

اصول مکانیک کوانتومی

رامامورتی شنکار

ویرایش دوم

حسین صالحی

اصول مکانیک کوانتومی

رامامورتی شنکار

(*Ramamurti Shankar 2005*)

ترجمہ:

حسین صالحی

فهرست

- فصل ۱- مقدمه ریاضی..... ۱۹
- ۱-۱- فضاهای برداری خطی: اصول..... ۱۹
- ۲-۱- فضاهای ضرب داخلی..... ۲۶
- ۳-۱- فضاهای دوگان(همزاد) و نمادگذاری دیراک..... ۲۹
- ۱-۳-۱- بسط بردارها در یک پایه راست هنجار..... ۳۰
- ۲-۳-۱- عمل الحاقی..... ۳۱
- ۴-۱- زیر فضاها..... ۳۶
- ۵-۱- عملگرهای خطی..... ۳۶
- ۶-۱- عناصر ماتریسی عملگرهای خطی..... ۳۹
- ۷-۱- تبدیلات اکتیو و پسیو (فعال و غیرفعال)..... ۴۷
- ۸-۱- مسئله ویژه مقدراری..... ۴۸
- ۹-۱- توابع عملگرها و مفاهیم مربوطه..... ۷۲
- ۱۰-۱- تعمیم به ابعاد نامتناهی..... ۷۴
- فصل ۲- مروری بر مکانیک کلاسیک..... ۹۳
- ۱-۲- اصل کمترین کنش و مکانیک لاگرانژی..... ۹۳
- ۲-۲- لاگرانژی الکترومغناطیسی..... ۱۰۱
- ۳-۲- مسئله دو- جسمی..... ۱۰۳
- ۴-۲- ذره تا چه اندازه با هوش است؟..... ۱۰۴
- ۵-۲- فرمالیزم هامیلتونی..... ۱۰۵
- ۶-۲- نیروی الکترومغناطیسی در طرح هامیلتونی..... ۱۰۹
- ۷-۲- مختصه‌های چرخه‌ای، گروه‌های پواسون و تبدیلات کانونیک..... ۱۰۹
- ۸-۲- تقارن‌ها و پیامدهای آنها..... ۱۱۷
- فصل ۳- هر چیزی با مکانیک کلاسیک سازگار نیست..... ۱۲۵
- ۱-۳- ذرات و امواج در فیزیک کلاسیک..... ۱۲۵
- ۲-۳- آزمایشی با امواج و ذرات (کلاسیکی)..... ۱۲۶
- ۳-۳- آزمایش دوشکافی با نور..... ۱۲۸
- ۴-۳- امواج مادی (امواج دوپروی)..... ۱۳۱
- ۵-۳- نتایج..... ۱۳۱

فصل ۴ - اصول موضوعه ۱۳۳

۱-۴- اصول موضوعه ۱۳۳

۲-۴- بحث اصول موضوعه (۱) تا (۳) ۱۳۳

۳-۴- معادله شرودینگر ۱۶۲

فصل ۵ - مسائل ساده در یک بعد ۱۷۱

۱-۵- ذره آزاد ۱۷۱

۲-۵- ذره در جعبه ۱۷۷

۳-۵- معادله پیوستگی احتمال ۱۸۵

۴-۵- پتانسیل پله: مسئله‌ای در پراکندگی ۱۸۸

۵-۵- آزمایش دو شکافی ۱۹۶

۶-۵- چند قضیه ۱۹۶

فصل ۶ - حد کلاسیکی ۱۹۹

فصل ۷ - نوسانگر هماهنگ ۲۰۵

۱-۷- چرا نوسانگر هماهنگ را مطالعه می‌کنیم؟ ۲۰۵

۲-۷- مروری بر نوسانگر کلاسیک ۲۰۸

۳-۷- کوانتس نوسانگر (پایه مختصه) ۲۰۹

۴-۷- نوسانگر در پایه انرژی ۲۲۲

۵-۷- گذر از پایه انرژی به پایه X ۲۳۷

فصل ۸ - فرمول بندی نظریه کوانتومی ۲۴۱

۱-۸- دستورالعمل انتگرال مسیر ۲۴۱

۲-۸- تحلیل دستورالعمل ۲۴۱

۳-۸- تقریبی برای $U(t)$ یک ذره آزاد ۲۴۳

۴-۸- محاسبه انتشارگر ذره آزاد با انتگرال مسیر ۲۴۴

۵-۸- هم ارزی با معادله شرودینگر ۲۴۷

۶-۸- پتانسیل‌های به شکل $V = a + bx + cx^2 + dx + ex^i$ ۲۴۹

فصل ۹ - رابطه عدم قطعیت هایزنبرگ ۲۵۳

۱-۹- مقدمه ۲۵۳

۲-۹- استنتاج روابط عدم قطعیت ۲۵۳

- ۲۵۵ ۹-۳- بسته موج با کمینه عدم قطعیت
۲۵۷ ۹-۴- کاربردهای اصل عدم قطعیت
۲۶۰ ۹-۵- رابطه عدم قطعیت انرژی - زمان

فصل ۱۰ - سیستم‌های با N درجه آزادی ۲۶۳

- ۲۶۳ ۱۰-۱- ذره در یک بعد
۲۷۴ ۱۰-۲- چند ذره در چند بعد
۲۷۶ ۱۰-۳- ذرات یکسان

فصل ۱۱ - تقارن‌ها و پیامدهای آنها ۲۹۵

- ۲۹۵ ۱۱-۱- کلیات
۲۹۵ ۱۱-۲- نوردایی انتقالی در مکانیک کوانتومی
۳۱۰ ۱۱-۳- نوردایی انتقال در زمان
۳۱۲ ۱۱-۴- نوردایی پاریته
۳۱۶ ۱۱-۵- تقارن وارونی- زمان

فصل ۱۲ - نوردایی چرخشی و تکانه زاویه‌ای ۳۲۱

- ۳۲۱ ۱۲-۱- انتقالات در دو بعد
۳۲۲ ۱۲-۲- چرخش‌ها در دو بعد
۳۲۹ ۱۲-۳- مسئله ویژه مقداری L_z
۳۳۴ ۱۲-۴- تکانه زاویه‌ای در سه بعد
۳۳۷ ۱۲-۵- مسئله ویژه مقداری L_z و L^2
۳۵۶ ۱۲-۶- حل مسائل دارای نوردایی چرخشی

فصل ۱۳ - اتم هیدروژن ۳۷۱

- ۳۷۱ ۱۳-۱- مسئله ویژه مقداری
۳۷۷ ۱۳-۲- تبهگنی طیف هیدروژن
۳۷۹ ۱۳-۳- برآوردهای عددی و مقایسه با آزمایش
۳۸۶ ۱۳-۴- اتم‌های چند الکترونی و جدول تناوبی

فصل ۱۴ - اسپین ۳۹۱

- ۳۹۱ ۱۴-۱- مقدمه
۳۹۱ ۱۴-۲- ماهیت اسپین چیست؟

۶..... اصول مکانیک کوانتومی

- ۳-۱۴- سینماتیک اسپین..... ۳۹۲
۴-۱۴- دینامیک اسپین..... ۴۰۳
۵-۱۴- بازگشت درجات آزادی مداری..... ۴۱۵

فصل ۱۵ - جمع تکانه‌های زاویه‌ای..... ۴۲۱

- ۱-۱۵- یک مثال ساده..... ۴۲۱
۲-۱۵- مسئله عمومی..... ۴۲۶
۳-۱۵- عملگرهای تانسوری کاهش ناپذیر..... ۴۳۴
۴-۱۵- توضیح برخی تبهگنی‌های «تصادفی»..... ۴۳۹

فصل ۱۶ - روش‌های وردشی و WKB..... ۴۴۷

- ۱-۱۶- روش وردشی..... ۴۴۷
۲-۱۶- روش ونتزل - کرامر - بریلوئن..... ۴۵۳

فصل ۱۷ - نظریه اختلال مستقل از زمان..... ۴۶۹

- ۱-۱۷- فرمالیزم..... ۴۶۹
۲-۱۷- مثال‌ها..... ۴۷۲
۳-۱۷- نظریه اختلال تبهگن..... ۴۸۲

فصل ۱۸ - نظریه اختلال وابسته به زمان..... ۴۹۱

- ۱-۱۸- مسئله..... ۴۹۱
۲-۱۸- نظریه اختلال مرتبه اول..... ۴۹۲
۳-۱۸- مرتبه‌های بالاتر در نظریه اختلال..... ۵۰۲
۴-۱۸- بحث عمومی برهمکنش‌های الکترومغناطیسی..... ۵۱۰
۵-۱۸- برهمکنش اتم‌ها با تابش الکترومغناطیسی..... ۵۱۷

فصل ۱۹ - نظریه پراکندگی..... ۵۳۹

- ۱-۱۹- مقدمه..... ۵۳۹
۲-۱۹- مروری بر پراکندگی یک - بعدی و کلیات..... ۵۴۰
۳-۱۹- تقریب بورن (توصیف وابسته به زمان)..... ۵۴۵
۴-۱۹- تقریب بورن (توصیف وابسته به زمان)..... ۵۵۰
۵-۱۹- بسط موج جزئی..... ۵۶۰
۶-۱۹- پراکندگی دو- ذره‌ای..... ۵۷۱

فصل ۲۰ - معادله دیراک ۵۷۹

۲۰-۱- معادله دیراک ذره آزاد ۵۷۹

۲۰-۲- برهمکنش الکترومغناطیسی ذره دیراک ۵۸۲

۲۰-۳- مطالبی بیشتر در مورد مکانیک کوانتومی نسبی ۵۸۹

فصل ۲۱ - انتگرال‌های مسیر II ۵۹۵

۲۱-۱- به دست آوردن انتگرال مسیر ۵۹۶

۲۱-۲- فرمالیزم زمان موهومی ۶۲۹

۲۱-۳- انتگرال‌های مسیر اسپینی و فرمیونی ۶۵۳

۲۱-۴- خلاصه ۶۷۰

کتابنامه ۶۷۳

ضمیمه ۶۷۵

A-۱- معکوس سازی ماتریس ۶۷۵

A-۲- انتگرال‌های گوسی ۶۷۸

A-۳- اعداد مختلط ۶۸۰

A-۴- دستور العمل $\mathcal{I}\mathcal{E}$ ۶۸۱

پاسخ تمرین‌های منتخب ۶۸۳

جدول ثابت‌ها ۶۸۷

پیشگفتار ویرایش دوم

با گذشت یک و نیم دهه از زمانی که ویرایش اول را نوشتم هیچ چیزی عقیده‌ام را در مورد درستی روش کلی به کار رفته در آن کتاب عوض نکرده است. این را بر اساس واکنش اساتید و دانشجویان و مطالعه گاه به گاه خودم اظهار می‌کنم، اگرچه بخش‌هایی بودند که احساس کردم می‌توانستند بهتر شوند و همین‌طور بخش‌هایی که با نبودنشان آزارم دادند. در این ویرایش همه اینها را تصحیح کرده‌ام.

جدای از حذفیات اندکی که انجام داده‌ام سه تغییر عمده صورت داده‌ام. ابتدا مقدار قابل توجهی از مقدمه ریاضی فصل اول را بازنویسی کرده‌ام. سپس مبحث وارونی زمان را اضافه کرده‌ام. نمی‌دانم چطور این مطلب در ویرایش اول فراموش شده است - دوست دارم به عقب برگردم و آن را لحاظ کنم. مهمترین تغییر، لحاظ کردن فصل ۲۱، انتگرال‌های مسیر II، است. ویرایش اول با اختصاص یک فصل به این موضوع، که در آن روزها کاملاً ناشناخته بود، جانبداری من از این موضوع را نشان می‌دهد. در این ویرایش تمام محدودیت‌ها را کنار گذاشته‌ام و بسیاری از انتگرال‌های مسیر و کاربردهای آنها را ارائه کرده‌ام. در حالی که در فصل ۸ فقط دستورالعمل انتگرال مسیر ارائه شده، در اینجا با به دست آوردن آن شروع کرده‌ام. انتگرال فضای پیکربندی، انتگرال فضای فاز و انتگرال حالت همدوس (نوسانگر) را به دست آورده‌ام. دو کاربرد را هم بحث نموده‌ام: استنتاج و کاربرد فاز بری و مطالعه پایین‌ترین تراز لاندائو با یک چشم به اثر کوانتومی هال. ارتباط این موضوعات غیر قابل تردید است. بعد از آن انتگرال‌های مسیر زمان موهومی - توصیف آن از تونل‌زنی، اینستانتون‌ها، و شکست تقارن، و رابطه آن با مکانیک آماری کلاسیکی و کوانتومی - ارائه شده است. بعد از آن به مطالعه انتگرال‌های مسیر حالت‌های همدوس اسپینی و انتگرال‌های مسیر برای فرمیون‌ها اختصاص داده شده است. اینها به نظر می‌رسید که برای کتابی مثل این خیلی پیشرفته باشند اما عقیده دارم که دیگر این‌طور نیست و این موضوعات به شکلی وسیع به کار می‌روند.

با زمان محدود، چگونه اساتید باید به این فصل اضافی بپردازند؟ من پیشنهاد می‌کنم که برخی موضوعات را از فصول قبلی حذف کنید (نه من یک نفر، بلکه اطرافیان من هم کل کتاب را پوشش می‌دهند). یک روش واقع‌بینانه، تدریس بخشی از فصل ۲۱ و واگذاری بقیه به عنوان مطالعه آزاد، امتحانات تیک-هوم و غیره است. نادیده گرفتن این فصل می‌تواند به منزله از دست دادن فرصتی بزرگ برای دانشجو جهت مواجه شدن با مفاهیمی باشد که برای بسیاری از موضوعات تحقیقات، محوری هستند. از آنجا که هدف این فصل هدایت دانشجویان به طرف موضوعات روز است از بقیه کتاب مختصرتر است و انتظار می‌رود که دانشجویان به مراجع آخر کتاب مراجعه نمایند.

طی سال‌ها من بازخوردهای بسیار مفیدی را دریافت کرده‌ام و از همه اساتید و دانشجویانی که برای انجام این کار وقت صرف کرده‌اند تشکر می‌کنم. از *Howard Haber* برای بحث تقریب بورن؛ *Harsh Mathur* و *Ady Stern* برای بحث‌های فاز بری؛ *Alen Chodos*، *Ganpathy Ilya Gruzberg*، *Murthy*، *Charlie Sommerfeld* و *Senthil Todari* به خاطر نکات مفید در مورد فصل ۲۱ تشکر می‌نمایم. از *Captain Richard F. Malm, U.S.C.G.* به خاطر غلط‌گیری اشتباهات چاپی قدردانی می‌کنم. از همسر و فرزندانم به خاطر حمایت‌هایشان ممنونم.

R. Shankar

New Haven, Connecticut

پیشگفتار ویرایش اول

با وجود کتاب‌های بسیاری که در زمینه مکانیک کوانتومی موجودند به نظر می‌رسد که به چیزی بیش از آنچه موجود است نیاز داریم مثلاً کتابی که حاوی آخرین نسخه جدول اعداد صحیح باشد. اما این موضوع مرا از تلاش برای منتشر کردن کتاب خودم و ارائه چگونگی تدریس آن باز نداشت (همان‌طور که پیشینیان مرا باز نداشت). روشی که در اینجا معرفی می‌شود (و بزودی توصیف می‌شود) اولین بار روی گروهی در تابستان سال ۷۶ در هاروارد در مقطع کارشناسی، بار دیگر در تابستان ۷۷ و اخیراً در دانشگاه یاله در مقطع کارشناسی (۷۸-۷۷) و کارشناسی ارشد (۷۹-۷۸) در طی یک دوره طولانی یک ساله اجرا شده است. در همه موارد، نتایج بسیار رضایت‌بخش بودند به این مفهوم که به نظر می‌رسید دانشجویان موضوع را به خوبی یاد گرفته‌اند و از ارائه آن بهره‌مند شده‌اند. در واقع این پاسخ مجذوب و با حرارت و تشویق آنها بود که مرا متقاعد کرد که رویکردم درست است و مرا به سمت نوشتن این کتاب سوق داد.

ایده اصلی، توسعه موضوع از اصول موضوعه آن بعد از یک سری مقدمات ضروری است. اکثر مردم بر این عقیده‌اند که بهترین روش آموزش هر موضوع که به نقطه توسعه و پیشرفت رسیده است و می‌تواند به چند اصل موضوع تقلیل یابد، شروع با اصول موضوعه است چون این رویکرد است که به دانشجویان درکی کامل از اصول و پایه‌های نظریه و چگونگی کاربرد آن‌ها می‌دهد. اما آنها استدلال می‌کنند که در حالی که این رویکرد در مورد نسبت خاص یا مکانیک خاص روش بسیار خوبی است، برخی دانشجویان در رابطه با یادگیری مکانیک کوانتومی بندرت با زبان ریاضی، که اصول موضوعه به آن زبان بیان می‌شود، آشنایی دارند. من با این گروه موافق هستم ولی اعتقاد دارم که این مشکل باید و می‌تواند رفع شود. این کتاب تلاشی برای انجام همین کار است.

این کتاب با یک فصل نسبتاً طولانی آغاز می‌شود که در آن ریاضیات مورد نیاز فضاهای برداری از مفاهیم ساده در مورد بردارها و ماتریس‌ها، که فرض می‌شود دانشجویان با آنها آشنا است، توسعه یافته و فراتر می‌رود. سطح سختی مطلب آنقدر است که فکر می‌کنم برای آماده کردن دانشجویان برای کار با مکانیک کوانتومی لازم است. این فصل که نوعاً شش تا هشت ساعت درسی لازم دارد حاوی مثال‌هایی از فیزیک است تا دانشجویان از انتظار کشیدن برای «فیزیک واقعی» ناراحت و بی‌قرار نشوند. از آنجا که ریاضیات ارائه شده باید دیر یا زود آموزش داده شود پیشنهاد می‌شود که این کار زودتر انجام شود چون بدین ترتیب دانشجویان، وقتی به آن دست یافتند، می‌توانند تمام توجه خود را به نظریه کوانتومی معطوف کنند بدون اینکه مجبور به درگیر شدن همزمان با قضایای ریاضی باشند. همین‌طور با جدا کردن قضایای ریاضی از اصول موضوعه فیزیکی از هر نوع اشتباه ممکن بین آنها در همان ابتدا جلوگیری شده است.

بعد از این فصل، فصلی به مکانیک کلاسیکی اختصاص داده شده که در آن فرمالیزم‌های لاگرانژی و هامیلتونی به‌طور عمیق توسعه یافته‌اند. اینکه چه مقدار از این فصل تدریس شود با استاد مربوطه است چون بیشتر دانشجویان این مطلب را می‌دانند و در این فصل رابطه بین مکانیک کلاسیکی و کوانتومی را بهتر درک خواهند کرد. فصل ۳ به مطالعه مختصر آزمایشات ایده‌آل‌سازی شده اختصاص

داده شده است، که بی کفایتی مکانیک کلاسیکی را مشخص کرده و نگاهی اجمالی به مکانیک کوانتومی دارند.

با یادگیری و ایجاد انگیزه در دانشجویان، اصول موضوعه مکانیک کوانتومی یک ذره منفرد در یک بعد به آنها آموزش داده می شود. در اینجا از «اصل موضوع» به این معنی استفاده می کنیم که نمی تواند از استدلال ریاضی یا منطقی خالص استنتاج شود و با داشتن آن می توان مسائل مکانیک کوانتومی را فرمول بندی و حل کرد و نتایج را تفسیر نمود. این آن معنی ای نیست که یک اصل موضوع گذار حقیقی آن را به کار می برد. برای نمونه، جایی که اصل موضوع گذار حقیقی فقط مسلم فرض کرده است که متغیرهای دینامیکی به وسیله عملگرهای فضای هیلبرت مشخص می شوند، من هویت های عملگرها را هم پیوست کرده ام، یعنی عملگرهایی را که اندازه حرکت و مختصه را نمایش می دهند (و از آنها بقیه عملگرها می توانند ساخته شوند) مشخص نموده ام. همین طور من به این گفته بسنده نکرده ام که یک عملگر هامیلتونی وجود دارد که از طریق معادله $i\hbar \partial|\psi\rangle / \partial t = H|\psi\rangle$ بر تحول زمانی حاکم است بلکه گفته ام که H از هامیلتونی کلاسیکی با جاگذاری x و p با عملگرهای متناظرشان به دست می آید. در حالی که اصول موضوعه کلی تر این حُسن را دارند که اعتبار خود را حفظ می کنند، وقتی به سیستم های با درجات آزادی بیشتر، با یا بدون نظایر کلاسیکی، می رویم دانشجویان با داشتن همین اصول موضوعه نخواهند دانست که چطور چیزی مثل طیف نوسانگر را محاسبه کنند. حال البته می توان تلاش کرد تا این جانشینی های عملگر را "استنتاج" کرد، اما برای انجام این کار مجبوریم به مفاهیمی متوسل شویم که خودشان ماهیت اصل موضوعی دارند (برای "استنتاج" معادله شرودینگر هم همین وضعیت است). همین طور که جلو می رویم این اصول موضوعه به درجات آزادی بیشتر تعمیم داده می شوند و به دلایل آموزشی این تعمیم ها به تعویق انداخته می شوند. شاید وقتی دانشجویان به پایان این کتاب برسند بتوانند خود را از جانشینی های عملگر خاص رها کرده و به مکانیک کوانتومی به عنوان یک فرمالیزم ریاضی عام تابع اصول موضوعه معین نگاه کنند (در مفهوم دقیق عبارت).

اصول موضوعه فصل ۴ با بحثی طولانی و همراه با مثال های زیاد از فضا های هیلبرت ساختگی سه بعدی ادامه می یابند. با وجود این برای دانشجویان این مطالب مشکل خواهند بود. فقط وقتی به جلو می روند و این اصول موضوعه را می بینند که بارها و بارها در بقیه کتاب به کار رفته اند، در طرح مسائل و تفسیر نتایج، متوجه می شوند که چطور این بازی انجام می شود. امید است که آنها تا پایان فارغ التحصیلی در درون خویش به این نتیجه برسند. من فکر می کنم که هر تلاشی برای آرام کردن این تندباد اولیه سرانجام آن را خاموش خواهد کرد.

فصل ۵ به مسائل استاندارد در یک بعد می پردازد. شایسته است ذکر کنیم که پراکنندگی از یک پله پتانسیل با استفاده از یک رویکرد بسته موجی بحث می شود. اگر این موضوع در این مرحله خیلی مشکل بنظر رسید، استاد مربوطه می تواند تصمیم بگیرد که بعد از فصل ۷ (نوسانگر)، وقتی که دانشجویان

تجربه بیشتری کسب کردند، به آن برگردد. هر چند من فکر می‌کنم که دیر یا زود دانشجویان باید با این بحث پراکندگی آشنایی پیدا کنند.

حد کلاسیکی موضوع فصل بعد است. نوسانگر هماهنگ به‌طور مفصل در فصل بعد از آن بحث خواهد شد. این مسئله اولین مسئله واقعی بوده و ممکن است استاد مشتاق باشد در سریع‌ترین زمان ممکن به آن برسد. اگر استاد مایل باشد می‌تواند حد کلاسیکی را بعد از بحث نوسانگر ارائه دهد.

در فصل بعد فرمول‌بندی انتگرال مسیر فاینمن را بحث می‌کنیم. با درک شهودی که این روش فراهم می‌کند و زیبایی آن (گذشته از توانایی آن برای به‌دست دادن انتشارگر کامل فقط در چند دقیقه در دسته‌ای از مسائل)، درک علت حذف آن از اکثر کتب سخت است. در حالی که محاسبه انتگرال مسیر مسلماً سخت است (یک مثال در اینجا ارائه می‌شود)، مفهوم نوشتن انتشارگر به صورت یک جمع روی دامنه‌های ناشی از مسیرهای مختلف نسبتاً ساده است. اهمیت این دیدگاه روز به روز برای کسانی که در حوزه مکانیک آماری و نظریه میدان کار می‌کنند روشن‌تر می‌شود. من فکر می‌کنم که حتی الامکان باید تلاش کرد تا حداقل سه بخش اول این فصل (و شاید پنج بخش اول) در دوره درسی گنجانده شود.

محتوای فصول بعدی، در تقریب اول، استاندارد است. البته این سبک مختص اینجانب (مؤلف) است چون این فصول مربوط به موضوعات ویژه هستند. برای مثال کل فصل ۱۱ به تقارن‌ها و پیامدهای آنها اختصاص داده شده است. فصل مربوط به اتم هیدروژن هم شامل بخشی مربوط به چگونگی برآوردهای عددی است که با چند نکته شروع می‌شود. فصل ۱۵ علاوه بر اندازه حرکت‌های زاویه‌ای، شامل بخشی است که مربوط به تبهگنی‌های "تصادفی" در طیف هیدروژن و نوسانگر همسانگرد است. کوانتس میدان تابشی در فصل ۱۸، که در مورد نظریه اختلال وابسته به زمان است، بحث می‌شود. سرانجام بحث معادله دیراک در فصل ۲۰ ارائه می‌شود تا نشان دهد که چیزهایی مثل اسپین الکترون، گشتاور مغناطیسی آن، برهمکنش اسپین-مدار و غیره که در فصول قبلی به صورت موردی و بدون عمویّت معرفی شدند، به صورت یک کل مرتبط به هم از معادله دیراک بیرون می‌آیند و به دانشجویان چشم‌اندازی از آنچه پیش روست نشان دهد. این فصل نشان می‌دهد که چطور فاینمن مسئله جوابهای انرژی-منفی را حل می‌کند (تا حدی که برای بوزون‌ها و فرمیون‌ها به کار می‌رود).

این کتاب برای چه کسانی در نظر گرفته شده است؟

در نوشتن این کتاب، دانشجویانی خطاب قرار گرفته‌اند که می‌خواهند مطلب را به صورت خود آموز یاد بگیرند، یعنی این کتاب با لحاظ کردن تعداد زیادی تمرین و پاسخ اکثر آنها و بحث کردن نکات مهمی که دانشجویان را هنگام یادگیری دچار مشکل می‌کند تا حد امکان جامع و بی‌نیاز از کتب دیگر نوشته شده است. اما می‌دانم که به احتمال زیاد عملاً به عنوان یک کتاب درسی به کار خواهد رفت و برای یک دوره کامل یک ساله در مقطع کارشناسی ارشد مطلب کافی وجود دارد. هر چند که جا دادن آن در یک دوره یک ساله طولانی کارشناسی کاملاً راحت است. چند بخشی که می‌توانند بدون از دست رفتن

پیوستگی حذف شوند اشاره شده‌اند. ترتیب موضوعات هم می‌تواند همان‌طور که قبلاً در همین مقدمه اشاره شد تغییر داده شود. فکر می‌کنم که بهتر است استاد مربوطه نگاهی سطحی به کل کتاب کرده و دوره را با توجه به سطح آمادگی دانشجویان و اهداف درس برای کلاس خود تنظیم کند. البته اگر استاد درس با استدلال‌هایی که در اینجا می‌کنیم هم‌فکر و هم‌عقیده نباشد، یعنی شروع با آموزش ریاضیات و ادامه دادن با اصول موضوعه، این کتاب خیلی مفید نخواهد بود. برای اساتیدی که احساس می‌کنند این روش اصالتاً خوب است ولی در عمل خوب کار نمی‌کند مجدداً تکرار می‌کنم که این روش در عمل نه تنها توسط من بلکه توسط بسیاری از اساتید دیگر هم خوب جواب داده است.

این کتاب ممکن است مورد استفاده دانشجویان غیر رشته فیزیک هم قرار گیرد (در کلاس من برای دانشجویان شیمی هم به خوبی جواب داده است). اگر چه این کتاب برای دانشجویانی نوشته شده است که هیچ آشنایی با موضوع ندارند ولی مطالعات قبلی آنها در رابطه با موضوع می‌تواند مفید باشد. سرانجام از همه اساتید و دانشجویان دعوت می‌شود که پیشنهادات و انتقادات خود را چه در مورد نحوه آموزش و چه در مورد خطاها و اشتباهات چاپی برای بهبود کار با من در میان بگذارند.

New Haven, Connecticut

R. Shankar

مقدمه

توصیف ما از جهان فیزیکی ماهیتاً پویا بوده و متحمل تغییر و تحول می‌شود. در هر زمان ما دانش خود از پدیده‌های طبیعی را به وسیله یک سری قوانین معین خلاصه می‌کنیم. این قوانین پدیده‌های شناخته شده تا آن زمان را تا دقتی قابل قبول توصیف می‌کنند. با گذشت زمان، حوزه مشاهدات خود را گسترش می‌دهیم و دقت اندازه‌گیری را بهبود می‌بخشیم. با انجام این کار، پیوسته امتحان می‌کنیم تا ببینیم که آیا قوانین کماکان معتبر هستند یا نه. قوانینی که معتبر باقی می‌مانند توانمندتر می‌شوند و آنهایی که اعتبار خود را از دست می‌دهند می‌بایست کنار گذاشته شده و جای خود را به قوانین جدیدی بدهند که معتبر هستند.

در این تصویر در حال تغییر، قوانین مکانیک کلاسیک که توسط گالیله، نیوتن، و بعداً توسط اویلر، لاگرانژ، هامیلتون، ژاکوبی و دیگران فرمول‌بندی شده‌اند به مدت تقریباً سه قرن بدون تغییر ماندند. توسعه فیزیک کلاسیک در حدود آغاز قرن حاضر با اولین مانع خود مواجه شد. این مانع در دو جبهه اتفاق افتاد: در سرعت‌های بالا و مقیاس‌های (اتمی) کوچک. مشکل سرعت‌های بالا توسط انیشتین با موفقیت حل شد، کسی که مکانیک نسبیتی را عرضه کرد، در حالی که بنیانگذاران مکانیک کوانتومی - بوهر، هایزنبرگ، شرودینگر، دیراک، بورن و دیگران - مشکل فیزیک مقیاس‌های کوچک را حل کردند. تلفیق مکانیک کوانتومی و نسبیتی، که برای توصیف پدیده‌هایی که شامل سرعت‌های بالا و مقیاس‌های کوچک به‌طور هم‌زمان هستند، بسیار مشکل به نظر می‌رسد. اگر چه تا به امروز پیشرفت‌های زیادی در رابطه با این موضوع، موسوم به نظریه کوانتومی میدان، صورت گرفته است ولی تا این تاریخ سوالات زیادی بدون پاسخ مانده‌اند. ما در اینجا فقط به مسائل مقیاس - کوچک یعنی مکانیک کوانتومی غیر نسبیتی متمرکز خواهیم شد.

گذر از مکانیک کلاسیکی به کوانتومی چند ویژگی دارد که برای همه گذرهای این چنینی، که در آنها یک نظریه قدیمی با نظریه‌ای جدید جایگزین می‌شود، مشترک هستند:

(۱) - یک حوزه D_0 از پدیده‌هایی وجود دارد که به وسیله نظریه جدید توصیف می‌شوند و یک زیر حوزه D_0 از آن وجود دارد که نظریه قدیمی (تا یک دقت معین) قابل قبول و اعتماد است.

(۲) - در زیر حوزه D_0 هر دو نظریه می‌توانند برای انجام پیش‌بینی‌های کمی مورد استفاده قرار گیرند. شاید اغلب مصلحت این باشد که از نظریه قدیمی بهره بگیریم.

(۳) - علاوه بر دقت عددی، نظریه جدید موجب تغییرات مفهومی بنیادی می‌شود. این تغییرات به علت ماهیت کیفی خود روی همه D_0 تأثیر خواهند گذاشت.

برای مثال در مورد نسبیت، D_0 و D_0 پدیده‌های (ماکروسکوپی) شامل به ترتیب سرعت‌های کوچک و سرعت‌های دلخواه هستند که البته دومی با سرعت نور محدود می‌شود. نظریه نسبیت علاوه بر ارائه پیش‌بینی‌های عددی بهتر برای پدیده‌های سرعت - بالا برخی مفاهیم دست پرورده روش نیوتنی مثل زمان مطلق، طول مطلق، سرعت‌های نامحدود برای ذرات و غیره را کنار می‌گذارد.

به همین ترتیب مکانیک کوانتومی نه تنها پیش‌بینی‌های عددی بهتری برای جهان میکروسکوپی فراهم می‌کند بلکه تغییراتی مفهومی ایجاد می‌کند که بسیاری از پایه‌های تفکر کلاسیک را متزلزل می‌کنند.

این کتاب با شروع از اصول موضوعه شما را با این موضوع آشنا می‌کند. تا شروع اصول موضوعه سه فصل فاصله دارید که در این سه فصل خلاصه‌ای از مفاهیم ریاضی که در بیان اصول موضوعه ظاهر می‌شوند، مروری بر مکانیک کلاسیک و توضیفی مختصر از اساس تجربی نظریه کوانتومی را خواهید یافت. در بقیه کتاب، از اصول موضوعه برای فرمول‌بندی و حل انواع مسائل مکانیک کوانتومی بهره گرفته می‌شود.

قابل توجه دانشجویان

تا جایی که می‌توانید برای حل مسائل، بویژه مسائلی که با علامت ستاره مشخص شده یا نتایج آنها با معادلات شماره‌دار مشخص شده است، همت کنید. جواب هر تمرین یا با یک تمرین دیگر یا در پایان کتاب ارائه شده است.

فصل اول بسیار مهم است پس با شتاب زدگی از آن رد نشوید. حتی اگر با ریاضیات آن آشنایی دارید برای آشنایی با نمادگذاری آن را مطالعه کنید.

من اظهار نمی‌کنم که موضوع کتاب آسان است ولی امیدوارم که این کتاب آن را در نظر شما معقول و منطقی جلوه دهد.

با آرزوی موفقیت

سخن مترجم

کتاب پر حجم و جامعی که در پیش رو داریم نگاهی متفاوت به مبحث مکانیک کوانتومی دارد و با توجه به این که در دوران تحصیل خود صرفاً از این کتاب به عنوان کتاب درسی استفاده نموده‌ام، آن را بسیار کامل و سودمند می‌دانم و مطالعه آن را به تمامی دانشجویان رشته فیزیک و داوطلبان آزمون کارشناسی ارشد توصیه می‌کنم. در ترجمه این کتاب سعی بر آن بوده است تا در حد توان اثری با کمترین اشتباه و خطا و با دقت بالا ارائه شود اما بی‌شک همانند تمام کارهای دیگر بدون نقص نیست. لذا از همه صاحب‌نظران و اساتید و دانشجویان عزیز خواهشمندم نظرات، پیشنهادات و انتقادات ارزشمند خود را به آدرس h_salehi2008@yahoo.com ارسال نمایند.

با سپاس فراوان

حسین صالحی

۱۳۸۲

هدف این کتاب آماده کردن شما برای ورود به بحث مکانیک کوانتومی با شروع از اصول موضوعه آن است. در این فصل قصد داریم شما را به ابزارهای ریاضی لازم مجهز کنیم. تمام ریاضیاتی که نیاز خواهید داشت، با شروع از یک سری مفاهیم پایه و اساسی در مورد بردارها و ماتریس‌ها، که فرض می‌شود با آنها آشنایی دارید، در اینجا ارائه می‌شود. تعدادی مثال و تمرین در رابطه با مکانیک کلاسیک ارائه شده است تا هم گشایشی از لحاظ ریاضی فراهم شود و هم قابلیت‌های کاربردی زیاد تکنیک‌هایی را که در اینجا فرا می‌گیرید نشان دهد. کوششی که شما در این فصل مهم اول برای تبخّر و تسلط در موضوع انجام می‌دهید به زحمتش می‌ارزد: یعنی نه تنها شما را برای این دوره درسی آماده خواهد کرد بلکه بسیاری از مفاهیمی را که تاکنون بتدریج یاد گرفته‌اید به صورت یکجا ارائه خواهد داد. برای یادگیری بهتر این فصل می‌بایست مثل هر فصل دیگر تمرین‌ها را حل کنید.

۱-۱- فضاهای برداری خطی: اصول

در این بخش فضاهای برداری خطی را به شما معرفی خواهیم کرد. مطمئناً شما از فیزیک مقدماتی با پیکان‌های (خطوط جهت‌دار) سرعت، نیرو، جابه‌جایی، گشتاور و غیره، که به وسیله اندازه و جهت مشخص می‌شوند، آشنا هستید و می‌دانید که چطور آنها را با هم جمع کنید یا اعداد را در آنها ضرب کنید و قواعدی را که این عمل‌ها از آنها پیروی می‌کنند می‌دانید. برای مثال می‌دانید که ضرب عدد توزیع‌پذیر است: ضرب عدد در مجموع دو بردار، مجموع حاصل ضرب هاست. آنچه می‌خواهیم انجام دهیم بیرون آوردن مجموعه‌ای از ویژگی‌های اصلی یا اصول موضوعه از این مورد ساده است، هر مجموعه از اشیاء که از این اصول موضوعه پیروی کنند تشکیل یک فضای برداری خطی می‌دهند. هوش و ذکاوت در اینجا نقش دارد که تصمیم بگیریم کدامیک از ویژگی‌ها در این تعمیم حفظ شوند. اگر ویژگی‌های زیادی را بخواهید حفظ کنید چیز دیگری باقی نخواهد ماند، اگر ویژگی‌های خیلی کمی را حفظ کنید، نتایج جالبی برای بیرون آمدن از اصول موضوعه وجود نخواهند داشت.

در ادامه فهرستی از ویژگی‌هایی را که ریاضی‌دانان به‌عنوان لازمه یک فضای برداری به شکلی خردمندانه انتخاب کرده‌اند ارائه می‌شود. وقتی آنها را مطالعه می‌کنید با دنیای پیکان‌ها مقایسه کنید و مطمئن شوید که اینها واقعاً ویژگی‌هایی هستند که این بردارهای آشنا دارا هستند. اما توجه کنید که برجسته‌ترین مفاهیمی که کنار گذاشته می‌شوند، وجود اندازه و جهت برای هر بردار است که اولین مفاهیم و برجسته‌ترین ویژگی‌هایی

هستند که از وقتی که برای اولین بار درباره آنها شنیدیم در ذهن ما رخنه کرده‌اند. حذف این دو شرط ممکن است برایتان سؤال برانگیز باشد اما وقت کافی خواهید داشت تا با پیشروی به جلو منطق پشت سر این انتخاب را تأیید کنید و یگانگی و تلفیق مفاهیم گوناگون را تحت عنوان فضاهای برداری خواهید دید. نمونه‌هایی از فضاهای برداری را خواهید دید که شامل موجوداتی هستند که نمی‌توانید آنها را به‌عنوان اشیای دارای بزرگی یا جهت به‌صورت شهودی درک کنید. در حالی که بحق باید از این موضوع جا خورده باشید ولی به‌خاطر داشته باشید که اگر در این تعمیم از مفاهیم پیکان‌ها استفاده کنیم و از شهود خود برای اثبات قضایا بهره بگیریم یا حداقل آنها را پیش بینی کنیم ابتدا مشکلی ایجاد نخواهد شد.

تعریف ۱: یک فضای برداری خطی مجموعه‌ای از اشیاء $|1\rangle$ و $|2\rangle$ و ... و $|V\rangle$ و ... و $|W\rangle$ و ...، موسوم به بردار، است که برای آنها

$$1- \text{یک قاعده معین برای تشکیل جمع برداری، } |V\rangle + |W\rangle \text{، وجود دارد.}$$

$$2- \text{یک قاعده معین برای ضرب در اعداد } a \text{ و } b \text{ و ...، } a|V\rangle \text{، با ویژگی‌های زیر وجود دارد:}$$

- نتیجه این عمل‌ها عنصر دیگری از این فضا ست، و ویژگی که به بسته بودن معروف است:
- $$|V\rangle + |W\rangle \in V$$

- ضرب عدد، نسبت به بردارها توزیع‌پذیر است: $\alpha(|V\rangle + |W\rangle) = \alpha|V\rangle + \alpha|W\rangle$

- ضرب عدد، نسبت به اعداد توزیع‌پذیر است: $(\alpha + \beta)|V\rangle = \alpha|V\rangle + \beta|V\rangle$

- ضرب عدد، شرکت‌پذیر است: $a(b|V\rangle) = ab|V\rangle$

- جمع، خاصیت جابه‌جایی دارد: $|V\rangle + |W\rangle = |W\rangle + |V\rangle$

- جمع، شرکت‌پذیر است: $|V\rangle + (|W\rangle + |Z\rangle) = (|V\rangle + |W\rangle) + |Z\rangle$

- یک بردار صفر $|0\rangle$ وجود دارد که $|V\rangle + |0\rangle = |V\rangle$ می‌شود.

- برای هر بردار $|V\rangle$ یک وارون تحت جمع، $|-V\rangle$ ، وجود دارد به‌طوری که $|V\rangle + |-V\rangle = |0\rangle$ می‌شود.

یک روش خوب برای به‌خاطر سپردن همه این‌ها وجود دارد: آنچه که به‌طور طبیعی پیش می‌آید انجام دهید.

تعریف ۲: اعداد a و b و ... میدان نامیده می‌شوند، که روی آن فضای برداری تعریف می‌شود.

اگر میدان شامل همه اعداد حقیقی باشد، یک فضای برداری حقیقی داریم و اگر اعداد مختلط باشند یک فضای برداری مختلط داریم. بردارها خودشان نه حقیقی‌اند و نه مختلط، این صفت فقط برای اعداد به کار می‌رود.

توجه کنید که اصول موضوعه فوق اشاره می‌کنند که

- $|0\rangle$ منحصر به فرد است؛ اگر $|0'\rangle$ دارای همه ویژگی‌های $|0\rangle$ باشد، آنگاه $|0'\rangle = |0\rangle$ است.

- $0|V\rangle = |0\rangle$

- $|-V\rangle = -|V\rangle$

- $|-V\rangle$ وارون جمعی منحصر به فرد $|V\rangle$ است.

اثبات این‌ها در تمرین زیر خواسته شده است. شما مجبور به دانستن این اثبات‌ها نیستند، اما باید مطالب فوق را بدانید.

تمرین ۱-۱-۱: ادعاهای فوق را اثبات کنید. برای اولی، $|0\rangle + |0\rangle$ را در نظر گرفته و ویژگی‌های دو بردار صفر را به نوبت به کار ببرید. برای دومی با $|V\rangle + |-V\rangle = |0\rangle$ شروع کنید. برای سومی از $|V\rangle + (-|V\rangle) = 0|V\rangle = |0\rangle$ شروع کنید. برای آخری فرض کنید $|W\rangle$ رابطه $|W\rangle + |V\rangle = |0\rangle$ را هم برآورده کند. از آنجا که $|0\rangle$ منحصر به فرد است این بدین معنی است که $|V\rangle + |W\rangle = |V\rangle + |-V\rangle$ است.

تمرین ۲-۱-۱: مجموعه همه موجودات به شکل (a, b, c) را در نظر بگیرید که در آن ورودی‌ها اعداد حقیقی هستند. جمع و ضرب عدد به صورت زیر تعریف می‌شوند:

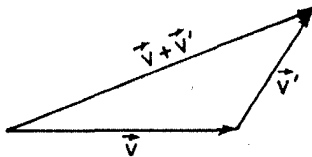
$$(a, b, c) + (d, e, f) = (a + d, b + e, c + f)$$

$$\alpha(a, b, c) = (\alpha a, \alpha b, \alpha c)$$

بردار صفر و وارون (a, b, c) را بنویسید. نشان دهید که بردارهای به شکل $(a, b, 1)$ یک فضای برداری تشکیل نمی‌دهند.

ملاحظه کنید که ما از یک نماد جدید $|V\rangle$ برای نشان دادن یک بردار نوعی استفاده می‌کنیم. این شیء کت V نامیده می‌شود و این نامگذاری به دیراک منسوب است که نماد گذاری اش به‌طور مفصل بعداً بحث خواهد شد. ما عمداً از نماد \vec{V} برای نشان دادن بردارها استفاده نمی‌کنیم تا اولین گام برای جدا کردن شما از مفهوم محدود بردار به‌عنوان یک پیکان باشد. اما تا وقتی که با بردارهایی مواجه نشده‌اید که پیکان نیستند می‌توانید از وابسته کردن یک شیء پیکان گونه به $|V\rangle$ دلسرد و ناامید نشوید.

وقتی اصول موضوعه را مطالعه می‌کردید از شما خواسته شد که ثابت کنید که مجموعه پیکان‌ها واجد شرایط یک فضای برداری هستند. در اینجا مفاهیمی کلیدی وجود دارند که باید از آنها فراتر می‌رفتید. فضای برداری شامل پیکان‌هاست که از آن جمله \vec{V} و \vec{V}' می‌باشند. قاعده جمع آشناست: انتهای پیکان دوم را در نوک پیکان اول قرار می‌دهیم و مانند شکل ۱-۱ عمل می‌کنیم.



شکل ۱-۱: قاعده جمع برداری. توجه کنید که این قاعده از اصول موضوعه (۱) تا (۳) پیروی می‌کند.

ضرب عدد a در بردار، متناظر با کشیدن بردار به اندازه ضریب a است. این یک فضای برداری حقیقی است چون کشیدن به اندازه یک عدد مختلط بی‌معنی است (اگر a منفی باشد، آن را به‌عنوان تغییر جهت پیکان هم، ضمن مقیاس‌بندی مجدد به اندازه $|a|$ ، تعبیر می‌کنیم). از آنجا که که وقتی این عمل‌ها روی پیکان‌ها انجام می‌شوند پیکان‌های دیگری به‌دست می‌آیند، بسته بودن را داریم. جمع و ضرب عدد به وضوح همه ویژگی‌های

توزیع پذیری و شرکت پذیری مورد نظر را دارند. بردار صفر، پیکانی با طول صفر است در حالی که وارون یک بردار برداری با جهت معکوس شده است.

بنابراین، مجموعه همه پیکان‌ها واجد شرایط لازم برای یک فضای برداری هستند. اما نمی‌توانیم این موضوع را تحریف کنیم. برای مثال مجموعه همه پیکان‌ها با مولفه‌های z مثبت یک فضای برداری تشکیل نمی‌دهند: چون هیچ وارونی وجود ندارد.

توجه کنید که تاکنون هیچ اشاره‌ای به جهت و اندازه نداشته‌ایم. نکته این است که در حالی که پیکان‌ها این صفات را دارا هستند، اعضای یک فضای برداری لزوماً آنها را ندارند. این گفته بی‌معنی است مگر اینکه بتوانیم مثال‌هایی را به شما ارائه کنیم. در اینجا دو مثال ارائه می‌شود.

مجموعه همه ماتریس‌های 2×2 را در نظر بگیرید. می‌دانیم که چگونه آنها را جمع کرده و در اعداد ضرب کنیم (هر چهار عنصر ماتریسی را در آن ضرب می‌کنیم). قواعد متناظر از شرط بسته بودن، شرکت پذیری و توزیع پذیری تبعیت می‌کنند. ماتریس صفر دارای عناصر صفر بوده و وارون یک ماتریس تحت جمع، ماتریسی است که همه عناصرش منفی شده‌اند. باید موافق باشید که در اینجا یک فضای برداری واقعی داریم که شامل چیزهایی است که طول و جهت معینی وابسته به خود ندارند. وقتی بخواهیم تصریح کنیم که ماتریس M عنصری از یک فضای برداری است ممکن است آن را به صورت مثلاً 4 یا (4) نشان دهیم.

به‌عنوان مثال دوم همه توابع $f(x)$ را در نظر بگیرید که در بازه $0 \leq x \leq L$ تعریف شده‌اند. ضرب عدد a را به صورت $af(x)$ تعریف کرده و جمع را به صورت جمع نقطه به نقطه تعریف می‌کنیم: مجموع دو تابع f و g در نقطه x دارای مقدار $f(x) + g(x)$ است. تابع صفر در همه جا صفر است و وارون جمعی f و $-f$ است. **تمرین ۱-۱-۳:** آیا توابعی که در نقاط انتهایی $x = 0$ و $x = L$ صفر می‌شوند تشکیل یک فضای برداری می‌دهند؟ توابع دوره‌ای که از $f(L) = f(0) = f$ پیروی می‌کنند چطور؟ توابعی که از $f(0) = 4$ پیروی می‌کنند چطور؟ اگر این توابع واجد شرایط نیستند دلایل را ارائه کنید.

مفهوم بعدی، استقلال خطی مجموعه‌ای از بردارهای $\{|1\rangle, |2\rangle, \dots, |n\rangle\}$ است. ابتدا یک رابطه خطی به شکل زیر را در نظر بگیرید:

$$\sum_{i=1}^n a_i |i\rangle = |0\rangle \quad (1-1-1)$$

می‌توانیم بدون از دست دادن عمومیت مسئله فرض کنیم که سمت چپ شامل هیچ مضربی از $|0\rangle$ نیست چون اگر چنین مضربی وجود داشته باشد می‌توانیم به سمت راست منتقل کرده و با $|0\rangle$ سمت راست ترکیب کنیم تا یک بار دیگر $|0\rangle$ به دست آید (از این واقعیت استفاده می‌کنیم که هر مضربی از $|0\rangle$ برابر $|0\rangle$ است).

تعریف ۳: مجموعه‌ای از بردارها مستقل خطی گفته می‌شوند اگر رابطه خطی مثل معادله (1-1-1) یک رابطه بدیهی با همه $a_i = 0$ ها باشد. اگر مجموعه بردارها مستقل خطی نباشند، وابسته خطی هستند.

معادله (1-1-1) بیان می‌کند که ممکن نیست عضوی از مجموعه مستقل خطی را بر حسب بقیه بنویسیم. از طرف دیگر، اگر مجموعه‌ای از بردارها وابسته خطی باشند چنین رابطه‌ای موجود خواهد بود و حداقل می‌بایست دو ضریب غیر صفر داشته باشد. فرض کنید مثلاً $x_3 \neq 0$ باشد. آنگاه می‌توانیم بنویسیم

$$|3\rangle = \sum_{i=1, \neq 3}^n \frac{-a_i}{a_3} |i\rangle \quad (2-1-1)$$

و بدین وسیله $|3\rangle$ را برحسب بقیه بنویسیم.

به عنوان مثالی واقعی دو بردار غیر موازی $|1\rangle$ و $|2\rangle$ را در یک صفحه در نظر بگیرید. اینها یک مجموعه مستقل خطی تشکیل می دهند. هیچ روشی برای نوشتن یکی به صورت ضربی از دیگری وجود ندارد یا به طور معادل هیچ راهی برای ترکیب آنها برای به دست آوردن بردار صفر وجود ندارد. از سوی دیگر اگر بردارها موازی باشند واضح است که می توانیم یکی را به صورت ضربی از دیگر بنویسیم یا به طور معادل با استفاده از آنها بردار 0 را به دست آوریم.

توجه کنید که گفته شد 0 نه $|0\rangle$. اگر دقیق تر بگوییم این نادرست است چون جمع یک مجموعه از بردارها فقط می تواند یک بردار شود نه یک عدد. اما مرسوم است که بردار صفر را با 0 نشان می دهیم. فرض کنید یک بردار سوم $|3\rangle$ را هم به این صفحه اضافه کنیم. اگر این بردار با هر یک از این دو بردار موازی باشد یک مجموعه وابسته خطی خواهیم داشت. پس فرض کنید که اینگونه نیست. اما حتی در این صورت هم سه بردار وابسته خطی هستند. دلیل این است که می توانیم یکی از آنها مثلاً $|3\rangle$ را به صورت یک ترکیب خطی از دو تای دیگر بنویسیم. برای یافتن این ترکیب یک خط از انتهای $|3\rangle$ در جهت $|1\rangle$ رسم کنید. سپس خطی پاد موازی با $|2\rangle$ از نوک $|3\rangle$ رسم کنید. این خطوط با هم تلاقی خواهند کرد چون $|1\rangle$ و $|2\rangle$ طبق فرض موازی نیستند. نقطه تلاقی P مشخص خواهد کرد که چه مقدار از $|1\rangle$ و $|2\rangle$ را می خواهیم. از انتهای $|3\rangle$ تا P با استفاده از مضرب مناسبی از $|1\rangle$ رفته و از P تا نوک $|3\rangle$ با استفاده از مضرب مناسبی از $|2\rangle$ می رویم.

تمرین ۱-۱-۴: سه عنصر از فضای برداری ماتریس های 2×2 حقیقی را در نظر بگیرید:

$$|1\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad |2\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad |3\rangle = \begin{bmatrix} -2 & -1 \\ 0 & -2 \end{bmatrix}$$

آیا آنها مستقل خطی اند؟ جواب خود را به صورت مشروح بیان کنید (توجه کنید که ما این ماتریس ها را بردار می نامیم و از کت ها برای نمایش آنها استفاده می کنیم تا به نقش آنها به عنوان عناصر یک فضای برداری تأکید کنیم).

تمرین ۱-۱-۵: نشان دهید که بردارهای سطری زیر وابسته خطی اند: $(0, 1, 1)$ و $(1, 0, 1)$ و $(1, 0, 1)$ و $(1, 2, 3)$. عکس مطلب را برای $(0, 1, 1)$ ، $(1, 0, 1)$ و $(1, 0, 1)$ نشان دهید.

تعریف ۴: یک فضای برداری دارای بعد n است اگر حداکثر n بردار مستقل خطی داشته باشد. اگر میدان

حقیقی باشد این فضا با $V^n(R)$ نشان داده می شود و اگر میدان مختلط باشد با $V^n(C)$.

با نگاهی به بحث های قبلی، صفحه دو بعدی است و مجموعه همه پیکان هایی که به این صفحه محدود نباشند یک فضای برداری سه بعدی تعریف می کنند. ماتریس های 2×2 چگونه؟ آن ها یک فضای برداری چهار بعدی تشکیل می دهند. این مطلب را ثابت می کنیم. بردارهای زیر مستقل خطی اند:

$$|1\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad |2\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad |3\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad |4\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

چون تشکیل یک ترکیب خطی از هر سه بردار از آنها برای به دست آوردن چهارمی ناممکن است، هر سه آنها یک صفر در یک جایی دارند که بردار چهارم آن صفر را ندارد. لذا فضا حداقل چهار بعدی است. آیا فضا می تواند بزرگتر باشد؟ خیر، چون هر ماتریس 2×2 دلخواه می تواند بر حسب آنها نوشته شود:

$$\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} = a|1\rangle + b|2\rangle + c|3\rangle + d|4\rangle$$

اگر اعداد a و b و c و d حقیقی باشند، یک فضای چهار بعدی حقیقی داریم، اگر آنها مختلط باشند یک فضای چهار بعدی مختلط داریم.

قضیه ۱: هر بردار $|V\rangle$ در یک فضای n -بعدی می تواند به صورت یک ترکیب خطی از n بردار مستقل خطی $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |n\rangle$ نوشته شود.

اثبات: اگر یک بردار $|V\rangle$ وجود می داشت که این کار برای آن امکان پذیر نبود به این مجموعه از بردارها می پیوست و یک مجموعه با $n+1$ بردار مستقل خطی تشکیل می دادند که در یک فضای n -بعدی طبق تعریف امکان پذیر نیست.

تعریف ۵: یک مجموعه از n بردار مستقل خطی در یک فضای n -بعدی، یک پایه نامیده می شود. پس با اتکاء به تعریف فوق می توان نوشت

$$|V\rangle = \sum_{i=1}^n v_i |i\rangle \quad (3-1-1)$$

که بردارهای $|i\rangle$ یک پایه تشکیل می دهند.

تعریف ۶: ضرایب v_i بسط یک بردار بر حسب یک پایه مستقل خطی $(|i\rangle)$ ، مولفه های بردار در آن پایه نامیده می شوند.

قضیه ۲: بسط معادله (۳-۱-۱) منحصر به فرد است.

فرض کنید این بسط منحصر به فرد نباشد. در این صورت می بایست بسط دیگری داشته باشیم:

$$|V\rangle = \sum_{i=1}^n v'_i |i\rangle \quad (4-1-1)$$

با تفریق معادله (۴-۱-۱) از (۳-۱-۱) (یعنی ضرب دومی در عدد ۱- و جمع دو معادله) داریم

$$|0\rangle = \sum_i (v_i - v'_i) |i\rangle \quad (5-1-1)$$

که ایجاب می کند که

$$v_i = v'_i \quad (6-1-1)$$

باشند، چون بردارهای پایه مستقل خطی اند و فقط یک رابطه خطی بدیهی می تواند بین آنها برقرار باشد. توجه کنید که با داشتن یک پایه، مولفه‌ها منحصر به فرد هستند اما اگر پایه را تغییر دهیم، مولفه‌ها تغییر خواهند کرد. $|V\rangle$ را به طور خلاصه بردار می نامیم که یک وجود از خودش دارد و روابط مختلفی را که بردارهای دیگر برآورده می کنند برآورده می نماید. وقتی یک پایه انتخاب می کنیم بردارها برحسب مولفه‌هایشان اشکال واقعی به خود می گیرند و رابطه بین بردارها به وسیله مولفه‌ها برآورده می شود. برای مثال، سه پیکان $\vec{C}, \vec{B}, \vec{A}$ را در صفحه در نظر بگیرید که طبق قوانین جمع پیکان‌ها، $\vec{A} + \vec{B} = \vec{C}$ را برآورده می کنند. تاکنون هیچ پایه‌ای انتخاب نشده است و برای اظهار اینکه این بردارها یک مثلث بسته تشکیل می دهند نیاز به پایه‌ای نداریم. حال یک پایه انتخاب کرده و هر بردار را برحسب مولفه‌ها می نویسیم. مولفه‌ها رابطه $C_i = A_i + B_i$ ، $i = 1, 2$ را برآورده خواهند کرد. اگر پایه دیگری انتخاب کنیم این مولفه‌ها از نظر مقادیر عددی تغییر خواهند کرد ولی رابطه بین آنها، که به صورت مساوی بودن \vec{C} با مجموع دو بردار دیگر نوشته می شود، هنوز بین مجموعه جدید مولفه‌ها برقرار خواهد بود.

در مورد بردارهای غیر پیکان، جمع آنها برحسب مولفه در سایه اصول موضوعه مثل مورد بردارهای مقدماتی خواهد بود. اگر

$$|V\rangle = \sum_i v_i |i\rangle \quad (7-1-1)$$

و

$$|W\rangle = \sum_i w_i |i\rangle \quad (8-1-1)$$

آنگاه

$$|V\rangle + |W\rangle = \sum_i (v_i + w_i) |i\rangle \quad (9-1-1)$$

که از اصول موضوعه استفاده کرده ایم تا جملات را مجدداً دسته بندی کنیم. نتیجه اینکه:

برای جمع دو بردار، مولفه‌های آن‌ها را جمع کنید.

هیچ اشاره‌ای به اینکه انتهای یک بردار را در نوک بردار دیگر قرار دهیم و غیره نشده است چون در حالت کلی بردارها ابتدا و انتها ندارند. البته اگر از پیکان‌ها صحبت کنیم می توانیم آنها را یا با استفاده از روش ابتدا به انتها جمع کنیم یا فقط مولفه‌های آنها را در یک پایه جمع کنیم.

به همین ترتیب داریم:

$$a|V\rangle = a \sum_i v_i |i\rangle = \sum_i av_i |i\rangle \quad (10-1-1)$$

به عبارتی دیگر:

برای ضرب یک بردار در یک عدد، همه مولفه‌های آن را در آن عدد ضرب کنید.

۱-۲- فضاهای ضرب داخلی

مثال‌های ماتریس‌ها و توابع باید شما را متقاعد کرده باشند که ما می‌توانیم یک فضای برداری داشته باشیم بدون اینکه از قبل تعریفی به طول یا جهت عناصر اختصاص دهیم. اما می‌توانیم کمیت‌هایی بسازیم که دارای همان خواص باشند که طول‌ها و زوایا در مورد پیکان‌ها دارند. گام اول، تعریف یک مانسته معقول برای حاصل ضرب نقطه‌ای است، چون در مورد پیکان‌ها، از ضرب نقطه‌ای

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = |\vec{A}| |\vec{B}| \cos \theta \quad (1-2-1)$$

می‌توانیم طول مثلاً \vec{A} را به صورت $\sqrt{|\vec{A}| \cdot |\vec{A}|}$ و کسینوس زاویه بین دو بردار را به صورت $\vec{A} \cdot \vec{B} / |\vec{A}| |\vec{B}|$ استنباط کنیم. حال ممکن است اعتراض کنید که: چطور می‌توان از ضرب نقطه‌ای برای تعریف طول و زوایا استفاده کرد در حالی که خود ضرب نقطه‌ای نیازمند دانستن طول‌ها و زوایاست؟ پاسخ این است که ضرب نقطه‌ای عبارت معادل دیگری برحسب مولفه‌ها دارد:

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = A_x B_x + A_y B_y + A_z B_z \quad (2-2-1)$$

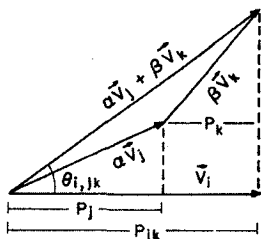
هدف ما تعریف فرمولی مشابه برای مورد کلی است که در آن تصویری از مولفه‌ها در یک پایه داریم. یادآوری می‌کنیم که ویژگی‌های اصلی ضرب نقطه‌ای بالا به شرح زیرند:

$$1- \vec{A} \cdot \vec{B} = \vec{B} \cdot \vec{A} \quad (\text{تقارن})$$

$$2- \vec{A} \cdot \vec{A} \geq 0 \quad \text{اگر } \vec{A} = 0 \text{ باشد، } 0 \quad (\text{نیمه معین مثبت})$$

$$3- \vec{A} \cdot (b\vec{B} + c\vec{C}) = b\vec{A} \cdot \vec{B} + c\vec{A} \cdot \vec{C} \quad (\text{خطی بودن})$$

خطی بودن ضرب نقطه‌ای در شکل ۱-۲ نشان داده شده است.



شکل ۱-۲: اثبات هندسی اینکه ضرب نقطه‌ای برای یک ضرب داخلی از اصل موضوع (۳) پیروی می‌کند. این اصل موضوع ایجاب می‌کند که تساوی زیر برقرار باشد: $P_k + P_j = P_{jk}$ تبعیت کنند.

می‌خواهیم یک تعمیم ارائه دهیم که به ضرب داخلی یا ضرب اسکالر بین دو بردار $|V\rangle$ و $|W\rangle$ موسوم است و آن را با $\langle V | W \rangle$ نشان می‌دهیم. این ضرب باز هم یک عدد (در حالت کلی مختلط) وابسته به دو بردار است. در خواست می‌کنیم که این ضرب از اصول موضوعه زیر پیروی کند،

$$\bullet \langle V | W \rangle = \langle W | V \rangle \quad (\text{پاد-تقارن})$$

$$\bullet \langle V | V \rangle = 0 \quad \text{اگر } |V\rangle = |0\rangle \text{ باشد،} \quad (\text{نیمه معین مثبت})$$

$$\bullet \langle V | (a|W\rangle + b|Z\rangle) \rangle = \langle V | a|W\rangle + b|Z\rangle \rangle = a\langle V | W \rangle + b\langle V | Z \rangle \quad (\text{خطی بودن نسبت به کت})$$

تعریف ۷: یک فضای برداری با یک ضرب داخلی، یک فضای ضرب داخلی نامیده می‌شود.

توجه کنید که ما هنوز یک قاعده صریح برای محاسبه واقعی ضرب اسکالر ارائه نکرده‌ایم، فقط درخواست کرده‌ایم که هر قاعده‌ای که ارائه شود باید این ویژگی را داشته باشد. به منظور یافتن چنین قاعده‌ای اجازه دهید خود را با اصول موضوعه آشنا کنیم. اولی از متناظرش برای ضرب نقطه‌ای فرق دارد و ضرب داخلی را به ترتیب دو عامل حساس می‌کند به طوری که دو انتخاب منجر به مزدوج‌های مختلط می‌شوند. در یک فضای برداری حقیقی، این اصول موضوعه، تقارن ضرب نقطه‌ای تحت تعویض دو بردار را بیان می‌کنند. فعلاً اشاره می‌کنیم که این اصل موضوع اطمینان می‌دهد که $\langle V|V \rangle$ حقیقی است.

اصل موضوع دوم بیان می‌کند که $\langle V|V \rangle$ فقط حقیقی نیست بلکه نیمه معین مثبت هم هست، صفر زمانیست که خود بردار صفر باشد. اگر بخواهیم طول بردار را به صورت جذر مربع ضرب داخلی آن با خودش تعریف کنیم (مثل ضرب نقطه‌ای) این کمیت مجبور است برای همه بردارهای غیر صفر حقیقی و مثبت باشد. اصل موضوع آخر، خطی بودن ضرب داخلی را، وقتی یک برهمنه‌ی خطی $\langle aW + bZ | \rangle \equiv \langle aW + bZ | \rangle$ به عنوان بردار دوم در ضرب اسکالر ظاهر می‌شود، بیان می‌کند. اعتبار آن را برای مورد پیکان‌ها بحث کرده‌ایم (شکل ۱-۲).

اگر عامل اول در ضرب، یک برهمنه خطی باشد چطور؟ یعنی $\langle aW + bZ | V \rangle$ ؟ این با اصل موضوع اول مشخص می‌شود:

$$\begin{aligned} \langle aW + bZ | V \rangle &= \langle V | aW + bZ \rangle^* \\ &= (a \langle V | W \rangle + b \langle V | Z \rangle)^* \\ &= a^* \langle V | W \rangle^* + b^* \langle V | Z \rangle^* \\ &= a^* \langle W | V \rangle + b^* \langle Z | V \rangle \end{aligned} \quad (3-2-1)$$

که یاد خطی بودن ضرب داخلی نسبت به عامل اول در ضرب داخلی را بیان می‌کند. به عبارتی دیگر، ضرب داخلی یک برهمنه خطی با برداری دیگر، اگر برهمنه عامل دوم باشد برهمنه متناظر ضرب‌های داخلی است، در حالی که اگر برهمنه عامل اول باشد، یک برهمنه با همه ضرایب مزدوج شده است. این بی‌تقارنی که در فضاهای برداری حقیقی ناآشناست در ادامه کار مورد استفاده قرار خواهد گرفت.

با ضرب‌های داخلی ادامه می‌دهیم. اگر چه تلاش می‌کنیم تا تصور محدود شده از یک بردار به عنوان یک پیکان را کنار بگذاریم و به دنبال یک تعمیم متناظر با ضرب نقطه‌ای می‌گردیم، هنوز هم از برخی اصطلاحات مشترک استفاده می‌کنیم.

تعریف ۸: دو بردار را متعامد یا عمود بر هم می‌گوییم وقتی ضرب داخلی آنها صفر شود.

تعریف ۹: $\sqrt{\langle V | V \rangle} \equiv |V|$ را نرم یا طول بردار می‌نامیم. یک بردار بهنجار شده دارای نرم یک است.

تعریف ۱۰: یک مجموعه از بردارهای پایه، همه با نرم یک، که دو به دو بر هم عمودند، یک پایه راست هنجار نامیده می‌شوند.

همین‌طور اغلب به ضرب داخلی یا اسکالر، ضرب نقطه‌ای هم اطلاق خواهیم کرد.

اکنون آماده‌ایم تا یک فرمول واقعی برای ضرب داخلی بر حسب مولفه‌ها به دست آوریم. با داشتن $|V\rangle$ و $|W\rangle$

$$|V\rangle = \sum_i v_i |i\rangle$$

$$|W\rangle = \sum_j w_j |j\rangle$$

با استفاده از اصول موضوعه‌ای که ضرب داخلی تابع آنهاست داریم

$$\langle V|W\rangle = \sum_i \sum_j v_i^* w_j \langle i|j\rangle \quad (۴-۲-۱)$$

برای ادامه کار باید $\langle i|j\rangle$ ، یعنی ضرب داخلی بردارهای پایه، را بدانیم این ضرب به جزئیات بردارهای پایه بستگی دارد و همه چیزی که می‌دانیم این است که آنها مستقل خطی‌اند. این وضعیت برای پیکان‌ها هم همین‌طور است. یک مسئله دو بعدی را در نظر بگیرید که در آن بردارهای پایه دو بردار مستقل خطی بوده اما عمود بر هم نیستند. اگر همه بردارها را بر حسب این پایه بنویسیم ضرب نقطه‌ای هر دو بردار از آنها هم یک جمع دو گانه با چهار جمله (که با چهار ضرب نقطه‌ای ممکن بین بردارهای پایه مشخص می‌شوند) و همین‌طور مولفه‌های برداری خواهد شد. اما اگر یک پایه راست هنجار مثل \vec{i} و \vec{j} استفاده کنیم، فقط جملات قطری مثل $\langle i|i\rangle$ نگه داشته خواهند شد و به نتیجه آشنای $\vec{A} \cdot \vec{B} = A_x B_x + A_y B_y$ خواهیم رسید که فقط به مولفه‌ها بستگی دارد.

برای مورد کلی تر غیر از پیکان‌ها به قضیه ۳ متوسل می‌شویم.

قضیه ۳ (گرام-شمیت): با داشتن یک پایه مستقل خطی می‌توانیم ترکیبات خطی از بردارهای پایه تشکیل دهیم تا یک پایه راست هنجار به دست آوریم.

اثبات قضیه را کمی به تعویق می‌اندازیم. فرض می‌کنیم که این فرایند کامل شده و پایه موجود راست هنجار است:

$$\langle i|j\rangle = \begin{cases} 1 & \text{for } i=j \\ 0 & \text{for } i \neq j \end{cases} \equiv \delta_{ij}$$

که δ_{ij} نماد دلتای کرونیکر است. با قرار دادن این در معادله (۴-۲-۱)، جمع دو گانه به واسطه دلتای کرونیکر به یک جمع تقلیل می‌یابد و داریم

$$\langle V|W\rangle = \sum_i v_i^* w_i \quad (۵-۲-۱)$$

این شکل ضرب داخلی است که از حالا به بعد استفاده خواهیم کرد.

اکنون می‌توانیم اصل موضوع اول را تصدیق کنیم؛ به خاطر مزدوج مختلط شدن مولفه‌های بردار اول، $\langle V|V\rangle$ حتی حقیقی هم نمی‌شد تا مثبت شود. اما اکنون داریم

$$\langle V|V\rangle = \sum_i |v_i|^2 \geq 0 \quad (۶-۲-۱)$$

و فقط برای بردار صفر، صفر می شود. این مطلب، اطلاق مربع طول یا نرم یک بردار به $\langle V|V \rangle$ را معقول می سازد.

معادله (۱-۲-۵) را در نظر بگیرید. از آنجا که بردار $|V\rangle$ در یک پایه معین به صورت منحصر به فرد به وسیله مولفه هایش مشخص می شود می توانیم در این پایه آنرا به صورت یک بردار ستونی بنویسیم:

$$|V\rangle \rightarrow \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} \quad (۱-۲-۷)$$

همین طور

$$|W\rangle \rightarrow \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_n \end{bmatrix} \quad (۱-۲-۸)$$

ضرب داخلی $\langle V|W \rangle$ با ضرب ماتریسی مزدوج ترانهاده بردار ستونی نمایشگر $|V\rangle$ با بردار ستونی نمایشگر $|W\rangle$ مشخص می شود:

$$\langle V|W \rangle = [v_1^*, v_2^*, \dots, v_n^*] \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_n \end{bmatrix} \quad (۱-۲-۹)$$

۱-۳- فضاهای دوگان (همزاد) و نمادگذاری دیراک

در اینجا یک نکته تکنیکی وجود دارد. ضرب داخلی یک عدد است که تلاش می کنیم از دو کت $|V\rangle$ و $|W\rangle$ آنرا به دست آوریم که هر دو در یک پایه به وسیله بردارهای ستونی نمایش داده می شوند. حال هیچ راهی برای به دست آوردن یک عدد از دو ستون به وسیله ضرب ماتریسی مستقیم وجود ندارد، اما روشی برای به دست آوردن یک عدد از طریق ضرب ماتریسی یک سطر در یک ستون وجود دارد. ترفند ما برای به دست آوردن یک عدد از دو ستون، وابسته کردن یک بردار سطری منحصر به فرد به یک ستون (مزدوج ترانهاده آن) و تشکیل ضرب ماتریسی آن با ستون نمایش دهنده دیگری است. این کار دارای این ویژگی است که جواب به این بستگی دارد که کدامیک از دو بردار را بخواهیم به سطر تبدیل کنیم، دو انتخاب $(\langle W|V \rangle, \langle V|W \rangle)$ منجر به جواب هایی می شوند که از طریق مزدوج مختلط شدن به هم مربوط می شوند.

اما می‌توان نگاه دیگری به مسئله کرد. بردارهای ستونی، نمادهای واقعی یک بردار مجرد $|V\rangle$ یا کت در یک پایه هستند. می‌توانیم برعکس عمل کرده و از بردارهای ستونی به کت‌های مجرد برویم. اما در این صورت این امکان هم هست که به هر بردار سطری یک موجود مجرد $\langle W|$ ، موسوم به برا W ، وابسته کنیم. می‌توانیم این براها را هر طور که می‌خواهیم نامگذاری کنیم اما به شیوه زیر عمل می‌کنیم: به هر کت $|V\rangle$ یک بردار ستونی وابسته است. از این بردار الحاقی، یا مزدوج ترانهاده، گرفته و یک بردار سطری تشکیل می‌دهیم. برا مجرد وابسته به این بردار، همین نماد را خواهد داشت یعنی $\langle V|$ نامیده خواهد شد. بنابراین دو فضای برداری وجود خواهد داشت؛ فضای کت‌ها و فضای دوگان براها، یک کت برای هر برا و بالعکس (مولفه‌ها به وسیله عمل الحاقی به هم مربوط می‌شوند). ضرب‌های داخلی عملاً فقط بین براها و کت‌ها و در نتیجه از عناصر دو فضای برداری متمایز اما مرتبط تعریف می‌شوند. یک پایه از بردارهای $|i\rangle$ برای بسط کت‌ها و یک پایه مشابه $\langle i|$ برای بسط براها وجود دارد. کت پایه $|i\rangle$ در پایه‌ای که به کار می‌بریم به وسیله یک بردار ستونی با همه مولفه‌های صفر به جز سطر i ام که یک است نشان داده می‌شود در حالی که برا پایه $\langle i|$ یک بردار سطری با همه مولفه‌های صفر به جز ستون i ام که یک است می‌باشد.

تمام اینها را می‌توان به صورت زیر خلاصه کرد:

$$|V\rangle \leftrightarrow \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} \leftrightarrow [v_1^*, v_2^*, \dots, v_n^*] \leftrightarrow \langle V| \quad (1-3-1)$$

که \leftrightarrow به معنی «در یک پایه» است.

با این وجود در دیدگاه اول، وابسته کردن یک ضرب اسکالر با یک جفت از ستونها یا کت‌ها (بدون اشاره به فضای دوگان دیگر) و سر کردن با بی‌تقارنی بین بردار اول و دوم در ضرب داخلی (کدام یک باید مزدوج ترانهاده شود؟) چیزی اشتباه نبود. اگر در بحث بالا احساس مشکل کردید می‌توانید موقتاً آنرا نادیده بگیرید.

تنها چیزی که باید به‌خاطر بسپارید این است که در مورد یک فضای برداری عام (غیر از پیکان‌ها):

- به بردارها می‌توان هنوز هم در یک پایه راست هنجار مولفه‌هایی اختصاص داد، درست مثل پیکان‌ها، اما این مولفه‌ها می‌توانند مختلط باشند.
- ضرب داخلی هر دو بردار طبق معادله (۱-۲-۵) برحسب این مولفه‌ها مشخص می‌شود. این ضرب از همه اصول موضوعه پیروی می‌کند.

۱-۳-۱- بسط بردارها در یک پایه راست هنجار

فرض کنید بخواهیم یک بردار $|V\rangle$ را در یک پایه راست هنجار بسط دهیم. برای به‌دست آوردن مولفه‌هایی که در بسط وارد می‌شوند به صورت زیر عمل می‌کنیم. دو طرف بسط مفروض را در $\langle j|$ ضرب نقطه‌ای می‌کنیم: (یا $|j\rangle$)، اگر در استعمال لغات و سواس داشته باشید)

$$|V\rangle = \sum_i v_i |i\rangle \quad (2-3-1)$$

$$\langle j|V\rangle = \sum_i v_i \langle j|i\rangle \delta_{ij} \quad (۳-۳-۱)$$

$$= v_j \quad (۴-۳-۱)$$

یعنی برای یافتن مولفه v_j بردار، ضرب نقطه‌ای آن با بردار $|j\rangle$ را، دقیقاً مثل پیکان‌ها، محاسبه می‌کنیم. با استفاده از این نتیجه می‌توانیم بنویسیم

$$|V\rangle = \sum_i |i\rangle \langle i|V\rangle \quad (۵-۳-۱)$$

اجازه دهید یقین حاصل کنیم که بردارهای پایه آن طور که باید باشند، هستند. اگر در معادله (۵-۳-۱) $|V\rangle = |j\rangle$ قرار دهیم جواب صحیح را به دست می‌آوریم: مولفه i ام بردار پایه $|j\rangle$ است. لذا برای مثال ستون نمایشگر بردار پایه شماره ۴ در سطر چهارم یک ۱ داشته و در بقیه سطرها صفر دارد. رابطه مجرد

$$|V\rangle = \sum_i v_i |i\rangle \quad (۶-۳-۱)$$

در این پایه می‌شود:

$$\begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} = v_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} + v_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} + \dots + v_n \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \quad (۷-۳-۱)$$

۱-۳-۲- عمل الحاقی

دیدیم که می‌توانیم از نمایش ستونی یک کت با عمل الحاقی، یعنی مزدوج ترانهاده گرفتن، به نمایش سطری برا متناظر برویم. سوال: اگر $|V\rangle$ برا متناظر با کت $|V\rangle$ باشد کدام برا با $|aV\rangle$ ، که a یک عدد است، متناظر است؟ با رفتن به هر پایه به راحتی می‌توان دید که

$$a|V\rangle \rightarrow \begin{bmatrix} av_1 \\ av_2 \\ \vdots \\ av_n \end{bmatrix} \rightarrow [a^*v_1^*, a^*v_2^*, \dots, a^*v_n^*] \rightarrow \langle V|a^* \quad (۸-۳-۱)$$

مرسوم است که $|aV\rangle$ را به صورت $\langle aV|$ و برا متناظر را به صورت $|aV\rangle$ می‌نویسند. آنچه یافته‌ایم این است که

$$\langle aV| = \langle V|a^* \quad (۹-۳-۱)$$

از آنجا که رابطه بین براها و کت‌ها خطی است می‌توانیم بگوییم که اگر یک معادله بین کت‌ها مثل

$$a|V\rangle = b|W\rangle + c|Z\rangle + \dots \quad (10-3-1)$$

داشته باشیم، یک رابطه بین براهای متناظر هم داریم:

$$\langle V|a^* = \langle W|b^* + \langle Z|c^* + \dots \quad (11-3-1)$$

دو معادله فوق الحاقی‌های یکدیگر گفته می‌شوند. درست همان‌طور که هر معادله شامل اعداد مختلط اشاره به معادله دیگری می‌کند که با مزدوج مختلط گرفتن از دو طرف به دست می‌آید، یک معادله بین کت‌ها (براهای) اشاره به معادله دیگری بین براها (کت‌ها) دارد. اگر در یک پایه فکر کنید خواهید دید که این مطلب فقط از این موضوع به دست می‌آید که اگر دو ستون مساوی باشند، مزدوج‌های ترانهاده آنها هم اینگونه خواهند بود.

در اینجا یک قاعده برای گرفتن الحاقی وجود دارد:

برای گرفتن الحاقی از یک معادله خطی مرتبط کننده کت‌ها (براهای)، هر کت (برا) را با برا (کت) آن جایگزین کرده و همه ضرایب را مزدوج مختلط کنید.

می‌توانیم این قاعده را به صورت زیر توسعه دهیم. فرض کنید یک بسط برای یک بردار بر حسب بردارهای پایه داریم:

$$|V\rangle = \sum_{i=1} v_i |i\rangle \quad (12-3-1)$$

الحاقی آن عبارت می‌شود از

$$\langle V| = \sum_{i=1} \langle i| v_i^*$$

با یادآوری اینکه $\langle i|V\rangle = v_i$ و $v_i^* = \langle V|i\rangle$ ، نتیجه می‌شود که الحاقی

$$|V\rangle = \sum_{i=1} |i\rangle \langle i|V\rangle \quad (13-3-1)$$

می‌شود:

$$\langle V| = \sum_{i=1} \langle V|i\rangle \langle i| \quad (14-3-1)$$

که از آن قاعده زیر به دست می‌آید:

برای گرفتن الحاقی از یک معادله شامل کت‌ها و براها و ضرایب، ترتیب همه عامل‌ها را معکوس کرده براها و کت‌ها را عوض کنید و همه ضرایب را مزدوج مختلط کنید.

قضیه گرام - اشمیت

اینک از روش گرام-اشمیت برای تبدیل یک پایه مستقل خطی به یک پایه راست هنجار استفاده می‌کنیم. ایده اصلی را می‌توان با یک مثال ملاحظه نمود. فضای دو بعدی پیکان‌ها را در یک صفحه تصور کنید. فرض کنید دو بردار غیر موازی انتخاب کنیم که یک پایه را معرفی می‌کنند. برای به دست آوردن یک پایه راست هنجار از اینها، به صورت زیر اقدام می‌کنیم:

• بردار اول را با اندازه خودش مجدداً مقیاس می‌کنیم تا یک بردار یکه شود. این، بردار پایه اول خواهد شد.

• از بردار دوم تصویر آن در امتداد بردار اول را کم می‌کنیم، قسمت باقی مانده باید بر بردار اول عمود باشد (چنین قسمتی باقی خواهد ماند چون طبق فرض، بردارها ناموازی هستند).

• قسمت باقی مانده را به وسیله طول خودش مجدداً مقیاس می‌کنیم. اکنون بردار پایه دوم را داریم. این بردار بر اولی عمود بوده و دارای طول واحد است.

این مثال ساده کل داستان این روش را بیان می‌کند که هم اکنون در نمادگذاری دیراک در حالت کلی بحث خواهد شد.

فرض کنید $|I\rangle$ ، $|II\rangle$ و ... در یک پایه مستقل خطی باشند. اولین بردار پایه راست هنجار،

$$|1\rangle = \frac{|I\rangle}{|I|}$$

خواهد بود که

$$|I| = \sqrt{\langle I|I\rangle}$$

است. واضح است که

$$\langle 1|1\rangle = \frac{\langle I|I\rangle}{|I|^2} = 1$$

به عنوان بردار دوم پایه،

$$|2'\rangle = |II\rangle - |1\rangle\langle 1|II\rangle$$

را در نظر بگیرید که $|II\rangle$ منهای جزء رو به بردار یکه اول است (مثال پیکان‌ها را تصور کنید). واضح است که این بردار اول عمود است:

$$\langle 1|2'\rangle = \langle 1|II\rangle - \langle 1|1\rangle\langle 1|II\rangle = 0$$

حال $|2'\rangle$ را بر نرم خودش تقسیم می‌کنیم تا به $|2\rangle$ برسیم که بر بردار اول عمود بوده و به یک بهنجار خواهد بود. سرانجام

$$|3'\rangle = |III\rangle - |1\rangle\langle 1|III\rangle - |2\rangle\langle 2|III\rangle$$

را در نظر بگیرید که بر $|1\rangle$ و $|2\rangle$ عمود است. با تقسیم آن بر نرم خود به $|3\rangle$ می‌رسیم، سومین عضو از پایه متعامد. برای تولید بقیه پایه هیچ چیز جدیدی برای گفتن باقی نمی‌ماند.

استقلال خطی پایه اصلی (اولیه) را کجا به کار بردیم؟ اگر با یک پایه وابسته خطی شروع می‌کردیم چه اتفاقی می‌افتاد؟ در این صورت در یک نقطه یک بردار مثل $|2'\rangle$ یا $|3'\rangle$ صفر می‌شد و کل فرایند در یک جا متوقف می‌شد. از سوی دیگر، استقلال خطی به ما اطمینان می‌دهد که چنین چیزی هرگز اتفاق نخواهد افتاد

چون به داشتن یک ترکیب خطی غیر بدیهی از بردارهای مستقل خطی سر می‌زند که جمعشان بردار صفر می‌شود (به معادلات $|2\rangle$ و $|3\rangle$ مراجعه کنید و خود را قانع کنید که اینها ترکیبات خطی از بردارهای پایه قدیمی (اولیه) هستند).

تمرین ۱-۳-۱: با شروع از $\vec{A} = 3\vec{i} + 4\vec{j}$ و $\vec{B} = 2\vec{i} - 6\vec{j}$ یک پایه متعامد در دو بعد تشکیل دهید. آیا می‌توانید با شروع از این دو بردار، پایه راست هنجار دیگری به دست آورید. اگر این گونه است آنرا به دست آورید.

تمرین ۱-۳-۲: نشان دهید که چطور از پایه

$$|I\rangle = \begin{bmatrix} 3 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |II\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} \quad |III\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \\ 5 \end{bmatrix}$$

به پایه راست هنجار

$$|1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |2\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1/\sqrt{5} \\ 2/\sqrt{5} \end{bmatrix} \quad |3\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ -2/\sqrt{5} \\ 1/\sqrt{5} \end{bmatrix}$$

می‌رویم.

وقتی اولین بار در مورد بُعد مطالبی آموختیم، آنرا به تعداد جهت‌های عمود بر هم وابسته کردیم. در این فصل آن را برحسب بیشینه تعداد بردارهای مستقل خطی تعریف کردیم. قضیه زیر دو تعریف را به هم ربط می‌دهد.

قضیه ۴: بعد یک فضا برابر n_{\perp} ، بیشینه تعداد بردارهای دو به دو عمود بر هم در آن، است.

برای نشان دادن آن، ابتدا توجه کنید که هر مجموعه متقابلاً عمود بر هم، مستقل خطی هم هست. فرض کنید یک ترکیب خطی از بردارهای متعامد داریم که جمع آنها صفر است. با ضرب نقطه‌ای دو طرف در یکی از اعضاء و استفاده از تعامد می‌توانیم نشان دهیم که ضریب ضرب شده در آن بردار باید صفر باشد. این کار می‌تواند برای همه ضرایب انجام شود که نشان می‌دهد ترکیب خطی بدیهی است.

حال n_{\perp} می‌تواند فقط مساوی با، بزرگتر از یا کوچکتر از n ، بعد فضا باشد. فرایند گرام-اشمیت مورد آخر را با تعبیر صریح حذف می‌کند در حالی که استقلال خطی بردارهای متعامد گزینه ما قبل آخر را رد می‌کند.

نامساوی‌های شوارتز و مثلث

دو قضیه قدرتمند برای هر فضای ضرب داخلی به کار می‌روند و از اصول موضوعه ما پیروی می‌کنند:

قضیه ۵: نامساوی شوارتز

$$|\langle V|W\rangle| \leq |V||W| \quad (15-3-1)$$

قضیه ۶: نامساوی مثلث

$$|V+W| \leq |V| + |W| \quad (16-3-1)$$

$$|V+W| \leq |V| + |W|$$

اثبات اولی همین قدر که بتوانید به کار کردن با کت‌ها و براها عادت کنید راحت خواهد بود. اثبات دومی را به عنوان تمرین واگذار می‌کنیم.

قبل از اثبات هر چیزی توجه کنید که صحت این نتایج برای پیکان‌ها واضح است: نامساوی شوارتز می‌گوید که ضرب نقطه‌ای دو بردار نمی‌تواند از ضرب طول‌های آنها تجاوز کند و نامساوی مثلث بیان می‌کند که طول یک جمع نمی‌تواند از جمع طول‌ها بیشتر شود. این مثالی است که مزیت تصور بردارهای مجرد به عنوان پیکان و حدس ویژگی‌هایی که ممکن است آنها به صورت مشترک با پیکان‌ها داشته باشند را نشان می‌دهد. البته اثبات قضیه باید صرفاً بر اصول موضوعه متکی باشد.

برای اثبات نامساوی شوارتز، اصل موضوع $\langle Z|Z \rangle \geq 0$ را در نظر بگیرید که برای

$$|Z\rangle = |V\rangle - \frac{\langle W|V\rangle}{|W|^2} |W\rangle \quad (17-3-1)$$

به کار رود. در این صورت داریم:

$$\begin{aligned} \langle Z|Z \rangle &= \langle V - \frac{\langle W|V\rangle}{|W|^2} W | V - \frac{\langle W|V\rangle}{|W|^2} W \rangle \\ &= \langle V|V \rangle - \frac{\langle W|V\rangle \langle V|W \rangle}{|W|^2} - \frac{\langle W|V \rangle^* \langle W|V \rangle}{|W|^2} \\ &\quad + \frac{\langle W|V \rangle^* \langle W|V \rangle \langle W|W \rangle}{|W|^4} \\ &\geq 0 \end{aligned} \quad (18-3-1)$$

که از یاد خطی بودن ضرب داخلی نسبت به برا استفاده کرده‌ایم. با استفاده از

$$\langle W|V \rangle^* = \langle V|W \rangle$$

خواهیم داشت:

$$\langle V|V \rangle > \frac{\langle W|V \rangle \langle V|W \rangle}{|W|^2} \quad (19-3-1)$$

با ضرب طرفین در $|W|^2$ و گرفتن ریشه دوم، نتیجه به دست می‌آید.

تمرین ۱-۳-۳: این نامساوی چه زمانی برآورده خواهد شد؟ آیا این با تجربه شما در مورد پیکان‌ها توافق دارد؟

تمرین ۱-۳-۴: نامساوی مثلث را با شروع از $|V+W|^2$ ثابت کنید. باید از $\operatorname{Re}\langle V|W \rangle \leq |\langle V|W \rangle|$ و نامساوی شوارتز استفاده کنید. نشان دهید که نامساوی آخر فقط در صورتی مساوی می‌شود که $|V\rangle = a|W\rangle$ باشد که a یک عدد مثبت حقیقی است.

۱-۴- زیر فضاها

تعریف ۱۱: فضای برداری V را در نظر بگیرید، زیر مجموعه‌ای از عناصر آن که بین خودشان یک فضای برداری تشکیل می‌دهند^۱ یک زیر فضا نامیده می‌شود. یک زیر فضای خاص i با بعد n_i را به صورت $V_i^{n_i}$ نشان خواهیم داد.

مثال ۱-۴-۱: در فضای $V^3(R)$ مثال‌هایی از زیر فضاها عبارتند از: (الف) - همه بردارهای در امتداد محور x ، فضای V_x^1 ؛ (ب) - همه بردارهای در امتداد محور y ، فضای V_y^1 ؛ (ج) - همه بردارهای واقع در صفحه $x-y$ ، فضای V_{xy}^2 . توجه کنید که همه زیر فضاها بردار بی اثر را در خود دارند [برای پیروی از اصل موضوع (۳)] و هر بردار با وارونش همراه است [تا اصل موضوع (۴) برآورده شود]. لذا مجموعه همه بردارهای در امتداد محور x مثبت به تنهایی فضای برداری تشکیل نمی‌دهند.

تعریف ۱۲: دو زیر فضای $V_i^{n_i}$ و $V_j^{m_j}$ را در نظر بگیرید. مجموع آنها، $V_i^{n_i} \oplus V_j^{m_j} = V_k^{m+k}$ ، را به عنوان مجموعه‌ای شامل (الف) - همه عناصر $V_i^{n_i}$ ، (ب) - همه عناصر $V_j^{m_j}$ و (ج) - همه ترکیبات خطی ممکن بالا تعریف می‌کنیم. اما برای عناصر (ج) بسته بودن کنار گذاشته می‌شود.

مثال ۱-۴-۲: اگر برای مثال $V_x^1 \oplus V_y^1$ فقط دارای بردارهای در امتداد محورهای x و y بود می‌توانستیم با جمع دو عنصر، یکی از هر جهت، عنصری، در امتداد هیچکدام، از آنها تولید کنیم. از طرف دیگر، اگر همه ترکیبات خطی را هم بگنجانیم به جواب صحیح، $V_x^1 \oplus V_y^1 = V_{xy}^2$ ، می‌رسیم.

تمرین ۱-۴-۱: در یک فضای V^n ثابت کنید که مجموعه همه بردارهای $\{|V_1^1\rangle, |V_1^2\rangle, \dots\}$ ، عمود بر هر $\langle 0| \neq |V\rangle$ ، تشکیل یک زیر فضا، V^{n-1} ، می‌دهند.

تمرین ۱-۴-۲: فرض کنید $V_2^{n_2}, V_1^{n_1}$ دو زیر فضا هستند به طوری که هر عنصر از V_1 به هر عنصر از V_2 عمود است. نشان دهید که بعد $V_1 \oplus V_2$ ، $n_1 + n_2$ است (راهنمایی: قضیه ۶).

۱-۵- عملگرهای خطی

هر عملگر Ω دستوری برای تبدیل یک $|V\rangle$ معین به کتی دیگر $|V'\rangle$ است. اثر عملگر به صورت زیر نشان داده می‌شود

$$(1-5-1)$$

$$\Omega|V\rangle = |V'\rangle$$

گفته می‌شود که عملگر Ω کت $|V\rangle$ را به $|V'\rangle$ تبدیل کرده است. توجه خود را به آن عملگرهای Ω محدود خواهیم کرد که ما را به خارج از فضای برداری نمی‌برند، یعنی اگر $|V\rangle$ عنصری از فضای برداری باشد، $\Omega|V\rangle = |V'\rangle$ هم همین طور باشد. عملگرها روی بر اها هم اثر می‌کنند:

۱- جمع برداری و ضرب عدد در بردار به همان روشی که در V تعریف می‌شوند در زیر فضا هم تعریف می‌شوند.

$$(۱-۵-۲)$$

$$\langle V' | \Omega = \langle V'' |$$

ما فقط به عملگرهای خطی علاقمند هستیم، یعنی آنهایی که از قواعد زیر پیروی می‌کنند:

$$(۱-۵-۳-الف)$$

$$\Omega \alpha |V_i\rangle = \alpha \Omega |V_i\rangle$$

$$(۱-۵-۳-ب)$$

$$\Omega \{ \alpha |V_i\rangle + \beta |V_j\rangle \} = \alpha \Omega |V_i\rangle + \beta \Omega |V_j\rangle$$

$$(۱-۵-۴-الف)$$

$$\langle V_i | \alpha \Omega = \langle V_i | \Omega \alpha$$

$$(۱-۵-۴-ب)$$

$$\langle \langle V_i | \alpha + \langle V_j | \beta \rangle \Omega = \alpha \langle V_i | \Omega + \beta \langle V_j | \Omega$$

مثال ۱-۵-۱ - ساده‌ترین عملگر، عملگر همانی است که دستور می‌دهد:

$$I \rightarrow \text{بردار را تنها بگذار!}$$

بنابراین:

$$(۱-۵-۵)$$

$$I |V\rangle = |V\rangle \quad |V\rangle \text{ برای همه } V \text{ ها}$$

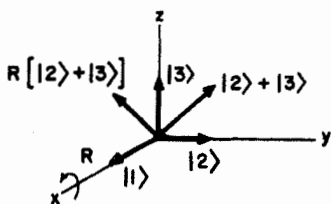
$$(۱-۵-۶)$$

$$\langle V | I = \langle V | \quad \langle V | \text{ برای همه } V \text{ ها}$$

اکنون به عملگر جالب تری روی $V^3(R)$ می‌پردازیم:

$$R\left(\frac{1}{2}\pi i\right) \rightarrow \text{بردار را به اندازه } \frac{1}{2}\pi \text{ حول بردار یکه } \hat{i} \text{ بچرخان}$$

[به‌طور کلی، $R(\theta)$ نشانگر چرخشی به اندازه زاویه $\theta = |\theta|$ حول محور موازی با بردار یکه $\hat{\theta} = \theta/\theta$ است]. فرض کنید اثر این عملگر را روی سه بردار یکه $\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}$ ، که در نمادگذاری ما با $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ نشان داده می‌شود (شکل ۱-۳ را ببینید)، بررسی کنیم،



شکل ۱-۳: اثر عملگر $R\left(\frac{1}{2}\pi i\right)$. توجه کنید که

$$R\left[\left[|2\rangle + |3\rangle\right]\right] = R|2\rangle + R|3\rangle$$

انتظار می‌رود (ما اغلب $R\left(\frac{1}{2}\pi i\right)$ را هر گاه احتمال بروز اشتباه یا ابهام نباشد با R نشان می‌دهیم).

از شکل واضح است که

$$(۱-۵-۷-الف)$$

$$R\left(\frac{1}{2}\pi i\right)|1\rangle = |1\rangle$$

$$(۱-۵-۷-ب)$$

$$R\left(\frac{1}{2}\pi i\right)|2\rangle = |3\rangle$$

$$R\left(\frac{1}{2}\pi i\right)|3\rangle = -|2\rangle \quad (1-5-7)$$

واضح است که $R\left(\frac{1}{2}\pi i\right)$ خطی است. برای نمونه، از همان شکل پیداست که

$$R[|2\rangle + |3\rangle] = R|2\rangle + R|3\rangle$$

ویژگی خوب عملگرهای خطی این است که همین که اثر آنها روی بردارهای پایه معلوم شود اثر آنها روی هر بردار در فضا مشخص می‌شود. اگر برای پایه $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |n\rangle$ در V^n ،

$$\Omega|i\rangle = |i'\rangle$$

آنگاه برای هر $|V\rangle = \sum v_i |i\rangle$

$$\Omega|V\rangle = \sum_i \Omega v_i |i\rangle = \sum_i v_i \Omega|i\rangle = \sum_i v_i |i'\rangle \quad (1-5-8)$$

در مورد مثال $\Omega = R\left(\frac{1}{2}\pi i\right)$ اینگونه است. اگر

$$|V\rangle = v_1|1\rangle + v_2|2\rangle + v_3|3\rangle$$

یک بردار باشد، در این صورت

$$R|V\rangle = v_1R|1\rangle + v_2R|2\rangle + v_3R|3\rangle = v_1|1\rangle + v_2|3\rangle - v_3|2\rangle$$

ضرب دو عملگر نماینده این دستور است که دستورات متناظر با دو عملگر به صورت متوالی انجام می‌شوند

$$\Lambda\Omega|V\rangle = \Lambda(\Omega|V\rangle) = \Lambda|\Omega V\rangle \quad (1-5-9)$$

که $|\Omega V\rangle$ کت به دست آمده به وسیله اثر Ω روی $|V\rangle$ است. ترتیب عملگرها در یک ضرب خیلی مهم است: به طور کلی

$$\Omega\Lambda - \Lambda\Omega \equiv [\Omega, \Lambda]$$

معروف به جابه‌جاگر Λ, Ω صفر نیست. برای مثال $R\left(\frac{1}{2}\pi i\right), R\left(\frac{1}{2}\pi j\right)$ جابه‌جا نمی‌شوند، یعنی جابه‌جاگرشان غیر صفر است. دو اتحاد مفید زیر برای جابه‌جاگرها برقرارند:

$$[\Omega, \Lambda\theta] = \Lambda[\Omega, \theta] + [\Omega, \Lambda]\theta \quad (1-5-10)$$

$$[\Lambda\Omega, \theta] = \Lambda[\Omega, \theta] + [\Lambda, \theta]\Omega \quad (1-5-11)$$

توجه کنید که جدای از تأکید بر ترتیب به کار رفته، این قواعد شبیه قاعدهٔ زنجیره‌ای در ریاضیات برای محاسبه مشتق حاصل ضرب هستند.

وارون Ω, Ω^{-1} ، در رابطه زیر صدق می‌کند^۱

$$\Omega\Omega^{-1} = \Omega^{-1}\Omega = I \quad (12-5-1)$$

هر عملگری وارون ندارد. شرط وجود وارون در ضمیمه ۱-A ارائه شده است. عملگر $R\left(\frac{1}{2}\pi i\right)$ دارای وارون است و وارون آن $R\left(-\frac{1}{2}\pi i\right)$ است. وارون حاصل ضرب عملگرها، حاصل ضرب وارون‌ها به‌طور معکوس است:

$$(\Omega\Lambda)^{-1} = \Lambda^{-1}\Omega^{-1} \quad (13-5-1)$$

زیرا فقط در این صورت است که داریم:

$$(\Omega\Lambda)(\Omega\Lambda)^{-1} = (\Omega\Lambda)(\Lambda^{-1}\Omega^{-1}) = \Omega\Lambda\Lambda^{-1}\Omega^{-1} = \Omega\Omega^{-1} = I$$

۱-۶- عناصر ماتریسی عملگرهای خطی

اکنون به نمایش یک بردار مجرد در یک پایه به‌وسیله اعداد n تایی، موسوم به مولفه‌ها، عادت کرده‌ایم که برحسب آنها همهٔ عمل‌های برداری می‌توانند انجام شوند. خواهیم دید که به همین ترتیب یک عملگر خطی می‌تواند به‌وسیله مجموعه‌ای از n^2 عدد، که به‌صورت ماتریس $n \times n$ نوشته می‌شوند و عناصر ماتریسی آن در آن پایه نامیده می‌شوند، نمایش داده شود. اگر چه عناصر ماتریسی، درست شبیه مولفه‌های بردار، وابسته به پایه هستند، اما محاسبه همهٔ کمیت‌های مستقل از پایه را با ملموس‌تر و هویداً ساختن عملگر مجرد، آسان می‌کند.

نقطه شروع ما همان یافتهٔ قبلی است که اثر یک عملگر خطی به‌وسیله اثر آن روی بردارهای پایه کاملاً مشخص می‌شود. اگر بردارهای پایه به‌صورت زیر تغییر کنند،

$$\Omega|i\rangle = |i'\rangle$$

(که $|i'\rangle$ معلوم است)، هر بردار در این فضا متحمل تغییری می‌شود که به آسانی قابل محاسبه است.

$$\Omega|V\rangle = \Omega \sum_i v_i |i\rangle = \sum_i v_i \Omega|i\rangle = \sum_i v_i |i'\rangle$$

وقتی می‌گوییم $|i'\rangle$ معلوم است منظور مان این است که مولفه‌های آن در پایه اصلی معلومند:

۱- در $V^n(C)$ با n متناهی، $\Omega\Omega^{-1} = I \Leftrightarrow \Omega^{-1}\Omega = 1$. این را با استفاده از نتایج حاصل از قضیه ۱-۱-A ضمیمه A اثبات کنید.

$$\langle j|i' \rangle = \langle j|\Omega|i \rangle \equiv \Omega_{ji} \quad (1-6-1)$$

تعداد n^2 عدد Ω_{ij} عناصر ماتریسی Ω در این پایه هستند. اگر

$$\Omega|V\rangle = |V'\rangle$$

باشد آنگاه مولفه‌های کت تبدیل یافته $|V'\rangle$ را می‌توان بر حسب Ω_{ij} و مولفه‌های $|V\rangle$ نوشت:

$$\begin{aligned} v'_i &= \langle i|V'\rangle = \langle i|\Omega|V\rangle = \langle i|\Omega\left(\sum_j v_j|j\rangle\right) \\ &= \sum_j v_j \langle i|\Omega|j\rangle \\ &= \sum_j \Omega_{ij} v_j \end{aligned} \quad (2-6-1)$$

معادله (۲-۶-۱) می‌تواند به شکل ماتریسی زیر در آید:

$$\begin{bmatrix} v'_1 \\ v'_2 \\ \vdots \\ v'_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle 1|\Omega|1\rangle & \langle 1|\Omega|2\rangle & \cdots & \langle 1|\Omega|n\rangle \\ \langle 2|\Omega|1\rangle & & & \\ \vdots & & & \vdots \\ \langle n|\Omega|1\rangle & \cdots & & \langle n|\Omega|n\rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} \quad (3-6-1)$$

نکته: عناصر ستون اول فقط مولفه‌های بردار پایه اول تبدیل یافته، $|1'\rangle = \Omega|1\rangle$ ، در پایه داده شده هستند. همین‌طور، عناصر ستون j ام، تصویر بردار پایه j ام را، بعد از اینکه Ω روی آن اثر می‌کند، نمایش می‌دهند.

خود را متقاعد کنید که اثر همین ماتریس Ω_{ij} از سمت چپ روی بردار سطر متناظر با هر $|V'\rangle$ ، بردار سطر متناظر با $|V''\rangle = \langle V'|\Omega$ را به دست می‌دهد.

مثال ۱-۶-۱: با ترکیب نکته بالا با این مطلب که عملگر $R\left(\frac{1}{2}\pi i\right)$ اثر زیر را روی بردارهای پایه دارد،

$$R\left(\frac{1}{2}\pi i\right)|1\rangle = |1\rangle$$

$$R\left(\frac{1}{2}\pi i\right)|2\rangle = |3\rangle$$

$$R\left(\frac{1}{2}\pi i\right)|3\rangle = -|2\rangle$$

می‌توانیم ماتریسی بنویسیم که آنرا در پایه $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ نمایش می‌دهد:

$$R\left(\frac{1}{2}\pi i\right) \leftrightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (4-6-1)$$

برای نمونه، ۱- در ستون سوم بیان می‌کند که R ، $|3\rangle$ را به $|2\rangle$ می‌چرخاند. همین‌طور می‌توان نکته فوق را نادیده گرفته و فقط از تعریف $R_{ij} = \langle i | R | j \rangle$ برای محاسبه ماتریس استفاده نمود.

تمرین ۱-۶-۱: عملگر Ω با ماتریس زیر مشخص می‌شود:

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

اثر آن چیست؟

اکنون برخی عملگرهای خاص را بررسی کرده و می‌بینیم که چطور در شکل ماتریسی ظاهر می‌شوند.

(الف) - عملگر همانی I .

$$I_{ij} = \langle i | I | j \rangle = \langle i | j \rangle = \delta_{ij} \quad (۵-۶-۱)$$

لذا I به وسیله یک ماتریس قطری نمایش داده می‌شود که روی قطر آن اعداد 1 قرار دارند. باید ثابت کنید که نکته ما هم همین نتیجه را به دست می‌دهد.

(ب) - عملگرهای تصویرگر. ابتدا با عملگرهای تصویرگر آشنا می‌شویم. بسط کتی دلخواه را در یک پایه در نظر بگیرید

$$|V\rangle = \sum_{i=1}^n |i\rangle \langle i | V \rangle$$

برحسب اشیاء $|i\rangle \langle i|$ ، که عملگرهای خطی هستند و طبق تعریف روی $|V\rangle$ اثر می‌کنند تا $|i\rangle \langle i | V \rangle$ به دست آید می‌توانیم عبارت بالا را به صورت زیر بنویسیم

$$|V\rangle = \left(\sum_{i=1}^n |i\rangle \langle i| \right) |V\rangle \quad (۶-۶-۱)$$

از آنجا که معادله (۶-۶-۱) برای همه $|V\rangle$ ها درست است، شیء داخل پرانتز باید با عملگر همانی یکی فرض شود

$$I = \sum_{i=1}^n |i\rangle \langle i| = \sum_{i=1}^n P_i \quad (۷-۶-۱)$$

شیء $|i\rangle \langle i| = P_i$ عملگر تصویرگر برای کت $|i\rangle$ نامیده می‌شود. رابطه (۷-۶-۱)، که رابطه کامل بودن نامیده می‌شود، عملگر همانی را به صورت جمعی روی عملگرهای تصویرگر بیان کرده و برای ما بسیار ارزشمند خواهد بود (اگر فکر می‌کنید که زمانی که برای عملگر همانی، که به نظر می‌رسد کاری انجام نمی‌دهد، صرف شد اتلاف وقت بود، فقط منتظر باشید و ببینید!).

ملاحظه کنید که

$$P_i |V\rangle = |i\rangle \langle i | V \rangle = |i\rangle v_i \quad (۸-۶-۱)$$

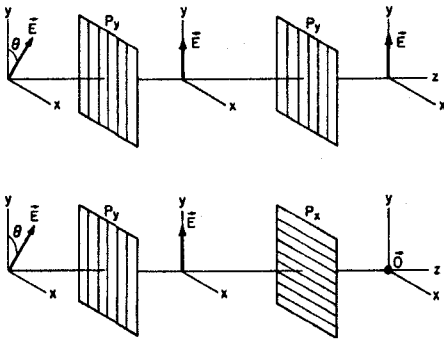
واضح است که P_i خطی است. توجه کنید که $|V\rangle$ هر چه باشد، $P_i|V\rangle$ مضربی از $|i\rangle$ با ضریب (v_i) است که مولفه $|V\rangle$ در امتداد $|i\rangle$ است. از آنجا که P_i مولفه هر کت $|V\rangle$ را در جهت $|i\rangle$ تصویر می‌کند عملگر تصویرگر نامیده می‌شود. رابطه کامل بودن، رابطه $(1-6-7)$ ، بیان می‌کند که مجموعه تصاویرهای یک بردار در امتداد همه n جهت، با خود بردار برابر می‌شود. عملگرهای تصویرگر می‌توانند روی برآها هم به شیوه مشابه اثر کنند:

$$\langle V|P_i = \langle V|i\rangle\langle i| = v_i^*\langle i| \quad (9-6-1)$$

عملگرهای تصویرگر متناظر با بردارهای پایه از رابطه زیر پیروی می‌کنند

$$P_i P_j = |i\rangle\langle i|j\rangle\langle j| = \delta_{ij} P_j \quad (10-6-1)$$

این معادله بیان می‌کند که (۱) - همین که P_i کت $|V\rangle$ را در امتداد $|i\rangle$ تصویر می‌کند، کاربردهای مجدد P_i هیچ تفاوتی ایجاد نمی‌کند؛ (۲) - کاربرد بعدی P_j ($j \neq i$) صفر خواهد شد زیرا یک بردار که تماماً در امتداد $|i\rangle$ قرار دارد نمی‌تواند تصویری در امتداد جهت عمود بر خود، $|j\rangle$ ، داشته باشد. مثال زیر از اپتیک می‌تواند بحث را تا حدی روشن کند. باریکه نوری را در نظر بگیرید که در جهت محور Z حرکت کرده و در صفحه $y-x$ با زاویه θ نسبت به محور y قطبیده است (شکل ۱-۴).



شکل ۱-۴: P_y, P_x قطبشگرهای واقع در سر راه باریکه عبوری در امتداد محور z هستند. اثر قطبشگرها روی میدان الکتریکی \vec{E} از قانون ترکیب عملگرهای تصویرگر پیروی می‌کند: $P_i P_j = \delta_{ij} P_j$

اگر قطبشگر P_y ، که فقط نور قطبیده در جهت محور y را عبور می‌دهد، در بین راه قرار گیرد، تصویر $E \cos \theta$ در امتداد محور y عبور می‌کند. قطبشگر دیگر P_x واقع در سر راه هیچ اثری روی باریکه ندارد. می‌توانیم اثر قطبشگر را با اثر یک عملگر تصویرگر P_y که روی بردار میدان الکتریکی E اثر می‌کند یکسان در نظر بگیریم. اگر بعد از P_y یک قطبشگر P_x قرار گیرد، باریکه کاملاً قطع می‌شود. بنابراین قطبشگرها از معادله $P_i P_j = \delta_{ij} P_j$ ، که از عملگرهای تصویرگر انتظار می‌رود، پیروی می‌کنند.

به عناصر ماتریسی P_i بر می‌گردیم. دو رویکرد وجود دارد، اولی که تا حدی غیر مستقیم است، احساسی در مورد نوع شیء $|i\rangle\langle i|$ به ما می‌دهد. می‌دانیم که

$$|i\rangle \leftrightarrow \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\langle i| \leftrightarrow [0, 0, \dots, 1, 0, 0, \dots, 0]$$

به طوری که با استفاده از قواعد ضرب ماتریس‌ها،

$$|i\rangle\langle i| \leftrightarrow \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} [0, 0, \dots, 1, 0, \dots, 0] = \begin{bmatrix} 0 & & \dots & & 0 \\ & \ddots & & & \\ & & 0 & & \\ \vdots & & & 1 & \\ & & & & 0 \\ & & & & \ddots & \\ 0 & & & & & 0 \end{bmatrix} \quad (11-6-1)$$

نظریه اینکه (ماتریس $(n \times 1)$) \times (ماتریس $(1 \times n)$) = یک عدد است، (ماتریس $(n \times n)$) = (ماتریس $(1 \times n)$) \times (ماتریس $(n \times 1)$) = یک عملگر است. ضرب داخلی $\langle V | V' \rangle$ یک براکت را نشان می‌دهد که همدیگر را یافته‌اند، در حالی که $|V\rangle\langle V'|$ ، که گاهی ضرب خارجی نامیده می‌شود، دو عامل دارد که به دنبال یک برا یا یک کت برای ضرب نقطه‌ای هستند. رویکرد مستقیم تر به عناصر ماتریسی نتیجه می‌دهد که

$$(\mathbb{P}_i)_{kl} = \langle k|i\rangle\langle i|l\rangle = \delta_{ki}\delta_{il} = \delta_{kl}\delta_{ii} \quad (12-6-1)$$

که با معادله (11-6-1) یکسان است. همین نتیجه از نکته قبلی هم به دست می‌آید. هر عملگر تصویرگر فقط یک عنصر ماتریسی غیر صفر دارد، یک ۱ در عنصر i ام روی قطر. رابطه کامل بودن، رابطه (7-6-1)، بیان می‌کند که وقتی همه P_i ها جمع می‌شوند، قطر تکمیل می‌شود تا عملگر همانی به دست آید. اگر جمع روی فقط تعدادی از عملگرهای تصویرگر را تشکیل دهیم، عملگری به دست می‌آوریم که یک بردار معین را به زیر فضای پوشش داده توسط فقط بردارهای پایه متناظر تصویر می‌کند.

ماتریس‌های متناظر با ضرب عملگرها

ماتریس‌هایی را در نظر بگیرید که ضرب عملگرها را نمایش می‌دهند. این ماتریس‌ها با کاربرد معادله (7-6-1) به ماتریس‌های نمایش دهنده تک تک عملگرها مربوط می‌شوند:

$$\begin{aligned}
 (\Omega\Lambda)_{ij} &= \langle i|\Omega\Lambda|j\rangle = \langle i|\Omega\Lambda|j\rangle \\
 &= \sum_k \langle i|\Omega|k\rangle \langle k|\Lambda|j\rangle = \sum_k \Omega_{ik} \Lambda_{kj}
 \end{aligned}
 \tag{۱۳-۶-۱}$$

بنابراین ماتریس نمایش دهنده ضرب عملگرها، ضرب ماتریس‌های نمایش دهنده عامل هاست.

الحاقی یک عملگر

یادآوری می‌کنیم که برا متناظر با کت $|\alpha V\rangle = |\alpha V\rangle$ عبارتست از

$$\langle \alpha V| = \langle V|\alpha^* \quad (\langle V|\alpha)$$

مشابه این، با داشتن یک کت

$$\Omega|V\rangle = |\Omega V\rangle$$

یک برا متناظر وجود دارد که

$$\langle \Omega V| = \langle V|\Omega^\dagger \tag{۱۴-۶-۱}$$

که عملگر Ω^\dagger را تعریف می‌کند. می‌توان این معادله را به صورت زیر بیان کرد:

اگر Ω کت $|V\rangle$ را به $|V'\rangle$ تبدیل کند، Ω^\dagger برا $\langle V|$ را به $\langle V'|$ تبدیل می‌کند. درست مثل α و α^* ، $\langle V|$ و $|V\rangle$ اشیائی مرتبط اما مجزا هستند، لذا Ω و Ω^\dagger هم اینگونه هستند. رابطه بین Ω و Ω^\dagger ، که الحاقی Ω یا «مگا دگر» نامیده می‌شود، در یک پایه بهتر دیده می‌شود:

$$\begin{aligned}
 (\Omega^\dagger)_{ij} &= \langle i|\Omega^\dagger|j\rangle = \langle \Omega i|j\rangle \\
 &= \langle j|\Omega i\rangle^* = \langle j|\Omega|i\rangle^*
 \end{aligned}$$

بنابراین

$$\Omega_{ij}^\dagger = \Omega_{ji}^* \tag{۱۵-۶-۱}$$

به عبارتی دیگر، ماتریس نمایش دهنده Ω^\dagger مزدوج ترانهاده ماتریس نمایشگر Ω است. (یادآوری می‌شود که بردار سطری نمایشگر $\langle V|$ مزدوج ترانهاده بردار ستونی نمایشگر $|V\rangle$ است. در یک پایه معین، عمل الحاقی همانند گرفتن مزدوج ترانهاده است). الحاقی یک ضرب، ضرب الحاقی‌ها به صورت معکوس است:

$$(\Omega\Lambda)^\dagger = \Lambda^\dagger\Omega^\dagger \tag{۱۶-۶-۱}$$

برای اثبات این، $\langle \Omega\Lambda V|$ را در نظر بگیرید. ابتدا $\Omega\Lambda$ را به عنوان یک عملگر در نظر می‌گیریم

$$\langle \Omega\Lambda V| = \langle (\Omega\Lambda)V| = \langle V|(\Omega\Lambda)^\dagger$$

سپس (ΛV) را به صورت بردار دیگر بحث کرده و می‌نویسیم:

$$\langle \Omega \Lambda V | = \langle \Omega (\Lambda V) | = \langle \Lambda V | \Omega^\dagger$$

Λ را بیرون کشیده، Ω^\dagger را جلوتر می‌بریم:

$$\langle \Lambda V | \Omega^\dagger = \langle V | \Lambda^\dagger \Omega^\dagger$$

با مقایسه این با نتیجه به دست آمده در بالا به نتیجه مورد نظر می‌رسیم. حال معادله‌ای شامل کت‌ها، عددها و عملگرها را در نظر بگیرید:

$$\alpha_1 |V_1\rangle = \alpha_2 |V_2\rangle + \alpha_3 |V_3\rangle \langle V_4 | V_5 \rangle + \alpha_4 \Omega \Lambda |V_6\rangle \quad (1-17-6-1) \text{ الف}$$

الحاقی آن کدام است؟ قاعده قدیمی ما بیان می‌کند که الحاقی آن به صورت زیر است:

$$\langle V_1 | \alpha_1^* = \langle V_2 | \alpha_2^* + \langle V_5 | V_4 \rangle \langle V_3 | \alpha_3^* + \langle \Omega \Lambda V_6 | \alpha_4^*$$

در جمله آخر می‌توانیم $\langle \Omega \Lambda V_6 |$ را با عبارت زیر جایگزین کنیم

$$\langle V_6 | (\Omega \Lambda)^\dagger = \langle V_6 | \Lambda^\dagger \Omega^\dagger$$

به طوری که سرانجام الحاقی معادله (1-17-6-1) به دست می‌آید:

$$\langle V_1 | \alpha_1^* = \langle V_2 | \alpha_2^* + \langle V_5 | V_4 \rangle \langle V_3 | \alpha_3^* + \langle V_6 | \Lambda^\dagger \Omega^\dagger \alpha_4^* \quad (1-17-6-1) \text{ ب}$$

قاعده آخر برای گرفتن الحاقی از عمومی‌ترین معادله‌ای که مواجه خواهیم شد این است:

وقتی با ضربی از عملگرها، براها، کت‌ها و ضرایب عددی صحیح مواجه شویم، ترتیب همه عامل‌ها را معکوس کرده و جانشینی‌های $\Omega \leftrightarrow \Omega^\dagger$ ، $| \rangle \leftrightarrow \langle |$ و $\alpha \leftrightarrow \alpha^*$ را انجام می‌دهیم. (البته واقعاً نیازی به معکوس کردن مکان اعداد α نیست مگر اینکه به یک شکل شدن آنها علاقه‌مند باشیم).

عملگرهای هرمیتی، پاد هرمیتی و یکانی

توجه خود را به آن دسته از عملگرها معطوف می‌کنیم که نقش عمده‌ای در مکانیک کوانتومی ایفا می‌کنند.

تعریف ۱۳: عملگر Ω هرمیتی است در صورتی که $\Omega^\dagger = \Omega$ باشد.

تعریف ۱۴: عملگر Ω پاد هرمیتی است در صورتی که $\Omega^\dagger = -\Omega$ باشد.

الحاقی برای عملگر، مثل مزدوج مختلط برای اعداد است. عملگرهای هرمیتی و پاد هرمیتی شبیه اعداد حقیقی خالص و موهومی خالص هستند. درست همان‌طور که هر عدد می‌تواند به مجموع قسمت‌های حقیقی و موهومی خالص تجزیه شود،

$$\alpha = \frac{\alpha + \alpha^*}{2} + \frac{\alpha - \alpha^*}{2}$$

می‌توانیم هر عملگر را به بخش‌های هرمیتی و پاد هرمیتی آن تجزیه کنیم:

$$\Omega = \frac{\Omega + \Omega^\dagger}{2} + \frac{\Omega - \Omega^\dagger}{2} \quad (18-6-1)$$

تمرین ۱-۶-۲: فرض کنید Ω و Λ هرمیتی‌اند. در مورد (۱) $\Omega\Lambda$ ، (۲) $\Omega\Lambda + \Lambda\Omega$ ، (۳) $[\Omega, \Lambda]$ و (۴) $i[\Omega, \Lambda]$ چه می‌توان گفت؟
تعریف ۱۵: عملگر U یکانی است اگر که

$$UU^\dagger = I \quad (19-6-1)$$

این معادله بیان می‌کند که U و U^\dagger معکوس یکدیگر هستند. در نتیجه، از معادله (۱-۵-۱۲)،

$$U^\dagger U = I \quad (20-6-1)$$

در ادامه مقایسه بین عملگرها و اعداد، عملگرهای یکانی شبیه اعداد مختلط با مدول واحد، $u = e^{i\theta}$ هستند. درست همان‌طور که $UU^* = 1$ است، $U^+U = I$ است.

تمرین ۱-۶-۳: نشان دهید که حاصل ضرب عملگرهای یکانی، یکانی است.
قضیه ۷: عملگرهای یکانی، ضرب داخلی بین بردارهایی که روی آنها اثر می‌کنند را ناوردا نگه می‌دارد.
اثبات: فرض کنید

$$|V_1\rangle = U|V_1\rangle$$

و

$$|V_2\rangle = U|V_2\rangle$$

در این صورت،

$$\langle V_2|V_1\rangle = \langle UV_2|UV_1\rangle \quad (21-6-1)$$

$$= \langle V_2|U^\dagger U|V_1\rangle = \langle V_2|V_1\rangle$$

(Q.E.D.)

عملگرهای یکانی تعمیم‌های عملگرهای چرخش از $V^3(R)$ به $V^n(C)$ هستند، زیرا، درست همانند عملگرهای چرخش در سه بعد، آنها طول بردارها و ضرب داخلی آنها را ناوردا نگه می‌دارند. در واقع، در فضای برداری حقیقی، شرط یکانی بودن، $U^{-1} = U^T$ می‌شود (T به معنی ترانزپوز، که یک ماتریس متعامد یا چرخش را تعریف می‌کند) $\left[\frac{1}{2}\pi i\right]$ یک مثال است].

قضیه ۸: اگر ستون‌های یک ماتریس یکانی $n \times n$ را به‌عنوان مولفه‌های n بردار در نظر بگیریم، این بردارها راست‌هنجار هستند. به همین ترتیب، سطرها می‌توانند به‌عنوان مولفه‌های n بردار راست‌هنجار تعبیر شوند.

اثبات ۱: طبق نکته مذکور در قبل، ستون z ام ماتریس نمایشگر U ، تصویر بردار پایه z ام بعد از اثر U روی آن است. از آنجا که U ضرب داخلی را ناوردا نگه می‌دارد، مجموعه بردارهای چرخیده هم راست هنجار هستند. حال سطرها را در نظر بگیرید. اکنون از این واقعیت بهره می‌گیریم که U^\dagger هم یک چرخش است (دیگر چگونه می‌توان U را بی‌اثر کرد تا $U^\dagger U = I$ شود؟). از آنجا که سطرهای U ستونهای U^\dagger هستند (غیر از مزدوج مختلط، که راست هنجار بودن را تحت تأثیر قرار نمی‌دهد)، نتیجه‌ای که برای ستونهای ماتریس یکانی به دست آمد بیان می‌کند که سطرهای U راست هنجار هستند.

اثبات ۲: از آنجا که $U^\dagger U = I$ است،

$$\begin{aligned} \delta_{ij} &= \langle i | I | j \rangle = \langle i | U^\dagger U | j \rangle \\ &= \sum_k \langle i | U^\dagger | k \rangle \langle k | U | j \rangle \\ &= \sum_k U_{ik}^* U_{kj} = \sum_k U_{ki}^* U_{kj} \end{aligned} \quad (1-6-22)$$

که قضیه را برای ستونها اثبات می‌کند در صورتی که با معادله $UU^\dagger = I$ شروع کنیم، نتیجه مشابهی برای سطرها به دست می‌آید.

توجه کنید که $UU^\dagger = I$ و $U^\dagger U = I$ شروط مستقلی نیستند.

تمرین ۱-۶-۴: فرض می‌شود که شما می‌دانید که (۱) - دترمینان چیست، (۲) $\det \Omega^T = \det \Omega$ (علامت ترانهاد)، (۳) - دترمینال حاصل ضرب ماتریس‌ها، حاصل ضرب دترمینان هاست [اگر نمی‌دانید، این

ویژگی‌ها را برای حالت دوبعدی $\Omega = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}$ ، که $\det \Omega = \alpha\delta - \beta\gamma$ است، اثبات کنید]. ثابت کنید که دترمینان یک ماتریس یکانی، عدد مختلطی با مدول واحد است.

تمرین ۱-۶-۵: ثابت کنید که $R\left(\frac{1}{2}\pi i\right)$ یکانی (متعامد) است.

تمرین ۱-۶-۶: ثابت کنید که ماتریس‌های زیر یکانی هستند:

$$\frac{1}{2^{1/2}} \begin{bmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{bmatrix}, \quad \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1+i & 1-i \\ 1-i & 1+i \end{bmatrix}$$

ثابت کنید که دترمینان در هر مورد به شکل $e^{i\theta}$ است. آیا ماتریس‌های فوق هرمیتی‌اند؟

۷-۱ - تبدیلات اکتیو و پسیو (فعال و غیرفعال)

فرض کنید همه بردارهای $|V\rangle$ در یک فضا تحت تبدیلات یکانی قرار گیرند

$$|V\rangle \rightarrow U|V\rangle \quad (1-7-1)$$

تحت این تبدیل، عناصر ماتریسی هر عملگر Ω به صورت زیر تغییر می‌کنند:

$$\langle V' | \Omega | V \rangle \rightarrow \langle UV' | \Omega | UV \rangle = \langle V' | U^\dagger \Omega U | V \rangle \quad (2-7-1)$$

واضح است که اگر همه بردارها را رها می‌کردیم و همه عملگرها تبدیل می‌شدند همین تغییر صورت می‌گرفت:

$$\Omega \rightarrow U^\dagger \Omega U \quad (3-7-1)$$

حالت اول یک تبدیل اکتیو و حالت دوم یک تبدیل پسیو نامیده می‌شود. این نامگذاری با توجه به بردارها انتخاب شده است: بردارها در تبدیل اکتیو تغییر می‌کنند و در تبدیل پسیو بدون تغییر می‌مانند. این وضعیت از نقطه نظر عملگرها دقیقاً بر عکس است.

بعداً خواهیم دید که فیزیک مسئله در نظریه کوانتومی در عناصر ماتریسی عملگرها قرار گرفته و تبدیلات اکتیو و پسیو دو روش هم ارز برای توصیف یک تبدیل فیزیکی هستند.

تمرین ۱-۷-۱: رد (trace) یک ماتریس به صورت مجموع عناصر قطری آن تعریف می‌شود

$$\text{Tr } \Omega = \sum_i \Omega_{ii}$$

نشان دهید که

$$\text{Tr}(\Omega \Lambda) = \text{Tr}(\Lambda \Omega) \quad \text{الف}$$

$$\text{Tr}(\Omega \Lambda \theta) = \text{Tr}(\Lambda \theta \Omega) = \text{Tr}(\theta \Omega \Lambda) \quad \text{ب}$$

ج- رد یک عملگر با تبدیل یکانی پایه، $|i\rangle \rightarrow U|i\rangle$ ، تغییر نمی‌کند [به طور معادل نشان دهید که $[\text{Tr} \Omega = \text{Tr}(U^\dagger \Omega U)]$].

تمرین ۲-۷-۱: نشان دهید که دترمینان یک ماتریس با تبدیل یکانی پایه تغییر نمی‌کند [به طور معادل نشان دهید که $[\det \Omega = \det(U^\dagger \Omega U)]$].

۱-۸-۱- مسئله ویژه مقدری

عملگر خطی Ω را در نظر بگیرید که روی کت دلخواه غیر صفر $|V\rangle$ اثر می‌کند:

$$\Omega |V\rangle = |V'\rangle \quad (1-8-1)$$

کت بالا تغییری غیربدیهی خواهد داشت، یعنی $|V'\rangle$ رابطه ساده‌ای با $|V\rangle$ نخواهد داشت مگر اینکه عملگر، عملگری بدیهی نظیر عملگر همانی یا ضربی از آن باشد. این کت‌های دلخواه فراوان هستند. اما هر عملگر کت‌های خاصی به نام ویژه کت برای خود دارد که اثرش روی آنها ضربی از خود کت است:

$$\Omega |V\rangle = \omega |V\rangle \quad (2-8-1)$$

معادله (۲-۸-۱) یک معادله ویژه مقدری است: $|V\rangle$ یک ویژه کت Ω با ویژه مقدار ω است. در این فصل خواهیم دید که چگونه می‌توان به طور اصولی همه ویژه مقادیر و ویژه بردارهای یک عملگر مفروض Ω را

تعیین کرد. اینکه چطور چنین معادله‌ای وارد فیزیک می‌شود با چند مثال از مکانیک در پایان این بخش نشان داده خواهد شد.

مثال ۱-۸-۱: برای نشان دادن اینکه مسئله ویژه مقدری واقعاً چقدر آسان است با حالتی شروع خواهیم کرد که به طور کامل حل می‌شود: حالت $\Omega = I$. از آنجا که برای هر $|V\rangle$,

$$I|V\rangle = |V\rangle$$

نتیجه می‌شود که

(۱) - تنها ویژه مقدار I ، 1 است.

(۲) - همه بردارها ویژه بردار آن با ویژه مقدار 1 هستند.

مثال ۱-۸-۲: بعد از این موفقیت فاقد شرایط لازم، به سراغ حالتی می‌رویم که کمی مشکل‌تر است:

$\Omega = P_V$ ، عملگر تصویرگر مربوط به یک کت بهنجار شده $|V\rangle$. واضح است که الف - هر $|\alpha V\rangle$ ، موازی با $|V\rangle$ ، یک ویژه کت با ویژه مقدار 1 است:

$$P_V|\alpha V\rangle = |V\rangle\langle V|\alpha V\rangle = \alpha|V\rangle|V|^2 = 1 \cdot |\alpha V\rangle$$

(ب) - هر کت $|V_\perp\rangle$ ، عمود بر $|V\rangle$ ، ویژه کتی با ویژه مقدار صفر است:

$$P_V|V_\perp\rangle = |V\rangle\langle V|V_\perp\rangle = 0 = 0|V_\perp\rangle$$

(ج) - کت‌های مرکب از هر دو، یعنی به شکل $|\alpha V\rangle + \beta|V_\perp\rangle$ ، ویژه کت نیستند:

$$P_V(|\alpha V\rangle + \beta|V_\perp\rangle) = |\alpha V\rangle \neq \gamma(|\alpha V\rangle + \beta|V_\perp\rangle)$$

از آنجا که هر کت در فضا در یکی از دسته‌های فوق قرار می‌گیرد، همه ویژه مقادیر و ویژه بردارها را به دست آورده‌ایم.

مثال ۱-۸-۳: حال عملگر $R\left(\frac{1}{2}\pi i\right)$ را در نظر بگیرید. می‌دانیم که یک ویژه کت دارد که همان $|1\rangle$ در امتداد محور x است:

$$R\left(\frac{1}{2}\pi i\right)|1\rangle = |1\rangle$$

آیا ویژه کت‌های دیگری وجود دارد؟ البته هر بردار $|\alpha|1\rangle$ در امتداد محور x هم با چرخش x تغییر نمی‌کند. این ویژگی عمومی معادله ویژه مقدری است و خطی بودن عملگر را منعکس می‌کند: اگر

$$\Omega|V\rangle = \omega|V\rangle$$

آنگاه برای هر مضرب α ،

$$\Omega\alpha|V\rangle = \alpha\Omega|V\rangle = \alpha\omega|V\rangle = \omega\alpha|V\rangle$$

چون معادله ویژه مقدراری، ویژه بردار را صرف نظر از یک ضریب عددی ثابت نگه می‌دارد، مضرب‌های یک ویژه بردار را به‌عنوان ویژه بردارهای متمایز در نظر نخواهیم گرفت. با این ذهنیت، سوال این است که آیا $R\left(\frac{1}{2}\pi i\right)$ ویژه بردارهای دیگری در کنار $|1\rangle$ دارد؟ حدس ما این است که خیر، زیرا هر بردار غیر واقع در جهت محور x به‌وسیله $R\left(\frac{1}{2}\pi i\right)$ چرخانده می‌شود و امکان ندارد به مضربی از خودش تبدیل شود. چون هر بردار یا موازی $|1\rangle$ است یا موازی آن نیست، مسئله ویژه مقدراری را به‌طور کامل حل کرده‌ایم.

مشکل اینجاست که این نتیجه گیری نادرست است! $R\left(\frac{1}{2}\pi i\right)$ دو ویژه بردار دیگر غیر از $|1\rangle$ دارد. اما نباید حدس خود را سرزنش کنیم زیرا این بردارها در $V^n(C)$ هستند نه در $V^3(R)$. از این مثال روشن است که برای حل مسئله ویژه مقدراری به روشی اصولی و معتبر نیازمندیم. اکنون توجه خود را به این مورد مشکوک جلب می‌کنیم.

معادله مشخصه و جواب مسئله ویژه مقدراری

با بازنویسی معادله (۲-۸-۱) به‌صورت زیر شروع می‌کنیم

$$(\Omega - \omega I)|V\rangle = |0\rangle \quad (۳-۸-۱)$$

با اعمال $(\Omega - \omega I)^{-1}$ به هر دو طرف، با فرض وجود آن، داریم:

$$|V\rangle = (\Omega - \omega I)^{-1}|0\rangle \quad (۴-۸-۱)$$

حال هر عملگر متناهی (عملگری با عناصر ماتریسی محدود) که روی بردار بی‌اثر اثر کند فقط می‌تواند یک بردار بی‌اثر به‌دست دهد. لذا به نظر می‌رسد که در جستجو به دنبال یک ویژه بردار غیر صفر $|V\rangle$ ، تلاش می‌کنیم به چیزی برسیم که غیر از معادله (۴-۸-۱) نیست و این غیر ممکن است. نتیجه اینکه فرض ما مبنی بر اینکه عملگر $(\Omega - \omega I)^{-1}$ موجود است (به‌عنوان یک عملگر متناهی) غلط است. لذا این سوال مطرح می‌شود که در چه صورتی این وضعیت به‌دست خواهد آمد. نظریه ماتریس‌ها بیان می‌کند که معکوس هر ماتریس M از رابطه زیر به‌دست می‌آید

$$M^{-1} = \frac{\text{cofactor } M^T}{\det M} \quad (۵-۸-۱)$$

حال اگر M متناهی باشد همسازه M متناهی می‌شود. بنابراین آنچه نیاز داریم صفر شدن دترمینان است. لذا شرط وجود ویژه بردارهای غیر صفر عبارتست از:

$$\det(\Omega - \omega I) = 0 \quad (۶-۸-۱)$$

این معادله ویژه مقادیر ω را مشخص خواهد کرد. برای یافتن آنها، معادله (۳-۸-۱) را در یک پایه تصویر می‌کنیم. با ضرب نقطه‌ای هر دو طرف در یک پایه $|i\rangle$ ،

$$\langle i|\Omega - \omega I|V\rangle = 0$$

و وارد کردن نمایش عملگر همانی [معادله (۷-۶-۱)] به سمت چپ $|V\rangle$ به تصویر زیر از معادله (۳-۸-۱) می‌رسیم:

$$\sum_j (\Omega_{ij} - \omega \delta_{ij}) v_j = 0 \quad (۷-۸-۱)$$

با صفر قرار دادن دترمینان عبارتی به شکل زیر به دست می‌آید

$$\sum_{m=0}^n c_m \omega^m = 0 \quad (۸-۸-۱)$$

معادله (۸-۸-۱)، معادله مشخصه نامیده شده و

$$P^n(\omega) = \sum_{m=0}^n c_m \omega^m \quad (۹-۸-۱)$$

چند جمله‌ای مشخصه نامیده می‌شود. اگر چه چند جمله‌ای مذکور در یک پایه خاص مشخص می‌شود، ویژه مقادیر، که ریشه‌های آن هستند، مستقل از پایه‌اند زیرا ویژه مقادیر به وسیله معادله مجرد (۳-۸-۱) تعریف می‌شوند که هیچ اشاره‌ای به هیچ پایه‌ای ندارد.

حال، یک نتیجه اساسی در آنالیز این است که هر چند جمله‌ای درجه n ، n ریشه دارد که لزوماً متمایز نبوده و لزوماً حقیقی نیستند. لذا هر عملگر در $V^n(C)$ ، تعداد n ویژه مقدار دارد. با دانستن ویژه مقادیر، ویژه بردارها، حداقل برای عملگرهای هرمیتی و یکانی، می‌توانند از روش ارائه شده در مثال زیر به دست آیند [عملگرهای تعریف شده در $V^n(C)$ که از نوع بالا نباشند نمی‌توانند n ویژه بردار داشته باشند - تمرین ۱-۴-۸ را ببینید. قضایای ۱۰ و ۱۲ ثابت می‌کنند که عملگرهای هرمیتی و یکانی روی $V^n(C)$ ، n ویژه بردار خواهند داشت].

تمرین ۱-۴-۸: تکنیک‌های عمومی ارائه شده در فوق را به کار می‌بریم تا همه ویژه بردارها و ویژه مقادیر

$R\left(\frac{1}{2}\pi i\right)$ را به دست آوریم. یادآوری می‌کنیم که ماتریس نمایشگر آن عبارتست از

$$R\left(\frac{1}{2}\pi i\right) \leftrightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

لذا معادله مشخصه به صورت زیر است

$$\det(R - \omega I) = \begin{vmatrix} 1 - \omega & 0 & 0 \\ 0 & -\omega & -1 \\ 0 & 1 & -\omega \end{vmatrix} = 0$$

یعنی

$$(1 - \omega)(\omega^2 + 1) = 0 \quad (۱۰-۸-۱)$$

که ریشه‌های آن $\omega = 1, \pm i$ هستند. می‌دانیم که $\omega = 1$ متناظر با $|1\rangle$ است. اجازه دهید ببینیم که این مطلب از فرمالیزم مذکور به دست می‌آید. با قرار دادن $\omega = 1$ در معادله $(A-1)\psi = 0$ نتیجه می‌شود که مولفه‌های x_1, x_2, x_3 ویژه بردار متناظر باید از معادلات زیر پیروی کنند

$$\begin{bmatrix} 1-1 & 0 & 0 \\ 0 & 0-1 & -1 \\ 0 & 1 & 0-1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{cases} -x_2 - x_3 = 0 \\ x_2 - x_3 = 0 \end{cases} \rightarrow x_2 = x_3 = 0$$

بنابراین همان‌طور که انتظار می‌رفت هر بردار به شکل زیر قابل قبول است

$$x_1|1\rangle \leftrightarrow \begin{bmatrix} x_1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

به‌طور قراردادی از آزادی در مقیاس برای بهنجار کردن ویژه بردارها استفاده می‌کنیم. پس در این حالت، یک انتخاب به‌صورت زیر است

$$|\omega = 1\rangle = |1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

گفتیم یک انتخاب، و نه انتخاب، چون بردار مذکور می‌تواند در عددی با مدول واحد ضرب شود بدون اینکه نرم آن تغییر کند. هیچ قرار داد کلی پذیرفته شده‌ای برای حذف این آزادی وجود ندارد به جز آنکه در صورت امکان بردار را با مولفه‌های حقیقی انتخاب کنیم.

به سه معادله بالا توجه کنید، اولی یک معادله حقیقی نیست. در حالت کلی فقط $(n-1)$ معادله مستقل خطی وجود خواهد داشت. این دلیل ثابت نبودن نرم بردار است و همان‌طور که در ضمیمه $A-1$ نشان داده می‌شود دلیل صفر شدن دترمینان است.

حال معادلات متناظر با $\omega = i$ را در نظر بگیرید. مولفه‌های ویژه بردار مربوطه تابع معادلات زیرند

$$(1-i)x_1 = 0 \quad (\text{i.e., } x_1 = 0)$$

$$-ix_2 - x_3 = 0 \quad (\text{i.e., } x_2 = ix_3)$$

$$x_2 - ix_3 = 0 \quad (\text{i.e., } x_2 = ix_3)$$

یکبار دیگر توجه کنید که ما فقط $(n-1)$ معادله مفید داریم. یک جواب به درستی بهنجار شده عبارتست از

$$|\omega = i\rangle \leftrightarrow \frac{1}{2^{1/2}} \begin{bmatrix} 0 \\ i \\ 1 \end{bmatrix}$$

روشی مشابه، ویژه بردار سوم را به دست می‌دهد:

$$|\omega = -i\rangle \leftrightarrow \frac{1}{2^{1/2}} \begin{bmatrix} 0 \\ -i \\ 1 \end{bmatrix}$$

در مثال بالا یک قرارداد معروف به کار برده‌ایم و آن بر چسب زدن و نامگذاری ویژه بردارها به وسیله ویژه مقدار است. برای نمونه کت متناظر با $\omega = \omega_i$ به صورت $|\omega = \omega_i\rangle$ یا فقط $|\omega_i\rangle$ نوشته می‌شود. این نمادگذاری فرض می‌کند که برای هر ω_i فقط یک بردار نامگذاری شده با آن وجود دارد. اگر چه همیشه اینگونه نیست، فقط یک تغییر جزئی در این نمادگذاری لازم خواهد بود تا حالت عمومی را پوشش دهد.

پدیده‌های دارای یک ویژه مقدار نمایشگر بیش از یک ویژه بردار تبهگن نامیده می‌شوند و متناظر با ریشه‌های تکرار شده برای چند جمله‌ای مشخصه هستند. در مواجهه با تبهگنی نه تنها نیاز به تصحیح برچسب‌زنی داریم بلکه به روش به کار رفته در مثال بالا برای یافتن ویژه بردارها هم نیاز داریم. تصور کنید که بجای $R\left(\frac{1}{2}\pi i\right)$ به عملگر دیگر Ω روی $V^3(R)$ با ریشه‌های $\omega_1, \omega_2, \omega_3$ پردازیم. این مسئله شبیه حالتی به نظر می‌رسد که می‌توانیم دو ویژه بردار، یکی برای هر ω متمایز، به روش مذکور در فوق به دست آوریم. ویژه بردار سوم را چگونه به دست می‌آوریم؟ یا اینکه آیا ویژه بردار سوم وجود دارد؟ این سوالات به زودی زمانی که وضعیت تبهگنی را به طور مفصل بررسی می‌کنیم به طور عام پاسخ داده خواهند شد. حال توجه خود را به دو قضیه محوری در مورد عملگرهای هرمیتی جلب می‌کنیم که نقشی حیاتی در مکانیک کوانتومی ایفا می‌کنند.

قضیه ۹: ویژه مقادیر یک عملگر هرمیتی حقیقی‌اند.

اثبات: فرض کنید

$$\Omega|\omega\rangle = \omega|\omega\rangle$$

هر دو طرف را در $\langle\omega|$ ضرب نقطه‌ای کنید:

$$\langle\omega|\Omega|\omega\rangle = \omega\langle\omega|\omega\rangle \tag{۱۱-۸-۱}$$

از رابطه فوق الحاقی می‌گیریم،

$$\langle\omega|\Omega^\dagger|\omega\rangle = \omega^*\langle\omega|\omega\rangle$$

از آنجا که $\Omega = \Omega^\dagger$ است به نتیجه زیر می‌رسیم

$$\langle\omega|\Omega|\omega\rangle = \omega^*\langle\omega|\omega\rangle$$

با تفریق این از معادله (۱۱-۸-۱)، قضیه اثبات می‌شود:

$$0 = (\omega - \omega^*)\langle\omega|\omega\rangle$$

$$\omega = \omega^* \quad \text{Q.E.D.}$$

قضیه ۱۰: برای هر عملگر هرمیتی Ω (حداقل) یک پایه شامل ویژه بردارهای راست هنجار آن وجود دارد. عملگر مذکور در این ویژه پایه قطری بوده و ویژه مقادیرش روی قطر اصلی قرار می‌گیرند.

اثبات: با معادله مشخصه شروع می‌کنیم. این معادله حداقل باید یک ریشه داشته باشد که آن را ω_1 می‌نامیم. متناظر با ω_1 باید حداقل یک ویژه بردار غیر صفر $|\omega_1\rangle$ موجود باشد [اگر نباشد، قضیه ۱-A-1 بیان می‌کند که $\Omega - \omega_1 I$ معکوس‌پذیر است] زیر فضای $V_{\perp 1}^{n-1}$ را، شامل همه بردارهای عمود بر $|\omega_1\rangle$ ، در نظر بگیرید. اجازه دهید بردار $|\omega_1\rangle$ (به‌نجار شده به یک) و همه $n-1$ بردار راست هنجار $\{V_{\perp 1}^1, V_{\perp 1}^2, \dots, V_{\perp 1}^{n-1}\}$ در $V_{\perp 1}^{n-1}$ را به‌عنوان پایه انتخاب کنیم. در این پایه، Ω شکل زیر را دارد:

$$\Omega \leftrightarrow \begin{bmatrix} \omega_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \boxed{} & & & & & \\ 0 & & \boxed{} & & & & \\ \vdots & & & \boxed{} & & & \\ 0 & & & & \boxed{} & & \end{bmatrix} \quad (12-8-1)$$

ستون اول درست تصویر $|\omega_1\rangle$ بعد از اثر Ω روی آن است. با معلوم شدن ستون اول، سطر اول از هرمیتی بودن Ω به‌دست می‌آید.

اکنون معادله مشخصه به شکل زیر در می‌آید

$$(\omega_1 - \omega) \cdot (\text{دترمینان زیر ماتریس درون مربع}) = 0$$

$$(\omega_1 - \omega) \sum_0^{n-1} c_m \omega^m = (\omega_1 - \omega) P^{n-1}(\omega) = 0$$

حال چند جمله‌ای P^{n-1} هم باید یک ریشه، ω_2 ، و یک ویژه بردار به‌نجار شده، $|\omega_2\rangle$ ، به‌دست دهد. زیر فضای $V_{\perp 1,2}^{n-2}$ از بردارهای واقع در $V_{\perp 1}^{n-1}$ و عمود بر $|\omega_2\rangle$ (و به‌طور خودکار عمود بر $|\omega_1\rangle$) را تعریف کرده و رویه فوق را تکرار می‌کنیم. سرانجام، ماتریس Ω در پایه $|\omega_1\rangle, |\omega_2\rangle, \dots, |\omega_n\rangle$ به‌صورت زیر می‌شود

$$\Omega \leftrightarrow \begin{bmatrix} \omega_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \omega_2 & 0 & & 0 \\ 0 & 0 & \omega_3 & & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & & \omega_n \end{bmatrix}$$

چون هر $|\omega_i\rangle$ از یک فضا انتخاب شده بود که عمود بر قبلی‌ها، $|\omega_{i-1}\rangle, \dots, |\omega_2\rangle, |\omega_1\rangle$ ، بود، پایه شامل ویژه بردارها راست هنجار است (توجه کنید که به هیچ وجه مجبور نیستیم فرض کنیم که ویژه مقادیر همگی متمایز هستند).

[مانستگی بین اعداد حقیقی و عملگرهای هرمیتی با این حقیقت بیشتر تقویت می شود که در پایه معین (از ویژه بردارها) عملگر هرمیتی می تواند با یک ماتریس نشان داده شود که همه عناصر آن حقیقی هستند].
در شروع قضیه ۱۰ نشان داده شد که ممکن است بیش از یک پایه از ویژه بردارها موجود باشند که Ω را قطری کنند. این در صورتی اتفاق می افتد که تبهگنی وجود داشته باشد. فرض کنید $\omega_1 = \omega_2 = \omega$ باشد. در این صورت دو بردار راست هنجار داریم که

$$\Omega|\omega_1\rangle = \omega|\omega_1\rangle$$

$$\Omega|\omega_2\rangle = \omega|\omega_2\rangle$$

است. نتیجه اینکه برای هر β, α ،

$$\Omega[\alpha|\omega_1\rangle + \beta|\omega_2\rangle] = \alpha\omega|\omega_1\rangle + \beta\omega|\omega_2\rangle = \omega[\alpha|\omega_1\rangle + \beta|\omega_2\rangle]$$

از آنجا که بردارهای $|\omega_1\rangle$ و $|\omega_2\rangle$ متعامد هستند (و در نتیجه مستقل خطی) نتیجه می گیریم که یک زیر فضای دو بعدی متشکل از $|\omega_1\rangle$ و $|\omega_2\rangle$ داریم که عناصر آن ویژه بردارهای Ω با ویژه مقدار ω هستند. به این فضا، ویژه فضای Ω با ویژه مقدار ω اطلاق می شود. علاوه بر بردارهای $|\omega_1\rangle$ و $|\omega_2\rangle$ ، تعداد متناهی از جفت های راست هنجار $|\omega'_1\rangle$ و $|\omega'_2\rangle$ وجود دارد که از طریق چرخش صلب $|\omega_1\rangle$ و $|\omega_2\rangle$ به دست آمده اند و می توانیم در تشکیل ویژه پایه Ω هر جفت از آنها را انتخاب کنیم. به طور کلی اگر ویژه مقداری m_i بار اتفاق بیفتد، یعنی اگر معادله مشخصه دارای m_i ریشه مساوی با ω_i باشد، یک ویژه فضای $V_{\omega_i}^{m_i}$ وجود خواهد داشت که می توانیم از آن هر m_i بردار راست هنجار را برای تشکیل پایه اشاره شده در قضیه ۱۰ انتخاب کنیم.

در غیاب تبهگنی، می توانیم قضایای ۹ و ۱۰ را به راحتی اثبات کنیم. با دو ویژه بردار شروع می کنیم:

$$(۱-۱۳-الف)$$

$$\Omega|\omega_i\rangle = \omega_i|\omega_i\rangle$$

$$(۱-۱۳-ب)$$

$$\Omega|\omega_j\rangle = \omega_j|\omega_j\rangle$$

با ضرب نقطه ای اولی در $|\omega_j\rangle$ و دومی در $|\omega_i\rangle$ داریم:

$$(۱-۱۴-الف)$$

$$\langle\omega_j|\Omega|\omega_i\rangle = \omega_i\langle\omega_j|\omega_i\rangle$$

$$(۱-۱۴-ب)$$

$$\langle\omega_i|\Omega|\omega_j\rangle = \omega_j\langle\omega_i|\omega_j\rangle$$

با گرفتن الحاقی از معادله دوم و استفاده از ماهیت هرمیتی Ω ،

$$\langle\omega_j|\Omega|\omega_i\rangle = \omega_j^*\langle\omega_j|\omega_i\rangle$$

با تفریق این معادله از معادله (۱-۱۴-الف) به رابطه زیر می رسیم

$$0 = (\omega_i - \omega_j^*) \langle \omega_j | \omega_i \rangle \quad (15-8-1)$$

اگر $i = j$ باشد، چون $\langle \omega_i | \omega_i \rangle \neq 0$ است،

$$\omega_i = \omega_i^* \quad (16-8-1)$$

اگر $i \neq j$ باشد،

$$\langle \omega_i | \omega_j \rangle = 0 \quad (17-8-1)$$

چون طبق فرض $\omega_i - \omega_j^* = \omega_i - \omega_j \neq 0$ است. اینکه اثبات متعامد بودن برای $\omega_i = \omega_j$ با شکست مواجه می‌شود تعجب‌آور نیست، زیرا دو بردار برچسب زده شده به وسیله ویژه مقدار تبهگن می‌توانستند هر دو عضو از فضای تبهگن باشند که لازم نیست لزوماً متعامد باشند. تصحیح این اثبات در حالت تبهگن مستلزم بحث‌هایی است که در اثبات قضیه ۱۰ به کار رفتند. مزیت قضیه ۱۰ این بود که در حالت تبهگن هیچ تصحیحی متحمل نمی‌شود.

تبهگنی

همان‌طور که قبلاً وعده دادیم به حالت تبهگن می‌پردازیم. تحلیل عمومی ما در قضیه ۱۰ نشان داد که در مواجهه با تبهگنی، نه یکی، بلکه بی‌نهایت ویژه پایه راست هنجار داریم. به وسیله یک مثال می‌بینیم که چطور وقتی به دنبال ویژه بردارها هستیم این تعدد خودش را نشان می‌دهد و چطور باید بحث شود.

مثال ۱-۸-۵: عملگر Ω را با عناصر ماتریسی زیر در یک پایه در نظر بگیرید

$$\Omega \leftrightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

معادله مشخصه به صورت زیر است

$$(\omega - 2)^2 \omega = 0$$

یعنی،

$$\omega = 0, 2, 2$$

بردار متناظر با $\omega = 0$ با روش معمولی به دست می‌آید:

$$|\omega = 0\rangle \leftrightarrow \frac{1}{2^{1/2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}$$

حالت $\omega = 2$ به معادلات زیر برای مولفه‌های ویژه بردار منجر می‌شود:

$$-x_1 + x_3 = 0$$

$$0 = 0$$

$$x_1 - x_3 = 0$$

اکنون فقط یک معادله، به جای دو ($n-1$) معادله، داریم! این بازتاب تبهگنی است. برای هر ظهور اضافی یک ریشه (علاوه بر اولی) یک معادله کم می‌شود. لذا تبهگنی، اجازه درجات آزادی اضافی را در کنار آزادی در بهنجارش به ما می‌دهد. شروط

$$x_1 = x_3$$

دلخواه x_2

مجموعه‌ای از بردارها را تعریف می‌کند که بر بردار اول، ($|\omega=0\rangle$) عمودند، یعنی در صفحه عمود بر ($|\omega=0\rangle$) قرار می‌گیرند. این در توافق با انتظار ماست که یک تبهگنی دو گانه باید منجر به ویژه فضای دو بعدی شود. آزادی در x_2 (یا دقیق‌تر، در نسبت x_2/x_3) متناظر با آزادی جهت‌گیری در این صفحه است. فرض کنید به‌طور دلخواه $x_2 = 1$ انتخاب کنیم تا یک ویژه بردار بهنجار شده متناظر با $\omega = 2$ به‌دست آوریم:

$$|\omega = 2\rangle \leftrightarrow \frac{1}{3^{1/2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

بردار سوم طوری انتخاب می‌شود که در این صفحه قرار گیرد و بر دومی عمود باشد (بودن در این صفحه به‌طور خودکار موجب می‌شود تا عمود بر اولی، ($|\omega=0\rangle$) باشد):

$$|\omega = 2, \text{ second one}\rangle \leftrightarrow \frac{1}{6^{1/2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

واضح است که هر انتخاب متمایز نسبت x_2/x_3 ، دو ویژه بردار راست هنجار متمایز با ویژه مقدار ۲ به‌دست می‌دهد.

توجه کنید که در مواجهه با تبهگنی، ($|\omega_i\rangle$) دیگر به یک کت منفرد اطلاق نمی‌شود بلکه به عنصری نوعی از ویژه فضای $V_{\omega_i}^{m_i}$ اطلاق می‌شود. برای اشاره به عنصری خاص، باید از نماد ($|\omega_i, \alpha\rangle$) استفاده کنیم که α کت را در داخل ویژه فضا برچسب می‌زند. انتخابی طبیعی برای α به زودی بحث خواهد شد. اکنون مانسته قضایای ۹ و ۱۰ را برای عملگرهای یکانی در نظر می‌گیریم.

قضیه ۱۱: ویژه مقادیر یک عملگر یکانی، اعداد مختلط با مدول واحد هستند.

قضیه ۱۲: ویژه بردارهای یک عملگر یکانی، دو به دو متعامد هستند (فرض می‌کنیم هیچ تبهگنی وجود ندارد).

اثبات هر دو قضیه (با فرض عدم وجود تبهگنی): فرض کنید

$$U|u_i\rangle = u_i|u_i\rangle \quad (۱۸-۸-۱ \text{ الف})$$

$$U|u_j\rangle = u_j|u_j\rangle \quad (۱۸-۸-۱ \text{ ب})$$

اگر الحاقی معادله دوم را گرفته و هر دو طرف را در طرف متناظر معادله اول ضرب نقطه‌ای کنیم،

$$\langle u_j|U^\dagger U|u_i\rangle = u_i u_j^* \langle u_j|u_i\rangle$$

به طوری که

$$(1 - u_i u_j^*) \langle u_j|u_i\rangle = 0 \quad (۱۹-۸-۱)$$

اگر $i = j$ باشد، چون $\langle u_i|u_i\rangle \neq 0$ است، داریم

$$u_i u_i^* = 1 \quad (۲۰-۸-۱ \text{ الف})$$

در حالی که اگر $i \neq j$ باشد،

$$\langle u_i|u_j\rangle = 0 \quad (۲۰-۸-۱ \text{ ب})$$

چون

$$|u_i\rangle \neq |u_j\rangle \Rightarrow u_i \neq u_j \Rightarrow u_i u_j^* \neq u_i u_i^* \Rightarrow u_i u_j^* \neq 1$$

اگر U تبهگن باشد، می‌توانیم تحلیلی موازی با تحلیل به کار رفته برای عملگر هرمیتی Ω به کار ببریم، اما با یک تفاوت. در حالی که در معادله (۱۲-۸-۱) صفرهای سطر اول از صفرهای ستون اول و $\Omega^+ = \Omega$ به دست می‌آیند، در اینجا آنها از این شرط به دست می‌آیند که مجموع مربع مدول عناصر در هر سطر برابر ۱ می‌شود. چون $|u_i| = 1$ است، همه عناصر دیگر در سطر اول باید صفر شوند.

قطری کردن ماتریس‌های هرمیتی

عملگر هرمیتی Ω را روی $V^n(C)$ در نظر بگیرید که به صورت یک ماتریس در پایه راست هنجار $|1\rangle$ و ... و $|i\rangle$ و ... و $|n\rangle$ نمایش داده شده است. اگر این پایه را با ویژه پایه $|1\rangle$ و ... و $|\omega_i\rangle$ و ... و $|\omega_n\rangle$ عوض کنیم، ماتریس نمایشگر Ω قطری خواهد شد. واضح است که عملگر U تغییر دهنده پایه،

$$|\omega_i\rangle = U|i\rangle \quad (۲۱-۸-۱)$$

یکانی است، زیرا یک پایه راست هنجار را به پایه راست هنجار دیگر ((می‌چرخاند)). (اگر بخواهید می‌توانید از نکته مذکور در گذشته برای U استفاده کرده و ماهیت یکانی بودن آن را ثابت کنید: ستون‌های آن شامل مولفه‌های ویژه بردارهای $|\omega_i\rangle$ هستند که راست هنجارند). این نتیجه اغلب به صورت زیر خلاصه می‌شود:

هر ماتریس هرمیتی روی $V^n(C)$ می‌تواند به وسیله تغییر یکانی پایه، قطری شود.

این نتیجه را می‌توانیم به زبان تبدیلات پسیو به صورت زیر بیان کنیم:
 اگر Ω یک عملگر هرمیتی باشد، یک ماتریس یکانی U وجود دارد (ساخته شده از روی ویژه بردارهای Ω) به طوری که $U^\dagger \Omega U$ قطری است.

بنابراین مسئله یافتن پایه‌ای که Ω را قطری می‌کند با حل مسئله ویژه مقادیری آن هم ارز است.
تمرین ۱-۸-۱: الف - ویژه مقادیر ماتریس زیر را به دست آورده، ویژه بردارهای آن را بهنجار کنید.

$$\Omega = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 4 \end{bmatrix}$$

(ب) - آیا ماتریس فوق هرمیتی است؟ آیا ویژه بردارها متعامد هستند؟

تمرین ۱-۸-۲: ماتریس زیر را در نظر بگیرید

$$\Omega = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

الف - آیا ماتریس هرمیتی است؟

ب - ویژه مقادیر و ویژه بردارهایش را به دست آورید.

ج - ثابت کنید که $U^\dagger \Omega U$ قطری است، که U ماتریس ویژه بردارهای Ω است.

تمرین ۱-۸-۳: ماتریس هرمیتی زیر را در نظر بگیرید

$$\Omega = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & -1 \\ 0 & -1 & 3 \end{bmatrix}$$

الف - نشان دهید که $\omega_1 = \omega_2 = 1$ ؛ $\omega_3 = 2$.

ب - نشان دهید که $|\omega = 2\rangle$ می‌تواند هر برداری به شکل زیر باشد

$$\frac{1}{(2a^2)^{1/2}} \begin{bmatrix} 0 \\ a \\ -a \end{bmatrix}$$

ج - نشان دهید که ویژه فضای $\omega = 1$ شامل همه بردارهای به شکل زیر است

$$\frac{1}{(b^2 + 2c^2)^{1/2}} \begin{bmatrix} b \\ c \\ c \end{bmatrix}$$

یا از طریق قرار دادن $\omega = 0$ در معادلات، یا با درخواست اینکه ویژه فضای $\omega = 1$ عمود بر $|\omega = 2\rangle$ است.

تمرین ۱-۸-۴: یک ماتریس $n \times n$ دلخواه لزوماً n ویژه بردار ندارد. به عنوان مثال ماتریس زیر را در نظر بگیرید

$$\Omega = \begin{bmatrix} 4 & 1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}$$

الف - نشان دهید که $\omega_1 = \omega_2 = 3$ است.

ب- با قرار دادن این مقدار نشان دهید که فقط یک ویژه بردار به شکل زیر وجود دارد

$$\frac{1}{(2a^2)^{1/2}} \begin{bmatrix} +a \\ -a \end{bmatrix}$$

نمی توانیم ویژه بردار دیگری پیدا کنیم که مستقل خطی باشد.

تمرین ۱-۸-۵: ماتریس زیر را در نظر بگیرید

$$\Omega = \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}$$

الف - نشان دهید که یکانی است.

ب- نشان دهید که ویژه مقادیر آن $e^{i\theta}$ و $e^{-i\theta}$ هستند.

ج- ویژه بردارهای متناظر را بیابید و نشان دهید که متعامد هستند.

د- ثابت کنید که (ماتریس قطری) $U^+ \Omega U = \Omega$ ، که U ماتریس ویژه بردارهای Ω است.

تمرین ۱-۸-۶: الف - دیدیم که دترمینال یک ماتریس تحت تبدیل یکانی پایه تغییر نمی کند. حال ثابت کنید که برای یک Ω هرمیتی یا یکانی،

$$\det \Omega = \Omega \quad \text{حاصل ضرب ویژه مقادیر} = \prod_{i=1}^n \omega_i$$

ب- با استفاده از ناوردایی رد عملگر تحت همین تبدیل نشان دهید که

$$\text{Tr } \Omega = \sum_{i=1}^n \omega_i$$

تمرین ۱-۸-۷: با استفاده از نتایج مربوط به دترمینان و رد ماتریس در مسئله قبل، نشان دهید که ویژه مقادیر ماتریس زیر، ۳ و ۱- هستند:

$$\Omega = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}$$

این مطلب را با محاسبه مستقیم ثابت کنید. توجه کنید که ماهیت هرمیتی ماتریس یک عامل اصلی است.

تمرین ۱-۸-۸: ماتریس های هرمیتی M^1, M^2, M^3 و M^4 را در نظر بگیرید که تابع رابطه زیرند

$$M^i M^j + M^j M^i = 2\delta^{ij} I, \quad i, j = 1, \dots, 4$$

الف - نشان دهید که ویژه مقادیر M^i ها، ± 1 هستند (راهنمایی: به ویژه پایه M^i رفته و معادله را برای $i = j$ به کار ببرید).

ب- با در نظر گرفتن رابطه

$$M^i M^j = -M^j M^i \text{ و } i \neq j$$

نشان دهید که M^i ها بدون رد (یا دارای رد صفر) هستند.

$$(Tr(ACB) = Tr(CBA)) \text{ (راهنمایی)}$$

ج- نشان دهید که این ماتریس ها نمی توانند ماتریس های یا بعد فرد باشند.

تمرین ۱-۸-۹: مجموعه ای از جرم های m_α ، واقع در \mathbf{r}_α و در حال چرخش با سرعت زاویه ای ω حول یک محور مشترک، تکانه زاویه ای زیر را دارد

$$\mathbf{I} = \sum_{\alpha} m_{\alpha} (\mathbf{r}_{\alpha} \times \mathbf{v}_{\alpha})$$

که $\mathbf{v}_{\alpha} = \omega \times \mathbf{r}_{\alpha}$ سرعت جرم m_{α} است. با استفاده از اتحاد زیر

$$\mathbf{A} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = \mathbf{B}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}) - \mathbf{C}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})$$

نشان دهید که هر مولفه دکارتی I_i از l از رابطه زیر به دست می آید

$$I_i = \sum_j M_{ij} \omega_j$$

که

$$M_{ij} = \sum_{\alpha} m_{\alpha} [r_{\alpha}^2 \delta_{ij} - (\mathbf{r}_{\alpha})_i (\mathbf{r}_{\alpha})_j]$$

یا در نمادگذاری دیراک،

$$|I\rangle = M|\omega\rangle$$

الف - آیا تکانه زاویه ای و سرعت زاویه ای همیشه موازی خواهند بود؟

ب- نشان دهید که ماتریس گشتاور لختی M_{ij} هرمیتی است.

ج- ثابت کنید که سه جهت برای ω وجود دارد به طوری که L و ω موازی باشند. این جهت ها چگونه مشخص می شوند؟

د- ماتریس گشتاور لختی یک کره را در نظر بگیرید. به خاطر تقارن کامل کره، واضح است که هر جهتی، ویژه جهت آن برای چرخش است. با توجه به این، در مورد سه ویژه مقدار ماتریس M چه می توان گفت؟

قطری سازی همزمان دو عملگر هرمیتی

اکنون قطری سازی همزمان دو عملگر هرمیتی را بررسی می کنیم.

قضیه ۱۳: اگر Ω و Λ دو عملگر هرمیتی جابه جا شونده باشند (حداقل) یک پایه از ویژه بردارهای مشترک وجود دارد که هر دو آنها را قطری می کند.

$$\Omega \Lambda | \omega_i, \alpha \rangle = \Lambda \Omega | \omega_i, \alpha \rangle = \omega_i \Lambda | \omega_i, \alpha \rangle$$

اما به خاطر تبهگنی Ω فقط می‌توانیم نتیجه بگیریم که $\Lambda | \omega_i, \alpha \rangle$ در داخل $V_i^{m_i}$ قرار می‌گیرد. حال اگر $| \omega_j, \beta \rangle$ و $| \omega_i, \alpha \rangle$ بردارهای پایه باشند و $\omega_j \neq \omega_i$ باشد، چون بردارهای مربوط به ویژه فضاهاى مختلف، متعامد هستند [معادله (۱-۸-۱۵) داریم:

$$\langle \omega_j, \beta | \Lambda | \omega_i, \alpha \rangle = 0$$

در نتیجه در این پایه،

$$\Lambda \leftrightarrow \begin{bmatrix} \boxed{\Lambda_1} & & & 0 \\ & \boxed{\Lambda_2} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \boxed{\Lambda_k} \end{bmatrix}$$

که ماتریس قطری بلوکی نامیده می‌شود و کاملاً روشن است. شکل قطری بلوکی Λ این حقیقت را منعکس می‌کند که وقتی Λ روی عنصر $| \omega_i, \alpha \rangle$ از ویژه فضای $V_i^{m_i}$ اثر می‌کند آنرا به عنصر دیگری از $V_i^{m_i}$ می‌برد. درون هر زیر فضای i ، Λ به وسیله یک ماتریس Λ_i مشخص می‌شود که به صورت یک بلوک در معادله بالا ظاهر می‌شود. ماتریس Λ_i را در $V_i^{m_i}$ در نظر بگیرید. چون Λ هرمیتی است این ماتریس هم هرمیتی است. ماتریس مذکور می‌تواند به وسیله تعویض پایه $| \omega_i, 1 \rangle, | \omega_i, 2 \rangle, \dots$ و $| \omega_i, m_i \rangle$ در $V_i^{m_i}$ برای ویژه پایه Λ_i ، که با آن شروع کردیم، به راحتی قطری شود. این تغییر پایه‌ای را در هر ویژه فضایی انجام می‌دهیم و از این طریق Λ را به شکل قطری در می‌آوریم. در این ضمن، Ω به چه شکلی در می‌آید؟ البته Ω قطری باقی می‌ماند، چون به انتخاب پایه‌های راست هنجار در هر ویژه فضای تبهگن بی‌تفاوت است. اگر ویژه مقادیر Λ_i ، $\lambda_i^{(1)}$ و $\lambda_i^{(2)}$ و ... و $\lambda_i^{(m_i)}$ باشند به نتیجه مطلوب زیر می‌رسیم

$$\Lambda \leftrightarrow \begin{bmatrix} \lambda_1^{(1)} & & & & \\ & \lambda_1^{(2)} & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \lambda_1^{(m_1)} & \\ & & & & \lambda_2^{(1)} & \\ & & & & & \ddots \\ & & & & & & \lambda_k^{(m_k)} \end{bmatrix}$$

$$\Omega \leftrightarrow \begin{bmatrix} \omega_1 & & & & \\ & \omega_1 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \omega_1 & \\ & & & & \omega_2 & \\ & & & & & \ddots \\ & & & & & & \omega_m \end{bmatrix}$$

و قضیه اثبات می‌شود.

اگر Λ در هیچ زیر فضای تبهگن نباشد، $\lambda_i^{(k)} \neq \lambda_i^{(l)}$ برای هر k و l و i پایه‌ای که به آن رسیدیم منحصر به فرد خواهد بود: آزادی عملی که Ω در هر ویژه فضا به ما می‌داد به وسیله Λ کاملاً از بین می‌رود. عناصر این پایه می‌توانند به صورت منحصر به فردی توسط زوج شاخص‌های ω و λ به شکل $|\omega, \lambda\rangle$ نامگذاری شوند، که λ نقش برجسته اضافی α را ایفا می‌کند. اگر Λ در یک ویژه فضای Ω تبهگن باشد، مثلاً $\lambda_1^{(1)} = \lambda_1^{(2)}$ باشد، یک ویژه فضای دو بعدی وجود دارد که می‌توانیم هر دو بردار راست هنجار را از آن، برای پایه مشترک انتخاب کنیم. در این صورت لازم است تا عملگر سومی پیدا کنیم، Γ ، که با هر دوی Ω و Λ جابه‌جا شود و در این زیر فضا غیر تبهگن باشد. به‌طور کلی برای n متناهی همیشه می‌توان مجموعه‌ای از عملگرهای $\{\Omega, \Lambda, \Gamma, \dots\}$ یافت که با یکدیگر جابه‌جا شوند و ویژه پایه‌ای مشترک و منحصر به فرد فراهم کنند که عناصر آن می‌توانند به شکلی واضح به صورت $|\omega, \lambda, \gamma, \dots\rangle$ مشخص شوند. در مطالعه مکانیک کوانتومی فرض می‌شود که چنین مجموعه کاملی از عملگرهای جابه‌جا شونده، حتی اگر n نامتناهی باشد، وجود دارد.

تمرین ۱-۸-۱۰: با در نظر گرفتن عملگر جابه‌جاگر، نشان دهید که ماتریس‌های هرمیتی زیر می‌توانند همزمان قطری شوند. ویژه بردارهای مشترک برای هر دو را به دست آورده و ثابت کنید که تحت یک انتقال یکانی به این پایه هر دو ماتریس قطری می‌شوند

$$\Omega = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \Lambda = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 \\ 1 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

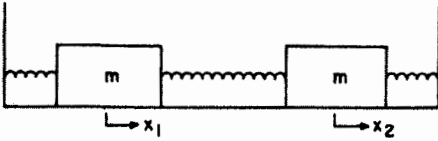
چون Ω تبهگن بوده و Λ غیر تبهگن است، در تصمیم‌گیری در اینکه کدام ماتریس انتخاب پایه را تحمیل می‌کند باید با تدبیر عمل کنید.

مثال ۱-۸-۶: اکنون با جزئیات جواب کامل یک مسئله را در مکانیک بحث می‌کنیم. مهم است که این مثال را به‌طور کامل درک کنید چون نه تنها کاربرد تکنیک‌های ریاضی ارائه شده در این فصل را نشان می‌دهد بلکه خصوصیات عمده مسئله محور Ω در مکانیک کوانتومی را هم در بر دارد.

دستگاه مکانیکی مورد بحث در شکل ۱-۵ نشان داده شده است. دو جرم m به یکدیگر و به دیواره‌ها از طریق فنرهایی با ثابت نیروی k جفت شده‌اند. اگر x_1 و x_2 جابه‌جایی‌های جرم‌ها از نقاط تعادلشان باشند، از معادلات زیر تبعیت می‌کنند که از طریق کاربرد مقدماتی قوانین نیوتن به دست می‌آیند:

$$\ddot{x}_1 = -\frac{2k}{m}x_1 + \frac{k}{m}x_2 \quad (۱-۸-۲۴-الف)$$

$$\ddot{x}_2 = \frac{k}{m}x_1 - \frac{2k}{m}x_2 \quad (۱-۸-۲۴-ب)$$



شکل ۱-۵: مسئله جرم‌های جفت شده، هر دو جرم، m بوده و همه فنرها دارای ثابت k هستند جابه‌جایی‌های جرم‌ها از تعادل x_1 و x_2 است.

مسئله، یافتن $x_1(t)$ و $x_2(t)$ با مقادیر داده‌های اولیه معلوم است که در این مورد شامل سرعت‌ها و مکانهای اولیه‌اند. ما خود را به حالت سرعت‌های اولیه صفر محدود می‌کنیم و مسئله، یافتن $x_1(t)$ و $x_2(t)$ با معلوم بودن $x_1(0)$ و $x_2(0)$ خواهد بود.

در ادامه، مسئله را به زبان فضا‌های برداری خطی فرمولبندی کرده و آنرا با استفاده از مطالب ارائه شده در این فصل حل می‌کنیم. به‌عنوان گام اول، معادله (۱-۸-۲۴) را به شکل ماتریسی می‌نویسیم:

$$\begin{bmatrix} \ddot{x}_1 \\ \ddot{x}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Omega_{11} & \Omega_{12} \\ \Omega_{21} & \Omega_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad (1-8-25 \text{ الف})$$

که عناصر این ماتریس هرمیتی، Ω_{ij} ها، عبارتند از

$$\Omega_{11} = \Omega_{22} = -2k/m, \quad \Omega_{12} = \Omega_{21} = k/m \quad (1-8-25 \text{ ب})$$

حال x_1 و $\Omega_{12} = \Omega_{21} = k/m$ را به‌عنوان مولفه‌های یک بردار مجرد $|x\rangle$ و Ω_{ij} ها را به‌عنوان عناصر ماتریسی عملگر هرمیتی Ω در نظر می‌گیریم. چون بردار $|x\rangle$ دو مولفه حقیقی دارد، عنصری از $V^2(R)$ بوده و Ω عملگری هرمیتی روی $V^3(R)$ است. شکل مجرد معادله (۱-۸-۲۵ الف) به‌صورت زیر است

$$|\ddot{x}(t)\rangle = \Omega |x(t)\rangle \quad (1-8-26)$$

معادله (۱-۸-۲۵ الف) با تصویر کردن معادله (۱-۸-۲۶) روی بردارهای پایه $|1\rangle$ و $|2\rangle$ ، که دارای اهمیت فیزیکی زیرند، به‌دست می‌آید:

$$|1\rangle \leftrightarrow \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \leftrightarrow \begin{bmatrix} \text{first mass displaced by unity} \\ \text{second mass undisplaced} \end{bmatrix} \quad (1-8-27 \text{ الف})$$

$$|2\rangle \leftrightarrow \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \leftrightarrow \begin{bmatrix} \text{first mass undisplaced} \\ \text{second mass displaced by unity} \end{bmatrix} \quad (1-8-27 \text{ ب})$$

یک حالت دلخواه که در آن جرم‌ها به اندازه x_1 و $|\omega_{II}^2\rangle$ جابه‌جا شده باشند، در این پایه به‌صورت زیر مشخص می‌شود

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} x_1 + \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} x_2 \quad (1-8-28)$$

شکل مجرد معادله فوق به‌صورت زیر است

$$(۲۹-۸-۱)$$

$$|x\rangle = |1\rangle x_1 + |2\rangle x_2$$

در این پایه $|1\rangle$ و $|2\rangle$ است که Ω به شکل ماتریس ظاهر شده در معادله (۲۵-۸-۱)، با عناصر $-2k/m$ و k/m ، نمایش داده می‌شود.

پایه $|1\rangle$ و $|2\rangle$ از نظر فیزیکی بسیار مطلوب است، زیرا مولفه‌های $|x\rangle$ در این پایه (x_2, x_1) تعبیر ساده جابه‌جایی‌های جرم‌ها را دارند اما از حیث یافتن جواب ریاضی برای مسئله مقدار - اولیه چندان مطلوب نیست، چون مولفه‌های x_2, x_1 تابع معادلات دیفرانسیل جفت شده (۲۴-۸-۱-الف) و (۲۴-۸-۱-ب) هستند. جفت شدگی، به وسیله عناصر ماتریسی غیر قطری $\Omega_{21} = \Omega_{12} = k/m$ اتفاق می‌افتد.

با مربوط ساختن مسئله به پایه $|1\rangle$ و $|2\rangle$ ، باید به دنبال پایه‌ای باشیم که Ω در آن قطری است. مولفه‌های $|x\rangle$ در این پایه جدید تابع معادله دیفرانسیل جفت نشده خواهند بود که می‌تواند به راحتی حل شود. با یافتن جواب، می‌توانیم به پایه $|1\rangle$ و $|2\rangle$ برگردیم که از نظر فیزیکی مرجح است. این، هدف اصلی ماست. از مطالعه عملگرهای هرمیتی می‌دانیم که پایه‌ای که Ω را قطری می‌کند، پایه ویژه بردارهای بهنجار شده آن است. فرض کنید $|I\rangle$ و $|II\rangle$ ویژه بردارهای آن باشند که به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$(۳۰-۸-۱-الف)$$

$$\Omega|I\rangle = -\omega_I^2|I\rangle$$

$$(۳۰-۸-۱-ب)$$

$$\Omega|II\rangle = -\omega_{II}^2|II\rangle$$

در اینجا از نمادگذاری معمول خودمان منحرف می‌شویم: ویژه مقدار Ω به صورت $-\omega^2$ ، به جای ω ، نوشته شده، قبل از اینکه بدانیم Ω ویژه مقادیری به شکل $-\omega^2$ ، با ω حقیقی، دارد. همین‌طور از نمادهای $|I\rangle$ و $|II\rangle$ برای نشان دادن $|\omega_I^2\rangle$ و $|\omega_{II}^2\rangle$ ، که مطابق قراردادمان هستند، استفاده می‌کنیم. حل مسئله ویژه مقاداری (که شما باید انجام دهید) برای Ω در پایه $|1\rangle$ و $|2\rangle$ (که در آن عناصر ماتریسی Ω معلومند) یک تمرین ساده است که نتیجه می‌شود:

$$(۳۱-۸-۱-الف)$$

$$\omega_I = \left(\frac{k}{m}\right)^{1/2}, \quad |I\rangle \leftrightarrow \frac{1}{2^{1/2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$(۳۱-۸-۱-ب)$$

$$\omega_{II} = \left(\frac{3k}{m}\right)^{1/2}, \quad |II\rangle \leftrightarrow \frac{1}{2^{1/2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

حال اگر بردار $|x(t)\rangle$ را در این پایه جدید به صورت زیر بسط دهیم

$$(۳۲-۸-۱)$$

$$|x(t)\rangle = |I\rangle x_I(t) + |II\rangle x_{II}(t)$$

(در مقایسه با معادله (۲۹-۸-۱))، مولفه‌های x_I و x_{II} به صورت زیر تحول می‌یابند:

$$\begin{bmatrix} \ddot{x}_I \\ \ddot{x}_{II} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\omega_I^2 & 0 \\ 0 & -\omega_{II}^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_I \\ x_{II} \end{bmatrix} \quad (۳۳-۸-۱)$$

$$= \begin{bmatrix} -\omega_I^2 x_I \\ -\omega_{II}^2 x_{II} \end{bmatrix}$$

این معادله را می‌توان با بازنویسی معادله (۲۴-۸-۱) در پایه $|I\rangle$ و $|II\rangle$ ، که در آن Ω ویژه مقادیرش را در مکان‌های قطر داشته و $|x\rangle$ مولفه‌های x_1 و x_2 دارد، به دست آورد. به شکلی دیگر، می‌توانیم عملگر $\Omega - d^2/dt^2$ را به هر دو طرف بسط معادله (۳۲-۸-۱) اعمال کنیم،

$$|0\rangle = |I\rangle(\ddot{x}_I + \omega_I^2 x_I) + |II\rangle(\ddot{x}_{II} + \omega_{II}^2 x_{II}) \quad (۳۴-۸-۱)$$

چون $|I\rangle$ و $|II\rangle$ متعامد هستند، هر ضریب صفر می‌شود.
جواب معادلات واجفت شده

$$\ddot{x}_i + \omega_i^2 x_i = 0, \quad i = I, II \quad (۳۵-۸-۱)$$

تحت شرط سرعت‌های اولیه صفر، به صورت زیر است

$$x_i(t) = x_i(0) \cos \omega_i t, \quad i = I, II \quad (۳۶-۸-۱)$$

همان‌طور که انتظار می‌رفت، مولفه‌های $|x\rangle$ در پایه $|I\rangle$ و $|II\rangle$ تابع معادلات واجفت شده هستند که می‌توانند به راحتی حل شوند. با قرار دادن معادله (۳۶-۸-۱) در معادله (۳۲-۸-۱) به معادله زیر می‌رسیم

$$|x(t)\rangle = |I\rangle x_I(0) \cos \omega_I t + |II\rangle x_{II}(0) \cos \omega_{II} t \quad (۳۷-۸-۱ \text{ الف})$$

$$= |I\rangle \langle I|x(0)\rangle \cos \omega_I t + |II\rangle \langle II|x(0)\rangle \cos \omega_{II} t \quad (۳۷-۸-۱ \text{ ب})$$

معادله (۳۷-۸-۱) جواب صریح مسئله مقدار-اولیه را فراهم می‌کند و متناظر با الگوریتم زیر برای یافتن $|x(t)\rangle$ با معلوم بودن $|x(0)\rangle$ است:
مرحله (۱): مسئله ویژه مقداری Ω را حل کنید.

مرحله (۲): ضرایب $x_I(0) = \langle I|x(0)\rangle$ و $x_{II}(0) = \langle II|x(0)\rangle$ را در بسط زیر به دست آورید

$$|x(0)\rangle = |I\rangle x_I(0) + |II\rangle x_{II}(0)$$

مرحله (۳): به هر ضریب $x_i(0)$ ($i = I, II$) یک $\cos \omega_i t$ وابسته به زمان الحاق کنید تا ضرایب بسط $|x(t)\rangle$ را به دست آورید.

این الگوریتم را با حل مسئله مقدار-اولیه (عمومی) زیر توضیح می‌دهیم. حالت بعدی دستگاه را با فرض معلوم بودن اینکه در $t = 0$ جرم‌ها به اندازه $x_1(0)$ و $x_2(0)$ جابه‌جا شده‌اند، بیابید.

مرحله (۱): چون مسئله ویژه مقدراری حل شده است [معادله (۱-۸-۳۱)] می‌توانیم از این مرحله چشم‌پوشی کنیم.
مرحله (۲):

$$x_I(0) = \langle I | x(0) \rangle = \frac{1}{2^{1/2}} (1, 1) \begin{bmatrix} x_1(0) \\ x_2(0) \end{bmatrix} = \frac{x_1(0) + x_2(0)}{2^{1/2}}$$

$$x_{II}(0) = \langle II | x(0) \rangle = \frac{1}{2^{1/2}} (1, -1) \begin{bmatrix} x_1(0) \\ x_2(0) \end{bmatrix} = \frac{x_1(0) - x_2(0)}{2^{1/2}}$$

مرحله (۳):

$$|x(t)\rangle = |I\rangle \frac{x_1(0) + x_2(0)}{2^{1/2}} \cos \omega_I t + |II\rangle \frac{x_1(0) - x_2(0)}{2^{1/2}} \cos \omega_{II} t$$

جواب صریح فوق می‌تواند با تصویر کردن $|x(t)\rangle$ روی پایه $|1\rangle$ و $|2\rangle$ برای به‌دست آوردن $x_1(t)$ و $x_2(t)$ ، جابه‌جایی‌های جرم‌ها، حتی صریح‌تر هم شود. نتیجه این که (با قرار دادن فرمول‌های صریح ω_I و ω_{II})

$$x_1(t) = \langle I | x(t) \rangle$$

$$\begin{aligned} &= \langle I | I \rangle \frac{x_1(0) + x_2(0)}{2^{1/2}} \cos \left[\left(\frac{k}{m} \right)^{1/2} t \right] + \langle I | II \rangle \frac{x_1(0) - x_2(0)}{2^{1/2}} \cos \left[\left(\frac{3k}{m} \right)^{1/2} t \right] \quad (۱-۸-۳۸-الف) \\ &= \frac{1}{2} [x_1(0) + x_2(0)] \cos \left[\left(\frac{k}{m} \right)^{1/2} t \right] + \frac{1}{2} [x_1(0) - x_2(0)] \cos \left[\left(\frac{3k}{m} \right)^{1/2} t \right] \end{aligned}$$

با استفاده از این حقیقت که

$$\langle I | I \rangle = \langle I | II \rangle = 1/2^{1/2}$$

همین‌طور می‌توان نشان داد که

$$x_2(t) = \frac{1}{2} [x_1(0) + x_2(0)] \cos \left[\left(\frac{k}{m} \right)^{1/2} t \right] - \frac{1}{2} [x_1(0) - x_2(0)] \cos \left[\left(\frac{3k}{m} \right)^{1/2} t \right] \quad (۱-۸-۳۸-ب)$$

می‌توانیم معادله (۱-۸-۳۸) را به شکل ماتریسی زیر بازنویسی کنیم

$$\begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\cos[(k/m)^{1/2}t] + \cos[(3k/m)^{1/2}t]}{2} & \frac{\cos[(k/m)^{1/2}t] - \cos[(3k/m)^{1/2}t]}{2} \\ \frac{\cos[(k/m)^{1/2}t] - \cos[(3k/m)^{1/2}t]}{2} & \frac{\cos[(k/m)^{1/2}t] + \cos[(3k/m)^{1/2}t]}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1(0) \\ x_2(0) \end{bmatrix} \quad (۱-۸-۳۹)$$

این رابطه، تعیین حالت بعدی دستگاه را با فرض معلوم بودن حالت اولیه کامل می‌کند.

انتشارگر

دو ویژگی قابل توجه در معادله (۱-۸-۳۹) وجود دارد:

- (۱) - بردار حالت نهایی، از بردار حالت اولیه با ضرب یک ماتریس به دست می آید.
- (۲) - این ماتریس از حالت اولیه مستقل است و آن را انتشارگر می نامیم. یافتن این انتشارگر در حکم یافتن جواب کامل مسئله است، برای هر حالت اولیه دیگر معلوم با جابه جایی های $\vec{x}_1(0)$ و $\vec{x}_2(0)$ ، با اعمال همین ماتریس به بردار حالت اولیه به $\vec{x}_1(t)$ و $\vec{x}_2(t)$ می رسیم.

می توانیم معادله (۱-۸-۳۹) را به عنوان تصویر رابطه مجرد زیر در پایه $|1\rangle$ و $|2\rangle$ تصور کنیم

$$|x(t)\rangle = U(t)|x(0)\rangle \quad (۱-۸-۴۰)$$

با مقایسه این معادله با معادله (۱-۸-۳۷) ب) نمایش مجرد U را به دست می آوریم:

$$U(t) = |I\rangle\langle I| \cos \omega_I t + |II\rangle\langle II| \cos \omega_{II} t \quad (۱-۸-۴۱-الف)$$

$$= \sum_{i=1}^{II} |i\rangle\langle i| \cos \omega_i t \quad (۱-۸-۴۱-ب)$$

ممکن است به راحتی خودتان را متقاعد کنید که اگر عناصر ماتریسی این عملگر را در پایه $|1\rangle$ و $|2\rangle$ به دست آوریم، ماتریس ظاهر شده در معادله (۱-۸-۳۹) را مجدداً می یابیم. برای مثال

$$U_{11} = \langle 1|U|1\rangle$$

$$= \langle 1| \left\{ |I\rangle\langle I| \cos \left[\left(\frac{k}{m} \right)^{1/2} t \right] + |II\rangle\langle II| \cos \left[\left(\frac{3k}{m} \right)^{1/2} t \right] \right\} |1\rangle$$

$$= \langle 1|I\rangle\langle I|1\rangle \cos \left[\left(\frac{k}{m} \right)^{1/2} t \right] + \langle 1|II\rangle\langle II|1\rangle \cos \left[\left(\frac{3k}{m} \right)^{1/2} t \right]$$

$$= \frac{1}{2} \left\{ \cos \left[\left(\frac{k}{m} \right)^{1/2} t \right] + \cos \left[\left(\frac{3k}{m} \right)^{1/2} t \right] \right\}$$

توجه کنید که $U(t)$ [معادله (۱-۸-۴۱)] به وسیله ویژه بردارها و ویژه مقادیر Ω به طور کامل مشخص می شود پس می توانیم الگوریتم قبلی خود را به صورت زیر بازگویی کنیم. برای حل معادله

$$|\dot{x}\rangle = \Omega|x\rangle$$

(۱) - مسئله ویژه مقادری Ω را حل کنید.

(۲) - انتشارگر U را بر حسب ویژه مقادیر و ویژه بردارها بسازید.

$$|x(t)\rangle = U(t)|x(0)\rangle \quad (۳)$$

مدهای طبیعی (بهنجار)

دو حالت اولیه $|x(0)\rangle$ وجود دارد که برای آنها تحول زمانی بسیار ساده است. تعجب نکنید که اینها ویژه کت های $|I\rangle$ و $|II\rangle$ هستند. فرض کنید داریم $|x(0)\rangle = |I\rangle$. در این صورت حالت در لحظه t عبارتست از

$$\begin{aligned} |I(t)\rangle &\equiv U(t)|I\rangle \\ &= (|I\rangle\langle I| \cos \omega_I t + |II\rangle\langle II| \cos \omega_{II} t)|I\rangle \\ &= |I\rangle \cos \omega_I t \end{aligned} \quad (۴۲-۸-۱)$$

لذا دستگاهی که با $|I\rangle$ شروع می شود فقط به وسیله یک ضریب $\cos \omega_I t$ تغییر می کند. وضعیت مشابهی برای تبدیل $I \rightarrow II$ معتبر است. این دو مدار تعاش، که در آنها همه (دو) مولفه های یک بردار به صورت هم فاز نوسان می کنند، مدهای طبیعی نامیده می شوند.

فیزیک مدهای طبیعی در پایه $|1\rangle$ و $|2\rangle$ واضح است. در این پایه،

$$|I\rangle \leftrightarrow \frac{1}{2^{1/2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

و متناظر با حالتی است که در آن هر دو جرم به اندازه یکسان جابه جا شده اند. در این صورت فنر میانی فقط یک ناظر بوده و هر جرم با فرکانس $\omega_1 = (k/m)^{1/2}$ در پاسخ به نزدیکترین فنر به خودش در انتها نوسان می کند. در نتیجه،

$$|I(t)\rangle \leftrightarrow \frac{1}{2^{1/2}} \begin{bmatrix} \cos [(k/m)^{1/2}t] \\ \cos [(k/m)^{1/2}t] \end{bmatrix}$$

از سوی دیگر اگر با حالت زیر شروع کنیم،

$$|II\rangle \leftrightarrow \frac{1}{2^{1/2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

جرم ها به اندازه مساوی ولی مخالف جابه جا می شوند. در این حالت فنر میانی به اندازه دو برابر جابه جایی هر جرم تغییر شکل می دهد. اگر جرم ها به ترتیب به اندازه Δ و $-\Delta$ جابه جا شوند، هر جرم نیروی بازگرداننده ای به اندازه $3k\Delta$ از فنر میانی و $2k\Delta$ از فنر انتهایی نزدیکتر به خود احساس می کند. چون ثابت نیروی موثر $k_{eff} = 3k\Delta/\Delta = 3k$ است، فرکانس ارتعاشی، $(3k/m)^{1/2}$ بوده و

$$|II\rangle(t)\rangle \leftrightarrow \frac{1}{2^{1/2}} \begin{bmatrix} \cos [(3k/m)^{1/2}t] \\ -\cos [(3k/m)^{1/2}t] \end{bmatrix}$$

اگر دستگاه در ترکیب خطی از $|I\rangle$ و $|II\rangle$ آماده شود، به ترکیب خطی متناظر از مدهای طبیعی $|I(t)\rangle$ و $|II(t)\rangle$ تحول می یابد. این، قابلیت معادله انتشار گر است،

$$\begin{aligned} |x(t)\rangle &= U(t)|x(0)\rangle \\ &= |I\rangle\langle I|x(0)\rangle \cos \omega_I t + |II\rangle\langle II|x(0)\rangle \cos \omega_{II} t \\ &= |I(t)\rangle\langle I|x(0)\rangle + |II(t)\rangle\langle II|x(0)\rangle \end{aligned}$$

راه دیگر برای اینکه تحول ساده حالت اولیه $|I\rangle$ و $|II\rangle$ را ببینیم این است که ماتریس نمایشگر U در پایه $|I\rangle$ و $|II\rangle$ را مشخص کنیم

$$U \xleftrightarrow[\text{basis}]{I, II} \begin{bmatrix} \cos \omega_I t & 0 \\ 0 & \cos \omega_{II} t \end{bmatrix} \quad (۴۳-۸-۱)$$

شما باید این نتیجه را با انتخاب عناصر ماتریسی مناسب $U(t)$ در معادله (۱-۸-۴۱) ثابت کنید. از آنجا که هر ستون بالا، تصویر بردارهای پایه متناظر ($|I\rangle$ یا $|II\rangle$) بعد از اثر $U(t)$ است (بعد از تحول زمانی)، می بینیم که حالت های اولیه $|I\rangle$ و $|II\rangle$ فقط با زمان تحول می یابند. مسئله محوری در مکانیک کوانتومی بسیار شبیه به مثال ساده ای است که بحث کردیم. حالت دستگاه در نظریه کوانتومی به وسیله یک کت، $|\psi\rangle$ ، توصیف می شود که از معادله شرودینگر پیروی می کند

$$i\hbar|\dot{\psi}\rangle = H|\psi\rangle$$

که \hbar ثابتی مرتبط با ثابت پلانک h از طریق $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ بوده و H عملگر هرمیتی موسوم به هامیلتونی است. مسئله، پیدا کردن $|\psi(t)\rangle$ با معلوم بودن $|\psi(0)\rangle$ است. [از آنجا که معادله فوق مرتبه اول از t است، نیازی به هیچ فرضی در مورد $|\psi(0)\rangle$ ، که به وسیله معادله شرودینگر برابر $H|\psi(0)\rangle = (-i/\hbar)$ تعیین می شود، نیست].

در اکثر موارد، H عملگری مستقل از زمان بوده و الگوریتمی که در حل این مسئله ویژه مقدراری استفاده می شود کاملاً شبیه الگوریتمی است که به کار برده ایم:

مرحله (۱): مسئله ویژه مقدراری H را حل کنید.

مرحله (۲): انتشارگر $U(t)$ را برحسب ویژه بردارها و ویژه مقادیر H بیابید.

مرحله (۳): $|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle$.

البته باید تا فصل ۴ منتظر بمانید تا تغییر فیزیکی $|\psi\rangle$ ، شکل واقعی عملگر H و رابطه دقیق بین $U(t)$ و ویژه مقادیر و ویژه بردارهای H را دریابید.

تمرین ۱-۸-۱۱: مسئله جرم های جفت شده بحث شده در بالا را در نظر بگیرید.

(۱)- فرض کنید حالت اولیه $|1\rangle$ باشد که در آن جرم اول به اندازه واحد جابه جا شده و جرم دوم جابه جا نشده باشد، $|1(t)\rangle$ را با استفاده از الگوریتم فوق محاسبه کنید.

(۲)- نتیجه خود را با آنچه از معادله (۱-۸-۳۹) به دست می آید مقایسه کنید.

تمرین ۱-۸-۱۲: یک بار دیگر مسئله بحث شده در مثال قبل را در نظر بگیرید. (۱)- با فرض اینکه

$$|\tilde{x}\rangle = \Omega|x\rangle$$

دارای جواب زیر است،

$$|x(t)\rangle = U(t)|x(0)\rangle$$

معادله دیفرانسیل برآورده شونده توسط $U(t)$ را به دست آورید. از این حقیقت استفاده کنید که $|x(0)\rangle$ دلخواه است.

(۲)- با فرض اینکه Ω و U می توانند همزمان قطری شوند (همان طور که هست)، این معادله را برای عناصر ماتریس U در این پایه مشترک حل کرده و معادله (۱-۸-۴۳) را مجدداً به دست آورید. فرض کنید $|\dot{x}(0)\rangle = 0$.

۱-۹- توابع عملگرها و مفاهیم مربوطه

ما با دو نوع از اشیاء مواجه شده ایم که روی بردارها اثر می کنند. اعداد، که با یکدیگر و با همه عملگرها جابه جا می شوند؛ و عملگرها، که در حالت کلی با یکدیگر جابه جا نمی شوند. مرسوم است که به اولی اعداد c و به دومی اعداد q می گویند. ما به توابع اعداد c نظیر $\sin(x)$ ، $\log(x)$ و غیره عادت کرده ایم. اکنون می خواهیم بررسی کنیم که آیا توابع اعداد q می توانند یک مفهوم محسوس به ما بدهند. ما خودمان را به آن توابعی محدود می کنیم که می توانند به صورت سری توانی نوشته شوند. سری زیر را در نظر بگیرید

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n \quad (1-9-1)$$

که x یک عدد c است. همین تابع از یک عملگر یا عدد q را به صورت زیر تعریف می کنیم

$$f(\Omega) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \Omega^n \quad (2-9-1)$$

این تعریف فقط در صورتی معنی دارد که جمع به یک حد معینی همگرا شود. برای درک معنی این، یک مثال عمومی را در نظر بگیرید

$$e^{\Omega} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\Omega^n}{n!} \quad (3-9-1)$$

خودمان را به عملگر هرمیتی Ω محدود می کنیم. با رفتن به ویژه پایه Ω می توانیم جمع معادله (۱-۹-۳) را به راحتی انجام دهیم. از آنجا که

$$\Omega = \begin{bmatrix} \omega_1 & & & \\ & \omega_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \omega_n \end{bmatrix} \quad (4-9-1)$$

$$\Omega^m = \begin{bmatrix} \omega_1^m & & & \\ & \omega_2^m & & \\ & & \ddots & \\ & & & \omega_n^m \end{bmatrix} \quad (5-9-1)$$

$$e^\Omega = \begin{bmatrix} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\omega_1^m}{m!} & & & \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\omega_n^m}{m!} \end{bmatrix} \quad (6-9-1)$$

از آنجا که هر جمع به حد آشنای e^{ω_i} همگرا می شود، عملگر e^Ω با این سری توانی در این پایه (و بنابراین در هر پایه دیگر) خوش تعریف است.
تمرین ۱-۹-۱: می دانیم که سری

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

می تواند در صورتی که $|x| < 1$ باشد مساوی تابع $f(x) = (1-x)^{-1}$ قرار گیرد. با رفتن به ویژه پایه، بررسی کنید که در چه صورتی سری توانی عدد q مربوط به یک عملگر هرمیتی Ω ،

$$f(\Omega) = \sum_{n=0}^{\infty} \Omega^n$$

می تواند با $(1-\Omega)^{-1}$ مشخص شود.

تمرین ۱-۹-۲: اگر H یک عملگر هرمیتی باشد، نشان دهید که $U = e^{iH}$ یکانی است (به تشابه با اعداد c توجه کنید: اگر θ حقیقی باشد، $u = e^{i\theta}$ یک عدد با مدول واحد است).
تمرین ۱-۹-۳: برای حالت بالا، نشان دهید که $\det U = e^{i \text{Tr} H}$.

مشتقات عملگرها نسبت به پارامترها

عملگر $\theta(x)$ را در نظر بگیرید که به پارامتر λ بستگی دارد. مشتق آن نسبت به λ به صورت زیر تعریف می شود

$$\frac{d\theta(\lambda)}{d\lambda} = \lim_{\Delta\lambda \rightarrow 0} \left[\frac{\theta(\lambda + \Delta\lambda) - \theta(\lambda)}{\Delta\lambda} \right]$$

اگر $\theta(\lambda)$ به صورت ماتریسی در یک پایه نوشته شود، ماتریس نمایشگر $d\theta(\lambda)/d\lambda$ با مشتق گیری از عناصر ماتریسی $\theta(\lambda)$ به دست می آید. یک حالت خاص $\theta(\lambda)$ که مورد نظر ماست عبارتست از

$$\theta(\lambda) = e^{\lambda\Omega}$$

که Ω هرمیتی است. با رفتن به ویژه پایه Ω می توانیم نشان دهیم که،

$$\frac{d\theta(\lambda)}{d\lambda} = \Omega e^{\lambda\Omega} = e^{\lambda\Omega} \Omega = \theta(\lambda) \Omega \quad (7-9-1)$$

همین نتیجه حتی در صورت هرمیتی نبودن Ω می تواند به دست آید، با کار کردن با سری توانی، به شرط موجود بودن:

$$\frac{d}{d\lambda} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n \Omega^n}{n!} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n \lambda^{n-1} \Omega^n}{n!} = \Omega \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^{n-1} \Omega^{n-1}}{(n-1)!} = \Omega \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\lambda^m \Omega^m}{m!} = \Omega e^{\lambda\Omega}$$

بالعکس، می توان گفت که اگر با معادله دیفرانسیل (7-9-1) روبرو شویم، جواب آن به صورت زیر است

$$\theta(\lambda) = c \exp\left(\int_0^\lambda \Omega d\lambda'\right) = c \exp(\Omega\lambda)$$

(در اینجا فرض می شود که Ω به صورتی رفتار می کند که اگر فقط یک عدد c بود رفتار می کرد. متناظر با انتخاب $c = I$ است.) در بالا، c (عملگر) ثابت انتگرال گیری است. جواب $\theta = e^{\Omega\lambda}$

در همه عمل های بالا، می بینیم که Ω به صورتی رفتار می کند که اگر فقط یک عدد c بود رفتار می کرد. حال تفاوت حقیقی بین اعداد c و اعداد q این است که اعداد q عموماً جابه جا نمی شوند. اما اگر فقط یک عدد q (یا توان های آن) در تصویر وارد شود همه چیز جابه جا می شوند و می توانیم با آنها مثل اعداد c رفتار کنیم. اگر کسی این نکته را به خاطر بسپارد می تواند مدتها آن را حفظ کند.

از طرف دیگر اگر بیش از یک عدد q در مسئله باشد، ترتیب عامل ها از همه مهمتر است. برای مثال رابطه

$$e^{\alpha\Omega} e^{\beta\Omega} = e^{(\alpha+\beta)\Omega}$$

همان طور که می تواند به وسیله بسط سری توانی هم ثابت شود، درست است، در حالی که

$$e^{\alpha\Omega} e^{\beta\theta} = e^{\alpha\Omega + \beta\theta}$$

یا

$$e^{\alpha\Omega} e^{\beta\theta} e^{-\alpha\Omega} = e^{\beta\theta}$$

درست نیستند مگر اینکه $[\Omega, \theta] = 0$ باشد. همین طور در مشتق گیری از یک حاصل ضرب، قاعده زنجیره ای به صورت زیر است

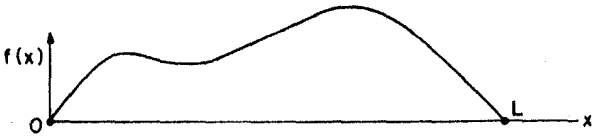
$$\frac{d}{d\lambda} e^{\lambda\Omega} e^{\lambda\theta} = \Omega e^{\lambda\Omega} e^{\lambda\theta} + e^{\lambda\Omega} e^{\lambda\theta} \theta \quad (8-9-1)$$

آزادیم که Ω را به جلوی $e^{\lambda\Omega}$ ببریم و جمله اول را به صورت $e^{\lambda\Omega} \Omega e^{\lambda\theta}$ بنویسیم اما به صورت $e^{\lambda\Omega} e^{\lambda\theta} \Omega$ مجاز نیستیم مگر اینکه $[\Omega, \theta] = 0$ باشد.

۱-۰-۱- تعمیم به ابعاد نامتناهی

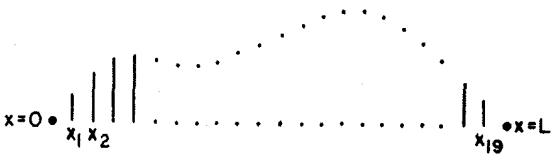
در همه مباحث قبلی، بعد (n) فضا نامشخص بود اما فرض شد که یک عدد متناهی باشد. اکنون تعمیم مفاهیم قبلی به ابعاد بی نهایت را در نظر می گیریم.

ابتدا با بردار بی نهایت بعدی آشنا می شویم. تابعی را در نظر بگیرید که در بازه $a \leq x \leq b$ تعریف شده است. یک مثال واقعی، جابه جایی $f(x, t)$ یک ریسمان محکم شده در $x = 0$ و $x = L$ است (شکل ۶-۱).



شکل ۶-۱: ریسمان در $x = 0$ و $x = L$ محکم شده است و آزاد است تا در صفحه کاغذ نوسان کند.

فرض کنید بخواهیم جابه جایی $f(x)$ ریسمان را در لحظه t به شخصی در کره ماه گزارش کنیم. یک راه ساده، تقسیم بازه 0 تا L به ۲۰ قسمت مساوی و اندازه گیری جابه جایی $f(x_i)$ در ۱۹ نقطه $19L/20$ و ... و $2L/20$ و $x = L/20$ و ارسال ۱۹ مقدار بای سیسیم است. با معلوم بودن این $f(x_i)$ ها، دوست ما روی ماه قادر خواهد بود تصویر تقریبی ریسمان نشان داده شده در شکل ۷-۱ را بازسازی کند.



شکل ۷-۱: ریسمانی که توسط شخص روی ماه بازسازی شده است.

