. برای تابع موج ناهمبسته ۶۱-۸ که آن را با $\Psi(x, y) = \psi_a(x) \psi_b(y)$ نشان می‌دهیم، چگالی احتمال از رابطه زیر به دست می‌آید

$$P(R) = \int_R dx \int dy |\psi_a(x)|^2 |\psi_b(y)|^2 = \int_R dx |\psi_a(x)|^2 \quad (۶۶-۸)$$

روی تمام گستره مختصات الکترون b انتگرال گرفته‌ایم زیرا جای آن برای ما مهم نیست. برای تابع موج پادمتقارن داریم

$$|\Psi(x, y)|^2 = \frac{1}{N^2} [\psi_a^*(x) \psi_b^*(y) - \psi_b^*(x) \psi_a^*(y)] [\psi_a(x) \psi_b(y) - \psi_b(x) \psi_a(y)]$$

که باید از آن روی متغیرهای وابسته به الکترون a در ناحیه R و روی گستره کامل مختصات مربوط

$$\begin{aligned}
P_a(R) &= \frac{1}{N^2} \int_R dx |\psi_a(x)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dy |\psi_b(y)|^2 \\
&+ \frac{1}{N^2} \int_R dy |\psi_a(y)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_b(x)|^2 \\
&- \frac{1}{N^2} \int_R dx \int_R dy [\psi_a^*(x) \psi_b(x) \psi_b^*(y) \psi_a(y) \\
&+ \psi_b^*(x) \psi_a(x) \psi_a^*(y) \psi_b(y)] \\
&= \frac{2}{N^2} \int_R dx |\psi_a(x)|^2 - \frac{2}{N^2} \int_R dx \int_R dy \psi_a^*(x) \psi_b(x) \psi_b^*(y) \psi_a(y)
\end{aligned} \quad (67-8)$$

در جمله تداخلی هر دو انتگرال روی ناحیه R گرفته می‌شوند، زیرا در هر دو انتگرال تابع موجی با شاخص a وجود دارد. تفاوت میان دو چگالی احتمالی وقتی حائز اهمیت می‌شود که انتگرال همپوشی $\int_R dx \psi_a^*(x) \psi_b(x)$ در ناحیه R برای متغیر x قابل ملاحظه باشد. چون توابع موج برای حالت‌های مقید به‌طور نمای کاهشی می‌یابند، واضح است که این انتگرال وقتی مهم است که آنها به یکدیگر بسیار نزدیک باشند.

برای مثال، یک دستگاه دو الکترونی را در نظر بگیرید که دو الکترون آن با دو بسته موج گاوسی، یکی حول مبدأ و دیگری حول $x = L$ ، نمایش داده می‌شوند. در محاسبه احتمال یافتن یک الکترون در یک ناحیه R انتگرال همپوشی $Ce^{-\beta x^2}$ و $Ce^{-\beta(x-L)^2}$ به‌صورت زیر وارد می‌شود

$$C^2 \int_R dx e^{-\beta(x^2 + (x-L)^2)}$$

که به‌سادگی می‌توان دید که متناسب با $e^{-\beta L^2/2}$ است. بنابراین، اگر L بزرگ باشد انتگرال همپوشی به‌سرعت صفر می‌شود، و این درک شهودی که لازم نیست تابع موج الکترون مورد نظر با همه یا با هر یک از الکترون‌های دور پادمتقارن باشد درست از آب درمی‌آید. اصل طرد پاولی را باید در آنها و مولکول‌ها به‌حساب آورد نه در وضعیتهایی که فاصله آنها از یکدیگر بسیار زیاد است. حتی در شبکه‌های بلوری، که در آنها فاصله بین آنها چند آنگستروم است، همپوشی اغلب کوچک است، و پادمتقارن‌سازی ضرورت ندارد.

انرژی حالت پایه برای ذرات آزاد در یک جعبه

یک پیامد جالب اصل طرد پاولی این است که حالت پایه برای N الکترون در یک پتانسیل تفاوت بسیاری با حالت پایه برای N بوزون یا N ذره تمایزپذیر دارد. به‌عنوان مثال، جعبه پتانسیل نامتناهی

$$\begin{aligned} V(x) &= \infty & x < 0 \\ &= 0 & 0 < x < b \\ &= \infty & b < x \end{aligned} \quad (۶۸-۸)$$

جواب معادله شرودینگر که در $x = 0$ و $x = L$ صفر می شود به صورت زیر است

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{b}} \sin \frac{n\pi x}{b} \quad (۶۹-۸)$$

که در آن $n = 1, 2, 3, \dots$ ویژه مقدارهای انرژی عبارت اند از

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mb^2} \quad (۷۰-۸)$$

برای N بوزون بدون برهم کنش، حالت پایه شامل تمام ذرات در حالت $n = 1$ است، و در نتیجه انرژی با رابطه زیر داده می شود

$$E = N \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mb^2} \quad (۷۱-۸)$$

و انرژی به ازای هر ذره عبارت است از

$$\frac{E}{N} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mb^2} \quad (۷۲-۸)$$

برای N فرمیون بدون برهم کنش وضعیت کاملاً متفاوت است. در هر یک از حالت های $n = 1, 2, 3, \dots$ تنها دو الکترون می توانند وجود داشته باشند، و در نتیجه تعداد حالت های اشغال شده $N/2$ است. بنابراین، انرژی کل برابر است با

$$E = 2 \sum_{n=1}^{N/2} \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mb^2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{mb^2} \frac{N^2}{24} \quad (۷۳-۸)$$

در محاسبه نتیجه بالا، N را بزرگ گرفته ایم، و از این رو مهم نیست که آخرین تراز با یک الکترون اشغال شده است یا با دو الکترون، و از تقریب زیر استفاده کرده ایم

$$\sum_{n=1}^{N/2} n^2 \approx \int_1^{N/2} n^2 dx \simeq \frac{1}{3} \left(\frac{N}{2} \right)^3$$

$$\frac{E}{N} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{24mb^2} N^2 \quad (74-8)$$

که با N^2 افزایش می‌یابد. به عبارت دیگر، به‌ازای یک انرژی معین، تعداد بوزونهای که چاه را اشغال می‌کنند متناسب با E است، در حالی که تعداد فرمیونهای اشغال‌کننده چاه با $E^{1/2}$ متناسب است. بالاترین ترازی که فرمیونها اشغال می‌کنند ترازی است که برای آن $n = N/2$ و انرژی آن برابر است با

$$E_F = \frac{\hbar^2 \pi^2 N^2}{\lambda m b^2} \quad (75-8)$$

شاخص پایین F را به این دلیل نوشته‌ایم که این انرژی را انرژی فرمی می‌نامند. انرژی فرمی را می‌توان برحسب چگالی فرمیونها، که در این مسئله یک‌بعدی برابر است با $N/b = \rho$ ، نوشت:

$$E_F = \frac{\hbar^2 \pi^2}{\lambda m} \rho^2 \quad (76-8)$$

اهمیت این مطالب را در فصل ۹ خواهیم دید. اصل طرد نقش فوق‌العاده مهمی در ساختار اتمها دارد. تنوع بسیار زیاد خواص شیمیایی عناصر مختلف مستقیماً ناشی از این واقعیت است که تعداد محدودی الکترون می‌توانند یک ویژه‌حالت انرژی معین را اشغال کنند. در این باره در فصل ۱۹ بحث خواهیم کرد.

مسائل

- ۱-۸ جرم کاهیده یک دستگاه الکترون-پروتون را به‌دست آورید و آن را با جرم کاهیده دستگاه الکترون-دوترون مقایسه کنید. جرم کاهیده دستگاهی متشکل از دو ذره یکسان را تعیین کنید.
- ۲-۸ ثابت کنید عملگر تبادل P_{12} هرمیتی است.
- ۳-۸ دو الکترون بدون برهم‌کنش را در یک چاه پتانسیل نامتناهی در نظر بگیرید. اگر این دو الکترون در حالت اسپینی یکسان باشند تابع موج حالت پایه را به‌دست آورید.
- ۴-۸ دو الکترون در یک حالت اسپینی یکسان را در نظر بگیرید که با پتانسیل زیر برهم‌کنش دارند

$$V(|x_1 - x_2|) = -V_0 \quad |x_1 - x_2| \leq a$$

= ۰ هر جای دیگر

کمترین انرژی این حالت دو الکترونی را با فرض اینکه نگاه کل این الکترونها صفر است به دست آورید

[راهنمایی: معادله را به روشی که به ۸-۳۷ از آن حاصل شد جدا کنید و سپس اصل پاولی را به کار ببرید.]

۸-۵ دو ذره یکسان را که با عملگر انرژی زیر توصیف می شوند در نظر بگیرید

$$H = H(p_1, x_1) + H(p_2, x_2)$$

که در آن

$$H(p, x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

حرکت مرکز جرم را جدا کنید، و طیف انرژی این دستگاه را به دست آورید. نشان دهید این طیف با طیفی که از حل

$$H\psi(x_1, x_2) = E\psi(x_1, x_2)$$

با

$$\psi(x_1, x_2) = u_1(x_1)u_2(x_2)$$

به دست می آید توافق دارد. درباره واگنی طیف انرژی بحث کنید.
۸-۶ دو الکترون را که با هامیلتونی زیر توصیف می شوند در نظر بگیرید

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + V(x_1) + V(x_2)$$

که در آن به ازای $x < 0$ و $x > a$ داریم $V(x) = \infty$ ، و در بازه $0 < x < a$ داریم $V(x) = 0$.

فرض کنید الکترونها در حالت اسپینی یکسانی باشند، یعنی $\sigma_1 = \sigma_2$.

(الف) کمترین انرژی این حالت دو الکترونی را تعیین کنید.

(ب) ویژه تابع انرژی را برای این حالت پایه به دست آورید.

(ج) انرژی و تابع موج اولین حالت برانگیخته را، باز هم با فرض $\sigma_1 = \sigma_2$ ، به دست آورید.

۸-۷ یک دستگاه دو الکترونی را در نظر بگیرید که برای آن $\sigma_1 = \sigma_2$ و از این رو لازم نیست

اسپین را در نظر بگیریم. فرض کنید الکترونها به صورت بسته های موج گاوسی حول $x = a$

و $x = -a$ هستند، یعنی توابع موج آنها به‌تقریب عبارت‌اند از $(\sqrt{\pi}/\mu)e^{-\mu^2(x-a)^2/2}$ و $(\sqrt{\pi}/\mu)e^{-\mu^2(x+a)^2/2}$. یک تابع موج دو الکترونی با بهنجارش مناسب بسازید. فرض کنید $\hbar^2/\mu = 5 \text{ eV}$. برآورد کنید که به‌ازای چه مقادیری از a می‌توان اثرات اصل پاولی را تا دقت ۱ روی ۱۰۰۰ نادیده گرفت.

۸-۸ با استفاده از تابع موج دستگاه دو الکترونی مسئله ۷-۸، احتمال این را محاسبه کنید که فاصله بین دو الکترون در بازه $(x, x+dx)$ باشد. همچنین نشان دهید که مقدار انتظاری مرکز جرم این دستگاه دو الکترونی برابر است با $\langle (x_1 + x_2)/2 \rangle = 0$.

[راهنمایی: x_1 و x_2 را برحسب مختصه مرکز جرم $X = (x_1 + x_2)/2$ و فاصله $x = x_1 - x_2$ بنویسید، و تابع موج را برحسب این متغیرها بیان کنید.]

۹-۸ چگالی احتمال مربوط به مسئله ۸-۸ را برحسب x برای دو مورد (الف) $\hbar^2/\mu = 1/a$ ، و (ب) $\hbar^2/\mu = 2/a$ ترسیم کنید. مفهوم فیزیکی نتایج را بیان کنید.

۸-۱۰ فرض کنید در مسئله‌های ۷-۸ تا ۹-۸ به‌جای الکترون بوزون داریم. تغییر در فرمولها را بنویسید، چگالی احتمال را برحسب x برای دو فاصله ترسیم کنید، و تفاوت میان فرمیونها و بوزونها را از لحاظ چگالی احتمال توضیح دهید.

مراجع

به هریک از مراجع آخر فصل ۶ و همچنین دو کتاب زیر مراجعه کنید.

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

D Park *Introduction to the Quantum Theory*, (3rd Ed) McGraw-Hill, New York, 1992.

۹

معادله شرودینگر در سه بعد (۱)

هامیلتونی یک ذره که در فضای سه بعدی حرکت می‌کند عبارت است از

$$H = \frac{P_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(x, y, z) \quad (۱-۹)$$

در این فصل پتانسیلی را در نظر می‌گیریم که به صورت زیر است

$$V(x, y, z) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z) \quad (۲-۹)$$

به آسانی می‌توان دید که معادله

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) u_E(x, y, z) \quad (۳-۹)$$

$$+ [V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)] u_E(x, y, z) = E u_E(x, y, z)$$

با جداسازی زیر حل می‌شود

$$u_E(x, y, z) = u_{\epsilon_1}(x) v_{\epsilon_2}(y) w_{\epsilon_3}(z) \quad (۴-۹)$$

$$\begin{aligned} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_1(x) \right] u_{\epsilon_1}(x) &= \epsilon_1 u_{\epsilon_1}(x) \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + V_2(y) \right] v_{\epsilon_2}(y) &= \epsilon_2 v_{\epsilon_2}(y) \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + V_3(z) \right] w_{\epsilon_3}(z) &= \epsilon_3 w_{\epsilon_3}(z) \end{aligned} \quad (5-9)$$

و

$$E = \epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3$$

ذره آزاد در جعبه

یک مثال مخصوصاً جالب تعمیم سه بعدی چاه پتانسیل نامتناهی است. اگر جعبه سه بعدی مکعبی به ضلع L باشد، آنگاه

$$\begin{aligned} V_1(x) &= \infty & x < 0 \\ &= 0 & 0 < x < L \\ &= \infty & L < x \end{aligned} \quad (6-9)$$

و غیره. بنابراین، جواب عمومی عبارت است از

$$u_E(x, y, z) = \left(\frac{2}{L} \right)^{3/2} \sin \frac{n_1 \pi x}{L} \sin \frac{n_2 \pi y}{L} \sin \frac{n_3 \pi z}{L} \quad (7-9)$$

و

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \quad (8-9)$$

توجه کنید که واگنی در این مسئله بسیار زیاد است: تعداد جوابها به ازای یک مقدار معین E برابر است با تعداد مجموعه‌های اعداد درست $\{n_1, n_2, n_3\}$ که در ۸-۹ صدق می‌کنند. واگنی معمولاً

ناشی از وجود عملگرهای جابه‌جاشونده H_x ، H_y و H_z هستند، که به صورت زیر تعریف می‌شوند

$$\begin{aligned} H_x &= \frac{p_x^2}{2m} + V_1(x) \\ H_y &= \frac{p_y^2}{2m} + V_2(y) \\ H_z &= \frac{p_z^2}{2m} + V_3(z) \end{aligned} \quad (9-9)$$

و

$$H_x + H_y + H_z = H \quad (10-9)$$

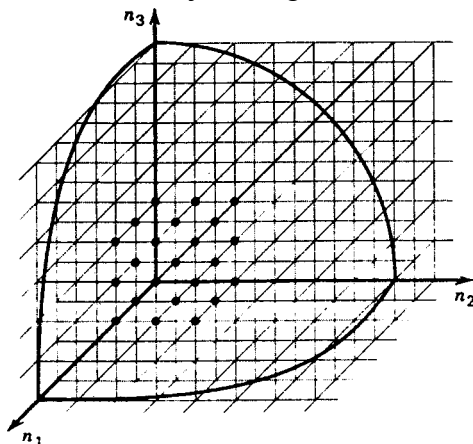
اثرات اصل طرد

پتانسیلی که در بالا در نظر گرفتیم چنان ساده است که می‌توان از آن برای بحث درباره انرژیهای الکترونیهای بدون برهم‌کنش (و سایر فرمیونهای یکسان) در جعبه سه‌بعدی استفاده کرد. به عنوان اولین گام، بهتر است انرژی حالت پایه N فرمیون یکسان بدون برهم‌کنش، مثلاً الکترون، را در جعبه‌ای به حجم L^3 به دست آوریم. برای هر سه‌تایی اعداد درست (n_1, n_2, n_3) ، $(1, 2, 1)$ ، $(2, 1, 1)$ ، $(1, 1, 1)$ ، ... می‌توان دو الکترون در نظر گرفت. مسئله یافتن انرژی را به صورت آسانتری مطرح می‌کنیم: چند سه‌تایی اعداد درست (n_1, n_2, n_3) وجود دارند که برای آنها E در ۸-۹ کمتر از انرژی E_F است؟ هر سه‌تایی یک نقطه شبکه در یک فضای سه‌بعدی تشکیل می‌دهد، و اگر تعداد این نقاط بسیار زیاد باشد، با تقریب بسیار خوب می‌توان گفت که آنها باید در کره‌ای به شعاع R قرار داشته باشند که بنابه ۸-۹ با رابطه زیر داده می‌شود

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = R^2 = \frac{2mE_F}{\hbar^2 \pi^2} L^2 \quad (11-9)$$

این تعداد برابر است با حجم یک هشتم کره که برای آن تمام n_i ها مثبت‌اند (شکل ۹-۱). بنابراین، تعداد نقطه‌های شبکه برابر است با

$$\frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} R^3 = \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} \left(\frac{2mE_F}{\hbar^2 \pi^2} L^2 \right)^{3/2} \quad (12-9)$$



شکل ۹-۱ شمارش حالتها برای دستگاه ذرات مستقل.

و تعداد الکترونها با انرژی کمتر از انرژی E_F دو برابر این است، یعنی

$$N = \frac{\pi}{3} L^3 \left(\frac{2mE_F}{\hbar^2 \pi^2} \right)^{3/2} \quad (9-13)$$

تعداد الکترونها، چنانکه باید، متناسب با حجم جعبه است. برحسب چگالی الکترونها،

$$n = \frac{N}{L^3} \quad (9-14)$$

داریم

$$E_F = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{3n}{\pi} \right)^{2/3} \quad (9-15)$$

انرژی E_F متعلق به پرانرژی ترین الکترون در حالت پایه یک گاز الکترونی به چگالی n است. این انرژی را انرژی فرمی می نامند، و نشان گذاری آن با F به همین دلیل است. برای محاسبه انرژی کل، می توان تعداد نقاط شبکه را به صورت

$$\frac{1}{8} \int_{|n| \leq R} d^3 \mathbf{n} \quad (9-16)$$

نوشت که در آن ضریب $1/8$ از قید مثبت بودن اعداد درست در ۹-۸ ناشی می شود؛ در انتگرال ۹-۱۶ این قید برداشته شده است و ضریب جلوانتگرال به جای آن گذاشته شده است.

این انرژی باید دو برابر شود، زیرا برای هر نقطه شبکه دو الکترون با یک انرژی وجود دارند. بنابراین، انرژی کل برابر است با

$$\begin{aligned} E_{\text{کل}} &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{m L^3} \frac{1}{\lambda} \int \mathbf{n}^2 d^3 \mathbf{n} \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{\lambda m L^3} \pi \int_0^R n^2 dn \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{\lambda^3 m L^3} R^5 \end{aligned} \quad (۱۷-۹)$$

چون رابطه R با تعداد الکترونها به صورت زیر است

$$N = 2 \cdot \frac{1}{\lambda} \cdot \frac{4}{3} \pi R^3 \quad (۱۸-۹)$$

در نهایت به دست می آوریم

$$E_{\text{کل}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{\lambda^3 m L^3} \left(\frac{3N}{\pi} \right)^{5/3} \quad (۱۹-۹)$$

که برحسب چگالی $n = N/L^3$ به صورت زیر درمی آید

$$E_{\text{کل}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{\lambda^3 m} \left(\frac{3n}{\pi} \right)^{5/3} L^3 \quad (۲۰-۹)$$

پیامدهای اصل طرد پازلی کاملاً گیج کننده هستند. تعدادی از آنها را پس از ملاحظات زیر بررسی می کنیم:

(الف) عدد موج که با $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ در سطح “دریای فرمی” تعریف می شود با رابطه زیر داده می شود

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} \quad (۲۱-۹)$$

چون $k = 2\pi/\lambda$ ، برای طول موج دو بروی به دست می آوریم

$$\lambda = 2 \cdot 3 \pi n^{-1/3} \quad (۲۲-۹)$$

از آنجا که $n^{-1/2}$ تقریباً برابر با فاصله میان ذره‌ای d است، نتیجه بالا را می‌توان به صورتی که به آسانی به خاطر سپرده می‌شود بیان کرد:

$$d = \frac{\lambda_F}{2} \quad (23-9)$$

این رابطه چیزی با ارزشتر از یک وسیله یادسپاری است. چون اصل طرد نمی‌گذارد دو الکترون با اعداد کوانتومی یکسان کنار هم قرار گیرند رابطه بالا به معنای این است که آنها باید دست کم به اندازه یک نیم موج از هم فاصله داشته باشند.

(ب) اگر تعداد الکترون‌ها را ثابت بگیریم، آنگاه ۹-۱۹ بر حسب حجم حاوی الکترون‌ها به صورت زیر درمی‌آید

$$E_{\mathcal{L}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{10m} \left(\frac{3N}{\pi} \right)^{5/3} V^{-2/3} \quad (24-9)$$

اگر N بزرگ باشد، این نتیجه عملاً مستقل از شکل حجم است. در محاسبات بالا از مکعب استفاده کردیم زیرا این راه برای محاسبه از همه ساده‌تر است.

فشار واگنی و کاربردهای اخترفیزیکی

اگر گاز الکترونی را متراکم کنیم الکترون‌ها به یکدیگر نزدیکتر می‌شوند، و در نتیجه طول موج دو بروی کاهش می‌یابد، یعنی انرژی زیاد می‌شود. بنابراین، مقاومتی در برابر تراکم ظاهر می‌شود؛ فشار مانع تراکم را فشار واگنی می‌نامند. این فشار با رابطه زیر داده می‌شود

$$\begin{aligned} p_{\text{واگنی}} &= - \frac{\partial E_{\text{tot}}}{\partial V} \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{10m} \left(\frac{3n}{\pi} \right)^{5/3} \end{aligned} \quad (25-9)$$

مدول کپه‌ای B (عکس تراکم‌پذیری) برای یک ماده به صورت زیر تعریف می‌شود

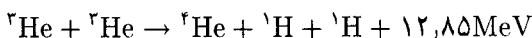
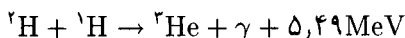
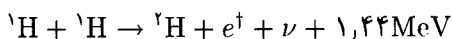
$$B = -V \frac{\partial p}{\partial V} \quad (26-9)$$

و اگر به جای p فشار واگنی را قرار دهیم به دست می‌آوریم $B = \frac{5}{3} p_{\text{واگنی}}$ ، و در نتیجه

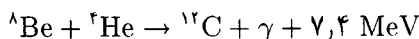
$$B = \frac{\hbar^2 \pi^2}{9m} \left(\frac{3n}{\pi} \right)^{5/3} \quad (27-9)$$

استفاده از الگوی گاز الکترونی و اکن برای $n = 2.65 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ ، و در نتیجه $B = 9.2 \times 10^{10} \text{ dyne/cm}^2$. به عنوان مثال، برای سدیم مقدار تجربی $10^{10} \text{ dyne/cm}^2 \times 6.4$ است.

مقاومت در برابر تراکم که منشأ آن در اصل طرد پاولی است نقش مهمی در تکامل ستاره‌ای دارد. ستاره‌ها با واکنشهای هسته‌ای متوالی "می‌سوزند". هیدروژن با واکنشهای زیر به هلیوم تبدیل می‌شود



وقتی تمام هیدروژن به هلیوم تبدیل شد این سوختن متوقف می‌شود. انقباض گرانشی هلیوم را متراکم می‌کند تا اینکه هلیوم با واکنش زیر شروع به سوختن می‌کند



انواع فرایندهای هسته‌ای زیادتر می‌شوند، و فرایند ترکیب هسته‌ها را اکنون کاملاً می‌دانیم. در یک مرحله، وقتی که ستاره عمدتاً از آهن، سیلیسیم، و عنصرهای مجاور تشکیل شده است، سوختن متوقف می‌شود. آنگاه ماده انقباض گرانشی را از سر می‌گیرد، و تنها مانع در برابر رمیش گرانشی کامل اثر فشار واگنی است.