اگر بخواهیم دقیق تر باشیم می توانیم مقادیر $f(x)$ را در تعداد نقاط بیشتری مشخص کنیم. فرض کنید تقریب گسسته $f(x)$ را با $f_n(x)$ نشان دهیم که در n نقطه بر آن منطبق می شود و در بین نقاط صفر می شود. حال اجازه دهید n تایی مرتب شده $\{f_n(x_1), f_n(x_2), \dots, f_n(x_n)\}$ را به عنوان مولفه های یک کت $|f_n\rangle$ در فضای برداری $V^n(R)$ تعبیر کنیم:

$$|f_n\rangle \leftrightarrow \begin{bmatrix} f_n(x_1) \\ f_n(x_2) \\ \vdots \\ f_n(x_n) \end{bmatrix} \quad (1-10-1)$$

بردارهای پایه در این فضا عبارتند از

$$|x_i\rangle \leftrightarrow \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \leftarrow \text{ith place} \quad (2-10-1)$$

که متناظر با تابع گسسته‌ای است که در $x = x_i$ برابر واحد و سایر جاها صفر است. بردارهای پایه روابط زیر را برآورده می‌کنند

$$\langle x_i | x_j \rangle = \delta_{ij} \quad (\text{تعامد}) \quad (۳-۱۰-۱)$$

$$\sum_{i=1}^n |x_i\rangle \langle x_i| = \mathbf{I} \quad (\text{کامل بودن}) \quad (۴-۱۰-۱)$$

تلاش کنید تا فضایی شامل n محور دو به دو عمود بر هم، یکی برای هر نقطه x_i ، تصور کنید. در امتداد هر محور یک بردار بکه $|x_i\rangle$ وجود دارد. تابع $f_n(x)$ با برداری نمایش داده می‌شود که تصویرش در امتداد جهت i ام، $f_n(x_i)$ است:

$$|f_n\rangle = \sum_{i=1}^n f_n(x_i) |x_i\rangle \quad (۵-۱۰-۱)$$

برای هر تقریب گسسته ممکن $g_n(x)$ ، $h_n(x)$ و غیره، یک کت متناظر $|g_n\rangle$ ، $|h_n\rangle$ و غیره وجود دارد و بالعکس. باید خودتان را متقاعد کنید که اگر جمع برداری را به صورت جمع مولفه‌ها تعریف کنیم و ضرب عدد در بردار را به صورت ضرب هر مولفه در عدد، آنگاه مجموعه همه کت‌های نمایشگر توابع گسسته که در L و $x=0$ صفر می‌شوند و در n نقطه بین آن دو معین هستند، یک فضای برداری تشکیل می‌دهند. اکنون ضرب داخلی را در این فضا به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$\langle f_n | g_n \rangle = \sum_{i=1}^n f_n(x_i) g_n(x_i) \quad (۶-۱۰-۱)$$

دو تابع $f_n(x)$ و $g_n(x)$ متعامد گفته می‌شوند در صورتی که $\langle f_n | g_n \rangle = 0$ باشد. اکنون شخص روی ماه را فراموش می‌کنیم و تعیین بیشین جابه‌جایی ریسمان را، با دادن مقادیر آن در هر نقطه در بازه 0 تا L ، در نظر می‌گیریم. در این حالت $f_\infty(x) \equiv f(x)$ به وسیله تعداد بی‌شماری از اعداد مرتب شده مشخص می‌شود: یک $f(x)$ برای هر نقطه x . اکنون هر تابع به وسیله یک کت $|f_\infty\rangle$ در فضای برداری بی‌نهایت بعدی نمایش داده می‌شود و بالعکس. جمع برداری و ضرب عدد در بردار درست همانند قبل تعریف می‌شوند. اما ضرب داخلی را در نظر بگیرید. برای n متناهی به صورت زیر تعریف کردیم

$$\langle f_n | g_n \rangle = \sum_{i=1}^n f_n(x_i) g_n(x_i)$$

به ویژه اینکه

$$\langle f_n | f_n \rangle = \sum_{i=1}^n [f_n(x_i)]^2$$

اگر اجازه دهیم n به بی‌نهایت برود، جمع هم عملاً برای هر تابع به بی‌نهایت می‌رود. آنچه نیاز داریم تعریف مجدد ضرب داخلی برای n متناهی است به طوری که با میل n به بی‌نهایت، یک حد همواری به دست آید. انتخاب طبیعی به صورت زیر است

$$\langle f_n | g_n \rangle = \sum_{i=1}^n f_n(x_i) g_n(x_i) \Delta, \quad \Delta = L/(n+1) \quad (6-10-1)$$

اگر اجازه دهیم تا n به بی نهایت برود، طبق تعریف معمول انتگرال به عبارت زیر می‌رسیم

$$\langle f | g \rangle = \int_0^L f(x) g(x) dx \quad (7-10-1)$$

$$\langle f | f \rangle = \int_0^L f^2(x) dx \quad (8-10-1)$$

اگر بخواهیم فراتر از ریمان رفته و توابع مختلط از x را هم، در یک بازه $a \leq x \leq b$ ، در نظر بگیریم تنها تصحیح لازم، در ضرب داخلی است:

$$\langle f | g \rangle = \int_a^b f^*(x) g(x) dx \quad (9-10-1)$$

بردارهای پایه در این فضا چه چیزهایی هستند و چگونه بهنجار می‌شوند؟ می‌دانیم که هر نقطه x یک بردار

پایه $|x\rangle$ به دست می‌دهد. تعامد دو محور متفاوت ایجاب می‌کند که

$$\langle x | x' \rangle = 0, \quad x \neq x' \quad (10-10-1)$$

اگر $x = x'$ باشد چگونه؟ آیا باید همانند حالت بُعد متناهی مقرر کنیم که $\langle x | x \rangle = 1$ باشد؟ پاسخ منفی است و بهترین راه برای دیدن آن، به دست آوردن بهنجارش صحیح است. با تعمیم طبیعی رابطه کامل بودن، معادله (۴-۱۰-۱)، به حالتی که کت‌ها به وسیله یک شاخص پیوسته x' برچسب زده می‌شوند شروع می‌کنیم:

$$\int_a^b |x'\rangle \langle x'| dx' = I \quad (11-10-1)$$

که در آن، مثل همیشه، عملگر یکانی لازم است تا هر کت را بدون تغییر باقی گذارد. با ضرب نقطه‌ای هر دو طرف معادله (۱۱-۱۰-۱) در یک کت دلخواه $|f\rangle$ از سمت راست و بر پایه $|x\rangle$ از چپ،

$$\int_a^b \langle x | x' \rangle \langle x' | f \rangle dx' = \langle x | I | f \rangle = \langle x | f \rangle \quad (12-10-1)$$

حال، $\langle x | f \rangle$ ، تصویر $|f\rangle$ در امتداد کت پایه $|x\rangle$ ، همان $f(x)$ است. همین‌طور $\langle x' | f \rangle = f(x')$. فرض کنید ضرب داخلی $\langle x | x' \rangle$ یک تابع نامعلوم $\delta(x, x')$ باشد. چون $\delta(x, x')$ در صورت $x \neq x'$ صفر می‌شود می‌توانیم انتگرال را در معادله (۱۲-۱۰-۱) به ناحیه‌ای بسیار کوچک نزدیک $x = x'$ محدود کنیم:

$$\int_{x-\varepsilon}^{x+\varepsilon} \delta(x, x') f(x') dx' = f(x) \quad (13-10-1)$$

در این ناحیه بسیار کوچک، $f(x')$ (برای هر f هموار در حد معقول) می‌تواند با مقدارش در $x' = x$ تقریب زده شود و از انتگرال بیرون آید:

$$f(x) \int_{x-\varepsilon}^{x+\varepsilon} \delta(x, x') dx' = f(x) \quad (14-10-1)$$

به طوری که

$$\int_{x-\varepsilon}^{x+\varepsilon} \delta(x, x') dx' = 1 \quad (15-10-1)$$

واضح است که $\delta(x, x')$ نمی‌تواند در $x' = x$ متناهی باشد زیرا در این صورت انتگرال آن روی یک ناحیه بسیار کوچک هم بی‌نهایت کوچک می‌شود. در واقع $\delta(x, x')$ باید نامتناهی باشد به طوری که انتگرالش یک شود. از آنجا که $\delta(x, x')$ فقط به اختلاف $x - x'$ بستگی دارد آنرا به صورت $\delta(x - x')$ می‌نویسیم. «تابع» $\delta(x - x')$ با خواص زیر تابع دلتای دیراک نامیده می‌شود

$$\delta(x - x') = 0, \quad x \neq x'$$

$$\int_a^b \delta(x - x') dx' = 1, \quad a < x < b \quad (16-10-1)$$

و بهنجارش بردارهای پایه را ثابت و مشخص می‌کند:

$$\langle x | x' \rangle = \delta(x - x') \quad (17-10-1)$$

این رابطه، هر زمان که کت‌های پایه به وسیله یک شاخص پیوسته نظیر x نامگذاری می‌شوند، مورد نیاز خواهد بود. توجه کنید که این تابع فقط در رابطه با یک انتگرال گیری تعریف می‌شود: انتگرال تابع دلتا $\delta(x, x')$ با هر تابع هموار $f(x)$ ، $f(x')$ است. گاهی تابع دلتا را تابع نمونه گیری می‌نامند چون از مقدار تابع $f(x')$ در یک نقطه نمونه گیری می‌کند:^۱

$$\int \delta(x - x') f(x') dx' = f(x) \quad (18-10-1)$$

تابع دلتا شبیه هیچ تابعی نیست که قبلاً دیده‌ایم، مقادیر آن یا صفرند یا بی‌نهایت. لذا مفید این است که آنرا به عنوان حد یک تابع متعارف تر تلقی کنیم. یک گوسین را در نظر بگیرید

۱- اغلب حدود انتگرال گیری را، در صورتی که بی‌اهمیت باشند، حذف خواهیم کرد.

$$g_{\Delta}(x-x') = \frac{1}{(\pi\Delta^2)^{1/2}} \exp\left[-\frac{(x-x')^2}{\Delta^2}\right] \quad (19-10-1)$$

که در شکل ۱-۸ الف هم نشان داده شده است. گوسین در $x = x'$ متمرکز بوده، دارای پهنای Δ ، ارتفاع پیشینه $(\pi\Delta^2)^{-1/2}$ و مساحت واحد و مستقل از Δ است. با میل Δ به سمت صفر، g_{Δ} تقریبی بهتر و بهتر برای تابع دلتا می‌شود.^۱

از مدل گوسین واضح است که تابع دلتا فرد است. این موضوع می‌تواند به صورت زیر ثابت شود:

$$\delta(x-x') = \langle x|x' \rangle = \langle x'|x \rangle^* = \delta(x'-x)^* = \delta(x'-x)$$

چون تابع دلتا حقیقی است.

اکنون شیئی را در نظر می‌گیریم که حتی خاص‌تر از تابع دلتا است: مشتق آن نسبت به شناسه اول x :

$$\delta'(x-x') = \frac{d}{dx} \delta(x-x') = -\frac{d}{dx'} \delta(x-x') \quad (20-10-1)$$

اثر این تابع در زیر انتگرال چیست؟ این اثر از مدل گوسین بیرون می‌آید. $dg_{\Delta}(x-x')/dx = -dg_{\Delta}(x-x')/dx'$ را به صورت تابعی از x' در نظر بگیرید. با جمع شدن g_{Δ} ، هر برآمدگی در $\pm\epsilon$ ، صرف‌نظر از یک ضریب عددی (مقیاس)، تابع δ خواهد شد. برآمدگی اول، $f(x-\epsilon)$ را و برآمدگی دوم $f(x+\epsilon)$ را، باز هم صرف‌نظر از یک ضریب عددی، نمونه‌برداری می‌کند به طوری که

$$\int \delta'(x-x') f(x') dx' \propto f(x+\epsilon) - f(x-\epsilon) = 2\epsilon \left. \frac{df}{dx'} \right|_{x'=x}$$

ثابت تناسب، $\frac{1}{2\epsilon}$ انتخاب می‌شود به طوری که

$$\int \delta'(x-x') f(x') dx' = \left. \frac{df}{dx'} \right|_{x'=x} = \frac{df(x)}{dx} \quad (21-10-1)$$

این نتیجه می‌تواند به صورت زیر ثابت شود:

۱- نکته ظریفی که به فصل ۸ ماکول می‌شود: این فرمول برای تابع دلتا حتی در صورتی که Δ موهومی خالص باشد، مثلاً برابر $i\beta^2$ ، معتبر است. ابتدا از معادله $(A-2-0)$ می‌بینیم که g مساحت واحد دارد. سپس انتگرال g ضریب $f(x')$ را روی ناحیه‌ای از x' که شامل x است در نظر می‌گیریم. برای قسمت عمده، صفر به دست می‌آید زیرا f هموار بوده و g با $\beta \rightarrow 0$ شدیداً نوسانی می‌شود. اما در $x = x'$ مشتق فاز g صفر می‌شود و نوسانات متوقف می‌شوند. با بیرون کشیدن $f(x'=x)$ از انتگرال به نتیجه مطلوب می‌رسیم.

$$\int \delta'(x-x') f(x') dx' = \int \frac{d\delta(x-x')}{dx} f(x') dx' = \frac{d}{dx} \int \delta(x-x') f(x') dx'$$

$$= \frac{df(x)}{dx}$$

توجه کنید که $D_{xx'} = \delta'(x-x')$ تابعی فرد است. این موضوع باید از شکل ۸-۱-ب یا معادله (۲۰-۱۰-۱) واضح باشد. یک روش معادل برای توصیف اثر تابع δ' از طریق معادله زیر است

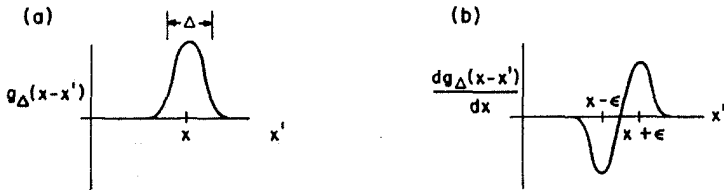
$$\delta'(x-x') = \delta(x-x') \frac{d}{dx'} \quad (22-10-1)$$

که از آن بدیهی است که هر دو طرف در انتگرالی روی x' ظاهر می‌شوند و عملگر مشتق‌گیری روی هر تابعی که همراه تابع x' در انتگرالده باشد اثر می‌کند. در این نمادگذاری می‌توانیم اثر مشتقات بالاتر تابع دلتا را به صورت زیر نشان دهیم:

$$\frac{d^n \delta(x-x')}{dx'^n} = \delta(x-x') \frac{d^n}{dx'^n} \quad (23-10-1)$$

اکنون نمایش دیگری از تابع دلتا ارائه می‌دهیم. از تحلیل فوریه می‌دانیم که با معلوم بودن یک تابع می‌توانیم تبدیل آنرا به صورت زیر تعریف کنیم

$$f(k) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} f(x) dx \quad (24-10-1)$$



شکل ۸-۱: الف- با $\Delta \rightarrow 0$ ، گوسین g_Δ به تابع دلتا میل می‌کند. ب- مشتق آن، $dg/dx(x-x')$ با $\Delta \rightarrow 0$ به $\delta'(x-x')$ میل می‌کند.

و معکوس آن،

$$f(x') = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx'} f(k) dk \quad (25-10-1)$$

با قرار دادن معادله (۲۴-۱۰-۱) در (۲۵-۱۰-۱)،

$$f(x') = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ik(x'-x)} \right) f(x) dx$$

با مقایسه این نتیجه با معادله (۱۸-۱۰-۱) دیده می شود که

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ik(x'-x)} = \delta(x'-x) \quad (۲۶-۱۰-۱)$$

تمرین ۱-۱۰-۱: نشان دهید که $|\delta(ax)| = \delta(x)/|a|$ را در نظر گرفته و به خاطر داشته باشید که $[\delta(ax)d(ax)] = \delta(x)d(x)$.

تمرین ۳-۱۰-۱: نشان دهید که

$$\delta(f(x)) = \sum_i \frac{\delta(x_i - x)}{|df/dx_i|}$$

که x_i ها صفرهای $f(x)$ هستند. راهنمایی: کجاها $\delta(f(x))$ برآمده است؟ $f(x)$ را نزدیک این نقاط به صورت سری تیلور بسط داده و اولین جمله غیر صفر را نگه دارید.

تمرین ۳-۱۰-۱: تابع $\theta(x-x')$ را در نظر بگیرید که اگر $x-x'$ منفی باشد صفر شده و اگر $x-x'$ مثبت باشد برابر یک می شود. نشان دهید که تابع θ تانگنرال تابع دلتا است.

عملگرها در ابعاد نامتناهی

با عادت دادن خودمان به عناصر این فضای تابع، یعنی کت های $|f\rangle$ و بردارهای پایه $|x\rangle$ ، به عملگرهایی (خطی) برمی گردیم که روی آنها اثر می کنند. معادله زیر را در نظر بگیرید

$$\Omega|f\rangle = |\tilde{f}\rangle$$

چون کت ها در تناظر با توابع هستند، Ω تابع $f(x)$ را به تابع دیگر، $\tilde{f}(x)$ می برد. حال، عملگری که یک چنین خاصیتی دارد عملگر آشنای مشتق است که با اثر بر $f(x)$ ، $\tilde{f}(x) = df(x)/dx$ را به دست می دهد. در فضای تابع، می توانیم اثر این عملگر را به صورت زیر توصیف کنیم

$$D|f\rangle = |df/dx\rangle$$

که $|df/dx\rangle$ کت متناظر با تابع df/dx است. عناصر ماتریسی D در پایه $|x\rangle$ کدامند؟ برای به دست آوردن آنها، دو طرف معادله بالا را در $\langle x|$ ضرب نقطه ای می کنیم

$$\langle x|D|f\rangle = \left\langle x \left| \frac{df}{dx} \right. \right\rangle = \frac{df(x)}{dx}$$

و عملگر همانی را در سمت راست آن وارد می کنیم

$$\int \langle x|D|x'\rangle \langle x'|f\rangle dx' = \frac{df}{dx} \quad (۲۷-۱۰-۱)$$

با مقایسه این معادله با معادله (۲۱-۱۰-۱) نتیجه می شود

$$\langle x | D | x' \rangle = D_{xx'} = \delta'(x - x') = \delta(x - x') \frac{d}{dx'} \quad (۲۸-۱۰-۱)$$

بهرتر است یادآوری شود که $D_{xx'} = \delta'(x - x')$ باید روی شاخص دوم (x') انتگرال گیری شود و مشتق F را نسبت به شاخص اول (x) به دست دهد. برخی ترجیح می دهند که از $\delta'(x - x')$ روی شاخص اول انتگرال بگیرند، که در این حالت $-df/dx'$ بیرون می آید. اگر $D_{xx'}$ به عنوان ماتریسی در نظر گرفته شود که از سمت چپ روی مولفه های $f_{x'} = f(x')$ یک بردار، $\langle f |$ ، اثر می کند قرارداد ما مرسوم تر است. لذا عملگر آشنای مشتق، ماتریسی بی نهایت بعدی با عناصر داده شده در بالاست. معمولاً کسی به D به عنوان یک ماتریس نگاه نمی کند زیرا معمولاً وقتی ماتریسی روی یک بردار اثر می کند، یک جمع روی شاخص مشترک وجود دارد. در واقع معادله (۲۷-۱۰-۱) شامل چنین جمعی روی شاخص x' است. اما اگر در این معادله مقدار $D_{xx'}$ را قرار دهیم، تابع دلتا، انتگرال گیری را بدیهی می سازد:

$$\int \delta(x - x') \frac{d}{dx'} f(x') dx' = \left. \frac{df}{dx'} \right|_{x'=x} = \frac{df}{dx}$$

لذا اثر D فقط اعمال d/dx به $f(x)$ بدون هیچ جمعی روی شاخص مشترک است. اگر چه انتگرال روی شاخص مشترک را هم نهایتاً حذف می کنیم اما همچنان به کاربرد آن تا مدتی ادامه می دهیم، تا یادآوری کند که D ، نظیر همه عملگرهای خطی، یک ماتریس است. اکنون هرمیتی بودن D و مسئله ویژه مقدراری آن را بررسی می کنیم. اگر D هرمیتی بود، داشتیم:

$$D_{xx'} = D_{x'x}^*$$

اما اینگونه نیست:

$$D_{xx'} = \delta'(x - x')$$

در حالی که،

$$D_{x'x}^* = \delta'(x' - x)^* = \delta'(x' - x) = -\delta'(x - x')$$

اما به راحتی می توانیم D را با ضرب آن در یک عدد موهومی محض تبدیل به ماتریسی هرمیتی کنیم. فرض کنید

$$K = -iD$$

که رابطه زیر را برآورده می کند

$$K_{xx'}^* = [-i\delta'(x' - x)]^* = +i\delta'(x' - x) = -i\delta'(x - x') = K_{x'x}$$

ثابت می شود که علی رغم بالا، همان طور که تحلیل زیر هم نشان می دهد هرمیتی بودن عملگر K تضمین نمی شود. فرض کنید $\langle f |$ و $\langle g |$ دو کت در فضای تابع باشند که تصاویرشان در پایه X دو تابع $f(x)$ و $g(x)$ در بازه a تا b است. اگر K هرمیتی باشد باید رابطه زیر را هم برآورده کند

$$\langle g|K|f\rangle = \langle g|Kf\rangle = \langle Kf|g\rangle^* = \langle f|K^\dagger|g\rangle^* = \langle f|K|g\rangle^*$$

بنابراین سوال این است که آیا

$$\int_a^b \int_a^b \langle g|x\rangle \langle x|K|x'\rangle \langle x'|f\rangle dx dx'$$

$$\stackrel{?}{=} \left(\int_a^b \int_a^b \langle f|x\rangle \langle x|K|x'\rangle \langle x'|g\rangle dx dx' \right)^*$$

$$\int_a^b g^*(x) \left[-\frac{i df(x)}{dx} \right] dx \stackrel{?}{=} \left\{ \int_a^b f^*(x) \left[-\frac{i dg(x)}{dx} \right] dx \right\}^* = i \int_a^b \frac{dg^*}{dx} f(x) dx$$

با انتگرال گیری جزء به جزء از سمت چپ نتیجه می شود:

$$-ig^*(x)f(x) \Big|_a^{b^0} + i \int_a^b \frac{dg^*(x)}{dx} f(x) dx$$

لذا K فقط در صورتی هرمیتی است که جمله سطحی صفر شود:

$$-ig^*(x)f(x) \Big|_a^b = 0 \quad (۲۹-۱۰-۱)$$

برخلاف حالت با بعد متناهی، $K_{xx'} = K_{x'x}^*$ شرطی کافی برای هرمیتی بودن K نیست. لازم است به رفتار توابع در نقاط انتهایی a و b هم نگاه کنیم. بنابراین K در صورتی هرمیتی است که فضا شامل توابعی باشد که تابع معادله (۲۹-۱۰-۱) باشند. یک مجموعه از توابع که تابع این شرط هستند بیکریندی های ممکن $f(x)$ ریسمان محکم شده در L و $x=0$ هستند، چون $f(x)$ در نقاط انتهایی صفر می شود. اما شرط (۲۹-۱۰-۱) می تواند به شکل دیگری هم برآورده شود. توابع موجود در فضای سه بعدی، پارامتری شده با r و θ و ϕ (زاویه اندازه گیری شده حول محور z) را در نظر بگیرید. فرض می کنیم که این توابع تک مقدار باشند. بویژه اگر از یک نقطه معین شروع کرده و یک بار حول z بچرخیم و به نقطه اولیه برگردیم، تابع باید مقدار اولیه اش را داشته باشد، یعنی،

$$f(\phi) = f(\phi + 2\pi)$$

در فضای چنین توابع دوره ای، $K = -i d/d\phi$ عملگری هرمیتی است. جمله سطحی صفر می شود چون سهم ناشی از یک انتها با سهم انتهای دیگر خنثی می شود:

$$-ig^*(\phi)f(\phi) \Big|_0^{2\pi} = -i[g^*(2\pi)f(2\pi) - g^*(0)f(0)] = 0$$

در مطالعه مکانیک کوانتومی، علاقه‌مند به توابعی هستیم که روی بازه کامل $-\infty \leq x \leq +\infty$ تعریف شده باشند. این توابع دو دسته‌اند، آنهایی که با میل $|x| \rightarrow \infty$ صفر می‌شوند و آنهایی که صفر نمی‌شوند، دسته دوم به صورت e^{ikx} رفتار می‌کنند که k پارامتری حقیقی است که این توابع را برچسب می‌زند. واضح است که $K = -i \, d/dx$ وقتی هرمیتی است که بین دو تابع از دسته اول یا یک تابع از هر دسته ساندویچ شود، چون در هر حالت، جمله سطحی صفر می‌شود. وقتی بین دو تابع از دسته دوم ساندویچ شود، هرمیتی بودن بستگی به این دارد که آیا

$$e^{ikx} e^{-ik'x} \Big|_{-\infty}^{\infty} \stackrel{?}{=} 0$$

اگر $k = k'$ باشد، سهم ناشی از یک انتها سهم ناشی از انتهای دیگر را از بین می‌برد. اگر $k \neq k'$ باشد پاسخ، به علت نوسان $e^{i(k-k')x}$ در صورت میل $|x| \rightarrow \infty$ به جای میل به یک حد، مبهم است. یک روش برای تعریف حد چنین توابعی وجود دارد: این حد وقتی $|x| \rightarrow \infty$ میل می‌کند به صورت یک متوسط روی یک بازه بزرگ تعریف می‌شود. طبق این دستورالعمل، داریم

$$\lim_{x \rightarrow \infty} e^{ikx} e^{-ik'x} = \lim_{\substack{L \rightarrow \infty \\ \Delta \rightarrow \infty}} \frac{1}{\Delta} \int_L^{L+\Delta} e^{i(k-k')x} dx = 0 \quad \text{if } k \neq k'$$

و بنابراین K در این فضا هرمیتی است.

اکنون به مسئله ویژه مقداری K برمی‌گردیم. به نظر می‌رسد کار سختی داشته باشیم چون مجبوریم ریشه‌های یک چند جمله‌ای مشخصه مرتبه بی‌نهایت را یافته و ویژه بردارهای متناظر را به دست آوریم. ثابت می‌شود که این کار کاملاً ساده است و ممکن است آن را بارها در گذشته انجام داده باشید. با رابطه زیر شروع می‌کنیم

$$(۳۰-۱۰-۱)$$

$$K|k\rangle = k|k\rangle$$

طبق روش استاندارد،

$$\langle x|K|k\rangle = k\langle x|k\rangle$$

$$\int \langle x|K|x'\rangle \langle x'|k\rangle dx' = k\psi_k(x) \quad (۳۱-۱۰-۱)$$

$$-i \frac{d}{dx} \psi_k(x) = k\psi_k(x)$$

که طبق تعریف، $\psi_k(x) = \langle x|k\rangle$ است. این معادله می‌توانست با جاگذاری بی‌واسطه $K = -i \, d/dx$ در پایه X مستقیماً نوشته شود. از اینجا به بعد به این نماد متوسل می‌شویم مگر اینکه دلایلی برای عدم انجام این کار داشته باشیم.

جواب معادله بالا به صورت زیر است

(۱۰-۳۲)

$$\psi_k(x) = A e^{ikx}$$

که A ، یک مقیاس کلی، پارامتری آزاد است که به وسیله مسئله ویژه مقدراری مشخص نمی‌شود. بنابراین مسئله ویژه مقدراری K به طور کامل حل می‌شود: هر عدد حقیقی k یک ویژه مقدار است و ویژه تابع متناظر به صورت $A e^{ikx}$ است. طبق معمول، از آزادی در ضرب (مقیاس) برای بهنجار کردن جواب استفاده خواهد شد. ما A را $(1/2\pi)^{1/2}$ انتخاب می‌کنیم به طوری که

$$|k\rangle \leftrightarrow \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} e^{ikx}$$

و

$$\langle k|k'\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle k|x\rangle \langle x|k'\rangle dx = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(k-k')x} dx = \delta(k-k') \quad (۱۰-۳۳)$$

(از آنجا که $\langle k|k\rangle$ نامتناهی است، هیچ انتخابی از A نمی‌تواند $|k\rangle$ را به یک بهنجار کند. در صورت پیوسته بودن طیف ویژه مقدراری، بهنجارش طبیعی، بهنجارش به تابع دلتا است). خواننده متوجه ممکن است در این جا سوالی مطرح کند:

«چرا فرض شد که ویژه مقدار k حقیقی است؟ واضح است که تابع $A e^{ikx}$ با $k = k_1 + ik_2$ هم معادله (۱۰-۳۱) را برآورده می‌کند.»

پاسخ این است که بله، ویژه توابعی از K با ویژه مقادیر مختلط وجود دارد. اما اگر فضای ما شامل چنین توابعی باشد، K باید در زمره عملگرهای غیر هرمیتی قرار گیرد (جمله سطحی دیگر صفر نمی‌شود چون e^{ikx} با میل x به $+\infty$ یا $-\infty$ ، بسته به علامت قسمت موهومی، k_2 ، به صورت نمایی زیاد می‌شود. در محدود کردن خودمان به k حقیقی، به فضایی مقید شده‌ایم که آن رافضای هیلبرت فیزیکی خواهیم نامید و در مکانیک کوانتومی مورد نظر ماست. این فضا به عنوان فضای توابعی تعریف می‌شود که می‌توانند یا به یک یا به تابع دلتای دیراک بهنجار شوند و نقشی محوری در مکانیک کوانتومی ایفا می‌کند (صفت «فیزیکی» را به کار می‌بریم تا آنرا از فضای هیلبرتی که توسط ریاضی دانان تعریف می‌شود و فقط شامل بردارهای **سوره**، یعنی بردارهای قابل بهنجارش به یک، است متمایز کنیم. نقش بردارهای **ناسوره** در نظریه کوانتومی بعداً مشخص خواهد شد).

فرض خواهیم کرد که قضیه اثبات شده برای ابعاد متناهی، یعنی اینکه ویژه توابع یک عملگر هرمیتی یک پایه کامل تشکیل می‌دهند، در فضای هیلبرت معتبر می‌ماند.^۱ (مشکل کار با فضای بی‌نهایت بعدی این است که حتی در صورتی که تعدادی نامتناهی از ویژه بردارهای راست هنجار داشته باشید هرگز نمی‌توانید مطمئن باشید که همه آنها را دارید، چون جمع یا تفریق آنها باز هم شما را با تعدادی نامتناهی از آنها مواجه می‌کند).

۱- از اینجا به بعد صفت «فیزیکی» را حذف می‌کنیم.

از آنجا که K عملگری هرمیتی است، توابعی که در پایه X با مولفه‌های $\langle x|f \rangle = f(x)$ بسط داده شوند هم باید بسطی در پایه K داشته باشند. برای یافتن مولفه‌ها، با کت $|f \rangle$ شروع کرده و به صورت زیر عمل می‌کنیم:

$$f(k) = \langle k|f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle k|x \rangle \langle x|f \rangle dx = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} f(x) dx \quad (۳۴-۱۰-۱)$$

رفتن به پایه X به صورت زیر است:

$$f(x) = \langle x|f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle k|x \rangle \langle k|f \rangle dk = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} f(k) dk \quad (۳۵-۱۰-۱)$$

بنابراین تبدیل فوریه آشنا، همان گذر از یک پایه کامل $|x \rangle$ به پایه کامل دیگر $|k \rangle$ است. هر پایه می‌تواند برای بسط توابعی که متعلق به فضای هیلبرت اند به کار رود. عناصر ماتریسی K در پایه K بدیهی هستند:

$$\langle k|K|k' \rangle = k' \langle k|k' \rangle = k' \delta(k-k') \quad (۳۶-۱۰-۱)$$

اکنون می‌دانیم که پایه K از کجا می‌آید: این پایه به وسیله عملگر هرمیتی K تولید می‌شود. کدام عملگر مسئول پایه راست هنجار X است؟ فرض کنید آنرا عملگر X بنامیم. کت‌های $|x \rangle$ ویژه بردارهای آن با ویژه مقدار x هستند:

$$X|x \rangle = x|x \rangle \quad (۳۷-۱۰-۱)$$

عناصر ماتریسی آن در پایه X عبارتند از

$$\langle x'|X|x \rangle = x \delta(x'-x) \quad (۳۸-۱۰-۱)$$

برای به دست آوردن اثر آن روی توابع، با معادله زیر شروع می‌کنیم

$$X|f \rangle = |\tilde{f} \rangle$$

طبق معمول می‌توان نتیجه گرفت که

$$\langle x|X|f \rangle = \int \langle x|X|x' \rangle \langle x'|f \rangle dx' = xf(x) = \langle x|\tilde{f} \rangle = \tilde{f}(x)$$

یا

$$\therefore \tilde{f}(x) = xf(x)$$

از این رو اثر X ، ضرب x در $f(x)$ است. همانند مورد عملگر K ، معمولاً انتگرال روی شاخص مشترک به وسیله تابع دلتا کنار می‌رود. می‌توانیم اثر X را در فضای هیلبرت به صورت زیر خلاصه کنیم

(۱۰-۱-۳۹)

$$X|f(x)\rangle = |xf(x)\rangle$$

که طبق معمول $|xf(x)\rangle$ کت متناظر با تابع $xf(x)$ است.
 تعامل متقابل خوبی بین عملگرهای X و K وجود دارد که خودش را هنگام محاسبه عناصر ماتریسی X در پایه K نشان می‌دهد:

$$\begin{aligned} \langle k|X|k'\rangle &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} x e^{ik'x} dx \\ &= +i \frac{d}{dk} \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k'-k)x} dx \right) = i\delta'(k-k') \ddagger \end{aligned}$$

(در گام آخر از این حقیقت بهره برده‌ایم که $(\delta(k'-k) = \delta(k-k'))$.
 بنابراین اگر $|g(k)\rangle$ کتی باشد که تصویرش در پایه k $g(k)$ باشد، آنگاه

$$X|g(k)\rangle = \left| \frac{d g(k)}{dk} \right\rangle \quad (۱۰-۱-۴۰)$$

به‌طور خلاصه، در پایه X ، X به‌صورت x و K به‌صورت $-i d/dx$ [روی توابع $f(x)$] عمل می‌کند، در حالی که در پایه K ، K نظیر k و X نظیر $i d/dk$ [روی $f(k)$] عمل می‌کند. عملگرهایی با چنین روابط بین یکدیگر مزدوج هم گفته می‌شوند.

عملگرهای مزدوج X و K جابه‌جانه نمی‌شوند، جابه‌جاگر آنها می‌تواند به‌صورت زیر محاسبه شود. فرض کنید X و K را در هر دو ترتیب ممکن روی کت $|f\rangle$ اثر دهیم و سپس اثر آنها را در پایه X بنویسیم:

$$X|f\rangle \rightarrow xf(x)$$

$$K|f\rangle \rightarrow -i \frac{df(x)}{dx}$$

بنابراین،

$$XK|f\rangle \rightarrow -ix \frac{df(x)}{dx}$$

$$KX|f\rangle \rightarrow -i \frac{d}{dx} xf(x)$$

در نتیجه،

$$[X, K]|f\rangle \rightarrow -ix \frac{df}{dx} + ix \frac{df}{dx} + if = if \rightarrow iI|f\rangle$$

چون $|f\rangle$ کتی دلخواه است، به نتیجه مورد نظر رسیده‌ایم:

$$[X, K] = iI$$

(۱۰-۱-۴۱)

این مطلب ما را به انتهای بحثمان درباره فضای هیلبرت می‌برد و فقط یک مثال ارائه می‌دهیم. اگر چه عملگرهای زیاد دیگری وجود دارند که می‌توان در این فضا مطالعه کرد، اما ما خودمان را به X و K محدود می‌کنیم چون تقریباً همه عملگرهایی که برای مکانیک کوانتومی نیاز خواهیم داشت توابعی از X و $P = \hbar K$ هستند که \hbar ثابتی است که بعداً تعریف می‌شود.

مثال ۱-۱۰-۱: یک مسئله مد طبیعی (بهنجار) در فضای هیلبرت. ریسمانی به طول L محکم شده از دو انتها در نقاط L و $x = 0$ را در نظر بگیرید. جابه‌جایی $\psi(x, t)$ تابع معادله دیفرانسیل زیر است:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (۴۲-۱۰-۱)$$

با معلوم بودن اینکه در $t = 0$ جابه‌جایی برابر $\psi(x, 0)$ و سرعت برابر $\dot{\psi}(x, 0) = 0$ است می‌خواهیم تحول زمانی ریسمان را مشخص کنیم.

به استثنای تغییر بعد، این مسئله با مسئله دو جرم جفت شده که در انتهای بخش ۱-۸ بحث شد یکی است (معادله (۱-۸-۲۶) را ببینید) و پیشنهاد می‌کنیم که یک بار دیگر به آن مثال مراجعه کنید تا قبل از پیشروی بیشتر ذهن خود را آماده کنید.

ابتدا $\psi(x, t)$ را به‌عنوان مولفه‌های بردار $|\psi(t)\rangle$ در فضای هیلبرت در نظر می‌گیریم که عناصر آن در تناظر با جابه‌جایی‌های ممکن ψ هستند، یعنی توابعی که در بازه $0 \leq x \leq L$ پیوسته بوده و در نقاط انتهایی صفرند. می‌توانید ثابت کنید که این توابع تشکیل یک فضای برداری می‌دهند.

مانسته عملگر Ω در معادله (۱-۸-۲۶) عملگر $\partial^2/\partial x^2$ است. ما این عملگر را منفی مربع عملگر $\partial/\partial x \leftrightarrow -iK$ می‌شناسیم. چون K روی فضایی اثر می‌کند که در آن $\psi(0) = \psi(L) = 0$ است، هرمیتی بوده و لذا K^2 هم هرمیتی خواهد بود. معادله (۴۲-۱۰-۱) شکل مجرد زیر را دارد

$$|\ddot{\psi}(t)\rangle = -K^2 |\psi(t)\rangle \quad (۴۳-۱۰-۱)$$

ما این مسئله مقدار-اولیه را به تبعیت از الگوریتم به کار رفته در مثال ۱-۸-۶ حل می‌کنیم:

- مرحله (۱): مسئله ویژه مقداری $-K^2$ را حل می‌کنیم.
- مرحله (۲): انتشارگر $U(t)$ را برحسب ویژه بردارها و ویژه مقادیر تشکیل می‌دهیم.
- مرحله (۳):

$$|\psi(t)\rangle = U(t) |\psi(0)\rangle \quad (۴۴-۱۰-۱)$$

معادله‌ای که باید حل شود عبارتست از

$$K^2 |\psi\rangle = k^2 |\psi\rangle \quad (۴۵-۱۰-۱)$$

در پایه X این معادله شکل زیر را دارد

$$-\frac{d^2}{dx^2} \psi_k(x) = k^2 \psi_k(x) \quad (۴۶-۱۰-۱)$$

جواب عمومی آن برابر است با

$$\psi_k(x) = A \cos kx + B \sin kx \quad (۴۷-۱۰-۱)$$

که A و B دلخواه هستند. اما همه این جواب‌ها در فضای هیلبرتی که ما در نظر می‌گیریم قرار نمی‌گیرند. ما فقط آنهایی را می‌خواهیم که در $x=0$ و $x=L$ صفر می‌شوند. در $x=0$ داریم:

$$\psi_k(0) = 0 = A \quad (۴۸-۱۰-۱) \text{ الف}$$

در حالی که در $x=L$,

$$0 = B \sin kL \quad (۴۸-۱۰-۱) \text{ ب}$$

اگر جواب بدیهی ($A=B=0$) نخواهیم باید در خواست کنیم که

$$\sin kL = 0, \quad kL = m\pi, \quad m = 1, 2, 3, \dots \quad (۴۹-۱۰-۱)$$

باشد. m های منفی را در نظر نمی‌گیریم چون به هیچ جواب مستقل خطی منجر نمی‌شوند. $[\sin(-x) = -\sin(x)]$ لذا ویژه بردارهای مجاز تشکیل مجموعه‌ای گسسته می‌دهند که با عدد صحیح m برچسب زده می‌شوند:

$$\psi_m(x) = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \quad (۵۰-۱۰-۱)$$

که $B = (2/L)^{1/2}$ انتخاب کرده‌ایم به طوری که

$$\int_0^L \psi_m(x) \psi_{m'}(x) dx = \delta_{mm'} \quad (۵۱-۱۰-۱)$$

به هر جواب برچسب زده شده با عدد صحیح m یک کت مجرد $|m\rangle$ وابسته می‌کنیم:

$$|m\rangle \xrightarrow{x \text{ basis}} (2/L)^{1/2} \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \quad (۵۲-۱۰-۱)$$

اگر $|\psi(t)\rangle$ را در پایه $|m\rangle$ ، که در آن K با ویژه مقادیر $(m\pi/L)^2$ قطری است، تصویر کنیم، مولفه‌های $\langle m|\psi(t)\rangle$ تابع معادلات واجفت زیر، در تشابه با معادله (۱-۸-۳۳)، خواهند بود:

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle m|\psi(t)\rangle = -\left(\frac{m^2\pi^2}{L^2}\right) \langle m|\psi(t)\rangle, \quad m = 1, 2, \dots \quad (۵۳-۱۰-۱)$$

این معادلات می‌توانند به راحتی حل شوند (تحت شرط سرعت‌های اولیه صفر) به طوری که

$$\langle m | \psi(t) \rangle = \langle m | \psi(0) \rangle \cos \left(\frac{m\pi t}{L} \right) \quad (54-10-1)$$

در نتیجه

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{m=1}^{\infty} |m\rangle \langle m | \psi(t) \rangle \quad (55-10-1)$$

$$= \sum_{m=1}^{\infty} |m\rangle \langle m | \psi(0) \rangle \cos \omega_m t, \quad \omega_m = \frac{m\pi}{L}$$

یا

$$U(t) = \sum_{m=1}^{\infty} |m\rangle \langle m | \cos \omega_m t, \quad \omega_m = \frac{m\pi}{L} \quad (56-10-1)$$

معادله انتشارگر

$$|\psi(t)\rangle = U(t) |\psi(0)\rangle$$

در پایه $|x\rangle$ به صورت زیر در می آید

$$\begin{aligned} \langle x | \psi(t) \rangle &= \psi(x, t) \\ &= \langle x | U(t) | \psi(0) \rangle \end{aligned} \quad (57-10-1)$$

$$= \int_0^L \langle x | U(t) | x' \rangle \langle x' | \psi(0) \rangle dx'$$

از معادله (56-10-1) نتیجه می شود که

$$\langle x | U(t) | x' \rangle = \sum_m \langle x | m \rangle \langle m | x' \rangle \cos \omega_m t \quad (58-10-1)$$

$$= \sum_m \left(\frac{2}{L} \right) \sin \left(\frac{m\pi x}{L} \right) \sin \left(\frac{m\pi x'}{L} \right) \cos \omega_m t$$

بنابراین با معلوم بودن هر $\psi(x', 0)$ ، می توانیم با حل انتگرال معادله (57-10-1) و با استفاده از $\langle x | U(t) | x' \rangle$ از معادله (58-10-1)، $\psi(x, t)$ را به دست آوریم. اگر زبان انتشارگر خیلی مجرد به نظر برسد می توانیم با معادله (55-10-1) شروع کنیم، با ضرب نقطه ای دو طرف در $\langle x |$ ،

$$\psi(x, t) = \sum_{m=1}^{\infty} \langle x | m \rangle \langle m | \psi(0) \rangle \cos \omega_m t \quad (59-10-1)$$

$$= \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{2}{L} \right)^{1/2} \sin \left(\frac{m\pi x}{L} \right) \cos \omega_m t \langle m | \psi(0) \rangle$$

با معلوم بودن $|\psi(0)\rangle$ باید مقدار زیر محاسبه شود

$$\langle m | \psi(0) \rangle = \left(\frac{2}{L} \right)^{1/2} \int_0^L \sin \left(\frac{m\pi x}{L} \right) \psi(x, 0) dx$$

معمولاً خواهیم دید که ضرایب $\langle m | \psi(0) \rangle$ با افزایش m به تندی کوچک می‌شوند به طوری که چند جمله پیشرو می‌تواند برای رسیدن به تقریبی خوب کافی باشد.

تمرین ۱-۱۰-۴: ریسمانی در $t=0$ به صورت زیر جابه‌جا شده است:

$$\begin{aligned} \psi(x, 0) &= \frac{2xh}{L}, & 0 \leq x \leq \frac{L}{2} \\ &= \frac{2h}{L}(L-x), & \frac{L}{2} \leq x \leq L \end{aligned}$$

نشان دهید که

$$\psi(x, t) = \sum_{m=1}^{\infty} \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \cos \omega_m t \cdot \left(\frac{8h}{\pi^2 m^2}\right) \sin\left(\frac{\pi m}{2}\right)$$

در این فصل فرمول‌بندی لاگرانژی و هامیلیونی مکانیک را با شروع از قوانین نیوتن ارائه می‌دهیم. این فرمول‌بندی‌های مجدد مکانیک ظرافت‌های زیادی به همراه داشته و موجب سادگی محاسبات می‌شوند. اما مقصود اصلی ما از آنها ریشه در این حقیقت دارد که آنها سکوه‌های پرش ایده‌آلی برای جهش به مکانیک کوانتومی هستند، گذر از فرمول‌بندی لاگرانژی به مکانیک کوانتومی توسط فاینمن از طریق فرمالیزم انتگرال مسیر صورت گرفت. خط سیر منتهی به مکانیک کوانتومی که ما بیشتر پیرو آن هستیم، فرمالیزم هامیلیونی را به‌عنوان نقطه شروع خود داشته و عمدتاً توسط شرودینگر، هایزنبرگ، دیراک و بورن ابداع شده است.

باید تأکید شود و بزودی هم روشن خواهد شد که هر سه فرمول‌بندی از مکانیک، از این نظر که حوزه‌های اعتبار و پیش‌بینی‌های یکسانی دارند، در اصل یک نظریه هستند. با وجود این، در یک زمینه مشخص، یکی از آنها می‌تواند به دلایل مفهومی، محاسباتی یا فقط زیبایی‌شناسی جالب‌تر از بقیه باشد.

۲-۱- اصل کمترین کنش و مکانیک لاگرانژی

فرض کنید یک ذره نقطه‌ای به جرم m را که در امتداد محور x تحت پتانسیل $V(x)$ حرکت می‌کند به‌عنوان اولین نمونه از طرح نیوتنی در نظر بگیریم. طبق قانون دوم نیوتن،

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{dV}{dx} \quad (1-1-2)$$

اگر متغیرهای حالت اولیه، $x(t_i)$ و سرعت $\dot{x}(t_i)$ ، معلوم باشند، می‌توانیم مسیر کلاسیکی بعدی $x_{cl}(t)$ را محاسبه کنیم. با استفاده از سرعت و شتاب اولیه (به‌دست آمده از معادله (۲-۱-۱)) مکان و سرعت را در لحظه $t_i + \Delta t$ محاسبه می‌کنیم. برای مثال

$$x_{cl}(t_i + \Delta t) = x(t_i) + \dot{x}(t_i)\Delta t$$

با داشتن متغیرهای حالت در زمان $t_i + \Delta t$ می‌توانیم فرآیند را مجدداً تکرار کنیم و به زمان $t_i + 2\Delta t$ برسیم و به همین ترتیب.

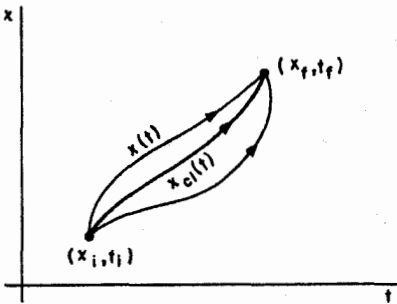
معادله حرکت نسبت به زمان از مرتبه دو بوده و دو گروه از داده‌ها، $x(t_i)$ و $\dot{x}(t_i)$ ، لازم هستند تا یک $x_{cl}(t)$ منحصر به فرد مشخص شود. روشی معادل برای انجام همین کار، و روشی که فرصت بهره‌گیری از آن را خواهیم داشت، مشخص کردن دو نقطه فضا-زمان (x_i, t_i) و (x_f, t_f) روی مسیر است.

طرح بالا به راحتی به بیش از یک ذره و بیش از یک بعد تعمیم می‌یابد. اگر از n مختصه دکارتی (x_1, x_2, \dots, x_n) برای مشخص کردن مکان‌های ذرات استفاده کنیم، پیکربندی فضایی دستگاه می‌تواند به صورت نقطه‌ای در فضای پیکربندی n بعدی تصور شود (عبارت «فضای پیکربندی» حتی در صورتی که n مختصه دکارتی هم نباشند به کار می‌رود) حرکت نقطه نماینده با رابطه زیر مشخص می‌شود:

$$m_j \frac{d^2 x_j}{dt^2} = - \frac{\partial V}{\partial x_j} \quad (2-1-2)$$

که m_j جرم ذره‌ای است که مکانش x_j است. این معادلات می‌توانند درست مانند قبل با انتگرال‌گیری مرحله به مرحله مسیر را مشخص کنند.

در فرمالیزم لاگرانژی، مسئله ذره منفرد در پتانسیل $V(x)$ به شیوه دیگری مطرح می‌شود: فرض کنید ذره در زمان‌های t_i و t_f به ترتیب در مکان‌های x_i و x_f باشد، چه چیزی مسیر واقعی $x_{cl}(t)$ را از مسیرهای دیگری که این نقاط را به هم وصل می‌کنند متمایز می‌کند؟ (شکل ۱-۲ را ببینید).



شکل ۱-۲: فرمالیزم لاگرانژی به دنبال این است که چه چیزی مسیر واقعی $x_{cl}(t)$ طی شده توسط ذره را از همه مسیرهای ممکن واصل نقاط (x_i, t_i) و (x_f, t_f) متمایز می‌کند.

بنابراین رویکرد لاگرانژی، علی‌رغم رویکرد موضعی روش نیوتونی که مایل است بدانند در بازه زمانی بی‌نهایت کوچک بعدی چه بر سر ذره می‌آید، از این جهت که تلاش می‌کند در یک حرکت کل مسیر $x_{cl}(t)$ را مشخص کند کلی و جامع است.

پاسخ به سوال مطرح شده در بالا در سه بخش ارائه می‌شود:

- (۱) - یک تابع \mathcal{L} ، به نام لاگرانژی، برابر با $\mathcal{L} = T - V$ ، تعریف کنید که T و V انرژی‌های جنبشی و پتانسیل ذره هستند. لذا $\mathcal{L} = \mathcal{L}(x, \dot{x}, t)$. وابستگی صریح به t در صورتی می‌تواند ظاهر شود که ذره در یک میدان وابسته به زمان خارجی باشد. اما فرض خواهیم کرد که این وابستگی به t وجود ندارد.
- (۲) - برای هر مسیر $x(t)$ متصل کننده (x_i, t_i) به (x_f, t_f) کنش $S[x(t)]$ را که به صورت زیر تعریف می‌شود، حساب کنید

$$S[x(t)] = \int_{t_i}^{t_f} \mathcal{L}(x, \dot{x}) dt \quad (3-1-2)$$

از براکت‌های مربعی برای شناسه δ استفاده می‌کنیم تا خاطر نشان کنند که تابع δ به مسیر کل یا تابع $x(t)$ ، و نه فقط به مقدار x در زمان t ، بستگی دارد. δ را تابعی می‌نامند تا نشان دهد که تابعی از یک تابع است. (۳) - مسیر کلاسیکی مسیری است که روی آن δ کمینه است (عملاً فقط لازم است فرینه باشد. هر چند که معمولاً به این شرط، اصل کمترین کنش اطلاق می‌شود).

اکنون ثابت خواهیم کرد که این اصل، قانون دوم نیوتن را مجدداً به دست می‌دهد.

مرحله اول پی بردن به این مطلب است که تابعی $\delta[x(t)]$ فقط تابعی از n متغیر است که $n \rightarrow \infty$. به عبارتی دیگر، تابع $x(t)$ فقط تعدادی نامتناهی از مقادیر $x(t_f), \dots, x(t), \dots, x(t_i)$ را مشخص می‌کند، یکی برای هر لحظه از زمان t در بازه $t_i \leq t \leq t_f$ ، و δ تابعی از این متغیرهاست. برای یافتن کمینه آن، فقط روش به کار رفته برای حالت n متناهی را تعمیم می‌دهیم. یادآوری می‌کنیم که اگر $f = f(x_1, \dots, x_n)$ باشد، کمینه X^0 بدین صورت مشخص می‌شود که اگر به اندازه مقدار کوچک η در هر جهت از آن دور شویم، تغییر مرتبه اول در f ، $\delta f^{(1)}$ ، صفر شود. یعنی اگر بسط تیلور را بنویسیم،

$$f(\mathbf{x}^0 + \boldsymbol{\eta}) = f(\mathbf{x}^0) + \sum_{i=1}^n \left. \frac{\partial f}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}^0} \eta_i + \text{higher-order terms in } \eta \quad (۴-۱-۲)$$

آنگاه

$$\delta f^{(1)} \equiv \sum_{i=1}^n \left. \frac{\partial f}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}^0} \eta_i = 0 \quad (۵-۱-۲)$$

از این شرط می‌توانیم عبارتی هم ارز و شاید آشناتر برای شرط کمینه شدن به دست آوریم: هر مشتق جزئی مرتبه اول در X^0 صفر شود. برای اثبات این، برای مثلاً $\partial f / \partial x_i$ فرض می‌کنیم که η در امتداد جهت i ام باشد. بنابراین

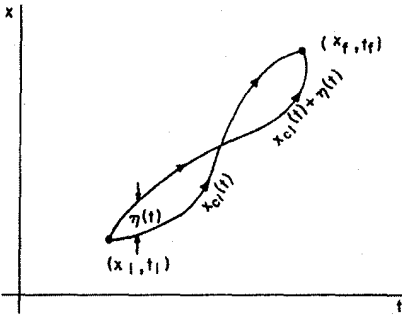
$$\left. \frac{\partial f}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}^0} = 0, \quad i = 1, \dots, n \quad (۶-۱-۲)$$

از این روش برای کنش δ استفاده می‌کنیم. فرض کنید $x_{cl}(t)$ مسیر کمترین کنش بوده و $x_{cl}(t) + \eta(t)$ مسیری «نزدیک» باشد (شکل ۲-۲ را ببینید). این شرط که باید همه مسیرها در t_1 و t_f بر هم منطبق باشند بدین معنی است که

$$\eta(t_i) = \eta(t_f) = 0 \quad (۷-۱-۲)$$

اکنون می‌توان نوشت:

$$\begin{aligned}
 S[x_{cl}(t) + \eta(t)] &= \int_{t_i}^{t_f} \mathcal{L}(x_{cl}(t) + \eta(t); \dot{x}_{cl}(t) + \dot{\eta}(t)) dt \\
 &= \int_{t_i}^{t_f} \left[\mathcal{L}(x_{cl}(t), \dot{x}_{cl}(t)) + \left. \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x(t)} \right|_{x_{cl}} \cdot \eta(t) \right. \\
 &\quad \left. + \left. \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}(t)} \right|_{x_{cl}} \cdot \dot{\eta}(t) + \dots \right] dt \\
 &= S[x_{cl}(t)] + \delta S^{(1)} + \text{higher-order terms}
 \end{aligned}$$



شکل ۲-۲: اگر $x_{cl}(t)$ را کمینه کند، آنگاه اگر به هر مسیر نزدیک $x_{cl}(t) + \eta(t)$ برویم، $\delta S^{(1)} = 0$ است. در مقایسه با مورد متغیر منتهای، $\delta S^{(1)} = 0$ قرار می‌دهیم:

$$0 = \delta S^{(1)} = \int_{t_i}^{t_f} \left[\left. \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x(t)} \right|_{x_{cl}} \cdot \eta(t) + \left. \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}(t)} \right|_{x_{cl}} \cdot \dot{\eta}(t) \right] dt$$

اگر از جمله دوم به صورت جزء به جزء انتگرال بگیریم به شکل زیر در می‌آید

$$\left. \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}(t)} \right|_{x_{cl}} \cdot \eta(t) \Big|_{t_i}^{t_f} - \int_{t_i}^{t_f} \left[\frac{d}{dt} \left. \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}(t)} \right|_{x_{cl}} \right] \cdot \eta(t) dt$$

جمله اول به خاطر معادله (۲-۱-۷) صفر می‌شود، به طوری که

$$0 = \delta S^{(1)} = \int_{t_i}^{t_f} \left[\left. \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x(t)} - \frac{d}{dt} \left. \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}(t)} \right|_{x_{cl}} \right] \cdot \eta(t) dt \quad (۲-۱-۸)$$

توجه کنید که شرط $\delta S^{(1)} = 0$ بیان می‌کند که S فرینه می‌شود و نه لزوماً کمینه، اما ما به جایگزینی کمینه به جای فرینه ادامه خواهیم داد. این معادله مانسته معادله (۲-۱-۵) است: متغیر گسسته η_i به وسیله $\eta(t)$ جایگزین شده، جمع روی i با انتگرال روی t و $\partial f / \partial x_i$ با عبارت زیر جایگزین شده است:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x(t)} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}(t)}$$

چون \mathcal{L} (یا به طور معادل S) هم وابستگی صریح و هم وابستگی ضمنی (از طریق جملات \dot{x}) به $x(t)$ دارد، دو جمله در اینجا وجود دارد که نقش $\partial f / \partial x_i$ را بازی می کنند. از آنجا که $\eta(t)$ دلخواه است می توانیم مانسته معادله (۲-۱-۶) را به دست آوریم:

$$\left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x(t)} - \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}(t)} \right] \right\}_{x_{cl}(t)} = 0 \quad \text{for } t_i \leq t \leq t_f \quad (۲-۱-۹)$$

برای به دست آوردن این نتیجه برای یک زمان خاص t_0 ، یک $\eta(t)$ انتخاب می کنیم که در همه جا به غیر از یک ناحیه بی نهایت کوچک حول t_0 صفر می شود.

معادله (۲-۱-۹)، معادله مشهور اوایلر - لاگرانژ است. اگر در آن، $\mathcal{L} = T - V$ ، $T = \frac{1}{2} m \dot{x}^2$ و $V = V(x)$ قرار دهیم، به معادلات زیر می رسم

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} = \frac{\partial T}{\partial \dot{x}} = m \dot{x}$$

و

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} = - \frac{\partial V}{\partial x}$$

به طوری که معادله اوایلر - لاگرانژ به صورت

$$\frac{d}{dt} (m \dot{x}) = - \frac{\partial V}{\partial x}$$

می شود که درست همان قانون دوم نیوتن، معادله (۲-۱-۱)، است.

اگر دستگاهی متشکل از n مختصه دکارتی را در نظر بگیریم، همین رویه نتیجه می دهد که

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_i} \right) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_i} \quad (i = 1, \dots, n) \quad (۲-۱-۱۰)$$

حال،

$$T = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n m_i (\dot{x}_i)^2$$

و

$$V = V(x_1, \dots, x_n)$$

به طوری که معادله (۲-۱-۱۰) به صورت زیر در می آید

$$\frac{d}{dt} (m_i \dot{x}_i) = - \frac{\partial V}{\partial x_i}$$

که با معادله (۲-۱-۲) یکسان است. بنابراین اصل کمینه (کنش)، در صورتی که $\mathcal{L} = T - V$ اختیار شود، به درستی مکانیک نیوتونی را به دست می دهد.

توجه کنید که در اثبات بالا فرض کرده ایم که V مستقل از سرعت باشد. یک نیروی مهم، که نیروی میدان مغناطیسی \mathbf{B} روی بار متحرک است، با این قید کنار گذاشته می شود، چون $\mathbf{F}_B = q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ است که q بار ذره و $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{r}}$ سرعت آن است. به زودی نشان خواهیم داد که این نیرو هم می تواند در فرمالیزم لاگرانژی گنجانده شود، بدین معنی که می توانیم یک \mathcal{L} بیابیم که وقتی از معادله (۲-۱-۲) استفاده می شود قانون صحیح نیرو را به دست می دهد اما این نیرو دیگر به شکل $T - V$ نیست. لذا می توان خود را از قید نماد گذاری $\mathcal{L} = T - V$ رها کرده و \mathcal{L} را به صورت تابع $\mathcal{L} = (x_i, \dot{x}_i)$ در نظر گرفت که وقتی در معادلات اوایلر - لاگرانژ قرار گیرد دینامیک نیوتنی صحیح را به دست می دهد. به خواننده ای که به استفاده از مکانیک لاگرانژی اعتراض می کند، به خاطر اینکه کل کاری که در پایان انجام می دهد به دست دادن قانون نیروی نیوتن است، برخی از جاذبه های مهم آنرا در کنار منحصر بودنش به مکانیک کوانتومی به وسیله مثال زیر معرفی می کنیم.

(۱) - در طرح لاگرانژی، باید صرفاً یک اسکالر \mathcal{L} تشکیل دهیم و همه معادلات حرکت را با مشتق گیری ساده به دست آوریم. این باید متفاوت با طرح نیوتنی باشد که با بردارها در ارتباط بوده و لذا پیچیده تر است.

(۲) - معادلات اوایلر - لاگرانژ (۲-۱-۲)، اگر به جای n مختصه دکارتی x_1, \dots, x_n ، از هر مجموعه دلخواه از n مختصه مستقل q_1, q_2, \dots, q_n استفاده کنیم، شکل یکسانی دارند. برای به خاطر سپردن این مطلب، معادله (۲-۱-۲) را به صورت زیر بازنویسی می کنیم

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \right) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} \quad (11-1-2)$$

این مطلب را می توان یا با روش ناشیانه، با تغییر متغیر در معادله (۲-۱-۲) و مشاهده اینکه معادله یکسانی به دست می آید که در آن x_i به وسیله q_i جایگزین شده است، ثابت کرد، یا می توان فقط استنتاج شرط کمترین کنش را مرور کرد و دید که به هیچ وجه فرض نشد که مختصات دکارتی باشد. البته در مرحله بعد، دز نشان دادن اینکه معادلات اوایلر - لاگرانژ هم ارز با معادلات نیوتن هستند، مختصه های دکارتی به کار رفتند، چون در این مختصات، انرژی جنبشی T و معادلات نیوتن اشکال ساده ای دارند. اما همین که به نظر می رسد اصل کمترین کنش، دینامیک صحیح را تولید می کند، می توانیم همه چیز را در مورد قوانین نیوتن فراموش کرده و معادله (۲-۱-۲) را به عنوان معادلات حرکت به کار ببریم. آنچه تاکید می شود این است که این معادلات، که شرط کمترین کنش را بیان می کنند، تحت تبدیل مختصات دلخواه شکل ناوردا دارند. این ناوردایی در شکل باید متفاوت با معادله نیوتنی (۲-۱-۲) باشد، که از قبل فرض می کند x_i ها دکارتی هستند. اگر x_i ها را با مجموعه غیر دکارتی دیگری از q_i ها عوض کنیم، معادله (۲-۱-۲) شکل متفاوتی خواهد داشت (مثال ۲-۱-۱ را در پایان این بخش ببینید).

اگر کمیت

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \quad (12-1-2)$$

به عنوان تکانه کانونیک (بنیادی) مزدوج q_i و کمیت

$$F_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} \quad (13-1-2)$$

به عنوان نیروی تعمیم یافته مزدوج q_i تعریف شوند، معادله (۱۱-۱-۲) می تواند به صورتی نوشته شود که شبیه قانون دوم نیوتن شود. اگر چه آهنگ تغییر تکانه کانونیک برابر نیروی تعمیم یافته است، باید به خاطر داشت که نه p_i همیشه تکانه خطی (جرم ضربدر سرعت یا تکانه mv) است و نه F_i همیشه نیرو (با ابعاد جرم ضربدر شتاب) است. برای مثال اگر q_i زاویه θ باشد، p_i تکانه زاویه‌ای و F_i گشتاور خواهد بود.

(۳) - قوانین پایستگی در این فرمالیزم به راحتی به دست می آیند. فرض کنید لاگرانژی به سرعت معین \dot{q}_i بستگی دارد اما به مختصه متناظر q_i بستگی ندارد، در این صورت این مختصه q_i ، مختصه چرخه‌ای نامیده می شود. نتیجه اینکه p_i متناظر پایسته است:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \right) = \frac{dp_i}{dt} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = 0 \quad (14-1-2)$$

اگر چه قانون دوم نیوتن، معادله (۲-۱-۲)، هم بیان می کند که اگر مختصه دکارتی x_i چرخه‌ای (دوره‌ای یا حذف شدنی) باشد، تکانه متناظرش $m_i \dot{x}_i$ پایسته می ماند، ولی معادله (۱۴-۱-۲) کلی تر است. برای مثال پتانسیل $V(x, y)$ را در دو بعد در نظر بگیرید که فقط به $\rho = (x^2 + y^2)^{\frac{1}{2}}$ بستگی داشته و به زاویه قطبی ϕ بستگی ندارد به طوری که $V(\rho, \phi) = V(\rho)$ است. مشاهده می شود که ϕ یک مختصه چرخه‌ای است چنانکه T فقط به ϕ بستگی دارد (مثال ۲-۱-۱ را در زیر ببینید) در نتیجه $\partial \mathcal{L} / \partial \phi = p_\phi$ پایسته است. در مقابل، هیچ قانون پایستگی از معادلات دکارتی (۲-۱-۲) به دست نمی آید چون نه x چرخه‌ای است و نه y . اگر قوانین نیوتن را در مختصات قطبی بنویسیم تا از $\partial V / \partial \dot{\phi} = 0$ بهره بگیریم، معادلات متناظر به دلیل جملات گریز از مرکز و کوریولیس پیچیده می شوند. این فرمالیزم لاگرانژی است که اجازه می دهد مختصاتی انتخاب کنیم که به بهترین شکل، تقارن پتانسیل را منعکس کند بدون اینکه شکل ساده معادلات تغییر کند.

مثال ۲-۱-۱: اکنون مطالب بالا را با یک مثال نشان می دهیم. ذره‌ای را در نظر بگیرید که در یک صفحه حرکت می کند. لاگرانژی در مختصات دکارتی به صورت زیر است.

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) - V(x, y) \\ &= \frac{1}{2}m\mathbf{v} \cdot \mathbf{v} - V(x, y) \end{aligned} \quad (15-1-2)$$

که \mathbf{v} سرعت ذره، $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{r}}$ ، است و \mathbf{r} بردار مکان آن است. معادلات متناظر حرکت عبارتند از

$$m\ddot{x} = -\frac{\partial V}{\partial x} \quad (16-1-2)$$

$$m\ddot{y} = -\frac{\partial V}{\partial y} \quad (17-1-2)$$

که با قوانین نیوتن یکسان هستند. اگر کسی بخواهد همین قوانین نیوتن را برحسب مختصات قطبی ρ و ϕ به دست آورد، برای به دست آوردن جملات گریز از مرکز و کوریولیس به آنالیز برداری نیاز دارد:

$$m\ddot{\rho} = -\frac{\partial V}{\partial \rho} + m\rho(\dot{\phi})^2 \quad (18-1-2)$$

$$m\ddot{\phi} = -\frac{1}{\rho^2} \frac{\partial V}{\partial \phi} - \frac{2m\dot{\rho}\dot{\phi}}{\rho} \quad (19-1-2)$$

به تفاوت شکل بین معادلات (۱۶-۱-۲) و (۱۷-۱-۲) از یک طرف و معادلات (۱۸-۱-۲) و (۱۹-۱-۲) از طرف دیگر توجه کنید.

در طرح لاگرانژی فقط باید \mathcal{L} را در مختصات قطبی مجدداً حساب کنیم. از شکل ۲-۳ واضح است که مسافت پیموده شده توسط ذره در زمان Δt برابر است با

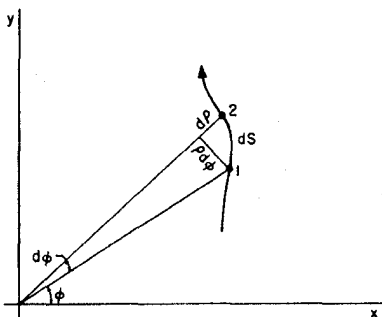
$$dS = [(d\rho)^2 + (\rho d\phi)^2]^{1/2}$$

به طوری که بزرگی سرعت برابر است با

$$v = \frac{dS}{dt} = [(\dot{\rho})^2 + \rho^2(\dot{\phi})^2]^{1/2}$$

و

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m(\dot{\rho}^2 + \rho^2\dot{\phi}^2) - V(\rho, \phi) \quad (20-1-2)$$



شکل ۲-۳: نقاط (۱) و (۲) مکان‌های ذره در زمان‌های به فاصله Δt هستند.

(توجه کنید که در این مختصات، T نه تنها شامل سرعت‌های $\dot{\rho}$ و $\dot{\phi}$ است بلکه مختصه ρ را هم شامل می‌شود. این وضعیت در مختصات دکارتی اتفاق نمی‌افتد.) معادلات حرکت به دست آمده از این \mathcal{L} به صورت زیرند

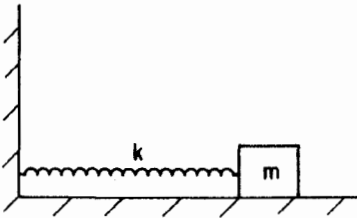
$$\frac{d}{dt}(m\dot{\rho}) = -\frac{\partial V}{\partial \rho} + m\rho\dot{\phi}^2 \quad (21-1-2)$$

$$\frac{d}{dt}(m\rho^2\dot{\phi}) = -\frac{\partial V}{\partial \phi} \quad (22-1-2)$$

که با معادلات (۱۸-۱-۲) و (۱۹-۱-۲) یکی هستند. در معادله (۲۲-۱-۲) تکانه کانونیک $p_\phi = m\rho^2\dot{\phi}$ ، تکانه زاویه‌ای، و نیروی تعمیم یافته $-\partial V/\partial \phi$ ، گشتاور است که هر دو در امتداد محور z هستند. توجه کنید که نیروهای گریز از مرکز و کوریولیس چطور به آسانی به دست می‌آیند.

سرانجام، اگر $V(\rho, \phi) = V(\rho)$ باشد، پایدگی p_ϕ در معادله (۲۲-۱-۲) واضح است. پایدگی p_ϕ بعد از کمی عملیات از روی معادله (۱۹-۱-۲) به دست می‌آید و در معادلات (۱۶-۱-۲) و (۱۷-۱-۲) عملاً نامشهود است. هم کمیت پایسته و هم قانون پایدگی آن به طور طبیعی از طرح لاگرانژی به دست می‌آیند.

تمرین ۱-۱-۲: دستگاه زیر، موسوم به نوسانگر هماهنگ، را در نظر بگیرید. جسم دارای جرم m بوده و روی سطح بدون اصطکاکی قرار دارد. فنر دارای ثابت نیروی k است.



لاگرانژی را نوشته و معادلات حرکت را به دست آورید.

تمرین ۲-۱-۲: همین کار را برای مسئله جرم جفت شده که در انتهای بخش ۸-۱ بحث شد انجام دهید. معادلات حرکت را با معادلات (۲۴-۸-۱) و (۲۵-۸-۱) مقایسه کنید.

تمرین ۳-۱-۲: ذره‌ای به جرم m تحت پتانسیل $V(r, \theta, \phi) = V(r)$ در سه بعد حرکت می‌کند. لاگرانژی \mathcal{L} آنرا نوشته و معادلات حرکت را به دست آورید.

۲-۲- لاگرانژی الکترومغناطیسی^۱

یادآوری می‌کنیم که نیروی وارد بر بار q مربوط به میدان الکتریکی \mathbf{E} و میدان مغناطیسی \mathbf{B} از رابطه زیر به دست می‌آید

$$\mathbf{F} = q\left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{B}\right) \quad (1-2-2)$$

که $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{r}}$ سرعت ذره است. چون نیرو، وابسته به سرعت است باید مسئله را بدون توجه به بحث قبلی، که به نیروهای مستقل از سرعت محدود بود، از نو تحلیل کنیم.

اکنون ثابت می‌شود که اگر از لاگرانژی زیر استفاده کنیم

$$\mathcal{L}_{e.m} = \frac{1}{2} m \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} - q\phi + \frac{q}{c} \mathbf{v} \cdot \mathbf{A} \quad (۲-۲-۲)$$

قوانین نیروی الکترومغناطیسی صحیح را به دست می‌آوریم. در معادله (۲-۲-۲)، c سرعت نور، ϕ و \mathbf{A} پتانسیل‌های نرده‌ای و برداری مربوط به \mathbf{E} و \mathbf{B} هستند:

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (۳-۲-۲)$$

و

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (۴-۲-۲)$$

معادلات اوایلر - لاگرانژ متناظر با $\mathcal{L}_{e.m}$ عبارتند از

$$\frac{d}{dt} \left(m\dot{x}_i + \frac{q}{c} A_i \right) = -q \frac{\partial \phi}{\partial x_i} + \frac{q}{c} \frac{\partial (\mathbf{v} \cdot \mathbf{A})}{\partial x_i}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (۵-۲-۲)$$

با ترکیب سه معادله بالا در یک معادله برداری،

$$\frac{d}{dt} \left(m\mathbf{v} + \frac{q\mathbf{A}}{c} \right) = -q\nabla\phi + \frac{q}{c} \nabla(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) \quad (۶-۲-۲)$$

تکانه کانونیک به صورت زیر است

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} + \frac{q\mathbf{A}}{c} \quad (۷-۲-۲)$$

با بازنویسی معادله (۶-۲-۲) به معادله زیر می‌رسیم

$$\frac{d}{dt} (m\mathbf{v}) = -q\nabla\phi + \frac{q}{c} \left[\frac{d\mathbf{A}}{dt} + \nabla(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) \right] \quad (۸-۲-۲)$$

مشتق کلی $d\mathbf{A}/dt$ دو قسمت دارد: یک وابستگی صریح به زمان $\partial A/\partial t$ ، با اضافه یک وابستگی ضمنی $(\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{A}$ که این واقعیت را نشان می‌دهد که برای ذره متحرک، تغییر (وردش) فضایی A به عنوان تغییری زمانی ظاهر خواهد شد. حال معادله (۸-۲-۲) به صورت زیر می‌شود

$$\frac{d}{dt} (m\mathbf{v}) = -q\nabla\phi - \frac{q}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \frac{q}{c} [\nabla(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) - (\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{A}] \quad (۹-۲-۲)$$

که با اتکاء به اتحاد زیر با معادله (۱-۲-۲) یکسان است

$$\mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{A}) = \nabla(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) - (\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{A}$$

توجه کنید که $\mathcal{L}_{e.m}$ به شکل $T - V$ نیست، چون کمیت $U = q\phi - (q/c)\mathbf{v}\cdot\mathbf{A}$ (که گاهی پتانسیل تعمیم یافته نامیده می شود) نمی تواند به عنوان انرژی پتانسیل ذره باردار تعبیر شود. قبل از همه، نیروی مربوط به میدان الکترومغناطیسی وابسته به زمان در حالت کلی پایستار نیست و تابع کاری مستقل از مسیر به دست نمی آید تا نقش پتانسیل را ایفا کند. حتی در موارد خاص، وقتی نیرو پایستار است، فقط $q\phi$ می تواند به عنوان انرژی پتانسیل الکتریکی تعبیر شود. جمله $[-q(\mathbf{v}\cdot\mathbf{A})/c]$ انرژی پتانسیل مغناطیسی نیست چون نیروی مغناطیسی $F_B = q(\mathbf{v}\times\mathbf{B})/c$ هرگز کاری انجام نمی دهد و همیشه بر سرعت عمود است. از این رو برای گنجانیدن نیروهایی نظیر نیروهای الکترومغناطیسی باید \mathcal{L} را مجدداً تعریف کنیم تا آن تابع $\mathcal{L}(q, \dot{q}, t)$ باشد که وقتی در معادلات اوایلر - لاگرانژ قرار گیرد، دینامیک صحیح را به دست بدهد. قاعده $\mathcal{L} = T - V$ فقط نکته ای مفید برای حالت نیروهای پایستار می باشد.

۲-۳- مسئله دو- جسمی

در اینجا دسته ای از مسائل را بحث می کنیم که نقشی محوری در فیزیک کلاسیک ایفا می کنند: مسائلی که دو جرم m_1 و m_2 نیروهای مساوی و مخالف بر یکدیگر وارد می کنند. از آنجا که این ذرات به یکدیگر، و نه به چیز خارجی، عکس العمل نشان می دهند، پتانسیل بین آنها فقط به مکان نسبی $r = r_1 - r_2$ ، و نه به هر یک از مکان های \mathbf{r}_1 و \mathbf{r}_2 ، وابستگی دارد. اما $V(r_1, r_2) = V(r_1 - r_2)$ به نوبه خود بدین معنی است که سه مختصه چرخه ای وجود دارد چون V فقط به سه متغیر به جای شش متغیر ممکن بستگی دارد (در مختصات دکارتی، چون T فقط تابعی از سرعتهاست، مختصه غایب در V هم چرخه ای است). تکانه های پایسته متناظر، سه مولفه تکانه کل خواهند بود که در غیاب نیروهای خارجی پایسته اند. برای نشان دادن این ویژگی ها، بهتر است به جای \mathbf{r}_1 و \mathbf{r}_2 از

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \quad (1-3-2)$$

و

$$\mathbf{r}_{CM} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2} \quad (2-3-2)$$

استفاده کنیم که \mathbf{r}_{CM} مختصه مرکز جرم (CM) نامیده می شود، با وارون کردن معادلات (۱-۳-۲) و (۲-۳-۲) (شکل ۴-۲ را ببینید)،

$$\mathbf{r}_{CM} = \mathbf{r}_{CM} + \frac{m_2\mathbf{r}}{m_1 + m_2} \quad (3-3-2)$$

$$\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_{CM} - \frac{m_1\mathbf{r}}{m_1 + m_2} \quad (4-3-2)$$

اگر لاگرانژی

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m_1 |\dot{\mathbf{r}}_1|^2 + \frac{1}{2} m_2 |\dot{\mathbf{r}}_2|^2 - V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (5-3-2)$$

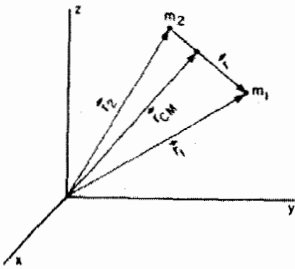
را بر حسب \mathbf{r} و \mathbf{r}_{CM} بازنویسی کنیم،

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} (m_1 + m_2) |\dot{\mathbf{r}}_{CM}|^2 + \frac{1}{2} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} |\dot{\mathbf{r}}|^2 - V(\mathbf{r}) \quad (6-3-2)$$

ویژگی‌های عمده معادله (۶-۳-۲) به شرح زیرند:

(۱) - مسئله دو ذره متقابلاً بر همکش کننده به مسئله دو ذره ساختگی (پنداری) تبدیل شده است که با یکدیگر بر همکش نمی‌کنند. به عبارت دیگر، معادلات حرکت برای \mathbf{r} شامل \mathbf{r}_{CM} نیستند و بالعکس، چون

$$\mathcal{L}(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}; \mathbf{r}_{CM}, \dot{\mathbf{r}}_{CM}) = \mathcal{L}(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) + \mathcal{L}(\mathbf{r}_{CM}, \dot{\mathbf{r}}_{CM})$$



شکل ۲-۴: رابطه بین \mathbf{r} و \mathbf{r}_{CM} و \mathbf{r}_2 و \mathbf{r}_1

(۲) - ذره ساختگی اول، مرکز جرم با جرم $M = m_1 + m_2$ است. از آنجا که \mathbf{r}_{CM} متغیری چرخه‌ای است، تکانه $\mathbf{P}_{CM} = M \dot{\mathbf{r}}_{CM}$ (که تکانه کل است) همانند انتظار پایسته است. چون حرکت مرکز جرم مورد توجه نیست معمولاً نادیده گرفته می‌شود. یک روش برای انجام این کار رفتن به چارچوب مرکز جرم است که در آن $\dot{\mathbf{r}}_{CM} = 0$ است به طوری که مرکز جرم کاملاً از لاگرانژی حذف می‌شود.

(۳) - ذره ساختگی دوم دارای جرم $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ (موسوم به جرم کاهش یافته) و تکانه $\mathbf{p} = \mu \dot{\mathbf{r}}$ بوده و تحت پتانسیل $V(\mathbf{r})$ حرکت می‌کند و باید این مسئله یک جسمی حل شود.

اگر کسی بخواهد می‌تواند به راحتی در پایان با استفاده از معادلات (۱-۳-۲) و (۲-۳-۲) به مختصات \mathbf{r}_1 و \mathbf{r}_2 برگردد.

تمرین ۲-۳-۱: با تغییر متغیر، معادله (۶-۳-۲) را از (۵-۳-۲) به دست آورید.

۲-۴- ذره تا چه اندازه با هوش است؟

به نظر می‌رسد فرمالیزم لاگرانژی پیش‌بینی‌های زیادی برای ذره انجام می‌دهد: یک ذره واقع در (x_i, t_i) ، منتهی شوند به (x_f, t_f) ، از قبل ترتیب محاسبه کنش برای هر مسیر ممکن واصل این نقاط را داده و مسیری

با کمترین کنش انتخاب می‌کند. اما این البته یک چشم‌بندی است. ذره نیازی به دانستن تمام مسیرش از قبل ندارد بلکه فقط لازم است در هر لحظه از زمان از معادلات اوپلر - لاگرانژ پیروی کند تا کنش را کمینه کند. این به نوبه خود به معنی تبعیت از قانون نیوتن است که بیان می‌کند: ذره مجبور است پتانسیل را در مجاورت خود بسنجد (از آن نمونه‌گیری کند) و در جهت بیشترین تغییر شتاب بگیرد.

ارزشی که برای ذره قائل هستیم با یادگیری مکانیک کوانتومی بیشتر رو به زوال خواهد گذاشت. خواهیم دید که جدا از هر نوع استراتژی و راهکاری که در پیش می‌گیریم، ذره، تا حدی، از (x_i, t_i) به (x_f, t_f) در امتداد همه مسیرهای ممکن می‌رود و به هر مسیر وزن مساوی می‌دهد! اینکه چطور علی‌رغم این، ذرات کلاسیکی به نظر می‌رسد از $x_{cl}(t)$ پیروی می‌کنند، سوال جالبی است که وقتی پاسخ داده خواهد شد که به فرمالیزم انتگرال مسیر در مکانیک کوانتومی برسیم.

۲-۵- فرمالیزم هامیلتونی

در فرمالیزم لاگرانژی، متغیرهای مستقل، مختصه‌های q_i و سرعت‌های \dot{q}_i هستند. تکانه‌ها، کمیت‌های فرعی تعریف شده طبق رابطه زیرند

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \quad (1-5-2)$$

در فرمالیزم هامیلتونی، نقش‌های q و p را عوض می‌کنیم: لاگرانژی $\mathcal{L}(q, \dot{q})$ را با هامیلتونی $\mathcal{H}(q, p)$ جایگزین می‌کنیم که معادلات حرکت را به دست می‌دهد و q یک کمیت فرعی می‌شود

$$\dot{q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \quad (2-5-2)$$

بدین وسیله تعویض نقش q و p ها کامل می‌شود.

رویه‌ای استاندارد برای ایجاد چنین تغییری وجود دارد که به تبدیل لژاندر معروف است و به وسیله مثال ساده زیر نشان داده می‌شود. فرض کنید یک تابع $f(x)$ داریم که

$$u(x) = \frac{df}{dx} \quad (3-5-2)$$

فرض کنید امکان معکوس کردن $u(x)$ برای به دست آوردن $x(u)$ وجود داشته باشد [برای مثال اگر $u(x) = x^3$ باشد، $x(u) = u^{\frac{1}{3}}$ و غیره]. اگر تابعی به صورت زیر تعریف کنیم

$$g(u) = x(u)u - f(x(u)) \quad (4-5-2)$$

آنگاه

$$\frac{dg}{du} = \frac{dx}{du} \cdot u + x(u) - \frac{df}{dx} \cdot \frac{dx}{du} = x(u) \quad (5-5-2)$$

یعنی، در رفتن از f به g (یا برعکس) نقش‌های x و u را عوض می‌کنیم. معادله (۵۴-۲) تبدیل لژاندر نامیده می‌شود و f و g تبدیل لژاندر یکدیگر هستند.

به‌طور کلی‌تر، اگر $f = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ باشد، می‌توان یک زیر مجموعه $\{x_i, i=1 \text{ تا } j\}$ را به نفع مشتقات جزئی $u_i = \partial f / \partial x_i$ از طریق تبدیل زیر حذف کرد

$$g(u_1, \dots, u_j, x_{j+1}, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^j u_i x_i - f(x_1, \dots, x_n) \quad (6-5-2)$$

در سمت راست معادله (۶-۵-۲) دیده می‌شود که همه x_i ها که باید حذف شوند به‌صورت توابعی از متغیرهای مجاز در g نوشته شده‌اند. به راحتی می‌توان ثابت کرد که

$$\frac{\partial g}{\partial u_i} = x_i \quad (7-5-2)$$

که در گرفتن مشتق جزئی بالا، همه متغیرهای دیگر را در g ثابت می‌گیریم. با کاربرد این روش‌ها برای مسئله مورد بحث، تعریف می‌کنیم:

$$\mathcal{H}(q, p) = \sum_{i=1}^n p_i \dot{q}_i - \mathcal{L}(q, \dot{q}) \quad (8-5-2)$$

که \dot{q} ها باید به‌صورت توابعی از q ها و p ها نوشته شوند. این معکوس‌سازی معمولاً ساده است چون \mathcal{L} یک چند جمله‌ای درجه ۲ از \dot{q} ها، و $p_i = \partial \mathcal{L} / \partial \dot{q}_i$ یک چند جمله‌ای درجه ۱ از \dot{q} ها است (مثلاً معادله (۷-۲-۲)). اکنون ملاحظه کنید که

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} = \frac{\partial}{\partial p_i} \left(\sum_j p_j \dot{q}_j - \mathcal{L} \right) \quad (9-5-2)$$

$$= \dot{q}_i + \sum_j p_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial p_i} - \sum_j \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j} \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial p_i}$$

$$= \dot{q}_i \quad \left(\text{since } p_j = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j} \right) \quad (10-5-2)$$

[جملات $(\partial \mathcal{L} / \partial q_j)(\partial q_j / \partial p_i)$ وجود ندارند چون q در $\partial \mathcal{H} / \partial p_i$ ثابت نگه‌داشته می‌شود، یعنی p و q متغیرهای مستقل هستند]. به‌طور مشابه،

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} = \sum_j p_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} - \sum_j \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j} \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_i} = - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} \quad (11-5-2)$$

اکنون با جاگذاری \dot{p}_i به جای $(\partial \mathcal{L} / \partial q_i)$ معادلات کانونیک هامیلتون را به‌دست می‌آوریم:

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} = \dot{q}_i, \quad \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} = -\dot{p}_i \quad (۱۲-۵-۲)$$

توجه کنید که برای دستگامی با n درجه آزادی، $2n$ معادله مرتبه اول (از زمان) داریم. با معلوم بودن داده‌های مقدار اولیه، $(q_i(0), p_i(0))$ و $i = 1, \dots, n$ ، می‌توانیم از معادلات انتگرال گرفته و $(q_i(t), p_i(t))$ را به دست آوریم.

جدول ۱-۲: مقایسه فرمالیزم‌های لاگرانژی و هامیلتونی را نشان می‌دهد.

فرمالیزم هامیلتونی	فرمالیزم لاگرانژی
حالت یک سیستم با n درجه آزادی به وسیله n مختصه و n تکانه $(q_1, \dots, q_n; p_1, \dots, p_n)$ ، یا به طور خلاصه با (q, p) ، توصیف می‌شود.	حالت یک سیستم با n درجه آزادی به وسیله n مختصه (q_1, \dots, q_n) و n سرعت $(\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n)$ ، یا در نمادگذاری فشرده‌تر با (q, \dot{q}) ، توصیف می‌شود.
حالت سیستم می‌تواند به وسیله یک نقطه در فضای فاز $2n$ بعدی با مختصه‌های $(q_1, \dots, q_n; p_1, \dots, p_n)$ نمایش داده شود.	حالت سیستم می‌تواند به وسیله یک نقطه متحرک با سرعتی معین در فضای پیکربندی n بعدی نمایش داده شود.
$2n$ مختصه و تکانه از $2n$ معادله درجه اول پیروی می‌کنند.	n مختصه مذکور طبق n معادله درجه ۲ تحول می‌یابند.
برای یک \mathcal{H} معین فقط یک مسیر از یک نقطه معین در فضای فاز می‌گذرد.	برای یک \mathcal{L} معین، ممکن است، بسته به \dot{q} ، چندین مسیر از یک نقطه معین در فضای پیکربندی عبور کند.

اکنون درست همان‌طور که \mathcal{L} می‌تواند در صورت پایستار بودن نیرو به صورت $T - V$ تعبیر شود، برای \mathcal{H} هم در این حالت چنین تعبیر ساده‌ای وجود دارد. جمع $\sum_i p_i \dot{q}_i$ را در نظر بگیرید. فرض کنید از مختصات دکارتی استفاده کنیم، که برحسب آن،

$$T = \sum_{i=1}^n \frac{1}{2} m_i \dot{x}_i^2$$

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_i} = \frac{\partial T}{\partial \dot{x}_i} = m_i \dot{x}_i$$

و

$$\sum_{i=1}^n p_i \dot{x}_i = \sum_{i=1}^n m_i \dot{x}_i^2 = 2T \quad (۱۳-۵-۲)$$

به طوری که انرژی کل،

$$\mathcal{H} = \sum_i p_i \dot{x}_i - \mathcal{L} = T + V \quad (۱۴-۵-۲)$$

توجه کنید که اگر چه در طی این روش از مختصات دکارتی استفاده کرده‌ایم، اما معادله حاصل (۲-۵-۱۴) رابطه‌ای بین اعداد است و لذا مستقل از مختصات است.

تمرین ۲-۵-۱: نشان دهید که اگر $T = \sum_i \sum_j T_{ij}(q) \dot{q}_i \dot{q}_j$ باشد که \dot{q} ها سرعت‌های تعمیم یافته‌اند، آنگاه $\sum_i p_i \dot{q}_i = 2T$.

روش هامیلتونی به وسیله مثال ساده نوسانگر هماهنگ توضیح داده می‌شود که برای آن

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}kx^2$$

تکانه کانونیک برابر است با

$$p = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}$$

معکوس کردن این رابطه برای به دست آوردن \dot{x} به صورت تابعی از p ساده است:

$$\dot{x} = p/m$$

و نتیجه اینکه

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(x, p) &= T + V = \frac{1}{2}m[\dot{x}(p)]^2 + \frac{1}{2}kx^2 \\ &= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 \end{aligned} \quad (2-5-15)$$

معادلات حرکت عبارتند از

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} = \dot{q} \rightarrow \frac{p}{m} = \dot{x} \quad (2-5-16)$$

$$-\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} = \dot{p} \rightarrow -kx = \dot{p} \quad (2-5-17)$$

این معادلات می‌توانند با معلوم بودن p و q اولیه نسبت به زمان انتگرال گیری شوند. اما اگر معادله درجه دوم آشنا را بخواهیم، از معادله (۲-۵-۱۶) نسبت به زمان مشتق گرفته و آنرا در معادله (۲-۵-۱۷) قرار می‌دهیم:

$$m\ddot{x} + kx = 0$$

تمرین ۲-۵-۲: با استفاده از پایستگی انرژی نشان دهید که مسیرها در فضای فاز برای نوسانگر، بیضی‌هایی به شکل $b^2 = 2mE$ و $a^2 = 2E/k$ هستند که $(x/a)^2 + (p/b)^2 = 1$.

تمرین ۲-۵-۳: تمرین ۲-۱-۲ را با استفاده از فرمالیزم هامیلتونی حل کنید.

تمرین ۲-۵-۴: نشان دهید که \mathcal{H} متناظر با \mathcal{L} در معادله (۲-۳-۶)،

ترتیب تکانه‌های مزدوج (همزاد) \mathbf{r} و \mathbf{r}_{CM} هستند. $\mathcal{H} = |\mathbf{p}_{CM}|^2 / 2M + |\mathbf{p}|^2 / 2\mu + V(\mathbf{r})$ است که M جرم کل، μ جرم کاهش یافته، P و P_{CM} به

۲-۶- نیروی الکترومغناطیسی در طرح هامیلتونی

گذر از $\mathcal{L}_{e.m}$ به تبدیل لژاندر آن $\mathcal{H}_{e.m}$ به هیچ وجه به ماهیت وابسته به سرعت نیرو حساس نیست. اگر $\mathcal{L}_{e.m}$ قوانین نیروی صحیح را به دست داده، هم چنین خواهد بود و مضامین دینامیکی هر دو طرح یکسان هستند. در مقابل، عدم وابستگی نیرو به سرعت، در نشان دادن مقدار عددی \mathcal{H} به صورت $T + V$ ، انرژی کل، مفروض بود. بنابراین تحلیل را برای حالت الکترومغناطیسی تکرار می کنیم. چنان که،

$$\mathcal{L}_{e.m} = \frac{1}{2} m \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} - q\phi + \frac{q}{c} \mathbf{v} \cdot \mathbf{A}$$

و

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

داریم،

$$\mathcal{H}_{e.m} = \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} - \mathcal{L}_{e.m}$$

$$= m\mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + q \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}}{c} - \frac{1}{2} m\mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + q\phi - \frac{q\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}}{c} \quad (1-6-2)$$

$$= \frac{1}{2} m\mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + q\phi = T + q\phi$$

اکنون یک موضوع در دسر ساز در مورد معادله (۱-۶-۲) وجود دارد: به نظر می رسد پتانسیل برداری \mathbf{A} در طی کار حذف شده است. $\mathcal{H}_{e.m}$ چطور می تواند دینامیک صحیح را بدون اینکه بدانیم \mathbf{A} چه چیزی است، به دست دهد؟ پاسخ این است که \mathcal{H} بیش از فقط $T + q\phi$ است؛ \mathcal{H} برابر آن $T + q\phi$ است که بر حسب متغیرهای صحیح، به ویژه بر حسب \mathbf{p} و نه \mathbf{v} ، نوشته شده است. با تغییر متغیرها داریم:

$$\mathcal{H}_{e.m} = \frac{|\mathbf{p} - q\mathbf{A}/c|^2}{2m} + q\phi \quad (2-6-2)$$

که در آن \mathbf{A} به خوبی خود را نشان می دهد.

۲-۷- مختصه های چرخه ای، گروه های پواسون و تبدیلات کانونیک

مختصه های چرخه ای در اینجا هم درست مثل مورد لاگرانژی تعریف شده و همان اهمیت را دارند: اگر مختصه q_i در \mathcal{H} نباشد، آنگاه

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} = 0 \quad (1-7-2)$$

۱- توجه کنید که در این بحث، q بار بوده و مختصه نیست. مختصه (دکارتی) \mathbf{r} در توابع $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ و $\phi(\mathbf{r}, t)$ مستتر است.

حال، کمیت‌های دیگری نظیر انرژی وجود خواهند داشت که می‌توانند علاوه بر تکانه کانونیک پایسته بمانند.^۱ روش خوبی برای مشخص کردن این کمیت‌ها در فرمالیزم هامیلتونی وجود دارد. فرض کنید $\omega(p, q)$ تابعی از متغیرهای حالت، بدون هیچ وابستگی صریح به t ، باشد. تغییر زمانی آن با رابطه زیر داده می‌شود

$$\begin{aligned} \frac{d\omega}{dt} &= \sum_i \left(\frac{\partial \omega}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \omega}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) \\ &= \sum_i \left(\frac{\partial \omega}{\partial q_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} - \frac{\partial \omega}{\partial p_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \right) \quad (۲-۷-۲) \\ &\equiv \{\omega, \mathcal{H}\} \end{aligned}$$

که گروه پواسون (PB) بین دو متغیر $\omega(p, q)$ و $\lambda(p, q)$ را به صورت زیر تعریف کرده‌ایم

$$\{\omega, \lambda\} \equiv \sum_i \left(\frac{\partial \omega}{\partial q_i} \frac{\partial \lambda}{\partial p_i} - \frac{\partial \omega}{\partial p_i} \frac{\partial \lambda}{\partial q_i} \right) \quad (۳-۷-۲)$$

از معادله (۲-۷-۲) نتیجه می‌شود که هر متغیری که گروه پواسون آن با \mathcal{H} صفر شود نسبت به زمان ثابت است، یعنی پایسته است. بویژه خود \mathcal{H} ، اگر هیچ وابستگی صریح به t نداشته باشد، یک ثابت حرکت است (به عنوان انرژی کل).

تمرین ۲-۷-۱: نشان دهید که

$$\{\omega, \lambda\} = -\{\lambda, \omega\}$$

$$\{\omega, \lambda + \sigma\} = \{\omega, \lambda\} + \{\omega, \sigma\}$$

$$\{\omega, \lambda \sigma\} = \{\omega, \lambda\} \sigma + \lambda \{\omega, \sigma\}$$

به تشابه بین بالا و معادلات (۱-۵-۱) و (۱۱-۵-۱) برای جابه‌جاگرها توجه کنید. گروه پواسون‌های بین q و p ها از اهمیت اساسی برخوردارند. مشاهده می‌شود که

$$\{q_i, q_j\} = \{p_i, p_j\} = 0 \quad (\text{الف-۴-۷-۲})$$

$$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij} \quad (\text{ب-۴-۷-۲})$$

چون (q_1, \dots, p_n) متغیرهای مستقل هستند $(\partial q_i / \partial p_k = 0)$ ، $\partial q_i / \partial q_j = \delta_{ij}$ ، و غیره. معادلات هامیلتون می‌توانند برحسب گروه پواسون به صورت زیر نوشته شوند

$$\dot{q}_i = \{q_i, \mathcal{H}\} \quad (\text{الف-۵-۷-۲})$$

۱- مثال دیگر، بقای $L_z = x p_y - y p_x$ است وقتی که $V(x, y) = V(x^2 + y^2)$. در اینجا هیچ مختصه چرخه‌ای وجود ندارد. البته اگر در مختصات قطبی کار کنیم، $V(\rho, \phi) = V(\rho)$ ، و $p_\phi = m \rho^2 \dot{\phi} = L_z$ پایسته است چون تکانه مزدوج مختصه چرخه‌ای ϕ است.

$$\dot{p}_i = \{p_i, \mathcal{H}\} \quad (۲-۷-۵ ب)$$

که در معادله (۲-۷-۲)، p_i یا $q_i = \omega$ قرار گرفته است.

تمرین ۲-۷-۲: (الف) - معادلات (۲-۷-۴) و (۲-۷-۵) را ثابت کنید.

(ب) - مسئله $\mathcal{H} = p_x^2 + p_y^2 + ax^2 + by^2$ را در دو بعد در نظر بگیرید. نشان دهید که اگر $a = b$ باشد، $\{L_z, \mathcal{H}\}$ باید صفر شود. با محاسبه صریح ثابت کنید.

تبدیلات کانونیک

دیدیم که معادلات اوپلر- لاگرانژ تحت یک تغییر مختصات دلخواه^۱ در فضای پیکربندی دارای شکل ناوردا هستند

$$q_i \rightarrow \bar{q}_i(q_1, \dots, q_n), \quad i = 1, \dots, n \quad (۲-۷-۶ الف)$$

یا به طور خلاصه تر

$$q \rightarrow \bar{q}(q) \quad (۲-۷-۶ ب)$$

پاسخ سرعت‌ها به این تبدیل، تابع معادله (۲-۷-۶ الف) است:

$$\dot{q}_i = \dot{\bar{q}}_i = \frac{d\bar{q}_i}{dt} = \sum_j \left(\frac{\partial \bar{q}_i}{\partial q_j} \right) \dot{q}_j \quad (۲-۷-۷)$$

پاسخ تکانه‌های کانونیک می‌تواند با بازنویسی \mathcal{L} برحسب $(\bar{q}, \dot{\bar{q}})$ و مشتق‌گیری نسبت به $\dot{\bar{q}}$ به دست آید:

$$\bar{p}_i = \frac{\partial \mathcal{L}(\bar{q}, \dot{\bar{q}})}{\partial \dot{\bar{q}}_i} \quad (۲-۷-۸)$$

نتیجه اینکه (تمرین ۲-۷-۸):

$$\bar{p}_i = \sum_j \left(\frac{\partial q_j}{\partial \bar{q}_i} \right) p_j \quad (۲-۷-۹)$$

توجه کنید که اگر چه \mathcal{L} در معادله (۲-۷-۸) وارد می‌شود، ولی در معادله (۲-۷-۹)، که \bar{p} را به متغیرهای قدیمی مرتبط می‌کند، ظاهر نمی‌شود. این همان‌طور است که باید باشد، زیرا انتظار داریم که پاسخ تکانه‌ها به یک تبدیل مختصه (مثلاً چرخش) سوالی کاملاً سینماتیکی است.

۱- فرض می‌کنیم تبدیل معکوس‌پذیر است لذا می‌توانیم q را برحسب \bar{q} بنویسیم: $q = q(\bar{q})$. همین‌طور تبدیل ممکن است به صورت صریح به زمان بستگی داشته باشد $[\bar{q} = q(q, t)]$ اما در اینجا چنین چیزی در نظر نمی‌گیریم.

منظور از $\mathcal{L}(\bar{q}, \dot{\bar{q}})$ لاگرانژی نوشته شده برحسب \bar{q} و $\dot{\bar{q}}$ است. لذا مقدار عددی لاگرانژی تحت $(q, \dot{q}) \rightarrow (\bar{q}, \dot{\bar{q}})$ بدون تغییر است؛ چون (q, \dot{q}) و $(\bar{q}, \dot{\bar{q}})$ به حالت فیزیکی یکسانی دلالت دارند. اما شکل تابعی لاگرانژی تغییر کرده و لذا عملاً باید از دو نماد متفاوت $\mathcal{L}(q, \dot{q})$ و $\mathcal{L}(\bar{q}, \dot{\bar{q}})$ استفاده کنیم. با وجود این، از قرارداد نمایش یک متغیر دینامیکی معین، نظیر لاگرانژی، به وسیله یک نماد ثابت در همه دستگاه‌های مختصات کماکان استفاده می‌کنیم.

ناوردایی معادلات اوایلر - لاگرانژ تحت $(q, \dot{q}) \rightarrow (\bar{q}, \dot{\bar{q}})$ اشاره به ناوردایی معادله هامیلتون تحت تبدیل $(q, p) \rightarrow (\bar{q}, \bar{p})$ دارد، یعنی تابع معادلات زیرند

$$\dot{q}_i = \partial \mathcal{H} / \partial \bar{p}_i, \quad \bar{p}_i = -(\partial \mathcal{H} / \partial \dot{\bar{q}}_i) \quad (10-7-2)$$

که $\mathcal{H} = \mathcal{H}(\bar{q}, \bar{p})$ هامیلتونی نوشته شده برحسب \bar{q} و \bar{p} است. دلیل آن ساده است: با $\mathcal{L}(\bar{q}, \dot{\bar{q}})$ شروع کرده، یک تبدیل لژاندر انجام داده و از این حقیقت که \bar{q} از معادلات اوایلر - لاگرانژ پیروی می‌کند استفاده می‌کنیم.

تبدیل زیر یک تبدیل نقطه‌ای نامیده می‌شود:

$$q_i \rightarrow \bar{q}_i(q_1, \dots, q_n), \quad \bar{p}_i = \sum_j \left(\frac{\partial q_j}{\partial \dot{\bar{q}}_i} \right) p_j \quad (11-7-2)$$

اگر فرمالیزم هامیلتونی را به‌عنوان چیزی که از طرح لاگرانژی به‌دست آمده و در فضای n بعدی بیکربندی فرمول‌بندی شده است تلقی کنیم، این تبدیل عمومی‌ترین تبدیلی است (مستقل از زمان) که شکل معادلات هامیلتون را حفظ می‌کند (و ما می‌توانیم تصور کنیم). از طرف دیگر اگر به اصل فرمالیزم هامیلتونی بنگریم، پشت پرده آن فضای فاز $2n$ بعدی است. در این فضا، تبدیل نقطه‌ای بیش از حد محدود کننده است. می‌توان تبدیلی عمومی‌تر از مختصه‌های فضای فاز انتظار داشت:

$$q \rightarrow \bar{q}(q, p) \quad (12-7-2)$$

$$p \rightarrow \bar{p}(q, p)$$

اگر چه هر مجموعه از $2n$ مختصه مستقل (\bar{q}, \bar{p}) ظاهراً برای توصیف حالت دستگاه کافی هستند، اما همه آنها شکل کانونیک معادلات هامیلتون را حفظ نخواهند کرد (این شبیه این است که بگوییم اگر چه قوانین نیوتن می‌توانند برحسب هر مجموعه کامل از مختصه‌ها نوشته شوند، اما شکل ساده $m\dot{q}_i = -\partial V / \partial q_i$ فقط در صورتی معتبر است که q_i ها دکارتی باشند). اما اگر (\bar{q}, \bar{p}) از معادلات کانونیک (10-7-2) پیروی می‌کنند می‌گوییم آنها مختصه‌های کانونیک هستند و معادله (12-7-2) یک تبدیل کانونیک را تعریف می‌کند. هر مجموعه از مختصه‌های (q_1, \dots, q_n) و تکانه‌های متناظر تولید شده در فرمالیزم لاگرانژی $(p_i = \partial \mathcal{L} / \partial \dot{q}_i)$ مختصه‌های کانونیک هستند. با معلوم بودن یک مجموعه (q, p) ، می‌توانیم مجموعه دیگر (\bar{q}, \bar{p}) را با تبدیل نقطه‌ای، که حالت خاصی از تبدیل کانونیک است، به‌دست آوریم. اما این کار همه امکان‌ها را پوشش نمی‌دهد (تمام نمی‌کند). اکنون این سوال مطرح می‌شود: با داشتن مجموعه جدیدی از

مختصه‌ها $(\bar{q}(q, p), \bar{p}(q, p))$ ، در مورد کانونیک بودن آنها چه می‌توان گفت [با فرض کانونیک بودن (q, p) ؟] برای هر $\omega(x, p)$ می‌توان نوشت

$$\dot{\omega} = \{\omega, \mathcal{H}\} = \sum_i \left(\frac{\partial \omega}{\partial q_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} - \frac{\partial \omega}{\partial p_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \right) \quad (۱۳-۷-۲)$$

که با کاربرد این برای $\bar{q}_i(q, p)$ نتیجه می‌شود که

$$\dot{\bar{q}}_i = \sum_i \left(\frac{\partial \bar{q}_i}{\partial q_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} - \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial p_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \right) \quad (۱۴-۷-۲)$$

اگر \mathcal{H} را تابعی از (\bar{q}, \bar{p}) تصور کرده و از قاعده زنجیره‌ای استفاده کنیم،

$$\frac{\partial \mathcal{H}(q, p)}{\partial p_i} = \frac{\partial \mathcal{H}(\bar{q}, \bar{p})}{\partial p_i} = \sum_k \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \bar{q}_k} \frac{\partial \bar{q}_k}{\partial p_i} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \bar{p}_k} \frac{\partial \bar{p}_k}{\partial p_i} \right) \quad (الف-۱۵-۷-۲)$$

و

$$\frac{\partial \mathcal{H}(q, p)}{\partial q_i} = \frac{\partial \mathcal{H}(\bar{q}, \bar{p})}{\partial q_i} = \sum_k \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \bar{q}_k} \frac{\partial \bar{q}_k}{\partial q_i} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \bar{p}_k} \frac{\partial \bar{p}_k}{\partial q_i} \right) \quad (ب-۱۵-۷-۲)$$

با قرار دادن همه اینها در معادله (۱۴-۷-۲)، بعد از دسته‌بندی مجدد جملات به عبارت زیر می‌رسیم،

$$\dot{\bar{q}}_j = \sum_k \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \bar{q}_k} \{\bar{q}_j, \bar{q}_k\} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \bar{p}_k} \{\bar{q}_j, \bar{p}_k\} \right) \quad (۱۶-۷-۲)$$

به‌طور مشابه ثابت می‌شود که

$$\dot{\bar{p}}_j = \sum_k \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \bar{q}_k} \{\bar{p}_j, \bar{q}_k\} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \bar{p}_k} \{\bar{p}_j, \bar{p}_k\} \right) \quad (۱۷-۷-۲)$$

اگر قرار باشد معادلات (۱۶-۷-۲) و (۱۷-۷-۲) برای هر $\mathcal{H}(q, p)$ به معادلات (۱۰-۷-۲) تقلیل یابند باید داشته باشیم

$$\{\bar{q}_j, \bar{q}_k\} = 0 = \{\bar{p}_j, \bar{p}_k\} \quad (۱۸-۷-۲)$$

$$\{\bar{q}_j, \bar{p}_k\} = \delta_{jk}$$

اینها شروطی هستند که باید به‌وسیله متغیرهای جدید، در صورت کانونیک بودن آنها، برآورده شوند. توجه کنید که این قیود (شروط) هیچ ارتباطی با شکل تابعی خاص \mathcal{H} ندارند: این معادلات تعریف‌کننده متغیرهای کانونیک، کاملاً سینماتیکی هستند و برای هر $\mathcal{H}(q, p)$ درستند.

تمرین ۲-۷-۳: مراحل انجام نشده در رسیدن به معادله (۱۸-۷-۲) را با شروع از معادله (۱۴-۷-۲) انجام دهید.

تمرین ۲-۷-۴: ثابت کنید که تغییر به چارچوب چرخیده زیر یک تبدیل کانونیک است

$$\bar{x} = x \cos \theta - y \sin \theta$$

$$\bar{y} = x \sin \theta + y \cos \theta$$

$$\bar{p}_x = p_x \cos \theta - p_y \sin \theta$$

$$\bar{p}_y = p_x \sin \theta + p_y \cos \theta$$

تمرین ۲-۷-۵: نشان دهید که متغیرهای قطبی $\rho = (x^2 + y^2)^{1/2}$ و $\phi = \tan(y/x)$ کانونیک هستند (\hat{e}_ρ بردار یکه در جهت شعاعی است)

$$p_\rho = \hat{e}_\rho \cdot \mathbf{p} = \frac{x p_x - y p_y}{(x^2 + y^2)^{1/2}}, \quad p_\phi = x p_y - y p_x (= l_z)$$

تمرین ۲-۷-۶: ثابت کنید که تغییر از متغیرهای \mathbf{r}_1 و \mathbf{r}_2 و \mathbf{P}_1 و \mathbf{P}_2 به \mathbf{r}_{CM} و \mathbf{P}_{CM} و \mathbf{r} و \mathbf{P} تبدیلی کانونیک است (تمرین ۲-۵-۴ را ببینید).

تمرین ۲-۷-۷: ثابت کنید که

$$\bar{q} = \ln(q^{-1} \sin p)$$

$$\bar{p} = q \cot p$$

تبدیلی کانونیک است.

تمرین ۲-۷-۸: در اینجا می‌خواهیم معادله (۲-۷-۹) را، که تبدیل تکانه‌ها تحت یک تبدیل مختصه در فضای پیکربندی را به دست می‌دهد، به دست آوریم:

$$q_i \rightarrow \bar{q}_i(q_1, \dots, q_n)$$

الف- نشان دهید که اگر معادله بالا را معکوس کنیم تا $q = q(\bar{q})$ به دست آید، می‌توانیم شکل دیگری از معادله (۲-۷-۷) را به دست آوریم:

$$\dot{q}_i = \sum_j \frac{\partial q_i}{\partial \bar{q}_j} \dot{\bar{q}}_j$$

ب- از روی الف) نشان دهید که

$$\left(\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial \dot{\bar{q}}_j} \right)_{\bar{q}} = \frac{\partial q_i}{\partial \bar{q}_j}$$

ج- اکنون

$$\bar{p}_i = \left[\frac{\partial \mathcal{L}(\bar{q}, \dot{\bar{q}})}{\partial \dot{\bar{q}}_i} \right]_{\bar{q}} = \left[\frac{\partial \mathcal{L}(q, \dot{q})}{\partial \dot{q}_i} \right]_{\bar{q}}$$

را محاسبه کنید. از قاعده زنجیره‌ای و همین‌طور این حقیقت که q برابر $q(\bar{q})$ است و نه $q(\bar{q}, \dot{\bar{q}})$ برای به دست آوردن معادله (۲-۷-۹) استفاده کنید.

د- با محاسبه گروه پواسون در معادله (۲-۷-۱۸) ثابت کنید که تبدیل نقطه‌ای، کانونیک است.

اگر (q, p) و (\bar{q}, \bar{p}) هر دو کانونیک باشند باید جایگاه یکسانی برای آنها قائل باشیم چون معادلات هامیلتون وقتی برحسب هر یک از دو مجموعه نوشته شوند ظاهر یکسانی دارند. اکنون که گروه پواسون دو متغیر ω و σ را برحسب (q, p) به صورت زیر تعریف کرده ایم

$$\{\omega, \sigma\} = \sum_i \left(\frac{\partial \omega}{\partial q_i} \frac{\partial \sigma}{\partial p_i} - \frac{\partial \omega}{\partial p_i} \frac{\partial \sigma}{\partial q_i} \right) \equiv \{\omega, \sigma\}_{q,p}$$

آیا نباید برای هر زوج کانونیک (\bar{q}, \bar{p}) هم گروه پواسونی، $\{\omega, \sigma\}_{\bar{q}, \bar{p}}$ ، تعریف کنیم؟ خوشبختانه ثابت می شود که گروه پواسون ها تحت تبدیلات کانونیک ناوردا هستند:

$$\{\omega, \sigma\}_{q,p} = \{\omega, \sigma\}_{\bar{q}, \bar{p}} \quad (19-7-2)$$

(بدیهی است که ω و σ در سمت راست به صورت تابعی از \bar{q} و \bar{p} نوشته می شوند). یک راه برای اثبات این نتیجه محاسبه تمام مشتقات است. در اینجا روش دیگری به کار می بریم، ابتدا فرض کنید $\sigma = \mathcal{H}$ باشد. می دانیم که چون (q, p) از معادلات کانونیک پیروی می کنند،

$$\dot{\omega} = \{\omega, \mathcal{H}\}_{q,p}$$

تمرین ۲-۷-۹: معادله (۱۹-۷-۲) را با محاسبه مستقیم تحقیق کنید. از قاعده زنجیره ای استفاده کرده و از مشتقات q و p به مشتقات \bar{q} و \bar{p} بروید. جملاتی را که نشانگر گروه پواسون \bar{q} و \bar{p} هستند دسته بندی کنید.

اما در این صورت (\bar{q}, \bar{p}) هم از معادلات کانونیک پیروی می کنند، لذا

$$\dot{\omega} = \{\omega, \mathcal{H}\}_{\bar{q}, \bar{p}}$$

حال ω یک کمیت فیزیکی نظیر انرژی جنبشی یا مولفه تکانه زاویه ای در یک جهت مشخص است، لذا آهنگ تغییر آن مستقل از مختصه های به کار رفته فضای فاز است، یعنی $\dot{\omega}$ ، $\dot{\omega}$ است، چه $\omega = \omega(q, p)$ باشد و چه $\omega = \omega(\bar{q}, \bar{p})$. بنابراین

$$\{\omega, \mathcal{H}\}_{q,p} = \{\omega, \mathcal{H}\}_{\bar{q}, \bar{p}} \quad (20-7-2)$$

با اثبات نتیجه برای چیزی که به نظر حالت خاص، $\sigma = \mathcal{H}$ ، می رسد، دست به ترفند زیر می زنیم. توجه کنید که در مشتق گیری در هیچ جایی فرض نکردیم که \mathcal{H} تابعی خاص از q و p باشد. در واقع، دینامیک هامیلتونی، به عنوان یک طرح ریاضی سازگار، هیچ قیدی روی \mathcal{H} قرار نمی دهد. این شرط و الزام فیزیکی که تحول زمانی ایجاد شده توسط \mathcal{H} با آنچه عملاً مشاهده می شود منطبق باشد است که مقید می کند که \mathcal{H} برابر $T + V$ شود. بنابراین \mathcal{H} می توانست در بحث قبلی و در نتیجه معادله (۲۰-۷-۲) (که فقط رابطه ای بین مشتقات جزئی است) هر تابعی باشد. اگر بدانیم که \mathcal{H} در این بحث $T + V$ نیست بلکه هر تابع دلخواهی، مثلاً σ است، به نتیجه مورد نظر می رسیم.

تبدیلات اکتیو قبلاً تبدیل

$$\bar{q} = \bar{q}(q, p)$$

$$\bar{p} = \bar{p}(q, p)$$

را به عنوان تبدیل پسو در نظر گرفتیم: هم (q, p) و هم (\bar{q}, \bar{p}) به نقطه یکسانی در فضای فاز توصیف شده در دو دستگاه مختصات مختلف دلالت دارند. تحت تبدیل $(q, p) \rightarrow (\bar{q}, \bar{p})$ ، مقادیر عددی همه متغیرهای دینامیکی بدون تغییر می‌مانند (چون در مورد یک حالت فیزیکی بحث می‌کنیم)، اما شکل تابعی آنها تغییر می‌کند. برای نمونه، تحت تبدیل از مختصات دکارتی به کروی،

$$\omega(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2 \rightarrow \omega(r, \theta, \phi) = r^2$$

همان‌طور که قبلاً ذکر شد برای یک متغیر معین از یک علامت استفاده می‌کنیم حتی اگر وابستگی تابعی آن به مختصه‌ها با تغییر دادن مختصات تغییر نکند.

اکنون دسته محدودی از تبدیلات، موسوم به تبدیلات منظم، را در نظر بگیرید که گستره (دامنه) متغیرها را ثابت نگه می‌دارند: (q, p) و (\bar{q}, \bar{p}) دامنه یکسانی دارند. تبدیل از یک مختصات دکارتی به یک مختصات انتقال یافته یا چرخیده منظم است (هر متغیر هم قبل و هم بعد از تبدیل از $-\infty$ تا $+\infty$ تغییر می‌کند)، در حالی که تبدیل به مختصات کروی (که بعضی مختصه‌ها غیر منفی و بعضی مقید به 2π و غیره هستند) منظم نیست.

یک تبدیل منظم $(q, p) \rightarrow (\bar{q}, \bar{p})$ امکان تعبیری دیگر به ما می‌دهد: به جای اینکه (\bar{q}, \bar{p}) را به عنوان همان نقطه فضای فاز در دستگاه مختصات جدید تصور کنیم، می‌توانیم آنرا به صورت نقطه‌ای جدید در همان دستگاه مختصات تصور کنیم. این متناظر با یک تبدیل اکتیو است که حالت دستگاه را تغییر می‌دهد. تحت این تغییر، مقدار عددی هر متغیر دینامیکی $\omega(q, p)$ به کلی تغییر خواهد کرد: $\omega(q, p) \neq \omega(\bar{q}, \bar{p})$ ، اگر چه وابستگی تابعی آن تغییر نخواهد کرد: $\omega(\bar{q}, \bar{p})$ همان تابع $\omega(q, p)$ است که در نقطه جدید $(q = \bar{q}, p = \bar{p})$ محاسبه شده است.

گفته می‌شود که ω تحت تبدیل منظم $(q, p) \rightarrow (\bar{q}, \bar{p})$ ناورد است در صورتی که

$$\omega(q, p) = \omega(\bar{q}, \bar{p}) \quad (21-7-2)$$

(این معادله فقط در صورتی مفهوم دارد که در مورد تبدیلات اکتیو سخن بگوییم، زیرا برای هر ω تحت تبدیل پسو صحیح است).

چه تبدیل $(q, p) \rightarrow (\bar{q}, \bar{p})$ را به عنوان تبدیل اکتیو تلقی کنیم و چه پسو، این تبدیل در صورتی کانونیک نامیده می‌شود که (\bar{q}, \bar{p}) از معادله (21-7-2) پیروی کنند. همان‌طور که خواهیم دید، فقط تبدیلات کانونیک منظم اهمیت فیزیکی دارند.

۲-۸- تقارن‌ها و پیامدهای آنها

بحث خود را با این مطلب آغاز می‌کنیم که کلمه «تقارن» در کاربردهای روزانه به چه معنی است. گفته می‌شود که کره شیئی بسیار متقارن است زیرا از هر جهت به آن نگاه شود به یک شکل به نظر می‌رسد. یا به‌طور معادل، یک کره قبل و بعد از اینکه تحت یک چرخش حول هر محور گذرنده از مرکزش قرار می‌گیرد یکسان به نظر می‌رسد. یک استوانه هم دارای تقارن است اما نه آنقدر زیاد: چرخش باید حول محور آن صورت گیرد. پس به‌طور کلی، تقارن هر شیء به ناوردایی آن تحت برخی تبدیلات، که در مثال ما چرخش‌ها هستند، اشاره دارد.

تقارن، همان‌طور که با مثال شش ضلعی و دایره نشان داده می‌شود می‌تواند گسسته یا پیوسته باشد. در حالی که زوایای چرخشی که شش ضلعی را بدون تغییر می‌گذارند یک مجموعه گسسته تشکیل می‌دهند، یعنی مضرب‌های 60° ، مجموعه متناظر برای دایره یک پیوستار است. می‌توانیم تقارن پیوسته دایره را به روش دیگری مشخص کنیم. تبدیل همانی را در نظر بگیرید که هیچ کاری انجام نمی‌دهد یعنی در این مثال به اندازه 0° می‌چرخاند. این تبدیل هم دایره و هم شش ضلعی را ناوردا نگه می‌دارد. اکنون یک تبدیل بی‌نهایت کوچک را در نظر بگیرید که کاملاً «نزدیک» به تبدیل همانی است. در مثال ما، این تبدیل، چرخش به اندازه زاویه بسیار کوچک ε است. چرخش بی‌نهایت کوچک، دایره را ناوردا نگه می‌دارد اما شش ضلعی را نه. بنابراین دایره به‌وسیله ناوردایی اش تحت چرخش‌های بی‌نهایت کوچک مشخص می‌شود. با مشخص شدن این ویژگی، ناوردایی آن تحت چرخش‌های متناهی به‌دست می‌آید، چون هر چرخش متناهی می‌تواند به‌صورت چرخش‌های بی‌نهایت کوچک متوالی (که هر یک از آنها دایره را ناوردا نگه می‌دارد) تلقی شود. همچنین ممکن است توابعی را با چند متغیر در نظر بگیریم که از این نظر متقارن هستند که اگر مقادیر متغیرها را به شکلی خاص تغییر دهیم، مقدار تابع ناوردا باشد. برای مثال تابع زیر را در نظر بگیرید

$$f(x, y) = x^2 + y^2$$

اگر تغییر زیر را در شناسه‌ها انجام دهیم،

$$x \rightarrow \bar{x} = x \cos \theta - y \sin \theta \quad (2-8-1)$$

$$y \rightarrow \bar{y} = x \sin \theta + y \cos \theta$$

می‌بینیم که f ناوردا است و می‌گوییم f تحت تبدیل بالا متقارن است. در اصطلاح معرفی شده در قبل، تبدیل مورد نظر پیوسته است: نسخه بی‌نهایت کوچک آن عبارتست از

$$x \rightarrow \bar{x} = x \cos \varepsilon - y \sin \varepsilon = x - y\varepsilon \quad (2-8-2)$$

$$y \rightarrow \bar{y} = x \sin \varepsilon + y \cos \varepsilon = x\varepsilon + y \quad (\text{to order } \varepsilon)$$

اکنون تابع $\mathcal{H}(q, p)$ را در نظر بگیرید. دو پیامد دینامیکی مهم وجود دارد که از ناوردایی آن تحت تبدیلات کانونیک منظم به‌دست می‌آیند.

۱. اگر \mathcal{H} تحت تبدیل بی‌نهایت کوچک زیر (که می‌توانید ثابت کنید کانونیک است، تمرین

$$q_i \rightarrow \bar{q}_i = q_i + \varepsilon \frac{\partial g}{\partial p_i} \equiv q_i + \delta q_i \quad (۳-۸-۲)$$

$$p_i \rightarrow \bar{p}_i = p_i - \varepsilon \frac{\partial g}{\partial q_i} \equiv p_i + \delta p_i$$

که $g(q, p)$ هر متغیر دینامیکی است، آنگاه g پایسته است یعنی یک ثابت حرکت است. g مولد تبدیل نامیده می‌شود.

۲- اگر \mathcal{H} تحت تبدیل کانونیک منظم، اما نه لزوماً بی‌نهایت کوچک، $(q, p) \rightarrow (\bar{q}, \bar{p})$ ناوردا باشد و اگر $(q(t), p(t))$ جوابی برای معادلات حرکت باشد، مسیر تبدیل شده (انتقال یافته، چرخیده، غیره) $(\bar{q}(t), \bar{p}(t))$ هم چنین خواهد بود. اکنون این دو نتیجه را تحلیل می‌کنیم.

نتیجه ۱: ابتدا ثابت می‌کنیم که g واقعاً پایسته است در صورتی که \mathcal{H} تحت تبدیلی که آن تولید می‌کند ناوردا باشد. اگر تا مرتبه اول از ε کار کنیم و تغییر \mathcal{H} تحت تغییرشناسه‌هایش را برابر صفر قرار دهیم خواهیم داشت:

$$\delta \mathcal{H} = \sum_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \left(\varepsilon \frac{\partial g}{\partial p_i} \right) + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \left(-\varepsilon \frac{\partial g}{\partial q_i} \right) = \varepsilon \{ \mathcal{H}, g \} = 0 \quad (۴-۸-۲)$$

اما طبق معادله (۲-۷-۲)،

$$\{g, \mathcal{H}\} = 0 \rightarrow g \text{ پایسته است} \quad (۵-۸-۲)$$

(به‌طور کلی‌تر، پاسخ هر متغیر ω به تبدیل به‌صورت

$$\delta \omega = \varepsilon \{ \omega, g \} \quad (۶-۸-۲)$$

است توجه کنید که δp و δq در معادله (۳-۸-۲) می‌توانند به‌صورت گروه پواسون هم نوشته شوند) به‌عنوان مثال ذره‌ای را در یک بعد و حالت $g = p$ را در نظر بگیرید. از معادله (۳-۸-۲)،

$$\delta x = \varepsilon \frac{\partial p}{\partial p} = \varepsilon \quad (۷-۸-۲)$$

$$\delta p = -\varepsilon \frac{\partial p}{\partial x} = 0$$

که به‌عنوان یک انتقال بی‌نهایت کوچک می‌شناسیم. بنابراین تکانه خطی p مولد انتقال‌های فضایی بوده و در یک مسئله ناوردا از نظر انتقالی، پایسته است. فیزیک مسئله بعد از این نتیجه واضح است. چون p در انتقال بدون تغییر است، $T = p^2/2m$ هم بدون تغییر می‌ماند. در نتیجه $V(x + \varepsilon) = V(x)$. اما اگر پتانسیل از نقطه‌ای به نقطه دیگر تغییر نکند، هیچ نیرویی وجود نداشته و p پایسته می‌ماند.

اکنون یک مثال دو بعدی در نظر بگیرید که $g = l_z = xp_y - yp_x$ است. در اینجا

$$\delta x = -y\varepsilon \left(= \varepsilon \frac{\partial l_z}{\partial p_x} \right)$$

$$\delta y = x\varepsilon \left(= \varepsilon \frac{\partial l_z}{\partial p_y} \right)$$

(۲-۸-۱)

$$\delta p_x = -p_y\varepsilon \left(= -\varepsilon \frac{\partial l_z}{\partial x} \right)$$

$$\delta p_y = p_x\varepsilon \left(= -\varepsilon \frac{\partial l_z}{\partial y} \right)$$

که به عنوان چرخشی بی‌نهایت کوچک حول محور z [معادله (۲-۸-۲)] می‌شناسیم. بنابراین تکانه زاویه‌ای حول محور z مولد چرخش‌ها حول آن محور بوده و اگر \mathcal{H} تحت چرخش‌های حالت حول آن محور ناوردا باشد، پایسته است. رابطه بین تقارن و قانون پایستگی می‌تواند با بیان آشای زیر درک شود. تحت چرخش مختصه‌ها و تکانه‌ها، $|\mathbf{p}|$ تغییر نکرده و لذا $T = |\mathbf{p}|^2 / 2m$ هم تغییر نمی‌کند. در نتیجه V ، در صورتی که در امتداد هر دایره به مرکزیت مبدا حرکت کنیم، یک ثابت است. این به نوبه خود بدین معنی است که هیچ نیرویی در جهت مماسی وجود نداشته و لذا هیچ گشتاوری حول محور z وجود ندارد پس پایستگی l_z نتیجه می‌شود.

تمرین ۲-۸-۱: نشان دهید که $\mathbf{p} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2$ ، تکانه کل، مولد انتقال‌های بی‌نهایت کوچک برای یک دستگاه دو-ذره‌ای است.

تمرین ۲-۸-۲: ثابت کنید که تبدیل بی‌نهایت کوچک تولید شده به وسیله هر متغیر دینامیکی g تبدیلی کانونیک است (راهنمایی: طبق معمول، تا مرتبه اول از ε را در نظر بگیرید).

تمرین ۲-۸-۳: هامیلتونی

$$\mathcal{H} = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 (x^2 + y^2)$$

را در نظر بگیرید که ناورادایی آن تحت چرخش مختصه‌ها و تکانه‌ها منجر به پایستگی l_z می‌شود. اما \mathcal{H} تحت چرخش فقط مختصه‌ها هم ناوردا است. ثابت کنید که این یک تبدیل غیر کانونیک است. خود را متقاعد کنید که در این مورد امکان نوشتن $\delta\mathcal{H}$ به صورت $\{ \mathcal{H}, g \}$ ، برای هیچ g بی وجود ندارد، یعنی هیچ قانون پایستگی به دست نمی‌آید.

تمرین ۲-۸-۴: هامیلتونی $\mathcal{H} = \frac{1}{2} p^2 + \frac{1}{2} x^2$ را در نظر بگیرید که تحت چرخش‌های بی‌نهایت کوچک در فضای فاز (صفحه $x-p$) ناورداست. مولد این تبدیل را (بعد از اثبات کانونیک بودن) به دست آورید (می‌توانید پاسخ را براساس تمرین ۲-۵-۲ حدس بزنید).

تحلیل قبلی، به عنوان یک نتیجه فرعی، روشی برای تولید تبدیلات کانونیک بی‌نهایت کوچک به دست می‌دهد. تابع $g(q, p)$ را در نظر گرفته، تبدیل حاصل از معادله (۲-۸-۶) را به دست می‌آوریم (یادآوری می‌کنیم که اگر چه قبلاً تبدیل کانونیک را تعریف کردیم، اما تاکنون تبدیل کانونیک مولد نداشتیم). با داشتن تبدیل کانونیک بی‌نهایت کوچک، می‌توانیم با «انتگرال گیری» از آن تبدیل متناهی را به دست آوریم.

مثال‌ها زیر باید شما را متقاعد کند که این کار ممکن است. تبدیل تولید شده به وسیله $g = \mathcal{H}$ را در نظر بگیرید

$$\delta q_i = \varepsilon \{q_i, \mathcal{H}\} \quad (9-8-2)$$

$$\delta p_i = \varepsilon \{p_i, \mathcal{H}\}$$

اما از معادلات حرکت می‌دانیم که $\dot{q}_i = \{q_i, \mathcal{H}\}$ و غیره. بنابراین

$$\delta q_i = \varepsilon \dot{q}_i \quad (10-8-2)$$

$$\delta p_i = \varepsilon \dot{p}_i$$

لذا نقطه جدید در فضای فاز، $(\bar{q}, \bar{p}) = (q + \delta q, p + \delta p)$ ، که به وسیله این تبدیل کانونیک از (q, p) به دست آمده است، همان نقطه‌ای است که (q, p) در بازه زمانی بی‌نهایت کوچک ε به آن حرکت می‌کند. به عبارتی دیگر، حرکت نقاط در فضای فاز تحت تحول زمانی ایجاد شده توسط \mathcal{H} ، یک تبدیل کانونیک اکتیو است. اکنون می‌دانید که با انتگرال‌گیری از معادلات حرکت می‌توانیم (\bar{q}, \bar{p}) را در هر زمان بعدی بیابیم، یعنی تبدیل کانونیک منتهای را به دست آوریم. حالت کلی $g \neq \mathcal{H}$ را در نظر می‌گیریم. باز هم داریم:

$$\delta q_i = \varepsilon \{q_i, g\} \quad (11-8-2)$$

$$\delta p_i = \varepsilon \{p_i, g\}$$

از نظر ریاضی این معادلات با معادله (9-8-2) یکسان هستند و g نقش هامیلتونی را ایفا می‌کند. واضح است که نباید در انتگرال‌گیری از این معادلات برای تحول نقاط فضای فاز تحت هامیلتونی «جعلی» g و «زمان» جعلی ε مشکلی وجود داشته باشد. برای نمونه حالت $g = l_z$ را در نظر می‌گیریم که دارای واحد $erg \cdot sec$ و زمان جعلی $\varepsilon = \delta\theta$ ، یک زاویه، است. تبدیل مختصه‌ها عبارتند از

$$\delta x = \varepsilon \{x, l_z\} = -\varepsilon y \equiv (-\delta\theta)y \quad (12-8-2)$$

$$\delta y = (\delta\theta)x$$

معادلات جعلی حرکت عبارتند از:

$$\frac{dx}{d\theta} = -y, \quad \frac{dy}{d\theta} = x \quad (13-8-2)$$

با مشتق‌گیری از اولی نسبت به θ و استفاده از دومی به معادله زیر می‌رسیم

$$\frac{d^2x}{d\theta^2} + x = 0$$

$$\frac{d^2y}{d\theta^2} + y = 0$$

بنابراین

$$x = A \cos \theta + B \sin \theta$$

$$y = C \sin \theta + D \cos \theta$$

ثابت‌ها را از «سرعت‌ها» و مختصه‌های «اولیه» ($\theta = 0$) به دست می‌آوریم: $A = x_0$ و $D = y_0$ و $B = (\partial x / \partial \theta)_0 = -y_0$ ، $C = (\partial y / \partial \theta)_0 = x_0$. با برگشتن به نمادگذاری استاندارد، که در آن (x, y) به جای (x_0, y_0) نقطه اولیه را مشخص کرده و (\bar{x}, \bar{y}) به جای (x, y) نقطه تبدیل یافته را نشان می‌دهد، می‌توانیم تبدیل کانونیک متناهی (چرخش متناهی) را به صورت زیر بنویسیم:

$$\bar{x} = x \cos \theta - y \sin \theta$$

(۲-۸-۱۴)

$$\bar{y} = x \sin \theta + y \cos \theta$$

معادلات مشابهی برای \bar{p}_x و \bar{p}_y برحسب p_x و p_y به دست می‌آیند.

اگر چه دسته زیادی از تبدیلات کانونیک هم اکنون در مقابل ما هستند، اما تبدیلات زیادی هم دور از چشمان ما قرار دارند. برای مثال $(q, p) \rightarrow (-q, -p)$ یک تبدیل کانونیک گسسته است که دارای نسخه (شکل) بی‌نهایت کوچک نیست. همین‌طور تبدیلاتی وجود دارند که منظم نیستند، نظیر تغییر از مختصات دکارتی به کروی، که نه اشکال بی‌نهایت کوچک دارند و نه تعبیر اکتیو. ما روش‌های تولید اینها را بررسی نخواهیم کرد.^۱

نتیجه ۲: اجازه دهید مضمون این نتیجه را قبل از اثبات به وسیله یک مثال درک کنیم. یک دستگاه دو ذره‌ای در نظر بگیرید که هامیلتونی اش تحت انتقال کل دستگاه، یعنی هر دو ذره، ناورد است. فرض کنید ناظر S_A در $t = 0$ حالت $(x_1^0, x_2^0; p_1^0, p_2^0)$ را آماده کند که بعد از زمان t به $(x_1(t), x_2(t); p_1(t), p_2(t))$ تحول یافته و در لحظه T به حالت $(x_1^T, x_2^T; p_1^T, p_2^T)$ منتهی شود. فرض کنید حالت نهایی را خروجی آزمایش صورت گرفته توسط S_A بنامیم. گفته شده که به عنوان نتیجه‌ای از ناوردایی انتقالی \mathcal{H} ، هر مسیر دیگر که به وسیله یک انتقال دلخواه x با این مسیر مرتبط باشد هم جوابی از معادلات حرکت است. در این حالت، حالت اولیه برای مثال $(x_1^0 + a, x_2^0 + a; p_1^0, p_2^0)$ است. حالت نهایی و همه حالت‌های میانی هم به همین اندازه جابه‌جا می‌شوند. برای ناظر S_B ، که به اندازه a نسبت به S_A جابه‌جا شده است، تحول دستگاه دوم به نظر می‌رسد که با آنچه S_A در ابتدا دیده یکسان باشد. با فرض اینکه، برای منظور این بحث، دستگاه دوم را آماده کرده است، می‌توانیم بگوییم که اگر \mathcal{H} ناوردای انتقالی باشد یک آزمایش مشخص و شکل انتقال یافته آن نتیجه یکسانی خواهند داد.

۱- برای بحث بیشتر درباره این سوال و بسیاری موضوعات دیگر درباره مکانیک کلاسیک پیشرفته

ایده فیزیکی به قرار زیر است. به دلایل همیشگی، ناوردایی انتقالی \mathcal{H} به ناوردایی $V(x_1, x_2)$ اشاره می‌کند. این به نوبه خود به معنی $V(x_1, x_2) = V(x_1 - x_2)$ است. بنابراین هر ذره فقط به جایی متوجه است که دیگری نسبت به آن متوجه است و نه به جایی که سیستم به عنوان یک کل در فضا متوجه است. در نتیجه خروجی آزمایش به وسیله یک انتقال کلی تغییر نمی‌کند.

نتیجه (۲) تعمیمی از این نتیجه به تبدیلات کانونیک دیگری است که \mathcal{H} را ناوردا نگه می‌دارند. برای مثال اگر \mathcal{H} ناوردایی چرخشی داشته باشد، یک آزمایش معین و شکل چرخیده آن نتیجه یکسانی به دست خواهند داد (با توجه به ناظری که آنها را انجام داده‌اند).
به اثبات نتیجه عمومی برمی‌گردیم.

اثبات: مسیر $(q(t), p(t))$ را در فضای فاز تصور کنید که معادلات حرکت را برآورده می‌کند. فرض کنید یک مسیر تصویر، $(\bar{q}(t), \bar{p}(t))$ ، به آن وابسته کنیم که از طریق انتقال دادن هر نقطه (q, p) به نقطه تصویر (\bar{q}, \bar{p}) به وسیله یک تبدیل کانونیک منظم به دست می‌آید. سوال این است که آیا نقطه تصویر طبق معادله حرکت هامیلتون، حرکت می‌کند، یعنی اگر \mathcal{H} تحت تبدیل $(q, p) \rightarrow (\bar{q}, \bar{p})$ ناوردا باشد، آیا

$$\dot{\bar{q}}_j = \frac{\partial \mathcal{H}(\bar{q}, \bar{p})}{\partial \bar{p}_j}, \quad \dot{\bar{p}}_j = -\frac{\partial \mathcal{H}(\bar{q}, \bar{p})}{\partial \bar{q}_j} \quad (15-8-2)$$

حال $\bar{q}_j(q, p)$ شبیه هر متغیر دینامیکی $\omega(q, p)$ از رابطه زیر پیروی می‌کند

$$\dot{\bar{q}}_j = \{\bar{q}_j, \mathcal{H}(q, p)\}_{q,p} \quad (16-8-2)$$

اگر $(q, p) \rightarrow (\bar{q}, \bar{p})$ تبدیل کانونیک پسو بود، چون گروه براکت‌ها تحت چنین تبدیلی ناوردا هستند، می‌توانستیم بنویسیم:

$$\dot{\bar{q}}_j = \{\bar{q}_j, \mathcal{H}(q, p)\}_{q,p} = \{\bar{q}_j, \mathcal{H}(\bar{q}, \bar{p})\}_{\bar{q},\bar{p}} = \frac{\partial \mathcal{H}(\bar{q}, \bar{p})}{\partial \bar{p}_j}$$

اما تبدیل، یک تبدیل اکتیو است. هر چند به دلیل تقارن \mathcal{H} یعنی $\mathcal{H}(q, p) = \mathcal{H}(\bar{q}, \bar{p})$ ، می‌توانیم همان مراحل منتهی به معادله (۲-۱۶-۷) از (۷-۱۴) را طی کرده و نتیجه را ثابت کنیم. اگر شما عقیده‌ای به این ندارید می‌توانید با محاسبه صریح و با استفاده از $\mathcal{H}(q, p) = \mathcal{H}(\bar{q}, \bar{p})$ آنرا ثابت کنید. بحثی مشابه نشان می‌دهد که

$$\dot{\bar{p}}_j = -\frac{\partial \mathcal{H}(\bar{q}, \bar{p})}{\partial \bar{q}_j} \quad (17-8-2)$$

بنابراین نقطه تصویر طبق معادلات هامیلتون حرکت می‌کند و مسئله اثبات می‌شود.

تصویر ۲-۸-۵: چرا آن تبدیل غیرکانونیکی که \mathcal{H} را ناوردا نگه می‌دارد جواب یکی را به دیگری نمی‌برد (نمی‌نگارد)؟ یا با توجه به بحث‌های نتیجه (۲)، چرا یک آزمایش و شکل تبدیل یافته آن، وقتی تبدیلی که \mathcal{H} را ناوردا نگه می‌دارد کانونیک نیست، نتیجه یکسانی به دست نمی‌دهند؟ بهتر است یک مثال در نظر بگیریم.

بتانسیل تمرین ۲-۸-۳ را در نظر بگیرید. فرض کنید من ذره‌ای را در $(x=a, y=0)$ با $(p_x=b, p_y=0)$ رها کرده و شما ذره‌ای را در حالت تبدیل یافته‌ای که در آن $(x=0, y=0)$ و $(p_x=b, p_y=0)$ است رها کنید یعنی مختصه‌ها را چرخانده و تکانه‌ها را نچرخانید. این یک تبدیل غیر کانونیک است که \mathcal{H} را ناوردانگه می‌دارد. خود را متقاعد کنید که در زمان‌های بعدی حالت‌های دو ذره با همین تبدیل به هم مربوط نمی‌شوند. سعی کنید بفهمید که در حالت عام چه چیزی کار را خراب می‌کند. با پیشروی و یادگیری مکانیک کوانتومی خواهید دید که تقارن‌های هامیلتونی نتایج مشابهی برای دینامیک سیستم دارند.

در مقدمه گفته شد که وقتی حوزه مشاهدات خود را گسترش می‌دهیم می‌بایست پیوسته محک زده و ببینیم که آیا قوانین موجود فیزیک قادر به توضیح پدیده‌های جدید هستند یا نه، اگر قادر نیستند، باید تلاش کنیم تا قوانین جدیدی پیدا کنیم که این کار را انجام دهند. در این فصل با آزمایشاتی آشنا خواهید شد که نقص روش کلاسیکی را نشان می‌دهند. آزمایشاتی که توصیف می‌شوند به صورتی که در اینجا گفته می‌شود هرگز به طور دقیق انجام نشده‌اند اما حاوی جنبه‌ها و ویژگی‌های اصلی آزمایشات واقعی هستند که (در ربع اول این قرن) بدون هیچیک از پیچیدگی‌های غیر ضروری خود انجام شده‌اند.

۳-۱- ذرات و امواج در فیزیک کلاسیک

در فیزیک کلاسیک دو مفهوم متمایز وجود دارد: ذرات و امواج، ذرات را به طور مفصل در فصل قبل مطالعه کرده‌ایم و می‌توانیم ویژگی‌های اصلی آنها را به صورت زیر خلاصه کنیم: ذرات، بسته‌های جایگزیده انرژی و تکانه هستند، آنها در هر لحظه به وسیله پارامترهای حالت q و \dot{q} (یا q و p) توصیف می‌شوند. این پارامترها با گذشت زمان با توجه به معادلات حرکت تحول می‌یابند. با داشتن مقادیر اولیه $q(t_i)$ ، $\dot{q}(t_i)$ در زمان t_i ، مسیر $q(t)$ می‌تواند برای همه زمان‌های بعدی از معادلات حرکت به دست آید. در مقابل، یک موج، آشفتگی گسترده شده در فضا است. این موج به وسیله یک تابع موج $\psi(\mathbf{r}, t)$ توصیف می‌شود که آشفتگی را در نقطه \mathbf{r} در زمان t مشخص می‌کند.

در مورد امواج صوتی، ψ فشار هوای اضافی بر فشار طبیعی است در حالی که در مورد امواج الکترومغناطیس، ψ می‌تواند هر مولفه از بردار میدان الکتریکی \mathbf{E} باشد. مانسته q و \dot{q} برای یک موج، ψ و $\dot{\psi}$ در نقطه \mathbf{r} هستند، با فرض اینکه ψ از یک معادله موج مرتبه دوم نسبت به زمان نظیر

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}$$

پیروی می‌کند که این معادله توصیف‌گر امواج منتشر شونده با سرعت نور c است. با داشتن $\psi(\mathbf{r}, 0)$ و $\dot{\psi}(\mathbf{r}, 0)$ ، با حل معادله موج می‌توان تابع موج $\psi(\mathbf{r}, t)$ را در همه زمان‌های بعدی به دست آورد.

از موارد خاص جالب برای ما، امواجی هستند که نسبت به فضا و زمان دوره‌ای هستند و امواج تخت نامیده می‌شوند. در یک بعد امواج تخت می‌توانند به صورت

$$\psi(x, t) = A \exp \left[i \left(\frac{2\pi}{\lambda} x - \frac{2\pi}{T} t \right) \right] \equiv A \exp[i\phi] \quad (1-1-3)$$

نوشته شوند.

در یک زمان معین t ، موج در فضا با دوره تناوب λ دوره ای است که λ طول موج است و همین طور در یک نقطه معین x ، موج نسبت به زمان دوره ایست و هر T ثانیه خودش را تکرار می کند و T دوره تناوب زمانی است. ما اغلب به جای λ و T کمیت های وابسته $k = 2\pi/\lambda$ ، $\omega = 2\pi/T$ ، موسوم به عدد موج، و $\omega = 2\pi/T$ ، موسوم به فرکانس (زایویه ای) را به کار خواهیم برد. برحسب فاز ϕ در معادله (۳-۱-۱)، k تغییر فاز در واحد طول در هر زمان ثابت t را اندازه می گیرد در حالی که ω تغییر فاز در واحد زمان در هر نقطه ثابت x را اندازه گیری می کند. این موج با سرعت $v = \omega/k$ حرکت می کند. برای اثبات این ادعا توجه کنید که اگر از نقطه ای شروع کنیم که در آن $\phi = 0$ است و با آهنگ $x = (\omega/k)t$ در امتداد x حرکت کنیم، ϕ صفر باقی می ماند. ضریب A در جلو، دامنه نامیده می شود. برای هر موج، شدت به صورت $I = |\psi|^2$ تعریف می شود. برای امواج تخت این یک ثابت برابر با $|A|^2$ است. اگر ψ یک موج الکترومغناطیسی را نشان دهد، شدت، معیاری از انرژی و تکانه حمل شده توسط امواج است [چون میدان الکترومغناطیسی حقیقی است فقط قسمت حقیقی ψ آنرا توصیف می کند. اما در مورد امواج تخت متوسط های زمانی شار انرژی و تکانه هنوز متناسب با شدت هستند (همان طور که در بالا تعریف شد)].

امواج تخت در سه بعد به صورت

$$\psi(\mathbf{r}, t) = A e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}, \quad \omega = |\mathbf{k}|v \quad (۳-۱-۲)$$

نوشته می شوند که در آن هر مولفه k_i ، تغییر فاز در واحد طول در امتداد محور i ام را به دست می دهد و \mathbf{k} بردار موج نامیده می شود.^۱

۳-۲- آزمایشی با امواج و ذرات (کلاسیکی)

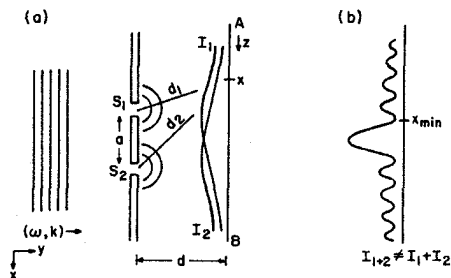
امواج، پدیده ای از خود نشان می دهند که تا/خل نامیده می شود که مختص آنها بوده و به وسیله ذراتی که توسط مکانیک کلاسیکی توصیف می شوند نشان داده نمی شود. این پدیده به وسیله آزمایش زیر نشان داده می شود (شکل ۳-۱-الف). فرض کنید موج $\psi = A e^{i(ky - \alpha x)}$ به صورت عمود روی پرده ای با شکاف های k_1 و k_2 به فاصله a از هم فرود آید. در فاصله d موازی با آن، یک سری آشکارساز وجود دارد که شدت را به صورت تابعی از مکان x اندازه می گیرند که x در امتداد AB اندازه گیری می شود.

اگر ابتدا فقط k_1 را باز نگه داریم موج فرودی از k_1 بیرون خواهد آمد و به صورت شعاعی به سمت خارج منتشر خواهد شد. می توان k_1 را به عنوان چشمه مجازی این موج ψ_1 در نظر گرفت که با موج فرودی دارای فرکانس و طول موج یکسان است. الگوی شدت $I_1 = |\psi_1|^2$ توسط آشکارسازها ثبت می شود.

۱- متناسبانه از \mathbf{k} برای نشان دادن بردار یکه در جهت محور z هم استفاده می کنیم که باید از متن منظورمان مشخص شود.

همین طور اگر S_2 به جای S_1 باز باشد موج ψ_2 الگوی $I_2 = |\psi_2|^2$ را تولید می کند. در هر دو حالت، ورود انرژی به آشکار سازها تابعی هموار از x و t است.

حال اگر هم S_1 و هم S_2 باز باشند هر دو موج ψ_1 و ψ_2 وجود داشته و یک الگوی شدت $I_{1+2} = |\psi_1 + \psi_2|^2$ تولید می کنند.

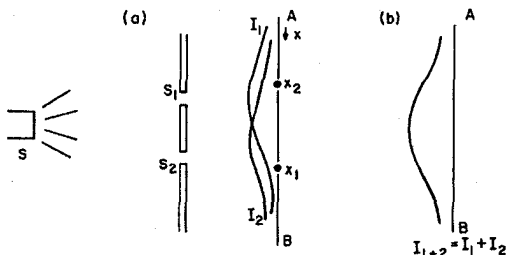


شکل ۳-۱- الف: وقتی یک موج $\psi = e^{i(ky - \omega t)}$ روی پرده ای با شکاف S_1 یا S_2 باز فرود می آید الگوهای شدت I_1 و I_2 ، به ترتیب، به وسیله یک سری آشکار ساز روی AB اندازه گیری می شوند. ب: با دو شکاف باز، الگوی I_{1+2} مشاهده می شود. توجه کنید که $I_{1+2} \neq I_1 + I_2$ است. این پدیده تداخل نامیده می شود.

موضوع جالب این است که $I_{1+2} \neq I_1 + I_2$ است بلکه الگوی تداخلی به صورت شکل ۳-۱-ب است. برجستگی ها و فرورفتگی ها مربوط به این حقیقت اند که امواج ψ_1 و ψ_2 مجبورند فواصل متفاوت d_1 و d_2 را پیمایند تا به یک x معین برسند (شکل ۳-۱-الف را ببینید) و لذا همیشه هم فاز نیستند. بویژه بیشینه ها متناظر با حالت $d_2 - d_1 = n\lambda$ هستند (n عددی درست است) وقتی که امواج دقیقاً هم فازند؛ کمینه ها متناظر با حالت $d_2 - d_1 = (2n + 1)\lambda/2$ هستند، وقتی امواج دقیقاً غیر هم فاز هستند. بر حسب فازهای ϕ_1 و ϕ_2 ، در بیشینه، $\phi_2(x) - \phi_1(x) = 2n\pi$ ، و در کمینه، $\phi_2(x) - \phi_1(x) = (2n + 1)\pi$ است. به راحتی می توان نشان داد که فاصله Δx بین دو بیشینه مجاور، $\Delta x = \lambda d/a$ است.

جنبه ای که باید مورد توجه خاص قرار گیرد این است که اگر x_{min} یک کمینه تداخل باشد شارش انرژی به x_{min} با فقط یک شکاف باز بیشتر از شارش انرژی با دو شکاف است به عبارتی دیگر باز کردن یک شکاف اضافی می تواند عملاً شار انرژی به x_{min} را کاهش دهد.

حال آزمایش با ذرات را در نظر بگیرید (شکل ۳-۲-الف) چشمه امواج تخت فرودی به وسیله چشمه ای از ذرات، که آنها را به سمت پرده با جهت های مختلف اما انرژی ثابت پرتاب می کند، جایگزین می شود.



شکل ۳-۲- الف: الگوی شدت، وقتی S_1 یا S_2 باز است، مربوط به باریکه ای از ذرات فرودی. ب: الگو با دو شکاف باز با توجه به مکانیک کلاسیک $(I_{1+2} = I_1 + I_2)$.

فرض کنید خط AB با آرایه‌ای از آشکارسازهای ذره پر شده باشد و شدت $I(x)$ را تعداد ذراتی تعریف کنیم که در هر ثانیه به هر x معین می‌رسند. الگوها با S_1 یا S_2 باز در شکل ۳-۲ الف نشان داده شده‌اند. این الگوها شباهت بسیار زیادی به الگوهای متناظر برای موج دارند. تنها تفاوت این خواهد بود که ذرات به صورت پیوسته نمی‌رسند بلکه به صورت جدا جدا می‌رسند و هر ذره در لحظه ورود به یک نقطه یک ضربه به شمارنده می‌زند، اگر چه این حقیقت وقتی باریکه چگال باشد نامفهوم می‌شود اما وقتی شار فرودی کاهش یابد به آسانی قابل آشکارسازی است.

اگر هم S_1 و هم S_2 باز باشند چگونه مکانیک کلاسیک یک پیش‌بینی روشن دارد: $I_{1+2} = I_1 + I_2$. دلیل این است: هر ذره در امتداد یک مسیر معین که از S_1 یا S_2 به مقصد x رسم می‌شود حرکت می‌کند. برای ذره‌ای که از S_1 سرچشمه گرفته مهم نیست که S_2 باز باشد یا بسته. با جایگزیده بودن در فضا، هیچ راهی حتی برای دانستن اینکه S_2 باز است یا بسته برای آن وجود ندارد و لذا نمی‌تواند به هیچ وجه به آن پاسخ دهد. بنابراین تعداد خروجی از S_1 به طرف x مستقل از اینست که آیا S_2 باز است یا نه و بالعکس. نتیجه اینکه $I_{1+2} = I_1 + I_2$ (شکل ۳-۲ ب).

ممکن است اعتراض زیر وارد شود: اگر چه ذرات سرچشمه گرفته از S_1 از باز بودن S_2 آگاه نیستند، اما اگر برای مثال ذرات S_1 به سمت x_1 و ذرات S_2 به سمت x_2 در حرکت باشند آنها مسلماً می‌توانند به وسیله ذراتی که از S_2 خارج می‌شوند منحرف شوند (شکل ۳-۱ الف را ببینید).

این ایراد می‌تواند با فرستادن یک ذره در هر لحظه بر طرف شود. یک ذره معین البته الگویی نظیر I_1 یا I_2 به تنهایی تولید نخواهد کرد و به یک نقطه x خواهد رفت. اما اگر یک نمودار ستونی (هیستوگرام) بسازیم، پوش این نمودار ستونی بعد از شمارش زیاد، توابع هموار I_1 ، I_2 و I_{1+2} را تعریف خواهد کرد. حال نتیجه گیری $I_{1+2} = I_1 + I_2$ مسلم می‌شود.

این همان پیش‌بینی فیزیک کلاسیک است که ذرات و امواج در آزمایش دو شکافی انجام خواهند داد.

۳-۳- آزمایش دوشکافی با نور

حال ببینیم چه اتفاقی می‌افتد وقتی آزمایش زیر را انجام می‌دهیم تا این ایده فیزیک کلاسیک را، که نور یک پدیده موجی الکترومغناطیسی است، بیازماییم.

دو شکاف مطابق شکل ۳-۱ الف به همراه یک سری از وسایل اندازه‌گیری حساس به نور در امتداد AB را فراهم می‌کنیم و باریکه $\psi = e^{i(ky - \omega t)}$ را در جهت عمود بر پرده می‌فرستیم (دقیقتاً بگوییم، موج الکترومغناطیسی می‌بایست با معلوم بودن سمت گیری بردارهای \mathbf{E} و \mathbf{B} علاوه بر ω و k مشخص شود اما برای موج تخت، \mathbf{B} به صورت یگانه‌ای توسط \mathbf{E} ثابت و معین می‌شود. اگر فرض کنیم که \mathbf{E} عمود بر صفحه، قطبیده است این قطبیدگی به وسیله دو شکاف متأثر نمی‌شود بنابراین می‌توانیم از اشاره صریح به این بردار ثابت خود داری کرده و میدان را به صورت یک تابع اسکالر نمایش دهیم). می‌بینیم که با باز بودن یکی از شکاف‌ها در یک لحظه الگوهای I_1 و I_2 حاصل می‌شود و با باز بودن هر دو، الگوی تداخلی I_{1+2} حاصل می‌شود که در شکل‌های ۳-۱ الف و ۳-۱ ب هم نشان داده شده‌اند (این الگوی تداخلی البته همان چیزیست

که فیزیکدان‌های کلاسیک را متقاعد کرد که نور یک پدیده موجی است). انرژی به صورت پیوسته و یکنواخت، آن‌طور که شایسته یک موج است، به آشکارسازها می‌رسد.

فرض کنید آزمایش را با یک تغییر تکرار کنیم که انتظار می‌رود (در فیزیک کلاسیک) هیچ اثر کیفی ایجاد نکند. با δ_1 باز شروع می‌کنیم و شدت را کاهش می‌دهیم. اتفاق عجیبی می‌افتد؛ می‌بینیم که انرژی به‌طور پیوسته نمی‌رسد بلکه صورت انفجارهای (رگبارهای) ناگهانی خواهد بود، یک انفجار اینجا، یک انفجار آنجا و به همین ترتیب. حال شدت را کمتر می‌کنیم به طوری که فقط یک آشکارساز در یک لحظه معین فعال باشد و یک گاف (فاصله) کافی، مثلاً میلی‌ثانیه، بین شمارش‌ها وجود داشته باشد. وقتی انفجاری در یک x اتفاق می‌افتد آنرا ثبت می‌کنیم و یک نمودار ستونی (هیستوگرام) رسم می‌کنیم. با داده‌های کافی، پوش نمودار ستونی، الگوی I_1 می‌شود. ما کشف مهمی انجام داده‌ایم: انرژی نور پیوسته نیست و به صورت بسته‌ای می‌باشد. این ماهیت گسسته بودن در باریکه‌های شدید محو می‌شود چون بسته‌ها آنچنان سریع روی همه خط AB می‌رسند که شارش انرژی در فضا و زمان پیوسته به نظر می‌رسد.

وقتی مطالعه خود را در مورد این بسته‌ها، موسوم به فوتون، به‌طور مفصل دنبال می‌کنیم ویژگی‌های زیر حاصل می‌شوند:

۱- هر بسته، انرژی یکسان، E ، حمل می‌کند.

۲- هر بسته، تکانه یکسان، p ، حمل می‌کند.

۳- $E = pc$. از معادله مشهور $E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$ نتیجه می‌گیریم که این بسته‌ها ذراتی با جرم صفر هستند.

۴- اگر فرکانس چشمه نور را تغییر دهیم خواهیم دید که

$$(1-3-3) \quad E = \hbar\omega$$

$$E = \hbar\omega$$

$$(2-3-3) \quad p = \hbar k$$

$$p = \hbar k$$

$\hbar = h/2\pi$ یک ثابت است. h ثابت پلانک نامیده می‌شود و دارای بعد $erg \ sec$ است که با بعد کنش و تکانه زاویه‌ای یکی است. مقدار آن برابر است با

$$(3-3-3) \quad \frac{h}{2\pi} = \hbar \simeq 10^{-27} \text{ erg sec}$$

برای علاقمندان به تاریخچه باید گفت که آزمایش واقعی که ماهیت دانه‌ای نور را آشکار کرد اثر فوتوالکتریک نامیده می‌شود. توضیح صحیح این آزمایش، به زبان فوتون‌ها، در سال ۱۹۰۵ توسط انیشتین ارائه شد.

اینکه نور از ذرات تشکیل شده است، فیزیکی‌دان‌های کلاسیک را شگفت‌زده خواهد کرد اما به معنی پایان دوره فیزیک کلاسیک نیست زیرا فیزیکی‌دان‌ها بر این باورند که پدیده‌هایی که در نگاه اول پیوسته به نظر می‌رسند ممکن است واقعاً گسسته باشند. آنها با اشتیاق به مطالعه دینامیک فوتون‌ها خواهند پرداخت و تلاش می‌کنند تا معادلات حرکت را برای مسیر آن و غیره به دست آورند. آنچه به فیزیک کلاسیک واقعاً لطمه می‌زند این حقیقت است که حال اگر هر دو شکاف را باز کنیم و هنوز شدت را بقدری پایین نگه داریم که فقط یک فوتون در یک زمان معین در ناحیه آزمایشی وجود داشته باشد و به شکلی که نمودار ستونی پیدا می‌کند نگاه کنیم نتیجه نخواهیم گرفت که I_{1+2} با $I_1 + I_2$ ، آن‌طور که از ذرات انتظار می‌رود، برابر است، بلکه یک الگوی تداخلی مشخصه عدد موج k است. این نتیجه، این امکان را که فوتون‌ها مثل ذرات مکانیک کلاسیک در مسیرهای معین و خوش تعریفی حرکت می‌کنند کاملاً رد می‌کند زیرا اگر این درست بود، فوتونی که از S_1 خارج می‌شود می‌بایست به اینکه S_2 باز است یا بسته بی تفاوت می‌شد (و بالعکس) و نتیجه $I_{1+2} = I_1 + I_2$ غیرقابل اجتناب می‌شد. برای بیان این مطلب به شیوه‌ای دیگر، یک نقطه x_{\min} را در نظر بگیرید که یک کمینه تداخل است. با S_1 یا S_2 باز فوتون‌های بیشتری به این نقطه می‌رسند تا هر دو باز باشند. اگر فوتون‌ها از مسیرهای معینی عبور می‌کردند قابل فهم نبود که مسیر خروجی دیگر را چطور باز کنیم تا بتوانیم تعداد ورودی به x_{\min} را کاهش دهیم. از آنجا که آزمایش را با یک فوتون در یک لحظه انجام می‌دهیم، نمی‌توان حتی این فرضیه نامحتمل را مطرح کرد که فوتون‌های خروجی از S_1 با فوتون‌های خروجی از S_2 برخورد می‌کنند تا الگوی یکنواخت $I_1 + I_2$ را (به‌طور اعجاز‌آمیز) به الگوی تداخلی تغییر دهند.

از این حقایق، بورن این نتیجه را گرفت: به هر فوتون یک موج ψ وابسته است، موسوم به دامنه احتمال یا فقط دامنه، که مربع مدول آن، احتمال یافتن ذره در x را به دست می‌دهد [به شکلی دقیق‌تر، نباید $|\psi(x)|^2$ را به عنوان احتمال یک x معین بلکه به عنوان چگالی احتمال در x در نظر بگیریم چون x یک متغیر پیوسته است. اما این موشکافی‌ها می‌توانند تا بعد منتظر بمانند]. کل آزمایش می‌تواند برحسب این فرضیه به شکل زیر درک شود. هر فوتون خروجی با انرژی E و تکانه p یک تابع موج ψ وابسته به خود دارد که موجی تخت با $\omega = E/\hbar$ و $k = p/\hbar$ است. این موج با خودش تداخل کرده و الگوی نوسان‌کننده $|\psi(x)|^2$ را در امتداد AB تشکیل می‌دهد که احتمال رسیدن فوتون مورد نظر به نقطه x را به دست می‌دهد. یک فوتون معین البته به یک x معین می‌رسد و توزیع احتمال را معلوم نمی‌کند. اما اگر تا رسیدن چندین فوتون صبر کنیم، که همگی با یک ψ توصیف می‌شوند، تعداد در هر x متناسب با تابع احتمال $|\psi(x)|^2$ خواهد شد. همین‌طور، اگر یک باریکه شدید تکفام (ماکروسکوپی) فرود آید، فوتون‌های زیادی، که همگی با یک موج و در نتیجه با یک توزیع احتمال تعریف می‌شوند، در یک لحظه و همگی در امتداد خط AB می‌رسند. آنگاه توزیع شدت شکل توزیع احتمال را، چنان که باید، به خود گرفته و شارش انرژی، در توافق با پیش‌بینی‌های نظریه الکترومغناطیس کلاسیک، پیوسته به نظر می‌رسد.

نکته اصلی قابل ذکر، در کنار تغییر احتمال، این است که یک موج نه به یک باریکه از فوتون‌ها بلکه به هر فوتون وابسته است. اگر باریکه تکفام باشد هر فوتون با یک ψ و یک توزیع احتمال مشخص می‌شود. یک

مجموعه بزرگ از چنین فوتون‌هایی پدیده‌هایی را ایجاد خواهند کرد که از یک موج الکترومغناطیسی کلاسیک ψ انتظار می‌رود و جنبه‌های احتمالی پنهان خواهند شد.

۳-۴- امواج مادی (امواج دوبروی)

اینکه نور، که به نظر یک پدیده موجی خالص می‌آمد، باید شامل فوتون‌ها باشد، دوبروی را بر آن داشت تا حدس بزنند که موجوداتی نظیر الکترون، که عموماً اعتقاد بر ذره بودن آنها بود، باید رفتار موج گونه نشان دهند. او در مانستگی با فوتون حدس زد که ذرات با تکانه p در آزمایش دو شکافی یک الگوی تداخلی متناظر با عدد موج $k = p/\hbar$ تولید خواهند کرد. این پیش‌بینی اندکی بعد توسط داویسون و گرمر برای الکترون‌ها اثبات شد. امروزه کاملاً مورد پذیرش قرار گرفته است که همه ذرات به‌وسیله دامنه‌های احتمال $\psi(x)$ توصیف می‌شوند و فرض اینکه آنها در مسیرهایی معین حرکت می‌کنند به‌وسیله آزمایش رد شده است.

اما در این مورد که عقل سلیم می‌گوید توپ‌های بیلیارد و بیسیال در امتداد مسیرهای معین حرکت می‌کنند چطور؟ چطور مکانیک کلاسیک به مدت سه قرن پا بر جا بود؟ پاسخ این است که ماهیت موجی ماده برای پدیده‌های ماکروسکوپی واضح نیست چون \hbar بسیار کوچک است. معنی دقیق این گفته فقط بعد از اینکه بر مکانیک کوانتومی به‌طور کامل مسلط شدیم روشن خواهد شد. با وجود این، مثال زیر می‌تواند آموزنده باشد. فرض کنید آزمایش دو شکافی را با گلوله‌هایی به جرم $1g$ که با سرعت 1 cm/s حرکت می‌کنند انجام دهیم. طول موج مربوط به این ذرات برابر است با

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{p} \approx 10^{-26}\text{ cm}$$

که 10^{-13} برابر کوچکتر از شعاع پروتون است! برای هر مقدار معقول پارامترهای a و d (شکل ۳-۱-ب) را ببینید) الگوی تداخلی نسبت به x چنان فشرده می‌شود که ابزارهای ما فقط میانگین یکساخت را اندازه‌گیری خواهند کرد که از $I_{1+2} = I_1 + I_2$ ، همان‌طور که به‌طور کلاسیکی انتظار می‌رود، پیروی خواهد کرد.

۳-۵- نتایج

هدف اصلی این فصل نشان دادن نقض و بی‌کفایتی فیزیک کلاسیک در توضیح پدیده‌های قطعی و مسلّم بود و به‌طور ضمنی نگاهی اجمالی به آنچه که فیزیک (کوانتومی) جدید باید به دنبال آن باشد. دیدیم که موجوداتی نظیر الکترون از حیث کلاسیکی ذره هستند، از این نظر که وقتی آشکارسازی شوند به نظر می‌رسد همه انرژی، تکانه و بار و غیره خود را به شکل جایگزیده حمل می‌کنند و با وجود این آنها ذره گونه نیستند، از این نظر که فرض اینکه آنها در امتداد مسیرهای معین حرکت می‌کنند منجر به تضاد با آزمایش می‌شود. به نظر می‌رسد که به هر ذره یک تابع موج $\psi(x, t)$ مربوط می‌شود به طوری که $|\psi(x, t)|^2$ احتمال یافتن آن در نقطه x در زمان t را به‌دست می‌دهد. این پدیده، دوگانگی موجی - ذره‌ای نامیده می‌شود.

پس دینامیک ذره، دینامیک این تابع $\psi(x, t)$ ، یا، اگر به توابع به عنوان بردارهایی در فضای بی‌نهایت بعدی بنگریم، دینامیک کت $\langle \psi(t) \rangle$ است. در فصل بعد، اصول موضوعه نظریه کوانتومی، دینامیک را

برحسب $\langle \psi(t) |$ تعریف خواهند کرد. این اصول موضوعه، که مشخص می‌کنند چه قسم از اطلاعات در $\langle \psi(t) |$ قرار می‌گیرند و چطور $\langle \psi(t) |$ با زمان تحول می‌یابد، نتایج آزمایش دو شکافی و بسیاری از آزمایشاتی که در اینجا ذکر نشده‌اند را به‌طور مختصر بیان می‌کنند. آزمایش دو شکافی در اینجا توضیح داده شد تا بی‌کفایتی فیزیک کلاسیک را نشان دهد نه اینکه حجم کل نتایج تجربی را، که از آنها همه اصول موضوعه می‌توانستند استنباط شوند، بیان کند. خوشبختانه، آزمایش دو شکافی شامل اکثر ویژگی‌های محوری نظریه است به‌طوری که وقتی با اصول موضوعه در فصل بعد مواجه شویم بسیار قابل قبول و موجه به نظر خواهند رسید.

با کسب اطلاعات ریاضی لازم و انگیزه فیزیکی اکنون آماده‌اید که با اصول موضوعه مکانیک کوانتومی آشنا شوید. در این فصل اصول موضوعه بیان شده و با عباراتی ساده بحث می‌شوند تا جنبه‌های اصلی نظریه کوانتومی را نمایان کنند. فصول بعدی فقط مختص کاربردهای اصول موضوعه برای حل بسیاری از مسائل جالب فیزیکی خواهند بود. علی‌رغم آمادگی شما، ممکن است در این مواجهه اول هنوز اصول موضوعه را تا حدی مجرد و گیج کننده تصور کنید، اما این احساس بعد از اینکه برای مدتی با موضوع کار کردید از بین خواهد رفت.

۴-۱- اصول موضوعه

در اینجا اصول موضوعه مکانیک کوانتومی غیرنسبیتی ارائه می‌شوند. ابتدا سیستمی با یک درجه آزادی، یعنی یک ذره منفرد در یک بعد فضا را در نظر می‌گیریم. تعمیم سرراست به ذرات بیشتر و ابعاد بالاتر تا آخر فصل بحث خواهد شد. در ادامه، اصول موضوعه کوانتومی با نظایر کلاسیکی آنها (در فرمالیزم هامیلتونی) همراه می‌شوند تا یک افق دید حاصل شود.

۴-۲- بحث اصول موضوعه (۱) تا (۳)

اصول موضوعه (مکانیک کلاسیک و کوانتومی) به دو دسته تقسیم می‌شوند: سه اصل اول بیان می‌کنند که سیستم در یک زمان معین چگونه نمایش داده می‌شود و آخری، مشخص می‌کند که این تصویر چگونه با زمان تغییر می‌کند. ما توجه خود را در این بخش به سه اصل موضوع اول جلب کرده و چهارمی را به بخش بعدی محول می‌کنیم.

اصل موضوع اول بیان می‌کند که یک ذره به وسیله یک کت $|\psi\rangle$ در فضای هیلبرت توصیف می‌شود که شامل بردارهای سره^۱ قابل بهنجارش به یک و همین‌طور بردارهای ناسره^۲ قابل بهنجارش به تابع دلتای دیراک است.^۳ یک کت در چنین فضایی در حالت کلی در یک پایه معین بی‌نهایت مولفه دارد. ممکن است تعجب کنید که چرا یک ذره، که فقط دو درجه آزادی مستقل x و p در مکانیک کلاسیک داشت، اکنون لازم است تا به وسیله تعداد نامتناهی از متغیرها مشخص شود. این متغیرها چه چیزی در مورد ذرات به ما می‌گویند؟ برای درک این مطلب می‌بایست به سراغ دو اصل موضوع بعدی برویم که دقیقاً به این سوال پاسخ می‌دهند. ابتدا

1- Proper.

2- Improper.

۳- وضعیت هر دو دسته بعداً در همین فصل روشن خواهد شد.

توجه می‌کنیم که آزمایش دو شکافی قبلاً اشاره کرده است که ذره‌ای نظیر الکترون باید به وسیله یک تابع موج $\psi(x)$ توصیف شود. در بخش ۱-۱۰ دیدیم که یک تابع $f(x)$ می‌تواند به عنوان یک کت $|f\rangle$ در فضای هیلبرت تلقی شود. کت $|\psi\rangle$ مکانیک کوانتومی چیزی غیر از بردار نمایشگر دامنه احتمال $\psi(x)$ که در آزمایش دو شکافی معرفی شد، نیست.

مکانیک کوانتومی	مکانیک کلاسیک
۱- حالت ذره به وسیله یک بردار $ \psi(t)\rangle$ در فضای هیلبرت نمایش داده می‌شود.	۱- حالت یک ذره در هر لحظه معین با دو متغیر $X(t)$ و $p(X)$ مشخص می‌شود، یعنی به صورت یک نقطه در فضای فاز دو بعدی.
۲- متغیرهای مستقل X و p مکانیک کلاسیک به وسیله عملگرهای هرمیتی X و P با عناصر ماتریسی زیر در ویژه پایه X نمایش داده می‌شوند: ^۱ $\langle x X x'\rangle = x\delta(x-x')$ $\langle x P x'\rangle = -i\hbar\delta'(x-x')$ عملگرهای متناظر با متغیرهای وابسته $\omega(x, p)$ عملگرهای هرمیتی معین هستند. ^۲ $\Omega(X, P) = \omega(x \rightarrow X, p \rightarrow P)\S$	۲- هر متغیر دینامیکی ω تابعی از X و p است: $\omega = \omega(x, p)$
۳- اگر ذره در حالت $ \psi\rangle$ باشد اندازه گیری متغیر (متناظر با) Ω یکی از ویژه مقادیر ω را با احتمال $P(\omega) \propto \langle \omega \psi\rangle ^2$ به دست خواهد داد. حالت سیستم در نتیجه اندازه گیری از $ \psi\rangle$ به $ \omega\rangle$ تغییر خواهد کرد.	۳- اگر ذره در حالتی باشد که با X و p معلوم می‌شود اندازه گیری متغیر ω یک مقدار $\omega(x, p)$ به دست خواهد داد. حالت بدون تغییر باقی خواهد ماند.
۴- بردار حالت $ \psi(t)\rangle$ از معادله شرودینگر $i\hbar \frac{d}{dt} \psi(t)\rangle = H \psi(t)\rangle$ پیروی می‌کند که $H(X, P) = \mathcal{H}(x \rightarrow X, p \rightarrow P)$ عملگر هامیلتونی کوانتومی و \mathcal{H} هامیلتونی مسئله کلاسیکی متناظر است.	۴- متغیرهای حالت طبق معادلات هامیلتون تغییر می‌کنند: $\dot{x} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}$ $\dot{p} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x}$

- ۱- توجه کنید که عملگر X همان است که به طور مفصل در بخش ۱-۱۰ بحث شد. همین طور $p = \hbar k$ ، که k هم در آنجا بحث شد و می‌توانید به آنجا مراجعه کنید.
- ۲- منظور این است که Ω همان تابعی از X و P است که ω از X و p است.
- ۳- در یک آزمایش ایده‌آل این با نظریه سازگار است. فرض می‌شود که شما با اندازه گیری کلاسیکی ایده‌آل، که می‌تواند حالت سیستم را بدون هر گونه مختل کردن آن مشخص کند، آشنا هستید. بحث اندازه گیری‌های کوانتومی ایده‌آل در ادامه می‌آید.
- ۴- همان پاورقی قبل.

وقتی می‌گوییم $|\psi\rangle$ عنصری از یک فضای برداری است منظورمان این است که اگر $|\psi\rangle$ و $|\psi'\rangle$ حالت‌های ممکن یک ذره را نشان دهند $\alpha|\psi\rangle + \beta|\psi'\rangle$ هم همین کار را می‌کند. این مطلب، اصل برهم‌نهی نامیده می‌شود. این اصل فی نفسه خیلی جدید نیست: برای مثال از فیزیک کلاسیک می‌دانیم که اگر $f(x)$ و $g(x)$ [با $f(0) = f(L) = g(0) = g(L) = 0$] دو جابه‌جایی ممکن یک ریسمان باشند برهم‌نهی $\alpha f(x) + \beta g(x)$ هم اینگونه خواهد بود. آنچه جدید است، تعبیر حالت بر هم نهاده $|\psi\rangle + \beta|\psi'\rangle$ است. در مورد ریسمان $\alpha f + \beta g$ مشخصه‌های خیلی متفاوتی از حالت‌های f و g دارد: این حالت شکل متفاوتی خواهد داشت، دارای مقدار متفاوت از انرژی کشسانی ذخیره شده است و غیره و غیره. از سوی دیگر در نظریه کوانتومی، حالت $|\psi\rangle + \beta|\psi'\rangle$ ، اگر خیلی دقیق نباشیم، مشخصه‌هایی خواهد داشت که گاهی شبیه مشخصه $|\psi\rangle$ و در مواقعی دیگر مشخصه $|\psi'\rangle$ هستند. اما نیازی نیست با مسامحه سخن بگوییم زیرا ما اصول موضوعه (۲) و (۳) را داریم که بیان می‌کنند که دقیقاً چطور بردار حالت $|\psi\rangle$ در نظریه کوانتومی تعبیر می‌شود و ما آنرا پیدا می‌کنیم.

در مکانیک کلاسیک وقتی یک حالت (x, p) معلوم است، می‌توان گفت که هر متغیر دینامیکی ω دارای مقدار $\omega(x, p)$ است، از این حیث که اگر این متغیر اندازه‌گیری شود نتیجه $\omega(x, p)$ به دست خواهد آمد. بیان مشابهی که در مکانیک کوانتومی، وقتی ذره در یک حالت $|\psi\rangle$ قرار دارد، می‌توان گفت چیست؟

پاسخ به وسیله اصول موضوعه (۲) و (۳) ارائه می‌شود که طبق مراحل زیر است:

مرحله ۱: عملگر کوانتومی متناظر $\Omega = \omega(x \rightarrow X, p \rightarrow P)$ را بسازید که در آن X و P عملگرهای تعریف شده در اصل موضوع (۲) هستند.

مرحله ۲: ویژه بردارهای راست $|\omega_i\rangle$ و ویژه مقادیر ω_i عملگر Ω را به دست آورید.

مرحله ۳: $|\psi\rangle$ را در این پایه بسط دهید:

$$|\psi\rangle = \sum_i |\omega_i\rangle \langle \omega_i | \psi \rangle$$

مرحله ۴: احتمال $P(\omega)$ که نتیجه ω به دست آید متناسب با مربع مدول تصویر $|\psi\rangle$ در امتداد ویژه بردار

$$|\omega\rangle \text{ است یعنی } P(\omega) \propto |\langle \omega | \psi \rangle|^2.$$

$$P(\omega) \propto |\langle \omega | \psi \rangle|^2 = \langle \psi | \omega \rangle \langle \omega | \psi \rangle = \langle \psi | P_\omega | \psi \rangle = \langle \psi | P_\omega P_\omega | \psi \rangle = \langle P_\omega \psi | P_\omega \psi \rangle$$

اطلاعات بسیار زیادی در این مراحل وجود دارد. در اینجا به نکات برجسته زیر اشاره می‌کنیم:

۱- این نظریه فقط پیش‌بینی‌های احتمالی برای نتیجه اندازه‌گیری Ω انجام می‌دهد. به علاوه، احتمالات (نسبی) را فقط برای به دست آوردن ویژه مقدار ω از Ω مشخص می‌کند. بنابراین تنها مقادیر ممکن Ω ویژه مقادیر آن هستند. از آنجا که اصل موضوع (۲) ایجاب می‌کند که Ω هرمیتی باشد، این ویژه مقادیر همگی حقیقی‌اند.

۲- چون گفته می‌شود که $P(\omega_i) \propto |\langle \omega_i | \psi \rangle|^2$ است، کمیت $|\langle \omega_i | \psi \rangle|^2$ فقط احتمال نسبی است. برای

به دست آوردن احتمال مطلق، $|\langle \omega_i | \psi \rangle|^2$ را بر مجموع همه احتمالات نسبی تقسیم می‌کنیم:

$$P(\omega_i) = \frac{|\langle \omega_i | \psi \rangle|^2}{\sum_j |\langle \omega_j | \psi \rangle|^2} = \frac{|\langle \omega_i | \psi \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (1-2-4)$$

واضح است که اگر با حالت بهنجار شده

$$|\psi'\rangle = \frac{|\psi\rangle}{\langle \psi | \psi \rangle^{1/2}}$$

شروع کرده بودیم به

$$P(\omega_i) = |\langle \omega_i | \psi' \rangle|^2 \quad (2-2-4)$$

می‌رسیدیم.

اگر $|\psi\rangle$ یک بردار سره باشد، چنین مقیاس‌بندی مجددی ممکن شده و بعد از این مفروض خواهد بود. اگر $|\psi\rangle$ یکی از بردارهای ناسره در فضا باشد این تعبیر احتمال با شکست مواجه می‌شود چون در این حالت $\langle \psi | \psi \rangle = \delta(0)$ تنها بهنجارش معقول است. وضعیت چنین بردارهایی در مثال ۴-۲-۲ در چند صفحه بعد توضیح داده خواهد شد.

توجه کنید که شرط $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ یک موضوع قرار دادی است و یک قید فیزیکی روی بردارهای سره نیست (در واقع مجموعه همه بردارهای بهنجار شده، حتی یک فضای برداری تشکیل نمی‌دهند. اگر $|\psi\rangle$ و $|\psi'\rangle$ بهنجار شده باشند، آنگاه هر ترکیب خطی دلخواه $\alpha|\psi\rangle + \beta|\psi'\rangle$ بهنجار نیست).

همین‌طور توجه کنید که توزیع احتمالات نسبی متناظر با حالت‌های $|\psi\rangle$ و $\alpha|\psi\rangle$ ، وقتی مجدداً به یک بهنجار می‌شوند، به توزیع احتمال مطلق یکسان تبدیل می‌شوند. بنابراین متناظر با هر حالت فیزیکی، نه یک بردار، بلکه یک «جهت» در فضای هیلبرت وجود دارد. وقتی از حالت ذره صحبت می‌کنیم معمولاً منظورمان کت $|\psi\rangle$ با نرم یک است. حتی با شرط $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ ، آزاد هستیم تا کت را در عددی به شکل $e^{i\theta}$ ضرب کنیم بدون اینکه حالت فیزیکی را تغییر دهیم. این آزادی به دفعات مورد استفاده قرار خواهد گرفت تا مولفه‌های $|\psi\rangle$ در یک پایه، حقیقی شوند.

۳- اگر $|\psi\rangle$ یک ویژه حالت، $|\omega_i\rangle$ ، باشد، اندازه‌گیری Ω تضمین می‌کند که نتیجه ω_i به‌دست می‌آید. یک ذره در چنین حالتی می‌توان گفت که از حیث کلاسیکی دارای مقدار ω_i برای Ω است.

۴- وقتی دو حالت $|\omega_1\rangle$ و $|\omega_2\rangle$ بر هم نهاده می‌شوند تا یک حالت (بهنجار شده) نظیر

$$|\psi\rangle = \frac{\alpha|\omega_1\rangle + \beta|\omega_2\rangle}{(|\alpha|^2 + |\beta|^2)^{1/2}}$$

تشکیل دهند حالتی به‌دست می‌آید که اندازه‌گیری Ω روی آن می‌تواند یا مقدار ω_1 یا مقدار ω_2 را با احتمال‌های به‌ترتیب $|\alpha|^2 / (|\alpha|^2 + |\beta|^2)$ ، $|\beta|^2 / (|\alpha|^2 + |\beta|^2)$ به‌دست دهد. این، پیامد عجیب اصل برهم‌نهی در نظریه کوانتومی است که قبلاً به آن اشاره شد. این اصل هیچ مانسته‌ای در مکانیک کلاسیک ندارد. برای مثال، اگر یک متغیر دینامیکی ریسمان در حالت $\alpha f + \beta g$ اندازه‌گیری شود، انتظار نمی‌رود که به مقدار متناظر با f در اندکی از زمان دست یافته و به مقدار مربوط به g در بقیه زمان دست یافت؛ در

عوض می‌توان انتظار یک مقدار منحصر بفرد و عموماً متمایز از هر دو را داشت. همین‌طور توابع f و αf (حقیقی) دو پیکربندی متمایز از ریمان را توصیف می‌کنند و از نظر فیزیکی هم ارزش نیستند.

۵- وقتی اطلاعاتی در مورد متغیر دیگر Λ بخواهیم کل فرایند را تکرار کرده و ویژه بردارهای $|\lambda\rangle$ و ویژه مقادیر λ_i را به دست می‌آوریم. سپس

$$P(\lambda) = |\langle \lambda | \psi \rangle|^2$$

البته پایه‌های Ω و Λ در حالت کلی متفاوت خواهند بود. به‌طور خلاصه، یک کت منفرد $|\psi\rangle$ داریم که نمایشگر ذره در فضای هیلبرت است و حاوی پیش‌بینی آماری برای همه مشاهده‌پذیرها می‌باشد. برای استخراج این اطلاعات برای هر مشاهده‌پذیر می‌بایست ویژه پایه عملگر متناظر را پیدا کرده و تصویر $|\psi\rangle$ را روی همه ویژه کت‌های آن به دست آوریم.

۶- وقتی توجه ما از یک متغیر Ω به متغیر دیگر Λ معطوف می‌شود، توجه مان از کت‌های $|\omega\rangle$ به کت‌های $|\lambda\rangle$ معطوف می‌شود. اما همیشه نیازی به تغییر پایه نیست. برای مثال فرض کنید در پایه Ω کار می‌کنیم که در آن

$$|\psi\rangle = \sum_i |\omega_i\rangle \langle \omega_i | \psi \rangle$$

و $P(\omega_i) = \langle \omega_i | \psi \rangle^2$. اگر $P(\lambda_i)$ را بخواهیم، عملگر Λ را در نظر گرفته (که ماتریسی معلوم با عناصر $\Delta_{ij} = \langle \omega_i | \Lambda | \omega_j \rangle$ است) ویژه بردارهای آن، $|\lambda_i\rangle$ ها، را به دست آورده (که بردارهای ستونی با مولفه‌های $\langle \omega_j | \lambda_i \rangle$ هستند) و ضرب داخلی $\langle \lambda_i | \psi \rangle$ را در این پایه محاسبه می‌کنیم:

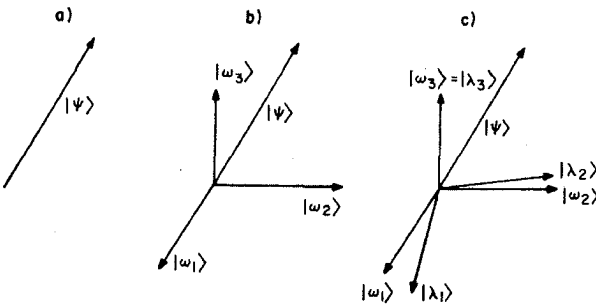
$$\langle \lambda_i | \psi \rangle = \sum_j \langle \lambda_i | \omega_j \rangle \langle \omega_j | \psi \rangle$$

مثال ۴-۲-۱: مثال زیر را از یک فضای هیلبرت ساختگی $V^3(R)$ در نظر بگیرید (شکل ۴-۱). در شکل ۴-۱-الف حالت بهنجار شده $|\psi\rangle$ را، بدون هر نوع اشاره به یک پایه، داریم. برای انجام پیش‌بینی‌هایی روی Ω ، ویژه پایه آنرا به دست آورده و بردار حالت $|\psi\rangle$ را بر حسب ویژه بردارهای راست هنجار $|\omega_1\rangle$ و $|\omega_2\rangle$ می‌نویسیم (شکل ۴-۱-ب). فرض می‌کنیم که

$$|\omega\rangle = \frac{1}{2} |\omega_1\rangle + \frac{1}{2} |\omega_2\rangle + \frac{1}{2^{1/2}} |\omega_3\rangle$$

این یعنی، مقادیر ω_1 ، ω_2 و ω_3 به ترتیب با احتمال‌های $\frac{1}{4}$ ، $\frac{1}{4}$ و $\frac{1}{2}$ انتظار می‌روند و سایر مقادیر ω غیرممکن هستند. اگر در عوض، $|\psi\rangle$ یک ویژه بردار، مثلاً $|\omega_1\rangle$ ، بود آنگاه نتیجه ω_1 با احتمال یک به دست می‌آمد. از نظر کلاسیکی فقط ذره واقع در حالت $|\psi\rangle = |\omega_1\rangle$ دارای مقدار خوش تعریفی از Ω است. اگر $P(\lambda_i)$ را بخواهیم پایه $|\lambda_1\rangle$ ، $|\lambda_2\rangle$ و $|\lambda_3\rangle$ را تشکیل می‌دهیم که می‌تواند در حالت کلی متمایز از پایه Ω باشد. در مثال ما (شکل ۴-۱-ج) فقط یک ویژه بردار مشترک $|\omega_3\rangle = |\lambda_3\rangle$ وجود دارد.

با بازگشت به بحث اصلی خود، می‌بینیم که چند پیچیدگی و مشکل در انجام مراحل ۱ تا ۴ بروز می‌کند. در زیر مشکلات عمده را بحث کرده و چگونگی برطرف کردن آنها را بیان می‌کنیم.



شکل ۴-۱-الف) -کت بهنجار شده در $V^3(R)$ ، نمایشگر حالت ذره. (ب) - پایه Ω ، $|\omega_1\rangle$ ، $|\omega_2\rangle$ و $|\omega_3\rangle$ (ج) پایه‌های Ω و Λ . برای کسب اطلاعات آماری در مورد یک متغیر، ویژه بردارهای عملگر متناظر را به دست آورده و $|\psi\rangle$ را روی آن پایه تصویر می‌کنیم.

پیچیدگی ۱: دستورالعمل $\Omega = \omega(x \rightarrow X, p \rightarrow P)$ مبهم است. برای مثال اگر $\omega = xp$ باشد نمی‌دانیم که آیا $\Omega = XP$ یا $\Omega = PX$ ، چون از نظر کلاسیکی $xp = px$ است. یک دستورالعمل کلی برای برطرف کردن چنین ابهاماتی وجود ندارد. فرمالیزم انتگرال مسیر (که هنوز مطالعه نکرده‌ایم) معمولاً به این مشکل پاسخ می‌دهد چون این فرمالیزم می‌تواند بدون توجه به موجودات غیرجابه‌جا شونده فرمول‌بندی شود. در اینجا، قاعده این است که از جمع متقارن $\Omega = (XP + PX)/2$ استفاده کنیم. ضمناً توجه کنید که متقارن‌سازی، Ω ی هریتی تحویل ما می‌دهد. متقارن‌سازی، تا وقتی که Ω شامل حاصل ضرب‌های توان دو یا بیشتر X با توان دو یا بیشتر P نباشد، یک راه حل است. در غیر این صورت فقط تجربه می‌تواند در مورد دستورالعمل صحیح تصمیم بگیرد. در این کتاب با چنین مواردی مواجه نخواهیم شد.

پیچیدگی ۲: عملگر Ω **تبهگن باشد.** فرض کنید مثلاً $\omega_1 = \omega_2 = \omega$ باشد. در این حالت $P(\omega)$ چیست؟ پایه راست هنجار $|\omega, 1\rangle$ و $|\omega, 2\rangle$ را در ویژه فضای V_m با ویژه مقدار ω انتخاب می‌کنیم، آنگاه

$$P(\omega) = |\langle \omega, 1 | \psi \rangle|^2 + |\langle \omega, 2 | \psi \rangle|^2$$

که مربع مدول تصویر $|\psi\rangle$ در ویژه فضای تبهگن است. این نتیجه‌ای است که اگر فرض کنیم ω_1 و ω_2 تمایز فوق‌العاده کوچکی با هم داشته باشند و به دنبال $P(\omega_1)$ یا $P(\omega_2)$ باشیم، خواهیم رسید. برحسب عملگر تصویرگر ویژه فضا،

(۴-۲-۳-الف)

$$\mathbb{P}_\omega = |\omega, 1\rangle\langle \omega, 1| + |\omega, 2\rangle\langle \omega, 2|$$

داریم:

(۴-۲-۳-ب)

$$P(\omega) = \langle \psi | \mathbb{P}_\omega | \psi \rangle = \langle \mathbb{P}_\omega \psi | \mathbb{P}_\omega \psi \rangle$$

در کل می‌توان در اصل موضوع (۳)،

$$P(\omega) \propto \langle \psi | P_\omega | \psi \rangle$$

قرار داد. که در آن عملگر تصویرگر برای ویژه فضای با ویژه مقدار ω است. در این صورت اصل موضوع (۳) به صورتی که ابتدائاً گفته شد حالت خاصی می شود که در آن هیچ تبهگنی وجود ندارد و هر ویژه فضا، فقط یک ویژه بردار است.

در مثال ما از $V^3(R)$ ، اگر $\omega_1 = \omega_2 = \omega$ باشد (شکل ۴-۱-ب) آنگاه $P(\omega)$ مربع مولفه $|\psi\rangle$ در صفحه "x-y" است.

پیچیدگی ۳: طیف ویژه مقداری Ω پیوسته باشد. در این حالت $|\psi\rangle$ را به صورت زیر بسط می دهیم

$$|\psi\rangle = \int |\omega\rangle \langle \omega | \psi \rangle d\omega$$

انتظار می رود که وقتی ω به طور پیوسته تغییر می کند $\langle \omega | \psi \rangle$ هم اینگونه باشد، یعنی انتظار می رود که $\langle \omega | \psi \rangle$ یک تابع هموار، $\psi(\omega)$ ، باشد. برای تصور این تابع، یک فضای یک بعدی معین، موسوم به فضای ω معرفی می شود که نقاط واقع در آن به وسیله مختصه ω برچسب زده می شوند. در این فضا $\psi(\omega)$ تابعی هموار از ω خواهد شد و تابع موج فضایی ω نامیده می شود. ما صرفاً عکس چیزی را که در بخش ۱-۱۰ انجام دادیم، انجام می دهیم؛ در آن جا با یک تابع $f(x)$ شروع کرده و تلاش کردیم آنرا به عنوان مولفه های یک کت $|\psi\rangle$ بی نهایت بعدی در پایه $|x\rangle$ تعبیر کنیم. تا وقتی که بردار حالت $|\psi\rangle$ مورد نظر باشد، فقط یک فضا، فضای هیلبرت، وجود دارد که $|\psi\rangle$ در آن قرار می گیرد. فضای ω ، فضای λ ، و غیره بسلاهای کمکی هستند که به منظور تصور مولفه های بردار بی نهایت بعدی $|\psi\rangle$ در پایه Ω ، پایه Λ ، و غیره و غیره معرفی شده اند. تابع موج $\psi(\omega)$ هم دامنه احتمال برای یافتن ذره با $\Omega = \omega$ نامیده می شود.

آیا می توانیم $|\langle \omega | \psi \rangle|^2$ را به عنوان احتمال یافتن ذره با مقدار ω برای Ω تعبیر کنیم؟ خیر. از آنجا که تعداد مقادیر ممکن برای ω بی نهایت بوده و احتمال کل برابر یک است به هر مقدار منفرد ω فقط یک احتمال بی نهایت کوچک می تواند اختصاص یابد. $P(\omega) = |\langle \omega | \psi \rangle|^2$ را به عنوان چگالی احتمال در ω تعبیر می کنند و منظور این است که $P(\omega)d\omega$ احتمال به دست آوردن نتیجه ای بین ω و $\omega + d\omega$ است. این تعریف، درخواست اینکه احتمال کل یک باشد را تأمین می کند، چون

$$\int P(\omega) d\omega = \int |\langle \omega | \psi \rangle|^2 d\omega = \int \langle \psi | \omega \rangle \langle \omega | \psi \rangle d\omega \quad (۴-۲-۴)$$

$$= \langle \psi | I | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle = 1$$

اگر $\langle \psi | \psi \rangle = \delta(0)$ تنها امکان بهنجارش معقول باشد حالت نمی تواند به یک بهنجار شود و $P(\omega)$ می بایست به عنوان چگالی احتمال نسبی تعبیر شود. این حالت های ناسره را بعداً بحث خواهیم کرد.

یک مثال مهم از طیف پیوسته، مثال X ، عملگر متناظر با مکان x است. تابع موج در پایه X (یا فضای x)، $\psi(x)$ ، معمولاً فقط تابع موج گفته می‌شود چون پایه X پایه‌ای است که تقریباً همیشه به کار می‌رود. در بحث‌های ما در فصل قبل $|\psi(x)|^2$ به جای چگالی احتمال به عنوان احتمال یافتن ذره در یک x معین معرفی شد تا از ورود به جزئیات اجتناب شود. اکنون زمان آن فرا رسیده که دقیق‌تر شویم!

قبلاً تعجب می‌کردیم که چرا لازم است تا یک ذره کلاسیکی را، که فقط با دو عدد x و p تعریف می‌شد، به وسیله کتی که دارای بی‌نهایت مولفه است توصیف کنیم. اکنون پاسخ آن روشن است. یک ذره کلاسیکی در هر زمان معین، یک مکان معین دارد. در مشخص کردن حالت مجبور هستیم این مقدار x را ارائه دهیم. از سوی دیگر یک ذره کوانتومی در اندازه‌گیری می‌تواند هر مقدار x را بگیرد و می‌بایست احتمالات نسبی برای همه خروجی‌های ممکن را مشخص کنیم. این بخشی از اطلاعات موجود در $\langle \psi | x \rangle = \psi(x)$ ، مولفه‌های $\langle \psi |$ در پایه X ، است. البته در مورد ذره کلاسیکی لازم است تا تکانه p هم مشخص شود. در نظریه کوانتومی، برای به دست آوردن مقادیر مختلف تکانه احتمالات وقوع ارائه می‌شود اما نیازی به یک بردار جدید برای مشخص کردن اینها نیست؛ همین کت $\langle \psi |$ وقتی بر حسب ویژه کت‌های $|p\rangle$ عملگر تکانه P بسط داده شود این احتمالات را از طریق تابع موج در فضای p ، $\langle p | \psi \rangle = \psi(p)$ ، به دست می‌دهد.

پیچیدگی ۴: متغیر کوانتومی Ω هیچ نظیر کلاسیکی نداشته باشد.

معلوم شده است که ذرات «نقطه‌ای»، مثل الکترون، دارای «اسپین» هستند که یک تکانه زاویه‌ای داخلی است یعنی تکانه زاویه‌ای که ارتباطی با حرکت آن در فضا ندارد. از آنجا که چنین درجه آزادی در مکانیک کلاسیک وجود ندارد اصول موضوعه ما مشخص نمی‌کنند که کدام عملگر قرار است این متغیر را در نظریه کوانتومی توصیف کند. همان‌طور که در فصل مربوط به اسپین خواهیم دید پاسخ، از ترکیب یک استدلال کلاسیکی و یک استدلال شهودی به دست می‌آید. شایسته است به خاطر بسپاریم که اصول موضوعه با هر زحمتی که بنا شوند می‌بایست اغلب به وسیله عقاید کلاسیکی و شهودی تکمیل شوند.

با بحث برنامه چهار مرحله‌ای برای استخراج اطلاعات آماری از بردار حالت، با مطالعه مطالب دیگری که اصول موضوعه نظریه کوانتومی بیان می‌کنند، ادامه می‌دهیم.

رمبش^۱ بردار حالت

اکنون جنبه‌های دیگری از اصل موضوع (۳) را بررسی می‌کنیم یعنی اینکه اندازه‌گیری متغیر Ω بردار حالت را که در حالت کلی یک برهم نهی به شکل

$$|\psi\rangle = \sum_{\omega} |\omega\rangle \langle \omega | \psi \rangle$$

است به ویژه حالت $|\omega\rangle$ متناظر با ویژه مقدار ω به دست آمده در اندازه‌گیری تغییر می‌دهد. این پدیده ریمبش یا فروریزش (تقلیل) بردار حالت نامیده می‌شود.

ابتدا باید توجه کنیم که هر بیان قطعی در مورد اثر فرایند اندازه‌گیری، از قبل فرض می‌کند که فرایند اندازه‌گیری از یک نوع معین است. برای مثال این اصل کلی مکانیک کلاسیک که هر متغیر دینامیکی بدون تغییر حالت ذره می‌تواند اندازه‌گیری شود فرض می‌کند که اندازه‌گیری یک اندازه‌گیری ایده‌آل است (سازگار با روش کلاسیکی). اما می‌توان اندازه‌گیری‌های غیر ایده‌آلی را هم تصور کرد که حالت را تغییر می‌دهند؛ تصور کنید که بخواهیم مکان لوستری را در یک اتاق تاریک با استفاده از تکان دادن یک جاروب برای تماس و برخورد با آن تعیین کنیم. آنچه به اصل موضوع (۳) عمق می‌بخشد این است که فرایند اندازه‌گیری اشاره شده در آنجا یک اندازه‌گیری کوانتومی ایده‌آل است تا حدی که بهترین اندازه‌گیری قابل انجام است. اکنون مفهوم اندازه‌گیری کوانتومی ایده‌آل و مضمون این اصل موضوع را با یک مثال روشن می‌کنیم.

یک ذره را در یک ویژه حالت تکانه $|p\rangle$ در نظر بگیریم. اصل موضوع مذکور بیان می‌کند که اگر تکانه در این حالت اندازه‌گیری شود از اینکه نتیجه p شود مطمئن هستیم و اینکه حالت، بعد از اندازه‌گیری همان حالت خواهد بود (چون $\langle p|\psi\rangle = |p\rangle$ یک ویژه حالت عملگر P مورد بحث است). یک روش برای اندازه‌گیری تکانه ذره، از طریق پراکندگی کامپتون است که در آن یک فوتون با تکانه معین از ذره وا می‌جهد. با اندازه‌گیری تغییر تکانه فوتون، Δp_γ ، می‌توانیم تکانه اولیه ذره، p ، و تکانه نهایی، $p - \Delta p_\gamma$ ، را تعیین کنیم. این یک اندازه‌گیری ایده‌آل نیست چون حالت ذره تغییر می‌کند. اما اگر به حد $\Delta p_\gamma \rightarrow 0$ برویم به یک اندازه‌گیری کوانتومی ایده‌آل تکانه می‌رسیم. بعد از این وقتی از اندازه‌گیری تکانه سخن می‌گوییم منظورمان همین خواهد بود. همچنین فرض خواهیم کرد که برای هر متغیر دینامیکی یک اندازه‌گیری ایده‌آل متناظر وجود دارد. برای مثال، اندازه‌گیری ایده‌آل مکان را بحث خواهیم کرد که وقتی روی ذره واقع در حالت $|x\rangle$ انجام شود با احتمال ۱ نتیجه x را به دست خواهد داد و بردار حالت را بدون تغییر نگه خواهد داشت. حال فرض کنید که مکان یک ذره واقع در ویژه حالت تکانه، $|p\rangle$ ، را اندازه بگیریم، چون $|p\rangle$ مجموع ویژه کت‌های مکان است،

$$|p\rangle = \int |x\rangle \langle x|p\rangle dx$$

این اندازه‌گیری، سیستم را به یک حالت $|x\rangle$ خواهد برد. بنابراین حتی اندازه‌گیری ایده‌آل مکان هم حالت را که یک ویژه حالت مکان نیست تغییر خواهد داد. چرا اندازه‌گیری مکان، حالت $|p\rangle$ را تغییر می‌دهد در حالی که اندازه‌گیری تکانه آنرا تغییر نمی‌دهد؟ پاسخ آن است که یک اندازه‌گیری ایده‌آل مکان، از فوتون‌های با تکانه بی‌نهایت بزرگ استفاده می‌کند (همان‌طور که خواهیم دید) درحالی که یک اندازه‌گیری ایده‌آل تکانه از فوتون‌های با تکانه بی‌نهایت کوچک استفاده می‌کند (همان‌طور که دیده‌ایم).

لذا این، تفاوتی بزرگ بین مکانیک کوانتومی و کلاسیک است: یک اندازه‌گیری ایده‌آل هر متغیر ω در مکانیک کلاسیک هر حالت را ناوردا نگه می‌دارد در حالی که اندازه‌گیری ایده‌آل Ω در مکانیک کوانتومی فقط ویژه حالت Ω را ناوردا نگه می‌دارد.

اثر اندازه‌گیری می‌تواند به‌طور طرح وار به شکل زیر نمایش داده شود:

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\Omega \text{ measured, } \omega \text{ obtained}} = \frac{P_\omega |\psi\rangle}{\langle P_\omega \psi | P_\omega \psi \rangle^{1/2}}$$

که P_ω عملگر تصویرگر مربوط به $|\omega\rangle$ است و حالت، بعد از اندازه گیری بهنجار شده است. اگر ω تبهگن باشد،

$$|\psi\rangle \rightarrow \frac{P_\omega |\psi\rangle}{\langle P_\omega \psi | P_\omega \psi \rangle^{1/2}}$$

که P_ω عملگر تصویرگر برای ویژه فضای V_ω است. نکته زیر باید مورد توجه خاص قرار گیرد: اگر حالت اولیه $|\psi\rangle$ نامعلوم بود و اندازه گیری، ویژه مقدار تبهگن ω را به دست داد نمی توان گفت که حالت، بعد از اندازه گیری چیست، جز اینکه حالتی در ویژه فضا با ویژه مقدار ω است. از سوی دیگر اگر حالت اولیه $|\psi\rangle$ معلوم بود و اندازه گیری، یک مقدار تبهگن ω را به دست داد، حالت بعد از اندازه گیری $P_\omega |\omega\rangle$ می شود (صرف نظر از بهنجارش). مثال ما را از $V^3(R)$ در نظر بگیرید (شکل ۴-۱-ب). مثلاً داشتیم: $\omega_1 = \omega_2 = \omega$. فرض کنید از یک پایه راست هنجار $|\omega, 1\rangle$ ، $|\omega, 2\rangle$ و $|\omega, 3\rangle$ استفاده کنیم که طبق معمول برچسب های اضافی ۱ و ۲ برای تمایز بین بردارهای پایه در ویژه فضای تبهگن لازم هستند. اگر در این پایه برای مثال بدانیم که

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}|\omega, 1\rangle + \frac{1}{2}|\omega, 2\rangle + \left(\frac{1}{2}\right)^{1/2}|\omega_3\rangle$$

و اندازه گیری یک مقدار ω را به دست دهد، حالت بهنجار شده بعد از اندازه گیری برایمان مشخص است و عبارتست از

$$|\psi\rangle = 2^{-1/2}(|\omega, 1\rangle + |\omega, 2\rangle)$$

از طرف دیگر اگر حالت اولیه نامعلوم بود و یک اندازه گیری، نتیجه ω را به دست داد، فقط می توانستیم بگوییم که

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}|\omega, 1\rangle + \frac{1}{2}|\omega, 2\rangle + \left(\frac{1}{2}\right)^{1/2}|\omega_3\rangle$$

که α و β اعداد حقیقی دلخواهند.

توجه کنید که اگر چه از اندازه گیری نمی دانیم که α و β چه چیزهایی هستند اما دلخواه هم نیستند. به عبارتی دیگر، سیستم یک بردار حالت خوش تعریف $|\psi\rangle$ قبل از اندازه گیری داشته، با اینکه $|\psi\rangle$ را نمی دانیم، و یک بردار حالت خوش تعریف $P_\omega |\omega\rangle$ بعد از اندازه گیری دارد، اگر چه کل چیزی که می دانیم آن است که این بردار در یک زیر فضا، V_ω ، قرار می گیرد.

چگونه نظریه کوانتومی را بیازماییم؟

یکی از جنبه های برجسته مکانیک کلاسیک، ارائه پیش بینی های کاملاً معین است. مثلاً پیش بینی می کند که یک ذره در حال حرکت در $x = x_i$ با تکانه p_i در پتانسیل $V(x)$ ، دو ثانیه بعد با تکانه $p = p_f$ به

$x = x_f$ خواهد رسید. برای آزمودن این پیش‌بینی ذره را در $t = 0$ در $x = x_i$ با $p = p_i$ آماده می‌کنیم و در $x = x_f$ منتظر می‌مانیم تا ببینیم که آیا ذره در $t = 2$ با $p = p_f$ به آنجا می‌رسد یا نه. از طرف دیگر نظریه کوانتومی، پیش‌بینی‌های آماری در مورد یک ذره واقع در حالت $|\psi\rangle$ انجام می‌دهد و ادعا می‌کند که این حالت طبق معادله شرودینگر با زمان تحول می‌یابد. برای آزمودن این پیش‌بینی‌ها می‌بایست قادر باشیم تا

۱- ذرات را در یک حالت خوش تعریف $|\psi\rangle$ خلق کنیم.

۲- پیش‌بینی‌های احتمالاتی را در هر زمان چک کنیم.

رہبش بردار حالت روش خوبی برای آماده کردن حالت‌های معین برایمان فراهم می‌کند: با یک ذره واقع در حالت دلخواه $|\psi\rangle$ شروع کرده و متغیر Ω را اندازه می‌گیریم. اگر یک ویژه مقدار غیرتہگن ω را بہ دست آوریم، حالت $|\omega\rangle$ را در دست داریم (اگر ω تہگن باشد اندازه‌گیری دیگری لازم است. ما آمادگی بحث این مسئلہ را نداریم). توجہ کنید کہ چطور در نظریہ کوانتومی، اندازه‌گیری، بہ جای اینکہ بہ ما بگوید سیستم قبل از اندازه‌گیری در چه وضعیتی بود، بیان می‌کند کہ درست بعد از اندازه‌گیری در چه وضعیتی است (البتہ این را ہم بیان می‌کند کہ حالت اولیه تصویری روی حالت $|\omega\rangle$ بہ دست آمده بعد از اندازه‌گیری داشته است. اما این اطلاعات در مقایسہ با مشخص کردن حالت درست بعد از اندازه‌گیری هیچ چیزی نیستند). بہ ہر شکل، فرض کنید حالت $|\omega\rangle$ را آماده کرده‌ایم. اگر یک متغیر Λ را اندازه بگیریم بلافاصلہ بعد از این، بہ طوری کہ حالت نتوانستہ باشد از $|\omega\rangle$ تغییر کردہ باشد، و اگر مثلاً

$$|\omega\rangle = \frac{1}{3^{1/2}} |\lambda_1\rangle + \left(\frac{2}{3}\right)^{1/2} |\lambda_2\rangle + 0 \cdot (\text{others})$$

باشد این نظریہ پیش‌بینی می‌کند کہ λ_1 و λ_2 بہ ترتیب با احتمال‌های $\frac{1}{3}$ و $\frac{2}{3}$ بہ دست خواهند آمد. اگر اندازه‌گیری ما یک λ_i بدهد، $i \neq 1, 2$ ، (یا بدتر اینکہ، ہمہ ویژه مقادیر $\lambda \neq \lambda_i$) اینجا پایان نظریہ خواهد بود. لذا فرض می‌کنیم یکی از مقادیر مجاز را بہ دست آوریم، مثلاً λ_1 . این با نظریہ سازگار است اما بہ طور کامل آنرا تایید نمی‌کند چون احتمال وقوع می‌توانست برای λ_1 بہ جای $\frac{1}{3}$ ، $\frac{1}{30}$ باشد و باز ہم λ_1 را بہ دست آوریم. بنابراین باید آزمایش را بارها تکرار کنیم. اما نمی‌توانیم آزمایش را با این ذره تکرار کنیم چون بعد از اندازه‌گیری، حالت ذره $|\lambda_1\rangle$ می‌شود و می‌بایست با ذره دیگر واقع در $|\omega\rangle$ از نو شروع کنیم. برای این منظور بہ یک ہنگرد (مجموع) کوانتومی نیاز داریم کہ شامل تعداد زیادی، N ، از ذرات باشد کہ ہمگی در یک حالت $|\omega\rangle$ قرار دارند. اگر یک اندازه‌گیری Λ روی یکی از این ذرات صورت گیرد تقریباً $N/3$ مقدار λ_1 را خواهند داد و بہ حالت $|\lambda_1\rangle$ می‌روند در حالی کہ تقریباً $2N/3$ مقدار λ_2 را داده و بہ حالت $|\lambda_2\rangle$ می‌روند. برای N بہ قدر کافی بزرگ، انحرافات از کسرهای $\frac{1}{3}$ و $\frac{2}{3}$ ناچیز خواهد بود. تفاوت عمدہ بین یک ہنگرد کلاسیکی از نوعی کہ در مثلاً مکانیک آماری کلاسیکی مواجہ می‌شویم و ہنگرد کوانتومی اشارہ شدہ در فوق این است کہ اگر در یک ہنگرد کلاسیکی متشکل از N ذره، $N/3$ نتیجہ λ_1 و $2N/3$ نتیجہ λ_2 دادند می‌توان تصور کرد کہ ہنگرد قبل از اندازه‌گیری دارای $N/3$ ذره با $\lambda = \lambda_1$ و بقیہ با

$\lambda = \lambda_2$ بوده است. از طرف دیگر در هنگرد کوانتومی، فرض می‌شود که هر ذره پیش از اندازه‌گیری در همان حالت $|\omega\rangle$ باشد (یعنی هر ذره از لحاظ پتانسیلی قابلیت به‌دست دادن نتیجه λ_1 یا λ_2 را دارد). فقط بعد از اندازه‌گیری، $\frac{1}{3}$ از آنها به حالت $|\lambda_1\rangle$ رفته و بقیه به $|\lambda_2\rangle$ می‌روند.

همین که یک هنگرد داشته باشیم می‌توانیم هر متغیر دیگر را اندازه‌گیری کرده و انتظارات نظریه کوانتومی را بیازماییم. همچنین می‌توانیم یک هنگرد آماده کرده، اجازه دهیم با زمان تحول یابد و آنرا در زمان‌های آینده مطالعه کنیم و ببینیم که آیا حالت نهایی آن حالتی است که معادله شرودینگر به ما بیان می‌کند یا نه.

مثال ۴-۲-۳: مثالی از یک هنگرد که برای محک نظریه کوانتومی به کار می‌رود در آزمایش دو شکافی، با فوتون‌ها، مشاهده شد. یک فوتون معین با تکانه p و انرژی E انتظار می‌رفت که با چگالی احتمالی که از تابع نوسانی $|\psi(x)|^2$ به‌دست می‌آید به آشکارسازها اصابت کند. می‌توان آزمایش را با یکی یکی فرستادن چنین فوتون‌هایی، N بار تکرار کرد تا دید که آیا توزیع تعداد نهایی واقعاً از $|\psi(x)|^2$ به‌دست می‌آید یا نه. می‌توان باریکه‌ای ماکروسکوپی و تکفام از نور با فرکانس $\omega = E/\hbar$ و عدد موج $k = p/\hbar$ فرستاد که شامل تعداد زیادی فوتون با انرژی E و تکانه p است. اگر فرض شود که فوتون‌ها غیر برهم‌کنش کننده هستند (که تا حد زیادی صحیح است)، فرستادن باریکه با آزمایش کردن با هنگرد هم ارز می‌شود. در این حالت به محض اینکه باریکه به جریان یفتند، الگوی شدت، شکل چگالی احتمال $|\psi(x)|^2$ را خواهد گرفت.

مثال ۴-۲-۳: مثال زیر ارائه می‌شود تا تمایز بین توصیف‌های احتمالاتی سیستم را در مکانیک کلاسیک و مکانیک کوانتومی روشن کند:

یک طاس شش وجهی را به‌عنوان سیستم کلاسیکی خود در نظر می‌گیریم که برای آن احتمالات $P(n)$ به‌دست آوردن یک عدد n به‌طور تجربی تعیین شده‌اند. به‌عنوان سیستم کوانتومی خود، ذره‌ای را در حالت

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^6 C_i |\omega_i\rangle$$

در نظر می‌گیریم. فرض کنید چشم‌هایمان را ببندیم و طاس را بریزیم و آنرا با یک لیوان بپوشانیم. توصیف آماری آن تشابه زیادی با توصیف کوانتومی حالت $|\psi\rangle$ دارد:

۱- حالت طاس قبل از اینکه لیوان برداشته شود به‌وسیله یک تابع احتمال $P(n)$ توصیف می‌شود.

۲- تنها مقادیر ممکن Π عبارتند از ۱، ۲، ۳، ۴، ۵ و ۶.

۳- اگر لیوان برداشته شود و یک مقدار، مثلاً $n=3$ ، به‌دست آید، تابع $P(n)$ به δ_{n3} تقلیل می‌یابد (می‌رمد).

۴- اگر مجموعه‌ای از N چنین طاس‌هایی ریخته شوند، $N P(n)$ از آنها نتیجه Π را به‌دست خواهند داد (وقتی $N \rightarrow \infty$ میل می‌کند).

بیانات متناظر برای ذره واقع در حالت $|\psi\rangle$ بدون شک برای شما شناخته شده هستند. اکنون بعضی از تفاوت‌های کلیدی بین توصیف‌های آماری در دو حالت را بررسی می‌کنیم.

۱- ممکن است، حداقل در اصل، با معلوم بودن جرم طاس، مکان آن، سمت‌گیری آن، سرعت، سرعت زاویه‌ای در زمان رها شدن، چسبندگی هوا، کشسانی سطح روی میز و غیره و غیره پیش‌بینی کنیم که دقیقاً

کدام وجه طاس رو به بالا خواهد بود. اما در حالت کوانتومی، توصیف آماری تنها امکان است، حتی از نظر اصولی.

۲- اگر با برداشتن لیوان، نتیجه $n = 3$ به دست آمده بود، منطقی است فرض کنیم که طاس حتی قبل از اندازه گیری در یک چنین حالتی بوده است. اما در حالت کوانتومی، حالت بعد از اندازه گیری، مثلاً $|\omega_3\rangle$ ، حالت قبل از اندازه گیری، $|\psi\rangle$ ، نیست.

۳- اگر N عدد از این طاس ها ریخته شده و با N لیوان پوشانده شده باشند، تعداد $NP(1)$ طاس با $n = 1$ ، $NP(2)$ طاس با $n = 2$ و غیره قبل و بعد از اندازه گیری در مجموعه وجود خواهد داشت. در مقابل هنگرد کوانتومی متناظر با $|\psi\rangle$ دارای N ذره خواهد بود که همگی آنها قبل از اندازه گیری در یک حالت $|\psi\rangle$ هستند (یعنی هر کدام می توانند هر یک از مقادیر $\omega_1, \dots, \omega_6$ را به دست دهند) و بعد از اندازه گیری $NP(\omega_i)$ ذره حالت $|\omega_i\rangle$ فقط هنگرد، قبل از اندازه گیری، حالت $|\psi\rangle$ را نمایش می دهد. هنگرد بعد از اندازه گیری، ترکیبی از شش هنگرد نمایش دهنده حالت های $|\omega_1\rangle$ و ... و $|\omega_6\rangle$ است.^۱ مفهوم هنگرد در نظریه کوانتومی مفید است. اکنون دو متغیر آماری را، که یک هنگرد را مشخص می کنند، تعریف کرده و بحث می کنیم.

مقدار چشم داشتی

با داشتن یک هنگرد (مجموعه) بزرگ از N ذره در حالت $|\psi\rangle$ ، نظریه کوانتومی به ما اجازه می دهد که پیش بینی کنیم که اگر متغیر Ω اندازه گیری شود چه کسری از آنها مقدار ω را به دست خواهند داد. اما این پیش بینی، شامل حل مسئله ویژه مقداری عملگر Ω است. اگر کسی علاقه مند به چنین اطلاعات مفصل در مورد حالت (یا هنگرد متناظر) نباشد می تواند به جای آن یک متوسط روی هنگرد، موسوم به مقدار چشم داشتی $\langle \Omega \rangle$ ، را محاسبه کند. مقدار چشم داشتی همان مقدار میانگین تعریف شده در آمار است:

$$\begin{aligned} \langle \Omega \rangle &= \sum_i P(\omega_i) \omega_i = \sum_i |\langle \omega_i | \psi \rangle|^2 \omega_i \\ &= \sum_i \langle \psi | \omega_i \rangle \langle \omega_i | \psi \rangle \omega_i \end{aligned} \quad (۴-۲-۵)$$

اما به خاطر عامل های ω_i که در هر عملگر تصویرگر $\langle \omega_i | \omega_i \rangle$ ضرب شده اند نمی توانیم از $\sum_i \langle \omega_i | \omega_i \rangle = I$ استفاده کنیم. برای استفاده از این نکته توجه کنید که $\langle \omega_i | \omega_i \rangle = \Omega | \omega_i \rangle$ است. با قرار دادن این عبارت، نتیجه می شود که

$$\langle \Omega \rangle = \sum_i \langle \psi | \Omega | \omega_i \rangle \langle \omega_i | \psi \rangle$$

حال می توانیم از $\sum_i \langle \omega_i | \omega_i \rangle = I$ استفاده کنیم. نتیجه اینکه

۱- این مثالی از یک هنگرد آمیخته است. اینها در بخش «گریزی به ماتریس های چگالی» که در ادامه می آید بحث خواهند شد.

$$\langle \Omega \rangle = \langle \psi | \Omega | \psi \rangle \quad (۴-۲-۶)$$

چند نکته در ارتباط با این فرمول وجود دارد که باید مورد توجه قرار گیرند:

۱- برای محاسبه $\langle \Omega \rangle$ فقط لازم است بردار حالت و عملگر Ω مشخص باشند (مثلاً به ترتیب به صورت یک بردار ستونی و یک ماتریس در یک پایه). نیازی به یافتن ویژه بردارها و ویژه مقادیر Ω نیست.

۲- اگر ذره در یک ویژه حالت Ω باشد، یعنی $\langle \psi | \Omega | \psi \rangle = \omega$ ، آنگاه $\langle \Omega \rangle = \omega$.

۳- منظور از مقدار متوسط Ω ، متوسط روی هنگرد است. یک ذره معین البته فقط یکی از ویژه مقادیر را در اندازه گیری به دست خواهد داد. مقدار میانگین، در کل مقداری غیر قابل دسترس برای یک اندازه گیری مجرد خواهد بود مگر اینکه به صورت اتفاقی با یک ویژه مقدار برابر شود [مثالی آشنا از این پدیده، تعداد میانگین بچه برای هر زوج است که می تواند ۲/۱۲ باشد، اگر چه تعداد در یک خانواده معین محدود به یک عدد درست (مثبت) است].

عدم قطعیت

در هر وضعیتی که بتواند به صورت احتمالاتی توصیف شود، کمیت مفید دیگر که باید در کنار میانگین تعیین شود، انحراف معیار است که افت و خیز متوسط حول میانگین را نشان داده و اندازه گیری می کند و به صورت

$$\Delta \Omega = \langle (\Omega - \langle \Omega \rangle)^2 \rangle^{1/2} \quad (۴-۲-۷)$$

تعریف می شود و اغلب انحراف جذر میانگین مربعی نامیده می شود. در مکانیک کوانتومی، عدم قطعیت در Ω به آن اطلاق می شود. اگر Ω طیف گسسته داشته باشد،

$$(\Delta \Omega)^2 = \sum_i P(\omega_i) (\omega_i - \langle \Omega \rangle)^2 \quad (۴-۲-۸)$$

و اگر طیف پیوسته داشته باشد،

$$(\Delta \Omega)^2 = \int P(\omega) (\omega - \langle \Omega \rangle)^2 d\omega \quad (۴-۲-۹)$$

توجه کنید که $\Delta \Omega$ ، درست مثل $\langle \Omega \rangle$ ، با معلوم بودن فقط حالت و عملگر هم قابل محاسبه است، چون معادله (۴-۲-۷) به این معنی است که

$$\Delta \Omega = [\langle \psi | (\Omega - \langle \Omega \rangle)^2 | \psi \rangle]^{1/2} \quad (۴-۲-۱۰)$$

مقدار چشم داشتی و عدم قطعیت توصیف نسبتاً خوبی از حالت ارائه می دهند. برای مثال اگر برایمان معلوم باشد که $\langle X \rangle = a$ و $\Delta X = \Delta$ است، می دانیم که احتمال دارد ذره با انحرافات از مرتبه Δ در نزدیکی $x = a$ مشاهده شود.

تاکنون به اندازه گیری یک متغیر مجرد در یک لحظه پرداخته ایم. اکنون توجه خود را به اندازه گیری بیش از یک متغیر در یک لحظه معطوف می کنیم (از آنجا که هیچ دو اندازه گیری مستقلی نمی توانند واقعاً در یک لحظه انجام شوند) منظورمان از اندازه گیری دو یا چند متغیر دینامیکی، به صورت متوالی و بلافاصله^۱ است.

تمرین ۴-۲-۱ (خیلی مهم): عملگرهای زیر را در فضای هیلبرت $V^3(C)$ در نظر بگیرید:

$$L_x = \frac{1}{2^{1/2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad L_y = \frac{1}{2^{1/2}} \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}, \quad L_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

الف - مقادیر ممکن که در صورت اندازه گیری L_z به دست می آیند کدامند؟

ب - حالتی را در نظر بگیرید که در آن $L_z = 1$ است. در این حالت، $\langle L_x \rangle$ ، $\langle L_x^2 \rangle$ ، ΔL_x کدامند؟

ج - ویژه حالت های بهنجار شده و ویژه مقادیر L_x را در پایه L_z به دست آورید.

د - اگر ذره در حالتی باشد که $L_z = -1$ است و L_x اندازه گیری شود خروجی های ممکن و احتمالات آنها کدامند؟

ه - حالت

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 1/2^{1/2} \end{bmatrix}$$

را در پایه L_z در نظر بگیرید. اگر L_z^2 در این حالت اندازه گیری شود و نتیجه +۱ به دست آید حالت بعد از اندازه گیری کدام است؟ احتمال این نتیجه چقدر بوده است؟ اگر L_z اندازه گیری شود، خروجی ها و احتمالات مربوطه کدام خواهند بود؟

و - یک ذره در حالتی است که برای آن احتمالات عبارتند از $P(L_z = 1) = \frac{1}{4}$ ، $P(L_z = 0) = \frac{1}{2}$ و $P(L_z = -1) = \frac{1}{4}$. خود را متقاعد کنید که عمومی ترین حالت بهنجار شده با این ویژگی عبارتست از:

$$|\psi\rangle = \frac{e^{i\delta_1}}{2} |L_z = 1\rangle + \frac{e^{i\delta_2}}{2^{1/2}} |L_z = 0\rangle + \frac{e^{i\delta_3}}{2} |L_z = -1\rangle$$

قبلاً گفته شد که اگر $|\psi\rangle$ یک حالت بهنجار شده باشد آنگاه حالت $e^{i\theta} |\psi\rangle$ یک حالت بهنجار شده و از نظر فیزیکی معادل با آن است. آیا این بدین معنی است که ضرایب $e^{i\theta}$ که در ویژه حالت های L_z ضرب می شوند بی اهمیت هستند؟ [برای مثال $P(L_x = 0)$ را محاسبه کنید].

متغیرهای سازگار و ناسازگار

یک ویژگی برجسته نظریه کوانتومی این است که با داشتن یک ذره در یک حالت $|\psi\rangle$ ، در حالت کلی نمی توان گفت که ذره برای یک متغیر دینامیکی معین Ω مقداری معین دارد: یک اندازه گیری می تواند هر

ویژه مقدار ω را که برای آن $\langle \omega | \psi \rangle$ صفر نیست به دست دهد. استثناها حالت‌های $|\omega\rangle$ هستند. می‌توان گفت که یک ذره در یکی از این حالت‌ها، همچون مکانیک کلاسیک، یک مقدار ω برای Ω دارد، چون تضمین می‌شود که یک اندازه‌گیری این نتیجه را به دست می‌دهد. برای تولید چنین حالت‌هایی فقط نیاز داریم یک حالت دلخواه $|\psi\rangle$ را گرفته و Ω را اندازه‌گیری کنیم. فرایند اندازه‌گیری به‌عنوان فیلتری عمل می‌کند که فقط یک مولفه $|\psi\rangle$ ، در امتداد یک $|\psi\rangle$ ، از آن بیرون می‌آید. احتمال اینکه این اتفاق بیفتد $P(\omega) = |\langle \omega | \psi \rangle|^2$ است.

اکنون می‌خواهیم این ایده‌ها را به بیش از یک متغیر بسط دهیم. ابتدا حالت دو عملگر را در نظر می‌گیریم. بسط به بیش از دو عملگر سر راست است. سوالات ما این است که:

- ۱- آیا فرایندهای فیلتر سازی چند گانه‌ای وجود دارد که به وسیله آن بتوانیم مجموعه‌ای از ذرات را در یک حالت $|\psi\rangle$ گرفته و حالتی با مقادیر ω و λ ی خوش تعریف برای دو متغیر Ω و Λ تولید کنیم؟
 - ۲- اگر با حالت $|\psi\rangle$ شروع کنیم، احتمال اینکه فیلتر کردن چنین حالتی را به دست بدهد چقدر است؟
- برای پاسخ به این سوالات تلاش می‌کنیم تا تدبیری برای طرح فیلتر کردن چند گانه بیندیشیم. ابتدا Ω را روی هنگرد توصیف شونده توسط $|\psi\rangle$ اندازه گرفته و ذراتی را بر می‌داریم که یک نتیجه ω را به دست می‌دهند. این ذرات در حالتی هستند که مقداری خوش تعریف برای Ω دارد. بلافاصله Λ را اندازه می‌گیریم و آن ذراتی را بر می‌داریم که یک نتیجه λ را به دست می‌دهند. آیا اکنون هنگردی داریم که در حالتی با $\omega = \Omega$ و $\lambda = \Lambda$ باشد؟ در حالت کلی خیر، دلیل روشن است. بعد از اندازه‌گیری اول، سیستم را در حالت $|\omega\rangle$ داریم که نتیجه ω را برای Ω تضمین می‌کند ولی برای Λ هیچ تضمینی ندارد (چون $|\omega\rangle$ لزوماً یک ویژه حالت Λ نیست). با انجام اندازه‌گیری دوم روی آن، حالت به

$$|\psi'\rangle = |\lambda\rangle$$

تبدیل می‌شود و اکنون نتیجه λ برای Λ تضمین می‌شود ولی برای Ω هیچ تضمین معینی نداریم (چون $|\lambda\rangle$ لزوماً یک ویژه حالت Ω نیست).

به عبارتی دیگر، فیلتر کردن دوم در حالت کلی حالت تولید شده توسط اولی را تغییر می‌دهد. این تغییر، همان رمبش (تقلیل) بردار حالت $\langle \lambda | \omega \rangle = \Sigma |\lambda\rangle \langle \lambda | \omega \rangle$ به ویژه حالت $|\lambda\rangle$ است.

استثناء زمانی رخ می‌دهد که حالت تولید شده بعد از اولین اندازه‌گیری با اندازه‌گیری دوم متأثر نشود. این به نوبه خود ایجاب می‌کند که $|\omega\rangle$ یک ویژه حالت Λ هم باشد. پس پاسخ به سوال اول مطرح شده در بالا فقط برای ویژه حالت‌های همزمان $|\omega\lambda\rangle$ مثبت است. ابزار تولید این حالت‌ها درست به همان صورتی است که در بالا توضیح داده شد. این کت‌ها معادلات زیر را برآورده می‌کنند:

$$\Omega |\omega\lambda\rangle = \omega |\omega\lambda\rangle \tag{۴-۲-۱۱}$$

$$\Lambda |\omega\lambda\rangle = \lambda |\omega\lambda\rangle \tag{۴-۲-۱۲}$$

سوالی که به طور طبیعی مطرح می شود این است: چه زمانی دو عملگر ویژه کت های همزمان خواهند داشت؟ یک شرط لازم (اما نه کافی) با عمل کردن Ω روی معادله (۴-۲-۱۲) و Λ روی معادله (۴-۲-۱۱) و محاسبه تفاضل آنها به دست می آید:

$$(\Omega\Lambda - \Lambda\Omega)|\omega\lambda\rangle = 0 \quad (۴-۲-۱۳)$$

بنابراین اگر قرار باشد ویژه کت های همزمان وجود داشته باشند، $[\Omega, \Lambda]$ می بایست ویژه کت هایی با ویژه مقدار صفر داشته باشد. یک جفت از عملگرهای Ω و Λ به یکی از سه دسته تقسیم می شوند:

A: سازگار: $[\Omega, \Lambda] = 0$.

B: ناسازگار: چیزی که هیچ ویژه مقدار صفر ندارد $[\Omega, \Lambda]$

C: غیره (هیچ کدام).

دسته A: اگر دو عملگر جابه جا شوند، می دانیم که یک پایه کامل از ویژه کت های همزمان می توانند یافت شوند. هر عنصر $|\omega\lambda\rangle$ از این پایه دارای مقادیر خوش تعریف برای Ω و Λ است.

دسته B: معروفترین مثال از این دسته عملگرهای مکان و تکانه X و P هستند که از قاعده جابه جایی کانونیک

$$[X, P] = i\hbar \quad (۴-۲-۱۴)$$

پیروی می کنند. واضح است که هرگز نمی توانیم برای هر $|\psi\rangle$ غیر بدیهی داشته باشیم: $i\hbar|\psi\rangle = 0|\psi\rangle$ این بدین معنی است که حتی یک کت هم وجود ندارد که برای آن X و P هر دو خوش تعریف باشند. هر تلاشی برای فیلتر کردن X ، با فیلتر بعدی برای P ، مختل می شود و بالعکس. این منشاء اصل عدم قطعیت معروف هایزنبرگ است که در ادامه بحث خواهد شد.

دسته C: در این مورد حالت هایی وجود دارند که ویژه کت های همزمان هستند. هیچ چیز جالبی در مورد این دسته برای گفتن نداریم به جز اینکه تاکید کنیم که حتی اگر دو عملگر جابه جا نشوند هنوز هم می توان چند ویژه کت مشترک، ولو یک پایه کامل نباشند، پیدا کرد (چرا؟).

به سوال دوم در مورد احتمال به دست آوردن یک حالت $|\omega\lambda\rangle$ با اندازه گیری Ω و Λ در یک حالت $|\psi\rangle$ بر می گردیم. ما فقط مورد A را در نظر خواهیم گرفت برای مورد B این سوال پیش نمی آید؛ و حالت C خیلی مورد نظر نیست (بعد از مشاهده دو مورد اول باید خودتان قادر به بررسی حالت C باشید).

مورد A: ابتدا فرض می کنیم تبهگنی وجود ندارد. بنابراین برای یک ویژه مقدار معین λ ، فقط یک کت وجود دارد و این کت می بایست یک ویژه کت همزمان $|\omega\lambda\rangle$ باشد. فرض کنید ابتدا Ω را اندازه بگیریم،

مقدار ω را با احتمال $P(\omega) = |\langle\omega, \lambda|\psi\rangle|^2$ به دست می آوریم. بعد از اندازه گیری، ذره در حالت $|\omega\lambda\rangle$ است. اندازه گیری Λ مسلماً نتیجه λ را به دست می دهد. احتمال به دست آوردن ω برای Ω و Λ برای همان حاصل ضرب دو احتمال است:

$$P(\omega, \lambda) = |\langle\omega\lambda|\psi\rangle|^2 \cdot 1 = |\langle\omega\lambda|\psi\rangle|^2$$

توجه کنید که اگر Λ ابتدا اندازه گیری می‌شد و سپس Ω ، احتمال به دست آوردن نتایج λ و ω همین می‌شد. بنابراین اگر $|\psi\rangle$ را در ویژه پایه مشترک کامل به صورت زیر بسط دهیم:

$$|\psi\rangle = \sum |\omega\lambda\rangle \langle \omega\lambda|\psi\rangle \quad (۴-۲-۱۵-الف)$$

آنگاه

$$P(\omega, \lambda) = |\langle \omega\lambda|\psi\rangle|^2 = P(\lambda, \omega) \quad (۴-۲-۱۵-ب)$$

دلیل اینکه وقتی $[\Omega, \Lambda] = 0$ است Ω و Λ را سازگار می‌نامیم این است که اندازه گیری یک متغیر و به دنبال آن دیگری، ویژه مقدار به دست آمده در اولین اندازه گیری را تغییر نمی‌دهد و در آخر حالتی با یک مقدار خوش تعریف برای هر دو مشاهده پذیر داریم. به تأکید بر ناوردایی (بدون تغییر بودن) ویژه مقدار تحت اندازه گیری دوم توجه کنید. در حالت غیر تبهگن، این مطلب به ناوردایی بردار حالت هم اشاره می‌کند. در حالت تبهگن، همان‌طور که مثال زیر نشان خواهد داد، بردار حالت می‌تواند به واسطه اندازه گیری دوم تغییر کند، اگر چه ویژه مقدار تغییر نخواهد کرد. دو عملگر Λ و Ω را در $V^3(R)$ در نظر بگیرید. فرض کنید $|\omega_3\lambda_3\rangle$ یک ویژه بردار مشترک باشد. فرض کنید $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$ و $\omega_1 \neq \omega_2$ ویژه مقادیر Ω در این فضای تبهگن باشند و $|\omega_1\lambda\rangle$ ، $|\omega_2\lambda\rangle$ و $|\omega_3\lambda\rangle$ را به عنوان پایه به کار ببریم. یک حالت بهنجار شده را در نظر بگیرید:

$$|\psi\rangle = \alpha|\omega_3\lambda_3\rangle + \beta|\omega_1\lambda\rangle + \gamma|\omega_2\lambda\rangle \quad (۴-۲-۱۶)$$

فرض کنید ابتدا Ω را اندازه بگیریم و ω_3 را به دست آوریم. حالت، $|\omega_3\lambda_3\rangle$ شده و اندازه گیری بعدی Λ تضمین می‌شود که مقدار λ_3 را به دست داده و حالت را یکتا نگه دارد. بنابراین $P(\omega_3, \lambda_3) = P(\omega_2, \lambda_2)$ واضح است که $P(\omega_3, \lambda_3) = |\langle \omega_3\lambda_3|\psi\rangle|^2 = \alpha^2$. فرض کنید که اندازه گیری Ω مقدار ω_1 را به دست داد. حالت نهایی، $|\omega_1\lambda\rangle$ شده و احتمال اینکه خروجی این باشد $|\langle \omega_1\lambda|\psi\rangle|^2$ است. اندازه گیری بعدی Λ ، حالت را یکتا نگه خواهد داشت و با احتمال واحد (یک) نتیجه λ را به دست خواهد داد. بنابراین $P(\omega_1, \lambda)$ حاصل ضرب احتمالات است:

$$P(\omega_1, \lambda) = |\langle \omega_1\lambda|\psi\rangle|^2 \cdot 1 = |\langle \omega_1\lambda|\psi\rangle|^2 = \beta^2 \quad (۴-۲-۱۷)$$

حال اندازه گیری‌های صورت گرفته را به ترتیب عکس تصور کنید. فرض کنید نتیجه اندازه گیری، λ باشد. حالت $|\psi'\rangle$ بعد از اندازه گیری، تصویر $|\psi\rangle$ در ویژه فضای تبهگن λ است:

$$|\psi'\rangle = \frac{P_\lambda|\psi\rangle}{|P_\lambda\psi|} = \frac{\beta|\omega_1\lambda\rangle + \gamma|\omega_2\lambda\rangle}{(\beta^2 + \gamma^2)^{1/2}} \quad (۴-۲-۱۸)$$

که در عبارت فوق، حالت تصویر شده، بهنجار شده است. احتمال این خروجی، $P(\lambda) = \beta^2 + \gamma^2$ ، مربع تصویر $|\psi\rangle$ در ویژه فضا، است. اگر اکنون Ω اندازه گیری شود، هر دو نتیجه ω_1 و ω_2 ممکن هستند. احتمال یافتن ω_1 برابر $\beta^2 / (\beta^2 + \gamma^2)$ است. لذا احتمال نتیجه $\Lambda = \lambda$ و $\Omega = \omega_1$ برابر حاصلضرب احتمالات است:

$$P(\lambda, \omega_1) = (\beta^2 + \gamma^2) \cdot \frac{\beta^2}{\beta^2 + \gamma^2} = \beta^2 = P(\omega_1, \lambda) \quad (4-2-19)$$

بنابراین مستقل از تبهگنی، $P(\omega_1, \lambda) = P(\lambda, \omega_1)$ است. اما این بار، حالت بواسطه اندازه گیری دوم دچار تغییر می شود (مگر این که برحسب تصادف $|\psi\rangle$ هیچ مؤلفه ای در امتداد $|\omega_2\rangle$ نداشته باشد) بنابراین سازگار بودن عموماً اشاره به ناوردایی ویژه مقدار اندازه گیری شده در ابتدا تحت اندازه گیری دوم دارد. بنابراین فقط می توان گفت که حالت بعد از اندازه گیری دوم در همان ویژه فضا باقی می ماند. اگر ویژه مقدار اول غیر تبهگن باشد، ویژه فضا، یک بعدی بوده و بردار حالت خودش ناوردا می ماند.

در بحث قبلی ما در مورد چگونگی تولید حالت های خوش تعریف $|\psi\rangle$ برای آزمودن نظریه کوانتومی، مشاهده شد که خود فرایند اندازه گیری می تواند به عنوان یک مکانیزم آماده سازی به کار رود: اگر اندازه گیری Ω روی یک حالت اولیه دلخواه و ناشناخته یک نتیجه ω را به دست داده باشد مطمئن هستیم که حالت $|\psi\rangle = |\omega\rangle$ را داریم. اما این، از قبل فرض می کند که ω یک ویژه مقدار تبهگن نیست. اگر ω تبهگن باشد نمی توانیم حالت را، به جز به درون یک ویژه فضا، ثابت و محدود کنیم. از این رو پیشنهاد شد که به متغیرهایی بپردازیم که دارای طیف غیرتبهگن هستند. اکنون می توانیم این قید را برداریم. فرض کنید یک ویژه مقدار تبهگن ω برای متغیر Ω به دست آمده باشد. در این صورت یک بردار در ویژه فضای ω داریم. حال متغیر سازگار دیگر Λ را اندازه می گیریم اگر به یک نتیجه λ رسیدیم یک حالت معین $|\omega\lambda\rangle$ داریم مگر اینکه مقدار (ω, λ) خودش تبهگن باشد. در این صورت باید یک متغیر سوم Γ را اندازه بگیریم که با Ω و Λ سازگار باشد و به همین ترتیب. عاقبت به حالتی خواهیم رسید که منحصر به فرد است و همه ویژه مقادیر همزمان معلومند: $|\omega, \lambda, \gamma, \dots\rangle$. پیش فرض ما این است که یک چنین مجموعه ای از مشاهده پذیرهای سازگار، معروف به مجموعه کامل از مشاهده پذیرهای جابه جا شونده، موجود است. برای آماده سازی یک حالت برای مطالعه نظریه کوانتومی، یک حالت اولیه دلخواه انتخاب کرده و آنرا به وسیله یک سری از اندازه گیری های سازگار فیلتر می کنیم تا به برداری معلوم و منحصر به فرد دست یابیم. هر عملگر غیرتبهگن، به تنهایی، یک «مجموعه کامل» است.

ضمناً حتی اگر عملگرهای Ω و Λ ناسازگار باشند می توانیم احتمال $P(\omega, \lambda)$ ، اینکه اندازه گیری Ω و به دنبال آن اندازه گیری Λ روی یک حالت $|\psi\rangle$ به ترتیب نتایج ω و λ را به دست دهند، را تعیین کنیم. اما باید توجه کرد که:

$$1- \text{در حالت کلی، } P(\omega, \lambda) \neq P(\lambda, \omega)$$

۲- احتمال $P(\omega, \lambda)$ ، احتمال تولید یک حالت نهایی که دارای مقادیر ω و λ خوش تعریف برای Ω و Λ باشد نیست (چنین حالتی طبق تعریف ناسازگاری، موجود نیست). حالت تولید شده توسط دو اندازه گیری همان ویژه حالت عملگر دوم با ویژه مقدار اندازه گیری شده است.

گزیزی بر ماتریس چگالی^۱

تاکنون هنگردهایی از N سیستم، همگی در یک حالت $|\psi\rangle$ ، را در نظر گرفته ایم. به دست آمدن چنین حالت‌هایی در عمل مشکل است. عمومی‌تر، هنگردهایی از N سیستم هستند که تعداد n_i ($i = 1, 2, \dots, k$) از آنها در حالت $|i\rangle$ هستند (ما خود را به حالتی محدود می‌کنیم که $|i\rangle$ عنصری از یک پایه راست هنجار است). لذا هنگرد به وسیله k کت $|1\rangle$ ، $|2\rangle$ و ... و $|k\rangle$ و k عدد اشغال n_1, \dots, n_k توصیف می‌شود. راه بهتر برای جمع کردن همه این اطلاعات، در شکل ماتریس چگالی است (که واقعاً عملگری است که در یک پایه، ماتریس می‌شود):

$$\rho = \sum_i p_i |i\rangle \langle i| \quad (۲۰-۲-۴)$$

که در آن $p_i = n_i / N$ احتمال این است که یک سیستم انتخاب شده به صورت تصادفی از هنگرد، در حالت $|i\rangle$ باشد. هنگردهایی که تاکنون به آنها پرداخته‌ایم خالص بودند، آنها متناظر با این هستند که همه $p_i = 0$ ها باشند به جز یکی. یک هنگرد در حالت کلی، آمیخته است. اکنون متوسط هنگردی Ω را در نظر بگیرید که عبارتست از

$$\langle \bar{\Omega} \rangle = \sum_i p_i \langle i | \Omega | i \rangle \quad (۲۱-۲-۴)$$

علامت بار روی $\langle \bar{\Omega} \rangle$ به ما یادآوری می‌کند که دو نوع متوسط گیری انجام شده است: یک متوسط کوانتومی $\langle i | \Omega | i \rangle$ برای هر سیستم در حالت $|i\rangle$ و یک متوسط کلاسیکی روی سیستم‌ها در حالت‌های مختلف $|i\rangle$. می‌توان مشاهده کرد که

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\Omega \rho) &= \sum_i \langle i | \Omega \rho | i \rangle \\ &= \sum_j \sum_i \langle j | \Omega | i \rangle \langle i | j \rangle p_i = \sum_i \sum_j \langle i | j \rangle \langle j | \Omega | i \rangle p_i \\ &= \sum_i \langle i | \Omega | i \rangle p_i \\ &= \langle \bar{\Omega} \rangle \end{aligned} \quad (۲۲-۲-۴)$$

ماتریس چگالی شامل همه اطلاعات آماری در مورد هنگرد است. فرض کنید به جای $\langle \bar{\Omega} \rangle$ ، $\overline{P(\omega)}$ احتمال به دست آوردن یک مقدار خاص ω ، را بخواهیم. ابتدا توجه می‌کنیم که برای یک هنگرد خالص،

۱- این مبحث می‌تواند بدون از دست دادن پیوستگی حذف یا به تعویق انداخته شود.

$$P(\omega) = |\langle \omega | \psi \rangle|^2 = \langle \psi | \omega \rangle \langle \omega | \psi \rangle = \langle \psi | P_\omega | \psi \rangle = \langle P_\omega \rangle$$

که اگر با معادله (۴-۲-۲۲) ترکیب شود بیان می کند که

$$\overline{P(\omega)} = \text{Tr}(P_\omega \rho)$$

نتایج زیر به راحتی قابل اثبات هستند:

$$\rho^\dagger = \rho \quad -1$$

$$\text{Tr } \rho = 1 \quad -2$$

$$\rho^2 = \rho \quad -3$$

$$\rho = (1/k)I \quad -4$$

$$\text{Tr } \rho^2 \leq 1 \quad -5$$

برای یک هنگرد خالص.

برای هنگردی که به طور یکنواخت روی حالت های k توزیع شده باشد.

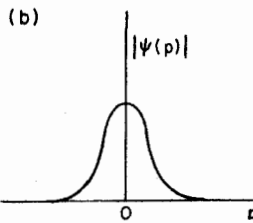
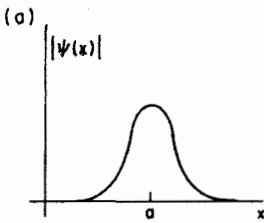
(تساوی برای یک هنگرد خالص برقرار است).

توصیه می شود که در مورد این روابط خود را متقاعد کنید.

مثال ۴-۲-۴: برای آشنایی بیشتر با نظریه کوانتومی، یک کت بی نهایت بعدی $|\psi\rangle$ را در نظر می گیریم که در پایه $|x\rangle$ عملگر مکان X بسط داده شده باشد:

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle \langle x | \psi \rangle dx = \int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle \psi(x) dx$$

$\psi(x)$ را تابع موج (در پایه X) می نامیم. فرض می کنیم $\psi(x)$ یک گوسین باشد یعنی $\psi(x) = A \exp[-(x-a)^2/2\Delta^2]$ [شکل ۴-۲-الف]. اکنون تلاش می کنیم تا اطلاعات مربوط به این حالت را با استفاده از اصول موضوعه استخراج کنیم. با بهنجار کردن حالت شروع می کنیم:



شکل ۴-۲-الف - مدول تابع موج، $|\psi(x)| = |\langle x | \psi \rangle|$. ب- مدول تابع موج، $|\langle p | \psi \rangle| = \psi(p)$

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

$$= \int_{-\infty}^{\infty} A^2 e^{-(x-a)^2/\Delta^2} dx = A^2 (\pi \Delta^2)^{1/2} \quad (\text{see Appendix A.2})$$

لذا حالت بهنجار شده عبارتست از

$$\psi(x) = \frac{1}{(\pi \Delta^2)^{1/4}} e^{-(x-a)^2/2\Delta^2}$$

احتمال یافتن ذره بین x و $x + dx$ برابر است با

$$P(x) dx = |\psi(x)|^2 dx = \frac{1}{(\pi\Delta^2)^{1/2}} e^{-(x-a)^2/\Delta^2} dx$$

که بسیار شبیه به شکل ۴-۲-الف است. بنابراین بسیار محتمل است که ذره حول $x = a$ یافت شود و شانس یافتن آن دورتر از این نقطه در فاصله Δ آنطرف تر به تندی افت می کند. می توانیم این مطالب را با محاسبه مقدار چشم داشتی و عدم قطعیت برای X به صورت کمی در آوریم:

عملگر X تعریف شده در اصل موضوع (۲) همان است که در بخش ۱-۱۰ به طور مفصل بحث کردیم. اثر آن در پایه X ، فقط ضرب کردن در x است یعنی اگر

$$\langle x | \psi \rangle = \psi(x)$$

آنگاه

$$\begin{aligned} \langle x | X | \psi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle x | X | x' \rangle \langle x' | \psi \rangle dx' = \int_{-\infty}^{\infty} x \delta(x-x') \psi(x') dx' \\ &= x \psi(x) \end{aligned}$$

با استفاده از این نتیجه مقدار میانگین یا چشم داشتی X عبارتست از

$$\begin{aligned} \langle X \rangle &= \langle \psi | X | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle \psi | x \rangle \langle x | X | \psi \rangle dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx \\ &= \frac{1}{(\pi\Delta^2)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x-a)^2/\Delta^2} x dx \end{aligned}$$

اگر تعریف کنیم که $y = x - a$ ،

$$\begin{aligned} \langle X \rangle &= \frac{1}{(\pi\Delta^2)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} (y+a) e^{-y^2/\Delta^2} dy \\ &= a \end{aligned}$$

این نتیجه را باید پیش بینی می کردیم چون چگالی احتمال حول $x = a$ به طور متقارن توزیع شده است. اکنون افت و خیزها حول $\langle X \rangle = a$ ، یعنی عدم قطعیت، را محاسبه می کنیم،

$$\begin{aligned} \Delta X &= [\langle \psi | (X - \langle X \rangle)^2 | \psi \rangle]^{1/2} \\ &= [\langle \psi | X^2 - 2X\langle X \rangle + \langle X \rangle^2 | \psi \rangle]^{1/2} \\ &= [\langle \psi | X^2 - \langle X \rangle^2 | \psi \rangle]^{1/2} \quad (\text{since } \langle \psi | X | \psi \rangle = \langle X \rangle) \\ &= [\langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2]^{1/2} \\ &= [\langle X^2 \rangle - a^2]^{1/2} \end{aligned}$$

حال

$$\begin{aligned} \langle X^2 \rangle &= \frac{1}{(\pi \Delta^2)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x-a)^2/2\Delta^2} \cdot x^2 \cdot e^{-(x-a)^2/2\Delta^2} dx \\ &= \frac{1}{(\pi \Delta^2)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2/\Delta^2} (y^2 + 2ya + a^2) dy = \frac{\Delta^2}{2} + 0 + a^2 \end{aligned}$$

لذا

$$\Delta X = \frac{\Delta}{2^{1/2}}$$

تا اینجا در مورد اطلاعات مربوط به متغیر X بود. فرض کنیم بخواهیم توزیع احتمال را برای مقادیر مختلف یک متغیر دینامیکی دیگر، مثلاً تکانه P ، بدانیم.

۱- ابتدا باید عملگر P را در این پایه بسازیم.

۲- سپس باید ویژه مقادیر P و ویژه بردارهای $|p\rangle$ آنرا به دست آوریم.

۳- سرانجام باید ضرب داخلی $\langle p | \psi \rangle$ را حساب کنیم.

۴- اگر p گسسته باشد، چگالی احتمال $\langle p_i | \psi \rangle^2 = P(p_i)$ و اگر p پیوسته باشد چگالی احتمال،

$$\langle p | \psi \rangle^2 = P(p) \text{ است.}$$

حال عملگر P همان عملگر K بحث شده در بخش ۱-۱۰ ضربدر \hbar است و در پایه X دارای اثر

$$-i\hbar \frac{d}{dx} \text{ است، زیرا اگر}$$

$$\langle x | \psi \rangle = \psi(x)$$

باشد آنگاه

$$\begin{aligned} \langle x | P | \psi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle x | P | x' \rangle \langle x' | \psi \rangle dx' \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} [-i\hbar \delta'(x-x')] \psi(x') dx' \\ &= -i\hbar \frac{d\psi}{dx} \end{aligned} \quad (\text{اصل موضوع (۲)})$$

بنابراین اگر معادله ویژه مقدراری

$$P|p\rangle = p|p\rangle$$

را در پایه X تصویر کنیم خواهیم داشت:

$$\langle x|P|p\rangle = p\langle x|p\rangle$$

یا

$$-i\hbar \frac{d\psi_p(x)}{dx} = p\psi_p(x)$$

که در آن $\psi_p(x) = \langle x|p\rangle$ است. جواب‌ها، بهنجار شده به تابع دلتای دیراک^۱ (از بخش ۱-۱۰) عبارتند از:

$$\psi_p(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{ipx/\hbar}$$

اکنون می‌توانیم عبارت زیر را حساب کنیم

$$\begin{aligned} \langle p|\psi\rangle &= \int \langle p|x\rangle \langle x|\psi\rangle dx = \int \psi_p^*(x)\psi(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ipx/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \frac{e^{-(x-a)^2/2\Delta^2}}{(\pi\Delta^2)^{1/4}} dx = \left(\frac{\Delta^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/4} e^{-ipa/\hbar} e^{-p^2\Delta^2/2\hbar^2} \end{aligned}$$

مدول $\psi(p)$ یک گوسین با پهنای Δ $\hbar/2^{1/2}$ است (شکل ۴-۲-ب). می‌توان نتیجه گرفت که $\langle P\rangle = 0$ و $\Delta P = \hbar/2^{1/2} \Delta$. چون $\Delta X = \Delta/2^{1/2}$ است به رابطه

$$\Delta X \cdot \Delta P = \hbar/2$$

می‌رسیم. گوسین، کران پائین رابطه عدم قطعیت را (که قرار است رسماً در فصل‌های بعد به دست آید) اشباع می‌کند:

$$\Delta X \cdot \Delta P \geq \hbar/2$$

رابطه عدم قطعیت نتیجه‌ای از این حقیقت کلی است که هر چیزی که در یک فضا تیز باشد در فضای تبدیل پهن است و بالعکس. بنابراین اگر شما فردی ضعیف با ۱۱۰ پوند وزن هستید و به وسیله فردی ۶۰۰ پوندی سرزنش می‌شوید فقط از او بخواهید به فضای تکانه برود!

وقت آن رسیده که اشاره کنیم امواج تخت $e^{ipx/\hbar}$ (و همه بردارهای ناسره یعنی بردارهایی که نمی‌توانند به یک بهنجار شوند بلکه فقط به تابع دلتای دیراک بهنجار می‌شوند) به عنوان موجوداتی خالصاً ریاضی وارد

۱- در اینجا $\langle p|p'\rangle = \delta(p-p') = \delta(k-k')/\hbar$ را می‌خواهیم که در آن $p = \hbar k$ است. این، ضریب بهنجارش $(2\pi\hbar)^{-1/2}$ را توضیح می‌دهد.

فرمالیزم شوند. ناتوانی ما در بهنجار کردن آنها به یک به معنی ناتوانی ما در نسبت دادن یک توزیع احتمال مطلق معقول به آنهاست آن طور که برای تغییر فیزیکی تابع موج ضروری است. در مورد کنونی ذره‌ای داریم که چگالی احتمال نسبی آن در همه فضا یکنواخت است. بنابراین احتمال مطلق یافتن آن در هر حجم متناهی، حتی به بزرگی منظومه شمسی ما، صفر است. از آنجا که هر ذره که ممکن است مورد نظر ما باشد قطعاً در یک حجم متناهی از چنین ابعاد نامتناهی موجود خواهد بود واضح است که هیچ حالت جالب از حیث فیزیکی به وسیله یک موج تخت مشخص نخواهد شد. اما از آنجا که امواج تخت ویژه توابع P هستند آیا این مفهوم استنباط می‌شود که حالت‌های با تکانه خوش تعریف موجود نیستند؟ در معنی دقیق، بله. اما حالت‌هایی وجود دارند که هم قابل بهنجارش به یک هستند (یعنی متناظر با بردارهای سره) و هم تا حد دلخواه به داشتن یک تکانه دقیق نزدیک می‌شوند. برای مثال تابع موجی که روی ناحیه بزرگی از فضا به صورت $e^{ip_0 x/\hbar}$ رفتار می‌کند و ورای آن کم کم به صفر کاهش می‌یابد، قابل بهنجارش به یک خواهد بود و تبدیل فوری‌ای خواهد داشت که در $p = p_0$ آنچنان تیز است که اندازه‌گیری‌های تکانه فقط نتایجی به دست خواهند داد که عملاً از p_0 غیر قابل تمییزند. بنابراین هیچ تضادی در این حقیقت که امواج تخت غیر فیزیکی‌اند، در حالی که حالت‌هایی با تکانه خوش تعریف وجود دارند، وجود ندارد، چون «خوش تعریف» هرگز به معنی «دقیق از نظر ریاضی» نبوده بلکه فقط به معنی «دقیق تا دقتی قابل اندازه‌گیری» است. لذا یک ذره که از یک شتاب‌دهنده با اندازه حرکتی مثلاً $500 \text{ GeV}/c$ بیرون می‌آید در یک حالت سره قابل بهنجارش است (چون معلوم است که باید در آزمایشگاه ما واقع باشد) و نه در یک حالت موج تخت متناظر با $|p = 500 \text{ GeV}/c\rangle$.

اما علی‌رغم همه اینها، کماکان به استفاده از ویژه‌کت‌های $|p\rangle$ به‌عنوان بردارهای پایه و صحبت از ذره واقع در حالت $|p\rangle$ ادامه خواهیم داد چون کار ریاضی با این بردارها بسیار راحت‌تر از کار با بردارهای سره است. اما باید در نظر داشت که وقتی می‌گوییم یک ذره (که از شتاب‌دهنده خارج می‌شود) در یک حالت $|p_0\rangle$ است، واقعاً در یک حالت سره است، با تابع موج فضای اندازه حرکتی که در $p = p_0$ آنچنان تیز است که می‌تواند با یک تابع دلتا $\delta(p - p_0)$ جایگزین شود.

مجموعه دیگر از کت‌های ناسره که با همین جرأت به کار خواهیم برد ویژه‌کت‌های مکان $|x\rangle$ هستند که آنها هم یک پایه قرار دادی تشکیل می‌دهند. باز هم وقتی از یک ذره واقع در حالت $|x_0\rangle$ صحبت می‌کنیم منظومان این است که تابع موج آن در $x = x_0$ آنچنان تیز است که می‌تواند با دقتی خوب به عنوان یک تابع دلتا با آن رفتار شود.^۱

گاهاً جایگزینی یک تابع موج سره با شکل ناسره آن یک تقریب ضعیف است. در اینجا مثالی از فصل ۱۹ ارائه می‌شود: احتمال این را در نظر بگیرید که یک ذره خروجی از یک شتاب‌دهنده با اندازه حرکتی تقریباً دقیق از یک هدف پراکنده شده و، نه در جهت اولیه، وارد آشکارسازی که دورتر قرار دارد می‌شود. شهود ما بیان می‌کند که اگر هدف وجود نداشته باشد پاسخ باید صفر باشد. این شرط معقول، در صورتیکه حالت اولیه ذره را با یک موج تخت تقریب بزنیم (که در هیچ جایی صفر نیست) نقض می‌شود. بنابراین به شکل زیر پیش

۱- بنابراین منظور ما از فضای هیلبرت فیزیکی، فضایی است که برای فیزیکدان‌ها اهمیت دارد نه فضایی که عناصرش همه متناظر با حالت‌های قابل تحقق از نظر فیزیکی هستند.

می‌رویم. در مجاورت هدف، برای تقریب تابع موج اولیه از موج تخت استفاده می‌کنیم، چون هر دو، روی گستره (متناهی و کوچک) تأثیر هدف، غیر قابل تمییز هستند. اما در آشکارساز، به موج سره برگشته (که کم کم، کاهش یافته است) تا حالت اولیه را نشان دهیم.

تمرین ۴-۲-۲: نشان دهید که برای یک تابع موج حقیقی $\psi(x)$ ، مقدار چشم‌داشتی تکانه، $\langle p \rangle = 0$ است (راهنمایی: نشان دهید که احتمالات تکانه‌های $\pm p$ برابرند). این نتیجه را به حالت $\psi = c\psi_r$ تعمیم دهید که در آن ψ_r حقیقی و c عددی دلخواه (حقیقی یا مختلط) است (یادآوری می‌شود که $|\psi\rangle$ و $\alpha|\psi\rangle$ از نظر فیزیکی معادلند).

تمرین ۴-۲-۳: نشان دهید که اگر $\psi(x)$ دارای تکانه میانگین $\langle P \rangle$ باشد. $e^{ip_0x/\hbar} \psi(x)$ دارای تکانه میانگین $\langle P \rangle + p_0$ است.

مثال ۴-۲-۵: رمبش (تقلیل) بردار حالت و اصل عدم قطعیت نقشی حیاتی در توضیح بسط زیر از آزمایش دو شکافی دارند. فرض کنید بگوییم که "اما اعتقاد نداریم که یک ذره معین (مثلاً یک الکترون) واقعاً از یک شکاف یا شکاف دیگر عبور نمی‌کند. بنابراین چشمه نوری را در بین شکافها عمود بر پرده تعبیه خواهیم کرد. هر الکترون عبوری در معرض باریکه قرار خواهد گرفت و متوجه خواهیم شد که از کدام شکاف خارج می‌شود و سپس به کجای پرده می‌رسد. جدولی از تعداد الکترون‌های رسیده به هر نقطه x و اینکه از کدام شکاف خارج شده‌اند تشکیل می‌دهیم. خال ناچار به این نتیجه گیری هستیم که تعداد رسیده به یک x معین برابر مجموع تعداد رسیده از طریق 1_k و 2_k هستند. این از نظریه کوانتومی و الگوی تداخلی آن!"

اما نکته این است که نظریه کوانتومی دیگر یک الگوی تداخلی پیش‌بینی نمی‌کند! این نظریه بیان می‌کند که اگر الکترونی با تکانه معلوم p مورد بحث باشد تابع موج متناظر، موجی با عدد موج خوش تعریف $k = p/\hbar$ است که با خودش تداخل کرده و الگوی تداخلی خوبی ایجاد می‌کند. این پیش‌بینی فقط تا وقتی معتبر است که حالت الکترون آن حالتی باشد که ما می‌گوییم. اما این حالت لزوماً به وسیله چشمه نور تغییر داده می‌شود، و اندازه گیری مکان الکترون روی آن (مثلاً وقتی بعد از 1_k باشد) تابع موج آنرا از چیزی که در فضا گسترده شده بود به چیزی جایگزیده در نزدیک 1_k تغییر می‌دهد. همینکه حالت تغییر کند پیش‌بینی قبلی تداخل دیگر معتبر نمی‌شود.

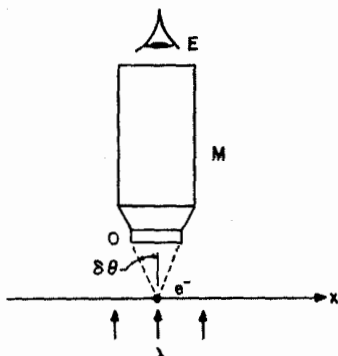
حال گاهگاهی الکترون هایی بدون آشکار شدن به وسیله چشمه نور به آشکارسازها خواهند رسید. ما جایی را که می‌رسند ثبت می‌کنیم اما نمی‌توانیم آنها را به الکترون‌هایی که از 1_k یا 2_k می‌آیند دسته‌بندی کنیم. وقتی توزیع فقط این الکترون‌ها رسم شود مسلماً به الگوی تداخلی می‌رسیم.

آزمایش فوق می‌تواند تا حدی برای رمزگشایی از رمبش تابع موج تحت آزمایش هم مورد استفاده قرار گیرد. چرا حتی اندازه گیری ایده‌آل هم تغییرات غیرقابل اجتنابی در حالت ایجاد می‌کند؟ پاسخ همان‌طور که خواهیم دید مربوط به این می‌شود که \hbar صفر نیست.

شکل طرح وار ۴-۳ را در نظر بگیرید. نوری با طول موج λ ، به یک الکترون (e^-) تابیده، وارد عدسی شیئی (O) میکروسکوپ M شده و به چشم ما می‌رسد (E). اگر $\delta\theta$ زاویه رو به مخروط نور ورودی به عدسی شیئی بعد از برهم کنش با الکترون باشد، اپتیک کلاسیک دقت اندازه گیری مکان را با عدم قطعیت

$$\Delta X \cong \lambda / \sin \delta \theta$$

محدود می‌کند. هم به‌طور کلاسیکی و هم به‌طور کوانتوم مکانیکی می‌توانیم با کاهش λ به صفر، ΔX را به ۰ کاهش دهیم.^۱ اما در توصیف اخیر، دقت بهبود یافته در اندازه‌گیری مکان به هزینهٔ ایجاد یک عدم قطعیت افزایش یافته در مولفه x تکانه الکترون (p_x) است. دلیل آن است که نور با طول موج λ موجی پیوسته نیست که اثرش روی تکانه الکترون بتواند با کاهشش در دامنه آن تا حد دلخواهی کاهش داده شود، بلکه با کاهش شار فوتون‌های با تکانه $p = 2\pi\hbar/\lambda$ صورت می‌گیرد. وقتی λ کاهش می‌یابد برخورد‌های بین الکترون و فوتون‌ها به شکل فزاینده‌ای شدید می‌شود. این فی‌نفسه، به یک عدم قطعیت در تکانه منجر نمی‌شد اگر به خاطر این حقیقت نبود که مولفه x فوتون‌های وارد شونده به عدسی شیئی می‌تواند از ۰ تا $p \sin \theta = 2\pi\hbar \sin \delta \theta / \lambda$ تغییر کند. از آنجا که حداقل یک فوتون می‌بایست بعد از واجهیدن الکترون به چشم ما برسد تا آنرا ببینیم، یک عدم قطعیت کمینه‌ای در تکانه پس‌زنی الکترون وجود دارد که با



شکل ۳-۴: نوری با طول موج λ باعث واجهش الکترون شده، وارد عدسی شیئی O میکروسکوپ شده و به چشم ناظر E می‌رسد.

$$\Delta P_x \cong \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \sin \delta \theta$$

مشخص می‌شود. در نتیجه در پایان اندازه‌گیری خود الکترونی داریم که مکان و تکانه‌هایش به اندازه ΔX و ΔP_x عدم قطعیت دارند به‌طوری که

$$\Delta X \cdot \Delta P_x \cong 2\pi\hbar \cong \hbar$$

[نمادهای ΔP_x و ΔX دقیقاً کمیت‌های تعریف شده در معادله (۴-۲-۷) نیستند بلکه از نظر مرتبه بزرگی با آنها یکسان هستند] این، اصل عدم قطعیت معروف است. اگر سرعت هر فوتون را با افزایش λ یا باریک کردن عدسی شیئی ملایم کنیم تا تکانه فوتون نهایی را بهتر تحت کنترل بگیریم دقت را از دست خواهیم داد. روش‌های دقیق‌تر، که پس‌زنی میکروسکوپ را تعیین می‌کنند هم بهبود یافته‌اند. توجه کنید که اگر \hbar صفر

۱- این، اندازه‌گیری ایده‌آل مکان می‌شد.

بود می توانستیم همزمان ΔX و ΔP_x را صفر داشته باشیم. از نظر فیزیکی این به معنی آن است که می توانیم بدون افزایش پهنای تکانه (Punch) حمل شده توسط فوتونها دقت مکان خود را افزایش دهیم. البته \hbar صفر نیست و ما نمی توانیم آنرا در هیچ آزمایشی صفر قرار دهیم. آنچه که ما می توانیم انجام دهیم استفاده از اشیاء بزرگتر و بزرگتر است به طوری که در مقیاس این اشیاء، \hbar به نظر ناچیز برسد. در این صورت مجدداً مکانیک کلاسیک را به دست می آوریم. مکان یک توپ بیلیارد می تواند با تاباندن نور روی آن به خوبی تعیین شود اما این نور به سختی تکانه آن را متأثر می کند. این دلیل بر این مطلب است که چرا تصور می شود در مکانیک کلاسیک تکانه و مکان می توانند همزمان خوش تعریف باشند.

تعمیم به درجات آزادی بیشتر

بحث ما تاکنون به سیستمی با یک درجه آزادی، یعنی ذره منفرد در یک بعد، محدود شده است. اکنون حوزه خود را به سیستمی با N درجه آزادی گسترش می دهیم. تنها تصحیح، در اصل موضوع (۲) اتفاق می افتد که اکنون به صورت زیر در می آید:

اصل موضوع (۲) : متناظر با N مختصه دکارتی x_1, \dots, x_N توصیفگر سیستم کلاسیکی، در نظریه کوانتومی N عملگر متقابلاً جابه جا شونده X_1, \dots, X_N وجود دارد. در ویژه پایه همزمان $\langle x_1, x_2, \dots, x_N \rangle$ این عملگرها، موسوم به پایه مختصه، و بهنجار شونده به صورت

$$\langle x_1, x_2, \dots, x_N | x'_1, x'_2, \dots, x'_N \rangle = \delta(x_1 - x'_1) \dots \delta(x_N - x'_N)$$

(حاصل ضرب توابع دلتا صفر می شود مگر اینکه همه شناسه ها صفر شوند) تناظر زیر را داریم:

$$|\psi\rangle \rightarrow \langle x_1, \dots, x_N | \psi \rangle = \psi(x_1, \dots, x_N)$$

$$X_i | \psi \rangle \rightarrow \langle x_1, \dots, x_N | X_i | \psi \rangle = x_i \psi(x_1, \dots, x_N)$$

$$P_i | \psi \rangle \rightarrow \langle x_1, \dots, x_N | P_i | \psi \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \psi(x_1, \dots, x_N)$$

P_i عملگر تکانه متناظر با تکانه کلاسیکی p_i است. متغیرهای دینامیکی وابسته $\omega(x_i, p_j)$ با عملگرهای $\Omega = \omega(x_i \rightarrow X_i, p_j \rightarrow P_j)$ نمایش داده می شوند.

اصول موضوعه دیگر، همانها باقی می ماند. برای مثال $\int |\psi(x_N, \dots, x_1)|^2 dx_1 \dots dx_N$ احتمال این است که مختصه های ذره بین x_1, x_2, \dots, x_N و $x_1 + dx_1, x_2 + dx_2, \dots, x_N + dx_N$ قرار گیرند. این اصل موضوع برحسب مختصه های دکارتی بیان می شود چون فقط برحسب اینها می توان جایگزینی های عملگری را به شکل ساده $X_i \rightarrow x_i, P_i \rightarrow -i\hbar \partial / \partial x_i$ نوشت، همین که جانشینی ها صورت گرفته و معادلات مورد نظر در پایه مختصه به دست آمدند می توان هر تغییر متغیر دلخواه را قبل از حل آنها انجام داد. برای مثال فرض کنید که بخواهیم ویژه مقادیر و ویژه بردارهای عملگر Ω متناظر با متغیر کلاسیکی

$$\omega = \frac{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2}{2m} + x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \quad (24-2-4)$$

را به دست آوریم که x_1, x_2, x_3 سه مختصه دکارتی و p_i ها تکانه‌های متناظر ذره‌ای به جرم m در سه بعد هستند. از آنجا که مختصه‌ها معمولاً x, y و z نامیده می‌شوند، از این نمادگذاری مرسوم استفاده کرده و معادله (۲۴-۲-۴) را به صورت

$$\omega = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + x^2 + y^2 + z^2 \quad (25-2-4)$$

می‌نویسیم. برای حل معادله

$$\Omega|\omega\rangle = \omega|\omega\rangle$$

با

$$\Omega = \frac{P_x^2 + P_y^2 + P_z^2}{2m} + X^2 + Y^2 + Z^2$$

جانشینی زیر را انجام می‌دهیم

$$|\omega\rangle \rightarrow \psi_\omega(x, y, z)$$

$$X \rightarrow x, \quad P_x \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

و غیره، نتیجه اینکه

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + x^2 + y^2 + z^2 \right] \psi_\omega(x, y, z) = \omega \psi_\omega(x, y, z) \quad (26-2-4)$$

همین که این معادله دیفرانسیل را به دست آورده‌ایم می‌توانیم به هر مجموعه از مختصات دیگر هم برویم. در حالت کنونی، مختصات کروی r, θ, ϕ و خودشان توصیه می‌شوند. از آنجا که

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$\equiv \nabla^2 \equiv \frac{1}{r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$$

معادله (۲۶-۲-۴) به صورت زیر می‌شود

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi_\omega}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi_\omega}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi_\omega}{\partial \phi^2} \right] \quad (27-2-4)$$

$$+ r^2 \psi_\omega = \omega \psi_\omega$$

اگر می‌خواستیم مستقیماً از ω در مختصات کروی،

$$\omega = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2} + \frac{p_\phi^2}{r^2 \sin^2 \theta} \right) + V(r)$$

به معادله (۴-۲۷) برویم چطور؟ با بررسی، روشن می‌شود که هیچ قاعده ساده‌ای [نظیر $[p_r \rightarrow (-i\hbar \partial/\partial r)]$ برای جایگزینی تکانه‌های کلاسیکی به وسیله عملگرهای دیفرانسیلی از r ، θ و ϕ وجود ندارد که با شروع از ω فوق معادله (۴-۲۷) را تولید کند. البته یک روش پیچیده برای کوانتیده کردن در مختصات‌های غیر دکارتی وجود دارد اما ما آنرا بحث نخواهیم کرد چون آن دستورالعمل هم نهایتاً همان چیزی را به دست می‌دهد که دستورالعمل دکارتی (که به نظر می‌رسد کار کند!) با این سرعت و سهولت به دست می‌دهد.

تعمیم‌های دیگری هم وجود دارند یعنی تعمیم به مکانیک کوانتومی نسبی و مکانیک کوانتومی سیستم‌هایی که در آنها ذرات خلق و نابود می‌شوند (به طوری که تعداد درجات آزادی تغییر می‌کند!). به جز بحثی مختصر درباره اینها تا پایان، به سراغ این موضوعات نخواهیم رفت.

۴-۳- معادله شرودینگر

با انجام بحث مفصل در مورد حالت در یک زمان معین، اکنون توجه خود را به اصل موضوع (۴) معطوف می‌کنیم که تغییر این حالت را با زمان مشخص می‌کند. طبق این اصل موضوع، حالت از معادله شرودینگر پیروی می‌کند

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \quad (۴-۳-۱)$$

بحث ما در مورد این معادله به سه بخش تقسیم می‌شود:

۱- نوشتن معادله.

۲- روش عمومی حل معادله.

۳- انتخاب پایه‌ای برای حل معادله.

۱- نوشتن معادله

برای نوشتن معادله شرودینگر می‌بایست فقط جانشینی $\mathcal{H}(x \rightarrow X, p \rightarrow P)$ را انجام دهیم که \mathcal{H} هامیلتونی کلاسیکی برای همان مسئله است. بنابراین، اگر در حال توصیف یک نوسانگر هماهنگ باشیم که از نظر کلاسیکی با هامیلتونی

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \quad (۴-۳-۲)$$

توصیف می‌شود، عملگر هامیلتونی در مکانیک کوانتومی به صورت

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2 \quad (۴-۳-۳)$$

می شود. در سه بعد، عملگر هامیلتونی برای نوسانگر کوانتومی مشابه بالاست:

$$H = \frac{P_x^2 + P_y^2 + P_z^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 (X^2 + Y^2 + Z^2) \quad (4-3-4)$$

با این فرض که ثابت نیرو در همه جهت ها یکسان است.

اگر ذره در یک بعد تحت تاثیر یک نیروی ثابت f باشد،

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} - fx$$

و

$$H = \frac{P^2}{2m} - fX \quad (5-3-4)$$

برای ذره‌ای با بار q در یک میدان الکترومغناطیسی در سه بعد،

$$\mathcal{H} = \frac{|\mathbf{p} - (q/c)\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)|^2}{2m} + q\phi(\mathbf{r}, t) \quad (6-3-4)$$

در ساخت عملگر هامیلتونی کوانتومی متناظر، می‌بایست از شکل متقارن شده

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{P} \cdot \mathbf{P} - \frac{q}{c} \mathbf{P} \cdot \mathbf{A} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \cdot \mathbf{P} + \frac{q^2}{c^2} \mathbf{A} \cdot \mathbf{A} \right) + q\phi \quad (7-3-4)$$

استفاده کنیم چون P با A ، که تابعی از X و Y و Z است، جابه‌جایی نمی‌شود.

بدین ترتیب می‌توان هامیلتونی H را برای هر مسئله دارای نسخه کلاسیکی ساخت. مسائل شامل اسپین

دارای اشکال (نسخه) کلاسیکی نیستند و مستلزم ابتکار عمل هستند. این سوال را هنگام مطالعه اسپین در فصل

۱۴ بحث می‌کنیم.

۲- روش عمومی حل معادله

ابتدا فرض می‌کنیم که H هیچ وابستگی صریح به t ندارد. در این حالت، معادله

$$i\hbar |\dot{\psi}\rangle = H |\psi\rangle$$

مشابه معادلات بحث شده در فصل ۱،

$$|\dot{x}\rangle = \Omega |x\rangle$$

و

$$|\dot{\psi}\rangle = -K^2 |\psi\rangle$$

بوده که به ترتیب توصیف کننده جرم‌های جفت شده و فتر مرتعش هستند. رویکرد ما باز هم به دست آوردن ویژه بردارها و ویژه مقادیر H و ساختن انتشارگر $U(t)$ برحسب اینها خواهد بود. با داشتن $U(t)$ می‌توان نوشت:

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle$$

در اینجا هیچ نیازی به انجام فرضیات در مورد $|\psi(0)\rangle$ نیست چون این کمیت به وسیله معادله (۴-۳-۱) تعیین می‌شود:

$$|\psi(0)\rangle = \frac{-i}{\hbar} H|\psi(0)\rangle$$

به عبارتی دیگر، معادله شرودینگر نسبت به زمان، مرتبه اول بوده و مشخص نمودن $|\psi\rangle$ در $t=0$ ، مآخذ مقدار-اولیه کافی است.

اکنون عبارتی صریح برای $U(t)$ برحسب ویژه کت‌های بهنجار شده H با ویژه مقادیر E ، که از معادله زیر پیروی می‌کنند، به دست می‌آوریم

$$H|E\rangle = E|E\rangle \quad (۴-۳-۸)$$

این معادله، معادله مستقل از زمان شرودینگر نامیده می‌شود. فرض کنید آنرا حل کرده و کت‌های $|E\rangle$ را به دست آورده ایم. اگر $|\psi\rangle$ را به صورت

$$|\psi(t)\rangle = \sum |E\rangle \langle E|\psi(t)\rangle \equiv \sum a_E(t)|E\rangle \quad (۴-۳-۹)$$

بسط دهیم و به هر دو طرف آن $(i\hbar \partial/\partial t - H)$ را اثر دهیم، معادله مربوط به $a_E(t)$ به دست می‌آید:

$$0 = (i\hbar \partial/\partial t - H)|\psi(t)\rangle = \sum (i\hbar \dot{a}_E - E a_E)|E\rangle \Rightarrow i\hbar \dot{a}_E = E a_E \quad (۴-۳-۱۰)$$

که از استقلال خطی کت‌های $|E\rangle$ استفاده کرده ایم. جواب معادله (۴-۳-۱۰) عبارتست از

$$a_E(t) = a_E(0) e^{-iEt/\hbar} \quad (۴-۳-۱۱-الف)$$

یا

$$\langle E|\psi(t)\rangle = \langle E|\psi(0)\rangle e^{-iEt/\hbar} \quad (۴-۳-۱۱-ب)$$

به طوری که

$$|\psi(t)\rangle = \sum_E |E\rangle \langle E|\psi(0)\rangle e^{-iEt/\hbar} \quad (۴-۳-۱۲)$$

اکنون می‌توانیم $U(t)$ را استخراج کنیم

$$U(t) = \sum_E |E\rangle \langle E| e^{-iEt/\hbar} \quad (۱۳-۳-۴)$$

فرض کرده‌ایم که طیف انرژی گسسته و غیرتبهگن است. اگر E تبهگن باشد می‌بایست ابتدا یک برچسب اضافی α معرفی کنیم (که معمولاً ویژه مقدار یک مشاهده‌پذیر سازگار است) تا حالت را مشخص کنیم. در این حالت،

$$U(t) = \sum_a \sum_E |E, \alpha\rangle \langle E, \alpha| e^{-iEt/\hbar}$$

اگر E پیوسته باشد، این جمع می‌بایست با یک انتگرال جایگزین شود. مدهای بهنجار،

$$|E(t)\rangle = |E\rangle e^{-iEt/\hbar}$$

حالت‌های مانا هم نامیده می‌شوند به این دلیل که: توزیع احتمال $P(\omega)$ برای هر متغیر Ω در یک چنین حالتی مستقل از زمان است:

$$\begin{aligned} P(\omega, t) &= |\langle \omega | \psi(t) \rangle|^2 \\ &= |\langle \omega | E(t) \rangle|^2 \\ &= |\langle \omega | E \rangle e^{-iEt/\hbar}|^2 \\ &= |\langle \omega | E \rangle|^2 \\ &= P(\omega, 0) \end{aligned}$$

عبارت دیگری برای $U(t)$ در کنار جمع، معادله (۱۳-۳-۴)، وجود دارد و آن اینکه

$$U(t) = e^{-iHt/\hbar} \quad (۱۴-۳-۴)$$

اگر این سری نمایی همگرا شود (و گاهی همگرا نمی‌شود)، این شکل $U(t)$ می‌تواند بسیار مفید باشد (خودتان را قانع کنید که $|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle$ معادله شرودینگر را برآورده می‌کند).

از آنجا که H (عملگر انرژی) هرمیتی است، $U(t)$ یکانی است. لذا می‌توانیم تحول زمانی کت $|\psi(t)\rangle$ را به منزله «چرخش» در فضای هیلبرت تصور کنیم. یک نتیجه فوری این است که نرم $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle$ ناورد است:

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | U^\dagger(t) U(t) | \psi(0) \rangle = \langle \psi(0) | \psi(0) \rangle \quad (۱۵-۳-۴)$$

به طوری که یک حالت، که یک بار بهنجار شده است، بهنجار باقی می‌ماند. نتایج دیگری از این حقیقت که تحول زمانی می‌تواند به‌عنوان یک چرخش تلقی شود، به‌دست می‌آیند. برای مثال پایه ثابت را که تاکنون به‌کار می‌بردیم کنار گذاشته و پایه‌ای اختیار کنیم که با همان آهنگی که بردارهای حالت می‌چرخند، بچرخد. در چنین پایه‌ای، بردارها به‌صورت ساکن و یخزده به نظر می‌رسند اما عملگرها، که در پایه ثابت، ماتریس‌های ثابت بودند، وابسته به زمان به نظر می‌رسند. اما هر موجود فیزیکی، نظیر یک عنصر ماتریسی، همانند قبل خواهد بود چون $\langle \phi | \Omega | \psi \rangle$ ، که ضرب نقطه‌ای $\langle \phi |$ در $|\Omega \psi\rangle$ است، تحت چرخش ناوردا می‌ماند. این دیدگاه

مکانیک کوانتومی، تصویر هایزنبرگ نامیده می شود و تصویری که تاکنون به کار می بردیم تصویر شرودینگر نامیده می شود. تصویرهای بی نهایت زیادی امکان پذیرند که هر یک مربوط به این می شود که چطور پایه می چرخد. بنابراین اگر فکر می کنید که برای داشتن سهمی در نظریه کوانتومی، خیلی دیر به دنیا آمده اید، نگران نباشید چون می توانید تصویر مربوط به خودتان را ابداع و ارائه کنید. مطالعه تصاویر مختلف را به فصل ۱۸ موكول می كنیم.

اجازه دهید حالت $H = H(t)$ را در نظر بگیریم، ما دیگر به دنبال مدهای طبیعی نیستیم چون عملگر تحت بررسی با زمان در حال تغییر است. هیچ استراتژی معینی برای حل چنین مسائلی وجود ندارد. در طی مطالعه خود با یک مسئله وابسته به زمان شامل اسپین مواجه خواهیم شد که می تواند به طور دقیق حل شود. همچنین یک روش تقریبی سیستماتیک را برای حل مسائلی مطالعه خواهیم کرد که در آنها

$$H(t) = H^0 + H^1(t)$$

H^0 یک قسمت عمده مستقل از زمان و $H^1(t)$ یک قسمت کوچک وابسته به زمان است. انتشارگر $U(t)$ در حالت وابسته زمان چه چیزی است؟ به عبارتی دیگر، چطور $U(t)$ در $|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle$ به $H(t)$ مربوط می شود؟ برای یافتن پاسخ، بازه $(0-t)$ را به N قسمت با پهنای $\Delta = t/N$ تقسیم می کنیم که N بسیار بزرگ و Δ بسیار کوچک است. با انتگرال گیری از معادله شرودینگر روی بازه اول، می توانیم تا مرتبه اول از Δ بنویسیم:

$$\begin{aligned} |\psi(\Delta)\rangle &= |\psi(0)\rangle + \Delta \left. \frac{d|\psi\rangle}{dt} \right|_0 \\ &= |\psi(0)\rangle - \frac{i\Delta}{\hbar} H(0) |\psi(0)\rangle \\ &= \left[1 - \frac{i\Delta}{\hbar} H(0) \right] |\psi(0)\rangle \\ &= \exp \left[\frac{-i\Delta}{\hbar} H(0) \right] |\psi(0)\rangle \end{aligned}$$

که تا این مرتبه،

[ممکن است تعجب کنید که آیا در بازه 0 تا Δ باید از $H(0)$ یا $H(\Delta)$ یا $H(\Delta/2)$ یا غیره استفاده کنید. اختلاف بین این امکان ها از مرتبه Δ بوده و لذا بی تأثیر است، چون یک توان از Δ در جلوی H وجود دارد.] با پیشروی با گام های Δ به نتیجه زیر می رسیم:

$$|\psi(t)\rangle = \prod_{n=0}^{N-1} e^{-i\Delta H(n\Delta)/\hbar} |\psi(0)\rangle$$

نمی توانیم فقط نماها را جمع کنیم تا در حد $N \rightarrow \infty$ به

$$U(t) = \exp \left[- (i/\hbar) \int_0^t H(t') dt' \right]$$

برسیم، چون در حالت کلی

$$[H(t_1), H(t_2)] \neq 0$$

برای مثال اگر

$$H(t) = X^2 \cos^2 \omega t + P^2 \sin^2 \omega t$$

باشد آنگاه

$$H(0) = X^2$$

و

$$H(\pi/2\omega) = P^2$$

و

$$[H(0), H(\pi/2\omega)] \neq 0$$

مرسوم است که در چنین مسائلی از نماد، موسوم به انتگرال ترتیب زمانی^۱،

$$T \left\{ \exp \left[- (i/\hbar) \int_0^t H(t') dt' \right] \right\} = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=0}^{N-1} \exp [- (i/\hbar) H(n\Delta) \Delta]$$

استفاده می‌کنیم. از این شکل $U(t)$ استفاده زیادی نخواهیم کرد. اما توجه کنید که با وجود ضرب عملگرهای یکانی، $U(t)$ یکانی است و تحول زمانی کماکان یک «چرخش» می‌باشد، چه H مستقل از زمان باشد، چه نباشد.

چه H وابسته به زمان باشد چه نباشد، انتشارگر شروط زیر را برآورده می‌کند:

$$\begin{aligned} U(t_3, t_2) U(t_2, t_1) &= U(t_3, t_1) \\ U^\dagger(t_2, t_1) &= U^{-1}(t_2, t_1) = U(t_1, t_2) \end{aligned} \quad (۱۶-۳-۴)$$

کاملاً روشن است که این معادلات درستند و می‌توانید آنها را با اعمال U ها به یک حالت دلخواه و استفاده از این حقیقت که U یکانی است و $U(t, t) = I$ به راحتی ثابت کنید.

۳- انتخاب پایه‌ای برای حل معادله

به جز چند استثناء، معادله شرودینگر همیشه در یک پایه خاص حل می‌شود. اگر چه همه پایه‌ها از نظر ریاضی یکسان هستند ولی بعضی از آنها نسبت به بقیه راحت ترند. قبل از همه، چون $H = H(X, P)$ است، پایه‌های X و P خودشان توصیه می‌شوند چون در رفتن به سراغ یکی از آنها عملگر متناظر قطری در می‌آید.

بنابراین می‌توان به پایه X رفت که در آن $X \rightarrow x$ و $P \rightarrow -i\hbar d/dx$ یا به پایه P رفت که در آن $P \rightarrow p$ و $X \rightarrow i\hbar d/dp$ قرار می‌گیرد. انتخاب از بین این دو به هامیلتونی بستگی دارد. با فرض اینکه هامیلتونی (در یک بعد) به شکل

$$H = T + V = \frac{P^2}{2m} + V(X) \quad (۱۷-۳-۴)$$

است انتخاب پایه به وسیله $V(x)$ دیکته می‌شود. از آنجا که $V(x)$ معمولاً تابعی پیچیده‌تر از X نسبت به T از P است، پایه X پیشنهاد می‌شود. بنابراین اگر

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{\cosh^2 X} \quad (۱۸-۳-۴)$$

باشد معادله

$$H|E\rangle = E|E\rangle$$

در پایه X ، معادله مرتبه دوم

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{\cosh^2 x} \right) \psi_E(x) = E\psi_E(x) \quad (۱۹-۳-۴)$$

می‌شود که می‌تواند حل شود. اگر به پایه P می‌رفتیم به معادله زیر می‌رسیدیم

$$\left[\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{\cosh^2(i\hbar d/dp)} \right] \psi_E(p) = E\psi_E(p) \quad (۲۰-۳-۴)$$

که کاملاً ترسناک است.

مسئله‌ای که برای آن پایه P پیشنهاد می‌شود، مسئله ذره در یک میدان نیروی ثابت f است که برای آن

$$H = \frac{P^2}{2m} - fX \quad (۲۱-۳-۴)$$

است. در پایه P یک معادله دیفرانسیل مرتبه اول به دست می‌آید

$$\left(\frac{p^2}{2m} - i\hbar f \frac{d}{dp} \right) \psi_E(p) = E\psi_E(p) \quad (۲۲-۳-۴)$$

در حالی که در پایه X معادله دیفرانسیل، مرتبه ۲ است،

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - fx \right) \psi_E(x) = E\psi_E(x) \quad (۲۳-۳-۴)$$

نوسانگر هماهنگ می‌تواند در هر دو پایه حل شود چون H نسبت به X و P از درجه ۲ است. خواهیم دید که بهتر است آنرا در پایه سومی حل کنیم که در آن نه X و نه P قطری‌اند! باید تا فصل ۷ صبر کنید تا چگونگی کار را ببینید.

یک تمایل و تعصب نسبت به پایه X وجود دارد و دلیلش این است که فضای x ، فضایی است که ما در آن زندگی می‌کنیم. به عبارتی دیگر وقتی از احتمال به دست آوردن یک مقدار بین x و $x + dx$ در صورت اندازه‌گیری X صحبت می‌کنیم، منظورمان فقط احتمال یافتن ذره بین x و $x + dx$ در فضای خودمان است. لذا می‌توان $\psi(x)$ را به صورت تابعی در فضای خودمان تصور کنیم که مربع مدول آن، چگالی احتمال یافتن ذره در نزدیکی x را به دست می‌دهد. چنین تصویری در تأمل در مورد آزمایش دو شکافی یا حالت‌های الکترونی در اتم هیدروژن مفید هستند.

اما مثل همه تصویرها، آن هم محدودیت‌هایی دارد. قبل از همه باید به خاطر سپرد که اگر چه $\psi(x)$ می‌تواند به عنوان یک موج در فضای ما تصور شود ولی یک موج حقیقی مثل موج الکترومغناطیسی که انرژی و تکانه و غیره حمل می‌کند نیست. برای درک این نکته ذره‌ای را در سه بعد در نظر بگیرید. تابع $\psi(x, y, z)$ می‌تواند به صورت موجی در فضای ما تصور شود. اما اگر سپس یک سیستم دو ذره‌ای را در نظر بگیریم، $\psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2)$ تابعی در فضای پیکربندی شش بعدی است و در حالت کلی در فضای ما نمی‌تواند تصور شود.

بنابراین مورد ذره منفرد واقعاً یک استثناء است: فقط یک عملگر مکان وجود دارد و فضای ویژه مقادیر آن می‌تواند بر فضایی که ما در آن زندگی می‌کنیم، و نمایشنامه فیزیک در آن اتفاق می‌افتد، منطبق باشد. در اینجا به پایان بحث اصول موضوعه می‌رسیم. اکنون به کاربرد نظریه کوانتومی برای مسائل فیزیکی مختلف بر می‌گردیم. به دلایل آموزشی، در چند فصل بعدی خودمان را به مسائل یک ذره منفرد در یک بعد محدود می‌کنیم.

اکنون که اصول مکانیک کوانتومی بیان و تشریح شده‌اند، به کاربردها می‌پردازیم. با ساده‌ترین گروه از مسائل یعنی مسائل مربوط به ذره منفرد در یک بعد شروع می‌کنیم. اگر چه این مسائل یک بعدی تا حدودی ساختگی هستند، اما شامل اکثر ویژگی‌های مکانیک کوانتومی سه‌بعدی هستند و در عین حال پیچیدگی کمتری نسبت به آنها دارند. مسئله‌ای که در این فصل بحث نخواهیم کرد، مسئله نوسانگر هماهنگ است. این مسئله به قدری اهمیت دارد که فصلی جداگانه به مطالعه آن اختصاص داده شده است.

۱-۵- ذره آزاد

ساده‌ترین مسئله در این خانواده، مسئله ذره آزاد است. معادله شرودینگر به صورت زیر است

$$i\hbar|\dot{\psi}\rangle = H|\psi\rangle = \frac{P^2}{2m}|\psi\rangle \quad (1-1-5)$$

مدهای طبیعی (بهنجار) یا حالت‌های مانا جواب‌هایی به شکل زیر هستند

$$|\psi\rangle = |E\rangle e^{-iEt/\hbar} \quad (2-1-5)$$

با قرار دادن این جواب در معادله (۱-۱-۵)، معادله شرودینگر مستقل از زمان برای $|E\rangle$ به دست می‌آید:

$$H|E\rangle = \frac{P^2}{2m}|E\rangle = E|E\rangle \quad (3-1-5)$$

این مسئله می‌تواند بدون رفتن به یک پایه حل شود. ابتدا توجه کنید که هر ویژه حالت P ویژه حالتی از P^2 هم هست. بنابراین جواب آزمایشی $|p\rangle$ را در معادله (۳-۱-۵) قرار داده و به معادله زیر می‌رسیم

$$\frac{P^2}{2m}|p\rangle = E|p\rangle$$

یا

$$\left(\frac{p^2}{2m} - E\right)|p\rangle = 0 \quad (4-1-5)$$

چون $|p\rangle$ یک بردار صفر نیست، نتیجه می شود که مقادیر مجاز p به شرح زیرند

$$p = \pm(2mE)^{1/2} \quad (5-1-5)$$

به عبارت دیگر، دو ویژه حالت متعامد برای هر ویژه مقدار E وجود دارد:

$$|E, +\rangle = |p = (2mE)^{1/2}\rangle \quad (6-1-5)$$

$$|E, -\rangle = |p = -(2mE)^{1/2}\rangle \quad (7-1-5)$$

بنابراین، نتیجه می گیریم که برای ویژه مقدار E یک ویژه فضای دو بعدی تبهگن متناظر است که به وسیله بردارهای بالا پدید می آید. از نظر فیزیکی این بدین معنی است که ذره ای با انرژی E می تواند با تکانه $|p| = (2mE)^{1/2}$ به راست یا به چپ در حال حرکت باشد. حال ممکن است بگویید «این دقیقاً همان چیزی است که در مکانیک کلاسیک اتفاق می افتد، پس چه چیز جدیدی وجود دارد؟» آنچه جدید است این حقیقت است که حالت

$$|E\rangle = \beta|p = (2mE)^{1/2}\rangle + \gamma|p = -(2mE)^{1/2}\rangle \quad (8-1-5)$$

هم ویژه حالتی با انرژی E است و یک ذره منفرد با انرژی E را نشان می دهد که می تواند در حال حرکت به راست یا چپ با تکانه $(2mE)^{1/2}$ باشد!

برای ساختن ویژه پایه متعامد کامل H ، باید دو بردار راست هنجار از هر ویژه فضای تبهگن انتخاب کنیم. انتخاب بدیهی، خود کت های $|E, +\rangle$ و $|E, -\rangle$ هستند. به زبان مفاهیم بحث شده در گذشته، ویژه مقدار یک متغیر سازگار P را به عنوان برچسب اضافی درون فضای تبهگن نسبت به انرژی به کار می بریم. چون P عملگری غیر تبهگن است، برچسب P به تنهایی کفایت می کند. به عبارت دیگر، نیازی به نشان دادن حالت به صورت $|p, E = P^2/2m\rangle$ نیست چون با مشخص بودن p ، مقدار $E = E(p)$ مشخص می شود. بنابراین این برچسب زائد را حذف می کنیم.

انتشارگر به صورت زیر است

$$U(t) = \int_{-\infty}^{\infty} |p\rangle\langle p| e^{-iE(p)t/\hbar} dp \quad (9-1-5)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} |p\rangle\langle p| e^{-ip^2t/2m\hbar} dp$$

تمرین ۵-۱-۱: نشان دهید که معادله (۹-۱-۵) می تواند به صورت انتگرالی روی E و یک جمع روی شاخص \pm به صورت

$$U(t) = \sum_{\alpha=\pm} \int_0^{\infty} \left[\frac{m}{(2mE)^{1/2}} \right] |E, \alpha\rangle\langle E, \alpha| e^{-iEt/\hbar} dE$$

نوشته شود.

تمرین ۵-۱-۲: با حل معادله ویژه مقداری (۳-۱-۵) در پایه X ، معادله (۸-۱-۵) را مجدداً به دست آورید، یعنی نشان دهید که جواب عمومی انرژی به صورت زیر است

$$\psi_E(x) = \beta \frac{\exp[i(2mE)^{1/2}x/\hbar]}{(2\pi\hbar)^{1/2}} + \gamma \frac{\exp[-i(2mE)^{1/2}x/\hbar]}{(2\pi\hbar)^{1/2}}$$

[ضریب $(2\pi\hbar)^{-1/2}$ دلخواه است و می تواند داخل β و γ قرار گیرد] با اینکه $\psi_E(x)$ معادله را حتی اگر $E < 0$ باشد بر آورده خواهد کرد، آیا این توابع در فضای هیلبرت هستند؟
انتشارگر $U(t)$ می تواند صریحاً در پایه X محاسبه شود. با عنصر ماتریسی زیر شروع می کنیم

$$\begin{aligned} U(x, t; x') &\equiv \langle x | U(t) | x' \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x | p \rangle \langle p | x' \rangle e^{-ip^2 t / 2m\hbar} dp \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ip(x-x')/\hbar} \cdot e^{-ip^2 t / 2m\hbar} dp \quad (10-1-5) \\ &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar it} \right)^{1/2} e^{im(x-x')^2 / 2\hbar t} \end{aligned}$$

که از نتیجه مربوط به ضمیمه $A-2$ درباره انتگرال های گوسی استفاده می کنیم. بر حسب این عملگر، هر مسئله ویژه مقداری می تواند حل شود، چون

$$\psi(x, t) = \int U(x, t; x') \psi(x', 0) dx' \quad (11-1-5)$$

اگر زمان اولیه را به جای صفر، t' انتخاب می کردیم به عبارت زیر می رسیدیم

$$\psi(x, t) = \int U(x, t; x', t') \psi(x', t') dx' \quad (12-1-5)$$

که $\langle x | U(t-t') | x' \rangle = U(x, t; x', t')$ ، چون U فقط به بازه زمانی $t-t'$ ، و نه مقادیر مطلق t و t' بستگی دارد [در غیاب چیزی که معرف یک زمان مطلق در مسئله باشد فقط اختلاف زمان اهمیت فیزیکی دارد] هر وقت $t'=0$ قرار دهیم به قرارداد قدیمی خود برگشته و $U(x, t; x', 0)$ را به صورت $U(x, t; x')$ می نویسیم.

با در نظر گرفتن حالت خاصی از معادله (۱۲-۱-۵) می توان تغییر فیزیکی خوبی به $U(x, t; x', t')$ داد. فرض کنید با ذره ای جایگزیده در $x' = x'_0$ شروع کرده ایم یعنی با $\psi(x', t') = \delta(x' - x'_0)$. در این صورت،

$x' = x'_0$, that is, with $\psi(x', t') = \delta(x' - x'_0)$. Then

$$(13-1-5)$$

$$\psi(x, t) = U(x, t; x'_0, t')$$

به عبارت دیگر، انتشارگر (در پایه X) دامنه‌ای است که با آن یک ذره شروع کننده در نقطه فضا-زمان (x'_0, t') به نقطه فضا-زمان (x, t) می‌رسد [چنین تعبیری را به وضوح می‌توان در هر پایه‌ای ارائه کرد: $\langle \omega' | U(t, t') | \omega \rangle$ دامنه‌ای است که ذره واقع در حالت $\langle \omega' |$ در t' ، در t با آن از حالت $\langle \omega |$ سرد می‌آورد] معادله (۱۲-۱-۵) بیان می‌کند که دامنه کل برای رسیدن ذره به (x, t) برابر مجموع سهم‌های ناشی از همه نقاط x' با وزنی متناسب با دامنه اولیه $\psi(x', t')$ ، دامنه بودن ذره در زمان t' در x' ، است. به $U(x, t; x', t')$ «سرنوشت» تابع دلتا $\delta(x' - x'_0)$ گفته می‌شود.

تحول زمانی بسته گوسی

قانون نانوشته‌ای وجود دارد که بیان می‌کند استنتاج انتشارگر ذره آزاد به وسیله اعمال آن به بسته گوسی حاصل می‌شود. این روش را پی می‌گیریم. بسته موج زیر را به عنوان تابع اولیه در نظر بگیرید

$$\psi(x', 0) = e^{ip_0 x' / \hbar} \frac{e^{-x'^2 / 2\Delta^2}}{(\pi\Delta^2)^{1/4}} \quad (14-1-5)$$

این بسته دارای مکان میانگین $\langle X \rangle = \Delta/2^{1/2}$ با عدم قطعیت $\Delta X = \Delta/2^{1/2}$ و تکانه میانگین p_0 با عدم قطعیت Δ است. با ترکیب معادلات (۱۰-۱-۵) و (۱۲-۱-۵) داریم

$$\begin{aligned} \psi(x, t) = & \left[\pi^{1/2} \left(\Delta + \frac{i\hbar t}{m\Delta} \right) \right]^{-1/2} \cdot \exp \left[\frac{-(x - p_0 t / m)^2}{2\Delta^2 (1 + i\hbar t / m\Delta^2)} \right] \\ & \times \exp \left[\frac{ip_0}{\hbar} \left(x - \frac{p_0 t}{2m} \right) \right] \end{aligned} \quad (15-1-5)$$

چگالی احتمال متناظر برابر است با

$$P(x, t) = \frac{1}{\pi^{1/2} (\Delta^2 + \hbar^2 t^2 / m^2 \Delta^2)^{1/2}} \cdot \exp \left\{ \frac{-[x - (p_0/m)t]^2}{\Delta^2 + \hbar^2 t^2 / m^2 \Delta^2} \right\} \quad (16-1-5)$$

ویژگی‌های عمده این نتیجه به شرح زیرند:

(۱) - مکان میانگین ذره عبارتست از

$$\langle X \rangle = \frac{p_0 t}{m} = \frac{\langle P \rangle t}{m}$$

به عبارتی دیگر، رابطه کلاسیکی $x = (p/m)t$ بین کمیت‌های متوسط برقرار است. این درست یکی از نتایج قضیه اهرنفتست است که بیان می‌کند معادلات کلاسیکی حاکم بر متغیرهای دینامیکی تعابیری در مکانیک کوانتومی به صورت روابط بین مقادیر چشم‌داشتی خواهند داشت. این قضیه در فصل بعد اثبات خواهد شد.

(۲) - پهنای بسته طبق رابطه زیر زیاد می‌شود:

$$\Delta X(t) = \frac{\Delta(t)}{2^{1/2}} = \frac{\Delta}{2^{1/2}} \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 \Delta^4} \right)^{1/2} \quad (17-1-5)$$

عدم قطعیت در حال افزایش مکان بازتابی از این حقیقت است که هر عدم قطعیتی در سرعت اولیه (که قرار است تکانه گفته شود) با گذشت زمان به صورت افزایش عدم قطعیت در مکان منعکس خواهد شد. در این مورد، چون $\Delta V(0) = \Delta P(0)/m = \hbar/2^{1/2} m \Delta$ ، عدم قطعیت X تقریباً به صورت $\Delta X \cong \hbar t / 2^{1/2} m \Delta$ افزایش می‌یابد که با معادله (۱۷-۱-۵) برای زمان‌های بزرگ سازگار است. اگر چه قادر به درک پهن شدن بسته موج با زبان کلاسیکی هستیم، این حقیقت که پهن شدن اولیه $\Delta V(0)$ غیرقابل اجتناب است (فرض می‌شود که می‌خواهیم مکان را با دقت Δ تعیین کنیم) یک ویژگی کاملاً کوانتوم مکانیکی است.

اگر ذره مورد نظر ماکروسکوپی بود، مثلاً به جرم $1g$ ، و می‌خواستیم مکان اولیه آن را در حد پهنای یک پروتون، که تقریباً 10^{-13} cm است مشخص کنیم، عدم قطعیت در مکان برابر می‌شد با

$$\Delta V(0) \simeq \frac{\hbar}{2^{1/2} m \Delta} \simeq 10^{-14} \text{ cm/sec}$$

بیش از سیصد هزار سال طول می‌کشید تا عدم قطعیت $\Delta(t)$ به یک میلی‌متر افزایش یابد. لذا می‌توانیم ذره ماکروسکوپی را برای هر مدت زمان معقولی به صورت کلاسیکی بحث کنیم. این سوال و سؤالات نظیر این به طور مفصل‌تر در فصل بعدی بررسی خواهند شد.

تمرین ۱-۵-۳: (روش دیگری برای مسئله گوسین). دیدیم که فرمول دیگری برای $U(t)$ وجود دارد، یعنی $U(t) = e^{-i\hbar t/\hbar}$ برای یک ذره آزاد این فرمول به صورت زیر است

$$U(t) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\frac{\hbar^2 t}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i\hbar t}{2m} \right)^n \frac{d^{2n}}{dx^{2n}} \quad (18-1-5)$$

حالت اولیه را در معادله (۱۶-۱-۵) با $p_0 = 0$ در نظر گرفته و $\Delta = 1$ و $t' = 0$ قرار دهید:

$$\psi(x, 0) = \frac{e^{-x^2/2}}{(\pi)^{1/4}}$$

با استفاده از معادله (۱۸-۱-۵)، $\psi(x, t)$ را به دست آورده و با معادله (۱۵-۱-۵) مقایسه کنید. راهنمایی: (۱) - $\psi(x, 0)$ را به صورت سری توانی بنویسید:

$$\psi(x, 0) = (\pi)^{-1/4} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n x^{2n}}{n! (2)^n}$$

(۲)- اثر چند جمله

$$1, \quad \left(\frac{i\hbar t}{2m}\right) \frac{d^2}{dx^2}, \quad \frac{1}{2!} \left(\frac{i\hbar t}{2m} \frac{d^2}{dx^2}\right)^2$$

و غیره را روی این سری توانی به دست آورید.

(۳)- جمله‌های با توان یکسان از x را دسته‌بندی کنید.

(۴)- دنبال بسط سری زیر در ضریب x^{2n} بگردید

$$\left(1 + \frac{i\hbar t}{m}\right)^{-n-1/2} = 1 - (n+1/2) \left(\frac{i\hbar t}{m}\right) + \frac{(n+1/2)(n+3/2)}{2!} \left(\frac{i\hbar t}{m}\right)^2 + \dots$$

(۵)- کمی تلاش کنید تا به جواب برسید.

تمرین ۵-۱-۴: یک مثال معروف. تابع موج زیر را در نظر بگیرید

$$\begin{aligned} \psi(x, 0) &= \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right), & |x| \leq L/2 \\ &= 0, & |x| > L/2 \end{aligned}$$

واضح است که وقتی این تابع چندین بار مشتق‌گیری شود تابع دیگری به دست می‌آید که به بازه $|x| \leq L/2$ محدود است. در نتیجه اثر

$$U(t) = \exp\left[\frac{i}{\hbar} \left(\frac{\hbar^2 t}{2m}\right) \frac{d^2}{dx^2}\right]$$

روی این تابع باید تابعی محدود به $|x| \leq L/2$ به دست دهد. در مورد پهن شدن شدگی بسته موج چه می‌توان گفت؟ [جواب: مشتق‌ها را در مرز در نظر بگیرید. در اینجا مثالی داریم که سری توانی عملگر (نمایی) همگرا نمی‌شود. توجه کنید که همگرایی یک سری توانی عملگر نه تنها به عملگر بستگی دارد بلکه به عمل شونده هم بستگی دارد. بنابراین هیچ پارادوکسی وجود ندارد: اگر تابع همانند بالا به طول ناگهانی سقوط کند به طوری که یک پارادوکسی به نظر آید، مشتقات در مرز تکین می‌شوند، درحالی که اگر به طور پیوسته نزول کند، تابع در زمان کافی، بدون توجه به میزان تندی نزول، به طور قطعی پهن خواهد شد.]

بعضی از ویژگی‌های کلی ویژه توابع انرژی

اکنون ویژه توابع انرژی را در یک پتانسیل $V(x)$ در نظر بگیرید. این توابع از معادله زیر پیروی می‌کنند

$$\psi'' = -\frac{2m(E-V)}{\hbar^2} \psi$$

که هر پریم نشانگر یک مشتق فضایی است. سوال این است که پیوستگی $V(x)$ به چه چیزی اشاره می کند. فرض کنید از نقطه x_0 شروع کنیم که در آن ψ و ψ' مقادیر $\psi(0)$ و $\psi'(0)$ را دارند. اگر ادعا کنیم x متغیر با زمان است و ψ یک مختصه ذره است، مسئله یافتن ψ در هر جای دیگر شبیه یافتن مسیر ذره (برای همه زمان های گذشته و آینده) با معلوم بودن مکان و سرعت در یک لحظه و شتاب آن به صورت تابعی از مکان آن و زمان می شود. واضح است که اگر از این معادلات انتگرال بگیریم، $\psi(x)$ و $\psi'(x)$ پیوسته به دست می آوریم. این وضعیت، نوعی است. اما مسائلی وجود دارد که در آنها برای سادگی ریاضی پتانسیل هایی در نظر می گیریم که در یک نقطه به طور ناگهانی تغییر می کنند. این یعنی ψ'' در آنجا به طور ناگهانی پرش می کند. اما ψ' هنوز پیوسته خواهد بود، چون سطح زیر تابع، حتی اگر تابع کمی هم پرده، پیوسته است. اگر تغییر در V بی نهایت بزرگ باشد چطور؟ این بدین معنی است که ψ'' هم بی نهایت بزرگ می شود. این به نوبه خود به معنی این است که وقتی از این نقطه عبور می کنیم ψ' می تواند ناگهانی تغییر کند، چون مساحت زیر ψ'' می تواند روی ناحیه بی نهایت کوچک حول این نقطه متناهی باشد. اما چه ψ' پیوسته باشد و چه نباشد، ψ که مساحت زیر آن است پیوسته خواهد بود.^۱

اکنون توجه خود را به چند مورد خاص جلب می کنیم.

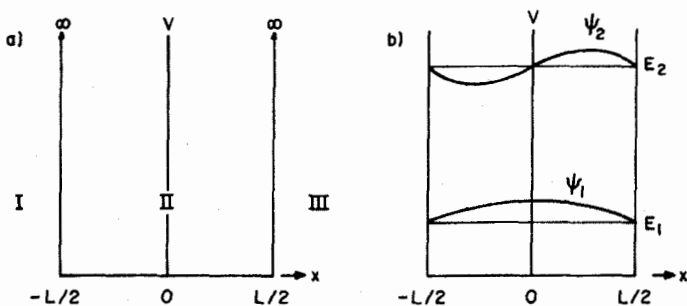
۵-۲- ذره در جعبه

اولین مسئله، پتانسیلی هر چند ساختگی به صورت زیر است

$$V(x) = 0, \quad |x| < L/2 \quad (1-2-5)$$

$$= \infty, \quad |x| \geq L/2$$

این پتانسیل (شکل ۵-۱-الف) جعبه نامیده می شود چون یک سد پتانسیل بی نهایت در سر راه ذره ای که سعی دارد ناحیه $|x| < L/2$ را ترک کند دارد.



شکل ۵-۱: الف - پتانسیل جعبه. ب - دو تراز اول و توابع موج در جعبه.

معادله ویژه مقداری در پایه X (که تنها انتخاب مناسب است) عبارتست از

۱- فرض می کنیم که پرش در ψ'' متناهی است. این حتی در پتانسیل های ساختگی هم که مواجه می شویم درست خواهد بود. اما آیا می توانید پتانسیلی تصور کنید که برای آن این مطلب صحیح نیست؟ (به دلنا فکر کنید).

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0 \quad (۲-۲-۵)$$

با تقسیم فضا به سه ناحیه I و II و III شروع می‌کنیم (شکل ۱-۵ الف) جواب ψ در نواحی I و II و III به ترتیب ψ_I ، ψ_{II} و ψ_{III} نامیده می‌شوند.

ناحیه اول را در نظر بگیرید که در آن $V = \infty$ است. بهتر است ابتدا حالتی را در نظر بگیریم که V نامتناهی نبوده بلکه برابر یک V_0 است که بزرگتر از E است. معادله (۲-۲-۵) به صورت زیر در می‌آید

$$\frac{d^2\psi_{III}}{dx^2} - \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\psi_{III} = 0 \quad (۳-۲-۵)$$

که با تابع زیر حل می‌شود

$$\psi_{III} = A e^{-\kappa x} + B e^{\kappa x} \quad (۴-۲-۵)$$

$$\kappa = \left[2m(V_0 - E)/\hbar^2 \right]^{1/2} \text{ که}$$

اگر چه A و B از نظر ریاضی ضرایب دلخواهی هستند، باید بر مبنای اصول فیزیکی $B = 0$ قرار گیرد چون $B e^{\kappa x}$ با میل $x \rightarrow \infty$ به صورت نامایی زیاد می‌شود و چنین توابعی اعضای فضای هیلبرت ما نیستند. اگر بخواهیم $V_0 \rightarrow \infty$ میل کند، مشاهده می‌کنیم که

$$\psi_{III} \equiv 0$$

به طور مشابه می‌شود نشان داد که $\psi_I \equiv 0$ است. در ناحیه II، چون $V = 0$ است، جواب‌ها دقیقاً همان جواب‌های ذره آزاد هستند:

$$\psi_{II} = A \exp[i(2mE/\hbar^2)^{1/2}x] + B \exp[-i(2mE/\hbar^2)^{1/2}x] \quad (۵-۲-۵)$$

$$= A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \quad k = (2mE/\hbar^2)^{1/2} \quad (۶-۲-۵)$$

بنابراین به نظر می‌رسد که ویژه مقادیر انرژی یک بار دیگر همچون مورد ذره آزاد پیوسته هستند. اما این طور نیست، چون فقط در ناحیه II، $\psi_{II}(x) = \psi$ است و نه در همه فضا. باید الزام کنیم که ψ_{II} با عبور به نواحی I و II به طور پیوسته به ترتیب به ψ_I و ψ_{III} برود. به عبارتی دیگر شرط می‌کنیم که

$$\psi_I(-L/2) = \psi_{II}(-L/2) = 0 \quad (۷-۲-۵)$$

$$\psi_{III}(+L/2) = \psi_{II}(+L/2) = 0 \quad (۸-۲-۵)$$

(ما نیاز به چنین پیوستگی برای ψ' در دیواره‌های جعبه نداریم چون V در آنجا به بی‌نهایت پرش می‌کند) این فیود وقتی به معادله (۶-۲-۵) اعمال شوند به شکل زیر در می‌آیند

(۵-۲-۹-الف)

$$A e^{-ikL/2} + B e^{ikL/2} = 0$$

(۵-۲-۹-ب)

$$A e^{ikL/2} + B e^{-ikL/2} = 0$$

یا در شکل ماتریسی،

$$\begin{bmatrix} e^{-ikL/2} & e^{ikL/2} \\ e^{ikL/2} & e^{-ikL/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (۵-۲-۱۰)$$

چنین معادله‌ای فقط در صورتی جواب‌های غیربدهی دارد که دترمینان صفر شود:

$$e^{-ikL} - e^{ikL} = -2i \sin(kL) = 0 \quad (۵-۲-۱۱)$$

یعنی فقط در صورتی که،

$$k = \frac{n\pi}{L}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (۵-۲-۱۲)$$

برای یافتن ویژه توابع متناظر، به سراغ معادلات (۵-۲-۹-الف) و (۵-۲-۹-ب) می‌رویم. چون فقط یکی از آنها مستقل است، فقط معادله (۵-۲-۹-الف) را مطالعه می‌کنیم که بیان می‌کند

(۵-۲-۱۳)

$$A e^{-in\pi/2} + B e^{in\pi/2} = 0$$

با ضرب $e^{i\pi n/2}$ خواهیم داشت:

(۵-۲-۱۴)

$$A = -e^{in\pi} B$$

چون $e^{in\pi} = (-1)^n$ است، معادله (۵-۲-۱۴) دو خانواده از جواب‌ها (بهنجار شده به یک) تولید می‌کند:

$$\psi_n(x) = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad n \text{ even} \quad (۵-۲-۱۵)$$

$$= \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad n \text{ odd} \quad (۵-۲-۱۶)$$

توجه کنید که مورد $n = 0$ جالب توجه نیست چون $\psi_0 \equiv 0$ می‌شود. به علاوه چون برای n فرد $\psi_n = \psi_{-n}$ می‌شود و برای n زوج $\psi_n = -\psi_{-n}$ ، و چون ویژه توابع متفاوت به اندازه یک ضرب کلی، متمایز در نظر گرفته نمی‌شوند، می‌توانیم خودمان را به n های غیر صفر مثبت مقید کنیم. به طور خلاصه داریم:

$$\psi_n = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad n = 1, 3, 5, 7, \dots \quad (۵-۲-۱۷-الف)$$

$$= \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad n=2, 4, 6, \dots \quad (ب-۱۷-۲-۵)$$

و از معادلات (۵-۲-۶) و (۵-۲-۱۲)،

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} \quad (ج-۱۷-۲-۵)$$

[به طور ضمنی از معادلات (۵-۲-۱۷-الف) و (۵-۲-۱۷-ب) می توان فهمید که $|x| < L/2$ است.]
در اینجا اولین مواجهه خود با کوانتش یک متغیر دینامیکی را تجربه می کنیم. هر دو متغیری که قبلاً در نظر گرفتیم، X و P ، طیف ویژه مقادیر پیوسته از $-\infty$ تا $+\infty$ داشتند که با مقادیر مجاز در مکانیک کلاسیک تطابق داشتند. در واقع طیف هامیلتونی در مورد ذره آزاد هم پیوسته بود. ذره واقع در جعبه ساده ترین مثال از وضعیتی است که بارها و بارها با آن مواجه خواهیم شد و در آن معادله شرودینگر در ترکیب با شرایط مرزی مناسب منجر به کوانتش انرژی می شود. این جواب ها مثال هایی از حالت های مقید هم هستند، یعنی حالت هایی که در آنها یک پتانسیل از فرار ذره به بی نهایت جلوگیری می کند. بنابراین حالت های مقید به صورت زیر مشخص می شوند

$$\psi(x) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} 0$$

حالت های مقید در مکانیک کوانتومی دقیقاً جایی ظاهر می شوند که از نظر کلاسیکی هم آنها را انتظار داریم، یعنی وضعیت هایی که $V(\pm\infty)$ بزرگتر از E است.

ترازهای انرژی حالات مقید همیشه کوانتیده هستند. مایل هستیم تا در مورد چگونگی وقوع آنها بصیرت بیشتری کسب کنیم. در مسئله ذره در جعبه، کوانتش از این شرط که ψ_{II} تعداد درستی نصف دوره درون جعبه کامل کند حاصل می شود به طوری که ψ_{II} به طور یکنواخت به نظایر ψ_I و ψ_{III} خود، که عیناً صفر می شوند، وصل می شود. حال ذره ای مقید به چاه متناهی، یعنی پتانسیلی که در $|x| < L/2$ از صفر به V_0 پرش می کند، را در نظر بگیرید. قبلاً دیدیم (معادله (۵-۲-۴)) که در ناحیه ممنوعه کلاسیکی $(V_0 < E)$ و $|x| < L/2$ مجموع جملات نمایی صعودی و نزولی است (وقتی $|x| \rightarrow \infty$) و باید ضریب جمله نمایی صعودی را صفر قرار دهیم تا به جواب مورد قبولی برسیم. در ناحیه ای که از نظر کلاسیکی مجاز است $(|x| \leq L/2)$ مجموع یک جمله سینوسی و یک جمله کسینوسی است. چون V در همه جا متناهی است. لازم است که ψ و ψ' در $|x| = \pm L/2$ پیوسته باشند. لذا چهار شرط روی ψ ، که فقط سه پارامتر آزاد دارد، اعمال می کنیم (ممکن است به نظر برسد که چهار پارامتر وجود دارد - ضرایب دو جمله نمایی نزولی، سینوس و کسینوس. اما مقیاس (ضریب) کلی ψ ، هم در معادله ویژه مقرداری و هم در شروط پیوستگی، به خاطر خطی بودنشان نسبت به ψ و ψ' ، اهمیت ندارد. لذا اگر بگوییم ψ' معادله پیوستگی را در $x = L/2$ برآورده نمی کند، مقیاس کردن مجدد ψ و ψ' هم کمکی نخواهد کرد). واضح است که شروط پیوستگی نمی توانند شاید به جز در بعضی انرژی های خاص برآورده شوند (برای جزئیات، تمرین ۵-۲-۶ را ببینید) این منشأ کوانتش انرژی در اینجا است.

اکنون یک پتانسیل عمومی $V(x)$ در نظر بگیرید که در صورت میل $\pm\infty \rightarrow x$ به حدود V_{\pm} میل می‌کند و ذره‌ای با انرژی E (کمتر از V_{+} و V_{-}) را مقید می‌کند. یک بار دیگر نشان می‌دهیم که تعداد قیود یکی بیشتر از تعداد پارامترهاست. فرض کنید فضا را به بازه‌های کوچکی تقسیم کنیم به طوری که در هر بازه پتانسیل $V(x)$ اساساً ثابت باشد. وقتی $\pm\infty \rightarrow x$ میل می‌کند این بازه‌ها می‌توانند بزرگتر و بزرگتر در نظر گرفته شوند چون V در مقادیر مجانبی V_{\pm} خود به حالت ثابت درمی‌آید. راست‌ترین و چپ‌ترین بازه‌ها می‌توانند بسیار پهن در نظر گرفته شوند چون طبق فرض، V در صورت $\pm\infty \rightarrow x$ ، حد معینی دارد. حال در همه بازه‌های متناهی، ψ دو پارامتر دارد. این ضرایب، ضرایب سینوس و کسینوس در حالت $V \gg E$ و ضرایب جملات نمایی صعودی و نزولی در حالت $V < E$ هستند (جمله نمایی صعودی غیر مجاز نیست چون داخل بازه‌های متناهی، بزرگ نمی‌شود). فقط در راست‌ترین و چپ‌ترین بازه‌ها ψ فقط یک پارامتر دارد چون در این بازه‌های نامتناهی جمله نمایی صعودی می‌تواند بزرگ شود. همه این پارامترها به وسیله پیوستگی ψ و ψ' در هر فصل مشترک بین نواحی مجاور محدود و مقید می‌شوند. برای اینکه ببینیم، تعداد قیود یکی بیشتر از تعداد پارامترهاست، ملاحظه می‌کنیم که هر بازه اضافی، با خودش دو پارامتر آزاد و یک فصل مشترک جدید، یعنی دو قید، به همراه می‌آورد. لذا وقتی از سه بازه در چاه متناهی به بی‌نهایت بازه در پتانسیل دلخواه می‌رویم، تعداد قیود همیشه یکی بیشتر از پارامترهای آزاد می‌شود. پس فقط در انرژی‌های خاصی می‌توانیم جوابی مُجاز انتظار داشته باشیم.

[بعدها پتانسیل نوسانگر هماهنگ، $V = 1/2 m \omega^2 x^2$ ، را مطالعه خواهیم کرد که با میل $x \rightarrow \infty$ بدون حد زیاد می‌شود. در اینجا چطور کوانتس انرژی را درک می‌کنیم؟ واضح است که هر ψ مجاز، با میل $|x| \rightarrow \infty$ ، حتی سریعتر از قبل صفر خواهد شد، چون $V - E$ ، به جای ثابت بودن، به صورت توان دو زیاد می‌شود به طوری که «حتی بیشتر از قبل از فرار ذره به بی‌نهایت ممانعت بعمل می‌آید». اگر انرژی مُجازی باشد^۱ انتظار داریم ψ با عبور از نقاط بازگشت $x_0 = \pm(2E/m\omega^2)^{1/2}$ سریعتر نزول کند. برای ذره واقع در چنین پتانسیلی نباید اهمیت داشته باشد اگر که پتانسیل را در فواصل بسیار بیشتر از $|x_0|$ به یک پتانسیل ثابت پهن کنیم، یعنی ترازهای مجاز و ویژه توابع باید در دو پتانسیلی که فقط در ناحیه‌ای که از رفتن ذره به آن شدیداً ممانعت می‌شود تفاوت می‌کنند یکسان باشند. چون پتانسیل پهن شده رفتار مجانبی را دارد که قبلاً بحث کردیم، می‌توانیم کوانتس انرژی را به همان شکل گذشته درک کنیم.]

اجازه دهید منشأ کوانتس انرژی را به شیوه دیگری بیان کنیم. فرض کنید برای به دست آوردن ویژه توابع مورد قبول انرژی، چاه متناهی را به عنوان یک مثال در نظر بگیریم. اگر با مقادیر اختیاری $\psi(x_0)$ و $\psi'(x_0)$ در نقطه x_0 در سمت راست چاه شروع کنیم می‌توانیم از معادله شرودینگر به صورت عددی انتگرال بگیریم (به مانستگی با مسئله یافتن مسیر ذره با معلوم بودن مکان و سرعت اولیه آن و نیروی روی آن توجه کنید). با انتگرال گیری تا $x \rightarrow \infty$ ، ψ مطمئناً بزرگ خواهد شد چون ψ_{III} دارای جمله نمایی صعودی است. از آنجا که $\psi(x_0)$ صرفاً مقیاس کلی را تعیین می‌کند، $\psi'(x_0)$ را تا زمانی تغییر می‌دهیم که جمله نمایی صعودی بی‌اثر شود [چون می‌توانیم مسئله را در ناحیه III به صورت تحلیلی حل کنیم حتی

می‌توانیم بگوییم که مقدار مطلوب $\psi'(x_0)$ چیست: این مقدار برابر $\psi'(x_0) = -k\psi(x_0)$ است. با شروع از معادله (۴-۲-۵) ثابت کنید که این مطلب ایجاب می‌کند که $B = 0$ باشد. ببینیم که با انتگرال‌گیری به سمت چپ x_0 چه چیزی به دست می‌آید. خواهیم دید که ψ به‌طور نمایی صعود می‌کند تا به چاه برسد و درون چاه نوسان خواهد کرد. وقتی از چاه می‌گذریم ψ مجدداً شروع به صعود به صورت نمایی می‌کند چون ψ_1 هم در حالت کلی شامل یک جمله نمایی صعودی است. لذا هیچ جواب قابل قبولی در یک انرژی تصادفاً انتخاب شده وجود نخواهد داشت. اما برای بعضی مقادیر انرژی، ψ در هر دو ناحیه I و III به صورت نمایی میرا خواهد شد [در هر نقطه x'_0 در ناحیه I یک نسبت $\psi'(x'_0)/\psi(x'_0)$ وجود دارد که برای آن فقط جمله نمایی میرا باقی می‌ماند. ψ بی‌بی که در ناحیه III از آن انتگرال‌گیری می‌شود در حالت کلی این ویژگی را ندارد. اما در انرژی‌های خاصی، این وضعیت می‌تواند اتفاق بیفتد]. اینها انرژیهای مجاز هستند و توابع متناظر، ویژه توابع مجازند. با پیدا کردن آنها، می‌توانیم $\psi(x_0)$ را طوری انتخاب کنیم که به یک بهنجار شوند. برای تحلیل عددی خوب این مسئله، کتاب *Eisberg* و *Resnick* را ببینید.^۱

روشن است که چطور این مباحث به ذره مقید در پتانسیلی دلخواه تعمیم می‌یابند: اگر تلاش کنیم در صورت میل $x \rightarrow -\infty$ ، ψ نمایی میرا باشد، در صورت میل $x \rightarrow +\infty$ بزرگ خواهد شد (بالعکس)، مگر در بعضی انرژی‌های خاص. همین‌طور واضح است که چرا برای حالت‌های نامقید، هیچ کوانتاش انرژی وجود ندارد: چون ذره از نظر کلاسیکی در بی‌نهایت مجاز است، ψ در آنجا نوسان می‌کند و لذا دو پارامتر دیگر، یکی از هر انتها (چرا؟)، و بنابراین دو جواب (قابل بهنجاروش به $\delta(0)$) در هر انرژی، داریم.

اکنون به مسئله ذره در جعبه برگشته و این حقیقت را بررسی می‌کنیم که پایین‌ترین انرژی صفر نیست (آن‌طور که در حالت کلاسیکی، متناظر با ذره در حال سکون درون چاه، می‌شد) بلکه $\hbar^2 \pi^2 / 2mL^2$ است. دلیل پشتوانه این مطلب، اصل عدم قطعیت است، که مانع از این می‌شود که ذره‌ای که مکانش (و در نتیجه Δx) محدود به $|x| \leq L/2$ می‌شود تکانه خوش تعریف صفر داشته باشد. این به نوبه خود به کرانی پایین برای انرژی منجر می‌شود که به صورت زیر به دست می‌آید. با معادله زیر شروع می‌کنیم.^۲

$$H = \frac{p^2}{2m} \quad (18-2-5)$$

به طوری که

$$\langle H \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} \quad (19-2-5)$$

برای هر حالت مقید $\langle P \rangle = 0$ است. چون هر حالت مقید یک حالت مانا است، $\langle P \rangle$ مستقل از زمان است. اگر $\langle P \rangle \neq 0$ باشد ذره باید (به‌طور متوسط) به راست یا چپ سوق پیدا کند و نهایتاً به بی‌نهایت برود که نمی‌تواند در حالت مقید اتفاق بیفتد.

1- R. Eisberg – and R. Resnick, Quantum Physics of atoms, Molecules, Solids, Nuclei and particles, Wiley, New York (1974). See Section 5. 7 and Appendix F.

۲- پتانسیل نامتناهی مربوط به دیواره‌های چاه را در نظر نمی‌گیریم. در عوض x را به گستره $|x| \leq L/2$ محدود می‌کنیم.

در نتیجه می‌توانیم معادله (۵-۲-۱۹) را به صورت زیر بنویسیم:

$$\langle H \rangle = \frac{\langle (P - \langle P \rangle)^2 \rangle}{2m} = \frac{(\Delta P)^2}{2m}$$

اگر از اصل عدم قطعیت استفاده کنیم،

$$\Delta P \cdot \Delta X \geq \hbar/2$$

نتیجه می‌شود که

$$\langle H \rangle \geq \frac{\hbar^2}{8m(\Delta X)^2}$$

چون متغیر x به وسیله $-L/2 \leq x \leq L/2$ محدود می‌شود، انحراف معیار آن، ΔX ، نمی‌تواند بیشتر از $L/2$ باشد. در نتیجه

$$\langle H \rangle \geq \hbar^2/2mL^2$$

در یک ویژه حالت انرژی، $\langle H \rangle = E$ ، به طوری که

$$E \geq \hbar^2/2mL^2 \quad (۵-۲-۲۰)$$

انرژی حالت پایه واقعی E_1 ، π^2 برابر بزرگی کران پایین می‌شود. اصل عدم قطعیت اغلب به این شکل برای برآورد سریع مرتبه بزرگی انرژی حالت پایه به کار می‌رود.

اگر کت مجرد متناظر با $\psi_n(x)$ را با $|n\rangle$ نشان دهیم می‌توانیم انتشارگر را به صورت زیر بنویسیم

$$U(t) = \sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle \langle n| \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} \right) t \right] \quad (۵-۲-۲۱)$$

لذا عناصر ماتریسی $U(t)$ در پایه X عبارتند از:

$$\langle x|U(t)|x'\rangle = U(x, t; x')$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n(x) \psi_n^*(x') \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} \right) t \right] \quad (۵-۲-۲۲)$$

برخلاف حالت ذره آزاد، هیچ عبارت بسته ساده‌ای برای این جمع وجود ندارد.

تمرین ۵-۲-۱: ذره‌ای در حالت پایه جعبه‌ای به طول L قرار دارد. به طور ناگهانی جعبه (به طور متقارن) به دو برابر اندازه خود پهن می‌شود و تابع موج بدون تغییر می‌ماند. نشان دهید که احتمال یافتن ذره در حالت پایه جعبه جدید برابر $(8/3\pi)^2$ است.

تمرین ۵-۲-۲: الف - نشان دهید که برای هر $|\psi\rangle$ بهنجار شده، $\langle \psi|H|\psi\rangle \geq E_0$ است که E_0 پایین‌ترین ویژه مقدار انرژی است (راهنمایی: $|\psi\rangle$ را در ویژه پایه H بسط دهید).

ب- قضیه زیر را ثابت کنید: هر پتانسیل جاذب در یک بعد حداقل یک حالت مقید دارد. راهنمایی: چون V جاذب است، اگر $V(\infty) = 0$ تعریف شود نتیجه می‌شود که برای همه x ها، $V(x) = -|V(x)|$ است. برای نشان دادن اینکه برای $E < 0$ حالت مقیدی وجود دارد تابع زیر را در نظر گرفته

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

و مقدار زیر را محاسبه کنید

$$E(\alpha) = \langle \psi_\alpha | H | \psi_\alpha \rangle, \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - |V(x)|$$

نشان دهید که $E(\alpha)$ می‌تواند با انتخاب مناسب α منفی شود. نتیجه مورد نظر می‌تواند از کاربرد قضیه اثبات شده در فوق به دست آید.

تمرین ۵-۲-۳: پتانسیل $V(x) = -aV_0 \delta(x)$ را در نظر بگیرید. نشان دهید که یک حالت مقید با انرژی $E = -ma^2V_0^2/2\hbar^2$ وجود دارد. آیا حالت مقید دیگری وجود دارد؟ راهنمایی: معادله شرودینگر را برای $E < 0$ در خارج از پتانسیل حل کرده و فقط جوابی را نگه دارید که رفتار درستی در بی‌نهایت داشته و در $x = 0$ پیوسته است. تابع موج را رسم کرده و ببینید که چطور در $x = 0$ یک تیزه یا یک تغییر ناپیوسته در شیب وجود دارد. تغییر شیب را محاسبه کرده و با مقدار زیر که از معادله شرودینگر مشخص می‌شود برابر قرار دهید (\mathcal{E} بی‌نهایت کوچک است)

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \left(\frac{d^2\psi}{dx^2}\right) dx$$

تمرین ۵-۲-۴: ذره‌ای به جرم m را در حالت $|n\rangle$ جعبه‌ای به طول L در نظر بگیرید. نیروی $F = -\partial E / \partial L$ ایجاد شده هنگام پیشروی دیوارها به داخل را، با فرض اینکه ذره در حالت n ام جعبه هنگام تغییر اندازه‌اش باقی ماند، به دست آورید. یک ذره کلاسیکی با انرژی E_n درون این جعبه در نظر بگیرید. سرعت آن، فرکانس برخورد آن به یک دیواره معین و تکانه انتقال یافته در هر برخورد، و در نتیجه نیروی متوسط را به دست آورید و آنرا با $-\partial E / \partial L$ محاسبه شده در فوق مقایسه کنید.

تمرین ۵-۲-۵: اگر جعبه از $x = 0$ تا $x = L$ ، به جای $x = -L/2$ تا $x = +L/2$ ، گسترده شده باشد نشان دهید که $\psi_n(x) = (2/L)^{1/2} \sin(n\pi x/L)$ ، و $E_n = n^2 \pi^2 \hbar^2 / 2mL^2$.

تمرین ۵-۲-۶: چاه پتانسیل مربعی. ذره‌ای را در پتانسیل چاه مربعی در نظر بگیرید:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| \leq a \\ V_0, & |x| \geq a \end{cases}$$

چون وقتی $V_0 \rightarrow \infty$ میل می‌کند، یک جعبه داریم، می‌شود حدس زد که پایین آوردن دیواره‌ها موجب چه وضعیتی برای حالت‌ها می‌شود. قبل از همه، همه حالت‌های مقید (که فقط آنها مورد نظرمان هستند) دارای $E \leq V_0$ خواهند بود. ثانیاً، توابع موج ترازهای واقع در پایین شیبه ترازهای ذره در جعبه خواهند بود، با این

تفاوت آشکار که ψ در دیواره‌ها صفر نخواهد شد بلکه دارای دنباله‌ای نمایی خواهد بود. ویژه توابع هنوز هم به صورت، زوج، فرد، زوج و غیره خواهند بود.

الف - نشان دهید که جواب‌های زوج دارای انرژی‌هایی هستند که معادله غیر جبری زیر را برآورده می‌کنند:

$$k \tan ka = \kappa \quad (23-2-5)$$

در حالی که جواب‌های فرد دارای انرژی‌هایی خواهند بود که معادله زیر را برآورده می‌کنند

$$k \cot ka = -\kappa \quad (24-2-5)$$

که k و $i\kappa$ اعداد موج حقیقی و مختلط به ترتیب در داخل و خارج چاه هستند. توجه کنید که k و κ به صورت زیر به هم مربوط می‌شوند

$$k^2 + \kappa^2 = 2mV_0/\hbar^2 \quad (25-2-5)$$

ثابت کنید که با میل V_0 به ∞ ، مجدداً ترازهای چاه را به دست می‌آوریم.

ب- معادلات (۲۳-۲-۵) و (۲۴-۲-۵) باید به صورت ترسیمی حل شوند. در صفحه $(\alpha = ka, \beta = \kappa a)$ دایره‌ای تصور کنید که تابع معادله (۲۵-۲-۵) است. در این صورت، حالت‌های مقید از تلاقی منحنی $\alpha \tan \alpha = \beta$ یا $\alpha \cot \alpha = -\beta$ با دایره به دست می‌آیند (به یاد داشته باشید که α و β مثبت‌اند).

ج- نشان دهید که همیشه یک جواب زوج وجود دارد و هیچ جواب فردی وجود ندارد مگر اینکه $V_0 \geq \hbar^2 \pi^2 / 8ma^2$ وقتی V_0 باشد. وقتی V_0 این شرط را برآورده می‌کند، E چقدر می‌شود؟ توجه کنید که نتیجه کلی حاصل از تمرین ۲-۲-۵-ب معتبر است.

۵-۳- معادله پیوستگی احتمال

بحث خود را درباره مسائل یک بعدی متوقف می‌کنیم تا با دو مفهومی که در بحث‌های بعدی به کار خواهند رفت، یعنی چگالی جریان احتمال و معادله پیوستگی که توسط آن برآورده می‌شود، آشنا شویم. از آنجا که مفهوم جریان احتمال در مسائل سه بعدی هم به کار خواهد رفت، در اینجا ذره را در سه بعد بحث می‌کنیم.

برای مقدمه مطالعه معادله پیوستگی در مکانیک کوانتومی، معادله مانسته آن را از الکترومغناطیس یادآوری می‌کنیم. در این مورد می‌دانیم که بار کل در جهان ثابت است، یعنی

$$Q(t) = \text{ثابت و مستقل از زمان} \quad (1-3-5)$$

این مثالی از قانون پایستگی کلی (جهان شمول) است، چون به بار کل در جهان مربوط می‌شود، اما بار به صورت موضعی هم پایسته می‌ماند، حقیقتی که معمولاً به شکل معادله پیوستگی بیان می‌شود

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{j} \quad (۲-۳-۵)$$

که ρ و \mathbf{j} به ترتیب چگالی‌های بار و جریان هستند. با انتگرال‌گیری از این معادله روی یک حجم محصور به وسیله سطح S_V و با بهره از قانون گوس خواهیم داشت:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} = - \int_V \nabla \cdot \mathbf{j} d^3\mathbf{r} = - \int_{S_V} \mathbf{j} \cdot d\mathbf{S} \quad (۳-۳-۵)$$

این معادله بیان می‌کند که هر کاهشی در بار واقع در حجم V به وسیله شارش بار به خارج از آن توضیح داده می‌شود، که بدین معنی است که بار در هیچ حجمی خلق یا نابود نمی‌شود.

معادله پیوستگی بعضی فرایندهایی را که از پایداری کلی پیروی می‌کنند، نظیر محو شدن ناگهانی بار از یک ناحیه فضا و ظهور بلافاصله آن در جایی دیگر، ممنوع می‌کند.

در مکانیک کوانتومی، کمیتی که به صورت کلی پایسته می‌ماند، احتمال کل یافتن ذره در هر جا از جهان است. با نوشتن ناوردایی نرم در پایه مکان می‌توانیم به این نتیجه برسیم: از آنجا که

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | U^\dagger(t) U(t) | \psi(0) \rangle = \langle \psi(0) | \psi(0) \rangle$$

آنگاه،^۱

$$\begin{aligned} \text{const} &= \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \iiint \langle \psi(t) | x, y, z \rangle \langle x, y, z | \psi(t) \rangle dx dy dz \\ &= \iiint \langle \psi(t) | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \psi(t) \rangle d^3\mathbf{r} \\ &= \iiint \psi^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} \\ &= \iiint P(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} \end{aligned} \quad (۴-۳-۵)$$

این قانون بقای کلی مانسته معادله (۱-۳-۵) است. برای رسیدن به مانسته معادله (۲-۳-۵) به معادله شرودینگر بر می‌گردیم

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi \quad (۵-۳-۵)$$

و مزدوج آن

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + V\psi^* \quad (۶-۳-۵)$$

توجه کنید که V در صورت هرمیتی بودن H باید حقیقی باشد. با ضرب معادله اول در ψ^* و دومی در ψ و محاسبه تفاضل داریم:

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

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2mi} \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (۷-۳-۵)$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{j}$$

که

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (۸-۳-۵)$$

چگالی جریان احتمال است که احتمال شارش بر واحد زمان بر واحد سطح عمود بر \mathbf{j} گفته می شود. برای به دست آوردن مجدد قانون پایستگی کلی، از معادله (۷-۳-۵) در سراسر فضا انتگرال می گیریم:

$$\frac{d}{dt} \int P(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} = - \int_{S_\infty} \mathbf{j} \cdot d\mathbf{S} \quad (۹-۳-۵)$$

که S_∞ کره ای در بی نهایت است. برای توابع موج (نوعی) که قابل بهنجارش به یک هستند، در صورت میل $r \rightarrow \infty$ $r^{\frac{3}{2}} \psi \rightarrow 0$ میل کرده به طوری که $\int \psi^* \psi r^2 dr d\Omega$ کراندار شده و انتگرال سطحی زروی S_∞ صفر می شود. مورد ویژه توابع تکانه که روی S_∞ صفر نمی شوند در یکی از تمرین های زیر بررسی می شود.

تمرین ۱-۳-۵: حالتی را در نظر بگیرید که $V = V_r - iV_i$ است، که قسمت موهومی V_i یک ثابت است. آیا هامیلتونی هرمیتی است؟ با استفاده از معادله پیوستگی نشان دهید که احتمال کل یافتن ذره به شکل نمایی $e^{-2V_i t / \hbar}$ کاهش می یابد. چنین پتانسیل های موهومی برای توصیف فرایندهایی به کار می روند که در آنها ذرات به وسیله یک چاهک^۱ جذب می شوند.

تمرین ۲-۳-۵: خودتان را متقاعد کنید که اگر $\psi = c\bar{\psi}$ باشد، که c ثابت (حقیقی یا مختلط) و $\bar{\psi}$ حقیقی است، $\bar{\mathbf{j}}$ متناظر صفر می شود.

تمرین ۳-۳-۵: فرض کنید

$$\psi_{\mathbf{p}} = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{3/2} e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})/\hbar}$$

\mathbf{j} و ρ را به دست آورده و رابطه بین آنها را با معادله الکترومغناطیسی $\mathbf{j} = \rho \mathbf{v}$ ، که v سرعت است، مقایسه کنید. چون ρ و \mathbf{j} ثابت اند توجه کنید که معادله پیوستگی (۵-۳-۷) به طور بدیهی بر آورده می شود.

تمرین ۳-۴-۵: $\psi = Ae^{ipx/\hbar} + Be^{-ipx/\hbar}$ را در یک بعد در نظر بگیرید. نشان دهید که $j = (|A|^2 - |B|^2)p/m$. عدم وجود جملات ضربدری بین قسمت های راست رونده و چپ رونده در ψ اجازه می دهد تا دو قسمت j را با دو قسمت متناظر ψ مرتبط کنیم.

تعبیر هنگردی j

یادآوری می کنیم که $\mathbf{j} \cdot d\mathbf{s}$ آهنگ شارش احتمال از سطح $d\mathbf{s}$ است. اگر مجموعه ای از N ذره را در یک حالت $\psi(\mathbf{r}, t)$ نظر بگیریم، آنگاه با فرض اینکه N به بی نهایت میل کند و \mathbf{j} جریان مربوط به $\psi(\mathbf{r}, t)$ باشد در هر ثانیه $\mathbf{j} \cdot d\mathbf{s}$ ذره به آشکار ساز ذره به مساحت $d\mathbf{s}$ سرازیر خواهند شد.

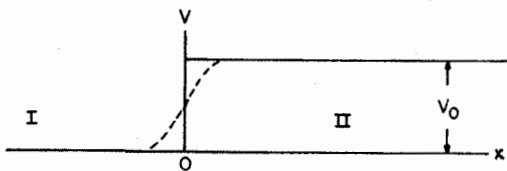
۵-۴- پتانسیل پله: مسئله ای در پراکندگی^۱

پتانسیل پله ای زیر را در نظر بگیرید (شکل ۵-۲):

$$V(x) = 0 \quad x < 0 \quad (\text{region I})$$

$$= V_0 \quad x > 0 \quad (\text{region II}) \quad (5-4-1)$$

چنین تغییر ناگهانی در پتانسیل کاملاً غیر واقعی است اما از نظر ریاضی مفید است. گذار واقعی تر به وسیله خط چین در شکل نشان داده شده است.



شکل ۵-۲: پتانسیل پله. خط چین پتانسیل واقعی تو را نشان می دهد که به وسیله پله ایده آل سازی شده است و از نظر ریاضی مفید است. انرژی کل E و انرژی پتانسیل V در امتداد محور y اندازه گیری می شوند.

اکنون تصور کنید که یک ذره کلاسیکی با انرژی E از طرف چپ (ناحیه I) به طرف پله پرتاب شود. انتظار می رود که اگر $E > V_0$ باشد ذره از سد پرش کرده و به ناحیه II برود، در حالی که اگر $E < V_0$ باشد بازتاب کند. اکنون این وضعیت کلاسیکی را با شکل کوانتومی آن مقایسه می کنیم.

قبل از همه باید حالت اولیه ای در نظر بگیریم که با اصول مکانیک کوانتومی سازگار باشد. ذره فرودی دارای مسیری خوش تعریف را با یک بسته موج^۲ جایگزین می کنیم. با اینکه (جزئیات) تابع موج مفصل در

۱- این بخش کمی مشکل تر بوده و خواننده می تواند تا رسیدن به فصل ۷ و کسب تجربه بیشتر آنرا به تعویق بیندازد، تصمیم با خواننده یا استاد است که کدام راه را انتخاب کند.

۲- یک بسته موج، هر تابع موجی است که دارای مکان و تکانه خوش تعریف معقولی باشد.

حدی که ما در نظر خواهیم گرفت اهمیت چندانی ندارد با یک گوسین شروع می کنیم که برای بحث تحلیلی آسان است:

$$\psi_I(x, 0) = \psi_I(x) = (\pi\Delta^2)^{-1/4} e^{ik_0(x+a)} e^{-(x+a)^2/2\Delta^2} \quad (2-4-5)$$

این بسته موج دارای تکانه متوسط $P_0 = \hbar k_0$ و مکان متوسط $\langle X \rangle = -a$ (که فرض می کنیم از پله دور باشد) با عدم قطعیت های زیر است

$$\Delta X = \frac{\Delta}{2^{1/2}}, \quad \Delta P = \frac{\hbar}{2^{1/2}\Delta}$$

ما به حالت Δ بزرگ علاقه مندیم که در آن ذره اساساً دارای تکانه خوش تعریف $\hbar k_0$ و انرژی $E_0 \cong \hbar^2 k_0^2 / 2m$ است. ابتدا $E > V_0$ را در نظر می گیریم.

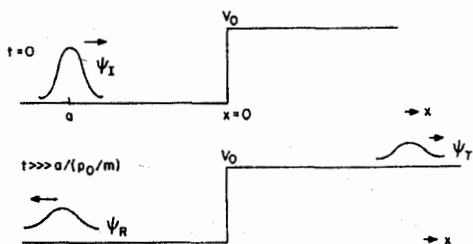
بعد از زمان $t \cong a[p_0/m]^{-1}$ ، بسته موج به پله برخورد کرده و به دو بسته موج، ψ_R بسته موج بازتابی و ψ_T بسته موج عبوری، تقسیم می شود (شکل ۳-۵). مساحت زیر $|\psi_R|^2$ در t بزرگ، احتمال یافتن ذره در ناحیه I در آینده دور است که احتمال بازتاب گفته می شود. همین طور مساحت زیر $|\psi_T|^2$ در t بزرگ احتمال عبور است. مسئله، محاسبه ضریب بازتاب

$$R = \int |\psi_R|^2 dx, \quad t \rightarrow \infty \quad (3-4-5)$$

و ضریب عبور

$$T = \int |\psi_T|^2 dx, \quad t \rightarrow \infty \quad (4-4-5)$$

است.



شکل ۳-۵: توصیف طرح وار تابع موج، بسیار قبل و بسیار بعد از برخورد به پله، مساحت زیر $|\psi_I|^2$ یک است. مساحت های زیر $|\psi_R|^2$ و $|\psi_T|^2$ به ترتیب احتمال های بازتاب و عبور هستند.

در حالت کلی R و T به جزئیات شکل تابع موج اولیه بستگی خواهند داشت. اما اگر به حدی برویم که در آن تکانه اولیه خوش تعریف است (یعنی وقتی گوسین در فضای x پهنای نامتناهی دارد)، انتظار می رود که جواب فقط به انرژی اولیه بستگی داشته باشد که تنها مشخصه حالت می شود. در تحلیل زیر فرض خواهیم کرد که $\Delta X = \Delta/2^{1/2}$ بزرگ است و تابع موج در فضای k در نزدیکی k_0 کاملاً تیز است.

برای یافتن سرنوشت بسته موج فرودی ψ_I روش استاندارد زیر را پی می گیریم:

گام ۱: هامیلتونی پتانسیل پله را برای ویژه تابع بهنجار شده $\psi_E(x)$ حل می کنیم.

گام ۲: تصویر $a(E) = \langle \psi_R | \psi_I \rangle$ را به دست می آوریم.

گام ۳: به هر ضریب $a(E)$ یک $e^{-iEt/\hbar}$ وابسته به زمان پیوست کرده و $\psi(x, t)$ را در هر زمان آینده به دست می آوریم.

گام ۴: ψ_T و ψ_R را در $\psi(x, t \rightarrow \infty)$ تعیین کرده و R و T را با استفاده از معادلات (۳-۴-۵) و (۴-۵-۴) مشخص می کنیم.

گام ۱: در ناحیه I ، چون $V = 0$ است، جواب (بهنجار نشده) آشناست:

$$\psi_E(x) = A e^{ik_1x} + B e^{-ik_1x}, \quad k_1 = \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{1/2} \quad (5-4-5)$$

در ناحیه II فقط E را با $E - V_0$ جایگزین می کنیم (معادله (۲-۲-۵) را ببینید)،

$$\psi_E(x) = C e^{ik_2x} + D e^{-ik_2x}, \quad k_2 = \left[\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \right]^{1/2} \quad (6-4-5)$$

(ما فقط $E > V_0$ را در نظر می گیریم؛ ویژه تابع با $E < V_0$ همان طور که در ادامه نشان خواهیم داد عمود بر ψ_I خواهد بود) ویژه توابع با $D = 0$ برای ما حائز اهمیت اند، چون فقط موج عبوری در ناحیه II (راست رونده)، و امواج فرودی بعلاوه بازتاب شده در ناحیه I را می خواهیم. حال اگر پیوستگی ψ و مشتق آنرا در $x = 0$ اعمال کنیم خواهیم داشت:

$$A + B = C \quad (7-4-5)$$

$$ik_1(A - B) = ik_2C \quad (8-4-5)$$

قبل از استفاده بعدی، این معادلات را حل می کنیم تا B و C را بر حسب A بنویسیم:

$$B = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right) A = \left(\frac{E^{1/2} - (E - V_0)^{1/2}}{E^{1/2} + (E - V_0)^{1/2}} \right) A \quad (9-4-5)$$

$$C = \left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right) A = \left(\frac{2E^{1/2}}{E^{1/2} + (E - V_0)^{1/2}} \right) A \quad (10-4-5)$$

توجه کنید که اگر $V_0 = 0$ باشد، همان طور که انتظار می رود $B = 0$ و $C = A$. در این صورت جواب با انرژی E عبارتست از

$$\psi_E(x) = A \left[\left(e^{ik_1x} + \frac{B}{A} e^{-ik_1x} \right) \theta(-x) + \frac{C}{A} e^{ik_2x} \theta(x) \right] \quad (11-4-5)$$

$$\theta(x) = 1 \quad \text{if } x > 0$$

$$= 0 \quad \text{if } x < 0$$

از آنجا که برای هر E یک $k_1 = +(2mE/\hbar^2)^{1/2}$ منحصر به فرد وجود دارد می‌توانیم ویژه حالت‌ها را با k_1 ، به جای E_1 ، بر حسب بزنیم. با حذف k_2 به نفع k_1 ،

$$\psi_{k_1}(x) = A \left[\left(\exp(ik_1x) + \frac{B}{A} \exp(-ik_1x) \right) \theta(-x) \right. \\ \left. + \frac{C}{A} \exp[i(k_1^2 - 2mV_0/\hbar^2)x] \theta(x) \right] \quad (12-4-5)$$

اگر چه ضریب مقیاس کلی A در حالت کلی دلخواه است (و فیزیک مسئله فقط به B/A و C/A بستگی دارد) در اینجا باید $A = (2\pi)^{-1/2}$ انتخاب شود چون ψ_k باید در روش چهار مرحله‌ای مذکور در بالا به درستی بهنجار شود. بزودی ثابت می‌کنیم که $A = (2\pi)^{-1/2}$ ضریب بهنجارش درست است. گام ۲: عبارت

$$a(k_1) = \langle \psi_{k_1} | \psi_I \rangle \\ = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \left[e^{-ik_1x} + \left(\frac{B}{A} \right)^* e^{ik_1x} \right] \theta(-x) \psi_I(x) dx \right. \\ \left. + \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{C}{A} \right)^* e^{-ik_2x} \theta(x) \psi_I(x) dx \right\} \quad (13-4-5)$$

را در نظر بگیرید. انتگرال دوم صفر می‌شود (با تقریب بسیار خوب) چون $\psi_I(x)$ از $x=0$ به سمت چپ غیر صفر است، در حالی که $\theta(x)$ فقط برای $x > 0$ غیر صفر است. به‌طور مشابه، قسمت دوم انتگرال اول هم صفر می‌شود چون ψ_I در فضای k حول $k = +k_0$ تیز بوده و بر حالت‌های با تکانه منفی (چپ رونده) عمود است [می‌توانیم از ضریب $\theta(-x)$ در معادله (۱۳-۴-۵) چشم‌پوشی کنیم زیرا در جایی که $\psi_I(x) \neq 0$ است برابر ۱ می‌شود]. بنابراین

$$a(k_1) = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik_1x} \psi_I(x) dx \\ = \left(\frac{\Delta^2}{\pi} \right)^{1/4} e^{-(k_1 - k_0)^2 \Delta^2 / 2} e^{ik_1 a} \quad (14-4-5)$$

همان تبدیل فوری ψ_I است. توجه کنید که برای Δ بزرگ، $a(k_1) = k_0$ از $k_1 = k_0$ بسیار تیز می‌شود. این موضوع چشم‌پوشی از ویژه توابع دارای $E \langle V_0 \rangle$ را تصدیق می‌کند چون این ویژه توابع متناظر با k_1 دورتر از k_0 هستند.

گام ۳: تابع موج در هر زمان بعدی t عبارتست از

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} a(k_1) e^{-iE(k_1)t/\hbar} \psi_{k_1}(x) dk_1 \quad (15-4-5)$$

$$= \left(\frac{\Delta^2}{4\pi^3}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{-i\hbar k_1^2 t}{2m}\right) \cdot \exp\left[\frac{-(k_1 - k_0)^2 \Delta^2}{2}\right] \exp(ik_1 a) \\ \times \left\{ e^{ik_1 x} \theta(-x) + \left(\frac{B}{A}\right) e^{-ik_1 x} \theta(-x) \right. \\ \left. + \left(\frac{C}{A}\right) \exp[i(k_1^2 - 2mV_0/\hbar^2)^{1/2} x] \theta(x) \right\} dk_1 \quad (16-4-5)$$

می‌توانید خودتان را متقاعد کنید که اگر در بالا $t = 0$ قرار دهیم مجدداً $\psi_I(x)$ را به دست می‌آوریم که انتخاب $A = (2\pi)^{-1/2}$ را تأیید می‌کند. گام ۴: جمله اول از سه جمله را در نظر بگیرید. اگر $\theta(-x)$ وجود نمی‌داشت، گوسین اولیه منتشر می‌شد. بعد از جاگذاری $x + a$ به جای x در معادله (۵-۱-۱۵) و وارد کردن ضریب $\theta(-x)$ جمله اول $\psi(x, t)$ به صورت زیر می‌شود.

$$\theta(-x) \pi^{-1/4} \left(\Delta + \frac{i\hbar t}{m}\right)^{-1/2} \exp\left[\frac{-(x+a - \hbar k_0 t/m)^2}{2\Delta^2(1 + i\hbar t/m\Delta^2)}\right] \\ \times \exp\left[ik_0\left(x+a - \frac{\hbar k_0 t}{2m}\right)\right] \equiv \theta(-x)G(-a, k_0, t) \quad (17-4-5)$$

چون گوسین $G(-a, k_0, t)$ در $t \rightarrow \infty$ ، در $x = -a + \hbar k_0 t/m \cong \hbar k_0 t/m$ متمرکز می‌شود و برای $x > 0$ ، $\theta(-x)$ صفر می‌شود، حاصل ضرب θG صفر می‌شود. بنابراین بسته موج اولیه، محو شده و به جای آن بسته موج‌های بازتاب شده و عبوری متناظر با دو جمله بعدی قرار می‌گیرند. در جمله میانی، اگر B/A را، که تابعی از k_1 است، با مقدار $(B/A)_0$ آن در $k_1 = k_0$ جایگزین کنیم (چون $a(k_1)$ در $k_1 = k_0$ بسیار تیز است) و از انتگرال بیرون بکشیم و متغیر ساختگی را از k_1 به $-k_1$ تغییر دهیم به راحتی مشاهده می‌شود که جدای از ضریب $(B/A)_0 \theta(-x)$ ، جمله میانی، انتشار آزاد یک بسته موج گوسی بهنجار شده را نشان می‌دهد که در ابتدا در $x = +a$ تیز بوده و شروع به سوق به سمت چپ با تکانه متوسط $-\hbar k_0$ نموده است. بنابراین

$$\psi_R = \theta(-x)G(a, -k_0, t)(B/A)_0 \quad (18-4-5)$$

وقتی $t \rightarrow \infty$ میل می‌کنند می‌توانیم $\theta(-x)$ را برابر ۱ قرار دهیم، چون G در $x = a - \hbar k_0 t/m \cong -\hbar k_0 t/m$ متمرکز می‌شود. از آنجا که گوسین G نرم یک دارد، از معادلات (۳-۴-۵) و (۹-۴-۵) نتیجه می‌گیریم که

$$R = \int |\psi_R|^2 dx = \left|\frac{B}{A}\right|_0^2 = \frac{|E_0^{1/2} - (E_0 - V_0)^{1/2}|^2}{|E_0^{1/2} + (E_0 - V_0)^{1/2}|^2} \quad \text{که در آن}$$

$$E_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} \quad (19-4-5)$$

این فرمول فقط وقتی دقیق است که بسته موج فرودی انرژی E_0 خوش تعریفی داشته باشد یعنی وقتی که پهنای گوسین فرودی به بی نهایت میل می کند. اما برای هر بسته موجی که در فضای تکانه به شکلی باریک تیز است تقریب بسیار خوبی است.

برای به دست آوردن T ، تلاش می کنیم تا قسمت سوم را محاسبه کنیم. اما نیازی به انجام این کار نیست چون می دانیم که

$$R + T = 1 \quad (۲۰-۴-۵)$$

که از پایستگی کلی احتمال نتیجه می شود. پس نتیجه اینکه

$$T = 1 - R = \frac{4E_0^{1/2}(E_0 - V_0)^{1/2}}{[E_0^{1/2} + (E_0 - V_0)^{1/2}]^2} = \left| \frac{C}{A} \right|_0^2 \frac{(E_0 - V_0)^{1/2}}{E_0^{1/2}} \quad (۲۱-۴-۵)$$

با بررسی معادلات (۱۹-۴-۵) و (۲۱-۴-۵) می بینیم که هم R و هم T بر حسب نسبت های $(B/A)_0$ و $(C/A)_0$ و یک ضرب سینماتیکی $(E_0 - V_0)^{1/2} / E_0^{1/2}$ بیان شده اند. آیا روشی وجود دارد که به وسیله آن بتوانیم مستقیماً از معادلات (۹-۴-۵) و (۱۰-۴-۵)، که جواب ایستای معادله شرودینگر را توصیف می کنند، به معادلات (۱۹-۴-۵) و (۲۱-۴-۵)، که پدیده دینامیک پراکندگی را توصیف می کنند برسیم؟ بله. ویژه حالت بهنجار نشده زیر را در نظر بگیرید

$$\psi_{k_0}(x) = [A_0 \exp(ik_0 x) + B_0 \exp(-ik_0 x)] \theta(-x) + C_0 \exp \left[i \left(k_0^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2} \right)^{1/2} x \right] \theta(x) \quad (۲۲-۴-۵)$$

موج تخت درون رو $A e^{ik_0 x}$ جریان احتمال مربوط به خود را دارد که برابر است با

$$j_I = |A_0|^2 \frac{\hbar k_0}{m} \quad (۲۳-۴-۵)$$

در حالی که جریان های مربوط به قسمت های بازتاب شده و عبوری عبارتند از

$$j_R = |B_0|^2 \frac{\hbar k_0}{m} \quad (۲۴-۴-۵)$$

و

$$j_T = |C_0|^2 \frac{\hbar(k_0^2 - 2mV_0/\hbar^2)^{1/2}}{m} \quad (۲۵-۴-۵)$$

(تمرین (۴-۳-۵) را به یاد بیاورید که تصور دو قسمت از z را در ناحیه I به عنوان قسمت های مربوط به توابع موج فرودی و بازتاب شده تأیید می کند) بر حسب این جریان ها،

$$R = \frac{j_R}{j_I} = \left| \frac{B_0}{A_0} \right|^2 \quad (۲۶-۴-۵)$$

$$T = \frac{j_T}{j_i} = \frac{|C_0|^2}{|A_0|^2} \frac{(k_0^2 - 2mV_0/\hbar^2)^{1/2}}{k_0} = \frac{|C_0|^2}{|A_0|^2} \frac{(E_0 - V_0)^{1/2}}{E_0^{1/2}} \quad (۲۷-۴-۵)$$

اکنون بررسی می‌کنیم که چرا در این روش این T و R هستند که قابل محاسبه‌اند. به خاطر بیاورید که T و R فقط برای آن بسته موج فرودی دقیق بودند که تکانه‌اش خوش تعریف و برابر با $\hbar k_0$ بود. از معادله (۲۴-۵) ملاحظه می‌شود که این موضوع مستلزم بی‌نهایت گرفتن پهنای گوسین است. همین طور که گوسین فرودی

پهن تر و پهن تر می‌شود (فعالاً از ضریب $\Delta^{-1/2}$ و بهنجارش صرف نظر می‌کنیم) مسائل زیر پیش می‌آید:

(۱) - گفتن اینکه چه زمانی بسته موج به پله برخورد می‌کند غیرممکن می‌شود چون بسته موج پهن شده است تا یک موج تخت راست رونده در ناحیه I باشد.

(۲) - بسته موج بازتاب شده هم بی‌نهایت پهن می‌شود و همراه با بسته موج فرودی به صورت موج تخت چپ رونده خواهد بود.

(۳) - بسته موج عبوری، موج تختی با عدد موج $(k_0^2 - 2mV_0/\hbar^2)^{1/2}$ در ناحیه II خواهد بود.

به بیانی دیگر، تصویر دینامیک یک بسته موج فرودی برخورد کننده به پله و تجزیه شدن به دو بسته موج، فرایند حالت پایای توصیف شده توسط ویژه تابع معادله (۲۴-۵) می‌شود. اما نمی‌توانیم T و R را با محاسبه مساحت زیر $|\psi_R|^2$ و $|\psi_T|^2$ محاسبه کنیم چون تمام مساحت‌ها نامتناهی هستند و بسته موج‌ها تبدیل به امواج تخت شده‌اند. در عوض می‌بینیم که نسبت‌های جریان‌های احتمال مربوط به امواج فرودی، بازتاب شده و عبوری، T و R را به دست می‌دهند. هم ارزی بین توصیف‌های بسته موجی و استاتیک، که توانستیم در این مورد ساده نشان دهیم، برای هر پتانسیلی معتبر است. وقتی به پراکندگی در سه بعد پردازیم فرض خواهیم کرد که هم ارزی دو رویکرد معتبر است.

تمرین ۴-۵-۱: (نستیاً سخت). جمله سوم را در معادله (۱۶-۴-۵) محاسبه کرده و T حاصل را با معادله (۵-۴-۲۱) مقایسه کنید [راهنمایی: ضریب $(k_1^2 - 2mV_0/\hbar^2)^{1/2}$ را نزدیک $k_1 = k_0$ بسط داده و فقط مشتق اول را در سری تیلور نگه دارید].

قبل از اینکه به سراغ بررسی بعضی ویژگی‌های جدید ضرایب بازتاب و عبور برویم، سوال این است که آنها در عمل چگونه به کار برده می‌شوند. یک مسئله عمومی را با پتانسیل $V(x)$ ، که هنگام میل $x \rightarrow \pm\infty$ به ثابت‌های V_+ و V_- میل می‌کند، در نظر بگیرید. برای سادگی $V_{\pm} = 0$ در نظر می‌گیریم. شتابنده‌های V_+ واقع در منتهی الیه چپ ($x \rightarrow -\infty$) تصور کنید که باریکه‌ای از ذرات تقریباً تک انرژی را با $\langle P \rangle = \hbar k_0$ به سمت پتانسیل شلیک می‌کند. سوالی که در عمل مطرح می‌شود این است که چه کسری از ذرات به $x = -\infty$ بازتاب شده و چه کسری به $x = +\infty$ تراگسیل خواهند شد. در حالت کلی نمی‌توان به این سوال پاسخ داد چون ما فقط تکانه‌های متوسط ذرات را دانسته و توابع موج هر یک از آنها را نمی‌دانیم. اما تحلیل قبلی نشان می‌دهد که تا وقتی که بسته موج‌ها در فضای تکانه به صورتی تیز جایگزیده هستند، احتمالات بازتاب و عبور (R, T) فقط به تکانه متوسط بستگی داشته و به جزئیات شکل توابع موج بستگی ندارد. لذا پاسخ سوال مطرح شده در فوق این است که کسر $R(k_0)$ بازتاب شده و کسر $T(k_0) = 1 - R(k_0)$

عبور خواهد کرد. برای به دست آوردن R و T ، ویژه توابع مستقل از زمان $H = T + V$ را با ویژه مقدار انرژی $E_0 = \hbar^2 k_0^2 / 2m$ به دست آورده و رفتار مجانبی

$$\psi_{k_0}(x) \begin{cases} \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} A e^{ik_0 x} + B e^{-ik_0 x} \\ \xrightarrow{x \rightarrow \infty} C e^{ik_0 x} \end{cases}$$

را بررسی کرده و از روی آن $R = |B/A|^2$ و $T = |C/A|^2$ را به دست می آوریم. جواب هایی با این رفتار مجانبی (یعنی رفتار ذره آزاد) همیشه موجود خواهند بود به شرطی که وقتی $|x| \rightarrow \infty$ میل می کند، V با تندی کافی صفر شود [بعداً خواهیم دید که این بدین معنی است که وقتی $|x| \rightarrow \infty$ میل می کند، $|xV(x)| \rightarrow 0$]. جواب عمومی شامل قسمتی به صورت $D \exp(-ik_0 x)$ در صورت میل $x \rightarrow \infty$ خواهد بود اما در اینجا $D = 0$ قرار می دهیم زیرا اگر قرار باشد $A \exp(ik_0 x)$ موج فرودی باشد، باید در حالت $x \rightarrow \infty$ فقط موج عبوری راست رونده $C \exp(ik_0 x)$ را تولید کند.

به معادلات (۵-۴-۴۹) و (۵-۴-۲۰) برمی گردیم. این دو معادله حاوی ویژگی های غیر کلاسیکی زیادی هستند. قبل از هر چیز می بینیم که یک ذره فرودی با $E_0 > V_0$ گاهاً دچار بازتاب می شود. همین طور می توان نشان داد که برخلاف انتظارات کلاسیکی ذره ای با $E_0 > V_0$ ، فرودی از راست، هم گاهاً بازتاب پیدا می کند.

سپس حالت $E_0 < V_0$ را در نظر بگیرید. از نظر کلاسیکی انتظار می رود که ذره در $x = 0$ بازتابیده شود و هرگز به ناحیه II نرسد. اما از نظر مکانیک کوانتومی اینگونه نیست. در ناحیه II، جواب معادله

$$\frac{d^2 \psi_{II}}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E_0 - V_0) \psi_{II} = 0$$

با $E_0 < V_0$ عبارتست از

$$\psi_{II}(x) = C e^{-\kappa x}, \quad \kappa = \left(\frac{2m|(E_0 - V_0)|}{\hbar^2} \right)^{1/2} \quad (۲۸-۴-۵)$$

(جمله نمایی صعودی e^{xx} به فضای هیلبرت فیزیکی متعلق نیست) لذا یک احتمال متناهی برای یافتن ذره در ناحیه ای که انرژی جنبشی آن $E_0 - V_0$ منفی است وجود دارد. اما هیچ شارش پایایی برای جریان احتمال به ناحیه II وجود ندارد، چون $\psi_{II}(x) = C \tilde{\psi}$ ، که $\tilde{\psi}$ حقیقی است. این موضوع با این حقیقت هم که ضریب بازتاب در این حالت به صورت زیر است تایید می شود:

$$R = \frac{|(E_0)^{1/2} - (E_0 - V_0)^{1/2}|^2}{|(E_0)^{1/2} + (E_0 - V_0)^{1/2}|^2} = \frac{|k_0 - i\kappa|^2}{|k_0 - i\kappa|^2} = 1 \quad (۲۹-۴-۵)$$

اینکه ذره می تواند به ناحیه ای که از نظر کلاسیکی ممنوع است نفوذ نماید به یک پدیده کوانتومی جالب موسوم به تونل زنی منجر می شود. تصحیحی از شکل ۵-۲ را در نظر بگیرید که در آن فقط بین $x = 0$ تا

$x = L$ ، $V = V_0$ بوده (ناحیه II) و آن طرف $x = L$ باز هم صفر می شود (ناحیه III). حال اگر موج تختی با $E < V_0$ از سمت چپ به این سد فرود آید، یک احتمال کوچک به صورت نمایی وجود دارد که ذره به ناحیه III برسد. همین که ذره به ناحیه III می رسد، بار دیگر آزاد بوده و به وسیله یک موج تخت توصیف می شود. مثالی از تونل زنی، ذرات α محبوس شده در هسته به وسیله یک سد هستند. هر از چند گاهی یک ذره α از سد نفوذ کرده و بیرون می آید. آهنگ این فرایند می تواند با معلوم بودن V_0 و L محاسبه شود.

تمرین ۵-۴-۲: الف) R و T را برای پراکندگی از پتانسیل $V(x) = V_0 a \delta(x)$ محاسبه کنید. ب) همین کار را برای $V = 0$ در $V = V_0$ و $|x| < a$ انجام دهید. فرض کنید انرژی مثبت اما کمتر از V_0 است.

تمرین ۵-۴-۳: ذره ای را در معرض نیروی ثابت f در یک بعد در نظر بگیرید. انتشارگر را در فضای اندازه حرکت محاسبه کرده و نتیجه بگیرید که

$$U(p, t; p', 0) = \delta(p - p' - ft) e^{i(p^3 - p'^3)/6m\hbar f} \quad (۳۰-۴-۵)$$

به فضای مکان برگشته و نشان دهید که

$$U(x, t; x', 0) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i t}\right)^{1/2} \exp\left\{i\left[\frac{m(x-x')^2}{2t} + \frac{1}{2}ft(x+x') - \frac{f^2 t^3}{24m}\right]\right\} \quad (۳۱-۴-۵)$$

[راهنمایی: $\psi_E(p)$ را طوری بهنجار کنید که $\langle E | E' \rangle = \delta(E - E')$ باشد. توجه کنید که E مقید نیست که مثبت باشد.]

۵-۵-۵- آزمایش دو شکافی

با کسب بصیرت در مکانیک کوانتومی، شایسته است به عقب برگشته و آزمایش دو شکافی (شکل ۳-۱) را بررسی کنیم. فرض کنید نواحی سمت چپ و راست پرده را I و II بنامیم. ذره فرودی را که باید توسط یک بسته موج نشان داده شود، به وسیله یک موج تخت با عدد موج $k = p/\hbar$ تقریب می زنیم. پرده غیر قابل نفوذ را به عنوان ناحیه ای با پتانسیل $V = \infty$ در نظر گرفته و در نتیجه ناحیه ای است که ψ در آن صفر می شود. نظریه موجی استاندارد (که می توانیم از الکترومغناطیس کلاسیک فرض کنیم) بیان می کند که در ناحیه II چه اتفاقی می افتد: دو شکاف به عنوان چشمه امواج شعاعی برون رو با طول موج یکسان عمل می کنند. این دو موج روی خط AB تداخل کرده و الگوی تداخلی ایجاد می کنند. اکنون به مکانیک کوانتومی برگشته و شدت $|\psi|^2$ را به عنوان چگالی احتمال یافتن ذره تعبیر می کنیم.

۵-۶- چند قضیه

قضیه ۱۵: هیچ تبهگنی در حالت های مقید یک بعدی وجود ندارد.

اثبات: فرض کنید ψ_1 و ψ_2 دو جواب با ویژه مقدار یکسان E باشند:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_1}{dx^2} + V \psi_1 = E \psi_1 \quad (۱-۶-۵)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_2}{dx^2} + V \psi_2 = E \psi_2 \quad (۲-۶-۵)$$

با ضرب اولی در ψ_2 و دومی در ψ_1 و تفریق آنها نتیجه می شود که

$$\psi_1 \frac{d^2 \psi_2}{dx^2} - \psi_2 \frac{d^2 \psi_1}{dx^2} = 0$$

یا

$$\frac{d}{dx} \left(\psi_1 \frac{d\psi_2}{dx} - \psi_2 \frac{d\psi_1}{dx} \right) = 0$$

به طوری که

$$\psi_1 \frac{d\psi_2}{dx} - \psi_2 \frac{d\psi_1}{dx} = c \quad (۳-۶-۵)$$

برای یافتن ثابت c ، به $|x| \rightarrow \infty$ می رویم که ψ_1 و ψ_2 در آنجا صفر می شوند، چون طبق فرض آنها حالت های مقید را توصیف می کنند. نتیجه اینست که $c = 0$ می شود. بنابراین

$$\frac{1}{\psi_1} d\psi_1 = \frac{1}{\psi_2} d\psi_2$$

(۴-۶-۵)

$$\log \psi_1 = \log \psi_2 + d \quad (d \text{ is a constant})$$

$$\psi_1 = e^d \psi_2$$

از این رو دو ویژه تابع فقط به اندازه یک ضریب عددی با هم فرق داشته و یک حالت را نشان می دهند.

در مورد ذره آزاد، که به ازای هر انرژی دو جواب تبهگن با $p = \pm(2mE/\hbar^2)^{1/2}$ وجود دارد، چطور؟ این قضیه در اینجا کاربرد ندارد چون $\psi_p(x)$ در بی نهایت فضایی صفر نمی شود [C را در معادله (۳-۶-۵) محاسبه کنید].

قضیه ۱۶: ویژه توابع H همیشه می توانند در پایه مکان حقیقی محض انتخاب شوند.

اثبات: اگر

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi_n = E_n \psi_n$$

آنگاه با مزدوج کردن،

۱- این قضیه حتی در صورتی که ψ در $+\infty$ یا $-\infty$ صفر شود معتبر می ماند. در یک حالت مقید ψ در هر دو انتها صفر می شود. اما می توان وضعیتی را تصور کرد که پتانسیل تابع موج را در یک انتها محدود کرده و در انتهای دیگر محدود نمی کند (باید روشن باشد که این قضیه در ابعاد بالاتر هم معتبر است).

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi_n^* = E_n \psi_n^*$$

بنابراین ψ_n و ψ_n^* ویژه توابعی با ویژه مقدار یکسان هستند. نتیجه اینکه قسمت‌های حقیقی و موهومی ψ_n ،

$$\psi_r = \frac{\psi_n + \psi_n^*}{2}$$

$$\psi_i = \frac{\psi_n - \psi_n^*}{2i}$$

هم ویژه توابعی با انرژی E هستند.

این قضیه در ابعاد بالاتر هم برای هامیلتونی‌هایی به شکل بالا که علاوه بر هرمیتی بودن حقیقی هستند معتبر است. اما توجه کنید که در حالی که هرمیتی بودن تحت تبدیل یکانی پایه حفظ می‌شود، حقیقی بودن حفظ نمی‌شود.

اگر مسئله شامل میدان مغناطیسی باشد، هامیلتونی، همان‌طور که از معادله (۴-۳-۷) واضح است، دیگر در پایه مکان حقیقی نمی‌شود. در این مورد ویژه توابع در حالت کلی نمی‌توانند حقیقی انتخاب شوند. این مطلب در پایان فصل ۱۱ بیشتر بررسی خواهد شد.

در یک بعد، بدلیل عدم وجود تگه‌نی، باید داشته باشیم:

$$\psi_i = c\psi_r, \quad c \text{ یک ثابت}$$

در نتیجه،

$$\psi = \psi_r + i\psi_i = (1 + ic)\psi_r = \tilde{c}\psi_r$$

از آنجا که مقیاس (ضریب) کلی \tilde{c} بی‌تأثیر است می‌توانیم از آن چشم‌پوشی کنیم، یعنی بدون از دست دادن عمومیت مسئله، با ویژه توابع حقیقی کار کنیم.

در اینجا به پایان مطالعه مسائل یک بعدی می‌رسیم به استثنای نوسانگر هماهنگ که موضوع فصل ۷ است.

کاملاً روشن است که وقتی مکانیک کوانتومی برای یک سیستم ماکروسکوپی به کار رود باید نتایج مکانیک کلاسیک را مجدداً به دست دهد، همان طور که دینامیک نسبیتی هم وقتی برای اشیائی که آرام حرکت می کنند ($v/c \ll 1$) به کار می رود دینامیک نیوتنی را به دست می دهد. در این فصل بررسی می کنیم که چطور مکانیک کلاسیک در حوزه مناسب استنتاج می شود. وقتی از بازیابی مکانیک کلاسیک سخن می گوئیم منظور جنبه های عددی است. از نظر کیفی می دانیم که جهان جبری مکانیک کلاسیک وجود ندارد. یک بار سیب کوانتوم را گاز زده ایم، برای همیشه بی گناهی خود را از دست داده ایم.

با بررسی تحول زمانی مقادیر چشم داشتی آغاز می کنیم. دیده می شود که^۱

$$\frac{d}{dt} \langle \Omega \rangle = \frac{d}{dt} \langle \psi | \Omega | \psi \rangle \quad (1-6)$$

$$= \langle \dot{\psi} | \Omega | \psi \rangle + \langle \psi | \Omega | \dot{\psi} \rangle + \langle \psi | \dot{\Omega} | \psi \rangle$$

در آنچه در ادامه می آید فرض خواهیم کرد که Ω هیچ وابستگی صریح به زمان ندارد. بنابراین جمله سوم، $\langle \psi | \dot{\Omega} | \psi \rangle$ ، را حذف خواهیم کرد. از معادله شرودینگر داریم،

$$|\dot{\psi}\rangle = \frac{-i}{\hbar} H |\psi\rangle$$

و از الحاقی آن،

$$\langle \dot{\psi} | = \frac{i}{\hbar} \langle \psi | H$$

با قرار دادن اینها در معادله (۱-۶) به رابطه

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \Omega \rangle &= \left(\frac{-i}{\hbar} \right) \langle \psi | [\Omega, H] | \psi \rangle \\ &= \left(\frac{-i}{\hbar} \right) \langle [\Omega, H] \rangle \end{aligned} \quad (2-6)$$

می رسمیم که قضیه اهرنفتست نامیده می شود.

۱- اگر در مشتق گیری از کت ها و براها راحت نیستید می توانید در یک پایه کار کرده و خود را متقاعد کنید که این مرحله صحیح است.

به تشابه ساختاری بین این معادله و متناظر آن از مکانیک کلاسیک توجه کنید:

$$\frac{d\omega}{dt} = \{\omega, \mathcal{H}\} \quad (۳-۶)$$

بررسی خود را ادامه می‌دهیم تا ببینیم چطور دقیقاً دو مکانیک به هم مربوط می‌شوند برای سادگی ذره‌ای را در یک بعد بررسی می‌کنیم. اگر $\Omega = X$ قرار دهیم خواهیم داشت

$$\langle \dot{X} \rangle = \left(\frac{-i}{\hbar} \right) \langle [X, H] \rangle \quad (۴-۶)$$

اگر فرض کنیم

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(X)$$

است در این صورت

$$\langle \dot{X} \rangle = \left(\frac{-i}{\hbar} \right) \langle [X, P^2/2m] \rangle$$

حال

$$\begin{aligned} [X, P^2] &= P[X, P] + [X, P]P \\ &= 2i\hbar P \end{aligned}$$

به طوری که

$$\langle \dot{X} \rangle = \frac{\langle P \rangle}{m} \quad (۵-۶)$$

رابطه $\dot{x} = p/m$ مکانیک کلاسیک اکنون به صورت رابطه‌ای بین مقادیر متوسط ظاهر می‌شود. می‌توانیم معادله (۵-۶) را با نوشتن آن به صورت زیر به شکل بهتری تبدیل کنیم

$$\frac{P}{m} = \frac{\partial H}{\partial P}$$

که $\partial H / \partial P$ مشتق صوری H نسبت به P است و با این ادعا که H ، P و X همان اعداد c هستند محاسبه می‌شود. قاعده به دست آوردن این مشتق‌ها تا وقتی که تابعی که مشتق‌گیری می‌شود دارای سری توانی، مثل همین مورد، باشد درست مثل مشتق‌گیری در ریاضیات است. اکنون به جای معادله (۵-۶) به معادله زیر می‌رسیم:

$$\langle \dot{X} \rangle = \left\langle \frac{\partial H}{\partial P} \right\rangle \quad (۶-۶)$$

حال ملاحظه می‌شود که

$$\begin{aligned} \langle \dot{P} \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \langle [P, H] \rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle [P, V(X)] \rangle \end{aligned}$$

برای به دست آوردن $[P, V(X)]$ به پایه X می‌رویم که در آن

$$P \rightarrow -i\hbar \frac{d}{dx} \quad , \quad V(X) \rightarrow V(x)$$

و برای هر $\psi(x)$ ،

$$\left[-i\hbar \frac{d}{dx}, V(x) \right] \psi(x) = -i\hbar \frac{dV}{dx} \psi(x)$$

نتیجه اینکه به طور خلاصه

$$[P, V(X)] = -i\hbar \frac{dV}{dX} \quad (۷-۶)$$

که dV/dX باز هم مشتق صوری است. از آنجا که $dV/dX = \partial H/\partial X$ است به معادله زیر می‌رسیم

$$\langle \dot{P} \rangle = \left\langle -\frac{\partial H}{\partial X} \right\rangle \quad (۸-۶)$$

تشابه بین معادلات (۶-۶) و (۸-۶) و معادلات هامیلتون کاملاً روشن است. مایلیم بینیم چگونه معادلات کوانتومی در صورت کاربرد برای یک ذره ماکروسکوپی (مثلاً یک گرم) به معادلات هامیلتون تقلیل می‌یابند. قبل از همه واضح است که باید حالت اولیه‌ای را در نظر بگیریم که مشابه حالت‌های مکانیک کلاسیک، یعنی حالت‌هایی با مکان و اندازه حرکت خوش تعریف، باشد. اگر چه ویژه حالت‌های همزمانی برای X و P موجود نیست، حالت‌هایی وجود دارد که می‌توانیم به‌عنوان ویژه حالت‌های تقریبی X و P تصور کنیم. در این حالت‌ها که به صورت $|x_0 p_0 \Delta\rangle$ برچسب زده می‌شوند، $\langle X \rangle = x_0$ و $\langle P \rangle = p_0$ ، با عدم قطعیت‌های $\Delta X = \Delta$ و $\Delta P \cong \hbar/\Delta$ ، که هر دو در مقیاس ماکروسکوپی کوچکند، است. مثالی واقعی از چنین حالتی عبارت است از

$$|x_0 p_0 \Delta\rangle \rightarrow \Psi_{x_0, p_0, \Delta} = \left(\frac{1}{\pi \Delta^2} \right)^{1/4} e^{ip_0 x/\hbar} e^{-(x-x_0)^2/2\Delta^2} \quad (۹-۶)$$

اگر $\Delta \cong 10^{-13} \text{ cm}$ انتخاب شود که اندازه یک پروتون است، $\Delta P \cong 10^{-14} \text{ gcm/sec}$ می‌شود. برای ذره‌ای به جرم یک گرم، این اشاره به $\Delta V \cong 10^{-14} \text{ cm/sec}$ ، عدم قطعیتی بسیار کمتر از گستره قابل آشکارسازی در آزمایشگاه، می‌کند. در مقیاس کلاسیکی می‌توان گفت چنین حالتی مقادیر خوش تعریفی برای X و P ، یعنی x_0 و p_0 ، دارد چون عدم قطعیت‌ها (افت و خیزها) حول این مقادیر واقعاً قابل

چشم‌پوشی‌اند. اگر اجازه دهیم چنین حالتی با زمان تحول باید مقادیر متوسط $x_0(t)$ و $p_0(t)$ باز هم با انحرافات ناچیزی از معادلات هامیلتون پیروی خواهند کرد. این نتیجه را به صورت زیر اثبات می‌کنیم:

معادلات (۶-۶) و (۸-۶) را در نظر بگیرید که حاکم بر تحول زمانی $\langle X \rangle = x_0$ و $\langle P \rangle = p_0$ هستند. این معادلات اگر می‌توانستیم مقادیر متوسط توابع سمت راست را با توابع مقادیر متوسط جایگزین کنیم به معادلات هامیلتون تقلیل می‌یافتند:

$$\dot{x}_0 = \langle \dot{X} \rangle = \left\langle \frac{\partial H(X, P)}{\partial P} \right\rangle \simeq \left. \frac{\partial H}{\partial P} \right|_{(X=x_0, P=p_0)} = \frac{\partial \mathcal{H}(x_0, p_0)}{\partial p_0} \quad (10-6)$$

و

$$\dot{p}_0 = \langle \dot{P} \rangle = - \left\langle \frac{\partial H}{\partial X} \right\rangle \simeq - \left. \frac{\partial H}{\partial X} \right|_{(X=x_0, P=p_0)} = - \frac{\partial \mathcal{H}(x_0, p_0)}{\partial x_0} \quad (11-6)$$

اگر تابعی از X و P را در نظر بگیریم در همین تقریب خواهیم دید که

$$\langle \Omega(X, P) \rangle \simeq \Omega(x_0, p_0) = \omega(x_0, p_0) \quad (12-6)$$

بنابراین مکانیک کلاسیک را، هر وقت جاگذاری متوسط توابع $\partial H / \partial P$ ، $\partial H / \partial X$ و $\Omega(X, P)$ با توابع متوسط تقریب خوبی باشد به عنوان تقریبی خوب می‌شناسیم. این به نوبه خود ایجاب می‌کند که افت و خیزها حول میانگین باید کوچک باشند (اگر هیچ افت و خیزی نباشد این نتیجه دقیق است). به عنوان یک مثال واقعی معادلات (۶-۱۰) و (۶-۱۱) را در نظر بگیرید. هیچ تقریبی در معادله اول لحاظ نشده است چون $\langle \partial H / \partial P \rangle$ همان p_0 / m است. در معادله دوم لازم است تا $\langle \partial H / \partial X \rangle = \langle dV / dx \rangle = \langle V'(X) \rangle$ را با $V'(X = x_0)$ تقریب بزنیم. برای اینکه بینیم در چه صورت این تقریب، تقریب خوبی است V' را حول x_0 بسط سری تیلور می‌دهیم. در اینجا بهتر است در پایه مکان کار کنیم که در آن $V(X) = V(x)$ است. سری مذکور به صورت زیر است:

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

اکنون از هر دو طرف متوسط می‌گیریم. جمله اول در سمت راست، که در تقریب خود فقط آنرا نگه می‌داریم، متناظر با نیروی کلاسیکی در x_0 است و لذا قانون دوم نیوتن را به دست می‌دهد. جمله دوم در همه حالت‌ها صفر می‌شود، چون میانگین $x - x_0$ صفر می‌شود. جملات بعدی که تصحیحات تقریب کلاسیکی هستند، این حقیقت را نشان می‌دهند که برخلاف ذره کلاسیکی که فقط در x_0 به نیروی $F' = -V'$ پاسخ می‌دهد، ذره کوانتومی در نقاط مجاور (همسایه) هم به نیرو پاسخ می‌دهد (ضمناً توجه کنید که وقتی پتانسیل حداکثر از درجه ۲ برحسب x باشد این جملات صفر می‌شوند). هر یک از جملات حاصل ضرب دو عامل هستند، یکی از آنها، اندازه یا جایگزیده نشدگی بسته موج و دیگری تغییر نیرو با x را مشخص می‌کند (برای مثال جمله سوم را ببینید). در یک سطح شهودی، می‌توانیم بگوییم که این جملات در صورتی که نیرو روی «اندازه» بسته موج به آرامی تغییر کند ناچیز هستند (تعریف یگانه‌ای برای «اندازه» وجود ندارد. عدم قطعیت

یک معیار است. مربع عدم قطعیت باید بسیار کوچکتر از معکوس مشتق دوم نیرو باشد). در وضعیت کنونی که اندازه بسته موج از مرتبه 10^{-13} cm است واضح است که تقریب کلاسیکی برای هر پتانسیلی که فقط در مقیاس های ماکروسکوپی به طور محسوسی تغییر کند، تقریب خوبی است.

یک مشکل ظاهری وجود دارد: اگر چه می توانیم دستگاه را در حالی با $\Delta \cong 10^{-13} \text{ cm}$ شروع نماییم، که یقیناً عدم قطعیت بسیار کوچکی است، اما می دانیم که با گذشت زمان، بسته موج پهن خواهد شد. عدم قطعیت در مکان ذره به ناچار ماکروسکوپی خواهد شد. درست است. اما بحث های بخش ۵-۱ را به خاطر بیاورید. دیدیم که پهن شدگی بسته موج می تواند به این واقعیت نسبت داده شود که هر عدم قطعیت اولیه ای در سرعت، هر چند کوچک، نهایتاً خودش را به صورت عدم قطعیتی بزرگ در مکان ظاهر خواهد کرد. اما در حالت کنونی $(\Delta V \cong 10^{-14} \text{ cm/sec})$ ، 300000 سال طول می کشد تا بسته موج دارای حتی یک میلی متر پهنای شود! (در اینجا است که ادعا می کنیم ذره ماکروسکوپی است: اما به این دلیل، یک ΔP کوچک اشاره به ΔV کوچک نمی کند). لذا مسئله فقط از نظر علمی جالب است و گذشته از این، در مکانیک کلاسیک هم وجود دارد، چون اندازه گیری کامل سرعت، صرفاً یک ایده آل سازی است.

هنوز سوال دیگری هم باقی می ماند. دیدیم که برای یک ذره ماکروسکوپی آماده شده در حالت $(\Delta x_0 p_0)$ ، تحول زمانی x_0 و p_0 طبق معادلات هامیلتون خواهد بود. سوال: در حالی که درست است که یک ذره در چنین حالت آماده شده ای از مکانیک کلاسیک پیروی می کند، آیا این حالت ها تنها حالت هایی هستند که در مکانیک کلاسیک با آنها مواجه می شویم؟ اگر مکان اولیه ذره ماکروسکوپی با دقتی در حد 10^{-2} cm معین باشد چطور؟ آیا در این صورت سرعت آن، عدم قطعیت هایی ندارد که به طور کلاسیکی قابل آشکار سازی هستند؟ بله. اما چنین حالت هایی در عمل اتفاق نمی افتند. فیزیکدانان کلاسیک در مورد اندازه گیری های دقیق مکان سخن می گویند اما در عمل هرگز اینگونه نیست. این موضوع از این حقیقت واضح است که آنها نور با فرکانس متناهی را برای تعیین مکان ذره به کار می برند در حالی که فقط نوری با فرکانس نامتناهی دارای دقت (تفکیک) کامل است. برای مثال نور در طیف مرئی دارای موج $\lambda \cong 10^{-5} \text{ cm}$ است و لذا کمینه ΔX تقریباً برابر 10^{-5} cm است. اگر کسی واقعاً به سمت ایده آل کلاسیکی می رفت و از فوتون های دارای طول موج رو به کاهش استفاده می کرد، بلافاصله می دید که اندازه حرکت ذره ماکروسکوپی بر اثر اندازه گیری مکان آن تغییر می کند (متأثر می شود). برای مثال، با گذشت زمان، به طول موج 10^{-27} cm می رسید، هر فوتون اندازه حرکت تقریباً 1 g cm/sec حمل کرده و مشاهده می شد که اشیاء ماکروسکوپی تحت اثر برخوردشان به عقب برمی گردند.

به طور خلاصه، یک ذره ماکروسکوپی نوعی، که از نظر کلاسیکی به عنوان ذره دارای مقدار p و x خوش تعریف توصیف می شود، در واقع در یک ویژه حالت تقریبی $(\Delta x_0 p_0)$ قرار دارد، که اگر از نور مرئی برای تعیین مکان ذره استفاده شود Δ حداقل 10^{-5} cm است. معادلات کوانتومی برای تحول زمانی این ویژه مقادیر تقریبی x_0 و p_0 با عدم قطعیت هایی واقعاً ناچیز به معادلات هامیلتون تقلیل می یابند. همین وضعیت برای هر متغیر دینامیکی دیگر وابسته به x و p هم وجود دارد.

این فصل را با تکرار مشاهده قبلی برای تأکید بر اهمیت آن به پایان می‌بریم. قضیه اهرنفتست بیان نمی‌کند که در حالت کلی مقادیر چشم‌داشتی عملگرهای کوانتومی همانند شکل‌های کلاسیکی آنها تحول می‌یابند. بویژه $\langle X \rangle = x_0$ و $\langle P \rangle = p_0$ در همه مسائل از معادلات هامیلتون پیروی نمی‌کنند. برای اینکه آنها از معادلات هامیلتون پیروی کنند باید قادر باشیم تا مقادیر متوسط (مقادیر چشم‌داشتی) توابع $\partial H / \partial P$ و $\partial H / \partial X$ از X و P را با توابع متناظر مقادیر متوسط $\langle X \rangle = x_0$ و $\langle P \rangle = p_0$ جایگزین کنیم. برای هامیلتونی‌هایی که حداکثر درجه ۲ از X و P هستند، این جاگذاری می‌تواند بدون هیچ خطایی برای همه توابع موج انجام شود. در حالت کلی، چنین جاگذاری‌یی تقریبی ضعیف است مگر اینکه افت و خیزها حول متوسط‌های x_0 و p_0 کوچک باشند. حتی در آن مواردی که x_0 و p_0 از معادلات کلاسیکی پیروی می‌کنند مقدار چشم‌داشتی یک متغیر وابسته $\Omega(X, P)$ لزوماً پیروی نمی‌کند مگر اینکه بتوانیم به جای $\langle \Omega(X, P) \rangle$ ، $\Omega(x_0, p_0)$ قرار دهیم.

مثال ۶-۱: $\langle \Omega(X) \rangle$ را، که $\Omega = X^2$ است، در حالت $\psi(x) = A \exp[-(x-a)^2 / 2\Delta^2]$ در نظر بگیرید. آیا $\langle \Omega(x) \rangle = \Omega(\langle X \rangle)$ است؟ خیر، چون اختلاف بسین آن دو، $\langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2 = (\Delta X)^2 \neq 0$ است.



۷-۱- چرا نوسانگر هماهنگ را مطالعه می‌کنیم؟

در این بخش نوسانگر هماهنگ را در جایگاه خود، بر روی یک سکو، قرار می‌دهیم. نوسانگر هماهنگ نه تنها دستگاهی است که می‌تواند دقیقاً حل شود (در نظریه کلاسیکی و کوانتومی) و ابزاری عالی برای تعلیم مفاهیم است (که مکرراً در این کتاب از آن بهره خواهیم گرفت)، بلکه دستگاهی با مناسبت فیزیکی زیاد است. همان‌طور که در ادامه نشان خواهیم داد، هر دستگاهی که به مقدار کم نزدیک پیکربندی تعادل پایدار نوسان می‌کند می‌تواند به وسیله یک نوسانگر یا مجموعه‌ای از نوسانگرهای هماهنگ غیرجفت شده توصیف شود. از آنجا که دینامیک مجموعه‌ای از نوسانگرهای غیر برهم‌کنش کننده خیلی پیچیده‌تر از دینامیک یک نوسانگر منفرد نیست (جدا از افزایش N تایی درجات آزادی)، در پرداختن به مسئله نوسانگر عملاً با مسئله عمومی نوسانات کوچک نزدیک تعادل یک سیستم دلخواه مواجه هستیم.

مثالی واقعی از یک نوسانگر هماهنگ منفرد، جرم m جفت شده به فنری با ثابت نیروی k است. برای تغییر شکل‌های کوچک x ، فنر نیرویی را طبق قانون هوک به اندازه $F = -kx$ اعمال می‌کند (k ثابت نیروی فنر است) و پتانسیل $V = \frac{1}{2}kx^2$ را ایجاد می‌کند. هامیلتونی این دستگاه عبارتست از

$$\mathcal{H} = T + V = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (1-1-7)$$

که $\omega = (k/m)^{\frac{1}{2}}$ فرکانس کلاسیکی نوسان است. هر هامیلتونی به شکل فوق که نسبت به اندازه حرکت و مکان خطی است، هامیلتونی نوسانگر هماهنگ نامیده می‌شود. حال دستگاه جرم - فنر فقط یکی از بین خانواده دستگاه‌های زیر است که با هامیلتونی نوسانگر توصیف می‌شوند. ذره‌ای را در نظر بگیرید که در پتانسیل $V(x)$ حرکت می‌کند. اگر ذره در یکی از کمینه‌های آن، x_0 ، قرار گیرد، در آنجا در یک حالت پایدار، تعادل استاتیکی، باقی خواهد ماند (بیشینه، که نقطه‌ای با تعادل استاتیکی ناپایدار است، در اینجا مورد نظر ما نیست). اکنون دینامیک این ذره را در صورت افت و خیز کوچک نزدیک $x = x_0$ در نظر بگیرید. پتانسیلی که ذره احساس می‌کند می‌تواند به صورت سری تیلور بسط داده شود

$$V(x) = V(x_0) + \left. \frac{dV}{dx} \right|_{x_0} (x - x_0) + \frac{1}{2!} \left. \frac{d^2V}{dx^2} \right|_{x_0} (x - x_0)^2 + \dots \quad (2-1-7)$$

جمله ثابت $V(x_0)$ حاوی هیچ نتیجه فیزیکی نیست و می‌تواند کنار گذاشته شود [به عبارت دیگر، می‌توانیم $V(x_0)$ را به عنوان نقطه مبدا اختیاری برای اندازه‌گیری پتانسیل انتخاب کنیم]. جمله دوم در سری

هم صفر می‌شود چون x_0 یک نقطه کمینه $V(x)$ است و یا به‌طور معادل، چون در نقطه تعادل پایدار (استاتیکی)، نیروی $-dV/dx$ صفر می‌شود. اگر مبدأ مختصات را به x_0 منتقل کنیم، معادله (۷-۱-۲) به‌صورت زیر در می‌آید

$$V(x) = \frac{1}{2!} \frac{d^2V}{dx^2} \Big|_0 x^2 + \frac{1}{3!} \frac{d^3V}{dx^3} \Big|_0 x^3 + \dots \quad (۳-۱-۷)$$

برای نوسانات کوچک، می‌توانیم از همه جملات به جز جمله پیشرو چشم‌پوشی کرده و به پتانسیل (یا هامیلتونی) معادله (۷-۱-۱)، d^2V/dx^2 به‌عنوان $k = m\omega^2$ ، برسیم (طبق تعریف x کوچک است اگر جملات نادیده گرفته شده در سری تیلور در مقایسه با جمله پیشرو که به تنهایی نگه داشته می‌شود، کوچک باشند. در مورد دستگاه جرم-فنر، تا وقتی قانون هوک تقریب خوبی باشد x کوچک است).

به‌عنوان مثالی از دستگاهی که با مجموعه‌ای از نوسانگرهای مستقل توصیف می‌شود، جرم‌های جفت شده را از مثال ۱-۸-۶ در نظر بگیرید (با مراجعه به گذشته و مرور این مسئله می‌توانید به آماده شدن ذهن خود کمک کنید). هامیلتونی این دستگاه عبارتست از

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 [x_1^2 + x_2^2 + (x_1 - x_2)^2] \\ &= \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \frac{1}{2} m\omega^2 (x_1 - x_2)^2 \end{aligned} \quad (۴-۱-۷)$$

این \mathcal{H} به شکل مذکور و قول داده شده در بالا نیست چون نوسانگرهای متناظر با \mathcal{H}_1 و \mathcal{H}_2 (مربوط به مختصه‌های x_1 و x_2 به‌وسیله جمله $(x_1 - x_2)^2$ به هم جفت شده‌اند. اما توصیف دیگری از این دستگاه را می‌شناسیم که در آن، دستگاه را می‌توان به‌عنوان دو نوسانگر غیر جفت شده در نظر گرفت. روش کار استفاده از مختصات بهنجار است. x_1 و x_2 را با عبارات‌های زیر عوض می‌کنیم:

$$x_I = \frac{x_1 + x_2}{2^{1/2}} \quad (۷-۱-۵-الف)$$

و

$$x_{II} = \frac{x_1 - x_2}{2^{1/2}} \quad (۷-۱-۵-ب)$$

با مشتق‌گیری از این معادلات نسبت به زمان، به نظیر این عبارات‌ها برای سرعت‌ها و در نتیجه اندازه حرکت‌ها می‌رسیم. برحسب مختصات بهنجار (و اندازه حرکت‌های متناظر)،

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_I + \mathcal{H}_{II} = \frac{p_I^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x_I^2 + \frac{p_{II}^2}{2m} + \frac{3}{2} m\omega^2 x_{II}^2 \quad (۶-۱-۷)$$

لذا مسئله دو جرم جفت شده به مسئله دو نوسانگر جفت نشده با فرکانس‌های $\omega_I = \omega = (k/m)^{1/2}$ و $\omega_{II} = 3^{1/2} \omega = (3k/m)^{1/2}$ تقلیل می‌یابد.

معادله (۷-۱-۴) را به‌صورت زیر بازنویسی می‌کنیم

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 p_i \delta_{ij} p_j + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 x_i V_{ij} x_j \quad (7-1-7)$$

که V_{ij} ها عناصر یک ماتریس (هرمیتی) متقارن حقیقی با مقادیر زیر هستند:

$$V_{11} = V_{22} = 2m\omega^2, \quad V_{12} = V_{21} = -m\omega^2 \quad (8-1-7)$$

در ورود به مختصات بهنجار x_I و x_{II} به پایه‌ای می‌رویم که V را قطری کرده و انرژی پتانسیل را به مجموع جملات غیر جفت شده، یک جمله برای هر مد بهنجار، تقلیل می‌دهد. قسمت انرژی جنبشی در هر دو پایه غیر جفت شده می‌ماند.

حال همان‌طور که دستگاه جرم - فنر فقط عنصری نماینده از یک خانواده از دستگاه‌های توصیف شونده به‌وسیله هامیلتونی نوسانگر بود، دستگاه جرم جفت شده هم حالت خاصی از یک خانواده است که می‌تواند به‌وسیله مجموعه‌ای از نوسانگرهای هماهنگ جفت شده توصیف شود. دستگاهی با N درجه آزادی دکارتی x_1, \dots, x_N ، با تابع انرژی پتانسیل $V(x_1, \dots, x_N)$ در نظر بگیریم. نزدیک یک نقطه تعادل (که به‌عنوان مبدأ انتخاب می‌شود)، بسط V در قیاس با معادله (۷-۱-۳) عبارتست از

$$V(x_1 \dots x_N) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left. \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \right|_0 x_i x_j + \dots \quad (9-1-7)$$

برای نوسانات کوچک، هامیلتونی به‌صورت زیر در می‌آید

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{p_i \delta_{ij} p_j}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_i V_{ij} x_j \quad (10-1-7)$$

که

$$V_{ij} = \left. \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \right|_0 = \left. \frac{\partial^2 V}{\partial x_j \partial x_i} \right|_0 = V_{ji} \quad (11-1-7)$$

عناصر ماتریس هرمیتی V هستند (برای سادگی فرض می‌کنیم که جرم‌های مربوط به همه N درجه آزادی برابرند). از نظریه ریاضی فصل ۱ می‌دانیم که پایه جدیدی وجود دارد (یعنی مجموعه جدیدی از مختصه‌های x_I ، x_{II} و ...) که V را قطری کرده و \mathcal{H} را به مجموع N هامیلتونی نوسانگر غیر جفت شده، هر هامیلتونی برای یک مد بهنجار، تقلیل می‌دهد. لذا مسئله عمومی افت و خیزهای کوچک نزدیک نقطه تعادل یک دستگاه دلخواه به مطالعه یک نوسانگر هماهنگ منفرد کاهش می‌یابد.

این بخش را با بحثی مختصر درباره دو دستگاه مهم، که به‌وسیله مجموعه‌ای از نوسانگرهای مستقل توصیف می‌شوند به پایان می‌بریم. اولی بلوری است (در سه بعد) که اتم‌ها در آن حول مکان‌های متوسطشان در شبکه حرکات آهسته‌ای دارند. دومی میدان الکترومغناطیسی در فضای آزاد است. بلوری با N_0 اتم (که ذرات نقطه‌ای فرض می‌شوند) دارای $3N_0$ درجه آزادی است که جابه‌جایی‌ها از نقاط تعادل روی شبکه هستند. برای نوسانات کوچک، هامیلتونی نسبت به مختصه‌های مکان (و البته اندازه حرکت‌ها) درجه دو خواهد بود. از این رو، $3N_0$ مختصات بهنجار و اندازه حرکت‌های مزدوج آنها وجود خواهد داشت که برحسب

آنها، \mathcal{H} جمعی غیر جفت شده روی هامیلتونی‌های نوسانگر خواهد بود. مدهای بهنجار متناظر چه چیزهایی هستند؟ به یاد بیاورید که در مورد دو جرم جفت شده، مدهای بهنجار با حرکت جمعی کل سیستم متناظر شدند، در یک حالت دو جرم هم‌فاز بوده و در حالت دیگر هر دو جرم دقیقاً غیر هم‌فاز بودند. همین‌طور، در حالت کنونی، حرکت در مدهای بهنجار جمعی بوده و با امواج تخت رونده در سراسر شبکه متناظر است. برای بردار موج معین \mathbf{k} ، اتم‌ها می‌توانند موازی با \mathbf{k} (قطبش طولی) یا در یکی از دو جهت مستقل عمود بر \mathbf{k} (قطبش عرضی) ارتعاش کنند. اکثر کتابهای فیزیک حالت جامد دلیل وجود فقط N_0 مقدار ممکن برای \mathbf{k} را ذکر می‌کنند (البته باید اینگونه باشد چون با سه قطبش هر \mathbf{k} ، دقیقاً $3N_0$ مد بهنجار خواهیم داشت) این مدها که با (\mathbf{k}, λ) برچسب زده می‌شوند، که λ شاخص قطبش است ($\lambda = 1, 2, 3$)، پایه‌ای کامل برای بسط هر حالت دستگاه تشکیل می‌دهند. ضرایب بسط، $a(\mathbf{k}, \lambda)$ ، مخصوصه‌های بهنجار هستند. فرکانس‌های بهنجار با $\omega(\mathbf{k}, \lambda)$ برچسب زده می‌شوند.^۱

در مورد میدان الکترومغناطیسی، مخصوصه، پتانسیل $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ در هر نقطه از فضا است $[\dot{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t)$ «سرعت» متناظر با مختصه $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ است]. مدهای بهنجار باز هم امواج تخت هستند اما دو تفاوت وجود دارد: اول اینکه هیچ قیدی روی \mathbf{k} وجود ندارد، ثانیاً قطبش باید عرضی باشد. نظریه کوانتومی میدان در فصل ۱۸ به‌طور مفصل بحث خواهد شد.

۷-۲- مروری بر نوسانگر کلاسیک

معادلات حرکت نوسانگر از معادله (۷-۱-۱) عبارتند از:

$$\dot{x} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} = \frac{p}{m} \quad (۱-۲-۷)$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x} = -m\omega^2 x \quad (۲-۲-۷)$$

با حذف \dot{p} به معادله‌آشنای زیر می‌رسیم

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0$$

که جواب آن عبارتست از

$$x(t) = A \cos \omega t + \beta \sin \omega t = x_0 \cos(\omega t + \phi) \quad (۳-۲-۷)$$

x_0 دامنه و ϕ فاز نوسانگر است. انرژی پایسته مربوط به نوسانگر برابر است با

$$E = T + V = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 x_0^2 \quad (۴-۲-۷)$$

۱- برای مقایسه با دستگاه دو جرمی، (\mathbf{k}, λ) شبیه I یا II، $a(\mathbf{k}, \lambda)$ شبیه x_I یا x_{II} و $\omega(\mathbf{k}, \lambda)$ شبیه $(k/m)^{1/2}$ یا $(3k/m)^{1/2}$ است.

چون x_0 متغیر پیوسته‌ای است، انرژی نوسانگر کلاسیکی هم پیوسته است. پایین‌ترین مقدار E صفر است و متناظر با ذره‌ای است که در مبداء ساکن باقی می‌ماند.

با حل این معادله نسبت به \dot{x} بر حسب E و X به معادله زیر می‌رسیم

$$\dot{x} = (2E/m - \omega^2 x^2)^{1/2} = \omega(x_0^2 - x^2)^{1/2} \quad (5-2-7)$$

که بیان می‌کند ذره از حالت سکون در نقطه بازگشت ($x = \pm x_0$) شروع کرده، سرعتش تا رسیدن به مبدأ افزایش یافته و سپس تا رسیدن به سکون هنگام رسیدن به نقطه بازگشت دیگر کم می‌شود. با یادآوری این نتایج کلاسیکی، می‌توانید آنها را به راحتی با اشکال کوانتومی آنها مقایسه کنید.

۷-۳- کوانتس نوسانگر (پایه مختصه)

اکنون نوسانگر کوانتومی را در نظر می‌گیریم، یعنی ذره‌ای که بردار حالتش، $|\psi\rangle$ ، از معادله شرودینگر پیروی می‌کند،

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H |\psi\rangle$$

که در آن

$$H = \mathcal{H}(x \rightarrow X, p \rightarrow P) = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2$$

همان‌طور که قبلاً هم به کرات دیده شد، دینامیک کامل در $U(t)$ گنجانده می‌شود که به نوبه خود می‌تواند بر حسب ویژه بردارها و ویژه مقادیر H بیان شود. در این بخش و بخش بعدی، مسئله ویژه مقادیری را به ترتیب در پایه X و پایه H حل خواهیم کرد. در بخش ۷-۵، عبور از پایه H به پایه X بحث خواهد شد. جواب در پایه P ، که ارتباطش با جواب در پایه X در این مورد بدیهی است، در یک تمرین بحث خواهد شد. ابتدا ثابت می‌کنیم که ویژه مقادیر H نمی‌توانند منفی باشند. برای هر $|\psi\rangle$ ،

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \frac{1}{2m} \langle \psi | P^2 | \psi \rangle + \frac{1}{2} m\omega^2 \langle \psi | X^2 | \psi \rangle \\ &= \frac{1}{2m} \langle \psi | P^\dagger P | \psi \rangle + \frac{1}{2} m\omega^2 \langle \psi | X^\dagger X | \psi \rangle \\ &= \frac{1}{2m} \langle P\psi | P\psi \rangle + \frac{1}{2} m\omega^2 \langle X\psi | X\psi \rangle \geq 0 \end{aligned}$$

است چون نرم‌های حالت‌های $\langle P\psi |$ و $\langle X\psi |$ نمی‌توانند منفی باشند. حال اگر $|\psi\rangle$ را با ویژه حالتی از H مساوی قرار دهیم به نتیجه مورد نظر می‌رسیم.

با تکیه به نتیجه فوق، می‌توانیم مبادرت به حل مسئله در پایه مکان بکنیم.

با تصویر کردن معادله ویژه مقادیری

$$\left(\frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2 \right) |E\rangle = E |E\rangle \quad (1-3-7)$$

در پایه X و با استفاده از جانشینی‌های زیر شروع می‌کنیم

$$X \rightarrow x$$

$$P \rightarrow -i\hbar \frac{d}{dx}$$

$$|E\rangle \rightarrow \psi_E(x)$$

نتیجه اینکه

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \psi = E \psi \quad (۲-۳-۷)$$

(شناسه ψ و اندیس E ضمنی هستند).

این معادله را می‌توانیم به صورت زیر مرتب کنیم

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \psi = 0 \quad (۳-۳-۷)$$

می‌خواهیم همه جواب‌های این معادله را که در فضای هیلبرت فیزیکی قرار می‌گیرند به دست آوریم (توابعی قابل بهنجارش به یک یا تابع دلتای دیراک).

گام اول، نوشتن معادله (۳-۳-۷) بر حسب متغیرهای بی‌بعد است. به دنبال متغیر جدید y می‌گردیم که بدون بعد بوده و طبق رابطه زیر به x مربوط می‌شود

$$x = by \quad (۴-۳-۷)$$

که b یک ضریب عددی با یکای طول است. اگر چه هر طول b (مثلاً شعاع منظومه شمسی) یک متغیر بی‌بعد y تولید خواهد کرد، منظور، انتخاب مقیاس طول طبیعی است که توسط خود معادله تولید می‌شود. با قرار دادن معادله (۴-۳-۷) در معادله (۳-۳-۷) به معادله زیر می‌رسیم:

$$\frac{d^2 \psi}{dy^2} + \frac{2mEb^2}{\hbar^2} \psi - \frac{m^2 \omega^2 b^4}{\hbar^2} y^2 \psi = 0 \quad (۵-۳-۷)$$

مطالب فوق پیشنهاد می‌کنند که انتخاب زیر انجام شود

$$b = \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{1/2} \quad (۶-۳-۷)$$

همین‌طور متغیر ابعادی ε را متناظر با E به صورت زیر تعریف می‌کنیم

$$\varepsilon = \frac{mEb^2}{\hbar^2} = \frac{E}{\hbar\omega} \quad (۷-۳-۷)$$

(می‌توانیم $\varepsilon = 2mEb^2 / \hbar^2$ هم انتخاب کنیم. ثابت‌های از مرتبه واحد به صورت منحصر به فرد توسط معادله پیشنهاد نمی‌شوند. در اینجا، انتخاب ε یک پیشدستی بر نتایج است). معادله (۵-۳-۷) بر حسب متغیرهای بی‌بعد به صورت زیر در می‌آید

(۸-۳-۷)

$$\psi'' + (2\varepsilon - y^2)\psi = 0$$

که پریم، مشتق نسبت به y را نشان می‌دهد.

متغیرهای بی‌بعد نه تنها منجر به معادله بسته‌تری می‌شوند بلکه مقیاس‌های طبیعی برای مسئله فراهم می‌کنند. با اندازه‌گیری x و E در واحدهای $(\hbar/m\omega)^{1/2}$ و $\hbar\omega$ ، که مقیاس‌های به‌دست آمده از پارامترهای موجود در مسئله هستند، مشخص می‌شود که عبارت‌های «کوچک» و «بزرگ» به چه مفهومی هستند: برای مثال، جابه‌جایی نوسانگر بزرگ است اگر y بزرگ باشد. اگر به کاربرد همین واحدها برای همه مسائل، از فیزیک اتمی تا کیهان‌شناسی، اصرار کنیم نه تنها اعدادی فوق‌العاده بزرگ یا فوق‌العاده کوچک خواهیم داشت، بلکه هیچ احساسی در مورد اندازه کمیت‌ها در مقیاس مربوطه هم نخواهیم داشت (فاصله 10^{-22} پارسک که در مقیاس کیهانی کوچک است، اگر در دستگاهی اتمی بحث کنیم، بزرگ است).

گام بعدی، بررسی معادله (۸-۳-۷) در مقادیر حدی y است تا به جواب معادله در این حدود پی ببریم. در حد $y \rightarrow \infty$ ، می‌توانیم از جمله $2\varepsilon\psi$ چشم‌پوشی کرده و به معادله زیر برسیم

(۹-۳-۷)

$$\psi'' - y^2\psi = 0$$

جواب این معادله در همین حد به صورت زیر است

$$\psi = Ay^m e^{\pm y^2/2}$$

زیرا

$$\psi'' = Ay^{m+2} \cdot e^{\pm y^2/2} \left[1 \pm \frac{2m+1}{y^2} + \frac{m(m-1)}{y^4} \right]$$

$$\xrightarrow{y \rightarrow \infty} Ay^{m+2} e^{\pm y^2/2} = y^2 \psi$$

که در وضعیت $y \rightarrow \infty$ ، همه را به جز توان پیشرو از y حذف کرده‌ایم. از دو امکان $y^m e^{\pm y^2/2}$ ، $y^m e^{-y^2/2}$ را انتخاب می‌کنیم، چون امکان دیگر جزئی از فضای هیلبرت فیزیکی نیست زیرا در صورت میل $y \rightarrow \infty$ به صورت نمایی زیاد می‌شود.

حال حد $y \rightarrow 0$ را در نظر بگیرید. معادله (۸-۳-۷)، با حذف جمله $y^2\psi$ ، به شکل زیر در می‌آید

$$\psi'' + 2\varepsilon\psi = 0$$

که جواب آن عبارتست از

$$\psi = A \cos(2\varepsilon)^{1/2} y + B \sin(2\varepsilon)^{1/2} y$$

چون جمله y^2 را در معادله به علت کوچکی حذف کرده‌ایم، سازگاری ایجاب می‌کند که کسینوس و سینوس را بسط دهیم و جملات از مرتبه y^2 و بیشتر را حذف کنیم که نتیجه می‌شود:

$$\psi \xrightarrow{y \rightarrow 0} A + cy + O(y^2)$$

که c ثابت جدید $\left[= B(2\varepsilon)^{\frac{1}{2}} \right]$ است.

بنابراین استنباط می‌کنیم که ψ به شکل زیر باشد

$$\psi(y) = u(y) e^{-y^2/2} \quad (10-3-7)$$

که u وقتی $y \rightarrow 0$ میل می‌کند به $A + cy$ (به علاوه توان‌های بالاتر) میل کرده و وقتی $y \rightarrow \infty$ میل می‌کند به y^m (به علاوه توان‌های پایین‌تر) میل می‌کند. برای تعیین کامل $u(y)$ ، جواب بالا را در معادله (۸-۳-۷) قرار داده و به معادله زیر می‌رسیم

$$u'' - 2yu' + (2\varepsilon - 1)u = 0 \quad (11-3-7)$$

این معادله ویژگی‌های مورد نظر را (که در تمرین ۷-۳-۱ بحث خواهد شد)، که نشانگر امکان جواب سری توانی هستند، دارد، یعنی اگر فرض کنیم که

$$u(y) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n y^n \quad (12-3-7)$$

معادله فوق ضرایب را مشخص خواهد کرد [سری با $n=0$ و نه n منفی شروع می‌شود، چون می‌دانیم که وقتی $y \rightarrow 0$ میل می‌کند، $(u \rightarrow A + cy + o(y^2))$. با قرار دادن این سری در معادله (۱۱-۳-۷) معادله زیر را به دست می‌آوریم

$$\sum_{n=0}^{\infty} C_n [n(n-1)y^{n-2} - 2ny^n + (2\varepsilon - 1)y^n] = 0 \quad (13-3-7)$$

جمله اول سری فوق را در نظر بگیرید:

$$\sum_{n=0}^{\infty} C_n n(n-1)y^{n-2}$$

به دلیل ضریب $n(n-1)$ ، این سری با

$$\sum_{n=2}^{\infty} C_n n(n-1)y^{n-2}$$

هم برابر است. بر حسب متغیر جدید $m = n - 2$ ، سری به صورت زیر می‌شود

$$\sum_{m=0}^{\infty} C_{m+2}(m+2)(m+1)y^m \equiv \sum_{n=0}^{\infty} C_{n+2}(n+2)(n+1)y^n$$

چون m یک متغیر ساختگی است. با قرار دادن این سری هم‌ارز در معادله (۱۳-۳-۷) خواهیم داشت:

$$\sum_{n=0}^{\infty} y^n [C_{n+2}(n+2)(n+1) + C_n(2\varepsilon - 1 - 2n)] = 0 \quad (14-3-7)$$

چون توابع y^n مستقل خطی‌اند هر ضریب در رابطه خطی بالا باید صفر شود (y^n را نمی‌توان به صورت ترکیب خطی از توان‌های دیگر y نوشت). بنابراین،

$$C_{n+2} = C_n \frac{(2n+1-2\varepsilon)}{(n+2)(n+1)} \quad (15-3-7)$$

لذا به ازای هر C_0 و C_1 ، رابطه بازگشتی فوق، C_2, C_4, C_6, \dots و C_3, C_5, C_7, \dots را تولید می کند. تابع $u(y)$ از معادله زیر به دست می آید:

$$u(y) = C_0 \left[1 + \frac{(1-2\varepsilon)y^2}{(0+2)(0+1)} + \frac{(1-2\varepsilon)}{(0+2)(0+1)} \frac{(4+1-2\varepsilon)}{(2+2)(2+1)} y^4 + \dots \right] \\ + C_1 \left[y + \frac{(2+1-2\varepsilon)y^3}{(1+2)(1+1)} + \frac{(2+1-2\varepsilon)}{(1+2)(1+1)} \frac{(6+1-2\varepsilon)}{(3+2)(3+1)} y^5 + \dots \right] \quad (16-3-7)$$

که C_0 و C_1 دلخواه هستند.