اگر فرض کنیم چگالی ماده ρ مستقل از شعاع است و شکل ستاره کروی است، فشار گرانشی به آسانی محاسبه می‌شود. انرژی پتانسیل ماده در پوسته‌ای بین شعاعهای r و $r + dr$ برابر است با

$$dV_g = -G \frac{(\frac{4}{3}\pi \rho r^3)(\frac{4}{3}\pi \rho r^2 dr)}{r} = -\frac{(\frac{4}{3}\pi)^2 G \rho^2}{3} r^4 dr \quad (28-9)$$

و در نتیجه انرژی پتانسیل ماده موجود در کره‌ای به شعاع R عبارت است از

$$V_g = -\frac{(\frac{4}{3}\pi)^2 G \rho^2}{3} \int_0^R r^4 dr = -\frac{(\frac{4}{3}\pi)^2}{15} G \rho^2 R^5 \quad (29-9)$$

رابطه میان ρ ، R و جرم ستاره M را هم داریم. ستاره از N نوکلئون (به صورت آهن، سیلیسیم و

$$\frac{4\pi}{3}\rho R^3 = M = (NM_n) \quad (30-9)$$

بنابراین، رابطه انرژی پتانسیل گرانشی برحسب حجم ستاره به صورت زیر است

$$V_g = -\frac{3}{5}\left(\frac{4\pi}{3}\right)^{1/3} G(Nm_n)^{2/3} V^{-1/3} \quad (31-9)$$

فشار گرانشی برابر است با

$$p_g = -\frac{\partial V_g}{\partial V} = -\frac{1}{5}\left(\frac{4\pi}{3}\right)^{1/3} G(Nm_n)^{2/3} V^{-4/3} \quad (32-9)$$

این فشار با فشار واگنی، که بنابه ۲۵-۹ به صورت زیر است، مخالفت می کند

$$p_{\text{واگنی}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{15m_e} \left(\frac{3n}{\pi}\right)^{5/3} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{15m_e} \left(\frac{3N_e}{\pi}\right)^{5/3} V^{-5/3} \quad (33-9)$$

که در آن N_e تعداد الکترونهاست و با تعداد پروتونهای آن برابر است. با فرض مساوی بودن تعداد پروتونها و نوترونها، داریم $N_e = N/2$. این دو فشار، به ازای یک مقدار معین N ، وقتی با هم موازنه می کنند که

$$\frac{1}{5}\left(\frac{4\pi}{3}\right)^{1/3} G(Nm_n)^{2/3} V^{-4/3} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{15m_e} \left(\frac{3N_e}{\pi}\right)^{5/3} V^{-5/3}$$

یعنی وقتی که شعاع ستاره برابر است با R^* :

$$R^* = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/3} V^{1/3} = \left(\frac{81\pi^2}{128}\right)^{1/3} \frac{\hbar^2}{Gm_em_n^2} N^{-1/3} \quad (34-9)$$

برای ستاره ای با جرم خورشید داریم

$$N \approx \frac{2 \times 10^{33} \text{g}}{1.67 \times 10^{-24} \text{g}} = 1.2 \times 10^{57}$$

و شعاع ستاره واگن برابر است با 10^8 km و $R_n \approx 10^8 \text{ km}$: شعاع یک ستاره ناواگن مانند خورشید تقریباً $7 \times 10^8 \text{ km}$ است.

اگر جرم ستاره اندکی بیشتر از جرم خورشید باشد انرژی میانگین الکترونها افزایش می‌یابد. وقتی الکترونها به انرژیهای نسبیتی می‌رسند رابطه بالا برای فشار واگنی تغییر عمده‌ای پیدا می‌کند. در واقع، انرژی الکترون دیگر $p^2/2m_e$ نیست بلکه pc است. می‌توان نشان داد (مسئله ۹-۱) که در این وضعیت فشار واگنی با $V^{-2/3}$ تغییر می‌کند، و اگر مقدار N به اندازه کافی بزرگ باشد فشار گرانشی بر فشار واگنی غالب می‌شود. یک نتیجه این فشار خالص زیاد این است که واکنش زیر روی می‌دهد

$$e^- + p \rightarrow n + \nu$$

نوترینوها فرار می‌کنند زیرا ماده، حتی ماده واگن، برای آنها شفاف است، و آنچه می‌ماند یک ستاره نوترونی است. فشار واگنی نوترونها را، که فرمیون هستند و بنابراین از اصل طرد پیروی می‌کنند، می‌توان به همان روش مربوط به فشار الکترون محاسبه کرد و البته به جای N_e باید N و به جای m_e باید m_n گذاشت. در این مورد به دست می‌آوریم

$$R_n^* = \left(\frac{81\pi^2}{16} \right)^{1/3} \frac{\hbar^2}{Gm_n^2} N^{-1/3} \quad (9-35)$$

برای ستاره‌ای که جرمش دو برابر خورشید است سرانجام به نتیجه $R_n^* \approx 10 \text{ km}$ می‌رسیم. اگر جرم (یا معادل آن N) چنان بزرگ باشد که نوترونها نسبیتی شوند آنگاه موازنه‌ای در برابر فشار گرانشی بسیار زیاد وجود نخواهد داشت، و یک سیاهچاله شکل می‌گیرد.

مسائل

۹-۱ انرژی فرمی برای گازی از فرمیونها را با این فرض که فرمیونها بدون جرم هستند، و در نتیجه رابطه انرژی-تکانه به صورت $E = pc$ است، از نو محاسبه کنید.

۹-۲ واگنی حالتها در یک جعبه مکعبی با حجم L^3 را برحسب E محاسبه کنید، یعنی تعداد حالتها را در بازه $(E, E + dE)$ به دست آورید و با استفاده از آن چگالی حالتهای یک گاز الکترونی را، با توجه به اینکه به ازای هر حالت انرژی دو الکترون داریم، تعیین کنید.

[راهنمایی: چند (n_1, n_2, n_3) وجود دارند که برای آنها $\sum_i n_i^2 = 2mEL^2/\hbar^2\pi^2$]

۹-۳ طیف انرژی الکترونها را در جعبه‌ای به اضلاع a ، a و L ، با فرض $a \ll L$ ، به دست آورید. درباره فاصله الکترونها به ازای $a = 10^{-8} \text{ cm}$ و $L = 10^{-4} \text{ cm}$ بحث کنید.

۹-۴ چگالی انرژی یک گاز فوتونی را در یک جعبه مکعبی با حجم L^3 ، با توجه به اینکه به ازای

هر حالت انرژی دو فوتون (دو حالت قطبش) وجود دارند، محاسبه کنید.

۵-۹ طیف انرژی یک گاز فوتونی را در جعبه‌ای به اضلاع a ، a و L ، با $L \ll a$ ، به دست آورید.
۶-۹ با توجه به اینکه چگالی تعداد الکترونهاى آزاد در مس 10^{22} cm^{-3} 8.5×10^{22} است، (۱) انرژی فرمی را برحسب الکترون ولت، و (۲) سرعت الکترونی را که انرژی جنبشی آن برابر با انرژی فرمی است محاسبه کنید.

۷-۹ یک هسته از N نوترون و Z پروتون، با $N + Z = A$ ، تشکیل شده است. اگر شعاع هسته با $R = r_0 A^{1/3}$ داده شود، که در آن $r_0 = 1.1 \text{ fm}$ ($1 \text{ fm} = 10^{-13} \text{ cm}$)، و اگر جرمهای نوترون و پروتون تقریباً $1.6 \times 10^{-24} \text{ g}$ باشند، رابطه انرژی فرمی را برای "گاز" پروتون و "گاز" نوترون، با فرض حرکت آزاد پروتونها و نوترونها، به دست آورید. این انرژیهای فرمی را به ازای $N = 126$ و $Z = 82$ تعیین کنید.

۸-۹ یک گاز نوترونی را در حالت پایه در نظر بگیرید که برای آن چگالی جرم ρ از 10^{11} تا 10^{16} گرم بر سانتیمترمکعب تغییر می‌کند. انرژی فرمی را برحسب ρ به دست آورید. توجه کنید که در یک نقطه این گاز نوترونی نسبیتی می‌شود. در چه گستره‌ای از چگالیها باید از فرمولهای نسبیتی استفاده کنیم؟

۱۰

معادله شرودینگر در سه بعد (۲)

پتانسیل مرکزی

در این فصل مورد بسیار مهمی را در نظر می‌گیریم که در آن پتانسیل $V(x, y, z)$ تنها به $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ بستگی دارد. برای یک دستگاه دوزره‌ای با پتانسیلی که تنها به فاصله بین دو ذره بستگی دارد، هامیلتونی به صورت زیر است

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} + V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \quad (۱-۱۰)$$

با تجزیه متداول به مختصات مرکز جرم و نسبی

$$\mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2} \quad (۲-۱۰)$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$$

و با تکانه‌های کل و نسبی www.arsanjan.blogfa.com

$$\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2$$

$$\mathbf{p} = \frac{m_2 \mathbf{p}_1 - m_1 \mathbf{p}_2}{m_1 + m_2} \quad (3-10)$$

هامیلتونی به صورت زیر درمی‌آید

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(|\mathbf{r}|) \quad (4-10)$$

در اینجا M جرم کل دستگاه است که با رابطه زیر داده می‌شود

$$M = m_1 + m_2 \quad (5-10)$$

و جرم کاهیده μ عبارت است از

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{M} \quad (6-10)$$

به سادگی می‌توان دید که

$$[P_i, R_j] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij}$$

$$[p_i, r_j] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij} \quad (7-10)$$

و تمام جابه‌جاگرهای دیگر صفر هستند. چون پتانسیل تابع مختصه مرکز جرم \mathbf{R} نیست، عملگر تکانه کل \mathbf{P} با H جابه‌جا می‌شود، و می‌توان ویژه‌تابعهای مشترکی برای \mathbf{P} و H به دست آورد. ویژه‌تابعهای \mathbf{P} عبارت‌اند از

$$U(\mathbf{P}, \mathbf{R}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{P} \cdot \mathbf{R}/\hbar} \quad (8-10)$$

بنابراین، ویژه‌تابع H به صورت زیر است

$$\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = U(\mathbf{P}, \mathbf{R}) u_E(\mathbf{r}) \quad (9-10)$$

به طوری که $u_E(\mathbf{r})$ در معادله www.arsanjan.blogfa.com

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(r) \right) u_E(\mathbf{r}) = E u_E(\mathbf{r}) \quad (10-10)$$

که در آن E انرژی داخلی، یعنی انرژی کل منهای انرژی حرکت دستگاه دوزره‌ای $P^2/2M$ ، است. معادله ۱۰-۱۰ را به صورت زیر می‌نویسیم

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r) \right) u_E(\mathbf{r}) = E u_E(\mathbf{r}) \quad (11-10)$$

پیامدهای ناوردایی چرخشی

در این بخش نشان می‌دهیم که ۱۱-۱۰ را می‌توان به گونه‌ای جداسازی کرد که تنها مختص شعاعی r در معادله ویژه مقداری انرژی ظاهر شود. در مکانیک کلاسیک این جداسازی با استفاده از تکانه زاویه‌ای انجام می‌شود. با

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (12-10)$$

به دست می‌آوریم

$$\mathbf{L}^2 = (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) = r^2 p^2 - (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p})^2$$

و در نتیجه

$$\begin{aligned} p^2 &= \frac{1}{r^2} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p})^2 + \frac{1}{r^2} \mathbf{L}^2 \\ &= p_r^2 + \frac{1}{r^2} \mathbf{L}^2 \end{aligned} \quad (13-10)$$

برای پتانسیل مرکزی (وقتی V تنها به r بستگی دارد) نیرو شعاعی است و لنگری بر دستگاه وارد نمی‌شود. بنابراین، \mathbf{L} یک ثابت حرکت است و \mathbf{L}^2 تنها یک عدد است. در نتیجه، معادله

$$E = \frac{1}{2\mu} p^2 + V(r)$$

تنها شامل مختص شعاعی است. همین نتیجه برای مکانیک کوانتومی صدق می‌کند. در بقیه این بخش:

۱. عملگر تکانه زاویه‌ای را از شرط ناوردایی بودن هامیلتونی تحت چرخش تعیین می‌کنیم؛ و
۲. معادله شعاعی را به دست می‌آوریم.

ناوردایی تحت چرخش حول محور z

مورد خاص چرخش حول محور z به اندازه زاویه θ را در نظر بگیرید: با

$$\begin{aligned}x' &= x \cos \theta - y \sin \theta \\y' &= x \sin \theta + y \cos \theta\end{aligned}\quad (14-10)$$

به آسانی می‌توان دید که

$$r' = (x'^2 + y'^2 + z'^2)^{1/2} = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2} = r$$

و

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial}{\partial x'}\right)^2 + \left(\frac{\partial}{\partial y'}\right)^2 &= \left(\cos \theta \frac{\partial}{\partial x} - \sin \theta \frac{\partial}{\partial y}\right)^2 + \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial x} + \cos \theta \frac{\partial}{\partial y}\right)^2 \\&= \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial}{\partial y}\right)^2\end{aligned}$$

چون هامیلتونی یک ویژگی ناوردایی دارد، انتظار داریم، همچنانکه در مورد پاریته و ناوردایی تحت جابه‌جایی دیدیم، یک قانون پایستگی به دست آوریم. برای تعیین عملگرهایی که با H جابه‌جا می‌شوند، یک چرخش بینهایت کوچک حول محور z در نظر می‌گیریم. با نگه داشتن جمله‌هایی که تنها تا مرتبه θ هستند، یعنی

$$\begin{aligned}x' &= x - \theta y \\y' &= y + \theta x\end{aligned}\quad (15-10)$$

می‌نویسیم

$$Hu_E(x - \theta y, y + \theta x, z) = Eu_E(x - \theta y, y + \theta x, z) \quad (16-10)$$

اگر این معادله را تا مرتبه اول برحسب θ بسط دهیم و معادله

$$Hu_E(x, y, z) = Eu_E(x, y, z) \quad (17-10)$$

را از آن کم کنیم، به دست می آوریم www.arsanjan.blogfa.com

$$H \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) u_E(x, y, z) = E \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) u_E(x, y, z) \quad (۱۸-۱۰)$$

طرف راست این معادله را می توان به صورت زیر نوشت

$$\left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) E u_E(x, y, z) = \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) H u_E(x, y, z) \quad (۱۹-۱۰)$$

اگر تعریف کنیم

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = x p_y - y p_x \quad (۲۰-۱۰)$$

آنگاه از ترکیب ۱۸-۱۰ و ۱۹-۱۰ به دست می آوریم

$$(H L_z - L_z H) u_E(x, y, z) = 0$$

چون $u_E(\mathbf{r})$ ها یک مجموعه کامل تشکیل می دهند، این رابطه موجب رابطه عملگری زیر می شود

$$[H, L_z] = 0 \quad (۲۱-۱۰)$$

L_z در اینجا مؤلفه z عملگر تکانه زاویه ای زیر است

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (۲۲-۱۰)$$

اگر چرخش را حول محوره های x و y در نظر بگیریم به دو معادله زیر می رسیم

$$\begin{aligned} [H, L_x] &= 0 \\ [H, L_y] &= 0 \end{aligned} \quad (۲۳-۱۰)$$

بنابراین، سه مؤلفه عملگر تکانه زاویه ای با هامیلتونی جابه جا می شوند، یعنی تکانه زاویه ای یک ثابت حرکت است. این نتیجه با این قانون کلاسیک که نیروهای مرکزی پایستگی تکانه زاویه ای را ایجاد می کنند همسنگ است.

رابطه جابه جایی تکانه زاویه‌ای www.arsanjan.blogfa.com

عملگرهای L_z و L_y ، L_x ، H یک مجموعه کامل از مشاهده پذیرهای جابه جاشونده تشکیل نمی دهند و از این رو نمی توانند ویژه تابعهای همزمان داشته باشند. برای مثال،

$$\begin{aligned}
 [L_x, L_y] &= [yp_z - zp_{y'}, zp_x - xp_z] \\
 &= [yp_z, zp_x] - [zp_{y'}, zp_x] - [yp_z, xp_z] + [zp_{y'}, xp_z] \\
 &= y[p_z, z]p_x + x[z, p_z]p_y \\
 &= \frac{\hbar}{i}(yp_x - zp_y) \\
 &= i\hbar L_z
 \end{aligned} \quad (24-10)$$

به همین ترتیب، به دست می آوریم

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x \quad (25-10)$$

$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y \quad (26-10)$$

رابطه های جابه جایی ۲۴-۱۰ تا ۲۷-۱۰ را می توان در فرمول زیر خلاصه کرد

$$\mathbf{L} \times \mathbf{L} = i\hbar \mathbf{L}$$

یک پیامد این رابطه های جابه جایی این است که تنها یک مؤلفه \mathbf{L} را می توان با H برای تشکیل مجموعه مشاهده پذیرهای جابه جاشونده برگزید. برای اثبات، فرض کنید ویژه تابعی از L_x با ویژه مقدار l_1 داریم که به طور همزمان ویژه تابع L_y با ویژه مقدار l_2 نیز هست:

$$L_x u = l_1 u$$

$$L_y u = l_2 u$$

بنابراین، باید $L_x L_y u = l_1 l_2 u$ و $L_y L_x u = l_2 l_1 u$ در نتیجه، با توجه به ۲۴-۱۰ به دست می آوریم $L_z u = 0$. اما آنگاه

$$L_y u = \frac{1}{i\hbar}(L_z L_x - L_x L_z)u = \frac{1}{i\hbar}L_z l_1 u = 0$$

این نتیجه ایجاب می‌کند که L_z و L^2 (که این یکی صرفاً قراردادی است) را به عنوان مجموعه کامل مشاهده پذیرهای جابه جاشونده انتخاب می‌کنیم. می‌توانستیم پاریته را هم اضافه کنیم زیرا واضح است که هامیلتونی تحت $x \rightarrow -x, y \rightarrow -y, z \rightarrow -z$ ناوردا است، اما چنانکه بعداً خواهیم دید با تعیین L^2 پاریته نیز تعیین می‌شود.

$$\begin{aligned}[L_z, L^2] &= [L_z, L_x^2 + L_y^2 + L_z^2] = [L_z, L_x^2] + [L_z, L_y^2] \\ &= L_x[L_z, L_x] + [L_z, L_x]L_x + L_y[L_z, L_y] + [L_z, L_y]L_y \\ &= i\hbar L_x L_y + i\hbar L_y L_x - i\hbar L_y L_x - i\hbar L_x L_y \\ &= 0\end{aligned}\quad (27-10)$$

و غیره. بنابراین، عملگرهای H, L^2 و L_z (که این یکی صرفاً قراردادی است) را به عنوان مجموعه کامل مشاهده پذیرهای جابه جاشونده انتخاب می‌کنیم. می‌توانستیم پاریته را هم اضافه کنیم زیرا واضح است که هامیلتونی تحت $x \rightarrow -x, y \rightarrow -y, z \rightarrow -z$ ناوردا است، اما چنانکه بعداً خواهیم دید با تعیین L^2 پاریته نیز تعیین می‌شود.

جداسازی متغیرها برای معادله شرودینگر

در فصل ۱۱ ویژه مقادارها و ویژه تابعهای L_z و L^2 را به دست می‌آوریم؛ در اینجا تنها متذکر می‌شویم که با استفاده از آنها حل معادله شرودینگر بسیار ساده تر می‌شود. این وضعیت پیامد رابطه‌ای است که در زیر به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned}L^2 &= (\mathbf{r} \times \mathbf{p})^2 = [(\mathbf{r} \times \mathbf{p})_x]^2 + [(\mathbf{r} \times \mathbf{p})_y]^2 + [(\mathbf{r} \times \mathbf{p})_z]^2 \\ &= -\hbar^2 \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ &\quad - \hbar^2 \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ &\quad - \hbar^2 \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \\ &= -\hbar^2 \left[x^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + y^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \right.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \text{www.arsanjan.blogfa.com} \\ & + z^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - 2xy \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} - 2yz \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} \\ & - 2zx \frac{\partial^2}{\partial z \partial x} - 2x \frac{\partial}{\partial x} - 2y \frac{\partial}{\partial y} - 2z \frac{\partial}{\partial z} \Big] \end{aligned}$$

و همچنین داریم

$$\begin{aligned} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p})^2 &= -\hbar^2 \left(x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ &= -\hbar^2 \left(x^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + y^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + z^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} + 2xy \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} + 2yz \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} \right. \\ & \quad \left. + 2zx \frac{\partial^2}{\partial z \partial x} + x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\partial}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (28-10)$$

مجموع این دو برابر است با

$$-\hbar^2 (x^2 + y^2 + z^2) \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \hbar^2 \left(x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (29-10)$$

بنابراین، اتحاد زیر را به دست می آوریم

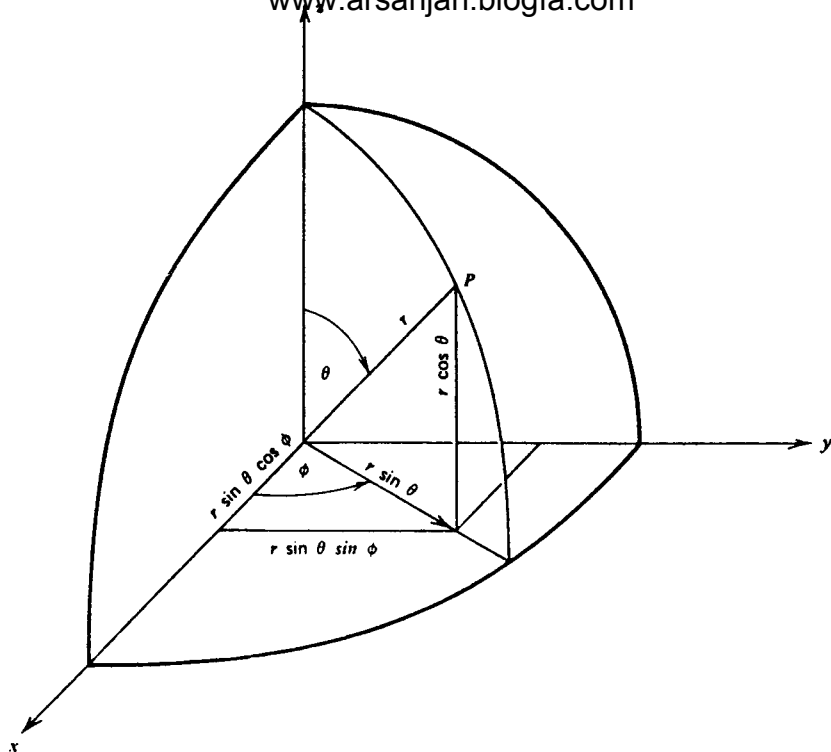
$$\mathbf{L}^2 + (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p})^2 = r^2 \mathbf{p}^2 + i\hbar \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \quad (30-10)$$

چون با عملگرها سروکار داریم، رعایت ترتیب عوامل ضروری است. از اتحاد بالا نتیجه می گیریم که

$$\mathbf{p}^2 = \frac{1}{r^2} \left[\mathbf{L}^2 + (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p})^2 - i\hbar \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \right] \quad (31-10)$$

این رابطه به این دلیل با نتیجه کلاسیک ۱۰-۱۳ تفاوت دارد که \mathbf{p} و \mathbf{r} جابه جا نمی شوند. با

$$\mathbf{p}^2 = \frac{1}{r^2} \mathbf{L}^2 - \hbar^2 \frac{1}{r^2} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 - \hbar^2 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \quad (32-10)$$



شکل ۱-۱۰. تعریف مختصات کروی (r, θ, ϕ) و رابطه آنها با مختصات دکارتی (x, y, z) .