به نظر می رسد که انرژی نوسانگر کوانتومی دلخواه است چون ε به هیچ وجه محدود نشده است. اما می دانیم که یک خطا وجود دارد، چون در ابتدا دیدیم که ویژه مقادیر نوسانگر غیر منفی هستند. اولین علامت وجود مشکل در جواب ما، معادله (۱۶-۳-۷)، این است که وقتی $y \rightarrow \infty$ میل می کند $u(y)$ به صورت y^m رفتار نمی کند (آن طور که در آغاز استنباط شد) چون شامل توان های دلخواه بالاتر از y است. فقط به یک شکل می توان این مطلب را توضیح داد. دیدیم که وقتی $y \rightarrow \infty$ میل می کند فقط دو امکان وجود دارد:

$$\psi(y) \xrightarrow{y \rightarrow \infty} y^m e^{\pm y^2/2}$$

اگر بنویسیم $\psi(y) = u(y) e^{-y^2/2}$ ، دو امکان برای $u(y)$ به صورت زیر می شوند

$$u(y) \xrightarrow{y \rightarrow \infty} y^m \text{ or } y^m e^{y^2}$$

واضح است که $u(y)$ در معادله (۱۶-۳-۷)، که وقتی $y \rightarrow \infty$ میل می کند به وسیله هیچ توان متناهی از y محدود نمی شود، متناظر با حالت دوم (آخری) است. این مطلب را می توانیم صریحاً به صورت زیر ثابت کنیم. سری توانی $u(y)$ را در وضعیت $y \rightarrow \infty$ در نظر بگیرید. درست همان طور که در حالت $y \rightarrow 0$ سری به وسیله C_0 کنترل می شود (ضریب کمترین توان y)، در حالت $y \rightarrow \infty$ به وسیله ضرایب $C_{n \rightarrow \infty}$ خودش حاکم می شود. رشد سری با نسبت زیر مشخص می شود [معادله (۱۵-۳-۷) را ببینید]

$$\frac{C_{n+2}}{C_n} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \frac{2}{n} \quad (17-3-7)$$

این را با رشد $y^m e^{y^2}$ مقایسه کنید. از آنجا که

$$y^m e^{y^2} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{y^{2k+m}}{k!}$$

$1/k! =$ ضریب $C_n = y^n$ ؛ با $n = 2k + m$ یا $k = (n - m)/2$. همین طور

$$C_{n+2} = \frac{1}{[(n+2-m)/2]!}$$

$$\frac{C_{n+2}}{C_n} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \frac{[(n-m)/2]!}{[(n+2-m)/2]!} = \frac{1}{(n-m+2)/2} \sim \frac{2}{n}$$

به عبارتی دیگر، $u(y)$ در معادله (۷-۳-۱۶) به صورت $y^m e^{y^2}$ بزرگ می‌شود به طوری که $\psi(y) \approx y^m e^{y^2} e^{-y^2/2} \approx y^m e^{+y^2/2}$ خواهد بود. حال وضعیت بد ما معکوس می‌شود: از فهمیدن اینکه هر ε مجاز است، اکنون به این نتیجه می‌رسیم که هیچ ε مجاز نیست. خوشبختانه یک راه خروج وجود دارد. اگر ε یکی از مقادیر خاص

$$\varepsilon_n = \frac{2n+1}{2}, \quad n=0, 1, 2, \dots \quad (۷-۳-۱۸)$$

باشد، ضرایب C_{n+2} (و دیگر ضرایب وابسته به آن) صفر می‌شوند. اگر وقتی n زوج است، $C_1 = 0$ انتخاب شود (یا وقتی n فرد است، $C_0 = 0$) یک چند جمله‌ای متناهی از مرتبه n داریم که معادله دیفرانسیل را برآورده کرده و وقتی $y \rightarrow \infty$ میل می‌کند به صورت y^n رفتار می‌کند:

$$\psi(y) = u(y) e^{-y^2/2} = \left\{ \begin{array}{l} C_0 + C_2 y^2 + C_4 y^4 + \dots + C_n y^n \\ C_1 y + C_3 y^3 + C_5 y^5 + \dots + C_n y^n \end{array} \right\} \cdot e^{-y^2/2} \quad (۷-۳-۱۹)$$

معادله (۷-۳-۱۸) بیان می‌کند که انرژی کوانتیده است: تنها مقادیر مجاز برای $E = \varepsilon \hbar \omega$ (یعنی مقادیری که جواب‌هایی در فضای هیلبرت فیزیکی به دست می‌دهند) عبارتند از

$$E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega, \quad n=0, 1, 2, \dots \quad (۷-۳-۲۰)$$

برای هر مقدار n ، معادله (۷-۳-۱۵) چند جمله‌ای‌های متناظر مرتبه n را مشخص می‌کند که به چند جمله‌ای‌های هرمیت، $H_n(y)$ ، معروفند:

$$\begin{aligned} H_0(y) &= 1 \\ H_1(y) &= 2y \\ H_2(y) &= -2(1 - 2y^2) \\ H_3(y) &= -12(y - \frac{2}{3}y^3) \\ H_4(y) &= 12(1 - 4y^2 + \frac{4}{3}y^4) \end{aligned} \quad (۷-۳-۲۱)$$

ضرایب اولیه دلخواه C_0 و C_1 در H_n طبق یک قرارداد استاندارد انتخاب می‌شوند. در این صورت جواب‌های بهنجار شده به شرح زیرند

$$\begin{aligned} \psi_E(x) &\equiv \psi_{(n+1/2)\hbar\omega}(x) \equiv \psi_n(x) \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar 2^{2n} (n!)^2} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar} \right) H_n \left[\left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/2} x \right] \end{aligned} \quad (۷-۳-۲۲)$$

به دست آوردن ثابت بهنجارش

$$A_n = \left[\frac{m\omega}{\pi \hbar 2^{2n} (n!)^2} \right]^{1/4} \quad (23-3-7)$$

کمی خسته کننده است و به دلیل ارائه روشی کوتاهتر در بخش بعدی در اینجا بحث نخواهد شد. روابط بازگشتی زیر بین چند جمله‌های هرمیت بسیار مفید هستند

$$H'_n(y) = 2nH_{n-1} \quad (24-3-7)$$

$$H_{n+1}(y) = 2yH_n - 2nH_{n-1} \quad (25-3-7)$$

همین طور انتگرال زیر،

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(y)H_m(y) e^{-y^2} dy = \delta_{nm}(\pi^{1/2}2^n n!) \quad (26-3-7)$$

که همان شرط متعامد بودن ویژه توابع $\psi_n(x)$ و $\psi_m(x)$ است که برحسب $y = (m\omega/\hbar)^{1/2}x$ نوشته شده است.

حال می‌توانیم انتشارگر را به صورت

$$U(x, t; x', t') = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) H_n(x) A_n \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x'^2\right) \times H_n(x') \exp[-i(n+1/2)\omega(t-t')] \quad (27-3-7)$$

بنویسیم. محاسبه این جمع کار بسیار پر زحمتی است. در اینجا تلاشی در این زمینه انجام نمی‌دهیم چون در فصل ۸ با استفاده از فرمول‌بندی انتگرال مسیر روش فوق‌العاده ساده‌ای برای محاسبه U ارائه خواهیم کرد. نتیجه جمع به صورت

$$U(x, t; x', t') = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T} \right)^{1/2} \exp \left[\frac{im\omega}{\hbar} \frac{(x^2 + x'^2) \cos \omega T - 2xx'}{2 \sin \omega T} \right] \quad (28-3-7)$$

خواهد شد که $T = t - t'$ است.

در اینجا جواب مسئله ویژه مقداری به سرانجام می‌رسد. قبل از تحلیل نتایج به‌دست آمده، رئوس راهکار خود را ارائه می‌کنیم.

مرحله ۱: متغیرهای بی بعد را در مسئله وارد کنید.

مرحله ۲: رفتار مجانبی ($y \rightarrow 0, \gamma \rightarrow \infty$) را مشخص کنید.

مرحله ۳: ψ را به صورت حاصل ضرب شکل مجانبی و یک تابع نامعلوم u بنویسید.

مرحله ۴: یک سری توانی نوشته و ملاحظه کنید که آیا یک رابطه بازگشتی به شکل معادله (۷-۳-۱۵) به‌دست می‌دهد یا نه.

تمرین ۷-۳-۱: چرا به دنبال جواب سری توانی برای معادله (۷-۳-۱۱) و نه معادله (۷-۳-۸) هستیم؟ با قرار دادن سری در معادله دوم، ثابت کنید که یک رابطه بازگشتی سه جمله‌ای بین C_{n-2} و C_n ، C_{n+2} می‌آید که جواب به این راحتی از آن به دست نمی‌آید. مسئله این است که ψ'' دو توان y کمتر از $2\mathcal{E}\psi$ دارد در حالی که جمله y^2 دو توان بیشتر از y دارد. از طرف دیگر در معادله (۷-۳-۱۱) از سه جمله u'' ، $2yu'$ و $(2\mathcal{E}-1)y$ ، دو تای آخری توان‌های یکسانی از y دارند.

تمرین ۷-۳-۲: ثابت کنید که $H_2(y)$ و $H_4(y)$ از رابطه بازگشتی، معادله (۷-۳-۱۵)، پیروی می‌کنند.
تمرین ۷-۳-۳: اگر با تبدیل $x \rightarrow -x$ ، $\psi(x)$ زوج و $\phi(x)$ فرد باشد، نشان دهید که

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)\phi(x) dx = 0$$

از این مطلب استفاده کرده و نشان دهید که $\psi_1(x)$ و $\psi_2(x)$ متعامند. با استفاده از مقادیر انتگرال‌های گوسی در ضمیمه A-۲ ثابت کنید که $\psi_0(x)$ و $\psi_2(x)$ متعامد هستند.
تمرین ۷-۳-۴: با استفاده از معادلات (۷-۳-۲۳) تا (۷-۳-۲۵) نشان دهید که

$$\langle n'|X|n\rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2} [\delta_{n',n+1}(n+1)^{1/2} + \delta_{n',n-1}n^{1/2}]$$

$$\langle n'|P|n\rangle = \left(\frac{m\omega\hbar}{2}\right)^{1/2} i[\delta_{n',n+1}(n+1)^{1/2} - \delta_{n',n-1}n^{1/2}]$$

تمرین ۷-۳-۵: با استفاده از مباحث تقارنی در تمرین (۷-۳-۳) نشان دهید که $\langle n|X|n\rangle = \langle n|P|n\rangle = 0$ و لذا در این حالت‌ها، $\langle X^2\rangle = (\Delta X)^2$ ، $\langle P^2\rangle = (\Delta P)^2$ است. نشان دهید که $\langle 1|X^2|1\rangle = 3\hbar/2m\omega$ و $\langle 1|P^2|1\rangle = \frac{3}{2}m\omega\hbar$. نشان دهید که $\psi_0(x)$ قید عدم قطعیت $\Delta X \Delta P \geq \frac{\hbar}{2}$ را اشیاع می‌کند.

تمرین ۷-۳-۶: ذره‌ای را در پتانسیل زیر در نظر بگیرید

$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega^2x^2, & x > 0 \\ \infty, & x \leq 0 \end{cases}$$

شرایط مرزی روی توابع موج چه چیزهایی هستند؟ ویژه مقادیر و ویژه توابع را به دست آورید. اکنون ویژه مقادیر و ویژه توابع نوسانگر را مورد بحث قرار می‌دهیم. مهمترین ویژگی‌ها عبارتند از:
 (۱)- انرژی کوانتیده است. برخلاف نوسانگر کلاسیکی که انرژی اش پیوسته است، نوسانگر کوانتومی مجموعه‌ای گسسته از ترازها دارد که با معادله (۷-۳-۲۰) مشخص می‌شوند. توجه کنید که کوانتش فقط بعد از اینکه معادله شرودینگر را با این شرط که ψ باید عنصری از فضای هیلبرت فیزیکی باشد همراه می‌کنیم، ظاهر

می‌شود. در این حالت، این به معنی تحمیل شرط مرزی $0 \rightarrow \psi(x \rightarrow \infty)$ است [نقطه مقابل $\infty \rightarrow \psi(x \rightarrow \infty)$ ، که برای همه مقادیر به جزء مقادیر خاص E به دست آمد].

چرا به نظر می‌رسد که نوسانگر کلاسیکی مقادیر انرژی پیوسته‌ای دارد؟ پاسخ باید به اندازه‌های نسبی گاف انرژی و انرژی کل نوسانگر کلاسیکی مربوط باشد. برای مثال جسمی به جرم $2g$ را در نظر بگیرید که با فرکانس 1 rad/sec و دامنه 1 cm نوسان می‌کند. انرژی آن برابر است با

$$E = \frac{1}{2} m \omega^2 x_0^2 = 1 \text{ erg}$$

این مقدار را با گاف بین انرژی‌های مجاز مقایسه کنید:

$$\Delta E = \hbar \omega \simeq 10^{-27} \text{ erg}$$

در سطح ماکروسکوپی، تمایز بین سیستمی که انرژی‌اش پیوسته است و سیستمی که ترازهای مجاز انرژی‌اش به فاصله 10^{-27} erg از هم قرار دارند، عملاً غیر ممکن است. به بیانی دیگر، عدد کوانتومی مربوط به این نوسانگر برابر است با

$$n = \frac{E}{\hbar \omega} - \frac{1}{2} \simeq 10^{27}$$

در حالی که تفاوت در n بین ترازهای مجاور، یک است. در اینجا حالت خاصی از اصل تناظر را داریم که بیان می‌کند که وقتی عدد کوانتومی به بی‌نهایت میل می‌کند، مجدداً تصویر کلاسیکی را به دست می‌آوریم (می‌دانیم که وقتی سیستم بزرگ است می‌تواند به صورت کلاسیکی توصیف شود. اصل تناظر بیان می‌کند که عدد کوانتومی معیار خوبی از بزرگی سیستم است).

(۲) - ترازها با فواصل یکسان از هم قرار دارند. اینکه ترازهای انرژی نوسانگر با گام‌های $\hbar \omega$ از هم فاصله دارند اجازه می‌دهد که تصویر زیر در ذهن تداعی شود. ما ادعا کردیم که وابسته به یک نوسانگر با فرکانس کلاسیکی ω ، ذراتی ساختگی به نام کوانتوم وجود دارند که هر یک دارای انرژی $\hbar \omega$ هستند. بخش $n \hbar \omega$ را در فرمول انرژی معادله (۷-۳-۲۰) به عنوان انرژی n عدد از این کوانتوم‌ها در نظر می‌گیریم. به عبارت دیگر، جرم و فنر را فراموش کرده و به کوانتوم‌ها می‌اندیشیم. وقتی عدد کوانتومی n به اندازه Δn زیاد شود (یا کم شود) می‌گوییم Δn کوانتوم خلق (یا نابود) شده است. اگر چه مطلب مذکور، موضوعی مفهومی به نظر می‌رسد اما ثابت شده است که صحبت کردن در مورد نوسانگر به زبان این کوانتوم‌ها بسیار مفید است.

در مورد بلور، $3N_0$ نوسانگر وجود دارد که با مقدار (\mathbf{k}, λ) برچسب زده شده و دارای فرکانس‌های $\omega(\mathbf{k}, \lambda)$ هستند. حالت کوانتومی بلور با مشخص شدن تعداد کوانتوم‌ها، معروف به فونون‌ها، در هر (\mathbf{k}, λ) ، مشخص می‌شود. برای بلوری که هامیلتونی‌اش دقیقاً از جمع جملات نوسانگر به دست می‌آید وارد کردن مفهوم فونون واقعاً کاری غیر ضروری است. اما اگر وضعیتی غیر از این، مثلاً در نظر گرفتن جملات غیر پیشرو در بسط تیلور پتانسیل یا برهم‌کنش بین بلور و یک کاوشگر خارجی نظیر الکترون شلیک شده در آن، را در نظر بگیریم، مفهوم فونون بسیار مفید ظاهر می‌شود (دو اثر مذکور می‌توانند به ترتیب برهم‌کنش فونون - فونون و فونون - الکترون در نظر گرفته شوند).

همین طور، برهم کنش میدان الکترومغناطیسی با ماده می تواند به صورت برهم کنش بین کوانتوم های نور یا فوتون ها و ماده تلقی شود که در فصل ۱۸ بحث خواهد شد.

(۳) - پایین ترین انرژی ممکن به جای 0 ، $\hbar\omega/2$ است. برخلاف نوسانگر کلاسیکی که می تواند در حالت انرژی صفر باشد (با $x = p = 0$)، نوسانگر کوانتومی دارای انرژی کمینه $\hbar\omega/2$ است. این انرژی، که انرژی نقطه - صفر نامیده می شود، بازتابی از این حقیقت است که ویژه حالت همزمان $(x = 0, p = 0)$ طبق رابطه جابه جایی کانونیک $[X, P] = i\hbar$ امکان پذیر نمی باشد. این نتیجه برای همه نوسانگرها مشترک است، چه یک دستگاه مکانیکی را توصیف کنند و چه مد بهنجار میدان الکترومغناطیسی را، چون تمام این مسائل از نظر ریاضی یکسانند و فقط در آنچه که مختصه و اندازه حرکت مزدوجش نمایش می دهند، با هم فرق دارند. بنابراین بلور در هر مد (\mathbf{k}, λ) دارای انرژی $\frac{1}{2}\hbar\omega(\mathbf{k}, \lambda)$ است حتی وقتی فونون ها حضور ندارند، و میدان الکترومغناطیسی در هر مد با فرکانس ω دارای انرژی $\frac{1}{2}\hbar\omega(\mathbf{k}, \lambda)$ است حتی وقتی فوتون ها حضور ندارند [افت و خیز نقطه - صفر میدان دارای نتایج قابل اندازه گیری است که در فصل ۱۸ بحث خواهند شد].

در ادامه بحث، خود را به نوسانگر مکانیکی محدود کرده و با دقت بیشتر انرژی نقطه - صفر را بررسی می کنیم. دیدیم که این نبودن حالت $(x = 0, p = 0)$ است که مسئول این انرژی است. چنین حالتی، با $\Delta X = \Delta P = 0$ ، به وسیله اصل عدم قطعیت ممنوع می شود. بنابراین تلاش می کنیم تا حالتی را بیابیم که از نظر کوانتوم مکانیکی مجاز بوده و از نظر انرژی تا حد ممکن به حالت کلاسیکی $x = p = 0$ نزدیک است. اگر یک تابع موج $\psi(x)$ انتخاب کنیم که نزدیک $x = 0$ کاملاً تیز است تا انرژی پتانسیل متوسط $\langle \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 \rangle$ را کمینه کند، تابع موج در فضای P پهن می شود و انرژی جنبشی متوسط $\langle P^2/2m \rangle$ زیاد می شود. عکس مطلب در صورتی اتفاق می افتد که یک تابع موج فضای تکانه که نزدیک $P = 0$ کاملاً تیز است انتخاب کنیم. اکنون جستجوی خود را برای $\psi_{\min}(x)$ آغاز می کنیم. با حالت آزمایشی بهنجار شده $|\psi\rangle$ شروع می کنیم و ملاحظه می کنیم که

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \langle H \rangle = \frac{\langle P^2 \rangle}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle X^2 \rangle \quad (۲۹-۳-۷)$$

حال

$$(\Delta P)^2 = \langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2 \quad (۳۰-۳-۷)$$

و

$$(\Delta X)^2 = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2 \quad (۳۱-۳-۷)$$

به طوری که

$$\langle H \rangle = \frac{(\Delta P)^2 + \langle P \rangle^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 [(\Delta X)^2 + \langle X \rangle^2] \quad (۳۲-۳-۷)$$

گام اول در کمینه کردن $\langle H \rangle$ ، محدود کردن خودمان به حالت‌هایی با $\langle X \rangle = \langle P \rangle = 0$ است (چون $\langle X \rangle$ و $\langle P \rangle$ از یکدیگر و از $(\Delta X)^2$ و $(\Delta P)^2$ مستقل‌اند، چنین انتخابی همیشه امکان‌پذیر است). برای این حالت‌ها (که باید از آنها مناسبترین را انتخاب کنیم)،

$$\langle H \rangle = \frac{(\Delta P)^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 (\Delta X)^2 \quad (۳۳-۳-۷)$$

اکنون از رابطه عدم قطعیت

$$\Delta X \cdot \Delta P \geq \hbar/2 \quad (۳۴-۳-۷)$$

استفاده می‌کنیم که علامت تساوی همان‌طور که در بخش ۹-۳ نشان داده خواهد شد فقط برای گوسین برقرار است. نتیجه اینکه

$$\langle H \rangle \geq \frac{\hbar^2}{8m(\Delta X)^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 (\Delta X)^2 \quad (۳۵-۳-۷)$$

$\langle H \rangle$ را با انتخاب یک تابع موج گوسی (گوسین) کمینه می‌کنیم که برای آن،

$$\langle H \rangle_{\text{Gaussian}} = \frac{\hbar^2}{8m(\Delta X)^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 (\Delta X)^2 \quad (۳۶-۳-۷)$$

است. آنچه یافته‌ایم این است که متوسط انرژی مربوط به تابع موج آزمایشی فقط به ΔX متناظر حساس است و اینکه از بین همه توابع دارای ΔX یکسان، گوسین پایین‌ترین انرژی را دارد. سرانجام از بین خانواده گوسین‌ها، آن گوسینی را انتخاب می‌کنیم که با ΔX خود، $\langle H \rangle_{\text{Gaussian}}$ را کمینه می‌کند. با شرط

$$\frac{\partial \langle H \rangle_{\text{Gaussian}}}{\partial (\Delta X)^2} = 0 = \frac{-\hbar^2}{8m(\Delta X)^4} + \frac{1}{2} m\omega^2 \quad (۳۷-۳-۷)$$

نتیجه می‌شود که

$$(\Delta X)^2 = \hbar/2m\omega \quad (۳۸-۳-۷)$$

و

$$\langle H \rangle_{\text{min}} = \hbar\omega/2 \quad (۳۹-۳-۷)$$

بنابراین با جستجوی اصولی در فضای هیلبرت، به این نتیجه رسیده‌ایم که تابع بهنجار شده زیر دارای پایین‌ترین انرژی متوسط است:

$$\psi_{\text{min}}(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right), \quad \langle H \rangle_{\text{min}} = \frac{\hbar\omega}{2} \quad (۴۰-۳-۷)$$

اگر نتیجه بالا را به کار ببریم،

$$\langle \psi_{\min} | H | \psi_{\min} \rangle \leq \langle \psi | H | \psi \rangle \quad (\text{for all } |\psi\rangle)$$

برای بردار حالت پایه $|\psi\rangle = |\psi_0\rangle$ ، نتیجه می‌گیریم که

$$\langle \psi_{\min} | H | \psi_{\min} \rangle \leq \langle \psi_0 | H | \psi_0 \rangle = E_0 \quad (۴۱-۳-۷)$$

اکنون این نتیجه را با نتیجه تمرین ۵-۲-۲ مقایسه کنید:

$$E_0 = \langle \psi_0 | H | \psi_0 \rangle \leq \langle \psi | H | \psi \rangle \quad \text{for all } |\psi\rangle$$

اگر $|\psi\rangle = |\psi_{\min}\rangle$ قرار دهیم،

$$E_0 = \langle \psi_0 | H | \psi_0 \rangle \leq \langle \psi_{\min} | H | \psi_{\min} \rangle \quad (۴۲-۳-۷)$$

از معادله (۴۱-۳-۷) و (۴۲-۳-۷) نتیجه می‌شود که

$$E_0 = \langle \psi_0 | H | \psi_0 \rangle = \langle \psi_{\min} | H | \psi_{\min} \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} \quad (۴۳-۳-۷)$$

همچنین چون فقط یک حالت $|\psi_{\min}\rangle$ با انرژی $\hbar\omega/2$ وجود داشت، نتیجه می‌شود که

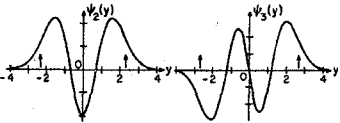
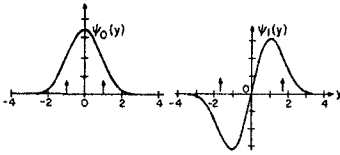
$$|\psi_0\rangle = |\psi_{\min}\rangle \quad (۴۴-۳-۷)$$

اگر در اینجا تأکید نمی‌شد که رابطه عدم قطعیت به شکلی فوق‌العاده در مبحث بالا موفقیت‌آمیز بوده است، از نظر آموزشی غفلت بزرگی را مرتکب می‌شدیم. توانایی ما در اینجا برای به‌دست آوردن همه اطلاعات در مورد حالت پایه با استفاده از رابطه عدم قطعیت نتیجه‌ای از شکل خاص هامیلتونی نوسانگر (که اجازه داد $\langle H \rangle$ را برحسب $(\Delta X)^2$ و $(\Delta P)^2$ بنویسیم) و این حقیقت است که تابع موج حالت پایه آن یک گوسین است (که نقش مقدمی نسبت به رابطه عدم قطعیت دارد). در بیشتر نمونه‌های نوعی، استفاده از رابطه عدم قطعیت بالا جبار با کمی کار دستی همراه بوده [قبل از اینکه $\langle H \rangle$ بتواند به وسیله تابعی از $(\Delta X)^2$ و $(\Delta P)^2$ تقریب زده شود] و سپس فقط تخمینی برای انرژی حالت پایه به‌دست خواهد داد. چنانکه برای تابع موج، فقط می‌توانیم به تخمینی برای ΔX ، پهن شدگی مربوط به آن، دست یابیم.

(۴) - جواب‌های $\psi_n(x)$ (شکل ۷-۱) فقط شامل توان‌های زوج یا فرد x هستند بسته به اینکه n زوج یا فرد باشد. در نتیجه ویژه توابع، زوج یا فردند:

$$\begin{aligned} \psi_n(-x) &= \psi_n(x), & n \text{ even} \\ &= -\psi_n(x), & n \text{ odd} \end{aligned}$$

در فصل ۱۱ که در مورد تقارن هاست نشان داده خواهد شد که ویژه توابع باید این ویژگی را داشته باشند.



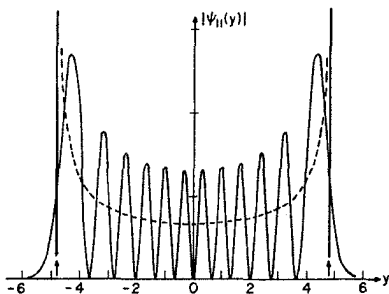
شکل ۷-۱: ویژه توابع بهنجار شده برای $n = 0, 1, 2, 3$
 فلش‌های کوچک در $|y| = (2n + 1)$ نشان‌دهنده نقاط بازگشت کلاسیکی هستند. یادآوری می‌شود که $y = (m\omega/\hbar)^{1/2}x$

(۵) - تابع موج، فراتر از نقاط بازگشت کلاسیکی صفر نمی‌شود بلکه با میل $x \rightarrow \infty$ به صورت نمایی به سمت صفر می‌رود [تحقیق کنید که نقاط بازگشت کلاسیکی از $y_0 = \pm(2n + 1)^{1/2}$ به دست می‌آیند]. اما توجه کنید که وقتی n بزرگ است (شکل ۷-۲) سیر در خارج از نقاط بازگشت، در مقایسه با دامنه کلاسیکی کوچک هستند. این دامنه میرای نمایی در ناحیه‌ای که از نظر کلاسیکی ممنوع است، در فصل ۵ هنگام مطالعه تونل‌زنی مشاهده شد.

(۶) - توزیع احتمال $P(X)$ از مورد کلاسیکی بسیار متفاوت است. مکان یک نوسانگر کلاسیکی معین البته دقیقاً معلوم است. اما می‌توانیم سوال زیر را مطرح کنیم. اگر به‌طور ناگهانی وارد اتاقی که دارای نوسانگر است شویم، احتمال دارد کجا آن را ببینیم؟ اگر سرعت در نقطه x ، $v(x)$ باشد، زمانی که نوسانگر نزدیک x سپری می‌کند و در نتیجه احتمال یافتن آن در آنجا در طول یک بررسی موضعی^۱ تصادفی به صورت عکس با $v(x)$ تغییر می‌کند:

$$P_{cl}(x) \propto \frac{1}{v(x)} = \frac{1}{\omega(x_0^2 - x^2)^{1/2}} \quad (۷-۳-۴۵)$$

که در نزدیکی $\pm x_0$ تیز شده و در مبداء دارای کمینه است. در حالت کوانتومی، بویژه برای حالت پایه، به نظر می‌رسد $|\psi(x)|^2$ به شکل دیگری تغییر کند (شکل ۷-۱). در اینجا هیچ تناقضی وجود ندارد چون انتظار می‌رود که مکانیک کوانتومی متفاوت از مکانیک کلاسیک باشد. اما اصل تناظر بیان می‌کند که برای n بزرگ، این دو باید غیرقابل تمییز شوند. از شکل ۷-۲ که وضعیت‌ها را در $n = 11$ نشان می‌دهد، می‌توانیم ببینیم که چطور حد کلاسیکی حاصل می‌شود: توزیع کوانتومی $P(x) = |\psi(x)|^2$ چنان تغییرات سریعی دارد (در مقیاسی تنظیم شده با دامنه کلاسیکی) که فقط متوسط آن می‌تواند در این مقیاس‌ها آشکارسازی شود و این با $P_{cl}(x)$ در توافق است. در اینجا آزمایش دو شکافی انجام شده با ذرات ماکروسکوپی را یادآور می‌شویم: یک نقش تداخلی فشرده‌ای وجود دارد که در عمل متوسط آن اندازه‌گیری می‌شود و با منحنی احتمال کلاسیکی در توافق است.



شکل ۷-۲: چگالی احتمال در حالت $n=11$. منحنی منقطع توزیع احتمال کلاسیکی را در حالی با همان انرژی نشان می‌دهد.

نکته‌ای که در فصل ۶ به وفور به آن اشاره شد عبارت بود از اینکه: نوسانگر کلاسیکی که اغلب به آن اشاره می‌کنیم یک موجود خیالی قرار گرفته در تصور ماست و وجود خارجی ندارد. به عبارتی دیگر، همه نوسانگرها، شامل دستگاه جرم $(2g)$ و فنر که نهایتاً تابع قوانین مکانیک کوانتومی بوده و بنابراین دارای انرژی‌های گسسته هستند می‌توانند از نقاط بازگشت «کلاسیکی» گذشته و انرژی نقطه - صفر $\frac{1}{2}\hbar\omega$ داشته باشند حتی وقتی در حالت سکون باشند. اما توجه کنید که آنچه که می‌گوییم موجود نیست نوسانگری است که واقعاً خواص نسبت داده شده به آن در مکانیک کلاسیک را دارد، نه نوسانگری که به نظر می‌رسد وقتی در سطح ماکروسکوپی بررسی شود آن خواص را داشته باشد.

تمرین ۷-۳-۷: نوسانگر در فضای اندازه حرکت. با نوشتن معادله ویژه مقاداری برای نوسانگر در پایه P و مقایسه آن با معادله $(۷-۳-۷)$ نشان دهید که ویژه توابع فضای اندازه حرکت می‌توانند از ویژه توابع فضای مختصه با جانشینی $x \rightarrow p$ و $m\omega \rightarrow 1/m\omega$ به دست آیند. بنابراین برای مثال،

$$\psi_0(p) = \left(\frac{1}{m\pi\hbar\omega} \right)^{1/4} e^{-p^2/2m\hbar\omega}$$

چند زوج دیگر، نظیر ΔX و ΔP در حالت $|n\rangle$ ، وجود دارند که با جانشینی $m\omega \rightarrow 1/m\omega$ به هم مرتبط می‌شوند (به تمرین ۷-۳-۵ مراجعه کنید).

۷-۴- نوسانگر در پایه انرژی

با یادآوری اینکه چطور معادله ویژه مقاداری

$$\left(\frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2 \right) |E\rangle = E |E\rangle \quad (۷-۴-۱)$$

در پایه مختصه حل شد شروع می‌کنیم: ۱- ابتدا به جای $x \rightarrow X$ و به جای $-i\hbar d/dx \rightarrow P$ قرار دادیم. ۲- معادله را برای مولفه‌های $\langle x | E \rangle = \psi_E(x)$ و ویژه مقادیر حل کردیم. برای حل مسئله در پایه اندازه حرکت، ابتدا عملگرهای x و p را در این پایه، با مشخص بودن شکل آنها در پایه مختصه، محاسبه می‌کنیم. برای مثال،

$$\begin{aligned} \langle p'|X|p\rangle &= \iint \frac{\langle p'|x\rangle}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \frac{\langle x|X|x'\rangle}{x\delta(x-x')} \frac{\langle x'|p\rangle}{(2\pi\hbar)^{1/2}} dx dx' \\ &= -i\hbar\delta'(p-p') \end{aligned}$$

سپس P و $H(X, P)$ را در این پایه به دست می آوریم. آنگاه معادله ویژه مقدری، (۷-۴-۱)، معادله دیفرانسیلی خواهد بود که در پی حل آن هستیم.

اکنون فرض کنید که بخواهیم در پایه انرژی کار کنیم. ابتدا باید ویژه توابع H ، یعنی $\langle x|E\rangle$ ، را بیابیم به طوری که بتوانیم پایه را تغییر دهیم. اما یافتن $\langle x|E\rangle = \psi_E(x)$ به حل مسئله ویژه مقدری کامل در پایه مختصه سر می زند. همین که این کار را انجام دهیم، نکته دیگری در نوشتن مسئله در پایه انرژی باقی نمی ماند. اما روش هوشمندانه ای مربوط به دیراک وجود دارد که اجازه می دهد بدون اینکه مجبور باشیم از قبل عملگرهای X و P را در این پایه بدانیم در پایه انرژی کار کنیم. کل چیزی که نیاز داریم رابطه جابه جایی

$$[X, P] = i\hbar I = i\hbar \quad (۷-۴-۲)$$

است که از $X \rightarrow x$ و $P \rightarrow -i\hbar d/dx$ به دست می آید، اما مستقل از پایه است. چند مرحله بعدی کمی مبهم به نظر خواهد رسید و به هیچیک از روش های آشنای بحث شده در گذشته منطبق نخواهد بود. ابتدا عملگر

$$a = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2} X + i\left(\frac{1}{2m\omega\hbar}\right)^{1/2} P \quad (۷-۴-۳)$$

و الحاقی آن

$$a^\dagger = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2} X - i\left(\frac{1}{2m\omega\hbar}\right)^{1/2} P \quad (۷-۴-۴)$$

را معرفی می کنیم (توجه کنید که وقتی $X \leftrightarrow P$ ، $m\omega \rightarrow 1/m\omega$). آنها رابطه جابه جایی

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad (۷-۴-۵)$$

را بر آورده می کنند (اثبات کنید). سپس توجه کنید که عملگر هرمیتی $a^\dagger a$ فقط به H وابسته است:

$$\begin{aligned} a^\dagger a &= \frac{m\omega}{2\hbar} X^2 + \frac{1}{2m\omega\hbar} P^2 + \frac{i}{2\hbar} [X, P] \\ &= \frac{H}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \end{aligned}$$

به طوری که

$$H = (a^\dagger a + 1/2)\hbar\omega \quad (6-4-7)$$

[این روش اغلب «روش تجزیه به سازه‌ها»^۱ نامیده می‌شود چون $H = P^2 + X^2$ را (با نادیده گرفتن ثابت‌ها) به صورت حاصل ضرب $(X + iP) = a$ و $(X - iP) = a^\dagger$ می‌نویسیم. $\hbar\omega/2$ اضافی در معادله (۶-۴-۷) از ماهیت غیر جابه‌جا شوندگی X و P حاصل می‌شود].
عملگر \hat{H} را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$\hat{H} = \frac{H}{\hbar\omega} = (a^\dagger a + 1/2) \quad (7-4-7)$$

که ویژه مقادیر آن، ε ، انرژی را برحسب $\hbar\omega$ مشخص می‌کنند. می‌خواهیم معادله ویژه مقادیری را برای \hat{H} حل کنیم:

$$\hat{H}|\varepsilon\rangle = \varepsilon|\varepsilon\rangle \quad (8-4-7)$$

که ε انرژی اندازه‌گیری شده در واحد $\hbar\omega$ است. دو رابطه‌ای که به زودی از آنها استفاده خواهیم کرد عبارتند از:

$$[a, \hat{H}] = [a, a^\dagger a + 1/2] = [a, a^\dagger a] = a \quad (9-4-7)$$

و

$$[a^\dagger, \hat{H}] = -a^\dagger \quad (10-4-7)$$

مزیت a و a^\dagger به این مربوط می‌شود که با معلوم بودن یک ویژه حالت از \hat{H} ، آنها بقیه را تولید می‌کنند. ملاحظه می‌شود که

$$\begin{aligned} \hat{H}a|\varepsilon\rangle &= (a\hat{H} - [a, \hat{H}]|\varepsilon\rangle) \\ &= (a\hat{H} - a)|\varepsilon\rangle \\ &= (\varepsilon - 1)a|\varepsilon\rangle \end{aligned} \quad (11-4-7)$$

از معادله (۱۱-۴-۷) استنباط می‌کنیم که $a|\varepsilon\rangle$ ویژه حالتی با ویژه مقدار $\varepsilon - 1$ است، یعنی

$$a|\varepsilon\rangle = C_\varepsilon|\varepsilon - 1\rangle \quad (12-4-7)$$

که C_ε یک ثابت و $|\varepsilon - 1\rangle$ و $|\varepsilon\rangle$ ویژه کت‌های بهنجار شده هستند.^۲
به‌طور مشابه می‌بینیم که

$$\begin{aligned} \hat{H}a^\dagger|\varepsilon\rangle &= (a^\dagger\hat{H} - [a^\dagger, H])|\varepsilon\rangle \\ &= (a^\dagger\hat{H} + a^\dagger)|\varepsilon\rangle \\ &= (\varepsilon+1)a^\dagger|\varepsilon\rangle \end{aligned} \tag{۱۳-۴-۷}$$

به طوری که

$$a^\dagger|\varepsilon\rangle = C_{\varepsilon+1}|\varepsilon+1\rangle \tag{۱۴-۴-۷}$$

a و a^\dagger عملگرهای پایین برنده و بالا برنده هم نامیده می شوند که دلیلش مشخص است. آنها همچنین عملگرهای نابودی و خلق هم نامیده می شوند چون کوانتوم های انرژی $\hbar\omega$ را نابود یا خلق می کنند. پس به این نتیجه می رسیم که اگر ε ویژه مقداری از \hat{H} باشد، $\varepsilon+1$ ، $\varepsilon+2$ ، $\varepsilon+3$ و ... و $\varepsilon+00$ و $\varepsilon-1$ ، $\varepsilon-2$ و ... و $\varepsilon-00$ ، هم ویژه مقادیر آن هستند. نتیجه گیری اخیر مغایر با این نتیجه است که ویژه مقادیر H غیر منفی اند. بنابراین باید زنجیر پایین در یک نقطه قطع شود: باید یک حالت $|\varepsilon_0\rangle$ موجود باشد که نتواند بیشتر پایین آورده شود:

$$a|\varepsilon_0\rangle = 0 \tag{۱۵-۴-۷}$$

با تاثیر a^\dagger خواهیم داشت:

$$a^\dagger a|\varepsilon_0\rangle = 0$$

یا

$$(\hat{H} - 1/2)|\varepsilon_0\rangle = 0 \quad [\text{از معادله (۷-۴-۷)}]$$

یا

$$\hat{H}|\varepsilon_0\rangle = \frac{1}{2}|\varepsilon_0\rangle$$

یا

$$\varepsilon_0 = \frac{1}{2} \tag{۱۶-۴-۷}$$

اما حالت $|\varepsilon_0\rangle$ را می توانیم با تکرار کاربرد a^\dagger به شکلی نامحدود بالا ببریم. بنابراین نتیجه می شود که نوسانگر دارای یک رشته از ترازها است:

$$\varepsilon_n = (n+1/2), \quad n=0, 1, 2, \dots$$

یا

$$E_n = (n+1/2)\hbar\omega, \quad n=0, 1, 2, \dots \tag{۱۷-۴-۷}$$

آیا اینها تنها ترازهای ممکن هستند؟ اگر گروه دیگری موجود باشد باید دارای حالت پایه $|\varepsilon'_0\rangle$ باشد به طوری که

$$a|\varepsilon'_0\rangle = 0$$

یا

$$a^\dagger a|\varepsilon'_0\rangle = 0$$

یا

$$\hat{H}|\varepsilon'_0\rangle = \frac{1}{2}|\varepsilon'_0\rangle \quad (18-4-7)$$

اما می‌دانیم که در یک بعد تهگنی وجود ندارد (قضیه ۱۵). در نتیجه از معادلات (۷-۴-۱۶) و (۷-۴-۱۸) نتیجه می‌شود که $|\varepsilon_0\rangle$ و $|\varepsilon'_0\rangle$ یک حالت را نشان می‌دهند. این مطلب در مورد خانواده‌های حالت‌هایی که از $|\varepsilon_0\rangle$ و $|\varepsilon'_0\rangle$ ، با تأثیر مکرر a^\dagger ، ساخته می‌شوند، درست است.

اکنون ثابت‌های C_e و C_{e+1} ظاهر شده در معادلات (۷-۴-۱۲) و (۷-۴-۱۴) را محاسبه می‌کنیم. از آنجا که $\varepsilon = n + 1/2$ است، کت‌ها را با عدد صحیح n برچسب می‌زنیم. می‌خواهیم ثابت C_n ظاهر شده در معادله

$$a|n\rangle = C_n|n-1\rangle \quad (7-4-19 \text{ الف})$$

را تعیین کنیم. الحاقی این معادله را در نظر بگیرید،

$$\langle n|a^\dagger = \langle n-1|C_n^* \quad (7-4-19 \text{ ب})$$

با ترکیب این معادلات به نتایج زیر می‌رسیم

$$\begin{aligned} \langle n|a^\dagger a|n\rangle &= \langle n-1|n-1\rangle C_n^* C_n \\ \langle n|\hat{H} - \frac{1}{2}|n\rangle &= C_n^* C_n \quad (\text{چون } |n-1\rangle \text{ بهنجار است}) \\ \langle n|n\rangle &= |C_n|^2 \quad (\text{چون } |\hat{H}|n\rangle = (n+1/2)|n\rangle) \end{aligned} \quad (20-4-7)$$

$$|C_n|^2 = n$$

$$C_n = (n)^{1/2} e^{i\phi} \quad (\phi \text{ دلخواه است})$$

به‌طور قرار دادی ϕ را صفر انتخاب می‌کنیم. بنابراین داریم:

$$a|n\rangle = n^{1/2}|n-1\rangle \quad (21-4-7)$$

مشابه‌ها می‌توانید نشان دهید که

$$a^\dagger|n\rangle = (n+1)^{1/2}|n+1\rangle \quad (22-4-7)$$

[توجه کنید که در معادلات (۲۱-۴-۷) و (۲۲-۴-۷)، n بزرگتر بر حسب زنده دو کت، زیر رادیکال ظاهر می‌شود.] با ترکیب این دو معادله،

$$a^\dagger a|n\rangle = a^\dagger n^{1/2}|n-1\rangle = n^{1/2}n^{1/2}|n\rangle = n|n\rangle \quad (۲۳-۴-۷)$$

بر حسب

$$N = a^\dagger a \quad (۲۴-۴-۷)$$

معروف به عملگر تعداد (چون کوانتوم‌ها را می‌شمارد)،

$$\hat{H} = N + \frac{1}{2} \quad (۲۵-۴-۷)$$

معادلات (۲۱-۴-۷) و (۲۲-۴-۷) بسیار مهم‌اند. آنها این امکان را به ما می‌دهند که عناصر ماتریسی همه عملگرها را در پایه $|n\rangle$ محاسبه کنیم. ابتدا خود a و a^\dagger را در نظر بگیرید:

$$\langle n'|a|n\rangle = n^{1/2}\langle n'|n-1\rangle = n^{1/2}\delta_{n',n-1} \quad (۲۶-۴-۷)$$

$$\langle n'|a^\dagger|n\rangle = (n+1)^{1/2}\langle n'|n+1\rangle = (n+1)^{1/2}\delta_{n',n+1} \quad (۲۷-۴-۷)$$

برای یافتن عناصر ماتریسی X و P ، معادلات (۳-۴-۷) و (۴-۴-۷) را معکوس می‌کنیم تا X و P به دست آیند

$$X = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2} (a + a^\dagger) \quad (۲۸-۴-۷)$$

$$P = i\left(\frac{m\omega\hbar}{2}\right)^{1/2} (a^\dagger - a) \quad (۲۹-۴-۷)$$

سپس از معادلات (۲۶-۴-۷) و (۲۷-۴-۷) استفاده می‌کنیم. جزئیات را به عنوان تمرین رها می‌کنیم. دو ماتریس اصلی در این پایه انرژی عبارتند از

$$a^\dagger \leftrightarrow \begin{matrix} & n=0 & n=1 & n=2 & \dots \\ n=0 & \left[\begin{array}{cccc} 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1^{1/2} & 0 & 0 & \\ 0 & 2^{1/2} & 0 & \\ 0 & 0 & 3^{1/2} & \\ \vdots & & & \end{array} \right. & \end{matrix} \quad (۳۰-۴-۷)$$

و الحاقی آن،

$$a \leftrightarrow \begin{bmatrix} 0 & 1^{1/2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2^{1/2} & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 3^{1/2} & \\ \vdots & & & & \end{bmatrix} \quad (۳۱-۴-۷)$$

هر دو ماتریس می‌توانند یا از معادلات (۲۶-۴-۷) و (۲۷-۴-۷) یا معادلات (۲۱-۴-۷) و (۲۲-۴-۷) به همراه نکتهٔ مربوط به تصاویر بردارهای تبدیل یافته $a^\dagger|n\rangle$ و $a|n\rangle$ ساخته شوند. با برگشتن به معادلات (۲۸-۴-۷) و (۲۹-۴-۷) به نمایش‌های ماتریسی X و P می‌رسیم:

$$X \leftrightarrow \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2} \begin{bmatrix} 0 & 1^{1/2} & 0 & 0 & \dots \\ 1^{1/2} & 0 & 2^{1/2} & 0 & \\ 0 & 2^{1/2} & 0 & 3^{1/2} & \\ 0 & 0 & 3^{1/2} & 0 & \\ \vdots & & & & \end{bmatrix} \quad (۳۲-۴-۷)$$

$$P \leftrightarrow i\left(\frac{m\omega\hbar}{2}\right)^{1/2} \begin{bmatrix} 0 & -1^{1/2} & 0 & 0 & \dots \\ 1^{1/2} & 0 & -2^{1/2} & 0 & \\ 0 & 2^{1/2} & 0 & -3^{1/2} & \\ 0 & 0 & 3^{1/2} & 0 & \\ \vdots & & & & \end{bmatrix} \quad (۳۳-۴-۷)$$

همیلتونی در پایه خودش قطریست:

$$H \leftrightarrow \hbar\omega \begin{bmatrix} 1/2 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 3/2 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 5/2 & & \\ \vdots & & & & \end{bmatrix} \quad (۳۴-۴-۷)$$

معادله (۲۲-۴-۷) هم امکان می‌دهد تا همه ویژه بردارهای بهنجار شده $|n\rangle$ را برحسب حالت پایه $|0\rangle$ بنویسیم:

$$|n\rangle = \frac{a^\dagger}{n^{1/2}} |n-1\rangle = \frac{a^\dagger}{n^{1/2}} \frac{a^\dagger}{(n-1)^{1/2}} |n-2\rangle \dots = \frac{(a^\dagger)^n}{(n!)^{1/2}} |0\rangle \quad (۳۵-۴-۷)$$

عملگرهای a و a^\dagger محاسبه عناصر ماتریسی عملگرهای دیگر را بین ویژه حالت‌های نوسانگر بسیار آسان می‌کنند. برای مثال $\langle 3|X^2|2\rangle$ را در نظر بگیرید. در پایه X مجبور به محاسبه انتگرال زیر هستیم:

$$\langle 3|X^3|2\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \left(\frac{1}{2^3 3!} \cdot \frac{1}{2^2 2!}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) \right. \\ \left. \times H_3\left[\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x\right] x^3 \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) H_2\left[\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x\right] \right\} dx$$

در حالی که در پایه $|n\rangle$ ،

$$\langle 3|X^3|2\rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2} \langle 3|(a+a^\dagger)^3|2\rangle \\ = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2} \langle 3|(a^3 + a^2 a^\dagger + a a^\dagger a + a a^\dagger a^\dagger \\ + a^\dagger a a + a^\dagger a a^\dagger + a^\dagger a^\dagger a + a^\dagger a^\dagger a^\dagger)|2\rangle$$

چون a ، n را به اندازه یک واحد پایین آورده و a^\dagger آنرا یک واحد بالا می‌برد و می‌خواهیم به اندازه یک واحد از $n=2$ به $n=3$ بالا برویم ، تنها سهم غیر صفر از $a^\dagger a^\dagger a$ ، $aa^\dagger a^\dagger$ و $a^\dagger a a^\dagger$ ناشی می‌شود. حال

$$a^\dagger a^\dagger a|2\rangle = 2^{1/2} a^\dagger a^\dagger |1\rangle = 2^{1/2} 2^{1/2} a^\dagger |2\rangle = 2^{1/2} 2^{1/2} 3^{1/2} |3\rangle$$

$$aa^\dagger a^\dagger |2\rangle = 3^{1/2} aa^\dagger |3\rangle = 3^{1/2} 4^{1/2} a|4\rangle = 3^{1/2} 4^{1/2} 4^{1/2} |3\rangle$$

$$a^\dagger aa^\dagger |2\rangle = 3^{1/2} a^\dagger a|3\rangle = 3^{1/2} N|3\rangle = 3^{1/2} 3|3\rangle$$

به‌طوری که

$$\langle 3|X^3|2\rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2} [2(3^{1/2}) + 4(3^{1/2}) + 3(3^{1/2})]$$

اگر نه یک عنصر ماتریسی از X ، بلکه احتمال یافتن ذره در $|n\rangle$ در مکان x را بخواهیم چطور؟ می‌توانیم به اصل موضوع (۳) برگردیم که بیان می‌کند ویژه بردارهای $|x\rangle$ ماتریس X را به‌دست آورده [معادله (۷-۴۲)] و ضرب داخلی $\langle x|n\rangle$ را محاسبه کنید. در بخش بعد روش عملی تری را ارائه خواهیم کرد.

یک ویژگی قابل توجه در مورد جواب فوق برای مسئله ویژه مقداری H وجود دارد. معمولاً ما در پایه X کار می‌کنیم و مسئله ویژه مقداری را با توسل به اصل موضوع (۲) ، که اثر X و P را در پایه X ($X \rightarrow x$ ، $P \rightarrow -i\hbar d/dx$) به‌دست می‌دهد، (به‌صورت یک معادله دیفرانسیل) می‌نویسیم. در بعضی موارد (مسئله پتانسیل خطی) ، خود پایه P مناسب است و ما از نسخه تبدیل فوریه یافته اصل موضوع (۲) ، یعنی $X \rightarrow i\hbar d/dp$ و $P \rightarrow p$ ، استفاده می‌کنیم. در این مورد نمی‌توانستیم این جانشینی عملگر را به ویژه پایه انرژی تبدیل کنیم، زیرا برای انجام این کار ابتدا مجبوریم ویژه توابع انرژی را در پایه X به‌دست آوریم که مورد سوال است. در عوض ما فقط رابطه جابه‌جایی $[X, P] = i\hbar$ را به کار بردیم که از موضوع

(۲) حاصل می‌شود اما در همه پایه‌ها بویژه پایه انرژی درست است. از آنجا که ما جواب کامل را با داشتن فقط این اطلاعات به دست آوردیم به نظر می‌رسد که جوهر اصل موضوع (۲) همان جابجاگر است. در واقع اینگونه هم هست. به عبارتی دیگر اصل موضوع (۲) کنونی خود را با یک اصل موضوع کلی عوض کنیم:

اصل موضوع (۲): متغیرهای مستقل x و p مکانیک کلاسیک، آن عملگرهای هرمیتی X و P می‌شوند که به وسیله جابجاگر کانونیک $[X, P] = i\hbar$ تعریف می‌شوند. متغیرهای وابسته $\omega(x, p)$ به وسیله عملگرهای $\Omega = \omega(x \rightarrow X, p \rightarrow P)$ مشخص می‌شوند.

برای بازیابی نسخه اولیه خود، به پایه X می‌رویم. واضح است که در این پایه، $X \rightarrow x$ می‌شود. سپس ما باید P را طوری انتخاب کنیم که $[X, P] = i\hbar$ شود. اگر انتخاب قرار دادی $P = -i\hbar d/dx$ را انجام دهیم، این شرط تأمین شده و به اصل موضوع (۲) که قبلاً گفته شد می‌رسیم. اما بیان کنونی اصل موضوع (۲) اجازه آزادی عمل در انتخاب P را به ما می‌دهد چون می‌توانیم هر تابعی از x را به $-i\hbar d/dx$ اضافه کنیم بدون اینکه جابه‌جاگر تغییر کند: جانشینی

$$X \xrightarrow{\text{X basis}} x \quad (الف-۳۶-۴-۷)$$

$$P \xrightarrow{\text{X basis}} -i\hbar \frac{d}{dx} + f(x) \quad (ب-۳۶-۴-۷)$$

به همان اندازه رضایتبخش است. حال به هیچ وجه روشن نیست که در هر مسئله (و نه فقط در نوسانگر هماهنگ) با در نظر گرفتن این نقطه به عنوان نقطه شروع به فیزیک یکسانی دست خواهیم یافت. برای مثال اگر معادله ویژه مقدری

$$P|p\rangle = p|p\rangle \quad (الف-۳۷-۴-۷)$$

را در پایه X تصویر کنیم،

$$\left[-i\hbar \frac{d}{dx} + f(x) \right] \psi_p(x) = p \psi_p(x) \quad (ب-۳۷-۴-۷)$$

که از آن نتیجه می‌شود که $\psi_p(x)$ دیگر یک موج تخت متناسب با $e^{ipx/\hbar}$ نیست. با این حال چطور فیزیک مسئله می‌تواند با گذشته یکسان باشد؟ پاسخ این است که هرگز تابع موج مستقیماً اندازه‌گیری نمی‌شود. آنچه اندازه می‌گیریم احتمالات $|\langle \omega | \psi \rangle|^2$ برای به دست آوردن یک نتیجه ω هنگام اندازه‌گیری Ω ، مربعات عناصر ماتریسی $|\langle \psi_1 | \Omega | \psi_2 \rangle|^2$ ، یا طیف ویژه مقدری عملگرهایی نظیر هامیلتونی است. در یکی از تمریناتی که در ادامه می‌آیند، به طرف اثبات این مطلب رهنمون می‌شوید که این کمیت‌های قابل اندازه‌گیری در حقیقت تحت تبدیل به جانشینی عملگر غیر تعویضی معادله (۳۶-۴-۷) ناوردا می‌مانند.

دیراک به ارتباط نزدیک بین قاعده جابه‌جایی

$$[X, P] = i\hbar$$

عملگرهای کوانتومی و گروه‌های پواسون (PB) شکل‌های کلاسیکی آنها،

$$\{x, p\} = 1$$

تأکید کرد که امکان می‌دهد تا رابطه تعریف کننده عملگرهای کوانتومی را به صورت زیر بنویسیم

$$[X, P] = i\hbar \{x, p\} = i\hbar \quad (38-4-7)$$

مزیت این دیدگاه این است که تعمیم آن به «کوانتش» سیستمی با N درجه آزادی واضح است:

اصل موضوع ۲ (برای N درجه آزادی): مختصه‌های دکارتی x_1, \dots, x_N و اندازه حرکت‌های p_1, \dots, p_N توصیف کلاسیکی سیستمی با N درجه آزادی، عملگرهای هرمیتی X_1, \dots, X_N ؛ P_1, \dots, P_N می‌شوند که تابع قواعد جابه‌جایی زیرند:

$$[X_i, P_j] = i\hbar \{x_i, p_j\} = i\hbar \delta_{ij}$$

$$[X_i, X_j] = i\hbar \{x_i, x_j\} = 0 \quad (39-4-7)$$

$$[P_i, P_j] = i\hbar \{p_i, p_j\} = 0$$

به طور مشابه، $\omega(x, p) \rightarrow \omega(x \rightarrow X, p \rightarrow P) = \Omega$

اما خودمان را به مختصه‌های دکارتی محدود می‌کنیم تا از بعضی ظرافت‌های مربوط به کوانتش مختصه‌های غیر دکارتی اما کانونیک اجتناب کنیم؛ تمرین (۷-۴-۱۰) را ببینید. همینکه معادلات دیفرانسیل به دست آمدند، می‌توانیم هنگام جستجوی جواب‌ها مختصه‌های دکارتی را کنار بگذاریم.

بدیهی است که تعمیم صورت گرفته در انتهای بخش ۴-۲، یعنی

$$X_i \xrightarrow{x \text{ basis}} x_i$$

$$P_i \xrightarrow{x \text{ basis}} -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}$$

یک انتخاب است اما، به همان دلیل حالت $N=1$ ، انتخابی نیست که قواعد جابه‌جایی کانونیک، معادله (۷-۴-۳۹)، را برآورده کند.

با معلوم بودن روابط جابه‌جایی بین X و P ، روابط بین عملگرهای وابسته از کاربرد مکرر روابط زیر به دست می‌آید

$$[\Omega, \Lambda \Gamma] = \Lambda [\Omega, \Gamma] + [\Omega, \Lambda] \Gamma$$

و

$$[\Omega \Lambda, \Gamma] = \Omega [\Lambda, \Gamma] + [\Omega, \Gamma] \Lambda$$

از آنجا که PB از قواعد مشابهی تبعیت می‌کند (تمرین ۲-۷-۱) به جز اینکه تأکیدی بر ترتیب متغیرهای کلاسیکی ندارد، ثابت می‌شود که اگر

$$\{\omega(x, p), \lambda(x, p)\} = \gamma(x, p)$$

باشد آنگاه،

$$[\Omega(X, P), \Lambda(X, P)] = i\hbar\Gamma(X, P) \quad (۴-۷-۴)$$

به جز تفاوت‌هایی که از ابهامات مربوط به ترتیب قرارگیری؛ و در نتیجه تشابه صوری بین مکانیک کلاسیک و کوانتومی که اولین بار در فصل ۶ با آن مواجه شدیم، ناشی می‌شوند.

اگر چه شکل جدید اصل موضوع (۲) روشی کلی و مستقل از پایه برای مشخص کردن عملگرهای کوانتومی متناظر با متغیرهای کلاسیکی فراهم می‌کند، لااقل برای «کوانتیده کردن»، در عمل نوعاً در پایه X کار کرده و همین طور آزادی عمل در انتخاب P_i را نادیده گرفته و با عملگر قدیمی $P_i = -i\hbar \partial/\partial x_i$ کار می‌کنند که به ساده‌ترین معادلات دیفرانسیل منجر می‌شود. حل مسئله نوسانگر، فقط با معلوم بودن روابط جابه‌جایی (و اندکی کمک گرفتن از دیراک) یک استثناء است.

تمرین ۷-۴-۱: عناصر ماتریسی X و P را در پایه $|n\rangle$ محاسبه کرده و با نتیجه حاصل از تمرین ۷-۳-۴ مقایسه کنید.

تمرین ۷-۴-۲: $\langle X \rangle$ ، $\langle P \rangle$ ، $\langle X^2 \rangle$ ، $\langle P^2 \rangle$ ، ΔX ، ΔP را در حالت $|n\rangle$ به دست آورید.

تمرین ۷-۴-۳: قضیه ویریاال. قضیه ویریاال در مکانیک کلاسیک بیان می‌کند که برای ذره‌ای مقید در پتانسیل $V(r) = ar^k$ ، متوسط انرژی‌های جنبشی و پتانسیل (روی مدار) با رابطه

$$\bar{T} = c(k)\bar{V}$$

به هم مربوط می‌شوند که $c(k)$ فقط به k بستگی دارد. نشان دهید که با در نظر گرفتن یک مدار دایره‌ای، $c(k) = k/2$ می‌شود. با استفاده از نتایج حاصل از تمرین قبل نشان دهید که برای نوسانگر هماهنگ ($k=2$) در حالت کوانتومی $|n\rangle$ ،

$$\langle T \rangle = \langle V \rangle$$

تمرین ۷-۴-۴: نشان دهید که $\langle n | X^4 | n \rangle = (\hbar/2m\omega)^2 [3 + 6n(n+1)]$

تمرین ۷-۴-۵: در $t=0$ ذره‌ای در حالت $\langle \psi(0) | = 1/2^{1/2} (\langle 0 | + \langle 1 |)$ قرار دارد. الف- $\langle \psi(t) |$ را حساب کنید. ب- $\langle \psi(0) | X | \psi(0) \rangle = \langle X(0) \rangle$ ، $\langle P(0) \rangle$ ، $\langle X(t) \rangle$ و $\langle P(t) \rangle$ را به دست آورید. ج- $\langle \dot{X}(t) \rangle$ و $\langle \dot{P}(t) \rangle$ را با استفاده از قضیه اهرنفتست به دست آورده و برای $\langle X(t) \rangle$ و $\langle P(t) \rangle$ حل کرده، با قسمت (ب) مقایسه کنید.

تمرین ۷-۴-۶: نشان دهید که $\langle a(t) \rangle = e^{-i\omega t} \langle a(0) \rangle$ و $\langle a^+(t) \rangle = e^{i\omega t} \langle a^+(0) \rangle$

تمرین ۷-۴-۷: معادله (۷-۴-۴۰) را برای حالت‌های زیر ثابت کنید

$$\Omega = X, \quad \Lambda = X^2 + P^2 \quad (۱)$$

$$\Omega = X^2, \quad \Lambda = P^2 \quad (۲)$$

حالت دوم، ابهام در ترتیب را نشان می‌دهد.

تمرین ۷-۴-۸: سه متغیر اندازه حرکت زاویه‌ای را در مکانیک کلاسیک در نظر بگیرید:

$$l_x = yp_z - zp_y$$

$$l_y = zp_x - xp_z$$

$$l_z = xp_y - yp_x$$

الف - شکل کوانتومی آنها، L_x ، L_y و L_z ، را تشکیل داده و توجه کنید که هیچ ابهام ترتیبی وجود ندارد.

ب- ثابت کنید که $\{l_x, l_y\} = l_z$ [معادله (۲-۷-۳) برای تعریف PB را ببینید].

ج- ثابت کنید که $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$.

تمرین ۷-۴-۹ (مهم): انتخاب عملگر غیر قراردادی (اما کاملاً قابل قبول) زیر را در پایه X در نظر بگیرید:

$$X \rightarrow x$$

$$P \rightarrow -i\hbar \frac{d}{dx} + f(x)$$

الف - ثابت کنید که رابطه جابه‌جایی کانونیک برآورده می‌شود.

ب- این امکان وجود دارد که تغییر جانشینی عملگر را به‌عنوان نتیجه یک تغییر یکانی پایه X تعبیر کنیم:

$$|x\rangle \rightarrow |\bar{x}\rangle = e^{ig(x)/\hbar} |x\rangle = e^{ig(x)/\hbar} |x\rangle$$

که

$$g(x) = \int^x f(x') dx'$$

ابتدا ثابت کنید که

$$\langle \bar{x} | X | \bar{x}' \rangle = x \delta(x - x')$$

یعنی

$$X \xrightarrow{\text{new } X \text{ basis}} x$$

سپس ثابت کنید که

$$\langle \bar{x} | P | \bar{x}' \rangle = \left[-i\hbar \frac{d}{dx} + f(x) \right] \delta(x - x')$$

یعنی

$$P \xrightarrow{\text{new } X \text{ basis}} -i\hbar \frac{d}{dx} + f(x)$$

این تمرین به ما می آموزد که «پایه X » منحصر به فرد نیست؛ با داشتن یک پایه $|x\rangle$ ، می توان با ضرب یک عامل فازی که نه نرم و نه متعامد بودن را تغییر می دهد پایه دیگری، $|\tilde{x}\rangle$ ، را به دست آورد. عناصر ماتریسی P با f تغییر می کنند و انتخاب استاندارد متناظر با $f=0$ است. از آنجا که وجود f به تغییر پایه مربوط می شود، ناوردایی فیزیکی مسئله تحت تغییر f (از صفر به غیر صفر) استنباط می شود. آنچه در اینجا انجام می دهیم این است که پایه را از پایه X به جای تغییر به یک پایه دیگر Ω به یک پایه X دیگر تغییر می دهیم. نکته آموزنده دیگر اینکه دو عملگر مشتق گیری متفاوت $\omega(x, -i\hbar d/dx)$ و $\omega(x, -i\hbar d/dx + f)$ دارای ویژه مقادیر یکسان هستند و بین ویژه توابع آنها تناظر یک به یک وجود دارد زیرا آنها هر دو یک عملگر مجرد $\Omega(X, P)$ را نمایش می دهند.

تمرین ۷-۴-۱۰: به یاد دارید که همیشه برای کوانتیده کردن یک سیستم مختصه های دکارتی x_1, \dots, x_N و اندازه حرکت های p_1, \dots, p_N را به عملگر تبدیل می کنیم که این عملگرها تابع قواعد جابه جایی کانونیک هستند. اگر در مواردی نظیر مسئله ویژه مقداری یک هامیلتونی با تقارن کروی مختصه های غیر دکارتی مناسب تر باشند ابتدا معادله دیفرانسیل را در مختصات دکارتی نوشته و سپس به مختصات کروی تغییر می دهیم (بخش ۴-۲). در بخش ۴-۲ دیدیم که اگر \mathcal{H} برحسب مختصه های غیر دکارتی اما کانونیک q_1, \dots, q_N و p_1, \dots, p_N نوشته شود، $\mathcal{H}(q_i \rightarrow q_i, p_i \rightarrow -i\hbar\partial/\partial q_i)$ هامیلتونی صحیح H را تولید نمی کند، حتی اگر الحاقی عملگر قواعد جابه جایی کانونیک را برآورده کند. در این بخش این موضوع را بازبینی می کنیم تا بعضی از ظرافت های موجود در کوانتش مستقیم مختصه های غیر دکارتی، بدون استفاده از مختصه های دکارتی در مراحل میانی، را توضیح دهیم.

۱- ذره ای را در دو بعد در نظر بگیرید که هامیلتونی آن عبارتست از

$$\mathcal{H} = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + a(x^2 + y^2)^{1/2}$$

که در پایه مختصه به نتیجه زیر منجر می شود

$$H \rightarrow \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + a(x^2 + y^2)^{1/2}$$

از آنجا که مسئله دارای تقارن چرخشی است، از مختصات قطبی استفاده می کنیم

$$\rho = (x^2 + y^2)^{1/2}, \quad \phi = \tan^{-1}(y/x)$$

که برحسب آنها خواهیم داشت:

$$H \xrightarrow[\text{coordinate basis}]{} \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + a\rho \quad (4-4-7)$$

چون ρ و ϕ مانند x و y [در جمله $(x^2 + y^2)^{1/2}$] با هم آمیخته نمی شوند شکل قطبی می تواند راحت تر حل شود.

سوال این است: چرا با \mathcal{H} ی که برحسب مختصات قطبی و اندازه حرکت های مزدوج نوشته می شود شروع نمی کنیم یعنی با

$$P_\rho = \mathbf{e}_\rho \cdot \mathbf{p} = \frac{x p_x + y p_y}{(x^2 + y^2)^{1/2}}$$

(که \hat{e}_ρ بردار یکه در جهت شعاعی است)، و

$$P_\phi = x p_y - y p_x \quad (\text{اندازه حرکت زاویه‌ای که } l_z \text{ هم نامیده می‌شود})$$

یا به عبارتی با

$$\mathcal{H} = \frac{P_\rho^2}{2m} + \frac{P_\phi^2}{2m\rho^2} + a\rho \quad (\text{این رابطه را اثبات کنید})$$

و سپس همه متغیرهای کلاسیکی ρ ، P_ρ ، ϕ و P_ϕ را مستقیماً به عملگرهای کوانتومی تابع قواعد جابه‌جایی کانونیک تبدیل کنیم (ارتقاء دهیم)؟ اجازه دهید همین کار را انجام دهیم و ببینیم چه اتفاقی می‌افتد. اگر عملگرهای

$$P_\rho \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial \rho}$$

$$P_\phi \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

را انتخاب کنیم که تابع قواعد جابه‌جایی هستند. به نتیجه زیر می‌رسیم که با معادله (۷-۴-۴۱) در توافق نیست

$$H \xrightarrow{\text{coordinate basis}} \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + a\rho \quad (۷-۴-۴۲)$$

حال این مسئله فی نفسه خیلی مهم نیست زیرا همان‌طور که در تمرین آخر دیده می‌شود ممکن است فیزیک یکسانی در هر دو معادله دیفرانسیل نهفته باشد. در اینجا و در حالت مورد بررسی این مطلب درست نیست: همان‌طور که خواهیم دید هامیلتونی‌ها در معادلات (۷-۴-۴۱) و (۷-۴-۴۲) ویژه مقادیر یکسانی ندارند. می‌دانیم که معادله (۷-۴-۴۱) معادله صحیح است، زیرا رویه کوانتش برحسب مختصه‌های دکارتی اساس تجربی دارد. اکنون چه باید کرد؟

۲- راه خروج، استفاده از این واقعیت است که اگر چه انتخاب $P_\rho \rightarrow -i\hbar \partial/\partial \rho$ به قاعده جابه‌جایی صحیحی منجر می‌شود، اما این عملگر هرمیتی نیست! ثابت کنید که

$$\begin{aligned} \langle \psi_1 | P_\rho | \psi_2 \rangle &= \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \psi_1^* \left(-i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial \rho} \right) \rho \, d\rho \, d\phi \\ &\neq \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \left(-i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial \rho} \right)^* \psi_2 \, \rho \, d\rho \, d\phi \\ &= \langle P_\rho \psi_1 | \psi_2 \rangle \end{aligned}$$

۱- آنچه خواهیم دید این است که $P_\rho = -i\hbar d/d\rho$ و در نتیجه هامیلتونی H ساخته شده از آن غیر هرمیتی هستند.

می‌توانید فرض کنید که وقتی ∞ یا $\rho \rightarrow 0$ میل می‌کند $\rho \psi_1^* \psi_2 \rightarrow 0$ میل می‌کند. مشکل از اینجا ناشی می‌شود که $\rho d\rho d\phi$ و نه $d\rho d\phi$ معیار انتگرال‌گیری است.) ولی نشان دهید که

$$P_{\rho} \rightarrow -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{2\rho} \right) \quad (۴۳-۴-۷)$$

هرمیتی بوده و همچنین قاعده جابه‌جایی کانونیک را برآورده می‌کند. اندازه حرکت زاویه‌ای $P_{\phi} \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$ ، وقتی روی توابع تک مقدار $\psi(\rho, \phi) = \psi(\rho, \phi + 2\pi)$ عمل کند، هرمیتی است. ۳- در حالت دکارتی دیدیم که افزودن یک $f(x)$ دلخواه به $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ هیچ اثر فیزیکی نداشت در حالی که در اینجا افزودن تابعی از ρ به $-i\hbar \frac{\partial}{\partial \rho}$ به نظر مهم می‌رسد. چرا؟ [آیا $f(x)$ کاملاً اختیاری است؟ آیا نباید حقیقی باشد؟ چرا؟ آیا همین موضوع برای قسمت $-i\hbar/2\rho$ هم درست است؟]

۴- با استفاده از عملگر اندازه حرکت جدید P_{ρ} نشان دهید که

$$H \xrightarrow{\text{coordinate basis}} \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{4\rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + ap$$

که هنوز هم با معادله (۴۱-۴-۷) در توافق نیست. ما قواعد جابه‌جایی را برآورده کرده و عملگرهای هرمیتی انتخاب کرده‌ایم ولی باز هم به هامیلتونی کوانتومی درست نرسیده‌ایم. کلید معما در این حقیقت نهفته است که H ، \mathcal{H} را به‌طور منحصر به‌فرد مشخص نمی‌کند زیرا جملات از مرتبه \hbar (یا بالاتر) ممکن است در H موجود باشند ولی در \mathcal{H} نباشند. در حالی که این ابهام حتی در حالت دکارتی هم وجود دارد، در تمام موارد مورد نظر با استفاده از مقارن‌سازی بر طرف می‌شود. با مختصات غیر دکارتی، این ابهام بیشتر است. روش‌هایی برای ساختن H از روی \mathcal{H} معلوم وجود دارد (که فرمول‌بندی انتگرال مسیر یکی از آنهاست) به‌طوری که جانشینی $P_{\rho} \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial \rho} + 1/2\rho$ به معادله (۴۱-۴-۷) منجر می‌شود. در حالت کنونی، هامیلتونی کوانتومی متناظر با

$$\mathcal{H} = \frac{P_{\rho}^2}{2m} + \frac{P_{\phi}^2}{2m\rho^2} + ap$$

به‌صورت زیر است

$$H \xrightarrow{\text{coordinate basis}} \mathcal{H} \left(\rho \rightarrow \rho, P_{\rho} \rightarrow -i\hbar \left[\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{2\rho} \right]; \phi \rightarrow \phi, P_{\phi} \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \right) - \frac{\hbar^2}{8m\rho^2} \quad (۴۴-۴-۷)$$

توجه کنید که جمله اضافی از مرتبه غیر صفر از \hbar است.

ما وارد مبحث این دستورالعمل‌ها برای به‌دست آوردن H نخواهیم شد زیرا آنها سرانجام نتایجی را به ما می‌دهند که از روشی که اتخاذ کرده‌ایم بسیار راحت‌تر قابل دسترسی هستند.

۷-۵ - گذر از پایه انرژی به پایه X

در بخش آخر گفته شد که اگر چه پایه $|n\rangle$ به طور ایده آل برای محاسبه عناصر ماتریسی عملگرها بین ویژه حالت های نوسانگر مناسب است، دامنه یافتن ذره در یک حالت $|n\rangle$ در نقطه x نمی توانست به سهولت محاسبه شود: این طور به نظر رسید که باید ویژه کت های $\langle x|$ عملگر X را به دست آوریم [معادله (۷-۴-۳۲)] و سپس ضرب داخلی $\langle x|n\rangle$ را محاسبه کنیم. اما روشی سر راست تر برای به دست آوردن $\psi_n(x) = \langle x|n\rangle$ وجود دارد. با تصویر کردن معادله تعریف کننده حالت پایه نوسانگر،

$$a|0\rangle = 0 \quad (1-5-7)$$

روی پایه X شروع می کنیم:

$$|0\rangle \rightarrow \langle x|0\rangle = \psi_0(x)$$

$$a = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2} X + i\left(\frac{1}{2m\omega\hbar}\right)^{1/2} P \quad (2-5-7)$$

$$\rightarrow \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2} x + \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2} \frac{d}{dx}$$

بر حسب $y = (m\omega/\hbar)^{1/2} x$ ،

$$a = \frac{1}{2^{1/2}} \left(y + \frac{d}{dy}\right) \quad (3-5-7)$$

همین طور برای استفاده بعدی توجه می کنیم که (چون d/dy پاد هرمیتی است)،

$$a^\dagger = \frac{1}{2^{1/2}} \left(y - \frac{d}{dy}\right) \quad (4-5-7)$$

پس معادله (۱-۵-۷) در پایه X به صورت زیر در می آید

$$\left(y + \frac{d}{dy}\right) \psi_0(y) = 0 \quad (5-5-7)$$

یا

$$\frac{d\psi_0(y)}{\psi_0(y)} = -y dy$$

یا

$$\psi_0(y) = A_0 e^{-y^2/2}$$

یا

$$\psi_0(x) = A_0 \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$$

یا بعد از بهنجارش،

$$= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) \quad (6-5-7)$$

با تصویر کردن معادله

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{(n!)^{1/2}} |0\rangle$$

روی پایه X به ویژه توابع بهنجار شده می‌رسیم:

$$\langle x|n\rangle = \psi_n\left[x = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2} y\right] = \frac{1}{(n!)^{1/2}} \left[\frac{1}{2^{1/2}} \left(y - \frac{d}{dy}\right)\right]^n \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-y^2/2} \quad (7-5-7)$$

مقایسه نتیجه بالا با معادله (۲۲-۳-۷) نشان می‌دهد که

$$H_n(y) = e^{y^2/2} \left(y - \frac{d}{dy}\right)^n e^{-y^2/2} \quad (8-5-7)$$

در اینجا بحث نسبتاً طولانی نوسانگر را به پایان می‌بریم. اگر این فصل را به دقت فهمیده باشید باید درک خوبی از چگونگی کار مکانیک کوانتومی داشته باشید.

تمرین ۱-۵-۷: معادله (۱-۵-۷) را روی پایه P تصویر کرده و $\psi_0(p)$ را به دست آورید.
تمرین ۲-۵-۷: رابطه

$$a|n\rangle = n^{1/2}|n-1\rangle$$

را روی پایه X تصویر کرده و با استفاده از معادله (۲۲-۳-۷) رابطه بازگشتی زیر را به دست آورید.

$$H'_n(y) = 2nH_{n-1}(y)$$

تمرین ۳-۵-۷: با روابط

$$a + a^\dagger = 2^{1/2}y$$

و

$$(a + a^\dagger)|n\rangle = n^{1/2}|n-1\rangle + (n+1)^{1/2}|n+1\rangle$$

و معادله (۲۲-۳-۷) شروع کرده و رابطه

$$H_{n+1}(y) = 2yH_n(y) - 2nH_{n-1}(y)$$

را به دست آورید.

تمرین ۴-۵-۷: ترمودینامیک نوسانگرها. فرمول بولتزمن

$$P(i) = e^{-\beta E(i)} / Z$$

که در آن

$$Z = \sum_i e^{-\beta E(i)}$$

است، احتمال یافتن یک سیستم در حالت i با انرژی $E(i)$ را به دست می‌دهد، وقتی که سیستم با یک منبع با دمای مطلق $T = 1/\beta k$ در تعادل گرمایی است، که $k = 1.4 \times 10^{-14} \text{ ergs / } ^\circ K$ ثابت بولتزمن است. («احتمال» که بدان اشاره شد مربوط به یک مجموعه کلاسیکی (هنگرد) از سیستم‌های مشابه است و ارتباطی با مکانیک کوانتومی ندارد).

الف) - نشان دهید که متوسط گرمایی انرژی سیستم برابر است با

$$\bar{E} = \sum_i E(i)P(i) = \frac{-\partial}{\partial \beta} \ln Z$$

ب) - فرض کنید سیستم، یک نوسانگر کلاسیکی باشد. شاخص i اکنون پیوسته بوده و متناظر با متغیرهای x و p توصیفگر حالت نوسانگر است، یعنی

$$i \rightarrow x, p$$

و

$$\sum_i \rightarrow \iint dx dp$$

و

$$E(i) \rightarrow E(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

نشان دهید که

$$Z_{cl} = \left(\frac{2\pi}{\beta m \omega^2} \right)^{1/2} \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{1/2} = \frac{2\pi}{\omega \beta}$$

و اینکه

$$\bar{E}_{cl} = \frac{1}{\beta} = kT$$

توجه کنید که E_{cl} مستقل از m و ω است.

ج) - برای نوسانگر کوانتومی، عدد کوانتومی n نقش شاخص i را ایفا می‌کند. نشان دهید که

$$Z_{qu} = e^{-\beta \hbar \omega / 2} (1 - e^{-\beta \hbar \omega})^{-1}$$

و

$$\bar{E}_{qu} = \hbar \omega \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} \right)$$

د) - کاملاً روشن است که وقتی دمای T افزایش می‌یابد (و $\beta = 1/kT$ کاهش می‌یابد) نوسانگر بیشتر و بیشتر برانگیخته شده و نهایتاً (از اصل تناظر) نتیجه می‌شود که،

$$\bar{E}_{qu} \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \bar{E}_{cl}$$

ثابت کنید که این واقعاً درست است و نشان دهید که « T بزرگ» به معنی $\hbar\omega/k \gg T$ است. (ه) - بلوری با N_0 اتم را در نظر بگیرید که برای نوسانات کوچک، معادل با $3N_0$ نوسانگر غیر جفت شده است. انرژی گرمایی میانگین بلور $\bar{E}_{crystal}$ ، \bar{E}_{cl} یا \bar{E}_{qu} جمع شده روی همه مدهای بهنجار است. نشان دهید که اگر نوسانگرها به طور کلاسیکی بحث شوند، گرمای ویژه بر اتم برابر می شود با

$$C_{cl}(T) = \frac{1}{N_0} \frac{\partial \bar{E}_{crystal}}{\partial T} = 3k$$

که مستقل از T و پارامترهای نوسانگرها بوده و در نتیجه برای همه بلورها یکسان است.^۱ این در دماهای بالا، اما نه وقتی $T \rightarrow 0$ میل می کند، با تجربه سازگاری دارد. به طور تجربی،

$$C(T) \rightarrow 3k \quad (T \text{ large})$$

$$\rightarrow 0 \quad (T \rightarrow 0)$$

همانند انیشتین، نوسانگرها را کوانتومی در نظر گرفته، برای سادگی فرض کنید همه آنها دارای فرکانس یکسان ω هستند. نشان دهید

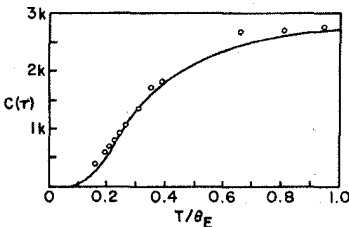
$$C_{qu}(T) = 3k \left(\frac{\theta_E}{T} \right)^2 \frac{e^{\theta_E/T}}{(e^{\theta_E/T} - 1)^2}$$

که $\theta_E = \hbar\omega/k$ دمای انیشتین نامیده شده و از یک بلور به بلور دیگر فرق می کند. نشان دهید که

$$C_{qu}(T) \xrightarrow{T \gg \theta_E} 3k$$

$$C_{qu}(T) \xrightarrow{T \ll \theta_E} 3k \left(\frac{\theta_E}{T} \right)^2 e^{-\theta_E/T}$$

اگر چه وقتی $T \rightarrow 0$ میل می کند $C_{qu}(T) \rightarrow 0$ میل می کند، افت نمایی با رفتار مشاهده شده $C(T) \rightarrow T^2$ توافق ندارد. این ناسازگاری از فرض یکسان گرفتن فرکانسهای همه مدهای بهنجار ناشی می شود، که البته در حالت کلی نادرست است [به یاد بیاورید که در مورد جرم جفت شده به $\omega_l = (k/m)^{\frac{1}{2}}$ و $\omega_{ll} = (3k/m)^{\frac{1}{2}}$ رسیدیم]. این ناسازگاری توسط دبی برطرف شد.



شکل ۷-۳: مقایسه آزمایش با نظریه انیشتین برای گرمای ویژه در مورد الماس (θ_E برابر با $1320^\circ K$ انتخاب شده است).

اما تصویر ساده انیشتین بخودی خود تا حد قابل ملاحظه ای موفق است (شکل ۷-۳).

۱- دقیق تر بگوییم؛ برای بلورهایی که اتم‌هایشان به صورت ذرات نقطه‌ای بدون درجات آزادی داخلی رفتار می کنند.



فرمول بندی نظریه کوانتومی-انتگرال مسیر

در اینجا فرمول بندی دیگری از مکانیک کوانتومی را بررسی می کنیم که توسط فاینمن در سال ۱۹۴۰ ابداع شد. در مقابل فرمول بندی شرودینگر که از مکانیک هامیلتونی ناشی می شود، فرمول بندی فاینمن با فرمول بندی لاگرانژی مکانیک گره خورده است. اگر چه ما با رویکرد اول کار می کنیم، اما در این فصل رویکرد فاینمن را بحث می کنیم نه فقط به خاطر اینکه دارای ارزش زیبایی شناختی است بلکه در دسته ای از مسائل انتشارگر کامل را با سهولت بسیار زیاد به دست داده و در رابطه با ارتباط بین مکانیک کلاسیک و مکانیک کوانتومی بصیرت و دیدگاه ارزشمندی به ما می دهد.

۸-۱- دستورالعمل انتگرال مسیر

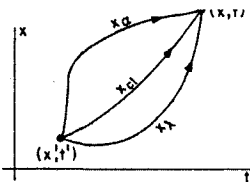
قبلاً دیده ایم که همین که انتشارگر معلوم شود، مسئله کوانتومی به طور کامل حل می شود. بنابراین در گذشته کار ما ابتدا به دست آوردن ویژه مقادیر و ویژه توابع H و سپس نوشتن $U(t)$ برحسب اینها بوده است. در رویکرد انتگرال مسیر، $U(t)$ مستقیماً محاسبه می شود. برای ذره ای در یک بعد، روش کار به شرح ذیل است: برای به دست آوردن $U(x, t; x', t')$:

(۱)- همه مسیرهای اصل نقاط (x', t') و (x, t) را در صفحه $x-t$ رسم می کنیم (شکل ۸-۱).

(۲)- برای هر مسیر $x(t)$ ، کنش $S[x(t)]$ را به دست می آوریم.

$$U(x, t; x', t') = A \sum_{\text{all paths}} e^{iS[x(t)]/\hbar} \quad (۸-۱-۱)$$

که A ضریب بهنجارش کلی است.



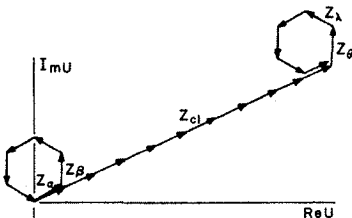
شکل ۸-۱: برخی از مسیرهایی که در انتشارگر سهمیم هستند. سهم ناشی از مسیر $x(t)$ ، $Z = \exp\{iS[x(t)]/\hbar\}$ است.

۸-۲- تحلیل دستورالعمل

دستورالعمل فوق را تحلیل می کنیم و برای مدتی اثبات اینکه مکانیک کوانتومی قراردادی از آن به دست می آید را به تعویق می اندازیم. جالب ترین مطلب در مورد دستورالعمل فوق، این است که هر مسیر، از جمله

مسیر کلاسیکی $x_{cl}(t)$ ، وزن یکسانی، یعنی عددی با مدول واحد، می‌گیرد. اگر مسیر کلاسیکی به هیچ وجه مطلوب به نظر نرسد چطور می‌توانیم در حد مناسب مکانیک کلاسیکی را مجدداً به دست آوریم؟ برای درک این مطلب باید جمع معادله (۸-۱) را انجام دهیم. روش درست برای جمع روی همه مسیرها، یعنی انتگرال‌گیری مسیر، کاملاً پیچیده است و آنرا بعداً بحث خواهیم کرد. فعلاً مشی ذهنی را در پیش می‌گیریم. ابتدا وانمود می‌کنیم که پیوستار مسیرهای اصل نقاط انتهایی واقعاً یک مجموعه گسسته است. چند مسیر از مجموعه در شکل ۸-۱ نشان داده شده‌اند.

ما می‌بایست سهم‌های $Z_\alpha = e^{iS[x_\alpha(t)]/\hbar}$ ناشی از هر مسیر $x_\alpha(t)$ را جمع کنیم. این جمع به‌طور طرح وار در شکل ۸-۲ انجام شده است. چون هر مسیر کنش متفاوتی دارد، با فاز متفاوتی سهم می‌شود و سهم‌های ناشی از مسیرها اساساً یکدیگر را خنثی می‌کنند تا اینکه به نزدیکی مسیر کلاسیکی برسیم. چون k در اینجا مانا است، Z ها به‌طور سازنده با هم جمع شده و یک جمع بزرگی حاصل می‌شود. وقتی از $x_{cl}(t)$ دور می‌شویم بار دیگر تداخل ویرانگر شروع می‌شود. از شکل روشن است که $U(t)$ به‌وسیله مسیرهای نزدیک به $x_{cl}(t)$ غالب می‌شود. بنابراین مسیر کلاسیکی مهم است نه به دلیل اینکه به خودی خود سهم زیادی دارد بلکه به این دلیل که در مجاورت آن، مسیرها به‌طور همدوس سهم می‌شوند.



شکل ۸-۲: نمایش طرح وار جمع $\sum Z_\alpha$. مسیرهای نزدیک $x_{cl}(t)$ به‌طور همدوس سهم می‌شوند چون k در اینجا مانا است. در حالی که مسیرهای دیگر همدیگر را خنثی می‌کنند و در تقریب اول هنگام محاسبه $U(t)$ می‌توانند نادیده گرفته شوند.

قبل از اینکه تداخل ویرانگر شروع شود تا چه حد باید از x_{cl} دور شده و منحرف شویم؟ ابتدا ممکن است به‌طور خام گفته شود که به محض اینکه فاز از مقدار حالت مانا $S[x_{cl}(t)]/\hbar \equiv S_{cl}/\hbar$ به اندازه π تغییر می‌کند همدوسی از بین می‌رود. این به نوبه خود بدین معنی است که کنش برای مسیرهای همدوسی می‌بایست به اندازه π از S_{cl} متفاوت باشد. برای ذره ماکروسکوپی این به معنی یک قید بسیار محکم روی مسیر آن است چون S_{cl} نوعاً از مرتبه $10^{27} \hbar$ $\approx 1 \text{ erg sec}$ است، در حالی که برای یک الکترون این قید تقریباً بی‌قیدی است. مثال زیر را در نظر بگیرید. یک ذره آزاد مبداء را در $t = 0$ ترک می‌کند و در $t = 1 \text{ s}$ به $x = 1 \text{ cm}$ می‌رسد. مسیر کلاسیکی،

$$(1-2-8)$$

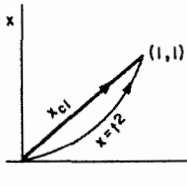
$$x = t$$

است. مسیر دیگر

$$(2-2-8)$$

$$x = t^2$$

را در نظر بگیرید که همان دو نقطه - زمان را به هم وصل می کند (شکل ۸-۳).



شکل ۸-۳: دو مسیر ممکن واصل (۰,۰) . (۱,۱) . کنش روی مسیر کلاسیکی $x=t$ برابر $m/2$ است در حالی که روی مسیر دیگر $2m/3$ است.

برای ذره کلاسیکی به جرم مثلاً $1g$ وقتی از مسیر کلاسیکی $x=t$ به مسیر غیر کلاسیکی $x=t^2$ می رویم کنش تقریباً به اندازه $1.6 \times 10^{26} \hbar$ و فاز به اندازه $1.6 \times 10^{26} \text{ rad}$ تغییر می کند و لذا می توانیم مسیرهای غیر کلاسیکی را نادیده بگیریم. از طرف دیگر برای الکترونی که جرمش $g \approx 10^{-27}$ است، $\delta S \approx \hbar/6$ و تغییر فاز فقط حدود یک ششم رادیان است که کاملاً در حد گستره همدوسی $\delta S / \hbar \leq \pi$ است. در چنین مواردی است که فرض حرکت ذره در امتداد یک مسیر خوش تعریف، $x_{cl}(t)$ ، به مغایرت با تجربه منجر می شود.

۸-۳- تقریبی برای $U(t)$ یک ذره آزاد

بحث های قبلی نشان دادند که با تقریب خوبی می توانیم از همه مسیرها به جز مسیر کلاسیکی و همسایه های آن در محاسبه $U(t)$ چشم پوشی کنیم. با فرض اینکه هر یک از این مسیرها به میزان یکسان $\exp(iS_{cl} / \hbar)$ سهم می شوند، چون S مانا است، خواهیم داشت:

$$U(t) = A' e^{iS_{cl}/\hbar} \quad (۱-۳-۸)$$

که A' یک ضریب بهنجار کننده است که «معیاری» از تعداد مسیرها در گستره همدوسی است. $U(t)$ را برای یک ذره آزاد در این تقریب به دست می آوریم و نتیجه را با نتیجه دقیق، معادله (۵-۱-۱۰)، مقایسه می کنیم.

مسیر کلاسیکی برای یک ذره آزاد، همان خط راست در صفحه $x-t$ است:

$$x_{cl}(t'') = x' + \frac{x-x'}{t-t'}(t''-t') \quad (۲-۳-۸)$$

که متناظر با حرکت با سرعت یکنواخت $v = (x-x')/(t-t')$ است. چون $\mathcal{L} = mv^2/2$ یک ثابت است،

$$S_{cl} = \int_{t'}^{t''} \mathcal{L} dt'' = \frac{1}{2} m \frac{(x-x')^2}{t-t'}$$

به طوری که

$$U(x, t; x', t') = A' \exp \left[\frac{im(x-x')^2}{2\hbar(t-t')} \right] \quad (۳-۳-۸)$$

برای به دست آوردن A' از این حقیقت بهره می‌گیریم که وقتی $t-t'$ به 0 میل می‌کند U باید به $\delta(x-x')$ میل کند. با مقایسه معادله (۳-۳-۸) با نمایش تابع دلتا که در بخش ۱-۱۰ با آن مواجه شدیم (پاورقی مربوط به پاراگراف بعد از معادله (۱-۱۰-۱۹) را ببینید)،

$$\delta(x-x') \equiv \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{1}{(\pi\Delta^2)^{1/2}} \exp\left[-\frac{(x-x')^2}{\Delta^2}\right]$$

(که حتی اگر Δ موهومی باشد معتبر است) به نتیجه زیر می‌رسیم

$$A' = \left[\frac{m}{2\pi\hbar i(t-t')} \right]^{1/2}$$

به طوری که

$$U(x, t; x', 0) \equiv U(x, t; x') = \left(\frac{m}{2\pi\hbar it} \right)^{1/2} \exp\left[\frac{im(x-x')^2}{2\hbar t} \right] \quad (۴-۳-۸)$$

که جواب دقیق است! ما فقط با محاسبه کنش کلاسیک به جواب دقیق رسیده‌ایم! اما در بخش ۸-۶ خواهیم دید که فقط برای پتانسیل‌هایی به شکل $V = a + bx + cx^2 + dx + exx$ درست است که $U(t) = A(t)e^{iS_{cl}/\hbar}$ بنویسیم. به علاوه در حالت کلی نمی‌توانیم $A(t)$ را با استفاده از $U(x, 0; x') = \delta(x-x')$ به دست آوریم چون A می‌تواند شامل یک تابع بی بعد دلخواه f باشد به طوری که وقتی $t \rightarrow 0$ میل می‌کند $f \rightarrow 1$ میل کند. در اینجا $f \equiv 1$ است زیرا نمی‌توانیم با استفاده از m ، \hbar و یک f بی بعد و غیر بدیهی بسازیم (امتحان کنید).

۸-۴- محاسبه انتشارگر ذره آزاد با انتگرال مسیر

اگر چه تحلیل ذهنی و ابتکاری ما، انتشارگر دقیق ذره آزاد را به دست داد، اکنون محاسبه را بدون هر نوع تقریبی برای نشان دادن انتگرال‌گیری مسیر تکرار خواهیم کرد.

$U(x_N, t_N; x_0, t_0)$ را در نظر بگیرید. نامگذاری خاص نقاط انتهایی بعداً توجیه خواهد شد. مسئله ما انجام انتگرال مسیر زیر است

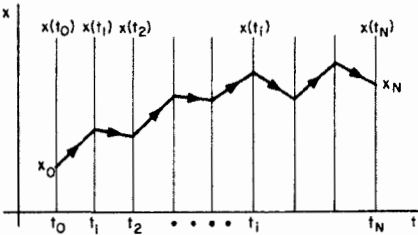
$$\int_{x_0}^{x_N} e^{iS[x(t)]/\hbar} \mathcal{D}[x(t)] \quad (۱-۴-۸)$$

که

$$\int_{x_0}^{x_N} \mathcal{D}[x(t)]$$

شیوه‌ای نمادین برای بیان «انتگرال روی همه مسیرهای واصل x_0 و x_N (در بازه t_0 تا t_N)» است. اکنون یک مسیر $x(t)$ به وسیله تعداد نامتناهی از اعداد $x(t_0), \dots, x(t), \dots, x(t_N)$ ، یعنی مقادیر تابع $x(t)$ در هر نقطه t در بازه t_0 تا t_N به طور کامل مشخص می‌شود. برای جمع روی همه مسیرها می‌بایست روی همه مقادیر ممکن این متغیرهای نامتناهی، البته به جز $x(t_0)$ و $x(t_N)$ که به ترتیب در x_0 و x_N ثابت نگه

داشته خواهند شد، انتگرال بگیریم. برای حل این مسئله از ایده به کار رفته در بخش ۱-۱۰ استفاده می کنیم. تابع $x(t)$ را با یک تقریب گسسته آن، که با $x(t)$ در $N+1$ نقطه $t_n = t_0 + n\varepsilon$ ، $n=0, \dots, N$ و $\varepsilon = t_N - t_0 / N$ ، مطابقت دارد عوض می کنیم. در این تقریب هر مسیر به وسیله $N+1$ عدد $x(t_0), x(t_1), \dots, x(t_N)$ مشخص می شود. فاصله ها در تابع گسسته به وسیله خطوط راست برازش می شوند. یک چنین مسیری در شکل ۸-۴ نشان داده شده است. امیدواریم که اگر حد $N \rightarrow \infty$ را در پایان بگیریم به نتیجه ای خواهیم رسید که به این تقریب ها حساس نیست. اکنون که مسیرها گسسته شده اند می بایست همین کار را برای انتگرال کنش هم انجام دهیم. تعریف مسیر - پیوسته



شکل ۸-۴: تقریب گسسته برای مسیر $x(t)$. هر مسیر به وسیله $N-1$ عدد $x(t_1), \dots, x(t_{N-1})$ مشخص می شود. برای جمع روی مسیرها، باید از هر x_i از $-\infty$ تا $+\infty$ انتگرال بگیریم. همین که همه انتگرال ها گرفته شدند، می توانیم حد $N \rightarrow \infty$ را بگیریم.

$$S = \int_{t_0}^{t_N} \mathcal{L}(t) dt = \int_{t_0}^{t_N} \frac{1}{2} m \dot{x}^2 dt$$

را با تعریف زیر جایگزین می کنیم

$$S = \sum_{i=0}^{N-1} \frac{m}{2} \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\varepsilon} \right)^2 \varepsilon \tag{۲-۴-۸}$$

که $x_i = x(t_i)$ است. می خواهیم انتگرال زیر را حساب کنیم

$$U(x_N, t_N; x_0, t_0) = \int_{x_0}^{x_N} \exp\{iS[x(t)]/\hbar\} \mathcal{D}[x(t)]$$

$$= \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \varepsilon \rightarrow 0}} A \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \sum_{i=0}^{N-1} \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{\varepsilon} \right] \tag{۳-۴-۸}$$

$$\times dx_1 \dots dx_{N-1}$$

اینکه x_0 و x_N مقادیری را دارند که ما در ابتدا انتخاب کرده ایم در عبارت فوق به طور ضمنی وجود دارد. ضریب A قرار است در پایان طوری انتخاب شود که وقتی حد $N \rightarrow \infty$ گرفته می شود به مقیاس درستی برای U برسیم.

ابتدا تغییر متغیر می دهیم:

$$y_i = \left(\frac{m}{2\hbar\varepsilon} \right)^{1/2} x_i$$

۱- انتظار داریم که تغییرات ناگهانی در سرعت در نقاط $t_0 + n\varepsilon$ که به واسطه تقریب ما ظاهر می شوند مسئله خاصی ایجاد نخواهند کرد چون \mathcal{L} به شتاب یا مشتقات بالاتر بستگی ندارد.

در این صورت آنچه مورد نظر است عبارتست از

$$\lim_{N \rightarrow \infty} A' \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[- \sum_{i=0}^{N-1} \frac{(y_{i+1} - y_i)^2}{i} \right] dy_1 \cdots dy_{N-1} \quad (۴-۴-۸)$$

که در آن

$$A' = A \left(\frac{2\hbar\varepsilon}{m} \right)^{(N-1)/2}$$

اگر چه انتگرال چندگانه پر در دسر به نظر می‌رسد ولی این‌طور نیست. با انجام انتگرال‌گیری y_1 شروع می‌کنیم. با در نظر گرفتن فقط بخشی از انتگرالده که شامل y_1 است نتیجه زیر حاصل می‌شود

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{1}{i} [(y_2 - y_1)^2 + (y_1 - y_0)^2] \right\} dy_1 = \left(\frac{i\pi}{2} \right)^{1/2} e^{-(y_2 - y_0)^2/2i} \quad (۵-۴-۸)$$

سپس انتگرال روی y_2 را در نظر می‌گیریم. با در نظر گرفتن آن بخش از انتگرالده که شامل y_2 است و ترکیب آن با نتیجه بالا،

$$\begin{aligned} & \left(\frac{i\pi}{2} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(y_3 - y_2)^2/i} \cdot e^{-(y_2 - y_0)^2/2i} dy_2 \\ &= \left(\frac{i\pi}{2} \right)^{1/2} e^{-(2y_3^2 + y_0^2)/2i} \left(\frac{2\pi i}{3} \right)^{1/2} e^{(y_0 + 2y_3)^2/6i} \\ &= \left[\frac{(i\pi)^2}{3} \right]^{1/2} e^{-(y_3 - y_0)^2/3i} \end{aligned} \quad (۶-۴-۸)$$

از مقایسه این نتیجه با نتیجه حاصل از انتگرال‌گیری y_1 این الگو به دست می‌آید: اگر این کار $N-1$ بار انجام شود تا انتگرال معادله (۴-۴-۸) محاسبه شود نتیجه می‌شود

$$\frac{(i\pi)^{(N-1)/2}}{N^{1/2}} e^{-(y_N - y_0)^2/Ni}$$

یا

$$\frac{(i\pi)^{(N-1)/2}}{N^{1/2}} e^{-m(x_N - x_0)^2/2\hbar\varepsilon Ni}$$

با وارد کردن ضرب $A(2\hbar\varepsilon/m)^{(N-1)/2}$ از بالا به عبارت

$$U = A \left(\frac{2\pi\hbar\varepsilon i}{m} \right)^{N/2} \left(\frac{m}{2\pi\hbar i N \varepsilon} \right)^{1/2} \exp \left[\frac{im(x_N - x_0)^2}{2\hbar N \varepsilon} \right]$$

می‌رسیم. اگر بخواهیم $N \rightarrow \infty$ ، $\varepsilon \rightarrow 0$ ، $t_N - t_0 \rightarrow \varepsilon$ میل کند به شرطی به جواب صحیح می‌رسیم که

$$A = \left[\frac{2\pi\hbar\varepsilon i}{m} \right]^{-N/2} \equiv B^{-N} \quad (۷-۴-۸)$$

باشد. به طور قرار دادی یک ضریب $1/B$ به هر یک از $N-1$ انتگرال نسبت می‌دهیم و ضریب $1/B$ را در جریان کار حفظ می‌کنیم. به عبارت دیگر آموخته‌ایم که مفهوم دقیق عبارت «انتگرال روی همه مسیرها» عبارتست از

$$\int \mathcal{D}[x(t)] = \lim_{\substack{\varepsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \frac{1}{B} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_1}{B} \cdot \frac{dx_2}{B} \dots \frac{dx_{N-1}}{B}$$

که در آن،

$$B = \left(\frac{2\pi\hbar\varepsilon i}{m} \right)^{1/2} \quad (۸-۴-۸)$$

۸-۵- هم ارزی با معادله شرودینگر

رابطه بین فرمالیزم‌های شرودینگر و فاینمن کاملاً شبیه رابطه بین فرمالیزم‌های نیوتنی و کمترین کنش در مکانیک است از این حیث که رویکرد اول نسبت به زمان موضعی است و به تحول زمانی روی دوره تناوب‌های بسیار کوچک می‌پردازد در حالی که رویکرد دوم کلی بوده و مستقیماً به انتشار در زمان‌های متناهی می‌پردازد.

در فرمالیزم شرودینگر، تغییر بردار حالت $|\psi\rangle$ روی یک زمان بی‌نهایت کوچک ε برابر است با

$$|\psi(\varepsilon)\rangle - |\psi(0)\rangle = \frac{-i\varepsilon}{\hbar} H |\psi(0)\rangle \quad (۱-۵-۸)$$

که در پایه X تا مرتبه اول از ε به شکل زیر در می‌آید

$$\psi(x, \varepsilon) - \psi(x, 0) = \frac{-i\varepsilon}{\hbar} \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, 0) \right] \psi(x, 0) \quad (۲-۵-۸)$$

برای مقایسه این نتیجه با پیش بینی انتگرال مسیر تا همین مرتبه از ε با عبارت زیر شروع می‌کنیم

$$\psi(x, \varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} U(x, \varepsilon; x') \psi(x', 0) dx' \quad (۳-۵-۸)$$

محاسبه $U(\varepsilon)$ با دانستن این که هیچ نیازی به انجام انتگرال گیری روی x های میانی نیست ساده می‌شود چون فقط یک بازه زمانی ε بین شروع و پایان وجود دارد. بنابراین

$$U(x, \varepsilon; x') = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon} \right)^{1/2} \exp \left\{ i \left[\frac{m(x-x')^2}{2\varepsilon} - \varepsilon V \left(\frac{x+x'}{2}, 0 \right) \right] / \hbar \right\} \quad (۴-۵-۸)$$

که ضریب $(m/2\pi\hbar i \varepsilon)^{1/2}$ مقابل آن همان ضریب $1/B$ معادله (۸-۴-۸) است. ما شناسه زمان V را صفر گرفتیم چون اکنون یک ضریب ε قبل از آن وجود دارد و هر تغییر V با زمان در بازه 0 تا ε اثری از مرتبه دوم از ε ایجاد خواهد کرد. لذا

$$\psi(x, \varepsilon) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i \varepsilon}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{im(x-x')^2}{2\varepsilon\hbar}\right] \exp\left[-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V\left(\frac{x+x'}{2}, 0\right)\right] \times \psi(x', 0) dx' \quad (5-5-8)$$

ضریب $\exp[im(x-x')^2/2\varepsilon\hbar]$ را در نظر بگیرید. با تغییر $(x-x')$ ، این ضریب به تندی نوسان می‌کند چون ε بی‌نهایت کوچک است و \hbar بسیار کوچک می‌باشد. وقتی چنین تابع نوسان کننده‌ای در یک تابع هموار نظیر $\psi(x', 0)$ ضرب می‌شود بیشتر به واسطه فاز تصادفی تابع نمایان انتگرال صفر می‌شود. درست مثل حالت انتگرال گیری مسیر، تنها سهم اساسی از ناحیه‌ای ناشی می‌شود که فاز مانا است. در این حالت، تنها نقطه پایدار $x = x'$ است جایی که فاز مقدار کمینه خود، صفر، را دارد. برحسب $y = x' - x$ ناحیه همدوسی همانند قبل عبارتست از

$$\frac{m\eta^2}{2\varepsilon\hbar} \lesssim \pi$$

یا

$$|\eta| \lesssim \left(\frac{2\varepsilon\hbar\pi}{m}\right)^{1/2} \quad (6-5-8)$$

اکنون

$$\psi(x, \varepsilon) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i \varepsilon}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(im\eta^2/2\hbar\varepsilon) \cdot \exp\left[-\left(\frac{i}{\hbar}\right)\varepsilon V\left(x + \frac{\eta}{2}, 0\right)\right] \times \psi(x + \eta, 0) d\eta \quad (7-5-8)$$

را در نظر بگیرید. ما تا مرتبه اول از ε و بنابراین تا مرتبه دوم از η کار خواهیم کرد [معادله (۶-۵-۸)] را ببینید. بسط زیر را انجام می‌دهیم

$$\begin{aligned} \psi(x + \eta, 0) &= \psi(x, 0) + \eta \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\eta^2}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \dots \\ \exp\left[-\left(\frac{i}{\hbar}\right)\varepsilon V\left(x + \frac{\eta}{2}, 0\right)\right] &= 1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V\left(x + \frac{\eta}{2}, 0\right) + \dots \\ &= 1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x, 0) + \dots \end{aligned}$$

چون باید از جملات از مرتبه $\eta\varepsilon$ چشم‌پوشی کنیم. معادله (۷-۵-۸) به شکل

$$\psi(x, \varepsilon) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\varepsilon}\right) \left[\psi(x, 0) - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x, 0) \psi(x, 0) + \eta \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\eta^2}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right] d\eta$$

می شود. با مراجعه به لیست انتگرال های گاوسی در ضمیمه A-۲ به عبارت زیر می رسیم

$$\psi(x, \varepsilon) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon}\right)^{1/2} \left[\psi(x, 0) \left(\frac{2\pi\hbar i\varepsilon}{m}\right)^{1/2} - \frac{\hbar\varepsilon}{2im} \left(\frac{2\pi\hbar i\varepsilon}{m}\right)^{1/2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \left(\frac{2\pi\hbar i\varepsilon}{m}\right)^{1/2} V(x, 0) \psi(x, 0) \right]$$

یا

$$\psi(x, \varepsilon) - \psi(x, 0) = \frac{-i\varepsilon}{\hbar} \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, 0) \right] \psi(x, 0) \quad (۸-۵-۸)$$

که با پیش بینی شرودینگر، معادله (۸-۵-۸)، سازگار است.

۸-۶- پتانسیل های به شکل $V = a + bx + cx^2 + dx + exx$ می خواهیم عبارت زیر را حساب کنیم

$$U(x, t; x') = \int_{x'}^x e^{iS[x(t'')]/\hbar} \mathcal{D}[x(t'')] \quad (۸-۶-۱)$$

فرض کنید هر مسیر را به صورت زیر بنویسیم

$$x(t'') = x_{cl}(t'') + y(t'') \quad (۸-۶-۲)$$

و به تبع آن،

$$\dot{x}(t'') = \dot{x}_{cl}(t'') + \dot{y}(t'') \quad (۸-۶-۳)$$

از آنجا که همه مسیرها در نقاط انتهایی بر هم منطبق اند، $y(0) = y(t) = 0$. وقتی زمان را به N قسمت تقسیم کنیم، برای متغیرهای انتگرال گیری میانی داریم:

$$x_i \equiv x(t_i'') = x_{cl}(t_i'') + y(t_i'') \equiv x_{cl}(t_i'') + y_i$$

چون $x_{cl}(t_i'')$ در t_i'' فقط یک ثابت است،

$$dx_i = dy_i$$

و

$$\int_{x'}^x \mathcal{D}[x(t'')] = \int_0^0 \mathcal{D}[y(t'')] \quad (4-6-8)$$

به طوری که معادله (۱-۶-۸) به صورت زیر می شود

$$U(x, t; x') = \int_0^0 \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S[x_{cl}(t'') + y(t'')]\right\} \mathcal{D}[y(t'')] \quad (5-6-8)$$

گام بعدی، بسط سری تیلور تابعی S حول x_{cl} است:

$$\begin{aligned} S[x_{cl} + y] &= \int_0^t \mathcal{L}(x_{cl} + y, \dot{x}_{cl} + \dot{y}) dt'' \\ &\equiv \int_0^t \left[\mathcal{L}(x_{cl}, \dot{x}_{cl}) + \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} \Big|_{x_{cl}} y + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \Big|_{x_{cl}} \dot{y} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial x^2} \Big|_{x_{cl}} y^2 + 2 \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial x \partial \dot{x}} \Big|_{x_{cl}} y \dot{y} + \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \dot{x}^2} \Big|_{x_{cl}} \dot{y}^2 \right) \right] dt'' \end{aligned} \quad (6-6-8)$$

چون \mathcal{L} یک چند جمله ای درجه ۲ است سری در اینجا قطع می شود. جمله اول، $\mathcal{L}(x_{cl}, \dot{x}_{cl})$ ، بعد از انتگرال گیری به $S[x_{cl}] \equiv S_{cl}$ منجر می شود. جزء دوم، که نسبت به y و \dot{y} خطی است، به خاطر معادله حرکت کلاسیکی صفر می شود. در جزء آخر، اگر به یاد آوریم که

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - a - bx - cx^2 - d\dot{x} - ex\dot{x} \quad (7-6-8)$$

داریم

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial x^2} = -c \quad (8-6-8)$$

$$\frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial x \partial \dot{x}} = -e \quad (9-6-8)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \dot{x}^2} = m \quad (10-6-8)$$

در نتیجه معادله (۵-۶-۸) به شکل زیر در می آید

$$\begin{aligned} U(x, t; x') &= \exp\left(\frac{iS_{cl}}{\hbar}\right) \int_0^0 \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t \left(\frac{1}{2} m \dot{y}^2 - cy^2 - ey\dot{y}\right) dt''\right] \\ &\quad \times \mathcal{D}[y(t'')] \end{aligned} \quad (11-6-8)$$

از آنجا که انتگرال مسیر هیچ نشانی از x_{cl} ندارد فقط می تواند به t بستگی داشته باشد. بنابراین

$$U(x, t; x') = e^{iS_{cl}/\hbar} A(t) \quad (۱۲-۶-۸)$$

که $A(t)$ تابع ناشناخته‌ای از t است. حال اگر مسئله ذره آزاد را در نظر می‌گیریم به معادله (۱۱-۶-۸) با $c = e = 0$ می‌رسیدیم. در این مورد می‌دانیم که [معادله (۴-۳-۸)] را ببینید

$$A(t) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar it} \right)^{1/2} \quad (۱۳-۶-۸)$$

چون ضریب b در معادله (۱۱-۶-۸) نمایان نمی‌شود نتیجه می‌شود که همین مقدار $A(t)$ متناظر با پتانسیل خطی $V = a + bx$ هم هست. برای نوسانگر هماهنگ، $c = \frac{1}{2}m\omega^2$ بوده و می‌بایست انتگرال زیر را محاسبه کنیم

$$A(t) = \int_0^0 \exp \left[i/\hbar \int_0^t \frac{1}{2} m(\dot{y}^2 - \omega^2 y^2) \right] dt'' \mathcal{D}[y(t'')] \quad (۱۴-۶-۸)$$

محاسبه این انتگرال در کتاب فاینمن و هیبز^۱ که در آخر این بخش بدان اشاره می‌شود بحث شده است. توجه کنید که حتی اگر ضریب $A(t)$ در $\psi(x, t)$ معلوم نباشد می‌توانیم همه اطلاعات احتمالاتی را در زمان t از آن استخراج کنیم.

توجه کنید که فرمالیزم فاینمن به چه سهولتی انتشارگر کامل را در این موارد به دست می‌دهد. به‌ویژه روش پر زحمت یافتن ویژه توابع هامیلتونی و چگونگی ساختن انتشارگر نوسانگر هماهنگ از آنها را ملاحظه کنید. روش انتگرال مسیر می‌تواند بدون تفاوت‌های کیفی زیاد به سه بعد هم بسط داده شود. بویژه شکل U در معادله (۱۲-۶-۸) برای پتانسیل‌هایی معتبر است که نسبت به مختصه‌ها و سرعت‌ها حداکثر از درجه ۲ هستند. یک مسئله جالب از این دست، مسئله ذره در میدان مغناطیسی یکنواخت است. برای جزئیات بیشتر در مورد مکانیک کوانتومی انتگرال‌های مسیر، کتاب انتگرال‌های مسیر و مکانیک کوانتومی فاینمن و هیبز را ببینید.^۲

تمرین ۸-۶-۱: ثابت کنید که

$$U(x, t; x', 0) = A(t) \exp(iS_{cl}/\hbar), \quad A(t) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar it} \right)^{1/2}$$

برای $V(x) = -fx$ با نتیجه دقیق، معادله (۳۱-۴-۵)، توافق دارد. راهنمایی: با $x_{cl}(t'') = x_0 + v_0 t'' + \frac{1}{2}(f/m)t''^2$ شروع کرده و ثابت‌های x_0 و v_0 را از شرط $x_{cl}(0) = x'$ و $x_{cl}(t) = x$ به دست آورید.

تمرین ۸-۶-۲: نشان دهید که برای نوسانگر هماهنگ با

1- Hibbs.

2- R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Path Integrals and Quantum Mechanics*, McGraw-Hill (1965)

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

$$U(x, t; x') = A(t) \exp \left\{ \frac{i m \omega}{2 \hbar \sin \omega t} [(x^2 + x'^2) \cos \omega t - 2 x x'] \right\}$$

که $A(t)$ تابعی نامعلوم است.

تمرین ۸-۶-۳: می‌دانیم که با معلوم بودن ویژه توابع و ویژه مقادیر، می‌توانیم انتشارگر را تشکیل دهیم:

$$U(x, t; x', t') = \sum_n \psi_n(x) \psi_n(x')^* e^{-i E_n(t-t')/\hbar} \quad (15-6-8)$$

فرایند معکوس را برای مورد نوسانگر در نظر بگیرید (چون رویکرد انتگرال مسیر مستقیماً U را به دست می‌دهد).

الف) - $x = x' = t' = 0$ قرار دهید. فرض کنید برای نوسانگر $(m \omega / 2 \pi i \hbar \sin \omega t)^{1/2}$ $A(t) =$ است. با بسط هر دو طرف معادله (۱۵-۶-۸) باید به $E = \hbar \omega / 2, 5 \hbar \omega / 2, 9 \hbar \omega / 2, \dots$ برسید. برای ترازهای بین آنها چه اتفاقی می‌افتد؟

ب) - (اختیاری). استخراج ویژه توابع را در نظر بگیرید. فرض کنید $x = x'$ و $t' = 0$ است. E_1, E_0 ، $|\psi_0(x)|^2$ و $|\psi_1(x)|^2$ را با بسط دادن بر حسب توان‌های $\alpha = \exp(i \omega t)$ به دست آورید.

تمرین ۸-۶-۴: استنتاج معادله شرودینگر از (۸-۵-۸) را با شروع از معادله (۴-۵-۸) به خاطر بیاورید. توجه کنید که اگر چه شناسه V را نقطه میانی $x + x' / 2$ انتخاب کردیم اما این مسئله مهمی نبود: هر انتخاب $x + \alpha \eta$ برای $0 \leq \alpha \leq 1$ همین نتیجه را به دست می‌داد چون تفاوت بین این انتخاب‌ها از مرتبه $\eta \varepsilon \cong \varepsilon^{3/2}$ است. تمام اینها مدیون ضرب ε ضرب شده در V در معادله (۴-۵-۸) و $|\eta| \cong \varepsilon^{1/2}$ هستند. حال حالت پتانسیل برداری را در نظر بگیرید که برای یک بازه زمانی یک ضرب

$$\exp \left[\frac{i q \varepsilon}{\hbar c} \frac{x - x'}{\varepsilon} A(x + \alpha \eta) \right] \cong \exp \left[- \frac{i q \varepsilon}{\hbar c} \frac{\eta}{\varepsilon} A(x + \alpha \eta) \right]$$

وارد می‌کند (در واقع باید از بردارها برای مکان و پتانسیل برداری استفاده کنیم اما شکل یک بعدی در اینجا کفایت می‌کند). توجه کنید که ε برخلاف مورد پتانسیل نرده‌ای حذف می‌شود. لذا رفتن تا مرتبه ε برای به دست آوردن معادله شرودینگر به معنی رفتن تا مرتبه η^2 در بسط تابع نمایی است. این نه تنها یک جمله A^2 وارد می‌کند بلکه جواب را به شناسه A در جمله خطی حساس خواهد کرد. $\alpha = 1/2$ انتخاب کرده و ثابت کنید که به شکل یک بعدی معادله (۴-۳-۷۹) می‌رسید. در طی مسیر خواهید دید که تغییر α تغییری از مرتبه ε در $\psi(x, \varepsilon)$ ایجاد می‌کند به طوری که انتخابی به جز $\alpha = 1/2$ ، یعنی دستورالعمل نقطه میانی، نداریم.

۹-۱-۱ مقدمه

در مکانیک کلاسیک برای یک ذره در حالت (x_0, p_0) مقادیر خوش تعریفی برای هر متغیر دینامیکی $\omega(x, p)$ به آن نسبت داده می‌شود یعنی $\omega(x_0, p_0)$. در نظریه کوانتومی با معلوم بودن یک حالت $|\psi\rangle$ فقط می‌توان احتمالات $P(\omega)$ را برای خروجی‌های ممکن اندازه‌گیری Ω به دست آورد. توزیع احتمال به وسیله مقادیر میانگین یا چشم‌داشتی

$$\langle \Omega \rangle = \langle \psi | \Omega | \psi \rangle \quad (1-1-9)$$

و یک عدم قطعیت حول این میانگین مشخص خواهد شد:

$$(\Delta\Omega) = [\langle \psi | (\Omega - \langle \Omega \rangle)^2 | \psi \rangle]^{1/2} \quad (2-1-9)$$

اما حالت‌هایی وجود دارند که برای آنها $\Delta\Omega = 0$ است و اینها ویژه حالت‌های $|\omega\rangle$ عملگر Ω هستند. اگر دو عملگر هرمیتی Ω و Λ را در نظر بگیریم در حالت کلی دارای عدم قطعیت‌های $\Delta\Omega$ و $\Delta\Lambda$ در یک حالت دلخواه هستند. در بخش بعد روابط عدم قطعیت هایزنبرگ را به دست خواهیم آورد که کران پایین را برای حاصل ضرب عدم قطعیت‌های $\Delta\Omega$ و $\Delta\Lambda$ به دست می‌دهد. به‌طور کلی کران پایین نه تنها به عملگرها بلکه به حالت هم بستگی خواهد داشت. از موارد مهم برای ما مواردی هستند که در آنها کران پایین مستقل از حالت است. استنتاج زیر شرایطی را که تحت آنها چنین رابطه‌ای موجود خواهد بود روشن خواهد کرد.

۹-۲- استنتاج روابط عدم قطعیت

فرض کنید Ω و Λ دو عملگر هرمیتی با جابجاگر زیر باشند

$$[\Omega, \Lambda] = i\Gamma \quad (1-2-9)$$

می‌توانید به راحتی ثابت کنید که Γ هم هرمیتی است. با حاصل ضرب عدم قطعیت در حالت بهنجار شده $|\psi\rangle$ شروع می‌کنیم:

$$(\Delta\Omega)^2(\Delta\Lambda)^2 = \langle \psi | (\Omega - \langle \Omega \rangle)^2 | \psi \rangle \langle \psi | (\Lambda - \langle \Lambda \rangle)^2 | \psi \rangle \quad (2-2-9)$$

که $\langle \Omega \rangle = \langle \psi | \Omega | \psi \rangle$ و $\langle \Lambda \rangle = \langle \psi | \Lambda | \psi \rangle$. دو تعریف زیر را ارائه می کنیم

$$\hat{\Omega} = \Omega - \langle \Omega \rangle \quad (3-2-9)$$

$$\hat{\Lambda} = \Lambda - \langle \Lambda \rangle$$

که همان جابه جاگر Ω و Λ را دارند (ثابت کنید). برحسب $\hat{\Omega}$ و $\hat{\Lambda}$ ،

$$(\Delta\Omega)^2(\Delta\Lambda)^2 = \langle \psi | \hat{\Omega}^2 | \psi \rangle \langle \psi | \hat{\Lambda}^2 | \psi \rangle \quad (4-2-9)$$

$$= \langle \hat{\Omega} \psi | \hat{\Omega} \psi \rangle \langle \hat{\Lambda} \psi | \hat{\Lambda} \psi \rangle$$

چون

$$\hat{\Omega}^2 = \hat{\Omega} \hat{\Omega} = \hat{\Omega}^\dagger \hat{\Omega}$$

و

$$\hat{\Lambda}^2 = \hat{\Lambda}^\dagger \hat{\Lambda} \quad (5-2-9)$$

اگر از نامساوی شوارتز

$$|V_1|^2 |V_2|^2 \geq |\langle V_1 | V_2 \rangle|^2 \quad (6-2-9)$$

(که علامت مساوی فقط در صورتی برقرار است که $|V_1\rangle = c|V_2\rangle$ باشد، که c ثابت است) برای حالات

$$|\hat{\Omega} \psi\rangle \quad \text{و} \quad |\hat{\Lambda} \psi\rangle$$

استفاده کنیم، از معادله (۴-۲-۹) به رابطه زیر می رسیم

$$(\Delta\Omega)^2(\Delta\Lambda)^2 \geq |\langle \hat{\Omega} \psi | \hat{\Lambda} \psi \rangle|^2 \quad (7-2-9)$$

از

$$\langle \hat{\Omega} \psi | \hat{\Lambda} \psi \rangle = \langle \psi | \hat{\Omega}^\dagger \hat{\Lambda} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{\Omega} \hat{\Lambda} | \psi \rangle \quad (8-2-9)$$

استفاده می کنیم تا نامساوی فوق را به صورت زیر بازنویسی کنیم

$$(\Delta\Omega)^2(\Delta\Lambda)^2 \geq |\langle \psi | \hat{\Omega} \hat{\Lambda} | \psi \rangle|^2 \quad (9-2-9)$$

اکنون می دانیم که جابه جاگر می بایست در یک جایی وارد این تصویر شود. ترتیب این کار را با اتحاد زیر مهیا می کنیم:

$$\hat{\Omega} \hat{\Lambda} = \frac{\hat{\Omega} \hat{\Lambda} + \hat{\Lambda} \hat{\Omega}}{2} + \frac{\hat{\Omega} \hat{\Lambda} - \hat{\Lambda} \hat{\Omega}}{2} \quad (10-2-9)$$

$$= \frac{1}{2}[\hat{\Omega}, \hat{\Lambda}]_+ + \frac{1}{2}[\hat{\Omega}, \hat{\Lambda}]_-$$

که $[\hat{\Omega}, \hat{\Lambda}]_+$ پادجابه جاگر نامیده می شود. با قرار دادن معادله (۹-۲-۱۰) در نامساوی (۹-۲-۷) به نامساوی

$$(\Delta\Omega)^2(\Delta\Lambda)^2 \geq |\langle \psi | \frac{1}{2}[\hat{\Omega}, \hat{\Lambda}]_+ + \frac{1}{2}[\hat{\Omega}, \hat{\Lambda}] | \psi \rangle|^2 \quad (۹-۲-۹)$$

می رسیم سپس از نکات زیر استفاده می کنیم که:

(۱) - چون $[\hat{\Omega}, \hat{\Lambda}] = i\Gamma$ ، که Γ هرمیتی است، مقدار چشم داشتی جابه جاگر، موهومی خالص است؛

(۲) - چون $[\hat{\Omega}, \hat{\Lambda}]_+$ هرمیتی است مقدار چشم داشتی پادجابه جاگر، حقیقی است.

با یادآوری $|a + ib|^2 = a^2 + b^2$ نامساوی به صورت زیر در می آید

$$\begin{aligned} (\Delta\Omega)^2(\Delta\Lambda)^2 &\geq \frac{1}{4} |\langle \psi | [\hat{\Omega}, \hat{\Lambda}]_+ | \psi \rangle + i \langle \psi | \Gamma | \psi \rangle|^2 \\ &\geq \frac{1}{4} \langle \psi | [\hat{\Omega}, \hat{\Lambda}]_+ | \psi \rangle^2 + \frac{1}{4} \langle \psi | \Gamma | \psi \rangle^2 \end{aligned} \quad (۹-۲-۱۲)$$

این رابطه، رابطه کلی عدم قطعیت بین هر دو عملگر هرمیتی است و بدیهی است که وابسته به حالت است. حال عملگرهای مزدوج کانونیک را در نظر بگیرید که برای آنها $\Gamma = \hbar$ است. در این مورد

$$(\Delta\Omega)^2(\Delta\Lambda)^2 \geq \frac{1}{4} \langle \psi | [\hat{\Omega}, \hat{\Lambda}]_+ | \psi \rangle^2 + \frac{\hbar^2}{4} \quad (۹-۲-۱۳)$$

چون جمله اول معین و مثبت است می توانیم ادعا کنیم که برای هر $|\psi\rangle$ ،

$$(\Delta\Omega)^2(\Delta\Lambda)^2 \geq \hbar^2/4$$

یا

$$\Delta\Omega \cdot \Delta\Lambda \geq \hbar/2 \quad (۹-۲-۱۴)$$

که رابطه عدم قطعیت مشهور است. توجه کنید که نامساوی فوق فقط در صورتی تساوی می شود که

$$(1) \quad \hat{\Omega}|\psi\rangle = c\hat{\Lambda}|\psi\rangle$$

(۹-۲-۱۵)

$$(2) \quad \langle \psi | [\hat{\Omega}, \hat{\Lambda}]_+ | \psi \rangle = 0$$

باشد.

۹-۳ - بسته موج با کمینه عدم قطعیت

در این بخش تابع موج $\psi(x)$ را پیدا می کنیم که کران پایین رابطه عدم قطعیت را برای X و P اشباع می کند. طبق معادله (۹-۲-۱۵) چنین حالتی با

$$(P - \langle P \rangle) |\psi\rangle = c(X - \langle X \rangle) |\psi\rangle \quad (۹-۳-۱)$$

$$\langle \psi | (P - \langle P \rangle)(X - \langle X \rangle) + (X - \langle X \rangle)(P - \langle P \rangle) | \psi \rangle = 0 \quad (۹-۳-۲)$$

مشخص می‌شود که $\langle P \rangle$ و $\langle X \rangle$ که مربوط به حالت $|\psi\rangle$ هستند به‌طور ضمنی با این معادلات تعریف می‌شوند. در پایه X ، معادله (۹-۳-۱) به صورت

$$\left(-i\hbar \frac{d}{dx} - \langle P \rangle\right) \psi(x) = c(x - \langle X \rangle) \psi(x)$$

یا

$$\frac{d\psi(x)}{\psi(x)} = \frac{i}{\hbar} [\langle P \rangle + c(x - \langle X \rangle)] dx \quad (۹-۳-۳)$$

در می‌آید. حال، $\langle X \rangle$ هر چه باشد همیشه این امکان وجود دارد که مبدا خود را (به $x = \langle X \rangle$) انتقال دهیم به طوری که در چارچوب مرجع جدید، $\langle X \rangle = 0$ شود. در این چارچوب، معادله (۹-۳-۳) دارای جواب

$$\psi(x) = \psi(0) e^{i\langle P \rangle x / \hbar} e^{cx^2 / 2\hbar} \quad (۹-۳-۴)$$

است. اکنون قید موجود، معادله (۹-۳-۲)، را در نظر می‌گیریم که در این چارچوب به صورت

$$\langle \psi | (P - \langle P \rangle) X + X (P - \langle P \rangle) | \psi \rangle = 0$$

در می‌آید. اگر از معادله (۹-۳-۱) و الحاقی آن بهره بگیریم،

$$\langle \psi | c^* X^2 + c X^2 | \psi \rangle = 0$$

$$(c + c^*) \langle \psi | X^2 | \psi \rangle = 0$$

که از آنها نتیجه می‌شود که c موهومی محض است:

$$c = i|c| \quad (۹-۳-۵)$$

جواب ما، معادله (۹-۳-۴) به صورت زیر می‌شود

$$\psi(x) = \psi(0) e^{i\langle P \rangle x / \hbar} e^{-|c|x^2 / 2\hbar}$$

بر حسب

$$\Delta^2 = \hbar / |c|$$

داریم

$$\psi(x) = \psi(0) e^{i\langle P \rangle x / \hbar} e^{-x^2 / 2\Delta^2} \quad (۹-۳-۶)$$

که Δ^2 ، نظیر $|c|$ ، دلخواه است. اگر مبدا طوری انتخاب نمی‌شد که $\langle X \rangle$ صفر شود به جای عبارت فوق، عبارت

$$\psi(x) = \psi(\langle X \rangle) e^{i\langle P \rangle (x - \langle X \rangle) / \hbar} e^{-(x - \langle X \rangle)^2 / 2\Delta^2} \quad (۹-۳-۷)$$

را می‌داشتیم. بنابراین تابع موج با عدم قطعیت کمینه، گوسی با پهنا و مرکز دلخواه است. این نتیجه، برای حالت خاص $\langle X \rangle = \langle P \rangle = 0$ ، در جستجو برای حالتی که مقدار چشم‌داشتی هامیلتونی نوسانگر را کمینه می‌کند به کار رفته بود.

۹-۴- کاربرد های اصل عدم قطعیت

اکنون کاربرد اصل عدم قطعیت را از طریق برآورد اندازه انرژی حالت پایه و پهنای تابع موج حالت پایه نشان می‌دهیم. باید از این مثال روشن و مشخص شود که موفقیتی که در مورد نوسانگر داشتیم استثنایی بود. اتم هیدروژن را به عنوان سیستم خود انتخاب می‌کنیم. هامیلتونی این سیستم، با فرض اینکه پروتون ناظری است که تنها نقش آن فراهم کردن پتانسیل کولنی برای الکترون است، می‌تواند تماماً برحسب متغیرهای الکترون به صورت زیر نوشته شود

$$H = \frac{P_x^2 + P_y^2 + P_z^2}{2m} - \frac{e^2}{(X^2 + Y^2 + Z^2)^{1/2}} \quad (1-4-9)$$

با تقلید از تحلیل به کار رفته برای نوسانگر شروع می‌کنیم. $\langle H \rangle$ را در حالت بهنجار شده $\langle \psi |$ محاسبه می‌کنیم:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \frac{\langle P_x^2 + P_y^2 + P_z^2 \rangle}{2m} - e^2 \left\langle \frac{1}{(X^2 + Y^2 + Z^2)^{1/2}} \right\rangle \\ &= \frac{\langle P_x^2 \rangle + \langle P_y^2 \rangle + \langle P_z^2 \rangle}{2m} - e^2 \left\langle \frac{1}{(X^2 + Y^2 + Z^2)^{1/2}} \right\rangle \end{aligned} \quad (2-4-9)$$

چون

$$\langle P_x^2 \rangle = \langle \Delta P_x \rangle^2 + \langle P_x \rangle^2 \text{ etc.}$$

گام اول در کمینه کردن $\langle H \rangle$ کار کردن فقط با حالت‌هایی است که برای آنها $\langle P_i \rangle = 0$ است. برای چنین حالت‌هایی،

$$\langle H \rangle = \frac{(\Delta P_x)^2 + (\Delta P_y)^2 + (\Delta P_z)^2}{2m} - e^2 \left\langle \frac{1}{(X^2 + Y^2 + Z^2)^{1/2}} \right\rangle \quad (3-4-9)$$

ما هنوز نمی‌توانیم از روابط عدم قطعیت

$$\Delta P_x \Delta X \geq \hbar/2, \text{ etc.}$$

استفاده کنیم چون $\langle H \rangle$ تابعی از ΔX و ΔP نیست. مسئله این است که $\left\langle \frac{1}{(X^2 + Y^2 + Z^2)^{1/2}} \right\rangle$ فقط به ΔX و ΔY و ΔZ وابسته نیست. کار دستی شروع می‌شود. استدلال می‌کنیم که (تمرین ۹-۴-۲)،

۱- ما اساساً ثابت می‌کنیم که متوسط توابع (X, Y, Z) و توابع متوسط $\langle X \rangle$ و $\langle Y \rangle$ و $\langle Z \rangle$ از لحاظ مرتبه بزرگی یکسان هستند. آنها در حقیقت مساوی هستند اگر که هیچ افت و خیزی حول متوسط وجود نداشته باشد و تقریباً مساویند اگر که افت و خیزها کوچک باشند (بحث انتهای فصل ۶).

$$\left\langle \frac{1}{(X^2 + Y^2 + Z^2)^{1/2}} \right\rangle \approx \frac{1}{\langle (X^2 + Y^2 + Z^2)^{1/2} \rangle} \quad (۴-۴-۹)$$

که نماد = به این معنی است که دو طرف (۴-۴-۹) دقیقاً مساوی نیستند بلکه مرتبه بزرگی یکسان است. بنابراین

$$\langle H \rangle \approx \frac{(\Delta P_x)^2 + (\Delta P_y)^2 + (\Delta P_z)^2}{2m} \frac{e^2}{\langle (X^2 + Y^2 + Z^2)^{1/2} \rangle}$$

بار دیگر استدلال می‌کنیم که

$$\langle (X^2 + Y^2 + Z^2)^{1/2} \rangle \approx (\langle X^2 \rangle + \langle Y^2 \rangle + \langle Z^2 \rangle)^{1/2}$$

و به عبارت زیر می‌رسیم^۱

$$\langle H \rangle \approx \frac{(\Delta P_x)^2 + (\Delta P_y)^2 + (\Delta P_z)^2}{2m} \frac{e^2}{(\langle X^2 \rangle + \langle Y^2 \rangle + \langle Z^2 \rangle)^{1/2}}$$

از روابط

$$\langle X^2 \rangle = (\Delta X)^2 + \langle X \rangle^2 \quad \text{etc.}$$

چنین برمی‌آید که ما می‌توانیم در جستجو برای حالتی با پایین‌ترین انرژی میانگین خودمان را به حالت‌هایی محدود کنیم که برای آنها $\langle X \rangle = \langle Y \rangle = \langle Z \rangle = 0$ است. برای چنین حالت‌هایی،

$$\langle H \rangle \approx \frac{\Delta P_x^2 + \Delta P_y^2 + \Delta P_z^2}{2m} \frac{e^2}{[(\Delta X)^2 + (\Delta Y)^2 + (\Delta Z)^2]^{1/2}}$$

برای مسئله‌ای نظیر این، با تقارن کروی، کاملاً روشن است که پیکربندی کمترین انرژی دارای

$$(\Delta X)^2 = (\Delta Y)^2 = (\Delta Z)^2$$

و

$$(\Delta P_x)^2 = (\Delta P_y)^2 = (\Delta P_z)^2$$

خواهد بود به طوری که

$$\langle H \rangle \approx \frac{3(\Delta P_x)^2}{2m} - \frac{e^2}{3^{1/2} \Delta X} \quad (۵-۴-۹)$$

اکنون از رابطه

$$\Delta P_x \Delta X \geq \hbar/2$$

استفاده می‌کنیم تا به رابطه زیر برسیم

۱- عملگر $(X^2 + Y^2 + Z^2)^{-1/2}$ همان $\frac{1}{r}$ در پایه مختصه است. ما گاهی برای سادگی در نماد گذاری آن را به صورت $\frac{1}{r}$ نشان می‌دهیم.

$$\langle H \rangle \approx \frac{3\hbar^2}{8m(\Delta X)^2} - \frac{e^2}{3^{1/2} \Delta X}$$

از سمت راست نسبت به ΔX مشتق می گیریم تا کمینه آن را پیدا کنیم

$$\frac{-6\hbar^2}{8m(\Delta X)^3} + \frac{e^2}{3^{1/2}(\Delta X)^2} = 0$$

یا

$$\Delta X = \frac{3(3^{1/2})\hbar^2}{4me^2} \approx 1.3 \frac{\hbar^2}{me^2} \quad (۹-۴-۶)$$

سرانجام

$$\langle H \rangle \approx \frac{-2me^4}{9\hbar^2} \quad (۹-۴-۷)$$

آنچه که مانع از این نتیجه گیری می شود (همانند مورد نوسانگر) که انرژی حالت پایه $-2me^4/9\hbar^2$ یا تابع موج حالت پایه یک گوسین [با پهنای $(3(3^{1/2})\hbar^2/4me^2)$ است، این حقیقت است که (۹-۴-۷) یک نامساوی تقریبی است. اما انرژی دقیق حالت پایه

$$(۹-۴-۸)$$

$$E_g = -me^4/2\hbar^2$$

از برآورد ما، معادله (۹-۴-۷)، فقط با یک ضرب $= 2$ تفاوت می کند. همین طور تابع موج حالت پایه درست یک گوسین نیست بلکه یک تابع نمایی $\psi(x, y, z) = c \exp[-(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}/a_0]$ است که در آن

$$a_0 = \hbar^2/me^2$$

شعاع بومر نامیده می شود. اما ΔX مربوط به این تابع موج برابر

$$(۹-۴-۹)$$

$$\Delta X = \hbar^2/me^2$$

است که باز هم در حد یک ضرب ۲ با ΔX برآورده شده در (۹-۴-۶) تفاوت دارد. در پایان، اصل عدم قطعیت اطلاعات زیادی در مورد حالت پایه به دست می دهد اما همیشه این اطلاعات به اندازه حالت نوسانگر نیست.

تمرین ۹-۴-۱: نوسانگر را در حالت $|n=1\rangle$ در نظر گرفته و ثابت کنید که

$$\left\langle \frac{1}{X^2} \right\rangle \approx \frac{1}{\langle X^2 \rangle} \approx \frac{m\omega}{\hbar}$$

تمرین ۹-۴-۲: الف - با مراجعه به جدول انتگرالها در ضمیمه A-۲، ثابت کنید که

$$\psi = \frac{1}{(\pi a_0^3)^{1/2}} e^{-r/a_0}, \quad r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$$

یک تابع موج بهنجار شده (حالت پایه هیدروژن) است. توجه کنید که در سه بعد شرط بهنجارش برای تابعی از فقط ۲ به صورت زیر است

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle &= \int \psi^*(r, \theta, \phi) \psi(r, \theta, \phi) r^2 dr d(\cos \theta) d\phi \\ &= 4\pi \int \psi^*(r) \psi(r) r^2 dr = 1 \end{aligned}$$

ب- در این حالت $(\Delta X)^2$ را محاسبه کنید [ثابت کنید که $(\Delta X)^2 = \frac{1}{3} \langle r^2 \rangle$] و نتیجه ارائه شده در معادله (۹-۴-۹) را مجدداً به دست آورید.

ج- نشان دهید که در این حالت $\langle 1/r \rangle \cong 1/\langle r \rangle \cong me^2/\hbar^2$ است.

تمرین ۹-۴-۳: از سه بعدی بودن اتم هیدروژن چشم‌پوشی کرده و فرض کنید که

$$H = \frac{P^2}{2m} - \frac{e^2}{(R^2)^{1/2}} \quad (P^2 = P_x^2 + P_y^2 + P_z^2, R^2 = X^2 + Y^2 + Z^2)$$

متناظر با یک مسئله یک بعدی است. با فرض

$$\Delta P \cdot \Delta R \geq \hbar/2$$

انرژی حالت پایه را برآورد کنید.

تمرین ۹-۴-۴: $\Delta T, \Delta X$ را حساب کنید که در آن $T = P^2/2m$ است. چرا این رابطه چندان معروف نیست؟

۹-۵- رابطه عدم قطعیت انرژی - زمان

یک رابطه عدم قطعیت وجود دارد که از معادله (۹-۲-۱۲) پیروی نمی‌کند

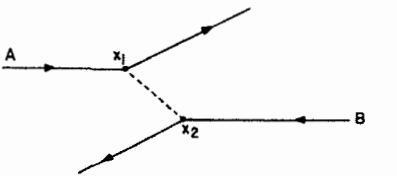
$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar/2 \quad (9-5-1)$$

چون زمان t یک متغیر دینامیکی نیست بلکه یک پارامتر است. ماهیت این معادله از معادلات دیگر که فقط شامل متغیرهای دینامیکی هستند کاملاً متفاوت است. مفهوم تقریبی این نامساوی این است که انرژی یک سیستم که فقط برای مدت محدود Δt بوجود آمده است دارای پهنای (عدم قطعیت) حداقل ΔE است که ΔE و Δt به وسیله (۹-۵-۱) به هم مربوط می‌شوند. برای اینکه ببینیم چطور این مسئله اتفاق می‌افتد یادآوری می‌کنیم که ویژه حالت‌های انرژی دارای وابستگی زمانی $e^{-iEt/\hbar}$ هستند یعنی یک انرژی معین یک فرکانس معین $\omega = E/\hbar$ دارد. حال فقط یک قطار موج که نسبت به زمان بی‌نهایت طولانی است (یعنی مثلاً سیستمی که برای مدت نامتناهی موجود باشد) دارای فرکانس خوش تعریف است. بنابراین سیستمی که فقط برای زمان

محدودی بوجود آمده باشد حتی اگر وابستگی زمانی اش در طی این دوره به صورت $e^{-iEt/\hbar}$ باشد به یک فرکانس مطلق $\omega = E/\hbar$ یا انرژی معین E وابسته نیست.

مثال زیر را نظر بگیرید. در زمان $t = 0$ نوری با فرکانس ω را روی مجموعه‌ای از اتم‌های هیدروژن، همگی در حالت‌های پایه خود، روشن می‌کنیم. از آنجا که فرض می‌شود نور شامل فوتون‌هایی با انرژی $\hbar\omega$ است، انتظار داریم که گذارهایی به فقط تراز (اگر موجود باشد) که به اندازه $\hbar\omega$ بالاتر از حالت پایه قرار دارد رخ دهد. اما دیده خواهد شد که در ابتدا اتم‌ها گذارهایی را به چندین تراز انجام می‌دهند که از این قید پیروی نمی‌کنند. اما وقتی t افزایش می‌یابد، انحراف ΔE از انرژی حالت - نهایی مورد انتظار طبق $\Delta E \approx \hbar/t$ کاهش می‌یابد. فقط وقتی $t \rightarrow \infty$ میل می‌کند قانون محکم پایستگی انرژی را در مفهوم کلاسیکی داریم. ما این نتیجه را این‌طور تعبیر می‌کنیم که اگر چشمه نور فقط برای زمانی محدود روشن باشد دارای یک فرکانس معین نخواهد بود (یعنی فوتون‌هایی با انرژی معین گسیل نمی‌کند)، حتی اگر در طول این مدت عقربه در فرکانس معینی تنظیم شده باشد [خروجی چشمه فقط $e^{-i\omega t}$ نیست بلکه به صورت $\theta(t)e^{-i\omega t}$ است که تبدیل آن یک تابع دلتای تیز در ω نیست]. به‌طور مشابه وقتی اتم‌های برانگیخته و انگیخته شده و به حالت پایه می‌افتند، فوتون‌هایی با انرژی معین $E = E_e - E_g$ گسیل نمی‌کنند (و e و g برای برانگیخته و پایه به کار می‌روند) بلکه پهنای انرژی $\Delta E \approx \hbar/\Delta t$ خواهد بود که Δt مدت زمانی است که اتم‌ها در حالت برانگیخته بوده‌اند [وابستگی زمانی تابع موج اتمی $e^{-iE_e t/\hbar}$ نیست بلکه $\theta(t)\theta(T-t)e^{-iE_e t/\hbar}$ است و فرض می‌شود که اتم‌ها به‌طور ناگهانی در $t = 0$ به این حالت برانگیخته شده و در $t = T$ به‌طور ناگهانی و انگیخته شوند]. وقتی برهم‌کنش اتم‌ها با تابش را در فصل بعد بررسی می‌کنیم دوباره به این نکته بر می‌گردیم.

روش دیگر توصیف این رابطه عدم قطعیت اینست که بگوییم انحرافات از قانون پایستگی انرژی کلاسیکی به اندازه ΔE در زمان‌های $\Delta t \sim \hbar/\Delta E$ امکان‌پذیر هستند. مثال زیر باید این موضوع را روشن کند.



شکل ۹-۱: در نقطه x_1 ، اسکی باز A گلوله را به طرف اسکی باز B پرتاب می‌کند و او آنرا در نقطه x_2 می‌گیرد.

مثال ۹-۵-۱: (برد نیروی هسته‌ای) دو اسکی باز را تصور کنید که هر کدام مجهز به چندین گلوله برفی بوده و آنها را به طرف هم، روی مسیری که موازی بوده اما به اندازه یک فاصله عمودی از هم جدا هستند، پرتاب می‌کنند (شکل ۹-۱). وقتی اسکی باز A به نقطه x_1 می‌رسد گلوله‌ای به طرف B پرتاب می‌کند. او (A) سپس برگشته و شروع به حرکت در امتداد خط راست جدید می‌کند. حال فرض کنید B گلوله را بگیرد. او نیز به همین شکل برخورد گشت. اگر کل فرایند به وسیله شخصی که نمی‌توانست گلوله‌ها را ببیند دیده می‌شد نتیجه می‌گرفت که یک نیروی دافعه بین A و B وجود دارد. اگر A (یا B) بتواند گلوله را حداکثر $10ft$ پرتاب

کند، ناظر نتیجه می‌گیرد که برد نیرو 10^6ft است، بدین معنی که A و B در صورتی که فاصله عمودی بین آنها از 10^6ft تجاوز کند یکدیگر را متأثر نخواهند کرد.

این تقریباً چگونگی برهمکنش ذرات بنیادی با یکدیگر است: اگر آنها فوتون‌هایی را به سمت یکدیگر پرتاب کنند، نیرو، نیروی الکترومغناطیسی نامیده شده و توانایی در پرتاب و گرفتن فوتون‌ها «بار الکتریکی» نامیده می‌شود. اگر پرت شونده‌ها پیون‌ها (مزون پی) باشند نیرو، نیروی هسته‌ای نامیده می‌شود. می‌خواهیم برد نیروی هسته‌ای را با استفاده از اصل عدم قطعیت تخمین بزنیم. حال، برخلاف دو اسکی باز دارای گلوله، پروتون‌ها و نوترون‌ها (یعنی نوکلئون‌ها) در هسته دارای ذخیره آماده از پیون‌ها، که دارای جرم m و انرژی μc^2 هستند، نیستند. اما یک نوکلئون نمی‌تواند از هیچ جایی پیون فراهم کند (انحراف از قانون پایستگی انرژی کلاسیکی به اندازه $\mu c^2 =$) به شرطی که پیون به وسیله نوکلئونی دیگر در مدت Δt گرفته شود به طوری که $\Delta t = \hbar / \Delta E = \hbar / \mu c^2$ باشد. حتی اگر پیون با سرعت نور به سمت گیرنده حرکت کند فقط می‌تواند یک فاصله $r = c \Delta t = \hbar / \mu c$ را ببیند، که طول موج کامپتون پیون نامیده می‌شود و معیاری از برد نیروی هسته‌ای است. مقدار r تقریباً $1 \text{ Fermi} = 10^{-13} \text{ cm}$ است.

تصویر نیروی هسته‌ای ارائه شده در اینجا نسبتاً ساده لوحانه است و باید با احتیاط ملاحظه شود. برای مثال، نه پیون تنها ذره‌ای است که می‌تواند بین نوکلئون‌ها «مبادله» شود نه تعداد مبادلات در هر مواجهه به یک مبادله محدود می‌شود (اما پیون سبک‌ترین شیء است که می‌تواند مبادله شود و در نتیجه مسئول نیروی هسته‌ای با طولانی‌ترین برد است). همچنین مقایسه ما با گلوله‌های برفی هیچ برهم‌کنش جاذبه‌ای را بین ذرات توضیح نمی‌دهد.

سیستم‌های با N درجه آزادی

۱۰

۱۰-۱- N ذره در یک بعد

تاکنون توجه خود را به سیستمی با یک درجه آزادی، یعنی یک ذره در یک بعد (جدای از انحرافات اندک) محدود کردیم. اکنون مکانیک کوانتومی سیستم‌هایی با N درجه آزادی را در نظر می‌گیریم. افزایش درجات آزادی می‌تواند مربوط به افزایش تعداد ذرات، تعداد ابعاد فضایی، یا هر دو باشد. در این بخش N ذره را در یک بعد در نظر گرفته و با حالت $N = 2$ شروع می‌کنیم.

فضای هیلبرت دو-ذره‌ای

دو ذره را در نظر بگیرید که از نظر کلاسیکی به وسیله (x_1, p_1) و (x_2, p_2) توصیف می‌شوند. قاعده کوانتیده کردن این سیستم [اصل موضوع (۲)، معادله (۷-۴-۳۹)] تبدیل (ارتقاء) این متغیرها به عملگرهای کوانتومی (X_1, P_1) و (X_2, P_2) تابع روابط جابه‌جایی کانونیک است:

$$[X_i, P_j] = i\hbar\{x_i, p_j\} = i\hbar\delta_{ij} \quad (i=1, 2) \quad (10-1-1-f)$$

$$[X_i, X_j] = i\hbar\{x_i, x_j\} = 0 \quad (10-1-1-b)$$

$$[P_i, P_j] = i\hbar\{p_i, p_j\} = 0 \quad (10-1-1-c)$$

گاهی ممکن است (همان‌طور که در مورد نوسانگر اینگونه بود) کل فیزیک مسئله را فقط از جابه‌جاگرهای کانونیک به دست آوریم. در عمل در یک پایه کار می‌کنیم که معمولاً پایه مختصه است. این پایه شامل کت‌های $|x_1 x_2\rangle$ است که ویژه کت‌های همزمان عملگرهای جابه‌جا شونده X_1 و X_2 هستند:

$$X_1|x_1 x_2\rangle = x_1|x_1 x_2\rangle \quad (10-1-2)$$

$$X_2|x_1 x_2\rangle = x_2|x_1 x_2\rangle$$

و به صورت زیر بهنجار می‌شوند:^۱

$$\langle x'_1 x'_2 | x_1 x_2 \rangle = \delta(x'_1 - x_1) \delta(x'_2 - x_2) \quad (10-1-3)$$

۱- توجه کنید که برای متناظر با $|x'_1 x'_2\rangle$ را با $\langle x'_1 x'_2|$ نشان می‌دهیم.

در این پایه،

$$|\psi\rangle \rightarrow \langle x_1 x_2 | \psi \rangle = \psi(x_1, x_2)$$

$$X_i \rightarrow x_i \tag{۴-۱-۱۰}$$

$$P_i \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}$$

می توانیم از

$$P(x_1, x_2) = |\langle x_1 x_2 | \psi \rangle|^2 \tag{۵-۱-۱۰}$$

به عنوان چگالی احتمال مطلق برای یافتن ذره ۱ نزدیک x_1 و ذره ۲ نزدیک x_2 تعبیر کنیم به شرطی که $|\psi\rangle$ را به یک بهنجار کنیم

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \int |\langle x_1 x_2 | \psi \rangle|^2 dx_1 dx_2 = \int P(x_1, x_2) dx_1 dx_2 \tag{۶-۱-۱۰}$$

پایه های ممکن دیگری هم در کنار $|x'_1 x'_2\rangle$ وجود دارند. برای مثال پایه تکانه، شامل ویژه کت های همزمان $|p_1 p_2\rangle$ عملگرهای P_1 و P_2 از این جمله است. به طور کلی می توانیم از ویژه کت های همزمان $|\omega_1 \omega_2\rangle$ دو عملگر^۱ جابه جا شونده $\Omega_1(X_1, P_1)$ و $\Omega_2(X_2, P_2)$ استفاده کنیم تا پایه Ω را تعریف کنیم. فضای هیلبرت دو ذره ای پدید آمده توسط هر یک از این پایه ها را با $V_{1\otimes 2}$ نشان می دهیم.

$V_{1\otimes 2}$ به عنوان یک فضای حاصل ضرب مستقیم

شیوه دیگری برای رسیدن به فضای $V_{1\otimes 2}$ وجود دارد و آن ساختن آن از روی دو فضای یک - ذره ای است. سیستمی از دو ذره را در نظر بگیرید که از نظر کلاسیکی با (x_1, p_1) و (x_2, p_2) توصیف می شود. اگر نظریه کوانتومی فقط ذره ۱ را بخواهیم، عملگرهای X_1 و P_1 را تعریف می کنیم که از رابطه زیر پیروی می کنند:

$$[X_1, P_1] = i\hbar I \tag{۷-۱-۱۰}$$

ویژه بردارهای $|x_1\rangle$ مربوط به X_1 یک پایه (مختصه) کامل برای فضای هیلبرت V_1 ذره ۱ تشکیل می دهند. پایه های دیگری نظیر $|p_1\rangle$ مربوط به P_1 یا در کل $|\omega_1\rangle$ مربوط به $\Omega_1(X_1, P_1)$ هم امکان پذیر هستند. چون عملگرهای X_1, P_1, Ω_1 و غیره روی V_1 عمل می کنند به همه آنها یک بالانویس (۱) الحاق می کنیم. بنابراین معادله (۷-۱-۱۰) به شکل

$$[X_1^{(1)}, P_1^{(1)}] = i\hbar I^{(1)} \tag{۱۰-۸-۱-الف}$$

می شود که $I^{(1)}$ عملگر همانی روی V_1 است. تصویر مشابهی برای ذره ۲ وجود داشته و بویژه

۱- توجه کنید که هر تابع از X_1 و P_1 با هر تابعی از X_2 و P_2 جابه جا می شود.

(۱۰-۱-۸-ب)

$$[X_2^{(2)}, P_2^{(2)}] = i\hbar I^{(2)}$$

اکنون توجه خود را به سیستم دو ذره‌ای معطوف می‌کنیم، پایه مختصه برای این سیستم چه چیزی خواهد بود؟ قبلاً به هر خروجی ممکن x_1 از یک اندازه‌گیری مکان یک بردار $|x_1\rangle$ در V_1 نسبت دادیم و همین‌طور برای ذره ۲. اکنون یک اندازه‌گیری مکان یک زوج از اعداد (x_1, x_2) به دست خواهد داد. چون بعد از اندازه‌گیری، ذره ۱ در حالت $|x_1\rangle$ و ذره ۲ در حالت $|x_2\rangle$ خواهد بود، کت متناظر را با $|x_1\rangle \otimes |x_2\rangle$ نشان می‌دهیم:

$$|x_1\rangle \otimes |x_2\rangle \leftrightarrow \begin{cases} \text{particle 1 at } x_1 \\ \text{particle 2 at } x_2 \end{cases} \quad (9-1-10)$$

توجه کنید که $|x_1\rangle \otimes |x_2\rangle$ یک شی جدید است، کاملاً بی‌شابهت با ضرب داخلی $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$ یا ضرب خارجی $|\psi_1\rangle \langle \psi_2|$ که هر دو شامل دو بردار از یک فضا هستند. حاصل ضرب $|x_1\rangle \otimes |x_2\rangle$ ، که حاصل ضرب مستقیم نامیده می‌شود، حاصل ضرب بردارهایی از دو فضای متفاوت است. حاصل ضرب مستقیم یک عمل خطی است:

$$(\alpha|x_1\rangle + \alpha'|x'_1\rangle) \otimes (\beta|x_2\rangle) = \alpha\beta|x_1\rangle \otimes |x_2\rangle + \alpha'\beta|x'_1\rangle \otimes |x_2\rangle \quad (10-1-10)$$

مجموعه همه بردارهای به شکل $|x_1\rangle \otimes |x_2\rangle$ پایه فضایی را تشکیل می‌دهند که ما $V_1 \otimes V_2$ می‌نامیم و به آن حاصل ضرب مستقیم فضاهای V_1 و V_2 اطلاق می‌کنیم. بُعد (تعداد بردارهای پایه ممکن) $V_1 \otimes V_2$ برابر حاصل ضرب بعد V_1 و بعد V_2 است. اگر چه همه بعدها در اینجا نامتناهی هستند، از این گفته چنین برمی‌آید که: برای هر بردار پایه $|x_1\rangle$ از V_1 و $|x_2\rangle$ از V_2 ، یک و فقط یک بردار پایه $|x_1\rangle \otimes |x_2\rangle$ از $V_1 \otimes V_2$ وجود دارد. این باید با جمع مستقیم (بخش ۱-۴) مقایسه شود:

$$V_{1 \otimes 2} = V_1 \oplus V_2$$

که در آن حالت، بعدها V_1 و V_2 جمع می‌شوند (با فرض اینکه بردارهای V_1 از بردارهای V_2 مستقل خطی هستند).

پایه مختصه (مکان)، $|x_1\rangle \otimes |x_2\rangle$ ، فقط یک امکان است؛ ما می‌توانیم از پایه تکانه $|p_1\rangle \otimes |p_2\rangle$ یا به‌طور کلی $|\omega_1\rangle \otimes |\omega_2\rangle$ استفاده کنیم. اگر چه این بردارها $V_1 \otimes V_2$ را پدید می‌آورند، هر عنصر از $V_1 \otimes V_2$ یک حاصل ضرب مستقیم نیست. برای نمونه،

$$|\psi\rangle = |x'_1\rangle \otimes |x'_2\rangle + |x''_1\rangle \otimes |x''_2\rangle$$

نمی‌تواند به‌صورت

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$$

نوشته شود که $|\psi_1\rangle$ و $|\psi_2\rangle$ به ترتیب عناصر V_1 و V_2 هستند.

حاصل ضرب داخلی $|x_1\rangle \otimes |x_2\rangle$ و $|x'_1\rangle \otimes |x'_2\rangle$ به‌صورت زیر است:

$$\begin{aligned} (\langle x'_1 | \otimes \langle x'_2 |) (|x_1\rangle \otimes |x_2\rangle) &= \langle x'_1 | x_1 \rangle \langle x'_2 | x_2 \rangle \\ &= \delta(x'_1 - x_1) \delta(x'_2 - x_2) \end{aligned} \quad (11-1-10)$$

چون هر بردار در $V_1 \otimes V_2$ می تواند بر حسب پایه $|x_1\rangle \otimes |x_2\rangle$ نوشته شود، این رابطه حاصل ضرب داخلی بین هر دو بردار را در $V_1 \otimes V_2$ تعریف می کند.

کاملاً روشن است که وقتی دو ذره ترکیب می شوند تا یک سیستم منفرد تشکیل دهند، عملگرهای مکان و تکانه هر ذره، $X_1^{(1)}$ ، $P_1^{(1)}$ و $X_2^{(2)}$ ، $P_2^{(2)}$ ، که به ترتیب روی V_1 و V_2 اثر می کردند می بایست در $V_1 \otimes V_2$ یک نظیر داشته و همان تعبیر را داشته باشند. نظیر $X_1^{(1)}$ را با $X_1^{(1) \otimes (2)}$ نشان داده و به آن «عملگر X ذره ۱» هم گفته می شود. می توانیم اثر آن را روی $V_1 \otimes V_2$ تعریف کنیم: از آنجا که بردارهای $|x_1\rangle \otimes |x_2\rangle$ فضا را پدید می آورند کافیه اثر آنها روی این بردارها تعریف کنیم. کت $|x_1\rangle \otimes |x_2\rangle$ حالتی را نشان می دهد که ذره ۱ در x_1 است. بنابراین باید ویژه کتی از $X_1^{(1) \otimes (2)}$ با ویژه مقدار x_1 باشد:

$$X_1^{(1) \otimes (2)} |x_1\rangle \otimes |x_2\rangle = x_1 |x_1\rangle \otimes |x_2\rangle \quad (12-1-10)$$

توجه کنید که عملاً اثری روی کت دوم $|x_2\rangle$ ندارد یعنی به صورت بدیهی (همانی) روی $|x_2\rangle$ اثر کرده و روی $|x_1\rangle$ درست مثل $X_1^{(1)}$ اثر می کند. به عبارتی دیگر،

$$X_1^{(1) \otimes (2)} |x_1\rangle \otimes |x_2\rangle = |X_1^{(1)} x_1\rangle \otimes |I^{(2)} x_2\rangle \quad (13-1-10)$$

حاصل ضرب مستقیم دو عملگر $\Gamma_1^{(1)}$ و $\Lambda_2^{(2)}$ را (که با $\Lambda_2^{(2)} \otimes \Gamma_1^{(1)}$ نشان می دهیم) این طور تعریف می کنیم که اثر آن روی یک کت حاصل ضرب مستقیم $|\omega_1\rangle \otimes |\omega_2\rangle$ به صورت زیر است:

$$(\Gamma_1^{(1)} \otimes \Lambda_2^{(2)}) |\omega_1\rangle \otimes |\omega_2\rangle = |\Gamma_1^{(1)} \omega_1\rangle \otimes |\Lambda_2^{(2)} \omega_2\rangle \quad (14-1-10)$$

در این نمادگذاری می توانیم با نگاهی به معادله (۱۳-۱-۱۰)، $X_1^{(1) \otimes (2)}$ را به صورت

$$X_1^{(1) \otimes (2)} = X_1^{(1)} \otimes I^{(2)} \quad (15-1-10)$$

بنویسیم. به طور مشابه می توان $P_2^{(*)}$ را از V_2 به $V_1 \otimes V_2$ برد، بدین ترتیب که عملگر تکانه برای ذره ۲، $P_1^{(1) \otimes (2)}$ را به صورت

$$P_2^{(*) \otimes (2)} = I^{(1)} \otimes P_2^{(2)} \quad (16-1-10)$$

تعریف کنیم.

ویژگی های زیر مربوط به حاصل ضرب های مستقیم عملگرها قابل اثبات هستند (با اثر دادن روی بردارهای پایه $|x_1\rangle \otimes |x_2\rangle$):

تمرین ۱۰-۱-۱: نشان دهید که

(الف)-

$$[\Omega_1^{(1)} \otimes I^{(2)}, I^{(1)} \otimes \Lambda_2^{(2)}] = 0 \quad \text{برای هر } \Omega_1^{(1)} \text{ و } \Lambda_2^{(2)} \quad (10-17-1-الف)$$

(عملگرهای ذره ۱ با عملگرهای ذره ۲ جابه‌جا می‌شوند).

(ب)-

$$(\Omega_1^{(1)} \otimes \Gamma_2^{(2)})(\theta_1^{(1)} \otimes \Lambda_2^{(2)}) = (\Omega\theta)_1^{(1)} \otimes (\Gamma\Lambda)_2^{(2)} \quad (10-17-1-ب)$$

(ج)- اگر

$$[\Omega_1^{(1)}, \Lambda_1^{(1)}] = \Gamma_1^{(1)}$$

باشد، آنگاه

$$[\Omega_1^{(1) \otimes (2)}, \Lambda_1^{(1) \otimes (2)}] = \Gamma_1^{(1)} \otimes I^{(2)} \quad (10-17-1-ج)$$

و همین‌طور با تبدیل 2 → 1.

(د)-

$$(\Omega_1^{(1) \otimes (2)} + \Omega_2^{(1) \otimes (2)})^2 = (\Omega_1^2)^{(1)} \otimes I^{(2)} + I^{(1)} \otimes (\Omega_2^2)^{(2)} + 2\Omega_1^{(1)} \otimes \Omega_2^{(2)} \quad (10-17-1-د)$$

مفهوم حاصل ضرب مستقیم بردارها و عملگرها بی‌شک از مفاهیم مشکلی است که هیچ مانسته ساده‌ای در آنالیز برداری مقدماتی ندارد. تمرین زیر باید تجارب ارزشمندی را در اختیار شما قرار دهد. پیشنهاد می‌شود که بعد از کار روی تمرین بحث قبلی را مجدداً بخوانید.

تمرین ۱۰-۱-۲: جهانی مصنوعی را تصور کنید که در آن فضای هیلبرت تک - ذره‌ای، دوبعدی است. بردارهای پایه را با $|+\rangle$ و $|-\rangle$ نشان دهید. فرض کنید

$$\sigma_1^{(1)} = \begin{matrix} + & - \\ \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \end{matrix} \quad \text{و} \quad \sigma_2^{(2)} = \begin{matrix} + & - \\ \begin{bmatrix} e & f \\ g & h \end{bmatrix} \end{matrix}$$

به ترتیب عملگرهای فضای V_1 و V_2 باشند (علامت‌های \pm بردارهای پایه را برچسب می‌زنند بنابراین $b = \langle + | \sigma_1^{(1)} | - \rangle$ (غیره) فضای $V_1 \otimes V_2$ با چهار بردار $|+\rangle \otimes |+\rangle$ ، $|+\rangle \otimes |-\rangle$ ، $|-\rangle \otimes |+\rangle$ و $|-\rangle \otimes |-\rangle$ پدید می‌آید. نشان دهید (با استفاده از روش تصاویر یا غیره) که:

$$\sigma_1^{(1) \otimes (2)} = \sigma_1^{(1)} \otimes I^{(2)} = \begin{matrix} ++ & +- & -+ & -- \\ \begin{bmatrix} a & 0 & b & 0 \\ 0 & a & 0 & b \\ c & 0 & d & 0 \\ 0 & c & 0 & d \end{bmatrix} \end{matrix} \quad (الف)-$$

(یادآوری می‌شود که $|\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle$ برآمتناظر با $|\alpha\rangle |\beta\rangle$ است)

$$\sigma_2^{(1) \otimes (2)} = \begin{bmatrix} e & f & 0 & 0 \\ g & h & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e & f \\ 0 & 0 & g & h \end{bmatrix} \quad \text{-(ب)}$$

$$(\sigma_1 \sigma_2)^{(1) \otimes (2)} = \sigma_1^{(1)} \otimes \sigma_2^{(2)} = \begin{bmatrix} ae & af & be & bf \\ ag & ah & bg & bh \\ ce & cf & de & df \\ cg & ch & dg & dh \end{bmatrix} \quad \text{-(ج)}$$

قسمت (ج) را به دو روش انجام دهید: با ضرب ماتریسی $\sigma_1^{(1) \otimes (2)}$ و $\sigma_2^{(1) \otimes (2)}$ و با محاسبه مستقیم عناصر ماتریسی $\sigma_1^{(1)} \otimes \sigma_2^{(2)}$.

از معادلات (۱۰-۱-۱۷-الف) و (۱۰-۱-۱۷-ج) نتیجه می شود که روابط جابه جایی بین عملگرهای مکان و تکانه روی $V_1 \otimes V_2$ عبارتند از

$$\begin{aligned} [X_i^{(1) \otimes (2)}, P_j^{(1) \otimes (2)}] &= i\hbar \delta_{ij} I^{(1)} \otimes I^{(2)} = i\hbar \delta_{ij} I^{(1) \otimes (2)} \\ [X_i^{(1) \otimes (2)}, X_j^{(1) \otimes (2)}] &= [P_i^{(1) \otimes (2)}, P_j^{(1) \otimes (2)}] = 0 \quad i, j = 1, 2 \end{aligned} \quad (18-1-10)$$

اکنون آماده ایم تا چیزی را ادعا کنیم که شاید تا به حال مشخص شده است: فضای $V_1 \otimes V_2$ همان $V_{1 \otimes 2}$ ، $|x_1\rangle \otimes |x_2\rangle$ همان $|x_1 x_2\rangle$ و $X_1^{(1) \otimes (2)}$ همان X_1 و غیره است. ابتدا توجه کنید که هر دو فضا بعد یکسانی دارند: بردارهای $|x_1 x_2\rangle$ و $|x_1\rangle \otimes |x_2\rangle$ هر دو در تناظر یک به یک با نقاط صفحه $x_1 - x_2$ هستند. توجه کنید که دو مجموعه از عملگرهای X_1, \dots, P_2 و $X_1^{(1) \otimes (2)}, \dots, P_2^{(1) \otimes (2)}$ دارای قواعد جابه جایی و معانی یکسان هستند [معادلات (۱۰-۱-۱۷) و (۱۸-۱-۱۰)]. چون X و P به وسیله جابه جاگرهایشان تعریف می شوند (بخش ۷-۴) می توانیم قرار دهیم:

$$\begin{aligned} X_i^{(1) \otimes (2)} &= X_i \\ P_i^{(1) \otimes (2)} &= P_i \end{aligned} \quad (19-1-10) \text{ (الف)}$$

همچنین می توانیم ویژه کت های همزمان عملگرهای مکان را (چون غیر تبهگن هستند) به صورت زیر مشخص کنیم:

$$|x_1\rangle \otimes |x_2\rangle = |x_1 x_2\rangle \quad (19-1-10) \text{ (ب)}$$

در ادامه نمادهای فشرده تری را در سمت راست معادلات (۱۰-۱-۱۹) به کار خواهیم برد. اما به مفهوم حاصل ضرب های مستقیم بردارها و عملگرها پیوسته بر خواهیم گشت و گاهی نمادهای سمت چپ را به کار خواهیم برد. اگر چه نماد گذاری مختصر برچسب $(2) \otimes (1)$ فضایی را که عملگرها در آن اثر می کنند حذف می کند، این موضوع باید از متن موضوع روشن شود. برای مثال عملگر انرژی جنبشی مرکز جرم سیستم دو ذره ای را در نظر بگیرید:

$$T_{CM} = \frac{P_{CM}^2}{2(m_1 + m_2)} = \frac{P_{CM}^2}{2M} = \frac{(P_1 + P_2)^2}{2M} = \frac{P_1^2 + P_2^2 + 2P_1 P_2}{2M}$$

که در واقع بدین معنی است که

$$2MT_{CM}^{(1)\otimes(2)} = (P_1^2)^{(1)\otimes(2)} + (P_2^2)^{(1)\otimes(2)} + 2P_1^{(1)\otimes(2)} \cdot P_2^{(1)\otimes(2)}$$

$$= (P_1^{(1)} \otimes I^{(2)})^2 + (I^{(1)} \otimes P_2^{(2)})^2 + 2P_1^{(1)} \otimes P_2^{(2)}$$

بازبینی حاصل ضرب مستقیم

از آنجایی که مفهوم فضای حاصل ضرب مستقیم بسیار مهم است صورت‌بندی $V_{1\otimes 2}$ را به‌عنوان حاصل ضرب مستقیم V_1 و V_2 بازبینی کرده اما این بار به جای بررسی مجرد، در پایه مختصه (مکان) بررسی می‌کنیم. فرض کنید $\Omega_1^{(1)}$ عملگری روی V_1 باشد که ویژه توابع غیر تبه‌گن آن $\omega_1(x_1) \equiv \psi_{\omega_1}(x_1)$ ها تشکیل یک پایه کامل می‌دهند. مشابهاً فرض کنید $\omega_2(x_2)$ ها پایه‌ای برای V_2 تشکیل دهند. حال تابع $\psi(x_1, x_2)$ را در نظر بگیرید که کت مجرد $|\psi\rangle$ را از $V_{1\otimes 2}$ نشان می‌دهد. اگر x_1 را در یک مقدار، مثلاً \bar{x}_1 ، ثابت بگیریم، ψ تابعی از فقط x_2 می‌شود و می‌توانیم آنرا به صورت زیر بسط دهیم:

$$\psi(\bar{x}_1, x_2) = \sum_{\omega_2} C_{\omega_2}(\bar{x}_1) \omega_2(x_2) \quad (20-1-10)$$

توجه کنید که ضرایب بسط به مقدار \bar{x}_1 بستگی دارند. اکنون تابع $C_{\omega_2}(\bar{x}_1)$ را در پایه $\omega_1(\bar{x}_1)$ بسط می‌دهیم:

$$C_{\omega_2}(\bar{x}_1) = \sum_{\omega_1} C_{\omega_1, \omega_2} \omega_1(\bar{x}_1) \quad (21-1-10)$$

با قرار دادن این بسط در بسط اول و حذف علامت بار از \bar{x}_1 بسط زیر می‌رسیم:

$$\psi(x_1, x_2) = \sum_{\omega_1} \sum_{\omega_2} C_{\omega_1, \omega_2} \omega_1(x_1) \omega_2(x_2) \quad (10-22-1-10) \text{ الف}$$

این بسط $\psi(x_1, x_2)$ اختیاری برحسب $\omega_1(x_1) \times \omega_2(x_2)$ به چه چیزی اشاره می‌کند؟ معادله (10-22-1-10) الف نسخه فضای مختصه نتیجه مجرد

$$|\psi\rangle = \sum_{\omega_1} \sum_{\omega_2} C_{\omega_1, \omega_2} |\omega_1\rangle \otimes |\omega_2\rangle \quad (10-22-1-10) \text{ ب}$$

است که به معنی $V_{1\otimes 2} = V_1 \otimes V_2$ است، چون $|\psi\rangle$ متعلق به $V_{1\otimes 2}$ است و $|\omega_1\rangle \otimes |\omega_2\rangle$ ها، $V_1 \otimes V_2$ را پدید می‌آورند. اگر $\Omega = X$ انتخاب شود به پایه آشنای $|x_1\rangle \otimes |x_2\rangle$ می‌رسیم. با ضرب نقطه‌ای دو طرف معادله (10-22-1-10) ب) در این بردارهای پایه، معادله (10-22-1-10) الف مجدداً به دست می‌آید (در پایه مختصه حاصل ضرب مستقیم کت‌های $|\omega_1\rangle$ و $|\omega_2\rangle$ همان حاصل ضرب معمولی توابع موج متناظر می‌شود). اکنون عملگرها را در نظر بگیرید. عملگر تکانه روی V_1 که به صورت $-i\hbar d/dx_1$ به کار رفت به شکل $-i\hbar \partial/\partial x_1$ می‌شود که نماد مشتق جزئی بیان می‌کند که بر روی x_1 همانند قبل عمل می‌کند و روی x_2 اثر ندارد. این نسخه فضای مختصه $P^{(1)} \otimes I^{(2)} = P^{(1)} \otimes P^{(2)}$ است. شما برای پیگیری بیشتر این تحلیل آماده شده‌اید.

تحول بردار حالت دو ذره‌ای

بردار حالت سیستم عنصری از $V_{1\otimes 2}$ است. این بردار طبق معادله

$$i\hbar|\dot{\psi}\rangle = \left[\frac{P_1^2}{2m_1} + \frac{P_2^2}{2m_2} + V(X_1, X_2) \right] |\psi\rangle = H|\psi\rangle \quad (۱۰-۱-۲۳)$$

با زمان تحول می‌یابد. دو دسته از مسائل وجود دارند.

دسته A: H جدا شدنی است یعنی

$$H = \frac{P_1^2}{2m_1} + V_1(X_1) + \frac{P_2^2}{2m_2} + V_2(X_2) = H_1 + H_2 \quad (۱۰-۱-۲۴)$$

دسته B: H جدا شدنی نیست یعنی

$$V(X_1, X_2) \neq V_1(X_1) + V_2(X_2)$$

و

$$H \neq H_1 + H_2 \quad (۱۰-۱-۲۵)$$

دسته A متناظر با دو ذره برهم کنش کننده با پتانسیل‌های خارجی V_1 و V_2 است که دو ذره با هم برهم کنش ندارند در حالی که در گروه B چنین قیدی وجود ندارد. اکنون به بررسی این دو دسته می‌پردازیم.

دسته A: هامیلتونی‌های جدا شدنی. از نظر کلاسیکی تجزیه یا جدا کردن

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1(x_1, p_1) + \mathcal{H}_2(x_2, p_2)$$

به این معنی است که دو ذره مستقل از یکدیگر تحول می‌یابند. به‌ویژه انرژی‌های آنها به‌طور جداگانه پایسته هستند و انرژی کل E برابر $E_1 + E_2$ است. ظهور مجدد این نتایج را در نظریه کوانتومی بررسی می‌کنیم. برای یک حالت مانا،

$$|\psi(t)\rangle = |E\rangle e^{-iEt/\hbar} \quad (۱۰-۱-۲۶)$$

معادله (۱۰-۱-۲۳) به صورت

$$[H_1(X_1, P_1) + H_2(X_2, P_2)]|E\rangle = E|E\rangle \quad (۱۰-۱-۲۷)$$

می‌شود. از آنجا که $[H_1, H_2] = 0$ است (معادله ۱۰-۱-۱۷ الف) می‌توانیم ویژه حالت‌های همزمان آنها را که چیزی غیر از $|E_1\rangle \otimes |E_2\rangle = |E_1 E_2\rangle$ ها نیستند به‌دست آوریم که در آن $|E_1\rangle$ ها و $|E_2\rangle$ ها جواب‌های معادلات زیرند:

$$H_1^{(1)}|E_1\rangle = E_1|E_1\rangle \quad (۱۰-۱-۲۸ الف)$$

و

$$H_2^{(2)}|E_2\rangle = E_2|E_2\rangle \quad (۱۰-۱-۲۸ ب)$$

باید واضح باشد که حالت $|E_1\rangle \otimes |E_2\rangle$ متناظر است با اینکه ذره ۱ در ویژه حالت انرژی $|E_1\rangle$ و ذره ۲ در ویژه حالت انرژی $|E_2\rangle$ باشد. بدیهی است که

$$H|E\rangle = (H_1 + H_2)|E_1\rangle \otimes |E_2\rangle = (E_1 + E_2)|E_1\rangle \otimes |E_2\rangle = (E_1 + E_2)|E\rangle$$

به طوری که

$$E = E_1 + E_2$$

(۱۰-۲۸-۱-ج)

(پایه $|E_1\rangle \otimes |E_2\rangle$ چیزی است که اگر در ساختن بردارهای پایه حاصل ضرب مستقیم $V_1 \otimes V_2$ ویژه بردارهای انرژی را به جای ویژه بردارهای مکان از هر فضا انتخاب می‌کردیم به آن می‌رسیدیم). سرانجام با قرار دادن $|E\rangle = |E_1\rangle \otimes |E_2\rangle$ و $E = E_1 + E_2$ در معادله (۱۰-۲۶-۱) به نتیجه زیر می‌رسیم:

$$|\psi(t)\rangle = |E_1\rangle e^{-iE_1 t/\hbar} \otimes |E_2\rangle e^{-iE_2 t/\hbar} \quad (۱۰-۲۹-۱)$$

به دست آوردن معادلات (۱۰-۲۸-۱) و (۱۰-۲۹-۱) در پایه مختصه برای نشان دادن یک تکنیک مفید که در کتب دیگر قابل دسترس است آموخته می‌شود. با تصویر کردن معادله ویژه مقدری (۱۰-۲۷-۱) روی این پایه و انجام جانشینی‌های عملگر معمول، معادله (۱۰-۴-۱)، نتیجه می‌شود که

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + V_1(x_1) - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + V_2(x_2) \right] \psi_E(x_1, x_2) = E \psi_E(x_1, x_2)$$

که در آن،

$$\psi_E(x_1, x_2) = \langle x_1 x_2 | E \rangle \quad (۱۰-۳۰-۱)$$

این معادله را به روش جدا سازی متغیرها حل می‌کنیم. فرض کنید

$$\psi_E(x_1, x_2) = \psi_{E_1}(x_1) \psi_{E_2}(x_2) \quad (۱۰-۳۱-۱)$$

اندیس‌های E_1 و E_2 هنوز تعبیر خاصی ندارند و صرفاً به عنوان برچسب به کار می‌روند. با قرار دادن این جواب در معادله (۱۰-۳۰-۱) و سپس تقسیم دو طرف بر $\psi_{E_1}(x_1) \psi_{E_2}(x_2)$ ،

$$\frac{1}{\psi_{E_1}(x_1)} \left[\frac{-\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + V_1(x_1) \right] \psi_{E_1}(x_1) + \frac{1}{\psi_{E_2}(x_2)} \left[\frac{-\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + V_2(x_2) \right] \psi_{E_2}(x_2) = E \quad (۱۰-۳۲-۱)$$

این معادله بیان می‌کند که یک تابع از فقط x_1 ، به علاوه یک تابع از فقط x_2 برابر یک ثابت E هستند. چون x_1 و x_2 و لذا دو تابع فوق می‌توانند به طور مستقل تغییر کنند می‌توان گفت که هر تابع به طور جداگانه با یک ثابت برابر است. این ثابت‌ها را E_1 و E_2 می‌نامیم. بنابراین معادله (۱۰-۳۲-۱) به سه معادله شکسته می‌شود:

$$\frac{1}{\psi_{E_1}(x_1)} \left[\frac{-\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + V_1(x_1) \right] \psi_{E_1}(x_1) = E_1$$

$$\frac{1}{\psi_{E_2}(x_2)} \left[\frac{-\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + V_2(x_2) \right] \psi_{E_2}(x_2) = E_2 \quad (۳۳-۱-۱۰)$$

$$E_1 + E_2 = E$$

در نتیجه،

$$\begin{aligned} \psi_E(x_1, x_2, t) &= \psi_E(x_1, x_2) e^{-iEt/\hbar} \\ &= \psi_{E_1}(x_1) e^{-iE_1t/\hbar} \psi_{E_2}(x_2) e^{-iE_2t/\hbar} \end{aligned} \quad (۳۴-۱-۱۰)$$

که ψ_{E_1} و ψ_{E_2} ویژه توابع معادله شرودینگر یک - ذره‌ای به ترتیب با ویژه مقدار E_1 و E_2 هستند. معادلات (۳۳-۱-۱۰) و (۳۴-۱-۱۰) را به عنوان تصاویر معادلات (۲۸-۱-۱۰) و (۲۹-۱-۱۰) روی $|x_1 x_2\rangle = |x_1\rangle \otimes |x_2\rangle$ می‌شناسیم.

دسته B: دو ذره برهم کنش کننده. اکنون مسئله کلی تر دو ذره برهم کنش کننده را با هامیلتونی زیر در نظر بگیرید

$$\mathcal{H} = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(x_1, x_2) \quad (۳۵-۱-۱۰)$$

که

$$V(x_1, x_2) \neq V_1(x_1) + V(x_2)$$

به طور کلی، این معادله نمی‌تواند به دو مسئله تک - ذره‌ای مستقل تبدیل شود. اما اگر

$$V(x_1, x_2) = V(x_1 - x_2) \quad (۳۶-۱-۱۰)$$

باشد که دو ذره‌ای را توصیف می‌کند که با هم برهم کنش داشته و با چیز دیگری برهم کنش ندارند، همیشه می‌توان با بهره‌گیری از مختصات مرکز جرم

$$x_{CM} = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2} \quad (۳۷-۱-۱۰ \text{ الف})$$

و مختصات نسبی،

$$x = x_1 - x_2 \quad (۳۷-۱-۱۰ \text{ ب})$$

مسئله را به مسئله دو ذره ساختگی مستقل تبدیل کرد، یکی مرکز جرم CM که آزاد بوده و دارای جرم $M = m_1 + m_2$ و تکانه

$$p_{CM} = M \dot{x}_{CM} = m_1 \dot{x}_1 + m_2 \dot{x}_2$$

است. دیگری با جرم کاهش یافته $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ ، تکانه $p = \mu \dot{x}$ که تحت تأثیر $V(x)$ حرکت می‌کند:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(x_1, p_1; x_2, p_2) &\rightarrow \mathcal{H}(x_{CM}, p_{CM}; x, p) \\ &= \mathcal{H}_{CM} + \mathcal{H}_{relative} = \frac{p_{CM}^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} + V(x) \end{aligned} \quad (38-1-10)$$

که همان نتیجه تمرین ۲-۵-۴ است که به یک بعد تغییر کرده است. از آنجا که متغیرهای جدید هم کانونیک و دکارتی هستند (تمرین ۲-۷-۶) شرط کوانتس به صورت

$$[X_{CM}, P_{CM}] = i\hbar \quad (10-1-39 الف)$$

$$[X, P] = i\hbar \quad (10-1-39 ب)$$

شده و همه جابه‌جاگرهای دیگر صفر می‌شوند. در نظریه کوانتومی،

$$H = \frac{p_{CM}^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} + V(X) \quad (40-1-10)$$

و ویژه توابع H به شکل حاصل ضرب دو عامل در می‌آیند:

$$\psi_E(x_{CM}, x) = \frac{e^{ip_{CM} \cdot x_{CM}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \cdot \psi_{E_{rel}}(x) \quad (41-1-10)$$

$$E = \frac{p_{CM}^2}{2M} + E_{rel}$$

دینامیک حقیقی در $\psi_{E_{rel}}(x)$ قرار دارد که ویژه تابع انرژی برای ذره‌ای به جرم μ در پتانسیل $V(x)$ است. چون مرکز جرم به صورت یک ذره آزاد پیوسته حرکت می‌کند معمولاً مطالعه مسئله در چارچوب مرکز جرم را انتخاب می‌کنیم. در این حالت $E_{CM} = p_{CM}^2/2M$ از انرژی حذف شده و عامل موج تخت در ψ که نشان دهنده حرکت مرکز جرم است یک عامل ثابت می‌شود. به‌طور خلاصه، می‌توان در نظریه کوانتومی، مثل نظریه کلاسیکی، همه چیز را در مورد مرکز جرم فراموش کرد.

N ذره در یک بعد

همه نتایج، غیر از یکی، از $N = 2$ به N دلخواه تعمیم می‌یابند. تنها استثناء، مربوط به نتیجه زیربخش قبلی است: برای $N > 2$ در حالت کلی نمی‌توان با استفاده از مختصه‌های نسبی و مرکز جرم (یا دیگر مجموعه مختصه‌ها) مسئله را به N مسئله یک ذره‌ای مستقل تقلیل داد. چند استثناء وجود دارد، آشناترین آنها درجه دو بودن هامیلتونی‌ها نسبت به مختصه‌ها و تکانه‌هاست، که می‌توانند با استفاده از مختصه‌های بهنجار به یک جمع روی هامیلتونی‌های نوسانگر تبدیل شوند. در چنین مواردی نوسانگرها مستقل شده و انرژی‌های آنها، هم در حالت کلاسیکی و هم کوانتومی جمع می‌شوند. این نتیجه (راجع به نوسانگرهای کوانتومی) در بحث گرمای ویژه در فصل ۷ مفروض در نظر گرفته شد.

تمرین ۱۰-۱-۳: هامیلتونی سیستم جفت شده را در نظر بگیرید:

$$\mathcal{H} = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 [x_1^2 + x_2^2 + (x_1 - x_2)^2]$$

از مثال ۱-۸-۶ می دانیم که \mathcal{H} در صورتی که از مختصه‌های بهنجار استفاده کنیم می تواند واجفت شود

$$x_{1,II} = \frac{x_1 \pm x_2}{2^{1/2}}$$

و تکانه‌های متناظر،

$$p_{1,II} = \frac{p_1 \pm p_2}{2^{1/2}}$$

(الف) - \mathcal{H} را بر حسب مختصه‌های بهنجار بازنویسی کنید. ثابت کنید که مختصه‌های بهنجار هم کانونیک هستند یعنی اینکه

$$\{x_i, p_j\} = \delta_{ij} \text{ etc.}; \quad i, j = I, II$$

حال سیستم را با ارتقاء این متغیرها به عملگرهایی که تابع روابط زیرند کوانتیده کنید:

$$[X_i, P_j] = i\hbar \delta_{ij} \text{ etc.}; \quad i, j = I, II$$

معادله ویژه مقداری برای H را در ویژه پایه همزمان X_I و X_{II} بنویسید.

(ب) با ارتقاء x_1, x_2, p_1, p_2 به عملگرهای کوانتومی، سیستم را مستقیماً کوانتیده کنید. معادله ویژه مقداری را برای H در ویژه پایه همزمان X_1 و X_2 بنویسید. حال x_1 و x_2 (و البته $\partial/\partial x_1$ و $\partial/\partial x_2$) را در معادله دیفرانسیل به x_I و x_{II} (و $\partial/\partial x_I$ و $\partial/\partial x_{II}$) تغییر دهید. نتیجه باید نتیجه قسمت (الف) باشد.

به طور کلی اگر تغییر مختصه‌ها کانونیک باشد، می توان مختصه‌ها را تغییر داده و سپس کوانتیده کرد یا ابتدا کوانتیده کرده و سپس در معادله دیفرانسیل تغییر متغیر داد (فرض می کنیم که همه متغیرها دکارتی هستند. همان طور که قبلاً در همین کتاب اشاره شد اگر کسی بخواهد از مختصه‌های غیر دکارتی استفاده کند بهتر است ابتدا مختصه‌های دکارتی را کوانتیده کند و سپس متغیرها را در معادله دیفرانسیل تغییر دهد).

۱۰-۲- چند ذره در چند بعد

از نظر ریاضی، مسئله یک ذره منفرد در دو بعد (بر حسب مختصه‌های دکارتی) با مسئله دو ذره در یک بعد هم ارز است. اما بهتر است در موارد دو بعدی از نمادگذاری متفاوتی استفاده کنیم. دو مختصه دکارتی ذره منفرد را به جای x_1 و x_2 با x و y نشان می دهیم. همین طور تکانه‌ها با p_x و p_y نشان داده خواهند شد. عملگرهای کوانتومی، X و Y ؛ و p_x و p_y ویژه کت‌های مشترک آنها به ترتیب $|xy\rangle$ و $|p_x p_y\rangle$ نامیده می شوند و به همین ترتیب. تعمیم مطلب به سه بعد ساده است. همچنین یک ویژه کت مکان را به صورت $|\mathbf{r}\rangle$ و رابطه راست هنجاری $\langle x' y' z' | x y z \rangle = \delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z')$ را به صورت $\langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle = \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ نشان می دهیم. همین کار را برای ویژه کت‌های تکانه $|\mathbf{p}\rangle$ انجام می دهیم. وقتی چند ذره که با اعداد $1, \dots, N$ نامگذاری می شوند موجود باشند این نامگذاری مضاعف را هم به کار خواهیم برد. بنابراین $|\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2\rangle$ یک حالت دو ذره‌ای را نشان می دهد که در آن ذره ۱ دارای تکانه \mathbf{p}_1 و ذره ۲ دارای تکانه \mathbf{p}_2 است و امثال این.

تمرین ۱۰-۲-۱: (ذره در جعبه سه بعدی). با یادآوری اینکه ذره در جعبه یک بعدی گسترده از $x = 0$ تا $x = L$ به ناحیه $0 \leq x \leq L$ محدود می‌شود؛ تابع موج آن در لبه‌های $x = 0$ و $x = L$ و آن سوی لبه‌ها صفر می‌شود (تمرین ۵-۲-۵). حال ذره‌ای را محبوس در جعبه سه بعدی مکعبی به حجم L^3 در نظر بگیرید. با انتخاب یکی از گوشه‌ها با عنوان مبدا و محورهای x و y و z در امتداد سه لبه‌ای که در مبدا به هم می‌رسند نشان دهید که ویژه توابع بهنجار شده انرژی عبارتند از:

$$\psi_E(x, y, z) = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L}\right) \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n_z \pi z}{L}\right)$$

که

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ML^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

و n_i ها اعداد صحیح مثبت‌اند.

تمرین ۱۰-۲-۲: نوسانگر دو بعدی را که برای آن

$$\mathcal{H} = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2 + \frac{1}{2} m \omega_y^2 y^2$$

است کوانتیده کنید.

الف-) نشان دهید که انرژی‌های مجاز عبارتند از:

$$E = (n_x + 1/2)\hbar\omega_x + (n_y + 1/2)\hbar\omega_y, \quad n_x, n_y = 0, 1, 2, \dots$$

ب-) توابع موج متناظر را برحسب توابع موج نوسانگر منفرد بنویسید. ثابت کنید که آنها تحت تبدیل $x \rightarrow -x$ و $y \rightarrow -y$ پاریته معینی (زوج یا فرد) دارند و پاریته فقط به $n = n_x + n_y$ بستگی دارد.

ج-) نوسانگر همسانگرد را در نظر بگیرید ($\omega_x = \omega_y$). توابع موج صریح و بهنجار شده سه حالت اول را بنویسید (یعنی برای $n = 0, 1$). نتایج خود را برحسب مختصه‌های قطبی ρ و ϕ بیان کنید. (برای مورد اخیر). نشان دهید که تبهگنی تراز با انرژی $E = (n+1)\hbar\omega$ ، $(n+1)$ است.

تمرین ۱۰-۲-۳: نوسانگر همسانگرد سه بعدی را که برای آن

$$\mathcal{H} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2 + z^2)$$

است کوانتیده کنید.

الف-) نشان دهید که:

$$E = (n + 3/2)\hbar\omega; \quad n = n_x + n_y + n_z; \quad n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, \dots$$

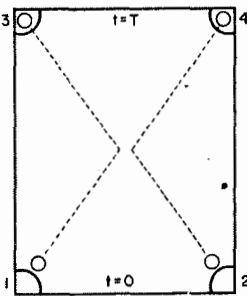
ب-) ویژه توابع متناظر را برحسب توابع موج نوسانگر منفرد نوشته و ثابت کنید که پاریته تراز با n معین، $(-1)^n$ است. چهار حالت اول را برحسب مختصات کروی بیان کنید. نشان دهید که تبهگنی تراز با انرژی $E = (n + \frac{3}{2})\hbar\omega$ ، $(n+1)(n+2)/2$ است.

۱۰-۳- ذرات یکسان

فرمالیزم ارائه شده در بالا وقتی به درستی برای سیستمی شامل ذرات یکسان به کار رود منجر به نتایج جالبی می‌شود. دو ذره را وقتی یکسان می‌گوییم که از هر نظر عین هم باشند و هیچ آزمایشی نباشد که تفاوتی ذاتی^۱ بین آنها نشان دهد. اگر چه تعریف ذرات یکسان از نظر کلاسیکی و کوانتومی یکسان است، مفاهیم، در دو حالت متفاوتند.

حالت کلاسیکی

ابتدا با مروری بر وضعیت در فیزیک کلاسیک سمت گیری خود را مشخص می‌کنیم. میز بیلیاردی را با چهار حفره با شماره‌های ۱ تا ۴ تصور کنید (شکل ۱-۱۰). نزدیک حفره‌های ۱ و ۲ دو توپ بیلیارد یکسان قرار دارند که آنها را توپ‌های ۱ و ۲ می‌نامیم. تفاوت بین برچسب‌ها هیچ تفاوت ذاتی بین توپ‌ها را نشان نمی‌دهد (چون یکسان هستند) اما اختلافی در اطراف آنها، یعنی حفره‌هایی که توپ‌ها نزدیکشان قرار دارند، وجود دارد.



شکل ۱-۱۰: دو توپ بیلیارد یکسان در نزدیکی حفره‌های ۱ و ۲ به گردش در آمده و همان‌طور که توسط P_1 پیش بینی شده به ترتیب به حفره‌های ۳ و ۴ می‌رسند. پیش بینی P_2 مبنی بر اینکه به ترتیب به حفره‌های ۳ و ۴ می‌رسند غلط است، ولو اینکه دو پیکربندی نهایی برای ناظری که در $t=T$ در آنجا قدم می‌زند غیر قابل تمییز باشد.

حال از تعریف یکسان بودن چنین بر می‌آید که اگر این دو توپ با هم تعویض شوند پیکربندی حاصل دقیقاً با قبلی یکسان به نظر می‌رسد. با وجود این، این دو پیکربندی در فیزیک کلاسیک به صورت مجزا و متمایز در نظر گرفته می‌شوند. برای معنی دار شدن این تمایز می‌بایست آزمایشاتی باشند که در آنها این دو پیکربندی غیر هم ارز باشند. اکنون روی چنین آزمایشی بحث می‌کنیم. تصور کنید که در زمان $t=0$ دو بازیکن توپ‌ها را به طرف گوشه‌های میز بزنند. دو فیزیکدان P_1 و P_2 مقدار اولیه داده‌ها را گرفته و پیش‌بینی‌های زیر را انجام می‌دهند:

$$P_1: \left. \begin{array}{l} \text{ball 1 goes to hole 3} \\ \text{ball 2 goes to hole 4} \end{array} \right\} \text{ at } t=T$$

$$P_2: \left. \begin{array}{l} \text{ball 1 goes to hole 4} \\ \text{ball 2 goes to hole 3} \end{array} \right\} \text{ at } t=T$$

۱- منظور از ذاتی، خواص لاینفک ذره نظیر بار یا جرم است و نه مکان یا تکانه آن.

در زمان T می‌بینیم که توپ ۱ به حفره ۳ و توپ ۲ به حفره ۴ می‌رسد و اظهار می‌کنیم که P_1 درست و P_2 نادرست است. حال پیکربندی‌های پیش‌بینی شده توسط آنها برای $t = T$ فقط به اندازه تعویض دو ذره یکسان با هم فرق دارد. اگر در انزوا ملاحظه می‌شد آنها یکسان به نظر می‌رسیدند: ناظری که درست در $t = T$ وضعیت را می‌بیند هر دو پیش‌بینی را صحیح می‌داند. ما چه چیزی درباره توپ‌ها می‌دانیم (که به ما اجازه می‌دهد بین آنها و در نتیجه بین دو خروجی تمایز قائل شویم) که ناظر دوم نمی‌داند؟ پاسخ البته این است که تاریخچه آنها را. اگر چه دو توپ برای ناظر جدید یکسان بنظر می‌رسند، ما قادر هستیم توپ حفره ۳ را تا نزدیکی حفره ۱ و توپ حفره ۴ را تا نزدیکی حفره ۲ به سمت عقب ردیابی کنیم. همین‌طور در $t = 0$ دو توپی که به نظر ما یکسان می‌رسیدند، برای کسی که آنها را از یک دوره زمانی قبل‌تر پیگیری کرده باشد تمیزپذیری می‌شوند. حال البته ضروری نیست که ما یا هر ناظر دیگر واقعاً حضور داشته باشیم تا این تمایز موجود باشد. در فیزیک کلاسیک ناظری خیالی (ساختگی) تصور می‌شود که همه چیز را می‌بیند و مزاحمتی برای چیزی ایجاد نمی‌کند؛ اگر او بتواند تمایز را بیابد، تمایز موجود است.

به‌طور خلاصه، در مکانیک کلاسیک این امکان وجود دارد که با پیگیری مسیرهای غیر یکسان ذرات، بین ذرات یکسان تمایز قائل شویم (بدون اینکه به هیچ وجه اختلالی برای آنها ایجاد کنیم). در نتیجه دو پیکربندی که با تعویض ذرات یکسان به هم مرتبط می‌شوند از نظر فیزیکی غیر هم‌ارزند.

پيامد بلافصل استدلال فوق و دلیلی که در ادامه نقش غالب را بازی خواهد کرد، این است که در نظریه کوانتومی که کاملاً از مفهوم مسیرهای پیوسته برای ذرات بی‌بهره است هیچ پایه و اساس فیزیکی برای تمایز قائل شدن بین ذرات یکسان وجود ندارد. در نتیجه دو پیکربندی، که با تعویض ذرات یکسان به هم مربوط می‌شوند، می‌بایست به‌صورت یک پیکربندی یکسان بحث شده و به‌وسیله یک بردار حالت توصیف شوند. اکنون پیامدهای این قید را بررسی می‌کنیم.

سیستم‌های دو ذره‌ای - حالت‌های متقارن و پادمتقارن

فرض کنید سیستمی شامل دو ذره ۱ و ۲ تمیزپذیر داریم و یک اندازه‌گیری مکان روی سیستم نشان می‌دهد که ذره ۱ در $x = a$ و ذره ۲ در $x = b$ است. حالت را درست بعد از اندازه‌گیری به‌صورت

$$|\psi\rangle = |x_1 = a, x_2 = b\rangle = |ab\rangle \quad (10-3-1)$$

می‌نویسیم که از این قرار داد استفاده می‌کنیم که حالت ذره ۱ به‌وسیله برچسب اول (a) و حالت ذره ۲ به‌وسیله برچسب دوم (b) مشخص می‌شود. چون ذرات تمیزپذیرند حالت به‌دست آمده به‌وسیله تعویض آنها، از حالت فوق تمیزپذیر است و با

$$|\psi\rangle = |ba\rangle$$

مشخص می‌شود و متناظر با این است که ذره ۱ در b و ذره ۲ در a یافت شود.

فرض کنید آزمایش را با دو ذره یکسان انجام داده و یکی را در $x = a$ و دیگری را در $x = b$ ببینیم. بردار حالت درست بعد از اندازه‌گیری $|ab\rangle$ است یا $|ba\rangle$ ؟ پاسخ این است که هیچکدام. دیده‌ایم که در نظریه کوانتومی دو پیکربندی مرتبط به هم از طریق تعویض ذرات یکسان می‌بایست به‌عنوان یک پیکربندی

تلقی شوند و به وسیله یک حالت توصیف شوند. چون $|\psi\rangle$ و $\alpha|\psi\rangle$ از نظر فیزیکی هم ارزند نیاز داریم که $|\psi(a, b)\rangle$ ، بردار حالت درست بعد از اندازه گیری، قید

$$|\psi(a, b)\rangle = \alpha|\psi(b, a)\rangle \quad (۱۰-۳-۲)$$

را برآورده کند که α هر عدد مختلط است. از آنجا که تحت تعویض،

$$|ab\rangle \leftrightarrow |ba\rangle$$

و دو بردار مضاربی از یکدیگر نیستند^۱ (یعنی از نظر فیزیکی متمایز هستند) هیچیک مورد قبول نیستند. مسئله آن است که اندازه گیری مکان نه یک زوج مرتب از اعداد (همانند حالت ذرات تمییز پذیر) بلکه فقط یک جفت عدد به دست می دهد: برای اختصاص آنها به ذرات به یک شیوه معین می بایست از آنچه که از نظر فیزیکی در نظریه کوانتومی با معنی است فراتر برویم. آنچه که اندازه گیری ما اجازه نتیجه گیری آنرا می دهد این است که بردار حالت، یک ویژه حالت $X_1 + X_2$ با ویژه مقدار $a + b$ است، که مجموع ویژه مقدارها به چگونگی اختصاص مقادیر a و b به ذرات حساس نیست. به عبارت دیگر، برای هر زوج نامرتب از اعداد a و b می توانیم یک جمع (اما نه تفریق) یگانه تعریف کنیم. حال فقط دو بردار حاصل ضرب $|ab\rangle$ و $|ba\rangle$ با این ویژه مقدار وجود دارد و بردار حالت در جایی در ویژه فضای دو بعدی تهگن (نسبت به X_1 و X_2) پدید آمده با آنها قرار می گیرد. فرض کنید $|\psi(a, b)\rangle = \beta|ab\rangle + \gamma|ba\rangle$ بردار مجاز باشد. اگر قید معادله (۱۰-۳-۲) را اعمال کنیم:

$$\beta|ab\rangle + \gamma|ba\rangle = \alpha[\beta|ba\rangle + \gamma|ab\rangle]$$

با مساوی قرار دادن ضرایب $|ab\rangle$ و $|ba\rangle$ نتیجه می شود که

$$\beta = \alpha\gamma, \quad \gamma = \alpha\beta$$

به طوری که

$$(۱۰-۳-۳)$$

$$\alpha = \pm 1$$

ساختن بردارهای حالت مجاز آسان است و عبارتند از

$$|ab, S\rangle = |ab\rangle + |ba\rangle \quad (۱۰-۳-۴)$$

که بردار حالت متقارن ($\alpha = 1$) گفته می شود و

$$|ab, A\rangle = |ab\rangle - |ba\rangle \quad (۱۰-۳-۵)$$

۱- فرض می کنیم $a \neq b$ است. اگر $a = b$ باشد حالت مورد قبول است. اما انتخابی که ما دنبال آن هستیم تحقق نمی یابد.

که بردار حالت پادمتقارن ($\alpha = -1$) نامیده می‌شود (اینها بردارهای بهنجار نشده هستند. بهنجارش آنها بزودی انجام خواهد شد).

به‌طور کلی، اگر یک متغیر Ω اندازه‌گیری شود و مقادیر ω_1 و ω_2 به‌دست آیند، بردار حالت بلافاصله بعد از اندازه‌گیری یا $|\omega_1\omega_2, S\rangle$ یا $|\omega_1\omega_2, A\rangle$ است.^۱ اگر چه ما در رسیدن به بردار حالت مربوط به اندازه‌گیری پیشرفت زیادی کرده‌ایم ولی هنوز باید شیوه‌ای برای انتخاب از بین این دو شق پیدا کنیم.

بوزون‌ها و فرمیون‌ها

هر چند که هم حالت k و هم A از نظر فیزیکی قابل قبول به نظر می‌رسند (از این حیث که تمییز ناپذیری ذرات را در نظر می‌گیرند) می‌توانیم یک گام به جلو رفته و ادعا کنیم که: یک نوع معین از ذرات باید از بین حالت‌های k و A یک بار و برای همیشه یک حالت را انتخاب کنند. فرض کنید عکس مطلب درست باشد و فضای هیلبرت دو ذره یکسان شامل بردارهای k و A باشد. در این صورت این فضا شامل ترکیبات خطی زیر هم خواهد بود:

$$|\psi\rangle = \alpha|\omega_1\omega_2, S\rangle + \beta|\omega'_1\omega'_2, A\rangle$$

که نه متقارن هستند نه پادمتقارن. بنابراین ما این امکان را رد می‌کنیم.

به‌نظر می‌رسد که طبیعت، قیودی را که استنتاج کرده‌ایم محترم می‌شمارد. ذراتی نظیر پيون، فوتون و گراویتون همیشه در حالت‌های متقارن یافت شده و بوزون نامیده می‌شوند. ذراتی نظیر الکترون، پروتون و نوترون همیشه در حالت‌های پادمتقارن یافت شده و فرمیون نامیده می‌شوند.

بنابراین اگر دو بوزون یکسان را یکی در $x = a$ و دیگری در $x = b$ بیاوریم، بردار حالت بلافاصله بعد از اندازه‌گیری عبارت می‌شود از

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= |x_1 = a, x_2 = b\rangle + |x_1 = b, x_2 = a\rangle \\ &= |ab\rangle + |ba\rangle = |ab, S\rangle \end{aligned}$$

اگر ذرات فرمیون می‌بودند بردار حالت بعد از اندازه‌گیری به‌صورت زیر می‌شد

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= |x_1 = a, x_2 = b\rangle - |x_1 = b, x_2 = a\rangle = |ab\rangle - |ba\rangle \\ &= |ab, A\rangle \end{aligned}$$

توجه کنید که اگر چه ما هنوز از برچسب‌های x_1 و x_2 استفاده می‌کنیم ولی به هیچ وجه آنها را به ذرات پیوست نمی‌کنیم. بنابراین با یافتن بوزون‌ها در $x = a$ و $x = b$ ، نباید روی اینکه آیا $x_1 = a$ و $x_2 = b$ است یا برعکس زیاد متحمل زحمت شویم. هر دو انتخاب منجر به $|\psi\rangle$ یکسان برای بوزون‌ها شده و به بردارهای حالتی که فقط به اندازه یک علامت با بردار حالت فرمیون‌ها تفاوت دارد منجر می‌شوند.

اکنون در موقعیتی هستیم که می‌توانیم به یک ویژگی اساسی مربوط به فرمیون‌ها پی ببریم که از پادمتقارن بودن بردار حالت آنها ناشی می‌شود. یک حالت دو فرمیونی را در نظر بگیرید

۱- فرض می‌کنیم Ω غیر تهیگن است. در غیر این صورت، فرض کنید ω ویژه مقادیر یک مجموعه کامل از عملگرهای جابه‌جا شونده را نشان دهد.

$$|\omega_1 \omega_2, A\rangle = |\omega_1 \omega_2\rangle - |\omega_2 \omega_1\rangle$$

اکنون فرض کنید $\omega_1 = \omega_2 = \omega$ باشد. نتیجه می‌گیریم که

$$|\omega \omega, A\rangle = |\omega \omega\rangle - |\omega \omega\rangle = 0 \quad (10-3-6)$$

این به اصل طرد پائولی مشهور است: دو فرمیون یکسان نمی‌توانند در یک حالت کوانتومی یکسان باشند. این اصل پیامدهای زیادی در مکانیک آماری، در درک خواص شیمیایی اتم‌ها، نظریه هسته‌ای، اختر فیزیک و غیره دارد و هر از گاهی به آن خواهیم گشت. با این نتیجه مهم، سوالی در اینجا مطرح می‌شود که ممکن است شما را آزار دهد: تحلیل ما فقط این مطلب را بیان کرده است که یک نوع معین از ذره، مثلاً یک پیون، می‌بایست یا یک بوزون باشد یا یک فرمیون، اما بیان نمی‌کند که کدام یک. به دو روش می‌توان پاسخ داد. اولی که هوشمندانه‌تر است در چارچوب نظریه کوانتومی میدان قرار دارد که اسپین ذره را به «آمار» آن، که اصطلاحی است که فیزیکدان‌ها برای اشاره به ماهیت بوزونی یا فرمیونی به کار می‌برند، مرتبط می‌کند. چون مباحث مربوطه فراتر از حوزه این کتاب هستند صرفاً نتایج را در اینجا ذکر می‌کنیم. به یاد بیاورید که اسپین ذره تکانه زاویه‌ای داخلی آن است. بزرگی اسپین برای یک ذره ناورد می‌ماند (و لذا به‌عنوان یک برجسب نظیر جرم یا بار آن به کار می‌رود) و فقط می‌تواند یکی از مقادیر $0, \hbar/2, \hbar, 3\hbar/2, 2\hbar, \dots$ را داشته باشد. قضیه آمار اسپینی، که در نظریه کوانتومی میدان قابل اثبات است، ادعا می‌کند که ذرات با (بزرگی) اسپین برابر با مضرب زوجی از $\hbar/2$ بوزون بوده و ذرات دارای اسپین برابر با مضرب فردی از $\hbar/2$ فرمیون‌اند. اما این نسبت، که در سه بعد ثابت شده، در یک بعد که امکان تعریف اسپین یا هر شکلی از تکانه زاویه‌ای وجود ندارد، کاربرد ندارد (این موضوع از نظر کلاسیکی باید واضح باشد). لذا تنها راه برای فهمیدن اینکه یک ذره در یک بعد بوزون است یا فرمیون، تعیین تقارن تابع موج به صورت تجربی است. این، موضوع روش دوم است که باید به موقع بحث شود.

قبل از اینکه به سراغ روش دوم برویم توجه کنید که این شرط که بردار حالت دو ذره یکسان (تحت تعویض اعداد کوانتومی برجسب زننده آنها) متقارن یا پادمقارن باشد در سه بعد هم اعمال می‌شود و با مرور مباحث در یک بعد روشن خواهد شد. برای مثال ویژه کت مکان یک بوزون اسپین - صفر با سه عدد x و y و z برجسب زده خواهد شد. برای فرمیون‌ها که حداقل دارای اسپین $\hbar/2$ هستند حالت‌ها به وسیله سمتگیری اسپین به علاوه برجسب‌های مداری، که بوزون‌های بدون اسپین را توصیف می‌کنند، برجسب زده خواهند شد.^۱ ما فقط ذرات با اسپین $1/2$ را در نظر می‌گیریم که برای آنها این برجسب فقط می‌تواند دو مقدار به خود بگیرد که آنها را $+$ و $-$ یا اسپین بالا و پائین می‌نامیم (معنی این اصطلاحات بعداً مشخص خواهد شد). اگر همه برجسب‌های مداری را با ω نشان داده و برجسب اسپینی را با s نشان دهیم، بردار حالت فرمیون که تحت تعویض ذرات، یعنی تحت تعویض همه برجسب‌ها، پادمقارن است به شکل

۱- چون اسپین هیچ تعبیر کلاسیکی ندارد، عملگر نمایش‌دهنده آن تابعی از عملگرهای مختصه و تکانه نیست و با هر عملگر مداری Ω جابه‌جا می‌شود. اسپین می‌تواند به‌طور همزمان با متغیرهای مداری مشخص شود.

$$(۱۰-۳-۱)$$

$$|\omega_1 s_1, \omega_2 s_2, A\rangle = |\omega_1 s_1, \omega_2 s_2\rangle - |\omega_2 s_2, \omega_1 s_1\rangle$$

خواهد شد. می‌بینیم که بردار حالت صفر می‌شود در صورتی که

$$(۱۰-۳-۱)$$

$$\omega_1 = \omega_2 \quad \text{و} \quad s_1 = s_2$$

باشد. بنابراین یکبار دیگر می‌بینیم که دو فرمیون نمی‌توانند در یک حالت کوانتومی باشند، حالت کوانتومی را حالتی با ω و s معین تعریف می‌کنیم. بنابراین دو الکترون می‌توانند در یک حالت مداری باشند در صورتی که ستمگیری اسپین آنها متفاوت باشد.

اکنون به روش دوم یافتن آمار یک نوع معین از ذرات بر می‌گردیم، روشی که در یک یا سه بعد کار می‌کند چون به یک آزمایش ساده متوسل می‌شود که مشخص می‌کند بردار حالت دو-ذره‌ای برای یک نوع معین متقارن است یا پادمقارن. برای ورود به بحث یک چنین آزمایشی، فضای هیلبرت بوزون‌ها و فرمیون‌ها را با جزئیات مطالعه می‌کنیم.

فضاهای هیلبرت بوزونی و فرمیونی

دیده‌ایم که دو بوزون یکسان همیشه بردارهای حالت متقارن و دو فرمیون یکسان همیشه بردارهای حالت پادمقارن خواهند داشت. فرض کنید فضای هیلبرت بردارهای بوزونی متقارن را V_S و فضای هیلبرت بردارهای فرمیونی پادمقارن را V_A بنامیم. ابتدا رابطه بین این دو فضا را از یک طرف و فضای برداری مستقیم $V_{1\otimes 2}$ را از طرف دیگر بررسی می‌کنیم.

فضای $V_{1\otimes 2}$ شامل همه بردارهای به شکل $|\omega_1 \omega_2\rangle = |\omega_1\rangle \otimes |\omega_2\rangle$ است. برای هر جفت از بردارهای $|\omega_1 = a, \omega_2 = b\rangle$ و $|\omega_1 = b, \omega_2 = a\rangle$ یک بردار بوزونی (بهنجار نشده) $|\omega_1 = b, \omega_2 = a\rangle + |\omega_1 = a, \omega_2 = b\rangle$ و یک بردار فرمیونی $|\omega_1 = a, \omega_2 = b\rangle - |\omega_1 = b, \omega_2 = a\rangle$ وجود دارد. اگر $a = b$ باشد، بردار $|\omega_1 = a, \omega_2 = a\rangle$ متقارن بوده و می‌توانیم آنرا بردار بوزونی بگیریم. بردار فرمیونی متناظر وجود ندارد (اصل طرد) بنابراین $V_{1\otimes 2}$ دارای بردارهای پایه کافی برای تشکیل یک فضای هیلبرت بوزونی و یک فضای هیلبرت فرمیونی است. این رابطه را به صورت

$$(۱۰-۳-۱)$$

$$V_{1\otimes 2} = V_S \oplus V_A$$

می‌نویسیم، که بعد V_S کمی بیشتر از نصف بعد $V_{1\otimes 2}$ است.^۱ تحلیل ما نشان داده است که در هر زمان مشخص، حالت دو بوزون، عنصری از V_S ، و حالت دو فرمیون عنصری از V_A است. همچنین می‌توان نشان داد که سیستمی که در $(V_A)V_S$ آماده می‌شود در $(V_A)V_S$ می‌ماند. تمرین ۱۰-۳-۵ را ببینید. بنابراین در مطالعه دو ذره یکسان لازم است فقط V_S یا V_A را در نظر بگیریم. اما بهتر است V_S و V_A را به‌عنوان زیر فضاهای $V_{1\otimes 2}$ و عناصر V_S یا V_A را به‌عنوان عناصر $V_{1\otimes 2}$ هم تلقی کنیم.

۱- چون هر عنصر از V_S بر هر عنصر از V_A عمود است (باید امتحان کنید)، بعد $V_{1\otimes 2}$ برابر مجموع ابعاد V_S و V_A است.

اکنون بهنجارش بردارها را در V_S بررسی می‌کنیم. ابتدا ویژه کت‌های $|\omega_1\omega_2, S\rangle$ متناظر با یک متغیر Ω با ویژه مقادیر گسسته را در نظر بگیرید. بردار حالت بهنجار نشده،

$$|\omega_1\omega_2, S\rangle = |\omega_1\omega_2\rangle + |\omega_2\omega_1\rangle$$

است. چون $|\omega_1\omega_2\rangle$ و $|\omega_2\omega_1\rangle$ حالت‌های راست هنجار در $V_{\otimes 2}$ هستند، ضریب بهنجارش $2^{-\frac{1}{2}}$ است، یعنی

$$|\omega_1\omega_2, S\rangle = 2^{-1/2} [|\omega_1\omega_2\rangle + |\omega_2\omega_1\rangle] \quad (10-3-10 \text{ الف})$$

ویژه بردار بهنجار شده است. می‌توانید به راحتی امتحان کنید که $\langle \omega_1\omega_2, S | \omega_1\omega_2, S \rangle = 1$ است. بحث قبلی فرض می‌کند که $\omega_1 \neq \omega_2$ است. اگر $\omega_1 = \omega_2 = \omega$ باشد کت حاصل ضرب خودش هم متقارن و هم بهنجار شده است و انتخاب می‌کنیم:

$$|\omega\omega, S\rangle = |\omega\omega\rangle \quad (10-3-10 \text{ ب})$$

هر بردار $|\psi_S\rangle$ در V_S می‌تواند برحسب این پایه Ω بسط داده شود. طبق معمول،

$$P_S(\omega_1, \omega_2) = |\langle \omega_1\omega_2, S | \psi_S \rangle|^2 \quad (11-3-10)$$

را به‌عنوان احتمال مطلق یافتن ذرات در حالت $|\omega_1\omega_2, S\rangle$ تعریف می‌کنیم وقتی یک اندازه‌گیری Ω روی سیستم در حالت $|\psi_S\rangle$ صورت بگیرد. شرط بهنجارش $|\psi_S\rangle$ و $P_S(\omega_1, \omega_2)$ می‌تواند به‌صورت

$$\begin{aligned} 1 = \langle \psi_S | \psi_S \rangle &= \sum_{\text{dist}} |\langle \omega_1\omega_2, S | \psi_S \rangle|^2 \\ &= \sum_{\text{dist}} P_S(\omega_1, \omega_2) \end{aligned} \quad (10-3-12 \text{ الف})$$

نوشته شود که \sum_{dist} جمع روی همه حالت‌هایی را نشان می‌دهد که از نظر فیزیکی متمایز هستند. اگر ω_1 و ω_2 مقادیر بین ω_{\min} و ω_{\max} را اختیار کنند، آنگاه

$$\sum_{\text{dist}} = \sum_{\omega_2 = \omega_{\min}}^{\omega_{\max}} \sum_{\omega_1 = \omega_{\min}}^{\omega_2} \quad (10-3-12 \text{ ب})$$

بدین ترتیب از شمارش هر دوی $|\omega_1\omega_2, S\rangle$ و $|\omega_2\omega_1, S\rangle$ ، که از نظر فیزیکی هم ارزند، اجتناب می‌کنیم. راه دیگر این است که هر دو را شمرده و بر ۲ تقسیم کنیم.

اگر چگالی احتمال مطلق را برای یک متغیر پیوسته نظیر X بخواهیم چطور؟ در این حالت باید تصویر $|\psi_S\rangle$ را روی ویژه کت مکان بهنجار شده به‌دست آوریم:

$$|x_1x_2, S\rangle = 2^{-1/2} [|x_1x_2\rangle + |x_2x_1\rangle] \quad (13-3-10)$$

$$P_S(x_1, x_2) = |\langle x_1 x_2, S | \psi_S \rangle|^2 \quad (14-3-10)$$

برسیم. شرط بهنجارش برای $P_S(x_1, x_2)$ و $|\psi_S\rangle$

$$1 = \iint P_S(x_1, x_2) \frac{dx_1 dx_2}{2} = \iint |\langle x_1 x_2, S | \psi_S \rangle|^2 \frac{dx_1 dx_2}{2} \quad (15-3-10)$$

است که ضریب $\frac{1}{2}$ به خاطر دو بار شمارش در انتگرال‌گیری روی dx_1 و dx_2 قرار داده شده است.^۱ در این مورد بهتر است تابع موج را به صورت

$$\psi_S(x_1, x_2) = 2^{-1/2} \langle x_1 x_2, S | \psi_S \rangle \quad (16-3-10)$$

تعریف کنیم به طوری که بهنجارش ψ_S به صورت

$$1 = \iint |\psi_S(x_1, x_2)|^2 dx_1 dx_2 \quad (17-3-10)$$

شود. اما در این حالت به دلیل مقیاس‌بندی مجدد داریم:

$$P_S(x_1, x_2) = 2 |\psi_S(x_1, x_2)|^2 \quad (18-3-10)$$

حال توجه کنید که

$$\psi_S(x_1, x_2) = \frac{1}{2^{1/2}} \langle x_1 x_2, S | \psi_S \rangle = \frac{1}{2} [\langle x_1 x_2 | \psi_S \rangle + \langle x_2 x_1 | \psi_S \rangle] \quad (19-3-10)$$

$$= \langle x_1 x_2 | \psi_S \rangle$$

که در آن از این حقیقت بهره گرفته‌ایم که $|\psi_S\rangle$ بین ذرات متقارن می‌شود و با $\langle x_1 x_2 |$ و $\langle x_2 x_1 |$ دارای ضرب داخلی یکسانی است. در نتیجه، شرط بهنجارش معادله (۱۷-۳-۱۰) به صورت

$$1 = \langle \psi_S | \psi_S \rangle = \iint |\psi_S|^2 dx_1 dx_2 = \iint \langle \psi_S | x_1 x_2 \rangle \langle x_1 x_2 | \psi_S \rangle dx_1 dx_2$$

می‌شود که وقتی $|\psi_S\rangle$ عنصری از V_{102} هم باشد معنی دارد. اما توجه کنید که کت‌های $|x_1 x_2\rangle$ فقط به عنوان ابزارهای دفترداری وارد تعریف تابع موج معادله (۱۰-۳-۱۹) و انتگرال بهنجارش فوق می‌شوند. آنها عناصر V_S نیستند و ضرب داخلی $\langle x_1 x_2 | \psi_S \rangle$ به درد ما نمی‌خورد، اگر به این خاطر نبود که کمیتی که از نظر فیزیکی برای ما جالب و مهم است، $\langle x_1 x_2, S | \psi_S \rangle$ ، فقط با یک ضریب مقیاس $2^{1/2}$ به آن مربوط می‌شود. اکنون یک مثال آموزنده را در نظر می‌گیریم. انرژی دو بوزون غیر برهم کنش کننده را در جعبه‌ای

۱- نقاط $x_1 = x_2 = x$ سوالات ظریفی را نسبت به ضریب $\frac{1}{2}$ و بهنجارش کت‌های $|x, x, S\rangle$ مطرح می‌کنند. ماب به این سوالات نمی‌پردازیم چون نقاط روی خط $x_1 = x_2 = x$ فقط سهم بی‌نهایت کوچکی در انتگرال‌گیری در صفحه $x_1 - x_2$ (از هر تابع یکنواخت) دارند. در ادامه بحث می‌توانید فرض کنید که کمیت‌هایی نظیر $P_S(x, x)$ و $\psi_S(x, x)$ همگی در حدهای $x \rightarrow x_2 \rightarrow x_1$ توابع $P_S(x_1, x_2)$ و $\psi_S(x_1, x_2)$ و غیره مشخص می‌شوند.

گسترده شده از $x = 0$ تا $x = L$ اندازه گرفته و می‌بینیم که در حالت‌های کوانتومی $n = 3$ و $n = 4$ قرار دارند. بردار حالت بهنجار شده درست بعد از اندازه‌گیری در نمادگذاری مرسوم،

$$|\psi_S\rangle = \frac{|3, 4\rangle + |4, 3\rangle}{2^{1/2}} \quad (۲۰-۳-۱۰)$$

است. تابع موج عبارتست از

$$\begin{aligned} \psi_S(x_1, x_2) &= 2^{-1/2} \langle x_1 x_2, S | \psi_S \rangle \\ &= \frac{1}{2} (\langle x_1 x_2 | + \langle x_2 x_1 |) \left(\frac{|3, 4\rangle + |4, 3\rangle}{2^{1/2}} \right) \\ &= \frac{1}{2(2^{1/2})} [\langle x_1 x_2 | 3, 4\rangle + \langle x_1 x_2 | 4, 3\rangle + \langle x_2 x_1 | 3, 4\rangle + \langle x_2 x_1 | 4, 3\rangle] \\ & \quad (۱۰-۳-۲۱-الف) \\ &= \frac{1}{2(2^{1/2})} [\psi_3(x_1)\psi_4(x_2) + \psi_4(x_1)\psi_3(x_2) + \psi_3(x_2)\psi_4(x_1) \\ & \quad + \psi_4(x_2)\psi_3(x_1)] \\ &= 2^{-1/2} [\psi_3(x_1)\psi_4(x_2) + \psi_4(x_1)\psi_3(x_2)] \\ &= \langle x_1 x_2 | \psi_S \rangle \end{aligned}$$

که در همه موارد بالا،

$$\psi_n(x) = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (۱۰-۳-۲۱-ب)$$

این ملاحظات با تصحیحاتی ساده برای فضای فرمیونی V_A به کار می‌روند. بردارهای پایه به شکل

$$|\omega_1 \omega_2, A\rangle = 2^{-1/2} [|\omega_1 \omega_2\rangle - |\omega_2 \omega_1\rangle] \quad (۱۰-۳-۲۲)$$

هستند (حالت $\omega_1 = \omega_2$ در اینجا اتفاق نمی‌افتد) تابع موج باز هم به صورت

$$\begin{aligned} \psi_A(x_1, x_2) &= 2^{-1/2} \langle x_1 x_2, A | \psi_A \rangle \\ &= \langle x_1 x_2 | \psi_A \rangle \end{aligned} \quad (۱۰-۳-۲۳)$$

است و همانند حالت بوزونی،

$$P_A(x_1, x_2) = 2 |\psi_A(x_1, x_2)|^2 \quad (۱۰-۳-۲۴)$$

شرط بهنجارش عبارتست از

$$1 = \iint P_A(x_1, x_2) \frac{dx_1 dx_2}{2} = \iint |\psi_A(x_1, x_2)|^2 dx_1 dx_2 \quad (۱۰-۳-۲۵)$$

با برگشتن به مثال دو ذره در یک جعبه، اگر مقادیر $n = 3$ و $n = 4$ را به دست می‌آوردیم آنگاه حالت درست بعد از اندازه‌گیری به صورت

$$|\psi_A\rangle = \frac{|3, 4\rangle - |4, 3\rangle}{2^{1/2}} \quad (۱۰-۳-۲۶)$$

می‌شد (می‌توانیم)

$$|\psi_A\rangle = \frac{|4, 3\rangle - |3, 4\rangle}{2^{1/2}}$$

هم انتخاب کنیم که هیچ تفاوتی از نظر فیزیکی ندارد. تابع موج متناظر می‌تواند به شکل یک دترمینال نوشته شود:

$$\begin{aligned} \psi_A(x_1, x_2) &= \langle x_1 x_2 | \psi_A \rangle = 2^{-1/2} [\psi_3(x_1)\psi_4(x_2) - \psi_4(x_1)\psi_3(x_2)] \\ &= 2^{-1/2} \begin{vmatrix} \psi_3(x_1) & \psi_4(x_1) \\ \psi_3(x_2) & \psi_4(x_2) \end{vmatrix} \end{aligned} \quad (27-3-10)$$

اگر حالت $|\omega_1 \omega_2, A\rangle$ را در نظر می‌گیریم [معادله (۲۷-۳-۱۰)]،

$$\psi_A(x_1, x_2) = 2^{-1/2} \begin{vmatrix} \psi_{\omega_1}(x_1) & \psi_{\omega_2}(x_1) \\ \psi_{\omega_1}(x_2) & \psi_{\omega_2}(x_2) \end{vmatrix} \quad (28-3-10)$$

تعیین آمار ذره

سرانجام آماده‌ایم تا به این سوال دیرینه پاسخ دهیم که: چطور می‌توان به‌طور تجربی آمار یک نوع (ذره) معین را مشخص کرد یعنی اینکه بدون توجه به قضیه آمار اسپینی مشخص کنیم که ذره بوزون است یا فرمیون؟ برای واقعی شدن، فرض کنید دو پتون یکسان غیر برهم‌کنش‌کننده داریم و می‌خواهیم بوزون و یا فرمیون بودن آنها را مشخص کنیم. به ترتیب زیر عمل می‌کنیم: آنها را در یک جعبه یک بعدی^۲ قرار داده و یک اندازه‌گیری انرژی انجام می‌دهیم. مثلاً دیده می‌شود که یکی در حالت $n=3$ و دیگری در حالت $n=4$ قرار دارد. توزیع احتمال در فضای x ، بسته به آمار آنها، به‌صورت زیر می‌شود:

$$\begin{aligned} P_{S/A}(x_1, x_2) &= 2|\psi_{S/A}(x_1, x_2)|^2 \\ &= 2|2^{-1/2}[\psi_3(x_1)\psi_4(x_2) \pm \psi_4(x_1)\psi_3(x_2)]|^2 \\ &= |\psi_3(x_1)|^2|\psi_4(x_2)|^2 + |\psi_4(x_1)|^2|\psi_3(x_2)|^2 \\ &\quad \pm [\psi_3^*(x_1)\psi_4(x_1)\psi_4^*(x_2)\psi_3(x_2) + \psi_4^*(x_1)\psi_3(x_1)\psi_3^*(x_2)\psi_4(x_2)] \end{aligned} \quad (29-3-10)$$

این وضعیت را، دو ذره دارای برچسب‌های ۱ و ۲ ولی از جهات دیگر یکسان^۳، با وضعیت ذره ۱ در حالت ۳، که با توزیع احتمال $|\psi_3(x)|^2$ توصیف می‌شود، و ذره ۲ در حالت ۴، که با توزیع احتمال $|\psi_4(x)|^2$ توصیف شود، مقایسه کنید. در این حالت، جمله اول احتمال اینکه ذره ۱ در x_1 و ذره ۲ در x_2 باشد را نشان می‌دهد در حالی که دومی احتمال عکس این رویداد را نشان می‌دهد. جمع این دو جمله، $P_D(x_1, x_2)$ یعنی احتمال یافتن یکی در x_1 و دیگری در x_2 را بدون توجه به برچسب‌ها به‌دست می‌دهد (اندیس D نشانگر تمییز‌پذیر بودن است) دو جمله بعدی، که جملات تداخلی نامیده می‌شوند، خاطر نشان می‌کنند که در نظریه

۱- شکل دترمینال ψ_A روشن می‌کند که اگر $x_1 = x_2$ یا $\omega_1 = \omega_2$ باشد ψ_A صفر می‌شود.

۲- این کار را برای سادگی بحث انجام می‌دهیم. ایده اصلی به همین خوبی در سه بعد هم درست است.

۳- این برچسب برای مثال می‌تواند بار الکتریکی باشد.

کوانتومی برای ذرات یکسان چیزی بیش از فقط مشخصه‌های یکسان آنها وجود دارد: آنها هیچ هویت (جوهر) جدایی ندارند. اگر آنها هویت‌های جدایی داشتند (مثل حالت کلاسیکی) و ما به اینکه کدامیک به x_1 و کدامیک x_2 می‌رسند بی تفاوت می‌بودیم، فقط دو جمله اول را می‌داشتیم. یک همانندی بین این وضعیت و آزمایش دو شکافی، که در آن احتمالات یافتن یک ذره در یک نقطه معین x روی پرده با دو شکاف برابر جمع احتمالات در حالتی که هر یک از دو شکاف باز است برابر نبود، وجود دارد. در هر دو حالت، جملات تداخلی ظاهر می‌شوند چون در نظریه کوانتومی وقتی یک رویداد می‌تواند به دو روش (یا چند روش) غیر قابل تمییز رخ دهد، دامنه‌های متناظر را جمع می‌کنیم نه احتمالات متناظر را.

درست همان‌طور که در آنجا مجاز نبودیم مسیری معین به ذره نسبت دهیم (از شکاف‌های ۱ یا ۲) اکنون هم مجاز نیستیم برچسب‌های معینی به ذرات نسبت دهیم.

جملات تداخلی بیان می‌کنند که پیون‌ها بوزون هستند یا فرمیون. تفاوت بین دو حالت وقتی که

$$x \rightarrow x_2 \rightarrow x_1 \text{ میل می‌کند برجسته‌تر است:}$$

$$P_A(x_1 \rightarrow x, x_2 \rightarrow x) \rightarrow 0 \quad (x \text{ به کار رفته است}) \quad (۱۰-۳-۳۰)$$

در حالی که

$$P_S(x_1 \rightarrow x, x_2 \rightarrow x) = 2[|\psi_3(x)|^2 |\psi_4(x)|^2 + |\psi_4(x)|^2 |\psi_3(x)|^2] \quad (۱۰-۳-۳۱)$$

که دو برابر بزرگی $P_D(x_1 \rightarrow x, x_2 \rightarrow x)$ ، چگالی احتمال برای دو ذره‌ای که برچسب‌های مجزا داشته (اما از هر نظر یکسان) و برچسب‌هایشان در اندازه‌گیری مکان بی اهمیت هستند، است.

به تمایل فرمیون‌ها برای اجتناب کردن از یکدیگر (یعنی اجتناب از حالت $x_1 = x_2 = x$)، پیروی از «آمار فرمی - دیراک» گفته شد و به تمایل بوزون‌ها به تجمع «پیروی از آمار بوز - اینشتین» گفته می‌شود و دلیل آن فیزیکدان‌هایی هستند که اولین بار نتایج مقارن سازی و پادمقارن سازی را روی مکانیک آماری مجموعه‌ای (هنگردی) از به ترتیب فرمیون‌ها و بوزون‌ها بررسی کردند (اینکه به ماهیت بوزونی/فرمیونی یک ذره آمار آن گفته می‌شود دلیلش همین است).

با معلوم شدن تفاوت برجسته دو توزیع، به راحتی می‌توانیم (یک بار و برای همیشه) با آماده‌سازی مجموعه‌ای (هنگردی) از سیستم‌ها (با ذرات واقع در $n = 3, 4$) و اندازه‌گیری $P(x_1, x_2)$ معین کنیم که پیون‌ها فرمیون هستند یا بوزون.

توجه کنید که $P(x_1, x_2)$ به ما کمک می‌کند تا نه تنها بوزون یا فرمیون بودن ذرات را تعیین کنیم بلکه در وهله اول می‌توانیم معین کنیم که آنها یکسان هستند. به عبارتی دیگر اگر ذراتی که ما فکر می‌کنیم یکسان هستند نسبت به یک برچسبی که ما از آن آگاه نیستیم فرق کنند، ماهیت جمله تداخلی این حقیقت را آشکار خواهد کرد. برای مثال دو بوزون را تصور کرده و آنها را K و \bar{K} بنامید که نسبت به جرم و بار یکسان هستند و از لحاظ یک عدد کوانتومی به نام «فوق بار» متفاوت هستند. فرض می‌کنیم که از وجود فوق بار بی‌خبر هستیم. در آماده‌سازی هنگردی که فکر می‌کنیم شامل N زوج یکسان است عملاً چند زوج (K, \bar{K}) ،

چند زوج (\bar{K}, \bar{K}) و چند زوج (K, \bar{K}) خواهیم گنجانند. حال اگر اندازه گیری‌هایی روی مجموعه انجام داده و توزیع $P(x_1, x_2)$ را به دست آوریم (باز هم با چشم‌پوشی از فوق بار) خواهیم دید که جمله تداخلی دارای علامت (+) است ولی به آن بزرگی که باید باشد نیست. اگر هنگرد فقط شامل بوزون‌های یکسان می‌بود $P(x, x)$ باید دو برابر بزرگی $P_D(x, x)$ ، که ذرات برچسب‌دار^۱ را توصیف می‌کند، می‌شد؛ اگر به نسبتی کمتر از ۲ برسیم می‌دانیم که هنگرد دارای ذرات برچسب‌دار است که هیچ جمله تداخلی ایجاد نمی‌کنند.

از بحث‌های بالا همچنین روشن است که نمی‌توان بدون تأمل نتیجه گرفت که با یافتن دو الکترون در یک حالت مداری یکسان در سه بعد آنها فرمیون نیستند. در این مورد، برچسبی که نادیده می‌گیریم جهت گیری اسپین s است. همان‌طور که قبلاً اشاره شد s فقط می‌تواند دو مقدار + و - را داشته باشد. اگر فرض کنیم که s هرگز (البته در طی آزمایش) تغییر نمی‌کند می‌تواند به عنوان یک برچسب ذره به کار رود که با گذشت زمان تغییر نمی‌کند. اگر برای یک الکترون $s = +$ و برای دیگری $s = -$ باشد آنها شبیه دو ذره متمایز بوده و می‌توانند در حالت مداری یکسان باشند. مطمئن‌ترین چیز در اینجا باز هم کار کردن با یک هنگرد به جای یک اندازه گیری منزوی است. از آنجا که از اسپین بی‌خبر هستیم، هنگرد ما شامل زوج‌های $(+, +)$ ، $(-, -)$ و $(-, +)$ خواهد بود. زوج‌های $(+, +)$ و $(-, -)$ فرمیون‌های یکسانند و جمله تداخلی منفی ایجاد خواهند کرد در حالی که زوج‌های $(-, +)$ و $(+, -)$ جمله‌ای ایجاد نخواهند کرد. بنابراین خواهیم دید که $P(\mathbf{r}, \mathbf{r})$ کوچکتر از $P_D(\mathbf{r}, \mathbf{r})$ توصیفگر ذرات برچسب‌دار است اما صفر نیست. این به ما می‌گوید که هنگرد ما دارای زوج‌های فرمیون یکسان است که با زوج‌هایی از ذرات قابل تمییز آمیخته است. بر ما خواهد بود که ماهیت درجه آزادی پنهانی را که تمایز را ایجاد می‌کند پیدا کنیم.

سیستم‌هایی با N ذره یکسان

حالت $N = 2$ فاقد یک ویژگی است که در N بزرگتر دیده می‌شود. این موضوع را با در نظر گرفتن حالت سه ذره یکسان در یک جعبه نشان می‌دهیم. فرض کنید که یک اندازه گیری انرژی نشان می‌دهد که اعداد کوانتومی ذرات n_1 ، n_2 و n_3 است. چون ذرات یکسان هستند تمام چیزی که می‌توانیم از این مشاهده نتیجه بگیریم این است که انرژی کل برابر است با

$$E = \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \right) (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$$

تعداد $6 = 3!$ حالت حاصل ضرب با این انرژی وجود دارد: $|n_1 n_2 n_3\rangle$ ، $|n_1 n_3 n_2\rangle$ ، $|n_2 n_1 n_3\rangle$ ، $|n_2 n_3 n_1\rangle$ ، $|n_3 n_1 n_2\rangle$ و $|n_3 n_2 n_1\rangle$. حالت‌های فیزیکی، عناصر ویژه فضای شش بعدی پدید آمده به وسیله این بردارها بوده و به وسیله این ویژگی تمییز داده می‌شوند که تحت تعویض هر دو برچسب ذره، بردار حالت فقط به اندازه یک ضریب α تغییر می‌کند. از آنجا که دو بار تعویض دو برچسب با عدم تعویض معادل است همچون قبل نتیجه می‌گیریم که $\alpha = \pm 1$ است. فقط دو حالت با این ویژگی وجود دارد:

$$|n_1 n_2 n_3, S\rangle = \frac{1}{(3!)^{1/2}} [|n_1 n_2 n_3\rangle + |n_1 n_3 n_2\rangle + |n_2 n_3 n_1\rangle + |n_2 n_1 n_3\rangle + |n_3 n_2 n_1\rangle + |n_3 n_1 n_2\rangle] \quad (۳۲-۳-۱۰)$$

که حالت کاملاً متقارن^۱ نامیده شده و برای آن، با هر سه تعویض ممکن ($1 \leftrightarrow 2$ و $2 \leftrightarrow 3$ و $1 \leftrightarrow 3$)، $\alpha = +1$ است.

$$|n_1 n_2 n_3, A\rangle = \frac{1}{(3!)^{1/2}} [|n_1 n_2 n_3\rangle - |n_1 n_3 n_2\rangle + |n_2 n_3 n_1\rangle - |n_2 n_1 n_3\rangle + |n_3 n_1 n_2\rangle - |n_3 n_2 n_1\rangle] \quad (۳۳-۳-۱۰)$$

که حالت کاملاً پادمقارن نامیده شده و برای آن، با هر سه تعویض ممکن، $\alpha = -1$ است. بوزون‌ها همیشه حالت‌های S و فرمیون‌ها حالت‌های A را انتخاب می‌کنند. نتیجه اینکه هیچ دو فرمیونی نمی‌توانند حالت یکسانی داشته باشند.

همچون مورد $N = 2$ ، تابع موج در پایه X عبارتست از

$$\psi_{S/A}(x_1, x_2, x_3) = (3!)^{-1/2} \langle x_1 x_2 x_3, S/A | \psi_{S/A} \rangle = \langle x_1 x_2 x_3 | \psi_{S/A} \rangle \quad (۳۴-۳-۱۰)$$

و

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_{S/A}|^2 dx_1 dx_2 dx_3 = 1$$

برای نمونه تابع موج مربوط به $|n_1 n_2 n_3, S/A\rangle$ ، معادلات (۳۳-۳-۱۰) و (۳۴-۳-۱۰)، عبارتست از

$$\begin{aligned} & \psi_{n_1 n_2 n_3}(x_1, x_2, x_3, S/A) \\ &= (3!)^{-1/2} [\psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2) \psi_{n_3}(x_3) \pm \psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_3}(x_2) \psi_{n_2}(x_3) \\ &+ \psi_{n_2}(x_1) \psi_{n_3}(x_2) \psi_{n_1}(x_3) \pm \psi_{n_2}(x_1) \psi_{n_1}(x_2) \psi_{n_3}(x_3) \\ &+ \psi_{n_3}(x_1) \psi_{n_1}(x_2) \psi_{n_2}(x_3) \pm \psi_{n_3}(x_1) \psi_{n_2}(x_2) \psi_{n_1}(x_3)] \end{aligned} \quad (۳۵-۳-۱۰)$$

تابع موج فرمیون باز هم می‌تواند به صورت یک دترمینان نوشته شود:

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(x_1, x_2, x_3, A) = \frac{1}{(3!)^{1/2}} \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(x_1) & \psi_{n_2}(x_1) & \psi_{n_3}(x_1) \\ \psi_{n_1}(x_2) & \psi_{n_2}(x_2) & \psi_{n_3}(x_2) \\ \psi_{n_1}(x_3) & \psi_{n_2}(x_3) & \psi_{n_3}(x_3) \end{vmatrix} \quad (۳۶-۳-۱۰)$$

با استفاده از خواص دترمینان به راحتی می‌توان دید که ψ ، وقتی دو تا از x ‌ها یا n ‌ها مساوی باشند، صفر می‌شود. همه این نتایج مستقیماً به N ‌های بالاتر تعمیم می‌یابند.

۱- ضریب بهنجارش $(3!)^{-1/2}$ فقط در صورتی درست است که هر سه n متفاوت باشند. اگر برای مثال $n_1 = n_2 = n_3 = n$ باشد، حالت حاصل ضرب $|nnn\rangle$ و متقارن بوده و می‌تواند به عنوان حالت S به کار رود. برای حالت فرمیون به دلیل اصل طرد پائولی چنین سوالی مطرح نمی‌شود.

در اینجا دو سوال ممکن است مطرح شود:

سوال ۱: حالت $N = 3$ را در نظر بگیرید. سه امکان تعویض در اینجا وجود دارد: $(1 \leftrightarrow 2)$ ، $(1 \leftrightarrow 3)$ و $(2 \leftrightarrow 3)$. حالت‌های S ضرب $\alpha = +1$ را برای هر سه تعویض انتخاب می‌کنند در حالی که حالت‌های A برای هر سه تعویض $\alpha = -1$ برمی‌گزینند. در مورد حالت‌هایی که برای آنها بعضی از α ها $+1$ و برخی -1 هستند چطور؟ چنین حالت‌هایی وجود ندارند. این موضوع را می‌توانید با صرف وقت اثبات کنید: $3!$ بردار حاصل ضرب را در نظر گرفته و تلاش کنید تا چنین ترکیب خطی را تشکیل دهید. چون اثبات عمومی برای این مورد و همه N ها به نظریه گروه مربوط می‌شود در اینجا این موضوع را بحث نخواهیم کرد. توجه کنید که چون فقط دو بردار مورد قبول برای هر $N!$ بردار حاصل ضرب به دست می‌آوریم فضای حاصل ضرب مستقیم برای $N \geq 3$ بزرگتر از $(V_S \oplus V_A)$ است.

سوال ۲: ما به‌طور ضمنی فرض کرده‌ایم که اگر دو ذره یکسان از یک نوع معین همیشه حالت S (با A) را انتخاب کنند برای سه ذره یا بیشتر هم چنین خواهد بود یعنی ما تعریف خود از بوزون‌ها و فرمیون‌ها را از $N = 2$ به همه N ها بسط داده‌ایم. آیا می‌شود دو پیون همیشه حالت S ولی سه پیون همیشه حالت A را انتخاب کنند؟ در حالی که با وجود چنین امکانی شهود ما منقلب می‌شود، فعلاً باید به‌طور صوری آن را رد کنیم. در پایان زیر بخش بعدی هم این کار را انجام می‌دهیم.

چه زمانی می‌توانیم متقارن سازی و پادمقارن سازی را نادیده بگیریم؟

یک فرض اساسی که فیزیکدان‌ها قبل از هر نوع پیشرفت انجام می‌دهند این است که آنها می‌توانند بخشی از جهان (سیستم) را جدا کرده و جدا از بقیه جهان مطالعه کنند. با اینکه هیچ سیستمی واقعاً منزوی و ایزوله نیست، اغلب می‌توان به این وضعیت ایده آل نزدیک شد، برای نمونه، وقتی نوسانات جرم جفت شده به یک فنر را مطالعه می‌کنیم از کشش گرانشی پلوتون چشم‌پوشی می‌کنیم.

از نظر کلاسیکی، منزوی سازی سیستم به‌صورت جدا شدنی شدن هامیلتونی جهان (کل) بیان می‌شود

$$\mathcal{H}_{\text{universe}} = \mathcal{H}_{\text{sys}} + \mathcal{H}_{\text{rest}} \quad (10-3-37)$$

که \mathcal{H}_{sys} تابعی از مختصه‌ها و تکانه‌های سیستم است. نتیجه اینکه تحول زمانی p ها و q های سیستم از آنچه در بقیه جهان می‌گذرد مستقل است. در مثال ما این قابلیت جدا شدن با برهم کش گرانشی بین جرم و پلوتون، که به فاصله نسبی آنها بستگی دارد، مختل می‌شود. اگر از این اثر کوچک بی‌معنی (و دیگر اثرات این چنینی) چشم‌پوشی کنیم، با تقریب بسیار خوبی به وضعیت قابل جدا شدن می‌رسیم.

از نظر مکانیک کوانتومی، قابلیت جدا شدن H به تجزیه تابع موج جهان منجر می‌شود:

$$\Psi_{\text{universe}} = \Psi_{\text{sys}} \cdot \Psi_{\text{rest}} \quad (10-3-38)$$

که فقط تابعی از مختصه‌های سیستم است که مجموعاً با α_s نشان داده می‌شوند. بنابراین اگر احتمال اینکه سیستم دارای یک مختصه معین α_s ، بدون توجه به بقیه، باشد را بخواهیم (به‌طور نمادین) نتیجه زیر به دست می‌آید

$$\begin{aligned}
 P(x_s) &= \int |\psi_{\text{universe}}(x_s, x_{\text{rest}})|^2 dx_{\text{rest}} \\
 &= |\psi_{\text{sys}}(x_s)|^2 \int |\psi(x_{\text{rest}})|^2 dx_{\text{rest}} \quad (۳۹-۳-۱۰) \\
 &= |\psi_{\text{sys}}(x_s)|^2
 \end{aligned}$$

می توانستیم این نتیجه را به سادگی با چشم‌پوشی از ψ_{rest} ، از همان ابتدا، به دست آوریم. وقتی سیستم و «بقیه جهان» شامل ذرات یکسان باشند وضعیت پیچیده می‌شود. حتی اگر هیچ برهم‌کنشی بین سیستم و بقیه جهان نباشد، یعنی هامیلتونی جدا شدنی باشد، حالت‌های حاصل ضرب مجاز نبوده و فقط می‌بایست حالت‌های S یا A به کار روند. همین که بردار حالت نتواند تجزیه شود (دو قسمت)، دیگر نمی‌توانیم بنویسیم:

$$P(x_s, x_{\text{rest}}) = P(x_s)P(x_{\text{rest}}) \quad (۴۰-۳-۱۰)$$

(یعنی سیستم‌ها از نظر آماری مستقل نخواهند بود) و نمی‌توانیم انتگرال $P(x_{\text{rest}})$ را انجام داده و $P(x_s)$ را مجدداً به دست آوریم.

حال به نظر منطقی می‌رسد که حداقل در بعضی موارد باید امکان‌پذیر باشد حالت حاصل ضرب را برداشته و از شروط مقارن‌سازی و پادمقارن‌سازی چشم‌پوشی کنیم.

برای مثال فرض کنید در $t = 0$ ، یک پیون را در حالت پایه یک پتانسیل نوسانگر متمرکز حول نقطه‌ای روی زمین و پیون دیگر را در همان حالت، اما روی ماه بیابیم. به نظر منطقی می‌رسد که ما می‌توانیم به ذرات برجسب‌های «پیون زمین» و «پیون ماه» بدهیم که با گذشت زمان ثابت باقی می‌مانند. اگر چه ما نمی‌توانیم مسیرهای آنها را دنبال کنیم ولی می‌توانیم توابع موج آنها را دنبال کنیم: می‌دانیم که تابع موج اول، گوسینی، $G_E(x_E)$ ، متمرکز در یک نقطه آزمایشگاه روی زمین و تابع موج دوم گوسین $G_M(x_M)$ متمرکز در نقطه‌ای روی ماه است. اگر پیونی را در لحظه t در جایی روی زمین بیابیم نظریه بیان می‌کند که تقریباً به‌طور قطعی «پیون زمین» است و احتمال اینکه «پیون ماه» باشد فوق‌العاده کوچک (محال) است. بنابراین عدم قطعیت در مکان هر پیون با فاصله‌ای که بسیار بزرگتر است جبران می‌شود (حتی در مکانیک کلاسیک، لازم نیست تا دقیقاً مسیرها را بدانیم تا ذرات را دنبال کنیم؛ نوار عدم قطعیت حول هر مسیر صرفاً می‌بایست بسیار باریکتر از کمترین فاصله بین ذرات در طول مواجهه آنها باشد). لذا متقاعد می‌شویم که اگر فرض کنیم،

$$\psi(x_E, x_M) = G_E(x_E)G_M(x_M) \quad (۴۱-۳-۱۰)$$

مرتکب خطایی می‌شویم که به ناچیزی احتمال یافتن پیون زمین روی ماه و بالعکس است. با داشتن این شکل حاصل ضرب، شخص روی زمین می‌تواند احتمال یافتن پیون زمین را در نقطه x با انتگرال‌گیری از پیون ماه محاسبه کند:

$$\begin{aligned}
 P(x_E) &= |G_E(x_E)|^2 \int |G_M(x_M)|^2 dx_M \\
 &= |G_E(x_E)|^2 \quad (۴۲-۳-۱۰)
 \end{aligned}$$

همین‌طور شخص روی ماه، که متوجه پیون زمین نیست، به‌دست خواهد آورد که

$$P(x_M) = |G_M(x_M)|^2 \quad (۴۳-۳-۱۰)$$

اکنون ثابت می‌کنیم که اگر تابع موج درست متقارن شده را انتخاب می‌کردیم اساساً به پیش‌بینی‌های یکسانی می‌رسیدیم (با تفاوت‌هایی ناچیز).
با

$$\psi_S(x_1, x_2) = 2^{-1/2} [G_E(x_1)G_M(x_2) + G_M(x_1)G_E(x_2)] \quad (۴۴-۳-۱۰)$$

شروع می‌کنیم. از برچسب‌های x_1 و x_2 به جای x_E و x_M استفاده می‌کنیم تا تأکید کنیم که با پیون‌ها به‌درستی به‌صورت غیر قابل تمیز رفتار می‌شود. حال احتمال (چگالی) یافتن یک ذره در نزدیکی x_1 و دیگری در نزدیکی x_2 ،

$$P(x_1, x_2) = 2|\psi|^2 = |G_E(x_1)|^2|G_M(x_2)|^2 + |G_M(x_1)|^2|G_E(x_2)|^2 + G_E^*(x_1)G_M(x_1)G_M^*(x_2)G_E(x_2) + G_M^*(x_1)G_E(x_1)G_E^*(x_2)G_M(x_2) \quad (۴۵-۳-۱۰)$$

است. احتمال یافتن یک ذره در یک نقطه x_E روی زمین، بدون توجه به دیگری، چقدر است؟ این با قرار دادن یکی از متغیرها (مثلاً x_1) برابر با x_E و انتگرال‌گیری روی دیگری مشخص می‌شود [چون $P(x_1, x_2) = P(x_2, x_1)$]. در انجام این انتگرال نیازی به تقسیم نمودن بر ۲ نیست (چرا؟). نتیجه اینکه،

$$P(x_E) = |G_E(x_E)|^2 \int |G_M(x_2)|^2 dx_2 + |G_M(x_E)|^2 \int |G_E(x_2)|^2 dx_2 + G_E^*(x_E)G_M(x_E) \int G_M^*(x_2)G_E(x_2) dx_2 + G_M^*(x_E)G_E(x_E) \int G_E^*(x_2)G_M(x_2) dx_2 \quad (۴۶-۳-۱۰)$$

جمله اول چیزی است که اگر با تابع موج حاصل ضرب، معادله (۴۱-۳-۱۰)، و انتگرال‌گیری روی x_M شروع می‌کردیم به آن می‌رسیدیم. سه جمله دیگر ناچیزند چون G_M روی ماه تیز است و در نقطه x_E روی زمین کاملاً ناچیز است. همین‌طور اگر در مورد $P(x_M)$ سوال می‌شد، که x_M نقطه‌ای روی ماه است، باز هم به $|G_M(x_M)|^2$ می‌رسیدیم.

برچسب‌های «پیون زمین» و «پیون ماه» مفید بودند به این خاطر که دو گوسین برای همه زمان‌ها کاملاً جدا از هم باقی می‌ماندند (حالت‌های مانا بودند). اگر دو گوسین به‌وسیله چاه‌های نوسانگر محدود و مقید نمی‌شدند و بسته موج‌هایی بودند که به سمت هم حرکت می‌کردند، برچسب‌زنی (و تابع موج تجزیه شده)، وقتی گوسین‌ها شروع به همپوشانی قابل توجهی می‌کردند، بی‌اعتبار می‌شد. نکته این است که در شروع هر آزمایش، همیشه می‌توان برچسب‌هایی را به ذرات نسبت داد (چسباند). این برچسب‌ها فقط در صورتی اهمیت فیزیکی

پیدا می کنند که برای یک مدتی باقی بمانند. برجسب‌هایی نظیر «ذره‌ای به جرم m و بار $+1$ » برای همیشه باقی می‌مانند، در حالی که طول عمر برجسبی نظیر «پیون زمین» به‌وسیله اینکه آیا پیون دیگر در مجاور آن است یا نه کنترل می‌شود (تغییر می‌کند).

اثبات این نکته با مثال زیر امکان‌پذیر است. در $t = 0$ دو پیون را یکی در $x = 0$ و دیگری در $x = b$ می‌یابیم و می‌توانیم به آنها برجسب‌های a و b بدهیم چون دو تابع دل‌تا حتی وقتی a و b در یک اتاق باشند نمی‌توانند همپوشانی کنند. می‌توانیم حالت اولیه را به‌وسیله تابع موج حاصل ضرب نشان دهیم. اما این برجسب‌زنی کاملاً بی‌مصرف است چون بعد از گذشت یک دوره زمانی بی‌نهایت کوچک، تابع دل‌تا کاملاً پهن می‌شوند: توزیع‌های احتمال ثابت می‌شوند. این مطلب را می‌توانید با آزمودن $|U(x, t; a, 0)|^2$ ("سرنوشت" تابع دل‌تا)^۱ یا با توجه به اینکه برای تابع دل‌تا $\Delta P = \infty$ است (ذره همه سرعت‌های ممکن از صفر تا ∞ را دارد) و لذا هیچ وقت پهن نمی‌شود، ثابت کرد.

همه این ملاحظات بدون تغییر برای دو فرمیون به کار می‌روند: دو مورد، در علامت جمله تداخلی، که به این ملاحظات ارتباطی ندارد، با هم فرق دارند.

اگر سه پیون باشد، دو تا روی زمین و یکی روی ماه چطور؟ چون دو تای روی زمین (با فرض اینکه توابع موج آنها به اندازه قابل توجهی همپوشانی می‌کنند) می‌توانند با یکدیگر اشتباه شوند می‌بایست بین آنها متقارن‌سازی کنیم، تابع موج کل،

$$\psi(x_{E_1}, x_{E_2}, x_M) = \psi_S(x_{E_1}, x_{E_2}) \cdot \psi(x_M) \quad (10-3-47)$$

خواهد شد. بسط این نتیجه به ذرات بیشتر و به فرمیون‌ها بدیهی است.

در اینجا جواب سوال ۲ پیش آمده در انتهای زیر بخش قبل روشن می‌شود. فرض کنید سیستم‌های سه پیونی، حالت A را انتخاب کنند در حالی که سیستم‌های دو پیونی حالت S را انتخاب می‌کنند. فرض کنید دو پیون از سه پیون روی زمین باشد و سومی روی ماه باشد. آنگاه طبق فرض، تابع زیر باید تقریب خوبی ارائه دهد:

$$\psi(x_{E_1}, x_{E_2}, x_M) = \psi_A(x_{E_1}, x_{E_2}) \psi(x_M) \quad (10-3-48)$$

اگر روی پیون ماه انتگرال بگیریم داریم

$$P(x_{E_1}, x_{E_2}) = 2|\psi_A(x_{E_1}, x_{E_2})|^2 \quad (10-3-49)$$

لذا به این نتیجه گیری رهنمون می‌شویم که دو پیون روی زمین، توزیع احتمال متناظر با دو فرمیون خواهند داشت، در صورتی که پیون سوم روی ماه قرار داشته باشد و توزیع مورد انتظار از دو بوزون را خواهند داشت، در صورتی که بوزون سومی روی ماه نباشد. این نتیجه‌گیری‌های نامعقول فقط در صورتی کنار گذاشته می‌شوند که آمار به نوع ذرات بستگی داشته باشد نه به تعداد آنها.

قبل از پایان دادن به این بحث طولانی توجه به یک مطلب ضروری است. اگر دو ذره دارای توابع موج غیر همپوشانی کننده در فضای x باشند آنگاه فقط در فضای x است که تابع موج حاصل ضرب تقریب خوبی برای تابع موج متقارن شده دقیق است که در تقریب ما عبارت بود از

$$\psi_S(x_1, x_2) = 2^{-1/2} [G_E(x_1)G_M(x_2) + G_M(x_1)G_E(x_2)] \quad (۵۰-۳-۱۰)$$

دلیل صوری اینست که برای هر انتخاب شناسه‌های x_1 و x_2 ، فقط یکی از دو جمله در سمت راست مهم‌اند. (برای مثال اگر x_1 روی زمین باشد و x_2 روی ماه، فقط قسمت اول مهم است) از نظر فیزیکی دلیل این است که شانس یافتن یک پیون در قلمرو دیگری ناچیز است و اثرات تداخلی می‌توانند نادیده گرفته شوند.

اما اگر بخواهیم به پایه دیگری برویم، مثلاً پایه P ، باید تبدیل فوریه تابع متقارن ψ_S ، و نه تابع حاصل ضرب، را در نظر بگیریم به طوری که به تابع موج متقارن شده در فضای P برسیم. دلیل فیزیکی مطلب این است که دو پیون دارای توزیع‌های تکانه یکسان - با $\langle P \rangle = 0$ و افت و خیزهای گوسینی یکسان حول این میانگین هستند چون تکانه نوسانگر مستقل از مکان آن است. در نتیجه هیچ زمینه‌هایی در فضای P برای تمایز قائل شدن بین آنها وجود ندارد. لذا وقتی یک اندازه‌گیری تکانه، دو عدد به دست می‌دهد (که هیچ چیزی در مورد مکان‌ها نمی‌گوید) نمی‌توانیم آنها را به هیچ شیوه منحصر به فردی به پیون‌ها نسبت دهیم. به طور صوری، متقارن سازی مهم است چون توابع موج فضای P پیون‌ها شدیداً همپوشانی می‌کنند و مقادیری برای دو تکانه (هر دو $0 =$) وجود دارد که برای آنها هر دو جمله در تابع موج متقارن مهم‌اند.

به همین اعتبار، اگر دو ذره با تابع موج غیر همپوشانی کننده در فضای P موجود باشند می‌توانیم سیستم را به وسیله تابع موج حاصل ضرب در این فضا توصیف کنیم (با استفاده از برجسب‌هایی چون «سریع» و «آرام» به جای «زمین» و «ماه» برای ایجاد تمایز بین آنها)، اما نه در فضای دیگری که در آن تمایزی بین آنها وجود ندارد. باید واضح باشد که این بحث‌ها نه فقط برای X یا P بلکه برای هر متغیر دلخواه هم درستند.

تمرین ۱۰-۳-۱: دو بوزون یکسان در حالت‌های $|\phi\rangle$ و $|\psi\rangle$ قرار دارند. بردار حالت بهنجار شده توصیفگر سیستم را وقتی $\langle \phi | \psi \rangle \neq 0$ است بنویسید.

تمرین ۱۰-۳-۲: وقتی اندازه‌گیری انرژی روی سیستمی شامل سه بوزون در یک جعبه انجام می‌شود n مقدار به دست آمده ۳، ۳ و ۴ هستند. بردار حالت متقارن شده و بهنجار شده را بنویسید.

تمرین ۱۰-۳-۳: وضعیتی را تصور کنید که در آن سه ذره وجود داشته و فقط سه حالت a و b و c برای آنها قابل دسترسی هستند. نشان دهید که تعداد کل پیکربندی‌های مجاز و متمایز برای این سیستم برابر است با: ۱-۲۷ عدد، اگر آنها برجسب‌دار باشند.

۲-۱۰ عدد، اگر بوزون باشند.

۳-۱ عدد، اگر فرمیون باشند.

تمرین ۱۰-۳-۴: دو ذره یکسان به جرم m در یک جعبه یک بعدی به طول L قرار دارند. اندازه‌گیری انرژی سیستم، مقدار $E_{sys} = \hbar^2 \pi^2 / mL^2$ را به دست می‌دهد بردار حالت سیستم را بنویسید. برای

$E_{sys} = 5\hbar^2\pi^2/2mL^2$ این کار را تکرار کنید، (در این حالت دو بردار ممکن وجود دارد). بوزون یا فرمیون بودن آنها داده نشده است. می توانید فرض کنید که فقط درجات آزادی مداری وجود دارد.

تمرین ۱۰-۳-۵: عملگر تبادل (تعویض) P_{12} را در نظر بگیرید که اثرش روی پایه X به صورت زیر است

$$P_{12}|x_1, x_2\rangle = |x_2, x_1\rangle$$

- ۱- نشان دهید که P_{12} دارای ویژه مقادیر ± 1 است. (عملگر، هرمیتی و یکانی است)
 - ۲- نشان دهید که اثر آن روی کت پایه $|\omega_1\omega_2\rangle$ هم، تعویض برچسب‌های ۱ و ۲ است و لذا $V_{S/A}$ ویژه فضاهای آن با ویژه مقادیر ± 1 هستند.
 - ۳- نشان دهید که $P_{12}X_1P_{12} = X_2$ و $P_{12}X_2P_{12} = X_1$ و همین طور برای P_1 و P_2 . سپس نشان دهید که $P_{12}\Omega(X_1, P_1, X_2, P_2) = \Omega(X_2, P_2, X_1, P_1)$. [اثر آن را روی $|x_1, x_2\rangle$ یا $|p_1, p_2\rangle$ در نظر بگیرید. همچون برای توابعی از X و P فرض کنید آنها با سری توانی مشخص می شوند و هر جمله را در سری بررسی کنید. اگر نیاز به کمک داشتید به بحث منتهی به معادله (۱۱-۲-۲) مراجعه کنید].
 - ۴- نشان دهید که هامیلتونی و انتشارگر برای دو ذره یکسان تحت تبدیل $H \rightarrow P_{12}HP_{12}$ و $U \rightarrow P_{12}UP_{12}$ ثابت باقی می ماند. با این فرض، نشان دهید که هر ویژه حالت P_{12} با گذشت زمان یک ویژه حالت با همان ویژه مقدار باقی می ماند یعنی عناصر $V_{S/A}$ هرگز زیر فضاهای متقارن و پادمتقارنی را که در آنها بوده اند ترک نمی کنند.
- تمرین ۱۰-۳-۶:** یک شی مرکب نظیر اتم هیدروژن را در نظر بگیرید آیا این شی به صورت یک بوزون یا فرمیون رفتار خواهد کرد؟ در حالت کلی ثابت کنید که اشیاء شامل تعداد زوج/فردی از فرمیون‌ها به صورت بوزون‌ها/فرمیون‌ها رفتار خواهند کرد.

۱۱-۱- کلیات

در فصل ۲، پیامدهای تقارن هامیلتونی را بررسی کردیم و دیدیم که:

۱- اگر \mathcal{H} تحت تبدیل کانونیک بی‌نهایت کوچک تولید شده به وسیله متغیر $g(q, p)$ ناوردا باشد، پایسته است.

۲- هر تبدیل کانونیک که \mathcal{H} را ناوردا نگه دارد، جواب‌های معادلات حرکت را به جواب‌های دیگر می‌برد، به طور معادل یک آزمایش و شکل تبدیل یافته آن نتیجه یکسانی به دست خواهند داد در صورتی که تبدیل کانونیک باشد و \mathcal{H} را ناوردا نگه دارد.

در اینجا نتایج متناظری را در مکانیک کوانتومی عنوان می‌کنیم.^۱

۱۱-۲- ناوردایی انتقالی در مکانیک کوانتومی

ذره‌ای منفرد را در یک بعد در نظر بگیرید. ناوردایی انتقالی را چگونه تعریف خواهیم کرد؟ از آنجا که ذره واقع در یک حالت دلخواه نه مکان خوش تعریف و نه انرژی خوش تعریفی دارد، نمی‌توانیم ناوردایی انتقالی را به صورت ناوردایی انرژی تحت یک جابه‌جایی (انتقال) بی‌نهایت کوچک در مکان ذره تعریف کنیم. اما تجربه قبلی ما پیشنهاد می‌کند که در فرمول‌بندی کوانتوم، مقادیر چشم‌داشتی باید نقش متغیرهای کلاسیکی را ایفا کنند. بنابراین ما تناظر نشان داده شده در جدول ۱۱-۱ را برقرار می‌کنیم.

جدول ۱۱-۱: تناظر بین مفاهیم کلاسیکی و مکانیک کوانتومی مربوط به ناوردایی انتقالی:

مفهوم	مکانیک کلاسیک	مکانیک کوانتومی
انتقال	$x \rightarrow x + \varepsilon$ $p \rightarrow p$	$\langle X \rangle \rightarrow \langle X \rangle + \varepsilon$ $\langle P \rangle \rightarrow \langle P \rangle$
ناوردایی انتقالی	$\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$	$\langle H \rangle \rightarrow \langle H \rangle$
قانون پایستگی	$\dot{p} = 0$	$\langle \dot{P} \rangle = 0$ (مورد انتظار)

با توافق بر سر فرمول‌بندی مسئله بر حسب مقادیر چشم‌داشتی، هنوز دو روش هم‌ارز برای تعبیر تبدیلات داریم:

$$\langle X \rangle \rightarrow \langle X \rangle + \varepsilon$$

(۱۱-۲-الف)

$$\langle P \rangle \rightarrow \langle P \rangle \quad (11-2-1-ب)$$

اولی این است که تحت انتقال بی نهایت کوچک، هر حالت $|\psi\rangle$ به حالت انتقال یافته $|\psi_\varepsilon\rangle$ تغییر می یابد به طوری که

$$\langle \psi_\varepsilon | X | \psi_\varepsilon \rangle = \langle \psi | X | \psi \rangle + \varepsilon \quad (11-2-2-الف)$$

$$\langle \psi_\varepsilon | P | \psi_\varepsilon \rangle = \langle \psi | P | \psi \rangle \quad (11-2-2-ب)$$

بر حسب $T(\varepsilon)$ ، عملگر انتقال، که حالت را منتقل می کند (و به صورت صریح ساخته خواهد شد)،

$$T(\varepsilon)|\psi\rangle = |\psi_\varepsilon\rangle \quad (11-2-3)$$

معادله (11-2-2) به صورت

$$\langle \psi | T^\dagger(\varepsilon) X T(\varepsilon) | \psi \rangle = \langle \psi | X | \psi \rangle + \varepsilon \quad (11-2-4-الف)$$

$$\langle \psi | T^\dagger(\varepsilon) P T(\varepsilon) | \psi \rangle = \langle \psi | P | \psi \rangle \quad (11-2-4-ب)$$

می شود. این دیدگاه، تصویر تبدیل اکتیو نامیده شده (در اصطلاح بخش ۷-۱) و از نظر فیزیکی با جابه جایی ذره به اندازه ε به سمت راست متناظر است.

در دیدگاه دوم هیچ اتفاقی برای بردارهای حالت نمی افتد و این عملگرهای X و P هستند که به صورت زیر توسط $T(\varepsilon)$ تغییر می کنند:

$$X \rightarrow T^\dagger(\varepsilon) X T(\varepsilon)$$

$$P \rightarrow T^\dagger(\varepsilon) P T(\varepsilon)$$

به طوری که

$$T^\dagger(\varepsilon) X T(\varepsilon) = X + \varepsilon I \quad (11-2-5-الف)$$

$$T^\dagger(\varepsilon) P T(\varepsilon) = P \quad (11-2-5-ب)$$

این دیدگاه، تصویر تبدیل پسیو نامیده می شود. از حیث فیزیکی این دیدگاه، متناظر با حرکت محیط (دستگاه مختصات، چشمه های میدان خارجی، اگر باشند، و غیره) به اندازه ε به سمت چپ است. از نظر فیزیکی، هم ارزی تصویرهای اکتیو و پسیو به این خاطر است که حرکت ذره در یک جهت معادل با حرکت محیط در جهت مخالف با همان سرعت است.

از نظر ریاضی، هم ارزی را به صورت زیر نشان می‌دهیم. اگر معادله عملگری (۱۱-۲-۵) را بین $\langle \psi |$ و $\langle \psi |$ ساندویچ کنیم، به معادله (۱۱-۲-۴) می‌رسیم. برای اینکه برعکس برویم، معادله (۱۱-۲-۴) را به صورت

$$\langle \psi | T^\dagger(\varepsilon) X T(\varepsilon) - X - \varepsilon I | \psi \rangle = 0$$

$$\langle \psi | T^\dagger(\varepsilon) P T(\varepsilon) - P | \psi \rangle = 0$$

بازنویسی می‌کنیم و به صورت زیر استدلال می‌کنیم:

۱- عملگرهای ساندویچ شده هر میتی هستند (ثابت کنید).

۲- چون $\langle \psi |$ دلخواه است، می‌توانیم آنرا هر یک از ویژه بردارهای این عملگرها انتخاب کنیم. نتیجه اینکه همه ویژه مقادیر صفر می‌شوند.

۳- عملگرها خودشان صفر می‌شوند، که به معادله (۱۱-۲-۵) اشاره می‌کند.

در ادامه، هر دو تصویر را بررسی خواهیم کرد. خواهیم دید که با داشتن یکی از معادلات (۱۱-۲-۴) یا (۱۱-۲-۵) امکان ساختن $T(\varepsilon)$ وجود دارد و البته هر دو نتایج یکسانی به دست می‌دهند. تصویر اکتیو از این حیث که با حالت کوانتومی $\langle \psi |$ کار می‌کنیم که حالا نقش حالت کلاسیکی (x, p) را بازی می‌کند، خوب است. تصویر تبدیل پسو خوب است چون پاسخ عملگرهای کوانتومی X و P به یک انتقال از نظر صوری شبیه پاسخ شکل‌های (نظایر) کلاسیکی آنهاست.^۱

با بحث انتقالات بر حسب تبدیلات اکتیو آغاز می‌کنیم. اجازه دهید چگونگی ارتباط کت $\langle \psi_r |$ به $\langle \psi |$ یا به طور معادل اثر عملگر فضای هیلبرت $T(\varepsilon)$ را بررسی کنیم. اگر با کت‌های با مکان معین، $|x\rangle$ ، کار کنیم پاسخ روشن به نظر می‌رسد. در این حالت واضح است که

$$T(\varepsilon)|x\rangle = |x + \varepsilon\rangle \quad (۱۱-۲-۶)$$

به عبارتی دیگر اگر ذره ابتدا در x باشد باید به $x + \varepsilon$ برود. توجه کنید که $T(\varepsilon)$ یکانی است: این عملگر روی پایه راست هنجار $|x\rangle$ ، $-\infty \leq x \leq +\infty$ ، اثر می‌کند و کت $|x + \varepsilon\rangle$ ، $-\infty \leq x \leq +\infty$ را به دست می‌دهد. همین که اثر $T(\varepsilon)$ روی یک پایه کامل معلوم شود اثر آن روی هر کت $|\psi\rangle$ مشخص می‌شود:

$$\begin{aligned} |\psi_\varepsilon\rangle &= T(\varepsilon)|\psi\rangle = T(\varepsilon) \int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle \langle x|\psi\rangle dx = \int_{-\infty}^{\infty} |x + \varepsilon\rangle \langle x|\psi\rangle dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} |x'\rangle \langle x' - \varepsilon|\psi\rangle dx' \quad (x' = x + \varepsilon) \end{aligned} \quad (۱۱-۲-۷)$$

به عبارتی دیگر اگر

۱- همان‌طور که خواهیم دید، این دیدگاه است که بسیاری از روابط صوری بین مکانیک کلاسیک و کوانتومی را به معرض نمایش می‌گذارد.

$$\langle x | \psi \rangle = \psi(x)$$

باشد آنگاه

$$\langle x | T(\varepsilon) | \psi \rangle = \psi(x - \varepsilon) \quad (۸-۲-۱۱)$$

برای مثال، اگر $\psi(x) \sim e^{-x^2}$ گوسی تیز در مبداء باشد، $\psi(x - \varepsilon) \sim e^{-(x-\varepsilon)^2}$ همان گوسین است که در $x = \varepsilon$ تیز است. بنابراین تابع موج $\psi_\varepsilon(x)$ با انتقال (بدون تغییر) تابع موج $\psi(x)$ به اندازه ε به سمت راست به دست می آید. می توانید ثابت کنید که اثر $T(\varepsilon)$ تعریف شده به وسیله معادله (۸-۲-۱۱) شرط معادله (۱-۲-۱۱ الف) را برآورده می کند. در مورد شرط معادله (۱-۲-۱۱ ب) چگونه؟ این معادله به طور خودکار برآورده می شود:

$$\begin{aligned} \langle \psi_\varepsilon | P | \psi_\varepsilon \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_\varepsilon^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi_\varepsilon(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x - \varepsilon) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi(x - \varepsilon) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x') \left(-i\hbar \frac{d}{dx'} \right) \psi(x') dx' \quad (x' = x - \varepsilon) \\ &= \langle \psi | P | \psi \rangle \end{aligned} \quad (۹-۲-۱۱)$$

در اینجا یک مطلب عجیب به نظر می رسد: از نظر کلاسیکی، انتقال به وسیله دو رابطه مستقل مشخص می شود:

$$x \rightarrow x + \varepsilon$$

$$p \rightarrow p$$

در حالی که در نسخه کوانتومی به نظر می رسد که در اعمال اولی (روی ویژه کت های مکان)، دومی به طور خودکار برقرار می شود. دلیل این است که در استنتاج خود بیش از آنچه که صریحاً گفتیم فرض کرده ایم. قبلاً بر اساس اصول فیزیکی استدلال کردیم که چون ذره ای که ابتدا در x قرار دارد باید به $x + \varepsilon$ برود، در نتیجه داشتیم:

$$T(\varepsilon) | x \rangle = | x + \varepsilon \rangle$$

در حالی که شهود ما صحیح بود ولی عمل ما صحیح نبوده است. همان طور که در فصل ۷ دیده شد، پایه X منحصراً به فرد نیست و نتیجه عمومی سازگار با شهود ما معادله (۶-۲-۱۱) نیست بلکه معادله

$$T(\varepsilon) | x \rangle = e^{i\text{og}(x)/\hbar} | x + \varepsilon \rangle \quad (۱۰-۲-۱۱)$$

است (توجه کنید که وقتی $\varepsilon \rightarrow 0$ میل می کند، همان طور که باید، $T(\varepsilon) | x \rangle \rightarrow | x \rangle$ میل می کند) در نادیده گرفتن $g(x)$ ، اساساً مانسته کوانتومی $p \rightarrow p$ را فرض کرده بودیم. بینیم چگونه؟ اگر با معادله (۱۰-۲-۱۱) به جای (۶-۲-۱۱) شروع کنیم، می بینیم که

$$\langle X \rangle \xrightarrow{T(\varepsilon)} \langle X \rangle + \varepsilon \quad (11-2-11 \text{ الف})$$

$$\langle P \rangle \rightarrow \langle P \rangle + \varepsilon \langle f(X) \rangle \quad (11-2-11 \text{ ب})$$

که در آن $f = g'$ است. با درخواست کردن $\langle p \rangle \rightarrow \langle p \rangle$ ، f را حذف (صفر) کرده و g را به یک ثابت بی‌ضرر تقلیل می‌دهیم (که می‌تواند صفر انتخاب شود).
تمرین ۱۱-۲-۱: معادله (۱۱-۲-۱۱ ب) را ثابت کنید.

توجه کنید که در انتخاب اولیه ما، $T|x\rangle = |x + \varepsilon\rangle$ ، چیزی غلط نبود - داشتن فقط شرط $\langle X \rangle \rightarrow \langle X \rangle + \varepsilon$ بسیار محدود کننده بود اما نه آنقدر محدود کننده که اگر $\langle p \rangle \rightarrow \langle p \rangle$ را هم در نظر می‌گرفتیم. این وضعیت، وقتی به دو یا سه بعد می‌رویم یا چرخش‌ها را در نظر می‌گیریم دوباره ظاهر می‌شود. در همه آن موارد، مشابه انتخاب ساده $T(\varepsilon)|x\rangle = |x + \varepsilon\rangle$ را انتخاب خواهیم کرد تا نتیجه‌گیری‌ها کوتاه شوند.

با تعریف انتقال‌ها، اکنون *ناوردایی انتقالی* را با همان جوهره تعریف می‌کنیم. ناوردایی انتقالی را با شرط و درخواست زیر تعریف می‌کنیم:

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi_\varepsilon | H | \psi_\varepsilon \rangle \quad (11-2-12)$$

برای به‌دست آوردن قانون پایستگی، که با معادله بالا همراه است، می‌بایست ابتدا عملگر $T(\varepsilon)$ را صریحاً بسازیم. چون $\varepsilon = 0$ متناظر با عدم انتقال است می‌توانیم $T(\varepsilon)$ را تا مرتبه ε بسط دهیم:

$$T(\varepsilon) = I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} G \quad (11-2-13)$$

عملگر G که مولد انتقال نامیده می‌شود هر میتی بوده و باید تعیین شود (تمرین ۱۱-۲-۲ را برای اثبات ببینید). ثابت $(-i/\hbar)$ از قبل وارد مسئله می‌شود.

تمرین ۱۱-۲-۲: با استفاده از $T^+(\varepsilon)T(\varepsilon) = 1$ تا مرتبه ε ، نتیجه بگیرید که $G^+ = G$ است. با برگشتن به معادله (۱۱-۲-۱۱)، G را به‌دست می‌آوریم:

$$\langle x | T(\varepsilon) | \psi \rangle = \psi(x - \varepsilon)$$

با بسط هر دو طرف تا مرتبه ε ، داریم

$$\langle x | I | \psi \rangle - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \langle x | G | \psi \rangle = \psi(x) - \frac{d\psi}{dx} \varepsilon$$

به‌طوری که

$$\langle x | G | \psi \rangle = -i\hbar \frac{d\psi}{dx}$$

واضح است که G عملگر تکانه است،

$$G = P$$

$$T(\varepsilon) = I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} P \quad (11-2-14)$$

می بینیم که درست مانند مکانیک کلاسیک، تکانه، مولد انتقالات (بی نهایت کوچک) است. قانون پایستگی تکانه از ترکیب ناوردایی انتقالی، معادله (11-2-12)، با معادله (11-2-14) به دست می آید:

$$\begin{aligned} \langle \psi | H | \psi \rangle &= \langle \psi_\varepsilon | H | \psi_\varepsilon \rangle \\ &= \langle T(\varepsilon) \psi | H | T(\varepsilon) \psi \rangle = \langle \psi | T^\dagger(\varepsilon) H T(\varepsilon) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \left(I + \frac{i\varepsilon}{\hbar} P \right) H \left(I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} P \right) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | H | \psi \rangle + \frac{i\varepsilon}{\hbar} \langle \psi | [P, H] | \psi \rangle + O(\varepsilon^2) \end{aligned}$$

به طوری که، با صفر قرار دادن ضریب ε نتیجه می گیریم که

$$\langle \psi | [P, H] | \psi \rangle = 0 \quad (11-2-15)$$

حال از قضیه اهرنفتست نتیجه می شود که

$$\langle [P, H] \rangle = 0 \rightarrow \langle \dot{P} \rangle = 0 \quad (11-2-16)$$

انتقال برحسب تبدیلات پسپو

$T(\varepsilon)$ را مجدداً به دست می آوریم، با فرض اینکه روی X و P به صورت زیر عمل می کند:

$$T^\dagger(\varepsilon) X T(\varepsilon) = X + \varepsilon I \quad (11-2-17\text{-الف})$$

$$T^\dagger(\varepsilon) P T(\varepsilon) = P \quad (11-2-17\text{-ب})$$

عملگر $T^\dagger(\varepsilon) X T(\varepsilon)$ یک عملگر مکان هم هست اما مکان را از مبدا جدید، که به اندازه ε به چپ منتقل شده، اندازه می گیرد؛ این، مفهوم معادله (11-2-17-الف) است. معادله (11-2-17-ب) بیان می کند که تحت انتقال مبدا، تکانه تغییری نمی کند.

با نوشتن مجدد

$$T(\varepsilon) = I - \frac{i\varepsilon G}{\hbar}$$

از معادله (11-2-17-الف) (با استفاده از $G^+ = G$) نتیجه می شود که

$$\left(I + \frac{i\varepsilon G}{\hbar} \right) X \left(I - \frac{i\varepsilon G}{\hbar} \right) = X + \varepsilon I$$

یا

$$-\frac{i\varepsilon}{\hbar}[X, G] = \varepsilon I \quad (11-2-11 \text{ الف})$$

$$[X, G] = i\hbar I \quad (11-2-11 \text{ ب})$$

این به ما امکان می‌دهد تا نتیجه بگیریم که

$$G = P + f(X) \quad (11-2-11)$$

حال اگر به معادله (11-2-11 ب) برگردیم داریم

$$-\frac{i\varepsilon}{\hbar}[P, G] = 0 \quad (11-2-11 \text{ الف})$$

یا

$$[P, G] = 0 \quad (11-2-11 \text{ ب})$$

که $f(X)$ را حذف می‌کند. ^۱ بنابراین یکبار دیگر،

$$T(\varepsilon) = I - \frac{i\varepsilon P}{\hbar}$$

با به دست آوردن مجدد عملگر انتقال در تصویر تبدیل پسیو، مفهوم ناوردایی انتقالی را مجدداً بررسی می‌کنیم. ناوردایی انتقالی را با شرط زیر تعریف می‌کنیم

$$T^\dagger(\varepsilon)HT(\varepsilon) = H \quad (11-2-11)$$

معادله (11-2-11) را می‌توانیم به شکلی بنویسیم که به تعریف کلاسیکی ناوردایی انتقالی نزدیک باشد. اما ابتدا به این نتیجه نیاز داریم که: برای هر $\Omega(X, P)$ که بتواند به صورت سری توانی بسط داده شود، و برای هر عملگر یکانی U ،

$$U^\dagger \Omega(X, P) U = \Omega(U^\dagger X U, U^\dagger P U)$$

برای اثبات، یک جمله نوعی را در سری، نظیر PX^2P ، در نظر بگیرید. با استفاده از $UU^\dagger = I$ داریم:

$$U^\dagger PX^2PU = U^\dagger P U U^\dagger X U U^\dagger X U U^\dagger P U \quad \text{Q.E.D.}$$

با کاربرد این نتیجه برای $U = T(\varepsilon)$ ، پاسخ هر متغیر دینامیکی به انتقال را به دست می‌آوریم:

۱- به عبارت درست‌تر، f به یک عدد c -تقلیل می‌یابد که با X و P جابه‌جا می‌شود و ما آنرا صفر انتخاب می‌کنیم.

$$\Omega(X, P) \rightarrow T^\dagger \Omega(X, P) T = \Omega(T^\dagger X T, T^\dagger P T) = \Omega(X + \varepsilon I, P) \quad (22-2-11)$$

بنابراین Ω تبدیل یافته با جاگذاری $X + \varepsilon I$ به جای X و P به جای P به دست می‌آید. اگر این را برای معادله (21-2-11) اعمال کنیم به تعریف زیر از ناوردایی انتقالی می‌رسیم:

$$H(X + \varepsilon I, P) = H(X, P) \quad (23-2-11)$$

نه تنها این شرط شکل یکسانی با شکل کلاسیکی آن،

$$\mathcal{H}(x + \varepsilon, p) = \mathcal{H}(x, p)$$

دارد بلکه هر زمان که شکل کلاسیکی برآورده می‌شود، آن هم برآورده می‌شود. دلیل فقط این است که H همان تابعی از X و P است که \mathcal{H} از x و p است و هر دو مجموعه از متغیرها در یک انتقال متحمل تغییرات یکسانی می‌شوند.

پایستگی تکانه در صورتی حاصل می‌شود که $T(\varepsilon)$ را در معادله (21-2-11) برحسب P نوشته و تا مرتبه اول از ε بسط دهیم:

$$\begin{aligned} 0 &= T^\dagger(\varepsilon) H T(\varepsilon) - H = (I + i\varepsilon P/\hbar) H (I - i\varepsilon P/\hbar) - H \\ &= \frac{-i\varepsilon}{\hbar} [H, P] \end{aligned} \quad (24-2-11)$$

که به دلیل قضیه اهرنفتست اشاره به $\langle \dot{P} \rangle = 0$ دارد.

گویی بر مقایسه با مکانیک کلاسیک^۱

تصویر تبدیل پسو دارای این خاصیت است که تشابه صوری آن به مکانیک کلاسیکی نزدیک است به طوری که عملگرهای Ω جای متغیرهای کلاسیکی ω [معادلات (17-2-11)، (22-2-11) و (23-2-11)] قرار می‌گیرند. در واقع تبدیل یکانی بی‌نهایت کوچک $T(\varepsilon)$ تولید شده توسط P تصویر کوانتومی تبدیل کانونیک بی‌نهایت کوچک تولید شده به وسیله p است: اگر تغییرات δX و δP را به صورت زیر تعریف کنیم:

$$\delta X = T^\dagger(\varepsilon) X T(\varepsilon) - X$$

$$\delta P = T^\dagger(\varepsilon) P T(\varepsilon) - P$$

از یک طرف از معادله (17-2-11) نتیجه می‌گیریم که

$$\delta X = X + \varepsilon I - X = \varepsilon I$$

$$\delta P = P - P = 0$$

و از طرف دیگر از $T = I - i\varepsilon P/\hbar$ (تا مرتبه اول از ε)،

$$\delta X = (I + i\varepsilon P/\hbar)X(I - i\varepsilon P/\hbar) - X = \frac{-i\varepsilon}{\hbar} [X, P]$$

$$\delta P = (I + i\varepsilon P/\hbar)P(I - i\varepsilon P/\hbar) - P = \frac{-i\varepsilon}{\hbar} [P, P]$$

که با ترکیب آنها نتیجه می‌شود:

$$\delta X = \frac{-i\varepsilon}{\hbar} [X, P] = \varepsilon I$$

$$\delta P = \frac{-i\varepsilon}{\hbar} [P, P] = 0$$

به‌طور کلی با ترکیب معادله (۱۱-۲-۲۲) و $T = I - i\varepsilon P/\hbar$ داریم:

$$\delta \Omega = \frac{-i\varepsilon}{\hbar} [\Omega, P] = \Omega(X + \varepsilon I, P) - \Omega(X, P)$$

اینها مانسته تبدیل کانونیک تولید شده به‌وسیله P هستند:

$$\delta x = \varepsilon \{x, p\} = \varepsilon$$

$$\delta p = \varepsilon \{p, p\} = 0$$

$$\delta \omega = \varepsilon \{\omega, p\} = \omega(x + \varepsilon, p) - \omega(x, p)$$

اگر مسئله از نظر انتقالی ناوردا باشد طبق قضیه اهرنفتست داریم:

$$\delta H = \frac{-i\varepsilon}{\hbar} [H, P] = 0 \rightarrow \langle \dot{P} \rangle = 0$$

در حالی که به‌طور کلاسیکی،

$$\delta \mathcal{H} = \varepsilon \{\mathcal{H}, p\} = 0 \rightarrow \dot{p} = 0$$

چون

$$\dot{p} = \{p, \mathcal{H}\}$$

این تناظر با قواعد جانیشینی آشنای زیر به‌دست می‌آید:

$$\Omega \leftrightarrow \omega$$

$$\frac{-i}{\hbar} [\Omega, \Lambda] \leftrightarrow \{\omega, \lambda\}$$

به‌طور کلی، تبدیل کانونیک بی‌نهایت کوچک تولید شده به‌وسیله $g(x, p)$ ،

$$\delta \omega = \varepsilon \{\omega, g\}$$

دارای تبدیل یکانی بی‌نهایت کوچک $U_G(\varepsilon) = I - i\varepsilon G/\hbar$ در نظریه کوانتومی به‌عنوان تصویرش می‌باشد که در پاسخ به آن،

$$\delta\Omega = \frac{-i\varepsilon}{\hbar} [\Omega, G]$$

است. حال دیده‌ایم که تبدیل تولید شده به وسیله هر $g(x, p)$ کانونیک است یعنی گروه پواسون بین X ها و p ها را حفظ می‌کند (ثابت نگه می‌دارد). در نظریه کوانتومی، کمیت‌های حفظ شده، روابط جابه‌جایی بین X ها و P ها هستند، زیرا اگر

$$[X_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}I$$

باشد، آنگاه با ضرب عبارت فوق از چپ در عملگر یکانی $U_G^\dagger(\varepsilon)$ و از راست در $U_G(\varepsilon)$ می‌بینیم که عملگرهای تبدیل یافته از

$$[U^\dagger X_i U, U^\dagger P_j U] = i\hbar\delta_{ij}I$$

پیروی می‌کنند.^۱ این، اثبات تناظر

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{تبدیل کانونیک بی نهایت کوچک} \\ \text{تولید شده توسط } g(x, p) \end{array} \right\} \longleftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \text{تبدیل یکانی بی نهایت کوچک} \\ \text{تولید شده توسط } G(X, P) \end{array} \right\}$$

را کامل می‌کند. این تناظر برای تبدیلات متناهی هم برقرار است زیرا این تبدیلات می‌توانند به صورت تبدیلات بی‌نهایت کوچک متوالی تلقی شوند.

تناظر با تبدیلات یکانی برای تبدیلات کانونیک منظم هم، که هیچ نسخه‌های بی‌نهایت کوچک ندارند، برقرار است. برای نمونه در مسئله نوسانگر جفت شده، تمرین ۱۰-۱-۳، تبدیل کانونیکی را از x_1, x_2, p_1 و p_2 به x_I, x_{II}, p_I, p_{II} انجام دادیم که در آن برای مثال $x_I = (x_1 + x_2)/2$ است. در نظریه کوانتومی عملگری یکانی موجود خواهد بود به طوری که برای مثال $U^\dagger X_I U = (X_1 + X_2)/2 = X_I$ و غیره و غیره، می‌شود.^۲

می‌توانیم ببینیم که چرا می‌توان یا تبدیل کانونیک را در سطح کلاسیکی انجام داده و سپس کوانتیده نمود یا ابتدا کوانتیده کرده و سپس تبدیل یکانی انجام داد - چون عملگرهای کوانتومی به تبدیل یکانی به همان صورتی پاسخ می‌دهند که نظایر کلاسیکی آنها به تبدیل کانونیک پاسخ می‌دهند، اثر نهایی یکسان خواهد بود.^۳

به مسئله ناوردایی انتقالی بر می‌گردیم. توجه کنید که در یک مسئله با ناوردایی انتقالی، معادله (۱۱-۲-۲۴) بیان می‌کند که ما می‌توانیم ویژه پایه همزمان H و P را بیابیم (این توافق با نتیجه ما از فصل ۵ است که طبق آن

۱- به طور کلی‌تر اگر $[\Omega, \theta] = \Gamma$ باشد رابطه مشابهی بین عملگرهای تبدیل یافته $U^\dagger\theta U$ و $U^\dagger\Gamma U$ برقرار است. این نسخه کوانتومی این نتیجه است که گروه‌های پواسون تحت تبدیل کانونیک ناوردا هستند.

۲- اگر تبدیل، منظم نباشد نمی‌توانیم تبدیلی یکانی در نظریه کوانتومی بیابیم چون تبدیلات یکانی، طیف ویژه مقداری را حفظ می‌کنند.

۳- پایان همین بخش.

ویژه حالت‌های انرژی یک ذره آزاد می‌توانستند طوری انتخاب شوند که ویژه حالت‌های تکانه هم باشند^۱ اگر سیستمی در یک چنین ویژه حالتی شروع (آماوه) شود ویژه مقدار تکان آن ثابت باقی می‌ماند. برای اثبات این، ابتدا توجه کنید که

$$[P, H] = 0 \rightarrow [P, U(t)] = 0 \quad (۲۵-۲-۱۱)$$

چون انتشارگر تابعی از فقط H است.^۲

فرض کنید در $t = 0$ سیستمی را در یک ویژه حالت P داریم:

$$P|p\rangle = p|p\rangle \quad (۲۶-۲-۱۱)$$

بعد از زمان t ، حالت $U(t)|p\rangle$ است و داریم

$$PU(t)|p\rangle = U(t)P|p\rangle = U(t)p|p\rangle = pU(t)|p\rangle \quad (۲۷-۲-۱۱)$$

به عبارت دیگر، حالت در زمان t هم یک ویژه حالت P با همان ویژه مقدار است. برای چنین حالت‌هایی با تکانه خوش تعریف، قانون پایستگی $\langle \dot{P} \rangle = 0$ به شکل کلاسیکی، $\dot{p} = 0$ ، تقلیل می‌یابد.

انتقال‌های متناهی

عملگر $T(a)$ متناظر با انتقال متناهی a کدام است؟ این عملگر را به شیوه زیر به دست می‌آوریم. بازه a را به N قسمت مساوی به اندازه a/N تقسیم می‌کنیم. وقتی $N \rightarrow \infty$ میل می‌کند، a/N بی‌نهایت کوچک شده و می‌دانیم که

$$T(a/N) = I - \frac{ia}{\hbar N} P \quad (۲۸-۲-۱۱)$$

از آنجا که انتقالی به اندازه a برابر N انتقال به اندازه a/N است،

$$T(a) = \lim_{N \rightarrow \infty} [T(a/N)]^N = e^{-iaP/\hbar} \quad (۲۹-۲-۱۱)$$

که از فرمول

$$e^{-ax} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{ax}{N} \right)^N$$

استفاده کرده‌ایم. می‌توانیم این فرمول را که برای اعداد C درست است برای این مسئله به کار ببریم چون P تنها عملگر در این تصویر است و با هر چیز جابجا می‌شود یعنی نظیر یک عدد C رفتار می‌کند. از آنجا که

۱- توجه کنید که یک ذره منفرد که H آن از نظر انتقالی ناورداست، حتماً آزاد است.

۲- وقتی H مستقل از زمان است می‌دانیم که $U(t) = \exp(-iH t/\hbar)$. اگر $H = H(t)$ باشد این نتیجه درست است اگر که P به ازای همه t با $H(t)$ جابجا شود (چرا؟).

$$T(a) \xrightarrow{\text{X basis}} e^{-ad/dx} \quad (۳۰-۲-۱۱)$$

نتیجه می شود که

$$\langle x|T(a)|\psi\rangle = \psi(x) - \frac{d\psi}{dx} a + \frac{d^2\psi}{dx^2} \frac{a^2}{2!} + \dots \quad (۳۱-۲-۱۱)$$

که سری تیلور کامل برای $\psi(x-a)$ حول نقطه x است.

آزمون سازگاری

انتقالی به اندازه a و سپس انتقالی به اندازه b برابر با انتقالی به اندازه $a+b$ است. این نتیجه هیچ ارتباطی با مکانیک کوانتومی ندارد و درست است، چه در مورد یک سیستم کوانتومی صحبت کنید چه یک کیسه سیب زمینی. این، فقط بیان چگونگی ترکیب انتقالها در فضا است. اکنون عملگرهای T را که فرض می شود حالت های کوانتومی را منتقل می کنند، ساخته ایم برای اینکه این تعبیر سازگار باشد لازم است تا قانون ترکیب عملگرهای انتقال با قانون ترکیب انتقالهایی که آنها نمایش می دهند انطباق داشته باشد. حال با اینکه ما این را هنگام به دست آوردن فرمول $T(a)$ فرض کردیم (معادله (۱۱-۲-۲۹) و خط بالای آنرا ببینید)، ثابت می کنیم که نتیجه ما، $T(a) = \exp(-ia P/\hbar)$ ، رابطه

$$T(a)T(b) = T(a+b)? \quad (۳۲-۲-۱۱)$$

را برآورده می کند. می توان دید که واقعاً اینگونه است:

$$T(a)T(b) = e^{-iaP/\hbar} \cdot e^{-ibP/\hbar} = e^{-i(a+b)P/\hbar} = T(a+b) \quad (۳۳-۲-۱۱)$$

گریزی به تبدیلات کانونیک و یکانی بی نهایت کوچک

با اینکه واضح است که تناظر بین تبدیلات کانونیک و یکانی، که برای حالت بی نهایت کوچک در بحث های قبلی ثابت شد، باید به حالت متناهی انتقال داده شود، با وجود این به سراغ جزئیات می رویم. برای تصریح، مورد انتقالها را در نظر بگیرید. در نظریه کوانتومی داریم:

$$\Omega \rightarrow T^\dagger(a)\Omega T(a) = e^{iaP/\hbar}\Omega e^{-iaP/\hbar}$$

با استفاده از اتحاد

$$e^{-A} B e^{+A} = B + [B, A] + \frac{1}{2!} [[B, A], A] + \frac{1}{3!} \dots$$

نتیجه می شود

$$\Omega \rightarrow \Omega + a \left(\frac{-i}{\hbar} \right) [\Omega, P] + \frac{1}{2!} a^2 \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 [[\Omega, P], P] + \dots \quad (۳۴-۲-۱۱)$$

برای مثال اگر $\Omega = X^2$ قرار دهیم به $(X + aI)^2 \rightarrow X^2$ می‌رسیم. در حالت کلاسیکی، تحت یک جابه‌جایی بی‌نهایت کوچک δa ،

$$\delta \omega = \delta a \{ \omega, p \}$$

یا

$$\frac{d\omega}{da} = \{ \omega, p \}$$

با اعمال نتیجه بالا برای متغیر $d\omega/da$ می‌رسیم به:

$$\frac{d}{da} (d\omega/da) = d^2\omega/da^2 = \{ d\omega/da, p \} = \{ \{ \omega, p \}, p \}$$

وقس علی‌هذا. پاسخ ω به انتقال منتهای از سری تیلور حول نقطه $a=0$ به دست می‌آید:

$$\omega \rightarrow \omega + a \{ \omega, p \} + \frac{a^2}{2!} \{ \{ \omega, p \}, p \} + \dots \quad (۳۵-۲-۱۱)$$

که می‌بینیم در صورتی که جانشینی‌های مرسوم را انجام دهیم در توافق با معادله (۳۴-۲-۱۱) است. **تموین ۱۱-۲-۳:** به یاد بیاورید که تبدیل چرخش منتهای را از تبدیل چرخش بی‌نهایت کوچک، با حل معادلات دیفرانسیل (بخش ۲-۸)، به دست آوردیم. ثابت کنید که اگر به جای آن، مختصه‌های تبدیل یافته \bar{x} و \bar{y} را به وسیله رشته نامتناهی از گروه‌های پواسون به x و y مرتبط کنید، به نتیجه یکسان $\bar{x} = x \cos \theta - y \sin \theta$ و غیره می‌رسید (سری مربوط به $\sin \theta$ و غیره را به خاطر بیاورید).

سیستم ذرات

ما در تعمیم بحث قبلی به سیستمی شامل N ذره مشکلی نخواهیم داشت. با شروع از مانسته معادله (۸-۲-۱۱)،

$$\langle x_1, \dots, x_N | T(\varepsilon) | \psi \rangle = \psi(x_1 - \varepsilon, \dots, x_N - \varepsilon) \quad (۳۶-۲-۱۱)$$

و با بسط هر دو طرف تا مرتبه ε داریم

$$\langle x_1, \dots, x_N | I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} P | \psi \rangle = \psi(x_1, \dots, x_N) - \sum_{i=1}^N \varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \quad (۳۷-۲-۱۱)$$

که از آن نتیجه می‌گیریم که

$$T(\varepsilon) = I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{i=1}^N P_i = I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} P \quad (۳۸-۲-۱۱)$$

که P عملگر تکانه کل است. می‌توانید ثابت کنید که

$$T^\dagger(\epsilon)X_i T(\epsilon) = X_i + \epsilon I \tag{۳۹-۲-۱۱}$$

$$T^\dagger(\epsilon)P_i T(\epsilon) = P_i, \quad i=1, \dots, N$$

ناوردایی انتقالی در این حالت بدین معنی است که (با حذف اندیس‌ها)

$$H(X, P) = T^\dagger(\epsilon)H(X, P)T(\epsilon) = H(X + \epsilon I, P) \tag{۴۰-۲-۱۱}$$

در حالی که در موارد ذره منفرد این اشاره به ذره آزاد داشت در اینجا صرفاً لازم می‌دارد که H (یا V) تابعی از تفاضل مختصه‌ها باشد. هر سیستمی که قسمت‌هایش با یکدیگر برهم‌کنش کنند و با خارج برهم‌کنش نداشته باشد این ویژگی را خواهد داشت. ناوردایی انتقالی در کنار پایستگی تکانه، نتایج عمیقی در پی دارد که به بعد مولکول می‌شوند.

مفاهیم ضمنی ناوردایی‌های انتقالی

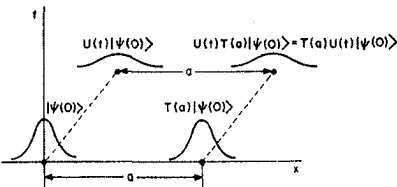
سیستمی را با ناوردایی انتقالی در نظر بگیرید. با ضرب دو طرف معادله (۲۱-۲-۱۱) از چپ در T و با استفاده از یکانی بودن آن، نتیجه می‌شود

$$[T(a), H] = 0$$

و در نتیجه

$$[T(a), U(t)] = 0 \quad \text{یا} \quad T(a)U(t) = U(t)T(a) \tag{۴۱-۲-۱۱}$$

پيامد این رابطه به‌وسیله مثال زیر نشان داده می‌شود (شکل ۱-۱۱). در $t = 0$ دو ناظر A و B سیستم‌های یکسانی را به ترتیب در $x = a$ و $x = 0$ آماده می‌کنند. اگر $|\psi(0)\rangle$ بردار حالت سیستم آماده شده توسط A باشد، $T(a)|\psi(0)\rangle$ بردار حالت سیستم آماده شده توسط B است. دو سیستم برای ناظرهایی که آنها را آماده کرده‌اند یکسان به نظر می‌رسند. بعد از زمان t بردارهای حالت به $U(t)|\psi(0)\rangle$ و $U(t)T(a)|\psi(0)\rangle$ تحول می‌یابند. با استفاده از معادله (۴۱-۲-۱۱)، حالت دوم می‌تواند به صورت $U(t)T(a)U(t)|\psi(0)\rangle$ نوشته شود که درست نسخه انتقال یافته سیستم ناظر A در زمان t است. بنابراین دو سیستم که در $t = 0$ فقط به اندازه یک انتقال فرق داشتند در زمان‌های بعدی به همان انتقال فرق می‌کنند. به عبارتی دیگر، تحول زمانی هر سیستم برای ناظری که آن را آماده کرده است یکسان به نظر می‌رسد. ناوردایی انتقالی H اشاره می‌کند که یک آزمایش که در دو مکان متفاوت تکرار شود نتیجه یکسانی به دست خواهد داد (وقتی به‌وسیله ناظرهای محلی دیده شوند). این نتیجه را قبلاً در چارچوب کلاسیکی دیده‌ایم. اکنون آنرا بیشتر دنبال می‌کنیم.



شکل ۱-۱۱: شرح سمبولیک ناوردایی انتقالی. حالت‌ها به‌طور طرح‌وار توسط توابع موج نشان داده شده‌اند.

اکنون مشخص می‌شود که هر برهم‌کنش شناخته شده - گرانشی، ضعیف، الکترومغناطیسی و قوی (مثل هسته ای) از نظر انتقالی ناوردا هستند از این حیث که هر آزمایش، اگر در یک مکان جدید تکرار شود همان نتیجه را به دست خواهد داد. مثال زیر را در نظر بگیرید که مفهوم این گفته را روشن می‌کند. یک اتم هیدروژن بین صفحات یک خازن باردار قرار می‌گیرد. هامیلتونی،

$$H = \frac{|\mathbf{P}_1|^2}{2m_1} + \frac{|\mathbf{P}_2|^2}{2m_2} + \frac{e_1 e_2}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|} + e_1 V(\mathbf{R}_1) + e_2 V(\mathbf{R}_2) \quad (۴۲-۲-۱۱)$$

است که در آن اندیس‌های ۱ و ۲ مربوط به الکترون و پروتون بوده و $V(\mathbf{R})$ پتانسیل مربوط به صفحات است. این مسئله هیچ ناوردایی انتقالی ندارد، یعنی

$$H(\mathbf{R}_1 + \boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{P}_1; \mathbf{R}_2 + \boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{P}_2) \neq H(\mathbf{R}_1, \mathbf{P}_1; \mathbf{R}_2, \mathbf{P}_2)$$

است، که به نوبه خود بدین معنی است که اگر اتم به تنهایی منتقل شود (به خارج از خازن) رفتار کاملاً متفاوتی خواهد داشت. اما این متناظر با تکرار کردن همین آزمایش و رسیدن به نتیجه‌ای متفاوت نیست چون خازن، که دینامیک را تحت تأثیر قرار می‌دهد، عقب می‌ماند. برای همراه کردن آن با آنچه که انتقال داده می‌شود، سیستم خود را مجدداً تعریف می‌کنیم تا شامل بارهای روی خازن (N بار) شود و H را به صورت

$$H = \sum_{i=1}^{N+2} \frac{|\mathbf{P}_i|^2}{2m_i} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N+2} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N+2} \frac{e_i e_j}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|} \quad (۴۳-۲-۱۱)$$

می‌نویسیم. حال بارهای روی خازن نه از طریق میدان خارجی که ناوردایی انتقالی را تخریب می‌کند بلکه از طریق برهم‌کنش کولنی که ناوردایی انتقالی را به هم نمی‌زند وارد H می‌شوند. اکنون به درستی می‌توان نوشت (با حذف اندیس):

$$H(\mathbf{R} + \boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{P}) = H(\mathbf{R}, \mathbf{P})$$

که اشاره می‌کند که اگر اتم و خازن به مکانی جدید برده شوند رفتار سیستم مرکب تغییری نخواهد کرد. این نتیجه باید نه به عنوان امری واضح و بدیهی بلکه به عنوان بیانی عمیق در مورد برهم‌کنش کولنی تلقی شود. مضمون ادعای صورت گرفته در فوق این است که هر برهم‌کنش شناخته شده، در سطح بنیادی دارای ناوردایی انتقالی است - اگر سیستم خود را توسعه دهیم تا همه درجات آزادی را که خروجی یک آزمایش را تحت تأثیر قرار می‌دهند شامل شود (به طوری که هیچ میدان خارجی نباشد، فقط برهم‌کنش‌های بین قسمت‌های سیستم وجود داشته باشند) H کل از نظر انتقالی ناوردا می‌شود. این دلیل کاربرد پایداری تکانه برای هر مسئله است، برهم‌کنش زمینه هر چه که باشد. ناوردایی انتقالی قوانین طبیعی، یکنواختی یا همگنی فضا را منعکس می‌کند. اینکه دینامیک یک سیستم منزوی (ایزوله شده)^۱ (خازن به علاوه اتم در مثال ما) فقط به این که

۱- به یاد آورید که \mathbf{R} عملگر متناظر با متغیر کلاسیکی \mathbf{r} است.

۲- دقیق‌تر بگوییم، هیچ سیستمی کاملاً «منزوی» نیست به جز کل جهان (و فقط اندازه حرکت آن دقیقاً پایسته است). اما در عمل، بین آنچه که سیستم را تشکیل می‌دهد و آنچه (برای مقاصد عملی) به تحول آن سیستم بی‌تاثیر است یک خط

قسمت‌های سیستم نسبت به یکدیگر کجا قرار دارند و نه به جایی که سیستم به‌عنوان یک کل قرار دارد بستگی دارد این حقیقت را نشان می‌دهد که یک قسمت از فضای آزاد به خوبی قسمت دیگر است. این ناوردایی انتقالی است که به آزمایش‌کنندگان اجازه می‌دهد تا در نقاط مختلف زمین ادعا کنند که آزمایش «یکسان» انجام داده و کارهای یکدیگر را تأیید، تصحیح و تکمیل نمایند. ناوردایی قوانین طبیعی تحت انتقالات است که به ما اجازه می‌دهد تا یک اتم هیدروژن را در یک ستاره دور به همان صورتی که روی زمین توصیف می‌کنیم توصیف کرده و قوانین مکانیک کوانتومی به‌دست آمده روی زمین را به دینامیک آن اعمال کنیم. پیامدهای دیگر ناوردایی انتقالی را تا انتهای بخش بعدی بررسی خواهیم کرد.

۱۱-۳- ناوردایی انتقال در زمان

درست همان‌طور که همگنی فضا تضمین می‌کند که یک آزمایش انجام گرفته در دو جای مختلف نتیجه یکسانی به‌دست می‌دهد همگنی در زمان تضمین می‌کند که یک آزمایش تکرار شده در دو زمان متفاوت نتیجه یکسانی به‌دست می‌دهد. بینیم چه ویژگی از هامیلتونی این تضمین را به ما می‌دهد و کدام قانون پایستگی به‌دست می‌آید.

فرض کنید در لحظه t_1 سیستمی را در حالت $|\psi_0\rangle$ آماده کنیم و بگذاریم برای یک زمان بی‌نهایت کوچک ε تحول یابد. حالت در زمان $t_1 + \varepsilon$ تا مرتبه اول از ε

$$|\psi(t_1 + \varepsilon)\rangle = \left[I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} H(t_1) \right] |\psi_0\rangle \quad (1-3-11)$$

خواهد شد. اگر آزمایش را در زمان t_2 تکرار کنیم و با همان حالت اولیه شروع کنیم حالت در زمان $t_2 + \varepsilon$

$$|\psi(t_2 + \varepsilon)\rangle = \left[I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} H(t_2) \right] |\psi_0\rangle \quad (2-3-11)$$

خواهد شد. خروجی در دو حالت، یکسان خواهد شد اگر که

$$\begin{aligned} 0 &= |\psi(t_2 + \varepsilon)\rangle - |\psi(t_1 + \varepsilon)\rangle \\ &= \left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} \right) [H(t_2) - H(t_1)] |\psi_0\rangle \end{aligned} \quad (3-3-11)$$

باشد. چون $|\psi_0\rangle$ دلخواه است، نتیجه می‌شود

$$H(t_2) = H(t_1) \quad (4-3-11)$$

چون t_1 و t_2 دلخواهند، H مستقل از زمان خواهد بود:

رسم می‌کنند. عبارت «منزوی» را در این مفهوم عملی به‌کار می‌بریم. مزیت واقعی مفاهیم ناوردایی انتقالی و پایستگی اندازه حرکت در این وضعیت‌های تقریبی قرار دارد. چه کسی نگران است که آیا جهان به‌عنوان یک کل از نظر انتقالی ناوردا است و اندازه حرکتش پایسته است یا نه؟ آنچه برای ما اهمیت دارد این است که می‌توانیم ابزار خود را به جای دیگر برده و به نتایج یکسانی برسیم و اینکه اندازه حرکت سیستم ما پایسته است (با دقتی خوب).

$$\frac{dH}{dt} = 0 \quad (۵-۳-۱۱)$$

بنابراین، ناوردایی انتقال در زمان مقرر می‌کند که H هیچ وابستگی به t نداشته باشد. حال قضیه اهرنست برای یک عملگر Ω که هیچ وابستگی زمانی ندارد عبارتست از:

$$i\hbar \langle \dot{\Omega} \rangle = \langle [\Omega, H] \rangle$$

با کاربرد آن برای $\Omega = H$ در مسئله‌ای با ناوردایی انتقال در زمان به

$$\langle \dot{H} \rangle = 0 \quad (۶-۳-۱۱)$$

می‌رسیم که قانون پایستگی انرژی است.

ساده‌سازی مهمی که اگر $dH/dt = 0$ باشد صورت می‌گیرد همان چیزی است که به کرات در گذشته از آن بهره گرفته‌ایم: معادله شرودینگر

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = H |\psi\rangle \quad (۷-۳-۱۱)$$

جواب‌هایی به شکل

$$|\psi(t)\rangle = |E\rangle e^{-iEt/\hbar} \quad (۸-۳-۱۱)$$

دارد که در آن کت مستقل از زمان $|E\rangle$ رابطه

$$H|E\rangle = E|E\rangle \quad (۹-۳-۱۱)$$

را برآورده می‌کند. دینامیک کُل، یعنی تعیین انتشارگر $U(t)$ ، به تعیین جواب معادله مستقل از زمان شرودینگر (۹-۳-۱۱) تقلیل می‌یابد.

ملاحظاتناهی که برای ناوردایی انتقال در فضا به کار رفتند در اینجا هم به کار می‌روند. بویژه، همه برهم کنش‌های شناخته شده - از گرانشی تا قوی - ناوردای انتقال در زمان هستند. در نتیجه، اگر سیستم را به طور مناسب تعریف کنیم (تا شامل چشمه‌های میدان‌های خارجی که آزمایش را تحت تأثیر قرار می‌دهند شود) H کل مستقل از t خواهد بود. برای مثال اتم هیدروژن را بین صفحات یک خازن در حال تخلیه در نظر بگیرد. اگر سیستم فقط شامل الکترون و پروتون باشد، H به زمان بستگی خواهد داشت و به شکل معادله (۱۱-۲-۴۲)، با $V = V(\mathbf{R}, t)$ ، خواهد بود. این واقعاً بدین معنی است که تکرار آزمایش بدون تخلیه (دشارژ) خازن، به نتیجه‌ای متفاوت منجر خواهد شد. اما اگر سیستم را بزرگ کنیم تا N بار روی خازن را شامل شود به H معادله (۱۱-۲-۴۳) می‌رسیم که هیچ وابستگی به t ندارد.

ناوردایی در فضا - زمان قوانین طبیعی اثر عمیقی در کاوش ما برای درک طبیعت دارد. خود چرخه فیزیک در استنتاج قوانین از یک سری پدیده‌های مطالعه شده در یک زمان و مکان و سپس کاربرد آنها برای پدیده‌های دیگر در زمان و مکانی متفاوت بر این فرض استوار است که قوانین طبیعی ناوردای مکان - زمان هستند. اگر طبیعت در سراسر فضا - زمان از قواعد یکسانی پیروی نمی‌کرد هیچ قاعده و قانونی به جز یک سری رویدادهای تصادفی بی دلیل و جهت وجود نمی‌داشت. با تکرار قوانین طبیعی به کرات در کل فضا - زمان، طبیعت به ساکنان کوچک زمین، که فقط ناحیه کوچکی از فضا را برای یک زمان کوتاه (در مقیاس کیهانی) کاوش می‌کنند، شانس درک جهان در مقیاس بزرگ را می‌دهد. با توجه به دانسته‌های اندک از قوانین طبیعت می‌بایست بارها و بارها دلسرد و ناامید شویم اما با این اصول تقارنی که بیان می‌کنند که دانسته‌های ما هر چند هم اندک، جهانی و ابدی است، آرامش پیدا می‌کنیم.

۱۱-۴- ناوردایی پاریته

برخلاف انتقالات در فضا - زمان و چرخش‌ها (که در فصل بعد بررسی خواهیم کرد) پاریته تبدیلی گسسته است. از نظر کلاسیکی عمل پاریته متناظر با انعکاس دادن حالت ذره نسبت به مبدا است

$$x \xrightarrow{\text{parity}} -x \quad (1-4-11)$$

$$p \xrightarrow{\text{parity}} -p$$

در نظریه کوانتومی، اثر عملگر پاریته را روی پایه X در مقایسه با حالت کلاسیکی به صورت

$$\Pi|x\rangle = |-x\rangle \quad (2-4-11)$$

تعریف می‌کنیم. با داشتن این همان‌طور که بزودی خواهیم دید،

$$\Pi|p\rangle = |-p\rangle \quad (3-4-11)$$

با معلوم بودن اثر Π روی پایه کامل (X) ، اثر آن روی یک کت دلخواه مشخص می‌شود:

$$\begin{aligned} \Pi|\psi\rangle &= \Pi \int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle \langle x|\psi\rangle dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} |-x\rangle \langle x|\psi\rangle dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} |x'\rangle \langle -x'|\psi\rangle dx' \quad (\text{where } x' = -x) \end{aligned} \quad (4-4-11)$$

در نتیجه اگر

$$\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$$

باشد آنگاه

$$(۵-۴-۱۱)$$

$$\langle x | \Pi | \psi \rangle = \psi(-x)$$

تابع $\psi(-x)$ تصویر آینه‌ای $\psi(x)$ حول مبدا است. با اعمال معادله (۵-۴-۱۱) به ویژه حالت تکانه به آسانی دیده می‌شود که $\Pi | p \rangle = | -p \rangle$ است.

ویژه مقادیر Π فقط ± 1 هستند. یک «بازتاب» لحظه‌ای این موضوع را ثابت خواهد کرد. از آنجا که

$$\Pi | x \rangle = | -x \rangle$$

$$\Pi^2 | x \rangle = | -(-x) \rangle = | x \rangle$$

چون این روابط برای یک پایه کامل درست هستند،

$$(۶-۴-۱۱)$$

$$\Pi^2 = I$$

نتیجه اینکه:

$$۱- \Pi = \Pi^{-1}$$

۲- ویژه مقادیر Π عبارتند از ± 1 .

۳- پس Π هرمیتی و یکانی است.

۴- بنابراین $\Pi^{-1} = \Pi^+ = \Pi$.

ویژه بردارهای با ویژه مقدار ± 1 دارای پارینه زوج / فرد گفته می‌شوند. در پایه X که

$$\psi(x) \xrightarrow{\Pi} \psi(-x)$$

بردارهای پارینه - زوج دارای توابع موج زوج و بردارهای پارینه - فرد دارای توابع موج فردند. برای پایه P هم همین طور است چون

$$\psi(p) \xrightarrow{\Pi} \psi(-p)$$

در یک پایه Ω دلخواه، لازم نیست زوج یا فرد باشد حتی اگر $|\psi\rangle$ یک ویژه حالت پارینه باشد (چک کنید).

به جای تعریف Π بر حسب اثر آن روی کت‌ها، آنرا از طریق اثرش روی عملگرها تعریف می‌کنیم:

$$\Pi^+ X \Pi = -X$$

$$(۷-۴-۱۱)$$

$$\Pi^+ P \Pi = -P$$

می‌گوییم $H(X, P)$ ناوردای پارینه است اگر که

$$\Pi^+ H(X, P) \Pi = H(-X, -P) = H(X, P)$$

$$(۸-۴-۱۱)$$

باشد. در این صورت

$$[\Pi, H] = 0$$

و ویژه پایه مشترک Π و H می‌تواند پیدا شود. به‌ویژه اگر فقط حالت‌های مقید را در یک بعد در نظر بگیریم (که دیدیم غیر تبه‌گن هستند)، هر ویژه بردار H لزوماً یک ویژه بردار Π است. برای مثال هامیلتونی نوسانگر معادله (۱۱-۴-۸) را برآورده می‌کند و ویژه توابع آن دارای پارته معین برابر با $(-1)^n$ هستند که n عدد کوانتومی حالت است. ذره در جعبه اگر جعبه از $-L/2$ تا $L/2$ گسترده باشد دارای هامیلتونی ناوردا ی - پارته است. در این مورد ویژه توابع دارای پارته $(-1)^{n+1}$ هستند که n عدد کوانتومی است. اگر جعبه از 0 تا L گسترده باشد، $V(x)$ ناوردا ی پارته نبوده و ویژه توابع

$$\psi_n(x) = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

دارای هیچ پارته معینی نیستند (وقتی $x \rightarrow -x$ تبدیل می‌شود آنها صفر می‌شوند چون ψ_n فقط بین 0 و L سینوسی است و بقیه جاها صفر است). اگر H ناوردا ی پارته باشد، آنگاه

$$(9-4-11)$$

$$\Pi U(t) = U(t) \Pi$$

یعنی اگر در $t = 0$ با سیستمی در حالت $|\psi(0)\rangle$ شروع کنیم و فردی دیگر با سیستمی در حالت پارته عمل کرده، یعنی $\Pi|\psi(0)\rangle$ ، شروع کند آنگاه در زمان بعدی حالت سیستم او به‌وسیله تبدیل پارته به سیستم ما مربوط خواهد شد.

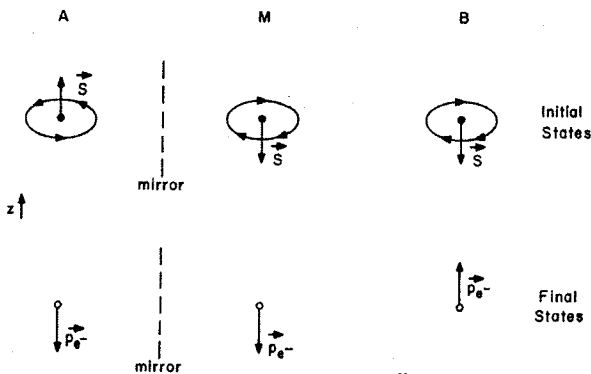
در حالی که همه قوانین طبیعی تحت تبدیلات فضایی - زمانی (و چرخشی) ناوردا هستند، بعضی از آنها تحت پارته ناوردا نیستند. اینها قوانین برهم‌کنش‌های ضعیف هستند که مسئول واپاشی β هسته‌ای هستند. این به‌طور صوری یعنی هامیلتونی نمی‌تواند در صورت وجود برهم‌کنش‌های ضعیف با تعریف مجدد سیستم به ناوردا ی پارته تبدیل شود. از نظر فیزیکی این بدین معنی است که اگر دو ناظر حالت‌های اولیه $|\psi(0)\rangle$ و $\Pi|\psi(0)\rangle$ را که تصاویر آینده‌ای هم هستند آماده کنند حالت‌های نهایی $U(t)|\psi(0)\rangle$ و $U(t)\Pi|\psi(0)\rangle$ تصاویر آینده‌ای هم نخواهند بود (چون $\Pi U \neq U \Pi$). مثال آموزنده واپاشی β را در نظر بگیرید:



که e^- یک الکترون و $\bar{\nu}$ یک پادنوترینوست. اکنون معلوم می‌شود که الکترون تمایل دارد در جهتی مخالف با اسپین ${}^{60}\text{Co}$ بیرون بیاید و این اشاره می‌کند که پارته ناوردا است. ببینیم چگونه؟ در $t = 0$ سیستمی را آماده می‌کنیم که شامل یک هسته ${}^{60}\text{Co}$ با اسپین بالا در جهت Z باشد (شکل ۱۱-۲) (آزمایش A). اگر چه شما هنوز با اسپین آشنا نیستید ولی می‌توانید وانمود کنید که ${}^{60}\text{Co}$ در حال چرخش در جهت

نشان داده شده است. ناظر دیگری را در نظر بگیرید که سیستم دیگری را که درست تصویر آینه‌ای آزمایش ما (آزمایش B) است آماده کند. فرض کنید M یک آزمایش ساختگی را نشان دهد که چیزی است که ما در آینه مقابل خود می‌بینیم. توجه کنید که چطور اسپین S تحت یک بازتاب آینه‌ای برعکس می‌شود. فرض کنید واپاشی β اتفاق بیفتد. الکترون ما با اسپین پایین بیرون می‌آید (پایین محور Z). البته آینه هم الکترونی را نشان می‌دهد که در جهت پائین محور Z بیرون آید. در آزمایش حقیقی دیگر (B)، دینامیک، الکترون را مجبور می‌کند تا در جهت محور Z (بالا) بیرون بیاید، چون S اولیه رو به پایین بود. بنابراین B به صورت تصویر آینه‌ای A شروع می‌شود اما به شکلی متفاوت پایان می‌یابد. در نتیجه آنچه ما در آینه می‌بینیم (آزمایش M) متناظر با چیزی نیست که بتواند در دنیای واقعی اتفاق افتد یعنی جوابی برای معادلات حرکت نیست.

پس این یک تفاوت بزرگ بین پاریته و دیگر تبدیلات نظیر انتقالات در فضا - زمان و چرخش هاست. اگر پدیده خاصی بتواند رخ دهد، انتقال یافته آن یا چرخیده آن هم می‌تواند اتفاق بیفتد اما شکل بازتاب شده آینه‌ای آن، اگر پدیده شامل برهم کنش‌های ضعیف باشد، نمی‌تواند رخ دهد. به زبان قوانین پایستگی، اگر یک سیستم منزوی در حالتی با پاریته معین شروع به کار کند در صورت وجود برهم کنش‌های ضعیف لازم نیست با حالتی با همان پاریته پایان پذیرد. اینکه برهم کنش‌های ضعیف غیر ناوردای پاریته هستند به‌طور مفصل توسط Lee و Yang در ۱۹۵۶ بحث و بررسی شده و بلافاصله بعد از آن به وسیله آزمایشات C.S.Wu و همکارانش تأیید شد.^۱



شکل ۱۱-۲: مثالی از عدم ناوردایی پاریته. در آزمایش A، که ما انجام می‌دهیم، اسپین هسته رو به محور Z است. در تصویر آینه‌ای واقعی آن، اسپین رو به پایین قرار می‌گیرد (آزمایش M). در آزمایش B که یک آزمایش واقعی است، اسپین رو به پایین انتخاب می‌شود، یعنی B به عنوان تصویر آینه‌ای A شروع می‌کند. بعد از واپاشی، تکانه الکترون ما، p_e ، رو به پایین محور Z است. البته تصویر آینه‌ای هم اسپین الکترون را رو به پایین نشان می‌دهد. اما در آزمایش واقعی B، دینامیک وادار می‌کند که الکترون با اسپین بالا بیرون بیاید، یعنی پادموازی با اسپین اولیه هسته، S.

تمرین ۱۱-۴-۱: ثابت کنید که اگر $[\Pi, H] = 0$ باشد سیستمی که در حالتی با پاریته زوج / فرد شروع می‌شود پاریته خود را حفظ می‌کند (توجه کنید که چون پاریته یک عمل گسسته است، هیچ قانون پایستگی وابسته‌ای در مکانیک کلاسیک ندارد).

تمرین ۱۱-۴-۲: ذره‌ای در پتانسیل

$$V(x) = V_0 \sin(2\pi x/a)$$

قرار دارد که تحت انتقالات $x \rightarrow x + ma$ ناورداست و m عددی صحیح است. آیا تکانه پایسته است؟ چرا نیست؟

تمرین ۱۱-۴-۳: به شما گفته می‌شود که در واکنشی خاص، الکترون همیشه با اسپین موازی با تکانه آن بیرون می‌آید. ثابت کنید که پارته نقض می‌شود.

تمرین ۱۱-۴-۴: پارته را به‌عنوان یک بازتاب آینه‌ای بحث کردیم. این مطلب در یک بعد، که در آن $x \rightarrow -x$ می‌تواند به‌عنوان اثر بازتاب کردن از یک آینه (نقطه‌ای) در مبدا تلقی شود، قطعاً درست است. در ابعاد بالاتر وقتی یک آینه تخت (مثلاً واقع در صفحه $x - y$) به کار می‌بریم فقط یک مختصه (z) معکوس می‌شود در حالی که تبدیل پارته هر سه مختصه را معکوس می‌کند.

ثابت کنید که بازتاب از روی آینه‌ای واقع در صفحه $x - y$ با پارته و به دنبال آن یک چرخش 180° حول محور z یکسان است. چون ناوردایی چرخشی برای برهم‌کنش‌های ضعیف برقرار است، عدم ناوردایی تحت بازتاب آینه‌ای به عدم ناوردایی تحت پارته اشاره می‌کند.

۱۱-۵- تقارن وارونی - زمان^۱

این تقارن یک تقارن گسسته مثل پارته است. اجازه دهید ببینیم که مفهوم آن در فیزیک کلاسیک چیست. سیاره‌ای را روی مداری دایره‌ای حول خورشید در نظر بگیرید که در $t = 0$ از $\theta = 0$ شروع می‌کند و دارای سرعتی در جهت افزایش θ است. به عبارتی دیگر مدار در جهت پاد ساعتگرد طی می‌شود. فرض کنید مکان و تکانه اولیه را $x(0)$ و $p(0)$ بنامیم (در واقع باید از بردارها استفاده کنیم ولی برای این بحث از این واقعیت چشم می‌پوشیم).

حال حالت زمان - برگشته^۲ را به‌عنوان حالتی تعریف می‌کنیم که در آن مکان همان بوده اما تکانه معکوس شده است:

$$x_r(t) = x(t) \quad p_r(t) = -p(t).$$

در حالت کلی هر کمیتی مثل مکان یا انرژی جنبشی که شامل یک توان زوج از t در تعریفش است ناوردا می‌ماند و هر کمیتی مثل تکانه یا تکانه زاویه‌ای تحت عمل وارونی - زمان تغییر علامت می‌دهد.

فرض کنید بعد از زمان T ، سیاره به یک حالت نهایی $x(T)$ و $p(T)$ در $\theta = \pi/2$ بعد از طی نمودن یک چهارم دور کامل رسیده باشد. حال یک ابرمرد (به دلایلی که برای او کاملاً معلوم است) آنرا به کلی در مسیرش متوقف کرده، سرعت آن را معکوس می‌کند و اجازه حرکت می‌دهد. سیاره چه کاری انجام خواهد داد؟ می‌دانیم که مسیرش را مجدداً طی خواهد کرد و در لحظه $2T$ در حالت زمان - برگشته حالت اولیه خواهد بود:

1- Time-reversal.
2- Time-reversed state.

$$(11-5-1)$$

$$x(2T) = x(0) \quad p(2T) = -p(0)$$

معادله فوق ناوردایی وارونی - زمان را تعریف می کند (TRI).

می توان TRI را به شکلی گرافیکی تر توصیف نمود: فرض کنید از $t = 0$ تا $t = T$ از سیاره مذکور فیلم بگیریم. در $t = T$ ، فیلم را به عقب پخش می کنیم. حرکت رو به عقب سیاره در $t = 2T$ آنرا به عقب، به حالت اولیه وارونی - زمان، خواهد برد. آنچه در فیلم می توانیم ببینیم می تواند واقعاً اتفاق افتد، در واقع، نشان داده شد که چطور ابر مرد می تواند این کار را انجام دهد حتی وقتی شما در حال تماشای فیلم هستید. به طور کلی تر، اگر شما فیلمی را از یک حرکت سیاره ای ببینید، هیچ راهی برای دانستن اینکه آیا تصویرساز به جلو یا عقب حرکت می کند ندارد. در برخی فیلم ها نشان دادن ماشین ها و مردمی که با صدای وزوز به صورت معکوس حرکت می کنند موجب خنده حضار می شود. شما به عنوان یک دانشجوی جدی فیزیک نباید وقتی با چنین صحنه ای مواجه می شوید بخندید چون این حرکت ها از قوانین نیوتن پیروی می کنند. به عبارتی دیگر، اجرای این حرکت برای مجموعه ای از ماشین ها و مردم کاملاً امکان پذیر است. از طرف دیگر وقتی یک شخصیت کار تونی که تحت گرانش سقوط می کند ناگهان شروع به چنگ زدن مسیر خود رو به بالا در هوای رقیق با استفاده از نیروی اراده محض می نماید نباید بخندید چون این یک انحراف فاحش از قوانین نیوتن است. در حالی که صحت معادله (11-5-1) به طور شهودی واضح است اکنون آنرا به کمک قانون دوم نیوتن و با استفاده از این حقیقت که این قانون تحت تبدیل $t \rightarrow -t$ ناورداست ثابت می کنیم: پتانسیل نسبت به زمان زوج است و پتانسیل یا نیرو هیچ نشانی از t ندارد. در اینجا جزئیات را ارائه می کنیم. فقط برای این بحث اجازه دهید از ساعتی استفاده کنیم که صفرش در نقطه وارونی زمان قرار دارد به طوری که $t = 0$ تعریف کننده این نقطه، وقتی حرکت زمان - برگشته می شود، باشد. وقتی فیلم به عقب پخش می شود مسیر

$$x_r(t) = x(-t)$$

را می بینیم. به عبارتی دیگر، ۵ ثانیه بعد از وارونی، شیء در جایی است که ۵ ثانیه قبل از وارونی در آنجا بود. وارونی سرعت ها از اینجا حاصل می شود:

$$\dot{x}_r(t) = \frac{dx(-t)}{dt} = -\frac{dx(-t)}{d(-t)} = -\dot{x}(-t)$$

سوال این است: آیا این مدار $x_r(t)$ از قانون دوم نیوتن پیروی می کند

$$m \frac{d^2 x_r(t)}{dt^2} = F(x_r)$$

با اینکه می دانیم $x(t)$ از آن پیروی می کند؟ می توان دید که اینگونه است:

$$m \frac{d^2 x_r(t)}{dt^2} = m \frac{d^2 x(-t)}{dt^2} = m \frac{d^2 x(-t)}{d(-t)^2} = F(x(-t)) = F(x_r(t))$$

همه مسائل، ناوردای وارونی - زمان نیستند. ذره باردار مثبتی را در صفحه $x - y$ در نظر بگیرید که تحت یک میدان مغناطیسی رو به پائین محور z حرکت می کند. فرض کنید درست مثل سیاره، این ذره هم در

$t = 0$ رها شود در حالی که سرعتش در جهت افزایش θ است. به واسطه نیروی $\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ ، ذره در یک مدار پاد ساعتگرد حرکت خواهد کرد. منتظر می‌مانیم تا به اندازه $\pi/2$ بچرخد و در این زمان، $t = T$ ، حالت آن را زمان-وارون می‌کنیم. آیا در $t = 2T$ ذره به حالت اولیه زمان-برگشته بر خواهد گشت؟ خیر، به راحتی دیده می‌شود که با شروع از $t = T$ ذره یک بار دیگر روی یک مدار دایره‌ای پاد ساعتگرد مماس بر اولی در نقطه وارونی حرکت خواهد کرد. برای این نقص RTI برهم‌کنش مغناطیسی را مقرر می‌دانیم: نیرو شامل سرعت است که تحت وارونی - زمان فرد است.

اکنون سوال این است که چگونه همه اینها در مکانیک کوانتومی ظاهر می‌شوند. این مفاهیم در ساده‌ترین موارد نشان داده می‌شوند. ذره‌ای را در یک بعد با هامیلتونی مستقل از زمان H در نظر بگیرید. در نمایش X معادله موج عبارتست از

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

ابتدا توجه می‌کنیم که

$$\psi \rightarrow \psi^*$$

وارونی - زمان انجام می‌دهد. این از آنجایی که توزیع احتمال مشروح نسبت به X با این تغییر، تغییری نمی‌کند واضح است. از طرف دیگر با نگاهی به امواج تخت (یا عملگر تکانه $-i\hbar(\partial/\partial x)$) می‌توان دید که تحت مزدوج مختلط، $P \rightarrow -P$ می‌رود.

اگر سیستم دارای TRI باشد می‌بایست مانسته معادله (۱۱-۵-۱) را بیابیم. پس فرض کنید حالت $\psi(x, 0)$ را آماده کنیم و بگذاریم برای مدت T تحول یابد، آنرا مزدوج مختلط کنیم و اجازه دهیم برای مدت دیگر T تحول یابد و ببینیم که آیا به مزدوج مختلط حالت اولیه می‌رسیم یا خیر. در هر مرحله وقایع زیر را می‌بینیم:

$$\psi(x, 0) \rightarrow e^{-iH(x)T/\hbar} \psi(x, 0) \rightarrow e^{iH^*(x)T/\hbar} \psi^*(x, 0) \rightarrow e^{-iH(x)T/\hbar} e^{iH^*(x)T/\hbar} \psi^*(x, 0)$$

واضح است که برای اینکه نتیجه نهایی، که $\psi(x, 2T)$ است، از

$$\psi(x, 2T) = \psi^*(x, 0)$$

پیروی کند لازم است که

$$H(x) = H^*(x)$$

باشد یعنی هامیلتونی حقیقی باشد. برای $H = P^2/2m + V(x)$ اینگونه است حتی در ابعاد بالاتر. از طرف دیگر اگر یک میدان مغناطیسی داشته باشیم، P به صورت خطی در هامیلتونی وارد می‌شود و $H(x) \neq H^*(x)$ می‌گردد.

اگر H دارای TRI باشد یعنی حقیقی باشد در انتهای فصل ۶ دیدیم که هر ویژه تابع اشاره به یک ویژه تابع تبهگن دارد که مزدوج مختلط آن است.

توجه کنید که نقض TRI در حضور میدان مغناطیسی هیچ نوع بی‌تقارنی بنیادی تحت وارونی - زمان در الکترومغناطیس را نشان نمی‌دهد. قوانین الکترومغناطیسی تحت تبدیل $t \rightarrow -t$ ناوردا هستند. بی‌تقارنی در مثال ما مربوط به این است که ما میدان مغناطیسی را خارج از سیستم بحث کردیم و لذا زمان - برگشته نشد. اگر در سیستم خود جریان‌های تولید کننده میدان مغناطیسی را هم لحاظ می‌کردیم و آنها را هم معکوس می‌نمودیم کل سیستم از مسیر زمان - برگشته پیروی می‌کرد. در واقع اگر یک فیلم از آزمایش می‌گرفتید و آنرا به عقب پخش می‌کردید و می‌توانستید بارهای واقع در سیستم را ببینید، می‌دیدید که آنها هم به عقب حرکت می‌کنند، میدان در $t = T$ معکوس می‌شد و باری که برای مطالعه انتخاب کرده‌ایم از مسیر زمان - برگشته پیروی می‌کرد.

از طرف دیگر برخی آزمایش‌ها همراه با مباحث عمومی نظریه میدان کوانتومی پیشنهاد می‌کنند که برهم‌کنش‌هایی در این جهان وجود دارند که فاقد این تقارن در سطح بنیادی هستند.

روش‌هایی برای فرمول‌بندی TRI به شیوه‌ای مستقل از پایه وجود دارند که ما در اینجا به آنها نخواهیم پرداخت. برای اکثر مسائل که برایشان پایه مختصه انتخاب طبیعی است بحث فوق معتبر است. وقتی مسئله شامل اسپین باشد، که نظیر کلاسیکی ندارد، وضعیت اندکی پیچیده خواهد شد. این وضعیت را می‌توان مانند بحث تکانه زاویه‌ای مداری بررسی کرد.

در فصل گذشته در باب تقارن‌ها، نوردایی چرخشی بررسی نشد نه به خاطر اینکه بی‌اهمیت است بلکه به خاطر اینکه اتفاقاً بسیار مهم بوده و فصل بخصوصی را به آن اختصاص دهیم. دلیل امر این است که اکثر مسائل مورد بحث ما شامل یک ذره منفرد (که می‌تواند جرم کاهش یافته باشد) در یک پتانسیل خارجی است و با اینکه نوردایی انتقالی H اشاره به آزاد بودن ذره می‌کند نوردایی چرخشی H فضایی برای دینامیک جالب توجه آن باقی می‌گذارد. ابتدا دو بعد را در نظر گرفته و سپس به سه بعد می‌رویم.

۱۲-۱- انتقال در دو بعد

اگر چه عمدتاً به چرخش‌ها علاقه مندیم ولی به طور سریع انتقال در دو بعد را مرور می‌کنیم. با تعمیم سراسر بحث‌هایی که منجر به معادله (۱۱-۲-۱۴) از معادله (۱۱-۲-۱۳) می‌شوند می‌توانیم نتیجه بگیریم که مولدهای انتقال بی‌نهایت کوچک در امتداد جهت‌های x و y به ترتیب عبارتند از:

$$P_x \xrightarrow{\text{coordinate basis}} -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (12-1-1)$$

$$P_y \xrightarrow{\text{coordinate basis}} -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \quad (12-1-2)$$

برحسب عملگر برداری P که تکانه را نشان می‌دهد،

$$\mathbf{P} = P_x \mathbf{i} + P_y \mathbf{j} \quad (12-1-3)$$

P_x و P_y ضرب‌های نقطه‌ای \mathbf{P} با بردار یکه (\hat{i} یا \hat{j}) در جهت انتقال هستند. از آنجا که در مورد این دو جهت هیچ چیز خاصی وجود ندارد نتیجه می‌گیریم که در حالت کلی،

$$\hat{n} \cdot \mathbf{P} \equiv P_{\hat{n}} \quad (12-1-4)$$

مولد انتقال در جهت بردار یکه \hat{n} است. عملگرهای انتقال متناهی با نمایی کردن به دست می‌آیند. بنابراین $T(\mathbf{a})$ که به اندازه \mathbf{a} منتقل می‌کند به وسیله

$$T(\mathbf{a}) = e^{-iaP_{\hat{n}}/\hbar} = e^{-ia\hat{n} \cdot \mathbf{P}/\hbar} = e^{-i\mathbf{a} \cdot \mathbf{P}/\hbar} \quad (12-1-5)$$

مشخص می‌شود که $\hat{a} = \mathbf{a}/a$ است.

آزمون سازگاری. اکنون این پرسش مطرح می شود که آیا عملگرهای انتقالی که ساخته ایم دارای قوانین صحیح ترکیب هستند، یعنی آیا

$$T(\mathbf{b})T(\mathbf{a}) = T(\mathbf{a} + \mathbf{b}) \quad (۶-۱-۱۲)$$

یا به طور معادل آیا

$$e^{-i\mathbf{b}\cdot\mathbf{P}/\hbar}e^{-i\mathbf{a}\cdot\mathbf{P}/\hbar} = e^{-i(\mathbf{a}+\mathbf{b})\cdot\mathbf{P}/\hbar} \quad (۷-۱-۱۲)$$

و این، به این سوال سر می زند که آیا P_x و P_y می توانند در کار با توابع نمایی به عنوان اعداد c رفتار شوند. پاسخ مثبت است، چون با توجه به معادلات (۱-۱-۱۲) و (۲-۱-۱۲)، این عملگرها جابه جا می شوند

$$[P_x, P_y] = 0 \quad (۸-۱-۱۲)$$

و ماهیت عدد q آنها در اینجا ظاهر نمی شود. جابه جایی پذیری P_x و P_y ، جابه جایی پذیری انتقالات در جهت های x و y را منعکس می کند.

تمرین ۱۲-۱-۱: با ملاحظه رابطه زیر ثابت کنید که $\hat{\mathbf{a}} \cdot \mathbf{P}$ مولد انتقالات بی نهایت کوچک در امتداد \mathbf{a} است:

$$\langle x, y | I - \frac{i}{\hbar} \hat{\mathbf{a}} \cdot \mathbf{P} | \psi \rangle = \psi(x - \delta a_x, y - \delta a_y)$$

۱۲-۲- چرخش ها در دو بعد

از نظر کلاسیکی، اثر یک چرخش \hat{k} ϕ_0 ، یعنی به اندازه ϕ_0 حول محور z (پادساعتگرد در صفحه $x - y$)، اثر زیر را روی حالت یک ذره دارد:

$$\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \phi_0 & -\sin \phi_0 \\ \sin \phi_0 & \cos \phi_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \quad (۱-۲-۱۲)$$

$$\begin{bmatrix} p_x \\ p_y \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \bar{p}_x \\ \bar{p}_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \phi_0 & -\sin \phi_0 \\ \sin \phi_0 & \cos \phi_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_x \\ p_y \end{bmatrix} \quad (۲-۲-۱۲)$$

فرض کنید عملگری را که این بردارهای دو بعدی را می چرخاند با $R(\phi_0 \hat{k})$ نشان دهیم. این عملگر با ماتریس 2×2 در معادلات (۱-۲-۱۲) و (۲-۲-۱۲) نشان داده می شود. درست همان طور که $T(\mathbf{a})$ عملگر مربوط به انتقال به اندازه \mathbf{a} در فضای هیلبرت است، فرض کنید $U[R(\phi_0 \hat{k})]$ عملگر مربوط به چرخش $R(\phi_0 \hat{k})$ باشد. در تصویر تبدیل اکتیو،

$$|\psi\rangle \xrightarrow{U[R]} |\psi_R\rangle = U[R]|\psi\rangle \quad (۳-۲-۱۲)$$

حالت چرخیده $|\psi_R\rangle$ می‌بایست طوری باشد که

$$\langle X \rangle_R = \langle X \rangle \cos \phi_0 - \langle Y \rangle \sin \phi_0 \quad (12-2-4 \text{ الف})$$

$$\langle Y \rangle_R = \langle X \rangle \sin \phi_0 + \langle Y \rangle \cos \phi_0 \quad (12-2-4 \text{ ب})$$

$$\langle P_x \rangle_R = \langle P_x \rangle \cos \phi_0 - \langle P_y \rangle \sin \phi_0 \quad (12-2-5 \text{ الف})$$

$$\langle P_y \rangle_R = \langle P_x \rangle \sin \phi_0 + \langle P_y \rangle \cos \phi_0 \quad (12-2-5 \text{ ب})$$

که در آنها

$$\langle X \rangle_R = \langle \psi_R | X | \psi_R \rangle$$

و

$$\langle X \rangle = \langle \psi | X | \psi \rangle, \text{ etc.}$$

مشابه مسئله انتقال، اثر $U[R]$ را روی ویژه کت‌های مکان به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$U[R]|x, y\rangle = |x \cos \phi_0 - y \sin \phi_0, x \sin \phi_0 + y \cos \phi_0\rangle \quad (12-2-6)$$

همچون حالت انتقالات، این معادله به وسیله چیزی بیش از فقط معادله (12-2-4)، که چگونگی تبدیل $\langle X \rangle$ و $\langle Y \rangle$ را مشخص می‌کند، حاصل می‌شود: در حذف عامل فاز ممکن $g(x, y)$ ، اطمینان می‌یابیم که $\langle P_x \rangle$ و $\langle P_y \rangle$ هم به صورت معادله (12-2-5) تبدیل می‌یابند.

یک روش برای نشان دادن این، نگه داشتن عامل فاز و استفاده از معادلات (12-2-5 الف) و (12-2-5 ب) برای حذف آن است. ما راه ساده‌تر را طی کرده و آنرا از ابتدا حذف می‌کنیم و در انتها نشان می‌دهیم که $\langle P_x \rangle$ و $\langle P_y \rangle$ طبق معادله (12-2-5) تبدیل می‌شوند.

شکل صریح $U[R]$

اکنون شکل $U[R]$ را می‌سازیم. ابتدا یک چرخش بی‌نهایت کوچک $\varepsilon_z \hat{k}$ را در نظر می‌گیریم. در این حالت، قرار می‌دهیم:

$$U[R(\varepsilon_z \hat{k})] = I - \frac{i\varepsilon_z L_z}{\hbar} \quad (12-2-7)$$

که L_z ، مولد چرخش‌های بی‌نهایت کوچک، باید تعیین شود. با شروع از معادله (12-2-6)، که تا مرتبه اول از ε_z به صورت زیر می‌شود:

$$U[R]|x, y\rangle = |x - y\varepsilon_z, x\varepsilon_z + y\rangle \quad (12-2-8)$$

می‌توان نشان داد که

$$\langle x, y | I - \frac{i\varepsilon_z L_z}{\hbar} | \psi \rangle = \psi(x + y\varepsilon_z, y - x\varepsilon_z) \quad (9-2-12)$$

تمرین ۱۲-۲-۱: مراحل رسیدن از معادله (۸-۲-۱۲) به (۹-۲-۱۲) را مشخص کنید [راهنمایی: استنتاج معادله (۸-۲-۱۱) از (۶-۲-۱۱) را به خاطر بیاورید].
با بسط هر دو طرف تا مرتبه اول از ε_z ،

$$\langle x, y | I | \psi \rangle - \frac{i\varepsilon_z}{\hbar} \langle x, y | L_z | \psi \rangle = \psi(x, y) + \frac{\partial \psi}{\partial x} (y\varepsilon_z) + \frac{\partial \psi}{\partial y} (-x\varepsilon_z)$$

$$\langle x, y | L_z | \psi \rangle = \left[x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) - y \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] \psi(x, y)$$

بنابراین

$$L_z \xrightarrow{\text{coordinate basis}} x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) - y \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (10-2-12)$$

یا به شکل مجرد

$$L_z = XP_y - YP_x \quad (11-2-12)$$

اکنون ثابت می‌کنیم که $\langle P_x \rangle$ و $\langle P_y \rangle$ طبق معادله (۵-۲-۱۲) تبدیل می‌یابند. از آنجا که

$$L_z \xrightarrow{\text{momentum basis}} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x} p_y - i\hbar \frac{\partial}{\partial p_y} p_x \right) \quad (12-2-12)$$

واضح است که

$$\frac{-i\varepsilon_z}{\hbar} \langle p_x, p_y | L_z | \psi \rangle = \frac{\partial \psi}{\partial p_x} (p_y \varepsilon_z) + \frac{\partial \psi}{\partial p_y} (-p_x \varepsilon_z) \quad (13-2-12)$$

لذا $I - i\varepsilon_z L_z / \hbar$ تابع موج فضای تکانه، $\psi(p_x, p_y)$ را به اندازه ε_z در فضای تکانه می‌چرخاند و در نتیجه $\langle P_x \rangle$ و $\langle P_y \rangle$ درست مثل $\langle X \rangle$ و $\langle Y \rangle$ ، یعنی طبق معادله (۵-۲-۱۲)، تبدیل می‌یابند.
می‌توانستیم معادله (۱۱-۲-۱۲) را برای L_z با شروع از معادلات تبدیل پسو برای یک چرخش بی‌نهایت کوچک به دست آوریم:

$$U^\dagger[R] X U[R] = X - Y\varepsilon_z \quad (14-2-12 \text{ الف})$$

$$U^\dagger[R] Y U[R] = X\varepsilon_z + Y \quad (14-2-12 \text{ ب})$$

$$U^\dagger[R] P_x U[R] = P_x - P_y \varepsilon_z \quad (15-2-12 \text{ الف})$$

$$U^\dagger[R] P_y U[R] = P_x \varepsilon_z + P_y \quad (15-2-12 \text{ ب})$$

با قرار دادن معادله (۱۲-۲-۷) در بالا می‌توانیم نتیجه بگیریم که

$$[X, L_z] = -i\hbar Y \quad (۱۲-۱۶-الف)$$

$$[Y, L_z] = i\hbar X \quad (۱۲-۱۶-ب)$$

$$[P_x, L_z] = -i\hbar P_y \quad (۱۲-۱۷-الف)$$

$$[P_y, L_z] = i\hbar P_x \quad (۱۲-۱۷-ب)$$

این روابط جابه‌جایی کافی هستند تا L_z را به صورت $XP_y - YP_x$ مشخص کنیم.

تمرین ۱۲-۲-۲: با استفاده از این روابط جابه‌جایی (و پیشینه ذهنی خود)، $L_z = XP_y - YP_x$ را به دست آورید. حداقل نشان دهید که معادلات (۱۲-۲-۱۶) و (۱۲-۲-۱۷) با $L_z = XP_y - YP_x$ سازگارند.

عملگر چرخش متناهی $U[R(\phi_0 \hat{k})]$ عبارتست از

$$U[R(\phi_0 \hat{k})] = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(I - \frac{i \phi_0}{\hbar N} L_z \right)^N = \exp(-i\phi_0 L_z / \hbar) \quad (۱۲-۲-۱۸)$$

با دانستن

$$L_z \xrightarrow{\text{coordinate basis}} x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) - y \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

مشکل است که ببینیم $e^{-i\phi_0 L_z / \hbar}$ واقعاً حالت را به اندازه ϕ_0 می‌چرخاند. یکی اینکه بسط تابع نمایی به خاطر اینکه $x(-i\hbar \partial/\partial y)$ و $y(-i\hbar \partial/\partial x)$ جابه‌جانی شوند پیچیده می‌شود. بنابراین شکل دیگری را برای L_z در نظر می‌گیریم. با تبدیل به مختصات قطبی می‌توان نشان داد که

$$L_z \xrightarrow{\text{coordinate basis}} -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (۱۲-۲-۱۹)$$

این نتیجه می‌تواند با شروع از این شرط که تحت یک چرخش بی‌نهایت کوچک $\varepsilon_z \hat{k}$ ، $\psi(x, y) = \psi(\rho, \phi)$ به $\psi(\rho, \phi - \varepsilon_z)$ تبدیل شود به شکلی مستقیم‌تر هم به دست آید.

تمرین ۱۲-۲-۳: معادله (۱۲-۲-۱۹) را با انجام یک تبدیل مختصه روی معادله (۱۲-۲-۱۰) و همچنین با روش مستقیم بالا به دست آورید.

اکنون روشن است که

$$\exp(-i\phi_0 L_z / \hbar) \xrightarrow{\text{coordinate basis}} \exp\left(-\phi_0 \frac{\partial}{\partial \phi}\right) \quad (۱۲-۲-۲۰)$$

حالت را به اندازه ϕ_0 حول محور z می‌چرخاند زیرا طبق قضیه تیلور،

$$\exp(-\phi_0 \partial/\partial \phi) \psi(\rho, \phi) = \psi(\rho, \phi - \phi_0)$$

همین طور روشن است که $U[R(\phi_0 + \phi'_0)\mathbf{k}] = U[R(\phi_0)\mathbf{k}]U[R(\phi'_0)\mathbf{k}]$. بنابراین عملگرهای چرخش دارای قانون صحیح ترکیب هستند.

تعبیر فیزیکی L_z : L_z را به عنوان عملگر تکانه زاویه‌ای می‌شناسیم چون (۱) - با قاعده جانشینی مرسوم (اصل موضوع ۲) از $L_z = xP_y - yP_x$ به دست می‌آید و (۲) - مولد چرخش‌های بی‌نهایت کوچک حول محور z است. در یک مسئله با ناوردایی چرخشی، L_z پایسته است: اگر

$$U^\dagger[R]H(X, P_x; Y, P_y)U[R] = H(X, P_x; Y, P_y) \quad (21-2-12)$$

(با انتخاب یک چرخش بی‌نهایت کوچک) نتیجه می‌شود که

$$[L_z, H] = 0 \quad (22-2-12)$$

چون X و P_x ، Y و P_y به چرخش به همان صورت پاسخ می‌دهند که شکل کلاسیکی آنها [معادلات (۱۲-۲-۱۴) و (۱۵-۲-۱۲)] پاسخ می‌دهند و H همان تابعی از این عملگرهاست که \mathcal{H} از متغیرهای کلاسیکی متناظر است، هر جا \mathcal{H} ناوردای چرخشی است H هم ناوردای چرخشی است).

معادله (۲۲-۲-۱۲) در کنار پایستگی $\langle L_z \rangle$ همچنین اشاره می‌کند که:

- (۱) - اگر H ناوردای انتقالی باشد یک آزمایش و شکل چرخیده آن نتیجه یکسانی به دست خواهند داد.
- (۲) - پایه‌ای مشترک برای L_z و H وجود دارد (در ادامه بحث زیادی را روی این پایه مشترک انجام خواهیم داد).

آزمون سازگاری. اکنون ثابت می‌کنیم که عملگرهای انتقال و چرخش ما به همان صورتی که باید با هم ترکیب می‌شوند. علی‌رغم انتقال یا چرخش‌های خالص، که قانون ترکیب ساده‌ای دارند، اثر ترکیب شده انتقال و چرخش‌ها خیلی ساده نیست. به نظر می‌رسد مجبور هستیم هر امکان ترکیب چرخش‌ها و انتقال را در نظر بگیریم، اثر خالص آنها را یافته و سپس ثابت کنیم که حاصل ضرب عملگرهای کوانتومی متناظر برابر عملگر متناظر با حاصل همه تبدیلات است. ابتدا قدم کوچکی در این راستا برمی‌داریم که ثابت خواهد شد که گام مهمی در جهت هدف ماست.

حاصل ضرب چهار عمل بی‌نهایت کوچک زیر را در نظر بگیرید:

$$U[R(-\varepsilon_z\mathbf{k})]T(-\varepsilon)U[R(\varepsilon_z\mathbf{k})]T(\varepsilon)$$

که $\varepsilon = \varepsilon_x \hat{i} + \varepsilon_y \hat{j}$ است. با قرار دادن یک نقطه واقع در صفحه $x - y$ در معرض این چهار عمل داریم:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} &\xrightarrow{\varepsilon} \begin{bmatrix} x + \varepsilon_x \\ y + \varepsilon_y \end{bmatrix} \xrightarrow{R(\varepsilon_z\mathbf{k})} \begin{bmatrix} (x + \varepsilon_x) - (y + \varepsilon_y)\varepsilon_z \\ (x + \varepsilon_x)\varepsilon_z + (y + \varepsilon_y) \end{bmatrix} \\ &\xrightarrow{-\varepsilon} \begin{bmatrix} x - (y + \varepsilon_y)\varepsilon_z \\ (x + \varepsilon_x)\varepsilon_z + y \end{bmatrix} \xrightarrow{R(-\varepsilon_z\mathbf{k})} \begin{bmatrix} x - \varepsilon_y\varepsilon_z \\ y + \varepsilon_x\varepsilon_z \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (23-2-12)$$

یعنی اینکه اثر خالص، انتقالی به اندازه $\hat{J} \varepsilon_x \varepsilon_z + \hat{I} \varepsilon_y \varepsilon_z - \varepsilon_x \varepsilon_z$ است.^۱ در بالا از جملات شامل ε_x^2 ، ε_y^2 و ε_z^2 و بالاتر چشم‌پوشی کرده‌ایم. اما جملات $\varepsilon_x \varepsilon_z$ و $\varepsilon_y \varepsilon_z$ را نگه می‌داریم چون شامل منشأ اولیه عدم جابه‌جاپذیری هستند. توجه کنید که اگر چه اینها جملات مرتبه دوم هستند ولی در تقریب ما به‌طور کامل مشخص می‌شوند یعنی به‌وسیله جملات مرتبه دوم که نادیده گرفته‌ایم متأثر نمی‌شوند. معادله (۱۲-۲-۲۳)، روی عملگرهای کوانتومی قید زیر را اعمال می‌کند:

$$U[R(-\varepsilon_z \mathbf{k})]T(-\varepsilon)U[R(\varepsilon_z \mathbf{k})]T(\varepsilon) = T(-\varepsilon_y \varepsilon_z \hat{i} + \varepsilon_x \varepsilon_z \hat{j}) \quad (24-2-12)$$

یا

$$\left(I + \frac{i}{\hbar} \varepsilon_z L_z \right) \left[I + \frac{i}{\hbar} (\varepsilon_x P_x + \varepsilon_y P_y) \right] \left(I - \frac{i}{\hbar} \varepsilon_z L_z \right) \left[I - \frac{i}{\hbar} (\varepsilon_x P_x + \varepsilon_y P_y) \right] \quad (25-2-12)$$

$$= I + \frac{i}{\hbar} \varepsilon_y \varepsilon_z P_x - \frac{i}{\hbar} \varepsilon_x \varepsilon_z P_y$$

با جورسازی ضرایب (که شما انجام می‌دهید) می‌توانیم قیده‌های زیر را به‌دست آوریم:

$$[P_x, L_z] = -i\hbar P_y$$

$$[P_y, L_z] = i\hbar P_x$$

که به‌وسیله مولدها [معادله (۱۲-۲-۱۷)] به‌درستی برآورده می‌شوند.

بنابراین عملگرهای ما با موفقیت از این آزمون عبور می‌کنند. اما آزمون‌های زیاد دیگری هم امکان دارند. در مورد ضرایب جملاتی نظیر $\varepsilon_x \varepsilon_z^2$ چگونه؟ یا به‌طور کلی تر هر مورد چرخش‌های متناهی چگونه؟ در مورد تست‌هایی غیر از ضرب چهارتایی، نظیر تستی شامل ۱۴ انتقال و ۶ چرخش به‌هم پیچیده چگونه؟ یک جواب برای همه این سوالات وجود دارد: نیازی به انجام تست‌های بیشتر نیست. اگر چه توضیح اینکه چرا اینگونه است خارج از حوزه این کتاب است اما توضیح اینکه چه زمانی وقت آن است که تست کردن را متوقف کنیم سخت نیست. می‌توانیم تست‌ها را وقتی متوقف کنیم که همه جابه‌جاگرهای ممکن بین مولدها ملاحظه و بررسی شده باشند. در مورد فعلی، با داشتن عملگرهای P_x و P_y و L_z ، جابه‌جاگرهای ممکن $[P_x, L_z]$ ، $[P_y, L_z]$ و $[P_x, P_y]$ هستند. ما تست کردن دو تای اول را تمام کرده‌ایم. اگر چه تست سومی به‌طور ضمنی در گذشته صورت گرفته است ولی یک بار دیگر صریحاً آنرا انجام می‌دهیم. اگر قانون ترکیب

$$\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \xrightarrow{\varepsilon_x \hat{i}} \begin{bmatrix} x + \varepsilon_x \\ y \end{bmatrix} \xrightarrow{\varepsilon_y \hat{j}} \begin{bmatrix} x + \varepsilon_x \\ y + \varepsilon_y \end{bmatrix} \xrightarrow{-\varepsilon_x \hat{i}} \begin{bmatrix} x \\ y + \varepsilon_y \end{bmatrix} \xrightarrow{-\varepsilon_y \hat{j}} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \quad (26-2-12)$$

۱- توجه کنید که اگر چرخش‌ها و انتقالات جابه‌جا می‌شدند، ضرب چهارتایی باید برابر \hat{I} می‌شد، همان‌طور که با ترتیب مجدد ضرایب، به‌طوری که دو چرخش مخالف و دو انتقال مخالف یکدیگر را خنثی کنند، می‌توان دید. انحراف از این نتیجه \hat{I} معیاری از غیرجابه‌جاپذیری است. با داشتن دو عمل تقارنی که جابه‌جا نمی‌شوند حاصلضرب چهارتایی توصیف خوبی از غیرجابه‌جاپذیری بودن آنها خواهد بود. همان‌طور که خواهیم دید این توصیف کامل است.

را به قید عملگری

$$T(-\varepsilon_y \mathbf{j})T(-\varepsilon_x \mathbf{i})T(\varepsilon_y \mathbf{j})T(\varepsilon_x \mathbf{i}) = I \quad (12-2-27)$$

تبدیل کنیم، نتیجه می گیریم که

$$[P_x, P_y] = 0$$

که البته به وسیله عملگرهای P_x و P_y برآورده می شود [اگر چه قبل از این، حاصلضرب چهارتایی، معادله (12-2-27)، را در نظر ننگرفتیم، ثابت کردیم که شناسه های عملگرهای T طبق قوانین آنالیز برداری ترکیب می شوند. معادله (12-2-26) حالت خاصی است که جابه جاپذیری P_x و P_y را نتیجه می دهد].

وقتی می گوئیم هیچ آزمون دیگری نیست که انجام شود منظورمان این است که:

(۱) - هر آزمون سازگاری فقط به رابطه دیگری بین جابه جاگرهای مولدها تقلیل پیدا خواهد کرد.

(۲) - این رابطه به طور خودکار برآورده خواهد شد اگر مولدها از آزمون هایی که اجرای آنها را به پایان رسانده ایم عبور کنند.

تمرین زیر می تواند این نکته را روشن کند.

تمرین ۱۲-۲-۴: هم ارز معادله (12-2-23) را با نگاه داشتن جملات مرتبه $\varepsilon_x \varepsilon_z^2$ مجدداً به دست آورید (می توانید فرض کنید $\varepsilon_y = 0$ است) از این اطلاعات استفاده کرده و معادله (12-2-24) را تا مرتبه $\varepsilon_x \varepsilon_z^2$ بازنویسی کنید. با برابر قرار دادن ضرایب این جمله، قید

$$-2L_z P_x L_z + P_x L_z^2 + L_z^2 P_x = \hbar^2 P_x$$

را به دست آورید. به نظر می رسد که این با گفته (۱) در بالا مغایرت دارد اما واقعاً این طور نیست، با توجه به اتحاد

$$-2\Lambda\Omega\Lambda + \Omega\Lambda^2 + \Lambda^2\Omega \equiv [\Lambda, [\Lambda, \Omega]]$$

ثابت کنید که قید جدید که از جمله $\varepsilon_x \varepsilon_z^2$ ناشی می شود با داشتن روابط جابه جایی بین P_x و P_y و L_z برآورده می شود.

عملگرهای برداری

اگر V_x و V_y تحت یک تبدیل پسپو تولید شده به وسیله $\mathbf{V} = V_x \hat{i} + V_y \hat{j}$ را یک عملگر برداری می نامیم اگر V_x و V_y تحت یک تبدیل پسپو تولید شده به وسیله $U[R]$ به صورت مولفه های یک بردار تبدیل شوند:

$$U^\dagger[R] V_i U[R] = \sum_j R_{ij} V_j$$

که R_{ij} ماتریس چرخش 2×2 است که در معادله (12-2-1) ظاهر می شود. مثال هایی از V ، $\mathbf{P} = P_x \hat{i} + P_y \hat{j}$ و $\mathbf{R} = X_x \hat{i} + Y_y \hat{j}$ هستند [معادلات (12-2-14) و (12-2-15) را ببینید]. به

شخصیت دو گانه یک عملگر برداری نظیر P توجه کنید: از یک طرف مولفه‌های آن عملگرهای فضای هیلبرت هستند و از طرف دیگر به صورت یک بردار $V^2(R)$ تبدیل می‌شود. همین تعریف عملگر برداری در سه بعد هم برقرار است با این تفاوت که R_{ij} ماتریسی 3×3 است.

۱۲-۳- مسئله ویژه مقدری L_z

دیده‌ایم که در یک مسئله ناوردای چرخشی، H و L_z دارای پایه‌ای مشترک هستند. برای بهره‌گیری از این حقیقت می‌بایست ابتدا ویژه توابع L_z را بیابیم. با نوشتن

$$L_z |l_z\rangle = l_z |l_z\rangle \quad (12-3-1)$$

در پایه مختصه شروع می‌کنیم:

$$-i\hbar \frac{\partial \psi_{l_z}(\rho, \phi)}{\partial \phi} = l_z \psi_{l_z}(\rho, \phi) \quad (12-3-2)$$

جواب این معادله عبارتست از

$$\psi_{l_z}(\rho, \phi) = R(\rho) e^{il_z \phi / \hbar} \quad (12-3-3)$$

که $R(\rho)$ تابعی دلخواه و قابل بهنجارش نسبت به $\int_0^\infty \rho d\rho$ است.^۱ مطالب بیشتری را در مورد $R(\rho)$ برای گفتن خواهیم داشت. اما ابتدا توجه کنید که L_z اختیاری به نظر می‌رسد: L_z می‌تواند حتی مختلط باشد چون ϕ فقط از 0 تا 2π تغییر می‌کند (این را با ویژه توابع $e^{ipx/\hbar}$ تکانه خطی مقایسه کنید که در آن توانستیم ثابت کنیم که p باید حقیقی باشد تا وقتی $|x| \rightarrow \infty$ میل می‌کند $|\psi|$ کراندار باشد). اینکه ویژه مقادیر مختلط وارد جواب می‌شوند اشاره به این دارد که ما از قید هرمیتی بودن چشم می‌پوشیم. اکنون آنرا (هرمیتی بودن) اعمال می‌کنیم. شرط

$$\langle \psi_1 | L_z | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | L_z | \psi_1 \rangle^* \quad (12-3-4)$$

در پایه مختصه به صورت

$$\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \psi_1^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \psi_2 \rho d\rho d\phi = \left[\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \psi_2^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \psi_1 \rho d\rho d\phi \right]^* \quad (12-3-5)$$

می‌شود. اگر قرار باشد این خواسته برای همه ψ_1 ها و ψ_2 ها برآورده شود می‌توان نشان داد که (با انتگرال جزء به جزء) این شرط کافیت در صورتی که هر ψ از

۱- این اطمینان خواهد داد که ψ قابل بهنجارش نسبت به $\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \rho d\rho d\phi$ است.

$$\psi(\rho, 0) = \psi(\rho, 2\pi) \quad (۹-۳-۱۲)$$

پیروی کند. اگر این قید را روی ویژه توابع L_z اعمال کنیم، معادله (۱۲-۳-۳)، نتیجه می شود که

$$1 = e^{2\pi i l_z / \hbar} \quad (۷-۳-۱۲)$$

این وادار می کند که l_z نه صرفاً حقیقی بلکه مضرب صحیحی از \hbar هم باشد:

$$l_z = m\hbar, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (۸-۳-۱۲)$$

m عدد کوانتومی مغناطیسی نامیده می شود. توجه کنید که $l_z = m\hbar$ بیان می کند که ψ تابعی تک - مقدار از ϕ است (با این حال تمرین ۱۲-۳-۲ را ببینید).

تمرین ۱۲-۳-۱: مراحل بین معادله (۱۲-۳-۵) تا (۱۲-۳-۶) را مشخص کنید.

تمرین ۱۲-۳-۲: تلاش کنید تا قید روی l_z را از زاویه ای دیگر به دست آورید. برهنه دو ویژه حالت مجاز l_z را در نظر بگیرید

$$\psi(\rho, \phi) = A(\rho) e^{i\phi l_z / \hbar} + B(\rho) e^{i\phi l'_z / \hbar}$$

با درخواست اینکه با چرخش 2π به حالت فیزیکی یکسانی برسیم (نه لزوماً بردار حالت یکسان) نشان دهید که $l_z - l'_z = m\hbar$ ، که m عددی صحیح است. بر اساس اصول تقارن استدلال کنید که مقادیر مجاز m می بایست حول صفر متقارن باشند، نشان دهید که این مقادیر یا صحیح اند یا نیمه صحیح. برای محدود کردن m به اعداد صحیح، باید مضافاً درخواست کنیم که ψ تک مقدار باشد یا $l_z = 0$ ممکن شود.

اکنون به تابع دلخواه $R(\rho)$ برمی گردیم که ویژه توابع L_z را همراهی می کند. حضور آن اشاره می کند که ویژه مقدار $l_z = m\hbar$ مربوط (محدود) به یک حالت یگانه در فضای هیلبرت نبوده بلکه فقط به یک زیر فضای V_m مربوط است. بعد این فضا بی نهایت است، زیرا فضای همه توابع قابل بهنجارش R ، بی نهایت بعدی است. کار طبیعی که در اینجا باید انجام دهیم معرفی عملگری است که با L_z جابه جا شود و ویژه توابع همزمان آن با L_z یک پایه منحصر به فرد در هر V_m تشکیل دهند. به زودی خواهیم دید که هامیلتونی در یک مسئله ناوردای چرخشی همین کار را انجام می دهد. از نظر فیزیکی این بدین معنی است که یک حالت نمی تواند فقط به وسیله تکانه زاویه ای اش (که فقط قسمت زاویه ای تابع موج را مشخص می کند) به شکلی یگانه مشخص شود بلکه در یک مسئله ناوردای چرخشی می تواند به وسیله انرژی و تکانه زاویه ای اش مشخص شود.

با معرفی توابع

$$\Phi_m(\phi) = (2\pi)^{-1/2} e^{im\phi} \quad (۹-۳-۱۲)$$

که در صورت موجود نبودن مختصه ρ ، ویژه توابع غیر تبهگن L_z می بودند این موضوع بهتر مشخص می شود. این توابع تابع شرط راست هنجاری

$$\int_0^{2\pi} \Phi_m^*(\phi) \Phi_{m'}(\phi) d\phi = \delta_{mm'} \quad (۱۰-۳-۱۲)$$

هستند. دیده خواهد که این توابع نقشی مهم در مسائل دارای ناوردایی چرخشی ایفا می‌کنند.
تمرین ۱۲-۳-۳: ذره‌ای به وسیله تابع موج زیر توصیف می‌شود

$$\psi(\rho, \phi) = A e^{-\rho^2/2\Delta^2} \cos^2 \phi$$

نشان دهید (با نوشتن $\cos^2 \phi$ برحسب Φ_m) که

$$P(l_z = 0) = 2/3$$

$$P(l_z = 2\hbar) = 1/6$$

$$P(l_z = -2\hbar) = 1/6$$

(راهنمایی: ثابت کنید که قسمت شعاعی $e^{-\rho^2/2\Delta^2}$ در اینجا بی‌تأثیر است).

تمرین ۱۲-۳-۴: ذره‌ای به وسیله تابع موج

$$\psi(\rho, \phi) = A e^{-\rho^2/2\Delta^2} \left(\frac{\rho}{\Delta} \cos \phi + \sin \phi \right)$$

توصیف می‌شود، نشان دهید که

$$P(l_z = \hbar) = P(l_z = -\hbar) = \frac{1}{2}$$

جواب‌های مسائل ناوردای چرخشی

مسئله‌ای را در نظر بگیرید که در آن $V(\rho, \phi) = V(\rho)$ است. معادله ویژه مقادری برای H عبارتست از:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + V(\rho) \right] \psi_E(\rho, \phi) = E \psi_E(\rho, \phi) \quad (11-3-12)$$

(نماد μ را برای جرم به کار می‌بریم چون m برای نشان دادن عدد کوانتومی مغناطیسی به کار خواهد رفت)، از آنجا که در این مسئله $[H, L_z] = 0$ است، به دنبال ویژه توابع همزمان H و L_z می‌گردیم. دیده‌ایم که عمومی‌ترین ویژه تابع L_z با ویژه مقدار $m\hbar$ به شکل

$$\psi_m(\rho, \phi) = R(\rho)(2\pi)^{-1/2} e^{im\phi} = R(\rho)\Phi_m(\phi)$$

است که $R(\rho)$ نامشخص است. در اینجا، R با این شرط که

$$\psi_{Em}(\rho, \phi) = R_{Em}(\rho)\Phi_m(\phi) \quad (12-3-12)$$

ویژه تابعی از H هم، با ویژه مقدار E ، باشد تعیین می‌شود، یعنی اینکه ψ_{Em} معادله (11-3-12) را برآورده کند. با قرار دادن شکل فوق در معادله (11-3-12) به معادله شعاعی می‌رسیم که $R_{Em}(\rho)$ و مقادیر مجاز E را مشخص می‌کند:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{m^2}{\rho^2} \right) + V(\rho) \right] R_{Em}(\rho) = E R_{Em}(\rho) \quad (13-3-12)$$

با تغییر دادن پتانسیل، فقط قسمت شعاعی تابع موج، R ، تغییر می کند؛ قسمت زاویه‌ای Φ_m بدون تغییر می ماند. لذا توابع $\Phi_m(\phi)$ ، که با این فرض به دست آمدند که ρ وجود ندارد، قسمت زاویه‌ای تابع موج را در مسئله ویژه مقدراری هر هامیلتونی ناوردای چرخشی تشکیل می دهند.

تمرین ۱۲-۳-۵: توجه کنید که به نظر می رسد تکانه زاویه‌ای در معادله (۱۲-۳-۱۳) یک پتانسیل دافع (دافعه) تولید می کند. گرادیان آنرا محاسبه کرده و آنرا به عنوان نیروی گریز از مرکز مشخص کنید.

تمرین ۱۲-۳-۶: ذره‌ای به جرم μ را در نظر بگیرید که بمقید به حرکت روی دایره‌ای به شعاع a است. نشان دهید که $H = L_z^2 / 2\mu a^2$ است. مسئله ویژه مقدراری H را حل کرده و تبهگنی را توضیح دهید.

تمرین ۱۲-۳-۷: (نوسانگر همسانگرد). هامیلتونی

$$H = \frac{P_x^2 + P_y^2}{2\mu} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 (X^2 + Y^2)$$

را در نظر بگیرید.

۱- خود را متقاعد کنید که $[H, L_z] = 0$ بوده و مسئله ویژه مقدراری H را به معادله دیفرانسیل شعاعی برای $R_{Em}(\rho)$ تقلیل دهید.

۲- معادله را در وضعیت $\rho \rightarrow 0$ بررسی کرده و نشان دهید که

$$R_{Em}(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \rho^{|m|}$$

۳- همین طور نشان دهید که صرف نظر از توان‌های ρ ،

$$R_{Em}(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} e^{-\mu\omega\rho^2/2\hbar}$$

بنابراین فرض کنید که $R_{Em}(\rho) = \rho^{|m|} e^{-\mu\omega\rho^2/2\hbar} U_{Em}(\rho)$

۴- از متغیرهای بی بعد $\varepsilon = E/\hbar\omega$ و $y = (\mu\omega/\hbar)^{1/2} \rho$ استفاده کنید.

۵- معادله R را به معادله‌ای برای U تبدیل کنید (پیشنهاد می کنیم در دو مرحله پیش بروید: $R = y^{|m|}\omega$ و

$$\omega = e^{-y^2/2} U$$

$$U'' + \left[\left(\frac{2|m|+1}{y} \right) - 2y \right] U' + (2\varepsilon - 2|m| - 2) U = 0$$

۶- ثابت کنید که یک سری توانی برای U به شکل

$$U(y) = \sum_{r=0}^{\infty} C_r y^r$$

به یک رابطه بازگشتی دو جمله‌ای منجر خواهد شد.

۷- رابطه بین C_r و C_{r+2} را بیابید. نشان دهید که اگر بخواهد رفتار $y \rightarrow \infty$ جواب مورد قبول باشد این

سری باید در یک r متناهی قطع شود. نشان دهید که $\varepsilon = r + |m| + 1$ منجر به قطع بعد از r جمله می شود.

حال نشان دهید که r لزوماً زوج است یعنی $r = 2k$ (نشان دهید که اگر r فرد باشد رفتار R در $\rho \rightarrow 0$ ،

$\rho^{|m|}$ نمی شود). بنابراین نهایتاً باید به

$$E = (2k + |m| + 1)\hbar\omega, \quad k=0, 1, 2, \dots$$

برسید. با تعریف $|m| = 2k + n$,

$$E_n = (n+1)\hbar\omega$$

۸- برای یک n معلوم مقادیر مجاز $|m|$ کدامند؟ با مشخص شدن این نشان دهید که برای یک n معین تبهگنی $n+1$ است. این را با آنچه در مختصات دکارتی به دست آوردید مقایسه کنید (تمرین ۱۰-۲-۲).

۹- همه ویژه توابع بهنجار شده متناظر با $n=0, 1$ را بنویسید.

۱۰- ثابت کنید که تابع $n=0$ می‌بایست با متناظر خودش که در مختصات دکارتی به دست آمد برابر باشد. نشان دهید که دو جواب $n=2$ ترکیبات خطی نظایر خودشان در مختصات دکارتی هستند. ثابت کنید که پارته حالت‌ها $(-1)^n$ است که در مختصات دکارتی هم دیدیم.

تمرین ۱۲-۳-۸: ذره‌ای با بار q را در پتانسیل برداری

$$\mathbf{A} = \frac{B}{2}(-y\mathbf{i} + x\mathbf{j})$$

در نظر بگیرید.

الف - نشان دهید که میدان مغناطیسی $\mathbf{B} = B\hat{k}$ است.

ب- نشان دهید که یک ذره کلاسیکی در این پتانسیل با فرکانس زاویه‌ای $\omega_0 = qB/\mu c$ روی دایره‌هایی حرکت خواهد کرد.

ج- هامیلتونی را برای مسئله کوانتومی متناظر در نظر بگیرید:

$$H = \frac{[P_x + qYB/2c]^2}{2\mu} + \frac{[P_y - qXB/2c]^2}{2\mu}$$

نشان دهید که $Q = (cP_x + qYB/2)/qB$ و $P = (P_y - qXB/2c)$ کانونیک هستند. H را برحسب P و Q نوشته و نشان دهید که ترازهای مجاز $E = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0$ هستند.

د- H را برحسب متغیرهای اولیه بسط داده و نشان دهید که

$$H = H\left(\frac{\omega_0}{2}, \mu\right) - \frac{\omega_0}{2}L_z$$

که در آن $H(\omega_0/2, \mu)$ هامیلتونی یک نوسانگر هماهنگ دو بعدی همسانگرد به جرم μ و فرکانس $\omega_0/2$ است. ثابت کنید که همان پایه‌ای که $H(\omega_0/2, \mu)$ را قطری می‌کند H را هم قطری خواهد کرد. با

تکیه بر این پایه نشان دهید که ترازهای مجاز برای H عبارتند از $E = (k + \frac{1}{2}|m| - \frac{1}{2}m + \frac{1}{2})\hbar\omega_0$ که k عددی صحیح بوده و m تکانه زاویه‌ای است. خود را متقاعد کنید که از این فرمول به همان ترازهایی می‌رسید

که از فرمول قبلی می‌رسید $[E = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0]$.

۱۲-۴- تکانه زاویه‌ای در سه بعد

روشن است که وقتی از دو بعد به سه بعد می‌رویم، عملگر L_z دو عملگر L_x و L_y را هم با خود همراه می‌کند که چرخش‌های بی‌نهایت کوچک به ترتیب حول محورهای x و y تولید می‌کنند. بنابراین داریم:

$$L_x = YP_z - ZP_y \quad (۱۲-۴-۱ الف)$$

$$L_y = ZP_x - XP_z \quad (۱۲-۴-۱ ب)$$

$$L_z = XP_y - YP_x \quad (۱۲-۴-۱ ج)$$

طبق معمول، اینها را در معرض تست سازگاری قرار می‌دهیم. می‌تواند ثابت شود (تمرین ۱۲-۴-۲) که اگر یک نقطه را در فضای سه بعدی انتخاب کرده و در معرض چرخش‌های $R(\varepsilon_x \hat{i})$ ، $R(\varepsilon_y \hat{j})$ ، $R(-\varepsilon_x \hat{i})$ و نهایتاً $R(-\varepsilon_y \hat{j})$ قرار دهیم نهایتاً به اندازه $\varepsilon_x \varepsilon_y \hat{k}$ می‌چرخد. به عبارتی دیگر

$$R(-\varepsilon_y \hat{j})R(-\varepsilon_x \hat{i})R(\varepsilon_y \hat{j})R(\varepsilon_x \hat{i}) = R(-\varepsilon_x \varepsilon_y \hat{k}) \quad (۱۲-۴-۲)$$

نتیجه اینکه عملگرهای کوانتومی $U[R]$ می‌بایست رابطه زیر را برآورده کنند

$$U[R(-\varepsilon_y \hat{j})]U[R(-\varepsilon_x \hat{i})]U[R(\varepsilon_y \hat{j})]U[R(\varepsilon_x \hat{i})] = U[R(-\varepsilon_x \varepsilon_y \hat{k})] \quad (۱۲-۴-۳)$$

اگر هر U را تا مرتبه ε نوشته و ضرایب $\varepsilon_x \varepsilon_y$ را با هم متحد قرار دهیم خواهیم دید که

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z \quad (۱۲-۴-۴ الف)$$

با انجام دو تست دیگر شامل $\varepsilon_y \varepsilon_z$ و $\varepsilon_x \varepsilon_z$ می‌توانیم قیود زیر را نتیجه بگیریم

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x \quad (۱۲-۴-۴ ب)$$

$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y \quad (۱۲-۴-۴ ج)$$

می‌توانید ثابت کنید که عملگرها در معادله (۱۲-۴-۱) این قیود را برآورده می‌کنند. بنابراین تضمین می‌شود که آنها عملگرهای چرخش متناهی تولید کنند که از قانون صحیح ترکیب پیروی می‌کنند. سه رابطه فوق می‌توانند به طور فشرده به صورت معادله برداری نوشته شوند

$$\mathbf{L} \times \mathbf{L} = i\hbar \mathbf{L} \quad (۱۲-۴-۵)$$

شیوه دیگر نوشتن روابط جابه‌جایی به شکل زیر است

$$[L_i, L_j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} L_k \quad (6-4-12)$$

در این معادله i و j از ۱ تا ۳ تغییر می‌کنند و L_1, L_2 و L_3 به ترتیب L_x, L_y و L_z هستند^۱ و ε_{ijk} ها مولفه‌های یک تانسور پادمتقارن مرتبه ۳ با خواص زیر هستند:

(۱) - وقتی دو اندیس با هم عوض می‌شوند آنها تغییر علامت می‌دهند. در نتیجه هیچ دو اندیسی نمی‌توانند برابر باشند.

$$\varepsilon_{123} = 1 \quad (2)$$

این، همه مولفه‌های دیگر را مشخص می‌کند. برای مثال،

$$\varepsilon_{132} = -1, \quad \varepsilon_{312} = (-1)(-1) = +1 \quad (7-4-12)$$

و قس علی هذا. کوتاه اینک، ε_{ijk} برای هر جایگشت دوره‌ای اندیس‌ها در ε_{123} برابر +۱ بوده و در غیر این صورت -۱ است (رابطه

$$(8-4-12)$$

$$\mathbf{c} = \mathbf{a} \times \mathbf{b}$$

بین سه بردار از $V^3(R)$ می‌تواند به شکل مولفه‌ای

$$c_i = \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} a_j b_k \quad (9-4-12)$$

نوشته شود. البته $\mathbf{a} \times \mathbf{a}$ صفر است اگر \mathbf{a} برداری باشد که مولفه‌هایش اعداد c باشند، و غیر صفر است اگر عملگر \mathbf{L} نظیر \mathbf{L} باشد.

تمرین ۱۲-۴-۱: الف- ثابت کنید که معادلات (۱۲-۴-۹) و (۱۲-۴-۸) هم ارزند. از تعریف ε_{ijk} استفاده کنید. ب- فرض کنید U_1 و U_2 و U_3 سه ویژه تابع انرژی یک ذره منفرد در یک پتانسیل باشند. تابع موج $\psi_A(x_1, x_2, x_3)$ سه فرمیون را در این پتانسیل تشکیل دهید، یکی از فرمیون‌ها در U_1 ، یکی در U_2 و یکی در U_3 است. از تانسور ε_{ijk} کمک بگیرید.

تمرین ۱۲-۴-۲: الف- با تشکیل ماتریس‌های 3×3 متناظر با $R(\varepsilon_x \hat{i})$ و $R(\varepsilon_y \hat{j})$ معادله (۱۲-۴-۲) را تا مرتبه ε ثابت کنید.

ب- مراحل منتهی به معادله (۱۲-۴-۴-الف) از معادله (۱۲-۴-۳) را بنویسید.

ج- ثابت کنید که L_x و L_y تعریف شده در معادله (۱۲-۴-۱)، معادله (۱۲-۴-۴-الف) را برآورده می‌کنند. اثبات برای جابه‌جاگرهای دیگر با جایگشت دوره‌ای به دست می‌آید.

مربع عملگر تکانه زاویه‌ای کل را تعریف می‌کنیم:

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \quad (10-4-12)$$

۱- غالباً اندیس‌ها را به جای x و y و z روی ۱، ۲ و ۳ تغییر می‌دهیم.

می تواند ثابت شود که (توسط شما)

$$[L^2, L_i] = 0, \quad i = x, y, \text{ or } z \quad (11-4-12)$$

عملگرهای چرخش متناهی. چرخش ها حول یک محور معین با هم جابه جا می شوند. بنابراین یک چرخش متناهی می تواند به صورت یک سری چرخش های بی نهایت کوچک حول همان محور تلقی شود. چه عملگری است که به اندازه زاویه θ یعنی به اندازه θ حول یک محور موازی با $\hat{\theta}$ می چرخاند؟ اگر $\theta = \theta_x \hat{i}$ باشد، واضح است که

$$U[R(\theta_x \hat{i})] = e^{-i\theta_x L_x / \hbar}$$

برای θ در امتداد بردارهای \hat{j} و \hat{k} هم همین طور است. اگر θ دارای جهتی دلخواه باشد چطور؟ حدس می زنیم که $L_{\hat{\theta}} \equiv \hat{\theta} \cdot \mathbf{L}$ (که $\hat{\theta} = \theta / \theta$) مولد چرخش های بی نهایت کوچک حول آن محور است و

$$U[R(\theta)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(I - \frac{i}{\hbar} \frac{\theta}{N} \hat{\theta} \cdot \mathbf{L} \right)^N = e^{-i\theta \hat{\theta} \cdot \mathbf{L} / \hbar} \quad (12-4-12)$$

$$= e^{-i\theta \cdot \mathbf{L} / \hbar}$$

حدس ما در تمرین زیر ثابت می شود.

تمرین ۱۲-۴-۳: می خواهیم نشان دهیم که $\hat{\theta} \cdot \mathbf{L}$ مولد چرخش ها حول محور موازی با $\hat{\theta}$ است. فرض کنید $\delta\theta$ چرخش بی نهایت کوچک موازی با θ باشد. الف- نشان دهید که وقتی یک بردار \mathbf{r} به اندازه $\delta\theta$ چرخانده می شود، به $\mathbf{r} + \delta\theta \times \mathbf{r}$ تغییر می کند (اگر با $\delta\theta \perp \mathbf{r}$ شروع کرده و سپس تعمیم دهید ممکن است کمک کننده باشد). ب- بنابراین درخواست می کنیم که

$$\psi(\mathbf{r}) \xrightarrow{U[R(\delta\theta)]} \psi(\mathbf{r} - \delta\theta \times \mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) - (\delta\theta \times \mathbf{r}) \cdot \nabla \psi$$

با مقایسه با $U[R(\delta\theta)] = I - (i \delta\theta / \hbar) L_{\hat{\theta}}$ نشان دهید که $L_{\hat{\theta}} \equiv \hat{\theta} \cdot \mathbf{L}$

تمرین ۱۲-۴-۴: به یاد آورید که \mathbf{V} یک عملگر برداری است، اگر مولفه های آن V_i به صورت زیر تبدیل یابند

$$U^\dagger[R] V_i U[R] = \sum_j R_{ij} V_j \quad (13-4-12)$$

الف- برای یک چرخش بی نهایت کوچک $\delta\theta$ ، بر پایه تمرین قبل نشان دهید که

$$\sum_j R_{ij} V_j = V_i + (\delta\theta \times \mathbf{V})_i = V_i + \sum_j \sum_k \epsilon_{ijk} (\delta\theta)_j V_k$$

ب- با قرار دادن $U[R] = 1 - (i/\hbar) \delta\theta \cdot \mathbf{L}$ در سمت چپ معادله (۱۲-۴-۱۳) نتیجه بگیرید که

$$[V_i, L_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} V_k \quad (12-4-14)$$

این به خوبی تعریف یک عملگر برداری، معادله (۱۲-۴-۱۳)، است با قرار دادن $\mathbf{V} = \mathbf{L}$ می‌توانیم قواعد جابه‌جایی بین L ها را به دست آوریم.
اگر هامیلتونی تحت چرخش‌های دلخواه ناوردا باشد،

$$U^\dagger[R]HU[R] = H \quad (12-4-15)$$

نتیجه می‌شود که (با در نظر گرفتن چرخش‌های بی‌نهایت کوچک حول محورهای x ، y و z)،

$$[H, L_i] = 0 \quad (12-4-16)$$

است و از آن

$$[H, L^2] = 0 \quad (12-4-17)$$

لذا L^2 و هر سه مولفه \mathbf{L} پایسته هستند. اما نمی‌توان گفت که پایه‌ای مشترک برای H و هر سه L وجود دارد. دلیل این است که L ها با یکدیگر جابه‌جا نمی‌شوند. بنابراین بهترین کاری که می‌توان انجام داد یافتن پایه‌ای مشترک برای H ، L^2 و یکی از L هاست که معمولاً L_z انتخاب می‌شود.
اکنون مسئله ویژه مقداری عملگرهای جابه‌جا شونده L^2 و L_z را بررسی می‌کنیم. وقتی این مسئله حل شود، به مسئله ویژه مقداری H ، L^2 و L_z برخورد خواهیم گشت.

۱۲-۵- مسئله ویژه مقداری L_z و L^2

تشابه نزدیکی بین رویکرد ما به این مسئله و مسئله نوسانگر هماهنگ وجود دارد. به یاد آورید که در آن مورد ما (۱)- مسئله ویژه مقداری H را در پایه مختصه حل کردیم؛ (۲)- مسئله را مستقیماً در پایه انرژی، با استفاده از عملگرهای a و a^+ ، قواعد جابه‌جایی و مثبت بودن H حل کردیم؛ (۳)- تابع موج مختصه (مکان) $\psi_n(y)$ را با داشتن نتایج قسمت (۲) با ترفند زیر به دست آوردیم: ما

$$a|0\rangle = 0$$

را در پایه مختصه به صورت

$$\left(y + \frac{\partial}{\partial y}\right)\psi_0(y) = 0$$

نوشتیم که بلافاصله صرف‌نظر از بهنجارش که می‌توانست به راحتی مشخص شود به $\psi_0(y) \approx e^{-y^2/2}$ رسیدیم.

با معلوم شدن ویژه تابع بهنجار شده $\psi_0(y)$ با کاربرد عملگر (مشتق) $(y - \partial/\partial y)^n / (2^n n!)^{\frac{1}{2}} \rightarrow (a^+)^n / (n!)^{\frac{1}{2}}$ به $\psi_n(y)$ رسیدیم.

در اینجا قسمت (۱) را که یک زور آزمایشی دیگر با معادلات دیفرانسیل است و خیلی متمر ثمر نیست، حذف می‌کنیم.

اکنون قسمت (۲) را در نظر می‌گیریم. این قسمت هم تشابه‌های زیادی با قسمت (۲) مسئله نوسانگر دارد.^۱ با فرض اینکه یک پایه مشترک $\{|\alpha, \beta\rangle\}$ برای L_z و L^2 وجود دارد شروع می‌کنیم:

$$L^2|\alpha\beta\rangle = \alpha|\alpha\beta\rangle \quad (1-5-12)$$

$$L_z|\alpha\beta\rangle = \beta|\alpha\beta\rangle \quad (2-5-12)$$

عملگرهای بالا برنده و پایین برنده را به صورت

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y \quad (3-5-12)$$

تعریف می‌کنیم که روابط

$$[L_z, L_{\pm}] = \pm \hbar L_{\pm} \quad (4-5-12)$$

و البته (چون L^2 با L_x و L_y جابه‌جا می‌شود)

$$[L^2, L_{\pm}] = 0 \quad (5-5-12)$$

را برآورده می‌کنند. معادلات (۴-۵-۱۲) و (۵-۵-۱۲) اشاره می‌کنند که L_{\pm} ویژه مقدار L_z را به اندازه \hbar بالا/پایین می‌برد در حالی که ویژه مقدار L^2 را تغییر نمی‌دهد. برای مثال،

$$\begin{aligned} L_z(L_+|\alpha\beta\rangle) &= (L_z L_+ + \hbar L_+)|\alpha\beta\rangle \\ &= (L_z + \hbar)L_+|\alpha\beta\rangle \\ &= (\beta + \hbar)(L_+|\alpha\beta\rangle) \end{aligned} \quad (6-5-12)$$

و

$$L^2 L_+|\alpha\beta\rangle = L_+ L^2|\alpha\beta\rangle = \alpha L_+|\alpha\beta\rangle \quad (7-5-12)$$

از معادلات (۶-۵-۱۲) و (۷-۵-۱۲) واضح است که $L_+|\alpha\beta\rangle$ متناسب با ویژه کت بهنجار شده $|\alpha, \beta + \hbar\rangle$ است:

$$L_+|\alpha\beta\rangle = C_+(\alpha, \beta)|\alpha, \beta + \hbar\rangle \quad (الف-۸-۵-۱۲)$$

همین طور می‌توان نشان داد که

$$L_-|\alpha\beta\rangle = C_-(\alpha, \beta)|\alpha, \beta - \hbar\rangle \quad (12-5-8)$$

وجود L_{\pm} بیان می‌کند که با معلوم بودن یک ویژه حالت $|\alpha\beta\rangle$ ، ویژه حالت‌های $|\alpha, \beta+1\rangle$ و $|\alpha, \beta+2\rangle$ و ... و $|\alpha, \beta-1\rangle$ و $|\alpha, \beta-2\rangle$ و ... هم موجودند. این، به وضوح علامت یک درد سر است چون شهود فیزیکی به ما می‌گوید که مولفه z تکانه زاویه‌ای نمی‌تواند برای یک مقدار معین مربع تکانه زاویه‌ای کل مقادیر منفی یا مثبت به دلخواه بزرگ اختیار کند؛ در واقع از نظر کلاسیکی $|L_z| \leq (L^2)^{\frac{1}{2}}$ است. از نظر کوانتوم مکانیکی داریم

$$\langle\alpha\beta|L^2 - L_z^2|\alpha\beta\rangle = \langle\alpha\beta|L_x^2 + L_y^2|\alpha\beta\rangle \quad (12-5-9)$$

که بیان می‌کند

$$\alpha - \beta^2 \geq 0$$

(چون $L_x^2 + L_y^2$ معین مثبت است) یا

$$\alpha \geq \beta^2 \quad (12-5-10)$$

از آنجا که β^2 به وسیله α محدود می‌شود می‌توان گفت که می‌بایست یک حالت $|\alpha\beta_{\max}\rangle$ باشد به طوری که نتواند بالا رود:

$$L_+|\alpha\beta_{\max}\rangle = 0 \quad (12-5-11)$$

با عمل L_- و استفاده از $L_-L_+ = L^2 - L_z^2 - \hbar L_z$ به

$$(L^2 - L_z^2 - \hbar L_z)|\alpha\beta_{\max}\rangle = 0$$

$$(\alpha - \beta_{\max}^2 - \hbar\beta_{\max})|\alpha\beta_{\max}\rangle = 0 \quad (12-5-12)$$

$$\alpha = \beta_{\max}(\beta_{\max} + \hbar)$$

می‌رسیم. با شروع از $|\alpha\beta_{\max}\rangle$ و k بار اثر دادن L_- تا رسیدن به حالت $|\alpha\beta_{\min}\rangle$ که نمی‌تواند بدون انحراف از نامساوی (12-5-10) بیشتر پایین برده شود:

$$L_-|\alpha\beta_{\min}\rangle = 0$$

$$L_+L_-|\alpha\beta_{\min}\rangle = 0$$

$$(L^2 - L_z^2 + \hbar L_z)|\alpha\beta_{\min}\rangle = 0 \quad (12-5-13)$$

$$\alpha = \beta_{\min}(\beta_{\min} - \hbar)$$

مقایسه معادلات (12-5-12) و (12-5-13) نشان می‌دهد که (طبق انتظار)

$$\beta_{\min} = -\beta_{\max} \quad (12-5-14)$$

چون در k مرحله و هر مرحله به اندازه \hbar از $|\alpha\beta_{\max}\rangle$ به $|\alpha\beta_{\min}\rangle$ رسیدیم می توان نوشت:

$$\beta_{\max} - \beta_{\min} = 2\beta_{\max} = \hbar k$$

$$\beta_{\max} = \frac{\hbar k}{2}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (12-5-15 \text{ الف})$$

$$\alpha = (\beta_{\max})(\beta_{\max} + \hbar) = \hbar^2 \left(\frac{k}{2}\right) \left(\frac{k}{2} + 1\right) \quad (12-5-15 \text{ ب})$$

$(k/2) = (\beta_{\max}/\hbar)$ را تکانه زاویه‌ای حالت می‌نامیم. توجه کنید که برخلاف فیزیک کلاسیک، β_{\max}^2 کمتر از α ، مربع بزرگی تکانه زاویه‌ای، است به جز وقتی $\alpha = \beta_{\max} = 0$ باشد، یعنی در حالتی با تکانه زاویه‌ای صفر.

اکنون نگاهی به حالت‌های با تکانه زاویه‌ای پایین ارائه شده در جدول ۱۲-۱ می‌اندازیم. در اینجا خواننده تیز فهم می‌تواند ایرادات زیر را مطرح کند:

جدول ۱۲-۱: بعضی از حالت‌های با تکانه زاویه‌ای پایین

(Angular momentum) $k/2$	β_{\max}	α	$ \alpha\beta\rangle$
0	0	0	$ 0, 0\rangle$
1/2	$\hbar/2$	$(1/2)(3/2)\hbar^2$	$ (3/4)\hbar^2, \hbar/2\rangle$ $ (3/4)\hbar^2, \hbar/2\rangle$
1	\hbar	$(1)(2)\hbar^2$	$ 2\hbar^2, \hbar\rangle$ $ 2\hbar^2, 0\rangle$ $ 2\hbar^2, -\hbar\rangle$
3/2	\vdots	\vdots	\vdots

سوال: من از نتایج شما برای k فرد آشفته شده‌ام. به نظر می‌رسد که شما به این نتیجه رسیدید که L_z می‌تواند ویژه مقادیر نیمه - صحیح (برحسب \hbar) داشته باشد. اما در بخش ۱۲-۳ ما را متقاعد کردید که L_z فقط می‌تواند ویژه مقادیر صحیح m (برحسب \hbar) داشته باشد. اشتباه شما در کجاست؟

جواب: در هیچ جا؛ اما دیدگاه شما پذیرفته است. ویژه مقادیر (نیمه - صحیح) اضافی به این دلیل وارد می‌شوند که ما یک مسئله عمومی‌تر از مسئله L_x, L_y, L_z و L^2 را حل کرده‌ایم (اگر چه قصد آنرا نداشتیم). توجه کنید که در هیچ جایی در استنتاج خود، عبارت‌های صریح برای L ها [معادله (۱۲-۴-۱)] و بویژه $L_z \rightarrow -i\hbar\partial/\partial\phi$ به کار نبردیم (اگر این کار را می‌کردیم، همان‌طور که شما انتظار دارید فقط به ویژه مقادیر صحیح می‌رسیدیم) در عوض فقط به روابط جابه‌جایی، $\mathbf{L} \times \mathbf{L} = i\hbar\mathbf{L}$ ، تکیه کردیم. حال این روابط جابه‌جایی قانون ترکیبات چرخش‌های بی‌نهایت کوچک را درسه بعد منعکس می‌کنند و می‌بایست، ماهیت توابع موجی که آنها می‌چرخانند هر چه باشد، به وسیله سه مولد چرخش برآورده شوند. قبلاً فقط توابع موج اسکالر $\psi(x, y, z)$ را در نظر گرفته‌ایم که یک عدد مختلط (اسکالر) به هر نقطه نسبت می‌دهند. اکنون، ذراتی می‌توانند در طبیعت وجود داشته باشند که برای آنها تابع موج پیچیده‌تر بوده مثلاً یک میدان برداری $\hat{\psi}(x, y, z) = \psi_x(x, y, z)\hat{i} + \psi_y(x, y, z)\hat{j} + \psi_z(x, y, z)\hat{k}$ است. پاسخ چنین

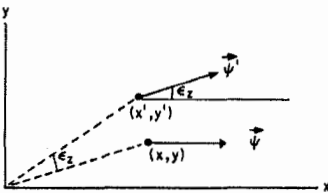
تابع موجی به چرخش‌ها پیچیده‌تر است. در حالی که در حالت اسکالر، اثر چرخش به اندازه $\delta\theta$ گرفتن عدد تخصیص داده شده به هر نقطه (x, y, z) و تخصیص مجدد آن به نقطه چرخیده (x', y', z') است. در حالت برداری، بردار در (x, y, z) ،

الف - باید به اندازه $\delta\theta$ چرخیده شود.

ب- سپس به (x', y', z') تخصیص داده شود (یک مثال ساده از دو بعد در شکل ۱۲-۱ ارائه شده است).

عملگرهای دیفرانسیلی L_x, L_y, L_z فقط قسمت (ب) را انجام داده و قسمت (الف) را، که باید به وسیله ماتریس‌های 3×3 ، S_x, S_y, S_z که مولفه‌های $\psi, \psi_x, \psi_y, \psi_z$ را بر می‌زنند، انجام شود، انجام نمی‌دهند. در چنین مواردی مولدهای چرخش بی‌نهایت کوچک به شکل

$$J_i = L_i + S_i$$



شکل ۱۲-۱: اثر چرخش بی‌نهایت کوچک به اندازه ϵ_z روی یک بردار ψ در دو بعد این است که (۱) ابتدا آنرا به نقطه چرخیده (x', y') تخصیص داده (۲) و سپس خود بردار را به اندازه زاویه بی‌نهایت کوچک بچرخاند. عملگر دیفرانسیلی L_z قسمت اول را انجام داده در حالیکه یک ماتریس 2×2 اسپین S_z قسمت دوم را انجام می‌دهد.

خواهند بود که L_i قسمت (الف) و S_i قسمت (ب) را انجام می‌دهد (برای مثالی واقعی تمرین ۱۲-۵-۱ را ببینید). L_i تکانه زاویه‌ای مداری و S_i تکانه زاویه‌ای اسپینی (یا فقط اسپین) و J_i تکانه زاویه‌ای کل نامیده می‌شود. هنوز نمی‌دانیم که J_i و S_i در این حالت‌های کلی شبیه چه چیزی هستند اما این را می‌دانیم که:

J_i ها باید از همان قواعد جابه‌جایی که L_i ها پیروی می‌کنند تبعیت کنند چون قواعد جابه‌جایی قانون ترکیب چرخش‌ها را منعکس کرده و می‌بایست به وسیله هر سه تایی از مولدها پیروی شوند (شرط سازگاری)، ماهیت تابع موجی که آنها می‌چرخانند هر چه باشد. بنابراین در حالت کلی داریم

$$(12-5-16)$$

$$\mathbf{J} \times \mathbf{J} = i\hbar \mathbf{J}$$

که به عنوان حالتی خاص است، وقتی تابع موج یک اسکالر است. لذا نتیجه ما، که فقط از روابط جابه‌جایی به دست آمد برای مسئله \mathbf{J} دلخواه و نه فقط \mathbf{L} کاربرد دارد. بنابراین پاسخ سوالی که قبلاً مطرح شد این است که برخلاف L_z, J_z مقید به داشتن ویژه مقادیر صحیح نیست. اما این تحلیل به ما، که درباره اسپین بسیار کم می‌دانیم، بیان می‌کند که اگر قرار باشد روابط جابه‌جایی برآورده شوند S_z می‌تواند فقط ویژه مقادیر صحیح یا نیمه صحیح داشته باشد. البته تحلیل ما اشاره نمی‌کند که باید ذراتی با اسپین صحیح یا نیمه صحیح وجود داشته باشند بلکه صرفاً امکان تنوع در توابع موج را نشان می‌دهد، اما مثل قدیمی که اگر چیزی بتواند اتفاق بیفتد اتفاق خواهد افتاد، در اینجا درست است و طبیعت، ذراتی را برای ما فراهم می‌کند که دارای اسپین هستند، یعنی ذراتی که توابع موجشان پیچیده‌تر از توابع موج اسکالر است. مطالعه آنها را به فصل اسپین واگذار می‌کنیم.

تمرین ۱۲-۵-۱: یک میدان برداری $\psi(x, y)$ را در دو بعد در نظر بگیرید. از شکل ۱۲-۱ چنین بر می آید که تحت یک چرخش بی نهایت کوچک $\varepsilon_z \hat{k}$ ،

$$\psi_x \rightarrow \psi'_x(x, y) = \psi_x(x + y\varepsilon_z, y - x\varepsilon_z) - \psi_y(x + y\varepsilon_z, y - x\varepsilon_z)\varepsilon_z$$

$$\psi_y \rightarrow \psi'_y(x, y) = \psi_x(x + y\varepsilon_z, y - x\varepsilon_z)\varepsilon_z + \psi_y(x + y\varepsilon_z, y - x\varepsilon_z)$$

نشان دهید (تا مرتبه ε_z) که

$$\begin{bmatrix} \psi'_x \\ \psi'_y \end{bmatrix} = \left(\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} - \frac{i\varepsilon_z}{\hbar} \begin{bmatrix} L_z & 0 \\ 0 & L_z \end{bmatrix} - \frac{i\varepsilon_z}{\hbar} \begin{bmatrix} 0 & -i\hbar \\ i\hbar & 0 \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} \psi_x \\ \psi_y \end{bmatrix}$$

به طوری که

$$\begin{aligned} J_z &= L_z^{(1)} \otimes I^{(2)} + I^{(1)} \otimes S_z^{(2)} \\ &= L_z + S_z \end{aligned}$$

که $I^{(1)}$ ماتریس همانی 2×2 نسبت به مولفه های بردار، $I^{(2)}$ عملگر همانی نسبت به شناسه های (x, y) تابع $\psi(x, y)$ هستند. این مثال فقط این حقیقت را توضیح می دهد که اگر تابع موج یک اسکالر نباشد، $J_z = L_z + S_z$ است. مثالی از ویژه مقادیر نیمه صحیح در فصل بعد هنگام بررسی اسپین ارائه خواهد شد (در مثال کنونی S_z دارای ویژه مقادیر $\pm \hbar/2$ است).

اکنون به بحث اصلی خود بر می گردیم. برای تأکید بر عمومیت نتایج به دست آمده، آنها را بر حسب \mathbf{J} ها، به جای \mathbf{L} ها، بیان کرده و همچنین از یک نمادگذاری عمومی تر استفاده می کنیم. در اینجا خلاصه ای از آنچه یافته ایم ارائه می شود. ویژه بردارهای عملگرهای J^2 و J_z به وسیله

$$J^2 |jm\rangle = j(j+1)\hbar^2 |jm\rangle, \quad j=0, 1/2, 1, 3/2, \dots \quad (12-5-17 \text{ الف})$$

$$J_z |jm\rangle = m\hbar |jm\rangle, \quad m=j, j-1, j-2, \dots, -j \quad (12-5-17 \text{ ب})$$

مشخص می شوند. z را تکانه زاویه ای حالت خواهیم نامید. توجه کنید که در بالا m می تواند بسته به z ، صحیح یا نیمه صحیح باشد.

نتایج مسئله محدود شده $\mathbf{J} = \mathbf{L}$ که در ابتدا برای حل ارائه کردیم در معادله (۱۲-۵-۱۷) قرار دارند: ما فقط از حالت های m و z نیمه صحیح چشم پوشی می کنیم. در این حالت ها برای یادآوری اینکه به $\mathbf{J} = \mathbf{L}$ می پردازیم، حالت ها را با $|lm\rangle$ نشان خواهیم داد که از

$$L^2 |lm\rangle = l(l+1)\hbar^2 |lm\rangle, \quad l=0, 1, 2, \dots \quad (12-5-18 \text{ الف})$$

$$L_z |lm\rangle = m\hbar |lm\rangle, \quad m=l, l-1, \dots, -l \quad (12-5-18 \text{ ب})$$

پیروی می کنند.

مسئله ما به طور کامل حل نشده است: ما فقط ویژه مقادیر را به دست آورده‌ایم و ویژه بردارها هنوز به طور کامل مشخص نشده‌اند (همچون مسئله نوسانگر، یافتن ویژه بردارها به معنی یافتن ماتریس‌های متناظر با عملگرهای اصلی است که روابط جابه‌جایی آنها معلومند). اجازه دهید تحلیل خود را برحسب J ها ادامه دهیم. اگر معادله (۱۲-۵-۸) را برحسب J_{\pm} ، z و m بازنویسی کنیم (به جای L_{\pm} ، α و β) می‌رسیم به

$$J_{\pm}|jm\rangle = C_{\pm}(j, m)|j, m \pm 1\rangle \quad (12-5-19)$$

که $C_{\pm}(j, m)$ ها باید مشخص شوند. اکنون آنها را مشخص خواهیم کرد.
اگر الحاقی

$$J_{+}|jm\rangle = C_{+}(j, m)|j, m + 1\rangle$$

را بگیریم خواهیم داشت:

$$\langle jm|J_{-} = C_{+}^{*}(j, m)\langle j, m + 1|$$

با مساوی قرار دادن ضرب داخلی اشیاء سمت چپ با ضرب اشیاء سمت راست،

$$\langle jm|J_{-}J_{+}|jm\rangle = |C_{+}(j, m)|^2\langle j, m + 1|j, m + 1\rangle$$

$$= |C_{+}(j, m)|^2$$

$$\langle jm|J^2 - J_z^2 - \hbar J_z|jm\rangle = |C_{+}(j, m)|^2$$

یا

$$|C_{+}(j, m)|^2 = j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 - m\hbar^2$$

$$= \hbar^2(j-m)(j+m+1)$$

یا^۱

$$C_{+}(j, m) = \hbar[(j-m)(j+m+1)]^{1/2}$$

همین طور می‌توان نشان داد که

$$C_{-}(j, m) = \hbar[(j+m)(j-m+1)]^{1/2}$$

به طوری که سرانجام

$$J_{\pm}|jm\rangle = \hbar[(j \mp m)(j \pm m + 1)]^{1/2}|j, m \pm 1\rangle \quad (12-5-20)$$

توجه کنید که وقتی J_{\pm} روی $|j, \pm z\rangle$ اثر می‌کند، حالت از بین می‌رود (صفر می‌شود) به طوری که هر خانواده با یک تکانه زاویه‌ای معین z فقط $2z + 1$ حالت با ویژه مقادیر $(j\hbar), (j-1)\hbar, \dots, -(j\hbar)$ برای J_z دارد.

۱- می‌تواند یک عامل فاز کلی در مقابل C_{+} قرار گیرد. ما آنرا طبق قرار داد استاندارد یک انتخاب می‌کنیم.

معادله (۱۲-۵-۲۰) ما را به انتهای محاسبه می‌رساند چون می‌توانیم عناصر ماتریسی J_x و J_y را در این پایه بنویسیم:

$$\begin{aligned} \langle j'm' | J_x | jm \rangle &= \langle j'm' | \frac{J_+ + J_-}{2} | jm \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2} \{ \delta_{j'j} \delta_{m',m+1} [(j-m)(j+m+1)]^{1/2} + \delta_{j'j'} \delta_{m',m-1} \\ &\quad \times [(j+m)(j-m+1)]^{1/2} \} \end{aligned} \quad (۱۲-۵-۲۱-الف)$$

$$\begin{aligned} \langle j'm' | J_y | jm \rangle &= \langle j'm' | \frac{J_+ - J_-}{2i} | jm \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2i} \{ \delta_{j'j} \delta_{m',m+1} [(j-m)(j+m+1)]^{1/2} - \delta_{j'j'} \delta_{m',m-1} \\ &\quad \times [(j+m)(j-m+1)]^{1/2} \} \end{aligned} \quad (۱۲-۵-۲۱-ب)$$

با استفاده از اینها می‌توانیم ماتریس‌های متناظر با J^2 ، J_z ، J_x و J_y را در پایه $|jm\rangle$ بنویسیم:

	$\begin{matrix} & jm \\ j'm' \end{matrix}$	$(0, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$	$(1, 1)$	$(1, 0)$	$(1, -1)$	\dots	
$J^2 \rightarrow$		$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{3}{4}\hbar^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \frac{3}{4}\hbar^2 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 2\hbar^2 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2\hbar^2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\hbar^2 & \dots \\ \vdots & & & & & & \ddots \end{bmatrix}$							

(۱۲-۵-۲۲)

J_z هم با عناصر $m\hbar$ قطری است.

$J_x \rightarrow$	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \hbar/2 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \hbar/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \hbar/2^{1/2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \hbar/2^{1/2} & 0 & \hbar/2^{1/2} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \hbar/2^{1/2} & 0 & \dots \\ \vdots & & & & & & \ddots \end{bmatrix}$						
-------------------	---	--	--	--	--	--	--

(۱۲-۵-۲۳)

۱- اعداد کوانتومی j و m به‌طور کامل یک حالت را برچسب نمی‌زنند، یک حالت به‌وسیله $|\alpha j m\rangle$ برچسب زده می‌شود که α بقیه برچسب‌ها را نشان می‌دهد. در ادامه، α را حذف می‌کنیم اما فرض می‌کنیم که در تمام مدت یک چیز است.

$$J_y \rightarrow \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & -i\hbar/2 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & i\hbar/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -i\hbar/2^{1/2} & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & i\hbar/2^{1/2} & 0 & -i\hbar/2^{1/2} & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & i\hbar/2^{1/2} & 0 & \\ \vdots & & & & & & \ddots \end{bmatrix} \quad (12-5-24)$$

توجه کنید که اگر چه J_x و J_y در پایه $|j, m\rangle$ قطری نیستند، ولی قطری بلوکی هستند: آنها هیچ عنصر ماتریسی بین یک مقدار z و مقدار دیگر آن ندارند. دلیل آن است که J_{\pm} ها (سواى اینکه از چه چیزی ساخته شده‌اند) وقتی روی $|jm\rangle$ اثر می‌کنند z را تغییر نمی‌دهند. از آنجا که J ها همگی قطری بلوکی‌اند، بلوک‌ها هنگامی که آنها را ضرب می‌کنیم با هم آمیخته نمی‌شوند. بویژه وقتی یک رابطه جابه‌جایی نظیر $[J_x, J_y] = i\hbar J_z$ را در نظر می‌گیریم، داخل هر بلوک برآورده خواهد شد. اگر بلوک $(2j+1) \times (2j+1)$ واقع در J_i ، متناظر با یک z خاص، را با $J_i^{(j)}$ نشان دهیم آنگاه داریم:

$$[J_x^{(j)}, J_y^{(j)}] = i\hbar J_z^{(j)}, \quad j=0, \frac{1}{2}, 1, \dots \quad (12-5-25)$$

تمرین ۱۲-۵-۲: الف- ثابت کنید که ماتریس‌های 2×2 $J_x^{(\frac{1}{2})}$ ، $J_y^{(\frac{1}{2})}$ و $J_z^{(\frac{1}{2})}$ از قاعده جابه‌جایی $[J_x^{(\frac{1}{2})}, J_y^{(\frac{1}{2})}] = i\hbar J_z^{(\frac{1}{2})}$ پیروی می‌کنند.