معادله شرودینگر به صورت زیر درمی آید

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{\hbar^2 r^2} \mathbf{L}^2 \right] u_E(\mathbf{r}) + V(r) u_E(\mathbf{r}) = E u_E(\mathbf{r}) \quad (۳۳-۱۰)$$

اگر در مختصات کروی کار کنیم (شکل ۱-۱۰)، که طبعاً باید چنین باشد، آنگاه تنها عملگری که زاویه‌های قطبی θ و ϕ در آن دخالت دارند \mathbf{L}^2 است. بنابراین، اگر ویژه‌تابعها را به صورت زیر بنویسیم

$$u_E(\mathbf{r}) = Y_\lambda(\theta, \phi) R_{E\lambda}(r) \quad (۳۴-۱۰)$$

که در آن Y_λ ویژه‌تابع عملگر \mathbf{L}^2 است:

$$\mathbf{L}^2 Y_\lambda(\theta, \phi) = \lambda Y_\lambda(\theta, \phi) \quad (۳۵-۱۰)$$

آنگاه معادله ۳۴-۱۰ به معادله ویژه مقدار L^2 (معادله ۱۵-۱۰) و یک معادله صرفاً شعاعی (معادله ۳۹-۱۰) تفکیک می‌شود. روش بالا واقعاً تفاوتی با روش مرسوم جداسازی متغیرها ندارد، اما در آن بر نقش تقارن در تعیین مجموعه کامل عملگرهای جابه‌جاشونده تأکید شده است. λ چنانکه باید دارای ابعاد \hbar^2 است، و آن را به صورت زیر می‌نویسیم

$$\lambda = l(l+1)\hbar^2 \quad (۳۶-۱۰)$$

در فصل بعد ثابت می‌کنیم که $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ ، و در تحلیل زیر از این نتیجه استفاده خواهیم کرد. ویژه‌تابعهای عملگر L^2 را در واقع به صورت $Y_{lm}(\theta, \phi)$ می‌نویسیم که در آن شاخص پایین m نشان می‌دهد که $Y_{lm}(\theta, \phi)$ ویژه‌تابع همزمان L^2 و L_z است:

$$L_z Y_{lm}(\theta, \phi) = m\hbar Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (۳۷-۱۰)$$

قبلاً گفتیم که l یک عدد درست است، و خواهیم دید که m نیز یک عدد درست است که در $-l \leq m \leq l$ صدق می‌کند. چون Y_{lm} ویژه‌تابع عملگرهای هرمیتی است، Y_{lm} ‌های متناظر با ویژه‌مقدارهای مختلف متعامد هستند. در فصل بعد ثابت می‌کنیم که وقتی این ویژه‌تابعها به‌طور مناسب بهنجار شده باشند، داریم

$$\int d\Omega Y_{l_1 m_1}(\theta, \phi)^* Y_{l_2 m_2}(\theta, \phi) \quad (۳۸-۱۰)$$

$$\equiv \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi Y_{l_1 m_1}(\theta, \phi)^* Y_{l_2 m_2}(\theta, \phi) = \delta_{l_1 l_2} \delta_{m_1 m_2}$$

معادله شعاعی

اگر ۳۴-۱۰، ۳۵-۱۰ و ۳۶-۱۰ را در ۳۳-۱۰ بگذاریم، معادله شرودینگر شعاعی زیر را به دست می‌آوریم

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} \right) + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{Elm}(r) + V(r) R_{Elm}(r) = E R_{Elm}(r) \quad (۳۹-۱۰)$$

توجه کنید که در این معادله وابستگی به m وجود ندارد. بنابراین، به ازای یک مقدار معین l همیشه یک واگنی $(2l+1)$ تایی داریم، زیرا تمام مقادیر ممکن m دارای یک انرژی هستند. معادله ۳۹-۱۰

را، با حذف شاخص زائد www.arsanjan.blogfa.com و توابع شعاعی، می‌توان به صورت زیر درآورد

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) R_{nl}(r) - \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] R_{nl}(r) + \frac{2\mu E}{\hbar^2} R_{nl}(r) = 0 \quad (40-10)$$

جوابهای این معادله را برای انواعی از پتانسیل بررسی می‌کنیم که در بینهایت سریعتر از $1/r$ به صفر میل می‌کنند، به‌استثنای مورد مهم پتانسیل کولنی که در فصل ۱۲ بیان خواهیم کرد. همچنین فرض می‌کنیم این پتانسیلها در مبدأ به اندازه $1/r^2$ تکین نیستند، و در نتیجه

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^2 V(r) = 0 \quad (41-10)$$

گاهی بهتر است تابع زیر را وارد کنیم

$$u_{nl}(r) = r R_{nl}(r) \quad (42-10)$$

از آنجا که

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) \frac{u_{nl}(r)}{r} = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} u_{nl}(r) \quad (43-10)$$

به‌دست می‌آوریم

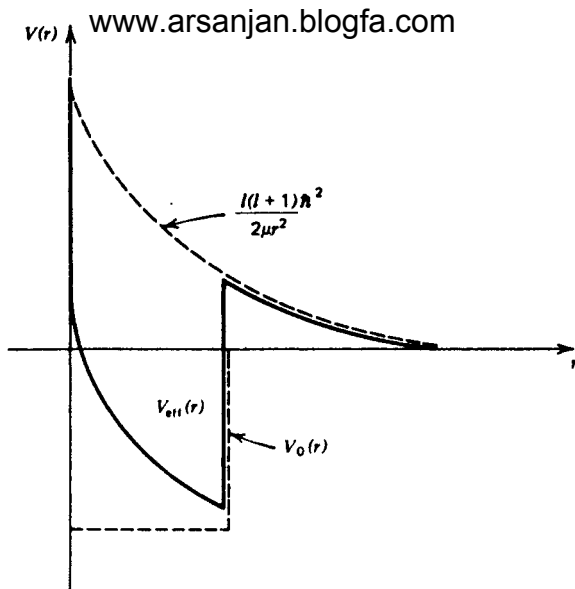
$$\frac{d^2 u_{nl}(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] u_{nl}(r) = 0 \quad (44-10)$$

این معادله شباهت بسیار زیادی با معادله یک‌بعدی دارد، بجز اینکه (الف) به پتانسیل $V(r)$ یک سد دافعه مرکزگریزی اضافه شده است:

$$V(r) \rightarrow V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \quad (45-10)$$

(ب) تعریف $u_{nl}(r)$ و متناهی بودن تابع موج در مبدأ ایجاب می‌کند که

$$u_{nl}(0) = 0 \quad (46-10)$$



شکل ۱۰-۲ پتانسیل مؤثر در معادله شعاعی برای $u = rR(r)$ وقتی پتانسیل واقعی یک چاه مستطیلی است.

که در نتیجه معادله بیشتر شبیه مسئله یک بعدی می شود که برای آن در ناحیه سمت چپ مبدأ $V = +\infty$ (شکل ۱۰-۲).

ابتدا معادله شعاعی را، با حذف تمام شاخصهای پایین برای سادگی، در نزدیکی مبدأ در نظر می گیریم. وقتی $r \rightarrow 0$ ، با نگر داشتن جمله های مهم، معادله شعاعی به صورت زیر درمی آید

$$\frac{d^2 u}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} u \simeq 0 \quad (۱۰-۴۷)$$

زیرا پتانسیل به ازای مقادیر به اندازه کافی کوچک r وقتی شرط $۱۰-۴۱$ برقرار باشد سهمی ندارد. اگر حدس زیر را به کار ببریم

$$u(r) \sim r^s \quad (۱۰-۴۸)$$

می بینیم که معادله به شرطی صادق است که

$$s(s-1) - l(l+1) = 0 \quad (۱۰-۴۹)$$

یعنی $s = l+1$ یا $s = -l$. جوابی که در شرط $u(0) = 0$ صدق می کند، یعنی جوابی که مانند r^{l+1} رفتار می کند، جواب منظم نامیده می شود. جوابی که مانند r^{-l} رفتار می کند جواب

نامنظم است. برای تابع موج $\psi(r)$ www.arsanjan.blogfa.com و جواب نامنظم به صورت r^{-l-1} است.

به ازای مقادیر بزرگ r می توان جمله های پتانسیل را حذف کرد، و معادله به صورت زیر در می آید

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{\mu E}{\hbar^2} u \simeq 0 \quad (50-10)$$

شرط انتگرال پذیری مجذوری ایجاب می کند که

$$\begin{aligned} 1 &= \int d^3 r |\psi(\mathbf{r})|^2 = \int_0^\infty r^2 dr \int d\Omega |R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 \\ &= \int_0^\infty r^2 dr |R_{nl}(r)|^2 \end{aligned} \quad (51-10)$$

یعنی

$$\int_0^\infty dr |u_{nl}(r)|^2 = 1 \quad (52-10)$$

بنابراین، تابع موج باید در بینهایت صفر شود. اگر $E < 0$ ، و در نتیجه

$$\frac{\mu E}{\hbar^2} = -\alpha^2 \quad (53-10)$$

جواب مجانبی به صورت زیر است

$$u(r) \sim e^{-\alpha r} \quad (54-10)$$

اگر $E > 0$ ، جوابهایی که به دست می آوریم تنها در جعبه هنجارپذیر هستند (به بحث مربوط در فصل ۴ مراجعه کنید). با

$$\frac{\mu E}{\hbar^2} = k^2 \quad (55-10)$$

جواب به ازای مقادیر به اندازه کافی بزرگ r به طوری که $V(r)$ قابل چشمپوشی باشد به صورت ترکیبی خطی از e^{-ikr} و e^{ikr} است، و ترکیب مناسب از این شرط تعیین می شود که جواب مجانبی به طور پیوسته به جوابی که در مبدأ منظم است متصل شود. اکنون به بررسی چند مثال می پردازیم.

در این مثال $V(r) = 0$ ، اما هنوز هم یک سد مرکزگریزی وجود دارد. معادله شعاعی $1^\circ-4^\circ$ به صورت زیر درمی آید

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) + k^2 R(r) = 0 \quad (56-1^\circ)$$

با معرفی متغیر $\rho = kr$ به دست می آوریم

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} R + R = 0 \quad (57-1^\circ)$$

یا

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} u + u = 0$$

این معادله به ازای $l = 0$ به صورت $d^2 u/d\rho^2 + u = 0$ درمی آید که جوابهای آن $\sin \rho$ و $\cos \rho$ هستند، یعنی جواب منظم عبارت است از

$$R_0(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho} \quad (58-1^\circ)$$

و جواب نامنظم به صورت زیر است

$$R_0(\rho) = \frac{\cos \rho}{\rho} \quad (59-1^\circ)$$

به ازای مقادیر دیگر l ، جوابها را می توان برحسب توابع ساده ای بیان کرد. جواب منظم تابع بسل کروی است که با رابطه زیر داده می شود

$$j_l(\rho) = (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \left(\frac{\sin \rho}{\rho} \right) \quad (60-1^\circ)$$

و جواب نامنظم که تابع نویمان کروی نامیده می شود به صورت زیر است

$$n_l(\rho) = -(-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \left(\frac{\cos \rho}{\rho} \right) \quad (61-1^\circ)$$

از این توابع چند تای اول را در زیر می آوریم www.arsanjan.blogfa.com

$$\begin{aligned}
 j_0(\rho) &= \frac{\sin \rho}{\rho} & n_0(\rho) &= -\frac{\cos \rho}{\rho} \\
 j_1(\rho) &= \frac{\sin \rho}{\rho^2} - \frac{\cos \rho}{\rho} & n_1(\rho) &= -\frac{\cos \rho}{\rho^2} - \frac{\sin \rho}{\rho} \\
 j_2(\rho) &= \left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right) \sin \rho - \frac{3}{\rho^2} \cos \rho \\
 n_2(\rho) &= -\left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right) \cos \rho - \frac{3}{\rho^2} \sin \rho
 \end{aligned} \quad (62-10)$$

ترکیبهای مناسب برای مقادیر بزرگ ρ عبارت اند از توابع هنکل کروی

$$h_l^{(1)}(\rho) = j_l(\rho) + i n_l(\rho) \quad (63-10)$$

و

$$h_l^{(2)}(\rho) = [h_l^{(1)}(\rho)]^* \quad (64-10)$$

چند تابع هنکل کروی را هم در زیر می نویسیم

$$\begin{aligned}
 h_0^{(1)}(\rho) &= \frac{e^{i\rho}}{i\rho} \\
 h_1^{(1)}(\rho) &= -\frac{e^{i\rho}}{\rho} \left(1 + \frac{i}{\rho} \right) \\
 h_2^{(1)}(\rho) &= \frac{i e^{i\rho}}{\rho} \left(1 + \frac{3i}{\rho} - \frac{3}{\rho^2} \right)
 \end{aligned} \quad (65-10)$$

موارد زیر مخصوصاً قابل توجه اند.

(الف) رفتار در نزدیکی مبدأ: به ازای $\rho \ll l$ به دست می آوریم

$$j_l(\rho) \approx \frac{\rho^l}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdots (2l+1)} \quad (66-10)$$

و

$$n_l(\rho) \simeq -\frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2l-1)}{\rho^{l+1}} \quad (67-10)$$

(ب) به ازای $l \gg \rho$ رابطه‌های مجانبی زیر را به دست می آوریم

$$j_l(\rho) \simeq \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right) \quad (۶۸-۱۰)$$

و

$$n_l(\rho) \simeq -\frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right) \quad (۶۹-۱۰)$$

و در نتیجه

$$h_l^{(1)}(\rho) \simeq -\frac{i}{\rho} e^{i(\rho - l\pi/2)} \quad (۷۰-۱۰)$$

جوابی که در مبدأ منظم است به صورت زیر است

$$R_l(r) = j_l(kr) \quad (۷۱-۱۰)$$

و صورت مجانبی آن، با استفاده از ۶۸-۱۰، عبارت است از

$$R_l(r) \simeq -\frac{1}{2ikr} [e^{-i(kr - l\pi/2)} - e^{i(kr - l\pi/2)}] \quad (۷۲-۱۰)$$

چاه پتانسیل نامتناهی

چاه پتانسیل نامتناهی سه بعدی زیر را در نظر بگیرید

$$\begin{aligned} V(r) &= 0 & r < a \\ &= \infty & r > a \end{aligned} \quad (۷۳-۱۰)$$

در این مورد، با

$$\frac{2\mu E}{\hbar^2} = k^2 \quad (۷۴-۱۰)$$

جوابی که در $r = 0$ منظم است عبارت است از

$$R(r) = A j_l(kr) \quad (۷۵-۱۰)$$

و ویژه‌مقدارها از شرط صفر www.arsanjan.blogfa.com می‌آیند، یعنی از

$$j_l(ka) = 0 \quad (۷۶-۱۰)$$

ریشه‌های این معادله به‌ازای چند مقدار l در جدول زیر نوشته شده‌اند

$l = 0$	۱	۲	۳	۴	۵
۳٫۱۴	۴٫۴۹	۵٫۷۶	۶٫۹۹	۸٫۱۸	۹٫۳۶
۶٫۲۸	۷٫۷۳	۹٫۱۰	۱۰٫۲۴		
۹٫۴۲					

از $۶۸-۱۰$ نتیجه می‌گیریم که به‌ازای مقادیر بزرگ ka (در واقع $ka \gg l$) این ریشه‌ها از $ka \approx n\pi + l\pi/2$ به‌دست می‌آیند.

مجموعه کامل ویژه‌تابه‌های همزمان H ، L^2 و L_z عبارت‌اند از

$$u_{nl}(r) = A j_l(k_{ln}r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (۷۷-۱۰)$$

که در آن k_{nl} ها از $j_l(k_{nl}a) = 0$ به‌دست می‌آیند، و A ضریب بهنجارش است. توجه کنید که به‌ازای هر یک از نامساویهای $n \neq n'$ و $l \neq l'$ داریم

$$\int_0^a d^3r u_{n'l'}(\mathbf{r}) u_{nl}(\mathbf{r}) = 0 \quad (۷۸-۱۰)$$

تعامل نسبت به اعداد کوانتومی l و m به Y_{lm} ها مربوط می‌شود. تعامل نسبت به عدد n ، که ویژه‌مقدارهای مختلف انرژی را به‌ازای مقادیر ثابت l و m متمایز می‌کند، نیز مسلماً باید وجود داشته باشد، و در واقع در بحث توابع بسل داریم

$$\int_0^a dt j_l(\alpha_m t) j_l(\alpha_n t) = 0 \quad m \neq n \quad (۷۹-۱۰)$$

که در آن $j_l(\alpha_n) = 0$. این رابطه هم‌ارز رابطه تعامل توابع شعاعی مربوط به مقادیر مختلف عدد کوانتومی شعاعی n است.

طیف چاه مستطیلی نامتناهی را می‌توان به‌صورت زیر توصیف کرد: اگر به‌ازای یک مقدار معین l ، اولین ریشه را با $n = ۱$ نشانگذاری کنیم، دومین ریشه را با $n = ۲$ ، و غیره، و اگر از

$$S : l = 0$$

$$P : l = 1$$

$$D : l = 2$$

$$F : l = 3$$

$$G : l = 4$$

آنگاه ترتیب ترازها به صورت زیر خواهد بود

$$1S; 1P; 1D; 2S; 1F; 2P; 1G; 2D; 1H; 3S; \dots$$

به عنوان یک الگو، هسته را متشکل از نوترونها و پروتونها در یک چاه نامتناهی می گیریم. چون نوترونها و پروتونها ذراتی با اسپین $1/2$ یعنی فرمیون هستند، بیشتر از دو نوترون و بیشتر از دو پروتون نمی توانند یک حالت معین را اشغال کنند. اگر تنها پروتونها را در نظر بگیریم، می بینیم که در حالت $1S$ تنها دو پروتون می توانند وجود داشته باشند. برای تراز بعدی ($1D$) داریم $l = 1$ ، و در نتیجه سه حالت (متناظر با سه مقدار ممکن m) وجود دارند، و از این رو این تراز با شش پروتون پر می شود. برای تراز $1D$ ، با پنج مقدار ممکن m (زیرا $l = 2$)، ده پروتون برای پر کردن این "پوسته" لازم اند. بدین ترتیب، ترازها وقتی پر می شوند که تعداد پروتونها برابر باشد با $2, 8, (2 + 6) = 18, (2 + 18) = 20, (2 + 18 + 10) = 32, (2 + 18 + 10 + 14) = 44, \dots$ و همچنین است برای نوترونها. بررسی هسته های واقعی نشان می دهد که برای اعداد "جادویی" $2, 8, 20, 28, 50, 82, 126, \dots$ هسته ها ویژگیهای خاصی از خود نشان می دهند که می توان آنها را به ترازهای پر، یعنی پوسته های بسته، نسبت داد. تفاوت میان اعداد "جادویی" واقعی و آنهایی که از الگوی ابتدایی بالا به دست می آیند ناشی از آن است که یک پتانسیل اضافی وابسته به اسپین وجود دارد و این پتانسیل ترازها را کم و بیش جابه جا می کند و از این رو ترتیب اعداد تغییر می کند. الگوی پوسته ای هسته، اگر به طور مناسب ساخته شود، بسیاری از خواص هسته ها را توضیح می دهد.

شاید اینکه در نظر گرفتن هسته ها به صورت ذرات مستقل در یک چاه تقریب خوبی به دست می دهد کمی اسرارآمیز به نظر برسد، چون می دانیم نیروهای بین نوکلئونها بسیار قوی هستند. توضیح در اصل طرد نهفته است. هسته ها در یک چاه از طریق برخورد با یکدیگر برهم کنش می کنند. یک برخورد به طور کلی باعث می شود که نوکلئون به حالت کوانتومی دیگری پراکنده شود. در حالت پایه،

پراکندگی صورت نمی‌گیرد زیرا www.arsanjan.blogfa.com در نتیجه نمی‌توانند به عنوان حالت‌های نهایی قابل دسترسی به کار آیند.
در زیر مثال دیگری را بررسی می‌کنیم که مانسته سه‌بعدی تراکسیل و بازتاب از چاهها یا سدهای یک‌بعدی است.

جوابهای پیوستار برای چاه مربعی

پتانسیل زیر را در نظر بگیرید

$$V(r) = -V_0 \quad r < a$$

$$= 0 \quad r > a \quad (۸۰-۱۰)$$

بنابراین، معادله شعاعی به صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2\mu}{\hbar^2} (V_0 + E) R = 0 \quad r < a$$

(۸۱-۱۰)

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2\mu E}{\hbar^2} R = 0 \quad r > a$$

جواب برای $r > a$ ترکیبی از جوابهای منظم و نامنظم معادله بدون میدان است:

$$R_l(r) = B j_l(kr) + C n_l(kr) \quad (۸۲-۱۰)$$

در حالی‌که جواب برای $r < a$ باید جواب منظم باشد، یعنی

$$R_l(r) = A j_l(\kappa r) \quad (۸۳-۱۰)$$

که در آن، مانند سابق،

$$\kappa^2 = \frac{2\mu(E + V_0)}{\hbar^2} \quad (۸۴-۱۰)$$

از جور کردن $(1/R_l) dR_l/dr$ در $r = a$ داریم

$$\kappa \left[\frac{dj_l(\rho)/d\rho}{j_l(\rho)} \right]_{\rho=\kappa a} = k \left[\frac{B dj_l/d\rho + C dn_l/d\rho}{B j_l(\rho) + C n_l(\rho)} \right]_{\rho=ka} \quad (۸۵-۱۰)$$

که از آن می‌توان C/B را به دست آورد. جواب مجانبی عبارت است از

$$\begin{aligned} R_{nl}(r) &\approx \frac{B}{2ikr} (e^{i(kr-l\pi/2)} - e^{-i(kr-l\pi/2)}) \\ &\quad - \frac{C}{2ikr} (e^{i(kr-l\pi/2)} + e^{-i(kr-l\pi/2)}) \\ &\approx \frac{-C + iB}{2ikr} \left[e^{-i(kr-l\pi/2)} + \frac{C + iB}{C - iB} e^{i(kr-l\pi/2)} \right] \end{aligned} \quad (۸۶-۱۰)$$

ضریب جلوگروشه، غیر از وابستگی لازم $1/r$ ، اهمیتی ندارد زیرا دامنه را شرط بهنجارش تعیین می‌کند. رابطه میان دو تابع نمایی دارای اهمیت فیزیکی است. قبل از هر چیز، متذکر می‌شویم که این دو جمله امواج کروی را نشان می‌دهند که یکی ورودی و دیگری خروجی است. در غیاب پتانسیل داریم $C' = 0$ ، و ضریب موج کروی خروجی 1 می‌شود. در حضور پتانسیل، این ضریب دارای قدرمطلق 1 است، زیرا از $۸۵-۱۰$ می‌توان دید که B/C' حقیقی است. بنابراین،

$$\left| \frac{C + iB}{C - iB} \right|^2 = \frac{1 + iB/C'}{1 - iB/C'} \times \frac{1 - iB/C'}{1 + iB/C'} = 1 \quad (۸۷-۱۰)$$

این ضریب را بنابه قرارداد به صورت زیر می‌نویسیم

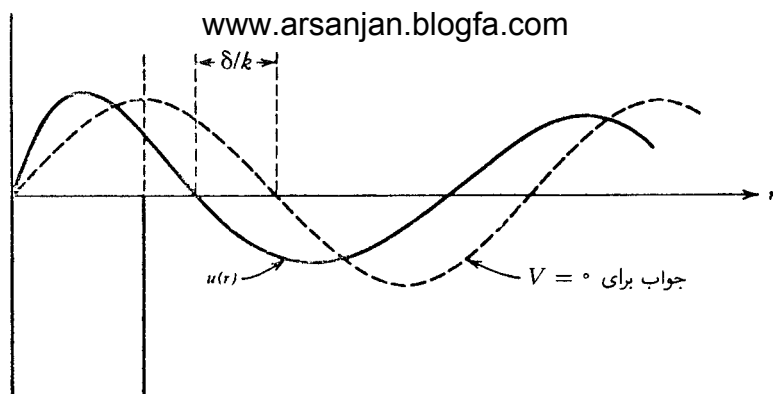
$$\frac{C + iB}{C - iB} \equiv -e^{2i\delta_l(k)} \quad (۸۸-۱۰)$$

(که معادل است با $C'/B = -\tan\delta_l(k)$)، و در نتیجه صورت مجانبی جواب شعاعی $R_{nl}(r)$ عبارت است از

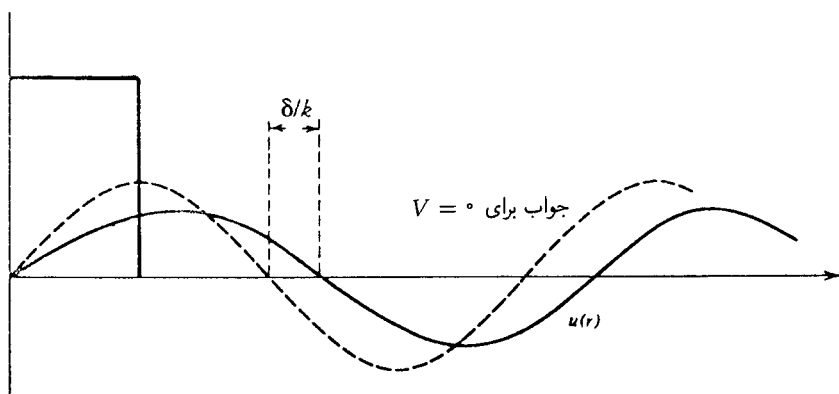
$$R_{nl}(r) \approx \frac{\text{const.}}{r} \sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l(k) \right) \quad (۸۹-۱۰)$$

کمیت $\delta_l(k)$ را به همین دلیل انتقال فاز می‌نامند. در واقع، $۸۹-۱۰$ صورت مجانبی به ازای هر پتانسیل حقیقی است، زیرا مجذور قدرمطلق ضریب موج کروی ورودی باید با مجذور قدرمطلق ضریب موج خروجی برابر باشد. این همان بیان پایستگی شار است: برای یک پتانسیل حقیقی، ذرات نه به وجود می‌آیند و نه پتانسیل آنها را جذب می‌کند.

محاسبه C'/B از $۸۵-۱۰$ بجز برای $l = 0$ عملاً پرهزمت است. همچون در مسئله حالت مقید، استفاده از $u(r) = rR(r)$ محاسبه را تا حد زیادی ساده می‌کند. تنها کافی است $A \sin kr$ را با $B \sin kr + C$ در $r = a$ جور کنیم تا رابطه‌ای برای $\tan \delta_0$ به دست آید.



شکل ۳-۱۰ جواب پیوستار $u(r) = rR(r)$ برای پتانسیل جاذبه (با $l = 0$).



شکل ۴-۱۰ جواب پیوستار $u(r) = rR(r)$ برای پتانسیل دافعه (با $l = 0$).

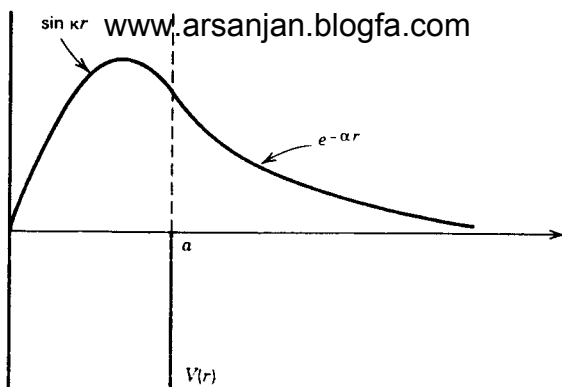
برای این مورد، نمودار کلی نتایج را در شکل‌های ۳-۱۰ و ۴-۱۰ ترسیم کرده‌ایم. این شکل‌ها نشان می‌دهند که پتانسیل جاذبه تمایل دارد تابع موج را "به‌درون بکشد"، در حالی‌که پتانسیل دافعه می‌خواهد آن را "به بیرون براند". در فصل ۴، در بحث نظریه برخورد، به این مطالب باز می‌گردیم.

چاه مربعی، حالت‌های مقید

می‌خواهیم جواب‌های حالت مقید را، که برای آنها $E < 0$ ، به دست آوریم. می‌نویسیم

$$\frac{\mu}{\hbar^2}(V_0 + E) = \kappa^2 \quad (90-10)$$

$$\frac{\mu}{\hbar^2}E = -\alpha^2$$



شکل ۵-۱۰ نمودار کلی تابع موج $u(r) = rR(r)$ برای چاه مربعی جاذبه وقتی تنها یک حالت مقید وجود دارد (با $l = 0$).

جواب در $r < a$ ، که باید در مبدأ منظم باشد، عبارت است از

$$R(r) = A j_l(\kappa r) \quad (91-10)$$

جواب در $r > a$ باید به ازای $r \rightarrow \infty$ صفر شود. معادله دوم ۸۱-۱۰ درست معادله مربوط به این تابع بسل کروی است بجز اینکه $i\alpha$ به جای k می‌نشیند. جوابی که مانند e^{ikr} رفتار می‌کند اکنون نمایی نزولی می‌شود، یعنی برای $r > a$ داریم

$$R(r) = B h_l^{(1)}(i\alpha r) \quad (92-10)$$

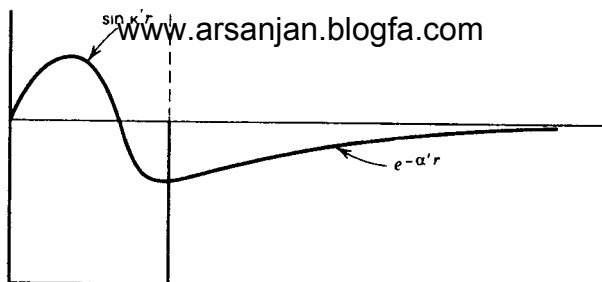
این دو جواب، و همچنین مشتقات آنها، باید در $r = a$ جور شوند. بنابراین، شرط زیر را به دست می‌آوریم

$$\kappa \left[\frac{dj_l(\rho)/d\rho}{j_l(\rho)} \right]_{\rho=\kappa a} = i\alpha \left[\frac{dh_l^{(1)}(\rho)/d\rho}{h_l^{(1)}(\rho)} \right]_{\rho=i\alpha a} \quad (93-10)$$

این یک معادله غیرجبری بسیار پیچیده است که در آن l ، V_0 و E دخیل‌اند. به ازای $l = 0$ مسئله بسیار ساده می‌شود. برحسب $u(r) = rR(r)$ ، باز هم به وضعیتی می‌رسیم که با پتانسیل یک بعدی با $V(x) = \infty$ در $x < 0$ یکسان است. از فصل ۵ (رابطه ۵-۶۹) می‌دانیم که در این مورد تنها به شرطی یک یا چند حالت مقید داریم که

$$\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} > \frac{\pi^2}{4}$$

شکل‌های ۵-۱۰ و ۶-۱۰ توابع موج مربوط به دو حالت مقید اول را به ازای $l = 0$ نشان می‌دهند.



شکل ۶-۱۰ نمودار کلی تابع موج $u(r) = rR(r)$ برای چاه مربعی جاذبه وقتی دو حالت مقید وجود دارند (با $l = 0$). در اینجا تنها تابع موج مربوط به دومین حالت مقید ترسیم شده است.

مسائل

۱-۱۰ تحقیق کنید که P_i , R_i , p_i و r_i در روابط جابه جایی ۷-۱۰ صدق می کنند.
 ۲-۱۰ فرض کنید دوترون (متشکل از یک نوترون و یک پروتون، با جرم مساوی) یک حالت مقید با $l = 0$ است، و پتانسیل یک چاه مربعی به گستره $10^{-12} \text{ cm} \times 28 \text{ MeV}$ است. اگر انرژی بستگی 2.2 MeV باشد، عمق پتانسیل را به دست آورید.

[راهنمایی: حول انرژی بستگی صفر که برای آن V_0 با 41.5 داده می شود بسط دهید].
 ۳-۱۰ انتقال فاز $l = 0$ را برای چاه پتانسیل مربعی محاسبه کنید. با استفاده از روشی که در ۱۰-۸۵ خلاصه شده است، مورد پتانسیل جاذبه و دافعه را به تفصیل بررسی کنید. درباره حدهای مختلف، مانند مقادیر بزرگ و کوچک E ، و مقادیر بزرگ و کوچک V_0 ، بحث کنید.
 ۴-۱۰ نشان دهید برای پراکندگی $l = 0$ از یک چاه مستطیلی با گستره اختیاری و عمق V_0 همواره می توان انتقال فاز را به صورت زیر نوشت

$$k \cot \delta_0 = -\frac{1}{a} + \frac{r_{\text{eff}} k^2}{2} + \dots (k^4)$$

رابطه ای برای a و r_{eff} برحسب پارامترهای چاه به دست آورید.
 ۵-۱۰ یک پتانسیل با صورت اختیاری که به ازای $r \geq a$ صفر می شود در نظر بگیرید. فرض کنید مشتق لگاریتمی تابع شعاعی در داخل چاه، یعنی

$$\frac{1}{R} \frac{dR(r)}{dr} \Big|_{r=a} = f_l(E)$$

برحسب انرژی به کندی تغییر می کند. برای $l = 0$:
 (الف) اگر پتانسیل دارای حالت مقیدی با انرژی E_B باشد، مقدار $f_0(E_B)$ را محاسبه کنید.

(ب) اگر $f_0(E)$ مستقل از E باشد، انتقال فاز را برحسب انرژی به دست آورید.

(ج) اگر $f_0(E) = f_0(E_B) + (E - E_B)f'_0$ ، چگونه در انتقال فاز وارد می شود؟ ساده تر این است که (ب) و (ج) را برحسب $k \cot \delta_0(k)$ حل کنید، و این راه بهتری برای ارائه نتایج است.

۶-۱۰ پتانسیل زیر را در نظر بگیرید

$$V(r) = \infty \quad r < a$$

$$V(r) = 0 \quad r > a$$

انتقال فاز $l = 0$ را محاسبه کنید، و آن را در حد مقادیر بسیار کوچک ka و همچنین در حد مقادیر بسیار بزرگ ka به دست آورید. توجه کنید که این پتانسیل الگویی برای کره نفوذناپذیر است. ۷-۱۰ شرط ویژه مقدار مربوط به یک چاه پتانسیل مربعی به گستره a و عمق V_0 را به ازای $l = 1$ در نظر بگیرید. رابطه ای به دست آورید که از آن بتوانید مقدار V_0 را برای انرژی بستگی صفر تعیین کنید. ۸-۱۰ نشان دهید که برای چاه مربعی وقتی $k \rightarrow 0$ ، داریم

$$k^{2l+1} \cot \delta_l(k) \rightarrow \text{const.}$$

۹-۱۰ شار سه بعدی با رابطه زیر داده می شود

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2i\mu} [\psi^*(\mathbf{r}) \nabla \psi(\mathbf{r}) - \nabla \psi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r})]$$

انتگرال شار شعاعی روی تمام زاویه ها، یعنی $\int d\Omega \mathbf{i}_r \cdot \mathbf{j}$ ، را برای توابع موج

$$\psi(\mathbf{r}) = C \frac{e^{\pm ikr}}{r} Y_{lm}(\theta, \phi)$$

با

$$\int d\Omega |Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 = 1$$

محاسبه کنید، و نشان دهید این توابع به امواج کروی ورودی و یا خروجی مربوط می شوند. ۱۰-۱۰ نشان دهید شار در راستای سمتی، $\mathbf{j} \cdot \mathbf{i}_\theta$ ، در مقایسه با j_r به ازای مقادیر بسیار بزرگ r قابل چشمپوشی است.

۱۰-۱۱ معادله شعاعی $\nabla^2 \psi = 0$ www.jstnar.iut.ac.ir نامیده می‌شود (در نظر بگیرید

$$V(r) = V_0 [e^{-2(r-r_0)/a} - 2e^{-(r-r_0)/a}]$$

ویژه‌مقدارهای انرژی را با ساده کردن معادله دیفرانسیل به دست آورید. این کار را با وارد کردن متغیر جدید $x = Ce^{-r/a}$ انجام دهید که در آن C چنان انتخاب می‌شود که معادله تا حد امکان ساده شود. سپس معادله را به روشی که برای مسئله نوسانگر هماهنگ ساده در فصل ۵ به کار برده شد بررسی کنید. پتانسیل را ترسیم کنید. نشان دهید برای پتانسیل عریض و عمیق حالت‌های مقید پایین تقریباً همان حالت‌های نوسانگر هماهنگ هستند، و علت را توضیح دهید.

مراجع

خواص عمومی معادلات دیفرانسیل مرتبه دوم در زمینه مکانیک کوانتومی در کتاب زیر بررسی شده‌اند.

پاول جی ل و ب کریسمن، مکانیک کوانتومی، ترجمه پاشایی راد و سعادت، تهران، مرکز نشر دانشگاهی، ۱۳۶۸.

بحث جامعی درباره این معادله‌ها را می‌توان در کتاب زیر ملاحظه کرد

P M Morse and H Feshbach, *Methods of Theoretical Physics*, McGraw-Hill, New York, 1953.



تکانه زاویه‌ای

عملگرهای تکانه زاویه‌ای در مختصات کروی

در این فصل ویژه‌مقدارها و ویژه‌تابعهای عملگرهای L_z و L^2 را به دست می‌آوریم. چون تکانه زاویه‌ای دارای ابعاد \hbar است، می‌توان معادله‌های ویژه‌مقداری را به صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} L_z Y_{lm} &= m \hbar Y_{lm} \\ L^2 Y_{lm} &= l(l+1) \hbar^2 Y_{lm} \end{aligned} \quad (۱-۱۱)$$

که در آن m و $l(l+1)$ اعداد حقیقی هستند. مناسب نوشتن ویژه‌مقدار L^2 به این صورت خاص بعداً معلوم خواهد شد. چند روش برای محاسبه وجود دارند. روش مرسوم این است که مؤلفه‌های L را در مختصات کروی بنویسیم. داریم

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \phi \\ y &= r \sin \theta \sin \phi \\ z &= r \cos \theta \end{aligned} \quad (۲-۱۱)$$

$$\begin{aligned}
 dx &= \sin \theta \cos \phi dr + r \cos \theta \cos \phi d\theta - r \sin \theta \sin \phi d\phi \\
 dy &= \sin \theta \sin \phi dr + r \cos \theta \sin \phi d\theta + r \sin \theta \cos \phi d\phi \quad (3-11) \\
 dz &= \cos \theta dr - r \sin \theta d\theta
 \end{aligned}$$

که از حل آنها به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}
 dr &= \sin \theta \cos \phi dx + \sin \theta \sin \phi dy + \cos \theta dz \\
 d\theta &= \frac{1}{r} (\cos \theta \cos \phi dx + \cos \theta \sin \phi dy - \sin \theta dz) \quad (4-11) \\
 d\phi &= \frac{1}{r \sin \theta} (-\sin \phi dx + \cos \phi dy)
 \end{aligned}$$

با استفاده از این معادله‌ها نتیجه می‌گیریم که

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \phi} \\
 &= \sin \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \phi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \\
 \frac{\partial}{\partial y} &= \sin \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \phi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \\
 \frac{\partial}{\partial z} &= \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}
 \end{aligned} \quad (5-11)$$

بنابراین،

$$L_z = \frac{h}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = \frac{h}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (6-11)$$

با معرفی عملگرهای زیر می‌توان دو مؤلفه دیگر تکانه زاویه‌ای را فشرده‌تر بیان کرد

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y \quad (7-11)$$

$$\begin{aligned}
 L_{\pm} &= \frac{h}{i} \left[y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \pm i \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \right] \\
 &= \frac{h}{i} \left[\pm i z \left(\frac{\partial}{\partial x} \pm i \frac{\partial}{\partial y} \right) \mp i (x \pm i y) \frac{\partial}{\partial z} \right] \quad (۸-۱۱) \\
 &= \pm h r \cos \theta \left(\sin \theta e^{\pm i \phi} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta e^{\pm i \phi} \frac{\partial}{\partial \theta} \pm \frac{i e^{\pm i \phi}}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\
 &\mp h r \sin \theta e^{\pm i \phi} \left(\cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right)
 \end{aligned}$$

بنابراین،

$$L_{\pm} = h e^{\pm i \phi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (۹-۱۱)$$

اکنون با استفاده از رابطه

$$\begin{aligned}
 L_+ L_- &= (L_x + i L_y)(L_x - i L_y) \\
 &= L_x^2 + L_y^2 - i [L_x, L_y] \quad (۱۰-۱۱)
 \end{aligned}$$

عملگر L^2 را به صورت زیر به دست می آوریم

$$\begin{aligned}
 L^2 &= L_z^2 + L_+ L_- + i [L_x, L_y] \\
 &= L_+ L_- + L_z^2 - h L_z \quad (۱۱-۱۱)
 \end{aligned}$$

در سطر دوم از ۱۰-۲۴ استفاده کرده ایم. بدین ترتیب، یک عملگر دیفرانسیلی مرتبه دوم شامل θ و ϕ به دست می آید، و اکنون می توانیم به حل معادله های دیفرانسیلی مربوط به ۱۱-۱ بپردازیم. حل این معادله ها در بسیاری از کتابهای درسی مکانیک کوانتومی یا الکتروپدینامیک کلاسیک بیان می شود. در اینجا معادله دوم ۱۱-۱ را به روش جبری حل می کنیم، اما قبل از آن ویژه تابه های L_z را به دست می آوریم.

$$L_z Y_{lm} = m \hbar Y_{lm} \quad (۱۲-۱۱)$$

با استفاده از ۱۱-۶ به صورت زیر درمی آید

$$\frac{\partial}{\partial \phi} Y_{lm}(\theta, \phi) = im Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (۱۳-۱۱)$$

و در نتیجه جواب به صورت $Y_{lm}(\theta, \phi) = \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\phi)$ است، که در آن $\Phi_m(\phi)$ جواب معادله زیر است

$$\frac{d\Phi_m(\phi)}{d\phi} = im \Phi_m(\phi) \quad (۱۴-۱۱)$$

این جواب با شرط بهنجارش

$$\int_0^{2\pi} d\phi |\Phi_m|^2 = 1 \quad (۱۵-۱۱)$$

عبارت است از

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \quad (۱۶-۱۱)$$

گاهی گفته می شود که چون چرخش 360° درجه ای، یعنی تبدیل $\phi \rightarrow \phi + 2\pi$ ، نباید تغییری در دستگاه ایجاد کند لازم است که

$$e^{2\pi im} = 1 \quad (۱۷-۱۱)$$

و در نتیجه m یک عدد درست است. این استدلال کاملاً صحیح نیست، زیرا کمیت هایی که در مشاهده پذیرهای فیزیکی وارد می شوند از نوع $\int_0^{2\pi} d\phi \psi_1^*(\phi) A \psi_2(\phi)$ هستند که در آن توابع موج $\psi(\phi)$ به صورت زیر بیان می شوند

$$\psi(\phi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} C_m \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}} \quad (۱۸-۱۱)$$

اگر بخواهیم این توابع موج اختیاری تحت تبدیل $\phi \rightarrow \phi + 2\pi$ تغییر نکنند (بجز برای یک عامل فاز کلی) به این نتیجه می‌رسیم که کلی‌ترین مقادیر مجاز m عبارت‌اند از $m = \text{عدد درست} + c$ ، که c در اینجا یک مقدار ثابت است. تنها اگر عملگر L_z را بخشی از کل مجموعه (L_x, L_y, L_z) در نظر بگیریم می‌توان چیزی درباره ثابت c گفت. بعداً استدلال خواهیم کرد که ویژه‌مقادیر حول صفر به صورت متقارن توزیع شده‌اند، و در نتیجه $c = 0$ یا $c = 1/2$ ، و برای عملگرهای این فصل تنها مقدار $c = 0$ ، یعنی این شرط که m یک عدد درست است، را می‌پذیریم. معادله ویژه‌مقداری L_z در زمینه دیگری نیز ظاهر می‌شود. یک چرخنده کلاسیک را در نظر بگیرید که در صفحه xy می‌چرخد. اگر گشتاور لختی I باشد، انرژی آن برابر است با

$$E = \frac{L_z^2}{2I} \quad (11-19)$$

و در نتیجه هامیلتونی عبارت است از

$$H = \frac{L_z^2}{2I} \quad (11-20)$$

اما به آسانی می‌توان دید که ویژه‌مقادیرهای این هامیلتونی به صورت زیر هستند

$$E_m = \frac{h^2 m^2}{2I} \quad (11-21)$$

و ویژه‌تابعها عبارت‌اند از $e^{\pm im\phi}$. واگنی وجود دارد، زیرا H با L_z جابه‌جا می‌شود، و به‌ازای یک مقدار معین E_m دو ویژه‌تابع متناظر با دو جهت چرخش وجود دارند. اگر N ذره را با فاصله‌های زاویه‌ای مساوی $2\pi/N$ روی یک دایره به‌طور صلب مستقر کنیم، و اگر این ذرات یکسان باشند، جواب معادله ویژه‌مقداری انرژی

$$H\Phi_E(\phi) = E\Phi_E(\phi) \quad (11-22)$$

باز هم به صورت $e^{\pm i\lambda\phi}$ خواهد بود. این دستگاه فیزیکی تحت چرخش $2\pi/N$ رادیان (یا مضرب درستی از این زاویه) بدون تغییر می‌ماند، و جوابها باید حاکی از این ناوردایی باشند. همان نوع استدلالهایی که نشان می‌دهند m باید یک عدد درست باشد اکنون ایجاب می‌کنند که (عدد درست) $\lambda = N \times$ بنابرین، انرژی برابر است با

$$E = \frac{h^2 (Nm)^2}{2I} \quad (11-23)$$

www.arsanjanblogfa.com عملگرهای افزاینده

اکنون به معادله‌های ۱-۱۱ باز می‌گردیم، و می‌خواهیم ویژه‌مقدارها را به روشی شبیه به مورد نوسانگر هماهنگ در فصل ۷ به دست آوریم. ویژه‌تابعهای عملگرهای هرمیتی L_z و L^2 ، مربوط به ویژه‌مقدارهای مختلف، متعامد هستند، و با بهنجارش مناسب می‌نویسیم

$$\langle Y_{l'm'} | Y_{lm} \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (24-11)$$

از آنجا که

$$\begin{aligned} \langle Y_{lm} | (L_x^2 + L_y^2 + L_z^2) Y_{lm} \rangle &= \langle L_x Y_{lm} | L_x Y_{lm} \rangle + \langle L_y Y_{lm} | L_y Y_{lm} \rangle + m^2 \hbar^2 \\ &\geq 0 \end{aligned} \quad (25-11)$$

نتیجه می‌گیریم که

$$l(l+1) \geq 0 \quad (26-11)$$

عملگرهای L_{\pm} که در ۷-۱۱ معرفی شدند در تحلیل زیر بسیار مفیدند، و خواهیم دید که در واقع عملگرهای افزاینده و کاهنده هستند. قبلاً دیدیم که

$$L^2 = L_+ L_- + L_z^2 - \hbar L_z \quad (27-11)$$

و می‌توان نشان داد که

$$L^2 = L_- L_+ + L_z^2 + \hbar L_z \quad (28-11)$$

از این دو رابطه، و همچنین مستقیماً از ۲۴-۱۰، به دست می‌آوریم

$$[L_+, L_-] = 2\hbar L_z \quad (29-11)$$

سایر رابطه‌های جابه‌جایی مربوط عبارت‌اند از

$$\begin{aligned} [L_+, L_z] &= [L_x + iL_y, L_z] = -i\hbar L_y - \hbar L_x \\ &= -\hbar L_+ \end{aligned} \quad (30-11)$$

$$[L_-, L_z] = \hbar L_- \quad (۳۱-۱۱)$$

همچنین، با توجه به $[L^{\dagger}, L] = 0$ نتیجه می‌گیریم که

$$\begin{aligned} [L^{\dagger}, L_{\pm}] &= 0 \\ [L^{\dagger}, L_z] &= 0 \end{aligned} \quad (۳۲-۱۱)$$

بنابراین، می‌توان نوشت

$$L^{\dagger} L_{\pm} Y_{lm} = L_{\pm} L^{\dagger} Y_{lm} = l(l+1)\hbar^2 L_{\pm} Y_{lm} \quad (۳۳-۱۱)$$

و این نشان می‌دهد که $L_{\pm} Y_{lm}$ نیز ویژه تابعهای L^{\dagger} با ویژه‌مقداری هستند که با l مشخص می‌شود. از طرف دیگر، داریم

$$\begin{aligned} L_z L_+ Y_{lm} &= (L_+ L_z + \hbar L_+) Y_{lm} \\ &= m\hbar L_+ Y_{lm} + \hbar L_+ Y_{lm} \\ &= \hbar(m+1) L_+ Y_{lm} \end{aligned} \quad (۳۴-۱۱)$$

بنابراین، $L_+ Y_{lm}$ نیز ویژه تابع L_z با ویژه‌مقدار $\hbar(m+1)$ است، یعنی به m یک واحد افزوده شده است. به همین ترتیب، می‌توان نشان داد

$$L_z L_- Y_{lm} = \hbar(m-1) L_- Y_{lm} \quad (۳۵-۱۱)$$

پس $L_- Y_{lm}$ ویژه تابع L_z است در حالی که از m یک واحد کاسته شده است. از این رو، L_+ و L_- را به ترتیب عملگرهای افزایشنده و کاهشنده می‌نامیم. می‌توان نوشت

$$L_{\pm} Y_{lm} = C_{\pm}(l, m) Y_{l, m \pm 1} \quad (۳۶-۱۱)$$

با توجه به هرمیتی بودن L_x و L_y داریم

$$L_{\pm}^{\dagger} = (L_x \pm iL_y)^{\dagger} = L_x \mp iL_y = L_{\mp} \quad (۳۷-۱۱)$$

$$\langle L_{\pm} Y_{lm} | L_{\pm} Y_{lm} \rangle \geq 0 \quad (38-11)$$

را به صورت زیر نوشت

$$\langle Y_{lm} | L_{\mp} L_{\pm} Y_{lm} \rangle \geq 0 \quad (39-11)$$

و در نتیجه با استفاده از ۲۷-۱۱ و ۲۸-۱۱ به دست می‌آوریم

$$\langle Y_{lm} | (L_z^2 - L_z \pm \hbar L_z) Y_{lm} \rangle \geq 0 \quad (40-11)$$

که نشان می‌دهد

$$l(l+1) \geq m^2 + m \quad (41-11)$$

$$l(l+1) \geq m^2 - m$$

چون $l(l+1) \geq 0$ ، می‌توانیم بدون نقض کلیت قرار دهیم $l \geq 0$. بنابراین، از ۴۱-۱۱ نتیجه می‌گیریم که

$$-l \leq m \leq l \quad (42-11)$$

اگر m یک مقدار کمینه (m_-) داشته باشد، آنگاه برای ویژه حالت مربوط داریم

$$L_- Y_{lm_-} = 0 \quad (43-11)$$

برای محاسبه m_- از ۲۷-۱۱ را بر اعمال می‌کنیم و به دست می‌آوریم

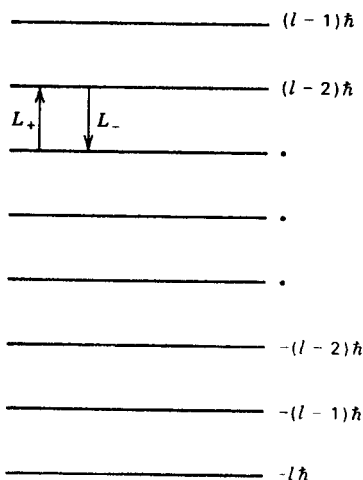
$$l(l+1)\hbar^2 = m_-^2 \hbar^2 - m_- \hbar^2 \quad (44-11)$$

به همین ترتیب، اگر m بیشینه‌ای داشته باشد (m_+) باید

$$L_+ Y_{lm_+} = 0 \quad (45-11)$$

۲. اگر $l+1 \geq 0$ را بگیریم کافی است تعریف کنیم $L = -l-1$ و به جای l قدیمی L مثبت جدید را قرار دهیم. چیزی تغییر نمی‌کند زیرا $L(L+1) = l(l+1)$.

www.arsanjan.blogfa.com



شکل ۱۱-۱ طیف عملگر L_z برای یک مقدار معین l .

و از اعمال ۲۸-۱۱ بر Y_{lm+} به دست می‌آوریم

$$l(l+1)\hbar^2 = m_+^2\hbar^2 + m_+\hbar^2 \quad (۴۶-۱۱)$$

در نتیجه

$$\begin{aligned} m_- &= -l \\ m_+ &= +l \end{aligned} \quad (۴۷-۱۱)$$

چون مقدار بیشینه باید از مقدار کمینه با گامهای واحد (اعمال مکرر L_+) به دست آید، معلوم می‌شود که (شکل ۱۱-۱): (الف) به ازای یک l معین $(2l+1)$ حالت وجود دارند، یعنی $2l+1$ یک عدد درست است. و (ب) m می‌تواند مقادیر زیر را بگیرد

$$m = -l, -l+1, -l+2, \dots, l-1, l$$

امکان نیم فرد بودن l ، یعنی $l = 1/2, 3/2, \dots$ را در فصل ۱۴ در بحث اسپین بررسی می‌کنیم. در این فصل تنها مقادیر درست l را در نظر می‌گیریم.