ب- آیا برای ماتریس‌های 3×3 $J_i^{(1)}$ هم اینگونه است؟
ج- ماتریس‌های 4×4 را تشکیل داده و ثابت کنید که

$$[J_x^{(3/2)}, J_y^{(3/2)}] = i\hbar J_z^{(3/2)}$$

تمرین ۱۲-۵-۳: الف- نشان دهید که در حالت $|jm\rangle$ ، $\langle J_x \rangle = \langle J_y \rangle = 0$ است.
ب- نشان دهید که در این حالت‌ها،

$$\langle J_x^2 \rangle = \langle J_y^2 \rangle = \frac{1}{2} \hbar^2 [j(j+1) - m^2]$$

از بحث‌های تقارن استفاده کنید تا $\langle J_x^2 \rangle$ را به $\langle J_y^2 \rangle$ مرتبط کنید.

ج- بررسی کنید که ΔJ_x ، ΔJ_y از قسمت (ب) نامساوی تحمیلی اصل عدم قطعیت [معادله (۹-۲-۹)] را برآورده می‌کند.

د- نشان دهید که حالت $|j, \pm j\rangle$ کران عدم قطعیت را برآورده می‌کند.

چرخش‌های متناهی^۱

اکنون که ماتریس‌های صریح مولدهای چرخش‌ها، J_x ، J_y و J_z ، را داریم می‌توانیم ماتریس‌های نمایشگر $U[R]$ را با نمایی کردن $(-i\hat{\theta} \cdot \mathbf{J}/\hbar)$ بسازیم. اما گفتن این مطلب راحت‌تر از انجام آن است. ماتریس‌های J_z بی‌نهایت بعدی بوده و نمایی کردن آنها عملاً ممکن نیست. اما وضعیت به دلیلی که ارائه می‌کنیم به آن وخامت که به نظر می‌رسد نیست. ابتدا توجه کنید که چون J_z ها قطری بلوکی‌اند ترکیب خطی $\hat{\theta} \cdot \mathbf{J}$ و نمای آنها هم قطری بلوکی می‌شوند. در نتیجه همه عملگرهای چرخش $U[R]$ به وسیله ماتریس‌های قطری بلوکی نمایش داده خواهند شد. بلوک $(2j+1)$ بعدی در یک z معین با $D^{(j)}[R]$ نشان داده می‌شود. شکل قطری بلوکی ماتریس‌های چرخش بیان می‌کند که هر بردار $|\psi_j\rangle$ در زیر فضای V_j پدید آمده به وسیله $(2j+1)$ بردار $|jz\rangle$ و ... و $|j,-j\rangle$ به عنصر دیگر $|\psi'_j\rangle$ از V_j می‌رود. بنابراین برای چرخش $|\psi_j\rangle$ فقط به ماتریس $D^{(j)}$ نیاز داریم. آنچه وضعیت را امیدوار کننده می‌کند آن است که اگر z کوچک باشد در عمل محاسبه اینها امکان‌پذیر است. ببینیم چگونه. سری نمایشگر $D^{(j)}$ را در نظر بگیرید:

$$D^{(j)}[R(\hat{\theta})] = \exp\left[-\frac{i\hat{\theta} \cdot \mathbf{J}^{(j)}}{\hbar}\right] = \sum_0^\infty \left(\frac{-i\hat{\theta}}{\hbar}\right)^n (\hat{\theta} \cdot \mathbf{J}^{(j)})^n \frac{1}{n!}$$

می‌توان نشان داد (تمرین ۱۲-۵-۴) که برای $n > 2j$ ، $(\hat{\theta} \cdot \mathbf{J}^{(j)})^n$ می‌تواند به صورت یک ترکیب خطی از $2j$ توان اول $\hat{\theta} \cdot \mathbf{J}^{(j)}$ نوشته شود. در نتیجه سری نمایشگر $D^{(j)}$ می‌تواند به

$$D^{(j)} = \sum_0^{2j} f_n(\theta) (\hat{\theta} \cdot \mathbf{J}^{(j)})^n$$

تقلیل یابد. در عمل امکان به دست آوردن عبارت‌های بسته برای $f_n(\theta)$ برحسب توابع مثلثاتی، برای مقادیر معروف z ، وجود دارد (تمرین ۱۲-۵-۵). برای مثال

$$D^{(1/2)}[R] = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) - \frac{2i}{\hbar} \hat{\theta} \cdot \mathbf{J}^{(1/2)} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

به زیر فضاهای V_j بر می‌گردیم. از آنجا که آنها تحت چرخش‌های دلخواه به خودشان می‌روند، زیر فضاهای ناوردا گفته می‌شوند. فیزیک پشت سر این ناوردایی ساده است: هر زیر فضا شامل حالت‌هایی با بزرگی مربع تکانه زاویه‌ای معین $j(j+1)\hbar^2$ است و یک چرخش نمی‌تواند این را تغییر دهد. از نظر صوری دلیل آن این است که $[J^2, U[R]] = 0$ بوده و بنابراین $U[R]$ نمی‌تواند ویژه مقدار J^2 را تغییر دهد. زیر فضاهای ناوردا ویژگی دیگری هم دارند: آنها کاهش‌ناپذیر^۲ هستند. یعنی V_j خودش شامل زیر فضاهای ناوردا نمی‌شود. ما این را با نشان دادن اینکه هر زیر فضای ناوردای \bar{V}_j از V_j به بزرگی V_j اثبات می‌کنیم. فرض کنید $|\psi\rangle$ عنصری از \bar{V}_j باشد. چون هنوز پایه‌ای انتخاب نکرده‌ایم، پایه‌ای را انتخاب

۱- در سطوح پایین‌تر آموزشی از اینجا تا آخر تمرین ۱۵-۵-۷ می‌تواند حذف شود.

می‌کنیم که $|\psi\rangle$ یکی از بردارهای پایه آن بوده و به علاوه همان بردار پایه $|j, z\rangle$ باشد، صرف نظر از یک ضریب بهنجارش، که در ادامه کار بی تأثیر است (اگر قبلاً پایه $|j, -z\rangle$ و ... و $|j, z\rangle$ تولید شده به وسیله عملگرهای J_{\pm} را انتخاب کرده بودیم چطور؟ تبدیلی یکانی، U ، که $|j, z\rangle$ را به $|\psi\rangle$ تبدیل می‌کند، و یک سه تایی متفاوت از عملگرهای J'_{\pm} تعریف شده به وسیله $J'_{\pm} = U J_{\pm} U^{\dagger}$ را در نظر بگیرید. عملگرهای پریم دار همان قواعد جابه‌جایی را داشته و لذا همان ویژه مقادیر J_{\pm} ها را دارند. ویژه بردارها $|jm\rangle' = U |jm\rangle$ ها هستند. در تحلیل زیر همه پریم‌ها را حذف می‌کنیم).

یک چرخش بی نهایت کوچک $\delta\theta$ به $|\psi\rangle$ اعمال می‌کنیم که نتیجه می‌شود

$$\begin{aligned} |\psi'\rangle &= U[R(\delta\theta)]|jz\rangle \\ &= [I - (i/\hbar)(\delta\theta \cdot \mathbf{J})]|jz\rangle \\ &= [I - (i/2\hbar)(\delta\theta_+ J_- + \delta\theta_- J_+ + 2\delta\theta_z J_z)]|jz\rangle \end{aligned}$$

که در آن

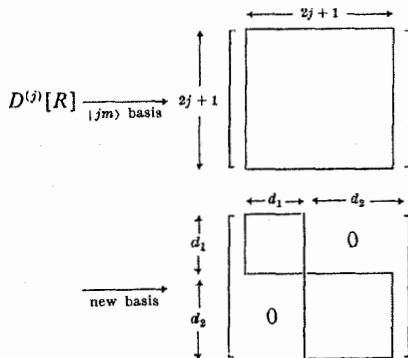
$$\delta\theta_{\pm} = (\delta\theta_x \pm i\delta\theta_y)$$

چون $J_+ |j, z\rangle = 0$ ، $J_z |j, z\rangle = j\hbar |j, z\rangle$ و $J_- |j, z\rangle = \hbar(2j) |j, z-1\rangle$ است می‌رسیم به

$$|\psi'\rangle = (1 - ij\delta\theta_z)|jz\rangle - \frac{1}{2}i(2j)^{1/2}\delta\theta_+ |j, z-1\rangle$$

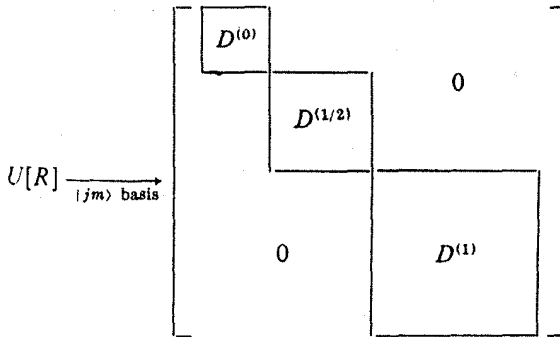
از آنجا که فرض می‌شود \overline{V}_j تحت هر چرخشی ناوردا باشد $|\psi'\rangle$ هم به \overline{V}_j متعلق است. با تفریق $|j, z\rangle$ از $(1 - ij\delta\theta_z)|jz\rangle$ ، که باز به \overline{V}_j متعلق است، از $|\psi'\rangle$ می‌بینیم که $|j, z-1\rangle$ هم به \overline{V}_j تعلق دارد. با در نظر گرفتن چرخش‌های بیشتری از این نوع به راحتی می‌توانیم ثابت کنیم که $(2j+1)$ بردار راست‌هنجار $|j, -z\rangle$ و ... و $|j, z-1\rangle$ و $|j, z\rangle$ همگی به \overline{V}_j تعلق دارند. پس \overline{V}_j همان بعد V_j را دارد. بنابراین V_j هیچ زیر فضای ناوردایی ندارد (از حیث تکنیکی، V_j زیر فضای خودش بوده و ناوردا است. در اینجا با زیر فضاهایی با بعد کمتر سر و کار داریم).

کاهش ناپذیری V_j به این معنی است که ما نمی‌توانیم با تغییر پایه درون V_j ، همه $D^{(j)}$ ها را بیش از این قطری بلوکی کنیم. نشان می‌دهیم که اگر این درست نبود یک تناقض پیش می‌آمد. فرض کنید امکان قطری بلوکی کردن همه $D^{(j)}$ ها وجود داشته باشد. مثلاً به صورت زیر:



(نواحی داخل مربع در حالت کلی غیر صفرند). دیده می شود که V_r شامل دو زیر فضای ناورد با ابعاد به ترتیب d_1 و d_2 است (برای مثال هر بردار با فقط d_1 مولفه اول غیر صفر به چنین بردار دیگری چرخش پیدا خواهد کرد. چنین بردارهایی یک زیر فضای d_1 بعدی تشکیل می دهند).

گفته می شود ماتریس های قطری بلوکی نمایش دهنده عملگرهای چرخش $U[R]$ یک نمایش (ماتریسی) کاهش ناپذیر از این عملگرها هستند. برای مجموعه همه عملگرهای چرخش، که عناصر آن در حالت کلی با یکدیگر جابه جا نمی شوند، این شکل کاهش ناپذیر بسته ترین شکلی است که می تواند به طور همزمان قطری شود. همه اینها به طور طرحوار در شکل زیر خلاصه شده اند، نواحی مربعی بلوک ها را نشان داده، $D^{(0)}$ ، $D^{(1)}$ ، $D^{(1/2)}$ و ... غیره. بقیه نواحی صفرها را در بر دارند.



حال ماتریس نمایش دهنده یک هامیلتونی با ناوردایی چرخشی را در این پایه در نظر بگیرید. چون $[H, J] = 0$ است، H شکل یکسانی با J^2 دارد که با همه مولدها هم جابه جا می شود یعنی،
 (۱) $[H, J_z] = 0$ ، $[H, J^2] = 0$ قطری است چون

(۲) داخل هر بلوک، H دارای ویژه مقدار یکسان E_r است چون $[H, J_{\pm}] = 0$ است.

از (۲) چنین بر می آید که V_r یک ویژه فضای H با ویژه مقدار E_r است یعنی همه حالت های یک زمعین در یک مسئله با ناوردایی چرخشی تبهگن هستند. اگر چه همین نتیجه از نظر کلاسیکی درست است، ولی رابطه بین تبهگنی و ناوردایی چرخشی در دو حالت متفاوت است. از نظر کلاسیکی، اگر دو حالت با بزرگی تکانه زاویه ای یکسان اما جهت گیری مختلف داشته باشیم ثابت می کنیم که آنها تبهگن اند چون

(۱) یکی می تواند به دیگری چرخانده شود.

(۲) این چرخش انرژی را تغییر نمی دهد.

از نظر کوانتوم مکانیکی، با داشتن دو عنصر از V_r همیشه درست نیست که آنها بتوانند به یکدیگر چرخانده شوند (تمرین ۱۲-۵-۶). اما به صورت زیر استدلال می کنیم:

(۱) - هر یکی می تواند با اثر مرکب J_{\pm} و $U[R]$ از دیگری به دست آید.

(۲) - این عملگرها با H جابه جا می شوند.

خلاصه اینکه ناوردایی چرخشی علت تبهگنی در دو حالت است اما در حالت کوانتومی حالت های تبهگن همیشه شکل چرخیده یکدیگر نیستند (تمرین ۱۲-۵-۶ و ۱۲-۵-۷).

تمرین ۱۲-۵-۴: الف- ثابت کنید که ویژه مقادیر $J_x^{(j)}$ و $J_y^{(j)}$ با ویژه مقادیر $J_z^{(j)}$ یعنی $(-j\hbar)$ و ... و $(j-1)\hbar$ و $j\hbar$ یکسان نیستند. نتیجه را به $\hat{\theta} \cdot \mathbf{J}^{(j)}$ تعمیم دهید.
ب- نشان دهید که

$$(J - j\hbar)[J - (j-1)\hbar][J - (j-2)\hbar] \cdots (J + j\hbar) = 0$$

که در آن $J = \hat{\theta} \cdot \mathbf{J}^{(j)}$ (راهنمایی: در حالت $J = J_z$ وقتی هر دو طرف به یک ویژه کت دلخواه $|jm\rangle$ اعمال می‌شوند چه اتفاقی می‌افتد؟ در مورد یک برهمنهی دلخواه از چنین کت‌هایی چطور؟)
ج- از (ب) نتیجه می‌شود که J^{2j+1} یک ترکیب خطی از J^{2j} و ... و J^1 و J^0 است ثابت کنید که برای J^{2j+k} ، $k = 1, 2, \dots$ هم همین‌طور است.

تمرین ۱۲-۵-۵ (مشکل): با استفاده از نتایج تمرین قبل و معادله (۱۲-۵-۲۳) نشان دهید که

الف- $D^{(1/2)}[R] = \exp(-i\hat{\theta} \cdot \mathbf{J}^{(1/2)}/\hbar) = \cos(\theta/2)I^{(1/2)} - (2i/\hbar)\sin(\theta/2)\hat{\theta} \cdot \mathbf{J}^{(1/2)}$

ب- $D^{(1)}[R] = \exp(-i\theta_x J_x^{(1)}/\hbar) = (\cos \theta_x - 1)\left(\frac{J_x^{(1)}}{\hbar}\right)^2 - i \sin \theta_x \left(\frac{J_x^{(1)}}{\hbar}\right) + I^{(1)}$

تمرین ۱۲-۵-۶: خانواده حالت‌های $|j, -j\rangle$ و ... و $|jm\rangle$ و ... و $|j, j\rangle$ را در نظر بگیرید. به این حالت‌ها، حالت‌های با بزرگی تکانه زاویه‌ای یکسان اما سمت‌گیری متفاوت گفته می‌شود. اگر کسی این گفته را کلمه به کلمه تفسیر کند، یعنی در مفهوم کلاسیکی، به این عقیده رهنمون می‌شود که می‌توان این حالت‌ها را به یکدیگر چرخاند همان‌طور که برای حالت‌های کلاسیکی با این خواص اینگونه است. برای نمونه خانواده $|1, 1\rangle$ ، $|1, 0\rangle$ و $|1, -1\rangle$ را در نظر بگیرید. برای مثال به نظر می‌رسد که حالت با تکانه زاویه‌ای صفر در امتداد محور z ، $|1, 0\rangle$ ، می‌تواند با چرخاندن $|1, 1\rangle$ به اندازه یک زاویه مناسب ($\frac{1}{2}\pi$?) حول محور x به دست آید. با استفاده از $D^{(1)}[R(\theta_x \hat{i})]$ از قسمت (ب) در تمرین قبل نشان دهید که

$$|1, 0\rangle \neq D^{(1)}[R(\theta_x \hat{i})]|1, 1\rangle, \quad \theta_x \text{ هر برای}$$

اشتباه از اینجا ناشی می‌شود که استدلال کلاسیکی باید برای $\langle \mathbf{J} \rangle$ به کار رود که به چرخش‌ها مثل یک بردار واقعی پاسخ می‌دهد، نه مستقیماً برای $|jm\rangle$ که برداری در فضای هیلبرت است. ثابت کنید که $\langle \mathbf{J} \rangle$ به چرخش‌ها مثل نظیر کلاسیکی اش پاسخ می‌دهد، با نشان دادن اینکه $\langle \mathbf{J} \rangle$ در حالت $|1, 1\rangle$ $D^{(1)}[R(\theta_x \hat{i})]$ $\left[-\sin \theta_x \hat{j} + \cos \theta_x \hat{k} \right]$ است.

اینکه بینیم چرا همیشه نمی‌توانیم رابطه

$$|jm\rangle = D^{(j)}[R]|jm\rangle$$

یا به‌طور کلی‌تر برای دو کت بهنجار شده $|\psi'_j\rangle$ و $|\psi_j\rangle$ برای هر انتخاب R

$$|\psi'_j\rangle = D^{(j)}[R] |\psi_j\rangle$$

را برآورده کنیم چندان مشکل نیست. این معادلات مجرد اشاره به $(2j+1)$ رابطه خطی و پیچیده بین مولفه‌های $|\psi_j\rangle$ و $|\psi'_j\rangle$ دارند که نمی‌توانند با تغییر دادن R ، که فقط به سه پارامتر θ_x ، θ_y ، θ_z بستگی دارد، برآورده شوند (البته می‌توان یک ماتریس یکانی در V_j یافت که $|jm\rangle$ را به $|jm'\rangle$ یا $|\psi_j\rangle$ را به $|\psi'_j\rangle$ می‌برد اما یک ماتریس چرخش متناظر با $U[R]$ نخواهد بود).

تمرین ۱۲-۵-۷: زوایای اوپلر. به جای پارامتری کردن یک چرخش دلخواه به اندازه زاویه θ ، که یک چرخش منفرد به اندازه θ حول محوری موازی با \mathbf{J} را توصیف می‌کند، می‌توانیم آنرا به وسیله سه زاویه α ، β و γ که زوایای اوپلر نامیده شده و سه چرخش متوالی را تعریف می‌کنند پارامتری کنیم:

$$U[R(\alpha, \beta, \gamma)] = e^{-i\alpha J_z/\hbar} e^{-i\beta J_y/\hbar} e^{-i\gamma J_z/\hbar}$$

الف- $D^{(j)}[R(\alpha, \beta, \gamma)]$ را صریحاً به صورت حاصلضرب سه ماتریس 3×3 بنویسید (نتیجه حاصل از تمرین ۱۲-۵-۵ را با $J_x \rightarrow J_y$ به کار ببرید).

ب- این عملگر را روی $|1, 1\rangle$ اثر داده و نشان دهید که $\langle \mathbf{J} \rangle$ در حالت به دست آمده برابر است با

$$\langle \mathbf{J} \rangle = \hbar(\sin \beta \cos \alpha \mathbf{i} + \sin \beta \sin \alpha \mathbf{j} + \cos \beta \mathbf{k})$$

ج- نشان دهید که برای هیچ مقدار از α ، β و γ نمی‌توان $|1, 1\rangle$ را به $|1, 0\rangle$ چرخاند.

د- نشان دهید که همیشه می‌توان هر $|1, m\rangle$ را به یک ترکیب خطی که شامل $|1, m'\rangle$ ها است چرخاند یعنی برای یک α ، β و γ و هر m و m' ،

$$\langle 1, m' | D^{(j)}[R(\alpha, \beta, \gamma)] | 1, m \rangle \neq 0$$

هـ) برای اینکه ببینیم گاهی می‌توان $|jm\rangle$ را به $|j, m'\rangle$ چرخاند، ثابت کنید که یک چرخش 180° حول محور z با اعمال روی $|1, 1\rangle$ آنرا به $|1, -1\rangle$ می‌چرخاند.

ویژه توابع حرکت زاویه‌ای در پایه مختصه

اکنون به مرحله (۳) که در آغاز این بخش اشاره شد برمی‌گردیم، یعنی ساخت ویژه توابع L^2 و L_z در پایه مختصه، با داشتن اطلاعات درباره کت‌های $|lm\rangle$.

حالت‌های متناظر با یک l معین را در نظر بگیرید. «بالاترین» حالت $|ll\rangle$ رابطه

$$L_+ |ll\rangle = 0 \quad (12-5-26)$$

را برآورده می‌کند. اگر عملگر $L_{\pm} = L_x \pm iL_y$ را در مختصات کروی بنویسیم خواهیم داشت:

$$L_{\pm} \xrightarrow{\text{coordinate basis}} \pm \hbar e^{\pm i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \pm i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (12-5-27)$$

تمرین ۱۲-۵-۸: (انتخابی). ثابت کنید که

$$L_x \xrightarrow{\text{coordinate basis}} i\hbar \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos \phi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

$$L_y \xrightarrow{\text{coordinate basis}} i\hbar \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \sin \phi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

اگر ویژه تابع متناظر با $|l l\rangle$ را با $\psi_l'(r, \theta, \phi)$ نشان دهیم خواهیم دید که معادله

$$\left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \psi_l'(r, \theta, \phi) = 0 \quad (28-5-12)$$

را برآورده می‌کند. از آنجا که ψ_l' ویژه تابعی از L_z با ویژه مقدار $l \hbar$ است، قرار می‌دهیم:

$$\psi_l'(r, \theta, \phi) = U_l'(r, \theta) e^{il\phi} \quad (29-5-12)$$

و نتیجه می‌شود که

$$\left(\frac{\partial}{\partial \theta} - l \cot \theta \right) U_l' = 0 \quad (30-5-12)$$

$$\frac{dU_l'}{U_l'} = l \frac{d(\sin \theta)}{\sin \theta}$$

یا

$$U_l'(r, \theta) = R(r) (\sin \theta)^l \quad (31-5-12)$$

که $R(r)$ تابعی دلخواه (قابل بهنجارش) از r است. وقتی مسئله ویژه مقدری هامیلتونی‌های با ناوردایی چرخشی را بررسی می‌کنیم اگر به دنبال ویژه توابع همزمان H ، L^2 و L_z باشیم خواهیم دید که H ، R را محدود می‌کند. اما ابتدا اجازه دهید همان‌طور که در مطالعه L_z در دو بعد انجام دادیم تابعی را معرفی کنیم که در غیاب مختصه شعاعی، جواب منحصره‌فرد غیر تبهنگن می‌شده است:

$$Y_l'(\theta, \phi) = (-1)^l \left[\frac{(2l+1)!}{4\pi} \right]^{1/2} \frac{1}{2^l l!} (\sin \theta)^l e^{il\phi} \quad (32-5-12)$$

در حالی که عامل فاز $(-1)^l$ ، قرار داد ما را منعکس می‌کند، بقیه اطمینان می‌دهند که

$$\int |Y_l'|^2 d\Omega \equiv \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} |Y_l'|^2 d(\cos \theta) d\phi = 1 \quad (33-5-12)$$

را می‌توانیم با استفاده از عملگر پایین برنده محاسبه کنیم. از آنجا که

$$L_-|l\rangle = \hbar[l(l+1)(1)]^{1/2}|l, l-1\rangle = \hbar(2l)^{1/2}|l, l-1\rangle$$

$$Y_l^{l-1}(\theta, \phi) = \frac{1}{(2l)^{1/2}} \frac{(-1)}{\hbar} \left[\hbar e^{-i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \right] Y_l^l \quad (۳۴-۵-۱۲)$$

می‌توانیم به همین شیوه عمل کنیم تا به Y_l^{-l} برسیم. نتیجه، برای $m \geq 0$ خواهد شد:

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^l \left[\frac{(2l+1)!}{4\pi} \right]^{1/2} \frac{1}{2^l l!} \left[\frac{(l+m)!}{(2l)!(l-m)!} \right]^{1/2} e^{im\phi} (\sin \theta)^{-m} \times \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l} \quad (۳۵-۵-۱۲)$$

برای $m < 0$ ، معادله (۳۵-۵-۱۲) را ببینید. این توابع، هماهنگ‌های کروی نامیده شده و شرط راست‌هنجاری را ارضا می‌کنند:

$$\int Y_l^{m*}(\theta, \phi) Y_l^{m'}(\theta, \phi) d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

روش دیگر برای Y_l^m ها، حل مستقیم مسئله ویژه مقاداری L^2 و L_z در پایه مختصه است که در آن

$$L^2 \rightarrow (-\hbar^2) \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \quad (۳۶-۵-۱۲)$$

و البته

$$L_z \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

اگر به دنبال ویژه توابع مشترک به شکل $f(\phi)e^{im\phi}$ باشیم، که بین $\theta = 0$ و π منظم هستند، خواهیم دید که L^2 دارای ویژه مقادیری به شکل $l(l+1)\hbar^2$ ، $l = 0, 1, 2, \dots$ است که $l \geq |m|$ است. توابع Y_l^m متقابلاً (دو به دو) بر هم عمود هستند زیرا آنها ویژه توابع غیر تبهگن L^2 و L_z ، که روی توابع تک مقدار از θ و ϕ هرمیتی اند، هستند.

تمرین ۱۲-۵-۹: نشان دهید که L^2 بالا هرمیتی است بدین معنی که

$$\int \psi_2^*(L^2 \psi_1) d\Omega = \left[\int \psi_1^*(L^2 \psi_2) d\Omega \right]^*$$

برای L_z هم که به θ حساس نیست و نسبت به انتگرال گیری روی ϕ هرمیتی است، همین طور است. می‌توانیم هر $\psi(r, \theta, \phi)$ را بر حسب $Y_l^m(\theta, \phi)$ ها بسط دهیم و از ضرایب وابسته به r استفاده کنیم (از معادله (۲-۱-۲۰) برای بسطی مشابه کمک می‌گیریم):

$$\psi(r, \theta, \phi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l C_l^m(r) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (۱۲-۵-۳۷\text{-الف})$$

که در آن

$$C_l^m(r) = \int Y_l^{m*}(\theta, \phi) \psi(r, \theta, \phi) d\Omega \quad (۱۲-۵-۳۷\text{-ب})$$

اگر $\langle \psi | L^2 | \psi \rangle$ را محاسبه کنیم و نتیجه را به عنوان متوسط وزنی تعبیر کنیم، به آسانی می‌توانیم بینیم که (با فرض اینکه ψ به یک بهنجار شده است)،

$$P(L^2 = l(l+1)\hbar^2, L_z = m\hbar) = \int_0^{\infty} |C_l^m(r)|^2 r^2 dr \quad (۱۲-۵-۳۸)$$

از بالا واضح است که C_l^m دامنه یافتن ذره در یک فاصله شعاعی r با تکانه زاویه‌ای (l, m) است.^۱ بسط معادله (۱۲-۵-۳۷-الف) به ما می‌گوید که چطور هر حالت $\psi(r, \theta, \phi)$ را به اندازه زاویه θ (در اصل) بچرخانیم:

(۱) - ماتریس‌های قطری بلوکی $\exp(-i\theta \cdot \mathbf{L} / \hbar)$ را تشکیل می‌دهیم.

(۲) - هر بلوک، C_l^m ها را به ترکیب خطی از یکدیگر خواهد چرخاند یعنی تحت اثر $U[R]$ ، ضرایب $C_l^m(r)$ ، $m = l, l-1, \dots, -l$ ؛ به وسیله $D_{m'm}^{(l)}$ با یکدیگر مخلوط خواهند شد.

در عمل این مراحل را فقط در صورتی می‌توان انجام داد که ψ فقط شامل Y_l^m های با l کوچک باشد. یک مثال واقعی در یکی از تمرین‌ها ارائه خواهد شد.

در اینجا بعضی از Y_l^m ها ارائه شده‌اند:

$$Y_0^0 = (4\pi)^{-1/2}$$

$$Y_1^{\pm 1} = \mp (3/8\pi)^{1/2} \sin \theta e^{\pm i\phi}$$

$$Y_1^0 = (3/4\pi)^{1/2} \cos \theta$$

(۱۲-۵-۳۹)

$$Y_2^{\pm 2} = (15/32\pi)^{1/2} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}$$

$$Y_2^{\pm 1} = \mp (15/8\pi)^{1/2} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi}$$

$$Y_2^0 = (5/16\pi)^{1/2} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

توجه کنید که

$$Y_l^{-m} = (-1)^m (Y_l^m)^* \quad (۱۲-۵-۴۰)$$

۱- توجه کنید که r همان ویژه مقدار عملگر $(X^2 + Y^2 + Z^2)^{1/2}$ است که با L^2 و L_z جابه‌جا می‌شود.

چند جمله‌ای‌های وابسته لژاندر P_l^m (با $0 \leq m \leq l$) که ارتباط نزدیکی با هماهنگ‌های کروی دارند به صورت

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \left[\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!} \right]^{1/2} (-1)^m e^{im\phi} P_l^m(\cos \theta) \quad (41-5-12)$$

تعریف می‌شوند. اگر $m = 0$ باشد، $P_l^0(\cos \theta) \equiv P_l(\cos \theta)$ یک چند جمله‌ای لژاندر نامیده می‌شود. شکل توابع Y_l^m برای l بزرگ توابع $|Y_l^m|$ ویژگی‌های کلاسیکی زیادی نشان می‌دهند. برای مثال $|Y_l^m| \propto |\sin^l \theta|$ ، تقریباً به طور کامل به صفحه $x - y$ محدود می‌شود، همان‌طور که از یک ذره کلاسیکی با تکانه زاویه‌ای واقع در جهت محور z انتظار می‌رود. همین‌طور، برای l بزرگ تقریباً به طور کامل به محور z محدود می‌شود. نمودارهای قطبی این توابع را می‌توانید در بسیاری از کتب درسی بیابید.

تمرین ۱۲-۵-۱۰: معادله دیفرانسیل متناظر با

$$L^2 |\alpha\beta\rangle = \alpha |\alpha\beta\rangle$$

را در پایه مختصه بنویسید، از عملگر L^2 داده شده در معادله (۱۲-۵-۳۶) استفاده کنید. قبلاً از تحلیل $-i\hbar(\partial/\partial\phi)$ دیدیم که $\beta = m\hbar$ است. بنابراین فرض کنید که ویژه توابع همزمان دارای شکل

$$\psi_{\alpha m}(\theta, \phi) = P_{\alpha}^m(\theta) e^{im\phi}$$

هستند و نشان دهید که P_{α}^m معادله

$$\left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\alpha}{\hbar^2} - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) P_{\alpha}^m(\theta) = 0$$

را برآورده می‌کند. لازم است نشان دهیم که

$$\frac{\alpha}{\hbar^2} = l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (1)$$

(۲)

$$|m| \leq l$$

ما فقط قسمت (۱) و همچنین حالت $m = 0$ را در نظر خواهیم گرفت. با بازنویسی معادله برحسب $u = \cos \theta$ نشان دهید که P_{α}^0 معادله

$$(1-u^2) \frac{d^2 P_{\alpha}^0}{du^2} - 2u \frac{dP_{\alpha}^0}{du} + \left(\frac{\alpha}{\hbar^2} \right) P_{\alpha}^0 = 0$$

را برآورده می‌کند. خودتان را متقاعد کنید که یک جواب سری توانی

$$P_{\alpha}^0 = \sum_{n=0}^{\infty} C_n u^n$$

به یک رابطه بازگشتی دو جمله‌ای منجر خواهد شد. نشان دهید که وقتی $n \rightarrow \infty$ میل می‌کند، $(C_{n+2}/C_n) \rightarrow 1$. بنابراین وقتی $|u| \rightarrow 1$ میل می‌کند ($\theta \rightarrow 0$ یا π) سری واگرا می‌شود. نشان دهید که اگر $\alpha/\hbar^2 = l(l+1)$ باشد، $l = 0, 1, 2, \dots$ ، سری قطع خواهد شد و تابعی زوج یا فرد از u می‌شود. توابع $P_\alpha^0(u) = P_{l(l+1)\hbar^2}^0(u) \equiv P_l^0(u) \equiv P_l(u)$ همان چند جمله‌ای‌های لژاندر، صرف‌نظر از یک ضریب، هستند. P_0 ، P_1 ، P_2 را مشخص کرده و با توابع Y_l^0 مقایسه کنید (ضرایب کلی را نادیده بگیرید).
تمرین ۱۲-۵-۱۱: با شروع از معادله (۱۲-۵-۲۸)، Y_1^1 را به دست آورید و آنرا بهنجار کنید [ضرایب $(-1)^l$ را از معادله (۱۲-۵-۳۲) به خاطر داشته باشید]. آنرا پایین ببرید تا به Y_1^0 و Y_1^{-1} برسید و با معادله (۱۲-۵-۳۹) مقایسه کنید.

تمرین ۱۲-۵-۱۲: از آنجا که L_z با Π جابه‌جا می‌شوند باید پایه مشترکی با آن داشته باشند. ثابت کنید که $Y_l^m \xrightarrow{\Pi} (-1)^l Y_l^m$. (ابتدا نشان دهید که تحت پاریته، $\theta \rightarrow \pi - \theta$ و $\phi \rightarrow \phi + \pi$ می‌روند. نتیجه را برای Y_l^1 ثابت کنید. ثابت کنید که L_- پاریته را تغییر نمی‌دهد و بدانوسیله نتیجه را برای همه Y_l^m ‌ها ثابت کنید).

تمرین ۱۲-۵-۱۳: ذره‌ای را در حالتی که با

$$\psi = N(x + y + 2z) e^{-\alpha r}$$

توصیف می‌شود در نظر بگیرید که N ضریب بهنجارش است.
 الف- با نوشتن توابع $Y_1^{\pm 1,0}$ برحسب x و y و z و r نشان دهید که

$$Y_1^{\pm 1} = \mp \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \frac{x \pm iy}{2^{1/2} r} \quad (۱۲-۵-۴۲)$$

$$Y_1^0 = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \frac{z}{r}$$

ب- با استفاده از این نتیجه نشان دهید که برای ذره‌ای که به وسیله ψ بالا توصیف می‌شود،

$$P(\ell_z = 0) = 2/3, \quad P(\ell_z = +\hbar) = 1/6 = P(\ell_z = -\hbar)$$

تمرین ۱۲-۵-۱۴: چرخش $\theta_x \hat{i}$ را در نظر بگیرید. تحت این چرخش،

$$x \rightarrow x$$

$$y \rightarrow y \cos \theta_x - z \sin \theta_x$$

$$z \rightarrow z \cos \theta_x + y \sin \theta_x$$

بنابراین می‌بایست داشته باشیم:

$$\psi(x, y, z) \xrightarrow{U[R(\theta_x \hat{i})]} \psi_R = \psi(x, y \cos \theta_x - z \sin \theta_x, z \cos \theta_x + y \sin \theta_x)$$

اجازه دهید این پیش بینی را برای یک مورد خاص

$$\psi = Az e^{-r^2/a^2}$$

ثابت کنیم که باید به

$$\psi_R = A(z \cos \theta_x - y \sin \theta_x) e^{-r^2/a^2}$$

برود.

الف- ψ را برحسب Y_1^0 ، Y_1^1 و Y_1^{-1} بسط دهید.

ب- ماتریس $e^{-i\theta_x L_x / \hbar}$ را به کار برده و سرنوشت ψ را تحت این چرخش به دست آورید. نتیجه خود را در

مقابل آنچه در بالا ارائه شد مقایسه کنید [راهنمایی: (۱) - $\psi \sim Y_1^0$ که متناظر است با

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

(۲)- از معادله (۱۲-۵-۴۲) استفاده کنید].

۱۲-۶- حل مسائل دارای ناوردایی چرخشی

اکنون رده‌ای از مسائل را در نظر می‌گیریم که اهمیت عملی زیادی دارند: مسائلی که در آنها

$V(r, \theta, \phi) = V(r)$ است. معادله شرودینگر در مختصات کروی به صورت

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + V(r) \right] \quad (۱۲-۶-۹)$$

$$\times \psi_E(r, \theta, \phi) = E \psi_E(r, \theta, \phi)$$

می‌شود. از آنجا که برای پتانسیل‌های با تقارن کروی $[H, L] = 0$ است، به دنبال ویژه توابع همزمان H ، L^2 و L_z می‌گردیم:

$$\psi_{Elm}(r, \theta, \phi) = R_{Elm}(r) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (۱۲-۶-۲)$$

با قرار دادن این شکل تابع موج و یادآوری اینکه قسمت زاویه‌ای ∇^2 همان عملگر L^2 در پایه مختصه (مکان) است [صرف نظر از یک ضریب $(-\hbar^2 r^2)^{-1}$ ، معادله (۱۲-۵-۳۶) را ببینید]، به معادله شعاعی

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] + V(r) \right\} R_{El} = ER_{El} \quad (۱۲-۶-۳)$$

می‌رسیم. توجه کنید که اندیس m حذف شده است: نه انرژی و نه تابع شعاعی به آن بستگی دارند. همچون گذشته می‌بینیم که تبهگنی $(2l+1)$ گانه برای H وجود دارد.

تمرین ۱۲-۶-۱: ذره‌ای به وسیله تابع موج

$$\psi_E(r, \theta, \phi) = A e^{-r/a_0} \quad (a_0 = \text{const})$$

توصیف می‌شود.

الف- تکانه زاویه‌ای مربوط به حالت چیست؟

ب- با فرض اینکه ψ_E یک ویژه حالت در پتانسیلی است که در وضعیت $r \rightarrow \infty$ صفر می‌شود، E را بیابید (جملات پیشرو را در معادله شرودینگر جورسازی کنید).

ج- با به دست آوردن E ، r را متناهی در نظر گرفته و $V(r)$ را به دست آورید. در اینجا بهتر است تابع U_{El} را معرفی کنیم که به صورت

$$R_{El} = U_{El}/r \quad (۱۲-۶-۴)$$

تعریف می‌شود و از معادله زیر پیروی می‌کند

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] \right\} U_{El} = 0 \quad (۱۲-۶-۵)$$

تمرین ۱۲-۶-۲: مراحل منتهی به معادله (۱۲-۶-۳) از (۱۲-۶-۵) را بنویسید.

این معادله با معادله شرودینگر یک بعدی یکسان است با این تفاوت‌ها که:

۱- متغیر مستقل (r) از 0 تا ∞ می‌رود نه از $-\infty$ تا $+\infty$.

۲- علاوه بر پتانسیل واقعی $V(r)$ ، سد دافعه گریز از مرکز، $l(l+1)\hbar^2/2\mu r^2$ ، در همه حالت‌ها به جز $l=0$ وجود دارد.

۳- شرایط مرزی روی U از حالت یک بعدی متفاوتند. این شرایط را با بازنویسی معادله (۱۲-۶-۵) به صورت یک معادله ویژه مقدری

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] U_{El} \equiv D_l(r) U_{El} = E U_{El} \quad (۱۲-۶-۶)$$

و درخواست اینکه توابع U_{El} طوری باشند که D_l نسبت به آنها هرمیتی باشد به دست می‌آوریم. به عبارتی دیگر اگر U_1 و U_2 دو تابع اینچینی باشند، آنگاه درخواست می‌کنیم که

$$\int_0^\infty U_1^*(D_l U_2) dr = \left[\int_0^\infty U_2^*(D_l U_1) dr \right]^* \equiv \int_0^\infty (D_l U_1)^* U_2 dr \quad (۱۲-۶-۷-الف)$$

این به شرط

$$\left(U_1^* \frac{dU_2}{dr} - U_2 \frac{dU_1^*}{dr} \right) \Big|_0^\infty = 0 \quad (۱۲-۶-۷-ب)$$

تقلیل می‌یابد.

تمرین ۱۲-۶-۳: نشان دهید که معادله (۱۲-۶-۷-ب) از (۱۲-۶-۷-الف) نتیجه می شود. حال شرط لازم برای اینکه

$$\int_0^{\infty} |R_{El}|^2 r^2 dr = \int_0^{\infty} |U_{El}|^2 dr$$

قابل بهنجارش به یک یا تابع دلتای دیراک باشد آن است که

$$U_{El} \xrightarrow[r \rightarrow \infty]{} 0 \quad (12-6-8-الف)$$

یا

$$U_{El} \xrightarrow[r \rightarrow \infty]{} e^{ikr} \quad (12-6-8-ب)$$

اولی متناظر با حالت های مقید و دومی متناظر با حالت های نامقید است. در هر دو حالت، عبارت داخل پرانتز در معادله (۱۲-۶-۷-ب) در حد بالا صفر می شود و هر میتی بودن D_1 منوط به این می شود که آیا

$$\left[U_1^* \frac{dU_2}{dr} - U_2 \frac{dU_1^*}{dr} \right]_0 = 0 \quad (12-6-9)$$

می شود یا نه. این شرط در صورتی تأمین می شود که

$$U \xrightarrow[r \rightarrow 0]{} c, \quad c = \text{const} \quad (12-6-10)$$

اگر c غیر صفر باشد، آنگاه

$$R \sim \frac{U}{r} \sim \frac{c}{r}$$

در مبداء واگره می شود. این به خودی خود یک سلب قابلیت نیست زیرا R هنوز انتگرال پذیر مجذوری است. مشکل با $c \neq 0$ آن است که تابع موج کل متناظر^۲

$$\psi \sim \frac{c}{r} Y_0^0$$

معادله شرودینگر را در مبداء برآورده نمی کند. این به دلیل رابطه

$$\nabla^2(1/r) = -4\pi\delta^3(\mathbf{r}) \quad (12-6-11)$$

است که اثبات آن به تمرین ۱۲-۶-۴ واگذار می شود. بنابراین مگر اینکه $V(r)$ شامل یک تابع دلتا در مبداء باشد (که فرض می کنیم اینگونه نیست) انتخاب $c \neq 0$ غیر منطقی است. لذا نتیجه می گیریم که

۱- برای حالت نوسانی، می بایست از روش حدگیری توصیف شده در بخش ۱-۱۰ استفاده کنیم.

۲- همان طور که به زودی خواهیم دید، $l \neq 0$ با درخواست $r^{-1} \rightarrow \psi(r)$ هنگام میل $r \rightarrow 0$ ناسازگار است. لذا

قسمت زاویه ای ψ مجبور است $Y_0^0 = (4\pi)^{-\frac{1}{2}}$ باشد.

$$U_{El} \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0 \quad (12-6-12)$$

تمرین ۱۲-۶-۴: الف- نشان دهید که

$$\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \equiv \delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z') = \frac{1}{r'^2 \sin \theta} \delta(r-r')\delta(\theta-\theta')\delta(\phi-\phi')$$

(یک تابع آزمون در نظر بگیرید).

ب- نشان دهید که

$$\nabla^2(1/r) = -4\pi\delta^3(\mathbf{r})$$

(راهنمایی: ابتدا نشان دهید که اگر $r \neq 0$ باشد $\nabla^2(1/r) = 0$ می‌شود. برای اینکه ببینید در $r = 0$ چه اتفاقی می‌افتد، کره کوچکی به مرکزیت مبدا در نظر گرفته و از قانون گاوس و اتحاد $\nabla^2\phi = \nabla \cdot \nabla\phi$ استفاده کنید!).

ویژگی‌های عمومی U_{El}

قبلاً برخی از ویژگی‌های U_{El} را هنگام میل ∞ یا $r \rightarrow 0$ بحث کرده‌ایم، تلاش خواهیم کرد تا با بررسی معادله حاکم بر آن در این حدود و بدون انجام فرضیات مفصل روی $V(\mathbf{r})$ اطلاعات بیشتری در مورد U_{El} به دست آوریم. ابتدا حد $r \rightarrow 0$ را در نظر بگیرید. با فرض اینکه $V(r)$ کمتر از r^{-2} تکیه است، معادله به وسیله سد گریز از مرکز غالب می‌شود:

$$U_l'' \simeq \frac{l(l+1)}{r^2} U_l \quad (13-6-12)$$

چون E در این حد بی‌اهمیت است، اندیس E را حذف کرده‌ایم. اگر جوابی به شکل

$$U_l \sim r^\alpha$$

بخواهیم خواهیم داشت:

$$\alpha(\alpha-1) = l(l+1)$$

یا

$$\alpha = l+1 \quad \text{or} \quad (-l)$$

و

$$U_l \sim \begin{cases} r^{l+1} & \text{(regular)} \\ r^{-l} & \text{(irregular)} \end{cases} \quad (14-6-12)$$

۱- یا این معادله را با معادله پواسون در الکتروستاتیک $\nabla^2\phi = -4\pi\rho$ مقایسه کنید. در اینجا $\rho = \delta^2(\mathbf{r})$ ، که یک بار نقطه‌ای واحد را در مبدا نشان می‌دهد. در این حالت از قانون کولن می‌دانیم که $\phi = \frac{1}{r}$.

جواب نامنظم را کنار می‌گذاریم چون شرط مرزی $U(0) = 0$ را تأمین نمی‌کند. رفتار جواب‌های منظم، نزدیک مبداء با انتظار ما مبنی بر اینکه وقتی تکانه زاویه‌ای افزایش می‌یابد، ذره باید از مبداء بیشتر و بیشتر دور شود، سازگار است.

واضح است که بحث‌های فوق فقط در صورتی درستند که $l \neq 0$ باشد. اگر $l = 0$ باشد، سد گریز از مرکز (مرکز گریزی) وجود نداشته و جواب می‌تواند به پتانسیل حساس باشد. در مسائلی که بررسی خواهیم کرد $U_{l=0}$ هم به صورت r^{l+1} با $l = 0$ رفتار خواهد کرد. اگر چه وقتی $r \rightarrow 0$ میل می‌کند $U_0(r) \rightarrow 0$ میل می‌کند، توجه کنید که یک ذره در حالت $l = 0$ با دامنه غیر صفر در مبداء خواهد بود، چون در $r = 0$ ، $R_0(r) = U_0(r)/r \neq 0$ است.

حال رفتار U_{El} را در $r \rightarrow \infty$ در نظر بگیرید. اگر $V(r)$ هنگام میل $r \rightarrow \infty$ صفر نشود، بر نتیجه غالب خواهد شد (مثل حالت نوسانگر همسانگرد که برای آن $V(r) \propto r^2$ است) و در حالت کلی هیچ چیزی نمی‌توان گفت. بنابراین حالتی را در نظر می‌گیریم که در آن وقتی $r \rightarrow \infty$ میل می‌کند $rV(r) \rightarrow 0$ میل می‌کند. در r بزرگ، معادله به صورت

$$\frac{d^2 U_E}{dr^2} = -\frac{2\mu E}{\hbar^2} U_E \quad (12-6-15)$$

می‌شود. اندیس l را حذف کرده‌ایم چون جواب به l بستگی ندارد. اکنون دو حالت وجود دارد: $E > 0$: ذره از نظر کلاسیکی مجاز به فرار به بی‌نهایت است. انتظار داریم وقتی $r \rightarrow \infty$ میل می‌کند U_E نوسان کند.

$E < 0$: ذره مقید است. ناحیه $r \rightarrow \infty$ از نظر کلاسیکی ممنوع است و انتظار داریم U_E در آنجا به‌طور نمایی افت کند.

حالت اول را در نظر بگیرید. جواب‌های معادله (12-6-15) به شکل

$$U_E = A e^{ikr} + B e^{-ikr}, \quad k = (2\mu E/\hbar^2)^{1/2}$$

هستند یعنی ذره دور از مبداء به‌صورت یک ذره آزاد رفتار می‌کند. اکنون ممکن است تعجب کنید که چرا درخواست کردیم که وقتی $r \rightarrow \infty$ میل می‌کند $rV(r) \rightarrow 0$ میل کند نه فقط $V(r) \rightarrow 0$. برای پاسخ به این سوال U_E را به‌صورت

$$U_E = f(r) e^{\pm ikr}$$

نوشته و ببینیم آیا هنگام $r \rightarrow \infty$ به یک ثابت میل می‌کند؟ با قرار دادن این شکل U_E در معادله (12-6-15) می‌بینیم که (با نادیده گرفتن سد گریز از مرکز)،

۱- اگر چه A و B در این شکل مجانبی اختیاری هستند، نسبت آنها با درخواست اینکه اگر U_E به طرف $r = 0$ ادامه داده شود می‌بایست صفر شود مشخص می‌شود. اینکه فقط یک پارامتر آزاد در جواب وجود دارد نه دو پارامتر به این خاطر است که D_l حتی برای $E > 0$ غیر تبه‌گن است که به نوبه خود به قید $U_{El}(r=0) = 0$ مربوط می‌شود. تمرین ۱۲-۶-۵ را ببینید.

$$f'' \pm (2ik)f' - \frac{2\mu V(r)}{\hbar^2} f = 0$$

چون انتظار داریم وقتی $r \rightarrow \infty$ میل می‌کند $f(r)$ کند تغییر باشد از f چشم پوشی کرده و به معادله زیر می‌رسیم

$$\frac{df}{f} = \mp \frac{i}{k} \frac{\mu}{\hbar^2} V(r) dr$$

(۱۲-۶-۱۶)

$$f(r) = f(r_0) \cdot \exp \mp \left[\frac{i\mu}{k\hbar^2} \int_{r_0}^r V(r') dr' \right]$$

که r_0 یک ثابت است. اگر $V(r)$ سریعتر از r^{-1} افت کند یعنی وقتی $r \rightarrow \infty$ میل می‌کند $rV(r) \rightarrow 0$ میل کند، می‌توانیم وقتی در انتگرال $r \rightarrow \infty$ میل می‌کند حد گرفته و در $r \rightarrow \infty$ ، $f(r)$ به یک ثابت میل کند. اگر مثل مسئله کولنی،

$$V(r) = -\frac{e^2}{r}$$

باشد آنگاه

$$f(r) = f(r_0) \exp \pm \left[\frac{i\mu e^2}{k\hbar^2} \ln \left(\frac{r}{r_0} \right) \right]$$

و

$$U_E(r) \sim \exp \pm \left[i \left(kr + \frac{\mu e^2}{k\hbar^2} \ln r \right) \right] \quad (۱۲-۶-۱۷)$$

این بدین معنی است که مهم نیست که ذره چقدر از مبدا دور باشد و هرگز از پتانسیل کولنی کاملاً آزاد نیست. اگر $V(r)$ حتی آرامتر از یک پتانسیل کولنی افت کند، مسئله فقط وخیم‌تر می‌شود.

حالت $E < 0$ را در نظر می‌گیریم. همه نتایج مربوط به حالت $E > 0$ با تغییر

$$k \rightarrow ik, \quad \kappa = (2\mu|E|/\hbar^2)^{1/2}$$

به این حالت انتقال می‌یابند. بنابراین

$$U_E \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A e^{-\kappa r} + B e^{+\kappa r} \quad (۱۲-۶-۱۸)$$

باز هم B/A دلخواه نیست اگر که درخواست کنیم وقتی U_E به طرف داخل ($r=0$) ادامه داده شود در $r=0$ صفر شود. در اینجا، تابع نمایی صعودی غیر مجاز است. برای $E < 0$ دلخواه، هم $e^{\kappa r}$ و هم $e^{-\kappa r}$ در U_E وجود خواهند داشت. فقط برای بعضی مقادیر گسسته E قسمت $e^{\kappa r}$ وجود نخواهد داشت. اینها

ترازهای حالت مقید مجاز خواهند بود (اگر A/B دلخواه می‌شد می‌توانستیم $B=0$ انتخاب کرده و برای هر $E < 0$ به یک حالت مقید قابل بهنجارش برسیم).

همچون قبل، معادله (۱۲-۶-۱۸) فقط در صورتی درست است که $rV(r) \rightarrow 0$ میل کند. در حالت کولنی انتظار داریم [از معادله (۱۲-۶-۱۷) با $k \rightarrow i\kappa$ که

$$U_E \sim \exp\left(\pm \frac{\mu e^2}{\kappa \hbar^2} \ln r\right) e^{\mp \kappa r} \quad (12-6-19)$$

$$= (r)^{\pm \mu e^2 / \kappa \hbar^2} e^{\mp \kappa r}$$

وقتی مسئله اتم هیدروژن را حل می‌کنیم خواهیم دید که واقعاً اینگونه است.

وقتی $E < 0$ باشد، ویژه توابع انرژی قابل بهنجارش به یک هستند. چون عملگر $D_l(r)$ غیر تبهگن است (تمرین ۱۲-۶-۵) داریم:

$$\int_0^\infty U_{E'l}(r) U_{El}(r) dr = \delta_{EE'}$$

و توابع

$$\psi_{Elm}(r, \theta, \phi) = R_{El}(r) Y_l^m(\theta, \phi)$$

از

$$\iiint \psi_{Elm}^*(r, \theta, \phi) \psi_{E'l'm'}(r, \theta, \phi) r^2 dr d\Omega = \delta_{EE'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

پیروی می‌کنند.

ما حالت $E > 0$ را در نظر خواهیم گرفت.

تمرین ۱۲-۶-۵: نشان دهید که D_l در فضای توابع U که وقتی $r \rightarrow 0$ میل می‌کند صفر می‌شوند غیر تبهگن است (اثبات قضیه ۵ بخش ۵-۱۲-۵ به‌خاطر بیاورید). توجه کنید که U_{El} حتی برای $E > 0$ غیر تبهگن است. این یعنی E, l و m دو سه بعد یک حالت را به‌طور کامل برچسب می‌زنند.

ذره آزاد در مختصات کروی^۱

اگر طبق معمول با

$$\psi_{Elm}(r, \theta, \phi) = R_{El}(r) Y_l^m(\theta, \phi)$$

شروع کنیم و به U_{El} متوسل شویم به معادله زیر می‌رسیم

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] U_{El} = 0, \quad k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$$

با تقسیم دو طرف بر k^2 و تغییر متغیر $\rho = kr$ نتیجه می‌شود

$$\left[-\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] U_l = U_l \quad (12-6-20)$$

متغیر k که ظاهر نشده است، وقتی جواب را بر حسب $r = \rho/k$ بازنویسی می‌کنیم مجدداً ظاهر خواهد شد. این مسئله تا حد زیادی به نوسانگر هماهنگ شبیه است جز اینکه به جای پتانسیل ρ^2 پتانسیل $1/\rho^2$ داریم. بنابراین عملگرهای مانسته عملگرهای بالا برنده و پایین برنده را به صورت

$$d_l = \frac{d}{d\rho} + \frac{l+1}{\rho} \quad (12-6-21\text{الف})$$

و الحاقی آن

$$d_l^\dagger = -\frac{d}{d\rho} + \frac{l+1}{\rho} \quad (12-6-21\text{ب})$$

تعریف می‌کنیم (توجه کنید که $d/d\rho$ پاد هرمیتی است) بر حسب اینها معادله (12-6-20) به صورت

$$(d_l d_l^\dagger) U_l = U_l \quad (12-6-22)$$

در می‌آید. هر دو طرف را از چپ در d_l^\dagger ضرب می‌کنیم

$$d_l^\dagger d_l (d_l^\dagger U_l) = d_l^\dagger U_l \quad (12-6-23)$$

می‌توانید ثابت کنید که

$$d_l^\dagger d_l = d_{l+1} d_{l+1}^\dagger \quad (12-6-24)$$

به طوری که

$$d_{l+1} d_{l+1}^\dagger (d_l^\dagger U_l) = d_l^\dagger U_l \quad (12-6-25)$$

نتیجه اینکه

$$d_l^\dagger U_l = c_l U_{l+1} \quad (12-6-26)$$

که در آن c_l یک ثابت است. ما آنرا یک انتخاب می‌کنیم چون همیشه می‌تواند در بهنجارش گنجانده شود. می‌بینیم که d_l^\dagger به عنوان یک «عملگر بالا برنده» در اندیس l عمل می‌کند. با داشتن U_0 می‌توانیم بقیه را به دست آوریم. ^۱ از معادله (12-6-20) واضح است که اگر $l = 0$ باشد دو جواب مستقل وجود دارد

$$U_0^A(\rho) = \sin \rho, \quad U_0^B = -\cos \rho \quad (12-6-27)$$

ثابت‌ها در جلو طبق قرار داد انتخاب می‌شوند. U_0^B در $\rho=0$ غیرقابل قبول است چون از معادله (۱۲-۶-۱۲) پیروی نمی‌کند. اما اگر معادله را در ناحیه‌ای بررسی کنیم که مبداء را شامل نمی‌شود U_0^B باید در نظر گرفته شود. اکنون جواب‌هایی را در نظر می‌گیریم که از U_0^A و U_0^B ساخته می‌شوند. با معادله

$$U_{l+1} = d_l^\dagger U_l \quad (12-6-28)$$

شروع می‌کنیم. به توابع $R_l = U_l / \rho$ علاقه‌مند هستیم، این توابع از معادلات زیر پیروی می‌کنند:

$$\begin{aligned} \rho R_{l+1} &= d_l^\dagger (\rho R_l) \\ &= \left(-\frac{d}{d\rho} + \frac{l+1}{\rho} \right) (\rho R_l) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} R_{l+1} &= \left(-\frac{d}{d\rho} + \frac{l}{\rho} \right) R_l \\ &= \rho^l \left(-\frac{d}{d\rho} \right) \frac{R_l}{\rho^l} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{R_{l+1}}{\rho^{l+1}} &= \left(-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right) \frac{R_l}{\rho^l} \\ &= \left(-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^2 \frac{R_{l-1}}{\rho^{l-1}} \\ &= \left(-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^{l+1} \frac{R_0}{\rho^0} \end{aligned}$$

به طوری که سرانجام داریم

$$R_l = (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right)^l R_0 \quad (12-6-29)$$

اکنون دو امکان برای R_0 وجود دارد:

$$R_0^A = \frac{\sin \rho}{\rho}$$

$$R_0^B = \frac{-\cos \rho}{\rho}$$

اینها توابع

$$R_l^A \equiv j_l = (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \left(\frac{\sin \rho}{\rho} \right) \quad (۱۲-۶-۳۰-الف)$$

را که توابع کروی بسل مرتبه l نامیده می‌شوند و توابع

$$R_l^B \equiv n_l = (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \left(\frac{-\cos \rho}{\rho} \right) \quad (۱۲-۶-۳۰-ب)$$

را که توابع کروی نویم مرتبه l نامیده می‌شوند تولید می‌کنند.^۱ در اینجا بعضی از این توابع ارائه می‌شوند:

$$\begin{aligned} j_0(\rho) &= \frac{\sin \rho}{\rho}, & n_0(\rho) &= \frac{-\cos \rho}{\rho} \\ j_1(\rho) &= \frac{\sin \rho}{\rho^2} - \frac{\cos \rho}{\rho}, & n_1(\rho) &= \frac{-\cos \rho}{\rho^2} - \frac{\sin \rho}{\rho} \\ j_2(\rho) &= \left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right) \sin \rho - \frac{3 \cos \rho}{\rho^2}, & n_2(\rho) &= - \left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right) \cos \rho - \frac{3 \sin \rho}{\rho^2} \end{aligned} \quad (۱۲-۶-۳۱)$$

وقتی $\rho \rightarrow \infty$ میل می‌کند این توابع به صورت

$$j_l \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \frac{1}{\rho} \sin \left(\rho - \frac{l\pi}{2} \right) \quad (۱۲-۶-۳۲)$$

$$n_l \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} -\frac{1}{\rho} \cos \left(\rho - \frac{l\pi}{2} \right) \quad (۱۲-۶-۳۲)$$

رفتار می‌کنند. علی‌رغم تکیه‌گی‌های واضح هنگام میل $\rho \rightarrow 0$ ، توابع $j_l(\rho)$ متناهی هستند و در واقع

$$j_l(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \frac{\rho^l}{(2l+1)!!} \quad (۱۲-۶-۳۳)$$

که $(2l+1)!! = (2l+1)(2l-1)(2l-3)\dots(5)(3)(1)$. اینها همان جواب‌های منظم ارائه شده در معادله (۱۲-۶-۱۴) هستند. از سوی دیگر توابع نویم تکیه بوده

$$n_l(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} -\frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}} \quad (۱۲-۶-۳۴)$$

و متناظر با جواب‌های نامنظم ارائه شده در معادله (۱۲-۶-۱۴) هستند.

۲- در بعضی مسائل با توابع کروی هنکل $h_l = j_l + in_l$ هم مواجه می‌شویم.

پس جواب‌های ذره - آزاد که در همه جای فضا منظم هستند عبارتند از

$$\psi_{Elm}(r, \theta, \phi) = j_l(kr) Y_l^m(\theta, \phi), \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \quad (۳۵-۶-۱۲)$$

اینها رابطه

$$\iiint \psi_{Elm}^* \psi_{E'l'm'} r^2 dr d\Omega = \frac{2}{\pi k^2} \delta(k-k') \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (۳۶-۶-۱۲)$$

را برآورده می‌کنند. در اینجا از این حقیقت استفاده می‌کنیم که

$$\int_0^\infty j_l(kr) j_l(k'r) r^2 dr = \frac{2}{\pi k^2} \delta(k-k') \quad (۳۷-۶-۱۲)$$

تمرین ۱۲-۶-۶: الف- ثابت کنید که معادلات (۱۲-۶-۲۱) و (۱۲-۶-۲۲) با معادله (۱۲-۶-۲۰) هم ارزند. ب- معادله (۱۲-۶-۲۴) را ثابت کنید.

تمرین ۱۲-۶-۷: ثابت کنید که j_0 و j_1 دارای حدهایی هستند که با معادله (۱۲-۶-۳) مشخص می‌شوند.

تمرین ۱۲-۶-۸: ترازهای انرژی یک ذره را در یک جعبه کروی به شعاع r_0 در سکاتور $l=0$ به دست آورید.

تمرین ۱۲-۶-۹: نشان دهید که شرط کوانتش برای حالت‌های مقید $l=0$ در یک چاه کروی به عمق V_0 و شعاع r_0 عبارتست از

$$k'/\kappa = -\tan k'r_0$$

که در آن k' عدد موج داخل چاه و κ عدد موج مختلط برای دنباله نمایی خارج است. نشان دهید که برای $V_0 \ll \pi^2 \hbar^2 / 8\mu r_0^2$ هیچ حالت مقیدی وجود ندارد (تمرین ۵-۲-۶ را ببینید).

ارتباط با جواب در مختصات دکارتی

اگر به مسئله ذره آزاد در مختصات دکارتی پرداخته بودیم به نتایج زیر می‌رسیدیم

$$\psi_E(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}, \quad E = \frac{p^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \quad (۳۸-۶-۱۲)$$

حال حالتی را در نظر بگیرید که متناظر با ذره‌ای متحرک در امتداد محور z با تکانه p است چون

$$\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar = (pr \cos \theta)/\hbar = kr \cos \theta$$

می‌رسیم به

$$\psi_E(r, \theta, \phi) = \frac{e^{ikr \cos \theta}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \quad (۳۹-۶-۱۲)$$

باید این امکان وجود داشته باشد که این جواب را که توصیف کننده یک ذره در حال حرکت در جهت z با انرژی $E = \hbar^2 k^2 / 2\mu$ است، به صورت یک ترکیب خطی از توابع Ψ_{Elm} بنویسیم که دارای همین انرژی یا به طور معادل همین k هستند:

$$e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l C_l^m j_l(kr) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (40-6-12)$$

حال فقط جملات $m=0$ مهم اند چون سمت چپ مستقل از ϕ است. از نظر فیزیکی این به معنی آن است که یک ذره در حال حرکت در امتداد محور z دارای هیچ تکانه زاویه‌ای در آن جهت نیست. از آنجا که داریم

$$Y_l^0(\theta) = \left(\frac{2l+1}{4\pi} \right)^{1/2} P_l(\cos \theta)$$

$$e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} C_l j_l(kr) P_l(\cos \theta), \quad C_l = C_l^0 \cdot \left(\frac{2l+1}{4\pi} \right)^{1/2}$$

می‌توان نشان داد که

$$C_l = i^l (2l+1)$$

به طوری که

$$e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (41-6-12)$$

این رابطه در معادله پراکندگی به کمک ما خواهد آمد. در اینجا مطالعه ذره آزاد پایان می‌پذیرد.
تمرین ۱۲-۶-۱۰: (اختیاری). معادله (۴۱-۶-۱۲) را با فرض

الف- $\int_{-1}^1 P_l(\cos \theta) P_l(\cos \theta) d(\cos \theta) = [2/(2l+1)] \delta_{ll}$

ب- $P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l (x^2-1)^l}{dx^l}$

ج- $\int_0^1 (1-x^2)^m dx = \frac{(2m)!!}{(2m+1)!!}$

ثابت کنید. راهنمایی: بعد از مشخص کردن C_l ، حد $kr \rightarrow 0$ را در نظر بگیرید.

این بخش مسائل با ناوردایی چرخشی را با مطالعه مختصر نوسانگر همسانگرد به پایان می‌بریم. مهم‌ترین مسئله از این رده مسائل، اتم هیدروژن، به طور مفصل در فصل بعدی مطالعه خواهد شد.

نوسانگر همسانگرد

نوسانگر همسانگرد با هامیلتونی

$$H = \frac{P_x^2 + P_y^2 + P_z^2}{2\mu} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 (X^2 + Y^2 + Z^2) \quad (۴۲-۶-۱۲)$$

توصیف می شود. اگر طبق معمول از

$$\Psi_{Elm} = \frac{U_{El}(r)}{r} Y_l^m(\theta, \phi) \quad (۴۳-۶-۱۲)$$

استفاده کنیم به معادله شعاعی می رسم

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - \frac{1}{2} \mu \omega^2 r^2 - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] \right\} U_{El} = 0 \quad (۴۴-۶-۱۲)$$

وقتی $r \rightarrow \infty$ میل می کند، به

$$U \sim e^{-y^2/2} \quad (۴۵-۶-۱۲)$$

می رسم که در آن

$$y = \left(\frac{\mu \omega}{\hbar} \right)^{1/2} r \quad (۴۶-۶-۱۲)$$

بدون بعد است. بنابراین فرض می کنیم که

$$U(y) = e^{-y^2/2} v(y) \quad (۴۷-۶-۱۲)$$

و معادله زیر برای $v(y)$ به دست می آید:

$$v'' - 2yv' + \left[2\lambda - 1 - \frac{l(l+1)}{y^2} \right] v = 0, \quad \lambda = \frac{E}{\hbar \omega} \quad (۴۸-۶-۱۲)$$

با بررسی مشخص می شود که یک رابطه بازگشتی دو جمله ای با در نظر گرفتن جواب سری توانی به دست خواهد آمد. با قرار دادن

$$v(y) = y^{l+1} \sum_{n=0}^{\infty} C_n y^n \quad (۴۹-۶-۱۲)$$

که رفتار شناخته شده نزدیک مبدا [معادله (۱۲-۶-۱۴)] را در آن جا داده ایم.

با طی یک سری مراحل (که به عنوان تمرین واگذار می شود) می توانیم به شرط کوانتاشن زیر برسیم:

$$E = (2k + l + 3/2) \hbar \omega, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (۵۰-۶-۱۲)$$

اگر عدد کوانتومی اصلی را (که انرژی را کنترل می کند) به صورت

$$(۱۲-۶-۵۱)$$

$$n = 2k + l$$

تعریف کنیم نتیجه می‌شود که

$$(۱۲-۶-۵۲)$$

$$E = (n + 3/2)\hbar\omega$$

در هر n ، مقادیر l مجاز عبارتند از

$$(۱۲-۶-۵۳)$$

$$l = n - 2k = n, n - 2, \dots, 1 \text{ or } 0$$

در اینجا چند ویژه حالت اول ارائه می‌شوند:

$$n=0 \quad l=0 \quad m=0$$

$$n=1 \quad l=1 \quad m = \pm 1, 0$$

$$n=2 \quad l=0, 2 \quad m=0; \pm 2, \pm 1, 0$$

$$n=3 \quad l=1, 3 \quad m = \pm 1, 0; \pm 3, \pm 2, \pm 1, 0$$

$$\vdots \quad \vdots \quad \vdots$$

آنچه که برایمان اهمیت ویژه‌ای دارد این است که حالت‌های با l متفاوت تبهگن هستند. تبهگنی در m در هر l را برحسب ناوردایی چرخشی توضیح می‌دهیم. تبهگنی حالت‌های l متفاوت (که به وسیله عملگرها یا مولدهای چرخش به هم مرتبط نمی‌شوند) یک معما بنظر می‌رسد. به این دلیل گاهاً به آن تبهگنی تصادفی یا اتفاقی گفته می‌شود. اما این اسم بی‌مسمایی است زیرا تبهگنی در l می‌تواند به خواص ناوردایی دیگر H نسبت داده شود. اینکه این ناوردایی‌های اضافی یا تقارن‌های اضافی H چه چیزهایی هستند و چگونه تبهگنی در l را توضیح می‌دهند در فصل ۱۵ خواهیم دید.

تمرین ۱۲-۶-۱۱: الف- با ترکیب معادلات (۱۲-۶-۴۸) و (۱۲-۶-۴۹) رابطه بازگشتی دو جمله‌ای را به دست آورید. ثابت کنید که اگر قرار باشد U در نزدیکی $y = 0$ خواص درستی داشته باشد باید $C_0 \neq 0$ باشد. شرط کوانتشن‌ها، معادله (۱۲-۶-۵۰)، را به دست آورید.

ب- تبهگنی و پاریته را در هر n به دست آورده و با تمرین ۱۰-۲-۳، که در آن مسئله در مختصات دکارتی حل شده است، مقایسه کنید.

ج- ویژه تابع بهنجار شده ψ_{nlm} را برای $n = 0, 1$ به دست آورده و آنها را به صورت ترکیبات خطی از ویژه توابع $n = 0$ و $n = 1$ به دست آمده در مختصات دکارتی بنویسید.

۱۳-۱- مسئله ویژه مقداری

در اینجا یک مسئله دو جسمی شامل الکترون با بار $-e$ و جرم m و پروتون با بار $+e$ و جرم M داریم. با استفاده از مختصات مرکز جرم (CM) و مختصات نسبی و کار کردن در چارچوب مرکز جرم، می‌توانیم مسئله را به دینامیک یک ذره منفرد که جرم آن $\mu = mM / m + M$ جرم کاهش یافته و مختصه آن \mathbf{r} مختصه نسبی دو ذره است تبدیل کنیم. اما چون $m / M \sim 1/2000$ است، در نتیجه، مختصه نسبی اساساً مختصه الکترون و جرم کاهش یافته اساساً m است، مسئله را ابتدا در حد $M \rightarrow \infty$ حل می‌کنیم. در این حالت فقط الکترون در حال حرکت در میدان پروتون بی‌حرکت را داریم. در مرحله بعد وقتی نظریه را با آزمایش مقایسه می‌کنیم خواهیم دید که چطور می‌توانیم به راحتی متناهی بودن جرم پروتون را لحاظ کنیم. از آنجا که انرژی پتانسیل الکترون در پتانسیل کولنی

$$\phi = e/r \quad (1-1-13)$$

مربوط به پروتون $V = -e^2/r$ است، معادله شرودینگر

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \frac{e^2}{r} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] \right\} U_{El} = 0 \quad (2-1-13)$$

ترازهای انرژی را در چارچوب ساکن اتم و همین‌طور توابع موج^۱ را معین می‌کند

$$\psi_{Elm}(r, \theta, \phi) = R_{El}(r) Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{U_{El}(r)}{r} Y_l^m(\theta, \phi) \quad (3-1-13)$$

با بررسی معادله (۲-۱-۱۳) روشن می‌شود که یک سری توانی به یک رابطه بازگشتی سه جمله‌ای منجر خواهد شد. بنابراین تلاش می‌کنیم تا رفتار مجانبی را به دست آوریم. از بخش ۱۲-۶ می‌دانیم که صرف نظر از توان‌های (شاید کسری) r [معادله (۱۲-۶-۱۹)]،

$$U_{El} \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \exp[-(2mW/\hbar^2)^{1/2}r] \quad (4-1-13)$$

که در آن

۱- باید از متن روشن شود که \mathbf{m} جرم الکترون است یا مولفه z تکانه زاویه‌ای.

$$W = -E$$

انرژی بستگی (که انرژی لازم برای آزاد کردن الکترون است) بوده، و

$$U_{El} \underset{r \rightarrow 0}{\sim} r^{l+1} \quad (5-1-13)$$

معادله (۴-۱-۱۳) پیشنهاد می‌کند که متغیر بی‌بعد

$$\rho = (2mW/\hbar^2)^{1/2} r \quad (6-1-13)$$

و تابع v_{El} را که طبق

$$U_{El} = e^{-\rho} v_{El} \quad (7-1-13)$$

تعریف می‌شود وارد کنیم. معادله برای v عبارتست از

$$\frac{d^2 v}{d\rho^2} - 2 \frac{dv}{d\rho} + \left[\frac{e^2 \lambda}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] v = 0 \quad (8-1-13)$$

که در آن

$$\lambda = (2m/\hbar^2 W)^{1/2} \quad (9-1-13)$$

و اندیس‌های روی v حذف شده‌اند. می‌توانید ثابت کنید که اگر یک سری در معادله (۸-۱-۱۳) قرار دهیم به یک رابطه بازگشتی دو جمله‌ای خواهیم رسید. با لحاظ کردن رفتار نزدیک $\rho = 0$ [معادله (۵-۱-۱۳)]،

$$v_{El} = \rho^{l+1} \sum_{k=0}^{\infty} C_k \rho^k \quad (10-1-13)$$

و رابطه بازگشتی زیر را بین ضرایب متوالی به دست می‌آوریم:

$$\frac{C_{k+1}}{C_k} = \frac{-e^2 \lambda + 2(k+l+1)}{(k+l+2)(k+l+1) - l(l+1)} \quad (11-1-13)$$

ترازهای انرژی
از آنجا که

$$\frac{C_{k+1}}{C_k} \underset{k \rightarrow \infty}{\longrightarrow} \frac{2}{k} \quad (12-1-13)$$

رفتار سری $\rho^m e^{2\rho}$ است و وقتی $\rho \rightarrow \infty$ میل می‌کند به $\rho^m e^\rho \sim \rho^m e^{-\rho} e^{2\rho} \sim \rho^m e^{-\rho} e^{2\rho}$ $U \sim e^{-\rho} v$ منتهی می‌شود، درخواست می‌کنیم که سری در یک k قطع شود. این در صورتی اتفاق خواهد افتاد که

$$e^2\lambda = 2(k+l+1) \quad (۱۳-۱-۱۳)$$

یا [از معادله (۱۳-۱-۱۳)]،

$$E = -W = \frac{-me^4}{2\hbar^2(k+l+1)^2}, \quad k=0, 1, 2, \dots; \quad l=0, 1, 2, \dots \quad (۱۴-۱-۱۳)$$

برحسب عدد کوانتومی اصلی،

$$n = k+l+1 \quad (۱۵-۱-۱۳)$$

انرژی‌های مجاز عبارتند از

$$E_n = \frac{-me^4}{2\hbar^2 n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (۱۶-۱-۱۳)$$

و در هر n مقادیر مجاز l با توجه به معادله (۱۵-۱-۱۳)، عبارتند از

$$l = n-k-1 = n-1, n-2, \dots, 1, 0 \quad (۱۷-۱-۱۳)$$

اینکه حالت‌های با l متفاوت می‌بایست تبهگن باشند نشان می‌دهد که H دارای تقارن‌های بیشتری در کنار ناوردایی چرخشی است. اینها را بعداً بحث می‌کنیم. در اینجا توجه کنید که تبهگنی در هر n برابر است با

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad (۱۸-۱-۱۳)$$

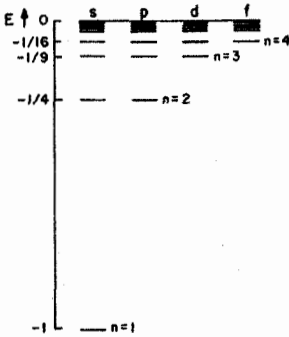
مرسوم است که به حالت‌های $l=0, 1, 2, 3, 4, \dots$ ، حالت‌های s, p, d, f, g, h, \dots گفته می‌شود. در این نمادگذاری طیف سنجی، $1s$ حالت $(n=0, l=0)$ ؛ $2p, (2s)$ حالت‌های $l=0, l=1$ در $n=2$ ؛ $3d, 3p, 3s$ حالت‌های $l=0, 1, 2$ در $n=3$ و غیره را نشان می‌دهند. هیچ تلاشی برای اینکه در جریان m قرار بگیریم انجام نمی‌دهیم. بهتر است از یک یکای طبیعی انرژی موسوم به ریدبرگ (Ry) برای اندازه‌گیری ترازهای انرژی هیدروژن بهره بگیریم:

$$Ry = \frac{me^4}{2\hbar^2} \quad (۱۹-۱-۱۳)$$

که بر حسب آن،

$$E_n = \frac{-Ry}{n^2} \quad (۲۰-۱-۱۳)$$

شکل ۱۳-۱ بعضی از حالت‌های با انرژی پایین هیدروژن را نشان می‌دهد.



شکل ۱۳-۱: چند ویژه حالت اول هیدروژن. انرژی بر حسب ریذبرگ اندازه گیری شده و حالت ها با نمادگذاری طیف سنجی بر حسب زده شده اند.

توابع موج

با داشتن روابط بازگشتی، تعیین توابع موج و بهنجار کردن آنها سر راست است. یک l, n معین را در نظر بگیرید. چون سری معادله (۱۳-۱۰) در

$$(13-21)$$

$$k = n - l - 1$$

قطع می شود، تابع v_l متناظر، ρ^{l+1} ضرب در یک چند جمله ای درجه $n-l-1$ است. این چند جمله ای، چند جمله ای وابسته لژاندر، $L_{n-l-1}^{2l+1}(2\rho)$ ، نامیده می شود.^۱ تابع شعاعی متناظر عبارتست از

$$(13-22)$$

$$R_{nl}(\rho) \sim e^{-\rho} \rho^l L_{n-l-1}^{2l+1}(2\rho)$$

با یادآوری اینکه

$$\rho = \left(\frac{2mW}{\hbar^2} \right)^{1/2} r = \left[\frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} \right) \right]^{1/2} r \tag{13-23}$$

$$= \frac{me^2}{\hbar^2 n} r$$

بر حسب طول

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \tag{13-24}$$

که شعاع بوهر نامیده می شود و مقیاس فاصله (طول) طبیعی برای اتم هیدروژن است،

$$R_{nl}(r) \sim e^{-r/na_0} \left(\frac{r}{na_0} \right)^l L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na_0} \right) \tag{13-25}$$

وقتی $r \rightarrow \infty$ میل می کند L با بالاترین توان، r^{n-l-1} ، غالب خواهد شد و

۱- $L_p^k(x) = (-1)^k (d^k/dx^k) L_{p+k}^0$, $L_p^0 = e^x (d^p/dx^p) (e^{-x} x^p)$

$$R_{nl} \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} (r)^{n-1} e^{-r/na_0} \quad (\text{مستقل از } l) \quad (۱۳-۱-۲۶)$$

(اگر $l = n - 1$ باشد، این شکل در همه r ها معتبر است چون L_0^{2l+1} یک ثابت است). معادله (۱۳-۱-۲۶) در فصل قبل وقتی رفتار U_{El} را در $r \rightarrow \infty$ در یک پتانسیل کولنی بررسی می کردیم (تمرین ۱۳-۱-۴) پیش بینی شده بود.

در زیر چند ویژه تابع بهنجار شده، $\psi_{Elm} \equiv \psi_{nlm}$ ، را ارائه کرده ایم:

$$\begin{aligned} \psi_{1,0,0} &= \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} e^{-r/a_0} \\ \psi_{2,0,0} &= \left(\frac{1}{32\pi a_0^3} \right)^{1/2} \left(2 - \frac{r}{a_0} \right) e^{-r/2a_0} \\ \psi_{2,1,0} &= \left(\frac{1}{32\pi a_0^3} \right)^{1/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \cos \theta \\ \psi_{2,1,\pm 1} &= \mp \left(\frac{1}{64\pi a_0^3} \right)^{1/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \sin \theta e^{\pm i\phi} \end{aligned} \quad (۱۳-۱-۲۷)$$

تمرین ۱۳-۱-۱: با شروع از معادلات (۱۳-۱-۸) - (۱۳-۱-۱۰) معادلات (۱۳-۱-۱۱) و (۱۳-۱-۱۴) را به دست آورید.

تمرین ۱۳-۱-۲: فرمول تبهگنی، معادله (۱۳-۱-۱۸)، را به دست آورید.

تمرین ۱۳-۱-۳: با شروع از رابطه بازگشتی، ψ_{210} را به دست آورید (بهنجار شده).

تمرین ۱۳-۱-۴: از فصل قبل به یاد آورید [معادله (۱۲-۶-۱۹)] که وقتی $r \rightarrow \infty$ میل می کند در یک پتانسیل کولنی $V = -e^2/r$ ، $U_E \sim (r)^{me^2/\kappa\hbar^2} e^{-\kappa r}$ است $[\kappa = (2mW/\hbar^2)^{1/2}]$. نشان دهید که این با معادله (۱۳-۱-۲۶) توافق دارد.

اجازه دهید این گفته را که a_0 یک مقیاس طولی طبیعی برای اتم هیدروژن فراهم می کند بررسی کنیم. حالت توصیف شونده به وسیله

$$\psi_{n,n-1,m} \propto e^{-r/na_0} r^{n-1} Y_{n-1}^m(\theta, \phi) \quad (۱۳-۱-۲۸)$$

را در نظر بگیرید. احتمال یافتن الکترون در یک پوسته کروی به شعاع r و ضخامت dr چقدر است:

$$\int_{\Omega} P(r) r^2 dr d\Omega \propto e^{-2r/na_0} r^{2n} dr \quad (۱۳-۱-۲۹)$$

چگالی احتمال نسبت به r به یک بیشینه می رسد در صورتی که

$$\frac{d}{dr} (e^{-2r/na_0} r^{2n}) = 0$$

$$r = n^2 a_0 \quad (۱۳-۳۰)$$

وقتی $n=1$ است این با a_0 برابر می شود. لذا شعاع بوهر محتمل ترین مقدار r را در حالت پایه به دست می دهد و «اندازه» اتم را تعریف می کند (تا حدی که بتوان در نظریه کوانتومی از آن صحبت کرد). اگر $n > 1$ باشد می بینیم که اندازه حداقل در حالت $l = n - 1$ به صورت n^2 بزرگ می شود. اگر $l \neq n - 1$ باشد تابع شعاعی دارای $n - l - 1$ صفر بوده و چگالی در r چندین برآمدگی دارد. در این حالت، می توانیم اندازه را به وسیله $\langle r \rangle$ تعریف کنیم.^۱ با استفاده از خواص L_{n-l-1}^{2l+1} می توان نشان داد که

$$\langle r \rangle_{nlm} = \frac{a_0}{2} [3n^2 - l(l+1)] \quad (۱۳-۳۱)$$

به جای اینکه به روش طولانی به دست آوردن این فرمول پردازیم، به بحث زیر می پردازیم که نشان می دهد اندازه به صورت $n^2 a_0$ بزرگ می شود. در هر ویژه حالت،

$$\langle H \rangle = E = \langle T \rangle + \langle V \rangle = \langle P^2/2m \rangle - \langle e^2/r \rangle \quad (۱۳-۳۲)$$

می توان نشان داد که (تمرین ۱۳-۵)

$$\langle T \rangle = -\frac{1}{2} \langle V \rangle \quad (۱۳-۳۳)$$

که همان نسخه کوانتومی قضیه کلاسیکی ویریا است که بیان می کند اگر $V = cr^k$ باشد آنگاه متوسط های \bar{T} و \bar{U} طبق رابطه زیر به هم مربوط می شوند:

$$\bar{T} = \frac{k}{2} \bar{V}$$

نتیجه اینکه،

$$E = \frac{1}{2} \langle V \rangle = -\frac{1}{2} \langle e^2/r \rangle \quad (۱۳-۳۴)$$

حال در حالت برجسب زده شده به وسیله n ،

$$E_n = \frac{-me^4}{2\hbar^2 n^2} = \frac{-e^2}{2a_0 n^2} \quad (۱۳-۳۵)$$

که از آن چنین برمی آید که

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_n = \frac{1}{a_0 n^2} \quad (۱۳-۳۶)$$

۱- اگر چه \mathbf{r} عملگر مجرد $(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$ را فقط در پایه مختصه نشان می دهد، از همین نماد برای نشان دادن آن به صورت مجرد استفاده خواهیم کرد تا نمادگذاری را ساده نگه داریم.

با اینکه

$$\frac{1}{\langle r \rangle} \neq \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle$$

این دو از مرتبه بزرگی یکسان هستند (تمرین ۹-۴-۲) و استنباط می کنیم که

$$\langle r \rangle_n \sim n^2 a_0 \quad (1-13-37)$$

که در توافق با نتیجه معادله (۱۳-۱-۳۱) است (باید در اظهاراتی نظیر $\langle 1/r \rangle \approx 1/\langle r \rangle$ محتاط بود. برای مثال در یک حالت s درست نیست که $\langle 1/r^4 \rangle = 1/\langle r^4 \rangle$ ، چون $\langle 1/r^4 \rangle$ واگراست در حالی که $1/\langle r^4 \rangle$ اینگونه نیست. اما در حالت مورد بحث $\langle 1/r \rangle$ در همه حالت‌ها خوش تعریف بوده و $\langle 1/r \rangle$ و $1/\langle r \rangle$ واقعاً از مرتبه بزرگی یکسانی هستند).

این، تحلیل ما از طیف هیدروژن و توابع موج را کامل می کند. لازم است سوالات زیادی نظیر (۱) - مقادیر عددی E_n ، a_0 و غیره چقدر است؟ (۲) - چطور ترازهای انرژی و توابع موج به دست آمده در اینجا با آزمایش مقایسه می شوند؟ پاسخ داده شوند.

این سوالات به بخش ۱۳-۳ و آگدار می شوند. ابتدا اجازه دهید به سوالی بپردازیم که قبلاً مطرح شد: منشأ تبهگنی نسبت به l در هر n چیست؟

تمرین ۱۳-۱-۵ (قضیه ویریال). از آنجا که $|n, l, m\rangle$ یک حالت مانا است برای هر Ω ، $\langle \dot{\Omega} \rangle = 0$ است. $\Omega = \mathbf{R} \cdot \mathbf{P}$ و قضیه اهرنفتست را در نظر گرفته و نشان دهید که در حالت $|n, l, m\rangle$ ، $\langle T \rangle = \left(-\frac{1}{2}\right) \langle V \rangle$.

۱۳-۲ - تبهگنی طیف هیدروژن

اتم هیدروژن، مانند نوسانگر، از خود «تبهگنی تصادفی» نشان می دهد. علامت گیومه مجدداً به کار می رود چون مثل حالت نوسانگر، تبهگنی می تواند بر حسب تقارن های دیگری که هامیلتونی در کنار ناوردایی چرخشی دارد توضیح داده شود. دیدیم که تقارن های H به پایستگی مولدهای تقارن ها اشاره دارند. در نتیجه اگر یک تقارن اضافی (کنار تقارن چرخشی) وجود داشته باشد می بایست کمیت های پایسته دیگری (در کنار تکانه زاویه ای) وجود داشته باشند. از نظر کلاسیکی به خوبی می دانیم که پتانسیل کولنی^۱ (از بین پتانسیل های با ناوردایی چرخشی) از این نظر که بردار رانگ - لِنز^۲ را پایسته نگه می دارد خاص است:

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{p} \times \mathbf{l}}{m} - \frac{e^2}{r} \mathbf{r} \quad (1-2-13)$$

پایستگی \mathbf{n} اشاره می کند که نه تنها مدار به یک صفحه عمود بر \mathbf{l} محدود است (مثل هر مسئله با ناوردایی چرخشی) بلکه بسته هم هست (تمرین ۱۳-۲-۱).

در نظریه کوانتومی یک عملگر \mathbf{N} وجود خواهد داشت که با H جابه جا می شود:

۱- یا به طور کلی هر پتانسیل $1/r$ مثل گرانشی.

$$[N, H] = 0 \quad (۱۳-۲-۲)$$

و به وسیله رابطه زیر مشخص می شود^۱

$$N = \frac{1}{2m} [\mathbf{P} \times \mathbf{L} - \mathbf{L} \times \mathbf{P}] - \frac{e^2 R}{(X^2 + Y^2 + Z^2)^{1/2}} \quad (۱۳-۲-۳)$$

دیدیم که پایستگی \mathbf{L} اشاره می کند که $[L_{\pm}, H] = 0$ است که معنی آن این است که می توانیم در یک l معین بدون تغییر انرژی، مقادیر m را بالا یا پایین ببریم. این چگونگی «توضیح» تبهگنی در m به وسیله ناوردایی چرخشی است.

بنابراین چون $[N, H] = 0$ است باید قادر به ساختن عملگری از روی مولفه های N باشیم که با H جابه جا شده و l را به اندازه یک واحد بالا ببرد. در این صورت این تبهگنی در l را در هر n توضیح می دهد. اینکه دقیقاً این عملگر چه چیزی است و چطور l را به اندازه یک واحد بالا می برد در بخش ۱۵-۴ توضیح داده خواهد شد که به مطالعه تبهگنی «تصادفی» اختصاص داده شده است. همین طور در آنجا توضیح تبهگنی نوسانگر را هم خواهید یافت.

تمرین ۱۳-۲-۱: ببینیم که چرا پایستگی بردار رنگ-لنز \mathbf{n} ایجاب می کند که مدارها بسته باشند.

الف - \mathbf{n} را برحسب صرفاً \mathbf{r} و \mathbf{p} بنویسید (الحاقی \mathbf{l} را بگیرد).

(ب) - از آنجا که ذره مقید است نمی تواند به بی نهایت فرار کند. بنابراین وقتی آنرا از یک زمان دلخواه به بعد تعقیب کنیم می بایست به یک نقطه \mathbf{r}_{\max} برسد که فاصله آن از مبدأ دیگر زیاد نشود. نشان دهید که در این نقطه

$$\mathbf{n} = \mathbf{r}_{\max} \left(2E + \frac{e^2}{r_{\max}} \right)$$

(قانون پایستگی انرژی را به کار برید تا p^2 را حذف کنید). نشان دهید که به دلایل مشابه اگر بیشتر منتظر بمانیم به \mathbf{r}_{\min} خواهد آمد که در آن جا

$$\mathbf{n} = \mathbf{r}_{\min} \left(2E + \frac{e^2}{r_{\min}} \right)$$

بنابراین \mathbf{r}_{\min} و \mathbf{r}_{\max} با یکدیگر و با \mathbf{n} موازی هستند. پایستگی یا ثابت بودن \mathbf{n} ایجاب می کند که بیشینه (کمینه) فاصله همیشه در یک نقطه $r_{\min} r_{\max}$ حاصل شود یعنی مدار بسته باشد. در واقع هر سه بردار \mathbf{r}_{\max} و \mathbf{r}_{\min} و \mathbf{n} با محور اصلی بیضی که ذره روی آن حرکت می کند در یک خط قرار می گیرند، و \mathbf{n} موازی اند در حالی که \mathbf{n} و \mathbf{r}_{\max} پاد موازی اند (چرا؟). خودتان را متقاعد کنید که برای یک مدار دایروی \mathbf{n} می بایست صفر شود و می شود.

۱- چون $[\mathbf{P}, \mathbf{L}] \neq 0$ است، از قاعده متقارن سازی استفاده کرده ایم تا N را از \mathbf{n} بسازیم یعنی

$$\mathbf{P} \times \mathbf{L} \rightarrow \frac{1}{2} [(\mathbf{P} \times \mathbf{L}) + (\mathbf{P} \times \mathbf{L})^+] = \frac{1}{2} [\mathbf{P} \times \mathbf{L} - \mathbf{L} \times \mathbf{P}]$$
 (ثابت کنید).

۱۳-۳ - برآوردهای عددی و مقایسه با آزمایش

در این بخش ما (۱) - برآوردهای عددی را برای کمیت‌های مختلف نظیر شعاع بوهر، ترازهای انرژی و غیره به دست آورده؛ (۲) - جویا می‌شویم که چطور پیش‌بینی‌های نظریه عملاً با آزمایش مقایسه می‌شوند.

برآوردهای عددی

ابتدا جرم‌های ذرات را در نظر بگیرد. انرژی‌های سکون ذرات را بر حسب مگا الکترون ولت (MeV) خواهیم نوشت:

$$mc^2 \simeq 0.5 \text{ Mev} \quad (\text{مقدار دقیق تر است}) \quad (۱-۳-۱۳)$$

$$Mc^2 = 1000 \text{ MeV} \quad (938.3) \ddagger \quad (۲-۳-۱۳)$$

$$m/M \simeq 1/2000 \quad (1/1836) \ddagger \quad (۱/۱۸۳۶) \quad (۳-۳-۱۳)$$

در نتیجه جرم کاهش یافته μ و جرم الکترون m تقریباً یکسان هستند:

$$\mu = \frac{mM}{m+M} \simeq \frac{mM}{M} = m \quad (۴-۳-۱۳)$$

همان‌طور که مختصه نسبی و مختصه الکترون اینگونه هستند.

تخمینی از شعاع بوهر به دست می‌آوریم:

$$a_0 = \hbar^2 / me^2 \quad (۵-۳-۱۳)$$

برای به دست آوردن این به مقادیر e, \hbar نیاز داریم. قبلاً اشاره شد که

$$\hbar = 1.054 \times 10^{-27} \text{ erg sec}$$

نکته مفید که برای انجام برآورد سریع باید به خاطر داشت این است که^۱

$$\hbar c \simeq 2000 \text{ eV \AA} \quad (1973.3) \quad (۶-۳-۱۳)$$

که $1 \text{ angstrom} (\text{\AA}) = 10^{-8} \text{ cm}$ است. بهترین راه برای به خاطر سپردن e^2 از طریق ثابت ساختار ریزر است:

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137} \left(\frac{1}{137.04} \right) \quad (۷-۳-۱۳)$$

این ثابت نقشی اساسی در مسائل مکانیک کوانتومی شامل الکترودینامیک ایفا می‌کند. از آنجا که بدون بعد است مقدار عددی آن دارای اهمیت مطلق است: بدون توجه به اینکه چه واحدهایی برای طول، جرم و زمان

۱- بسیاری از روش‌های به کار رفته در اینجا از پروفیسور *A. Rosenfeld* در برکلی فرا گرفته شده‌اند.

به کار می‌بریم α برابر $1/137$ خواهد بود. بنابراین اگر چه کسی تلاش برای توضیح اینکه چرا $c = 3 \times 10^{10} \text{ cm}$ است انجام نمی‌دهد، تلاش‌هایی برای رسیدن به شکل جادویی $1/137$ انجام گرفته است. از آنجا که این یک عدد خدادادی (مستقل از انتخاب واحدها) است تلاش می‌شود تا آنرا به اعداد پایه نظیر π, e, π, e, π, π ، تعداد ابعاد فضا-زمان و غیره مرتبط کنند.

به هر شکل با برگشتن به مسئله اصلی خودمان می‌توانیم a_0 را تخمین بزنیم:

$$a_0 \approx \frac{\hbar^2}{me^2} = \frac{\hbar c}{mc^2} \left(\frac{\hbar c}{e^2} \right) = \frac{(2000)(137)}{0.5 \times 10^6} \text{ \AA} \approx 0.55 \text{ \AA} \quad (0.53)$$

حال ترازهای انرژی را در نظر بگیرید

$$E_n = -Ry/n^2$$

تخمین می‌زنیم که

$$Ry = \frac{me^4}{2\hbar^2} = \frac{mc^2}{2} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 \\ \approx \frac{0.25 \times 10^6}{(137)^2} \text{ eV} \approx 13.3 \text{ eV} \quad (13.6)$$

لذا با استفاده از مقدار دقیق‌تر R_y ،

$$E_n = \frac{-13.6}{n^2} \text{ eV}$$

الکترون در حالت پایه 13.6 eV انرژی نیاز دارد تا آزاد یا یونیزه شود. می‌توان تصور کرد که این مقدار 13.6 eV پائین‌تر از پتانسیل کولنی بی‌نهایت عمیق است.

اجازه دهید گریزی زده و دو مقیاس طولی مرتبط با a_0 را در نظر بگیریم. ابتدا

$$a_0 \alpha = \frac{\hbar^2}{me^2} \cdot \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{\hbar}{mc} \equiv \lambda_e \quad (۱۳-۳-۸)$$

که طول موج کامپتون الکترون نامیده شده و ۱۳۷ بار کوچکتر از شعاع بوهر است. λ_e چه چیزی را نشان می‌دهد؟ در بحث نیروی هسته‌ای اشاره شد که طول موج کامپتون پيون فاصله‌ای بود که در آن پيون می‌توانست مبادله شود. این طول می‌تواند به عنوان حد پایینی که در آن یک ذره می‌تواند خوب جایگزیده باشد هم تعریف شود. در نظریه غیرنسبیتی که ما در نظر می‌گیریم حد پایینی صفر است چون ویژه کت‌های مکان $|x\rangle$ را می‌پذیریم. اما در واقع وقتی تلاش می‌کنیم مکان ذره را بهتر و بهتر تعیین کنیم از کاوشگرهای پر انرژی مثل فوتون‌ها استفاده می‌کنیم. برای تعیین مکان آن تا یک ΔX به فوتونی با تکانه

$$\Delta P \sim \frac{\hbar}{\Delta X}$$

نیاز داریم: چون فوتون بدون جرم است، انرژی متناظر طبق فرمول انیشتین $E^2 = c^2 p^2 + m^2 c^4$ برابر است با

$$\Delta E \sim \frac{\hbar c}{\Delta X}$$

اگر این انرژی از دو برابر انرژی سکون ذره تجاوز کند نسبت، اجازه تولید یک زوج ذره - پاد ذره را در فرایند اندازه گیری می دهد. بنابراین درخواست می کنیم که

$$\Delta E \lesssim 2mc^2$$

$$\frac{\hbar c}{\Delta X} \lesssim 2mc^2$$

یا

$$\Delta X \gtrsim \frac{\hbar}{2mc} \sim \frac{\hbar}{mc}$$

باشد. اگر بخواهیم ذره را هر چه بهتر جایگزیده کنیم، شاهد خلق زوج خواهیم بود و به جای یک ذره ای که می خواستیم مکانش را تعیین کنیم سه ذره (یا بیشتر) خواهیم داشت.

در تحلیل اتم هیدروژن، با الکترون به عنوان یک ذره نقطه ای جایگزیده رفتار کردیم. تحلیل قبلی نشان می دهد که این خیلی درست نیست اما این را هم نشان می دهد که تقریبی نسبتاً خوب است چون «fuzziness» یا «اندازه» الکترون α بار کوچکتر از اندازه اتم، a_0 ، است،

$$\frac{\hbar/mc}{a_0} = \alpha \simeq \frac{1}{137}$$

اگر بار الکتريکی ده برابر بزرگتر می بود، α از مرتبه واحد می شد و اندازه الکترون و اندازه مدار آن هم مرتبه می شدند و تقریب ذره نقطه ای غیر قابل دفاع می شد. توجه کنید که

$$\lambda_e = \alpha \cdot a_0 \simeq 0.5 \times \frac{1}{137} \text{ \AA} \simeq \frac{1}{250} \text{ \AA} \simeq 4 \times 10^{-3} \text{ \AA}$$

اگر λ_e را در α ضرب کنیم به طول دیگری می رسیم که شعاع کلاسیک الکترون نامیده می شود:

$$r_e = \alpha \lambda_e = \frac{\hbar}{mc} \cdot \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{e^2}{mc^2} \simeq 3 \times 10^{-5} \text{ \AA} \quad (9-3-13)$$

اگر الکترون را یک توزیع بار کروی تصور کنیم انرژی کولنی توزیع (انرژی لازم برای گردآوری آن) از مرتبه e^2/r_e خواهد شد که r_e شعاع کره است. اگر انرژی سکون الکترون را به این انرژی کولنی نسبت دهیم به شعاع کلاسیکی می رسیم. به طور خلاصه،

$$a_0 \xrightarrow{\alpha} \lambda_e \xrightarrow{\alpha} r_0$$

$$\left(\frac{1}{2} \text{Å}\right) \quad \left(\frac{\alpha}{2} \text{Å}\right) \quad \left(\frac{\alpha^2}{2} \text{Å}\right)$$

به اتم هیدروژن بر می گردیم. نکات ذکر شده در گذشته فقط مربوط به اعداد بودند اکنون نکاتی را در نظر می گیریم که در به خاطر سپردن دینامیک به ما کمک می کنند. اینها باید با احتیاط به کار برده شوند چون این نکات به زبانی بیان می شوند که در نظریه کوانتومی مجاز نیستند.

منشأ این نکات مدل بوهر اتم هیدروژن است. حدود یک دهه یا بیشتر قبل از فرمول بندی مکانیک کوانتومی که در این کتاب ارائه شده است بوهر مدلی برای اتم پیشنهاد کرد که به قرار زیر بود. ذره ای به جرم m را در پتانسیل $V(r) = -e^2/r$ در نظر بگیرید که در مداری دایره ای به شعاع r حرکت می کند. معادله دینامیکی عبارتست از

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{r^2} \quad (10-3-13)$$

یا

$$mv^2 = \frac{e^2}{r} \quad (11-3-13)$$

بنابراین اگر r این معادله را بر آورده کند شعاعی مجاز است، همین طور نتیجه می شود که هر انرژی یی، مجاز است چون

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{r} = -\frac{e^2}{2r} = -\frac{1}{2}mv^2 \quad (12-3-13)$$

بوهر حدس زد که مدارهای مجاز آنهایی هستند که تکانه زاویه ای آنها مضرب صحیحی از \hbar باشد:

$$(13-3-13)$$

$$mvr = n\hbar$$

با قرار دادن این در معادله (11-3-13) می رسیم به

$$m \cdot \frac{n^2 \hbar^2}{m^2 r^2} = \frac{e^2}{r}$$

یا

$$r = n^2 \frac{\hbar^2}{me^2} = n^2 a_0 \quad (14-3-13)$$

و

$$E_n = -\frac{e^2}{2r} = -\frac{e^2}{2a_0} \cdot \left(\frac{1}{n^2}\right) \quad (15-3-13)$$

بنابراین اگر شما فرمول‌های a_0 یا E_n را فراموش کردید می‌توانید به عقب برگشته و به این مدل مراجعه کنید (نه برای فیزیک مسئله، چون این مدل روی مرز بین مکانیک کوانتومی و کلاسیک قرار می‌گیرد، از مدارها صحبت می‌کند اما تکانه زاویه‌ای و غیره را کوانتیده می‌کند) کوتاه‌ترین راه برای به‌خاطر سپردن اتم بوهر (یعنی نکته‌ای برای نکته مذکور) معادله زیر است

$$\alpha = \beta \quad (13-3-16)$$

که β سرعت الکترون در حالت پایه هیدروژن است که نسبت به سرعت نور اندازه‌گیری می‌شود $(\beta = v/c)$. با داشتن این، به انرژی حالت پایه می‌رسیم:

$$\begin{aligned} E_1 &= -\frac{1}{2}mv^2 = -\frac{1}{2}mc^2(v/c)^2 = -\frac{1}{2}mc^2\beta^2 = -\frac{1}{2}mc^2\alpha^2 \\ &= -\frac{1}{2}mc^2\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \end{aligned} \quad (13-3-17)$$

با در دست داشتن این، چطور می‌توان فراموش کرد که ترازها به صورت n^{-2} تغییر می‌کنند یعنی

$$E_n = -\frac{E_1}{n^2}?$$

اگر E_1 را به صورت $-e^2/2a_0$ بازنویسی کنیم می‌توانیم به فرمول a_0 برسیم. معادله $\alpha = \beta$ کاربرد مکانیک کوانتومی غیرنسبیتی را هم تصدیق می‌کند. یک روش هم ارز (که از کاربرد سرعت اجتناب می‌کند) معادله (13-3-17) است که بیان می‌کند که انرژی بستگی $(1/137)^2 \approx$ برابر انرژی سکون الکترون است.

تمرین (13-3-1): پيون دارای گستره (برد) $1\text{Fermi} = 10^{-5} \text{ \AA}$ به‌عنوان واسطه نیروی هسته‌ای است. انرژی سکون آنرا تخمین بزنید.

تمرین (13-3-2): طول موج دوبروی یک الکترون با انرژی جنبشی 200eV را برآورد کنید (بادآوری: $\lambda = 2\pi\hbar/p$).

مقایسه با آزمایش

نظریه کوانتومی پیش‌بینی‌های خیلی مفصلی برای اتم هیدروژن انجام می‌دهد. سوال این است که چطور این پیش‌بینی‌ها باید با آزمایش مقایسه شوند. اجازه دهید ابتدا ترازهای انرژی و سپس توابع موج را در نظر بگیریم. در اصل می‌توان ترازهای انرژی را فقط با وزن کردن اتم اندازه‌گیری کرد. در عمل اختلاف ترازهای انرژی به صورت زیر اندازه‌گیری می‌شود. اگر با اتم واقع در یک ویژه حالت $|nlm\rangle$ شروع کنیم، برای همیشه در آن حالت باقی خواهد ماند. اما اگر آنرا برای مدت T مختل کنیم، با روشن کردن یک میدان خارجی (یعنی تغییر هامیلتونی از H^0 ، هامیلتونی کولنی، به $H^0 + H^1$) بردار حالت آن شروع به حرکت در فضای هیلبرت می‌کند، چون $|nlm\rangle$ یک حالت مانای $H^0 + H^1$ نیست. اگر انرژی را در زمان $t > T$ اندازه

بگیریم ممکن است آنرا متناظر با حالت دیگر $n' \neq n$ بیابیم. انرژی به وسیله آشکارسازی فوتون گسیل شده توسط اتم اندازه گیری می شود. فرکانس فوتون آشکار شده برابر خواهد بود با

$$\omega_{nn'} = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} \quad (۱۸-۳-۱۳)$$

بنابراین فرکانس نور خروجی از هیدروژن برابر خواهد بود با

$$\begin{aligned} \omega_{nn'} &= \frac{Ry}{\hbar} \left(-\frac{1}{n^2} + \frac{1}{n'^2} \right) \\ &= \frac{Ry}{\hbar} \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right) \end{aligned} \quad (۱۹-۳-۱۳)$$

برای مقدار ثابت $n' = 1, 2, 3, \dots$ ، خانواده‌ای از خطوط را با تغییر n به دست می آوریم. این خانواده‌ها حداقل برای چندین مقدار n' مشاهده شده‌اند. خانواده $n' = 1$ سری لیمن نامیده می شود (متناظر با گذار از حالت‌های بالاتر به حالت پایه است):

$$\omega_{n1} = \frac{Ry}{\hbar} \left(\frac{1}{1} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (۲۰-۳-۱۳)$$

خانواده $n' = 2$ سری بالمر نامیده شده و متناظر با گذار به حالت‌های $|2lm\rangle$ از $n = 3, 4, \dots$ است. خانواده $n = 3$ سری پاشن نامیده شده و الی آخر. طول موج یک خط نوعی را در سری لیمن برآورد می کنیم مثلاً خط مربوط به گذار $n' = 1 \rightarrow n = 2$:

$$\begin{aligned} \omega_{21} &= \frac{13.5 \text{ eV}}{\hbar} \left(1 - \frac{1}{4} \right) \\ &\simeq \frac{10}{\hbar} \text{ eV} \end{aligned}$$

برآورد می شود که طول موج برابر باشد با

$$\lambda = \frac{2\pi c}{\omega} = \frac{2\pi}{10} (\hbar c) \simeq 1200 \text{ \AA}$$

یک برآورد موشکافانه‌تر، مقدار 1216 \AA را به دست می دهد که در توافق بسیار خوبی با آزمایش می باشد. توافق برای همه خطوط مشاهده شده دیگر هم به همین خوبی است اما در همه موارد اختلافات کوچک وجود دارند. بسیاری از این اختلافات می توانند به وسیله تصحیحاتی که به صورت نظری محاسبه می شوند توضیح داده شوند. اولین چیزی که می بایست تصحیح کنیم این است که پروتون واقعاً بی حرکت نیست، یعنی در اینجا یک مسئله دو جسمی داریم. همان طور که در فصل ۱۰ توضیح دادیم این کار از طریق نوشتن معادله شرودینگر برای مختصه نسبی (و نه الکترون) و کار کردن در چارچوب مرکز جرم انجام می شود. این معادله با معادله (۱۳-۱-۲) فقط در این تفاوت می کرد که m با μ جایگزین می شد. این در واقع تنها تغییر در همه فرمول‌هایی

می‌شد که به دست می‌آیند به‌ویژه در معادله (۱۳-۱-۱۶) برای ترازهای انرژی. این کار، فقط طیف کل را به اندازه عامل $\mu/m = M/M + m$ به مقیاس کوچکتری ترسیم می‌کند که کمتر از یک‌دهم درصد با عدد یک فرق می‌کند، اما این تفاوت در عمل قابل مشاهده است: این تفاوت، در اختلاف بین ترازهای هیدروژن و دوتریم مشاهده می‌شود (که هسته دوتریم دارای یک پروتون و یک نوترون است).

بعد از این تصحیح، تصحیح مربوط به این است که در نظریه انیشتین انرژی جنبشی الکترون $\frac{1}{2}mv^2 = p^2/2m$ نیست بلکه به جای آن $mc^2[(1-v^2/c^2)^{-1/2} - 1]$ است که اختلاف بین انرژی در سرعت v و انرژی سکون است. جمله $\frac{1}{2}mv^2$ همان جمله اول در بسط سری توانی عبارت فوق نسبت به متغیر v^2/c^2 است. در فصل ۱۷ اثر جمله بعدی را، که $3mv^2/8c^2$ ، یا بر حسب تکانه $3p^4/8m^3c^2$ است، در نظر خواهیم گرفت. این، تصحیحی از مرتبه v^2/c^2 نسبت به قسمت $p^2/2m$ است که در نظر گرفته‌ایم، است یا از آنجا که $v/c = \alpha$ است، تصحیحی از مرتبه α^2 نسبت به قسمت اصلی (جمله اصلی) است. تصحیحات دیگری از همین مرتبه وجود دارند و به نام تصحیحات ساختار-ریز در فصل ۱۷ (با تقریب) لحاظ خواهند شد. معادله دیراک، که ما در این فصل آن را حل نخواهیم کرد تصحیحات نسبی را تا همه مرتبه‌ها نسبت به v/c در نظر می‌گیرد. اما آن هم کل داستان نیست، تصحیحات کوچکی مربوط به افت و خیزهای کوانتومی میدان الکترومغناطیسی (که ما تاکنون به صورت کلاسیکی با آن رفتار کرده‌ایم) وجود دارد. این تصحیحات از نظر تئوری قابل محاسبه و از نظر تجربی قابل اندازه‌گیری هستند. توافق بین نظریه و آزمایش بسیار جالب و تماشایی است. اما مهم است به‌خاطر بسیاری که همه این تصحیحات مثل یک لایه شکر روی کیک است یعنی معادله شرودینگر غیر نسبی ساده به تنهایی توصیفی بسیار خوب از طیف هیدروژن به دست می‌دهد (بسیاری از تحقیقات نظری کنونی که روی نظریه صحیح ذرات بنیادی انجام می‌شوند متوقف خواهند شد در صورتی که بتوان توصیفی از این ذرات ارائه کرد که به آن خوبی توصیف اتم هیدروژن توسط معادله شرودینگر هم نباشد).

حال توابع موج را در نظر بگیرید. برای آزمودن پیش‌بینی‌ها، یکبار دیگر به مختل کردن سیستم متوسل می‌شویم. مثال زیر باید احساسی از چگونگی انجام این کار به شما بدهد. فرض کنید یک اختلال خارجی H^1 را برای مدتی کوتاه اعمال کنیم. در طول این مدت، سیستم از $|nlm\rangle$ به

$$\begin{aligned} |\psi(\varepsilon)\rangle &= \left[I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} (H^0 + H^1) \right] |nlm\rangle \\ &= |nlm\rangle - \left(\frac{i\varepsilon E_n}{\hbar} + \frac{i\varepsilon H^1}{\hbar} \right) |nlm\rangle \end{aligned}$$

می‌رود. احتمال بودن در حالت $|n'l'm'\rangle$ (با فرض اینکه $|n'l'm'\rangle$ از $|nlm\rangle$ متفاوت است) برابر است با

$$|\langle n'l'm' | \psi(\varepsilon) \rangle|^2 = \left| -\frac{i\varepsilon}{\hbar} \langle n'l'm' | H^1 | nlm \rangle \right|^2$$

بنابراین نظریه کوانتومی می تواند آهنگ گذار به حالت $|n'l'm\rangle$ را هم مشخص کند. این آهنگ به وسیله عنصر ماتریسی $\langle n'l'm|H'|nlm\rangle$ تنظیم می شود که در فضای مختصه یک انتگرال روی $\psi_{nlm}, \psi_{n'l'm'}$ با H' ساندریج شده بین آنها، خواهد بود. محاسبه انتگرالها مستلزم دانش کامل در مورد توابع موج است و بالعکس، توافق آهنگ های محاسبه شده با آزمایش محکی برای توابع موج پیش بینی شده است. مثالی واقعی از این را وقتی بر همکنش تابش با ماده را در فصل ۱۸ بحث می کنیم خواهیم دید.

تمرین (۱۳-۳-۳): به جای اینکه به طیف گسیلی هیدروژن نگاه کنیم می توانیم به طیف جذبی آن هم نگاه کنیم. مثلاً بعضی اتم های هیدروژن در سطح خورشید قرار می گیرند. از درون خورشید نور سفید بیرون می آید و اتم های روی سطح آنچه را که می توانند جذب می کنند. اتم های واقع در حالت پایه، سری لیمن را جذب خواهند کرد و اگر نور خروجی از خورشید را تجزیه کنیم به خطوط تاریک در آن منجر خواهد شد. وجود این خطوط به ما بیان خواهد کرد که در سطح خورشید هیدروژن وجود دارد. همچنین می توانیم دمای سطح خورشید را هم به صورت زیر تخمین بزنیم. فرض کنید دمای سطح T باشد. احتمالات $P(n=2), P(n=1)$ ، احتمالات بودن یک اتم به ترتیب در $n=2$ و $n=1$ ، طبق فرمول بولتزمن به هم مربوط می شوند:

$$\frac{P(n=2)}{P(n=1)} = 4 e^{-(E_2 - E_1)/kT}$$

که در آن ضریب ۴ مربوط به تبهگنی تراز $n=2$ است. حال فقط اتم های واقع در $n=2$ می توانند خطوط بالمر در طیف جذبی تولید کنند. شدت نسبی خطوط بالمر و لیمن مقدار $P(n=2)/P(n=1)$ را به ما خواهد داد که از روی آن می توانیم به T پی ببریم. نشان دهید که برای $T = 6000^\circ K$ ، $P(n=2)/P(n=1)$ ناچیز است و فقط برای $T \approx 10^5 K$ این مقدار مهم می شود (ثابت بولتزمن $k = 9 \times 10^{-5} eV / ^\circ K$ است. نکته اینکه در دمای اتاق $T = 300^\circ K$ ، $kT \approx 1/40 eV$ است).

۱۳-۴- اتم های چند الکترونی و جدول تناوبی

امکان بحث اتم های چند الکترونی به صورت تحلیلی وجود ندارد حتی اگر هسته ها را بی حرکت در نظر بگیریم. اگر چه در اصل این امکان وجود دارد که یک اتم با پیچیدگی دلخواه را از طریق حل معادله شرودینگر دقیق به صورت عددی مورد بررسی قرار دهیم، روش عملی تر استفاده از یک روش تقریبی است. روش هارتری را در نظر بگیرید. در اینجا فرض می شود که هر الکترون از یک معادله شرودینگر یک- ذره ای پیروی می کند که در آن انرژی پتانسیل $V = -e\phi(r)$ مربوط به هسته و الکترون های دیگر است. در محاسبه سهم الکترونی در $\phi(r)$ ، به هر الکترون یک توزیع بار نسبت داده می شود که برابر است با $(-e)$ در چگالی احتمال مربوط به تابع موج آن. اما توابع موج چه چیزهایی هستند؟ آنها، ویژه حالت ها در پتانسیل $\phi(r)$ هستند! برای شکستن این دور باطل، با حدس منطقی پتانسیل، $\phi_0(r)$ ، شروع کرده و ویژه حالت های انرژی مجاز را محاسبه می کنیم. سپس طبق افزایش انرژی آنها را پر می کنیم به طوری که فقط دو الکترون در هر حالت مداری، با

اسپین‌های مخالف، قرار گرفته (اصل پائولی اجازه الکترون‌های بیشتر را نمی‌دهد)^۱ تا همه الکترون‌ها گنجانده شوند. سپس پتانسیل $\phi_1(r)$ مربوط به این پیکربندی الکترونی را محاسبه می‌کنیم.^۲ اگر این پتانسیل با $\phi_0(r)$ یکی باشد (تادقت مورد نظر) در اینجا توقف کرده و پیکربندی در نظر گرفته شده را به‌عنوان حالت پایه اتم در نظر می‌گیریم. در غیر این صورت، یک بار دیگر فرایند را تکرار می‌کنیم ولی این بار با $\phi_1(r)$ شروع می‌کنیم. این حقیقت که در عمل خیلی زود می‌توان پتانسیلی را پیدا کرد که خودش را مجدداً تولید کند اشاره به درستی این روش دارد.

در مورد ویژه حالت‌ها چگونه؟ آنها هنوز هم همانند هیدروژن با (nlm) برچسب زده می‌شوند، با حالت‌هایی که m متفاوت داشته و در یک n و l معین تهگن هستند [دلیل این است که $\phi(r)$ از نظر چرخشی ناورداست]. اما تهگنی در l از این می‌رود. از نظر صوری دلیل این مطلب اینست که پتانسیل دیگر $1/r$ نیست و از نظر فیزیکی دلیل اینست که حالت‌های با تکانه زاویه‌ای پایین‌تر دامنه بزرگتری برای بودن در نزدیکی مبدأ داشته و در نتیجه از بیشتر بار هسته نمونه برداری می‌کنند (تأثیر می‌پذیرند) در حالی که حالت‌های با تکانه زاویه‌ای بالا بار هسته را به‌صورت پوشیده توسط الکترون‌های مدارهای داخلی‌تر می‌بینند. در نتیجه در هر n ، انرژی با l زیاد می‌شود. «شعاع» هر حالت، با وابستگی جزئی به l ، با n زیاد می‌شود. لذا گفته می‌شود که حالت‌های با n معین تشکیل یک لایه می‌دهند (چون از حیث کلاسیکی، می‌توانند به‌صورت متحرک روی کره‌ای به شعاعی برابر با محتمل‌ترین مقدار r تلقی شوند). حالت‌های با یک l و n معین یک زیر لایه تشکیل می‌دهند.

اکنون پیکربندی‌های الکترونی چند اتم با Z کم را در نظر می‌گیریم (Z بار هسته است). هیدروژن (1H) فقط یک الکترون دارد که در حالت $1s$ قرار دارد. این پیکربندی با $1s^1$ نشان داده می‌شود. هلیوم (2He) دو الکترون در حالت $1s$ با اسپین‌های مخالف دارد و پیکربندی آن با $1s^2$ نشان داده می‌شود. 2He دارای لایه $n=1$ پر است. لیتیم (3Li) الکترون سوم خود را در حالت $2s$ دارد یعنی در پیکربندی $1s^2, 2s^1$ است (به یاد بیاورید که حالت s پایین‌تر از حالت p است). این روش را تا بریلیم (4Be)، بور (5B)، کربن (6C)، نیتروژن (7N)، اکسیژن (8O)، فلئور (9F) و تانتون (^{10}Ne) ادامه می‌دهیم. نئون در پیکربندی $1s^2, 2s^2, 2p^6$ است یعنی دارای لایه $n=2$ پر است. عنصر بعدی، سدیم (^{11}Na) یک الکترون منفرد در حالت $3s$ دارد. زیر لایه‌های $3p, 3s$ وقتی به آرگون (^{18}Ar) می‌رسیم پر می‌شوند. عنصر بعدی پتاسیم (^{19}K) است که الکترون نوزدهم آن در حالت $4s$ ، و نه $3d$ ، است. این بدین دلیل است که افزایش انرژی مربوط به تغییر در n از 3 به 4 کمتر از افزایش مربوط به تغییر در l از 2 به 3 در $n=3$ است - این پدیده اغلب وقتی به Z ‌های بالاتر می‌رویم اتفاق می‌افتد. برای مثال، در عناصر «خاکی نادر» لایه $6s$ قبل از پوسته $4f$ پر می‌شود.

۱- در این بحث، اسپین الکترون به‌عنوان یک متغیر تماشاجی و بی‌اثر در نظر گرفته می‌شود که تنها نقش آن دو تا کردن حالت است. این یک تقریب نسبتاً خوب است.

۲- اگر لازم باشد، روی زوایا متوسط‌گیری می‌شود تا یک ϕ با تقارن کروی حاصل شود.

با داشتن پیکربندی الکترونی، می توان بسیاری از خواص شیمیایی عناصر را پیش گویی کرد. عنصری نظیر ^{10}Ne را در نظر بگیرید که دارای لایه خارجی بسته است. از آنجا که بار الکترونی کل تقارن کروی دارد $(|R_{nl}|^2 \sum_{m=-l}^l |Y_l^m|^2)$ مستقل از ϕ, θ است) بار هسته را به طور مؤثری حفاظت کرده و اتم دارای هیچ اثر الکتروستاتیکی مهمی برای الکترون های اتم های دیگر نخواهد بود. اگر یکی از الکترون های لایه خارجی می توانست به تراز بالاتر برانگیخته شود این تغییر می کرد اما گاف انرژی بزرگی برای عبور وجود دارد. بنابراین اتم بندرت برانگیخته می شود و از نظر شیمیایی بی اثر است. از طرف دیگر عنصری نظیر ^{11}Na را در نظر بگیرید که یک الکترون بیشتر دارد که حالت $3s$ را اشغال می کند. این الکترون وقتی به سمت داخل می نگرند بار $+e$ را می بیند (۱۱ بار هسته که به وسیله ۱۰ الکترون در لایه های $n=2, n=1$ پوشیده شده است) و بنابراین دارای تقید بسیار کمی است. انرژی بستگی آن نسبت به الکترون $n=2$ در نئون که دارای انرژی بستگی 21.6eV است 5.1eV است. اگر ^{11}Na می توانست این الکترون را رها کند به یک پیکر بندی پایدار با لایه $n=2$ بسته می رسید. اگر به مکان چپ (نسبت به Z) نگاه کنیم یک پذیرنده کامل برای این الکترون می بینیم: در اینجا ^9F را داریم که لایه $n=2$ آن، به جز برای یک الکترون، کاملاً پر است. بنابراین وقتی ^{11}Na و ^9F به هم نزدیک می شوند، Na الکترونش را به F داده و سیستم به عنوان یک کل انرژی اش پایین می آید چون انرژی بستگی در F برابر 17.4eV است. با انجام یافتن این انتقال، اتمها نمی توانند از هم جدا شوند چون حالا دیگر یون های باردار Na^+ و F^- شده اند که به وسیله جاذبه الکتروستاتیکی موسوم به پیوند یونی به هم نگه داشته می شوند و تشکیل مولکول NaF می دهند.

یکبار دیگر متوجه می شویم که رفتار شیمیایی به وسیله آنچه که در بیرونی ترین لایه اتفاق می افتد دیکته می شود. می توانیم ببینیم که چندین عنصر خواص شیمیایی مشابه دارند چون دارای لایه های بیرونی مشابه هستند. برای مثال انتظار داریم که همه عناصر با لایه بیرونی پر از نظر شیمیایی بی اثر باشند و این درست است. همین طور درست است که برخی عناصر دارای زیر لایه های پر هم، نظیر ^{18}Ar که در آن فقط زیر لایه های $3p, 3s$ پرند، بی اثر هستند. منشأ این بی اثری با مورد لایه های پر، یکی است: یک توزیع بار الکترونی با تقارن کروی و یک انرژی برانگیختگی بزرگ. اگر یک مکان به سمت راست عناصر بی اثر برویم به عناصری می رسیم که مثل Na رفتار می کنند یعنی تمایل به دادن یک الکترون دارند در حالی که اگر یک خانه به چپ برویم به عناصر مشابه F می رسیم که تمایل به گرفتن یک الکترون دارند. اگر دو مکان به چپ برویم به عناصر مشابه اکسیژن می رسیم که دو الکترون می خواهند در حالی که با دو خانه حرکت به راست به عناصری نظیر منیزیم می رسیم که می خواهند دو الکترون از دست بدهند. چنین به نظر می رسد که وقتی در Z حرکت می کنیم چندین بار تمایل شیمیایی خاصی را می بینیم. این رفتار شبه دوره ای در سال ۱۸۶۹ توسط مندلیف، کسی که عناصر را در یک جدول تناوبی سازماندهی کرد، که در آن عناصر درون قالبی چیده شده و همه عناصر مشابه در یک ستون قرار می گیرند، مورد تأکید قرار گرفت. با پایین رفتن از ستون اول، برای مثال $\text{Na}, \text{Li}, \text{H}$ و غیره را می بینیم، یعنی عناصری با یک الکترون برای از دست دادن. در ستون آخر عناصر بی اثر Ne, He و غیره را می بینیم. با داشتن این اصل، می توانیم حدس بزنیم که کدام یک با چه عنصری برهمکنش خواهد کرد. برای مثال، نه تنها Na می تواند الکترونش را به F بدهد بلکه می تواند به Cl هم

بدهد که نسبت به زیر لایه $3p$ پری میل است. همین طور F می تواند الکترونش را از K هم بگیرد که یک الکترون تنها در حالت $4s$ دارد. اتفاقات پیچیده تر هم می تواند بیفتد، نظیر تشکیل H_2O ، وقتی دو اتم H با یک اتم اکسیژن ترکیب شده و تشکیل پیوند کووالانسی دهند، که در آن هر اتم هیدروژن یک الکترون با اتم اکسیژن به اشتراک می گذارد. بدین ترتیب سه اتم لایه های بیرونی خود را در کوتاهترین زمان پر می کنند.

خواص بسیاری از عناصر از پیکربندی الکترون های خارجی به دست می آید. عناصر خاکی نادر را در نظر بگیرید، ^{58}Ce تا ^{71}Lu که خواص شیمیایی بسیار مشابهی دارند. چرا رفتار شیمیایی در این گستره با Z تغییر نمی کند؟ پاسخ این است که در این عناصر زیر لایه $6s$ پر بوده و زیر لایه $4f$ ، که داخلی است (اما دارای انرژی بالاتری است) در حال پر شدن است. چون آنچه در لایه های داخلی اتفاق می افتد خواص شیمیایی را تغییر نمی دهد، همه آنها مثل هم رفتار می کنند. برای اکتینیدها هم همین طور است، ^{90}Th تا ^{103}Lw که دارای زیر لایه $7s$ پر بوده و زیر لایه $5f$ در حال پر شدن است.

از آنجا که باید یک جایی توقف کنیم همین جا توقف می کنیم. اگر بخواهید بیشتر بدانید می بایست به سراغ کتاب های مربوط به این موضوع بروید.^۱

تمرین (۱۳-۴-۱): نشان دهید که اگر از بر همکنش بین الکترونی چشم پوشی کنیم ترازهای انرژی یک اتم چند الکترونی به صورت Z^2 تغییر می کنند. از آنجا که پتانسیل کولنی Ze/r است چرا انرژی متناسب با Z^2 است؟

تمرین (۱۳-۴-۲): اندازه های اتم های اورانیوم و هیدروژن را (به طور تقریبی) مقایسه کنید. فرض کنید که ترازها به ترتیب افزایش n پر می شوند و توصیف غیر نسبیته معتبر است. از اثرات بین الکترونی چشم پوشی کنید.

تمرین (۱۳-۴-۳): نور مرئی دارای طول موج تقریبی 5000Å است. فکر می کنید کدامیک از سری های لیمن، بالمر و پاشن در ابتدا کشف شده باشد؟

۱- برای اطلاعات بیشتر در مورد جدول تناوبی، فصل ۱۸ از کتاب فیزیک پایه اتم ها و مولکول ها اثر U. Fano and L. Fano, Wiley, New York (1959) را ببینید.

۱۴-۱- مقدمه

در این فصل دسته‌ای از پدیده‌های کوانتومی را در نظر می‌گیریم که نمی‌توانند با کاربرد مستقیم و سراسرست چهار اصل موضوع اشاره شده در گذشته بحث و بررسی شوند. دلیل این است که این پدیده‌ها دارای یک درجه آزادی کوانتومی، موسوم به اسپین، هستند که هیچ نظیر کلاسیکی ندارد. در نتیجه نه می‌توانیم عملگر اسپین را با بازگشت به اصل موضوع (۲) به دست آوریم و نه می‌توانیم بلافاصله آن هامیلتونی کوانتومی را بنویسیم که ناظر بر تحول زمانی آن باشد. مسئله بسیار مهم است چون اکثر ذرات - الکترون‌ها، پروتون‌ها، نوترون‌ها و فوتون‌ها دارای درجه آزادی اسپینی هستند. خوشبختانه این مشکل می‌تواند با ترکیب زیرکانه شهود کلاسیکی و استدلال از طریق قیاس حل شود. در این فصل فقط اسپین الکترون را مطالعه می‌کنیم. بحث اسپین ذرات دیگر کاملاً مشابه همین است به جز فوتون که با سرعت c حرکت می‌کند و نمی‌تواند به صورت غیر نسبیستی بحث شود (اسپین فوتون در فصل ۱۸ بحث خواهد شد).

در سه بخش بعدی به دنبال سوالات زیر هستیم:

- (۱) - ماهیت این درجه آزادی اسپینی جدید چیست؟
- (۲) - فضای هیلبرت چطور تصحیح می‌شود تا این درجه آزادی جدید را در بر بگیرد؟ عملگرهای اسپین در این فضا شبیه چه چیزی هستند (سینماتیک اسپین)؟
- (۳) - اسپین با زمان چگونه تحول می‌یابد یعنی آیا اسپین در هامیلتونی وارد می‌شود (دینامیک اسپین)؟

۱۴-۲- ماهیت اسپین چیست؟

بهترین شیوه برای مشخص کردن اسپین، به صورت شکلی از تکانه زاویه‌ای است. اما همان‌طور که آزمایش زیر نشان می‌دهد اسپین تکانه زاویه‌ای وابسته به عملگر L نیست. الکترونی در یک حالت با تکانه خطی صفر آماده می‌شود یعنی در حالتی با تابع موج ثابت (مستقل از فضا). چون عملگرهای L_x ، L_y و L_z وقتی روی آن اثر کنند عدد صفر را به دست خواهند داد، فرمالیزم موجود، پیش‌بینی می‌کند که اگر تکانه زاویه‌ای در امتداد مثلاً جهت z اندازه‌گیری شود نتیجه صفر به دست خواهد آمد. اما آزمایش واقعی نشان می‌دهد که این

اشباه است و نتیجه عبارتست از $\pm \hbar/2$.^۱ نتیجه اینکه الکترون دارای تکانه زاویه‌ای «ذاتی» است که وابسته به حرکت مداری آن نیست. این تکانه زاویه‌ای اسپین نامیده می‌شود چون در روزهای اولیه تصور می‌شد که اگر الکترون بدون حرکت در فضا دارای تکانه زاویه‌ای باشد، می‌بایست چرخنده‌ای شبیه فرفره باشد. ما از این نامگذاری بهره گرفته‌ایم نه از مدل مکانیکی که با این اسم همراه است، چون مدل مکانیکی سازگاری وجود ندارد. خوشبختانه می‌توان اسپین و دینامیک آنرا بدون توسل به هیچ مدلی و فقط با مشاهده این حقیقت که اسپین شکلی از تکانه زاویه‌ای است، توصیف کرد. اکنون فرمالیزمی را که اسپین را بحث کرده و بویژه امکان درک آزمایش فوق را به ما می‌دهد ارائه می‌کنیم.

۱۴-۳- سینماتیک اسپین

بحث مربوط به جواب عمومی مسئله ویژه مقداری تکانه زاویه‌ای (بخش ۱۲-۵) روش بحث و بررسی ذرات دارای تکانه زاویه‌ای ذاتی یا اسپین را پیشنهاد می‌کند. به یاد آورید که اگر ذره‌ای به وسیله تابع موجی با چند (n) مولفه توصیف شود مولد چرخش بی‌نهایت کوچک، فقط L نیست بلکه چیز دیگری است. دلیل این است که تحت یک چرخش بی‌نهایت کوچک دو اتفاق برای تابع موج می‌افتد: (۱) - مقادیر در هر نقطه فضایی به نقطه چرخیده اختصاص داده می‌شوند و (۲) - مولفه‌های تابع موج به ترکیبات خطی از یکدیگر تبدیل می‌شوند.

عملگر دیفرانسیلی L قسمت (۱) را انجام داده در حالی که یک ماتریس S ، $n \times n$ ، مسئول قسمت (۲) است.

با تعمیم یافته‌های خود در تمرین ۱۲-۵-۱ به یک تابع موج دارای n مولفه در سه بعد می‌توانیم بگوییم که تحت یک چرخش بی‌نهایت کوچک حول محور z ، تابع موج به صورت زیر تبدیل می‌یابد:

$$\begin{bmatrix} \psi'_1 \\ \vdots \\ \psi'_n \end{bmatrix} = \left(\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{bmatrix} - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \begin{bmatrix} -i\hbar \partial/\partial\phi & & & 0 \\ & \ddots & & \\ & & -i\hbar \partial/\partial\phi & \\ 0 & & & \end{bmatrix} - \frac{i\varepsilon}{\hbar} S_z \right) \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_n \end{bmatrix} \quad (1-3-14)$$

که در آن S_z یک ماتریس $n \times n$ است. در شکل مجرد، این معادله به صورت زیر است^۲

$$\begin{aligned} |\psi'\rangle &= \left[I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} (L_z + S_z) \right] |\psi\rangle \\ &= \left[I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} J_z \right] |\psi\rangle \end{aligned} \quad (2-3-14)$$

ما J_z ، مولد چرخش‌های بی‌نهایت کوچک حول محور z ، را به عنوان مولفه z تکانه زاویه‌ای تعریف می‌کنیم. می‌بینیم که J_z دو قسمت دارد:

۱- در عمل، تکانه زاویه‌ای اندازه‌گیری نمی‌شود کمیتی وابسته موسوم به گشتاور مغناطیسی اندازه‌گیری می‌شود. بعداً در این مورد بیشتر خواهیم گفت. همچنین اسپین اولین بار بر پایه شواهد طیف‌سنجی کشف شد نه از طریق آزمایشی از نوع بالا.

۲- عملگرهای اسپین چه به صورت مجرد و چه به صورت ماتریسی با همین نماد S نشان داده می‌شوند.

$$J_z = L_z + S_z$$

و در حالت کلی تر،

$$(۳-۳-۱۴)$$

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$$

مسئله ما، یافتن تعداد (n) مولفه مربوط به الکترون و سه ماتریس اسپین، که مولفه‌های آنرا می‌چرخانند، است. از آنجا که J_i ها مولدهای چرخش‌ها هستند می‌بایست از شرط سازگاری

$$[J_i, J_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} J_k \quad (۴-۳-۱۴)$$

پیروی کنند.

از آنجا که \mathbf{L} و \mathbf{S} روی قسمت‌های مختلف موج اثر می‌کنند (اولی روی α و γ و z و دومی روی شاخص‌های $i = 1, \dots, n$)، با هم جابه‌جا شده و می‌توانیم از معادله (۴-۳-۱۴) استنباط کنیم که

$$[L_i, L_j] + [S_i, S_j] = i\hbar \left[\sum_k \epsilon_{ijk} L_k + \sum_k \epsilon_{ijk} S_k \right] \quad (۵-۳-۱۴)$$

با استفاده از قواعد جابه‌جایی شناخته شده L_i ها، نتیجه می‌گیریم که

$$[S_i, S_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} S_k \quad (۶-۳-۱۴)$$

یادآوری می‌کنیم که در فصل ۱۲ ماتریس‌های J_x ، J_y و J_z را به دست آوریم [معادلات (۱۲-۵-۲۲) - (۱۲-۵-۲۴)] که دقیقاً از این روابط جابه‌جایی پیروی می‌کنند. اما این ماتریس‌ها بی‌نهایت بعدی بودند. هر چند که ماتریس‌های بی‌نهایت بعدی متشکل از $(2j+1) \times (2j+1)$ بلوک، با $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$ بودند و روابط جابه‌جایی به صورت بلوک به بلوک برآورده می‌شدند. کدام بلوک را برای عملگرهای اسپین الکترون انتخاب خواهیم کرد؟ پاسخ با این واقعیت تجربی مشخص می‌شود که S_z فقط دارای ویژه مقادیر $\pm \hbar/2$ است. این مطلب، بلوک‌های 2×2 معادلات (۱۲-۵-۲۲) - (۱۲-۵-۲۴) را انتخاب می‌کند:

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (۷-۳-۱۴)$$

بنابراین توصیف الکترون، از طریق یک تابع موج دو مولفه‌ای موسوم به اسپینور صورت می‌گیرد:

$$\psi = \begin{bmatrix} \psi_+(x, y, z) \\ \psi_-(x, y, z) \end{bmatrix} \quad (۱۴-۳-۸-الف)$$

$$\equiv \psi_+ \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \psi_- \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (۱۴-۳-۸-ب)$$

اگر $\psi_- = 0$ و $\psi_+ \neq 0$ باشد، ویژه حالتی از S_z با ویژه مقدار $\hbar/2$ داریم؛ اگر $\psi_+ = 0$ و $\psi_- \neq 0$ باشد ویژه مقدار S_z ، $(-\hbar/2)$ است.

اکنون آزمایش مذکور در بالا را تفسیر می‌کنیم. از آنجا که حالتی با تکانه صفر را آماده کرده‌ایم، می‌خواهیم عملگر \mathbf{P} وقتی روی ψ اثر می‌کند مقدار صفر را به دست دهد. عملگر \mathbf{P} فقط از دو مولفه ψ مشتق می‌گیرد:

$$\mathbf{P} \rightarrow \begin{bmatrix} -i\hbar\nabla & 0 \\ 0 & -i\hbar\nabla \end{bmatrix} \quad (۹-۳-۱۴)$$

از $\mathbf{P}|\psi\rangle = 0$ ، یعنی

$$\begin{bmatrix} -i\hbar\nabla\psi_+ \\ -i\hbar\nabla\psi_- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (۱۰-۳-۱۴)$$

نتیجه می‌گیریم که ψ_+ و ψ_- مستقل از x ، y و z هستند. نتیجه اینکه وقتی L_z روی ψ اثر کند صفر به دست می‌آید؛ اما S_z اینگونه نیست: دامنه به دست آوردن $\pm\hbar/2$ ، ψ_{\pm} است.

اسپینور الکترون، یک موجود دو مولفه‌ای است که آنرا بین یک اسکالر، که یک مولفه دارد، و یک بردار، که سه مولفه دارد، قرار می‌دهد. اما مولفه‌های اسپینور مختلط هستند.

تفاوت مهم بین تکانه زاویه‌ای اسپینی و مداری این است که: ما می‌توانیم بزرگی تکانه زاویه‌ای مداری یک ذره را تغییر دهیم (با اعمال میدان‌های خارجی) اما در مورد ویژگی بزرگی اسپین آن این گونه نیست. عملگر S^2 عبارتست از

$$S^2 = \hbar^2 \begin{bmatrix} (\frac{1}{2})(\frac{1}{2}+1) & 0 \\ 0 & (\frac{1}{2})(\frac{1}{2}+1) \end{bmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (۱۱-۳-۱۴)$$

و مقدار $\frac{3}{4}\hbar^2$ را در هر حالت ψ به دست می‌دهد [برای هر ذره، بزرگی اسپین به وسیله تعداد مولفه‌ها در تابع موج مشخص می‌شود و یک ناورداست. لذا اسپین الکترون همیشه $\frac{1}{2}$ (نسبت به \hbar) است و به عنوان یک برچسب ناوردای ذره، نظیر بار یا جرم سکون آن، باقی می‌ماند].

به این نتیجه رسیده‌ایم که در پایه مختصه الکترون باید به وسیله یک تابع موج دو مولفه‌ای توصیف شود.^۱ اجازه دهید این نتیجه را در فضای هیلبرت مجدداً بیان کنیم. ابتدا به راحتی می‌توان دید که ورود اسپین، اندازه فضای هیلبرت را دو برابر کرده است؛ اگر قبلاً ∞ بعدی بود، اکنون 2∞ بعدی است، اگر که منظورمان را بدانید. بردارهای پایه $\{|x, y, z, s_z\rangle$ عملگرهای دو به دو جابه‌جا شونده X, Y, Z و S_z را قطری می‌کنند (می‌توان به پایه‌های دیگری چون $\{|p_{s_z}\rangle$ یا $\{|p_{s_x}\rangle$ و غیره هم فکر کرد). بردار حالت $|\psi\rangle$ در این پایه یک بردار ستونی 2∞ بعدی است:

۱- وقتی به معادله دیراک رسیدیم خواهیم دید که در نظر گرفتن مکانیک نسبیتی به طور خودکار منجر به یک تابع موج چند مولفه‌ای، یعنی به اسپین، منجر می‌شود، اگر درخواست کنیم که معادله نسبت به زمان و فضای مرتبه اول باشد.

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\mathbf{R}, S_z \text{ basis}} \langle xyzs_z | \psi \rangle = \begin{bmatrix} \psi(x=-\infty, y=-\infty, z=-\infty, s_z=+\hbar/2) \\ \vdots \\ \psi(x, y, z, s_z=+\hbar/2) \\ \vdots \\ \psi(x=\infty, y=\infty, z=\infty, s_z=+\hbar/2) \\ \hline \psi(x=-\infty, y=-\infty, z=-\infty, s_z=-\hbar/2) \\ \vdots \\ \psi(x, y, z, s_z=-\hbar/2) \\ \vdots \\ \psi(x=\infty, y=\infty, z=\infty, s_z=-\hbar/2) \end{bmatrix} \quad (12-3-14)$$

واضح است که $\psi(\mathbf{r}, \pm \hbar/2)$ دامنه یافتن الکترون در \mathbf{r} با $s_z = \pm \hbar/2$ است. خط چین افقی، مولفه‌های $s_z = \hbar/2$ را از مولفه‌های دارای $s_z = -\hbar/2$ جدا می‌کند. حال اگر s_z در $\hbar/2$ ثابت شود و x و y و z را از $-\infty$ تا ∞ تغییر دهیم. مولفه $|\psi\rangle$ به صورت یکنواخت تغییر خواهد کرد یعنی تابع پیوسته $\psi_+(x, y, z)$ را تعریف می‌کند. همین‌طور مولفه‌های زیر نقطه چین تابع $\psi_-(x, y, z)$ را تعریف می‌کنند. برحسب این توابع می‌توانیم معادله (۱۲-۳-۱۴) را به شکل زیر فشرده کنیم:

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\mathbf{R}, S_z \text{ basis}} \begin{bmatrix} \psi_+(x, y, z) \\ \psi_-(x, y, z) \end{bmatrix} \quad (13-3-14)$$

این نمادگذاری، دو نمادگذاری را که تاکنون به کار برده‌ایم، ترکیب می‌کند، اگر بردار دارای مولفه‌های برچسب زده شده به وسیله شاخص گسسته i ($i = 1, \dots, n$) باشد آنرا به صورت یک بردار ستونی نشان می‌دهیم در حالی که اگر به وسیله یک شاخص پیوسته نظیر x برچسب زده شده باشد به وسیله تابع $\psi(x)$ نشان می‌دهیم؛ اما در اینجا چون هم به شاخص گسسته (s_z) و هم به شاخص پیوسته (x, y, z) بستگی دارد، آنرا به صورت یک بردار ستونی می‌نویسیم که مولفه هایش توابع هستند. شرط بهنجارش،

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \sum_{s_z} \int \langle \psi | xyzs_z \rangle \langle xyzs_z | \psi \rangle dx dy dz \quad (14-3-14)$$

$$= \int (|\psi_+|^2 + |\psi_-|^2) dx dy dz$$

است. در نمادگذاری فشرده، S_z یک ماتریس 2×2 است:

$$S_z |\psi\rangle \xrightarrow{\mathbf{R}, S_z \text{ basis}} \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_+(x, y, z) \\ \psi_-(x, y, z) \end{bmatrix} \quad (\text{الف} - 15-3-14)$$

در حالی که در شکل کامل خود، ماتریس 2∞ بعدی است:

نوشته می‌شود که در آن $|\psi_0\rangle$ و $|\chi_s\rangle$ به ترتیب عناصر \mathbb{V}_s و \mathbb{V}_0 هستند. اکنون $\langle\psi_0(t)|$ در پاسخ به H_0 تحول یافته در حالی که تحول $|\chi_s(t)\rangle$ به وسیله H_s دیکته می‌شود. ما فقط تحول $|\chi_s\rangle$ را دنبال خواهیم کرد. شکل حاصلضربی $|\psi\rangle$ اطمینان می‌دهد که درجات آزادی اسپینی و مداری از نظر استاتیکی مستقل هستند. البته موارد جالب زیادی وجود دارد که در آنها H جدا شدنی نبوده و درجات آزادی مداری و اسپینی در تحولشان به یکدیگر کوپل و جفت شده هستند. به این موارد در فصل‌های بعدی می‌پردازیم.

با این فرض فقط یک فضای هیلبرت دو بعدی (مختلط)، \mathbb{V}_s ، برای کار داریم. یک پایه کامل، متشکل از بردارهای $|s, m\rangle \equiv |s, m\hbar\rangle = |S, S_z\rangle$ است و آنها عبارتند از

$$|s, m\rangle = |1/2, 1/2\rangle \xrightarrow{S_z \text{ basis}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (14-3-21 \text{ الف})$$

$$|s, m\rangle = |1/2, -1/2\rangle \xrightarrow{S_z \text{ basis}} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (14-3-21 \text{ ب})$$

هر کت $|\chi\rangle$ در \mathbb{V}_s می‌تواند به صورت

$$|\chi\rangle = \alpha|1/2, 1/2\rangle + \beta|1/2, -1/2\rangle \xrightarrow{S_z \text{ basis}} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} \quad (14-3-22)$$

بسط داده شود. شرط بهنجارش عبارتست از

$$1 = \langle\chi|\chi\rangle \xrightarrow{S_z \text{ basis}} 1 = [\alpha^*, \beta^*] \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = |\alpha|^2 + |\beta|^2 \quad (14-3-23)$$

اگر $\langle S \rangle$ را در ویژه حالت‌های S_z محاسبه کنیم داریم

$$\langle 1/2, \pm 1/2 | S | 1/2, \pm 1/2 \rangle = \pm(\hbar/2)\mathbf{k} \quad (14-3-24)$$

به این حالت‌ها، حالت‌های با اسپین رو به بالا / پایین محور z اطلاق می‌شود. به‌طور کلی‌تر، ویژه حالت‌های $|\hat{n}, \pm\rangle$ مربوط به $\hat{n} \cdot S$ با ویژه مقادیر $\pm\hbar/2$ که در آنها

$$\langle \hat{n}, \pm | S | \hat{n}, \pm \rangle = \pm(\hbar/2)\hat{n} \quad (14-3-25)$$

است حالت‌های با اسپین رو به بالا / پایین جهت بردار \hat{n} گفته می‌شوند. سعی می‌کنیم تا مولفه‌های $|\hat{n}, \pm\rangle$ را (در پایه S_z) تعیین کرده و معادله (14-3-25) را ثابت کنیم.

فرض کنید \hat{n} در جهت (θ, ϕ) باشد یعنی

$$\hat{n}_z = \cos \theta$$

$$\hat{n}_x = \sin \theta \cos \phi \quad (14-3-26)$$

$$\hat{n}_y = \sin \theta \sin \phi$$

کت‌های $|\hat{n}, \pm\rangle$ ویژه بردارهای

$$\begin{aligned} \hat{n} \cdot \mathbf{S} &= n_x S_x + n_y S_y + n_z S_z \\ &= \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} n_z & n_x - i n_y \\ n_x + i n_y & -n_z \end{bmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\phi} \\ \sin \theta e^{i\phi} & -\cos \theta \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (27-3-14)$$

هستند. حل مسئله ویژه مقاداری (تمرین ۱۴-۳-۲) ساده بوده و نتیجه می شود که

$$|\hat{n} \text{ up}\rangle \equiv |\hat{n}+\rangle = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) e^{-i\phi/2} \\ \sin(\theta/2) e^{i\phi/2} \end{bmatrix} \quad (14-3-28\text{الف})$$

$$|\hat{n} \text{ down}\rangle \equiv |\hat{n}-\rangle = \begin{bmatrix} -\sin(\theta/2) e^{-i\phi/2} \\ \cos(\theta/2) e^{i\phi/2} \end{bmatrix} \quad (14-3-28\text{ب})$$

می توانید ثابت کنید که همان طور که ادعا کردیم:

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}\pm | \mathbf{S} | \hat{n}\pm \rangle &= \pm (\hbar/2) (\mathbf{i} \sin \theta \cos \phi + \mathbf{j} \sin \theta \sin \phi + \mathbf{k} \cos \theta) \\ &= \pm (\hbar/2) \hat{n} \end{aligned} \quad (14-3-29)$$

یک ویژگی جالب \mathbb{V}_s این است که نه تنها می توانیم $\langle \mathbf{S} \rangle$ را در یک حالت معین حساب کنیم بلکه می توانیم برعکس حرکت کرده یعنی با معلوم بودن $\langle \mathbf{S} \rangle$ بردار حالت را نتیجه بگیریم. این موضوع مربوط به این حقیقت می شود که هر عنصر از \mathbb{V}_s فقط دو مولفه (مختلط) α و β دارد که به وسیله شرط بهنجارش $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ مقید می شوند، سه درجه آزادی حقیقی، و $\langle \mathbf{S} \rangle$ دقیقاً سه بخش از اطلاعات را شامل می شوند. اگر $\langle \mathbf{S} \rangle$ را به صورت $(\hbar/2) \hat{n}$ بنویسیم آنگاه کت متناظر $|\hat{n}, +\rangle$ یا، اگر شما بخواهید، $|\hat{n}, -\rangle$ است. روش دیگر بیان این نتیجه به صورت زیر است: به جای مشخص کردن یک حالت به وسیله α و β می توانیم عملگر $\hat{n} \cdot \mathbf{S}$ را بدهیم که این حالت یک ویژه بردار آن با ویژه مقدار $\hbar/2$ است. یک نتیجه جالب این است که هر اسپینور در \mathbb{V}_s یک ویژه کت عملگر اسپین $\hat{n} \cdot \mathbf{S}$ با ویژه مقدار $\hbar/2$ است.

تمرین ۱۴-۳-۱: می خواهیم نتیجه فوق را صریحاً ثابت کنیم. اسپینوری را با مولفه های $\alpha = \rho_1 e^{i\phi_1}$ و $\beta = \rho_2 e^{i\phi_2}$ در نظر بگیرید. از $\langle \chi | \chi \rangle = 1$ نتیجه بگیرید که می توانیم برای یک θ ، بنویسیم: $\rho_1 = \cos(\theta/2)$ و $\rho_2 = \sin(\theta/2)$. سپس عامل فاز مشترک را بیرون بیاورید تا اسپینور شکل معادله (۱۴-۳-۲۸الف) را بگیرد. این، نتیجه فوق را ثابت کرده و \hat{n} را هم مشخص می کند.

تا اینجا در مورد بردارهای حالت در \mathbb{V}_s کافیست. در مورد عملگرها در این فضا چطور؟ اجازه دهید با S_x ، S_y و S_z شروع کنیم. بهتر است ماتریس های پائولی σ را معرفی کنیم که به صورت زیر تعریف می شوند

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \quad (14-3-30)$$

به طوری که

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (14-3-31)$$

به خاطر سپردن این ماتریس ها سودمند است. در اینجا برخی از ویژگی های مهم آنها را ارائه می کنیم:

(۱) - آنها با یکدیگر جابه جا می شوند:

$$[\sigma_i, \sigma_j]_+ = 0 \quad \text{or} \quad \sigma_i \sigma_j = -\sigma_j \sigma_i \quad (i \neq j) \quad (۳۲-۳-۱۴)$$

(۲) - از قواعد جابه جایی برای عملگرهای اسپین S و با استفاده از پادجابه جایی ماتریس های پائولی به

$$\sigma_x \sigma_y = i \sigma_z \quad (\text{جایگشت دوره ای}) \quad (۳۳-۳-۱۴)$$

می رسیم.

(۳) - ترس (رد) آنها صفر است:

$$\text{Tr} \sigma_i = 0, \quad i = x, y, z \quad (۳۴-۳-۱۴)$$

(تمرین ۱۴-۳-۳ را برای اثبات ببینید).

(۴) - مربع هر ماتریس پائولی برابر I است:

$$\sigma_i^2 = I \quad (۳۵-۳-۱۴)$$

یا به طور کلی تر

$$(\hat{n} \cdot \sigma)^2 = I \quad (۳۶-۳-۱۴)$$

اثبات. چون S_z دارای ویژه مقادیر $\pm \hbar/2$ است، نتیجه می شود که در این فضا،^۱

$$\left(S_z + \frac{\hbar}{2}\right) \left(S_z - \frac{\hbar}{2}\right) = 0$$

اما چون آنچه که ما محور Z می نامیم دلخواه است می بایست داشته باشیم:

$$\left(\hat{n} \cdot S + \frac{\hbar}{2}\right) \left(\hat{n} \cdot S - \frac{\hbar}{2}\right) = 0$$

یا

$$(\hat{n} \cdot S)^2 = \frac{\hbar^2}{4} I$$

یا

$$(\hat{n} \cdot \sigma)^2 = I \quad \text{Q.E.D.}$$

(۵) - می توانیم معادلات (۳۲-۳-۱۴) و (۳۵-۳-۱۴) را ترکیب کنیم تا به

$$[\sigma_i, \sigma_j]_+ = 2\delta_{ij}I \quad (۱۴-۳-۳۷)$$

برسیم.

(۶)- با ترکیب این رابطه با قواعد جابه جایی،

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z \quad (\text{جایگشت دوره‌ای}) \quad (۱۴-۳-۳۸)$$

می‌توانیم یک اتحاد بسیار مفید را ثابت کنیم (تمرین ۱۴-۳-۴):

$$(\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B}I + i(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (۱۴-۳-۳۹)$$

که در آن \mathbf{A} و \mathbf{B} بردار یا عملگرهای برداری هستند که با $\boldsymbol{\sigma}$ جابه‌جا می‌شوند.

(۷)- با ترکیب معادلات (۱۴-۳-۳۳) و (۱۴-۳-۳۵) نتیجه می‌شود که

$$\text{Tr}(\sigma_i \sigma_j) = 2\delta_{ij}, \quad i, j = x, y, z \quad (۱۴-۳-۴۰-الف)$$

فرض کنید ماتریس یکانی I را به عنوان ماتریس پائولی چهارم تلقی کنیم و آنرا σ_0 بنامیم،^۱

$$\text{Tr}(\sigma_\alpha \sigma_\beta) = 2\delta_{\alpha\beta} \quad (\alpha, \beta = x, y, z, 0) \quad (۱۴-۳-۴۰-ب)$$

این معادله بیان می‌کند که ماتریس‌های σ_α مستقل خطی هستند. بر این اساس طبق معمول نتیجه می‌گیریم که

$$\sum_{\alpha} c_{\alpha} \sigma_{\alpha} = 0 \rightarrow c_{\alpha} = 0 \quad \text{برای هر } \alpha \quad (۱۴-۳-۴۱)$$

برای اثبات این برای مثلاً c_{β} ، هر دو طرف را در σ_{β} ضرب کرده و رد آنرا می‌گیریم.

از آنجا که هر ماتریس 2×2 ، M ، فقط چهار درجه آزادی (مختلط) مستقل دارد، می‌تواند به صورت

$$M = \sum m_{\alpha} \sigma_{\alpha} \quad (۱۴-۳-۴۲)$$

نوشته شود. برای یافتن m_{β} ها، در σ_{β} ضرب کرده و رد آنرا محاسبه می‌کنیم:

$$m_{\beta} = \frac{1}{2} \text{Tr}(M \sigma_{\beta}) \quad (۱۴-۳-۴۳)$$

(ضرایب m_{α} در حالت کلی مختلط خواهند بود و اگر M هرمیتی باشد حقیقی خواهند بود).

از این رو، هر عملگر در V_s می‌تواند برحسب σ_{α} ها نوشته شود که تشکیل پایه‌ای می‌دهند که نسبت به

ضرب داخلی $\frac{1}{2} \text{Tr}(\sigma_{\alpha} \sigma_{\beta})$ راست هنجار است.^۲

۱- از حالا به بعد α و β روی چهار مقدار x, y, z و 0 تغییر می‌کنند در حالی که i و j فقط روی x و y و z تغییر خواهند کرد.

۲- ضرب داخلی بین دو ماتریس M و M' که روی V_s اثر می‌کنند واقعاً $\text{Tr}(MM')$ است. اما دگر برای σ های هرمیتی بی‌تأثیر است. تمرین جالبی است که ببینید این ضرب داخلی از سه اصل موضوع پیروی می‌کند.

اشکال صریح عملگرهای چرخش

اینکه $(\hat{n} \cdot \sigma)^2 = I$ است، بسیاری از محاسبات را ساده کرده و این امکان را به ما می‌دهد که چندین عملگر نظیر $U(t) = \exp(-iHt/\hbar)$ و $U(R(\theta)) = \exp(-i\theta \cdot S/\hbar)$ را که در فضاهای بی‌نهایت بعدی محاسبه آنها مشکل است در شکل بسته محاسبه کنیم. در این بخش عملگرهای چرخش را در نظر گرفته و در بخش بعد به انتشارگر می‌پردازیم. ملاحظه کنید که

$$\begin{aligned} U[R(\theta)] &= \exp(-i\theta \cdot S/\hbar) = \exp(-i\theta \cdot \sigma/2) \\ &= \exp\left[-i\left(\frac{\theta}{2}\right)\hat{\theta} \cdot \sigma\right] \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i\theta}{2}\right)^n \frac{1}{n!} (\hat{\theta} \cdot \sigma)^n \\ &= I + \left(-\frac{i\theta}{2}\right)\hat{\theta} \cdot \sigma + \frac{1}{2!} \left(-\frac{i\theta}{2}\right)^2 I + \frac{1}{3!} \left(-\frac{i\theta}{2}\right)^3 (\hat{\theta} \cdot \sigma) + \dots \end{aligned}$$

با دسته‌بندی ضرایب I و $\hat{\theta} \cdot \sigma$ به

$$U[R(\theta)] = \cos(\theta/2)I - i \sin(\theta/2)\hat{\theta} \cdot \sigma \quad (۴۴-۳-۱۴)$$

می‌رسیم.

این عملگر را مورد آزمایش قرار می‌دهیم. فرض کنید ذره‌ای با اسپین بالا در جهت z یعنی حالت $[0]$ ، داریم. اگر بخواهیم از این حالت به ذره‌ای در حالت $[+, \hat{n}]$ برسیم واضح است که می‌بایست $[0]$ را به اندازه زاویه θ حول محوری عمود بر محور z و محور \hat{n} بچرخانیم. بنابراین زاویه چرخش برابر است با

$$\theta = \theta \hat{\theta} = \theta \frac{\mathbf{k} \times \hat{n}}{|\mathbf{k} \times \hat{n}|} \quad (۴۵-۳-۱۴)$$

که \mathbf{k} بردار یکه در امتداد محور z است، چون $(\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta) = \hat{n}$ نتیجه می‌شود که

$$\hat{\theta} = \frac{1}{\sin \theta} (-\sin \theta \sin \phi, \sin \theta \cos \phi, 0) = (-\sin \phi, \cos \phi, 0) \quad (۴۶-۳-۱۴)$$

ماتریس چرخش، از معادله (۴۴-۳-۱۴)، عبارتست از

$$\exp\left(-\frac{i\theta}{2}\hat{\theta} \cdot \sigma\right) = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) & -\sin(\theta/2)e^{-i\phi} \\ \sin(\theta/2)e^{i\phi} & \cos(\theta/2) \end{bmatrix} \quad (۴۷-۳-۱۴)$$

طبق نکته مذکور در گذشته، ستون اول، شکل چرخیده $[0]$ است و می‌بینیم که با $[+, \hat{n}]$ ارائه شده در معادله (۴۶-۳-۱۴) صرف نظر از یک ضریب فاز در توافق است.

در اینجا خلاصه‌ای از فرمول‌های مفیدی که به دست آورده شده یا فقط بیان شده‌اند ارائه می‌شود:

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}$$

$$[\sigma_i, \sigma_j]_+ = 2I\delta_{ij}$$

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i \sum_k \varepsilon_{ijk} \sigma_k$$

$$(\hat{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})^2 = I$$

$$\text{Tr } \sigma_i = 0$$

$$\text{Tr}(\sigma_\alpha \sigma_\beta) = 2\delta_{\alpha\beta} \quad (\alpha, \beta = x, y, z, 0)$$

$$\exp\left(-i \frac{\theta}{2} \hat{\theta} \cdot \boldsymbol{\sigma}\right) = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) I - i \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \hat{\theta} \cdot \boldsymbol{\sigma}$$

$$(\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})I + i(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot \boldsymbol{\sigma}$$

تمرین ۱۴-۳-۲: الف- نشان دهید که ویژه بردارهای $\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{n}$ به وسیله معادله (۱۴-۳-۲۸) مشخص می شوند.

(ب) - معادله (۱۴-۳-۲۹) را ثابت کنید.

تمرین ۱۴-۳-۳: با استفاده از معادلات (۱۴-۳-۳۲) و (۱۴-۳-۳۳) نشان دهید که رد ماتریس های پائولی صفر است.

تمرین ۱۴-۳-۴: معادله (۱۴-۳-۳۹) را به دو روش مختلف به دست آورید:

الف- $\sigma_i \sigma_j$ را برحسب $[\sigma_i, \sigma_j]_+$ و $[\sigma_i, \sigma_j]$ بنویسید.

ب- از معادلات (۱۴-۳-۴۲) و (۱۴-۳-۴۳) استفاده کنید.

تمرین ۱۴-۳-۵: ماتریس زیر را برحسب ماتریس های پائولی بنویسید:

$$M = \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{bmatrix}$$

تمرین ۱۴-۳-۶: الف- استدلال کنید که $\langle s_z = \hbar/2 | U[R(\phi\mathbf{k})]U[R(\theta\mathbf{j})] | s_z = \hbar/2 \rangle = U[R(\hat{n}, +)]$ ب- با محاسبه

صریح این را اثبات کنید.

تمرین ۱۴-۳-۷: ماتریس های زیر را به صورت ترکیب های خطی از ماتریس های پائولی و I بنویسید:

الف- $(I + i\sigma_x)^{1/2}$ (این را به نصف یک چرخش معین ارتباط دهید).

ب- $(2I + \sigma_x)^{-1}$

ج- σ_x^{-1}

تمرین ۱۴-۳-۸: الف- نشان دهید که هر ماتریسی که با $\boldsymbol{\sigma}$ جابه جا شود ضربی از ماتریس واحد است.

ب- نشان دهید که نمی‌توانیم ماتریسی پیدا کنیم که با هر سه ماتریس پائولی پادجابیه‌جا شود (اگر چنین ماتریسی موجود باشد می‌بایست برابر صفر باشد).

۱۴-۴- دینامیک اسپین

از آنجا که جستجو برای هامیلتونی اسپینی بر پایه قیاس کلاسیکی قرار دارد، برخی از مفاهیم اساسی مغناطوستاتیک کلاسیک را یادآوری می‌کنیم. حلقه‌ای مربعی را که حامل جریان I است در یک میدان مغناطیسی \mathbf{B} در نظر بگیرید (شکل ۱۴-۱). از مغناطوستاتیک استاندارد (نیرو بر واحد طول روی رسانای حامل جریان و غیره) می‌شود نشان داد که گشتاور وارده بر حلقه برابر

$$\mathbf{T} = \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B} \quad (14-4-1)$$

است که $\boldsymbol{\mu}$ گشتاور مغناطیسی برابر است با

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{I \cdot A}{c} \mathbf{e}_{\perp} \quad (14-4-2)$$

A مساحت حلقه، c سرعت نور و \mathbf{e}_{\perp} بردار یکه عمود بر صفحه حلقه است.^۱ اثر \mathbf{T} چرخاندن حلقه است تا وقتی که $\boldsymbol{\mu}$ و \mathbf{B} موازی شوند.

از آنجا که در نهایت به دنبال مسئله کوانتوم مکانیکی هستیم ترجیح می‌دهیم تا برهم‌کنش بین حلقه و میدان مغناطیسی را برحسب انرژی پتانسیل وابسته به گشتاور بیان کنیم: اگر زاویه بین $\boldsymbol{\mu}$ و \mathbf{B} باشد انرژی برهم‌کنش برابر می‌شود با:^۲

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \int T(\theta) d\theta = \int \boldsymbol{\mu} B \sin \theta d\theta = -\boldsymbol{\mu} B \cos \theta = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} \quad (14-4-3)$$

همان‌طور که انتظار می‌رود وقتی $\boldsymbol{\mu}$ و \mathbf{B} موازی شوند این انرژی، کمینه می‌شود یعنی یک پیکربندی پایدار به دست می‌آید.

اگر چه معادلات بالا را برای حلقه‌ای مربعی به دست آوردیم ولی برای هر حلقه صفحه‌ای کوچک، که روی سطح آن \mathbf{B} ثابت باشد، درست است. از این رو می‌توانیم آنرا برای مسئله زیر به کار ببریم. ذره‌ای به جرم m و بار q را تصور کنید که در مداری دایره‌ای به شعاع r حرکت می‌کند. جریان وابسته به این بار برابر است با

$$I = \text{جریان بار عبوری از هر نقطه دایره در هر ثانیه} \\ = \frac{qv}{2\pi r} \quad (14-4-4)$$

۱- سوی \mathbf{e}_{\perp} به وسیله قاعده دست راست به شارش جریان مربوط می‌شود.

۲- این، هامیلتونی کل نیست (چون انرژی جنبشی حلقه را در بر ندارد) بلکه فقط انرژی پتانسیل برهم‌کنش با میدان مغناطیسی است.

و گشتاور مغناطیسی دارای بزرگی

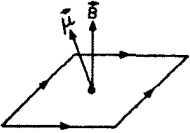
$$\mu = \frac{qv}{2\pi r} \cdot \frac{\pi r^2}{c} = \frac{qvr}{2c} = \left(\frac{q}{2mc}\right) mvr = \frac{q}{2mc} \cdot l \quad (۵-۴-۱۴)$$

است که l بزرگی تکانه زاویه‌ای است. چون μ و \mathbf{L} موازی هستند،

$$\mu = \left(\frac{q}{2mc}\right) \mathbf{l} \quad (۶-۴-۱۴)$$

نسبت μ به \mathbf{l} ، نسبت ژیرومغناطیسی γ نامیده می‌شود. برای ذره در نظر گرفته شده در بالا،

$$\gamma = \frac{q}{2mc} \quad (۷-۴-۱۴)$$



شکل ۱۴-۱: در شکل، \mathbf{B} میدان مغناطیسی و μ گشتاور مغناطیسی حلقه است. جهت بیگانها در حلقه، جهت جریان است.

در مورد حلقه جریان گفته شد که اثر گشتاور \mathbf{T} ، همسو کردن μ و \mathbf{B} است. این تصویر، وقتی منشأ μ در تکانه زاویه‌ای باشد، همان‌طور که برای ذره مورد بحث این‌طور است، تغییر می‌کند. در این حالت، \mathbf{T} موجب حرکت تقدیمی μ حول \mathbf{B} می‌شود. این موضوع را می‌توانیم به صورت زیر مشاهده کنیم (شکل ۱۴-۲):

معادله حرکت عبارتست از

$$\mathbf{T} = \frac{d\mathbf{l}}{dt} = \mu \times \mathbf{B} = \gamma(\mathbf{l} \times \mathbf{B}) \quad (۸-۴-۱۴)$$

بنابراین در زمان کوچک Δt ،

$$\Delta \mathbf{l} = \gamma(\mathbf{l} \times \mathbf{B}) \Delta t$$

یا

$$\Delta l = \gamma l B \sin \theta \Delta t$$

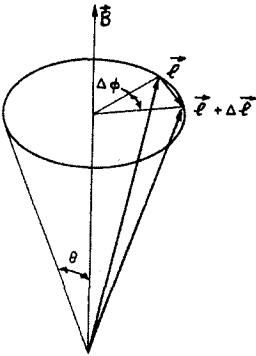
چون $\Delta \mathbf{l}$ عمود بر \mathbf{l} است، نوک بردار \mathbf{l} به اندازه زاویه

$$\Delta \phi = \left(\frac{-\Delta l}{l \sin \theta}\right) = (-\gamma B) \Delta t \quad (۹-۴-۱۴)$$

حرکت می‌کند، یعنی با فرکانس

$$\omega_0 = -\gamma B \quad (۱۰-۴-۱۴)$$

حرکت تقدیمی می‌کند.



شکل ۱۴-۲: در زمان کوچک Δt ، نوک بردار \mathbf{I} به اندازه زاویه $\Delta\phi$ حول بردار میدان مغناطیسی حرکت تقدیمی می‌کند.

گشتاور مغناطیسی مداری در نظریه کوانتومی

این مطالب در نظریه کوانتومی هم پدیدار می‌شوند. هامیلتونی ذره‌ای به جرم m و بار q در یک میدان مغناطیسی به صورت

$$H = \frac{(\mathbf{P} - q\mathbf{A}/c)^2}{2m} = \frac{|\mathbf{P}|^2}{2m} - \frac{q}{2mc} (\mathbf{P} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{P}) + \frac{q^2 |\mathbf{A}|^2}{2mc^2} \quad (11-4-14)$$

است. فرض کنید که

$$\mathbf{A} = \frac{B}{2} (-y\mathbf{i} + x\mathbf{j}) \quad (12-4-14)$$

باشد به طوری که

$$\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B} = B\mathbf{k} \quad (13-4-14)$$

ثابت و در امتداد محور z باشد. فرض خواهیم کرد که B کوچک است و جمله آخر را در H به علت اینکه نسبت به B از درجه ۲ است حذف می‌کنیم. وقتی جمله میانی روی هر $|\psi\rangle$ اثر کند،

$$\begin{aligned} (\mathbf{P} \cdot \mathbf{A})|\psi\rangle &\rightarrow -i\hbar \nabla \cdot (\mathbf{A}\psi) \\ &= -i\hbar [(\nabla \cdot \mathbf{A})\psi + \mathbf{A} \cdot \nabla \psi] \\ &= (-i\hbar \mathbf{A} \cdot \nabla)\psi \rightarrow (\mathbf{A} \cdot \mathbf{P})|\psi\rangle \end{aligned}$$

چون در اینجا، $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ است.^۱ پس هامیلتونی برهم کنش عبارت می‌شود از

۱- در بخش ۱۸-۴ نشان داده می‌شود که \mathbf{A} متناظر با یک \mathbf{B} معین همیشه می‌تواند طوری انتخاب شود که دیورژانسش صفر باشد.

$$\begin{aligned}
 H_{\text{int}} &= -\frac{q}{2mc} (2\mathbf{A} \cdot \mathbf{P}) \\
 &= -\frac{q}{mc} \frac{B}{2} (-Y P_x + X P_y) \quad (14-4-14) \\
 &= -\frac{q}{2mc} \mathbf{L} \cdot \mathbf{B} \equiv -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}
 \end{aligned}$$

به طوری که

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{q}{2mc} \mathbf{L} \quad (15-4-14)$$

دقیقاً همان طور که در حالت کلاسیکی است (ما از همین نماد $\boldsymbol{\mu}$ برای نشان دادن متغیر کلاسیکی و عملگر کوانتومی استفاده می کنیم. گاهی از این قرارداد خود خارج می شویم و از قراردادهای دیگری که کاربردهای زیادی دارند استفاده می کنیم).

اگر این رابطه را در امتداد محور z تصویر کنیم نتیجه می شود

$$\mu_z = \frac{q}{2mc} L_z = \frac{q\hbar}{2mc} (0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

کمیت $q\hbar/2mc$ مگنتون بور ذره نامیده می شود. مگنتون بور الکترون، که فقط مگنتون بور نامیده می شود، به بزرگی

$$\frac{e\hbar}{2mc} \simeq 0.6 \times 10^{-8} \text{ eV/G} \quad (16-4-14)$$

است، که m جرم الکترون و G برای گوس است. مگنتون بور نوکلئون حدود ۲۰۰۰ بار کوچکتر است:

$$\frac{e\hbar}{2Mc} \simeq 0.3 \times 10^{-11} \text{ eV/G} \quad (17-4-14)$$

که در آن M جرم نوکلئون (پروتون یا نوترون)^۱ است (مگنتون بور نوکلئون هم مگنتون بور هسته/ای نامیده می شود).

با استفاده از قضیه اهرنفتست می شود ثابت کرد که $\langle \mathbf{L} \rangle$ حول میدان ثابت \mathbf{B} حرکت تقدیمی می کند درست همان طور که \mathbf{L} می کرد (تمرین ۱۴-۴-۱).

گشتاور مغناطیسی اسپینی

با اتکاء بر این دانسته‌ها، اکنون به دنبال این هستیم که چطور الکترون با یک میدان مغناطیسی خارجی برهم کنش می کند. یک بار دیگر فرض می کنیم که یک عملگر گشتاور مغناطیسی $\boldsymbol{\mu}$ وابسته به تکانه زاویه‌ای

۱- به خاطر بیاورید که این دو تقریباً برابرند: $M_p c^2 = 938.28 \text{ MeV}$ ، در حالی که $M_n c^2 = 939.5 \text{ MeV}$.

اسپینی وجود دارد. از آنجا که هر عملگر روی \mathbb{V}_S یک ترکیب خطی از عملگرهای اسپینی و همانی است و چون μ یک عملگر برداری است، نتیجه می‌گیریم که

$$\mu = \gamma S \quad (14-4-18 \text{ ب})$$

که γ یک ثابت است. چون برای حالت مداری $\gamma = -e/2mc$ است، μ را به صورت

$$\mu = g(-e/2mc)S \quad (14-4-18 \text{ ب})$$

می‌نویسیم که g یک ثابت است. همین‌طور فرض می‌کنیم که

$$H_{\text{int}} = -\mu \cdot B = \frac{ge}{2mc} S \cdot B \quad (14-4-19)$$

$$= \frac{ge\hbar}{4mc} \sigma \cdot B$$

گشتاور مغناطیسی ذاتی مربوط به اسپین، $g/2$ مگنتون است. فرمالیزم کنونی ما مقدار g را به ما نمی‌گوید؛ برای یافتن آن می‌بایست H بالا را در مواجهه آزمایش قرار داده و امیدوار باشیم که برای یک مقدار g فیزیک درست مسئله را به ما بدهد. اتفاقاً اینگونه بوده و مقدار تجربی g بسیار نزدیک به ۲ است. از این به بعد فرض می‌کنیم که

$$g = 2 \quad (14-4-20)$$

پس نسبت ژیرومغناطیسی برای اسپین دو برابر آن برای تکانه زاویه‌ای مداری است.

چرا $g = 2$ است؟ چرا دقیقاً برابر ۲ نیست که بسیار قشنگ‌تر هم می‌شد؟ فرمالیزم ما این را به ما نمی‌گوید. اما ناچاریم از موضوع خارج شده و اشاره کنیم که معادله دیراک، که در فصل ۲۰ بحث خواهیم کرد، پیش‌بینی می‌کند که دقیقاً $g = 2$ است. الکترودینامیک کوانتومی، که در این کتاب بحث نخواهد شد، پیش‌بینی می‌کند که نتیجه دیراک تصحیحاتی را خواهد داشت که می‌تواند به صورت یک سری توانی از α ، ثابت ساختار ریز، محاسبه شوند. فیزیک پشت سر این تصحیحات به شرح زیر است: به یاد بیاورید که برهم‌کنش بین الکترون و دیگر ذرات باردار از طریق تبادل فوتون صورت می‌گیرد. گاهی یک الکترون فوتونی را که گسیل کرده است مجدداً گیر می‌اندازد. بین گسیل و جذب مجدد، سیستم که ابتدائاً فقط شامل الکترون بود، شامل یک الکترون و فوتون خواهد شد. اگر گشتاور مغناطیسی سیستم در این لحظه بررسی شود به نتیجه‌ای می‌رسیم که متناظر با $g \neq 2$ است چون الکترون در سیستم دو ذره‌ای هم دارای تکانه مداری و هم اسپینی است. در واقع الکترودینامیک کوانتومی (QED) پیش‌بینی می‌کند که آنچه که ما آنرا الکترون می‌نامیم یک برهم‌نهی از حالتهاست که شامل یک الکترون دیراک؛ یک الکترون دیراک و یک فوتون؛ یک

الکترون دیراک، چندین فوتون؛ چندین زوج الکترون - پوزیترون؛ و غیره است.^۱ دلیل اینکه مقدار مشاهده شده g اینقدر به مقدار دیراک، ۲، نزدیک است این است که پیکربندی‌های با پیچیدگی رو به رشد با افزایش توان‌های ثابت ساختار ریز در برهم‌نهی کم می‌شوند. بنابراین ساده‌ترین پیکربندی، با فقط الکترون دیراک، بر تصویر غالب خواهد شد و حالت‌های پیچیده، تصحیحات کوچکتر و کوچکتری بر نتیجه $g = 2$ ایجاد خواهند کرد. این تصحیحات می‌توانند به صورت یک سری توانی از α محاسبه شوند:

$$g = 2 \left[1 + \frac{1}{2\pi} \cdot \alpha + O(\alpha^2) + \dots \right]$$

که تا مرتبه α^3 برآورد شده و نتیجه عبارتست از^۲

$$g_{\text{theory}} = 2[1.001159652140(\pm 28)]$$

که در آن خطای (± 28) در دو عدد آخر مربوط به عدم قطعیت‌ها در مقدار خود α و در برآورد عددی برخی انتگرال‌ها در محاسبه است.

علاوه بر تصحیحات مرتبه بالاتر، این نتیجه تصحیحاتی را هم به واسطه برهم‌کنش‌های دیگر الکترون، یعنی به واسطه توانایی آن برای تبادل کوانتوم‌های دیگر نظیر گراویتون، خواهد داشت. اما این اثرات برای دقت در نظر گرفته شده در بالا ناچیزند. مقدار تجربی g برابر است با^۳

$$g_{\text{exp}} = 2[1.0011596521884(\pm 43)]$$

که توافق بسیار خوبی با نظریه دارد. به نظر فاینمن این معادل با پیش‌بینی و اندازه‌گیری فاصله بین نیویورک تا لوس‌آنجلس با دقتی در حد یک تار مو است. وضعیت نظری در مورد میون، که همان شکل سنگین‌تر الکترون است، اینقدر خوب نیست اما باز هم بسیار قابل تأمل است.

وضعیت نظری برای نوکلئونها بد است به این دلیل که این ذرات در برهم‌کنش‌های قوی هم شرکت می‌کنند یعنی می‌توانند پیونها و غیره را جذب یا گسیل کنند و نظیر (المثنی‌ی) α ، بزرگ است (≈ 15). به عبارتی دیگر، حالت، دیگر فقط با ذره دیراک غالب نمی‌شود و تصحیحات کوچک نیستند. g را می‌توانیم به‌طور تجربی اندازه بگیریم و نتیجه عبارت می‌شود از

$$\gamma_{\text{proton}} = 5.6 (e/2Mc)$$

$$\gamma_{\text{neutron}} = -3.8 (e/2Mc)$$

نظریه دیراک برای پروتون، $\gamma = e/mc$ یا $g = 2$ و برای نوترون خنثی، $\gamma = 0$ پیش‌بینی می‌کند. مقدار γ غیر صفر این مطلب را منعکس می‌کند که نوترون می‌تواند در حالتی باشد که دارای ذرات با بار الکتریکی خنثی کننده هم، ولی نه لزوماً دارای گشتاورهای مغناطیسی خنثی کننده هم، است.

۱- رابطه عدم قطعیت زمان - انرژی اجازه تولید این ذرات را برای زمان‌های کوتاه می‌دهد.

2- T. Kinoshita and W. B. Lindquist, *Phys. Rev.* **D42**, 636, 1990.

3- R.S. Van Dyck, P. B. Schwinberg, and H. G. Dehmelt, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 26, 1987

به دلیل جرم بزرگ، گشتاورهای مغناطیسی نوکلئون‌ها در مقایسه با گشتاورهای مغناطیسی الکترون‌ها ناچیز هستند.^۱

اینک به دینامیک اسپین در میدان مغناطیسی \mathbf{B} برمی‌گردیم. کل چیزی که از حالا به بعد نیاز داریم هامیلتونی

$$H = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\gamma \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} \quad (۱۴-۴-۲۱)$$

است که در آن

$$\gamma = \frac{-e \cdot 2}{2mc} = \frac{-e}{mc} \quad (۱۴-۴-۲۲)$$

فرض کنید $|\psi(0)\rangle$ حالت اولیه الکترون باشد. حالت در یک زمان بعدی عبارتست از

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle$$

که

$$U(t) = e^{-iHt/\hbar} = e^{+i\gamma t(\mathbf{S} \cdot \mathbf{B})/\hbar} \quad (۱۴-۴-۲۳)$$

چون $\exp(-i\boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{S}/\hbar)$ عملگری است که به اندازه θ می‌چرخاند، اثر $U(t)$ چرخاندن حالت به اندازه زاویه

$$\theta(t) = -\gamma \mathbf{B}t \quad (۱۴-۴-۲۴)$$

است. بنابراین $\langle \mathbf{S} \rangle$ حول \mathbf{B} با فرکانس $\omega_0 = -\gamma \mathbf{B}$ حرکت تقدیمی خواهد کرد. اگر این خیلی انتزاعی به نظر می‌رسد یک مثال واقعی در نظر می‌گیریم. فرض کنید \mathbf{B} در امتداد محور z باشد: $\mathbf{B} = B\hat{k}$. در این حالت،

$$\begin{aligned} U(t) &= \exp(i\gamma t S_z B/\hbar) \\ &= \exp(i\omega_0 t \sigma_z/2) \quad (\omega_0 = \gamma B) \end{aligned}$$

چون σ_z قطری است،

$$U(t) \rightarrow \begin{bmatrix} e^{i\omega_0 t/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega_0 t/2} \end{bmatrix}$$

الکترونی را در نظر بگیرید که در حالت $|\hat{n}, +\rangle$ ظاهر می‌شود:

$$|\psi(0)\rangle = |\hat{n}, +\rangle \rightarrow \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) e^{-i\phi/2} \\ \sin(\theta/2) e^{i\phi/2} \end{bmatrix}$$

که در این حالت،

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle \rightarrow \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) e^{-i(\phi - \omega_0 t)/2} \\ \sin(\theta/2) e^{i(\phi - \omega_0 t)/2} \end{bmatrix}$$

یعنی ϕ با آهنگ ω_0 کاهش می‌یابد.

تشدید پارامغناطیسی

یک گشتاور مغناطیسی کلاسیکی μ را در میدان $\mathbf{B}_0 = B_0 \hat{k}$ در نظر بگیرید. این گشتاور حول \mathbf{B}_0 با فرکانس

$$\omega_0 = -\gamma B_0$$

حرکت تقدیمی خواهد کرد. فرض کنید این حرکت تقدیمی را در چارچوبی بینیم که با فرکانس ω موازی با \mathbf{B} در حال چرخش است. در این چارچوب چرخان، فرکانس تقدیمی برابر خواهد بود با

$$\omega_r = \omega_0 - \omega = -\gamma B_0 - \omega = -\gamma(B_0 + \omega/\gamma) \quad (25-4-14)$$

بنابراین میدان موثر در این چارچوب چرخان برابر

$$\mathbf{B}_r = \mathbf{B}_0 + \omega/\gamma \quad (26-4-14)$$

خواهد بود. این نتیجه حتی اگر ω و \mathbf{B}_0 موازی نباشند معتبر است (تمرین ۱۴-۴-۵). اینک مسئله مورد نظر را در نظر بگیرید که در آن در چارچوب غیر چرخان (آزمایشگاه)،

$$\mathbf{B} = B \cos \omega t \hat{i} - B \sin \omega t \hat{j} + B_0 \hat{k} \quad (B \ll B_0) \quad (27-4-14)$$

و در $t = 0$

$$\mu(0) = \mu \hat{k} \quad (28-4-14)$$

است. به دست آوردن تحول $\mu(t)$ مورد نظر ماست. از آنجا که \mathbf{B} به زمان بستگی دارد، به نظر می‌رسد بهتر است که ابتدا مسئله را در چارچوبی در نظر بگیریم که با همان فرکانس $\omega = -\omega \hat{k}$ ، که میدان کوچک چرخنده (ساعتگرد) \mathbf{B} می‌چرخد، بچرخد. در این چارچوب، مولفه چرخان \mathbf{B} در یک جا ثابت گشته (مثلاً در امتداد محور x) و مولفه ثابت $B_0 \hat{k}$ طبق معادله (۲۶-۴-۱۴) کاهش می‌یابد به طوری که میدان موثر و مستقل از زمان عبارت می‌شود از

$$\mathbf{B}_r = B \hat{i}_r + (B_0 - \omega/\gamma) \hat{k} \quad (29-4-14)$$

که در آن بردار یکه در جهت x در چارچوب چرخان است (البته $\mathbf{k} = \mathbf{k}_r$). در این چارچوب، $\boldsymbol{\mu}$ حول \mathbf{B}_r با فرکانس

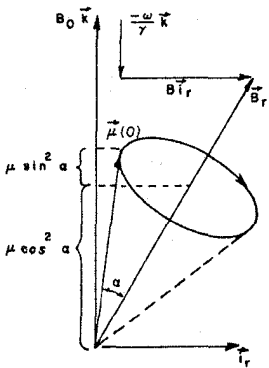
$$\boldsymbol{\omega}_r = -\gamma \mathbf{B}_r \tag{۱۴-۴-۳۰ الف}$$

حرکت تقدیمی خواهد کرد که در آن

$$|\boldsymbol{\omega}_r| = \omega_r = \gamma [B^2 + (B_0 - \omega/\gamma)^2]^{1/2} \tag{۱۴-۴-۳۰ ب}$$

به راحتی می توان از شکل ۱۴-۳ نتیجه گرفت که μ_z به صورت زیر نوسان می کند:

$$\begin{aligned} \mu_z(t) &= \mu \cos^2 \alpha + \mu \sin^2 \alpha \cos \omega_r t \\ &= \mu_z(0) \left[\frac{(\omega_0 - \omega)^2}{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2 B^2} + \frac{\gamma^2 B^2 \cos \omega_r t}{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2 B^2} \right] \end{aligned} \tag{۱۴-۴-۳۱}$$



شکل ۱۴-۳: وضعیت در چارچوب چرخان. میدان مغناطیسی موثر، \mathbf{B}_r است. گشتاور مغناطیسی ابتدا در جهت محور z است (اما برای مشخص بودن کمی در شکل جابه جا شده است) و حول \mathbf{B}_r حرکت تقدیمی می کند. مؤلفه z گشتاور با دامنه $\mu \sin^2 \alpha$ نوسان می کند که α زاویه مخروط است. در تشدید، \mathbf{B}_r در امتداد محور x قرار می گیرد و $\boldsymbol{\mu}$ در صفحه عمود بر آن حرکت تقدیمی می کند. دامنه نوسان μ_z در این صورت در مقدار بیشینه اش μ قرار دارد.

این فرمول $\mu_z(t)$ در چارچوب آزمایشگاه هم به کار می رود چون μ_z تحت چرخش های z ناورد است. با افزایش ω از صفر، مؤلفه z بردار \mathbf{B}_r به طور پیوسته کاهش می یابد، α ، زاویه مخروط افزایش می یابد و دامنه نوسان، $\mu \sin^2 \alpha$ زیاد می شود. در تشدید پارامغناطیسی، $\omega = \omega_0$ و $\mathbf{B}_r = B \hat{i}_r$ و $\alpha = \pi/2$ ، و مخروط یک دایره در صفحه xy می شود و μ_z با فرکانس γB با بزرگترین دامنه μ نوسان می کند. رفتار برای $\langle \omega \rangle \omega_0$ واضح است.

اگر میدان چرخان را در فرکانس تشدید به مدت زمان τ اعمال کنیم به طوری که

$$\gamma B \tau = \pi/2$$

باشد چطور؟ چنین پالس، موسوم به پالس 90° ، گشتاور مغناطیسی را به صفحه xy می برد (در هر دو چارچوب). بعد از آن $\boldsymbol{\mu}$ حول $B_0 \hat{k}$ با فرکانس ω_0 در چارچوب آزمایشگاه حرکت تقدیمی خواهد کرد. اگر یک پالس 180° اعمال کنیم یعنی τ را طوری انتخاب کنیم که

$$\gamma B \tau = \pi$$

باشد، این پالس علامت μ را معکوس کرده و آنرا در جهت پایین محور z قرار می‌دهد، جایی که در آنجا خواهد ماند (در هر دو چارچوب).

این نتایج برای گشتاور کلاسیکی μ ، در مسئله کوانتومی برای مقدار چشم‌داشتی $\langle \mu \rangle$ به کار می‌روند و می‌توانید با انجام تمرین ۱۴-۴-۱، که در آن در حالت کلی اثبات می‌شود، و تمرین ۱۴-۴-۳، که در آن اثبات صریح در این مورد بحث می‌شود، این ثابت کنید.

دمای مطلق منفی (اختیاری)

صفر مطلق دما، 0°K ، $(= -273^\circ \text{C})$ ، طوری تعریف می‌شود که هیچ چیزی نمی‌تواند سردتر از آن باشد با اینحال از دمای مطلق منفی صحبت می‌کنیم! هیچ جای تعجب نیست چون خواهیم دید که دماهای منفی گرمتر از دماهای مثبت هستند! قبل از اینکه همه ایده‌ها و عقاید خود را از دست بدهید سریعاً این مطلب را جمع و جور می‌کنیم.

دمای مطلق T به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\beta = \frac{1}{kT} = \frac{1}{k} \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{\partial \ln \Omega(E)}{\partial E} \quad (۱۴-۴-۳۲)$$

که β دمای ترمودینامیکی، k ثابت بولتزمن، $S = k \ln \Omega$ آنروپی و $\Omega(E)$ تعداد حالت‌های قابل دسترس برای سیستم به عنوان تابعی از انرژی آن است (Ω به متغیرهای دیگر بستگی دارد، ولی فرض شده است که ثابت هستند) در اکثر سیستم‌ها β مثبت است چون افزودن انرژی فقط حالت‌های بیشتری را آزاد می‌کند و Ω را افزایش می‌دهد. برای مثال اگر جعبه‌ای از مولکول‌های گاز داشته باشیم همه آنها در $T = 0$ در حالت پایه می‌مانند بنابراین $S = k \ln \Omega = k \ln 1 = 0$ می‌شود. وقتی به آن انرژی بدهیم، می‌تواند حالت‌های بالاتر را اشغال کنند و S و Ω می‌تواند بدون محدودیت افزایش یابند.

اینک مجموعه‌ای از N ذره با اسپین نیمه صحیح^۱ واقع بر یک شبکه بلوری را در نظر بگیرید که در میدان مغناطیسی $\mathbf{B} = B_0 \hat{k}$ قرار دارند. هر گشتاور مغناطیسی (یا اسپین) فقط دو حالت، با انرژی‌های $E = \pm \mu B_0$ ، دارد که μ بزرگی گشتاور مغناطیسی است. در $T = 0^\circ \text{K}$ همه ذرات در حالت پایه قرار داشته (μ موازی با \mathbf{B})؛ $\Omega = 1$ و $S = 0$ است. سیستم دارای گشتاور مغناطیسی $\mathbf{M} = n \mu \hat{k}$ است. اگر انرژی $2\mu B_0$ را به آن بدهیم، یکی از گشتاورها می‌تواند به حالت انرژی بالاتر برود و برای گشتاوری که به بالا حرکت می‌کند، N راه برای انتخاب وجود دارد، به طوری که $\Omega = N$ و $S = k \ln N$ می‌شود. واضح است که β و T مثبت اند. وقتی دما را بیشتر و بیشتر می‌کنیم S به افزایش خود ادامه می‌دهد تا نصف گشتاورها پایین و نصف آنها بالا باشند. در این نقطه، S به یک بیشینه می‌رسد، $\beta = \partial S / \partial E = 0$ ، و $T = +\infty$ می‌شود. این سیستم هیچ گشتاور مغناطیسی میانگینی در امتداد محور z ندارد. دما بیشتر انرژی فقط S را کاهش می‌دهد و ذرات در حالت بالا بیشتر و بیشتر انباشته می‌شوند. بنابراین β و T منفی می‌شوند. سرانجام وقتی

$E = N \mu B_0$ شود همه گشتاورها در حالت انرژی بالاتر قرار گرفته (پاد موازی با \mathbf{B})، $\mathbf{M} = -N \mu \hat{k}$ ، و فقط یک حالت به این صورت وجود دارد و $\Omega = 1$ و $S = 0$ می‌شود. این متناظر با $\beta = -\infty$ و $T = 0^-$ است. بنابراین دنباله (ترتیب) دماها عبارتست از

$$T = 0^+, \dots, 300, \dots, \infty, -\infty, \dots, -300, \dots, 0^-$$

بر حسب β پیوستگی بیشتری وجود دارد: $\beta = \infty, \dots, 0^+, 0^-, \dots, -\infty$ (بهتر بود $-\beta$ را به عنوان دما انتخاب می‌کردیم، چون با گرم کردن سیستم به‌طور یکنواخت از $-\infty$ تا $+\infty$ افزایش می‌یابد) باید روشن شده باشد که دماهای منفی گرمتر از دماهای مثبت‌اند چون از دماهای مثبت به دماهای منفی از طریق دمش انرژی به سیستم، می‌رویم. این موضوع را می‌توان با تصور سیستمی در دمای $T = -300^\circ K$ که در تماس با سیستمی یکسان در دمای $T = 300^\circ K$ قرار داده می‌شود مشاهده کرد. از آنجا که جمعیت هر دو سیستم، به جز در تبدیل موازی \leftrightarrow پادموازی، یکسان هستند، سیستم‌ها می‌توانند با حرکت به سمت حالتی که دارای تعداد مساوی از گشتاورهای بالا و پایین است، آنتروپی خود را افزایش دهند. در این فرایند واضح است که انرژی از سیستم با دمای منفی به سیستم با دمای مثبت شورش می‌کند یعنی اولی گرمتر است. همین‌طور توجه کنید که دمای تعادل نهایی $0^\circ K$ نیست بلکه $\infty^\circ K$ است.

دماهای منفی چگونه در آزمایشگاه تهیه می‌شوند؟ نمونه‌ای در دمای اتاق مثلاً در $T = 300^\circ K$ انتخاب می‌شود. در این نمونه گشتاورهای موازی بیشتری نسبت به گشتاورهای پادموازی خواهد بود:

$$\frac{N(\text{parallel})}{N(\text{antiparallel})} = \frac{e^{-(-B\mu B_0)}}{e^{-\beta\mu B_0}} = e^{2\beta\mu B_0} > 1 \quad (۳۳-۴-۱۴)$$

و یک گشتاور مغناطیسی خالص \mathbf{M} در امتداد محور z وجود خواهد داشت. اگر یک پالس 180° اعمال شود وارونی جمعیت بوجود خواهد آمد (موازی \leftrightarrow پادموازی) که منتهی به تغییر علامت β و T می‌شود [معادله (۳۳-۴-۱۴) را ببینید]. سیستم اسپینی نمی‌تواند در این حالت داغ ($T = -300^\circ K$) برای همیشه باقی بماند چون با شبکه در تماس است که در نهایت آنرا تا دمای اتاق سرد خواهد کرد. مشاهده بازگشت به تعادل گرمایی راحت‌تر است در صورتی که یک پالس 90° اعمال شود که \mathbf{M} را به صفحه $x-y$ ببرد. اینک دما $T = \infty^\circ K$ است چون

$$M_z = 0 \rightarrow N \text{ (موازی)} = N \text{ (پاد موازی)} \rightarrow T = \infty$$

بنابراین \mathbf{M} ، که ابتدائاً شروع به حرکت تقدیمی حول $\mathbf{B} = B_0 \hat{k}$ خواهد کرد، مجدداً در نهایت خودش را با \mathbf{B} همسو خواهد کرد. کاهش (کوچک شدن) مولفه‌های چرخان آن در صفحه $x-y$ می‌تواند به‌صورت زیر مشاهده شود: فرض کنید که نمونه یک استوانه دراز است که محورش در صفحه $x-y$ قرار دارد. اگر یک سیم بیچ دور آن پیچیده شود مولفه‌های عرضی $(x-y)$ \mathbf{M} ، که مانند یک آهنربای چرخان در صفحه

$x - y$ هستند، یک ولتاژ نوسان کننده در سیم پیچ القاء خواهند کرد. فرکانس نوسان (میرا)، ω_0 خواهد بود و نیمه عمر آن، موسوم به *زمان واهلش عرضی*، τ خواهد بود.

تمرین ۱۴-۴-۱: نشان دهید که اگر $H = -\gamma \mathbf{L} \cdot \mathbf{B}$ و \mathbf{B} مستقل از مکان باشد،

$$\frac{d\langle \mathbf{L} \rangle}{dt} = \langle \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B} \rangle = \langle \boldsymbol{\mu} \rangle \times \mathbf{B}$$

با مقایسه این و معادله (۱۴-۴-۸) می بینیم که $\langle \boldsymbol{\mu} \rangle$ دقیقاً مثل $\boldsymbol{\mu}$ تحول می یابد. توجه کنید که این نتیجه گیری حتی اگر \mathbf{B} به زمان بستگی داشته باشد و همین طور اگر به جای تکانه زاویه ای مداری در مورد اسپین صحبت کنیم معتبر است. اثبات صریح در تمرین ۱۴-۴-۳ ارائه می شود.

تمرین ۱۴-۴-۲: با مطالعه شکل ۱۴-۳ معادله (۱۴-۴-۳۱) را به دست آورید.

تمرین ۱۴-۴-۳: در اینجا مایلیم تحول زمانی حالتی را مطالعه کنیم که ابتدا در حالت $[0^1]$ است و در معرض میدان \mathbf{B} ارائه شده در معادله (۱۴-۴-۲۷) قرار می گیرد. این حالت از معادله

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi\rangle \quad (14-4-34)$$

پیروی می کند که در آن $H = -\gamma \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}$ بوده و \mathbf{B} وابسته به زمان است. از آنجا که استدلال کلاسیکی پیشنهاد می کند که در یک چارچوب چرخان با فرکانس $(-\omega \hat{k})$ ، هامیلتونی باید مستقل از زمان بوده و تحت تاثیر \mathbf{B}_r باشد [معادله (۱۴-۴-۲۹)]، کت حالت را در چارچوب چرخان در نظر بگیرید، $|\psi_r(t)\rangle$ ، که از طریق زاویه چرخش ωt به $|\psi(t)\rangle$ مربوط می شود:

$$|\psi_r(t)\rangle = e^{-i\omega t S_z / \hbar} |\psi(t)\rangle \quad (14-4-35)$$

معادلات (۱۴-۴-۳۴) و (۱۴-۴-۳۵) را ترکیب کنید تا معادله شرودینگر را برای $|\psi_r(t)\rangle$ در پایه S_z به دست آورید و ثابت کنید که چشم داشتی کلاسیکی بیرون می آید. با محاسبه $U_r(t)$ ، انتشارگر در چارچوب چرخان، $|\psi_r(t)\rangle = U_r(t) |\psi_r(0)\rangle$ را حل کنید. به چارچوب آزمایشگاه برگشته نشان دهید که

$$|\psi(t)\rangle \xrightarrow{S_z \text{ basis}} \begin{bmatrix} \left[\cos\left(\frac{\omega_r t}{2}\right) + i \frac{\omega_0 - \omega}{\omega_r} \sin\left(\frac{\omega_r t}{2}\right) \right] e^{+i\omega t/2} \\ \frac{i\gamma B}{\omega_r} \sin\left(\frac{\omega_r t}{2}\right) e^{-i\omega t/2} \end{bmatrix} \quad (14-4-36)$$

این حالت را با حالت $|\hat{n}, +\rangle$ مقایسه کرده و ببینید برای حالت $\omega_0 = \omega$ چه اتفاقی برای اسپین می افتد. $\langle \mu_z(t) \rangle$ را محاسبه کرده، ثابت کنید که در توافق با معادله (۱۴-۴-۳۱) است.

۱- مولفه های عرضی \mathbf{M} به دلایل دیگر، در کنار بازگرداندن تعادل گرمایی، کاهش می یابند.

تمرین ۱۴-۴-۴: در $t = 0$ ، یک الکترون در حالت $s_z = \hbar/2$ قرار دارد. یک میدان پایدار $\mathbf{B} = B\hat{i}$ ، $B = 100G$ ، روشن می‌شود. چند ثانیه طول می‌کشد تا اسپین تغییر کند (بچرخد)؟

تمرین ۱۴-۴-۵: می‌خواهیم اعتبار معادله (۱۴-۴-۲۶) را وقتی ω و \mathbf{B}_0 موازی نیستند ثابت کنیم. الف- بردار \mathbf{V} را در چارچوب (غیر چرخان) لخت در نظر بگیرید که در مدت Δt به اندازه $\Delta \mathbf{V}$ تغییر می‌کند. با استفاده از نتایج تمرین (۱۲-۴-۳) ثابت کنید که این تغییر وقتی در یک چارچوب چرخان با سرعت زاویه‌ای ω دیده شود، برابر $\Delta \mathbf{V} - \omega \times \mathbf{V} \Delta t$ است. رابطه‌ای بین مشتقات زمانی \mathbf{V} در دو چارچوب به دست آورید.

ب- این نتیجه را برای \mathbf{I} به کار ببرید [معادله (۱۴-۴-۸)] و فرمول میدان موثر در چارچوب چرخان را به دست آورید.

تمرین ۱۴-۴-۶: (یک مسئله ماتریس چگالی). الف- نشان دهید که ماتریس چگالی برای یک هنگرد (مجموعه) از ذرات اسپین $-\frac{1}{2}$ می‌تواند به صورت

$$\rho = \frac{1}{2}(I + \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma})$$

نوشته شود که \mathbf{a} یک بردار عدد c است.

ب- نشان دهید که \mathbf{a} قطبش میانگین، $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$ ، است.

ج- مجموعه‌ای از الکترون‌ها در میدان مغناطیسی $\mathbf{B} = B\hat{k}$ در تعادل گرمایی در دمای T قرار دارند. ماتریس چگالی را برای این مجموعه تشکیل دهید. $\langle \boldsymbol{\mu} \rangle$ را حساب کنید.

۱۴-۵- بازگشت درجات آزادی مداری

اکنون اجازه می‌دهیم تا درجات آزادی مداری برگردند. ساده‌ترین حالت وقتی است که H جدا شدنی است:

$$H = H_0 + H_s \quad (14-5-1)$$

به طوری که ویژه حالت‌های انرژی به صورت زیر تجزیه شوند

$$|\psi\rangle = |\psi_0\rangle \otimes |\chi_s\rangle$$

یک مثال از این نوع، اتم هیدروژن است که در آن برهم کنش کولنی مستقل از اسپین است:

$$H = H_0 \quad (14-5-2)$$

در اینجا اسپین نسبت به زمان ثابت است و کل چیزی که اتفاق می افتد، الحاق یک اسپینور ثابت χ به توابع موجی است که در فصل ۱۳ به دست آوردیم. اگر χ را در یک ویژه حالت S_z انتخاب کنیم داریم:

$$|nlmm_s = 1/2\rangle \rightarrow \psi_{nlm}(r, \theta, \phi) \chi_+ \quad \left[\chi_+ = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \right]$$

$$|nlmm_s = -1/2\rangle \rightarrow \psi_{nlm}(r, \theta, \phi) \chi_- \quad \left[\chi_- = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \right]$$

(۳-۵-۱۴)

البته ترازهای انرژی بدون تغییر می ماند. تمام آنچه که داریم، دو تا شدن حالتهاست که مربوط به این می شود که اسپین الکترون در هر یک از حالت های مداری (nlm) رو به بالا یا پایین (محور z) باشد. اکنون مسئله اتم هیدروژن را در یک میدان مغناطیسی ضعیف $\mathbf{B} = B\hat{k}$ در نظر بگیرید. اگر چه هم پروتون و هم الکترون با \mathbf{B} جفت (کوپل) می شوند، کوچک بودن نسبت m/M به ما اجازه می دهد تا در تقریب اول از جفت شدگی گشتاورهای مغناطیسی ذاتی و مداری پروتون چشم پوشی کنیم (اینها نسبت به گشتاورهای الکترون از مرتبه m/M و $(m/M)^2$ هستند، تمرین ۱۴-۵-۱ را ببینید). از این رو از معادلات (۱۴-۴-۱۴) و (۱۹-۴-۱۴) داریم:

$$H = H_{\text{Coulomb}} - \left(\frac{-eB}{2mc} \right) L_z - \left(\frac{-eB}{mc} \right) S_z \quad (۴-۵-۱۴)$$

چون جملات اضافی در H با H_{Coulomb} ، L^2 ، L_z و S_z جابه جا می شوند، این H به وسیله همان حالت های قبلی یعنی $|nlmm_s\rangle$ ها قطری می شود. اما ویژه مقادیر متفاوت هستند:

$$H|nlmm_s\rangle = \left[\frac{-Ry}{n^2} + \frac{eB\hbar}{2mc} (m + 2m_s) \right] |nlmm_s\rangle \quad (۵-۵-۱۴)$$

تبهگنی، به وسیله میدان \mathbf{B} فوق العاده کاهش می یابد. حالت پایه، که دو بار تبهگن بود، به دو تراز شکافته می شود:

$$E_{n=1} = -Ry \pm \frac{e\hbar B}{2mc} \quad (۶-۵-۱۴)$$

حالت دوم، که هشت بار تبهگن بود به پنج تراز شکافته می شود:

۱- اندیس s را برای m_s به این خاطر به کار می بریم که خاطر نشان کند تصویر اسپین را اندازه می گیرد $S_z = m_s \hbar$. هر وقت واضح باشد که در مورد اسپین بحث می کنیم آنرا حذف خواهیم کرد.

$$E_{n=2} = -\frac{Ry}{4} + \frac{eB\hbar}{2mc} \times \begin{bmatrix} 2(m=1, m_s=1/2) \\ 1(m=0, m_s=1/2) (l=0 \text{ or } 1) \\ 0(m=1, m_s=-1/2, \text{ or } m=-1, m_s=1/2) \\ -1(m=0, m_s=-1/2) (l=0 \text{ or } 1) \\ -2(m=-1, m_s=-1/2) \end{bmatrix} \quad (7-5-14)$$

و قس علی هذا. در یک اتم چند الکترونی، فقط سهم‌های ناشی از همه الکترون‌ها جمع می‌شوند. شکافتگی ترازها به افزایش تعداد خطوط طیفی منجر می‌شود؛ یک خط به چندین خط شکافته شده و فاصله بین آنها می‌تواند با تغییر دادن B تغییر کند. این پدیده، اثر زیمن نامیده می‌شود.

نهایتاً هامیلتونی

$$(8-5-14)$$

$$H = H_{\text{Coulomb}} + a\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$$

را در نظر بگیرید که منشأ آن در فصل‌های بعدی توضیح داده خواهد شد. در حال حاضر، توجه کنید که این هامیلتونی جدا شدنی نیست و در نتیجه درجات آزادی مداری و اسپینی در تحول زمانی شان جفت شده هستند. ویژه حالت‌های H فقط حاصلضرب قسمت‌های مداری و اسپینی نخواهند بود بلکه برهم‌نهی این حالتها خواهند بود که $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ را قطری می‌کنند. جزئیات مطلب در فصل بعد توضیح داده خواهد شد.

تمرین ۱۴-۵-۱: الف - چرا جفت شدگی گشتاور ذاتی پروتون به \mathbf{B} یک تصحیح مرتبه m/M برای معادله (۴-۵-۱۴) است؟

ب- چرا جفت شدگی حرکت مداری آن تصحیحی از مرتبه $(m/M)^2$ است؟ (در هر دو قسمت می‌توانید به‌طور کلاسیکی استدلال کنید).

تمرین ۱۴-۵-۲: الف - اندازه نسبی شکافتگی تراز را در حالت $n=1$ نسبت به انرژی مختل نشده حالت $n=1$ ، وقتی $B=1000G$ اعمال می‌شود، محاسبه کنید.

ب- به یاد آورید که از جمله مرتبه B^2 در H چشم‌پوشیده‌ایم. سهم آن را در حالت $n=1$ نسبت به جمله خطی $\mu \cdot \mathbf{B}$ - که نگه داشته‌ایم برآورد کنید، با فرض اینکه الکترون روی مداری کلاسیکی به شعاع a_0 حرکت می‌کند. بالاتر از چه مقدار $|\mathbf{B}|$ این تقریب شروع به تبدیل به یک تقریب ضعیف می‌شود؟

آزمایش اشترن - گرواخ (SG)

اکنون آزمایش SG را (در ساده‌ترین شکل) در نظر می‌گیریم که به روشنی کوانتش تکانه زاویه‌ای را (در هر جهت) نشان می‌دهد. دستگاه (شکل ۱۴-۴) شامل قطب‌های شمال و جنوب آهنرباست که بین آنها یک میدان مغناطیسی غیر همگن وجود دارد. باریکه‌ای از (ذرات با) گشتاورهای مغناطیسی، که در امتداد محور z حرکت می‌کنند، وارد دستگاه و ناحیه‌ای می‌شوند که در آنجا \mathbf{B} به‌صورت عمده در امتداد محور z بوده و $\partial B_z / \partial z < 0$ است. آیا آنچه که از نظر کلاسیکی انتظار داریم اتفاق خواهد افتاد؟ اگر ادعا کنیم که گشتاور مغناطیسی به یک جفت از بارهای مغناطیسی (پنداری) مساوی و مخالف مربوط است مشخص می‌شود که هر

ناهمگنی در \mathbf{B} می تواند به یک نیروی خالص روی دو قطبی منجر شود. اگر نیروی مربوط به گرادیان انرژی برهم کنش را محاسبه کنیم این انتظار تأیید می شود:

$$\mathbf{F} = -\nabla \mathcal{H} = \nabla(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}) = (\boldsymbol{\mu} \cdot \nabla)\mathbf{B} = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \mathbf{k} \quad (9-5-14)$$

[از اتحاد $\nabla(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}) = (\boldsymbol{\mu} \cdot \nabla)\mathbf{B} + (\mathbf{B} \cdot \nabla)\boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\mu} \times (\nabla \times \mathbf{B}) + \mathbf{B} \times (\nabla \times \boldsymbol{\mu})$ استفاده کرده ایم. در مورد فعلی، $\boldsymbol{\mu}$ تابعی از \mathbf{r} نیست و طبق معادلات ماکسول، $\nabla \times \mathbf{B} = 0$ است] از نظر کلاسیکی، چون μ_z پیوسته است، انتظار می رود باریکه از دستگاه خارج شده و اثر پیوسته ای (A در شکل) روی پرده واقع در آنسوی آهنربا ایجاد کند. آزمایش واقعی انجام شده با اتم های یک سری نقاط گسسته (B در شکل) نمایان می کند. این مطلب را به زبان نیمه کلاسیکی درک می کنیم و می گوئیم که μ_z در معادله (9-5-14) گسسته است و بنابراین تکانه زاویه ای در امتداد محور z هم اینگونه است.