همچنین می‌توان ضرایب $C_{\pm}(l, m)$ را بدست آورد. می‌نویسیم

$$\begin{aligned} |C_{\pm}(l, m)|^2 \langle Y_{l, m \pm 1} | Y_{l, m \pm 1} \rangle &= \langle L_{\pm} Y_{lm} | L_{\pm} Y_{lm} \rangle \\ &= \langle Y_{lm} | L_{\mp} L_{\pm} Y_{lm} \rangle \\ &= \langle Y_{lm} | \mathbf{L}^2 - L_z^2 \mp \hbar L_z Y_{lm} \rangle \\ &= \hbar^2 [l(l+1) - m(m \pm 1)] \end{aligned}$$

بنابراین، با انتخاب فاز مناسب، به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} C_{+}(l, m) &= \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} = \hbar \sqrt{(l-m)(l+m+1)} \\ C_{-}(l, m) &= \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} = \hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)} \end{aligned} \quad (48-11)$$

هماهنگهای کروی

آنچه را می‌توان از روشهای عملگری به‌دست آورد در بالا گفتیم. اکنون با استفاده از صورت صریح عملگرهای L_z و L_{\pm} رابطه‌های مربوط به ویژه‌تابعهای \mathbf{L}^2 را برحسب زاویه‌های θ و ϕ به‌دست می‌آوریم. این مشابه با مورد $50-7$ تا $53-7$ است. بنابه آنچه قبلاً گفتیم، می‌نویسیم

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \Theta_{lm}(\theta) e^{im\phi} \quad (49-11)$$

و رابطه $45-11$ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\hbar e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \Theta_{ll}(\theta) e^{il\phi} = \hbar e^{i(l+1)\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - l \cot \theta \right) \Theta_{ll}(\theta) = 0 \quad (50-11)$$

به‌سادگی می‌توان دید که جواب این معادله، با تقریب یک ضریب ثابت که آن را بعداً از شرط بهنجارش به‌دست می‌آوریم، عبارت است از

$$\Theta_{ll}(\theta) = (\sin \theta)^l \quad (51-11)$$

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = C(L_-)^{l-m}(\sin \theta)^l e^{il\phi} \quad (52-11)$$

ابتدا می‌نویسیم

$$\begin{aligned} L_- Y_{lm}(\theta, \phi) &= \hbar e^{-i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) (\sin \theta)^l e^{il\phi} \\ &= \hbar e^{i(l-1)\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} - l \cot \theta \right) (\sin \theta)^l \end{aligned}$$

اما برای یک تابع اختیاری $f(\theta)$ می‌توان نشان داد

$$\left(\frac{d}{d\theta} + l \cot \theta \right) f(\theta) = \frac{1}{(\sin \theta)^l} \frac{d}{d\theta} [(\sin \theta)^l f(\theta)] \quad (53-11)$$

و در نتیجه داریم

$$Y_{l,l-1} = C' \frac{e^{i(l-1)\phi}}{(\sin \theta)^l} \left(-\frac{d}{d\theta} \right) [(\sin \theta)^l (\sin \theta)^l] \quad (54-11)$$

مرحله بعد نیز از همین قرار است، بجز اینکه به جای l می‌گذاریم $l-1$ و ۵۳-۱۱ را بر ۵۴-۱۱ اعمال می‌کنیم:

$$\begin{aligned} Y_{l,l-2} &= C'' \frac{e^{i(l-2)\phi}}{(\sin \theta)^{l-1}} \left(-\frac{d}{d\theta} \right) \left[(\sin \theta)^{l-1} \frac{1}{(\sin \theta)^l} \left(-\frac{d}{d\theta} \right) (\sin \theta)^{2l} \right] \\ &= C'' (-1)^2 \frac{e^{i(l-2)\phi}}{(\sin \theta)^{l-1}} \frac{d}{d\theta} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} (\sin \theta)^{2l} \right] \quad (55-11) \end{aligned}$$

با وارد کردن متغیر جدید $u = \cos \theta$ داریم $u = \cos \theta$ ، $-1/(\sin \theta)(d/d\theta) = d/du$ و رابطه‌های ۵۴-۱۱ و ۵۵-۱۱ به صورت زیر درمی‌آیند

$$\begin{aligned} Y_{l,l-1} &= C' \frac{e^{i(l-1)\phi}}{(\sin \theta)^{l-1}} \frac{d}{du} [(1-u^2)^l] \\ Y_{l,l-2} &= C'' \frac{e^{i(l-2)\phi}}{(\sin \theta)^{l-2}} \frac{d^2}{du^2} [(1-u^2)^l] \end{aligned} \quad (56-11)$$

رابطه کلی عبارت است از www.arsanjan.blogfa.com

$$Y_{lm} = C \frac{e^{im\phi}}{(\sin \theta)^m} \left(\frac{d}{du} \right)^{l-m} [(\mathbf{1} - u^2)^l] \quad (57-11)$$

ویژه‌تابعها را باید بهنجار کنیم. چون با زاویه‌های کروی کار می‌کنیم، که گستره انتگرال‌گیری روی آنها $0 \leq \phi \leq 2\pi$ و $0 \leq \theta \leq \pi$ است (شکل ۱-۱۰)، و در اینجا انتگرال روی سطح کره (با $r = \text{const}$) عبارت است از

$$\int d\Omega = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \quad (58-11)$$

باید بنویسیم

$$\langle Y_{lm} | Y_{lm} \rangle = \mathbf{1} = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-\mathbf{1}}^{\mathbf{1}} du |C|^2 \left[\frac{\mathbf{1}}{(\mathbf{1} - u^2)^{m/2}} \left(\frac{d}{du} \right)^{l-m} (\mathbf{1} - u^2)^l \right]^2$$

محاسبه این انتگرال پرزحمت است، و به نوشتن ویژه‌تابعهای بهنجارشده، با فازهایی که بتابه قرارداد به‌کار می‌روند، بسنده می‌کنیم: به‌ازای $m \geq 0$ داریم

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = (-\mathbf{1})^m \left[\frac{2^l + l}{2\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{1/2} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (59-11)$$

علاوه بر این،

$$Y_{l,-m} = (-\mathbf{1})^m Y_{lm}^* \quad (60-11)$$

چندجمله‌ایهای لژاندر وابسته (به‌ازای $m \geq 0$) با رابطه زیر داده می‌شوند

$$P_l^m(u) = (-\mathbf{1})^{l+m} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \frac{(\mathbf{1} - u^2)^{-m/2}}{2^l l!} \left(\frac{d}{du} \right)^{l-m} (\mathbf{1} - u^2)^l \quad (61-11)$$

و برای مقادیر منفی m داریم

$$P_l^{-m}(u) = (-\mathbf{1})^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(u) \quad (62-11)$$

$$Y_{ll}(\theta, \phi) = K (\sin \theta)^l e^{il\phi}$$

که در آن K مقداری ثابت است. بنابراین، توزیع احتمال برحسب زاویه قطبی نسبت به محور z به صورت زیر است

$$|Y_{ll}|^2 = K^2 (\sin \theta)^{2l} \quad (۶۳-۱۱)$$

مشاهده می‌کنیم که برای مقادیر بزرگ l این تابع تقریباً به صفحه استوایی محدود است. در واقع، بیشترین مقدار L_z به ازای $m = l$ روی می‌دهد، و از این رو $L_z^2 \approx L^2$. در حد کلاسیک، که در آن $l \gg 1$ داریم

$$\frac{L_z^2 - L^2}{L^2} = \frac{1}{l} \rightarrow 0 \quad (۶۴-۱۱)$$

یعنی می‌توان تکانه زاویه‌ای را در یک راستای خاص (در اینجا محور z) قرار داد. این هم راستایی متناظر است با اینکه $\langle L_x^2 \rangle = \langle L_y^2 \rangle = 0$ ، که وقتی اثرات مکانیک کوانتومی مهم می‌شوند غیرممکن است (به علت رابطه‌های جابه‌جایی).

چند ویژه تابع را در زیر می‌نویسیم

$$\begin{aligned} Y_{0,0} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ Y_{1,1} &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{i\phi} \sin \theta \\ Y_{1,0} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\ Y_{2,2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} e^{2i\phi} \sin^2 \theta \\ Y_{2,1} &= -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} e^{i\phi} \sin \theta \cos \theta \\ Y_{2,0} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) \end{aligned} \quad (۶۵-۱۱)$$

$Y_{lm}(\theta, \phi)$ ها که توابع راست‌هنجاری از θ و ϕ هستند یک مجموعه کامل تشکیل می‌دهند. بنابراین، در اینجا قضیه بسط ایجاب می‌کند که هر تابعی از θ و ϕ را بتوان به صورت زیر بسط داد

$$f(\theta, \phi) = \sum \sum C_{lm} Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (۶۶-۱۱)$$

که در آن

$$C_{lm} = \int d\Omega Y_{lm}^*(\theta, \phi) f(\theta, \phi) \quad (۶۷-۱۱)$$

وانتگرال‌گیری روی زاویه فضایی با ۵۸-۱۱ تعریف می‌شود. همچنین بنابه قضیه بسط اگر $f(\theta, \phi)$ تابع موج زاویه‌ای یک حالت باشد که به صورت زیر بهنجار شده است

$$\int d\Omega |f(\theta, \phi)|^2 = ۱ \quad (۶۸-۱۱)$$

آنگاه $|C_{lm}|^2$ احتمال این است که از اندازه‌گیری همزمان L_z و L^2 در این حالت به ترتیب $m\hbar$ و $l(l+1)\hbar^2$ به دست آید.

احتمال به دست آمدن $l(l+1)\hbar^2$ از اندازه‌گیری L^2 عبارت است از

$$P(l) = \sum_{m=-l}^l |C_{lm}|^2 \quad (۶۹-۱۱)$$

و به سادگی می‌توان دید که مقدار انتظاری L_z برابر است با

$$\langle L_z \rangle = \sum_l \sum_{m=-l}^l m\hbar |C_{lm}|^2 \quad (۷۰-۱۱)$$

قضیه بسط ۶۶-۱۱ را با نمادنگاری مجرد زیر در نظر بگیرید

$$|\psi\rangle = \sum_{l,m} C_{lm} |Y_{lm}\rangle \quad (۷۱-۱۱)$$

با توجه به شرط راست‌هنجاری

$$\langle Y_{l'm'} | Y_{lm} \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (۷۲-۱۱)$$

$$C_{lm} = \langle Y_{lm} | \psi \rangle \quad (۷۳-۱۱)$$

۷۱-۱۱ با جاگذاری ۷۳-۱۱ به صورت زیر درمی‌آید

$$|\psi\rangle = \sum_l \sum_{m=-l}^l |Y_{lm}\rangle \langle Y_{lm} | \psi \rangle$$

بنابراین، باید

$$\sum_l \sum_{m=-l}^l |Y_{lm}\rangle \langle Y_{lm}| = ۱ \quad (۷۴-۱۱)$$

که در آن ۱ عملگر واحد است.

با استفاده از قضیه بسط می‌توان به این پرسش که اغلب مطرح می‌شود پاسخ داد: راستای \hat{z} چه ویژگی خاصی دارد؟ آیا نمی‌توان تکانه زاویه‌ای را (تا جایی که ممکن است) با محور x هم‌راستا کرد؟ پاسخ این است که این کار واقعاً امکان‌پذیر است. چنین حالتی، که باید در نزدیکی صفحه استوایی حول محور x (در مجاورت $\phi = \pi/2$) محدود باشد، یک ترکیب خطی خاص از Y_{lm} ها خواهد بود، و خواص فیزیکی آن دقیقاً همان خواص حالت Y_{ll} است.

موج تخت برحسب هماهنگ‌های کروی

جواب معادله ذره آزاد

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + k^2 \psi(\mathbf{r}) = 0$$

را می‌توان به دو صورت نوشت. یک صورت این جواب همان جواب موج تخت است:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (۷۵-۱۱)$$

راه دیگر این است که آن را به صورت یک برهم‌نهشی خطی از جوابهای پاره‌موجی بنویسیم:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_l \sum_m A_{lm} j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (۷۶-۱۱)$$

بنابراین، می‌توان A_{lm} را از www.arsanjan.blogfa.com به دست آورد. توجه کنید که زاویه‌های کروی θ و ϕ مختصات بردار \mathbf{r} نسبت به یک راستای اختیاری هستند که آن را محور z می‌گیریم. اگر این محور z را با جهت \mathbf{k} (که تا اینجا یک جهت اختیاری است) تعریف کنیم آنگاه می‌توان نوشت

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = e^{ikr \cos \theta} \quad (۷۷-۱۱)$$

بنابراین، سمت چپ ۷۶-۱۱ تابع زاویه سمتی ϕ نیست و از این رو در سمت راست تنها جمله‌هایی با $m = 0$ می‌توانند ظاهر شوند؛ در نتیجه، با استفاده از

$$Y_l(\theta, \phi) = \left(\frac{2l+1}{4\pi} \right)^{1/2} P_l(\cos \theta) \quad (۷۸-۱۱)$$

که در آن $P_l(\cos \theta)$ چندجمله‌ای لژاندر است، به دست می‌آوریم

$$e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{2l+1}{4\pi} \right)^{1/2} A_l j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (۷۹-۱۱)$$

با توجه به رابطه

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) = \frac{\delta_{ll'}}{2l+1} \quad (۸۰-۱۱)$$

که پیامد مستقیم رابطه راست‌هنجاری برای Y_{lm} ها و ۷۸-۱۱ است، نتیجه می‌گیریم که

$$A_l j_l(kr) = \frac{1}{4} [4\pi(2l+1)]^{1/2} \int_{-1}^1 dz P_l(z) e^{ikrz} \quad (\text{الف } ۸۱-۱۱)$$

دو طرف این معادله را در حد $kr \rightarrow 0$ با هم مقایسه می‌کنیم. جمله طرف چپ عبارت است از

$$A_l \frac{(kr)^l}{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \dots \cdot (2l+1)}$$

و در طرف راست، جمله شامل $(kr)^l$ به صورت زیر است

$$\frac{1}{4} [4\pi(2l+1)]^{1/2} (ikr)^l \int_{-1}^1 dz P_l(z) z^l / l! \quad (\text{ب } ۸۱-۱۱)$$

انتگرال را می‌توان با توجه به اینکه $P_l(z)$ یک چندجمله‌ای درجه l برحسب z است محاسبه کرد. ضریب جمله مربوط به بزرگترین توان، z^l ، با استفاده از ۱۱-۶۱ به دست می‌آید

$$(-1)^l \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dz} \right)^l (1 - z^2)^l = \frac{2l(2l-1)(2l-2) \cdots (l+1)}{2^l l!} z^l + O(z^{l-2})$$

بنابراین، چون طرف چپ همان $P_l(z)$ است و $O(z^{l-2})$ شامل $P_{l-2}(z)$ ، $P_{l-4}(z)$ ، ... است، داریم

$$z^l = \frac{2^l l!}{2l(2l-1)(2l-2) \cdots (l+1)} P_l(z) + \text{جمله‌های شامل } P_{l-2}(z) \text{ و ماقبل}$$

با جاگذاری در ۱۱-۸۱ ب و استفاده از ۱۱-۸، سرانجام به دست می‌آوریم

$$A_l \frac{(kr)^l}{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2l+1)} = \frac{1}{2} [4\pi(2l+1)]^{1/2} (ikr)^l \frac{1}{l!} \frac{2^l l!}{2l(2l-1)(2l-2) \cdots (l+1)} \frac{2}{2l+1}$$

با تعیین A_l ، بسط ۱۱-۷۹ به صورت زیر درمی‌آید

$$e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (11-82)$$

که در بحث نظریه برخورد بسیار مفید است.

مسائل

۱۱-۱ یک مولکول از دو اتم یکسان تشکیل شده است که هر یک در حالت پایه خود دارای اسپین ۰ است. در میان برانگیختگیهای ممکن این مولکول، برانگیختگیهای چرخشی را در نظر می‌گیریم. اگر این چرخش تنها حول محور z باشد، به طوری که $H = L_z^2/2I$ ، و فاصله بین اتمها را ثابت بگیریم، طیف چرخشی را به دست آورید. اگر اسپین اتمها $1/2$ باشد و هر دو اتم در یک حالت اسپینی باشند، طیف به چه صورتی درمی‌آید؟

۱۱-۲ هماهنگهای کروی در ۱۱-۶۵ را برحسب $x = r \sin \theta \cos \phi$ ، $y = r \sin \theta \sin \phi$ و $z = r \cos \theta$ بیان کنید.

$$\langle Y_{lm_1} | L_x | Y_{lm_2} \rangle \text{ و } \langle Y_{lm_1} | L_y | Y_{lm_2} \rangle \text{ را محاسبه کنید.} \quad ۳-۱۱$$

$$\langle Y_{lm_1} | L_x^2 | Y_{lm_2} \rangle \text{ و } \langle Y_{lm_1} | L_y^2 | Y_{lm_2} \rangle \text{ را محاسبه کنید.} \quad ۴-۱۱$$

[راهنمایی: با استفاده از ۳۶-۱۱ و ۴۸-۱۱، $\langle Y_{lm_1} | L_+^2 | Y_{lm_2} \rangle$ و کمیت‌های لازم دیگر را محاسبه کنید.]

۵-۱۱ هامیلتونی یک چرخنده با تقارن محوری با رابطه زیر داده می‌شود

$$H = \frac{L_x^2 + L_y^2}{2I_1} + \frac{L_z^2}{2I_2}$$

ویژه‌مقدارهای H را به دست آورید. طیف را با فرض $I_1 > I_2$ ترسیم کنید.

۶-۱۱ ثابت کنید $\langle L_x^2 \rangle = \langle L_y^2 \rangle = 0$ فقط برای حالتی با تکانه زاویه‌ای کل $l = 0$ ممکن است. [راهنمایی: از رابطه کاملیت]

$$\sum \sum |Y_{lm}\rangle \langle Y_{lm}| = 1$$

[استفاده کنید.]

۷-۱۱ اگر محور کوانتش در راستای x باشد، یعنی L_x عملگر برگزیده باشد، می‌توان نقطه \mathbf{r} را با زاویه‌های Θ و Φ تعریف کرد که به ترتیب عبارت‌اند از زاویه‌ای که بردار مکان \mathbf{r} با محور x می‌سازد و زاویه‌ای که تصویر \mathbf{r} روی صفحه yz (عمود بر محور x) با محور y می‌سازد. هماهنگی‌های کروی را در این مورد با $Y_{LM}(\Theta, \Phi)$ نشان می‌دهیم، و اینها را می‌توان برحسب $Y_{lm}(\theta, \phi)$ ‌ها بسط داد:

$$Y_{LM}(\Theta, \Phi) = \sum_l \sum_m C_{lm}(L, M) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

(الف) Θ و Φ را برحسب θ و ϕ به دست آورید.

(ب) تابع موج مربوط به $M = L$ را در نظر بگیرید، و خواص $C_{lm}(L, L)$ را تا جایی که می‌توانید تعیین کنید.

۸-۱۱ صورت صریح هماهنگی‌های کروی بهنجار شده $l = 3$ ، Y_{30} ، Y_{31} ، Y_{32} ، Y_{33} را به دست آورید.

۹-۱۱ با استفاده از روشی که در این فصل به اختصار بیان شد، درباره چرخش در چهار بعد بحث کنید. تعمیم L در اینجا عبارت است از مجموعه عملگرهایی که می‌توان آنها را به صورت زیر نوشت

$$L_{ij} = -i(x_i \partial_j - x_j \partial_i)$$

که در آن ∂_i نشانه‌دهنده $\partial/\partial x_i$ است، و ℓ و $j = 1, 2, 3$ با وارد کردن

$$(J_1, J_2, J_3) = (L_{23}, L_{31}, L_{12})$$

و

$$(K_1, K_2, K_3) = (L_{14}, L_{24}, L_{34})$$

(الف) رابطه‌های جابه‌جایی تمام این شش عملگر را بین خودشان به دست آورید.
(ب) نشان دهید هر یک از عملگرهای

$$J^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(J + K); \quad J^{(-)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(J - K)$$

از رابطه‌های جابه‌جایی عملگر تکانه زاویه‌ای پیروی می‌کنند و با یکدیگر جابه‌جا می‌شوند. با استفاده از نتیجه نهایی، بزرگترین مجموعه مشاهده‌پذیرهای جابه‌جا شونده را به دست آورید، و از اینجا اعداد کوانتومی را که باید برای نشانگذاری ویژه‌تابعها به کار برده شوند تعیین کنید.

۱۱-۱۰ ذره‌ای در یک پتانسیل متقارن کروی در حالتی است که با بسته موج زیر توصیف می‌شود

$$\psi(x, y, z) = C(xy + yz + zx)e^{-\alpha r}$$

احتمال اینکه از اندازه‌گیری مجذور تکانه زاویه‌ای مقدار α به دست آید چقدر است؟ احتمال به دست آمدن $6\hbar^2$ را تعیین کنید. اگر معلوم شود که l برابر با ۲ است، احتمالهای نسبی مربوط به $m = 2, 1, 0, -1, -2$ را محاسبه کنید.

۱۱-۱۱ الگوی زیر را برای یک استوانه کاملاً هموار در نظر بگیرید: این حلقه‌ای است به شعاع R متشکل از ذرات یکسان هم‌فاصله به جرم M/N ، و در نتیجه جرم حلقه M و گشتاور لختی آن MR^2 است. مقادیر ممکن تکانه زاویه‌ای و ویژه‌مقدارهای انرژی را محاسبه کنید. اختلاف انرژی بین حالت پایه با تکانه زاویه‌ای صفر و اولین حالت برانگیخته چقدر است؟ نشان دهید که این تقاضل به‌ازای $N \rightarrow \infty$ به بینهایت میل می‌کند. این نتیجه را با انرژی یک استوانه "دندانه‌ای" فاقد تقارن تحت چرخش $2\pi/N$ رادیان است، مقایسه کنید. این مثال نشان می‌دهد که به چرخش درآوردن یک استوانه کاملاً هموار غیرممکن است، و این نتیجه سازگار با این واقعیت است که برای استوانه کاملاً هموار چنین چرخشی غیرقابل مشاهده است.

۱۲-۱۱ L^2 را برحسب $\partial/\partial\theta$ و $\partial/\partial\phi$ بیان کنید. معادله دیفرانسیل حاکم بر Θ_{lm} را که در ۱۱-۴۹ وارد شده است بنویسید.

www.arsanjan.blogfa.com

مطالب این فصل را می‌توان در هر یک از کتابهایی که در کتابشناسی معرفی شده‌اند پیدا کرد. برای نگاهی عمیق‌تر به پیامدهای ناوردایی تحت چرخش، مخصوصاً مراجعه کنید به

K Gottfried, *Quantum Mechanics*, Vol 1, W A Benjamin, New York, 1966.

M E Rose, *Elementary Theory of Angular Momentum*, John Wiley & Sons, New York, 1957.

۱۲

اتم هیدروژن

اتم هیدروژن از همه اتمها ساده تر است، زیرا بیش از یک الکترون ندارد. بنابراین، معادله شرودینگر پس از جدا کردن حرکت مرکز جرم یک معادله تک ذره ای می شود. اتمهای هیدروژن گونه را در نظر می گیریم، یعنی اتمهایی که تنها یک الکترون دارند اما هسته های آنها می توانند بیشتر از یک پروتون داشته باشند. بنابراین، پتانسیل عبارت است از

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad (۱-۱۲)$$

و معادله شرودینگر شعاعی به صورت زیر است

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) R + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] R = 0 \quad (۲-۱۲)$$

تنها حالت های مقید، یعنی جواب های مربوط به $E < 0$ ، را بررسی می کنیم با استفاده از تعویض متغیر مناسب

$$\rho = \left(\frac{2\mu |E|}{\hbar^2} \right)^{1/2} r \quad (۳-۱۲)$$

معادله به صورت زیر درمی آید www.arsanjan.blogfa.com

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} R + \left(\frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} \right) R = 0 \quad (4-12)$$

که در آن پارامتر بی بعد λ عبارت است از

$$\lambda = \frac{Z e^2}{h} \left(\frac{\mu}{2|E|} \right)^{1/2} = Z \alpha \left(\frac{\mu c^2}{2|E|} \right)^{1/2} \quad (5-12)$$

صورت دوم معادله برای محاسبه ساده تر است، زیرا $\alpha = 1/137$ و انرژی برحسب جرم سکون بیان شده است؛ اما صورت اول به روشنی نشان می دهد که سرعت نور c واقعاً در معادله شروند ظاهر نمی شود، یعنی این معادله دقیقاً یک معادله غیرنسبیتی است.