این آزمایش می تواند برای آشکار کردن وجود اسپین برای الکترون هم به کار رود. برای مثال اگر باریکه ای از اتم های هیدروژن را در حالت پایه خود به درون دستگاه بفرستیم به دو باریکه شکافته خواهد شد. اینک آزمایش اتم هیدروژن مذکور در فوق را به زبان کوانتوم مکانیکی توصیف می کنیم. فرض کنید حالت اولیه اتم هیدروژن،

$$\psi_{\text{initial}} = \psi_y(\mathbf{r}_{CM}) \psi_{100}(\mathbf{r}) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (10-5-14)$$

باشد که ψ_y بسته موجی است که در امتداد محور y در حال سوق بوده و حرکت مرکز جرم را توصیف می کند، ψ_{100} تابع موج حالت پایه و $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ اسپینور الکترون است (اسپین پروتون نادیده گرفته می شود چون گشتاور مغناطیسی مربوطه برای تأثیر بر دینامیک بسیار کوچک است). از آنجا که اسپین الکترون بالاست، μ_z آن پایین است. چون $\langle 0 | \partial B_z / \partial z | 0 \rangle$ است نیروی کلاسیکی روی اتم رو به بالا است. بنابراین طبق قضیه اهرنفتس^۱ انتظار داریم که اتم از دستگاه در حالت

$$\psi_{\text{out}} = \psi_{y,+z}(\mathbf{r}_{CM}) \psi_{100}(\mathbf{r}) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (11-5-14)$$

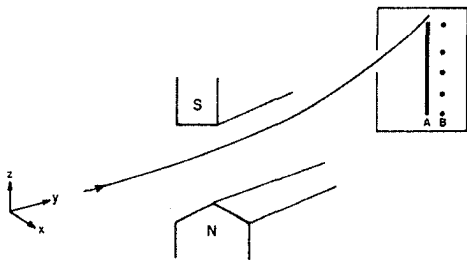
بیرون بیاید (صرف نظر از یک عامل فاز) که در آن $\psi_{y,+z}$ بسته موجی را توصیف می کند که در امتداد محور z مثبت (نسبت به بسته ورودی) جابه جا می شود و یک سرعت کوچک هم در همان جهت دارد. همین طور اگر اسپینور الکترون در ابتدا در حالت $\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$ می بود مرکز جرم در حالت $\psi_{y,-z}$ (در همین نماد گذاری) ظاهر می شد. به طور کلی تر اگر

۱- هشدار آخر فصل ۶ را به خاطر بیاورید. در حالت کنونی، سیستم به لطف پروتون سنگین مسیر کلاسیکی را دنبال می کند (به طور تقریبی). اگر فقط الکترون را به داخل بفرستیم، افت و خیزهای کوانتومی این اثر را محو می کنند. برای مثال صفحات ۳۲۴ تا ۳۳۰ از G. Baym, *Lectures on Quantum Mechanics*, Benjamin, New York (1969) را ببینید.

$$\psi_{\text{initial}} = \psi_y \psi_{100} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \psi_y \psi_{100} \begin{bmatrix} \alpha \\ 0 \end{bmatrix} + \psi_y \psi_{100} \begin{bmatrix} 0 \\ \beta \end{bmatrix} \quad (12-5-14)$$

باشد، آنگاه با استفاده از خطی بودن معادله شرودینگر،

$$\psi_{\text{out}} = \psi_{y,+z} \psi_{100} \begin{bmatrix} \alpha \\ 0 \end{bmatrix} + \psi_{y,-z} \psi_{100} \begin{bmatrix} 0 \\ \beta \end{bmatrix} \quad (13-5-14)$$



شکل ۱۴-۴: آزمایش اشترون - گرلاخ. باریکه‌ای از ذرات دارای گشتاورهای مغناطیسی وارد میدان غیر همگن می‌شود. از نظر کلاسیکی، انتظار می‌رود باریکه بعد از عبور اثر پیوسته (A) روی پرده ایجاد کند. آنچه مشاهده می‌شود مجموعه‌ای از نقاط گسته است. این به کوانتیز گشتاور مغناطیسی و تکانه زاویه‌ای اشاره دارد.

با فرض اینکه $\psi_{y,\pm z}$ بسته‌های باریک بدون همپوشانی هستند، می‌بینیم که دستگاه اشترون - گرلاخ یک همبستگی بین اسپین و مختصات مداری ایجاد کرده است: اگر اتم خروجی را (با قرار دادن یک صفحه) بالای خط سیر اولیه بیایم (یعنی در ناحیه‌ای که $\psi_{y,+z}$ تیز است)، دارای اسپین بالا خواهد بود، در حالی که اگر آنرا در پایین بیایم دارای اسپین پایین خواهد بود.

دستگاه SG می‌تواند برای آماده سازی حالتی با جهت گیری اسپین معین به کار رود: برای داشتن باریکه‌ای خالص با اسپین بالا / پایین، فقط باریکه پایینی / بالایی را مسدود می‌کنیم. اما توجه کنید که فرایند فیلتر کردن، متوسط مولفه z تکانه خطی را تغییر می‌دهد. اگر چند آهنربای دیگر (با B در امتداد محور z) بعد از این دستگاه قرار دهیم می‌شود این اتفاق نیفتاده و ذره تکانه اولیه خود را باز یابد (اما نسبت به اسپین فیلتر شده باشد). با این تصحیح (که در تمرین‌های بعدی مفروض گرفته می‌شود) تنها اثر دستگاه SG با یک یا چند باریکه مسدود شده، فیلتر کردن اسپین بدون تحت تأثیر قرار دادن حرکت مداری است.

تمرین ۱۴-۵-۳: باریکه‌ای از ذرات با اسپین - $\frac{1}{2}$ که در امتداد محور z حرکت می‌کنند از دو دستگاه SG هم خط، هر دو با باریکه‌های پایین مسدود شده، عبور می‌کنند. میدان B اولی در امتداد محور z و میدان B دومی در امتداد محور x است (یعنی با چرخاندن اولی به اندازه زاویه $\pi/2$ حول محور z حاصل می‌شود) چه کسر از ذرات خروجی از اولی از دومی خارج خواهند شد؟ اگر فیلتر سومی که فقط اسپین بالا را در امتداد محور z عبور می‌دهد وارد مسئله شود، چه کسری از ذرات خروجی از اولی از سومی خارج خواهند شد؟ اگر فیلتر میانی هم اسپین رو به بالا و هم پایین محور x را عبور دهد (بدون مسدود کردن) اما آخری فقط اسپین رو به پایین محور z را عبور دهد چه کسری از ذرات خروجی از اولی از آخری خارج خواهند شد؟

تمرین ۱۴-۵-۴: باریکه‌ای از ذرات اسپین - $\frac{1}{2}$ ، که در امتداد محور z حرکت می‌کنند، به دو دستگاه اشترون - گرلاخ هم خط فرود می‌آیند که در اولی B در امتداد محور z و در دومی B در امتداد محور z' است که در صفحه x-z با زاویه θ نسبت به محور z قرار دارد. هر دو دستگاه فقط باریکه‌های بالایی را عبور می‌دهند چه کسری از ذرات خروجی از اولی از دومی عبور خواهد کرد؟

۱-۱۵- یک مثال ساده

سیستمی را با دو ذره اسپین $\frac{1}{2}$ - در نظر بگیرید (که از درجات آزادی مداری چشم‌پوشی می‌کنیم). اگر S_1 و S_2 عملگرهای اسپین آنها باشند فضای هیلبرت دو ذره‌ای $V_{1 \otimes 2}$ به وسیله چهار بردار

$$|s_1 m_1\rangle \otimes |s_2 m_2\rangle \equiv |s_1 m_1, s_2 m_2\rangle \quad (1-1-15)$$

پدید می‌آید که از روابط زیر پیروی می‌کنند:

$$S_i^2 |s_1 m_1, s_2 m_2\rangle = \hbar^2 s_i (s_i + 1) |s_1 m_1, s_2 m_2\rangle \quad (1-2-1-15) \text{ الف}$$

$$S_{iz} |s_1 m_1, s_2 m_2\rangle = \hbar m_i |s_1 m_1, s_2 m_2\rangle \quad (i=1, 2) \quad (1-2-1-15) \text{ ب}$$

چون $s_i = \frac{1}{2}$ و $m_i = \pm \frac{1}{2}$ فقط در علامت آزادی دارد، از نمادگذاری فشردده $|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle$ برای نشان دادن حالت‌ها استفاده می‌کنیم. برای نمونه،

$$|+-\rangle = |s_1 = \frac{1}{2} m_1 = \frac{1}{2}, s_2 = \frac{1}{2} m_2 = -\frac{1}{2}\rangle \quad (3-1-15)$$

و قس علی هذا. این چهار بردار پایه حاصل ضرب را تشکیل می‌دهند. آنها حالت‌هایی را نشان می‌دهند که دارای مقادیر خوش تعریف برای بزرگی و مولفه z تک تک اسپین‌ها هستند.

فرض کنید نخواهیم به دنبال تک تک اسپین‌ها نباشیم بلکه به سیستم به‌عنوان یک کل بنگریم. مقادیر ممکن برای بزرگی و مولفه z اسپین سیستم و حالت‌هایی که با این مقادیر مربوط هستند کدامند؟ این موضوع، مسئله جمع تکانه‌های زاویه‌ای است که موضوع این فصل است.

عملگر

$$S = S_1 + S_2 \quad (4-1-15)$$

۱- به زبان عملگرهای $S_1^{(1)}$ و $S_2^{(2)}$ که روی فضاها یکی - ذره‌ای اثر می‌کنند، $S_1 = S_1^{(1)} \otimes I^{(2)}$ و

$S_2 = I^{(1)} \otimes S_2^{(2)}$.

را در نظر بگیرید که آنرا عملگر تکانه زاویه‌ای کل می‌نامیم. اینکه S واقعاً عملگر تکانه زاویه‌ای کل است، (۱) - به وسیله شهود ما و (۲) - با توجه به این حقیقت که S مولد چرخش برای کت‌های حاصل ضرب، یعنی چرخش‌های کل سیستم، است و (۳) - اینکه از قواعد جابه‌جایی مورد انتظار از یک مولد چرخش، یعنی

$$[S_i, S_j] = \sum_k i\hbar \varepsilon_{ijk} S_k \quad (5-1-15)$$

که می‌تواند به راحتی اثبات شود، پیروی می‌کند، تأیید می‌شود. مسئله ما، یافتن ویژه مقادیر و ویژه بردارهای S_z^2 و S_z است. ابتدا

$$S_z = S_{1z} + S_{2z} \quad (6-1-15)$$

را در نظر بگیرید که با S_1^2 ، S_2^2 ، S_{1z} و S_{2z} جابه‌جا می‌شود و انتظار داریم که در پایه حاصل ضرب قطری باشد. این به راحتی قابل اثبات است:

$$S_z |++\rangle = (S_{1z} + S_{2z}) |++\rangle = \left(\frac{\hbar}{2} + \frac{\hbar}{2}\right) |++\rangle$$

$$S_z |+-\rangle = 0 |+-\rangle \quad (7-1-15)$$

$$S_z |-+\rangle = 0 |-+\rangle$$

$$S_z |--\rangle = -\hbar |--\rangle$$

بنابراین مقادیر مجاز برای مولفه z کل عبارتند از \hbar ، 0 و $-\hbar$.
با استفاده از روش تصویرها (یا هر روش دیگر)،

$$S_z \xrightarrow{\text{product basis}} \hbar \begin{bmatrix} ++ & +- & -+ & -- \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (8-1-15)$$

توجه کنید که ویژه مقدار $S_z = 0$ دو بار تبهگن است و این ویژه فضا به وسیله بردارهای $|+-\rangle$ و $|-+\rangle$ پدید می‌آید. اگر یک ترکیب خطی تشکیل دهیم، $\alpha |+-\rangle + \beta |-+\rangle$ ، باز هم به ویژه حالتی با $S_z = 0$ می‌رسیم اما این حالت دارای مقادیر معین برای S_{1z} و S_{2z} نخواهد بود (مگر اینکه $\alpha = 0$ یا $\beta = 0$ باشد).

اکنون عملگر

$$S^2 = (S_1 + S_2) \cdot (S_1 + S_2) = S_1^2 + S_2^2 + 2S_1 \cdot S_2 \quad (9-1-15)$$

را ملاحظه کنید. اگر چه S^2 با S_1^2 و S_2^2 جابه‌جا می‌شود، اما به دلیل جمله $S_1 \cdot S_2$ که دارای S_{1x} و S_{1y} و غیره در خود است با S_{1z} و S_{2z} جابه‌جا نمی‌شود. با محاسبه صریح،

$$S^2 \xrightarrow{\text{product basis}} \hbar^2 \begin{matrix} ++ & +- & -+ & -- \\ \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \end{matrix} \quad (10-1-15)$$

لذا می‌بینیم که اگر چه $|++\rangle$ و $|--\rangle$ ویژه حالت‌های S^2 ، $(S(S+1) = 2)$ ، هستند اما حالت‌های با S_z صفر یعنی $|+-\rangle$ و $|-+\rangle$ اینگونه نیستند. اما ترکیب‌های خطی زیر ویژه حالت‌های S^2 هستند:

$$\frac{|+-\rangle + |-+\rangle}{2^{1/2}} \quad (s=1) \quad (11-1-15)$$

$$\frac{|+-\rangle - |-+\rangle}{2^{1/2}} \quad (s=0)$$

تمرین ۱-۱-۱۵: معادلات (۱۰-۱-۱۵) و (۱۱-۱-۱۵) را به دست آورید. از رابطه

$$S_1 \cdot S_2 = S_{1z} S_{2z} + \frac{1}{2}(S_{1+} S_{2-} + S_{1-} S_{2+}) \quad (12-1-15)$$

کمک بگیرید.

این مطلب، جواب مسئله‌ای را که دنبالش بودیم کامل می‌کند. مقادیر مجاز برای اسپین کل $s = 0, 1$ هستند در حالی که مقادیر مجاز s_z ، \hbar ، 0 و $-\hbar$ است. ویژه حالت‌های متناظر در پایه حاصل ضرب عبارتند از:

$$\begin{aligned} |s=1, m=1, s_1=1/2, s_2=1/2\rangle &= |++\rangle \\ |s=1, m=0, s_1=1/2, s_2=1/2\rangle &= 2^{-1/2}[|+-\rangle + |-+\rangle] \\ |s=1, m=-1, s_1=1/2, s_2=1/2\rangle &= |--\rangle \\ |s=0, m=0, s_1=1/2, s_2=1/2\rangle &= 2^{-1/2}[|+-\rangle - |-+\rangle] \end{aligned} \quad (13-1-15)$$

این بردارها، حالت‌های با تکانه زاویه‌ای کل خوش - تعریف را نمایش می‌دهند و پایه s -کل را تشکیل می‌دهند. سه حالت اسپین - ۱، سه تایی^۱ و حالت تنهای اسپین - صفر تکتایی^۱ نامیده می‌شوند. مسئله جمع تکانه‌های زاویه‌ای در اصل یک تغییر پایه است از پایه‌ای که $(S_1^2, S_2^2, S_{1z}, S_{2z})$ را قطری می‌کند به پایه‌ای که (S^2, S_z, S_1^2, S_2^2) را قطری می‌کند. می‌توانیم یافته‌های خود را به صورت نمادین به شکل

$$1/2 \otimes 1/2 = 1 \oplus 0 \quad (14-1-15)$$

بنویسیم که بدین معنی است که حاصل ضرب مستقیم دو فضای هیلبرت اسپین $\frac{1}{2}$ - جمع مستقیم یک فضای اسپین - ۱ و یک فضای اسپین - ۰ است. شیوه پیدا کردن ابعاد در معادله (۱۴-۱-۱۵) به صورت زیر است:

1- Triplets.
2- Singlet.

سمت چپ: $(2s_1 + 1)(2s_2 + 1) = (2 \times 1/2 + 1)(2 \times 1/2 + 1) = 4$

$$\sum_{s=0}^1 (2s + 1) = 1 + 3 = 4 \quad (15-1-15)$$

سمت راست:

تجزیه (تفکیک) فضای حاصل ضرب مستقیم به یک جمع روی فضاها با اسپین کل خوب تعریف می‌تواند بدین ترتیب دیده شود. عملگرهای چرخش برای کل سیستم، در پایه حاصل ضرب ماتریس های 4×4 خواهند بود. اما این ماتریس ها کاهش پذیرند: با رفتن به پایه 's' کل این ماتریس ها می‌توانند به صورت یک بلوک 3×3 (سکتور اسپین - 1) و یک بلوک 1×1 (سکتور اسپین - صفر) قطری بلوکی شوند. لیکن پایه s- کل کاهش ناپذیر است و نمی‌توانیم فضای اسپین - 1 را باز هم به قسمت‌هایی تقسیم کنیم که تحت چرخش ها آمیخته نمی‌شوند.

حالت های s- کل ویژگی دیگری هم دارند: آنها تحت تعویض دو ذره متقارن معینی دارند، سه تایی ها متقارن و تک تایی پادمتقارن است. حال بردار حالت برای دو ذره یکسان اسپین - $\frac{1}{2}$ می‌بایست تحت تعویض برچسب های ذره، یعنی تحت تعویض درجات آزادی اسپینی و مداری خودشان، پادمتقارن باشد. می‌دانیم که اگر Ω یک عملگر مداری (متشکل از مختصه ها و تکانه ها) باشد، آنگاه

$$|\omega_1 \omega_2, S\rangle = 2^{-1/2} [|\omega_1 \omega_2\rangle + |\omega_2 \omega_1\rangle]$$

$$|\omega_1 \omega_2, A\rangle = 2^{-1/2} [|\omega_1 \omega_2\rangle - |\omega_2 \omega_1\rangle]$$

تحت تعویض متغیر مداری به ترتیب متقارن و پادمتقارن هستند. برای ساختن بردار حالت کامل، فقط حالت های مداری و اسپینی را با تقارن مخالف در هم ضرب می‌کنیم

$$|\omega_1 m_1, \omega_2 m_2, A\rangle = \begin{cases} |\omega_1 \omega_2, S\rangle \otimes \frac{|+-\rangle - |-+\rangle}{2^{1/2}} \\ |\omega_1 \omega_2, A\rangle \otimes \frac{|++\rangle + |--\rangle}{2^{1/2}} \end{cases} \quad (16-1-15)$$

این بردارها یک پایه کامل برای فضای هیلبرت دو ذره یکسان اسپین - $\frac{1}{2}$ فراهم می‌کنند. به عنوان مثال حالت پایه اتم هلیوم را در نظر بگیرید که دو الکترون دارد. در رابطه با جدول تناوبی گفته شد که در این حالت دارای پایین ترین انرژی، هر دو الکترون در پایین ترین حالت مداری $|n=1, l=0, m=0\rangle$ قرار داشته و اسپین های مخالف دارند. اینک می‌توان آن گفته را تصریح کرد. قسمت مداری کت حالت پایه، حاصل ضرب مستقیم

۱- اگر از نیروهای برهمکنش چشم‌پوشی کنیم، حالت های مجاز برای الکترون ها، هیدروژن گونه هستند به این معنی که بصورت $|nlm\rangle$ برچسب زده می‌شوند. اما انرژی ها و توابع موج با جاگذاری $ze^2 = 2e^2 \rightarrow e^2$ به دست می‌آیند.

$$|\psi_o\rangle = |100\rangle \otimes |100\rangle \quad (17-1-15)$$

است که متقارن است. بنابراین قسمت اسپینی می‌بایست

$$|\chi_s\rangle = 2^{-1/2}(|+-\rangle - |-+\rangle) \quad (18-1-15)$$

باشد و در نتیجه

$$|\psi_{\text{ground}}\rangle = |\psi_o\rangle \otimes |\chi_s\rangle \quad (19-1-15)$$

در این حالت، هم تکانه زاویه‌ای مداری و هم اسپینی صفرند.

اکنون به مسئله دو اسپین برمی‌گردیم (بدون مختصه‌های مداری). حالا که دو پایه داریم کدامیک را باید

به کار ببریم؟ پاسخ به هامیلتونی بستگی دارد. برای نمونه اگر دو اسپین فقط با یک میدان خارجی $\mathbf{B} = B_0 \hat{k}$ برهم کنش داشته باشند،

$$H = -(\gamma_1 \mathbf{S}_1 + \gamma_2 \mathbf{S}_2) \cdot \mathbf{B} = -B_0(\gamma_1 S_{1z} + \gamma_2 S_{2z}) \quad (20-1-15)$$

پایه حاصل ضرب، که S_{1z} و S_{2z} را قطری می‌کند، انتخاب بدیهی است (اما اگر $\gamma_1 = \gamma_2$ باشد آنگاه $H \propto S_z$ بوده و می‌توانیم پایه s -کل را هم به کار ببریم). از طرف دیگر اگر اسپین‌ها برهمکنش متقابل داشته باشند و مثلاً

$$H = A \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \frac{1}{2} A (S^2 - S_1^2 - S_2^2) \quad (21-1-15)$$

باشد پایه s -کل H را قطری می‌کند.

تمرین ۱۵-۱-۲: علاوه بر برهم کنش کولنی، برهمکنش دیگری موسوم به برهمکنش فوق ریز بین الکترون و پروتون در اتم هیدروژن وجود دارد. هامیلتونی توصیفگر این برهمکنش، که به گشتاورهای مغناطیسی دو ذره مربوط می‌شود، عبارتست از

$$H_{hf} = A \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \quad (A > 0) \quad (22-1-15)$$

(این فرمول فرض می‌کند که حالت مداری الکترون $|1, 0, 0\rangle$ است). لذا هامیلتونی کل، هامیلتونی کولنی به علاوه H_{hf} است.

الف- نشان دهید که H_{hf} حالت پایه را به دو تراز می‌شکافد:

$$E_+ = -Ry + \frac{\hbar^2 A}{4} \quad (23-1-15)$$

$$E_- = -Ry - \frac{3\hbar^2 A}{4}$$

و حالت‌های متناظر به ترتیب سه تایی و تک‌تایی هستند.

ب- تلاش کنید تا فرکانس تابش گسیل شده را وقتی اتم از حالت سه تایی به تک‌تایی می‌پرد حساب کنید. برای این کار می‌توانید فرض کنید که الکترون و پروتون دو دو قطبی μ_e و μ_p به فاصله x_0 از هم با انرژی برهمکنشی از مرتبه^۱

$$\mathcal{H}_{hf} \cong \frac{\mu_e \cdot \mu_p}{a_0^3}$$

هستند. نشان دهید که این اشاره می‌کند که ثابت معادله (۱۵-۱-۱۲) عبارتست از

$$A \sim \frac{2e}{2mc} \frac{(5.6)e}{2Mc} \frac{1}{a_0^3}$$

(که ۵/۶ ضریب g برای پروتون است) و اینکه

$$\Delta E = E_+ - E_- = A\hbar^2$$

تصحیحی از مرتبه $(m/M)\alpha^2$ نسبت به انرژی حالت پایه است. نشان دهید که فرکانس تابش گسیل شده چند ده سانتی متر است، به نکات فصل ۱۳ مراجعه کنید. مقدار اندازه‌گیری شده ۲۱/۴ cm است. این تابش، که خط $cm-21$ نامیده می‌شود، روشی برای آشکارسازی هیدروژن در دیگر قسمت‌های جهان است. ج- نسبت احتمال $P(\text{triplet})/P(\text{singlet})$ اتم‌های هیدروژن را در تعادل گرمایی در دمای اتاق برآورد کنید.

۱۵-۲- مسئله عمومی

اینک مسئله عمومی جمع دو تکانه زاویه‌ای \mathbf{J}_1 و \mathbf{J}_2 را در نظر بگیرید. ویژه مقادیر و ویژه کت‌های J^2 و J_z ، کدامند؟ یک روش پیدا کردن اینها، تقلید از بخش آخر است: ماتریس‌های $(2j_2 + 1)$ ، $(2j_1 + 1)$ بعدی J^2 و J_z را تشکیل داده و آنها را قطری می‌کنیم. J_z در پایه حاصل ضرب خود بخود قطری خواهد شد، چون

$$J_z |j_1 m_1, j_2 m_2\rangle = \hbar(m_1 + m_2) |j_1 m_1, j_2 m_2\rangle \quad (15-2-1)$$

J_z یک عملگر تبهگن خواهد بود چون روش‌های زیادی برای ساختن یک $m = m_1 + m_2$ کل وجود دارد، به جز وقتی $m = \pm(j_1 + j_2)$ باشد، یعنی وقتی هر دو تکانه زاویه‌ای تصاویر بیشین در جهت بالا / پایین محور z دارند. برای نمونه اگر $m = j_1 + j_2 - 2$ باشد سه کت حاصل ضرب وجود دارد: $(m_1 = j_1, m_2 = j_2 - 2)$ ، $(m_1 = j_1 - 1, m_2 = j_2 - 1)$ ، و $(m_1 = j_1 - 2, m_2 = j_2)$. در هر یک از ویژه فضاهای تبهگن J_z می‌بایست پایه‌ای انتخاب کنیم که J^2 را قطری می‌کند (و J_{1z} و J_{2z} را قطری نمی‌کند). این کار را می‌توانیم با تشکیل ماتریس J^2 و سپس قطری کردن آن انجام دهیم. اما این کار

۱- این توصیف در اینجا اغراق آمیز است؛ به‌دست آوردن \mathcal{H}_{hf} و H_{hf} بسیار دشوار است. هدف ما فقط برآورد $|A|$ است نه رسیدن به منشاء دقیق آن.

می‌تواند کسل کننده باشد (اگر تمرین ۱۵-۱-۱ را حل کرده باشید خواهید فهمید که تشکیل ماتریس S^2 حتی در این مورد چهار بعدی بسیار پر دردرس است). اما یک روش کارآمدتر وجود دارد که به توصیف آن می‌پردازیم.

به عنوان گام اول لازم است مقادیر مجاز z را بدانیم. شهود و تجربه ما از بخش قبل پیشنهاد می‌کنند که z می‌تواند مقادیر $z_1 - z_2, z_1, z_1 + z_2 - 1, \dots, z_1 + z_2$ را اتخاذ کند (با فرض $j_1 \geq z_2$).^۱ این موضوع را امتحان می‌کنیم. تعداد کت‌های حاصل ضرب، $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ است. این تعداد باید برابر تعداد کت‌های z -کل باشد. طبق حدس ما این تعداد برابر است با

$$\sum_{j=j_1-j_2}^{j_1+j_2} (2j+1) = \sum_{j=0}^{j_1+j_2} (2j+1) - \sum_{j=0}^{j_1-j_2-1} (2j+1) = (2j_1+1)(2j_2+1) \quad (2-2-15)$$

که از فرمول

$$\sum_{n=0}^N n = \frac{N(N+1)}{2}$$

استفاده کرده‌ایم. این را به عنوان اثبات حدس خودمان در نظر می‌گیریم:

$$j_1 \otimes j_2 = (j_1 + j_2) \oplus (j_1 + j_2 - 1) \oplus \dots \oplus (j_1 - j_2) \quad (3-2-15)$$

به عبارتی دیگر، کت‌های z -کل عبارتند از

$$|jm, j_1 j_2\rangle, \quad j_1 + j_2 \geq j \geq j_1 - j_2, \quad j \geq m \geq -j \quad (4-2-15)$$

آن‌ها را به شکل یک آرایه می‌نویسیم:

$$\begin{array}{ccc} \begin{array}{l} j \\ \left\{ \begin{array}{l} j_1 + j_2 \\ |j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle \\ |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle \\ |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 2\rangle \\ \vdots \\ |j_1 + j_2, -(j_1 + j_2 - 2)\rangle \\ |j_1 + j_2, -(j_1 + j_2 - 1)\rangle \\ |j_1 + j_2, -(j_1 + j_2)\rangle \end{array} \right. \\ m \end{array} & \begin{array}{l} j_1 + j_2 - 1 \\ |j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle \\ |j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2\rangle \\ \vdots \\ |j_1 + j_2 - 1, -(j_1 + j_2 - 2)\rangle \\ |j_1 + j_2 - 1, -(j_1 + j_2 - 1)\rangle \end{array} & \begin{array}{l} \dots \\ j_1 - j_2 \\ |j_1 - j_2, j_1 - j_2\rangle \\ \vdots \\ |j_1 - j_2, -(j_1 - j_2)\rangle \end{array} \end{array} \quad (5-2-15)$$

(توجه کنید که برچسب‌های $j_1 j_2$ از کت‌های z -کل حذف می‌شوند. این کار را غالباً برای ساده کردن نمادگذاری انجام می‌دهیم).

۱- کلیت مسئله از بین نمی‌رود چون همیشه می‌توانیم عدد بزرگتر را j_1 بنامیم.

مسئله ما، نوشتن هر یک از این کت‌ها به صورت یک ترکیب خطی از کت‌های حاصل ضرب است. برای اینکه یک ایده از چگونگی انجام این کار به دست آوریم مسئله حل شده در بخش قبل ($j_1 = j_2 = \frac{1}{2}$) را ملاحظه می‌کنیم. در این مورد حالت‌ها عبارتند از

$$\begin{array}{l}
 \begin{array}{c} \rightarrow \\ j \end{array} \\
 \begin{array}{c} \downarrow \\ m \end{array} \\
 \begin{array}{cc}
 1 & 0 \\
 |1, 1\rangle & \\
 |1, 0\rangle & |0, 0\rangle \\
 |1, -1\rangle &
 \end{array}
 \end{array}$$

حالت بالایی، $|1, 1\rangle$ ، را در ستون اول در نظر بگیرید که بزرگترین مولفه z ممکن را دارد. فقط یک حاصل ضرب با مقدار m صحیح، یعنی هر دو اسپین بالا، وجود دارد. بنابراین

$$|1, 1\rangle = |++\rangle$$

می‌توانیم سمت راست را در یک عامل فاز ضرب کنیم اما از قرار داد موسوم به *قرار داد کوندون-شورتلی*^۱ استفاده می‌کنیم که در آن ضریب این حالت بالایی یک انتخاب می‌شود. حالا حالت زیر این حالت یعنی $|1, 0\rangle$ را در نظر بگیرید. دو حالت حاصل ضرب با $m = 0$ وجود دارند یعنی $|+-\rangle$ و $| -+\rangle$ ؛ و $|1, 0\rangle$ می‌بایست ترکیب خطی از اینها باشد. این ترکیب را به صورت زیر پیدا می‌کنیم: می‌دانیم که^۲

$$S_-|1, 1\rangle = 2^{1/2}\hbar|1, 0\rangle$$

به طوری که

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{2^{1/2}\hbar} S_-|1, 1\rangle$$

اما $|1, 0\rangle$ را بر حسب $|1, 1\rangle$ نمی‌خواهیم بلکه آنرا بر حسب کت‌های حاصل ضرب می‌خواهیم. پس سمت راست را مجدداً به صورت زیر می‌نویسیم:

$$= \frac{1}{2^{1/2}\hbar} (S_{1-} + S_{2-})|++\rangle = \frac{1}{2^{1/2}\hbar} (\hbar| -+\rangle + \hbar|+-\rangle)$$

به طوری که

$$|1, 0\rangle = 2^{-1/2}(|+-\rangle + | -+\rangle)$$

که در توافق با نتیجه قبلی ماست.

حالت بعدی، $|1, -1\rangle$ ، می‌تواند با پایین آوردن این حالت به اندازه یک پله دیگر به دست آید یا به طور ساده‌تر با توجه به اینکه فقط یک کت با m منفی بیشین وجود دارد، یعنی $|--\rangle$ ، بنابراین

$$|1, -1\rangle = |--\rangle$$

1- Condon-Shortley convention.

۲- به یاد بیاورید که $J_{\pm}|j, m\rangle = \hbar[(j \mp m)(j \pm m + 1)]^{1/2}|j, m \pm 1\rangle$

قرارداد فاز ما طور است که اگر $|1, 0\rangle$ را پایین هم می‌آوردید به همین نتیجه می‌رسیدید.

این، حالت‌های z را تأمین می‌کند. حالت $z = 0$ را در نظر بگیرید. حالت $|0, 0\rangle$ دارای $m = 0$ بوده و یک ترکیب خطی از $|+-\rangle$ و $|+ -\rangle$ هم هست. این ترکیب را با استفاده از دو قید به دست می‌آوریم: (۱) - این ترکیب باید بر ترکیبی که حالت دیگر را با $m = 0$ تشکیل می‌دهد، یعنی $|1, 0\rangle$ عمود باشد و ضرایب حقیقی داشته باشد (۲) - این ترکیب به یک بهنجار می‌شود. اگر ترکیب را به صورت $\alpha|+-\rangle + \beta|+ -\rangle$ بگیریم، قیدهای مذکور بیان می‌کنند که

$$\alpha + \beta = 0$$

$$\alpha^2 + \beta^2 = 1$$

در نتیجه،

$$|0, 0\rangle = 2^{-1/2}(|+-\rangle - |+ -\rangle)$$

توجه کنید که می‌توانستیم حالت را در (۱) - هم ضرب کنیم. قرار داد ما به صورت زیر است: در هر ستون در معادله (۱۵-۲-۵) به حالت بالایی علامتی داده می‌شود که ضرب کت حاصل ضرب با $m_1 = j_1$ مثبت شود. به مسئله عمومی معادله (۱۵-۲-۵) برمی‌گردیم. یک بار دیگر حالت بالایی در ستون اول، با m برابر با مقدار پیشینه $j_1 + j_2$ ، می‌تواند از فقط یک کت حاصل ضرب ساخته شود، کتی که در آن هر دو تکانه زاویه‌ای تصویرهای ممکن پیشینه را در جهت محور z دارند:

$$|j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = |j_1 j_1, j_2 j_2\rangle \quad (۱۵-۲-۶)$$

حالت‌های m دیگر در این مقدار z با پایین آوردن به دست می‌آیند. اکنون یک پله پایین می‌رویم. از آنجا که

$$J_- |j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = \hbar [2(j_1 + j_2)]^{1/2} |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle$$

مثل مسئله اسپین - $(1/2 \otimes 1/2)$ داریم:

$$|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle$$

$$= \frac{1}{[2(j_1 + j_2)]^{1/2} \hbar} \cdot (J_{1-} + J_{2-}) |j_1 j_1, j_2 j_2\rangle$$

$$= \frac{1}{[2(j_1 + j_2)]^{1/2} \hbar} [\hbar (2j_1)^{1/2} |j_1(j_1 - 1), j_2 j_2\rangle + \hbar (2j_2)^{1/2} |j_1 j_1, j_2(j_2 - 1)\rangle] \quad (۱۵-۲-۷)$$

$$= \left(\frac{j_1}{j_1 + j_2}\right)^{1/2} |j_1(j_1 - 1), j_2 j_2\rangle + \left(\frac{j_2}{j_1 + j_2}\right)^{1/2} |j_1 j_1, j_2(j_2 - 1)\rangle$$

با پیشروی بدین شیوه می‌توانیم حالت انتهایی ستون اول را به دست آوریم.^۲

۱- این جزء قرارداد است.

۲- در عمل فقط تا $m = 0$ پایین می‌رویم. حالت‌های با m منفی می‌توانند با استفاده از ویژگی‌های خاص بسط، که به زودی بحث می‌کنیم، به دست آیند.

برای حالت بالایی در ستون دوم، چون دارای $m = j_1 + j_2 - 1$ است، دو کت حاصل ضرب وجود دارد که برای ورود در ترکیب خطی مورد قبول هستند و عبارتند از $\langle j_1 j_1, j_2 (j_2 - 1) \rangle$ و $\langle j_1 (j_1 - 1), j_2 j_2 \rangle$. این ترکیب باید به یک بهنجار شود تا بر حالت دیگر تشکیل شده از این کت‌ها، یعنی $\langle j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1 \rangle$ ، عمود باشد [معادله (۱۵-۲-۷) را ببینید] و طبق قرارداد دارای ضرایب حقیقی باشد. با کمی بررسی پاسخ عبارتست از

$$\begin{aligned} \langle j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1 \rangle &= \left(\frac{j_1}{j_1 + j_2} \right)^{1/2} \langle j_1 j_1, j_2 (j_2 - 1) \rangle \\ &\quad - \left(\frac{j_2}{j_1 + j_2} \right)^{1/2} \langle j_1 (j_1 - 1), j_2 j_2 \rangle \end{aligned} \quad (۱۵-۲-۸)$$

علامت کل با درخواست اینکه ضریب کت حاصل ضرب با $m_1 = j_1$ مثبت باشد معین می‌شود. با داشتن حالت بالایی، بقیه ستون دوم می‌تواند با پایین آوردن به دست آید. به سراغ یک ستون دیگر می‌رویم. حالت بالایی در ستون سوم، $\langle j_1 + j_2 - 2, j_1 + j_2 - 2 \rangle$ ، می‌تواند برهنه‌ی سه کت حاصل ضرب باشد. سه ضریب (حقیقی) با این سه شرط معین می‌شوند: عمود بودن بر دو کت j -کل با m یکسان قبلی و بهنجارش به یک. واضح است که همیشه قیدهای کافی برای تعیین حالت‌های بالایی هر ستون وجود دارد و همینکه حالت‌های بالایی مشخص شدند بقیه با پایین آوردن به دست می‌آیند.

تمرین ۱۵-۲-۱ الف- تحقیق کنید که $\langle j_1 j_1, j_2 j_2 \rangle$ واقعاً یک حالت با $j = j_1 + j_2$ است. اجازه دهید $J^2 = J_1^2 + J_2^2 + 2J_{1z}J_{2z} + J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+}$ روی آن اثر کند. ب- (اختیاری). ثابت کنید که سمت راست معادله (۱۵-۲-۸) واقعاً دارای تکانه زاویه‌ای $j = j_1 + j_2 - 1$ است.

ضرایب کلیش - گوردن (CG)

کامل بودن کت‌های حاصل ضرب به ما اجازه می‌دهد تا کت‌های j -کل را به صورت

$$|jm, j_1 j_2 \rangle = \sum_{m_1, m_2} \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | jm, j_1 j_2 \rangle |j_1 m_1, j_2 m_2 \rangle$$

بنویسیم. ضرایب بسط،

$$\langle j_1 m_1, j_2 m_2 | jm, j_1 j_2 \rangle \equiv \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | jm \rangle$$

ضرایب کلیش - گوردن یا ضرایب جمع برداری نامیده می‌شوند (چون برچسب‌های $j_1 j_2$ در برا ظاهر می‌شوند، آنها را در کت حذف می‌کنیم). برخی از ویژگی‌های این ضرایب به شرح زیرند:

۱-

$$\langle j_1 m_1, j_2 m_2 | jm \rangle \neq 0, \quad j_1 - j_2 \leq j \leq j_1 + j_2 \quad (۱۵-۲-۹)$$

(این نامساوی مثلث نامیده می‌شود چون از نظر هندسی به این معنی است که باید با اضلاع j_1 ، j_2 و j قادر به تشکیل یک مثلث باشیم).

-۲

$$(۱۵-۲-۱۰)$$

تنها اگر $m_1 + m_2 = m$ ، $\langle j_1 m_1, j_2 m_2 | jm \rangle \neq 0$

۳- این ضرایب حقیقی هستند (به‌طور قرار دادی).

$$۴- \langle j_1 j_1, j_2 (j - j_1) | j j \rangle$$
 مثبت است (قرار داد).

(این شرط، علامت کل را در بسط هر حالت بالایی معین می‌کند و در بحث قبلی از آن کمک گرفتیم).

-۵

$$(۱۱-۲-۱۵)$$

$$\langle j_1 m_1, j_2 m_2 | jm \rangle = (-1)^{j_1 + j_2 - j} \langle j_1 (-m_1), j_2 (-m_2) | j (-m) \rangle$$

این رابطه کاری را که باید انجام دهیم نصف می‌کند: ما با حالت بالایی شروع کرده و کار را تا $m = 0$ (یا $\frac{1}{2}$ اگر j نیمه - صحیح باشد) ادامه می‌دهیم. سپس ضرایب برای حالت‌های با m منفی طبق این رابطه معین می‌شوند.

تمرین ۱۵-۲-۲: ضرایب CG را برای

$$\text{الف- } \frac{1}{2} \otimes 1 = \frac{3}{2} \oplus \frac{1}{2}$$

$$\text{ب- } 1 \otimes 1 = 2 \oplus 1 \oplus 0$$

به‌دست آورید.

$$\text{تمرین ۱۵-۲-۳: ثابت کنید که } \frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} = \frac{3}{2} \oplus \frac{1}{2} \oplus \frac{1}{2}$$

اگر ضرایب CG را به شکل یک ماتریس در آوریم می‌بینیم که متعامد است (حقیقی و یکانی). این ناشی از این حقیقت است که ماتریس مذکور یک پایه راست هنجار را به پایه راست دیگر مربوط می‌کند. اگر ماتریس را معکوس کنیم می‌توانیم کت‌های حاصل ضرب را بر حسب کت‌های j - کل بنویسیم. ضرایب این بسط هم ضرایب CG هستند:

$$\langle jm | j_1 m_1, j_2 m_2 \rangle = \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | jm \rangle^* = \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | jm \rangle$$

چون ضرایب CG حقیقی‌اند. به‌عنوان مثال مسئله $\frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2}$ را در نظر بگیرید. در آنجا داریم:

$$\begin{bmatrix} |1, 1\rangle \\ |1, 0\rangle \\ |1, -1\rangle \\ |0, 0\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2^{1/2} & 1/2^{1/2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1/2^{1/2} & -1/2^{1/2} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |++\rangle \\ |+-\rangle \\ |-+\rangle \\ |--\rangle \end{bmatrix}$$

(توجه کنید که ستون‌ها شامل مولفه‌های بردارها نیستند بلکه شامل بردارهای پایه هستند). می‌توانیم این رابطه را معکوس کنیم:

$$\begin{bmatrix} |++\rangle \\ |+-\rangle \\ |-+\rangle \\ |--\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2^{1/2} & 0 & 1/2^{1/2} \\ 0 & 1/2^{1/2} & 0 & -1/2^{1/2} \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |1, 1\rangle \\ |1, 0\rangle \\ |1, -1\rangle \\ |0, 0\rangle \end{bmatrix}$$

لذا می توان نوشت:

$$|+-\rangle = 2^{-1/2}(|1, 0\rangle + |0, 0\rangle)$$

و غیره. در عمل ضرایب CG را برای هر دو منظور به کار می برند، رفتن از پایه حاصل ضرب به پایه j -کل و بالعکس.

جمع L و S

الکترونی را در نظر بگیرید که مقید به یک پروتون در یک حالت تکانه زاویه ای مداری l است. چون الکترون اسپین $\frac{1}{2}$ دارد تکانه زاویه کل آن، $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ ، می تواند مقادیر $j = l \pm \frac{1}{2}$ را داشته باشد. می خواهیم حالت های j -کل را برحسب حالت های حاصل ضرب $|l m_l, s m_s\rangle$ بنویسیم. از آنجا که $m_s = \pm 1/2$ است، در هر m حداکثر دو کت حاصل ضرب مورد قبول وجود خواهد داشت. فرض کنید

$$|j = l + 1/2, m\rangle = \alpha |l, m - 1/2; 1/2, 1/2\rangle + \beta |l, m + 1/2; 1/2, -1/2\rangle \quad (12-2-15)$$

$$|j = l - 1/2, m\rangle = \alpha' |l, m - 1/2; 1/2, 1/2\rangle + \beta' |l, m + 1/2; 1/2, -1/2\rangle \quad (13-2-15)$$

شرط اینکه این حالت ها راست هنجار باشند بیان می کند که

$$\alpha^2 + \beta^2 = 1 \quad (14-2-15)$$

$$\alpha'^2 + \beta'^2 = 1 \quad (15-2-15)$$

$$\alpha\alpha' + \beta\beta' = 0 \quad (16-2-15)$$

بنابراین فقط یک قید دیگر نیاز داریم مثلاً نسبت α/β . این نسبت را با درخواست زیر به دست می آوریم:

$$J^2 |j = l + 1/2, m\rangle = \hbar^2 (l + 1/2)(l + 3/2) |j = l + 1/2, m\rangle \quad (17-2-15)$$

با نوشتن

۱- در اینجا m_s ، m_l و m مربوط به تصویرهای مداری، اسپین و کل در امتداد محور Z هستند.

۲- این می تواند در ساختن جدولی شبیه جدول (15-2-15) کمک کند. این جدول شامل دو ستون، یکی برای

$j = l + 1/2$ و یکی برای $j = l - 1/2$ ، خواهد بود.

$$J^2 = L^2 + S^2 + 2L_z S_z + L_- S_+ + L_+ S_- \quad (15-2-18)$$

می‌توان نتیجه گرفت که

$$\frac{\beta}{\alpha} = \left(\frac{l+1/2-m}{l+1/2+m} \right)^{1/2} \quad (15-2-19)$$

با داشتن این و قاعده ما برای علامت کل،

$$|j=l \pm 1/2, m\rangle = \frac{1}{(2l+1)^{1/2}} [\pm(l+1/2 \pm m)^{1/2} |l, m-1/2; 1/2, 1/2\rangle \\ + (l+1/2 \mp m)^{1/2} |l, m+1/2; 1/2, -1/2\rangle] \quad (15-2-20)$$

[توجه کنید که اگر $z = l + \frac{1}{2}$ باشد، $m = \pm(l + \frac{1}{2})$ ؛ تنها یک جمله با ضریب ۱ باقی می‌ماند]. اگر هامیلتونی شامل فقط برهمکنش کولنی یا علاوه بر آن یک برهمکنش با میدان مغناطیسی ثابت ضعیف باشد پایه حاصل ضرب مناسب است. پایه z -کل وقتی به کمک ما می‌آید که برهمکنش اسپین - مدار را در فصل ۱۷ مطالعه می‌کنیم [که شامل عملگر $(J^2 - L^2 - S^2)$ است].
تمرین ۱۵-۲-۴: معادلات (۱۵-۲-۱۹) و (۱۵-۲-۲۰) را به دست آورید.

تمرین ۱۵-۲-۵: الف- نشان دهید که $P_1 = \frac{3}{4}I + (S_1 \cdot S_2)/\hbar^2$ و $P_2 = \frac{3}{4}I - (S_1 \cdot S_2)/\hbar^2$ عملگرهای تصویری هستند یعنی از $P_i P_j = \delta_{ij} P_j$ پیروی می‌کنند [از معادله (۱۴-۳-۳۹) استفاده کنید].

ب- نشان دهید که اینها فضاهاى اسپین - ۱ و اسپین - صفر را در $1 \oplus 0 = \frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2}$ تصویر می‌کنند.

تمرین ۱۵-۲-۶: عملگرهای تصویری P_{\pm} را برای زیر فضاهاى $z = l \pm \frac{1}{2}$ در جمع $L + S = J$ بسازید.

تمرین ۱۵-۲-۷: نشان دهید که وقتی z_1 را با z_2 جمع می‌کنیم، حالت‌های با $z = 2z_1 = 2z_2$ متقارن هستند. نشان دهید که حالت‌های با $z = 2z_1 - 1$ پادمقارن هستند (در مورد تقارن حالت‌های بالایی ستون بحث کرده و نشان دهید که پایین آوردن، تقارن را تغییر نمی‌دهد). این الگوی تناوبی تقارن با کاهش z ادامه می‌یابد اما اثبات آن سخت‌تر می‌شود.

نمادگذاری طیف‌سنجی تصحیح‌یافته

در غیاب اسپین، کافیت از یک حرف تنها نظیر s, p, d, \dots برای نشان دادن تکانه زاویه‌ای (مداری) یک ذره استفاده کنیم. در حضور اسپین نمادگذاری به صورت زیر تغییر می‌کند:

۱- از حروف بزرگ S, P, D, \dots (اجازه دهید که یک حرف نوعی L بنامیم) برای نشان دادن مقدار تکانه زاویه‌ای استفاده می‌کنیم.

۲- یک اندیس J به سمت راست L برای نشان دادن مقدار z الحاق می‌کنیم.

۳- یک بالانویس $2S + 1$ به سمت چپ L برای نشان دادن چندگانگی مربوط به تصویرهای اسپین الحاقی می‌کنیم.

بنابراین برای مثال،

$${}^{2S+1}L_J = {}^2P_{3/2}$$

حالتی را با $j = \frac{3}{2}$ و $s = \frac{1}{2}$ و $l = 1$ نشان می‌دهد. برای یک الکترون منفرد، برچسب $2S + 1$ زائد بوده و همیشه برابر ۲ است. برای یک سیستم چند الکترونی، S و L برای اسپین کل و تکانه زاویه‌ای مدارای کل و J برای مجموع آنها به کار می‌رود. لذا در حالت پایه He ،

$${}^{2S+1}L_J = {}^1S_0$$

۱۵-۳- عملگرهای تانسوری کاهش ناپذیر

قبلاً عملگرهای اسکالر و برداری را بحث کردیم. یک عملگر اسکالر S ، تحت چرخش مثل یک اسکالر (عدد) تبدیل می‌شود، یعنی ناوردا باقی می‌ماند:

$$S \rightarrow S' = U^\dagger [R] S U [R] = S \quad (1-3-15)$$

با در نظر گرفتن چرخش‌های بی نهایت کوچک دلخواه می‌توانیم نتیجه بگیریم که

$$[J_i, S] = 0$$

یا در شکلی که بعداً به کار گرفته خواهد شد،

$$[J_\pm, S] = 0 \quad (2-3-15)$$

$$[J_z, S] = 0$$

مثال‌هایی از S ، هامیلتونی‌های ناوردای چرخشی مثل هامیلتونی کولنی یا نوسانگر همسانگرد هستند. یک عملگر برداری V به صورت مجموعه‌ای از سه عملگر (V_x, V_y, V_z) تعریف شد که به صورت مولفه‌های یک بردار در $V^3(R)$ تبدیل می‌یابند:

$$V_i \rightarrow V'_i = U^\dagger [R] V_i U [R] = \sum_j R_{ij} V_j \quad (3-3-15)$$

که در آن R ماتریس چرخش 3×3 معمولی است. با در نظر گرفتن چرخش‌های بی نهایت کوچک می‌توانیم نتیجه بگیریم که [معادله (۱۲-۴-۱۴)]:

$$[V_i, J_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} V_k \quad (4-3-15)$$

معادله (۱۵-۳-۳) را به شکلی معادل می‌نویسیم. با جاگذاری $R^{-1} = R^T$ به جای R در همه جا داریم

$$U [R] V_i U^\dagger [R] = \sum_j R_{ji} V_j \quad (5-3-15)$$

توجه کنید که در اینجا جمع روی اندیس اول R انجام می‌شود. این معادله به نظر خاص می‌رسد چون به معادلاتی شبیه معادله (۱۵-۳-۳) عادت داریم که در آنها جمع روی اندیس دوم قرار دارد. رابطه معادله

(۳-۳-۱۵) با (۵-۳-۱۵) به صورت زیر است. فرض کنید $|1\rangle$ و $|2\rangle$ و $|3\rangle$ کت‌های پایه در $V^3(R)$ و R یک عملگر چرخش روی آن باشد. اگر $|V\rangle$ برداری با مولفه‌های $\langle i|V\rangle = v_i$ باشد شکل چرخیده آن $\langle V'| = R|V\rangle$ دارای مولفه‌های

$$v'_i = \langle i|R|V\rangle = \sum_j \langle i|R|j\rangle \langle j|V\rangle = \sum_j R_{ij} v_j \quad (۶-۳-۱۵)$$

است. اگر بپرسیم که R چه کاری روی پایه انجام می‌دهد می‌بینیم که $\langle i'| = R|i\rangle$ ، که در آن

$$\langle i'| = R|i\rangle = \sum_j \langle j| \langle j|R|i\rangle = \sum_j R_{ji} \langle j| \quad (۷-۳-۱۵)$$

از آنجا که $R_{ji} = (R^{-1})_{ij}$ ، می‌بینیم که مولفه‌های بردار و بردارهای پایه به روش‌های «مخالف» تبدیل می‌یابند. معادله (۳-۳-۱۵) یک عملگر برداری را عملگری تعریف می‌کند که مولفه‌هایش تحت تبدیل $V_i \rightarrow U^+ V_i U$ مثل مولفه‌های بردار $|V\rangle$ تحت تبدیل $|V\rangle \rightarrow R|V\rangle$ تبدیل می‌یابند در حالی که معادله (۵-۳-۱۵) آنرا عملگری تعریف می‌کند که مولفه‌های آن، V_i ها، تحت تبدیل $V_i \rightarrow UV_i U^+$ مثل کت‌های $|i\rangle$ تحت تبدیل $|i\rangle \rightarrow R|i\rangle$ تبدیل می‌یابند. هر دو تعریف البته معادل هستند. تعریف اول در گذشته نقش عمده‌ای بازی کرده است و تعریف دوم در ادامه کار نقش عمده را ایفا خواهد کرد.

عملگرهای تانسوری

می‌دانیم که یک بردار $|V\rangle$ عنصری از $V^3(R)$ است یعنی می‌تواند به صورت

$$|V\rangle = \sum_{i=1}^3 v_i |i\rangle \quad (۸-۳-۱۵)$$

برحسب مولفه‌هایش، v_i ها، و کت‌های پایه $|i\rangle$ نوشته شود. یک تانسور رتبه - دو $|T^{(2)}\rangle$ عنصری از فضای حاصل ضرب مستقیم $V^3(R) \otimes V^3(R)$ پدید آمده به وسیله نه کت $|i\rangle \otimes |j\rangle$ است:

$$|T^{(2)}\rangle = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 t_{ij} |i\rangle \otimes |j\rangle \quad (۹-۳-۱۵)$$

t_{ij} ها مولفه‌های $|T^{(2)}\rangle$ در پایه $|i\rangle \otimes |j\rangle$ نامیده می‌شوند.

مثل مورد بردارها، یک عملگر تانسوری رتبه ۲، مجموعه‌ای از نه عملگر T_{ij} است که تحت تبدیل $T_{ij} \rightarrow U^+ T_{ij} U$ مثل مولفه‌های تانسوری T_{ij} یا به طور معادل تحت تبدیل $T_{ij} \rightarrow UT_{ij}U^+$ مثل کت‌های پایه $|i\rangle \otimes |j\rangle$ عکس‌العمل نشان می‌دهند. تانسورها و عملگرهای تانسوری رتبه $2 > n$ به شیوه مشابه تعریف می‌شوند (توجه کنید که یک بردار می‌تواند به عنوان یک تانسور رتبه ۱ در نظر گرفته شود). این تانسورها را تانسورهای دکارتی می‌نامیم.

اشیائی موسوم به عملگرهای تانسوری گروهی برای ما از اهمیت بیشتری برخوردارند. یک عملگر تانسوری گروهی رتبه k دارای $2k + 1$ مولفه T_k^q ، $q = +k, (k-1), \dots, -k$ ، است که هر یک تحت تبدیل

$T_k \xrightarrow{q} UT_k^q U^\dagger$ شبیه ویژه کت‌های تکانه زاویه‌ای $|kq\rangle = |j=k, m=q\rangle$ 'عکس‌العمل نشان می‌دهند:

$$U[R]T_k^q U^\dagger[R] = \sum_{q'} D_{q'q}^{(k)} T_k^{q'} \quad (10-3-15)$$

از آنجا که $(2k+1)$ کت $|kq\rangle$ به صورتی کاهش‌ناپذیر تبدیل می‌یابند عملگرهای T_k^q هم اینگونه هستند. به همین دلیل، این عملگرها، عملگرهای تانسوری کاهش‌ناپذیر نامیده می‌شوند. با در نظر گرفتن چرخش‌های بی‌نهایت کوچک، می‌توانیم از معادله (۱۵-۳-۱۰) استنتاج کنیم که (تمرین ۱۵-۳-۱):

$$[J_\pm, T_k^q] = \pm \hbar [(k \mp q)(k \pm q + 1)]^{1/2} T_k^{q \pm 1} \quad (11-3-15)$$

$$[J_z, T_k^q] = \hbar q T_k^q$$

توجه کنید که جابه‌جا کردن یک J با T_k^q شبیه این است که J روی کت $|kq\rangle$ اثر کند. چرا عملگرهای تانسوری کاهش‌ناپذیر مورد توجه هستند؟ اثر T_k^q را روی حالت $|\alpha l m\rangle$ در نظر بگیرید و اجازه بدهید حالت حاصله را بچرخانیم و ببینیم چه اتفاقی می‌افتد:

$$\begin{aligned} U[R]T_k^q |jm\rangle &= U[R]T_k^q U^\dagger[R]U[R]|jm\rangle \\ &= \sum_{q'} D_{q'q}^{(k)} T_k^{q'} \sum_{m'} D_{m'm}^{(j)} |jm'\rangle \\ &= \sum_{q'} \sum_{m'} D_{q'q}^{(k)} D_{m'm}^{(j)} T_k^{q'} |jm'\rangle \end{aligned} \quad (12-3-15)$$

می‌بینیم که $T_k^q |jm\rangle$ به چرخش‌ها مثل کت حاصل ضرب $|kq\rangle \otimes |jm\rangle$ عکس‌العمل نشان می‌دهد. بنابراین وقتی T_k^q را روی حالتی اثر می‌دهیم، تکانه زاویه‌ای (k, q) را به حالت اضافه می‌کنیم، به عبارتی دیگر، یک عملگر تانسوری کاهش‌ناپذیر T_k^q یک مقدار معین تکانه زاویه‌ای (k, q) را به حالتی که این عملگر روی آن اثر می‌کند، می‌دهد. این موضوع به ما امکان می‌دهد تا در مورد عناصر ماتریسی T_k^q بین ویژه حالت‌های تکانه زاویه‌ای چنین اظهار کنیم:

$$\langle \alpha' j' m' | T_k^q | \alpha j m \rangle = 0, \quad k+j \geq j' \geq |k-j|, \quad m' = m+q \quad (13-3-15)$$

دلیل این است که $T_k^q | \alpha j m \rangle$ فقط آن تکانه‌های زاویه‌ای را شامل می‌شود که می‌توانند با جمع کردن (j, m) و (k, q) به دست آیند، لذا $\langle \alpha' j' m' | T_k^q | \alpha j m \rangle$ بر $T_k^q | \alpha j m \rangle$ عمود است مگر اینکه (j', m') یکی از نتایج ممکن جمع (k, q) و (j, m) باشد. معادله (۱۵-۳-۱۳) مثالی از یک قاعده گزینش است.

$$\begin{aligned} |kq\rangle \rightarrow U[R]|kq\rangle &= \sum_{k'} \sum_{q'} |k'q'\rangle \langle k'q'|U[R]|kq\rangle \\ &= \sum_{q'} D_{q'q}^{(k)} |kq'\rangle \end{aligned}$$

اینک با شروع از عملگر تانسوری رتبه 0 به بررسی چند مثال می‌پردازیم. این عملگر فقط یک مولفه، T_0^0 دارد که مثل $|00\rangle$ تبدیل می‌یابد یعنی ناوردا باقی می‌ماند. بنابراین T_0^0 همان عملگر اسکالر S است که قبلاً بحث شد. قاعده گزینش ما بیان می‌کند که

$$\langle \alpha' j' m' | T_0^0 | \alpha j m \rangle = 0 \quad , \quad j = j', m = m' \quad \text{مگر} \quad (15-3-14)$$

حال T_1^q را در نظر بگیرید ($q = 1, 0, -1$). در اینجا سه شیء داریم که تحت چرخش‌ها به یکدیگر تبدیل می‌شوند. چون یک عملگر برداری V هم سه مولفه دارد که به صورت کاهش ناپذیر (چرا؟) به یکدیگر تبدیل می‌شوند، حدس می‌زنیم که ترکیب‌های خطی مولفه‌های عملگر برداری باید برابر هر T_1^q باشند. در واقع،

$$T_1^{\pm 1} = \mp \frac{V_x \pm iV_y}{2^{1/2}} \equiv V_1^{\pm 1} \quad (15-3-15)'$$

$$T_1^0 = V_z \equiv V_1^0$$

با داشتن معادله (15-3-15) و تعاریف فوق، به راحتی می‌شود ثابت کرد که $V_1^{\pm 1}$ و V_1^0 از معادله (15-3-11) با $k = 1$ و $q = \pm 1, 0$ پیروی می‌کنند. قاعده گزینش برای مثلاً V_x عبارتست از

$$\langle \alpha' j' m' | V_x | \alpha j m \rangle = \langle \alpha' j' m' | \frac{V_1^{-1} - V_1^1}{2^{1/2}} | \alpha j m \rangle \quad (15-3-16)$$

$$= 0 \quad , \quad j+1 \geq j' \geq |j-1|, \quad m' = m \pm 1 \quad \text{مگر}$$

(الف)

و همین طور

$$\langle \alpha' j' m' | V_z | \alpha j m \rangle = \langle \alpha' j' m' | V_1^0 | \alpha j m \rangle$$

$$= 0 \quad , \quad j+1 \geq j' \geq |j-1|, \quad m' = m \quad \text{مگر}$$

(15-3-16-ب)

همین که از رتبه 1 فراتر برویم دیگر امکان ندارد تا تانسورهای دکارتی و کروی با رتبه یکسان را برحسب یکدیگر بنویسیم. یک تانسور دکارتی رتبه n دارای 3^n مولفه است در حالی که یک تانسور کروی رتبه k دارای $(2k+1)$ مولفه است. برای $n=1$ و $n=0$ تانسورهای دکارتی تعداد مولفه‌های یکسانی با تانسورهای کروی به ترتیب رتبه $k=0$ و $k=1$ دارند و همین طور به صورت کاهش ناپذیر تبدیل می‌یابند. اما رتبه‌های بالاتر مثلاً رتبه 2 را در نظر بگیرید. تانسور T_2^q پنج مولفه دارد که به صورت کاهش ناپذیر تبدیل می‌یابند. تانسور T_{ij} نه مولفه دارد که به صورت کاهش پذیر تبدیل می‌یابند یعنی این امکان وجود دارد که ترکیبات خطی از T_{ij} ها تشکیل دهیم به طوری که برخی از آنها تحت چرخش‌ها هرگز با یکدیگر آمیخته (ترکیب) نشوند. یک ترکیب وجود دارد که ناورداست یعنی مثل T_0^0 تبدیل می‌یابد؛ سه ترکیب وجود دارد که مثل یک بردار، یا نظر به معادله (15-3-15)، مثل T_1^q تبدیل یافته و سرانجام پنج ترکیب وجود دارد که

نظیر T_2^q تبدیل می‌یابند. وقتی به مطالعه تبهگنی نوسانگر همسانگرد در صفحات بعد می‌پردازیم، خواهیم دید که این ترکیبات چه چیزهایی هستند. تانسورهای دکارتی رتبه بالاتر هم کاهش پذیرند. اکنون به قاعده گزینش، معادله (۱۵-۳-۱۳) بر می‌گردیم.

می‌توان یک گام جلوتر رفته و عناصر ماتریسی غیر صفر را به هم مرتبط کرد. مثال واقعی R_1^q ، عملگر مکان در شکل کروی، را در نظر بگیرید. با فرض نبودن اسپین (و لذا $\mathbf{J} = \mathbf{L}$)، داریم

$$\begin{aligned} & \langle \alpha_2 l_2 m_2 | R_1^q | \alpha_1 l_1 m_1 \rangle \\ &= \int R_{\alpha_2 l_2}^*(r) Y_{l_2}^{m_2}(\theta, \phi) r \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{1/2} Y^q R_{\alpha_1 l_1}(r) Y_{l_1}^{m_1}(\theta, \phi) r^2 dr d\Omega \\ &= \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{1/2} \int R_{\alpha_2 l_2}^* R_{\alpha_1 l_1} r^2 dr \cdot \int Y_{l_2}^{m_2} Y^q Y_{l_1}^{m_1} d\Omega \\ &= \langle \alpha_2 l_2 | R_1 | \alpha_1 l_1 \rangle \cdot \langle l_2 m_2 | 1q, l_1 m_1 \rangle \end{aligned} \tag{۱۷-۳-۱۵}$$

که در آن انتگرال شعاعی $\langle \alpha_2 l_2 | R_1 | \alpha_1 l_1 \rangle \equiv$ عنصر ماتریسی کاهش یافته نامیده می‌شود. توجه کنید که عنصر کاهش یافته مستقل از m_1 ، m_2 و q است؛ وابستگی به این متغیرها در ضریب کلپش - گوردن قرار دارد.

با ملاحظه این مثال واقعی، اکنون نتیجه را تعمیم می‌دهیم. در حالت کلی،

$$\langle \alpha_2 j_2 m_2 | T_k^q | \alpha_1 j_1 m_1 \rangle = \langle \alpha_2 j_2 | T_k | \alpha_1 j_1 \rangle \cdot \langle j_2 m_2 | kq, j_1 m_1 \rangle \tag{۱۸-۳-۱۵}$$

این، قضیه ویگنر-اکارت نامیده می‌شود. این رابطه، وابستگی عنصر ماتریسی به جهت‌گیری فضایی (به m_2 ، m_1 و q) را از بقیه جدا می‌کند. عبارت جلویی در (۱۵-۳-۱۸) تماماً بر حسب ضرایب CG نوشته می‌شود.

تمرین ۱۵-۳-۱: الف- نشان دهید که معادله (۱۵-۳-۱۱)، وقتی چرخش‌های بی نهایت کوچک در نظر گرفته شوند، از معادله (۱۵-۳-۱۰) به دست می‌آید (راهنمایی: $\delta \theta \cdot D_{q'q}^{(k)} = \langle kq' | I - (i \delta \theta \cdot \mathbf{J}) / \hbar | kq \rangle$ را در امتداد مثلاً جهت x در نظر بگیرید و سپس نتیجه را به جهت‌های دیگر تعمیم دهید).

ب- ثابت کنید که تانسور کروی V_1^q ساخته شده از \mathbf{V} ، به صورتی که در معادله (۱۵-۳-۱۵) است، از معادله (۱۵-۳-۱۱) پیروی می‌کند.

تمرین ۱۵-۳-۲: ادعا می‌شود که $\sum_q (-1)^q S_k^q T_k^{(-q)}$ یک عملگر اسکالر است.

الف- برای $k=1$ ثابت کنید که این عملگر همان $\mathbf{S} \cdot \mathbf{T}$ است.

ب- با در نظر گرفتن عکس‌العمل آن به یک چرخش، آنرا در حالت کلی ثابت کنید [راهنمایی:

$$[D_{-m, -m'}^{(j)} = (-1)^{m-m'} (D_{m, m'}^{(j)})]^*$$

۱- توجه کنید که R_1^q عملگرتانسوری و $R_{0l}(r)$ قسمت شعاعی تابع موج است. ما برای به‌دست آوردن R_1^q از معادله (۱۲-۵-۴۲) هم استفاده کرده‌ایم.

تمرین ۱۵-۳-۳: الف- با استفاده از $\langle jj | jj, 10 \rangle = [j / (j + 1)]^{1/2}$ نشان دهید که

$$\langle \alpha j || J_1 || \alpha' j' \rangle = \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{jj'} \hbar [j(j+1)]^{1/2}$$

ب- با استفاده از $\mathbf{J} \cdot \mathbf{A} = J_z A_z + \frac{1}{2}(J_- A_+ + J_+ A_-)$ (که در آن $A_{\pm} = A_x \pm iA_y$) استدلال کنید که

$$\langle \alpha' j m' | \mathbf{J} \cdot \mathbf{A} | \alpha j m \rangle = c \langle \alpha' j | | A | | \alpha j \rangle$$

که در آن c ثابتی مستقل از α ، α' و \mathbf{A} است. نشان دهید که $c = \hbar [j(j+1)]^{1/2} \delta_{m,m'}$.

ج- با توجه به مطالب فوق نشان دهید که

$$\langle \alpha' j m' | A^q | \alpha j m \rangle = \frac{\langle \alpha' j m' | \mathbf{J} \cdot \mathbf{A} | \alpha j m \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle j m' | J^q | j m \rangle \quad (15-3-19)$$

تمرین ۱۵-۳-۴: الف- سیستمی را در نظر بگیرید که تکانه زاویه‌ای اش شامل دو قسمت \mathbf{J}_1 و \mathbf{J}_2 بوده و گشتاور مغناطیسی اش عبارتست از

$$\boldsymbol{\mu} = \gamma_1 \mathbf{J}_1 + \gamma_2 \mathbf{J}_2$$

در یک حالت $|j m, j_1 j_2\rangle$ با استفاده از معادله (۱۵-۳-۱۹) نشان دهید که

$$\langle \mu_x \rangle = \langle \mu_y \rangle = 0$$

$$\langle \mu_z \rangle = m \hbar \left[\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2} + \frac{(\gamma_1 - \gamma_2) j_1(j_1 + 1) - j_2(j_2 + 1)}{2j(j+1)} \right]$$

ب- این مطلب را برای مسئله یک پروتون ($g = 5.6$) واقع در حالت ${}^2P_{1/2}$ به کار برده، نشان دهید که $\langle \mu_z \rangle = \pm 0.26$ مگنتون هسته‌ای است.

ج- برای الکترون واقع در حالت ${}^2P_{1/2}$ نشان دهید که $\langle \mu_z \rangle = \pm 1$ مگنتون بور است.

تمرین ۱۵-۳-۵: نشان دهید که $\langle j m | T_k^q | j m \rangle = 0$ است اگر که $k > 2j$ باشد.

۱۵-۴- توضیح برخی تبهگنی‌های «تصادفی»

در این بخش، تبهگنی حالت‌های l متفاوت در یک n معین در اتم هیدروژن و نوسانگر همسانگرد (بخش ۱۲-۶) توضیح داده خواهد شد. اما ابتدا باید تکلیف این را مشخص کنیم که منظور از توضیح تبهگنی چیست. برای مثال تبهگنی $(2l+1)$ گانه حالت‌های m مختلف را در یک l معین در این دو مسئله در نظر بگیرید. این تبهگنی را برحسب ناوردایی چرخشی هامیلتونی به صورت زیر توضیح می‌دهیم:

(۱)- برای هر چرخش $R(\theta)$ روی $V^3(R)$ یک عملگر یکانی $U[R]$ وجود دارد که عملگرهای برداری را می‌چرخاند

$$U^\dagger V_i U = \sum_j R_{ij} V_j \quad (15-4-1)$$

اگر هامیلتونی فقط به «طول‌های» عملگرهای برداری مختلف مثل P ، R ، L و غیره بستگی داشته باشد، آنگاه از نظر چرخشی ناورد است:

$$U^\dagger H U = H \quad (15-4-2)$$

یعنی چرخش‌ها، تقارن‌های H هستند. در مورد دو مسئله مذکور وضعیت بدین شکل است.
(۲) - اگر این رابطه را در شکل بی‌نهایت کوچک بنویسیم، نتیجه می‌گیریم که

$$[H, L_i] = 0, \quad i = 1, 2, 3 \quad (15-4-3)$$

که L_i ها مولدهای چرخش هستند. برای هر پارامتر آزاد که یک چرخش $(\theta_x, \theta_y, \theta_z)$ را تعریف کند یک مولد متناظر وجود دارد و همگی آنها پایسته هستند.
(۳) - از سه مولد، عملگر

$$L_- = L_x - iL_y \quad (15-4-4)$$

را می‌سازیم که مقدار m را پایین می‌برد:

$$L_- |l, m\rangle = c |l, m-1\rangle \quad (15-4-5)$$

از آنجا که $[L, H] = 0$ است، عمل پایین بردن انرژی را تغییر نمی‌دهد.

این، تبهگنی در m را توضیح می‌دهد چون با شروع از حالت با بزرگترین m در یک l معین می‌توانیم تا پایین‌ترین m برویم بدون اینکه انرژی تغییر کند (با L_+ هم می‌توانیم به همین کیفیت کار کنیم). این کار را برای دو مسئله مورد بحث انجام می‌دهیم - مرحله‌ای که طی می‌کنیم عبارتند از:
مرحله (۱): تقارن‌های H را در کنار ناوردایی چرخشی مشخص می‌کنیم.
مرحله (۲): مولدهای تبدیلات تقارنی را پیدا می‌کنیم.
مرحله (۳): یک عملگر از این مولدها می‌سازیم که می‌تواند l را در مورد هیدروژن یک واحد و در مورد نوسانگر ۲ واحد تغییر دهد.

هیدروژن

مراحل (۱) و (۲). متأسفانه، تنها تقارن مشخص هامیلتونی کولنی، ناوردایی چرخشی است. تقارن دیگر بعد از این که ما به دنبال هستیم در فضای تکانه کاملاً واضح است ولی ما آن را بحث نخواهیم کرد. اما در این صورت چگونه می‌توانیم به مرحله (۲) برویم؟ پاسخ در این حقیقت نهفته است که مولدهای این تقارن، کمیت‌های پایسته هستند. قبلاً دیده‌ایم که مسئله کولنی یک کمیت پایسته اضافی دارد و آن بردار رانگ - لنز است. بنابراین سه مولفه

$$\mathbf{N} = \frac{1}{2m} (\mathbf{P} \times \mathbf{L} - \mathbf{L} \times \mathbf{P}) - \frac{e^2 \mathbf{R}}{(X^2 + Y^2 + Z^2)^{1/2}} \quad (15-4-6)$$

می‌بایست مولدهای این تبدیلات تقارنی اضافی باشند (یا ترکیبات خطی از آنها).
مرحله (۳): از آنجا که می‌خواهیم در مورد تکانه زاویه‌ای صحبت کنیم، N را در شکل کروی می‌نویسیم:

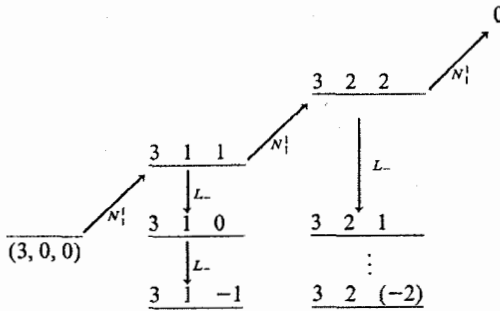
$$N_i^{\pm 1} = \mp \frac{N_x \pm iN_y}{2^{1/2}} \quad (۷-۴-۱۵)$$

$$N_i^0 = N_z$$

حالت $|n \ell\rangle$ اتم H را در نظر بگیرید. با تأثیر N_i^1 روی آن به حالت دیگری با همان انرژی یا همان n (چون $[H, N_i^1] = 0$ است) اما با تکانه زاویه‌ای بالاتر می‌رسیم: $N_i^1 |n \ell\rangle$ به صورت $|l+1, l+1\rangle \otimes |11\rangle$ رفتار می‌کند. بنابراین

$$N_i^1 |n, l, l\rangle = c |n, l+1, l+1\rangle \quad (۸-۴-۱۵)$$

(معلوم خواهد شد که وقتی $l = l_{\max} = n - 1$ شود c صفر می‌شود). با استفاده از N_i^1 می‌توانیم همه حالت‌های l مختلف را در یک n معین به هم وصل کرده و با استفاده از L_- همه حالت‌های m را در یک l معین به هم وصل کنیم. برای مثال در $n = 3$ ، شبکه‌ای که حالت‌های تبهگن را به هم وصل می‌کند به صورت زیر است:



نوسانگر

مرحله (۱): برای یافتن تقارن اضافی H ، نگاهی دیگر به آن می‌اندازیم:

$$H = \frac{P_x^2 + P_y^2 + P_z^2}{2\mu} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 (X^2 + Y^2 + Z^2) \quad (۹-۴-۱۵)$$

می‌گوییم H از نظر چرخشی ناورد است چون فقط به مربع طول بردارهای (حقیقی) \mathbf{P} و \mathbf{R} بستگی دارد. حال H را به شکلی می‌نویسیم که تقارن اضافی را نمایان کند. یک بردار مختلط (عملگر) تعریف می‌کنیم که قسمت‌های حقیقی و موهومی آن متناسب با \mathbf{R} و \mathbf{P} هستند:

$$\mathbf{a} = \frac{1}{(2\mu\omega\hbar)^{1/2}} (\mu\omega\mathbf{R} + i\mathbf{P}) \quad (۱۰-۴-۱۵)$$

و الحاقی آن، که مولفه هایش مزدوج مختلط‌های مولفه‌های \mathbf{a} هستند:

$$\mathbf{a}^\dagger = \frac{1}{(2\mu\omega\hbar)^{1/2}} (\mu\omega\mathbf{R} - i\mathbf{P}) \quad (11-4-15)$$

مولفه‌های \mathbf{a} و \mathbf{a}^\dagger همان عملگرهای پایین برنده و بالا برنده برای نوسانگرهای x ، y و z هستند و از

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}$$

پیروی می‌کنند. برحسب \mathbf{a} و \mathbf{a}^\dagger ،

$$H = \hbar\omega(\mathbf{a}^\dagger \cdot \mathbf{a} + 3/2) \quad (12-4-15)$$

بنابراین می‌بینیم که H تابعی از مربع طول یک بردار سه بعدی مختلط \mathbf{a} است. بنابراین تحت چرخش‌ها در $V^3(C)$ ، یعنی تحت تبدیلات یکانی در $V^3(C)$ ، ناورد است. درست همان‌طور که چرخش‌ها را در $V^3(R)$ با R نشان دادیم، اینجا را هم با C نشان می‌دهیم.^۱ برای هر «چرخش» C (تبدیل یکانی) در $V^3(C)$ عملگرهای فضای هیلبرت $U[C]$ موجود خواهند بود که عملگر برداری مختلط \mathbf{a} را می‌چرخانند:

$$a_i \rightarrow a'_i = U^\dagger[C] a_i U[C] = \sum_j C_{ij} a_j \quad (13-4-15)$$

که در آن C_{ij} ها عناصر ماتریسی عملگر یکانی C در $V^3(C)$ هستند. از آنجا که H فقط به مربع نرم \mathbf{a} بستگی دارد،

$$U^\dagger[C] H U[C] = H \quad (14-4-15)$$

مرحله (۲): چند مولد $U[C]$ وجود دارند و آنها کدامند؟ پاسخ قسمت اول، تعداد پارامترهایی است که یک چرخش را در $V^3(C)$ تعریف می‌کنند یعنی تعداد پارامترهای مستقل در ماتریس یکانی C ، 3×3 . هر چنین ماتریسی می‌تواند به صورت

$$C = e^{i\Omega} \quad (15-4-15)$$

نوشته شود که Ω یک ماتریس هرمیتی 3×3 است. به راحتی می‌شود دید که Ω سه عنصر قطری حقیقی و سه عنصر غیر قطری مختلط مستقل دارد لذا به سه پارامتر حقیقی بستگی دارد. بنابراین نه مولد پایسته وجود دارد. آنها کدامند؟ به جای استنتاج آنها (همان‌طور که L ها را با در نظر گرفتن اثر چرخش‌های بی نهایت کوچک روی ψ استنتاج کردیم) این نه کمیت پایسته را با امتحان کردن آنها می‌نویسیم. واضح است که در مورد نوسانگر، نه عملگر،

$$T_{ij} = a_i^\dagger a_j \quad (i, j = x, y, \text{ or } z) \quad (16-4-15)$$

۱- اینجا را در واقع باید U بنامیم اما این کار نمادگذاری را پیچیده می‌کند.

پایسته هستند. اثبات این ساده است: a_j یک کوانتوم z را نابود کرده و a_j^\dagger یک کوانتوم i خلق می‌کند و این انرژی را ناوردانگه می‌دارد چون نوسانگرهای x, y, z دارای ω یکسان هستند (همسانگردی). برای اینکه ببینیم T_{ij} چه اثری روی تبهگنی l دارد می‌بایست T_{ij} را به قسمت‌های کاهش پذیرش تفکیک کنیم. ابتدا ترکیب

$$\text{Tr } T = T_{xx} + T_{yy} + T_{zz} = a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y + a_z^\dagger a_z = \mathbf{a}^\dagger \cdot \mathbf{a} \quad (15-4-17)$$

را در نظر بگیرید. این به‌وضوح یک اسکالر است یعنی مثل T_0^0 تبدیل می‌یابد. اینکه با H جابه‌جا می‌شود، تبهگنی در l را توضیح نمی‌دهد چون هیچ تکانه زاویه‌ای «حمل» نمی‌کند. در واقع $\mathbf{a}^\dagger \cdot \mathbf{a}$ صرف‌نظر از یک ضرب مقیاس و یک ثابت اضافی همان H است. اکنون سه ترکیب پادمتقارن

$$\begin{aligned} T_{xy} - T_{yx} &= a_x^\dagger a_y - a_y^\dagger a_x = (\mathbf{a}^\dagger \times \mathbf{a})_z \\ T_{yz} - T_{zy} &= (\mathbf{a}^\dagger \times \mathbf{a})_x \\ T_{zx} - T_{xz} &= (\mathbf{a}^\dagger \times \mathbf{a})_y \end{aligned} \quad (15-4-18)$$

را در نظر بگیرید. اینها به‌وضوح به‌صورت بردار $\mathbf{V} = \mathbf{a}^\dagger \times \mathbf{a}$ تبدیل می‌یابند. در اینجا یک مشکل به‌نظر می‌رسد. فرض کنید عملگر $V_1^1 = -(V_x + iV_y)/2^{1/2}$ را بسازیم. انتظار داریم که مثل معادله (15-4-18)،

$$V_1^1 |n, l\rangle = c |n, l+1, l+1\rangle \quad (15-4-19)$$

این بدین معنی بود که حالت‌هایی که به اندازه یک واحد در l متفاوتند تبهگن هستند. اما از بخش ۱۲-۶ می‌دانیم که حالت‌هایی که به اندازه دو واحد در l تفاوت دارند تبهگن هستند. پس چطور از این تنگنا بیرون برویم؟ برای این کار می‌بایست هر یک از مولفه‌های عملگر $\mathbf{V} = \mathbf{a}^\dagger \times \mathbf{a}$ را بر حسب \mathbf{R} و \mathbf{P} پیدا کنیم. اگر این کار را بکنیم خواهیم دید که c در معادله (15-4-19) در واقع صفر بوده و پارادوکس (تناقض) رفع خواهد شد.

اکنون $5=3-1-9$ درجه آزادی از ۹ درجه آزادی اولیه T_{ij} خواهیم داشت. استدلال می‌کنیم که اینها باید به‌صورت کاهش ناپذیر تبدیل یابند. چرا؟ فرض کنید عکس مطلب درست است. آنگاه باید این امکان باشد که تانسورهای کاهش‌ناپذیر با کمتر از ۵ مولفه از این درجات آزادی باقی مانده تشکیل دهیم. تنها امکان تانسورهای با ۱ یا ۳ مولفه، یعنی اسکالرها و بردارها، هستند. اما می‌دانیم که با داشتن دو بردار \mathbf{a} و \mathbf{a}^\dagger فقط یک اسکالر $\mathbf{a}^\dagger \cdot \mathbf{a}$ و فقط یک بردار $\mathbf{a}^\dagger \times \mathbf{a}$ می‌توانیم بسازیم که از هر دوی آنها قبلاً استفاده کرده‌ایم. بنابراین به این نتیجه سوق پیدا می‌کنیم که پنج درجه آزادی باقی مانده ترکیبات خطی از T_2^q هستند. معمولاً به این شیء، تانسور چهار قطبی Q_2^q گفته می‌شود. آنچه در اینجا نیاز داریم مولفه Q_2^2 است، چون

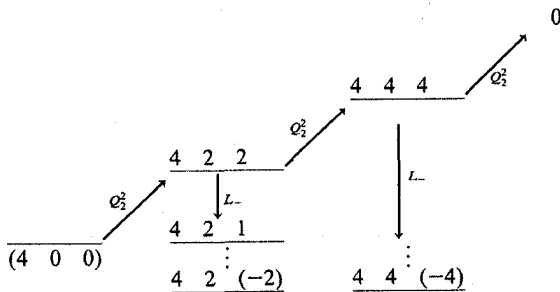
$$Q_2^2 |n, l\rangle = c |n, l+2, l+2\rangle \quad (15-4-20)$$

که تبهگنی در l را در هر n توضیح می دهد (وقتی $l = n = l_{\max}$ باشد، c صفر می شود).

برای کسب تجربه، عملگر Q_2^2 را صریحاً بر حسب $a_i^+ a_j$ می سازیم. \mathbf{a} و \mathbf{a}^\dagger عملگرهای برداری هستند که می توانیم عملگرهای تانسوری a_i^q و $(a^+)^q$ را، که شبیه $|1, q\rangle$ رفتار می کنند، از آنها بسازیم. در این صورت حاصل ضرب $a_i^+ a_j$ شبیه حاصل ضرب مستقیم (ترکیبات خطی) دو شیء اسپین-۱ رفتار می کند. چون Q_2^2 شبیه $|22\rangle$ رفتار می کند و $|22\rangle = |11\rangle \otimes |11\rangle$ ، نتیجه می گیریم که

$$\begin{aligned} Q_2^2 &= (a^\dagger)_i (a_i) \\ &= \left(\frac{a_x^\dagger + ia_y^\dagger}{2^{1/2}} \right) \left(\frac{a_x + ia_y}{2^{1/2}} \right) \quad (21-4-15) \\ &= \frac{1}{2} [a_x^\dagger a_x - a_y^\dagger a_y + i(a_x^\dagger a_y + a_y^\dagger a_x)] \end{aligned}$$

دیگر مولفه های Q_2^q می توانند با تکنیک های مشابه ساخته شوند (با جمع تکانه های زاویه ای $1 \otimes 1$ به ۲ می رسم). با شروع از کوچکترین مقدار l در هر n (یعنی ۰ یا ۱) می توانیم با گام های ۲ بالا رفته و به $l = n$ نقطه ای که در آن c در معادله (۲۰-۴-۱۵) صفر خواهد شد، برسیم. شبکه برای $n = 4$ در زیر نشان داده می شود



در اینجا توضیح تبهگنی نوسانگر کامل می شود.

جواب های ذره - آزاد

جواب های ذره آزاد بخش ۱۲-۶ را به کمک بحث قبلی امتحان می کنیم. در اینجا باز هم موردی داریم که در آن، حالت های l متفاوت، در واقع یک تعداد نامتناهی از آنها، در هر انرژی $E = \hbar^2 k^2 / 2\mu$ تبهگن هستند. اما این تبهگنی، «تصادفی» نیست چون تقارن اضافی هامیلتونی ذره آزاد، یعنی ناوردایی انتقالی، واضح است. بنابراین یک عملگر برداری پایسته، \mathbf{P} ، داریم که می توانیم P_+ را از آن بسازیم، که می تواند l را یک واحد بالا ببرد. لذا با داشتن حالت دارای $l = m = 0$ ، می توانیم به اندازه l آنرا بالا ببریم:

$P_+ = P_x + iP_y$ ، صرف نظر از یک ضریب مقیاس $(-2^{1/2})$ ، که خواص چرخشی آن را تغییر نمی دهد، همان P_1^1 است.

$$|kll\rangle = c(P_+)^l |k00\rangle \quad (22-4-15)$$

که c ثابت بهنجارش است.

به‌خاطر بیاورید که در پایه مختصه به‌دست آوردن تابع موج زیر ساده بود:

$$|k00\rangle \rightarrow \psi_{k00} = \frac{U_0(\rho)}{\rho} Y_0^0 \quad (23-4-15)$$

که در آن $\rho = kr$ و $U_0(\rho)$ ، $\sin \rho$ یا $-\cos \rho$ (جواب‌های منظم یا نامنظم) است. به‌راحتی می‌شود ثابت کرد که

$$P_+ |k00\rangle \xrightarrow{\text{coordinate basis}} -i\hbar(x+iy) \frac{1}{r} \cdot \frac{d}{dr} \left[\frac{U_0(\rho)}{\rho} \right] Y_0^0 \quad (24-4-15)$$

$$= C_1(x+iy) \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left[\frac{U_0(\rho)}{\rho} \right]$$

که C_1 همه ضرایبی را که هیچ وابستگی به ρ ندارند در خود جذب کرده است. اگر یک بار دیگر P_+ را اثر داده و از $[P_+, R_+] = 0$ استفاده کنیم (که $R_+ = R_x + iR_y \propto R_l^+$ ،

$$(P_+)^2 |k00\rangle \rightarrow C_2(x+iy)^2 \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right)^2 \frac{U_0(\rho)}{\rho} \quad (25-4-15)$$

و سرانجام

$$(P_+)^l |k00\rangle \rightarrow \psi_{kll} = C_l(x+iy)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \frac{U_0(\rho)}{\rho}$$

$$= \tilde{C}_l (\sin \theta)^l e^{il\phi} \rho^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \frac{U_0(\rho)}{\rho} \quad (26-4-15)$$

$$= \tilde{C}_l Y_l^l \rho^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \frac{U_0(\rho)}{\rho}$$

$$= R_l Y_l^l$$

که در آن

$$R_l = \tilde{C}_l \rho^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \frac{U_0(\rho)}{\rho} = \tilde{C}_l \rho^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l R_0(\rho) \quad (27-4-15)$$

اگر $\tilde{C}_l = (-1)^l$ قرار دهیم این با معادله (۱۲-۶-۲۹) توافق خواهد داشت.

۱۶-۱- روش وردشی

گاهی اوقات پیدا کردن جواب‌های دقیق مسئله ویژه مقدراری هامیلتونی غیرممکن است. در این صورت به روش‌های تقریبی، که برخی از آنها در این فصل و فصول بعدی توصیف خواهند شد، متوسل می‌شویم. در این بخش چند مثال را بررسی می‌کنیم که روش وردشی را توضیح می‌دهند. نقطه شروع ما نامساوی

$$E[\psi] \equiv \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0 \quad (1-1-16)$$

است که E_0 کمترین ویژه مقدار H ، یعنی انرژی حالت پایه است. اگر چه این نتیجه قبلاً اثبات شده است اما ایده پشت سر آنرا یادآوری می‌کنیم. $E[\psi]$ مقدار میانگین انرژی در حالت $|\psi\rangle$ است. این نامساوی بیان می‌کند که مقدار میانگین نمی‌تواند کمتر از پایین‌ترین مقدراری باشد که در متوسط وارد می‌شود. به‌طور رسمی‌تر، اگر $|\psi\rangle$ برحسب ویژه توابع $|E_n\rangle$ هامیلتونی H بسط داده شود،

$$E[\psi] = \frac{\sum E_n \langle E_n | \psi \rangle^2}{\sum \langle E_n | \psi \rangle^2} \geq \frac{E_0 \sum \langle E_n | \psi \rangle^2}{\sum \langle E_n | \psi \rangle^2} = E_0 \quad (2-1-16)$$

این نامساوی روشی (حداقل در اصل) برای تعیین انرژی و ویژه کت حالت پایه پیشنهاد می‌کند. ما همه کت‌های فضای هیلبرت را یک به یک برداشته و جدولی از $E[\psi]$ های متناظر تشکیل می‌دهیم. در پایان، پایین‌ترین ثبت و کت همراه آن را انتخاب می‌کنیم. واضح است که این یک الگوریتم عملی نیست. آنچه در عمل انجام می‌شود، در نظر گرفتن یک زیر مجموعه (نه لزوماً یک زیر فضا) از بردارهایی است که به‌وسیله متغیرها $(\alpha, \beta, \gamma, \dots)$ پارامتری شده و دارای ویژگی‌های عمومی مورد انتظار از کت حالت پایه صحیح هستند. در این جستجوی محدود، $E[\psi]$ به یک تابع از پارامترها، $E(\alpha, \beta, \dots)$ ، تقلیل می‌یابد. سپس مقادیر $(\alpha_0, \beta_0, \dots)$ را پیدا می‌کنیم که E را کمینه کنند. این $E(\alpha_0, \beta_0, \dots)$ کمینه یک کران بالا روی E_0 ایجاد می‌کند. نام این کار، پیدا کردن پایین‌ترین کران بالا برای یک مقدار معین از کار است. اگر H معین و مثبت باشد، $E_0 \geq 0$ شده، و ما قادر خواهیم بود تا E_0 را به گسترده $E(\alpha_0, \beta_0, \dots) \geq E_0 \geq 0$ محدود کنیم.

به عنوان مثال مسئله ذره در پتانسیل $V(x) = \lambda x^4$ را در نظر بگیرید. در اینجا جنبه‌ها و ویژگی‌هایی وجود دارند که از حالت پایه انتظار داریم. تابع موج پاریته معین خواهد داشت چون تابع موج حالت پایه هیچ گرهی نخواهد داشت (گره‌های بیشتر ← تحرک بیشتر ← انرژی جنبشی بیشتر)، و دارای پاریته زوج بوده و در $x = 0$ تیز خواهد بود تا $\langle V \rangle$ را کمینه کند و البته وقتی $|x| \rightarrow \infty$ میل می‌کند صفر خواهد شد. یک تابع آزمایشی که همه این جنبه‌ها را دارد (و همین‌طور مشتق‌گیری و انتگرال‌گیری از آن آسان است) عبارتست از

$$\psi(x, \alpha) = e^{-\alpha x^2/2} \quad (3-1-16)$$

که α یک پارامتر آزاد است که پهنای گوسین را مشخص می‌کند. انرژی به صورت تابعی از α برابر است با

$$E(\alpha) = \int e^{-\alpha x^2/2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \lambda x^4 \right) e^{-\alpha x^2/2} dx \Big/ \int e^{-\alpha x^2} dx = \frac{\hbar^2 \alpha}{4m} + \frac{3\lambda}{4\alpha^2}$$

در اینجا رقابت آشنایی بین جملات انرژی جنبشی و انرژی پتانسیل می‌بینیم. اولی می‌خواهد $\alpha \rightarrow 0$ میل کند به طوری که تابع موج پهن شده و فقط مولفه‌های طول موج بزرگی (تکانه کوچک) داشته باشد در حالی که دومی می‌خواهد $\alpha \rightarrow \infty$ میل کند به طوری که تابع موج مانند یک میخ تیز باریک در نزدیکی $x = 0$ ، جایی که پتانسیل کمینه است، شود. نقطه بهینه، که هر دو اثر را داشته باشد، عبارتست از

$$\alpha_0 = \left(\frac{6m\lambda}{\hbar^2} \right)^{1/3} \quad (4-1-16)$$

انرژی متناظر برابر است با

$$E(\alpha_0) = \frac{3}{8} \left(\frac{6\hbar^4 \lambda}{m^2} \right)^{1/3} \quad (5-1-16)$$

چون H معین و مثبت است نتیجه می‌شود که

$$0 \leq E_0 \leq E(\alpha_0) \quad (6-1-16)$$

بهترین تقریب برای تابع موج حالت پایه (بین همه گوسین‌ها) عبارت از $\psi(x, \alpha_0) = \exp(-\frac{1}{2}\alpha_0 x^2)$ است.

البته نامساوی (۶-۱-۱۶) مبهم است، اما سودمندی آن به این بستگی دارد که چقدر $E(\alpha_0)$ به E_0 نزدیک باشد. محاسبه ما این را به ما نمی‌گوید. همه آنچه که ما می‌دانیم این است که چون ما به پاریته، گره‌ها و غیره توجه کردیم، کران بالای ما $E(\alpha_0)$ ، پایین‌تر از آن مقداری است که به وسیله فردی که توابع آزمونش دارای پاریته فرد و ۱۵ گره باشد به دست می‌آید. برای مثال اگر $V(x)$ به جای λx^4 ، $\frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ می‌بود، $\alpha_0 = (m\omega/h)^{1/2}$ و $E(\alpha_0) = \hbar\omega/2$ به دست می‌آمد. اگر چه این جواب دقیق است اما محاسبه ما این را

به ما نمی‌گفت. روش برآورد کیفیت کران به‌دست آمده، تلاش برای پایین‌تر آوردن آن از طریق در نظر گرفتن تابع آزمونی با تعداد پارامترهای بیشتر است. اگر این کار موجب پایین آوردن اساسی کران شود به کار خود ادامه می‌دهیم. از سوی دیگر اگر هنگام تلاش برای استفاده از توابع آزمون بهتر جهت پایین آوردن کران با یک «مقاومت» مواجه شدیم باید تردید کنیم که E_0 نباید خیلی پایین‌تر باشد. در مورد $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ ، نهایتاً دیده خواهد شد که هیچ راهی برای رفتن به پایین‌تر از $E(\alpha_0) = \hbar\omega/2$ وجود ندارد.

اعتقاد ما به روش وردشی از اجرای آن در مواردی که جواب دقیق به‌صورت تحلیلی یا تجربی از قبل معلوم است ناشی می‌شود. دو مثال را بررسی می‌کنیم. اولی مثال الکترون در پتانسیل کولنی $V = -e^2/r$ است. انتظار داریم که تابع موج حالت پایه دارای هیچ تکانه زاویه‌ای و هیچ گرهی نباشد و وقتی $r \rightarrow 0$ میل می‌کند مثل r^0 رفتار کرده و وقتی $r \rightarrow \infty$ میل می‌کند صفر شود. از این رو $\psi(r, \theta, \phi, \alpha) = \exp(-\alpha r^2)$ انتخاب می‌کنیم.^۱ نتیجه اینکه (با نادیده گرفتن متغیرهای زاویه‌ای بی‌تأثیر)،

$$E(\alpha) = \int \left[e^{-\alpha r^2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} - \frac{e^2}{r} \right) e^{-\alpha r^2} \right] r^2 dr \Bigg/ \int e^{-2\alpha r^2} r^2 dr \quad (7-1-16)$$

$$= \frac{3\hbar^2\alpha}{2m} - \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} 2e^2\alpha^{1/2} \quad (8-1-16)$$

که به‌وسیله

$$\alpha_0 = \left(\frac{me^2}{\hbar^2}\right)^2 \cdot \frac{8}{9\pi} \quad (9-1-16)$$

کمینه می‌شود. پس کران بالایی برابر است با

$$E(\alpha_0) = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{8}{3\pi} = -0.85 \text{ Ry} \quad (10-1-16)$$

که کمی بالاتر از^۲ انرژی صحیح است. تابع موج درست البته یک گوسین نیست اما ویژگی‌ها و جنبه‌های کلی آنها یکسان هستند. برای مثال $\psi(r, \alpha_0) = e^{-\alpha_0 r^2}$ عدم قطعیت $\Delta X = (9\pi/32)^{1/2} a_0 = 0.94 a_0$ (شعاع بوهر) است.^۳ مثال بعدی مربوط به حالت پایه He است. با نادیده گرفتن حرکت هسته ($m/M \rightarrow 0$)، هامیلتونی در پایه مختصه عبارت می‌شود از

۱- می‌توانستیم $e^{-\alpha r}$ هم انتخاب کنیم که جواب دقیق را به‌دست می‌داد. اما اجازه دهید این کار را نکنیم.

۲- به‌خاطر داشته باشید که در اینجا به انرژی‌های منفی می‌پردازیم.

۳- این توافق بسیار اتفاقی است. در حالت کلی روش وردشی تقریب‌های بسیار بهتری برای انرژی‌ها نسبت به توابع موج فراهم می‌کند. دلیل آن به زودی معلوم می‌شود.

$$H \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}} \quad (11-1-16)$$

که r_1 و r_2 مختصه‌های شعاعی دو الکترون و r_{12} فاصله شعاعی بین آنهاست. قبلاً دیدیم که اگر دافعه متقابل (e^2/r_{12}) نادیده گرفته شود، تابع موج حالت پایه

$$\psi = \psi_{100}(\mathbf{r}_1) \psi_{100}(\mathbf{r}_2) \quad (12-1-16)$$

است که در آن تابع موج اسپینی تک‌تایی حذف شده و ψ_{100} تابع موج هیدروژن-گونه با $e^2 \rightarrow Ze^2$ است:

$$\psi_{100} = \left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} e^{-Zr/a_0} \quad (Z=2) \quad (13-1-16)$$

در نتیجه

$$\psi = \frac{Z^3}{\pi a_0^3} e^{-Z(r_1+r_2)/a_0} \quad (Z=2) \quad (14-1-16)$$

انرژی مربوط به این تصویر ساده شده برابر است با:

$$E = 2 \left(-\frac{m(2e^2)^2}{2\hbar^2} \right) = -8 \text{ Ry} \simeq -108.8 \text{ eV}$$

که بسیار پایین‌تر از مقدار اندازه‌گیری شده -78.6 eV است. پس به این نتیجه می‌رسیم که حذف دافعه کولنی بین الکترون‌ها تقریب بدی است. اما اگر جمله (e^2/r_{12}) را لحاظ کنیم مسئله نمی‌تواند به صورت تحلیلی حل شود. بنابراین روش وردشی را برای آن به کار می‌بریم. برای تابع موج آزمایشی، همان تابع حاصل ضرب معادله (14-1-16) را به کار می‌بریم اما به جای اینکه Z را برابر ۲ بگیریم آن را به عنوان یک متغیر در نظر می‌گیریم. دلیل این است که هر الکترون بار هسته‌ای را که توسط الکترون دیگر دیده می‌شود حفاظت می‌کند و Z مؤثر کمتر از ۲ خواهد بود. این مطلب از محاسبه زیر بیرون می‌آید

$$E(Z) = \frac{\int \psi(r_1 r_2 Z) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - 2e^2 \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) + \frac{e^2}{r_{12}} \right] \times \psi(r_1 r_2 Z) d^3 \mathbf{r}_1 d^3 \mathbf{r}_2}{\int |\psi(r_1 r_2 Z)|^2 d^3 \mathbf{r}_1 d^3 \mathbf{r}_2} \quad (15-1-16)$$

$$= -2 \text{ Ry} [4Z - Z^2 - \frac{5}{8} Z]$$

که کمینه آن نه در $Z = 2$ بلکه در $Z = 2 - 5/16$ قرار می‌گیرد. انرژی مربوطه برابر است با:

$$E(2 - 5/16) = -2(2 - 5/16)^2 \text{ Ry} \simeq -77.5 \text{ eV} \quad (16-1-16)$$

که به جواب واقعی بسیار نزدیکتر است. همین طور توجه کنید که این مقدار بالاتر از مقدار مطالبه شده از طریق نامساوی (۱۶-۱) قرار می گیرد. با در نظر گرفتن توابع آزمایشی با پارامترهای بیشتر می توان به جواب دقیق بسیار نزدیکتر شد و می توان «مقاومت» در برابر پایین بردن بیشتر را حس کرد.

حُسن روش وردشی این است که حتی یک تقریب ضعیف هم برای تابع موج واقعی می تواند تقریبی بسیار خوب برای انرژی واقعی به دست دهد. دلیلش به شرح زیر است: فرض کنید یک تابع آزمایشی انتخاب کرده ایم

$$|\psi\rangle = |E_0\rangle + \frac{1}{10}|E_1\rangle$$

که شامل ده درصد سهم از حالت $|E_1\rangle$ است. انرژی برآورد شده عبارت می شد از

$$E(\psi) = \frac{\langle E_0|H|E_0\rangle + \frac{1}{100}\langle E_1|H|E_1\rangle}{1 + \frac{1}{100}} = \frac{E_0 + 0.01E_1}{1.01}$$

$$\approx 0.99E_0 + 0.01E_1$$

که فقط به اندازه یک درصد خطا دارد (فرض بر این است که E_1 به طور غیر عادی بزرگ نیست). به صورت کلی تر فرض کنید که

$$|\psi\rangle = |E_0\rangle + |\delta\psi\rangle \quad (۱۶-۱-۱۷\text{-الف})$$

یک کت آزمایشی باشد. $|\delta\psi\rangle$ را به قسمت های موازی و عمود بر $|E_0\rangle$ تفکیک می کنیم:

$$\begin{aligned} |\delta\psi\rangle &= |\delta\psi_{\parallel}\rangle + |\delta\psi_{\perp}\rangle \\ &= \alpha|E_0\rangle + |\delta\psi_{\perp}\rangle \end{aligned} \quad (۱۶-۱-۱۷\text{-ب})$$

در این حالت،

$$E[\psi] = \frac{E_0|1 + \alpha|^2 + \langle \delta\psi_{\perp}|H|\delta\psi_{\perp}\rangle}{|1 + \alpha|^2 + \langle \delta\psi_{\perp}|\delta\psi_{\perp}\rangle} \quad (۱۶-۱-۱۸)$$

$$= E_0 + O(\delta\psi_{\perp})^2$$

بنابراین خطا در انرژی از مرتبه دوم خطا در بردار حالت است. توجه کنید که $|\delta\psi_{\parallel}\rangle$ هیچ خطایی در انرژی ایجاد نمی کند. دلیل امر این است که مقیاس بندی مجدد ویژه کت بهنجار شده، انرژی میانگین را تغییر نمی دهد.

همه این نتایج برای هر ویژه کت H صحیح اند. اگر

$$|\psi_n\rangle = |E_n\rangle + |\delta\psi_n\rangle$$

تقریبی برای $|E_n\rangle$ باشد، با استدلال مشابه،

$$E[\psi_n] = E_n + O[(\delta\psi_n)^2]$$

بنابراین ویژه کت های H با این حقیقت مشخص می شوند که وقتی تا مرتبه اول تغییر داده می شوند، تا مرتبه اول هیچ تغییر انرژی وجود ندارد: ویژه کت های H نقاط مانای $E[\psi]$ هستند [به علاوه، اتفاقاً حالت پایه یک

کمینه مطلق است]. اگر می‌توانستیم کار غیر ممکن جدول‌بندی همه $E[\psi]$ ها را انجام دهیم می‌توانستیم همه ویژه حالت‌ها را با پیدا کردن نقاط مانا، پیدا کنیم. البته این پیشنهاد عملی نیست. در عمل از روش زیر برای یافتن ویژه مقادیر و ویژه کت‌های بالاتر استفاده می‌کنیم. مورد $V = \lambda x^4$ را در نظر بگیرید. چون H ناوردای پاریته است، حالت‌ها دارای پاریته متناوب خواهند بود. فرض کنید یک حالت آزمایشی با پاریته فرد انتخاب کنیم. در این صورت در بسط $|\psi\rangle = \sum C_n |n\rangle$ ، برای همه n ‌های زوج، $C_n = \langle n|\psi\rangle = 0$ می‌شود چون انتگرال یک تابع زوج و یک تابع فرد صفر است. در نتیجه پایین‌ترین انرژی که در متوسط‌گیری وارد می‌شود E_1 بوده و نامساوی زیر را داریم:

$$E[\psi] \geq E_1 \quad (16-1-20)$$

از این رو انتظار داریم که اگر یک حالت آزمایشی با پاریته فرد، یک گره (در یک بعد، یک گره اضافی برای هر گام رو به بالا در انرژی وجود دارد) و رفتار معمول وقتی $|x| \rightarrow \infty$ میل می‌کند انتخاب کنیم، می‌توانیم به برآورد خوبی از E_1 و یک تصویر تقریبی از تابع موج مربوطه برسیم. اگر بخواهیم کرانی برای E_2 به دست آوریم چگونه؟ ایده کلی البته یکی است و باید حالت‌های آزمایشی را در نظر بگیریم که در بسط آنها $|E_0\rangle$ و $|E_1\rangle$ ظاهر نمی‌شوند. اما این کار نمی‌تواند فقط با انتخاب حالت‌های آزمایشی با پاریته معین انجام شود. آنچه می‌توانیم انجام دهیم به قرار زیر است: ما توابع موج تقریبی را برای دو تراز اول از تخمین‌های وردشی انرژی داریم. می‌توانیم حالت‌های آزمایشی خود را عمود بر اینها انتخاب کنیم. کران‌های متناظر خیلی دقیق نیستند، چون $|E_0\rangle$ و $|E_1\rangle$ را به‌طور دقیق نمی‌دانیم اما باز هم می‌توانند مفید باشند.

این ایده کلی در صورتی که H از نظر چرخشی ناوردا باشد از نظر اجرا در سه بعد راحت‌تر است. در این وضعیت ویژه حالت‌های انرژی، تکانه زاویه‌ای معین دارند. حالت پایه دارای $l = 0$ است. با تغییر دادن توابع آزمایشی دارای تقارن کروی می‌توانیم انرژی حالت پایه را برآورد کنیم. اگر سپس توابع آزمایشی $l = 1$ را $[\psi = R(r)Y_1^m]$ انتخاب کنیم، $E[\psi]$ تابع

$$E[\psi] \geq E_{l=1}$$

خواهد بود که $E_{l=1}$ پایین‌ترین تراز انرژی با $l = 1$ است. روشن است که می‌توانیم به افزایش l ادامه دهیم. فرض کنید این کار را برای مسئله کولنی انجام دهیم. می‌دانیم که در هر l ، پایین‌ترین انرژی با $n = l + 1$ متناظر است، اگر روش وردشی برای $l = 0, 1, 2, \dots$ به کار رود انرژی‌ها را نزدیک به انرژی ترازهای $n = 1, 2, \dots$ به دست خواهد داد. البته باید به قسمت شعاعی ψ هم توجه کنیم. برای مثال وقتی $r \rightarrow 0$ میل می‌کند $R(r)$ می‌بایست در سکور تکانه زاویه‌ای l شبیه r^l رفتار کند و اگر قرار باشد که کمترین انرژی را برای l داده شده داشته باشد باید دارای حداقل تعداد گره‌ها، یعنی صفر، باشد. با داشتن این ویژگی‌ها، هم انرژی و هم تابع موج به $\psi_{n, n-1, m}$ نزدیک خواهد شد.

در انتخاب توابع آزمایشی می‌توانیم از هر عملگر دیگری که با H جابه‌جا می‌شود هم استفاده کنیم. تکانه زاویه‌ای مخصوصاً راحت است چون نوشتن ویژه توابع آن آسان بوده و ویژه مقادیر آن با انرژی همبسته هستند (بزرگ می‌شوند).

تمرین ۱۶-۱-۱: $\psi = \exp(-\alpha x^2)$ را برای $V = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$ امتحان کرده و $\alpha_0, E(\alpha_0)$ را به دست آورید.

تمرین ۱۶-۱-۲: برای ذره واقع در جعبه‌ای که از $-a$ تا $+a$ گسترده شده است، $\psi = (x-a)(x+a)$ را (درون جعبه) امتحان کرده و E را محاسبه کنید. هیچ پارامتری برای تغییر وجود ندارد اما باز هم به یک کران بالا می‌رسید. این مقدار را با انرژی صحیح، E_0 ، مقایسه کنید (خودتان را قانع کنید که تکینگی‌های ψ'' در $x = \pm a$ سهمی در انرژی ندارند).

تمرین ۱۶-۱-۳: برای پتانسیل تابع دلتای جاذب $V = -aV_0\delta(x)$ از یک تابع آزمایشی گوسین استفاده کنید. کران بالا را برای E_0 محاسبه کرده و آنرا با جواب دقیق $(-ma^2V_0^2/2\hbar^2)$ (تمرین ۵-۲-۳) مقایسه کنید.

تمرین ۱۶-۱-۴: (اختیاری). برای نوسانگر، فرض کنید

$$\begin{aligned} \psi &= (x-a)^2(x+a)^2, & |x| \leq a \\ &= 0, & |x| > a \end{aligned}$$

$E(a)$ را محاسبه کرده، آنرا کمینه کنید و با $\hbar\omega/2$ مقایسه کنید.

تمرین ۱۶-۱-۵: مسئله وردشی را برای حالت‌های $l = 1$ الکترون در پتانسیل $V = -e^2/r$ حل کنید. در تابع آزمایشی خود، (۱) رفتار صحیح مربوط به $l = 1$ ، وقتی $r \rightarrow 0$ میل می‌کند (۲) - تعداد صحیح گره‌ها برای کمینه کردن انرژی (۳) - رفتار صحیح تابع موج در پتانسیل کولنی وقتی $r \rightarrow \infty$ میل می‌کند (یعنی میرایی نمایی به جای میرایی گوسین)، را لحاظ کنید. آیا مهم است که کدام m را برای Y_l^m انتخاب می‌کنید؟ در مورد رابطه کران انرژی که به دست می‌آورید با جواب دقیق بحث کنید.

۱۶-۲ - روش و نازل - کرامر - بریلوئن

ذره‌ای را در نظر بگیرید که با انرژی E در یک بعد در یک پتانسیل ثابت V حرکت می‌کند. ویژه توابع انرژی عبارتند از

$$\psi(x) = \psi(0) e^{\pm ipx/\hbar}, \quad p = [2m(E - V)]^{1/2} \quad (16-2-1)$$

که علامت‌های \pm مربوط به امواج تخت راست رونده و چپ رونده هستند. جواب عمومی، ترکیب خطی دو موج است. قسمت‌های حقیقی و موهومی ψ در فضا با طول موج $\lambda = 2\pi\hbar/p$ نوسان می‌کنند یا به‌طور معادل تغییر فاز در واحد طول یک ثابت، p/\hbar ، است. حال فرض کنید که V به جای ثابت بودن، خیلی آرام تغییر کند. در این صورت انتظار داریم که روی یک ناحیه کوچک [کوچک در مقایسه با فاصله‌ای که $V(x)$ روی آن به‌طور محسوسی تغییر می‌کند] ψ هنوز شبیه یک موج تخت با مقدار موضعی طول موج زیر رفتار کند

$$\lambda(x) = \frac{2\pi\hbar}{p(x)} = \frac{2\pi\hbar}{\{2m[E - V(x)]\}^{1/2}} \quad (16-2-2)$$

از آنجا که λ با x تغییر می‌کند، تغییر (انتقال) فاز انباشته بین $x = 0$ و $x = x$ با یک انتگرال به دست آید به طوری که

$$\psi(x) = \psi(0) \exp \left[\pm (i/\hbar) \int_0^x p(x') dx' \right]$$

یا به طور کلی‌تر

$$\psi(x) = \psi(x_0) \exp \left[\pm (i/\hbar) \int_{x_0}^x p(x') dx' \right] \quad (۳-۲-۱۶)$$

باز هم \pm مربوط به امواج راست رونده و چپ رونده است و جواب عمومی متشکل از یک ترکیب خطی دلخواه از هر دو آنهاست. همان‌طور که در بالا ذکر شد، فقط در صورتی به این فرمول اعتماد می‌کنیم که طول موج به آرامی تغییر کند. این تغییر آرام چقدر آرام باشد کافیت؟ توجه کنید که اگر چه در هر x یک تابع خوش تعریف $\lambda(x)$ وجود دارد ولی این به معنی صحبت کردن از طول موج در یک نقطه نیست. طول موج، مشخصه پدیده‌های تکرار شونده است و در نتیجه روی یک ناحیه که شامل تکرارهای زیادی است تعریف می‌شود. بنابراین گفتن «طول موج وابسته به مکان $\lambda(x)$ » فقط در صورتی معنی می‌دهد که $\delta\lambda$ روی طول λ نسبت به λ ناچیز باشد:

$$\left| \frac{\delta\lambda}{\lambda} \right| = \left| \frac{(d\lambda/dx) \cdot \lambda}{\lambda} \right| = \left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1 \quad (۴-۲-۱۶)$$

اکنون همه نتایج بالا را به طور رسمی‌تر به دست می‌آوریم. این استنتاج تصحیحاتی را به این نتیجه ارائه کرده و ماهیت تقریب را روشن می‌کند. مسئله ما، حل معادله

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \right\} \psi(x) = 0$$

یا

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{\hbar^2} p^2(x) \right] \psi(x) = 0$$

است. فرض کنید

$$\psi(x) = \exp[i\phi(x)/\hbar] \quad (۵-۲-۱۶)$$

چون $\phi(x)$ حقیقی فرض نشده است، کلیت مسئله خدشه‌دار نمی‌شود.^۱ با قرار دادن این شکل در معادله،

$$-\left(\frac{\phi'}{\hbar}\right)^2 + \frac{i\phi''}{\hbar} + \frac{p^2(x)}{\hbar^2} = 0 \quad (۶-۲-۱۶)$$

اکنون ϕ را به صورت یک سری توانی از \hbar بسط می‌دهیم،

۱- به عبارت دیگر هر عدد مختلط $\psi = \rho e^{i\phi} = e^{i\phi + \ln \rho} = e^{i\phi} \rho$ ، که $\phi = \tilde{\phi} - i \ln \rho$.

$$(۷-۲-۱۶)$$

$$\phi = \phi_0 + \hbar \phi_1 + \hbar^2 \phi_2 + \dots$$

منطق مسئله این است که اگر $\hbar \rightarrow 0$ میل کند طول موج $\lambda = 2\pi\hbar/p$ به سمت صفر میل می‌کند. در نتیجه هر پتانسیلی می‌تواند در این حد کند تغییر در نظر گرفته شود و تقریب ما، معادله (۱۶-۲-۳)، باید به‌طور فزاینده‌ای قابل اعتماد شود. برعکس، هر تصحیحی برای این فرمول می‌تواند از این حقیقت نشأت بگیرد که \hbar واقعاً صفر نیست. در وضعیت‌هایی که \hbar می‌تواند به‌صورت یک عدد کوچک بحث شود، بر این امید هستیم که تصحیحات بتوانند به‌صورت توان‌هایی از \hbar محاسبه شوند.

تقریب WKB (که تقریب نیمه کلاسیکی هم نامیده می‌شود) شامل نگه داشتن فقط دو جمله اول در معادله (۱۶-۲-۷) است. اگر این بسط قطع شده را در معادله (۱۶-۲-۶) قرار داده و جملات دارای وابستگی یکسان به \hbar را دسته‌بندی کنیم، خواهیم داشت:

$$-\frac{(\phi_0')^2 + p^2(x)}{\hbar^2} + \frac{i\phi_0'' - 2\phi_1'\phi_0'}{\hbar} + O(\hbar^0) = 0 \quad (۸-۲-۱۶)$$

در تقریب اول فقط روی جمله \hbar^{-2} متمرکز می‌شویم و نتیجه می‌شود که

$$\phi_0' = \pm p(x)$$

یا

$$\phi_0(x) = \pm \int^x p(x') dx' \quad (۹-۲-۱۶)$$

و

$$\psi(x) = A \exp\left[\pm (i/\hbar) \int^x p(x') dx'\right] \quad (۱۰-۲-۱۶)$$

$$= \psi(x_0) \exp\left[\pm (i/\hbar) \int_{x_0}^x p(x') dx'\right]$$

که در آن A با قرار دادن $x = x_0$ در معادله اول به‌دست آمده است. این تماماً با نتیجه قبلی ما سازگار است. اما می‌توانیم یک گام جلوتر رفته و جمله \hbar^{-1} را در معادله (۱۶-۲-۸) در نظر بگیریم. باز هم ϕ_0' را طوری انتخاب می‌کنیم که جمله \hbar^{-2} کماکان صفر شود. برای اینکه جمله \hbar^{-1} صفر شود لازم است که

$$i\phi_0' = 2\phi_1'\phi_0'$$

$$\frac{\phi_0''}{\phi_0'} = -2i\phi_1' \quad (۱۱-۲-۱۶)$$

$$\ln \phi_0' = -2i\phi_1 + c$$

$$\phi_1 = +i \ln(\phi_0')^{1/2} + c/2i = i \ln p^{1/2} + \bar{c}$$

تا این مرتبه از \hbar ،

$$\begin{aligned} \psi(x) &= e^{i\phi(x)/\hbar} = A e^{-\ln[p(x)]^{1/2}} \exp\left[\pm \left(\frac{i}{\hbar}\right) \int^x p(x') dx'\right] \\ &= \frac{A}{[p(x)]^{1/2}} \exp\left[\pm \left(\frac{i}{\hbar}\right) \int^x p(x') dx'\right] \end{aligned} \tag{۱۲-۲-۱۶}$$

یا

$$\psi(x) = \psi(x_0) \left[\frac{p(x_0)}{p(x)}\right]^{1/2} \exp\left[\pm \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x') dx'\right] \tag{۱۳-۲-۱۶}$$

چگالی احتمال وابسته به $\psi(x)$ به صورت $[p(x)]^{-1}$ رفتار می کند. این وابستگی معکوس به سرعت کلاسیکی از توابع احتمال کلاسیکی $P_{cl}(x)$ که در ارتباط با نوسانگر مطالعه کردیم برای ما آشناست. برعکس، می توانستیم معادله (۱۳-۲-۱۶) را با ترکیب کردن استدلال کلاسیکی و کوانتومی، یعنی با استدلال نیمه کلاسیکی، بنویسیم. به طور کلاسیکی می دانیم که اگر ذره ای ابتدا با تکانه $p(x_0) = \{2m[E - V(x_0)]\}^{1/2}$ در x_0 باشد، وقتی به x می رسد دارای تکانه $p(x) = \{2x[E - V(x)]\}^{1/2}$ خواهد بود. اکنون استدلال می کنیم که چون p/\hbar تغییر فاز در واحد طول تابع موج کوانتومی است، فاز آن می بایست $\int_{x_0}^x p(x') dx'/\hbar$ باشد. همان طور که برای دامنه تابع موج استدلال کردیم استدلال می کنیم که چون احتمال $P_{cl}(x) \sim 1/v(x)$ است، $|\psi| = 1/[v(x)]^{1/2} = 1/[p(x)]^{1/2}$ است.

هر وقت یک محاسبه تقریبی انجام می دهیم شایسته است تا در پایان ثابت کنیم که جوابی که به دست آورده ایم با فرضیاتی که در به دست آوردن آن استفاده کرده ایم سازگار است. فرض اساسی ما در رویکرد بازگشتی به معادله (۸-۲-۱۶) این بوده است که آن قسمت از معادله که دارای توانهای کمتر از \hbar است مهمتر از بخشی است که توان های بالاتر دارد، چون \hbar بسیار کوچک است. این تا وقتی که ضرایب توان های مختلف \hbar به طور غیر عادی بزرگ یا کوچک نباشند خوب است. برای مثال اگر ضریب جمله \hbar^{-2} ، $[-(\phi_0')^2 + p^2(x)]$ ، خیلی کوچک باشد، مثلاً از مرتبه \hbar ، آنگاه نادیده گرفتن جمله \hbar^{-1} در مقایسه بی معنی است. اگر ضریب \hbar^{-1} به بزرگی \hbar^{-1} باشد هم همین طور است. لذا درخواست می کنیم که بزرگی مطلق جمله اول بسیار بزرگتر از بزرگی مطلق جمله دوم باشد. چون در جواب، $\phi_0' = p(x)$ ، $(\phi_0'/\hbar)^2$ را به عنوان معیاری از جمله اول و به دلایل مشابه ϕ_0''/\hbar را به عنوان معیاری از جمله دوم انتخاب می کنیم. شرط اعتبار تقریب WKB (تا این مرتبه) عبارتست از

$$\left| \frac{\phi_0''}{\hbar} \right| \ll \left| \frac{\phi_0'}{\hbar} \right|^2 \tag{۱۴-۲-۱۶}$$

یا

$$\hbar \left| \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{\phi_0'} \right) \right| = \left| \frac{d}{dx} \left(\frac{\hbar}{p(x)} \right) \right| = \frac{1}{2\pi} \left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1 \tag{۱۵-۲-۱۶}$$

که با انتظار ذهنی ما، معادله (۱۶-۲-۴)، در توافق است.

ارتباط با فرمالیزم انتگرال مسیر

در اینجا توابع موج نیمه کلاسیکی معادله (۱۶-۲-۱۰) را در رویکرد انتگرال مسیر، در تقریب نیمه کلاسیکی، مجدداً به دست می آوریم که در آن می توان نوشت:

$$U_{cl}(xt, x'0) = A e^{(i/\hbar)S_{cl}(xt; x'0)} \quad (16-2-16)$$

که در آن $S_{cl}[xt; x'0]$ کنش برای مسیر کلاسیکی واصل نقاط انتهایی $(x'0)$ و $(x0)$ است. با فرض اینکه مسئله دارای ناوردایی انتقال در زمان است زمان اولیه را $t' = 0$ انتخاب کرده ایم. ضریب A در تقریب ما، که "مساحت" زیر انتگرال تابعی با مقدار انتگرالده در نقطه مانا ضربدر یک ثابت جایگزین می شود، هیچ وابستگی به x, x' یا t ندارد. این رویه را در وضعیت زیر نشان خواهیم داد.

(۱) - بتانسیل همیشه منفی است و وقتی $|x| \rightarrow \infty$ می رود به یک ثابت، که برای راحتی انتخاب می شود، میل می کند.

(۲) - ذره در یک حالت کوانتومی با انرژی $E > 0$ است، یعنی در سطح کلاسیکی هیچ نقطه بازگشتی وجود ندارد، و واقعیتهای که اهمیت آن معلوم خواهد شد.

استراتژی ما به صورت زیر خواهد بود: ابتدا نشان خواهیم داد که چگونه توابع موج دقیق را با انجام چند انتگرال از انتشارگر دقیق به دست می آوریم. سپس انتشارگر را در تقریب نیمه کلاسیکی محاسبه کرده و توابع موج (تقریبی) متناظر معادله (۱۶-۲-۱۰) را به دست می آوریم. توابع موج چگونه از انتشارگر استخراج می شوند؟ در حالت کلی داریم:

$$U(xt; x') \equiv U(xt; x'0) = \sum \psi_n(x) \psi_n^*(x') e^{-iE_n t/\hbar}$$

که اگر طیف پیوسته باشد جمع به انتگرال تبدیل می شود. در واقع در مسئله پیش رو اینگونه است. در ناحیه مجانبی $|x| \rightarrow \infty$ ، جوابها باید امواج تخت با تکانه

$$p_\infty = \pm \sqrt{2mE}$$

باشند. لذا می توانیم برای حالت های $E > 0$ از p به عنوان یک برچسب استفاده کنیم (از اینجا به بعد اندیس p_∞ را حذف می کنیم). در هر انرژی E ، درست مثل مورد ذره آزاد، دو جواب با انرژی $E = p^2/2m$ وجود خواهد داشت. اما توابع موج در داخل، امواج تخت نخواهند بود و اینها همان چیزهایی هستند که ما به دنبالشان هستیم. لذا با

$$U(xt; x') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \psi_p(x) \psi_p^*(x') e^{-ip^2 t/2m\hbar} + BS \quad (17-2-16)$$

شروع می کنیم که BS نشان دهنده جمع روی حالت های مقید است. این حالت ها را خواهند شد، چون بزودی حالت ها را در انرژی مثبت خواهیم یافت. ضرابی مثل π در انتگرال گیری از p خیلی مهم نیستند چون می خواهیم به وابستگی صحیح توابع موج به x برسیم نه به بهنجارش آنها. به یاد دارید که $U(t)$ ساخته شده تا سیستم را در زمان رو به جلو منتشر کند یعنی باید برای $t > 0$ به کار رود. اکنون تبدیل آن را تعریف می کنیم

$$U(x, x', z) = \int_0^{\infty} dt U(xt; x') e^{izt/\hbar} \quad z = E + i\epsilon \quad (۱۶-۱۸-الف)$$

که ϵ یک بی نهایت کوچک مثبت است که برای تضمین همگرایی در وضعیت $t \rightarrow \infty$ وارد شده است. در ادامه تمایزی بین ϵ و یک ضریب مثبت متناهی ضربدر ϵ قائل نخواهیم شد و از جملات مرتبه بالاتر ϵ چشم پوشی خواهیم نمود. به راحتی می توان دید که با ترکیب دو معادله بالا،

$$U(x, x', z) = 2m \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi i} \frac{\psi_p(x)\psi_p^*(x')}{p^2 - 2mE - i\epsilon} \quad (۱۶-۱۸-ب)$$

می توانیم (تا مرتبه ϵ) بنویسیم:

$$p^2 - 2mE - i\epsilon = p^2 - (\sqrt{2mE} + i\epsilon)^2$$

و کسر زیر را به دو عامل تبدیل کنیم

$$\frac{1}{p^2 - 2mE - i\epsilon} = \frac{1}{2\sqrt{2mE}} \left[\frac{1}{p - \sqrt{2mE} - i\epsilon} - \frac{1}{p + \sqrt{2mE} + i\epsilon} \right]$$

و با استفاده از فرمول،

$$\frac{1}{(x-a) \mp i\epsilon} = \mathcal{P} \frac{1}{x-a} \pm i\pi \delta(x-a)$$

به معادله زیر برسیم

$$U(x, x', z) = \sqrt{\frac{m}{2E}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi i} (\psi_p(x)\psi_p^*(x')) \times \left[\mathcal{P} \left(\frac{1}{p - \sqrt{2mE}} \right) + i\pi \delta(p - \sqrt{2mE}) - \mathcal{P} \left(\frac{1}{p + \sqrt{2mE}} \right) + i\pi \delta(p + \sqrt{2mE}) \right]$$

که \mathcal{P} انتگرال مقدار اصلی است که باید محاسبه شود. U به ویژه توابع نه فقط در انرژی E بلکه در انرژی های مجاور هم، به خاطر انتگرال مقدار اصلی، بستگی دارد. پس ترکیبی را تشکیل می دهیم که ویژه توابع را در فقط یک انرژی برگزیند:

$$\begin{aligned}
 & U(x, x', z) + [U(x', x, z)]^* \\
 &= \sqrt{\frac{m}{2E}} \int_{-\infty}^{\infty} dp (\psi_p(x) \psi_p^*(x')) \left[\delta(p - \sqrt{2mE}) + \delta(p + \sqrt{2mE}) \right] \quad (۱۹-۲-۱۶) \\
 &= \sqrt{\frac{m}{2E}} [\psi_{\sqrt{2mE}}(x) \psi_{\sqrt{2mE}}^*(x') + \psi_{-\sqrt{2mE}}(x) \psi_{-\sqrt{2mE}}^*(x')] \\
 &\text{اکنون این را با } U_{cl}(x, x', z) \text{ مقایسه می‌کنیم:}
 \end{aligned}$$

$$U_{cl}(x, x', z) = \int_0^{\infty} dt U_{cl}(x, x', t) e^{(i/\hbar)(E + i\epsilon)t} = \int_0^{\infty} dt e^{(i/\hbar)S_{cl}(x, x', t)} e^{(i/\hbar)(E + i\epsilon)t}$$

چون U_{cl} خودش در تقریب نقطه مانا (پایدار) یک انتگرال تابعی (بر پایه کوچکی \hbar) محاسبه شده بود، می‌بایست انتگرال واقعی در t را هم، با قرار دادن مقدار شناسه تابع نمایی در نقطه t^* ، با فاز مانا، که به وسیله

$$\frac{\partial S}{\partial t} + E = -E_{cl} + E = 0 \quad (۲۰-۲-۱۶)$$

تعریف می‌شود، و برابر قرار دادن انتگرال با انتگرالده در این نقطه ضربدر یک ثابت، محاسبه کرد. برای نقطه ثابت معادله (۲-۸-۱۸) را فراخوانی کرده و ضریب همگرایی ϵ را حذف کرده‌ایم چون نیازی به آن نیست. آنچه نقطه مانا انجام می‌دهد انتخاب یک مسیر از بین مسیرهای واصل دو نقطه انتهایی داده شده (با زمان‌های حرکت مختلف) است که انرژی کلاسیکی آن با انرژی E حالت کوانتومی برابر است (و زمان حرکت آن برابر $t^*(E) = t^*$ است).

توجه کنید که قبلاً مسیریابی را می‌خواستیم که در یک زمان معین t ، x' را به x وصل می‌کردند. با دانستن اینکه معادلات حرکت نسبت به زمان از درجه ۲ هستند، فقط یک مسیر وجود خواهد داشت که این شرایط را برآورده می‌کند. اما به دنبال مسیری هستیم که دارای یک انرژی معین بوده و واصل دو نقطه x' و x بدون داشتن قیدی روی زمان حرکت است. این در حالت کلی می‌تواند جواب‌های زیادی داشته باشد. برای مثال در یک پتانسیل مجبوس کننده نظیر نوسانگر (یا در هر حالت مقید) ذره‌ای که x' را با انرژی E ترک می‌کند به هر نقطه دیگر x (بین نقاط بازگشت) هنگام عقب و جلو رفتن بی‌نهایت بار برخورد خواهد کرد. هر چنین مداری زمان حرکت متفاوتی خواهد داشت و $(U_{cl}(x, x', E))$ از بی‌نهایت نقطه مانای تابع معادله (۲۰-۲-۱۶) سهم خواهد داشت.

در مسئله کنونی که هیچ نقطه بازگشتی ندارد فقط دو جواب به نام‌های R و L خواهیم داشت که در حال حرکت به راست یا چپ هستند. راست رونده می‌تواند از x' به x برود اگر $x' < x$ باشد و چپ رونده اگر $x' > x$ باشد.

محاسبه خود را با در نظر داشتن همه اینها ادامه داده و با

$$U_{cl}(x, x', E) = A' \sum_{R, L} e^{(i/\hbar)[S_{cl}(x, x', t^*) + Et^*]}$$

شروع می کنیم که A' یک ثابت جدید است. با در نظر داشتن اینکه روی مسیر کلاسیکی $E_{cl} = E$ پایسته است داریم:

$$\begin{aligned} S_{cl}[x, x', t^*] &= \int_0^{t^*} (T - V) dt = \int_0^{t^*} 2T dt - Et^* \\ &= \int_0^{t^*} p(x(t)) \frac{dx}{dt} dt - Et^* = \int_{x'}^x p(x'') dx'' - Et^* \quad (۱۶-۲۱-الف) \\ &\equiv W[x, x', E] - Et^* \end{aligned}$$

در نتیجه،

$$\begin{aligned} U_{cl}(x, x', E) &= A' \sum_{R,L} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_{x'}^x p(x'') dx''\right] \\ &= A' \sum_{R,L} \exp\left(\frac{i}{\hbar} W[x, x', E]\right) \quad (۱۶-۲۱-ب) \end{aligned}$$

اگر $x > x'$ باشد تکانه کلاسیکی باید مثبت باشد و $p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$ قرار می دهیم در حالی که اگر $x < x'$ باشد انتخاب دیگر را برای ریشه دوم انجام می دهیم. بنابراین

$$\begin{aligned} U_{cl}(x, x', E) &= \theta(x - x') A' \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left[\int_{x'}^x \sqrt{2m(E - V(x''))} dx'' \right]\right) \\ &+ \theta(x' - x) A' \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \left[\int_{x'}^x \sqrt{2m(E - V(x''))} dx'' \right]\right) \quad (۱۶-۲۲) \end{aligned}$$

اکنون داریم:

$$\begin{aligned} U_{cl}(x, x', E) + U_{cl}^*(x', x, E) &= A' \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left[\int_{x'}^x \sqrt{2m(E - V(x''))} dx'' \right]\right) \\ &+ A' \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \left[\int_{x'}^x \sqrt{2m(E - V(x''))} dx'' \right]\right) \quad (۱۶-۲۳) \end{aligned}$$

با مقایسه این با (۱۶-۲-۹) داریم:

$$\psi_{\pm\sqrt{2mE}}(x) \psi_{\pm\sqrt{2mE}}^*(x') \simeq \exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} \left[\int_{x'}^x \sqrt{2m(E - V(x''))} dx'' \right]\right)$$

به راحتی می توان نوشت:

$$\psi_{\pm}(x) = \psi(x_0) \exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} \left[\int_{x_0}^x \sqrt{2m(E - V(x''))} dx'' \right]\right)$$

چند نکته وجود دارد:

اول اینکه اگر بخواهیم به معادله (۱۶-۲-۱۳)، با ضرب $p^{-1/2}$ برسیم لازم است تا محاسبه دقیق تری را انجام دهیم. قبلاً انتگرال تابعی و انتگرال t واقعی را با برابر قرار دادن انتگرال با مقدار انتگرالده در نقطه مانا،

ضریبدر یک ثابت برای نشان دادن "مساحت" حول این نقطه، محاسبه کرده‌ایم. برای رسیدن به معادله (۱۶-۲-۱۳) می‌بایست انتگرالده‌ها را در نقطه مانا با گوسین‌ها تقرب زده و انتگرال گوسین‌ها را محاسبه کنیم. برای جزئیات بیشتر می‌توانید به کتب ارائه شده در آخر کتاب مراجعه کنید.

دوم اینکه توجه کنید که در رفتن از $U(t)$ به $U(E)$ (در x و x' ثابت) توجه خود را از مسیرهای با زمان ثابت به مسیرهای با انرژی ثابت معطوف کردیم. چون $E = -\partial S_{cl} / \partial t$ است باید t برای مشتق S_{cl} نسبت به زمان عوض شود. همان طور که در بخش ۲-۵ توضیح داده شد این کار مستلزم تبدیل لژاندر است. از معادله (۱۶-۲-۲۱-الف) واضح است که $W(E)$ تبدیل لژاندر مورد نظر است. این مطلب در تمرین (۱۶-۲-۱) بیشتر دنبال می‌شود.

سرانجام نگاهی به ترکیب $U(x, x', E) + U^*(x', x, E)$ می‌اندازیم که در فیلتر کردن یک انرژی از آن استفاده کردیم. از بحث بازگشت زمانی باید انتظار داشته باشید که نسخه مزدوج مختلط شده U (با نقاط ابتدا و انتهای عوض شده) نشانگر انتشارگر زمان-وارون شده باشد. اگر چنین باشد، انتگرال این ترکیب روی زمان‌های مثبت، انتگرال U روی همه زمان‌ها است. حال واضح است که اگر چنین انتگرالگیری روی معادله (۱۶-۲-۱۷) انجام شود واقعاً یک ضریب $\delta(E - p^2/2m)$ ایجاد خواهد کرد که حالت‌ها را در انرژی E به دست می‌دهد. این نکته در تمرین (۱۶-۲-۳) دنبال خواهد شد.

تمرین (۱۶-۲-۱): تابع $W(E)$ معرفی شده در معادله (۱۶-۲-۲۱-الف) را در نظر بگیرید. چون E -مشتق $S(t)$ نسبت به t است $W(E)$ باید تبدیل لژاندر S باشد. در این مورد t باید به صورت مشتق $W(E)$ نسبت به E ظاهر شود. ثابت کنید که دیفرانسیل گیری از فرمول

$$W(E) = \int_x^x \sqrt{2m(E - V(x''))} dx''$$

زمان لازم برای رفتن از نقطه شروع تا پایان با این انرژی از پیش تعیین شده را به دست می‌دهد.

تمرین ۱۶-۲-۲: مسئله ذره آزاد را با استفاده از رویکرد بالا در نظر بگیرید. اکنون که توابع موج را صریحاً می‌دانید انتگرال معادله (۱۶-۲-۱۸-ب) را با انتگرالگیری پربندی محاسبه کنید و عبارت زیر را به دست آورید

$$U(x, x', t) = \theta(x - x') e^{(i/\hbar)\sqrt{2mE}(x-x')} + \theta(x' - x) e^{-(i/\hbar)\sqrt{2mE}(x-x')}.$$

در انجام انتگرال‌های پربندی ببینید در کدام نیم صفحه می‌توانید برای یک علامت معین $x - x'$ پربندی ببینید. نتیجه فوق را با نتیجه نیمه کلاسیکی مقایسه کنید. توجه کنید که نیازی به تشکیل ترکیب $U(x, x', t) + U^*(x, x', t)$ نیست؛ می‌توانیم هردو سهم قسمت اصلی و تابع دلتا را صریحاً حساب کنیم چون وابستگی انتگرالده به p را صریحاً می‌دانیم. برای واضح تر دیدن این مطلب از روش انتگرال پربندی اجتناب کرده و به جای آن از فرمول مربوط به $(x \pm i\varepsilon)^{-1}$ ارائه شده در بالا استفاده کنید. انتگرال مقدار اصلی و سهم ناشی از تابع دلتا را محاسبه کنید و ببینید چگونه جمع آن‌ها به نتیجه انتگرال گیری پربندی می‌رسد. اگرچه هر دو روش در اینجا امکان پذیرند ولی در مسئله دارای $V \neq 0$ انتگرال گیری پربندی ممکن نیست چون وابستگی تابع موج به p در صفحه مختلط p معلوم نیست. مزیت روش $U + U^*$ این است که فقط با کمیت‌های روی محور حقیقی و فقط در یک انرژی کار می‌کند.

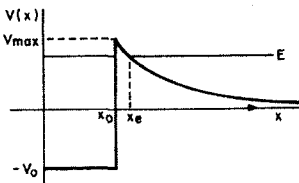
تمرین ۱۶-۲-۳: نگاهی دیگر به استنتاج خود می‌اندازیم. ما سخت تلاش کردیم تا ویژه توابع را در یک انرژی جدا کنیم: ترکیب $U(x, x', z) + U^*(x, x', z)$ را تشکیل دادیم تا از قسمت اصلی رهایی یافته و به تابع دلتا برسیم. واضح است که اگر می‌توانستیم در معادله (۱۶-۲-۱۸ الف) در گستره $-\infty \leq t \leq \infty$ انتگرال بگیریم به تابع دلتایی که می‌خواهیم می‌رسیدیم. آنچه ما را از این کار باز می‌داشت این بود که $U(t)$ برای استفاده در $t > 0$ ساخته شده بود. اما اگر عملگر تحول زمانی $e^{-(i/\hbar)Ht}$ را برای زمان‌های منفی به کار ببریم به ما خواهد گفت که با فرض هامیلتونی یکسان سیستم در زمان‌های قبلی در چه وضعیتی بوده است. بنابراین می‌توانیم این عملگر را برای زمان‌های منفی هم دانسته و تبدیلی تعریف کنیم که مربوط به همهٔ زمان هاست. این در مکانیک کلاسیک هم درست است. برای مثال اگر سنگی از بالای یک ساختمان بلند مستقیماً به بالا پرتاب شود، و زمان رسیدن به زمین را بخواهیم به دو جواب می‌رسیم، یکی با t منفی متناظر با برون یابی شرایط اولیهٔ داده شده به زمان‌های قبلی. با بررسی این که تحت مزدوج مختلط و تعویض $x' \leftrightarrow x$ چه اتفاقی برای $\langle x' | e^{-(i/\hbar)Ht} | x \rangle$ می‌افتد، ثابت کنید که $U(x, x', z) + U^*(x, x', z)$ واقعاً تبدیل $U(t)$ برای همهٔ زمان‌ها است. همین‌طور ببینید برای U_{cl} ، وقتی برای همهٔ زمان‌ها آن را تبدیل می‌کنیم، چه اتفاقی می‌افتد. حال خواهید دید که بدون توجه به اینکه یک مسیر راست رونده منفرد چه علامت از $x - x'$ را می‌تواند شرکت دهد این زمان نقطهٔ مانا، t^* ، است که با علامت $x - x'$ تغییر علامت خواهد داد (برای مسیر چپ رونده هم اینگونه است).

دامنهٔ تونلزی

فرمول WKB می‌تواند برای محاسبهٔ دامنه‌های تونلزنی هم به کار رود به شرطی که $\chi(x) = \{2m[V(x) - E]\}^{1/2}$ به آرامی تغییر کند. برای مثال ذره‌ای را در نظر بگیرید که در پتانسیل شکل ۱-۱۶ گیر افتاده است. اگر انرژی آن مثبت باشد احتمال دارد از سد نفوذ کرده و مثل ذره آزاد به بی‌نهایت فرار کند. در تقریب اول نسبت ψ در نقطهٔ فرار x_e و در دیوار بیرونی چاه x_0 برابر است با

$$\psi(x_e) = \psi(x_0) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^{x_e} i\{2m[V(x) - E]\}^{1/2} dx\right) \quad (24-2-16)$$

$$\equiv \psi(x_0) e^{-\gamma/2} \quad (25-2-16)$$



شکل ۱۶-۱: یک مسئله نوعی نفوذ در سد. ذره دارای انرژی $E > 0$ است اما به‌وسیلهٔ سد مقید شده است چون $V_{max} > E$ است. اما یک دامنه برای تونلزنی ذره از سد و فرار به بی‌نهایت به‌صورت یک ذره آزاد وجود دارد.

طول عمر میانگین ذره در داخل چاه می‌تواند با محاسبهٔ نیمه کلاسیکی زیر برآورد شود. از آنجا که ذره در داخل چاه دارای انرژی جنبشی $T = E - V = E + V_0$ است سرعت آن $v = [2m(E + V_0)]^{1/2} / m$

بوده و با فرکانس $f = v / 2x_0$ به دیوارهٔ بیرونی برخورد می‌کند. در اثر برخورد احتمال فرار $e^{-\gamma}$ است. در نتیجه احتمال فرار در یک ثانیه برابر است با

$$R = \frac{[2m(E + V_0)]^{1/2}}{2mx_0} e^{-\gamma} \quad (16-2-26)$$

در این صورت طول عمر میانگین $\tau = 1/R$ است.

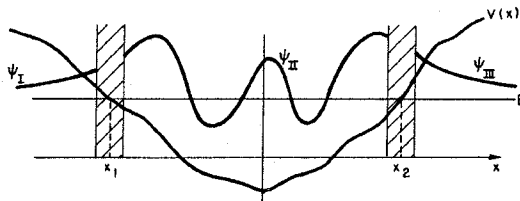
توجه کنید که همان طور که یک ذره می‌تواند از داخل به بیرون تونل بزند یک ذره با $E < V_{\max}$ می‌تواند از بیرون به داخل تونل زده و گیر بیفتد. مثالی از تونل‌زنی و گیر افتادن در واپاشی α دیده می‌شود که در آن یک هسته یک ذره α گسیل می‌کند. در فواصل کوتاه نیروی بین ذره α و هسته جاذبه است (نیروی هسته‌ای بر دافعهٔ کولنی غلبه می‌کند در حالی که در فواصل بزرگتر دافعهٔ کولنی غلبه پیدا می‌کند. مجموع این دو پتانسیل تقریباً بوسیلهٔ یک پتانسیل از نوع نشان داده شده در شکل ۱۶-۱ توصیف می‌شود که x نقش مختصهٔ شعاعی را ایفا می‌کند (اگر ذره α با تکانه زاویه‌ای مداری غیر صفر بیرون بیاید سد گریز از مرکز باید به این دو پتانسیل اضافه شود) لذا ذرات α با $E < V_{\max}$ می‌توانند از داخل به بیرون تونل زده یا از بیرون گیر بیفتند.

تمرین ۱۶-۲-۴: ذرات α با انرژی جنبشی 4.2 MeV از یک هسته با بار $Z = 90$ (بعد از گسیل) به بیرون تونل می‌زنند. فرض کنید که $V_0 = 0$ و $x_0 = 10^{-12} \text{ cm}$ و $V(x)$ برای $x \geq x_0$ کولنی است (شکل ۱۶-۱). طول عمر میانگین را برآورد کنید [راهنمایی: نشان دهید $\gamma = (8Ze^2 / \hbar v) [\cos^{-1} y^{1/2} - y^{1/2}(1-y)^{1/2}]$ که در آن $y = x_0/x_e$ است. نشان دهید $1 \ll \gamma$ است و قبل از محاسبه اعداد از $\cos^{-1} y^{1/2} \approx \frac{1}{2}\pi - y^{1/2}$ استفاده کنید].
به دست آوردن دامنهٔ تونل‌زنی، معادلهٔ (۱۶-۲-۲۴) در فرمالیزم انتگرال مسیر سراسر نیست چون هیچ مسیر کلاسیکی وجود ندارد که بتواند ذره را از سد عبور دهد. چنین مسیری در فرمالیزم "زمان موهومی" وجود دارد که در اینجا بحث نمی‌کنیم.

حالت‌های مقید

روش WKB می‌تواند برای تقریب زدن انرژی‌ها و توابع موج حالت‌های مقید به کار رود. ذره‌ای را مقید در پتانسیل $V(x)$ در نظر بگیرید (شکل ۱۶-۲). در شکل، x_1 و x_2 نقاط بازگشت کلاسیکی برای انرژی E هستند. بینیم چطور کوانتاش انرژی E از این فرمالیزم بیرون می‌آید. می‌دانیم که در نواحی ممنوعه از نظر کلاسیکی، I و III تابع موج یک نمایی میرا خواهد شد. برای نمونه،

$$\psi_{III}(x) \sim \frac{1}{\{2m[V(x) - E]\}^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int^x \{2m[V(x') - E]\}^{1/2} dx'\right) \quad (16-2-27)$$



شکل ۱۶-۲: یک مسئله نوعی با حالت مقید. تقریب WKB برای تابع موج به جز در نوارهای هاشور خورده نزدیک نقاط بازگشت کلاسیکی x_1 و x_2 به خوبی کار می‌کند. برای اتصال ψ_{II} به ψ_I و ψ_{III} ، معادله شرودینگر این نوارها، بعد از تقریب زدن پتانسیل با یک تابع خطی درون هر نوار، حل می‌شود.

در ناحیه II که از نظر کلاسیکی مجاز است تابع موج نوسانی خواهد شد و فرض می‌کنیم تابعی حقیقی^۱ با دو پارامتر آزاد A و B باشد:

$$\psi_{II}(x) = \frac{A}{[p(x)]^{1/2}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int^x p(x') dx' + B \right] \quad (28-2-16)$$

[دو پارامتر حقیقی A و B جای یک پارامتر مختلط $\psi(x_0)$ که قبلاً به کار رفت قرار می‌گیرند]. متأسفانه نه معادله (۱۶-۲-۲۷) و نه معادله (۱۶-۲-۲۸) در نزدیکی نقاط بازگشت قابل کاربرد هستند. از نظر صوری دلیل این است که $[P(x)]^{1/2}$ و $\{2m[V(x) - E]\}^{1/2}$ در آنجا بسیار بزرگ می‌شوند. از نظر فیزیکی دلیل این است که طول موج در آنجا به بی‌نهایت میل می‌کند و برآورده شدن این شرط که $V(x)$ روی یک طول موج تغییر کمی داشته باشد غیرممکن می‌شود. بنابراین تطبیق ψ_I ، ψ_{II} و ψ_{III} تقریبی و بدان وسیله تعیین انرژی‌های مجاز، به صورتی که در مثال‌های ساده با پتانسیل‌های ثابت تکه تکه انجام می‌شود، غیر ممکن است. این مشکل به صورت زیر از میان برداشته می‌شود: در نزدیکی هر نقطه بازگشت یک ناحیه گذار تعریف می‌کنیم (نوارهای هاشور خورده در شکل) که درون آنها، مسئله را با استفاده از معادله شرودینگر حل می‌کنیم. اگر $V(x)$ کند تغییر باشد، می‌تواند با یک تابع خطی در این نواحی تقریب زده شود برای مثال نزدیک x_1 ،

$$\begin{aligned} V(x) &\simeq V(x_1) + V' \cdot (x - x_1) \\ &= E + V' \cdot (x - x_1) \end{aligned} \quad (29-2-16)$$

در این صورت جواب‌های دقیق با این $V(x)$ با جواب‌های WKB خارج از ناحیه هاشور خورده، یعنی با توابع نمایشی میرا در یک طرف و کسینوسی نوسانی در طرف دیگر، جور می‌شوند. این تحلیل^۲ در نزدیکی x_1 منجر به تابع زیر در ناحیه II می‌شود:

$$\psi_{II}(x) = \frac{A}{[p(x)]^{1/2}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right] \quad (30-2-16)$$

در حالی که در نزدیکی x_2 ،

۱- قضیه ۱۶ بخش ۵-۶ را به خاطر بیاورید.

۲- جزئیات را حذف می‌کنیم.

$$\psi_{II}(x) = \frac{A'}{[p(x)]^{1/2}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right] \quad (۳۱-۲-۱۶)$$

برای اینکه دو جواب بر هم منطبق شوند، A و A' باید بزرگی یکسان داشته و اختلاف فاز بین دو کسینوس می‌بایست مضربی از π باشد:

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' - \frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x p(x') dx' - \frac{\pi}{2} = n\pi, \quad n=0, 1, 2, \dots$$

یا

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = (n + \frac{1}{2}) \pi \hbar \quad (۳۲-۲-۱۶)$$

یا

$$\oint p(x) dx = (n + \frac{1}{2}) 2\pi \hbar \quad (۳۳-۲-۱۶)$$

در اینجا \oint نشان دهنده انتگرال روی یک چرخه کامل از x_1 به x_2 و بالعکس است. اگر n زوج باشد $A = A'$ ، و اگر فرد باشد $A = -A'$.

معادله (۳۲-۲-۱۶) کوانتش انرژی را بیان می‌کند چون انتگرال و حدود در سمت چپ تابعی از انرژی و دیگر پارامترها مثل جرم ذره هستند.

به‌عنوان مثال ذره‌ای را در پتانسیل خطی $V(x) = k|x|$ در نظر بگیرید. نقاط بازگشت عبارتند از:

$$x_{1,2} = \mp E/k \quad (۳۴-۲-۱۶)$$

و شرط کوانتش به‌صورت زیر در می‌آید

$$\int_{-E/k}^{E/k} [2m(E - k|x|)]^{1/2} dx = 2 \int_0^{E/k} [2m(E - kx)]^{1/2} dx = (n + \frac{1}{2}) \hbar \pi \quad (۳۵-۲-۱۶)$$

وابستگی E به n, k, m, \hbar می‌تواند با یک مقیاس‌بندی به‌دست آید. متغیر y را به‌صورت

$$x = (E/k)y \quad (۳۶-۲-۱۶)$$

تعریف می‌کنیم که برحسب آن داریم

$$2 \int_0^1 (2mE)^{1/2} (1-y)^{1/2} \left(\frac{E}{k} \right) dy = (n + \frac{1}{2}) \hbar \pi$$

یا

$$E \propto (k)^{2/3} (m)^{-1/3} (n + \frac{1}{2})^{2/3} \hbar^{2/3} \quad (۳۷-۲-۱۶)$$

ثابت تناسب می تواند با حل انتگرال λ به دست آید نتیجه اینکه

$$E_n = \left[\frac{3k\hbar\pi}{4(2m)^{1/2}} \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^{2/3} \quad (16-2-38)$$

اگر این روش برای پتانسیل $V(x) = \lambda x^4$ به کار رود، با مقیاس کردن به

$$E_n = \left[\frac{c\lambda^{1/4}\hbar}{m^{1/2}} \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^{4/3} \quad (16-2-39)$$

می رسم که در آن c ثابتی است که می تواند با حل یک انتگرال بدون بعد به دست آید. اگر ترازهای انرژی WKB با ترازهای واقعی (به دست آمده از طریق حل تحلیلی یا انتگرال گیری عددی صحیح از معادله شرودینگر) مقایسه شوند می بینیم که توافق برای همه n ها به جز n بسیار کوچک بسیار خوب است. برای مثال در مورد λx^4 ،

$$\frac{E_0(WKB)}{E_0(\text{numerical})} = 0.716$$

$$\frac{E_1(WKB)}{E_1(\text{numerical})} = 0.992$$

وقتی به n های بالاتر می رویم توافق حتی بهتر هم می شود. بنابراین روش WKB روش وردشی را، که برای ترازهای پایینی بسیار خوب کار می کند، کامل می کند. دقت بهبود یافته با افزایش n معقول است از این نظر که وقتی به انرژی های بالاتر می رویم، ناحیه گذاری نزدیک نقاط بازگشت (جایی که تقریب با شکست مواجه می شود) نقش کم اهمیت تری بازی می کند.^۱

در مورد توابع موج WKB چگونه؟ آنها هم در n های بزرگ بهتر می شوند، البته به جز در نزدیکی نقاط بازگشت، جایی که به واسطه عامل $[P(x)]^{1/2}$ بسیار بزرگ می شوند. اما اگر معادله شرودینگر را در نزدیکی نقاط بازگشت بعد از تقریب زدن پتانسیل با یک تابع خطی واقعاً حل کنیم از این بزرگی شدگی یا پرش اجتناب شده و توافق با ویژه توابع صحیح بسیار زیادتر می شود.

تابع موج WKB ویژگی دیگری دارد که در توافق با جواب دقیق است: این تابع موج، n گره ($n = 0, 1, 2, \dots$) در تراز n ام دارد. این مطلب را به طور تحلیلی از معادله (۱۶-۲-۳۰) برای $\psi_{II}(x)$ ، و معادله (۱۶-۲-۳۲) برای انتگرال فاز $\int_{x_1}^x P(x') dx' / \hbar$ می بینیم. وقتی x از x_1 تا x_2 می رود، فاز ϕ از $-\pi/4$ تا $n\pi + \pi/4$ رفته و $\cos \phi$ ، n بار صفر می شود. در واقع می توانیم قاعده کوانتش (۱۶-۲-۳۲) را به شرح زیر درک کنیم. اگر در تقریب اول فرض کنیم که ψ باید در ناحیه ای که از نظر کلاسیکی ممنوع است صفر شود نتیجه می شود که این ψ باید تعداد درستی نصف - دوره (نصف طول موج) در بازه $x_1 \leq x \leq x_2$ داشته باشد. این منجر به قاعده کوانتش بوهر - زومرفلد می شود

۱- بعضی موارد استثناء نظیر نوسانگر هماهنگ وجود دارد که این روش برای آنها به ازای همه n ها انرژی های دقیق را به دست می دهد.

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = (n+1)\hbar\pi, \quad n=0, 1, 2, \dots \quad (۴۰-۲-۱۶)$$

اما می‌دانیم که ψ در نقاط بازگشت صفر نمی‌شود و یک دنباله نمایی در ناحیه ممنوعه کلاسیکی دارد. در نتیجه تعداد نصف - دوره‌های کامل شده بین x_1 و x_2 تا حدی کمتر از $n+1$ است. روش همبندی (توابع موج) بیان می‌کند که این تعداد در واقع $n + \frac{1}{2}$ است و از این رو قاعده کوانتش مرسوم، معادله (۱۶-۲-۳۲) است. اما اگر ψ واقعاً در x_1 و x_2 به‌خاطر اینکه سد پتانسیل در آنجا نامتناهی است صفر شود (مثل حالت ذره در جعبه)، معادله (۱۶-۲-۴) [و نه معادله (۱۶-۲-۳۲)] مناسب است.^۱ می‌توان یک حالت میانی هم در نظر گرفت که در آن سد در یک نقطه بازگشت نامتناهی است. در این مورد، قاعده کوانتش یک ضرب $(n + \frac{4}{3})$ در خود دارد.

روش WKB می‌تواند در سه بعد هم برای حل معادله شعاعی در یک مسئله دارای ناوردایی چرخشی به کار رود. در حالت $l=0$ ، هیچ سد گریز از مرکزی وجود ندارد و تابع موج WKB دارای شکل

$$U(r) \sim \frac{1}{[p(r)]^{1/2}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_0^r p(r') dr' \right], \quad p = \{2m[E - V(r)]\}^{1/2} \quad (۴۱-۲-۱۶)$$

است که حد پایین در انتگرال فاز صفر انتخاب شده تا $U(0) = 0$ باشد. شرط کوانتش، با یاد داشتن اینکه سد در $r=0$ نامتناهی است، عبارت می‌شود از

$$\int_0^{r_{\max}} p(r) dr = \left(n + \frac{3}{4}\right) \hbar\pi, \quad n=0, 1, 2, \dots \quad (۴۲-۲-۱۶)$$

که r_{\max} نقطه بازگشت است. این فرمول فقط در صورتی معتبر است که $V(r)$ در مبدا منظم باشد. اگر $V(r)$ در آنجا پرش کند ثابتی که به n اضافه می‌کنیم $\frac{3}{4}$ نبوده بلکه چیز دیگری می‌شود. همچنین اگر $l \neq 0$ باشد، سد گریز از مرکز، رفتار نزدیک $r=0$ را تغییر داده و تابع موج و این ثابت را عوض خواهد کرد.

تمرین ۱۶-۲-۵: در سال ۱۹۷۴ دو ذره جدید موسوم به ψ و ψ' کشف شدند که به ترتیب دارای انرژی‌های سکون 3.1 GeV و 3.7 GeV بودند ($1 \text{ GeV} = 10^9 \text{ eV}$). عقیده بر این بود که اینها حالت‌های مقید غیر نسبییتی یک کوارک «دلریا» به جرم $m = 1.5 \text{ GeV}/c^2$ (یعنی $1.5 \text{ GeV} = mc^2$) و یک پاد کوارک با همین جرم در یک پتانسیل خطی $V(r) = V_0 + kr$ هستند. با فرض اینکه اینها حالت‌های مقید $n=0$ و $n=1$ با تکانه زاویه‌ای مداری صفر هستند، با استفاده از فرمول WKB، V_0 را حساب کنید. برای جرم سکون ψ ، حالت $n=2$ ، چه چیزی پیش‌بینی می‌کنید؟ (مقدار اندازه‌گیری شده $4.2 \text{ GeV}/c^2$ است) [راهنمایی: (۱) - به جای eV با GeV کار کنید. (۲) - نیازی به تعیین k نیست].

۱- فرض اینکه $V(x)$ می‌تواند نزدیک نقطه بازگشت به صورت خطی در آید با شکست مواجه شده و این، معادله (۱۶-۲-۲۹) را بی‌اعتبار می‌سازد.

تمرین ۱۶-۲-۶: معادله (۱۶-۲-۳۹) را برای پتانسیل λx^4 از طریق ترفند مقیاس‌بندی (scaling trick) به دست آورید.

تمرین ۱۶-۲-۷: ترازهای مجاز نوسانگر هماهنگ را با روش *WKB* به دست آورید.

تمرین ۱۶-۲-۸: معادله شعاعی $l=0$ را برای مسئله کولنی در نظر بگیرید. از آنجا که $V(r)$ در نقطه بازگشت $r=0$ تکیه است نمی‌توانیم از $(n + \frac{3}{4})$ استفاده کنیم.

الف- آیا ثابت اضافی کمتر یا بیشتر از $\frac{3}{4}$ خواهد شد؟

ب- با تحلیل معادله دقیق‌تر نزدیک $r=0$ ، می‌توان نشان داد که این ثابت برابر ۱ است. با استفاده از این ثابت نشان دهید که ترازهای انرژی *WKB* با نتایج دقیق توافق دارند.

۱۷-۱- فرمالیزم

نظریه اختلال مستقل از زمان یک روش تقریبی است که در زمینه زیر به کار می‌رود: ما جواب مسئله ویژه مقدراری هامیلتونی H^0 را می‌دانیم و به دنبال جواب $H = H^0 + H^1$ هستیم که در آن H^1 در مقایسه با H^0 کوچک است تا اندازه‌ای که مسئله کمی دقیق شود. برای مثال، H^0 می‌تواند هامیلتونی کولنی برای یک الکترون مقید به پروتون و H^1 هامیلتونی اضافی مربوط به یک میدان الکتریکی خارجی باشد که در مقایسه با میدان پروتون در مکان (متوسط) الکترون ضعیف است. H^0 هامیلتونی مختل نشده و H^1 هامیلتونی مختل کننده یا اختلال نامیده می‌شود.

فرض می‌کنیم که برای هر ویژه کت $|n^0\rangle \equiv |n^0\rangle$ از H^0 با ویژه مقدار E_n^0 ، یک ویژه کت $|n\rangle$ از H با ویژه مقدار E_n وجود دارد.^۱ سپس فرض می‌کنیم که ویژه کت‌ها و ویژه مقادیر H می‌توانند به صورت یک سری اختلالی بسط داده شوند:^۲

$$|n\rangle = |n^0\rangle + |n^1\rangle + |n^2\rangle + \dots \quad (1-1-17)$$

$$E_n = E_n^0 + E_n^1 + E_n^2 + \dots \quad (2-1-17)$$

بالا نویس k روی هر جمله، توان (عنصر ماتریسی) H^1 را نشان می‌دهد که انتظار می‌رود جمله متناسب با آن در بیاید. یک جمله با بالا نویس k ، جمله مرتبه k ام نامیده می‌شود (واضح است که یک حاصل ضرب مثل $|n^k\rangle$ جمله‌ای از مرتبه $k + \bar{k}$ است). بر این امید هستیم که با افزایش مرتبه، جملات به‌طور اصولی و قانونمند کوچکتر شوند؛ این وقتی است که بتوانیم بگوییم H^1 کوچک است. وقتی فرمول‌های صریح را برای $|n^k\rangle$ و E_n^k به دست بیاوریم این مفاهیم روشن خواهند شد.

برای به دست آوردن جملات بسط $|n\rangle$ و E_n ، با معادله ویژه مقدراری

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (3-1-17)$$

۱- فرض می‌کنیم که $|n^0\rangle$ غیر تبهگن است. حالت تبهگن در ادامه می‌آید.

۲- فرض می‌کنیم $|n^0\rangle$ به یک بهنجار است. نرم $|n\rangle$ بزودی بحث خواهد شد.

یا

$$\begin{aligned} & (H^0 + H^1)[|n^0\rangle + |n^1\rangle + \dots] \\ & = (E_n^0 + E_n^1 + \dots)[|n^0\rangle + |n^1\rangle + \dots] \end{aligned} \quad (۴-۱-۱۷)$$

شروع می‌کنیم. به این معادلات به صورتی نزدیک می‌شویم که به معادله دیفرانسیل در تقریب *WKB* نزدیک شدیم. به یاد بیاورید که در آنجا معادله‌ای با جملات مرتبه \hbar^{-2} ، \hbar^{-1} و ... غیره داشتیم و ابتدا از همه جملات به جز جمله \hbar^{-2} چشم‌پوشی کردیم و برای ϕ_0 معادله را حل کردیم. سپس آنرا در قسمت \hbar^{-1} قرار دادیم تا ϕ_1 را تعیین کنیم (می‌توانستیم به همین ترتیب جلو برویم، هر چند خواستیم همانجا متوقف شویم). در این مورد هم، ابتدا جملات مرتبه صفرم معادله (۴-۱-۱۷) را در نظر می‌گیریم و به معادله

$$H^0|n^0\rangle = E_n^0|n^0\rangle \quad (۵-۱-۱۷)$$

می‌رسیم. توجه کنید که کمیت‌های مرتبه - صفرم $|n^0\rangle$ و E_n^0 واقعاً مستقل از H^1 هستند (یا به طور معادل، آنها به توان صفرم H^1 بستگی ندارند). طبق فرض، این معادله می‌تواند حل شده و ویژه بردارها، $|n^0\rangle$ ها، و ویژه مقادیر E_n^0 ها تعیین شوند. پس به سراغ جمله مرتبه اول می‌رویم و به معادله

$$H^0|n^1\rangle + H^1|n^0\rangle = E_n^0|n^1\rangle + E_n^1|n^0\rangle \quad (۶-۱-۱۷)$$

می‌رسیم. هر دو طرف را در $\langle n^0|$ ضرب نقطه‌ای می‌کنیم. با استفاده از $\langle n^0|E_n^0 = \langle n^0|H^0$ و $\langle n^0|n^0\rangle = 1$ به

$$E_n^1 = \langle n^0|H^1|n^0\rangle \quad (۷-۱-۱۷)$$

می‌رسیم. یعنی تغییر مرتبه اول در انرژی، مقدار چشم‌داشتی H^1 در حالت مختل نشده است. توجه کنید که E_n^1 متناسب با توان اول H^1 است. حال هر دو طرف معادله (۶-۱-۱۷) را در $\langle m^0|$ ضرب کنیم، $m \neq n$ ، ضرب نقطه‌ای می‌کنیم و داریم

$$\langle m^0|H^0|n^1\rangle + \langle m^0|H^1|n^0\rangle = E_n^0\langle m^0|n^1\rangle$$

یا

$$\langle m^0|n^1\rangle = \frac{\langle m^0|H^1|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} \quad (۸-۱-۱۷)$$

چون $m \neq n$ است، این معادله همه مولفه‌های $|n^1\rangle$ ، به جز مولفه موازی با $|n^0\rangle$ ، را در ویژه پایه H^0 معین می‌کند. مولفه موازی با $|n^0\rangle$ ، که آنرا $|n_{||}^1\rangle$ می‌نامیم، را با این شرط که $|n\rangle$ تا این مرتبه بهنجار است تعیین می‌کنیم.^۱ در نمادگذاری واضح خود داریم:

$$1 = \langle n|n\rangle = (\langle n^0| + \langle n_{\perp}^1| + \langle n_{||}^1|)(|n^0\rangle + |n_{\perp}^1\rangle + |n_{||}^1\rangle) \quad (9-1-17)$$

که منجر به

$$1 = \langle n^0|n^0\rangle + \langle n_{||}^1|n^0\rangle + \langle n^0|n_{||}^1\rangle + \text{higher order}$$

یا

$$0 = \langle n_{||}^1|n^0\rangle + \langle n^0|n_{||}^1\rangle + \text{higher order} \quad (10-1-17)$$

می‌شود. این بدین معنی است که

$$\langle n^0|n_{||}^1\rangle = i\alpha, \quad \alpha \text{ real} \quad (11-1-17)$$

با استفاده از

$$1 + i\alpha = e^{i\alpha} \quad (\text{تا این مرتبه}) \quad (12-1-17)$$

به

$$|n\rangle = |n^0\rangle e^{i\alpha} + \sum'_m \frac{|m^0\rangle \langle m^0|H^1|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} \quad (13-1-17)$$

می‌رسیم، که پریم روی \sum' به معنی $m \neq n$ است. از آنجا که $|n\rangle$ حتی بعد از بهنجار شدن یک آزادی در فاز کلی خود دارد، فاز آن را به اندازه $e^{-i\alpha}$ در معادله (۱۳-۱-۱۷) تغییر می‌دهیم. این کار باعث رهایی یافتن از عامل فاز ضرب شده در $|n^0\rangle$ شده و تا این مرتبه، تأثیری روی جزء مرتبه-اول نمی‌گذارد. اگر ویژه کت مختل شده، با فاز جدید، را هم $|n\rangle$ بنامیم. تا مرتبه اول به نتیجه زیر می‌رسیم:

$$|n\rangle = |n^0\rangle + \sum'_m \frac{|m^0\rangle \langle m^0|H^1|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} = |n^0\rangle + |n^1\rangle \quad (14-1-17)$$

توجه کنید که $|n^1\rangle$ بر $|n^0\rangle$ عمود بوده و متناسب با توان اول H^1 است (همان‌طور که از قبل انتظار می‌رفت). E_n^2 را از جزء مرتبه-دوم معادله (۴-۱-۱۷) تعیین می‌کنیم:

۱- یادآوری می‌شود حتی در مسائل ویژه مقداری که می‌توانند به‌طور دقیق حل شوند، این آزادی عمل در نرم بردار وجود دارد. تا این مرتبه، فقط $|n_{||}^1\rangle$ طول $|n^0\rangle$ را تغییر می‌دهد [معادله (۱۰-۱-۱۷)] را ببینید.

$$H^0|n^2\rangle + H^1|n^1\rangle = E_n^0|n^2\rangle + E_n^1|n^1\rangle + E_n^2|n^0\rangle \quad (15-1-17)$$

با ضرب نقطه‌ای $\langle n^0|$ و استفاده از نتایج مرتبه پایین‌تر ($|n^1\rangle = |n^1_\perp\rangle$)، نتیجه می‌شود که

$$E_n^2 = \langle n^0|H^1|n^1\rangle \quad (16-1-17)$$

$$= \sum_m \frac{\langle n^0|H^1|m^0\rangle\langle m^0|H^1|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} \quad (17-1-17)$$

$$= \sum_m \frac{|\langle n^0|H^1|m^0\rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0}$$

می‌توانیم به مرتبه‌های بالاتر هم برویم ولی در همین جا توقف می‌کنیم.

قبل از رفتن به سراغ مثال‌ها، بعضی از ویژگی‌های کلی نتایج خود را بررسی می‌کنیم. ابتدا توجه می‌کنیم که انرژی تا یک مرتبه معین، به وسیله بردار حالت یک مرتبه پایین‌تر تعیین می‌شود، معادلات (17-1-17) و (16-1-17) را ببینید. این در توافق با اظهاراتی است که در مطالعه روش وردشی اشاره شدند. فیزیک پشت سر این پدیده وقتی روشن می‌شود که چند مثال را بررسی کنیم. حال سوال این است که تحت چه شرایطی، بسط اختلالی خوب است، یعنی چه زمانی جملات تصحیحی در مقایسه با نتایج مرتبه صفرام (مختل نشده) کوچک هستند. پاسخ از معادله (17-1-17) بیرون می‌آید. شرط لازم برای اینکه $|n^1\rangle$ در مقایسه با $|n^0\rangle$ کوچک باشد آن است که

$$\left| \frac{\langle m^0|H^1|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} \right| \ll 1 \quad (18-1-17)$$

لذا می‌بینیم که این شرط (۱)- به اندازه مطلق H^1 (یعنی اگر H^1 مربوط به یک میدان خارجی باشد، به بزرگی میدان)؛ (۲)- عناصر ماتریسی H^1 بین حالت‌های مختل نشده؛ و (۳)- اختلاف انرژی بین ترازها، بستگی دارد. اگر ویژه حالت مختل نشده، $|n^0\rangle$ باشد، اختلال، حالت‌های متعامد را با آن می‌آمیزد. این آمیختگی مستقیماً با عنصر ماتریسی $\langle m^0|H^1|n^0\rangle$ متناسب بوده و با اختلاف انرژی بین دو تراز، که معیاری از «صلبیت» سیستم است، نسبت عکس دارد. اگر به هر دلیلی نامساوی فوق برآورده نشود (مثلاً به واسطه تبهگنی $E_n^0 = E_m^0$) می‌بایست به سراغ، فرمالیزم دیگری موسوم به نظریه اختلال تبهگن برویم که بعداً در این فصل توضیح داده می‌شود.

۱۷-۲- مثال‌ها

ذره‌ای با بار q و جرم m را در پتانسیل نوسانگر هماهنگ، $V = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ ، در نظر بگیرید. فرض کنید یک میدان الکتریکی خارجی به بزرگی f را در جهت مثبت محور x اعمال کنیم. این متناظر با یک پتانسیل الکتروستاتیک $\phi = -fx$ و انرژی پتانسیل $V = -qfx$ است. بنابراین،

$$H = H^0 + H^1 = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2 - qfX \quad (1-2-17)$$

می‌خواهیم H^1 را با نظریه اختلال بحث کنیم. ابتدا تغییر مرتبه اول انرژی را محاسبه کنیم، که عبارتست از

$$E_n^1 = \langle n^0 | H^1 | n^0 \rangle = -qf \langle n^0 | X | n^0 \rangle \quad (2-2-17)$$

که در آن $|n^0\rangle$ همان حالت n ام نوسانگر مختل نشده است. به طرق مختلف می‌توانیم ببینیم که E^1 صفر می‌شود. از نظر صوری، چون

$$X = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{1/2} (a + a^\dagger) \quad (3-2-17)$$

است، پس دارای هیچ عنصر ماتریسی قطری نمی‌باشد. فیزیک آنچه که اتفاق می‌افتد در پایه مختصه شفاف‌تر است:

$$E_n^1 = -qf \int (\psi_n^0)^* x \psi_n^0 dx \quad (4-2-17)$$

$$= -qf \int |\psi_n^0|^2 x dx$$

حال $\psi_n^0(x)$ ، که ویژه تابع مختل نشده است، دارای پارامتر معین $(-1)^n$ است. در نتیجه $|\psi_n^0|^2$ تابعی زوج است در حالی که پتانسیل خارجی تابعی فرد است. لذا برهم کنش متوسط با میدان خارجی صفر است چون احتمال یافت شدن ذره در ناحیه‌ای با پتانسیل ϕ با احتمال یافتن شدن آن در ناحیه با پتانسیل $-\phi$ یکسان است. توجه کنید که E_n^1 انرژی برهم کنش پیکربندی مختل نشده $|n^0\rangle$ با میدان اعمال شده است. در نتیجه این کل داستان نیست چون خود پیکربندی تحت تأثیر میدان خارجی به $|n^0\rangle + |n^1\rangle + \dots$ تغییر خواهد کرد و باید در واقع انرژی برهمکنش پیکربندی‌های مختل شده و میدان اعمالی را در نظر بگیریم. اما واضح است که این حداقل یک اثر مرتبه دوم است، چون تغییر $\delta|n\rangle \equiv |n\rangle - |n^0\rangle$ در پیکربندی، حداقل یک اثر مرتبه اول است و برهمکنش $\delta|n\rangle$ با میدان اعمال شده مرتبه دیگری از H^1 را در مسئله وارد می‌کند. پس ویژه کت مختل شده را تا مرتبه اول محاسبه کرده و سپس ترازهای انرژی را تا مرتبه دوم محاسبه می‌کنیم. از معادله (1-1-17)،

$$|n\rangle = |n^0\rangle + \sum_m' \frac{|m^0\rangle \langle m^0| - qf(\hbar/2m\omega)^{1/2}(a+a^\dagger)|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} \quad (5-2-17)$$

$$= |n^0\rangle + qf \left(\frac{1}{2m\hbar\omega^3} \right)^{1/2} [(n+1)^{1/2}|(n+1)^0\rangle - n^{1/2}|(n-1)^0\rangle]$$

لذا تا مرتبه اول، اختلال، حالت $|n^0\rangle$ را با حالت بالایی و پایینی آن می‌آمیزد. قبلاً گفته شد که $E_n^0 - E_m^0$ معیاری از «صلبیت» سیستم است. در این مثال می‌بینیم که این کمیت متناسب با ω است که در مورد جرم - فنر

معیاری از ثابت نیروست. تابع موج حالت مختل شده به چه شکلی خواهد بود؟ این از معادله بالا مشخص نیست اما انتظار داریم که توزیع احتمالی را نمایش دهد که دیگر متمرکز و متقارن حول $x = 0$ نیست بلکه متمایل به طرف مثبت محور x ها شده است (چون این جهت، جهت میدان خارجی است). این تصویر را به صورت کیفی تأیید خواهیم کرد.

تغییر انرژی مرتبه دوم (که منعکس کننده این است که پیکربندی سیستم، $|n^0\rangle$ نبوده بلکه $|n^1\rangle + |n^0\rangle$ است)، برابر است با

$$E_n^2 = \langle n^0 | H^1 | n^1 \rangle = \sum_m \frac{|\langle m^0 | H^1 | n^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} \quad (6-2-17)$$

$$= q^2 \cdot f^2 \cdot \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\frac{n+1}{-\hbar\omega} + \frac{n}{\hbar\omega} \right) = \frac{-q^2 f^2}{2m\omega^2}$$

این مسئله، مورد خوبی برای محک نظریه اختلال است چون می تواند به طور دقیق حل شود زیرا H می تواند به صورت زیر نوشته شود:

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2 - qfX \quad (7-2-17)$$

$$= \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \left(X - \frac{qf}{m\omega^2} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{q^2 f^2}{m\omega^2}$$

این هامیلتونی یک نوسانگر با فرکانس ω را توصیف می کند اما از این نظر که (۱)- نوسانگر متمرکز در $x = qf / m\omega^2$ است (۲)- به هر حالت یک انرژی ثابت $(-q^2 f^2 / 2m\omega^2)$ اضافه شده است، با آن تفاوت دارد. لذا ویژه توابع H همان ویژه توابع H^0 هستند که به اندازه $-qf / m\omega^2$ جابه جا شده اند و ویژه مقادیر عبارتند از $E_n = E_n^0 - q^2 f^2 / 2m\omega^2$. تصویر کلاسیکی همراه معادله (۷-۲-۱۷) روشن است: اثر یک نیروی ثابت qf روی جرم جفت شده به یک فنر با ثابت نیروی $m\omega^2$ ، جابه جایی نقطه تعادل به $x = qf / m\omega^2$ است (جرم آویزان از یک فنر متصل به سقف را تصور کنید و ببینید گرانش چه اثری بر دینامیک آن دارد) این نتایج دقیق را با نظریه اختلال مقایسه می کنیم. انرژی

$$E_n = E_n^0 - q^2 f^2 / 2m\omega^2 \quad (8-2-17)$$

را در نظر بگیرید. چون H^1 متناسب با qf است، توان qf ، مرتبه جمله را به دست می دهد. با توجه به معادله (۸-۲-۱۷)، هیچ تغییر انرژی مرتبه اولی وجود نداشته و تغییر مرتبه دوم، $-q^2 f^2 / 2m\omega^2$ است که با معادله (۶-۲-۱۷) در توافق است. اگر تا مرتبه های بالاتر هم ادامه می دادیم چیز بیشتری به دست نمی آوردیم. اینک بردارهای حالت را در نظر بگیرید. نتیجه دقیق عبارتست از

$$|n\rangle = T(qf/m\omega^2) |n^0\rangle \quad (9-2-17)$$

که $T(a)$ عملگری است که سیستم را به اندازه a منتقل می کند. از آنجا که تا مرتبه اول از qf کار می کنیم،

$$T(qf/m\omega^2) = e^{-i(qf/m\omega^2\hbar)P} \simeq I - i \left(\frac{qf}{m\omega^2\hbar} \right) P$$

$$= I - i \left(\frac{qf}{m\omega^2\hbar} \right) \left(\frac{\hbar m\omega}{2} \right)^{1/2} \cdot \frac{a - a^\dagger}{i}$$

به طوری که

$$|n\rangle = \left[I - \left(\frac{qf}{m\omega^2\hbar} \right) \left(\frac{\hbar m\omega}{2} \right)^{1/2} (a - a^\dagger) \right] |n^0\rangle$$

$$= |n^0\rangle + qf \left(\frac{1}{2m\hbar\omega^3} \right)^{1/2} [(n+1)^{1/2} |(n+1)^0\rangle - n^{1/2} |(n-1)^0\rangle]$$

که با (۱۷-۲-۵) در توافق است. واضح است که محاسبه $|n\rangle$ تا مرتبه بالاتر در نظریه اختلال معادل با بسط T تا مرتبه‌های بالاتر qf خواهد بود.

تمرین ۱۷-۲-۱: $H^1 = \lambda x^4$ را برای مسئله نوسانگر در نظر گرفته، الف- نشان دهید که

$$E_n^1 = \frac{3\hbar^2\lambda}{4m^2\omega^2} [1 + 2n + 2n^2]$$

ب- ثابت کنید که قطع نظر از اینکه λ چقدر کوچک است، بسط اختلال برای یک n بقدر کافی بزرگ با شکست مواجه می‌شود. دلیل فیزیکی چیست؟

تمرین ۱۷-۲-۲: یک ذره اسپین $-\frac{1}{2}$ را با نسبت ژیرومغناطیسی γ در یک میدان مغناطیسی $\mathbf{B} = B\hat{i} + B_0\hat{k}$ در نظر بگیرید. B را به صورت اختلال بحث کرده، تغییرات مرتبه اول و دوم انرژی و تغییر مرتبه اول تابع موج را برای حالت پایه حساب کنید، سپس با جواب‌های دقیق بسط داده شده تا مرتبه‌های متناظر مقایسه کنید.

تمرین ۱۷-۲-۳: در مطالعه اتم H ، فرض کردیم که پروتون یک بار نقطه‌ای e است. این فرض به برهمکنش کولنی آشنا $(-e^2/r)$ با الکترون منجر شد. الف- نشان دهید که اگر پروتون یک توزیع بار با چگالی یکنواخت به شعاع R باشد، این برهمکنش عبارت می‌شود از

$$V(r) = -\frac{3e^2}{2R} + \frac{e^2 r^2}{2R^3}, \quad r \leq R$$

$$= -\frac{e^2}{r}, \quad r > R$$

ب- تغییر مرتبه اول در انرژی حالت پایه هیدروژن بواسطه این تصحیح را محاسبه کنید. می‌توانید فرض کنید که $e^{-R/a_0} = 1$ است. باید به $E^1 = 2e^2 R^2 / 5a_0^2$ برسید.

تمرین ۱۷-۲-۴: الف- قاعده جمع توماس - ریچ - کوهن^۱ را ثابت کنید:

$$\sum_n (E_n - E_n) |\langle n' | X | n \rangle|^2 = \sum_n (E_n - E_n) \langle n | X | n' \rangle \langle n' | X | n \rangle = \frac{\hbar^2}{2m}$$

که $|n\rangle$ و $|n'\rangle$ ویژه حالت‌های $H = p^2/2m + V(x)$ هستند (راهنمایی: $E_{n'} - E_n$ را به نفع H حذف کنید).

ب- این قاعده جمع را روی حالت n ام نوسانگر امتحان کنید.

تمرین ۱۷-۲-۵: (سخت). دیده‌ایم که اگر دافعه e^2/r_{12} بین دو الکترون حالت پایه هلیوم را نادیده بگیریم، انرژی $-8R_y = -108.8eV$ می‌شود. با در نظر گرفتن e^2/r_{12} به عنوان یک اختلال، نشان دهید که

$$\langle 100, 100 | H^1 | 100, 100 \rangle = \frac{5}{2} R_y$$

به طوری که $E_0^+ + E_0^- = -5.5R_y = -74.8eV$. به یاد آورید که مقدار اندازه‌گیری شده، $-78.6eV$ و برآورد وردشی -77.5 است (راهنمایی: $\langle H^1 \rangle$ می‌تواند به عنوان برهمکنش بین دو توزیع بار هم مرکز با تقارن کروی و افت نمایی تلقی شود. پتانسیل $\phi(r)$ مربوط به یک توزیع را به دست آورده و انرژی برهم‌کنش بین این پتانسیل و توزیع بار دیگر را حساب کنید).

قواعد گزینش. در دسر موجود در محاسبات نظریه اختلال با استفاده از قواعد گزینش، که به ما این امکان را می‌دهند که بدون محاسبه صریح نتیجه بگیریم که بعضی عناصر ماتریسی H^1 صفرند، تا حد زیادی کاهش می‌یابد. این قواعد بر این پایه استوارند که اگر

$$[\Omega, H^1] = 0$$

باشد آنگاه!

$$\langle \alpha_2 \omega_2 | H^1 | \alpha_1 \omega_1 \rangle = 0, \quad \omega_1 = \omega_2 \quad \text{مگر} \quad (17-2-12)$$

اثبات:

$$0 = \langle \alpha_2 \omega_2 | \Omega H^1 - H^1 \Omega | \alpha_1 \omega_1 \rangle = (\omega_2 - \omega_1) \langle \alpha_2 \omega_2 | H^1 | \alpha_1 \omega_1 \rangle \quad \text{Q.E.D.}$$

برای مثال $H^1 = \lambda Z$ را در نظر بگیرید، که تحت چرخش حول محور z ناورداست. در این صورت $[L_z, H^1] = 0$ بوده و

$$\langle \alpha_2 m_2 | H^1 | \alpha_1 m_1 \rangle = 0, \quad m_2 = m_1 \quad \text{مگر} \quad (17-2-13)$$

(این نتیجه از قضیه ویگنر-اکارت هم به دست می‌آید). یا اگر H^1 ناوردای پاریته باشد، مثلاً $H^1 = \lambda z^2$ ، عنصر ماتریسی آن بین حالت‌های با پاریته مخالف صفر می‌شود.

روش ساده‌ای برای درک معادله (۱۷-۲-۱۲) وجود دارد. گفتن اینکه $[\Omega, H^1] = 0$ است همان گفتن این است که H^1 «هیچ Ω یی حمل نمی‌کند»؛ به عبارت دیگر وقتی H^1 روی یک حالت اثر می‌کند هیچ سهمی از Ω به آن نمی‌دهد. این موضوع را در زیر می‌بینیم. $\langle \omega_1 |$ را در نظر بگیرید که یک مقدار معین از متغیر Ω حمل می‌کند (دارد) یعنی ω_1 :

$$\Omega |\omega_1\rangle = \omega_1 |\omega_1\rangle \quad (17-2-14)$$

فرض کنید Ω را در این حالت بعد از اثر H^1 روی آن اندازه بگیریم:

$$\Omega(H^1|\omega_1\rangle) = H^1\Omega|\omega_1\rangle = H^1\omega_1|\omega_1\rangle = \omega_1(H^1|\omega_1\rangle) \quad (17-2-15)$$

می‌بینیم که این مقدار با مقدار قبلی یعنی ω_1 یکسان است. پس قاعده گزینش صرفاً تعامد ویژه حالت‌های با ω متفاوت را منعکس می‌کند.

این بحث زمینه‌ای برای توسعه قاعده گزینش به حالتی که در آن H^1 مقدار معینی از Ω را با خود حمل می‌کند فراهم می‌نماید. برای مثال اگر H^1 یک عملگر تانسوری، T_k^q ، باشد، تکانه زاویه‌ای (k, q) حمل می‌کند و از قضیه ویگنر - اکارت می‌دانیم که

$$\langle \alpha_2 j_2 m_2 | T_k^q | \alpha_1 j_1 m_1 \rangle = 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} j_1 + k \geq j_2 \geq |j_1 - k| \\ m_2 = m_1 + q \end{array} \right. \text{ مگر} \quad (17-2-16)$$

یعنی اینکه عنصر ماتریسی صفر می‌شود مگر اینکه $\langle \alpha_2 j_2 m_2 |$ دارای تکانه‌ای باشد که وقتی تکانه زاویه‌ای (k, q) داده شده توسط عملگر را با $(j_1 m_1)$ جمع می‌کنیم به دست می‌آید. برای نمونه اگر $H^1 = \lambda Z \sim T_1^0$ باشد داریم:

$$\langle \alpha_2 j_2 m_2 | Z | \alpha_1 j_1 m_1 \rangle = 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} j_2 = j_1 + 1, j_1, j_1 - 1 \\ m_2 = m_1 + q \end{array} \right. \text{ مگر} \quad (17-2-17)$$

در حالی که اگر $H^1 = \lambda X$ یا λY ($\sim T_1^{\pm 1}$) باشد داریم

$$\langle \alpha_2 j_2 m_2 | X \text{ or } Y | \alpha_1 j_1 m_1 \rangle = 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} j_2 = j_1 + 1, j_1, j_1 - 1 \\ m_2 = m_1 \pm 1 \end{array} \right. \text{ مگر} \quad (17-2-18)$$

مثالی دیگر از این نوع، عملگری است که ناوردای پارته نیست بلکه پارته فرد دارد. نمونه آن X است که از

$$\Pi^\dagger X \Pi = -X \quad (17-2-19)$$

پیروی می‌کند. می‌توانید ثابت کنید که اگر X روی حالتی با پارته معین اثر کند پارته حالت را تغییر می‌دهد. لذا عنصر ماتریسی X بین ویژه حالت‌های پارته، صفر می‌شود مگر اینکه آنها پارته مخالف داشته باشد. به طور کلی تر، اگر

$$\Pi^\dagger \Omega \Pi = -\Omega \quad (20-2-17)$$

آنگاه عنصر ماتریسی Ω بین دو ویژه حالت پاریده، صفر می شود مگر اینکه آنها پاریده مخالف داشته باشند. با ترکیب این قواعد گزینش می توانیم به قواعد گزینش بیشتری برسیم. برای مثال می توانیم قواعد گزینش پاریده و تکانه زاویه ای را برای عملگرهای برداری \mathbf{R} ترکیب کنیم (در نبود اسپین، $\mathbf{J} = \mathbf{L}$)، نتیجه اینکه

$$\langle \alpha_2 l_2 m_2 | Z | \alpha_1 l_1 m_1 \rangle = 0 \quad \begin{cases} l_2 = l_1 \pm 1 \\ m_2 = m_1 \end{cases} \text{ مگر} \quad (21-2-17)$$

$$\langle \alpha_2 l_2 m_2 | X \text{ or } Y | \alpha_1 l_1 m_1 \rangle = 0 \quad \begin{cases} l_2 = l_1 \pm 1 \\ m_2 = m_1 \pm 1 \end{cases} \text{ مگر}$$

ما امکان $l_2 = l_1$ را طبق قاعده گزینش پاریده رد می کنیم چون حالت های دارای تکانه زاویه ای مداری l دارای پاریده معین $l^1 (-1)$ هستند. معادله (21-2-17) قاعده گزینش دو قطبی نامیده می شود. اکنون مثالی را بررسی می کنیم که کاربرد این ترفندها را نشان می دهد. مسئله، تعیین پاسخ اتم هیدروژن در حالت پایه به یک میدان الکتریکی خارجی ثابت، $\mathcal{H} = \mathcal{H}^0 + e\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}$ ، است که اثر استارک نامیده می شود. ابتدا H^1 را حساب می کنیم و این کار را با تعیین \mathcal{H}^1 ، نظیر کلاسیکی آن و سپس جانشینی عملگر انجام می دهیم. اگر \mathbf{r}_1 و \mathbf{r}_2 به ترتیب بردارهای مکان الکترون و پروتون باشند و $\phi(r)$ پتانسیل الکتروستاتیک مربوط به \mathbf{E} باشد آنگاه

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^1 &= -e\phi(\mathbf{r}_1) + e\phi(\mathbf{r}_2) \\ &= e[\phi(\mathbf{r}_2) - \phi(\mathbf{r}_1)] \\ &= e(\mathbf{e}_1 - \mathbf{r}_2) \cdot \mathbf{E} \quad (\mathbf{E} = -\nabla\phi \text{ یادآوری}) \\ &= e\mathbf{r} \cdot \mathbf{E} \end{aligned} \quad (22-2-17)$$

که \mathbf{r} مختصه نسبی یا به طور معادل بردار مکان الکترون در چارچوب مرکز جرم در حد $m/M = 0$ است. \mathcal{H}^1 برهمکنش دو قطبی نامیده می شود چون برحسب

$$\boldsymbol{\mu}_e = e(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) = -e\mathbf{r} \quad (23-2-17)$$

گشتاور دو قطبی الکتریکی سیستم،

$$\mathcal{H}^1 = -\boldsymbol{\mu}_e \cdot \mathbf{E} \quad (24-2-17)$$

(این مانسته الکتریکی $\mathcal{H} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$ است).¹ لذا برای میدان الکتریکی داده شده،

$$H^1 = eZ\mathcal{E} \quad (25-2-17)$$

۱- در بقیه این فصل اندیس e مربوط به $\boldsymbol{\mu}_e$ را حذف می کنیم.

اکنون تغییر مرتبه اول در انرژی حالت پایه $|100\rangle$ را حساب می‌کنیم:

$$E_{100}^1 = \langle 100 | eZ\mathcal{E} | 100 \rangle \quad (26-2-17)$$

می‌توان بر پایه پارته یا قضیه ویگنر-اکارت استدلال کرد که $E_{100}^1 = 0$ است. به‌طور فیزیکی تر، E_{100}^1 صفر می‌شود چون در حالت مختل نشده توزیع احتمال الکترون دارای تقارن کروی است و الکترون به‌طور مساوی از $\phi(\mathbf{r})$ و $\phi(-\mathbf{r}) = -\phi(\mathbf{r})$ نمونه‌گیری می‌کند. روش دیگر بیان این مطلب آن است که اتم مختل نشده دارای هیچ گشتاور دو قطبی الکتریکی میانگین $\langle \boldsymbol{\mu} \rangle$ نیست (طبق پارته یا قضیه ویگنر-اکارت) به‌طوری که

$$E_{100}^1 = \langle 100 | -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{E} | 100 \rangle = -\langle 100 | \boldsymbol{\mu} | 100 \rangle \cdot \mathbf{E} = 0 \quad (27-2-17)$$

اما انتظار داریم که تغییر مرتبه دوم انرژی غیر صفر باشد چون میدان خارجی توزیع الکترون را به سمت پایین جابه‌جا کرده و یک گشتاور دو قطبی القا می‌کند که می‌تواند با \mathbf{E} برهمکنش کند. از این‌رو

$$E_{100}^2 = \sum'_{nlm} \frac{e^2 \mathcal{E}^2 |\langle nlm | Z | 100 \rangle|^2}{E_{100}^0 - E_{nlm}^0} \quad (28-2-17)$$

را محاسبه می‌کنیم که در آن

$$E_{100}^0 - E_{nlm}^0 = -Ry \left(1 - \frac{1}{n^2} \right) = Ry \left(\frac{1 - n^2}{n^2} \right) \quad (29-2-17)$$

برخلاف نوسانگر، جمع در اینجا شامل تعداد نامتناهی از جملات است. اگرچه می‌توانیم از قواعد گزینش دو قطبی استفاده کنیم تا جمع فوق را به جمع زیر تقلیل دهیم

$$E_{100}^2 = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{e^2 \mathcal{E}^2 |\langle n10 | Z | 100 \rangle|^2}{E_1^0 - E_n^0} \quad (30-2-17)$$

ولی شکل معادله (28-2-17) را تا مدتی حفظ می‌کنیم. به چند طریق می‌توانیم پیش برویم: روش ۱: چون بزرگی مخرج با n زیاد می‌شود نامساوی زیر را داریم

$$|E_{100}^2| \leq \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{|E_1^0 - E_2^0|} \sum'_{nlm} |\langle nlm | Z | 100 \rangle|^2$$

اما چون

$$\begin{aligned} & \sum'_{nlm} |\langle nlm|Z|100\rangle|^2 \\ &= \sum'_{nlm} \langle 100|Z|nlm\rangle \langle nlm|Z|100\rangle \\ &= \sum_{nlm} \langle 100|Z|nlm\rangle \langle nlm|Z|100\rangle - \langle 100|Z|100\rangle^2 \quad (31-2-17) \\ &= \langle 100|Z^2|100\rangle - \langle 100|Z|100\rangle^2 \\ &= a_0^2 - 0 = a_0^2 \end{aligned}$$

داریم:

$$\begin{aligned} |E_{100}^2| &\leq \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{|(e^2/2a_0)(1-\frac{1}{4})|} a_0^2 \\ &\leq \frac{8a_0^3 \mathcal{E}^2}{3} \quad (32-2-17) \end{aligned}$$

می‌توانیم با نگره‌داشتن جمله اول در معادله (31-2-17) به کران پایین $|E_{100}^2|$ هم برسیم (چون همه جملات علامت یکسان دارند):

$$|E_{100}^2| \geq \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{3e^2/8a_0} |\langle 210|Z|100\rangle|^2 \quad (33-2-17)$$

حال

$$|\langle 210|Z|100\rangle|^2 = \frac{2^{15} a_0^2}{3^{10}} \simeq 0.55 a_0^2 \quad (34-2-17)$$

به‌طوری که

$$|E_{100}^2| \geq (0.55)^{\frac{8}{3}} \mathcal{E}^2 a_0^3 \quad (35-2-17)$$

لذا $|E_{100}^2|$ به بازه زیر محدود می‌شود

$$\frac{8}{3} \mathcal{E}^2 a_0^3 \geq |E_{100}^2| \geq 0.55 \left(\frac{8}{3}\right) \mathcal{E}^2 a_0^3 \quad (36-2-17)$$

روش ۲: مسئله عمومی محاسبه

$$E_n^2 = \sum'_m \frac{\langle n^0|H^1|m^0\rangle \langle m^0|H^1|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} \quad (37-2-17)$$

را در نظر بگیرد. اگر مخرج نمی‌بود می‌توانستیم با استفاده از رابطه کامل بودن، جمع را حذف کنیم (بعد از جمع و تفریق جمله $m = n$). مخرج را به روش زیر حذف می‌کنیم: ^۱ فرض کنید می‌توانیم یک عملگر Ω را پیدا کنیم به‌طوری که

$$H^1 = [\Omega, H^0] \quad (۳۸-۲-۱۷)$$

باشد، آنگاه

$$\begin{aligned} E_n^2 &= \sum_m' \frac{\langle n^0 | H^1 | m^0 \rangle \langle m^0 | \Omega H^0 - H^0 \Omega | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} \\ &= \sum_m' \langle n^0 | H^1 | m^0 \rangle \langle m^0 | \Omega | n^0 \rangle \\ &= \langle n^0 | H^1 \Omega | n^0 \rangle - \langle n^0 | H^1 | n^0 \rangle \langle n^0 | \Omega | n^0 \rangle \end{aligned} \quad (۳۹-۲-۱۷)$$

که فقط مستلزم محاسبه سه عنصر ماتریسی است. اما پیدا کردن Ω بی که معادله (۳۸-۲-۱۷) را برآورده کند مسئله آسانی نیست (هر چند استثناهایی هم وجود دارد، تمرین (۷-۲-۱۷) را ببینید). پیشنهاد مرسوم این است که برای یک $|n^0\rangle$ معین Ω را طوری پیدا کنیم که،

$$H^1 |n^0\rangle = [\Omega, H^0] |n^0\rangle \quad (۴۰-۲-۱۷)$$

باشد. می‌توانید ثابت کنید که این کل کاری است که برای به دست آوردن معادله (۳۹-۲-۱۷) برای یک $|n^0\rangle$ معین انجام می‌شود. در مسئله مورد نظر ما لازم است تا معادله زیر حل شود

$$H^1 |100\rangle = [\Omega, H^0] |100\rangle \quad (۴۱-۲-۱۷)$$

با نوشتن این معادله در پایه مختصه و فرض اینکه Ω تابعی از مختصه‌ها، و نه تکانه‌ها، است می‌توانیم نشان دهیم که

$$\Omega \xrightarrow{\text{coordinate basis}} -\frac{ma_0 e \mathcal{E}}{\hbar^2} \left(\frac{r^2 \cos \theta}{2} + a_0 r \cos \theta \right) \quad (۴۲-۲-۱۷)$$

پس تغییر مرتبه دوم دقیق برابر است با

$$\begin{aligned} |E_{100}^2| &= |\langle 100 | H^1 \Omega | 100 \rangle - 0| \\ &= |\langle 100 | eZ \mathcal{E} \Omega | 100 \rangle| \\ &= \frac{9}{4} a_0^3 \mathcal{E}^2 = \frac{8}{3} a_0^3 \mathcal{E}^2 \cdot \left(\frac{27}{32}\right) \\ &= (0.84) \frac{8}{3} a_0^3 \mathcal{E}^2 \end{aligned} \quad (۴۳-۲-۱۷)$$

که تقریباً در میانه بازه‌ای است که به وسیله روش ۱ به آن محدود شدیم.

تمرین ۱۷-۲-۶: معادله (۳۴-۲-۱۷) را ثابت کنید.

تمرین ۱۷-۲-۷: برای نوسانگر، $H^1 = -qfX$ را در نظر بگیرید. یک Ω پیدا کنید که معادله (۲-۱۷-۳۸) را برآورده کند. آن را در معادله (۳۹-۲-۱۷) برای E_n^2 قرار داده و با محاسبه قبلی مقایسه کنید.

تمرین ۱۷-۲-۸: مراحل رسیدن از معادله (۴۱-۲-۱۷) به (۴۳-۲-۱۷) را بنویسید. تلاش کنید با استفاده از بحث‌های تقارنی مشکلات موجود در انتگرال را کاهش دهید.

قبلاً استدلال کردیم که E_{100}^2 برهمکنش گشتاور دو قطبی القایی را با میدان اعمال شده نمایش می‌دهد. گشتاور القایی μ چقدر بزرگ است؟ یک روش پیدا کردن جواب این سوال محاسبه $\langle \mu \rangle$ در حالت پایه مختل شده است. روش راحت‌تر استخراج آن از E_{100}^2 است. فرض کنید سیستمی داریم که هیچ گشتاور دو قطبی ذاتی ندارد و یک میدان الکتریکی خارجی در لحظه صفر روشن شده و از ۰ تا مقدار کامل E زیاد می‌شود. طی این مدت گشتاور دو قطبی از صفر تا μ زیاد می‌شود. اگر بارهای $\pm q$ را به فاصله x در امتداد E تصور کنید می‌توانید ببینید که کار انجام شده روی سیستم برای تغییر x به اندازه dx برابر است با

$$dW = -q\mathcal{E} dx \quad (17-2-44)$$

$$= -\mathcal{E} d\mu$$

اگر فرض کنیم گشتاور القایی متناسب با E است:

$$\mu = \alpha E \quad (17-2-45)$$

(که α قطبش پذیری است)، آنگاه

$$dW = -\alpha \mathcal{E} d\mathcal{E}$$

یا

$$W = -\frac{1}{2}\alpha \mathcal{E}^2 \quad (17-2-46)$$

W را با E_{100}^2 مساوی قرار داده و قطبش پذیری را تعیین می‌کنیم

$$\alpha = \frac{18}{4} a_0^3 \simeq \frac{18}{4} (0.5 \text{ \AA})^3 \simeq 0.56 \text{ \AA}^3 \quad (17-2-47)$$

اگر مقدار دقیق‌تر $a_0 = 0.53 \text{ \AA}$ را به کار ببریم به $\alpha = 0.67 \text{ \AA}^3$ می‌رسیم که در توافق بسیار خوبی با مقدار اندازه‌گیری شده 0.68 \AA^3 است. برای E معین می‌توانیم μ را از معادله (17-2-45) به دست آوریم. سرانجام توجه کنید که E_{100}^2 منفی است. از معادله (17-1-17) واضح است که تغییر مرتبه دوم در انرژی حالت پایه همیشه منفی است (مگر اینکه صفر شود). از آنجا که E_0^2 تغییر انرژی مربوط به تغییر مرتبه اول در بردار حالت پایه را اندازه می‌گیرد نتیجه می‌گیریم که سیستم پیکر بندی خود را تغییر می‌دهد تا انرژی برهمکنش خود با میدان خارجی را پایین‌تر آورد.

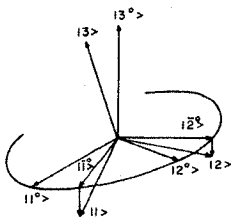
۱۷-۳- نظریهٔ اختلال تبهگن

در مواجهه با تبهگنی ($E_n^0 = E_m^0$)، امکان برآورده شدن شرط اعتبار بسط اختلال،

$$\left| \frac{\langle m^0 | H^1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} \right| \ll 1 \quad (17-3-1)$$

غیرممکن است. شکست این روش را می‌توان بشرح ذیل توضیح داد:

وضعیتی را در نظر بگیرید که نه H^0 و نه $H^0 + H^1$ تبهگن است. برای مقاصد این بحث، تصور کنید که H^1 مربوط به یک میدان خارجی است که می تواند به طور پیوسته از مقدار صفر به مقدار کامل خود تغییر داده شود. وقتی هامیلتونی کل از H^0 به $H^0 + H^1$ تغییر می کند، ویژه پایه متناظر به طور پیوسته از $|n^0\rangle$ به $|n\rangle$ تغییر می کند. همین تغییر پیوسته یا تحلیلی ویژه پایه با اختلال است که این امکان را می دهد تا با شروع از $|n^0\rangle$ ، $|n\rangle$ را به دست آوریم، روشی که در آن مقدار یک تابع تحلیلی در نقطه $x + a$ با شروع از نقطه x و با استفاده از سری تیلور به دست می آید. موردی را در نظر بگیرید که H^0 یک زیر فضای تبهگن داشته و $H^0 + H^1$ در این زیر فضا غیر تبهگن است (موارد کلی تر هم می توانند به همین شیوه بحث شوند). تصور کنید که با پایه $|n\rangle$ شروع کرده و به آرامی اختلال را خاموش کنیم، در این صورت به پایه $|\bar{n}^0\rangle$ هامیلتونی H^0 خواهیم رسید. اگر اکنون اختلال را روشن کنیم می توانیم مجدداً مسیر را به عقب برگشته و به $|n\rangle$ برسیم. واضح است که اگر با این پایه شروع کنیم، $|\bar{n}^0\rangle$ ، می توانیم $|n\rangle$ را به صورت اختلالی محاسبه کنیم. اما چون H^0 تبهگن است، لازم نیست با این پایه شروع کرده باشیم بلکه می توانستیم با پایه دیگر $|n^0\rangle$ ، که می تواند تصادفی انتخاب شود، شروع کنیم. اما اگر با هر پایه ای غیر از $|\bar{n}^0\rangle$ شروع کرده و میدان خارجی، با اندازه بی نهایت کوچک، را روشن کنیم تغییر در پایه، بی نهایت کوچک نخواهد بود. همین رفتار غیر تحلیلی است که با واگرایی در عنصر ماتریسی مرتبه -اول نشان داده می شود [این می تواند با واگرایی مشق اول در سری تیلور، وقتی $f(x)$ ناپیوسته است، مقایسه شود]. بنابراین می بایست با پایه صحیح در فضای تبهگن شروع کنیم. قبلاً این پایه را بدین صورت مشخص کردیم که پایه ای است که در صورت شروع با $|n\rangle$ و خاموش کردن آرام H^1 به آن می رسیم. روش مفیدتر برای مشخص نمودن این پایه چنین است: پایه ای است که H^1 را درون فضای تبهگن قطری می کند. چرا؟ چون، اگر با این پایه شروع کنیم، ضریب اختلال مرتبه اول [معادله (۱۷-۱)] پرش نمی کند (بزرگ نمی شود)، چون عنصر ماتریسی (غیر قطری) صورت، هر وقت که $|n^0\rangle$ و $|m^0\rangle$ متعلق به فضای تبهگن باشند، همراه مخرج صفر می شود. شکل ۱۷-۱ مثال ساده ای از $V^3(R)$ را نشان می دهد که در آن، صفحه $x - y$ فضای تبهگن بوده و $|1^0\rangle$ و $|2^0\rangle$ بردارهای پایه در آن فضا هستند که به صورت تصادفی انتخاب شده اند. نقطه شروع صحیح، زوج $|\bar{1}^0\rangle$ و $|\bar{2}^0\rangle$ هستند که H^1 را در صفحه $x - y$ قطری می کنند.



شکل ۱۷-۱: مثالی از مسئله تبهگن در $V^3(R)$. در صفحه $x - y$ ، که زیر فضای تبهگن است، نباید با هر زوج منتخب از بردارهای پایه $|1^0\rangle$ و $|2^0\rangle$ شروع کنیم باید با زوج $|\bar{1}^0\rangle$ و $|\bar{2}^0\rangle$ شروع کنیم که H^1 را قطری می کنند.

خوب است توجه شود که برای پیدا کردن نقطه شروع صحیح، لازم است پایه‌ای را پیدا کنیم که H^1 را فقط درون فضای تهنگن، و نه کل فضای هیلبرت، قطری می‌کند. بنابراین حتی اگر با فضاهای بی‌نهایت بعدی کار کنیم قطری‌سازی دقیق معمولاً باید فقط در یک زیر فضای کوچک با بعد متناهی صورت گیرد.

به عنوان مثال عملی، اثر استارک را در تراز $n = 2$ هیدروژن در نظر می‌گیریم (اسپین را که یک متغیر ناظر و بی اثر است نادیده می‌گیریم). آیا می‌توانیم نتیجه بگیریم که هیچ تغییر مرتبه اولی وجود ندارد، چون طبق ناوردایی پارته، یا به‌طور معادل چون اتم در این حالت‌ها هیچ گشتاور دو قطبی ذاتی ندارد:

$$\langle 2lm | e\mathcal{E}Z | 2lm \rangle = 0 \tag{۱۷-۳-۲}$$

خیر، چون لزومی ندارد این حالت‌ها با توجه به تهنگنی، نقاط شروع صحیح برای یک محاسبه اختلالی باشند. ما باید ابتدا پایه‌ای را در بخش (سکتور) $n = 2$ پیدا کنیم که H^1 را قطری می‌کند. با استفاده از قواعد گزینش، که بیان می‌کنند که تنها دو عنصر از ۱۶ عنصر ماتریس غیر صفرند، داریم

$$H^1 \rightarrow \begin{matrix} & \begin{matrix} nlm \\ 200 \\ 210 \\ 211 \\ 21-1 \end{matrix} \\ \begin{matrix} 200 \\ 210 \\ 211 \\ 21-1 \end{matrix} & \begin{bmatrix} 200 & 210 & 211 & 21-1 \\ 0 & \Delta & 0 & 0 \\ \Delta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix} \tag{۱۷-۳-۳}$$

که در آن

$$\Delta = \langle 200 | e\mathcal{E}Z | 210 \rangle = -3e\mathcal{E}a_0 \tag{۱۷-۳-۴}$$

تمرین ۱۷-۳-۱: با استفاده از قواعد گزینش دو قطبی نشان دهید که H^1 به شکل بالا بوده و محاسبه مربوط به Δ را انجام دهید.