طیف انرژی

معادله ۴-۱۲ را به روشی که دیگر با آن آشنا هستیم حل می کنیم. ابتدا رفتار مجانبی آن را تعیین می کنیم. به ازای مقادیر بزرگ ρ ، معادله به صورت زیر درمی آید

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} - \frac{1}{4} R \simeq 0 \quad (6-12)$$

که جواب آن، با رفتار مناسب در بینهایت، به صورت $R \sim e^{-\rho/2}$ است. مانند مورد نوسانگر هماهنگ، می نویسیم

$$R(\rho) = e^{-\rho/2} G(\rho) \quad (7-12)$$

در ۴-۱۲ جاگذاری می کنیم و معادله مربوط به $G(\rho)$ را به دست می آوریم. پس از عملیات ریاضی لازم، به معادله زیر می رسیم

$$\frac{d^2 G}{d\rho^2} - \left(1 - \frac{2}{\rho} \right) \frac{dG}{d\rho} + \left[\frac{\lambda - 1}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] G = 0 \quad (8-12)$$

اکنون $G(\rho)$ را به صورت بسط توانی زیر می نویسیم

$$G(\rho) = \rho' \sum_{n=0}^{\infty} a_n \rho^n \quad (9-12)$$

این واقعیت که $R(\rho)$ و در نتیجه $G(\rho)$ در مبدأ مانند ρ^l رفتار می‌کنند در فصل ۱۰ برای تمام پتانسیلهای صادق در ۱۰-۴۱ اثبات شد. با جاگذاری ۱۲-۹ در معادله دیفرانسیل، رابطه‌ای میان ضرایب مختلف a_n به دست می‌آوریم. این رابطه بازگشتی از معادله دیفرانسیل حاکم بر

$$H(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \rho^n \quad (10-12)$$

به دست می‌آید، که عبارت است از

$$\frac{d^2 H}{d\rho^2} + \left(\frac{2l+2}{\rho} - 1 \right) \frac{dH}{d\rho} + \frac{\lambda - 1 - l}{\rho} H = 0 \quad (11-12)$$

در واقع، با جاگذاری $G(\rho) = \rho^l H(\rho)$ در ۱۲-۸ داریم

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left[n(n-1)a_n \rho^{n-2} + na_n \rho^{n-1} \left(\frac{2l+2}{\rho} - 1 \right) + (\lambda - 1 - l)a_n \rho^{n-1} \right] = 0 \quad (12-12)$$

یا

$$\sum_{n=0}^{\infty} \{ (n+1)[na_{n+1} + (2l+2)a_{n+1}] + (\lambda - 1 - l - n)a_n \} \rho^{n-1} = 0$$

چون ضرایب توانهای مختلف ρ باید صفر باشند، رابطه بازگشتی زیر به دست می‌آید

$$\frac{a_{n+1}}{a_n} = \frac{n+l+1-\lambda}{(n+1)(n+2l+2)} \quad (13-12)$$

به ازای مقادیر بزرگ n این رابطه تبدیل می‌شود به

$$\frac{a_{n+1}}{a_n} \simeq \frac{1}{n} \quad (14-12)$$

و، مانند مورد مسئله نوسانگر هماهنگ، می‌توان نشان داد جوابی که در بینهایت خوشرفتار باشد به دست نمی‌آید مگر اینکه رشته ۱۲-۹ قطع شود. یعنی برای یک مقدار معین l ، به ازای یک n که آن را با n_r نشان می‌دهیم باید داشته باشیم

$$\lambda = n_r + l + 1 \quad (15-12)$$

$$n = n_r + l + 1 \quad (۱۶-۱۲)$$

از این واقعیت که $n_r \geq 0$ نتیجه می‌گیریم که

$$n \geq l + 1 \quad (۱)$$

(۲) n یک عدد درست است

(۳) رابطه

$$\lambda = n \quad (۱۷-۱۲)$$

ایجاب می‌کند که

$$E = -\frac{1}{2}\mu c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2}$$

که از الگوی قدیمی بور با آن آشنا هستیم. توجه کنید که در این رابطه جرم کاهیده ظاهر می‌شود؛ البته این نتیجه منحصر به رهیافت معادله دیفرانسیلی نیست. در نظریه قدیمی بور نیز می‌توان با بررسی مناسب مدارهای کلاسیک، با شرط کوانتیده بودن تکانه زاویه‌ای، جرم کاهیده را در فرمول انرژی وارد کرد. وجود جرم کاهیده

$$\mu = \frac{mM}{m+M} \quad (۱۸-۱۲)$$

که در آن m جرم الکترون و M جرم هسته است، به معنای این است که بسامدهای

$$\omega_{ij} = \frac{E_i - E_j}{h} = \frac{mc^2/2h}{1 + m/M} (Z\alpha)^2 \left(\frac{1}{n_j^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad (۱۹-۱۲)$$

برای اتمهای هیدروژن گونه مختلف اندکی متفاوت هستند. مخصوصاً، تفاوت میان طیف هیدروژن و طیف دوتریم که در آن M بسیار نزدیک به دو برابر جرم پروتون است—باعث شد که یوری در سال ۱۹۳۲ دوتریم را کشف کند.

واگنی طیف

اکنون واگنی طیف انرژی را بررسی می‌کنیم. در حالت پایه، یعنی وقتی $\lambda = 1$ ، باید داشته باشیم $n_r = 0$ و $l = 0$. تنها یک حالت پایه وجود دارد. به‌ازای $\lambda = 2$ ، دو امکان وجود دارند: (۱) $n_r = 1$ و $l = 0$. در اینجا با نوشتن ۱۲-۱۳ به‌صورت

$$\frac{a_{n+1}}{a_n} = \frac{n - n_r}{(n+1)(n+2l+2)} \quad (20-12)$$

دیده می‌شود که $a_1/a_0 = -1/(1 \times 2)$ و در نتیجه

$$H(\rho) = a_0 (1 - \rho/2) \quad (21-12)$$

در حالی‌که توزیع زاویه‌ای تقارن کروی دارد. (۲) $n_r = 0$ و $l = 1$. در اینجا تابع موج شعاعی ثابت است: $H(\rho) = a_0$ ، اما قسمت زاویه‌ای تابع موج حاوی $Y_{lm}(\theta, \phi)$ است. واگنی $(2l+1)$ است، و در نتیجه سه حالت از این نوع وجود دارند. واگنی کل به‌ازای $\lambda = n = 2$ برابر است با $2^2 = 4 = 1 + 3$.

به‌ازای $\lambda = 3$ ، سه امکان وجود دارند: (۱) $n_r = 2$ و $l = 0$. در اینجا یک حالت با $a_1/a_0 = -1/6$ و $a_2/a_1 = -1/6$ داریم، و در نتیجه

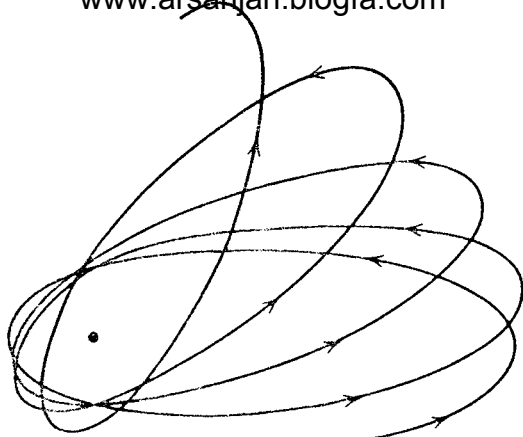
$$H(\rho) = a_0 \left(1 - \rho + \frac{1}{6}\rho^2 \right) \quad (22-12)$$

(۲) $n_r = 1$ و $l = 1$ و سه حالت با $H(\rho) = a_0 (1 - \rho/4)$ داریم. (۳) $n_r = 0$ و $l = 2$ که تعداد حالت‌های آن برابر است با $5 = (2l+1)$ ، و در اینجا $H(\rho) = a_0$. بدین ترتیب، $1 + 3 + 5 = 9 = 3^2$ حالت واگن با ویژه‌مقدار $\lambda = n = 3$ وجود دارند. به‌طور کلی، واگنی برای $\lambda = n$ برابر است با

$$1 + 3 + 5 + \dots + [2(n-1) + 1] = n^2 \quad (23-12)$$

از پیش انتظار داریم که برای پتانسیل شعاعی واگنی $(2l+1)$ باشد، زیرا هامیلتونی شعاعی تنها به L^2 بستگی دارد و مستقل از L_z است. اما یک واگنی اضافی وجود دارد. این واگنی خاص مشخصه پتانسیل $1/r$ است. اگر این پتانسیل کولنی را با افزودن یک جمله به‌صورت زیر تغییر دهیم

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{g^2}{r^2} \quad (24-12)$$



شکل ۱۲-۱ مدار برای پتانسیلی که دقیقاً به صورت $1/r$ نیست روی خودش بسته نمی‌شود بلکه دارای حرکت تقدیمی است. اگر پتانسیل شعاعی باشد مدار هامنای باقی می‌ماند.

معادله شعاعی بدون تغییر می‌ماند، بجز اینکه به جای $l(l+1)/r^2$ اکنون داریم $l^*(l^*+1)/r^2$ که در آن $l^*(l^*+1) = l(l+1) + g^2$ یعنی $l^* = -1/2 + \sqrt{(l+1/2)^2 + g^2}$. این تغییر باعث می‌شود انرژی به صورت زیر درآید

$$E = -\frac{1}{4}\mu c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{[n_r + 1/2 + \sqrt{(l+1/2)^2 + g^2}]^2} \quad (12-25)$$

که، به عنوان مثال، برای $(n_r = 1, l = 2)$ و $(n_r = 2, l = 1)$ دیگر واگن نیست. واگنی مشخصه پتانسیل $1/r$ را سابقاً "تفاقی" می‌نامیدند، زیرا دلیل واضحی برای آن وجود نداشت اما باید دید که منظور از "واضح" چیست. از مکانیک کلاسیک می‌دانیم که پتانسیل $1/r$ ویژگیهای خاصی دارد: مدارها بیضیهایی هستند که سمتگیری ثابتی در فضا دارند و حرکت تقدیمی (شکل ۱۲-۱) انجام نمی‌دهند. تغییرات کوچک در این پتانسیل باعث حرکت تقدیمی می‌شوند. این تغییرات می‌توانند ناشی از عوامل مختلف باشند، مثلاً اختلالات ناشی از سایر سیارات در مسئله کیلر. در بررسی مدار عطارد معلوم شده بود که پس از احتساب اثر سایر سیارات باز هم یک حرکت تقدیمی حسیض عطارد به مقدار $42''$ در هر قرن بدون توضیح می‌ماند. این حرکت تقدیمی را سرانجام نظریه نسبیت عام اینشتین توضیح داد: براساس این نظریه، باید دقیقاً پتانسیل $1/r^2$ را به پتانسیل نیوتونی $1/r$ اضافه کرد.

در اتم هیدروژن واقعی اختلالات کوچکی ناشی از اثرات اسپینی و اثرات نسبیتی وجود دارند. این اثرات را در فصل ۱۷ بررسی می‌کنیم. اما با یک تقریب بسیار خوب، مقادیر ممکن l به‌ازای

یک مقدار معین n عبارت‌اند از $l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$ و به‌ازای هر یک از اینها واگنی $(2l+1)$ است. بنابراین، واگنی کل باز هم n^2 است. چون برای الکترون دو حالت مربوط به اسپین آن وجود دارند، واگنی صحیح در واقع $2n^2$ است. این موضوع نقش مهمی در توصیف کوانتوم-مکانیکی جدول تناوبی دارد.

ویژه‌تابعهای شعاعی

اکنون به معادله شعاعی بازمی‌گردیم. از رابطه بازگشتی ۱۲-۱۳ با تبدیل k به λ و n به

$$a_{k+1} = \frac{k+l+1-n}{(k+1)(k+2l+2)} a_k \quad (26-12)$$

به‌دست می‌آوریم

$$a_{k+1} = (-1)^{k+1} \frac{n-(k+l+1)}{(k+1)(k+2l+2)} \cdot \frac{n-(k+l)}{k(k+2l+1)} \cdots \frac{n-(l+1)}{1 \cdot (2l+2)} a_0 \quad (27-12)$$

با استفاده از این رابطه می‌توان بسط رشته توانی مربوط به $H(\rho)$ را به‌دست آورد. در واقع، $H(\rho)$ چندجمله‌ای لاگر وابسته است:

$$H(\rho) = L_{n-l-1}^{(2l+1)}(\rho) \quad (28-12)$$

جدول این چندجمله‌ایها و ویژگیهای آنها را در اغلب کتابهای ریاضی و فیزیکی یافت می‌شوند.^۱

با استفاده از

$$a_0 = \frac{h}{\mu c \alpha} \quad (29-12)$$

۱. یک کتاب بسیار مفید در این زمینه کتابدستی زیر است

M Abramowitz and I A Stegun (eds), *Handbook of Mathematical Functions*, National Bureau of Standards Publication, Washington, D C, 1964.

چند تابع شعاعی را با تبدیل www.larsonian.blogfa.com و زیر می‌نویسیم

$$\begin{aligned}
 R_{10}(r) &= 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_0} \\
 R_{20}(r) &= 2 \left(\frac{Z}{2a_0} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{Zr}{2a_0} \right) e^{-Zr/2a_0} \\
 R_{21}(r) &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0} \right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \\
 R_{30}(r) &= 2 \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{3/2} \left[1 - \frac{2Zr}{3a_0} + \frac{2(Zr)^2}{27a_0^2} \right] e^{-Zr/3a_0} \\
 R_{31}(r) &= \frac{4\sqrt{2}}{3} \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} \left(1 - \frac{Zr}{6a_0} \right) e^{-Zr/3a_0} \\
 R_{32}(r) &= \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}} \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0} \right)^2 e^{-Zr/3a_0}
 \end{aligned} \quad (30-12)$$

ویژگیهای کیفی زیر را می‌توان از بررسی ویژه‌جوابها به‌دست آورد:

الف) رفتار r^l به‌ازای مقادیر کوچک r ، که باعث می‌شود تابع موج در گستره‌ای از شعاعها که با l افزایش می‌یابد کوچک بماند، پیامد وجود سد مرکزگریزی دافعه‌ای است که الکترونها را از نزدیک شدن به هسته باز می‌دارد.

ب) رابطه ۲۶-۱۲ نشان می‌دهد $H(\rho)$ یک چندجمله‌ای از درجه $n - l - 1$ است، و از این رو n_r گره (صفر) شعاعی دارد. توزیع چگالی احتمال

$$P(r) = r^2 [R_{nl}]^2 \quad (31-12)$$

$n - 1$ "برآمدگی" دارد. وقتی l ، به‌ازای یک مقدار معین n دارای بیشترین مقدار خود است ($l = n - 1$) تنها یک برآمدگی وجود دارد. چنانکه از ۳۰-۱۲ استنباط می‌شود، و چنانکه می‌توان از جواب معادله دیفرانسیل دید،

$$R_{n,n-1}(r) \propto r^{n-1} e^{-Zr/a_0} \quad (32-12)$$

بنابراین، چگالی احتمال $P(r) \propto r^{2n} e^{-2Zr/a_0 n}$ در یک r که از رابطه زیر به دست می آید بیشینه می شود

$$\frac{dP(r)}{dr} = \left(2nr^{2n-1} - \frac{2Z}{a_0 n} r^{2n} \right) e^{-2Zr/a_0 n} = 0 \quad (33-12)$$

یعنی در

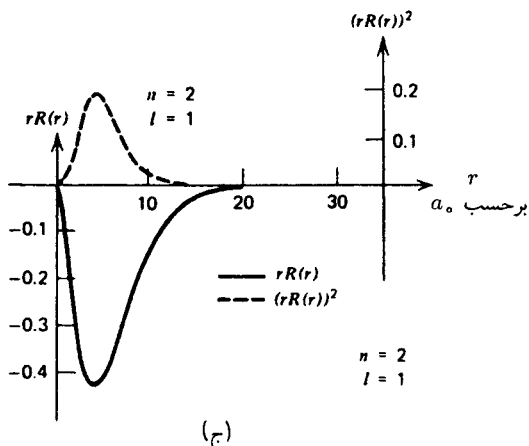
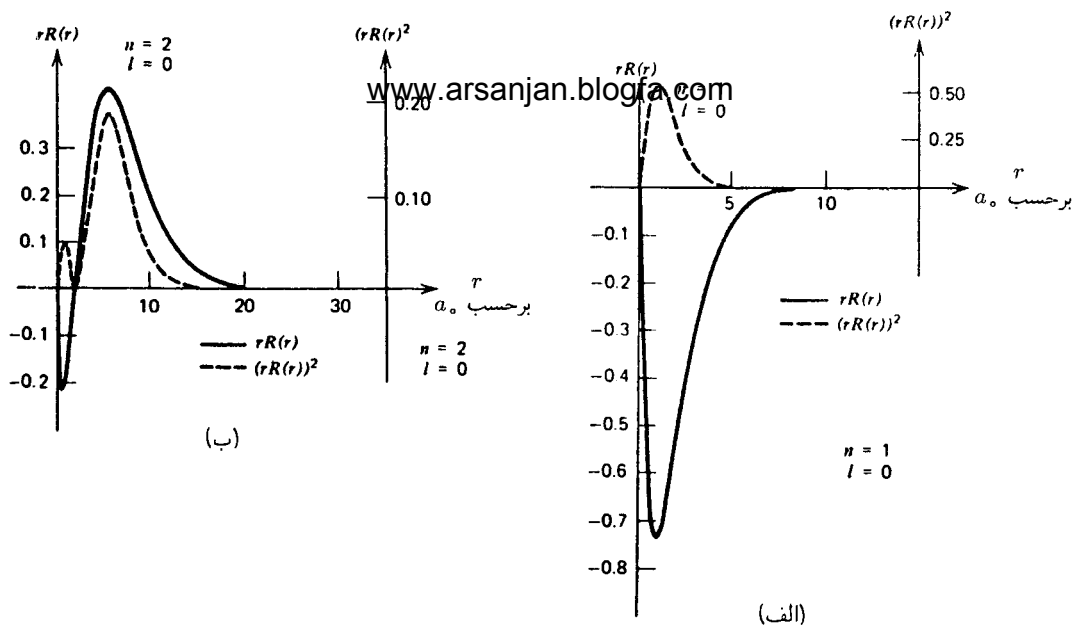
$$r = \frac{n^2 a_0}{Z} \quad (34-12)$$

که مقداری است که از اتم بور برای مدارهای دایره ای به دست می آید. چگالیهای احتمال مربوط به مقادیر کوچکتر l برآمدگیهای بیشتری دارند. می توان نشان داد که این برآمدگیها متناظر با مدارهای بیضوی در حد اعداد کوانتومی بزرگ هستند.

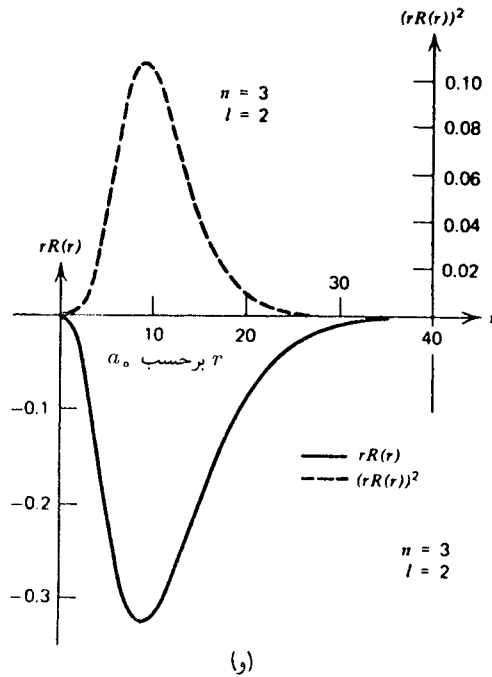
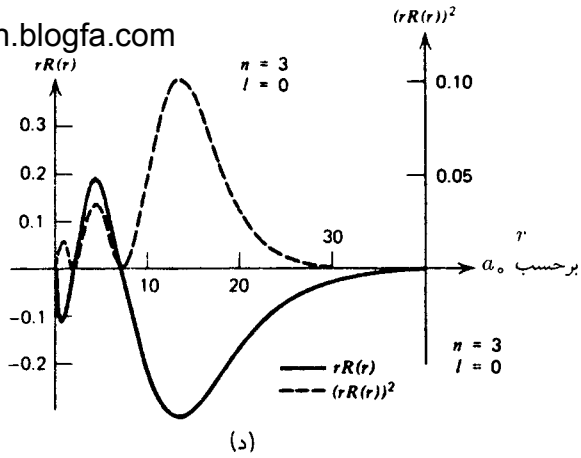
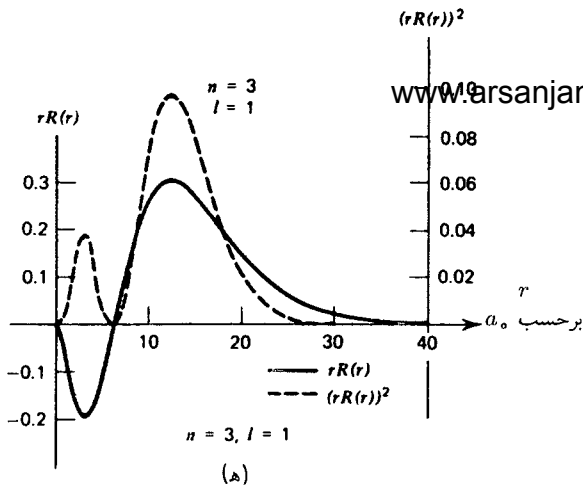
(ج) نمودارهای چگالی احتمال شعاعی $P(r)$ برای یافتن الکترون در فاصله r از مبدأ را می توان با استفاده از توابع موج ترسیم کرد. شکل ۱۲-۲ طرح کلی را نشان می دهد. باید به خاطر داشت که تابع موج قسمت زاویه ای هم دارد، که مجذور قدرمطلق آن $[P_l^m(\cos \theta)]^2$ است. نمودارهای توابع لژاندر وابسته $P_l^m(\cos \theta)$ در شکل ۱۲-۳ داده شده اند. چنانکه دیده می شود، با افزایش m چگالی احتمال از محور z به سمت صفحه استوایی منتقل می شود. وقتی $|m| = l$ چنانکه ۱۱-۶۳ نشان می دهد داریم $|P_l^l(\cos \theta)|^2 \propto \sin^{2l} \theta$. این تابع حول $\theta = \pi/2$ به اوج می رسد. می توان نشان داد که با افزایش l پهنای قله مانند $l^{-1/2}$ کاهش می یابد، و در نتیجه به ازای اعداد کوانتومی بزرگ به تصویر کلاسیک مدارهای هامنی می رسیم. پهنای متناهی قله را می توان با ملاحظات زیر توضیح داد. وقتی $|m| = l$ داریم $L_z^2 = l^2$ و در نتیجه $L_x^2 + L_y^2 = l$. بنابراین، بردار تکانه زاویه ای هیچگاه نمی تواند کاملاً در راستای یک محور قرار گیرد. در ضمن، واگنی m به ما امکان می دهد تا "مدار" را نسبت به یک محور دیگر سمتیابی کنیم، و از این رو هیچ محور z متمایزی واقعاً وجود ندارد. بدین ترتیب، حالتی که یک ویژه مقدار L_x با ویژه مقدار $Y_{lm}(\theta, \phi)$ است در راستای z "سمت گیری" می کند. تابع موج اکنون یک ترکیب خطی از توابع $Y_{lm}(\theta, \phi)$ است، اما انرژی به علت واگنی همان انرژی مربوط به مدارهایی است که در راستای z سمت گیری کرده اند.

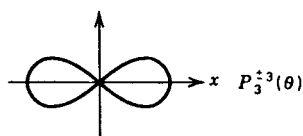
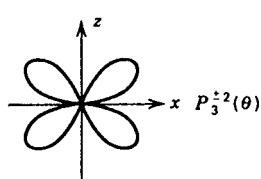
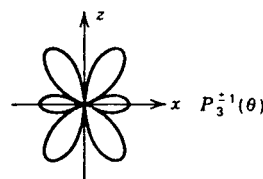
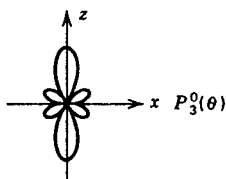
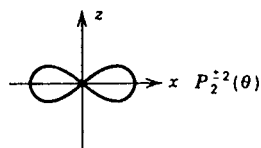
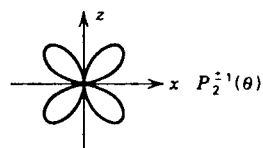
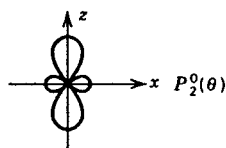
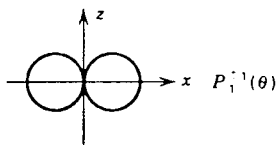
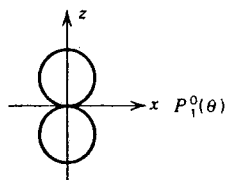
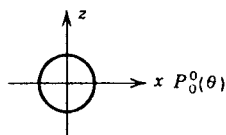
(د) با داشتن توابع موج، می توان $\langle r^k \rangle$ را با استفاده از رابطه زیر محاسبه کرد

$$\langle r^k \rangle = \int_0^\infty dr r^{2+k} [R_{nl}(r)]^2 \quad (35-12)$$



شکل ۲-۱۲ توابع موج شعاعی $u(r) = rR(r)$ و توابع چگالی احتمال شعاعی $u^2(r)$ برای مقادیر $n = 1, 2$ ، ۳، و مقادیر ممکن l . محور طول چپ معرف $u(r)$ و محور طول راست معرف $u^2(r)$ است. توابع موج با خط پر و توزیعهای احتمال با خط چین نشان داده شده‌اند. محور عرض معرف r برحسب a_0 است.





شکل ۱۲-۳ نمودارهای چندجمله‌ایهای لژاندر وابسته بر حسب θ (زاویه میان محور z و صفحه استوایی که با محور x نشان داده شده است).

بعضی مقادیر انتظاری مفید عبارت‌اند از

$$\langle r \rangle = \frac{a_0}{2Z} [3n^2 - l(l+1)]$$

$$\langle r^2 \rangle = \frac{a_0^2 n^2}{2Z^2} [5n^2 + 1 - 3l(l+1)]$$

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{Z}{a_0 n^2}$$

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{Z^3}{a_0^3 n^3 \left(l + \frac{1}{2} \right)}$$

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{Z^3}{a_0^3 n^3 l \left(l + \frac{1}{2} \right) (l + 1)} \quad (۱۲-۳۶)$$

در پراکندگی الکترون (یا پروتون) با جوابهای معادله شرودینگر برای پتانسیل $1/r$ به ازای $E > 0$ نیز سروکار داریم. اینها شامل توابع خاص، توابع فوق هندسی همشار، هستند. بررسی این جوابها فراتر از اهداف این کتاب است.

مسائل

۱۲-۱ طول موجهای مربوط به گذارهای $2P \rightarrow 1S$ را در موارد زیر مقایسه کنید. (۱) هیدروژن، (۲) دوتریم (با جرم هسته‌ای دو برابر جرم پروتون)، (۳) پوزیترونیم (حالت مقید از یک الکترون و یک پوزیترون که جرم آن برابر با جرم الکترون است).

۱۲-۲ یک الکترون در حالت پایه تریتم، که هسته آن متشکل از یک پروتون و دو نوترون است، قرار دارد. یک واکنش هسته‌ای باعث می‌شود هسته این اتم ناگهان به He^2 ، متشکل از دو پروتون و یک نوترون، تبدیل شود. احتمال این را به دست آورید که الکترون در حالت پایه He^2 باقی بماند. ۱۲-۳ مانسته نسبیتی معادله شرودینگر برای الکترونی با اسپین σ (که البته برای الکترون واقعی قابل استفاده نیست) صورت عملگری رابطه زیر است

$$(E - V)^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$$

یعنی

$$\left(\frac{E}{\hbar c} + \frac{Ze^2}{\hbar c} \frac{1}{r} \right)^2 \psi = -\nabla^2 \psi + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \psi$$

(الف) معادله شعاعی را به دست آورید.

(ب) طیف ویژه مقادارها را با توجه به ارتباط نزدیک معادله شعاعی قسمت (الف) با معادله شعاعی مربوط به مسئله اتم هیدروژن به دست آورید.

۴-۱۲ با استفاده از رابطه $\langle V \rangle_{n,l}$ www.arsanjan.blogfa.com

$$\langle T \rangle_{n,l} = \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle_{n,l}$$

را برای یک ویژه حالت اختیاری اتم هیدروژنگونه (با Z اختیاری) محاسبه کنید. نشان دهید که به طور کلی برای این پتانسیل داریم

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

این یک مثال خاص از قضیه ویرال است.

۵-۱۲ الکترونی در میدان کولنی یک پروتون در حالتی است که با تابع موج زیر توصیف می شود

$$\frac{1}{\epsilon} [4\psi_{100}(r) + 3\psi_{211}(r) - \psi_{210}(r) + \sqrt{10} \psi_{21-1}(r)]$$

(الف) مقدار انتظاری انرژی را محاسبه کنید.

(ب) مقدار انتظاری L^2 را به دست آورید.

(ج) مقدار انتظاری L_z را تعیین کنید.

۶-۱۲ الکترونی در میدان کولنی یک پروتون در حالتی است که با تابع موج زیر توصیف می شود

$$\psi(\mathbf{r}) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \right)^{3/2} e^{-\alpha^2 r^2 / 2}$$

رابطه ای برای احتمال یافتن الکترون در حالت پایه این اتم هیدروژن به دست آورید.

۷-۱۲ رابطه ۳۲-۱۲ را با استفاده از رابطه بازگشتی اثبات کنید.

۸-۱۲ الکترون یک اتم هیدروژن در حالت $n=2, l=1, m=0$ است. تابع موج آن را در فضای تکانه به دست آورید.

۹-۱۲ مقدار انتظاری تابع $f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ در هر حالت پایا ثابت است. برای هامیلتونی

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r)$$

ثابت کنید

$$\circ = \frac{d}{dt} \langle \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, \mathbf{r} \cdot \mathbf{p}] \rangle$$

$$\left\langle \frac{\mathbf{p}^2}{m} \right\rangle = \langle \mathbf{r} \cdot \nabla V(r) \rangle$$

با استفاده از این رابطه، نتیجه مسئله ۱۲-۴ را اثبات کنید. همچنین با استفاده از این نتیجه، $\langle 1/r \rangle$ را به دست آورید.

۱۲-۱۰ با استفاده از فتونی که در این فصل بیان شدند، مسئله نوسانگر هماهنگ سه بعدی را با

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 r^2$$

بررسی کنید. توجه کنید که چند جمله ایهای لاگر وابسته در این مسئله نیز ظاهر می شوند. ۱۱-۱۲ بنابه نظر جولین شوینگر، نیروی شعاعی متوسط باید برای حالت های پایا صفر شود. با استفاده از این نتیجه، $\langle n, l | 1/r^2 | n, l \rangle$ را محاسبه کنید. [راهنمایی: کمیت

$$\left\langle n, l \left| \frac{d}{dr} \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r} \right] \right| n, l \right\rangle$$

را محاسبه کنید.]

مراجع

برای بحث مفصلی درباره اتم های هیدروژن گونه به کتاب زیر مراجعه کنید

E U Condon and G H Shortley, *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge University Press, Cambridge, England, 1959.

مسئله اتم هیدروژن در تمام کتاب های مکانیک کوانتومی بررسی می شود.

برهم‌کنش الکترون با میدان الکترومغناطیسی

نظریه کلاسیک

در فصل ۱۲ برهم‌کنش الکترون را با میدان ایستای کولنی ناشی از یک بار نقطه‌ای بررسی کردیم. برای تعمیم این بررسی به برهم‌کنش با میدان مغناطیسی یا الکتریکی خارجی باید ابتدا نظریه کلاسیک را مرور کنیم. معادلات ماکسول برای خلأ در دستگاه گاوسی عبارت‌اند از

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (۱-۱۳)$$

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = 0 \quad (۲-۱۳)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = 4\pi\rho(\mathbf{r}, t) \quad (۳-۱۳)$$

$$\nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \quad (۴-۱۳)$$

که در آنها چگالیهای بار و جریان $\rho(\mathbf{r}, t)$ و $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ چشمه‌های میدانهای الکترومغناطیسی $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ و $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ هستند. معادله پایستگی بار

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (۵-۱۳)$$

خود به خود صادق است. www.arsanjan.blogfa.com

الکترون به عنوان یک نقطهٔ مادی به جرم μ و بار $-e$ تابع معادلهٔ نیروی لورنتس است:

$$\mu \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = -e[(\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t))] \quad (۶-۱۳)$$

گذار به مکانیک کوانتومی با ساختن هامیلتونی برای این دستگاه انجام می‌گیرد. برای این کار باید پتانسیل‌های این دستگاه الکترومغناطیسی را تعریف کنیم. با توجه به دو معادلهٔ اول ماکسول، ۱-۱۳ و ۲-۱۳، می‌توان پتانسیل‌های برداری و نرده‌ای $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ و $\phi(\mathbf{r}, t)$ را به‌گونه‌ای تعریف کرد که

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (۷-۱۳)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - \nabla \phi(\mathbf{r}, t)$$

در معادلهٔ حرکت الکترون پتانسیل‌های \mathbf{A} و ϕ مستقیماً دخالت ندارند. این پتانسیل‌ها خوش تعریف نیستند. اگر در معادلهٔ

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$$

را به $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - \nabla f(\mathbf{r}, t) \quad (۸-۱۳)$$

تبدیل کنیم معادله تغییر نمی‌کند زیرا $\nabla \times \nabla f(\mathbf{r}, t) = 0$. اگر، علاوه بر تبدیل ۸-۱۳، ϕ را به

$$\phi'(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c} \frac{\partial f(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (۹-۱۳)$$

تبدیل کنیم میدان الکتریکی تغییر نمی‌کند. این ناوردایی، که ناوردایی تحت تبدیلات پیمانه‌ای نامیده می‌شود، به ما امکان می‌دهد تا پتانسیل‌ها را به‌صورت‌های مختلف، مناسب با منظوری که داریم، تعریف کنیم.

زوج معادله‌های وابسته به چشمة ۳-۱۳ و ۴-۱۳ اکنون به‌صورت زیر درمی‌آیند

$$-\nabla^2 \phi(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}(\nabla \cdot \mathbf{A}) = 4\pi \rho(\mathbf{r}, t) \quad (۱۰-۱۳)$$

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \nabla \phi = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$$

یا

$$-\nabla^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} + \nabla \left(\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \quad (11-13)$$

اگر توزیع بار ایستا باشد، یعنی چگالی ρ مستقل از زمان باشد، بهتر است پیمانه را طوری انتخاب کنیم که

$$\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (12-13)$$

این انتخاب $f(\mathbf{r}, t)$ را پیمانه کولن می‌نامند. در این مورد داریم

$$-\nabla^2 \phi(\mathbf{r}) = 4\pi \rho(\mathbf{r}) \quad (13-13)$$

یعنی یک پتانسیل نرده‌ای مستقل از زمان داریم، و معادله مربوط به $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ به صورت زیر درمی‌آید

$$-\nabla^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \quad (14-13)$$

وقتی توزیع بار ایستا نیست، بهتر است پیمانه لورنتس را انتخاب کنیم که برای آن

$$\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c} \frac{\partial \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = 0 \quad (15-13)$$

با این انتخاب، معادله مربوط به پتانسیل برداری بدون تغییر می‌ماند، اما اکنون پتانسیل نرده‌ای نیز از یک معادله موج پیروی می‌کند. نکته مهمی که باید تذکر دهیم این است که رابطه

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = -\nabla^2 \mathbf{A} + \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A})$$

که در به دست آوردن ۱۱-۱۳ به کار می‌رود تنها در مختصات دکارتی معتبر است. بنابراین، واضح است که $\nabla^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ را باید بر حسب x, y, z محاسبه کنیم.

برای گذار به مکانیک کوانتومی باید از فرمولبندی هامیلتون برای معادله حرکت ۱۳-۶ استفاده کنیم. در غیاب برهم‌کنش با میدان الکترومغناطیسی، به آسانی می‌توان دید که از معادله‌های هامیلتون

$$\begin{aligned}\frac{dx_i}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \frac{dp_i}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial x_i}\end{aligned}\quad (۱۶-۱۳)$$

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + V(r) \quad (۱۷-۱۳)$$

به دست می‌آوریم

$$\mu \frac{d^2 x_i}{dt^2} = -\frac{\partial V}{\partial x_i} = F_i \quad (۱۸-۱۳)$$

همینونی برای برهم‌کنش الکترون با میدان الکترومغناطیسی خارجی، که با پتانسیلهای $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ و $\phi(\mathbf{r}, t)$ نمایش داده می‌شود، به صورت زیر است

$$H = \frac{(\mathbf{p} + (e/c)\mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^2}{2\mu} + e\phi(\mathbf{r}, t) \quad (۱۹-۱۳)$$

معادله‌های حرکت هامیلتون عبارت‌اند از

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{p_i + (e/c)A_i}{\mu} \quad (۲۰-۱۳)$$

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i} = -\frac{e}{\mu c} \left(p_k + \frac{e}{c} A_k \right) \frac{\partial A_k}{\partial x_i} + e \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \quad (۲۱-۱۳)$$

بنابراین،

$$\begin{aligned}\mu \frac{d^2 x_i}{dt^2} &= \frac{dp_i}{dt} + \frac{e}{c} \left(\frac{\partial A_i}{\partial t} + \frac{\partial A_i}{\partial x_k} \frac{dx_k}{dt} \right) \\ &= e \frac{\partial \phi}{\partial x_i} + \frac{e}{c} \frac{\partial A_i}{\partial t} - \frac{e}{c} \frac{\partial A_k}{\partial x_i} \frac{dx_k}{dt} + \frac{e}{c} \frac{\partial A_i}{\partial x_k} \frac{dx_k}{dt}\end{aligned}\quad (۲۲-۱۳)$$

دو جمله اول برابر با $-eE_i$ و $\frac{e\hbar}{2m} \nabla \cdot \mathbf{A}$ هستند. بدین ترتیب، ۱۳-۹ انتخاب درستی برای هامیلتونی H است.

معادله شرودینگر الکترون در میدان الکترومغناطیسی

معادله شرودینگر برای الکترون در میدان الکترومغناطیسی به صورت زیر است

$$\left[\frac{((\hbar/i)\nabla + (e/c)\mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^2}{2\mu} + e\phi(\mathbf{r}, t) \right] \psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (۱۳-۲۳)$$

که در آن $(\hbar/i)\nabla$ را به جای عملگر \mathbf{p} نوشته‌ایم. قبل از اینکه به حل معادله ویژه مقدری انرژی پردازیم، لازم است ناوردایی پیمانه‌ای را بررسی کنیم. اگر معادله ۱۳-۲۳ را برحسب \mathbf{A}' و ϕ' با ۱۳-۸ و ۱۳-۹ تعریف می‌شوند بنویسیم، به دست می‌آوریم

$$\left[\frac{((\hbar/i)\nabla + (e/c)\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) + (e/c)\nabla f(\mathbf{r}, t))^2}{2\mu} + e\phi'(\mathbf{r}, t) - \frac{e}{c} \frac{\partial f(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right] \psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}$$

که معادله متفاوتی به نظر می‌رسد. به آسانی می‌توان دید که اگر تبدیلهای ۱۳-۸ و ۱۳-۹ را با یک تغییر فاز در تابع موج، $\psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \psi'(\mathbf{r}, t)$ ، همراه کنیم به طوری که

$$\psi'(\mathbf{r}, t) = e^{i\Lambda(\mathbf{r}, t)} \psi(\mathbf{r}, t) \quad (۱۳-۲۴)$$

آنگاه چون

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}(e^{-i\Lambda} \psi') = -i \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \psi + e^{-i\Lambda} \frac{\partial \psi'}{\partial t}$$

و

$$\frac{\hbar}{i} \nabla \psi = \frac{\hbar}{i} \nabla (e^{-i\Lambda} \psi') = -\hbar \nabla \Lambda \psi - e^{-i\Lambda} \frac{\hbar}{i} \nabla \psi'$$

معادله اصلی برحسب \mathbf{A}' ، ϕ' و ψ' به دست می‌آید به شرط اینکه قرار دهیم

$$\Lambda(\mathbf{r}, t) = \frac{e}{\hbar c} f(\mathbf{r}, t) \quad (۱۳-۲۵)$$

اکنون به معادله شرودینگر بازمی‌گردیم. تنها میدانهای مستقل از زمان را در نظر می‌گیریم، یعنی $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{r})$ و $\phi = \phi(\mathbf{r})$. در این مورد، می‌توان نوشت

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-iEt/\hbar} \psi(\mathbf{r}) \quad (26-13)$$

و

$$\left[\frac{1}{2\mu} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \nabla + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) + e\phi(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (27-13)$$

که به صورت زیر درمی‌آید

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi - \frac{ie\hbar}{\mu c} \mathbf{A} \cdot \nabla \psi - \frac{ie\hbar}{2\mu c} (\nabla \cdot \mathbf{A}) \psi + \frac{e^2}{2\mu c^2} A^2 \psi + e\phi(\mathbf{r}) \psi = E\psi \quad (28-13)$$

اکنون با استفاده از آزادی انتخاب تابع پیمانه $f(\mathbf{r})$ به‌گونه‌ای که

$$\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0 \quad (29-13)$$

به دست می‌آوریم

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi - \frac{ie\hbar}{\mu c} \mathbf{A} \cdot \nabla \psi + \frac{e^2}{2\mu c^2} A^2 \psi + e\phi(\mathbf{r}) \psi = E\psi \quad (30-13)$$

میدان مغناطیسی ثابت

برای میدان مغناطیسی یکنواخت ثابت \mathbf{B} می‌توان نوشت^۱

$$\mathbf{A} = -\frac{1}{c} \mathbf{r} \times \mathbf{B} \quad (31-13)$$

بنابراین، \mathbf{A} برحسب سه مؤلفه‌اش عبارت است از

$$\mathbf{A} = -\frac{1}{c} (yB_z - zB_y, zB_x - xB_z, xB_y - yB_x)$$

۱. توجه کنید که این انتخاب یکتا نیست، زیرا می‌توان گرادینان هر تابعی را به \mathbf{A} اضافه کرد بدون اینکه \mathbf{B} تغییر کند. اما این انتخاب بسیار مناسب است.

$$\nabla \times \mathbf{A} = \left(\frac{1}{r} B_x + \frac{1}{r} B_x', B_y', B_z \right) \\ = \mathbf{B}$$

اکنون جمله دوم در ۱۳-۳ به صورت زیر در می آید

$$\frac{ie\hbar}{2\mu c} \mathbf{r} \times \mathbf{B} \cdot \nabla \psi = -\frac{ie\hbar}{2\mu c} \mathbf{B} \cdot \mathbf{r} \times \nabla \psi \\ = \frac{e}{2\mu c} \mathbf{B} \cdot \mathbf{r} \times \frac{\hbar}{i} \nabla \psi = \frac{e}{2\mu c} \mathbf{B} \cdot \mathbf{L} \psi \quad (13-32)$$

و برای جمله سوم، اگر راستای \mathbf{B} را محور z بگیریم، داریم

$$\frac{e^2}{4\mu c^2} (\mathbf{r} \times \mathbf{B})^2 \psi = \frac{e^2}{4\mu c^2} [r^2 B^2 - (\mathbf{r} \cdot \mathbf{B})^2] \psi = \frac{e^2 B^2}{4\mu c^2} (x^2 + y^2) \psi \quad (13-33)$$

نتیجه بالا به صورت پتانسیل نوسانگر هماهنگ دوی بعدی است.

بزرگیهای این دو جمله را با هم مقایسه می کنیم. نسبت این دو را با گرفتن $\langle L_z \rangle$ از مرتبه \hbar و $\langle x^2 + y^2 \rangle$ از مرتبه a_0^2 ، که شعاع بور است، برآورد می کنیم:

$$\frac{(e^2/4\mu c^2) a_0^2 B^2}{(e^2/2\mu c) \hbar B} \approx \frac{1}{4} \frac{e^2}{\hbar c} \frac{B}{e/a_0} \approx \frac{1}{548} \frac{B}{e/a_0} \\ \approx \frac{B}{548(4.8 \times 10^{-10}) / (0.5 \times 10^{-8})^2} \\ \approx \frac{B}{9 \times 10^9 \text{G}} \quad (13-34)$$

بنابراین، در دستگاههای اتمی، با میدانهایی که نوعاً در آزمایشگاه در دسترس هستند، یعنی $B \lesssim 10^4 \text{G}$ ، جمله درجه دوم مسلماً قابل چشمپوشی است. به روش مشابهی می توان جمله ای را که بر حسب B خطی است با مقایسه با انرژی پتانسیل کولنی برآورد کرد:

$$\frac{(e/2\mu c) \hbar B}{e^2/a_0} \approx \frac{1}{2} \frac{\hbar/\mu c}{e/a_0} B \approx \frac{1}{274} \frac{B}{e/a_0} \approx \frac{B}{5 \times 10^9 \text{G}} \quad (13-35)$$

بنابراین، جمله خطی ترازهای انرژی اتمی را تنها اندکی مختل می‌کند. جمله درجه دوم در دو وضعیت می‌تواند بسیار مهم شود: اگر میدان مغناطیسی بسیار شدید باشد؛ تصور می‌رود که میدانهای به بزرگی 10^{12} گاوس می‌توانند در سطح ستاره‌های نوترونی وجود داشته باشند، و این میدانها تغییرات بنیانی در ساختار اتمها ایجاد می‌کنند.^۲ جمله درجه دوم در بررسی حرکت ماکروسکوپی الکترونها در میدان خارجی، مثلاً حرکت الکترون در یک سنکروترون، نیز اهمیت دارد.

اثر بهنجار زیمان

ابتدا تنها جمله خطی را در نظر می‌گیریم، و محور z را در راستای \mathbf{B} انتخاب می‌کنیم. بنابراین، به هامیلتونی مربوط به $\mathbf{B} = 0$ جمله زیر اضافه می‌شود

$$H_{\perp} = \frac{e}{2\mu c} B L_z \quad (36-13)$$

اگر بسامد زیر را، که بسامد لارمور نامیده می‌شود، تعریف کنیم

$$\frac{eB}{2\mu c} = \omega_L \quad (37-13)$$

و ویژه‌حالتهای انرژی را در نظر بگیریم که همزمان ویژه‌حالتهای L_z و L^2 هستند، آنگاه جمله اضافی ۳۶-۱۳ وقتی روی یک ویژه‌حالت اثر کند یک عدد به‌دست می‌دهد، یعنی

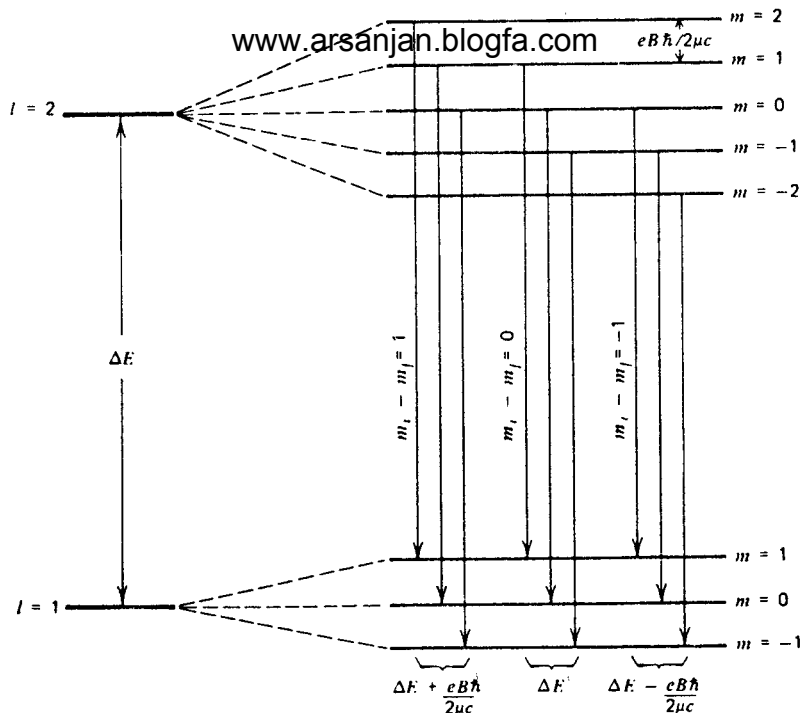
$$H_{\perp} u_{nlm}(\mathbf{r}) = \hbar \omega_L m u_{nlm}(\mathbf{r}) \quad (38-13)$$

که در آن m ویژه‌مقدار مؤلفه z تکانه زاویه‌ای، با $-l \leq m \leq l$ ، است. بنابراین، ترازهای انرژی موجود با واگنی $(l+1)$ تایی به $l+1$ مؤلفه همفاصله، با انرژیهای

$$E = -\frac{1}{2} \mu c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} + \hbar \omega_L m \quad (39-13)$$

شکافته می‌شوند. اندازه شکافتگی برابر است با

۲. مراجعه کنید به



شکل ۱۳-۱ اثر بهنجار زیمان: از پانزده گذار ممکن بین حالت‌های $l = 1$ و $l = 2$ ، که توسط میدان مغناطیسی شکافته شده‌اند، تنها نه گذار، مربوط به $1, 0, -1$ ، $\Delta m = m_i - m_f$ ، در تشکیل سه خط دخالت دارند.

$$\begin{aligned}
 \frac{eB\hbar}{2\mu c} &= \frac{e\hbar}{2\mu c} \left(\frac{B}{e/a_0^2} \right) \frac{e}{a_0^2} \\
 &= \frac{e^2\hbar}{2\mu c} \left(\frac{\mu c \alpha}{\hbar} \right)^2 \left(\frac{B}{e/a_0^2} \right) \\
 &= \left(\frac{1}{2} \alpha^2 \mu c^2 \right) \alpha \frac{B}{e/a_0^2} \\
 &= \left(\frac{B}{2.4 \times 10^4} \right) \times 13.6 \text{ eV}
 \end{aligned}$$

چون بنابه قاعده‌های گزینش (که بعداً خواهیم دید) تنها گذارهایی مجازند که در آنها m بدون تغییر بماند یا به اندازه ۱ تغییر کند، معلوم می‌شود که خط منفردی که گذار با $B = 0$ را نشان می‌دهد به سه خط شکافته می‌شود (شکل ۱۳-۱). این اثر را اثر بهنجار زیمان می‌نامند. در واقع، اگر حالت اسپینی الکترون در اتم حالتی با اسپین صفر نباشد، برهم‌کنش اسپین الکترون

با میدان مغناطیسی نقش قبلاً پیش‌بینی شد را تغییر می‌دهد. این اثر متداولتر را، که اثر ناهنجار زیمن نامیده می‌شود، پس از بحث اسپین بررسی خواهیم کرد.

میدانهای مغناطیسی بزرگ و حد کلاسیک

حل مسئله الکترون در میدان مغناطیسی ثابت تحت شرایطی که از نمی‌توان جمله B^2 را صرف‌نظر کرد اما پتانسیل کولنی قابل چشم‌پوشی است جالب توجه است. در این شرایط، و باز هم با انتخاب راستای B به‌عنوان محور z ، معادله شرودینگر با توجه به $13-30$ ، $13-32$ و $13-33$ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi + \frac{eB}{2\mu c}L_z\psi + \frac{e^2B^2}{8\mu c^2}(x^2 + y^2)\psi = E\psi \quad (13-40)$$

حضور "پتانسیل" $(x^2 + y^2)$ نشان می‌دهد که برای جداسازی متغیرها از مختصات استوانه‌ای استفاده کنیم. با نوشتن

$$\begin{aligned} x &= \rho \cos \phi \\ y &= \rho \sin \phi \end{aligned} \quad (13-41)$$

و به روشی که در آغاز فصل ۱۱ مطرح شد به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \cos \phi \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\sin \phi}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \sin \phi \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\cos \phi}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} \end{aligned} \quad (13-42)$$

و در نتیجه

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (13-43)$$

اکنون اگر بنویسیم

$$\psi(\mathbf{r}) = u_m(\rho)e^{im\phi}e^{ikz} \quad (13-44)$$

نتیجه می‌گیریم که معادله دیفرانسیل (۴۵-۱۳) از www.arsanjan.blogfa.com

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{du}{d\rho} - \frac{m^2}{\rho^2} u - \frac{e^2 B^2}{4\hbar^2 c^2} \rho^2 u + \left(\frac{2\mu E}{\hbar^2} - \frac{eB\hbar m}{\hbar^2 c} - k^2 \right) u = 0. \quad (45-13)$$

با وارد کردن متغیر

$$x = \sqrt{\frac{eB}{2\hbar c}} \rho \quad (46-13)$$

معادله به صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{d^2 u}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{du}{dx} - \frac{m^2}{x^2} u - x^2 u + \lambda u = 0. \quad (47-13)$$

که در آن

$$\lambda = \frac{2\mu c}{eB\hbar} \left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \right) - 2m \quad (48-13)$$

می‌توان به سادگی دید که (الف) رفتار $u(x)$ در بینهایت که از

$$\frac{d^2 u}{dx^2} - x^2 u \approx 0$$

تعیین می‌شود به صورت $u(x) \sim e^{-x^2/2}$ است، و (ب) رفتار $u(x)$ در نزدیکی $x=0$ که از

$$\frac{d^2 u}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{du}{dx} - \frac{m^2}{x^2} u \approx 0$$

تعیین می‌شود به صورت $u(x) \sim x^{|m|}$ است. بنابراین، می‌نویسیم

$$u(x) = x^{|m|} e^{-x^2/2} G(x) \quad (49-13)$$

و با جاگذاری در ۴۷-۱۳ معادله دیفرانسیل حاکم بر $G(x)$ را به دست می‌آوریم:

$$\frac{d^2 G}{dx^2} + \left(\frac{2|m|+1}{x} - 2x \right) \frac{dG}{dx} + (\lambda - 2 - 2|m|)G = 0. \quad (50-13)$$

$$y = x^2 \quad (۵۱-۱۳)$$

به صورت معادله ۱۱-۱۲ در می‌آید:

$$\frac{d^2 G}{dy^2} + \left(\frac{|m| + 1}{y} - 1 \right) \frac{dG}{dy} + \frac{\lambda - 2 - 2|m|}{4y} G = 0 \quad (۵۲-۱۳)$$

اکنون می‌توان به روش فصل ۱۲ عمل کرد. مقایسه با ۱۱-۱۲ نشان می‌دهد که باید داشته باشیم

$$\frac{1}{4}\lambda - \frac{1 + |m|}{2} = n_r \quad (۵۳-۱۳)$$

که یک شرط ویژه مقدار با $n_r = 0, 1, 2, 3, \dots$ است. این رابطه ایجاب می‌کند که $E - \hbar^2 k^2 / 2\mu$ یعنی انرژی منهای انرژی جنبشی حرکت آزاد در راستای z ، از رابطه زیر به دست آید

$$E - \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} = \frac{eB\hbar}{2\mu c} (2n_r + 1 + |m| + m) \quad (۵۴-۱۳)$$

و

$$G(y) = L_{n_r}^{|m|}(y) \quad (۵۵-۱۳)$$

این جواب را تنها در حد کلاسیک بررسی می‌کنیم. برای این کار، ابتدا نظریه کلاسیک را مرور می‌کنیم. با فرض هامیلتونی ۱۳-۱۹، بدون جمله پتانسیل نرده‌ای، داریم

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{p} + (e/c)\mathbf{A}}{\mu} \quad (۵۶-۱۳)$$

و با $\mathbf{A} = -(1/2)\mathbf{r} \times \mathbf{B}$ به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \mu \mathbf{r} \times \mathbf{v} &= \mathbf{r} \times \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{r} \times \left(-\frac{1}{2} \mathbf{r} \times \mathbf{B} \right) \\ &= \mathbf{L} - \frac{e}{2c} [\mathbf{r}(\mathbf{r} \cdot \mathbf{B}) - r^2 \mathbf{B}] \end{aligned} \quad (۵۷-۱۳)$$

که در آن از اتحاد زیر استفاده می‌کنیم: www.arsanjan.blogfa.com

$$\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \mathbf{b}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) - \mathbf{c}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) \quad (۵۸-۱۳)$$

مؤلفه معادله ۵۷-۱۳ در راستای \hat{z} عبارت است از

$$\mu(\mathbf{r} \times \mathbf{v})_z = L_z + \frac{e}{\gamma c} B(x^2 + y^2)$$

یا

$$\mu \rho v = L_z + \frac{eB}{\gamma c} \rho^2 \quad (۵۹-۱۳)$$

از رابطه نیروی وارد بر الکترون

$$\mathbf{F} = -\frac{e}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \quad (۶۰-۱۳)$$

برای حرکت دورانی به دست می‌آوریم

$$\frac{\mu v^2}{\rho} = \frac{e v B}{c} \quad (۶۱-۱۳)$$

از ترکیب این معادله با ۵۹-۱۳ به دو رابطه زیر می‌رسیم

$$\frac{1}{2} \mu v^2 = \frac{eB}{\mu c} L_z \quad (۶۲-۱۳)$$

و

$$\rho = \left[\frac{\gamma c}{eB} L_z \right]^{1/2} \quad (۶۳-۱۳)$$

اکنون به رابطه انرژی ۵۴-۱۳ بازمی‌گردیم. به دلیل کوچکی \hbar ، انرژی فقط وقتی می‌تواند برای مقادیر معقول B اندازه ماکروسکوپیک داشته باشد که $(2n_r + 1 + |m| + m)$ بسیار بزرگ باشد. دو مورد وجود دارند: (الف) اگر $m < 0$ ، آنگاه n_r بسیار بزرگ است. اما n_r درجه چندجمله‌ای $L_{n_r}^{(|m|)}(y)$ را تعیین می‌کند، یعنی تعداد صفرهای تابع را،^۳ و اگر این بسیار بزرگ باشد تابع نمی‌تواند

۳. نگاه کنید به بحث آغاز بخش مربوط به واگنی طیف در فصل ۱۲.

در گستره کوچکی از y که در آن مدار کلاسیک قرار دارد بزرگ باشد. (ب) اگر $m > 0$ ، ضریب به صورت $(2m + 1 + 2n_r)$ درمی‌آید، و این می‌تواند به‌ازای مقادیر کوچک n_r بزرگ باشد به شرط اینکه m بزرگ باشد. در اینجا انرژی عبارت است از

$$E - \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \simeq \frac{eB}{\mu c} \hbar m \quad (64-13)$$

که با نتیجه کلاسیک توافق دارد. توجه کنید که مقدار

$$L_z = \hbar m \quad (65-13)$$

همان‌طور که انتظار می‌رود مثبت است.

همچنین می‌توان نشان داد که شعاع مدار، که از بیشینه شدن توزیع احتمال شعاعی تعیین می‌شود، با مقدار کلاسیک تطابق دارد. فرض می‌کنیم $n_r = 0$. در این مورد، $L_{n_r}^{(m)}(y)$ یک مقدار ثابت است، و مجذور تابع موج بنابر ۴۹-۱۳ و ۵۵-۱۲ عبارت است از

$$P(x) = x^{2|m|} e^{-x^2} \quad (66-13)$$

این کمیت در جایی بیشینه است که

$$\frac{dP}{dx} = (2|m|x^{2|m|-1} - 2x^{2|m|+1})e^{-x^2} = 0$$

یعنی در

$$x = \sqrt{|m|} \quad (67-13)$$

که به‌دست می‌دهد

$$\rho = \left(\frac{2c}{eB} \hbar m \right)^{1/2} \quad (68-13)$$

این مسئله مثال جالبی از اصل تطابق است.

www.arsanjan.blogfa.com ترازهای لاندائ
انتخاب $\mathbf{A} = (-yB/2, xB/2, 0)$ یکتا نیست. انتخاب

$$\mathbf{A} = (0, Bx, 0) \quad (69-13)$$

نیز همان میدان مغناطیسی را به دست می دهد. اختلاف این \mathbf{A} با $\mathbf{A} = -\mathbf{r} \times \mathbf{B}/2$ در یک تبدیل پیمانه ای ساده است:

$$\left(\frac{-yB}{2}, \frac{xB}{2}, 0 \right) = (0, Bx, 0) - \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(\frac{yxB}{2} \right) \quad (70-12)$$

با این انتخاب پتانسیل برداری، عملگر هامیلتونی برای الکترون در میدان مغناطیسی ثابت به صورت زیر درمی آید

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\mu} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 &= \frac{1}{2\mu} \left(p_x^2 + \left(p_y + \frac{eB}{c} x \right)^2 + p_z^2 \right) \\ &= \frac{1}{2\mu} \left(p_x^2 + p_y^2 + \frac{2eB}{c} x p_y + \left(\frac{eB}{c} \right)^2 x^2 + p_z^2 \right) \end{aligned} \quad (71-13)$$

بدیهی است که $[H, p_y] = 0$ و $[H, p_z] = 0$ ، و در نتیجه می توان توابعی ساخت که ویژه تابه های همزمان p_y ، p_z و H باشند. باز هم این حالت را یک ویژه تابع p_z با ویژه مقدار صفر می گیریم. اگر ویژه مقدار p_y را به صورت hk بنویسیم آنگاه ویژه تابع همزمان به صورت زیر درمی آید

$$\psi(x, y) = e^{iky} v(x) \quad (72-13)$$

که در آن $v(x)$ عبارت است از جواب معادله

$$\frac{1}{2\mu} \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + \left(\frac{eB}{c} \right)^2 \left(x + \frac{\hbar ck}{eB} \right)^2 \right) v(x) = E v(x) \quad (73-13)$$

که دقیقاً معادله یک نوسانگر هماهنگ است که نقطه تعادل آن به جای اینکه در $x = 0$ باشد در $-x_0 = -\hbar ck/eB$ قرار دارد. بنابراین، می توان جواب را به صورت زیر نوشت

$$\psi(x, y) = e^{i\epsilon B x_0 y / \hbar c} u(x - x_0) \quad (74-13)$$

که در آن $u(x)$ ویژه‌جواب نوسانگر هماهنگ با نقطه تعادل $x = 0$ است. مقایسه با پتانسیل نوسانگر هماهنگ $\mu\omega^2 x^2/2$ نشان می‌دهد که

$$\omega = \frac{eB}{\mu c} \quad (۷۵-۱۳)$$

و ویژه‌مقدارهای انرژی عبارت‌اند از

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (۷۶-۱۳)$$

این ترازهای انرژی را ترازهای لاندائو می‌نامند.

اگر الکترون در نواری محبوس باشد که دارای اندازه L_1 در راستای x و اندازه L_2 در راستای y است، شرط مرزی در راستای y

$$\psi(y) = \psi(y + L_2) \quad (۷۷-۱۳)$$

ایجاب می‌کند که

$$\frac{eBx_0}{\hbar c} L_2 = 2\pi n^+ \quad n^+ = 0, 1, 2, \dots \quad (۷۸-۱۳)$$

از آنجا که

$$0 < x_0 < L_1 \quad (۷۹-۱۳)$$

نتیجه می‌گیریم که

$$0 \leq n^+ \leq \frac{eB}{2\pi\hbar c} L_1 L_2 \quad (۸۰-۱۳)$$

به‌سادگی می‌توان واریسی کرد که $\hbar c/eB$ دارای ابعاد مساحت است. (یک راه سریع این کار این است که توجه کنیم که eBv/c و در نتیجه eB ابعاد نیرو دارد: $[eB] = [ML/T^2]$ ، در حالی‌که $\hbar c$ دارای ابعاد $[ML^2/T^2]$ $[ML/T][L][L/T] = [ML^2/T^2]$ است.) طول مغناطیسی L_B را با رابطه زیر تعریف می‌کنیم

$$l_B^2 = \frac{\hbar c}{eB} \quad (۸۱-۱۳)$$

$$n_{\max}^* = \frac{L_1 L_2}{2\pi l_B^2} = (\text{مساحت نمونه}) / 2\pi l_B^2 \quad (۸۲-۱۳)$$

اکنون بینیم وقتی پایستریز تراز لاندائو ($n = 0$) پر است چه پیش می‌آید. یک نمونه دوبعدی به مساحت A می‌تواند به ازای هر تراز انرژی یک الکترون بگیرد (شاید پرسید چرا در هر حالت انرژی مطابق معمول دو الکترون وجود ندارند، اما چنانکه در فصل بعد خواهیم دید الکترون‌ها دارای گشتاور مغناطیسی وابسته به اسپین هستند، و در نتیجه حالت‌های "بالا" و "پایین" الکترون انرژی‌های متفاوتی دارند). بنابراین، تعداد کل الکترون‌هایی که پایستریز تراز لاندائو را پر می‌کنند برابر است با

$$n_{\max}^* = A / 2\pi l_B^2$$

اثر کوانتومی هال با اعداد درست

بحث بالا به اثر کوانتومی هال با اعداد درست که اخیراً کشف شده است مربوط می‌شود (شکل ۱۳-۲). در اینجا به توصیف ساده‌ای از این پدیده بسنده می‌کنیم. اگر یک میدان الکتریکی را در جهت مثبت y به نمونه دوبعدی اعمال کنیم، الکترون‌ها در جهت منفی y حرکت می‌کنند، و چگالی جریان عبارت است از

$$j_y = \sigma_0 E_y \quad (۸۳-۱۳)$$

که در آن $\sigma_0 = n_e^* \tau_0 / m_e^*$ در اینجا n_e^* چگالی الکترون، m_e^* جرم مؤثر الکترون در ماده، و τ_0 کمیتی با بعد زمان است، که می‌توان آن را زمان بین برخوردهای الکترون با ناخالصی‌ها و رویدادهای دیگری تعبیر کرد که باعث می‌شوند الکترون انرژی از دست بدهد و به‌طور نامحدود از میدان الکتریکی شتاب نگیرد.

اگر میدان مغناطیسی B را در جهت z اعمال کنیم، به هر الکترون نیروی اضافی $\mathbf{F} = -e(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) / c$ وارد می‌شود. رابطه سرعت \mathbf{v} با چگالی جریان به صورت $\mathbf{j} = -n_e e \mathbf{v}$ است، و در نتیجه الکترون‌ها به گونه‌ای رفتار می‌کنند که انگار میدان الکتریکی اضافی زیر به آنها اعمال می‌شود

$$\mathbf{E}' = \frac{(\mathbf{v} \times \mathbf{B})}{c} = \frac{-\mathbf{j} \times \mathbf{B}}{n_e e c}$$

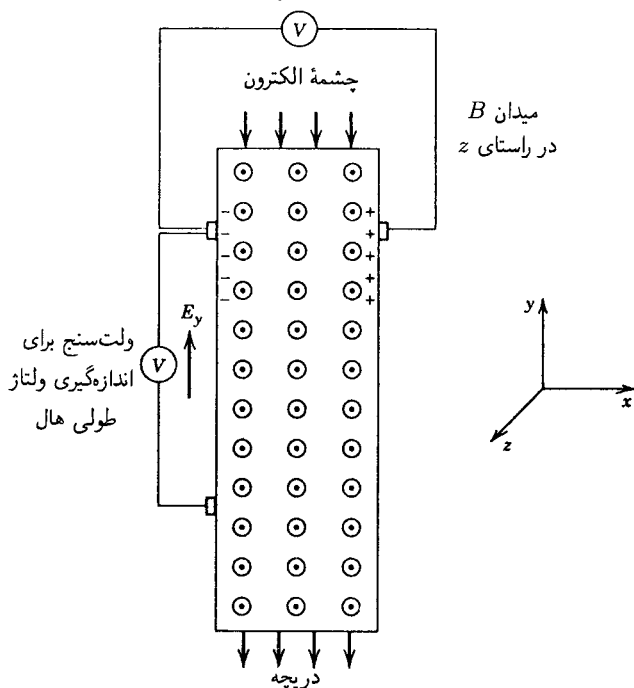
بنابراین، در حضور میدان مغناطیسی چگالی جریان با رابطه زیر داده می‌شود

$$\mathbf{j} = \sigma_0 \mathbf{E} - \sigma_0 \mathbf{j} \times \mathbf{B} / n_e e c \quad (۸۴-۱۳)$$

www.arsanjan.blogfa.com

ولت‌سنج برای اندازه‌گیری

ولتاژ عرضی هال



شکل ۱۳-۲ طرح کلی برای اندازه‌گیری ولتاژ هال.

که در آن B در راستای عمود بر صفحه نمونه است. بنابراین، از حل معادله‌های

$$j_x = -\frac{\sigma_o B}{n_e e c} j_y$$

$$j_y = \sigma_o E_y + \frac{\sigma_o B}{n_e e c} j_x$$

و با توجه به تعریف τ_o به دست می‌آوریم

$$j_y = \frac{\sigma_o}{1 + (eB\tau_o/m_e^+c)^2} E_y$$

$$j_x = -\frac{n_e e c}{B} \left(1 - \frac{1}{1 + (eB\tau_o/m_e^+c)^2} \right) E_y \quad (۱۳-۸۵)$$

تعداد کل الکترون‌ها را می‌توان با $f n_{\max}^+$ نشان داد که در آن f نسبت تعداد کل الکترون‌ها به

$$n_e = \frac{f n_{\max}^*}{A} = f \frac{eB}{hc} \quad (۱۳-۸۶)$$

با استفاده از این رابطه به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \frac{j_y}{E_y} &= \sigma_0 \frac{1}{1 + (eB\tau_0/m_e^*c)^2} \\ \frac{j_x}{e_y} &= -\frac{fe^2}{h} + \frac{n_e ec/B}{1 + (eB\tau_0/m_e^*c)^2} \end{aligned} \quad (۱۳-۸۷)$$

چگالی الکترون‌ها و میدان مغناطیسی B در اختیار آزمایشگر است. اگر n_e ثابت باشد و B تغییر کند، آنگاه نسبت‌های ۱۳-۸۷ را می‌توان برحسب B اندازه گرفت. از طرف دیگر، اگر B ثابت و n_e متغیر باشد، این نسبت‌ها را می‌توان برحسب n_e اندازه گرفت. فون کلیتسینگ، دورد، و پیر در سال ۱۹۸۰ نشان دادند که مقادیر B که به‌ازای آنها $f = 1, 2, 3, \dots$ باعث می‌شوند که (الف) $(j_y|E_y) = 0$ و (ب) $|j_x/E_y| = f(e^2/h)$. یک توضیح ساده این اثر این است که وقتی ترازهای لاندائ پر هستند الکترون نمی‌تواند به‌طور کشسان پراکنده شود، زیرا این الکترون نمی‌تواند به حالت دیگری با همان انرژی پس‌زده شود. الکترون نمی‌تواند با برانگیختگی گرمایی به تراز لاندائ بعدی برود، زیرا در دماهای کم ($T \approx 1K$) و میدانهای مغناطیسی بزرگ ($B \approx 10^5 G$)، $kt \ll eBh/\mu c$ ، بنابراین $\tau_0 \rightarrow \infty$ ، و نتیجه مشاهده شده پیامد ۱۳-۸۷ است. این بحث بیش از حد ساده شده است، زیرا در آن اثرهای بسیار زیادی که در وضعیت واقعی روی می‌دهند به حساب نیامده‌اند. برای مثال، بعضی از الکترون‌ها در ناکاملیهای شبکه بلوری به‌دام می‌افتند. ترازهای لاندائ به‌علت اثرات گرمایی و ناخالصی تیز نیستند، و برهم‌کنشهای الکترون-الکترون کاملاً نادیده گرفته شده‌اند. با وجود این، وقتی همه این پیچیدگی‌ها را منظور کنیم، باز هم در مقادیر بحرانی B نسبت j_x/E_y را با دقتی بهتر از 1° روی 10^5 میلیون مضرب درستی از e^2/h به دست می‌آوریم.^۴

۴. چنانکه آرفالین نشان داده است، این کوانتش دقیق در واقع پیامد ناوردایی پیمانه‌ای است. نمونه‌ای از این استدلال را می‌توانید در کتاب زیر ببینید

C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, Sixth Edition, John Wiley & Sons, Inc New York (1986).

کوانتشن شار و اثر آهارانوف-بوهم

نیر به بحث پس از ۱۳-۲۳ باز می‌گردیم. در یک روش کاملاً صوری، می‌توانیم معادله

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{h}{i} \nabla + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2 \psi(\mathbf{r}) + V(r) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) \quad (۸۸-۱۳)$$

بویستن

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{-i(e/\hbar c) \int \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}} \psi_0(\mathbf{r}) \quad (۸۹-۱۳)$$

حل کنیم. در اینجا $\psi_0(\mathbf{r})$ جواب معادله زیر است

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{h}{i} \nabla \right)^2 \psi_0(\mathbf{r}) + V(r) \psi_0(\mathbf{r}) = E \psi_0(\mathbf{r}) \quad (۹۰-۱۳)$$

تابع $f(\mathbf{r})$ انتگرال خطی زیر است که از یک نقطه ثابت معین P تا نقطه \mathbf{r} گرفته می‌شود

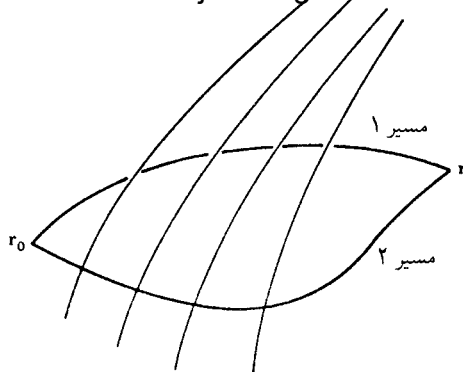
$$f(\mathbf{r}) = \int_P^{\mathbf{r}} d\mathbf{r}' \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}') \quad (۹۱-۱۳)$$

پس اگرال تنها وقتی $\mathbf{B} = 0$ ، یعنی در یک ناحیه آزاد از میدان، معنی دارد زیرا اختلاف انتگرال در دو مسیر مختلف، که آنها را با ۱ و ۲ نشانگذاری می‌کنیم، برابر است با

$$\begin{aligned} \int_1 d\mathbf{r}' \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}', t) - \int_2 d\mathbf{r}' \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}', t) &= \oint d\mathbf{r}' \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}', t) \\ &= \int_S \nabla' \times \mathbf{A}(\mathbf{r}', t) \cdot d\mathbf{S} = \int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = \Phi \end{aligned} \quad (۹۲-۱۳)$$

که در آن از قضیه استوکس استفاده کرده‌ایم، و Φ شار میدان مغناطیسی از سطحی است که بین دو مسیر قرار دارد (شکل ۱۳-۳). بنابراین، تنها اگر $\Phi = 0$ ضریب فاز در ۱۳-۸۹ مستقل از انتخاب مسیر انتگرال خطی خواهد بود. این استقلال وقتی لازم است که بخواهیم تابع موج تک‌مَرّی باشد

(اگر بین دو مسیر مس وجود داشته باشد نواح موج الکترونیایی که روی این دو مسیر حرکت می‌کنند با هم تداخل می‌آورند. یک پیامد جالب این است که اگر الکترونی در یک ناحیه رد در مسیر حرکت کند که همبند شده نیست بلکه "حفره"ای را احاطه کرده باشد که



شکل ۱۳-۳ انتگرالهای $\int_{r_0}^r A(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}'$ در دو مسیر ۱ و ۲ به طور کلی یکسان نیستند، زیرا اختلاف آنها برابر است با شار مغناطیسی Φ در حلقه بسته.

حاوی شار Φ است آنگاه این الکترون پس از تکمیل مدار ضریب فاز اضافی $e^{ie\Phi/\hbar c}$ به دست می آورد. شرط تک مقدار بودن تابع موج الکترون، به طوری که ضریب فاز برابر واحد شود، ایجاب می کند که شار محصور کوانتیده باشد:

$$\Phi = \frac{2\pi\hbar c}{e} n \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (13-93)$$

این وضعیت در حرکت الکترونها در یک حلقه ابررسانا که ناحیه حاوی شار را احاطه کرده است پیش می آید. نخستین آزمایشها، که در سال ۱۹۶۱ انجام شدند^۵، مبتنی بر طرح زیر بودند: حلقه ای از ماده ای که می تواند ابررسانا شود در یک میدان مغناطیسی خارجی در دمایی بالاتر از دمای بحرانی قرار داده می شود، و از این رو حلقه ابررسانا نیست. چون ابررساناها خطوط میدان مغناطیسی را بجز در یک لایه سطحی نازک دفع می کنند، در داخل ابررساناها $\mathbf{B} = 0$. این پدیده را اثر مایسز می نامند.^۶ اگر این حلقه را تا دمایی کمتر از دمای بحرانی سرد کنیم ابررسانا می شود، و شار مغناطیسی در داخل حلقه به دام می افتد (شکل ۱۳-۴). اندازه گیری ساده شار نشان می دهد که رابطه ۱۳-۹۳ با تقریب یک ضریب ثابت برقرار است، یعنی

$$\Phi = \frac{2\pi\hbar c}{(2e)} n \quad (13-94)$$

5. B S Deaver and W Fairbank, *Phys Rev Lett*, **7**, 43 (1961); R Döll and M Nabauer; *ibid*, **7**, 51 (1961).

۶. برای یک بحث عالی از این نشانه های ماکروسکوپی مکانیک کوانتومی مطالعه فصل ۲۱ از جلد سوم سخنرانیهای فاینمن درباره فیزیک اکیدا توصیه می شود.