از آنجا که H^1 همان Δ ضربدر ماتریس پائولی σ_x در سکتور $m = 0$ است، استنباط می‌کنیم که ویژه مقادیر آن، $\pm\Delta$ بوده و ویژه حالت‌های آن $\frac{1}{\sqrt{2}}[|200\rangle \pm |210\rangle]$ هستند. در سکتور $|m| = 1$ ، حالت‌های قدیمی $|2, 1, \pm 1\rangle$ ، H^1 را قطری می‌کنند. محاسبه ما بیان می‌کند که:

(۱) - حالت‌های مرتبه صفرم پایدار تحت اختلال عبارتند از $|2, 1, \pm 1\rangle$ و $\frac{1}{\sqrt{2}}[|200\rangle \pm |210\rangle]$.

(۲) - تغییر مرتبه اول E^1 برای دو حالت اول، صفر و برای دو حالت بعدی، $\pm\Delta$ است (توجه: Δ منفی است).

توجه داشته باشید که ویژه حالت‌های پایدار که برای آنها $E^1 \neq 0$ است، مخلوطی از $l = 0$ و $l = 1$ هستند. بنابراین دارای پارته نامعین بوده و می‌توانند گشتاور دو قطبی ذاتی داشته باشند که می‌تواند با E برهمکنش کرده و ایجاد تغییر انرژی مرتبه اول بکند. از تغییر انرژی، استنباط می‌کنیم که اندازه گشتاور دو قطبی، $3ea_0$ است.

نظریه اختلال تبهگن، نه تنها وقتی ترازها دقیقاً تبهگن هستند، بلکه وقتی که به هم نزدیک هستند، یعنی وقتی نامساوی (۱۷-۳-۱) برقرار نمی‌شود، هم مناسب است. در آن مورد می‌بایست $H^0 + H^1$ دقیقاً در زیر فضای تقریباً تبهگن قطری شود.

تمرین ۱۷-۳-۲: یک ذره اسپین - ۱ را (بدون درجات آزادی مداری) در نظر بگیرید. فرض کنید S_i ها ماتریس های 3×3 اسپینی و $A \gg B$ است. با در نظر گرفتن جمله B به عنوان اختلال، ویژه حالت های $H^0 = AS_z^2$ را، که تحت اختلال پایدار هستند، به دست آورید. جابه‌جایی های انرژی را تا مرتبه اول از B محاسبه کنید. اینها چگونه به جوابهای دقیق مربوط می‌شوند؟

ساختار ریز

پتانسیل کولنی ($-e^2/r$) برهمکنش کامل بین الکترون و پروتون را ارائه نمی‌کند اگر چه تقریب اول بسیار خوبی به دست می‌دهد.^۱ تصحیحات «ساختار ریز» برای این برهمکنش اصلی وجود دارند که تغییرات انرژی یی از مرتبه α^2 برابر انرژی بستگی مربوط به پتانسیل کولنی ایجاد می‌کنند. چون سرعت الکترون (در تصویر نیمه کلاسیکی) نوعاً $\beta = v/c \cong O(\alpha)$ است، این تصحیحات، نسبت به انرژی بستگی که خودش متناسب با $(v/c)^2$ است تصحیحاتی از مرتبه $(v/c)^2$ هستند. پس این تصحیحات در اصل نسبتی هستند. دو بخش برای این اثر وجود دارد.

بخش اول این مطلب را منعکس می‌کند که تا مرتبه $(v/c)^4$ ، انرژی جنبشی الکترون $p^2/2m$ نیست بلکه

$$T = (c^2 p^2 + m^2 c^4)^{1/2} - mc^2 = \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2} + O(p^6 \text{ or } v^6) \quad (5-3-17)$$

است. می‌خواهیم اثر این جمله اضافی را محاسبه کنیم:

$$H_T = -P^4/8m^3 c^2 \quad (6-3-17)$$

و آن را به عنوان یک اختلال در نظر می‌گیریم. چون H_T از نظر چرخشی ناورداست، در پایه $|nlm\rangle$ قطری است (به عبارت دیگر پایه $|nlm\rangle$ تحت این اختلال پایدار است) لذا می‌توانیم فراموش کنیم که در هر x ترازها تبهگن هستند، و E_T^1 را از

$$E_T^1 = -\frac{1}{8m^3 c^2} \langle nlm | P^4 | nlm \rangle \quad (7-3-17)$$

حساب کنیم. این عنصر ماتریسی را با توجه به

$$P^4 = 4m^2 \left(\frac{P^2}{2m} \right)^2 = 4m^2 \left(H^0 + \frac{e^2}{r} \right)^2 \quad (8-3-17)$$

۱- در اینجا فقط ساختار ریز هیدروژن را در نظر می‌گیریم. این تحلیل می‌تواند مستقیماً به اتم‌های هیدروژن گونه بسط داده شود. همین‌طور از اختلاف بین جرم کاهش یافته و جرم الکترون چشم‌پوشی می‌کنیم.

محاسبه می‌کنیم، به طوری که

$$E_r^1 = -\frac{1}{2mc^2} \left[(E_n^0)^2 + 2E_n^0 e^2 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nlm} + e^4 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nlm} \right] \quad (9-3-17)$$

از قضیه ویریا (معادله ۱۳-۱-۳۴):

$$-\left\langle \frac{e^2}{r} \right\rangle_{nlm} = 2E_n^0 \quad (10-3-17)$$

در حالی که طبق تمرین (۱۷-۳-۴):

$$\left\langle \frac{e^4}{r^2} \right\rangle_{nlm} = \frac{e^4}{a_0^2 n^3 (l+1/2)} = \frac{4E_0^2 n}{l+1/2} \quad (11-3-17)$$

بنابراین،

$$\begin{aligned} E_r^1 &= -\frac{(E_n^0)^2}{2mc^2} \left(-3 + \frac{4n}{l+1/2} \right) \\ &= -\frac{1}{2} (mc^2) a^4 \left[-\frac{3}{4n^4} + \frac{1}{n^3(l+1/2)} \right] \end{aligned} \quad (12-3-17)$$

اثر نسیبتی دیگر، برهمکنش اسپین - مدار نامیده می‌شود. برهمکنش کولنی $(-e^2/r)$ در صورتی تمام ماجرا است که الکترون ساکن باشد. اگر الکترون با سرعت v حرکت کند یک جمله اضافی وجود خواهد داشت که آنرا به صورت زیر پیدا می‌کنیم. در چارچوبی که الکترون ساکن است، پروتون با سرعت $-v$ حرکت خواهد کرد و میدان مغناطیسی

$$\mathbf{B} = -\frac{e}{c} \frac{\mathbf{v} \times \mathbf{r}}{r^3} \quad (13-3-17)$$

را تولید خواهد کرد. برهمکنش گشتاور مغناطیسی الکترون با این میدان منجر به انرژی اسپین - مدار می‌شود

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{s.o.} &= -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = \frac{e}{mc r^3} \boldsymbol{\mu} \cdot (\mathbf{p} \times \mathbf{r}) \\ &= -\frac{e}{mc} \frac{\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{l}}{r^3} \end{aligned} \quad (14-3-17)$$

لذا در نظریه کوانتومی انتظار داریم که اختلال زیر وجود داشته باشد

$$\begin{aligned} H_{s.o.} &= \left(-\frac{e}{mc} \right) \left(-\frac{e}{mc} \right) \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}}{r^3} \\ &= \frac{e^2}{m^2 c^2 r^3} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \end{aligned} \quad (15-3-17)$$

اما جواب صحیح نصف این مقدار است:

$$H_{s.o.} = \frac{e^2}{2m^2 c^2 r^3} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \quad (16-3-17)$$

دلیل اینست که «چارچوب ساکن الکترون» نسبت به مرکز جرم اتم دارای سرعت ثابتی نیست چون حرکت الکترون مستقیم الخط نیست. لذا $H_{s.o.}$ به دست آمده در چارچوبی که الکترون ثابت است مستقیماً به آنچه که می‌بایست در چارچوب مرکز جرم به کار می‌رفت انتقال نمی‌یابد. این تبدیل، و ضریب $\frac{1}{2}$ توسط توماس (۱۹۲۶) ارائه شد.^۱ در فصل ۲۰ معادله (۱۷-۳-۱۶) را از معادله دیراک، که سینماتیک نسبیتی درون آن ساختار یافته است، به دست می‌آوریم. ضریب توماس به‌طور خودکار بیرون می‌آید.

$H_{s.o.}$ شامل اسپین است. چون حالت‌های واقع در یک n معین تبهگن هستند می‌بایست با پایه‌ای شروع کنیم که $H_{s.o.}$ را قطری می‌کند. چون می‌توانیم $H_{s.o.}$ را به‌صورت زیر بازنویسی کنیم

$$H_{s.o.} = \frac{e^2}{4m^2 c^2 r^3} [J^2 - L^2 - S^2] \quad (17-3-17)$$

حالت‌های تکانه زاویه‌ای کل خودشان مناسب هستند. در این پایه،

$$\langle j', m'; l', 1/2 | H_{s.o.} | j, m; l, 1/2 \rangle$$

$$= \delta_{j'j} \delta_{m'm} \delta_{l'l} \frac{e^2}{4m^2 c^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} \hbar^2 [j(j+1) - l(l+1) - 3/4] \quad (18-3-17)$$

(توجه کنید که دو حالت با jm کل یکسان اما با l های مختلف متعامد هستند چون هماهنگ‌های کروی بر هم عمودند. بنابراین برای مثال در $n=2$ می‌توانیم $j=1/2$ را از $l=0$ یا $l=1$ بسازیم. حالت‌های $|j=1/2, m; 0, 1/2\rangle$ و $|j=1/2, m; 1, 1/2\rangle$ متعامد هستند). با قرار دادن $j = l \pm 1/2$ در معادله (۱۸-۳-۱۷) نتیجه می‌شود که

$$E_{s.o.}^1 = \frac{\hbar^2 e^2}{4m^2 c^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} \left\{ \begin{array}{c} l \\ -(l+1) \end{array} \right\} \quad (19-3-17)$$

که در آن مقادیر بالایی و پایینی با $j = l \pm 1/2$ متناظر هستند. با استفاده از نتیجه تمرین (۴-۳-۱۷)،

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} = \frac{1}{a_0^3} \frac{1}{n^3 l(l+1/2)(l+1)} \quad (20-3-17)$$

می‌رسیم به

$$E_{s.o.}^1 = \frac{1}{4} mc^2 \alpha^4 \frac{\left\{ \begin{array}{c} l \\ -(l+1) \end{array} \right\}}{n^3 (l)(l+1/2)(l+1)} \quad (21-3-17)$$

این فرمول برای $l \neq 0$ به دست آمده است. وقتی $l = 0$ باشد $\langle 1/r^3 \rangle$ واگرا شده و $\langle \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \rangle$ صفر می‌شود. اما اگر در معادله (۱۷-۳-۲۱)، $l = 0$ قرار دهیم به یک حد متناهی می‌رسیم که اتفاقاً تغییر تراز صحیح را برای حالت‌های $l = 0$ به دست می‌دهد. این موضوع در مطالعه معادله دیراک در فصل ۲۰ توضیح داده خواهد شد. منشأ فیزیکی این تغییر (که مشخصاً بر همکنش اسپین - مدار نیست) در آنجا بحث خواهد شد. از آنجا که E_T^1 و $E_{s.o.}^1$ هر دو اثرات α^4 هستند، آن‌ها را ترکیب کرده و به تغییر انرژی ساختار ریز کل برای $l = \pm 1/2$ j می‌رسیم

$$E_{l.s.}^1 = E_T^1 + E_{s.o.}^1 = -\frac{mc^2 \alpha^2}{2n^2} \cdot \frac{\alpha^2}{n} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \quad (۱۷-۳-۲۲)$$

فرمول ساختار ریز می‌تواند به اتم‌های دیگر هم بسط داده شود به شرط اینکه تغییر زیر را در معادله (۱۷-۳-۱۹) بدهیم:

$$\left\langle \frac{e^2}{r^3} \right\rangle \rightarrow \left\langle \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right\rangle$$

که V انرژی پتانسیل الکترون مورد بحث است. برای مثال حالت‌های $n = 4$ پتاسیم را در نظر بگیرید. در بحث قبل از اسپین دیده‌ایم که به واسطه اثرات نفوذ و حفاظت، تراز $4s$ زیر تراز $4p$ قرار می‌گیرد. اگر اسپین را به این تصویر اضافه کنیم حالت s فقط می‌تواند $2S_{1/2}$ شود در حالی که حالت p می‌تواند هم $2P_{3/2}$ و هم $2P_{1/2}$ را ایجاد کند. دو تای آخر به وسیله اثر ساختار ریز^۱ به اندازه $\langle (1/r)(dV/dr) \rangle$ ($3\hbar^2/4m^2c^2$) شکافته می‌شوند، که در آن V پتانسیل دیده شده به وسیله الکترون $l = 1$ و $n = 4$ است. در گذار $4s \rightarrow 4p$ بر همکنش ساختار ریز به جای یک خط دو خط با طول موج‌های 7644.9\AA و 7699.0\AA ایجاد می‌کند.

تمرین ۱۷-۳-۳: موردی را در نظر بگیرید که H^0 شامل بر همکنش کولنی به اضافه اسپین - مدار و H^1 اثر میدان مغناطیسی ضعیف $\mathbf{B} = B\hat{k}$ است. با استفاده از پایه مناسب نشان دهید که تغییر مرتبه اول تراز با رابطه زیر به j مربوط می‌شود

$$E^1 = \left(\frac{eB}{2mc} \right) \left(1 \pm \frac{1}{2l+1} \right) j_z, \quad j = l \pm 1/2$$

این ترازها را برای تراز $n = 2$ با فرض اینکه $E^1 \ll E_{f.s.}^1$ است رسم کنید.
تمرین ۱۷-۳-۴: در اینجا برخی از روش‌های محاسبه مقادیر چشم‌داشتی بعضی عملگرها را در ویژه حالت‌های هیدروژن بحث می‌کنیم. (الف) - فرض کنید $\langle 1/r \rangle_{nlm}$ را بخواهیم، ابتدا $\langle \lambda/r \rangle$ را در نظر بگیرید. می‌توانیم $\langle \lambda/r \rangle$ را به‌عنوان تصحیح مرتبه اول مربوط به یک اختلال λ/r تعبیر کنیم. این مسئله

۱- در واقع شکافتگی در یک l معین منحصراً مربوط به برهم‌کنش اسپین - مدار است. تصحیح انرژی جنبشی فقط به l بستگی دارد و در شکافتگی بین ترازهای $P_{3/2}$ و $P_{1/2}$ سهمی ندارد.

می تواند به طور دقیق حل شود؛ فقط به جای e^2 در همه جا $e^2 - \lambda$ قرار می دهیم (چرا؟). بنابراین انرژی دقیق از معادله (۱۳-۱-۱۶) برابر $E(\lambda) = -(e^2 - \lambda)^2 m / 2n^2 \hbar^2$ است. تصحیح مرتبه اول، جمله خطی نسبت به λ یعنی $E^1 = me^2 \lambda / n^2 \hbar^2 = \langle \lambda / r \rangle$ است که از آن به $\langle 1/r \rangle = 1/n^2 a_0$ ، در توافق با معادله (۱۳-۱-۳۶)، می رسمیم. برای کاربردهای بعدی مشاهده می شود که وقتی دقیق، محاسبه $\lambda(dE/d\lambda)_{\lambda=0}$ است.

(ب) - حال $\langle \lambda / r^2 \rangle$ را در نظر بگیرید. در این مورد جواب دقیق ممکن است چون اختلال فقط جمله گریز از مرکز را به شرح زیر تغییر می دهد:

$$\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + \frac{\lambda}{r^2} = \frac{\hbar^2 l'(l'+1)}{2mr^2} \quad (17-3-23)$$

که l' تابعی از λ است، وابستگی E به $l'(\lambda)$ ، از معادله (۱۳-۱-۱۴)، به صورت زیر است:

$$E(l') = \frac{-me^4}{2\hbar^2(k+l'+1)^2} = E(\lambda) = E^0 + E^1 + \dots$$

نشان دهید که

$$\left\langle \frac{\lambda}{r^2} \right\rangle = E^1 \lambda \left. \frac{dE}{d\lambda} \right|_{\lambda=0} = \left(\frac{dE}{dl'} \right)_{l'=l} \cdot \left(\frac{dl'}{d\lambda} \right)_{l'=l} \cdot \lambda = \frac{\lambda}{n^3 a_0^2 (l + \frac{1}{2})}$$

با حذف λ از دو طرف به معادله (۱۷-۳-۱۱) می رسمیم.

(ج) - سرانجام $\langle \lambda / r^3 \rangle$ را نظر بگیرید. چون چنین جمله ای در هامیلتونی کولنی وجود ندارد روش دیگری به کار می بریم. عملگر تکانه زاویه ای شعاعی $p_r = -i \hbar (\partial/\partial r + 1/r)$ را در نظر بگیرید که برحسب آن می توان قسمت شعاعی هامیلتونی،

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \right) \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$$

را به صورت $p_r^2 / 2m$ نوشت (ثابت کنید). با استفاده از اینکه در ویژه حالت های انرژی $\langle [H, P_r] \rangle = 0$ است و با محاسبه صریح جابه جاگر نشان دهید

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{1}{a_0(l)(l+1)} \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle$$

که با ترکیب آن با نتیجه قسمت (ب) به معادله (۱۷-۳-۲۰) می رسمیم.

(د) - انرژی جنبشی میانگین را با استفاده از قسمت (الف) به دست آورید. این بار جرم را مجدداً مقیاس بندی کنید. قضیه ویریال را مجدداً به دست آورید.

۱۸-۱- مسئله

به جز در مسئله تشدید مغناطیسی، از مطالعه پدیده‌هایی که هامیلتونی وابسته به زمان به آنها حاکم است خودداری کردیم. در حالی که در مورد مستقل از زمان، مسئله حل معادله

$$i\hbar|\dot{\psi}\rangle = H|\psi\rangle \quad (1-1-18)$$

به حل مسئله ویژه مقداری H تقلیل یافت، در مورد وابسته به زمان، ناگزیر به رویارویی با معادله شرودینگر وابسته به زمان کامل هستیم.

در این فصل جواب اختلالی دسته‌ای از پدیده‌هایی را بررسی می‌کنیم که به وسیله

$$H(t) = H^0 + H^1(t) \quad (2-1-18)$$

توصیف می‌شوند که H^0 یک بخش مستقل از زمان است که مسئله ویژه مقداری آن حل شده و H^1 یک اختلال وابسته به زمان کوچک است. برای مثال H^0 می‌تواند هامیلتونی اتم هیدروژن و H^1 بخش مربوط به یک میدان الکترومغناطیسی خارجی ضعیف باشد. در حالی که در مورد مستقل از زمان، ویژه بردارها و ویژه مقدارهای H مد نظر هستند، سوالی که در اینجا مطرح می‌شود این است: اگر در $t=0$ سیستم در ویژه حالت $|i^0\rangle$ هامیلتونی H^0 باشد دامنه بودن آن در ویژه حالت $|f^0\rangle$ ($f \neq i$) در زمان بعدی t چقدر است؟ هدف ما ارائه روشی است که در آن جواب بتواند به صورت یک سری اختلالی برحسب توان‌های H^1 محاسبه می‌شود. تا مرتبه صفر، جواب این سوال بوضوح صفر است، چون تنها اثر H^0 ، ضرب یک عامل فاز $\exp(-iE_i^0 t / \hbar)$ در $|i^0\rangle$ است که عمود بودن آن بر $|f^0\rangle$ را تغییر نمی‌دهد. اما بزودی اجازه می‌دهیم H^1 در تصویر وارد شود یعنی تا مرتبه غیر صفر کار می‌کنیم و ویژه حالت‌های H^0 دیگر مانا نبوده و $|i^0\rangle$ می‌تواند به حالتی تحول یابد که در امتداد $|f^0\rangle$ تصویر دارد.

بخش بعدی با استنتاج ساده دامنه گذار مرتبه اول برای فرایند $f \rightarrow i$ شروع می‌شود و با چند کاربرد و بحث انواع خاصی از اختلالات (ناگهانی، آدیاباتیکی (بی‌دررو)، دوره‌ای و غیره) ادامه می‌یابد. در بخش ۳، با استفاده از یک روش مجردتر از آنچه در بخش ۲ به کار می‌رود عبارات‌های مربوط به دامنه گذار را تا هر مرتبه‌ای به دست می‌آوریم. بخش‌های ۴ و ۵ به برهمکنش‌های الکترومغناطیسی مربوط می‌شوند. بخش ۴ شامل

خلاصه‌ای از مفاهیم مرتبط با الکترو دینامیک کلاسیک است که به دنبال آن یک بحث کلی در مورد چند نکته ظریف و کوچک در برهم کنش الکترومغناطیسی در سطوح کلاسیکی و کوانتومی ارائه می‌شود. بنابراین کمتر با نظریه اختلال سرو کار دارد اما راه را برای بخش آخر، که در آن نظریه اختلال مرتبه اول برای مطالعه برهمکنش اتم‌ها با میدان الکترومغناطیسی به کار می‌رود، هموار می‌کند. دو مسئله روشنگر بررسی خواهد شد، در یکی میدان به صورت کلاسیکی بحث شده، و در دیگری به صورت کوانتوم مکانیکی بحث می‌شود.

۱۸-۲- نظریه اختلال مرتبه اول

مسئله ما، حل معادله (۱۸-۱-۱) تا مرتبه اول از H^1 است. چون ویژه کت‌های $|n^0\rangle$ هامیلتونی H^0 یک پایه کامل تشکیل می‌دهند همیشه می‌توانیم بسط زیر را بنویسیم

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |n^0\rangle \quad (1-2-18)$$

به دست آوردن $c_n(t)$ با داشتن $c_n(0)$ معادل با به دست آوردن $|\psi(t)\rangle$ با داشتن $|\psi(0)\rangle$ است. حال $c_n(t)$ به خاطر H^0 و H^1 با زمان تغییر می‌کند. اگر H^1 نبود، می‌دانیم که

$$c_n(t) = c_n(0) e^{-iE_n^0 t/\hbar} \quad (2-2-18)$$

می‌شد. با استفاده از این اطلاعات می‌توانیم چنین بنویسیم:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n d_n(t) e^{-iE_n^0 t/\hbar} |n^0\rangle \quad (3-2-18)$$

اگر d_n با زمان تغییر می‌کند به دلیل H^1 است. بنابراین انتظار داریم که تحول زمانی d_n بتواند به صورت یک سری توانی خوش رفتار از H^1 نوشته شود. معادله حرکت $d_f(t)$ با اثر دادن $(i\hbar \partial/\partial t - H^0 - H^1)$ به هر دو طرف معادله (۳-۲-۱۸)،

$$0 = \sum_n [i\hbar \dot{d}_n - H^1(t)d_n] e^{-iE_n^0 t/\hbar} |n^0\rangle \quad (4-2-18)$$

و سپس ضرب نقطه‌ای در $\langle f^0 | \exp(iE_f^0 t/\hbar)$ به دست می‌آید:

$$i\hbar \dot{d}_f = \sum_n \langle f^0 | H^1(t) | n^0 \rangle e^{i\omega_{fn} t} d_n(t) \quad (الف-۵-۲-۱۸)$$

که در آن

$$\omega_{fn} = \frac{E_f^0 - E_n^0}{\hbar} \quad (ب-۵-۲-۱۸)$$

توجه کنید که H^0 در معادله (۵-۲-۱۸)، که دقیق بوده و با معادله (۱-۱-۱۸) کاملاً معادل است، حذف شده است. اینک موردی را در نظر بگیرید که در $t=0$ سیستم در حالت $|i^0\rangle$ باشد یعنی

$$d_n(0) = \delta_{ni} \quad (۶-۲-۱۸)$$

سوال این است که $d_f(t)$ چه می‌شود؟ تا مرتبه صفرم، از سمت راست معادله (۵-۲-۱۸)، به دلیل H^1 صریح به طور کامل چشم‌پوشی می‌کنیم و در توافق با انتظارات خودمان به مقدار زیر می‌رسیم

$$\dot{d}_f = 0 \quad (۷-۲-۱۸)$$

تا مرتبه اول، d_n مرتبه صفرم را در سمت راست به کار می‌بریم چون H^1 خودش از مرتبه اول است. این کار معادله مرتبه اول

$$\dot{d}_f(t) = \frac{-i}{\hbar} \langle f^0 | H^1(t) | i^0 \rangle e^{i\omega_f t} \quad (۸-۲-۱۸)$$

را به دست می‌دهد که جواب آن با شرایط مرزی درست عبارتست از

$$d_f(t) = \delta_{fi} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle f^0 | H^1(t') | i^0 \rangle e^{i\omega_f t'} dt' \quad (۹-۲-۱۸)$$

از آنجا که d را تا مرتبه اول می‌دانیم می‌توانیم آنرا در سمت راست معادله (۵-۲-۱۸) قرار دهیم تا به یک معادله برای d برسیم که تا مرتبه دوم خوب است. اگر چه می‌توانیم بدین روش تا مرتبه دلخواه ادامه دهیم ولی تا مرتبه اول بیشتر ادامه نمی‌دهیم چون در بخش بعدی روش فشرده‌تری برای محاسبه دامنه‌های گذار تا هر مرتبه دلخواه ارائه خواهد شد. در اینجا صرفاً اشاره می‌کنیم که محاسبه مرتبه اول در صورتی قابل اعتماد است که $\ll 1$ باشد $|d_f(t)|$ اگر این شرط نقض شود محاسبه ما از درون ناسازگار می‌شود چون دیگر نمی‌توانیم در سمت راست معادله (۵-۲-۱۸)، $d_n(t)$ را با δ_{ni} تقریب بزنیم.

نتیجه مرتبه اول خود را برای یک مسئله ساده به کار می‌بریم. یک نوسانگر هماهنگ یک بعدی را در حالت پایه $|0\rangle$ هامیلتونی مختل نشده در $t = -\infty$ در نظر بگیریم. اجازه دهید اختلال

$$H^1(t) = -e\mathcal{E}X e^{-t^2/\tau^2} \quad (۱۰-۲-۱۸)$$

بین $t = -\infty$ و $t = +\infty$ بر آن اعمال شود. احتمال اینکه نوسانگر در $t = \infty$ در حالت $|n\rangle$ باشد چقدر است؟ طبق معادله (۹-۲-۱۸)، برای $n \neq 0$

$$d_n(\infty) = \frac{-i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} (-e\mathcal{E}) \langle n | X | 0 \rangle e^{-t^2/\tau^2} e^{in\omega t} dt \quad (۱۱-۲-۱۸)$$

از آنجا که

$$X = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{1/2} (a + a^\dagger)$$

فقط $d_1(\infty) \neq 0$ است و برابر است با (با استفاده از $\langle 1 | a^+ | 0 \rangle = 1$):

$$d_1(\infty) = \frac{ie\mathcal{E}}{\hbar} \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2/\tau^2} e^{i\omega t} dt \quad (12-2-18)$$

$$= \frac{ie\mathcal{E}}{\hbar} \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{1/2} \cdot (\pi\tau^2)^{1/2} e^{-\omega^2\tau^2/4}$$

لذا احتمال گذار $0 \rightarrow 1$ برابر است با

$$P_{0 \rightarrow 1} = |d_1|^2 = \frac{e^2 \mathcal{E}^2 \pi \tau^2}{2m\omega \hbar} e^{-\omega^2\tau^2/2} \quad (13-2-18)$$

این نتیجه به زودی مورد استفاده قرار خواهد گرفت.

تمرین ۱۸-۲-۱: نشان دهید که اگر $H^1(t) = -e\mathcal{E}X / [1 + (t/\tau)^2]$ باشد آنگاه تا مرتبه اول،

$$P_{0 \rightarrow 1} = \frac{e^2 \mathcal{E}^2 \pi^2 \tau^2}{2m\omega \hbar} e^{-2\omega\tau}$$

تمرین ۱۸-۲-۲: یک اتم هیدروژن در $t = -\infty$ در حالت پایه قرار دارد. یک میدان الکتریکی

$\mathbf{E}(t) = \mathbf{k}\mathcal{E}e^{-t^2/x^2}$ تا $t = \infty$ اعمال می‌شود. نشان دهید که احتمال اینکه اتم در پایان در هر یک از حالت‌های $n = 2$ باشد تا مرتبه اول برابر است با

$$P(n=2) = \left(\frac{e\mathcal{E}}{\hbar} \right)^2 \left(\frac{2^{15} a_0^2}{3^{10}} \right) \pi \tau^2 e^{-\omega^2\tau^2/2}$$

که در آن $\omega = (E_{2lm} - E_{100})/\hbar$ است. آیا جواب به اینکه اسپین را در مسئله دخالت دهیم یا خیر بستگی دارد؟

اینک توجه خود را به انواع مختلف اختلالات معطوف می‌کنیم.

اختلال ناگهانی

سیستمی را در نظر بگیرید که هامیلتونی‌اش در یک بازه زمانی کوچک \mathcal{E} به‌طور ناگهانی تغییر می‌کند. تغییر بردار حالت وقتی $\mathcal{E} \rightarrow 0$ میل می‌کند چقدر است؟ بدون استفاده از نظریه اختلال می‌توانیم به این سوال پاسخ دهیم. فرض کنیم که تغییر حول $t = 0$ اتفاق افتاده باشد. با انتگرال گیری از معادله شرودینگر بین $t = -\mathcal{E}/2$ و $t = \mathcal{E}/2$ داریم:

$$|\psi(\mathcal{E}/2)\rangle - |\psi(-\mathcal{E}/2)\rangle = |\psi_{\text{after}}\rangle - |\psi_{\text{before}}\rangle$$

$$= \frac{-i}{\hbar} \int_{-\mathcal{E}/2}^{\mathcal{E}/2} H(t) |\psi(t)\rangle dt \quad (14-2-18)$$

۱- چون $d_n(t)$ و $c_n(t)$ فقط به اندازه یک عامل فاز فرق دارند $P(n) = |c_n|^2 = |d_n|^2$

چون انتگرالده درست راست منتهای است، انتگرال از مرتبه ϵ است. در حد $\epsilon \rightarrow 0$ داریم:

$$|\psi_{\text{after}}\rangle = |\psi_{\text{before}}\rangle \quad (15-2-18)$$

یک تغییر آنی در H هیچ تغییر آنی در $|\psi\rangle$ ایجاد نمی کند. حال حد $\epsilon \rightarrow 0$ غیر فیزیکی است. فایده نتیجه بالا در این است که اگر H در یک مدت که نسبت به مقیاس زمان طبیعی سیستم بسیار کوچک است تغییر کند، این نتیجه تقریب بسیار خوبی است. این زمان می تواند به طور نیمه کلاسیکی برآورد شود. در ادامه چند مثال ارائه می شود. یک نوسانگر را در نظر می گیریم که اختلال معادله (۱۸-۲-۱۰) به آن اعمال می شود. واضح است که مقیاس زمانی این سیستم هر چه باشد تغییر بردار حالت، وقتی τ ، پهنای تپ گوسین، صفر می شود، می بایست صفر شود. این بویژه بدین معنی است که سیستم که ابتدائاً در حالت پایه است باید بعد از تپ همان جا باقی بماند یعنی احتمال گذار $0 \rightarrow 1$ باید صفر شود، با دقتی بودن این نتیجه، انتظار داریم که اگر احتمال گذار به صورت اختلالی محاسبه شود، می بایست تا هر مرتبه صفر شود (این شبیه این است که بگوییم اگر یک تابع تحلیلی عیناً صفر شود، آنگاه هر جمله در بسط تیلور آن صفر می شود). با بازگشت به احتمال مرتبه اول برای گذار $0 \rightarrow 1$ در معادله (۱۸-۲-۱۳) می بینیم که وقتی τ به صفر میل می کند این احتمال واقعاً صفر می شود.

یک مسئله واقعی، که در آن ϵ ثابت است، شامل یک الکترون $1s$ مقید به یک هسته با بار Z است که با گسیل یک الکترون نسبیتی و تغییر بار آن به $(Z + 1)$ متحمل واپاشی β می شود. زمان لازم برای اینکه الکترون گسیل شونده از لایه $n = 1$ رهایی یابد برابر است با

$$\tau \approx a_0/Zc \quad (16-2-18)$$

در حالی که زمان مشخصه برای الکترون $1s$ برابر است با

$$T \approx \frac{\text{size of state}}{\text{velocity of } e^-} \approx \frac{a_0}{Z} \Big/ Z\alpha c = \frac{a_0}{Z^2 \alpha c} \quad (17-2-18)$$

به طوری که

$$\tau/T = Z\alpha$$

برای Z کوچک، می توانیم تقریب ناگهانی را به کار برده و نتیجه بگیریم که حالت الکترون اتمی، درست قبل و بعد از واپاشی β ، یکی است. البته این حالت، یک ویژه حالت یون با بار $(Z + 1)$ نیست بلکه یک برهنه از این حالت هاست (تمرین ۱۸-۲-۴ را ببینید).

تمرین ۱۸-۲-۳: ذره‌ای را در حالت پایه جعبه‌ای به طول L در نظر بگیرید. با بحث نیمه کلاسیکی ثابت کنید که زمان تناوب طبیعی مربوط به آن، $T \approx mL^2/\pi\hbar$ است. اگر جعبه در مدت $\tau \ll T$ به طور متقارن به دو برابر اندازه خودش بزرگ شود، احتمال یافتن ذره در حالت پایه جعبه جدید چقدر است؟ (تمرین ۱۸-۲-۵) را ببینید.

۱- فرض بر این است که \hbar در بازه $(-\epsilon/2, \epsilon/2)$ منتهای است. اگر H دارای یک تیزی به شکل تابع دلنا باشد می تواند موجب تغییر $|\psi\rangle$ شود. تمرین ۱۸-۲-۶ را ببینید.

تمرین ۱۸-۲-۴: در واپاشی β مربوط به

$$H^3 \rightarrow (He^3)^+ + (\text{۲ نوترون} + \text{۱ پروتون در هسته})$$

الکترون گسیل شده دارای انرژی جنبشی 16keV است. استدلال کنید که تقریب ناگهانی می‌تواند برای توصیف پاسخ الکترونی که در ابتدا در حالت $1s$ ام H قرار دارد به کار رود. نشان دهید که دامنه بودن آن در حالت پایه $(He^3)^+$ ، $16(2)^{3/2}/27$ است. احتمال بودن آن در حالت $|n=16, l=3, m=0\rangle$ مربوط به $(He^3)^+$ چقدر است؟

تمرین ۱۸-۲-۵: نوسانگری در حالت پایه هامیلتونی $H = H^0 + H^1$ قرار دارد که در آن اختلال وابسته به زمان H^1 ، پتانسیل خطی $(-fx)$ است. اگر در $t=0$ ، H^1 به‌طور ناگهانی خاموش شود نشان دهید که احتمال اینکه سیستم در ویژه حالت n ام H^1 باشد، با توزیع پواسون

$$P(n) = \frac{e^{-\lambda} \lambda^n}{n!}$$

مشخص می‌شود که

$$\lambda = \frac{f^2}{2m\omega^3 \hbar}$$

راهنمایی: از فرمول

$$\exp[A + B] = \exp[A] \exp[B] \exp[-\frac{1}{2}[A, B]]$$

استفاده کنید که در آن $[A, B]$ یک عدد c است.

تمرین ۱۸-۲-۶: سیستمی را در نظر بگیرید که در معرض اختلال $H^1(t) = H^1 \delta(t)$ قرار دارد. نشان دهید که اگر در $t=0^-$ سیستم در حالت $|i^0\rangle$ باشد، دامنه بودن آن در حالت $|f^0\rangle$ در $t=0^+$ ، تا مرتبه اول، برابر است با

$$d_f = \frac{-i}{\hbar} \langle f^0 | H^1 | i^0 \rangle \quad (f \neq i)$$

توجه کنید که (۱)- حالت سیستم به‌طور آنی تغییر می‌کند. (۲)- حتی اگر اختلال در $t=0$ «نامتناهی» باشد هنوز هم می‌توانیم از نظریه اختلال مرتبه اول استفاده کنیم به شرطی که «مساحت زیر آن» بقدر کافی کوچک باشد.

اختلال آدیاباتیک (بی دررو)

اکنون به سیستمی می‌پردازیم که هامیلتونی آن، $H(t)$ ، در مدت τ به‌صورت بسیار آرام از $H(0)$ به $H(\tau)$ تغییر می‌کند. اگر سیستم در $t=0$ در یک ویژه حالت، $|n(0)\rangle$ ، هامیلتونی $H(0)$ باشد بعد از مدت τ در چه حالتی خواهد بود؟ قضیه بی‌دررو ادعا می‌کند که اگر آهنگ تغییر H بقدر کافی آرام باشد

سیستم در ویژه کت متناظر $|n(\tau)\rangle$ هامیلتونی $H(\tau)$ خواهد بود.^۱ به جای اثبات قضیه و تعریف دقیق «بقدر کافی آرام» چند مثال برای روشن شدن مطلب ارائه می‌کنیم.

ذره‌ای را در یک جعبه به طول $L(0)$ در نظر بگیرید. اگر جعبه به طور آرام به طول $L(\tau)$ افزایش طول دهد، این قضیه بیان می‌کند که ذره‌ای که در حالت n ام جعبه^۲ به طول $L(0)$ بود اکنون در حالت n ام جعبه به طول $L(\tau)$ خواهد بود. "تغییر بقدر کافی آرام"، چقدر باید آرام باشد؟ دو روش برای برآورد این وجود دارد. روش اول یک روش نیمه کلاسیکی به شرح ذیل است: تکانه ذره (با حذف عامل‌های از مرتبه واحد مثل π ، n ، و غیره) از مرتبه

$$p \simeq \frac{\hbar}{L} \quad (18-2-18)$$

است و زمان لازم برای پایان یک نوسان کامل از مرتبه

$$T \simeq \frac{L}{v} = \frac{mL}{p} \simeq \frac{mL^2}{\hbar} \quad (18-2-19)$$

است. در صورتی می‌توانیم بگوییم که این انبساط یا انقباض آرام است که تغییر نسبی طول جعبه در هر چرخه بسیار کوچکتر از یک باشد:

$$\frac{|\Delta L|_{\text{per cycle}}}{L} \simeq \frac{|dL/dt| mL^2 / \hbar}{L} = \frac{mL}{\hbar} \left| \frac{dL}{dt} \right| \ll 1 \quad (18-2-20)$$

این می‌تواند به صورت

$$\frac{v_{\text{walls}}}{v_{\text{particle}}} \ll 1 \quad (18-2-21)$$

هم نوشته شود.

روش دوم کمتر شهودی بوده^۲ و T را به صورت

$$T \sim \frac{1}{\omega_{\min}} \quad (18-2-22)$$

برآورد می‌کند که در آن ω_{\min} کوچکترین فرکانس گذار بین حالت اولیه i و هر حالت نهایی قابل دسترس f است.^۳ یعنی کوچکترین فرکانس از بین فرکانس‌های زیر

$$\omega_{fi} = \frac{E_f^0 - E_i^0}{\hbar} \quad (18-2-23)$$

۱- این نتیجه هم تا هر مرتبه داده شده در نظریه اختلال درست است و از آن استفاده خواهیم کرد.

۲- منطوق پشت این روش و برتری آن به روش شهودی قبلی بزودی در یک مثال، که در آن نتایج نظریه اختلال مستقل از زمان را از نظریه وابسته به زمان به دست می‌آوریم، روشن خواهد شد.

۳- این حالتی است که برای آن $\langle f^0 | H^1 | i^0 \rangle \neq 0$ است.

در مورد کنونی، چون $E_n^0 = (n^2 \hbar^2 \pi^2 / 2mL^2)$ است، اختلاف انرژی‌ها از مرتبه \hbar^2 / mL^2 هستند و

$$T \sim \frac{1}{\omega_{\min}} \simeq \frac{mL^2}{\hbar} \quad (24-2-18)$$

که با معادله (۱۹-۲-۱۸) در توافق است. این تعجب‌آور نیست چون T را در معادله (۱۹-۲-۱۸) می‌توانیم به صورت زیر هم بنویسیم:

$$T \simeq \frac{mL^2}{\hbar} \simeq \frac{1}{E_i^0 / \hbar} \sim \frac{1}{\omega_i} \quad (25-2-18)$$

لذا T در معادله (۱۹-۲-۱۸) از مرتبه \hbar / E_i^0 است در حالی که در (۲۴-۲-۱۸) از مرتبه $\hbar / |E_j^0 - E_i^0|_{\min}$ است چون ترازهای انرژی یک سیستم کوانتومی همگی مرتبه بزرگی یکسانی دارند (مثلاً ریدبرگ یا $\hbar\omega$)، انرژی‌ها و اختلاف انرژی‌ها دارای مرتبه بزرگی یکسان بوده و دو برآورد برای T معادلند مگر اینکه ترازها تبهگن یا تقریباً تبهگن باشند. در این مورد، این $T \sim 1/\omega_{\min}$ است که قابل اعتماد است چون ناپایداری سیستم تبهگن را به نمایش می‌گذارد. در ادامه یک مثال صریح ارائه می‌شود که این موضوع را روشن می‌کند. مثال دیگری از قضیه بی‌دررو را در نظر می‌گیریم: نوسانگری که بین $-\infty \leq t \leq \infty$ در معرض اختلاف

$$H^1(t) = -e\mathcal{E}X e^{-t^2/\tau^2} \quad (26-2-18)$$

قرار می‌گیرد. انتظار داریم که اگر τ ، که زمانی است که در آن H^1 از 0 تا مقدار نهایی خود زیاد می‌شود، به بی‌نهایت میل کند، تغییر در سیستم، بی‌دررو خواهد بود. لذا اگر سیستمی در $t = -\infty$ در حالت پایه $H^0 = H(-\infty)$ باشد در نهایت در حالت پایه $H^0 = H(\infty) = H^0$ خواهد بود. فرمول مرتبه اول ما برای $P_{0 \rightarrow 1}$ ، معادله (۱۳-۲-۱۸)، این انتظار را تأیید می‌کند و وقتی $\omega\tau \rightarrow \infty$ میل می‌کند به صورت نمایی صفر می‌شود. فرمول ما همین‌طور بیان می‌کند که منظور از τ بزرگ چیست: منظور این است که

$$\omega\tau \gg 1, \quad \tau \gg 1/\omega \quad (27-2-18)$$

این همان چیزی است که از برآورد نیمه کلاسیکی یا برآورد $T \sim 1/\omega_{\min}$ و شرط $T \gg \tau$ انتظار داشتیم. قضیه بی‌دررو روشی برای بازیابی نتایج نظریه اختلال مستقل از زمان از نظریه وابسته به زمان پیشنهاد می‌کند. هامیلتونی $H(t)$ را در نظر بگیرید که به طور پیوسته از H^0 در $t = -\infty$ به $H^0 + H^1$ در $t = 0$ تغییر می‌کند:

$$H(t) = H^0 + e^{t/\tau} H^1, \quad -\infty \leq t \leq 0 \quad (28-2-18)$$

وقتی τ ، زمان صعود تابع نمایی، به بی‌نهایت می‌رود قضیه بی‌دررو اطمینان می‌دهد که ویژه حالت $|n^0\rangle$ هامیلتونی H^0 در $t = -\infty$ در $t = 0$ به ویژه حالت $|n\rangle$ هامیلتونی H تحول خواهد یافت. اگر حالت را در $t = 0$ تا مرتبه معین از نظریه وابسته به زمان حساب کنیم و اجازه دهیم $t \rightarrow \infty$ میل کند باید به فرمول

مستقل از زمان برای حالت $|n\rangle$ تا آن مرتبه برسیم. تا مرتبه اول، می‌دانیم که تصویر حالت در $t=0$ در امتداد $|m^0\rangle$ ($m \neq n$)،

$$d_m(0) = \frac{-i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 \langle m^0 | H^1 | n^0 \rangle e^{t/\tau} e^{i\omega_{mn}t} dt \quad (29-2-18)$$

$$= \frac{(-i/\hbar) \langle m^0 | H^1 | n^0 \rangle}{1/\tau + i\omega_{mn}}$$

است. اگر اجازه دهیم $t \rightarrow \infty$ میل کند، نتیجه آشنای

$$\langle m^0 | n \rangle = \frac{\langle m^0 | H^1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} \quad (30-2-18)$$

را به دست می‌آوریم. در عمل $t \rightarrow \infty$ به وسیله یک τ بزرگ جایگزین می‌شود. معادله (۲۹-۲-۱۸) بیان می‌کند که منظور از τ بزرگ چیست: τ بزرگ به صورت

$$|1/\tau| \ll |\omega_{\min}|$$

یا

$$\tau \gg 1/\omega_{\min} \quad (31-2-18)$$

تعریف می‌شود.

بنابراین می‌بینیم که $T = 1/\omega_{\min}$ واقعاً معیار قابل اعتمادی از مقیاس زمان طبیعی سیستم است. بویژه اگر سیستم تهنگن باشد (یا تقریباً تهنگن)، $T \rightarrow \infty$ میل کرده و تغییر بی‌درروی حالت سیستم عملاً غیر ممکن می‌شود.

بحث تقریب بی‌دررو را با ملاحظه شباهت آن با تقریب WKB به پایان می‌بریم. تقریب بی‌دررو بیان می‌کند که اگر هامیلتونی با گذشت زمان از H^0 به $H^0 + H^1$ تغییر کند ویژه حالت $|n^0\rangle$ در حد $\tau/T \rightarrow \infty$ به طور یکنواخت به نظیر خود $|n\rangle$ تحول می‌یابد که τ مدت زمان تغییر هامیلتونی و T مقیاس زمان طبیعی سیستم است. تقریب WKB بیان می‌کند که اگر پتانسیل در فضا از V^0 به V^1 تغییر کند، یک موج تخت با تکانه $p^0 = [2m(E - V^0)]^{1/2}$ در حد $L/\lambda \rightarrow 0$ به طور یکنواخت به موج تختی با تکانه $p^1 = [2m(E - V^1)]^{1/2}$ تحول می‌یابد، که L طولی است که V روی آن تغییر می‌کند و $\lambda = 2\pi\hbar/p$ مقیاس طول طبیعی سیستم است.

اختلال تناوبی

سیستمی را در نظر بگیرید که در معرض یک اختلال تناوبی قرار دارد مثل اتمی که بین صفحات یک خازن متصل به منبع ac قرار گیرد یا سر راه یک باریکه نور تکفام باشد. در حالی که در واقعیت این اختلالات به صورت سینوسی و کسینوسی تغییر می‌کنند در اینجا موردی را بررسی می‌کنیم که در آن

$$H^1(t) = H^1 e^{-i\omega t} \quad (۳۲-۲-۱۸)$$

است که از نظر ریاضی کار کردن با آن آسانتر است. سینوس و کسینوس را می توان بر حسب توابع نمایی نوشت.

فرض کنید سیستم در $t = 0$ در معرض این اختلال قرار گیرد. دامنه گذار از $|i^0\rangle$ به $|f^0\rangle$ در زمان t ($i \neq f$) برابر است با

$$d_f(t) = \left(\frac{-i}{\hbar}\right) \int_0^t \langle f^0 | H^1 | i^0 \rangle e^{i(\omega_f - \omega)t'} dt' \quad (۳۳-۲-۱۸)$$

$$= \frac{-i}{\hbar} \langle f^0 | H^1 | i^0 \rangle \frac{e^{i(\omega_f - \omega)t} - 1}{i(\omega_f - \omega)} \quad (۳۴-۲-۱۸)$$

احتمال گذار $f \rightarrow i$ برابر است با

$$P_{i \rightarrow f} = |d_f|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\langle f^0 | H^1 | i^0 \rangle|^2 \left\{ \frac{\sin[(\omega_f - \omega)t/2]}{(\omega_f - \omega)\frac{1}{2}t} \right\}^2 t^2 \quad (۳۵-۲-۱۸)$$

از آنجا که تابع $(\sin^2 x)/x^2$ در مبداء تیز بوده و دارای پهنای $\Delta x \approx \pi$ است، می بینیم که سیستم می خواهد به حالت f برود به طوری که

$$|(\omega_f - \omega)t/2| \lesssim \pi$$

باشد یا

$$E_f^0 t = (E_i^0 t + \hbar\omega t) \pm 2\hbar\pi$$

یا

$$E_f^0 - E_i^0 = \hbar\omega \pm \frac{2\hbar\pi}{t} = \hbar\omega \left(1 \pm \frac{2\pi}{\omega t}\right) \quad (۳۶-۲-۱۸)$$

برای t کوچک، سیستم تمایل خاصی به تراز دارای انرژی $E_f^0 = E_i^0 + \hbar\omega$ نشان نمی دهد. تنها وقتی $\omega t \gg 2\pi$ باشد شروع به تمایل به $E_f^0 = E_i^0 + \hbar\omega$ می کند. دلیل آن ساده است. می دانیم که اختلال دارای فرکانس ω است چون مثلاً منبع ac را روی فرکانس ω یا لیزر را در فرکانس ω تنظیم کرده ایم. اما سیستم، با شروع از زمان تماسش با اختلال، از آنچه که می داند پیروی می کند. در ابتدا حتی سیستم متوجه نخواهد شد که با اختلال تناوبی مواجه است؛ باید چندین چرخه منتظر بماند تا این پیغام را دریافت کند. بنابراین سیستم فقط بعد از چندین چرخه، یعنی بعد از $\omega t \gg 2\pi$ ، می تواند انتخاب کننده باشد. در این ضمن سیستم چه کاری انجام می دهد؟ سیستم تپ را به مولفه های فرکانسی آن تحلیل فوریه می کند و دامنه گذار آن به

حالت با انرژی $E_f^0 = E_i^0 + \hbar\omega_{fi}$ متناسب با مولفه فوریه در $\omega = \omega_{fi}$ است. انتگرال t' در معادله (۱۸-۳۳) دقیقاً این تبدیل فوریه است.^۱

اگر برای مدت طولانی منتظر بمانیم چه اتفاقی می افتد؟ برای روشن شدن این موضوع، سیستمی را در نظر می گیریم که از $T/2$ تا $-T/2$ در معرض اختلال بوده و اجازه می دهیم $T \rightarrow \infty$ میل کند. معادله (۱۸-۳۳) به شکل زیر در می آید

$$d_f = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{-i}{\hbar} \int_{-T/2}^{T/2} H_{fi}^1 e^{i(\omega_{fi} - \omega)t'} dt' \quad (۳۷-۲-۱۸)$$

$$= \frac{-2\pi i}{\hbar} H_{fi}^1 \delta(\omega_{fi} - \omega) \quad (۳۸-۲-۱۸)$$

و

$$P_{i \rightarrow f} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |H_{fi}^1|^2 \delta(\omega_{fi} - \omega) \delta(\omega_{fi} - \omega) \quad (۳۹-۲-۱۸)$$

حاصل ضرب توابع δ را به صورت زیر می نویسیم:

$$\delta\delta = \lim_{T \rightarrow \infty} \delta(\omega_{fi} - \omega) \frac{1}{2\pi} \int_{-T/2}^{T/2} e^{i(\omega_{fi} - \omega)t} dt \quad (۴۰-۲-۱۸)$$

چون تابع δ در جلوی انتگرال صفر می شود مگر اینکه $\omega_{fi} = \omega$ باشد، می توانیم مقدار $\omega_{fi} = \omega$ را در انتگرال قرار دهیم:

$$\delta\delta = \delta(\omega_{fi} - \omega) \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{T}{2\pi} \quad (۴۱-۲-۱۸)$$

با قرار دادن این در معادله (۱۸-۳۹) برای $P_{i \rightarrow f}$ و تقسیم آن بر T ، به آهنگ گذار متوسط می رسمیم:

$$R_{i \rightarrow f} = \frac{P_{i \rightarrow f}}{T} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f^0 | H^1 | i^0 \rangle|^2 \delta(E_f^0 - E_i^0 - \hbar\omega) \quad (۴۲-۲-۱۸)$$

این رابطه، قاعده طلایی فرمی نامیده می شود و کاربردهای زیادی دارد که برخی از آنها در این فصل و فصل بعدی بحث خواهند شد. ممکن است نگران تابع δ در $R_{i \rightarrow f}$ باشید و به ویژه اینکه آیا نظریه اختلال مرتبه اول، وقتی این آهنگ بی نهایت می شود، قابل اعتماد می شود یا خیر! همان طور که خواهیم دید در همه کاربردهای عملی از تابع دلتا به دلیلی انتگرال گرفته می شود. اعتبار فرمول مرتبه اول فقط به سطح زیر تابع δ بستگی خواهد داشت (تمرین ۱۸-۲-۶ را به خاطر بیاورید).

۱- ناتوانی یک سیستم در اختصاص یک فرکانس معین به یک اختلال خارجی قبل از سپری شدن چرخه های زیاد، یک اثر کلاسیکی خالص است. مکانیک کوانتومی وقتی وارد مسئله می شود که فرکانس را به انرژی ربط دهیم.

۱۸-۳- مرتبه‌های بالاتر در نظریه اختلال^۱

در بخش ۱۸-۲ فرمولی برای دامنه گذار از $|i^0\rangle$ به $|f^0\rangle$ تا مرتبه اول در نظریه اختلال به دست آوردیم. این روش تا مرتبه‌های بالاتر ارائه شده است ولی ادامه داده نشده است. ما این مسئله را در اینجا با استفاده از یک فرمالیزم انتزاعی‌تر پیگیری می‌کنیم که به خاطر فشردگی اش و بصیرتی که در مورد آناتومی سری اختلال به ما می‌دهد برایمان مطلوب است.

ایده اصلی پشتیبان این روش همان ایده بخش ۱۸-۲ است: ما می‌خواهیم تحول زمانی ایجاد شده توسط H^1 را جدا کنیم چون H^0 به خودی خود نمی‌تواند موجب گذار بین ویژه حالت‌های $|i^0\rangle$ و $|f^0\rangle$ خودش شود. برای این کار، می‌بایست با توصیف‌های هم‌ارز دیگر دینامیک کوانتومی در کنار توصیفی که تاکنون به کار برده‌ایم آشنا شویم. توصیفی که با آن آشنا هستیم، تصویر شرودینگر نامیده می‌شود. در این تصویر، حالت ذره به وسیله بردار $|\psi_S(t)\rangle$ توصیف می‌شود (اندیس S را به همه کمیت‌هایی که در تصویر شرودینگر ظاهر می‌شوند الحاق می‌کنیم تا آنها را از نظایرشان در تصویرهای دیگر متمایز کنیم). فیزیک مسئله در حاصل ضرب‌های داخلی $\langle \omega_S | \psi_S(t) \rangle$ قرار می‌گیرد که احتمالات

$$P(\omega, t) = |\langle \omega_S | \psi_S(t) \rangle|^2 \quad (1-3-18)$$

را برای به دست آوردن نتیجه ω هنگام اندازه‌گیری Ω به دست می‌دهند. در اینجا $|\omega_S\rangle$ ویژه کت بهنجار شده عملگر $\Omega_S(X_S, P_S)$ با ویژه مقدار ω است. چون X_S و P_S مستقل از زمان هستند، Ω_S و $|\omega_S\rangle$ هم اینگونه‌اند. لذا فیزیک مسئله در ضرب نقطه‌ای کت متحرک $|\psi_S(t)\rangle$ با کت‌های مانای $|\omega_S\rangle$ قرار می‌گیرد.

تحول زمانی $|\psi_S(t)\rangle$ در حالت کلی به وسیله

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_S(t)\rangle = H_S |\psi_S(t)\rangle \quad (1-2-3-18) \text{ الف}$$

و در مسئله ما به وسیله

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_S(t)\rangle = [H_S^0 + H_S^1(t)] |\psi_S(t)\rangle \quad (1-2-3-18) \text{ ب}$$

مشخص می‌شود. مقادیر چشم‌داشتی طبق رابطه زیر تغییر می‌کنند

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \Omega_S \rangle = \langle [\Omega_S, H_S] \rangle \quad (3-3-18)$$

اگر انتشارگر $U_S(t, t_0)$ را به صورت زیر تعریف کنیم

$$|\psi_S(t)\rangle = U_S(t, t_0) |\psi_S(t_0)\rangle \quad (4-3-18)$$

۱- خواننده‌ای که از نظر زمان در مضیقه است می‌تواند نگاهی سطحی به این بخش بیندازد.

از معادله (۱۸-۳-۳) نتیجه می شود که (چون $|\psi_S(t_0)\rangle$ دلخواه است):

$$i\hbar \frac{dU_S}{dt} = H_S U_S \quad (۱۸-۳-۵)$$

در اینجا فرمول هایی ارائه می شوند (که برای همه انتشار گرها درست هستند) که در ادامه کار مفید خواهند بود (معادله (۱۸-۳-۴) را به خاطر بیاورید):

$$U^\dagger U = I$$

$$U(t_3, t_2)U(t_2, t_1) = U(t_3, t_1) \quad (۱۸-۳-۶)$$

$$U(t_1, t_1) = I$$

$$U^\dagger(t_1, t_2) = U(t_2, t_1)$$

تصویر برهمکنش

از آنجا که $U_S(t, t_0)$ عملگری یکانی است، که تعمیم عملگر چرخش به فضاهاى مختلط است، می توانیم تحول زمانی بردارهای حالت را به صورت «چرخش» در فضا هیلبرت توصیف کنیم.^۱ چرخش به وسیله $U_S(t, t_0)$ یا به طور معادل به وسیله $H_S(t) = H_S^0 + H_S^1(t)$ ایجاد می شود. برای یک لحظه تصور کنید که H_S^1 وجود ندارد، آنگاه چرخش به وسیله $U_S^0(t)$ ایجاد خواهد شد که از

$$i\hbar \frac{dU_S^0}{dt} = H_S^0 U_S^0 \quad (۱۸-۳-۷)$$

پیروی می کند. جواب صوری این معادله $U_S(t, t_0) = e^{-iH_S^0(t-t_0)/\hbar}$ است. اگر $H_S^1(t)$ در مسئله قرار گیرد H_S^0 و $H_S^1(t)$ مشترکاً چرخش U_S را ایجاد می کنند.

این مباحث راهی برای منجمد کردن تحول زمانی ایجاد شده توسط H_S^0 پیشنهاد می کنند. فرض کنید به چارچوبی برویم که با آهنگی می چرخد که U_S^0 به تنهایی ایجاد می کند. در این چارچوب، بردار حالت حرکت می کند چون $H_S^1 \neq 0$ است. این حدس خود را ثابت می کنیم. برای خنثی کردن چرخش ایجاد شده توسط U_S^0 یعنی برای دیدن اشیاء از چارچوب چرخان $|\psi_S(t)\rangle$ را در $(U_S^0)^+$ ضرب می کنیم و داریم

$$|\psi_I(t)\rangle = [U_S^0(t, t_0)]^\dagger |\psi_S(t)\rangle \quad (۱۸-۳-۸-الف)$$

کت $|\psi_I(t_0)\rangle$ بردار حالت در چارچوب چرخان یا تصویر برهمکنش است. اگر در معادله بالا $t = t_0$ قرار دهیم داریم:

$$|\psi_I(t_0)\rangle = |\psi_S(t_0)\rangle \quad (۱۸-۳-۸-ب)$$

۱- در این بخش کلمه «چرخش» را در این مفهوم تعمیم یافته به کار می بریم و نه در معنی چرخش فضایی.

یعنی در $t = t_0$ ، لحظه‌ای که به چارچوب چرخان رفتیم، کت‌های برهمکنش و شرودینگر بر هم منطبق هستند. تحول زمانی $|\psi_I(t)\rangle$ به صورت زیر است:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_I(t)\rangle &= i\hbar \frac{dU_S^{0\dagger}}{dt} |\psi_S\rangle + U_S^{0\dagger} i\hbar \frac{d|\psi_S\rangle}{dt} \\ &= -U_S^{0\dagger} H_S^0 |\psi_S\rangle + U_S^{0\dagger} (H_S^0 + H_S^1) |\psi_S\rangle \\ &= U_S^{0\dagger} H_S^1 |\psi_S\rangle \\ &= U_S^{0\dagger} H_S^1 U_S^0 U_S^{0\dagger} |\psi_S\rangle \\ &= U_S^{0\dagger} H_S^1 U_S^0 |\psi_I(t)\rangle \end{aligned}$$

حال

$$(U_S^0)^\dagger H_S^1(t) U_S^0 = H_I^1(t) \quad (9-3-18)$$

هامیلتونی مختل کننده در چارچوب چرخان است. لذا می‌توانیم بنویسیم

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_I(t)\rangle = H_I^1(t) |\psi_I(t)\rangle \quad (10-3-18)$$

بنابراین همان‌طور که پیش‌بینی کردیم تحول زمانی بردار حالت در تصویر برهم‌کنش به وسیله هامیلتونی مختل کننده، H_I^1 ، مشخص می‌شود. علی‌رغم اینکه بردار حالت در این وضعیت با آهنگی متفاوت می‌چرخد پیش‌بینی‌های فیزیکی با پیش‌بینی‌های تصویر شرودینگر یکسان هستند. دلیل این امر این است که $P(\omega, t)$ فقط به ضرب داخلی بردار حالت و ویژه کت Ω با ویژه مقدار ω بستگی دارد و ضرب داخلی بین دو بردار با رفتن به چارچوب چرخان تغییر نمی‌کند. اما هم بردار حالت و هم ویژه کت در تصویر برهمکنش متفاوت ظاهر می‌شوند. درست همان‌طور که

$$|\psi_S(t)\rangle \rightarrow U_S^{0\dagger}(t, t_0) |\psi_S(t)\rangle = |\psi_I(t)\rangle$$

تغییر می‌کند، داریم

$$|\omega_S\rangle \rightarrow U_S^{0\dagger}(t, t_0) |\omega_S\rangle = |\omega_I(t)\rangle \quad (11-3-18)$$

اما

$$\langle \omega_S | \psi_S(t) \rangle = \langle \omega_I(t) | \psi_I(t) \rangle \quad (12-3-18)$$

کت وابسته به زمان $|\omega_I(t)\rangle$ همان ویژه کت عملگر وابسته به زمان

$$\Omega_I(t) = U_S^{0\dagger} \Omega_S U_S^0 \quad (13-3-18)$$

است که همان Ω است که در چارچوب چرخان دیده می‌شود:

$$\Omega_I(t)|\omega_I(t)\rangle = U_S^{0\dagger}\Omega_S U_S^0 U_S^{0\dagger}|\omega_S\rangle = U_S^{0\dagger}\Omega_S|\omega_S\rangle = \omega|\omega_I(t)\rangle \quad (14-3-18)$$

وابستگی Ω_I به زمان را می‌توان با ترکیب معادله (۱۸-۳-۱۳)، که آن را تعریف می‌کند، و معادله (۱۸-۳-۷)، که تحول زمانی U_S^0 را مشخص می‌کند، محاسبه کرد:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\Omega_I}{dt} &= i\hbar \frac{dU_S^{0\dagger}}{dt} \Omega_S U_S^0 + U_S^{0\dagger} \Omega_S i\hbar \frac{dU_S^0}{dt} \\ &= U_S^{0\dagger} [\Omega_S, H_S^0] U_S^0 = [\Omega_I, H_I^0] \end{aligned} \quad (15-3-18)$$

در تصویر برهمکنش، عملگرها در پاسخ به هامیلتونی مختل نشده H_I^0 تحول می‌یابند.^۱ در حالی که در تصویر شرودینگر کل بار مسئولیت تحول زمانی به دوش بردار حالت قرار می‌گیرد، در این تصویر این کار به وسیله بردارهای حالت و عملگرها مشترکاً انجام می‌شود (به شیوه‌ای که فیزیک مسئله تغییر نکند).

اینک مسئله اصلی خود یعنی به دست آوردن یک سری اختلالی برای دامنه گذار را پیگیری می‌کنیم. یک انتشارگر $U_I(t, t_0)$ در تصویر برهمکنش تعریف می‌کنیم:

$$|\psi_I(t)\rangle = U_I(t, t_0)|\psi_I(t_0)\rangle \quad (16-3-18)$$

که به دلیل معادله (۱۸-۳-۱۰) از رابطه زیر پیروی می‌کند

$$i\hbar \frac{dU_I}{dt} = H_I^1 U_I \quad (17-3-18)$$

همین که $U_I(t)$ را به دست آوریم همیشه می‌توانیم با استفاده از

$$U_S(t, t_0) = U_S^0(t, t_0) U_I(t, t_0) \quad (18-3-18)$$

که از معادلات (۱۸-۳-۸) و (۱۶-۳-۱۸) حاصل می‌شود به $U_S(t)$ برسیم.

از آنجا که H_I^1 به زمان بستگی دارد جواب معادله (۱۸-۳-۱۷)، $U_I = \exp(-iH_I^1(t-t_0)/\hbar)$ ، نیست. یک جواب صوری با شرط اولیه صحیح،

$$U_I(t, t_0) = I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H_I(t') U_I(t', t_0) dt' \quad (19-3-18)$$

است که می‌توان با قرار دادن آن در معادله دیفرانسیل به راحتی آن را اثبات کرد. چون در هر دو طرف U_I وجود دارد این واقعاً جواب نیست بلکه یک معادله انتگرالی، هم ارز با معادله دیفرانسیل (۱۸-۳-۱۷) با شرط اولیه صحیح، است. بنابراین به هیچ وجه جواب دقیق را به دست نیاورده‌ایم. اما این معادله انتگرالی روش خوبی

۱- در واقع در این مسئله $H_I^0 = U_S^{0\dagger} H_S^0 U_S^0 = H_S^0$ است چون $[H_S^0, U_S^0] = 0$.

برای نوشتن بسط اختلال فراهم می‌کند. فرض کنید U_I را تا مرتبهٔ صفرم بخواهیم. در معادلهٔ (۱۸-۳-۱۹) جملات دارای H_I^1 را حذف می‌کنیم:

$$U_I(t, t_0) = I + O(H_I^1) \quad (۲۰-۳-۱۸)$$

این مورد انتظار است چون اگر H_I^1 را نادیده بگیریم بردارهای حالت در تصویر برهمکنش حرکت نمی‌کنند. تا مرتبهٔ اول، فقط می‌توانیم یک H_I^1 را نگه داریم. لذا مقدار مرتبهٔ صفرم U_I را در سمت راست معادلهٔ (۱۸-۲-۹) به کار می‌بریم و داریم:

$$U_I(t, t_0) = I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H_I^1(t') dt' + O(H_I^2) \quad (۲۱-۳-۱۸)$$

قبل از رفتن به مرتبهٔ بعدی، این معادله را با معادلهٔ (۱۸-۲-۹) برای دامنهٔ گذار $d_f(t)$ ، که تا مرتبهٔ اول محاسبه شد، مقایسه می‌کنیم. تعریف $d_f(t)$ را به خاطر بیاورید: این کمیت، تصویر حالت اولیهٔ $|i_S^0\rangle$ (در $t = t_0$) در امتداد $\langle f_S^0 | \exp[iE_f^0(t - t_0)/\hbar]$ است:

$$d_f(t) = \langle f_S^0 | e^{iE_f^0(t-t_0)/\hbar} U_S(t, t_0) | i_S^0 \rangle \quad (۲۲-۳-۱۸)$$

$$= \langle f_S^0 | U_S^{0\dagger}(t, t_0) U_S(t, t_0) | i_S^0 \rangle$$

$$= \langle f_S^0 | U_I(t, t_0) | i_S^0 \rangle \quad (۲۳-۳-۱۸)$$

اگر انتشارگر مرتبهٔ اول خود، معادلهٔ (۱۸-۳-۲۱)، را در معادلهٔ فوق قرار دهیم داریم:

$$d_f(t) = \langle f_S^0 | U_I(t, t_0) | i_S^0 \rangle$$

$$= \delta_{fi} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle f_S^0 | H_I^1(t') | i_S^0 \rangle dt'$$

$$= \delta_{fi} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle f_S^0 | U_S^{0\dagger}(t', t_0) H_S^1 U_S^0(t', t_0) | i_S^0 \rangle dt' \quad (۲۴-۳-۱۸)$$

$$= \delta_{fi} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t (H_S^1)_{fi} e^{i\omega_{fi}(t'-t_0)} dt'$$

که اگر $t_0 = 0$ قرار دهیم، با (۱۸-۲-۹) در توافق است.

به سراغ مرتبه‌های بالاتر می‌رویم. با تکرار جاگذاری سمت راست معادلهٔ (۱۸-۳-۱۹)، نتیجهٔ U_I تا مرتبهٔ معلوم، می‌توانیم به U_I تا مرتبه‌های بالاتر برسیم:

$$U_I(t, t_0) = I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H_I^1(t') dt' + (-i/\hbar)^2 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t'} H_I^1(t') H_I^1(t'') dt' dt'' \quad (۲۵-۳-۱۸)$$

$$+ (-i/\hbar)^3 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t'} \int_{t_0}^{t''} H_I^1(t') H_I^1(t'') H_I^1(t''') dt' dt'' dt''' + \dots$$

با ضرب $U_S^0(t, t_0)$ از چپ و نوشتن H_I^1 بر حسب H_S^1 به انتشارگر تصویر شرودینگر می‌رسیم

$$U_S(t, t_0) = U_S^0(t, t_0) - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t U_S^0(t, t_0) U_S^{0\dagger}(t', t_0) H_S^1 U_S^0(t', t_0) dt' \\ + (-i/\hbar)^2 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t'} U_S^0(t, t_0) U_S^{0\dagger}(t', t_0) H_S^1 U_S^0(t', t_0) U_S^{0\dagger}(t'', t_0) \\ \times H_S^1 U_S^0(t'', t_0) dt' dt'' + \dots \quad (18-3-26)$$

$$U_S(t, t_0) = U_S^0(t, t_0) - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t U_S^0(t, t') H_S^1 U_S^0(t', t_0) dt' \\ + (-i/\hbar)^2 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t'} U_S^0(t, t') H_S^1 U_S^0(t', t'') H_S^1 U_S^0(t'', t_0) dt' dt'' + \dots$$

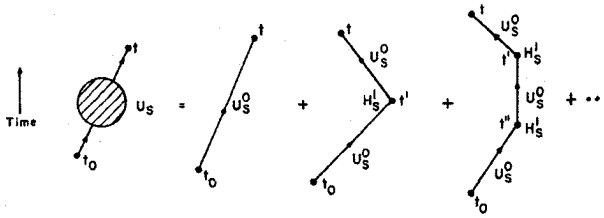
سری فوق می‌توانست به صورت زیر توصیف شود: در سمت چپ انتشارگر کامل تصویر شرودینگر را داریم و در سمت راست یک بسط سری آن را. جمله اول بیان می‌کند که سیستم از t_0 تا t فقط در پاسخ به U_S^0 ، یعنی در پاسخ به H_S^0 ، تحول می‌یابد. جمله دوم، اگر از چپ به راست آن را بخوانیم (تصور کنید که روی یک حالت اولیه اثر کند)، بیان می‌کند که سیستم از t_0 تا t' در پاسخ به U_S^0 تحول یافته، در آنجا یکبار با اختلال برهمکنش می‌کند و بعد از آن تا زمان t صرفاً به U_S^0 پاسخ می‌دهد. انتگرال روی t' تعداد دفعات ممکن را جمع می‌زند که این رویارویی تنها با H_S^1 می‌تواند اتفاق بیفتد. مفهوم جملات بالاتر هم واضح است. اینها به طور طرح وار در شکل ۱۸-۱ نشان داده شده‌اند.

مخصوصاً اگر گذار از حالت $|i^0\rangle$ به $|f^0\rangle$ را در نظر بگیریم (اندیس S را همه جا حذف می‌کنیم) با وارد کردن یک مجموعه کامل از ویژه حالت‌های H^0 در جمله مرتبه دوم داریم

$$\langle f^0 | U(t, t_0) | i^0 \rangle = \delta_{fi} e^{-iE_f^0(t-t_0)/\hbar} + \frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t e^{-iE_f^0(t-t')/\hbar} \langle f^0 | H^1 | i^0 \rangle e^{-iE_f^0(t-t_0)/\hbar} dt' \\ + \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t'} \sum_n e^{-iE_f^0(t-t')/\hbar} \langle f^0 | H^1 | n^0 \rangle \\ \times e^{-iE_n^0(t'-t'')/\hbar} \langle n^0 | H^1 | i^0 \rangle e^{-iE_f^0(t'-t_0)/\hbar} dt' dt'' + \dots \quad (18-3-27)$$

معنی جمله اول واضح است. جمله دوم (از راست به چپ) بیان می‌کند که بین t_0 و t' ویژه حالت $|i^0\rangle$ فقط یک فاز انتخاب می‌کند (یعنی فقط به H_S^0 پاسخ می‌دهد). در t' با اختلال مواجه می‌شود که دارای دامنه $\langle f^0 | H^1 | i^0 \rangle$ برای تبدیل آن به حالت $|f^0\rangle$ است. بعد از آن تا زمان t به عنوان ویژه حالت $|f^0\rangle$ تحول می‌یابد. دامنه کل برای رسیدن به $|f^0\rangle$ با انتگرال گیری روی زمان‌هایی که تبدیل می‌توانست در آنها صورت گیرد به دست می‌آید. پس گذار مرتبه اول با فرایند یک-مرحله‌ای $f \rightarrow i$ متناظر است. در مرتبه دوم، یک جمع روی مجموعه کاملی از حالت‌ها، $|n^0\rangle$ ‌ها، می‌بینیم و معنی آن اینست که سیستم می‌تواند از $|i^0\rangle$ به

$|f^0\rangle$ از طریق هر حالت میانی یا مجازی $|n^0\rangle$ برود. لذا دامنه مرتبه-دوم یک فرایند دو-مرحله‌ای $f \rightarrow n \rightarrow i$ را توصیف می‌کند. دامنه‌های مرتبه بالاتر تعابیر مشابهی دارند.



شکل ۱۸-۱: نمایش تصویری سری اختلالی. دایره هاشور خورده انتشارگر کامل را بین زمان‌های t_0 و t نشان می‌دهد. دایره هاشور خورده یک جمع روی تعداد زیادی از جملات است که هر کدام از آنها با تعداد متفاوتی از برهمکنش‌ها با اختلال H_S^1 متناظرند. بین چنین برهمکنش‌هایی، ذره در پاسخ به فقط H_S^0 تحول می‌یابد، یعنی به وسیله U_S^0 منتشر می‌شود.

تصویر هایزنبرگ

واضح است که نه فقط دو، بلکه بی نهایت تصویر وجود دارد چون می‌توان به چارچوب‌هایی رفت که با سرعت‌های مختلف می‌چرخند. اما همه آنها درخور مطالعه نیستند. این بخش را با یک تصویر به پایان می‌بریم که بسیار مهم است؛ یعنی تصویر هایزنبرگ. در این تصویر وابستگی زمانی کامل بردار حالت را منجمد می‌کنیم. بردار حالت هایزنبرگ عبارتست از

$$|\Psi_H(t)\rangle = U_S^\dagger(t, t_0) |\Psi_S(t)\rangle = |\Psi_S(t_0)\rangle \quad (18-3-28)$$

عملگرها در این تصویر،

$$\Omega_H(t) = U_S^\dagger \Omega_S U_S \quad (18-3-29)$$

که از رابطه زیر پیروی می‌کنند

$$i\hbar \frac{d\Omega_H}{dt} = [\Omega_H, H_H] \quad (18-3-30)$$

تمرین ۱۸-۳-۱: معادله (۱۸-۳-۳۰) را به دست آورید.

پس در تصویر هایزنبرگ بردارهای حالت ثابت بوده و عملگرها وابستگی زمانی کامل را دارند (چون تصویر برهمکنش بین تصویر هایزنبرگ و تصویر شرودینگر قرار می‌گیرد، یعنی عملگرها و بردارهای حالت وابستگی زمانی را بین خود تقسیم می‌کنند، تصویر میانی هم نامیده می‌شود. نام دیگر آن تصویر دیراک است). به تشابه بین معادله (۱۸-۳-۳۰) و معادله کلاسیکی

$$\frac{d\omega}{dt} = \{\omega, \mathcal{H}\} \quad (18-3-31)$$

توجه کنید. تصویر هایزنبرگ تشابه صوری نزدیکی بین مکانیک کوانتومی و کلاسیکی نشان می‌دهد: برای هر متغیر کلاسیکی ω یک عملگر کوانتومی Ω_H وجود دارد که از معادلات مشابهی تبعیت می‌کند؛ کل کاری که لازم است انجام دهیم، جانشینی مرسوم $\omega \rightarrow \Omega$ و $\{ \} \rightarrow (-i/\hbar)[,]$ است. اگر جابه‌جاگرها و گروه

پواسون (PB) را عملاً حساب کنیم تشابه بین معادلات (۳۰-۳-۱۸) و (۳۱-۳-۱۸) حتی برجسته تر هم هست. برای مثال مسئله نوسانگر را در نظر بگیرید که برای آن

$$H_H = \frac{P_H^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X_H^2 \quad (۳۲-۳-۱۸)$$

است. از آنجا که X_H و P_H به وسیله یک تبدیل یکانی از X_S و P_S به دست می آیند قواعد یکسانی را با آنها برآورده می کنند

$$[X_H(t), P_H(t)] = U_S^\dagger(t, t_0) [X_S, P_S] U_S(t, t_0) = U_S^\dagger i \hbar I U_S = i \hbar I \quad (۳۳-۳-۱۸)$$

توجه کنید که شناسه های زمان باید در X_H و P_H مساوی باشند. از این رو معادله (۳۳-۳-۱۸) رابطه جابه جایی زمان- مساوی نامیده می شود. از معادله (۳۱-۳-۱۸)،

$$\dot{X}_H = -\frac{i}{\hbar} [X_H, H_H] = \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \frac{i \hbar P_H}{m} = \frac{P_H}{m} \quad (الف-۳۴-۳-۱۸)$$

و همین طور

$$\dot{P}_H = -m \omega^2 X_H \quad (ب-۳۴-۳-۱۸)$$

که از نظر شکل با معادلات کلاسیکی

$$\dot{x} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} = \frac{p}{m} \quad (۳۵-۳-۱۸)$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x} = -m \omega^2 x$$

یکسان هستند. این مورد انتظار است، چون کوانتیده کردن طوریست که جابجاگرها و PB همیشه از تناظر

$$\{\omega, \lambda\} = \gamma \rightarrow -\frac{i}{\hbar} [\Omega, \Lambda] = \Gamma \quad (۳۶-۳-۱۸)$$

پیروی می کنند (معادله (۴۰-۴-۷)). اگر چه تصویر هایزبرگ معمولاً در مکانیک کوانتومی غیر نسیتی به کار نمی رود، ولی در نظریه میدان کوانتومی نسیتی بسیار مورد توجه است.

تمرین ۱۸-۳-۴: در مسئله تشدید پارامغناطیسی تمرین ۱۴-۴-۳ به چارچوبی رفتیم که در حال چرخش در فضای حقیقی بود. نشان دهید که این هم با یک چرخش فضای هیلبرت معادل است اما نه ما را به تصویر برهمکنش می برد نه هایزبرگ، مگر در حالت تشدید. در حالت تشدید چه تصویری خواهد بود؟ (اگر $\mathbf{B} = B_0 \mathbf{k} + B \cos \alpha t \mathbf{i} - B \sin \alpha t \mathbf{j}$ باشد B_0 را به H_S^0 و B را به H_S^1 مرتبط کنید).

۱۸-۴- بحث عمومی برهمکنش‌های الکترومغناطیسی

این بخش شامل خلاصه‌ای از مفاهیم الکترودینامیک است که برای بخش بعدی مورد نیاز هستند. همچنین به برخی سوالات ظریف پرداخته می‌شود که اهمیت زیادی دارند ولی مستقیماً به بقیه این فصل ارتباط پیدا نمی‌کنند.

الکترودینامیک کلاسیک

با مرور بسیار مختصر این موضوع آغاز می‌کنیم.^۱ پاسخ ماده به میدان الکترومغناطیسی با نیروی لورنتز روی یک بار q مشخص می‌شود:

$$\mathbf{F} = q \left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{B} \right) \quad (1-4-18)$$

پاسخ میدان‌ها به بارها با معادلات ماکسول مشخص می‌شود:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho \quad (2-4-18)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0 \quad (3-4-18)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (4-4-18)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \quad (5-4-18)$$

که ρ و \mathbf{j} چگالی‌های بار و جریان محدود شده به وسیله شرط مرزی

$$\nabla \cdot \mathbf{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (6-4-18)$$

است.

تمرین ۱۸-۴-۱: با گرفتن دیورژانس از معادله (۵-۴-۱۸) نشان دهید که اگر قرار باشد معادلات ماکسول دو به دو سازگار باشند، معادله پیوستگی باید برآورده شود.

پتانسیل‌های \mathbf{A} و ϕ به صورت زیر معرفی می‌شوند: معادله (۴-۴-۱۸) به همراه اتحاد $\nabla \cdot \nabla \times \mathbf{A} = 0$ بیان می‌کنند که \mathbf{B} می‌تواند به صورت یک کرل نوشته شود

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (7-4-18)$$

با قرار دادن این در معادله (۳-۴-۱۸) داریم

$$\nabla \times \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) = 0 \quad (8-4-18)$$

بر پایه اتحاد $\nabla \times \nabla \phi \equiv 0$ نتیجه می گیریم که $(\mathbf{E} + 1/c \partial \mathbf{A} / \partial t)$ می تواند به صورت یک گرادیان نوشته شود یا اینکه

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \phi \quad (9-4-18)$$

اگر \mathbf{E} و \mathbf{B} را در دو معادله ماکسول دیگر به وسیله پتانسیل ها جایگزین کرده و از اتحاد $\nabla \times \nabla \times \mathbf{A} \equiv \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A}$ (که در مختصات دکارتی درست است) به معادلاتی می رسیم که پاسخ \mathbf{A} و ϕ را به بارها و جریان ها به دست می دهند:

$$\nabla^2 \phi + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \cdot \mathbf{A}) = -4\pi\rho \quad (10-4-18)$$

$$\nabla^2 \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} - \nabla \left(\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) = -\frac{4\pi \mathbf{j}}{c} \quad (11-4-18)$$

قبل از مبادرت به حل این معادله توجه کنید که یک سری آزادی عمل در پتانسیل های \mathbf{A} و ϕ وجود دارد از این جهت که ممکن است بدون هیچ تغییر فیزیکی، آنها را (به شیوه ای خاص) تغییر دهیم. به راحتی می شود اثبات کرد که \mathbf{A} و ϕ و

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} - \nabla \Lambda \quad (12-4-18)$$

$$\phi' = \phi + \frac{1}{c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \quad (13-4-18)$$

که Λ تابعی دلخواه است، به میدان های \mathbf{E} و \mathbf{B} یکسان منجر می شوند.

تمرین ۱۸-۴-۲: با استفاده از معادلات (۷-۴-۱۸) و (۹-۴-۱۸)، \mathbf{E} و \mathbf{B} متناظر با (\mathbf{A}, ϕ) و (\mathbf{A}', ϕ') را محاسبه کرده و ادعای فوق را ثابت کنید.

از آنجا که فیزیک مسئله، یعنی قانون نیرو و معادلات ماکسول، فقط به \mathbf{E} و \mathbf{B} حساس است، تبدیل پتانسیل ها، موسوم به تبدیل پیمانه ای، آنها تحت تأثیر قرار نمی دهد. این موضوع به ناوردایی پیمانه ای معروف است که Λ پارامتر پیمانه و (\mathbf{A}, ϕ) و (\mathbf{A}', ϕ') تبدیلات پیمانه ای یکدیگر، یا هم ارز پیمانه ای، نامیده می شوند.

ناوردایی پیمانه ای می تواند برای ساده کردن معادلات (۱۰-۴-۱۸) و (۱۱-۴-۱۸) مورد استفاده قرار گیرد. مورد میدان الکترومغناطیسی آزاد ($\rho = \mathbf{j} = 0$) را در نظر بگیرید که در بخش بعدی مورد توجه قرار خواهد گرفت. در این مورد، آزادی پیمانه ای به ما این اجازه را می دهد که \mathbf{A} و ϕ را طوری انتخاب کنیم که (تمرین بعدی را ببینید):

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad (14-4-18)$$

$$\phi = 0 \quad (15-4-18)$$

این پیمانه، پیمانه کولن نامیده شده و بعد از این مورد استفاده قرار خواهد گرفت. اگر شروط پیمانه کولن فوق و شرط $|A| \rightarrow 0$ در بی نهایت فضایی را اعمال کنیم، آزادی پیمانه‌ای دیگری باقی نمی‌ماند. پتانسیل در پیمانه کولن منحصر بفرد و «فیزیکی» است از این حیث که برای یک E و B معین یک A منحصر بفرد وجود دارد.

تمرین (۱۸-۴-۳): فرض کنیم یک A و ϕ داریم که از شروط پیمانه کولن پیروی نمی‌کنند. بینیم چطور آنها می‌توانند به پیمانه کولن تبدیل شوند.

الف- نشان دهید که اگر

$$\Lambda(\mathbf{r}, t) = -c \int_{-\infty}^t \phi(\mathbf{r}, t') dt'$$

انتخاب کرده و به (A', ϕ') تبدیل کنیم آنگاه $\phi' = 0$ می‌شود. A' همان $A - \nabla \Lambda$ است که $\nabla \cdot A'$ لزوماً صفر نیست.

ب- نشان دهید که اگر یکبار دیگر از طریق

$$\Lambda' = -\frac{1}{4\pi} \int \frac{\nabla \cdot A'(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3\mathbf{r}'$$

تبدیل پیمانه‌ای به (A'', ϕ'') انجام دهیم آنگاه $\nabla \cdot A'' = 0$ می‌شود [راهنمایی:

$$[\nabla^2 (1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)] = -4\pi\delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

ج- با استفاده از $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$ ثابت کنید که ϕ'' هم صفر می‌شود.

د- نشان دهید که اگر بخواهیم هر تبدیل پیمانه‌ای دیگری درون پیمان کولن انجام دهیم، Λ می‌بایست مستقل از زمان بوده و از $\nabla^2 \Lambda = 0$ پیروی کند. اگر درخواست کنیم که در بی نهایت فضایی $|A| \rightarrow 0$ میل کند، A منحصر بفرد می‌شود.

در پیمانه کولن، معادلات حرکت برای میدان الکترومغناطیسی (دور از بارها) به شکل زیر ساده می‌شوند.

$$\nabla^2 \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = 0 \quad (18-4-16 \text{ الف})$$

$$\nabla \cdot \dot{\mathbf{A}} = 0 \quad (18-4-16 \text{ ب})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad (18-4-16 \text{ ج})$$

معادله اول بیان می‌کند که امواج الکترومغناطیسی با سرعت c حرکت می‌کنند. جواب‌های این معادلات به شکل^۱

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \quad (18-4-17)$$

از اهمیت خاصی برای ما برخوردارند. با قرار دادن این جواب در معادله موج، داریم

۱- \mathbf{k} بردار موج را در اینجا نشان می‌دهد نه بردار یکه در امتداد محور Z را.

$$\omega^2 = k^2 c^2$$

یا

$$\omega = kc$$

(۱۸-۴-۱۸)

شرط پیمانه‌ای بیان می‌کند که

$$0 = \nabla \cdot \mathbf{A} = -(\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_0) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$$

یا

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_0 = 0$$

(۱۹-۴-۱۸)

یعنی \mathbf{A} باید در صفحه عمود بر جهت انتشار قرار گیرد یعنی امواج الکترومغناطیسی، عرضی هستند. میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی متناظر با این جواب عبارتند از

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\left(\frac{\omega}{c}\right) \mathbf{A}_0 \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \quad (۲۰-۴-۱۸)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = -(\mathbf{k} \times \mathbf{A}_0) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \quad (۲۱-۴-۱۸)$$

لذا \mathbf{E} و \mathbf{B} بر هم عمود بوده و بر \mathbf{k} عمودند (یعنی عرضی هستند) - شکل ۱۸-۲ را ببینید. بزرگی آنها یکسان است:

$$|\mathbf{E}| = |\mathbf{B}| \quad (۲۲-۴-۱۸)$$

شارش انرژی از واحد سطح (عمود بر \mathbf{k}) در هر ثانیه برابر است با

$$|\mathbf{S}| = \frac{c}{4\pi} |(\mathbf{E} \times \mathbf{B})| = \frac{\omega^2}{4\pi c} |\mathbf{A}_0|^2 \sin^2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \quad (۲۳-۴-۱۸ \text{ الف})$$

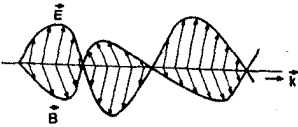
متوسط زمانی روی یک چرخه برابر است با

$$S_{av} = \frac{\omega^2}{8\pi c} |\mathbf{A}_0|^2 \quad (۲۳-۴-۱۸ \text{ ب})$$

و انرژی بر واحد حجم،

$$u = (1/8\pi) \cdot [|\mathbf{E}|^2 + |\mathbf{B}|^2] \quad (۲۴-۴-۱۸)$$

توجه کنید که $|\mathbf{S}|$ برابر چگالی انرژی ضربدر سرعت انتشار موج است.



شکل ۱۸-۲: موج الکترومغناطیسی در یک لحظه معین. E و B و k (بردار موج) متقابلاً بر هم عمودند.

پتانسیل‌ها در نظریه کوانتومی

اکنون سوال این است که آیا مکانیک کوانتومی هم تحت تبدیلات پیمانه‌ای پتانسیل‌ها ناورداست؟ با استفاده از رویکرد انتگرال مسیر به دنبال پاسخ این سوال می‌گردیم. به خاطر بیاورید که

$$U(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = N \sum_{\text{paths}} \exp[iS/\hbar] \tag{۲۵-۴-۱۸}$$

که N یک ضریب بهنجارش بوده و کنش

$$S = \int_{r'}^t \mathcal{L} dt'' = \int_{r'}^t \left(\frac{1}{2} m |\dot{\mathbf{r}}|^2 + \frac{q}{c} \mathbf{v} \cdot \mathbf{A} - q\phi \right) dt'' \tag{۲۶-۴-۱۸}$$

باید در امتداد هر مسیر P که (r', t') و (r, t) را به هم وصل می‌کند محاسبه شود. فرض کنید یک تبدیل پیمانه‌ای برای پتانسیل‌ها انجام دهیم، در این صورت

$$S \rightarrow S_{\Lambda} = S - \int_{r'}^t \frac{q}{c} \left(\mathbf{v} \cdot \nabla \Lambda + \frac{\partial \Lambda}{\partial t''} \right) dt'' \tag{۲۷-۴-۱۸}$$

اما

$$\mathbf{v} \cdot \nabla \Lambda + \frac{\partial \Lambda}{\partial t''} = \frac{d\Lambda}{dt''} \tag{۲۸-۴-۱۸}$$

مشتق کل در امتداد مسیر است. در نتیجه

$$S_{\Lambda} = S + \frac{q}{c} [\Lambda(\mathbf{r}', t') - \Lambda(\mathbf{r}, t)] \tag{۲۹-۴-۱۸}$$

واضح است که S و S_Λ به دینامیک کلاسیک یکسانی اشاره دارند: وردش S و وردش S_Λ (برای یافتن مسیر کمترین کنش‌ها) هم ارزند، چون S و S_Λ فقط به اندازه (q/c) A در نقاط انتهایی تفاوت داشته و این نقاط در وردش ثابت نگه داشته می‌شوند. در حالت کوانتومی از معادلات (۲۵-۴-۱۸) و (۲۹-۴-۱۸) نتیجه می‌گیریم که

$$U \rightarrow U_{\Lambda} = U \cdot \exp \left\{ \frac{iq}{\hbar c} [\Lambda(\mathbf{r}', t') - \Lambda(\mathbf{r}, t)] \right\} \tag{۳۰-۴-۱۸}$$

چون

$$U(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \langle \mathbf{r} | U(t, t') | \mathbf{r}' \rangle \tag{۳۱-۴-۱۸}$$

می بینیم که اثر تبدیل پیمانه‌ای با یک تغییر در پایه مختصه هم ارز است:

$$|\mathbf{r}\rangle \rightarrow |\mathbf{r}_\Lambda\rangle = e^{(iq\Lambda/\hbar c)}|\mathbf{r}\rangle \quad (۱۸-۴-۳۲)$$

که البته نمی‌تواند مسئله را تغییر دهد (اما بحث بخش ۷-۴ را به‌خاطر بیاورید). تغییر تابع موج تحت تبدیل پیمانه‌ای به‌صورت زیر است

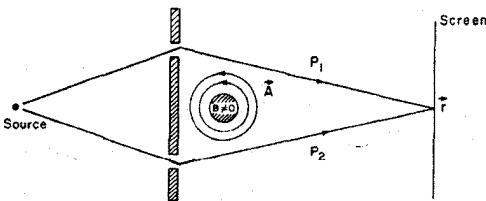
$$\psi = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle \rightarrow \psi_\Lambda = \langle \mathbf{r}_\Lambda | \psi \rangle = e^{-iq\Lambda(\mathbf{r},t)/\hbar c} \psi \quad (۱۸-۴-۳۳)$$

این نتیجه می‌تواند در رویکرد شرودینگر هم به‌دست آید (تمرین زیر).

تمرین ۱۸-۴-۴: (ثبات ناوردایی پیمانه‌ای در رویکرد شرودینگر). الف- H را برای ذره‌ای واقع در پتانسیل‌های (\mathbf{A}, ϕ) بنویسید.

ب- H_Λ ، هامیلتونی به‌دست آمده از طریق تبدیل پیمانه‌ای پتانسیل‌ها، را بنویسید. ج- نشان دهید که اگر $\psi(\mathbf{r}, t)$ جوابی از معادله شرودینگر با هامیلتونی H باشد، $\psi_\Lambda(\mathbf{r}, t)$ ارائه شده در معادله (۱۸-۴-۳۳) جواب متناظر، با $H \rightarrow H_\Lambda$ است.

اگر چه مکانیک کوانتومی از این حیث که به تبدیلات پیمانه‌ای پتانسیل‌ها حساس نیست به مکانیک کلاسیک شباهت دارد اما از نظر جایگاهی که به پتانسیل‌ها اختصاص می‌دهد متفاوت با آن است. این موضوع در اثر آهارنوف - بوم، که به‌طور طرح‌وار در شکل ۱۸-۳ نشان داده شده است، به شکلی برجسته مشهود است.^۱ این آزمایش همان آزمایش دو شکافی است با یک تغییر: یک ناحیه کوچک ($B \neq 0$) وجود دارد که از آنجا شار مغناطیسی به سمت بیرون صفحه خارج می‌شود (می‌توانید سیملوله‌ای کوچک را تصور کنید که از صفحه کتاب خارج شده و درون آن خطوط شار محبوس هستند. این خطوط البته باید به انتهای دیگر سیملوله برگردند اما این ترتیب قرار نیست در ناحیه آزمایشگاهی اتفاق بیفتد). پتانسیل برداری (در پیمانه کولن) به‌وسیله حلقه‌های بسته حول سیم پیچ نشان داده شده‌اند. در سطح کلاسیکی، این تغییر در آزمایش دو شکافی انتظار می‌رود که هیچ تغییر در خروجی ایجاد نکند چون هیچ میدان مغناطیسی بی در امتداد مسیرهای کلاسیکی P_1 و P_2 وجود ندارد. البته یک میدان \mathbf{A} در امتداد P_1 و P_2 وجود دارد اما این پتانسیل هیچ اهمیت مستقیمی در فیزیک کلاسیک ندارد. و اگرایی آن، که مهم است، در آنجا صفر می‌شود.



شکل ۱۸-۳: یک آزمایش (طرح وار) که اثر آهارنوف - بوم را نمایش می‌دهد. این همان آزمایش دو شکافی است جز اینکه یک سیم پیچ کوچک دارد که از صفحه خارج شده و حامل شار مغناطیسی است (که با ناحیه هاشور خورده و $B \neq 0$ نشان داده شده است).

حال مورد کوانتومی را در نظر بگیرید. در رویکرد انتگرال مسیر، دامنه رسیدن ذره گسیل شده توسط چشمه به نقطه \mathbf{r} روی صفحه، قبل از روشن شدن \mathbf{B} ، برابر است با:

$$\psi(\mathbf{r}) \simeq \psi_{P_1}(\mathbf{r}) + \psi_{P_2}(\mathbf{r}) \quad (۱۸-۴-۳۴)$$

که ψ_{P_i} سهم ناشی از مسیر کلاسیکی P_i و همسایه‌های مجاور آن است. تداخل بین این دو سهم، الگوی تداخلی معمول را ایجاد می‌کند. \mathbf{B} را روشن می‌کنیم، هر مسیر یک ضریب اضافی به همراه خواهد داشت:

$$\exp\left[\frac{iq}{\hbar c} \int_{r'}^r (\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) dt''\right] = \exp\left(\frac{iq}{\hbar c} \int_{\text{source}}^r \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}''\right) \quad (۱۸-۴-۳۵)$$

چون نزدیک P_1 و P_2 ، $\nabla \times \mathbf{A} = 0$ است، طبق قضیه استوکس این انتگرال برای P_1 و همسایه‌های آن و P_2 و همسایه‌های آن یکی است. اما انتگرال روی P_1 با انتگرال روی P_2 یکسان نیست چون این مسیرها سیم پیچ را در برداشته و

$$\begin{aligned} \int_{P_2} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} - \int_{P_1} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} &= \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = \int_S (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot d\mathbf{s} \\ &= \int \mathbf{B} \cdot d\mathbf{s} = \Phi \neq 0 \end{aligned} \quad (۱۸-۴-۳۶)$$

است. که S هر سطح محدود شده توسط حلقه بسته $P_1 + P_2$ ، Φ شار عبوری از آن، یعنی خروجی از صفحه در شکل ۱۸-۳، است. با در نظر داشتن این، به

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp\left(\frac{iq}{\hbar c} \int_{P_1} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}''\right) \psi_{P_1}(\mathbf{r}) + \exp\left(\frac{iq}{\hbar c} \int_{P_2} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}''\right) \psi_{P_2}(\mathbf{r}) \quad (۱۸-۴-۳۷)$$

می‌رسیم. با بیرون آوردن عامل فاز کلی، که الگوی تداخلی را تحت تأثیر قرار نمی‌دهد، به

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \left(\text{overall factor}\right) \left[\psi_{P_1}(\mathbf{r}) + \exp\left(\frac{iq}{\hbar c} \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}\right) \psi_{P_2}(\mathbf{r}) \right] \\ &= \left(\text{overall factor}\right) [\psi_{P_1}(\mathbf{r}) + \exp[iq\Phi/\hbar c] \psi_{P_2}(\mathbf{r})] \end{aligned} \quad (۱۸-۴-۳۸)$$

می‌رسیم.

با تغییر دادن \mathbf{B} (و در نتیجه Φ)، فاز نسبی بین سهم‌های ناشی از دو مسیر را تغییر می‌دهیم و الگوی تداخلی را به بالا و پایین حرکت می‌دهیم. هر وقت $q\Phi/\hbar c = 2\pi n$ شد، الگو به شکل اولیه اش، که هیچ میدانی وجود نداشت، بر خواهد گشت. به عبارتی دیگر م ضرب صحیحی از کوانتوم شار

$$\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar c}{q} \quad (۱۸-۴-۳۹)$$

هیچ تفاوت قابل مشاهده‌ای برای مکانیک کوانتومی ذره ایجاد نخواهد کرد. از این مطلب استفاده زیادی می‌کنیم.

ببینیم چطور ذره، ولو اینکه مسیره‌های غالب همگی در ناحیه $B = 0$ قرار گیرند، میدان مغناطیسی را تشخیص می‌دهد. فرض کنید شکل ۱۸-۳ را به شما نشان دهیم اما ناحیه‌ای که سیم پیچ در آن قرار دارد (ناحیه هاشور خورده و $B \neq 0$) را ببوشانیم، آیا شما متوجه شار مغناطیسی خروجی از صفحه خواهید شد؟ بله، چون خطوط در گردش \mathbf{A} به شما خواهند گفت که $\oint \mathbf{A} d\mathbf{r} = \int \mathbf{B} ds \neq 0$ است.^۱ اما ذره کلاسیکی در امتداد P_1 یا P_2 حرکت می‌کند و نمی‌تواند اطلاعاتی از $\oint \mathbf{A} d\mathbf{r}$ داشته باشد و بهترین کاری که می‌تواند انجام دهد اندازه‌گیری $\vec{\nabla} \times \mathbf{A}$ به صورت موضعی است که همیشه برابر صفر می‌شود. از سوی دیگر ذره کوانتومی «در امتداد P_1 و P_2 می‌رود» (در مفهوم انتگرال مسیر) و با کنار هم گذاشتن آنچه در امتداد P_1 و P_2 اتفاق می‌افتد (از طریق مقایسه فاز نسبی سهم‌های ناشی از دو مسیر) می‌تواند نه تنها وجود \mathbf{B} ، بلکه شار کل را هم نتیجه بگیرد. توجه کنید که با اینکه ذره به \mathbf{A} پاسخ می‌دهد، و نه مستقیماً به \mathbf{B} ، پاسخ، ناوردای پیمانه‌ای است.

۱۸-۵- برهمکنش اتم‌ها با تابش الکترومغناطیسی

ما هیچ تلاشی برای ورود به این حوزه بسیار بزرگ انجام نخواهیم داد و فقط دو مثال را بررسی خواهیم نمود. اولی، اثر فوتو الکترونیک در هیدروژن است (که در آن تابش فرودی، الکترون را از اتم خارج می‌کند). دومی فروافت (وآپاشی) خودبه‌خود هیدروژن از یک حالت برانگیخته به حالت پایه (فروافت در غیاب میدان‌های خارجی) است، که فقط در صورتی قابل درک است که میدان الکترومغناطیسی به صورت یک سیستم کوانتومی بحث شود.

اثر فوتو الکترونیک در هیدروژن

اتم هیدروژنی را در حالت پایه خود $|100\rangle$ واقع در مبداء در نظر بگیرید که موج

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \quad (18-5-1)$$

روی آن فرود می‌آید. برای انرژی‌های $\hbar\omega$ بقدر کافی بزرگ، الکترون مقید می‌تواند رها شده و به پرواز در آید. آهنگ این فرایند را می‌توانید با استفاده از قاعده طلایی فرمی محاسبه کنید:

$$R_{i \rightarrow f} = i \rightarrow f \text{ گذار آهنگ} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f^0 | H^1 | i^0 \rangle|^2 \delta(E_f^0 - E_i^0 - \hbar\omega) \quad (18-5-2)$$

دو نکته قبل از کاربرد این قاعده باید توضیح داده شوند:

۱- این شبیه به این است که بگوییم شما می‌توانید وجود یک قطب را در صفحه مختلط و مانده آنرا بدون اینکه واقعاً به نزدیکی آن بروید با محاسبه $\oint \frac{1}{2\pi i} f(z) dz$ روی مسیری که آن را احاطه می‌کند، استنباط کنید.

(۱) - برای حالت نهایی، می‌بایست یک ویژه حالت انرژی مثبت از هامیلتونی کولنی $H^0 = P^2/2m - e^2/r$ به کار ببریم. حال از حیث شهودی می‌دانیم که اگر الکترون خروجی بسیار پر انرژی باشد می‌بایست قادر باشیم تا از کشش پروتون روی آن چشم‌پوشی کرده و آنرا با یک موج تخت $\langle \mathbf{p}_f \rangle$ در معادله (۱۸-۵-۲)، با خطایی ناچیز، توصیف کنیم. در حالی که در اینجا اتفاقاً اینگونه است، نکته ظریفی وجود دارد که شایسته توجه است. اگر جاذبه کولنی پروتون را به‌عنوان یک اختلال نسبت به هامیلتونی ذره آزاد، $P^2/2m$ ، تلقی کنیم، می‌توانیم ویژه حالت H^0 را به صورت یک سری اختلالی بنویسیم:

$$|f^0\rangle = |\mathbf{p}_f\rangle + \text{جملات مرتبه بالاتر}$$

مسئله حق داریم تا حدس بزنیم که $\langle \mathbf{p}_f \rangle$ در انرژی‌های بالا در سری غالب خواهد شد. اما فرض دیگری می‌کنیم: فرض می‌کنیم که وقتی عنصر ماتریسی را در معادله (۱۸-۵-۲) محاسبه می‌کنیم، جمله پیشرو $\langle \mathbf{p}_f \rangle$ کماکان بر جملات مرتبه بالاتر غالب خواهد شد. واضح است که اعتبار این فرض به حالت اولیه $|i^0\rangle$ و عملگر H^1 هم بستگی دارد. اکنون معلوم می‌شود که اگر حالت اولیه یک حالت s باشد (مثل این مورد)، جملات مرتبه بالاتر واقعاً در محاسبه عنصر ماتریسی ناچیز می‌شوند. در غیر این صورت این طور نیست. برای مثال اگر حالت اولیه، یک حالت p باشد، سهم جمله مرتبه اول در عنصر ماتریسی قابل مقایسه با سهم ناشی از جمله پیشرو $\langle \mathbf{p}_f \rangle$ می‌شود. برای جزئیات بیشتر باید به کتابی مراجعه کنید که مختص این موضوع باشد.^۱

(۲) - این قاعده برای پتانسیل‌هایی به شکل $H^1(t) = H^1 e^{-i\omega t}$ به کار می‌رود در حالی که در اینجا [معادله (۱۴-۴-۱۱)] را به یاد بیاورید،^۲

$$\begin{aligned} H^1(t) &= \frac{-(-e)}{2mc} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{P} + \mathbf{P} \cdot \mathbf{A}) \\ &= \frac{e}{mc} \mathbf{A} \cdot \mathbf{P} \quad (\mathbf{V} \cdot \mathbf{A} = 0 \text{ چون}) \\ &= \frac{e}{mc} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{P} \\ &= \frac{e}{2mc} [e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}] \mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{P} \end{aligned} \quad (۱۸-۵-۳)$$

۱- برای مثال بخش ۷۰ از Quantum Mechanics of One and Two Electron Atoms by H. Bethe and E. Salpeter, Plenum, New York (1977) را ببینید. این کتاب، کتاب خوبی برای اطلاعات دیگر در رابطه با این موضوع است. برای نمونه اگر مقدار چشم‌داشتی r^4 را در حالت $|nlm\rangle$ هیدروژن بخواهید در این کتاب آنرا خواهید یافت.

۲- ما جمله متناسب با $|\mathbf{A}|^2$ را، که از مرتبه دوم است، در H^1 لحاظ نمی‌کنیم. برهمکنش اسپینی $-\gamma \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}$ از مرتبه اول است اما در ناحیه سینماتیکی، که روی آن متمرکز خواهیم شد، ناچیز است. این موضوع به زودی نشان داده خواهد شد.

از دو قسمت، فقط قسمت اول دارای وابستگی زمانی صحیح برای القای گذار $f \rightarrow i$ با $E_i \rangle E_f$ است؛ قسمت دوم به وسیله تابع دلتای پایسته کننده انرژی خنثی خواهد شد. بعد از این از جمله دوم چشم‌پوشی کرده و فرض می‌کنیم

$$H^1(t) = \frac{e}{2mc} e^{ik \cdot r} \mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{P} e^{-i\omega t} \quad (4-5-18)$$

$$= H^1 e^{-i\omega t}$$

با این دو نکته، می‌توانیم اقدام به محاسبه عنصر ماتریسی گذار در پایه مختصه بکنیم:

$$H_{fi}^1 = \frac{e}{2mc} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \int e^{-ip_0 \cdot r / \hbar} e^{ik \cdot r} \mathbf{A}_0 \cdot (-i\hbar \nabla) e^{-r/a_0} d^3 \mathbf{r} \quad (5-5-18)$$

ضریب $e^{ik \cdot r}$ را در نظر بگیرید. از فصل ۵ به‌خاطر دارید که ضرب یک تابع موج در $e^{ip_0 \cdot r / \hbar}$ به آن حالت یک تکانه \mathbf{p}_0 اضافه می‌کند. لذا ضریب $e^{ik \cdot r}$ این را نشان می‌دهد که تکانه $\hbar \mathbf{k}$ به وسیله تابش به اتم داده می‌شود.^۱ برای هر گذاری بین ترازهای اتمی، این تکانه انتقال یافته در مقایسه با تکانه نوعی p الکترون ناچیز است. این مطلب را به شرح زیر توضیح می‌دهیم. انرژی انتقال یافته از مرتبه یک ریدبرگ است:

$$\hbar \omega \sim e^2 / a_0 \quad (6-5-18)$$

به‌طوری که تکانه فوتون برابر است با

$$\hbar k = \frac{\hbar \omega}{c} \simeq \frac{e^2}{a_0 c} \quad (7-5-18)$$

از سوی دیگر، تکانه نوعی الکترون که از اصل عدم قطعیت برآورد می‌شود برابر است با

$$p \sim \frac{\hbar}{a_0} \quad (8-5-18)$$

لذا

$$\frac{\hbar k}{p} \simeq \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137} \quad (9-5-18)$$

در این مورد، $\hbar \omega$ بسیار بالاتر است چون یک الکترون آزاد شده پر انرژی داریم. اما هنوز هم گستره وسیعی از ω وجود دارد که روی آن $\hbar k / p \ll 1$ است و ما در این حوزه کار خواهیم کرد. دو این حوزه، نسبت برهم کنش اسپینی، که نادیده گرفته‌ایم، به برهمکنش مداری، که در حال بررسی است، تقریباً برابر است با

۱- ممکن است نگران شده باشید که عملگر $(-i\hbar \nabla)$ بین $e^{ik \cdot r}$ و تابع موج اتمی وجود دارد. اما چون $\vec{\nabla} \cdot \mathbf{A} = 0$ است می‌توانیم $\mathbf{A} \cdot \mathbf{P}$ را به‌صورت $\mathbf{P} \cdot \mathbf{A}$ هم بنویسیم، که در این مورد، $e^{ik \cdot r}$ کنار تابع موج اتمی خواهد بود.

$$\frac{\langle (e/2mc)\mathbf{S}\cdot\mathbf{B} \rangle}{\langle (e/mc)\mathbf{A}\cdot\mathbf{P} \rangle} \simeq \frac{\langle \hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\times\mathbf{A} \rangle}{\langle \mathbf{A}\cdot\mathbf{P} \rangle} \simeq \frac{\hbar k}{p} \ll 1 \quad (10-5-18)$$

که نادیده گرفتن ما را تأیید می کند.

حوزه‌ای که ما در آن کار می کنیم می تواند به صورت

$$ka_0 \ll 1 \quad (11-5-18)$$

هم توصیف شود [معادله (۹-۵-۱۸)]. این بدین معنی است که فاز موج روی اندازه اتم تغییر کمی بکند. از آنجا

که انتگرال در معادله (۵-۵-۱۸) به وسیله تابع موج e^{-r/a_0} در $r \simeq a_0$ به تسدی کاهش می یابد می توانیم

را در انتگرال به صورت $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \simeq 1 \quad (12-5-18)$$

تقریب بزنیم. این تقریب، تقریب دو قطبی الکتریکی^۱ نامیده می شود. دلیل این امر این است که در این تقریب، اتم یک میدان الکتریکی ثابت از نظر فضایی می بیند،

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \frac{-1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \\ &= \frac{-1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\mathbf{A}_0}{2} e^{-i\omega t} \right) \quad (13-5-18)^2 \\ &= \frac{i\omega}{2c} \mathbf{A}_0 e^{-i\omega t} \end{aligned}$$

و از طریق گشتاور دو قطبی الکتریکی $\boldsymbol{\mu} = -e\mathbf{R}$ به آن جفت می شود

$$H^1(t) = -\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{E} = \frac{i\omega e}{2c} \mathbf{A}_0\cdot\mathbf{R} e^{-i\omega t} \quad (14-5-18)$$

این باید با معادله (۳-۵-۱۸) در این تقریب توافق داشته باشد:

$$H^1(t) = \frac{e}{2mc} \mathbf{A}_0\cdot\mathbf{P} e^{-i\omega t} \quad (15-5-18)$$

هم ارزی معادلات (۱۴-۵-۱۸) و (۱۵-۵-۱۸) می تواند در حالت کلی بشرح ذیل نشان داده شود: از آنجا که برای هر

$$H^0 = \frac{|\mathbf{P}|^2}{2m} + V(\mathbf{R}) \quad (16-5-18) \text{ (الف)}$$

داریم

۱- با نگر داشتن توان‌های بالاتر $\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}$ در بسط، می توان به جملات معروف به سهم‌های چهار قطبی الکتریکی، دو قطبی مغناطیسی، هشت قطبی الکتریکی، چهار قطبی مغناطیسی و غیره رسید.

۲- ما قسمت فرکانسی «غلط» \mathbf{A} را نادیده می گیریم.

$$[\mathbf{R}, H^0] = \frac{i\hbar}{m} \mathbf{P} \quad (18-5-16 \text{ ب})$$

نتیجه می شود که

$$\begin{aligned} \langle f^0 | \mathbf{P} | i^0 \rangle &= \frac{m}{i\hbar} \langle f^0 | \mathbf{R} H^0 - H^0 \mathbf{R} | i^0 \rangle \\ &= \frac{m}{i\hbar} (E_i^0 - E_f^0) \langle f^0 | \mathbf{R} | i^0 \rangle \\ &= im\omega \langle f^0 | \mathbf{R} | i^0 \rangle \end{aligned} \quad (18-5-17)$$

به طوری که

$$\begin{aligned} \langle f^0 | \frac{e}{2mc} \mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{P} | i^0 \rangle &= \frac{ie\omega}{2c} \mathbf{A}_0 \cdot \langle f^0 | \mathbf{R} | i^0 \rangle \\ &= \langle f^0 | (-\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{E}) | i^0 \rangle \quad [\text{by Eq. (18.5.14)}] \end{aligned} \quad (18-5-18) \text{ (طبق (18-5-14))}$$

حال محاسبه عنصر ماتریسی H_{fi}^1 را در تقریب دو قطبی در نظر می گیریم:

$$H_{fi}^1 = N \int e^{-i\mathbf{p}_f \cdot \mathbf{r} / \hbar} \mathbf{A}_0 \cdot (-i\hbar \nabla) e^{-r/a_0} d^3 \mathbf{r} \quad (18-5-19)$$

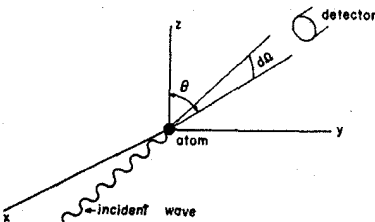
که N یک ثابت است:

$$N = \left(\frac{e}{2mc} \right) \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{3/2} \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \quad (18-5-20)$$

اگر از ∇ جزء به جزء انتگرال بگیریم نتیجه می شود

$$H_{fi}^1 = N \mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{p}_f \int e^{-i\mathbf{p}_f \cdot \mathbf{r} / \hbar} e^{-r/a_0} d^3 \mathbf{r} \quad (18-5-21)$$

(اکنون روشن می شود که چرا شکل $\mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{P}$ هامیلتونی H^1 را بر شکل $\mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{R}$ ترجیح می دهیم). اگر محور z را در امتداد \mathbf{p}_f بگیریم، انتگرال \mathbf{r} به شکل زیر در می آید



شکل ۱۸-۴: اثر فوتو الکترونیک. در هر آزمایش واقعی، دقت در انرژی و زاویه متناهی هستند. سوال این است که چه تعداد الکترون با بزرگی تکانه بین p و $p+dp$ وارد مخروطی با زاویه فضایی $d\Omega$ می شوند.

$$\begin{aligned}
 & \int_0^\infty \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} e^{-ip_f r \cos \theta / \hbar} e^{-r/a_0 r^2} dr d(\cos \theta) d\phi \\
 &= 2\pi \int_0^\infty \left(\frac{e^{-ip_f r / \hbar} - e^{ip_f r / \hbar}}{-ip_f r / \hbar} \right) e^{-r/a_0 r^2} dr \\
 &= \frac{2\pi \hbar i}{p_f} \left[-\frac{\partial}{\partial(1/a_0)} \right] \int_0^\infty [e^{-(1/a_0 + ip_f / \hbar)r} - e^{-(1/a_0 - ip_f / \hbar)r}] dr \\
 &= \frac{8\pi/a_0}{[(1/a_0)^2 + (p_f/\hbar)^2]^2}
 \end{aligned} \tag{۲۲-۵-۱۸}$$

با قرار دادن این در معادله (۱۸-۵-۵) و عبارت حاصل در قاعده طلایی به آهنگ گذار می‌رسیم

$$\begin{aligned}
 R_{i \rightarrow f} &= \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{e}{2mc} \right)^2 \frac{1}{8\pi^3 \hbar^3} \frac{1}{\pi a_0^3} \frac{|\mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{p}_f|^2 64\pi^2 a_0^6}{[1 + (p_f a_0 / \hbar)^2]^4} \\
 &\times \delta(E_f^0 - E_i^0 - \hbar\omega)
 \end{aligned} \tag{۲۳-۵-۱۸}$$

اکنون زمان در تابع δ قرار گرفته است. تابع دلتا، یک توزیع احتمال تکینه برای یافتن الکترون نهایی در حالتی با تکانه از نظر ریاضی دقیق \mathbf{p}_f به دست می‌دهد. این احتمال در عمل اهمیت چندانی ندارد چون در عمل یک آشکارساز با زاویه دهانه منتهای $d\Omega$ تعبیه شده و به دنبال این می‌گردیم که چه تعداد الکترون با بزرگی تکانه بین p_f و $p_f + dp_f$ وارد آن می‌شوند (شکل ۱۸-۴). تابع δ بیان می‌کند که تکانه‌های الکترونی در

$$\frac{p_f^2}{2m} = E_i^0 + \hbar\omega$$

متمرکز می‌شوند. سهم ناشی از این ناحیه با انتگرالگیری از تابع δ روی p_f به دست می‌آید. با استفاده از

$$\delta\left(\frac{p_f^2}{2m} - E_i^0 - \hbar\omega\right) = \frac{m}{p_f} \delta\{p_f - [2m(E_i^0 + \hbar\omega)]^{1/2}\} \tag{۲۴-۵-۱۸}$$

به آهنگ گذار به درون آشکارساز می‌رسیم

$$\begin{aligned}
 R_{i \rightarrow d\Omega} &= \frac{2\pi}{\hbar} |H_{fi}^1|^2 m p_f d\Omega \\
 &= \frac{4a_0^3 e^2 p_f |\mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{p}_f|^2}{m\pi \hbar^4 c^2 [1 + (p_f a_0 / \hbar)^2]^4} d\Omega
 \end{aligned} \tag{۲۵-۵-۱۸}$$

(در این عبارت و همه عبارت‌های بعدی، $p_f = [2m(E_i^0 + \hbar\omega)]^{1/2}$ است). توجه کنید که آهنگ فقط به بزرگی میدان اعمال شده \mathbf{A}_0 زاویه بین قطبش \mathbf{A}_0 و تکانه بیرون رونده، و بزرگی \mathbf{p}_f یا به طور معادل ω ، فرکانس تابش، بستگی دارد. فرمول بالا بیان می‌کند که الکترون می‌خواهد موازی با \mathbf{A}_0 ، یعنی با میدان الکتریکی که آنرا از اتم جدا می‌کند، بیرون بیاید. جهت تابش فرودی ظاهر نمی‌شود، چون ما فرض کرده‌ایم

که $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 1$ است. اگر ضریب $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ را نگه داریم، دیده خواهد شد که تکانه الکترون به سمت \mathbf{k} متمایل شده و نشان دهنده تکانه ورودی $\hbar\mathbf{k}$ خواهد بود.

تمرین ۱۸-۵-۱: الف- ثابت کنید که می توانیم دقیقاً با جاگذاری $\mathbf{p}_f - \hbar\mathbf{k}$ به جای \mathbf{p}_f در معادله (۱۸-۵-۱۹) ضریب $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ را لحاظ کنیم. ب- ادعای صورت گرفته در بالا در مورد توزیع تکانه الکترون را ثابت کنید.

اگر از $R_{i \rightarrow d\Omega}$ روی همه زوایا انتگرال بگیریم به آهنگ کل یونیزاسیون می رسیم. با انتخاب \mathbf{A}_0 در امتداد محور z برای راحتی، نتیجه می گیریم که

$$R_{i \rightarrow \text{all}} = \frac{4a_0^3 e^2 p_f^3 |A_0|^2}{m\pi\hbar^4 c^2 [1 + (p_f a_0 / \hbar)^2]^4} \iint \cos^2 \theta d(\cos \theta) d\phi$$

$$= \frac{16a_0^3 e^2 p_f^3 |A_0|^2}{3m\hbar^4 c^2 [1 + (p_f a_0 / \hbar)^2]^4} \quad (18-5-26)$$

از آنجا که این آهنگ یونیزاسیون است و هر یونیزاسیون، انرژی $\hbar\omega$ را از باریکه می گیرد، آهنگ جذب انرژی برابر است با

$$\frac{dE_{\text{abs}}}{dt} = \hbar\omega \cdot R_{i \rightarrow \text{all}} \quad (18-5-27)$$

حال باریکه انرژی را با آهنگ $\omega^2 |A_0|^2 / 8\pi c$ بر واحد سطح فرود می آورد. فرض کنید عمود بر این باریکه، صفحه کاملاً جذب کننده‌ای با مساحت σ قرار دهیم. این صفحه انرژی را با آهنگ

$$\frac{dE_{\text{abs}}}{dt} = \frac{\sigma |A_0|^2 \omega^2}{8\pi c} \quad (18-5-28)$$

جذب خواهد کرد. با مقایسه معادلات (۱۸-۵-۲۷) و (۱۸-۵-۲۸) می بینیم که می توانیم به اتم، یک سطح مقطع فوتو الکترونیک وابسته کنیم

$$\sigma = \frac{8\pi c}{|A_0|^2 \omega^2} \cdot \hbar\omega \cdot R_{i \rightarrow \text{all}} \quad (18-5-29)$$

$$= \frac{128a_0^3 \pi e^2 p_f^3}{3m\hbar^3 \omega c [1 + p_f^2 a_0^2 / \hbar^2]^4} \quad (18-5-30)$$

از این حیث که اگر مجموعه‌ای از N (بزرگ) اتم هیدروژن غیر همپوشانی کننده (a_0 فاصله) در سر راه باریکه قرار گیرند، این مجموعه، انرژی را مثل یک صفحه کاملاً جذب (در آشام) با مساحت $N\sigma$ جذب خواهد کرد. همچنین می توانیم یک سطح مقطع پراکندگی دیفرانسیلی $d\sigma/d\Omega$ به شارش انرژی به درون زاویه فضایی $d\Omega$ وابسته کنیم:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{8\pi c}{|A_0|^2 \omega^2} \hbar\omega R_{i \rightarrow d\Omega}$$

$$= \frac{32a_0^3 e^2 p_f^3 \cos^2 \theta}{m c \omega \hbar^3 [1 + p_f^2 a_0^2 / \hbar^2]^4} \quad (18-5-31)$$

در ناحیه‌ای که $1 \gg \langle p_f a_0 / \hbar \rangle$ است، این فرمول به

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{32e^2 \hbar^5 \cos^2 \theta}{mc\omega p_f^5 a_0^5} \quad (۱۸-۵-۳۲)$$

ساده می‌شود.

- تمرین ۱۸-۵-۲:** الف- سطح مقطع فوتو الکتریک را وقتی الکترون خارج شده دارای انرژی جنبشی Ry ۱۰ است محاسبه کنید و آنرا با سطح مقطع هندسی اتم ($\approx \pi a_0^2$) مقایسه کنید.
 ب- نشان دهید که اگر گسیل فوتون (فوتو گسیل) از حالت $1s$ اتمی با بار Z را در نظر بگیریم، در حد $1 \gg \langle p_f a_0 / Z \hbar \rangle$ ، $\sigma \propto Z^5$ است.

کوانتس میدان^۱

فرمالیزم کلی، توضیح داده شده در مثال قبل، می‌تواند برای گروهی از پدیده‌های دیگر شامل برهمکنش اتم‌ها با تابش به کار رود. مادامی که میدان الکترومغناطیسی دارای شدت ماکروسکوپی است، نتایج همیشه در توافق خوبی با آزمایش هستند. شکست فرمالیزم فوق برای میدان‌های ضعیف به وسیله مثال زیر به برجسته ترین شکل نشان داده می‌شود. اتم هیدروژنی را در فضای آزاد (حالت فرین میدان ضعیف) در حالت $|2, l, m\rangle$ در نظر بگیرید. آهنگ فرو افت (واپاشی) به حالت پایه چقدر است؟ فرمالیزم ما جواب واضح صفر به دست می‌دهد (چون فضای آزاد با $\mathbf{A} = 0$ (در پیمانه کولن) متناظر است، به طوری که $H^1 = 0$ بوده و اتم برای همیشه باید در حالت مانای $|2, l, m\rangle$ باشد. اما به طور تجربی دیده شده است که اتم با آهنگ $R \approx 10^9 \text{ sec}^{-1}$ فرو افت می‌کند یا دارای طول عمر میانگین $\tau \approx 10^{-9} \text{ sec}$ است. در واقع همه اتم‌های برانگیخته در فضای آزاد به طور خودبه خود به حالت‌های پایه خود فرو افت می‌کنند. این پدیده با فرمالیزم ما قابل توضیح نیست).

بنابراین آیا می‌توانیم این نتیجه‌گیری را داشته باشیم که توصیف ما از فضای آزاد (که باید ساده‌ترین چیز برای توصیف باشد) نامناسب است؟ بله! توصیف فضای آزاد به وسیله $\mathbf{A} = \dot{\mathbf{A}} = 0$ کلاسیکی بوده و مثل این است که بگوییم حالت پایه نوسانگر با $x = p = 0$ مشخص می‌شود. اکنون می‌دانیم اگر نوسانگر به صورت کوانتومی بحث شود، فقط کمیت‌های متوسط $\langle 0|X|0\rangle$ و $\langle 0|P|0\rangle$ در حالت پایه صفر می‌شوند و حول این مقادیر میانگین، افت و خیزهای غیر صفر $\langle 0|X^2|0\rangle = (\Delta X)^2$ و $\langle 0|P^2|0\rangle = (\Delta P)^2$ وجود دارند. به همین ترتیب اگر میدان الکترومغناطیسی به صورت کوانتومی بحث شود دیده خواهد شد که فضای آزاد (که حالت پایه میدان است) به وسیله $\langle \mathbf{A} \rangle = \langle \dot{\mathbf{A}} \rangle = 0$ (که \mathbf{A} و $\dot{\mathbf{A}}$ عملگر هستند)^۲ با افت و خیزهای غیر صفر $(\Delta \mathbf{A})^2$ و $(\Delta \dot{\mathbf{A}})^2$ توصیف می‌شود. لذا فضای آزاد فقط از حیث متوسط، خوابیده است؛ همیشه افت و خیزهای کوانتومی میدان‌ها حول این مقادیر میانگین وجود دارند. این افت و خیزها هستند که فرو افت خودبه خود را برمی‌انگیزند.

۱- بحث این موضوع پیشرفته تا حدی مختصر خواهد بود. اگر بخواهید آنرا به صورت عمقی پیگیری کنید مجبور هستید مراحل حذف شده را پیدا کنید.

۲- در اینجا از قرار داد خود جدا شده و متغیرهای میدان کلاسیکی و کوانتومی را با یک نماد نشان می‌دهیم.

تا وقتی خودمان را به میدان‌های ماکروسکوپی محدود می‌کنیم توصیف‌های کوانتومی و کلاسیکی میدان غیر قابل تمییز می‌شوند. این همان دلیلی است که هنگام رفتن به مکانیک کوانتومی از مکانیک کلاسیک، یعنی رفتن از $\mathcal{H}^1 = (e/mc)\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}$ به $H^1 = (e/mc)\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}$ ، صرفاً \mathbf{p} را به عملگر \mathbf{P} ارتقاء داده و \mathbf{A} را کماکان میدان کلاسیکی قرار می‌دهیم. به همین دلیل این بحث، بحث نیمه کلاسیکی نامیده می‌شود. اینک به بحث کاملاً کوانتومی برمی‌گردیم که در آن \mathbf{A} هم یک عملگر خواهد شد.

ایده اصلی پشت سر کوانتیده کردن میدان آشناست: یک مجموعه کامل از مختصه‌ها و تکانه‌های کانونیک پیدا می‌کنیم که میدان کلاسیکی را توصیف می‌کند و آنها را به عملگرهایی ارتقاء می‌دهیم که از روابط جابه‌جایی کانونیک پیروی می‌کنند. سپس \mathcal{H} را، که همان انرژی میدان است که برحسب متغیرهای کانونیک نوشته است، برداشته و با قاعده جانیشینی مرسوم، H را به دست می‌آوریم. اما همان‌طور که خواهیم دید موانع زیادی وجود دارد.

با مختصه‌های میدان شروع می‌کنیم. اگر تصمیم بگیریم آنها را برحسب پتانسیل‌ها توصیف کنیم در هر نقطه \mathbf{r} در فضا چهار مختصه $(\phi(\mathbf{r}), \mathbf{A}(\mathbf{r}))^1$ داریم. می‌دانیم که این مختصه‌ها تماماً فیزیکی نیستند از این حیث که می‌تواند بدون هیچ نتیجه قابل مشاهده‌ای تبدیل پیمانه‌ای یابند. برای فیزیکی شدن آنها می‌بایست آنها را، مثلاً با اعمال شروط پیمانه کولن، محدود به وضعیتی کنیم که در آن هیچ آزادی پیمانه‌ای باقی مانده‌ای وجود ندارد. اگر چه در نهایت همین کار را خواهیم کرد ولی فعلاً با آنها به صورت مختصه‌های حقیقی رفتار خواهیم کرد.

تکانه‌های مزدوج این مختصه‌ها کدامند؟ برای یافتن پاسخ، به لاگرانژی بر می‌گردیم:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{8\pi} \int [|\mathbf{E}|^2 - |\mathbf{B}|^2] d^3\mathbf{r} = \frac{1}{8\pi} \int \left[-\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \phi \right]^2 - |\nabla \times \mathbf{A}|^2 d^3\mathbf{r} \quad (۱۸-۵-۳۳)$$

که وقتی نسبت به پتانسیل‌ها و بردش داده شود معادلات ماکسول را به دست می‌دهد.^۲ تکانه مزدوج هر «مختصه» مشتق \mathcal{L} نسبت به «سرعت» متناظر است. از این رو تکانه مزدوج $\phi(\mathbf{r})$ صفر می‌شود (در هر نقطه \mathbf{r} در فضا)، چون $\dot{\phi}(\mathbf{r})$ در \mathcal{L} ظاهر نمی‌شود. اینکه به مختصه‌ای می‌پردازیم که تکانه مزدوج‌اش عیناً صفر می‌شود بیان می‌کند که نمی‌توانیم روش کانونیک را ادامه دهیم. اما خوشبختانه آزاد هستیم که در پیمانه‌ای کار کنیم که در آن $\phi = 0$ است. لذا بعد از این می‌توانیم همه چیز را در مورد ϕ و تکانه مزدوج صفر شونده آن فراموش کنیم. بویژه می‌توانیم در معادله (۱۸-۵-۳۳)، $\phi = 0$ قرار دهیم.

۱- در اینجا \mathbf{r} فقط برچسبی روی مختصه‌های میدان است نه یک متغیر دینامیکی.

۲- اگر با این \mathcal{L} ناآشنا هستید، به‌خاطر آورید که انرژی میدان طبق معادله (۱۸-۴-۲۴)، $\int (\frac{1}{8\pi}) [|\mathbf{E}|^2 + |\mathbf{B}|^2] d\mathbf{r}$ است. این را در پیمانه $\phi = 0$ نوشته و علامت جمله‌ای را که متناظر با «انرژی پتانسیل» است تغییر دهید. نتیجه بالا، تعمیم به پیمانه $\phi \neq 0$ است.

۳- برای مثال ببینید: Classical Mechanics, by Herbet Goldstein, Addison Wesley, Reading Massachusetts (1965), P. 366.

حال مختصه های $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ را در نظر بگیرید. برای به دست آوردن $\Pi_i(\mathbf{r}_0)$ ، تکانه مزدوج $A_i(\mathbf{r}_0)$ ، از رابطه زیر استفاده می کنیم

$$\Pi_i(\mathbf{r}_0) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}_i(\mathbf{r}_0)}$$

در مشتق گیری از \mathcal{L} نسبت به $\dot{A}_i(\mathbf{r}_0)$ با انتگرال معادله (۱۸-۵-۳۳) روی \mathbf{r} به صورت یک جمع روی شاخص پیوسته \mathbf{r} رفتار می کنیم. مشتق جزئی فقط جمله حامل شاخص $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0$ را در جمع انتخاب می کند (چون سرعت ها در نقاط مختلف متغیرهای مستقل هستند) و نتیجه می شود که^۱

$$\Pi_i(\mathbf{r}_0) = \frac{1}{4\pi c^2} \dot{A}_i(\mathbf{r}_0) = \frac{-E_i(\mathbf{r}_0)}{4\pi c} \quad (۱۸-۵-۳۴)$$

یا در شکل برداری (با حذف اندیس 0 روی \mathbf{r})،

$$\mathbf{\Pi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi c^2} \dot{\mathbf{A}} = -\frac{\mathbf{E}}{4\pi c} \quad (۱۸-۵-۳۵)$$

توجه کنید که $\mathbf{\Pi}$ ذاتاً میدان الکتریکی است.

کار طبیعی که باید در اینجا انجام دهیم، ارتقاء دادن \mathbf{A} و $\mathbf{\Pi}$ به عملگرهای کوانتومی پیروی کننده از قواعد جابه جایی کانونیک، و به دست آوردن هامیلتونی کوانتومی H از طریق قاعده جانیشینی است. اما اگر این کار را انجام می دادیم سر و کاری با الکترودینامیک نمی داشتیم. دلیل مطلب، کلاسیکی بوده و به شرح زیر است. لاگرانژی را در معادله (۱۸-۵-۳۳) در نظر گرفته و $\phi = 0$ قرار دهید. با وردش آن نسبت به مولفه های \mathbf{A} به معادله برداری زیر می رسیم

$$\nabla^2 \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} - \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) = 0 \quad (۱۸-۵-۳۶)$$

که همان

$$\nabla \times \mathbf{B} - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = 0$$

در پیمانه $\phi = 0$ است. دو معادله دیگر، در صورتی که \mathbf{E} و \mathbf{B} را بر حسب \mathbf{A} بنویسیم

۱- بحث رسمی تر به شرح زیر است. اگر مثلاً $\mathcal{L} = \sum_i \dot{q}_i^2$ باشد آنگاه می دانیم که

$$p_j = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j} = \sum_i 2\dot{q}_i \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial \dot{q}_j} = \sum_i 2\dot{q}_i \delta_{ij} = 2\dot{q}_j$$

همین طور اگر

$$\mathcal{L} = \int_i \dot{A}_i^2(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}$$

باشد،

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}_i(\mathbf{r}_0)} = \int_i 2\dot{A}_i(\mathbf{r}) \frac{\partial \dot{A}_i(\mathbf{r})}{\partial \dot{A}_i(\mathbf{r}_0)} d^3\mathbf{r}$$

$$= \int_i 2\dot{A}_i(\mathbf{r}) \delta_{ij} \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) d^3\mathbf{r} = 2\dot{A}_i(\mathbf{r}_0)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0$$

عیناً بر آورده می شوند. مثل دیگر معادله ماکسول، قانون گاوس،

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$$

از هیچ چیزی به دست نمی آید (اگرچه نسبت به ϕ و \mathbf{A} را نسبت به ϕ و \mathbf{A} می دادیم به این می رسیدیم، اما ϕ را از تصویر حذف کرده ایم) بنابراین این معادله می بایست به صورت یک معادله قید روی تکانه $\mathbf{\Pi}$ ، که همان \mathbf{E} ضربدر یک ثابت است، الصاق شود (برخلاف یک معادله حرکت که دارای مشتقات زمانی در خود است، یک معادله قید رابطه ای بین متغیرها در یک زمان معین است. این معادله به این معنی است که متغیرها مستقل نیستند). قید

(۱۸-۵-۳۷)

$$\nabla \cdot \mathbf{\Pi} = 0$$

بیان می کند که مولفه های تکانه ها در نقاط مجاور هم مستقل نیستند (به مشتقات موجود در ∇ به صورت تفاضلات نگاه کنید). اگر از معادله (۱۸-۵-۳۶) دیورژانس بگیریم به ویژگی مهمی از قید می رسم:

$$0 = \nabla \cdot \nabla^2 \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \nabla \cdot \mathbf{A} - \nabla^2 \nabla \cdot \mathbf{A} \rightarrow \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \cdot \mathbf{\Pi}) = 0 \quad (۱۸-۵-۳۸)$$

به عبارتی دیگر، این نظریه بدون این قید دارای کمیت پایسته $\nabla \cdot \mathbf{\Pi}$ است و الکترودینامیک، با آن زیر مجموعه از مسیرهایی که در آنها این ثابت حرکت صفر است متناظر است. به علاوه، اگر خودمان را به این مسیره محدود کنیم می بینیم که $\nabla \cdot \mathbf{A}$ هم یک ثابت حرکت است [معادله (۱۸-۵-۳۷) را به صورت $\nabla \cdot \dot{\mathbf{A}}$ بنویسید]. ما این ثابت را صفر می گیریم یعنی در پیمانه کولن کار می کنیم.

این نظریه را چگونه کوانتیده می کنیم؟ یک روش این است که قیدها را نادیده گرفته و نظریه کلی را کوانتیده کرده و سپس تلاش کنیم تا آن زیر مجموعه از جوابها را (در نظریه کوانتومی) پیدا کنیم که مربوط به الکترودینامیک هستند. این کار می تواند انجام شود اما بسیار مشکل است. بنابراین اجازه دهید با قیدها در سطح کلاسیکی مواجه شویم. اولین مسئله ای که این قیود مطرح می کنند غیر کانونیک کردن متغیرهای \mathbf{A} و $\mathbf{\Pi}$ است و ما دستورالعملی برای کوانتیده کردن متغیرهای غیر کانونیک نداریم. ثابت می کنیم که این قیود واقعاً بیانگر این هستند که \mathbf{A} و $\mathbf{\Pi}$ غیر کانونیک هستند. اگر آنها کانونیک می بودند، از تعمیم های

$$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}$$

(با همه گروه پواسون های دیگر، صفر) یعنی

$$\{A_i(\mathbf{r}), \Pi_j(\mathbf{r}')\} = \delta_{ij} \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (۱۸-۵-۳۹)$$

(با همه گروه پواسون های دیگر، صفر) پیروی می کردند. اما اگر دیورژانس \mathbf{A} را نسبت به \mathbf{r} یا $\mathbf{\Pi}$ را نسبت به \mathbf{r}' حساب کنیم در سمت چپ به عدد صفر می رسم در حالی که در سمت راست اینگونه نیست.

آنچه می‌خواهیم انجام دهیم به قرار زیر است: می‌خواهیم \mathbf{A} و $\mathbf{\Pi}$ را با مجموعه جدیدی از متغیرها که از نظر تعداد کمترند اما دارای قیدهایی بین خود هستند معاوضه کنیم (این مثل تعویض متغیرهای x و y و z مقید شده به وسیله $x^2 + y^2 + z^2 = a^2$ با زوایای θ و ϕ روی کره‌ای به شعاع a است). این متغیرها و تکانه‌های متناظر، کانونیک شده و به‌طور خودکار، در صورتی که با \mathcal{H} شروع کنیم که برحسب این متغیرها نوشته شده باشد، الکترودینامیک را مجدداً تولید می‌کنند. برای کوانتیده کردن، این متغیرها را به عملگرهای پیروی کننده از قواعد جابه‌جایی کانونیک ارتقاء می‌دهیم. سپس هامیلتونی و دیگر عملگرها با قاعده جانشینی به‌دست می‌آیند.

اکنون مسئله با قیود

$$(18-5-40) \quad \nabla \cdot \mathbf{A} = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{\Pi} = 0$$

موسوم به قیود عرضی بودن^۱ (به دلیلی که بعداً ارائه می‌شود)، این است که آنها جبری نبوده بلکه معادلات دیفرانسیل هستند. برای جبری ساختن آنها، \mathbf{A} و $\mathbf{\Pi}$ را با تبدیل فوریه آنها تعویض می‌کنیم، چون معادلات دیفرانسیل در فضای مختصه وقتی جبری می‌شوند که تبدیل فوریه پیدا کنند. امیدواریم که کار با قیود جبری بین ضرایب فوریه راحت‌تر باشد. خواهیم دید که واقعاً اینگونه است. با این کار امتیاز دیگری هم به‌دست خواهیم آورد: ضرایب فوریه، مختصه‌های بهنجار هستند، یعنی وقتی هامیلتونی

$$(18-5-41) \quad \mathcal{H} = \frac{1}{8\pi} \int [16\pi^2 c^2 |\mathbf{\Pi}|^2 + |\nabla \times \mathbf{A}|^2] d^3\mathbf{r}$$

را (که با تغییر علامت جمله انرژی پتانسیل و حذف \mathbf{A} به نفع $\mathbf{\Pi}$ از \mathcal{H} به‌دست می‌آید) برحسب اینها بنویسیم تبدیل به یک جمع روی هامیلتونی‌های نوسانگری غیرجفت شده می‌شود. این نتیجه به دلیلی که ذکر می‌کنیم می‌توانسته از قبل پیش‌بینی شود. اگر از رابطه $|\nabla \times \mathbf{A}|^2 = -\mathbf{A} \cdot \nabla^2 \mathbf{A}$ استفاده کنیم، که وقتی معتبر است که $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ باشد، به

$$(18-5-42) \quad \mathcal{H} = \frac{1}{8\pi} \int \sum_i \sum_j [16\pi^2 c^2 \Pi_i(\mathbf{r}) \delta_{ij} \Pi_j(\mathbf{r}) - A_i(\mathbf{r}) \nabla^2 \delta_{ij} A_j(\mathbf{r})] d^3\mathbf{r}$$

می‌رسیم که شکل یکسانی با معادله (۷-۱-۱۰) دارد [به‌خاطر بیاورید که وقتی عملگر مشتق یا عملگر همانی را بین دو عنصر از فضای تابع ساندویچ کنیم، فقط یک جمع (صریح) روی شاخص پیوسته \mathbf{r} وجود خواهد داشت و جمع دیگر به‌وسیله توابع دلتای عناصر ماتریسی از بین خواهد رفت. چون مدهای بهنجار (طبیعی) ویژه بردارهای ∇^2 هستند (که می‌دانیم امواج تخت‌اند) رفتن به ضرایب فوریه، رفتن به مختصه‌های بهنجار است. با این مقدمات، به تبدیل فوریه \mathbf{A} مقید نشده برمی‌گردیم:

$$(18-5-43) \quad \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \int [\mathbf{a}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \mathbf{a}^*(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}] d^3\mathbf{k}$$

این بسط چند نکته دارد:

(۱)- از آنجا که بردار \mathbf{A} را تبدیل فوریه می‌کنیم، ضرایب فوریه، بردارهای $\mathbf{a}(\mathbf{k})$ هستند [می‌توانید معادله (۱۸-۵-۴۳) را سه بسط فوریه تلقی کنید، برای هر مولفه \mathbf{A} ، یک بسط].

(۲)- از آنجا که $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ تابعی حقیقی است، ضریب فوریه در \mathbf{k} و $-\mathbf{k}$ می‌بایست مزدوج‌های مختلط باشند. بسط ما این موضوع را روشن می‌کند. به بیانی دیگر، یک تابع برداری حقیقی \mathbf{A} در فضای مختصه نمی‌تواند یک تابع برداری مختلط $\mathbf{a}(\mathbf{k})$ را در فضای \mathbf{k} مشخص کند: اگر دو طرف را در $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ ضرب کرده و روی \mathbf{r} انتگرال بگیریم، می‌بینیم که واقعاً همین‌طور است:

$$\int e^{-i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = (2\pi)^3 [\mathbf{a}(\mathbf{k}_0) + \mathbf{a}^*(-\mathbf{k}_0)] \quad (۴۴-۵-۱۸)$$

یعنی $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ فقط ترکیب $\mathbf{a}(\mathbf{k}) + \mathbf{a}(-\mathbf{k})$ را مشخص می‌کند. از این نکته بزودی استفاده خواهیم کرد.

(۳)- هیچ بحثی از زمان در معادله (۴۳-۵-۱۸) دیده نمی‌شود چون ما آنرا به صورت روابط خطی بین دو مجموعه از مختصه‌ها، مثل روابط

$$x_1 = \frac{x_I + x_{II}}{2^{1/2}}$$

$$x_2 = \frac{x_I - x_{II}}{2^{1/2}}$$

تلقی می‌کنیم که در همه زمان‌ها درستند. برچسب‌های گسسته ۱ و ۲ و I و II در اینجا با برچسب‌های پیوسته \mathbf{r} و \mathbf{k} جایگزین شده‌اند.

همین‌طور $\mathbf{\Pi}$ را (قبل از اینکه قید عرضی بودن اعمال شود) به صورت زیر بسط می‌دهیم

$$\mathbf{\Pi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi ic} \int k [\mathbf{a}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \mathbf{a}^*(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}] d^3\mathbf{k} \quad (۴۵-۵-۱۸)$$

ضریب $(k/4\pi ic)$ بیرون آورده می‌شود تا کارهای بعدی ساده‌تر شوند. توجه کنید که همان تابع $\mathbf{a}(\mathbf{k})$ در اینجا ظاهر می‌شود و هیچ مغایرتی وجود ندارد چون $\mathbf{\Pi}(\mathbf{r})$ ترکیب متفاوتی را مشخص می‌کند:

واضح است که معادلات (۴۴-۵-۱۸) و (۴۵-۵-۱۸) می‌توانند برای $\mathbf{a}(\mathbf{k})$ برحسب \mathbf{A} و $\mathbf{\Pi}$ حل شوند. دو تابع برداری حقیقی $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ و $\mathbf{\Pi}(\mathbf{r})$ یک تابع برداری مختلط $\mathbf{a}(\mathbf{k})$ را مشخص می‌کنند. حال بردار $\mathbf{a}(\mathbf{k})$ را در یک \mathbf{k} معین در نظر بگیرید. می‌توانیم آنرا برحسب هر سه بردار راست هنجار بسط دهیم. به جای اینکه آنها را بردارهای یک‌ه در امتداد x ، y و z انتخاب کنیم، به شیوه زیر به صورت تابعی از \mathbf{k} (با یک چشم به قیود) انتخاب می‌کنیم:

$$\left. \begin{matrix} \varepsilon(\mathbf{k}1) \\ \varepsilon(\mathbf{k}2) \end{matrix} \right\} \quad \mathbf{k} \text{ بردارهای راست هنجار در صفحه عمود بر } \mathbf{k} \quad (۴۷-۵-۱۸)$$

$$\varepsilon(\mathbf{k}3) \quad \text{بردار یک‌ه موازی با } \mathbf{k}$$

اگر $\mathbf{a}(\mathbf{k})$ را (در هر \mathbf{k}) به صورت

$$\mathbf{a}(\mathbf{k}) = \sum_{\lambda=1}^3 (c^2/4\pi^2\omega)^{1/2} a(\mathbf{k}\lambda)\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k}\lambda) \quad (48-5-18)$$

بسط دهیم (که $\omega = kc$) و در بسط‌های مربوط به \mathbf{A} و $\mathbf{\Pi}$ قرار دهیم، خواهیم داشت

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda} \int \left(\frac{c^2}{4\pi^2\omega} \right)^{1/2} [a(\mathbf{k}\lambda)\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k}\lambda) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + a^*(\mathbf{k}\lambda)\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k}\lambda) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}] d^3\mathbf{k} \quad (الف-49-5-18)$$

$$\mathbf{\Pi}(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda} \int \frac{1}{i} \left(\frac{\omega}{64\pi^4 c^2} \right)^{1/2} [a(\mathbf{k}\lambda)\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k}\lambda) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - a^*(\mathbf{k}\lambda)\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k}\lambda) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}] d^3\mathbf{k} \quad (ب-49-5-18)$$

این معادلات مختصه‌های قدیمی را - سه مولفه حقیقی \mathbf{A} و سه مولفه حقیقی $\mathbf{\Pi}$ در هر نقطه از فضای \mathbf{r} - به سه مولفه مختلط \mathbf{a} در هر نقطه از فضای \mathbf{k} مربوط می‌کنند. چون \mathbf{A} و $\mathbf{\Pi}$ ، قبل از اعمال عرضی بودن متغیرهای کانونیک هستند، گروه پواسون‌های آنها عبارتند از:

$$\{A_i(\mathbf{r}), A_j(\mathbf{r}')\} = 0$$

$$\{\Pi_i(\mathbf{r}), \Pi_j(\mathbf{r}')\} = 0 \quad (50-5-18)$$

$$\{A_i(\mathbf{r}), \Pi_j(\mathbf{r}')\} = \delta_{ij}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

از اینها می‌توانیم (بعد از کمی کار سخت) نتیجه بگیریم که

$$\{a(\mathbf{k}\lambda), a(\mathbf{k}'\lambda')\} = 0 = \{a^*(\mathbf{k}\lambda), a^*(\mathbf{k}'\lambda')\} \quad (51-5-18)$$

$$\{a(\mathbf{k}\lambda), a^*(\mathbf{k}'\lambda')\} = -i\delta_{\lambda\lambda'}\delta^3(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$$

اینک مسئله اعمال قیود، یعنی بازیابی الکترودینامیک، را پیگیری می‌کنیم. شروط $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ و $\nabla \cdot \mathbf{\Pi} = 0$ بیان می‌کنند که [وقتی آنها را به معادلات (43-5-18) و (45-5-18) اعمال کرده و هر دو طرف را روی یک \mathbf{k} معین تصویر کنیم،]

$$\mathbf{k} \cdot [\mathbf{a}(\mathbf{k}) + \mathbf{a}^*(-\mathbf{k})] = 0$$

$$\mathbf{k} \cdot [\mathbf{a}(\mathbf{k}) - \mathbf{a}^*(-\mathbf{k})] = 0$$

که از آنها نتیجه می‌شود:

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}(\mathbf{k}) = 0 \quad (52-5-18)$$

دو معادله دیفرانسیل قیود، همان‌طور که پیش‌بینی کرده بودیم، به قید جبری (مختلط) تقلیل یافته‌اند. با اعمال آن به معادله (48-5-18) [و با استفاده از $[\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k}, 1 \text{ or } 2)] = 0$ نتیجه می‌گیریم که

$$a(\mathbf{k}3) = 0 \quad (53-5-18)$$

لذا این قید موضوع بسیار ساده‌ای را بیان می‌کند: هر $a(\mathbf{k}3) = 0$ صفر است (چون $\mathbf{a}(\mathbf{k})$ را وادار می‌کند تا در صفحه عمود بر \mathbf{k} قرار گیرد و ما آنرا قید عرضی بودن می‌نامیم). کاربرد قید عرضی بودن در فضای تکانه بسیار ساده است: بعد از این اجازه می‌دهیم تا λ فقط مقادیر ۱ و ۲ را اختیار کند. همچنین قرار دادن $a(\mathbf{k}3) = 0$ گروه پواسون بین بقیه a ها را تغییر نمی‌دهد. معادله (49-5-18) برای \mathbf{A} و $\mathbf{\Pi}$ با $\lambda = 3$

اینگونه محدود شده کماکان معتبر می ماند. اما اکنون تضمین می شود که این میدانها شروط عرضی بودن را بر آورده کنند.

اکنون به ویژگی خوب دیگری از این مختصه ها می پردازیم. اگر \mathcal{H} را بر حسب این مختصه ها بنویسیم،

$$\mathcal{H} = \sum_{\lambda=1}^2 \int \omega [a^*(\mathbf{k}\lambda)a(\mathbf{k}\lambda)] d^3\mathbf{k} \quad (54-5-18)$$

لذا $a(\mathbf{k}\lambda)$ ها مختصه های بهنجار هستند از این حیث که \mathcal{H} شامل هیچ جمله ضربداری بین a های دارای بر حسب های متفاوت نیست. اگر بخواهیم به نوسانگرهای آشنا برسیم، متغیرهای حقیقی

$$q(\mathbf{k}\lambda) = \frac{1}{(2\omega)^{1/2}} [a(\mathbf{k}\lambda) + a^*(\mathbf{k}\lambda)] \quad (55-5-18)$$

$$p(\mathbf{k}\lambda) = \frac{1}{i} \left(\frac{\omega}{2}\right)^{1/2} [a(\mathbf{k}\lambda) - a^*(\mathbf{k}\lambda)]$$

را تعریف می کنیم که روابط گروه پواسون کانونیک را بر آورده می کنند [می توانید با ترکیب معادلات (51-5-18) و (55-5-18) این را ثابت کنید]. بر حسب این متغیرها،

$$\mathcal{H} = \sum_{\lambda} \int \left[\frac{1}{2} p^2(\mathbf{k}\lambda) + \frac{\omega^2}{2} q^2(\mathbf{k}\lambda) \right] d^3\mathbf{k} \quad (56-5-18)$$

بنابراین می بینیم که میدان تابشی با مجموعه ای از نوسانگرهای غیر جفت شده هم ارز است: یک نوسانگر در هر \mathbf{k} و λ ($\lambda = 1, 2$) با فرکانس $\omega = kc$ وجود دارد. پس کوانتش میدان تابشی به کوانتش نوسانگر، که قبلاً در فصل ۷ انجام شده است، تقلیل می یابد.

از آنجا که $q(\mathbf{k}\lambda)$ و $p(\mathbf{k}\lambda)$ مختصه های مستقل کانونیک توصیفگر میدان هستند، می توانیم میدان را، با ارتقاء دادن اینها به عملگرهای Q و P پیروی کننده از قواعد جابه جایی کانونیک، کوانتیده کنیم:

$$[Q(\mathbf{k}\lambda), P(\mathbf{k}'\lambda')] = i\hbar \{q, p\} = i\hbar \delta_{\lambda\lambda'} \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$$

که همه جابه جاگرهای دیگر صفر می شوند. مثل حالت یک نوسانگر منفرد، بهتر است با ترکیب

$$a(\mathbf{k}\lambda) = \left(\frac{\omega}{2\hbar}\right)^{1/2} Q + i \left(\frac{1}{2\omega\hbar}\right)^{1/2} P \quad \text{و الحاقی آن،}$$

$$a^\dagger(\mathbf{k}\lambda) = \left(\frac{\omega}{2\hbar}\right)^{1/2} Q - i \left(\frac{1}{2\omega\hbar}\right)^{1/2} P \quad (57-5-18)$$

۱- یک نکته کوچک: a و a^\dagger فوق عملگرهای متناظر با متغیرهای کلاسیکی $a/\hbar^{1/2}$ و $a^\dagger/\hbar^{1/2}$ هستند. برای دیدن این مطلب، معادله (58-5-18) را معکوس کنید. تمام چیزی که بعد از این لازم داریم معادلات (57-5-18) و (59-5-18) هستند.

کار کنیم که از

$$[a(\mathbf{k}\lambda), a^\dagger(\mathbf{k}'\lambda')] = \delta_{\lambda\lambda'} \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (58-5-18)$$

پیروی می کنند و بر حسب آنها، \mathbf{A} و $\mathbf{\Pi}$ ، که اکنون عملگرهای هریمیتی هستند، با روابط زیر مشخص می شوند:

$$\mathbf{A} = \sum_{\lambda} \int \left(\frac{\hbar c^2}{4\pi^2 \omega} \right)^{1/2} [a(\mathbf{k}\lambda) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k}\lambda) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + a^\dagger(\mathbf{k}\lambda) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k}\lambda) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}] d^3\mathbf{k} \quad (59-5-18 \text{ الف})$$

$$\mathbf{\Pi} = \sum_{\lambda} \int \frac{1}{i} \left(\frac{\hbar \omega}{64\pi^4 c^2} \right)^{1/2} [a(\mathbf{k}\lambda) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k}\lambda) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - a^\dagger(\mathbf{k}\lambda) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k}\lambda) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}] d^3\mathbf{k} \quad (59-5-18 \text{ ب})$$

برای به دست آوردن H ابتدا \mathcal{H} را مقارن کرده، یعنی $a^+ a \rightarrow \frac{1}{2}(a^+ a + a a^+)$ ، جانشینی عملگر انجام داده و از معادله (58-5-18) استفاده می کنیم تا به

$$H = \sum_{\lambda} \int [a^\dagger(\mathbf{k}\lambda) a(\mathbf{k}\lambda) + \frac{1}{2}] \hbar \omega d^3\mathbf{k} \quad (60-5-18)$$

برسیم.

اینک ویژه حالت های H را در نظر می گیریم. در حالت پایه میدان $|0\rangle$ ، همه نوسانگرها در حالت های پایه مربوطه خود هستند. لذا هر عملگر پایین برنده، $|0\rangle$ را نابود خواهد کرد:

$$a(\mathbf{k}\lambda)|0\rangle = 0 \quad \text{for all } \mathbf{k}, \lambda \quad (61-5-18)$$

انرژی این حالت، موسوم به حالت خلاء، یا فقط خلاء، برابر است با

$$E_0 = \sum_{\lambda} \int \frac{\hbar \omega}{2} d^3\mathbf{k} \quad (62-5-18)$$

که جمع روی انرژی های نقطه صفر نوسانگر هاست. این انرژی ثابت E_0 هیچ پیامد فیزیکی ندارد. اکنون نتایج ادعا شده در گذشته را ثابت می کنیم. در این حالت پایه،

$$\langle 0|\mathbf{A}|0\rangle \sim \langle 0|(a + a^\dagger)|0\rangle = 0 \quad (63-5-18)$$

$$\langle 0|\mathbf{\Pi}|0\rangle \sim \langle 0|(a - a^\dagger)|0\rangle = 0$$

در معادله بالا، تعداد زیادی از ضرایب بی اثر را حذف کرده ایم؛ فقط این ایده اصلی، که \mathbf{A} و $\mathbf{\Pi}$ ترکیبات خطی از عملگرهای خلق و نابودی هستند و لذا هیچ عنصر ماتریسی قطری در $|0\rangle$ ندارند، تأکید شده است. از سوی دیگر، به همان دلیلی که برای یک نوسانگر منفرد، $\langle X^2 \rangle \neq 0$ و $\langle P^2 \rangle \neq 0$ است، داریم

۱- ما از نمادهای یکسانی برای متغیرهای کلاسیکی و کوانتومی استفاده می کنیم تا از قرار داد بسیار مرسوم در این مورد استفاده کرده باشیم. منظور مطلب باید از متن مشخص شود.

$$\langle 0 | |A|^2 | 0 \rangle \neq 0 \quad (۶۴-۵-۱۸)$$

$$\langle 0 | |\Pi|^2 | 0 \rangle \neq 0$$

اگر روی $|0\rangle$ یکی از عملگرهای بالا برنده را اثر دهیم داریم

$$a^\dagger(\mathbf{k}\lambda)|0\rangle = |\mathbf{k}\lambda\rangle \quad (۶۵-۵-۱۸)$$

که در آن برچسب‌های \mathbf{k} و λ بیان می‌کنند که نوسانگر حامل آن برچسب، به اولین تراز برانگیخته خود رفته است. این حالت دارای انرژی $k\omega = \hbar kc$ بالای E_0 است که می‌تواند با اثر دادن H روی آن و با استفاده از معادلات (۱۸-۵-۵۸) و (۱۸-۵-۶۱) ثابت شود. در مورد تکانه چطور؟ هر کتاب استاندارد در رابطه با الکترودینامیک به ما بیان می‌کند که تکانه میدان در فیزیک کلاسیک با

$$\mathcal{P} = \frac{1}{4\pi c} \int (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) d^3\mathbf{r} \quad (۶۶-۵-۱۸)$$

مشخص می‌شود. اگر عملگر کوانتومی متناظر را محاسبه کنیم خواهیم دید که با معادله زیر مشخص می‌شود:

$$\mathbf{P} = \sum_{\lambda} \int [a^\dagger(\mathbf{k}\lambda)a(\mathbf{k}\lambda)] \hbar \mathbf{k} d^3\mathbf{k} \quad (۶۷-۵-۱۸)$$

با بررسی یا عمل صریح، روشن می‌شود که

$$\mathbf{P}|\mathbf{k}\lambda\rangle = \hbar \mathbf{k}|\mathbf{k}\lambda\rangle \quad (۶۸-۵-۱۸)$$

بنابراین حالت $|\mathbf{k}\lambda\rangle$ دارای تکانه $\hbar \mathbf{k}$ است.

اگر $a^\dagger(\mathbf{k}\lambda)$ را روی n بار به کار ببریم حالتی با انرژی $n\hbar\omega$ و تکانه $n\hbar \mathbf{k}$ خلق خواهیم کرد. این موضوع به ما اجازه می‌دهد تا اثر $a^\dagger(\mathbf{k}\lambda)$ را به عنوان خلق ذرات با تکانه‌های $\hbar \mathbf{k}$ و انرژی $\hbar\omega$ تلقی کنیم. این ذرات، موسوم به فوتون، بدون جرم هستند چون

$$m^2 c^4 = E^2 - c^2 p^2 = (\hbar\omega)^2 - (\hbar kc)^2 = 0 \quad (۶۹-۵-۱۸)$$

برحسب فوتون‌ها، تناظر زیر را داریم:

$$\{ \text{تعداد فوتون هادر هر } \mathbf{k} \text{ و } \lambda \} \leftrightarrow \{ \text{حالت کوانتومی هر نوسانگر} \} \leftrightarrow \{ \text{حالت کوانتومی میدان} \}$$

برای استفاده بیشتر، تابع موج فوتون را در حالت (\mathbf{k}, λ) به دست می‌آوریم. با بهنجارش حالت‌ها شروع می‌کنیم. با ترکیب معادلات (۱۸-۵-۶۵) و (۱۸-۵-۵۸) (و فرض $\langle 0|0\rangle = 1$) به

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}'\lambda' | \mathbf{k}\lambda \rangle &= \langle 0 | a(\mathbf{k}'\lambda') a^\dagger(\mathbf{k}\lambda) | 0 \rangle \\ &= \langle 0 | a^\dagger a + \delta_{\lambda\lambda'} \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}') | 0 \rangle \\ &= \delta_{\lambda\lambda'} \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \end{aligned} \quad (۷۰-۵-۱۸)$$

می‌رسیم. ضرب $\delta^3(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$ و اینکه $\hbar\mathbf{k}$ تکانه حالت است بیان می‌کنند که تابع موج متناظر با $|\mathbf{k}, \lambda\rangle$ عبارتست از

$$\psi \sim \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (18-5-71)$$

به جای علامت \rightarrow از علامت \sim استفاده می‌کنیم چون λ هنوز در تابع موج وارد نشده است. از ضرب $\delta_{\lambda\lambda'}$ و شیوه‌ای که λ برای اولین بار در این تصویر وارد شد نتیجه می‌شود که λ بردار قطبش را نشان می‌دهد:

$$|\mathbf{k}\lambda\rangle \rightarrow \frac{\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k}\lambda) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}} \quad (18-5-72)$$

ممکن است از این بابت ناراحت باشید که برخلاف عامل $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}/(2\pi)^{3/2}$ ، که از تحلیل تکانه حالت به دست آمد [یعنی از تحلیل معادله (18-5-68)]، $\boldsymbol{\varepsilon}$ از خارج به طور دستی وارد مسئله شد. $\boldsymbol{\varepsilon}$ هم می‌تواند با شروع از ملاحظات تکانه زاویه‌ای استنتاج شود ولی در اینجا این کار را انجام نمی‌دهیم.

از آنجا که تابع موج فوتون یک اسکالر نیست، پس فوتون دارای اسپین است. به علاوه چون $\boldsymbol{\varepsilon}$ موجودی سه مولفه‌ای است، اسپین، یک است. اما در خواست اینکه $\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\varepsilon} = 0$ باشد، یک قید روی جهت‌گیری‌های ممکن اسپین فوتون قرار می‌دهد. برای مثال فوتونی را در نظر بگیرید که در امتداد محور z حرکت می‌کند. شرط $\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\varepsilon} = 0$ بیان می‌کند که $\boldsymbol{\varepsilon}$ نمی‌تواند مولفه‌ای در امتداد محور z داشته باشد. معنی این چیست؟ مولفه $\boldsymbol{\varepsilon}$ موازی با محور z با این مشخص می‌شود که این مولفه تحت چرخش حول محور z ناورداست یعنی مثل یک حالت $S_z = 0$ تبدیل می‌یابد. لذا نتیجه می‌گیریم که فوتون می‌تواند فقط $S_z = \pm\hbar$ داشته باشد نه $S_z = 0$. به طور کلی‌تر، اسپین فوتون فقط می‌تواند مقادیر $\pm\hbar$ را موازی با تکانه‌اش اتخاذ کند. مولفه اسپین موازی با تکانه پیمایش^۱ نامیده می‌شود. شرط عرضی بودن پیمایش را مقید می‌کند تا $\pm\hbar$ باشد و از صفر شدن آن جلوگیری می‌کند.^۲

قبل از پرداختن به مسئله فرو افت خود به خود، آخرین ویژگی فوتون‌ها را بررسی می‌کنیم. حالتی را با یک فوتون در $(\mathbf{k}\lambda)$ و دیگری در $(\mathbf{k}'\lambda')$ در نظر بگیرید:

$$|\mathbf{k}\lambda, \mathbf{k}'\lambda'\rangle = a^\dagger(\mathbf{k}\lambda)a^\dagger(\mathbf{k}'\lambda')|0\rangle \quad (18-5-73)$$

اگر حالت‌های فوتونی را عوض کنیم به حالت زیر می‌رسیم:

$$|\mathbf{k}'\lambda', \mathbf{k}\lambda\rangle = a^\dagger(\mathbf{k}'\lambda')a^\dagger(\mathbf{k}\lambda)|0\rangle \quad (18-5-74)$$

1- Helicity.

۲- گراوتون، که بدون جرم است و اسپین ۲ دارد، هم فقط دو حالت پیمایش دارد، $\pm 2\hbar$. این ویژگی عمومی بوزون‌های بدون جرم و دارای اسپین است.

اما چون $[a^\dagger, a^\dagger] = 0$ است دو بردار حالت همان طور که باید برای بوزون های یکسان بر هم منطبق باشند بر هم منطبق هستند.

فروفت خود به خود

فروفت خود به خود اتم هیدروژن از $|2lm\rangle$ به $|100\rangle$ را در نظر بگیرید. هامیلتونی مختل کننده هنوز هم با قاعده جانشینی زیر مشخص می شود:

$$\mathcal{H}^1 = \frac{e}{mc} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} \rightarrow H^1 = \frac{e}{mc} \mathbf{A} \cdot \mathbf{P} \quad (۷۵-۵-۱۸)$$

اما \mathbf{A} در H^1 عملگر معادله (۱۸-۵-۵۹-الف) است. حالت اولیه سیستم (اتم + میدان) عبارت است از:

$$|i^0\rangle = |2lm\rangle \otimes |0\rangle \quad (۷۶-۵-۱۸)$$

و حالت نهایی،

$$|f^0\rangle = |100\rangle \otimes |\mathbf{k}\lambda\rangle \quad (۷۷-۵-۱۸)$$

اختلال H^1 مستقل از زمان است (\mathbf{A} عملگر در تصویر شرودینگر است) و

$$E_f^0 - E_i^0 = E_{100} + \hbar\omega - E_{2lm} \quad (۷۸-۵-۱۸)$$

از قاعده طلایی فرمی داریم^۱

$$R_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f^0 | \frac{e}{mc} \mathbf{A} \cdot \mathbf{P} | i^0 \rangle \right|^2 \delta(E_{100} + \hbar\omega - E_{2lm}) \quad (۷۹-۵-۱۸)$$

ملاحظه کنید که

$$\langle f^0 | \mathbf{A} \cdot \mathbf{P} | i^0 \rangle = \langle 100 | \langle \mathbf{k}\lambda | \mathbf{A} | 0 \rangle \cdot \mathbf{P} | 2lm \rangle \quad (۸۰-۵-۱۸)$$

اکنون \mathbf{A} یک جمع روی a ها و a^\dagger ها با برجسب های مختلف است. تنها عملگر مناسب از آنها $a^\dagger(\mathbf{k}\lambda)$ است که $|0\rangle$ را به $|\mathbf{k}\lambda\rangle$ بالا می برد. بنابراین با در نظر گرفتن عامل هایی که همراه $a^\dagger(\mathbf{k}\lambda)$ هستند،

$$\langle \mathbf{k}\lambda | \mathbf{A} | 0 \rangle = \left(\frac{\hbar c^2}{4\pi^2 \omega} \right)^{1/2} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k}\lambda) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (۸۱-۵-۱۸)$$

به طوری که

۱- در اثر فوتو الکتریک با میدان به عنوان یک اختلال وابسته به زمان خارجی رفتار می شود که روی اتم اثر می کند و $\hbar\omega$ در تابع دلتا این وابستگی زمانی را منعکس می کند. در این مورد میدان قسمتی از سیستم است و $\hbar\omega$ تغییر انرژی آن را نشان می دهد.

$$\langle f^0 | \mathbf{A} \cdot \mathbf{P} | i^0 \rangle = \left(\frac{\hbar c^2}{4\pi^2 \omega} \right)^{1/2} \int \psi_{100}^* e^{ik \cdot \mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot (-i\hbar \nabla) \psi_{2lm} d^3 \mathbf{r}$$

در تقریب دو قطبی و با استفاده از معادله (۱۸-۵-۱۷) این رابطه به شکل زیر در می آید:

$$\langle f^0 | \mathbf{A} \cdot \mathbf{P} | i^0 \rangle = \left(\frac{\hbar c^2}{4\pi^2 \omega} \right)^{1/2} (im\omega) \int \psi_{100}^* \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{r} \psi_{2lm} d^3 \mathbf{r} \quad (۱۸-۵-۱۸)$$

از ملاحظات پاریته واضح است که فقط $l = 1$ مناسب است. با نوشتن $\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{r}$ در پایه کروی (تمرین ۱۵-۳-۲)،

$$\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{r} = \sum_{-1}^{+1} (-1)^q \varepsilon_1^q r_1^{-q} \quad (۱۸-۵-۱۸)$$

$$= -\varepsilon_1^1 r_1^{-1} + \varepsilon_1^0 r_1^0 - \varepsilon_1^{-1} r_1^{+1}$$

که در آن

$$\varepsilon_1^{\pm 1} = \mp \frac{\varepsilon_x \pm i\varepsilon_y}{2^{1/2}}, \quad \varepsilon_1^0 = \varepsilon_z \quad (۱۸-۵-۱۸)$$

و از معادله (۱۲-۵-۴۲)،

$$r_1^{\pm 1} = \left(\frac{4\pi}{3} \right)^{1/2} r Y_1^{\pm 1}, \quad r_1^0 = \left(\frac{4\pi}{3} \right)^{1/2} r Y_1^0 \quad (۱۸-۵-۱۸)$$

می‌رسیم به

$$\begin{aligned} \int \psi_{100}^* \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{r} \psi_{2lm} d^3 \mathbf{r} &= \left(\frac{4\pi}{3} \right)^{1/2} \int R_{10} R_{2l} r^2 dr \\ &\times \left[\int Y_0^0 (-\varepsilon_1^1 Y_1^{-1} + \varepsilon_1^0 Y_1^0 - \varepsilon_1^{-1} Y_1^{+1}) Y_1^m d\Omega \right] \quad (۱۸-۵-۱۸) \\ &= \left(\frac{3}{2} \right)^{1/2} \frac{2^8}{3^5} \frac{a_0}{3^{1/2}} (+\varepsilon_1^1 \delta_{m,+1} + \varepsilon_1^0 \delta_{m,0} + \varepsilon_1^{-1} \delta_{m,-1}) \end{aligned}$$

محاسبه انتگرال‌ها (مثل بسیاری از مراحل در این بحث بسیار سریع) به عنوان تمرین واگذار می‌شود. مربع مدول کمیت بالا برابر است با

$$\frac{3}{2} \frac{2^{16}}{3^{10}} \frac{a_0^2}{3} [|\varepsilon_1^1|^2 \delta_{m,-1} + |\varepsilon_1^0|^2 \delta_{m,0} + |\varepsilon_1^{-1}|^2 \delta_{m,1}]$$

اگر روی سه m اولیه (یعنی روی مجموعه‌ای از چنین اتم‌هایی که نسبت به m به طور تصادفی توزیع شده‌اند) متوسط بگیریم این عبارت تقلیل می‌یابد به

۱- متأسفانه مجبور هستیم از نماد \mathbf{m} برای جرم و همین طور مولفه Z تکانه زاویه‌ای استفاده کنیم. منظور از \mathbf{m} باید از متن مشخص شود.

$$\frac{3}{2} \frac{2^{16}}{3^{10}} \frac{a_0^2}{3} \frac{1}{3} (\epsilon_x^2 + \epsilon_y^2 + \epsilon_z^2) = \frac{2^{15} a_0^2}{3^{11}} \quad (۱۸-۵-۸۷)$$

توجه کنید که نتیجه مستقل از جهت ϵ است. این انتظار می‌رود چون اتم بعد از متوسط گیری زاویه‌ای (m) هیچ احساسی از جهت ندارد. آهنگ گذار عبارت است از

$$R_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{e}{mc} \right)^2 \frac{\hbar c^2}{4\pi^2 \omega} m^2 \omega^2 \frac{2^{15} a_0^2}{3^{11}} \delta(E_{100} + \hbar\omega - E_{2lm}) \quad (۱۸-۵-۸۸)$$

که در آن i به این معنی است که حالت اولیه روی همه جهت گیری‌ها متوسط گیری شده است. اگر روی همه تکانه‌های فوتونی ممکن و دو قطبش ممکن در هر تکانه جمع بزیم با استفاده از

$$\int \delta(E_{100} + \hbar\omega - E_{2lm}) k^2 dk d\Omega = \frac{4\pi k^2}{\hbar c}$$

که در آن

$$k = \frac{\omega}{c} = \frac{E_{2lm} - E_{100}}{\hbar c} = \frac{e^2}{2a_0 \hbar c} \left(1 - \frac{1}{4} \right) = \frac{3e^2}{8a_0 \hbar c}$$

است، به آهنگ فروافت کل زیر می‌رسیم:

$$R_{i \rightarrow \text{all}} = \left(\frac{2}{3} \right)^8 \alpha^5 \frac{mc^2}{\hbar} \quad (۱۸-۵-۸۹)$$

به خاطر بیاورید که

$$\frac{mc^2}{\hbar} = \frac{mc^2 c}{\hbar c} \simeq \frac{0.5 \times 10^6 \text{ eV } c}{2000 \text{ eV } \text{Å}} \\ \simeq 0.25 \times 10^3 \text{ Å}^{-1} c$$

حال $c = 3 \times 10^{10} \text{ cm/sec} = 3 \times 10^{18} \text{ Å/sec}$ بنابراین

$$\frac{mc^2}{\hbar} \simeq 10^{21} \text{ sec}^{-1}$$

و

$$R_{i \rightarrow \text{all}} \simeq (0.67)^8 \left(\frac{1}{137} \right)^5 10^{21} \text{ seconds}^{-1} \\ \simeq 0.6 \times 10^9 \text{ seconds}^{-1}$$

طول عمر میانگین متناظر برابر است با

$$\tau = 1/R \simeq 1.6 \times 10^{-9} \text{ seconds} \quad (۱۸-۵-۹۰)$$

که در توافق خوبی با آزمایش است.

حتی اگر میدان‌ها ماکروسکوپی باشند می‌توانیم از نظریه کاملاً کوانتومی استفاده کنیم هر چند که بحث نیمه کلاسیکی واقعاً نتایج یکسانی به دست خواهد داد. رابطه دو رویکرد را می‌توان چنین بیان کرد: فرایندی را در نظر بگیرید که در آن یک اتم از حالت i_α به حالت f_α رفته و میدان از حالت با n فوتون در (\mathbf{k}, λ) به $(n+1)$ فوتون در (\mathbf{k}, λ) می‌رود. نتیجه‌ای که در بحث کوانتومی این فرایند، که شامل گسیل یک فوتون است، به دست می‌آوریم با محاسبه نیمه کلاسیکی، در صورتی که از یک میدان کلاسیکی \mathbf{A} استفاده کنیم که چگالی انرژی آن^۲ با چگالی انرژی $(n+1)$ فوتون در (\mathbf{k}, λ) یکی باشد، در توافق خواهد بود. عدد $n+1$ ، در n کوچک مهم است و راه حل فروافت خودبه‌خود را در خود دارد. اگر فرایندی را در نظر بگیریم که در آن یک فوتون جذب می‌شود به طوری که $n \rightarrow n-1$ می‌شود، روش نیمه کلاسیکی در صورتی جواب صحیح به دست می‌دهد که از یک میدان کلاسیکی \mathbf{A} استفاده کنیم که چگالی انرژی، چگالی انرژی n فوتون باشد. درک ظهور عامل‌های n و $(n+1)$ به زبان نوسانگر ساده است. وقتی یک فوتون خلق می‌شود، دامنه به صورت

$$\langle n+1|a^\dagger|n\rangle = (n+1)^{1/2}\langle n+1|n+1\rangle \quad (18-5-91)$$

زیاد می‌شود که عامل $(n+1)$ را در احتمال به دست می‌دهد در حالی که اگر نابود شود،

$$\langle n-1|a|n\rangle = n^{1/2}\langle n-1|n-1\rangle \quad (18-5-92)$$

که عامل n را در احتمال به دست می‌دهد.

قرار داد این است که احتمال گسیل متناسب با $n+1$ را به احتمال گسیل القایی، متناسب با n ، و احتمال گسیل خود به خود، متناسب با ۱، تفکیک می‌کنند. گسیل القایی به وسیله فوتون‌های موجود از قبل القاء می‌شود و گسیل خود به خود، خود به خود است.

عامل $(n+1)$ در احتمال گسیل در حالت کلی یک ویژگی از بوزون هاست: احتمال اینکه سیستمی که بوزونی را به حالتی که قبلاً به وسیله n بوزون اشغال شده است (از یک نوع)، گسیل کند، $(n+1)$ مرتبه بزرگتر از احتمال گسیل به آن حالت، در صورت اشغال نشده بودن آن در ابتدا، است. این اصل در لیزر استفاده می‌شود که شامل یک کاواک پر از اتم‌های واقع در یک حالت برانگیخته و آماده گسیل فوتون‌هایی با فرکانس ثابت اما جهت‌های دلخواه برای \mathbf{k} و λ است. هندسه کاواک طوری است که فوتون‌هایی با \mathbf{k} و λ معین درون آن گیر می‌افتند. در نتیجه، این فوتون‌های گیر افتاده موقتاً برگشته و بیشتر و بیشتر اتم‌ها را تحت تأثیر قرار می‌دهند تا به مد (\mathbf{k}, λ) گسیل کنند. این، دلیل نامیدن لیزر به تقویت نور با گسیل برانگیخته شده تابش است (این اصل کلی، در شکل تصحیح یافته، در تلویزیون هم مورد استفاده قرار می‌گیرد).

۱- کاری به مدهای دیگر، که ناظر هستند، نداریم.

۲- طول موج و قطبش البته با طول موج و قطبش فوتون‌ها یکی هستند.

۱-۱۹- مقدمه

یکی از بهترین شیوه‌های درک ساختار ذرات و نیروهای بین آنها پراکنده کردن آنها از یکدیگر است. این به ویژه در سطح کوانتومی، که در آن به سیستم‌ها نمی‌توان از حیث واقعی و مفهوم اصلی نگاه کرد و می‌بایست با ابزارهای غیر مستقیم آنها را مورد تفحص قرار داد، درست است. فرایند پراکندگی، اطلاعات مربوط به پرتابه، هدف و نیروهای بین آنها را به ما می‌دهد. روش طبیعی پیشرفت، در نظر گرفتن مواردی است که در آنها دو مورد از سه مورد را می‌دانیم و به تحقیق در مورد سوم می‌پردازیم. برای مثال از آزمایشات اخیر در مرکز شتابدهنده خطی استنفورد را در نظر بگیرید که در آن فوتون‌های پراکندگی برای بمباران نوترون‌های ساکن به کار برده شدند. ساختار فوتون و جفت شدگی آن به ماده به خوبی درک می‌شود - فوتون با تقریب بسیار خوبی یک ذره نقطه‌ای است و به بار الکتریکی به شیوه‌ای که با جزئیات مطالعه کرده‌ایم جفت می‌شود؛ بنابراین به عنوان یک کاوشگر^۱ خوب نوترون به کار می‌رود. برای نمونه، اینکه نوترون، که از نظر الکتریکی خنثی است، با فوتون بر همکنش می‌کند به ما بیان می‌کند که نوترون از اجزاء باردار ساخته شده است (که مجموع بار آنها صفر می‌شود). این آزمایش‌های پراکندگی همین‌طور روشن کرده‌اند که اجزاء نوترون دارای اسپین $\frac{1}{2}$ و بارهای کسری $(\frac{2}{3}e, -\frac{1}{3}e)$ هستند تصویری که از استدلال مستقل دیگری به دست آمده است. به علاوه نشان داده شده است که برهم کنش بین اجزاء (موسوم به کوارک‌ها) با نزدیک شدن آنها به هم بسیار ضعیف می‌شود. این اطلاعات به ما اجازه می‌دهند تا از مدل‌های بی‌شمار ممکن برای نیروی بین کوارک‌ها مدلی را انتخاب کنیم که احتمال موفقیت آن بسیار زیاد بوده و به کرومودینامیک (QCD) معروف است، موضوعی که امروزه شدیداً به وسیله بسیاری از فیزیکدان‌های ذرات دنبال می‌شود.

نظریه پراکندگی موضوعی بسیار وسیع است و هدف این فصل چشاندن طعم این مفهوم اساسی به شماست. برای اطلاعات بیشتر باید به کتب مربوط به این موضوع مراجعه کنید.^۲

یک رویداد پراکندگی عمومی به شکل زیر است

$$a(\alpha) + b(\beta) + \dots \rightarrow f(\gamma) + g(\delta) + \dots$$

1-Probe.

۲- برای مثال کتاب J. R. Taylor, Scattering Theory, Wiley, New York (1971) را ببینید. جزئیات حذف شده در اینجا به خاطر در مضيقه بودن، می‌توانند در آنجا یافت شوند.

که $\{a, b, \dots\}$ نام‌های ذرات و $\{\alpha, \beta, \gamma, \dots\}$ متغیرهای سینماتیکی مشخص کننده حالت‌های آنها نظیر تکانه، اسپین و غیره هستند. ما فقط با ذرات غیر نسیتی و پراکندگی کشسان ذرات بدون اسپین بی‌ساختار سر و کار داریم.

در سه بخش بعدی به فرمالیزی می‌پردازیم که پراکندگی یک ذره منفرد را از پتانسیل $V(\mathbf{r})$ توصیف می‌کند. این فرمالیزم یک ذره را توصیف می‌کند که با هدفی بی‌حرکت، که فقط نقشش فراهم کردن پتانسیل است، برخورد می‌کند (این تصویر تقریب خوبی برای آن فرایندهایی است که یک ذره سبک با ذره‌ای بسیار سنگین برخورد می‌کند، مثل یک ذره α که با یک هسته سنگین برخورد می‌کند). در بخش ۱۹-۶ می‌بینیم که این فرمالیزم چطور با تعبیر درست برخوردهای دو - ذره‌ای را در چارچوب مرکز جرم توصیف می‌کند. در آن بخش همچنین خواهید دید که چطور توصیف فرایند پراکندگی در چارچوب مرکز جرم می‌تواند به چارچوب دیگر، موسوم به چارچوب آزمایشگاه، که در آن هدف از ابتدا در حال سکون است، منتقل شود. مهم است بدانید که چطور از یک چارچوب به چارچوب دیگر می‌رویم چون محاسبات نظری در چارچوب مرکز جرم بسیار راحت‌تر انجام می‌شوند در حالی که اکثر آزمایشات در چارچوب آزمایشگاه انجام می‌شوند.

۱۹-۲- مروری بر پراکندگی یک - بعدی و کلیات

اگر چه بحث ما در اینجا پراکندگی در سه بعد است، با یادآوری پراکندگی یک بعدی شروع می‌کنیم چون بسیاری از ویژگی‌های عمومی آن با نظیر سه بعدی‌اش مشترک است. سوال عملی که در اینجا مطرح می‌شود عبارتست از:

اگر باریکه‌ای از ذرات تقریباً تک انرژی با تکانه‌های میانگین $\langle P \rangle = \hbar k_0$ از دور دست سمت چپ ($x \rightarrow -\infty$) روی پتانسیل $V(x)$ ، که وقتی $|x| \rightarrow \infty$ میل می‌کند به صفر میل می‌کند، فرود بیایند، چه کسری از آنها، T ، عبور کرده و چه کسری، R ، بازتاب می‌کند؟^۱ از قبل معلوم نیست که سوال فوق بتواند پاسخ داده شود، چون تکانه میانگین، حالت‌های کوانتومی ذرات ورودی را مشخص نمی‌کند. اما معلوم می‌شود که اگر تک تک توابع موج فضای تکانه در $\hbar k_0$ خیلی تیز باشند، احتمالات بازتاب و عبور فقط به k_0 بستگی دارند، نه به جزئیات شکل توابع موج. بنابراین می‌توانیم $R(k_0)$ و $T(k_0)$ را محاسبه کنیم که برای هر ذره باریکه به کار می‌روند. بعضی از جزئیات را یادآوری می‌کنیم.

$$(۱) - \text{با یک بسته موج شروع می‌کنیم مثلاً یک گوسین با } \langle P \rangle = \hbar k_0 \text{ و } \langle X \rangle \rightarrow -\infty.$$

$$(۲) - \text{این بسته را برحسب ویژه توابع } \psi_k \text{ هامیلتونی } H = T + V \text{ با ضرایب } a(k) \text{ بسط می‌دهیم.}$$

توابع ψ_k دارای ویژگی‌های زیرند:

۱- در حالت کلی، ذره می‌تواند از دور دست راست هم بیاید. همین‌طور لازم نیست $V(x)$ در هر دو طرف به صفر میل کند بلکه می‌تواند هنگام میل $x \rightarrow \pm\infty$ به ثابت‌های V_+ و V_- میل کند. برای سادگی فرض می‌کنیم $V_+ = V_- = 0$ است. همین‌طور فرض می‌کنیم که هنگام میل $|x| \rightarrow \infty$ ، $|xV(x)| \rightarrow 0$ ، میل می‌کند به طوری که ذره به‌طور مجانبی آزاد است ($\psi \sim e^{\pm ikx}$).

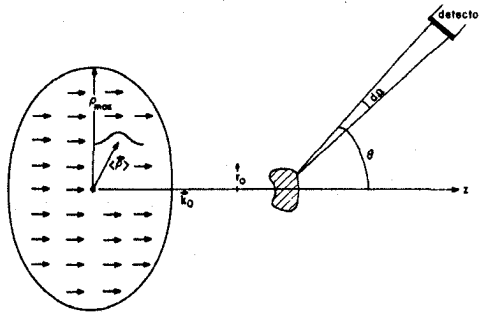
$$\begin{aligned} \psi_k &\xrightarrow{x \rightarrow -\infty} A e^{-ikx} + B e^{ikx} \\ &\xrightarrow{x \rightarrow \infty} C e^{ikx} \end{aligned} \quad (1-2-19)$$

به عبارتی دیگر، شکل مجانبی ψ_k شامل یک موج فرودی $A e^{ikx}$ و یک موج بازتاب شده $B e^{-ikx}$ هنگام میل $x \rightarrow -\infty$ و فقط یک موج عبوری $C e^{ikx}$ هنگام میل $x \rightarrow +\infty$ است. اگر چه کلی ترین جواب دارای قسمت $D e^{ikx}$ هنگام میل $x \rightarrow +\infty$ هم هست ولی به خاطر فیزیک مسئله $D = 0$ قرار می دهیم: موج فرودی $A e^{ikx}$ وقتی $x \rightarrow \infty$ میل می کند فقط می تواند یک موج راست رونده تولید کند.

(۳) - با الحاق کردن وابستگی زمانی $e^{-iEt/\hbar}$ به ضرایب بسط $a(k)$ ، که $E = \hbar^2 k^2 / 2\mu$ است، بسته موج را در زمان منتشر می کنیم و جواب به دست آمده را در $t \rightarrow \infty$ بررسی کرده و بسته های بازتاب شده و عبوری را تعیین می کنیم. از نرم اینها به ترتیب به T و R می رسم.

(۴) - در این مرحله می بینیم که اگر بسته فرودی در فضای تکانه در $\hbar k_0$ خیلی تیز باشد، T و R فقط به k_0 بستگی دارند نه به جزئیات شکل تابع موج. لذا پاسخ سوال مطرح شده در ابتدا این است که کسر $R(k_0)$ از ذرات فرودی بازتاب کرده و کسر $T(k_0)$ عبور خواهند کرد.

(۵) - با انجام کل این کار سخت، در پایان می بینیم که همین نتیجه می توانست با در نظر گرفتن فقط یک ویژه تابع ψ_{k_0} و محاسبه نسبت های چگالی های جریان عبوری و بازتاب شده به چگالی جریان فرودی به دست آید.



شکل ۱۹-۱: توصیفی طرح وار از پراکندگی: ذرات فرودی که با فلش هایی نشان داده شده اند، به وسیله بسته موج هایی (که فقط یکی از آنها نشان داده شده است) با تکانه میانگین $\langle P \rangle = \langle \hbar k_0 \rangle$ و پارامتر برخورد میانگین $\langle \rho \rangle$ ، توزیع شده به صورت یکنواخت در صفحه ρ تا $\rho_{max} \gg r_0$ ، برد پتانسیل، توصیف می شوند. ناحیه سایه خورده نزدیک مبدا حوزة ای را نشان می دهد که پتانسیل در آنجا مؤثر است. آشکارساز همه ذراتی را که به طرف مخروط با زاویه گشودگی $d\Omega$ بیرون می آیند گیر می اندازد. فرض می شود که باریکه در امتداد محور z می آید.

مسئله پراکندگی در سه بعد تشابه های زیادی با نظیر یک بعدی خود داشته و چندین تفاوت با آن دارد که بناچار با افزایش بعد با آن همراه هستند. قبل از همه، ذرات فرودی (خروجی از شتاب دهنده) نه فقط با تکانه میانگین $\langle P \rangle = \hbar k_0$ بلکه با اینکه آنها به طور یکنواخت نسبت به پارامتر برخورد ρ ، که مختصه واقع در صفحه عمود بر k_0 است، توزیع می شوند هم مشخص می شوند (شکل ۱۹-۱). البته این توزیع تا $\rho \rightarrow \infty$ یکنواخت نیست بلکه فقط تا $\rho_{max} \gg r_0$ یکنواخت است که r_0 ، برد (گستره) پتانسیل، مقیاس فاصله ای

است که فراتر از آن پتانسیل ناچیز است [برای مثال، اگر $V(r) = e^{-r^2/a^2}$ باشد، برد $r_0 \cong a$ است] مسئله، محاسبه آهنگی است که ذرات با آن به درون یک آشکارساز دور که رو به زاویه فضایی $d\Omega$ در جهت (θ, ϕ) ، که نسبت به جهت باریکه اندازه گیری می شوند، قرار دارد پراکنده می شوند (شکل ۱۹-۱). دقیق تر اینکه، به دنبال سطح مقطع دیفرانسیلی $d\sigma/d\Omega$ هستیم که به صورت زیر تعریف می شود:

$$\frac{d\sigma(\theta, \phi)}{d\Omega} = \frac{\text{تعداد ذرات پراکنده شده به درون } d\Omega \text{ در هر ثانیه}}{\text{مساحت در صفحه } \rho / \text{تعداد فرودی}} \quad (19-2)$$

$d\sigma/d\Omega$ به صورت زیر محاسبه می شود:

- (۱) - یک بسته موج اولیه با تکانه میانگین $\langle \mathbf{P} \rangle = \hbar \mathbf{k}_0$ و پارامتر برخورد میانگین $\langle \rho \rangle$ انتخاب می شود. مختصه (مکان) میانگین در جهت باریکه، تا وقتی که از مبدا دور است، دخیل نیست.
- (۲) - این بسته موج بر حسب ویژه توابع ψ_k هامیلتونی $H = T + V$ که به شکل زیرند

$$\psi_{\mathbf{k}} = \psi_{inc} + \psi_{sc} \quad (19-3)$$

بسط داده می شود. که در آن ψ_{inc} موج فرودی و $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ و ψ_{sc} موج پراکنده شده است. فقط آن جواب هایی را انتخاب می کنیم که در آنها ψ_{sc} خالصاً بیرون رونده است. در مورد ψ_{sc} بیشتر صحبت خواهیم کرد.

(۳) - با الحاق عامل وابستگی زمانی $e^{-iEt/\hbar}$ ($E = \hbar^2 k^2 / 2\mu$) به هر ضریب $a(\mathbf{k})$ در بسط، بسته موج را انتشار می دهیم.

(۴) - موج پراکنده شده را وقتی $t \rightarrow \infty$ میل می کند تعیین می کنیم و چگالی جریان احتمال مربوط به آن را محاسبه می کنیم. از شارش احتمال کل به درون مخروط $d\Omega$ واقع در (θ, ϕ) انتگرال می گیریم. این کار احتمال اینکه ذرات فرودی به درون آشکارساز واقع در (θ, ϕ) بروند را به دست می دهد. دیده می شود که اگر تابع موج فضای تکانه بسته موج فرودی در $\langle \mathbf{P} \rangle = \hbar \mathbf{k}_0$ خیلی تیز باشد، احتمال رفتن به درون $d\Omega$ فقط به $\hbar \mathbf{k}_0$ و $\langle \rho \rangle$ بستگی دارد. این احتمال را $P(\rho, \mathbf{k}_0 \rightarrow d\Omega)$ می نامیم.

(۵) - سپس باریکه ای از ذرات با $n(\rho)$ ذره در ثانیه در واحد سطح در صفحه ρ را در نظر می گیریم. تعداد پراکنده گی به درون $d\Omega$ در هر ثانیه برابر است با

$$\eta(d\Omega) = \int P(\rho, \mathbf{k}_0 \rightarrow d\Omega) \eta(\rho) d^2\rho \quad (19-2-4)$$

چون در آزمایش $n(\rho) = \eta$ ، یک ثابت است، از معادله (۱۹-۲-۲) داریم:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\eta(d\Omega)}{\eta} = \int P(\rho, \mathbf{k}_0 \rightarrow d\Omega) d^2\rho \quad (19-2-5)$$

(۶) - بعد از انجام همه این کارها دیده می‌شد که $d\sigma/d\Omega$ می‌توانسته با در نظر گرفتن فقط جواب استاتیکی ψ_{k_0} و محاسبه نسبت شارش احتمال در هر ثانیه به درون $d\Omega$ مربوط به چگالی ψ_{sc} به چگالی جریان احتمال فرودی مربوط به $e^{ik_0 \cdot r}$ محاسبه شود. دلیل تقلیل تصویر وابسته به زمان به تصویر مستقل از زمان با دلیل آن در یک بعد یکی است: وقتی بسته موج فرودی را در فضای مختصه بیشتر و بیشتر پهن می‌کنیم، امواج فرودی و پراکنده شده شروع به همزیستی در پیکربندی حالت پایا، ψ_{k_0} می‌کنند. در مورد متوسط‌گیری روی $\langle \rho \rangle$ چطور؟ این کار دیگر لازم نیست چون بسته فرودی اینک موج تخت $e^{ik_0 \cdot r}$ است که نسبت به ρ یکنواخت است.^۱

جزئیات استخراج $d\sigma/d\Omega$ از ψ_{k_0} را بررسی می‌کنیم. با انتخاب محور z موازی با k_0 و حذف اندیس 0 داریم

$$\psi_k = e^{ikz} + \psi_{sc}(r, \theta, \phi) \quad (۱۹-۲-۶)$$

که θ و ϕ در شکل ۱۹-۱ تعریف شده‌اند. اگر چه شکل مفصل ψ_{sc} به پتانسیل بستگی دارد ولی می‌دانیم که دور از مبدا این تابع موج، معادله ذره آزاد را برآورده می‌کند [با فرض $rV(r) \rightarrow 0$ وقتی $r \rightarrow \infty$ میل می‌کند].

$$(\nabla^2 + k^2)\psi_{sc} = 0 \quad (r \rightarrow \infty) \quad (۱۹-۲-۷)$$

و خالصاً برون رو است.

با یاد آوری جواب عمومی معادله ذره آزاد [در ناحیه‌ای که مبدا را در بر ندارد] می‌رسیم به

$$\psi_{sc} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_l \sum_m (A_l j_l(kr) + B_l n_l(kr)) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (۱۹-۲-۸)$$

توجه کنید که توابع نویم را خارج نمی‌کنیم چون وقتی $r \rightarrow \infty$ میل می‌کند کاملاً خوشرفتار هستند. از آنجا که

$$j_l(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sin(kr - l\pi/2)/(kr) \quad (۱۹-۲-۹)$$

$$n_l(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} -\cos(kr - l\pi/2)/(kr)$$

می‌بایست $A_l/B_l = -i$ باشد به طوری که به یک موج خالصاً برون رو e^{ikr}/kr برسیم. با این شرط، شکل مجانبی موج پراکنده شده به صورت زیر است

$$\psi_{sc} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{e^{ikr}}{kr} \sum_l \sum_m (-i)^l (-B_l) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (۱۹-۲-۱۰)$$

۱- مثل یک بعد توجه کنید که یک بسته موج با پهن کردن، یک موج تخت نمی‌شود. چون بسته موج نرم یک و موج تخت نرم $\delta^3(0)$ دارد. بنابراین فرض می‌شود که وقتی بسته پهن می‌شود، نرم آن به طور پیوسته زیاد می‌شود به طوری که نهایتاً یک موج تخت حاصل می‌شود. در هر مورد، نرم کل اهمیتی ندارد.

یا

$$\psi_{sc} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta, \phi) \quad (11-2-19)$$

و

$$\psi_k \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ikz} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (12-2-19)$$

که f دامنه پراکندگی نامیده می‌شود.

برای به دست آوردن سطح مقطع دیفرانسیلی، به نسبت احتمال شارش کننده به درون $d\Omega$ در هر ثانیه به چگالی جریان فرودی نیاز داریم. چگالی‌های جریان فرودی و پراکنده شده، \mathbf{j}_{sc} و \mathbf{j}_{inc} کدامند؟ با اینکه به دفعات از این کمیت‌ها سخن گفته‌ایم اما آنها خوش تعریف نیستند مگر اینکه از ایده‌های فیزیکی دیگری کمک بگیریم. دلیل این است که فقط یک چگالی جریان \mathbf{j} مربوط به ψ_k وجود دارد و نسبت به ψ_k از درجه دو است. بنابراین فقط جمع دو قسمت، یکی مربوط به e^{ikr} و یکی مربوط به ψ_{sc} ، نیست و جملات دیگری هم (جملات ضربدری) وجود دارند. ما به شرح زیر از شرایط مشکل خلاص می‌شویم. توجه کنید که وقتی $r \rightarrow \infty$ میل می‌کند ψ_{sc} در مقایسه با e^{ikz} به دلیل ضریب $1/r$ ناچیز می‌شود. بنابراین جریان فرودی مربوط به e^{ikz} را محاسبه می‌کنیم که برابر است با

$$|j_{inc}| = \left| \frac{\hbar}{2\mu i} (e^{-ikz} \nabla e^{ikz} - e^{ikz} \nabla e^{-ikz}) \right| \quad (13-2-19)$$

$$= \frac{\hbar k}{\mu}$$

از این ترغند نمی‌توانیم برای محاسبه \mathbf{j}_{sc} به درون $d\Omega$ استفاده کنیم چون ψ_{sc} هرگز به e^{ikz} غالب نمی‌شود. بنابراین از ترغند دیگری استفاده می‌کنیم. می‌گوییم که e^{ikz} در واقع یک ذره از تابع موجی است که به وسیله یک $\rho_{max} \ll r_0$ در جهت عرضی محدود می‌شود. لذا در هر توصیف واقعی، وقتی $r \rightarrow \infty$ میل می‌کند فقط ψ_{sc} برای $\theta \neq 0$ باقی خواهد ماند^۳ (برای یک ρ_{max} معین، موج فرودی فقط برای $\delta\theta \leq \rho_{max}/r$ وجود دارد. می‌توانیم با افزایش r ، که آشکار ساز در آنجا قرار گرفته است، $\delta\theta$ را به دلخواه کوچک کنیم) با این نکته، (برای $\theta \neq 0$) داریم

۱- در واقع f به k هم بستگی دارد؛ این وابستگی صریحاً نشان داده نمی‌شود.

۲- در یک بعد نباید نگران این مطلب باشیم چون \mathbf{j} مربوط به $Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ عبارتست از

$$(\hbar k/\mu)(|A|^2 - |B|^2) = j_{inc} + j_{ret}$$

۳- در واقع فقط در این تصویر واقعی‌تر معنی دارد که بگوییم ذرات وارد شونده به آشکار سازهای واقع در $\theta \neq 0$ ذرات پراکنده شده (و نه ذرات فرودی پراکنده نشده) هستند. در $\theta = 0$ (عملاً) هیچ راهی برای جدا کردن ذرات فرودی و پراکنده شده وجود ندارد. برای مقایسه تئوری با آزمایش، $f(\theta = 0)$ با برونمایی $f(\theta)$ از $\theta \neq 0$ استخراج می‌شود.

$$\mathbf{j}_{sc} = \frac{\hbar}{2\mu i} (\psi_{sc}^* \nabla \psi_{sc} - \psi_{sc} \nabla \psi_{sc}^*) \quad (14-2-19)$$

و

$$\nabla = \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \mathbf{e}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (15-2-19)$$

دو جمله آخر در ∇ وقتی $r \rightarrow \infty$ میل می کند بی تأثیرند. وقتی جمله اول روی ψ_{sc} مجانبی اثر می کند،

$$\frac{\partial}{\partial r} f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} = f(\theta, \phi) ik \frac{e^{ikr}}{r} + O\left(\frac{1}{r^2}\right)$$

به طوری که

$$\mathbf{j}_{sc} = \frac{\mathbf{e}_r}{r^2} |f|^2 \frac{\hbar k}{\mu} \quad (16-2-19)$$

احتمال با آهنگ

$$\begin{aligned} R(d\Omega) &= \mathbf{j}_{sc} \cdot \mathbf{e}_r r^2 d\Omega \\ &= |f|^2 \frac{\hbar k}{\mu} d\Omega \end{aligned} \quad (17-2-19)$$

به درون $d\Omega$ شارش می کند. از آنجا که با آهنگ

$$\begin{aligned} j_{inc} &= \hbar k / \mu \text{ sec}^{-1} \text{ area}^{-1} \\ \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega &= \frac{R(d\Omega)}{j_{inc}} = |f|^2 d\Omega \end{aligned}$$

می رسد، سرانجام

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \phi)|^2 \quad (18-2-19)$$

بنابراین در تصویر مستقل از زمان، محاسبه $d\sigma/d\Omega$ به محاسبه $f(\theta, \phi)$ تقلیل می یابد.

بعد از این بحث کلی، به محاسبات خاص بر می گردیم. در بخش بعد، محاسبه $d\sigma/d\Omega$ در تصویر وابسته به زمان تا مرتبه اول انجام می شود. در بخش ۴، $d\sigma/d\Omega$ را تا مرتبه اول در تصویر مستقل از زمان محاسبه می کنیم (البته دو نتیجه در توافق هستند) در بخش ۵ نظریه اختلال فراتر رفته و بعضی از ویژگی های کلی را برای پتانسیل های با تقارن کروی بحث می کنیم. پراکندگی دو- ذره ای در بخش ۶ بحث می شود.

۱۹-۳- تقریب بورن (توصیف وابسته به زمان)

یک بسته موج اولیه را در نظر بگیرید که آنقدر پهن است که می تواند به وسیله یک موج تخت $|\mathbf{p}_i\rangle$ تقریب زده شود. سرنوشت آن بعد از پراکندگی به وسیله انتشار گر $(t_f \rightarrow \infty, t_i \rightarrow -\infty)$ یعنی عملگر

$$S = \lim_{\substack{t_f \rightarrow \infty \\ t_i \rightarrow -\infty}} U(t_f, t_i)$$

مشخص می‌شود که ماتریس S نامیده می‌شود. احتمال ورود ذره به آشکارساز در جهت (θ, ϕ) با زاویه گشودگی $d\Omega$ ، احتمال این است که تکانه نهایی \mathbf{p}_f در مخروطی با زاویه گشودگی $d\Omega$ در جهت (θ, ϕ) قرار گیرد:

$$P(\mathbf{p}_i \rightarrow d\Omega) = \sum_{\mathbf{p}_f \text{ in } d\Omega} |\langle \mathbf{p}_f | S | \mathbf{p}_i \rangle|^2$$

اگر با در نظر گرفتن V به عنوان یک اختلال، S یا U را تا مرتبه اول محاسبه کنیم، مسئله به استفاده از قاعده تلایبی فرمی تقلیل می‌یابد که بیان می‌کند که آهنگ گذار برابر است با

$$R_{i \rightarrow d\Omega} = \frac{dP(\mathbf{p}_i \rightarrow d\Omega)}{dt} \tag{۱-۳-۱۹}$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} \left[\int_0^\infty |\langle \mathbf{p}_f | V | \mathbf{p}_i \rangle|^2 \delta\left(\frac{p_f^2}{2\mu} - \frac{p_i^2}{2\mu}\right) p_f^2 dp_f \right] d\Omega$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{p}_f | V | \mathbf{p}_i \rangle|^2 \mu \mathbf{p}_i d\Omega \tag{۲-۳-۱۹}$$

(بعد از این $p_f = p_i = p = \hbar k$ است) این آهنگ گذار همان آهنگ شارش احتمال به درون $d\Omega$ است. چون احتمال با آهنگ

$$j_{\text{inc}} = \frac{\hbar k}{\mu} \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3 \text{sec}^{-1} \text{area}^{-1} \tag{۳-۳-۱۹}$$

در جهت \mathbf{p}_i وارد می‌شود [یادآوری: $|\mathbf{p}_i\rangle \rightarrow (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{i\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{r}/\hbar}$ ، سطح مقطع دیفرانسیلی، که آهنگی را اندازه می‌گیرد که با آن احتمال در بین راه کم شده (و به $d\Omega$ کانال می‌زند)، عبارتست از

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{R_{i \rightarrow d\Omega}}{j_{\text{inc}}} = (2\pi)^4 \mu^2 \hbar^2 |\langle \mathbf{p}_f | V | \mathbf{p}_i \rangle|^2 d\Omega \tag{۴-۳-۱۹}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' \right|^2$$

که در آن

$$\hbar\mathbf{q} = \mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i \tag{۵-۳-۱۹}$$

تکانه انتقال یافته به ذره است. برای مراجعات بعدی توجه کنید که

$$|\mathbf{q}|^2 = |\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i|^2 = 2k^2(1 - \cos\theta) = 4k^2 \sin^2(\theta/2) \tag{۶-۳-۱۹}$$

بنابراین وابستگی $d\sigma/d\Omega$ به انرژی فرودی و زاویه پراکندگی از طریق ترکیب $|\mathbf{q}| \equiv q = 2k \sin(\theta/2)$ است.

با مقایسه معادلات (۱۹-۳-۴) و (۱۹-۲-۱۸) می‌توانیم، صرف‌نظر از یک ضریب فاز با مدول واحد (نسبت به موج فرودی)، $f(\theta)$ را به دست آوریم. بعداً خواهیم دید که این ضریب ۱- است. بنابراین

$$f(\theta, \phi) = \frac{-\mu}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' \quad (۷-۳-۱۹)$$

لذا در این تقریب بورن، $f(\theta, \phi) = f(\mathbf{q})$ همان تبدیل فوریه پتانسیل نسبت به انتقال تکانه است (صرف‌نظر از یک عامل ثابت).

بعد از این به پتانسیل‌هایی متمرکز می‌شویم که تقارن کروی دارند: $V(\mathbf{r}) = V(r)$. در این مورد در انتگرال‌گیری $d^3\mathbf{r}'$ می‌توانیم محور z' را موازی با \mathbf{q} انتخاب کنیم به طوری که

$$\begin{aligned} f(\theta, \phi) &= \frac{-\mu}{2\pi\hbar^2} \int e^{-iqr' \cos\theta'} V(r') d(\cos\theta') d\phi' r'^2 dr' \\ &= \frac{-2\mu}{\hbar^2} \int \frac{\sin qr'}{q} V(r') r' dr' \\ &= f(\theta) \end{aligned} \quad (۸-۳-۱۹)$$

که مستقل بودن f از ϕ می‌توانست از قبل پیش‌بینی شود. موج فرودی e^{ikz} به تغییر ϕ ، یعنی چرخش حول محور z ، حساس است. پتانسیل، که تقارن کروی دارد، هم چیزی در مورد ϕ نمی‌داند. از این رو f نمی‌تواند هیچ وابستگی به ϕ داشته باشد. به زبان تکانه زاویه‌ای، موج فرودی هیچ l_z ندارد و این جنبه در پراکندگی محفوظ باقی می‌ماند.

$f(\theta)$ را برای پتانسیل یوکاوا محاسبه می‌کنیم

$$V(r) = \frac{g e^{-\mu_0 r}}{r} \quad (۹-۳-۱۹)$$

از معادله (۱۹-۳-۸)،

$$\begin{aligned} f(\theta) &= -\frac{2\mu g}{\hbar^2 q} \int_0^\infty \frac{e^{iqr'} - e^{-iqr'}}{2i} e^{-\mu_0 r'} dr' \\ &= \frac{-2\mu g}{\hbar^2(\mu_0^2 + q^2)} \end{aligned} \quad (۱۰-۳-۱۹)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4\mu^2 g^2}{\hbar^4 [\mu_0^2 + 4k^2 \sin^2(\theta/2)]^2} \quad (۱۱-۳-۱۹)$$

حال اگر $g = Ze^2$ و $\mu_0 = 0$ قرار دهیم به سطح مقطع پراکندگی کولنی ذره‌ای با بار e از یک پتانسیل $\phi = Ze/r$ (یا $V = Ze^2/r$) می‌رسیم:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \Big|_{\text{Coulomb}} = \frac{\mu^2(Ze^2)^2}{4p^4 \sin^4(\theta/2)} \tag{۱۹-۳-۱۲}$$

$$= \frac{(Ze^2)^2}{16E^2 \sin^4(\theta/2)}$$

که در آن $E = p^2/2\mu$ انرژی جنبشی ذره فرودی است. این جواب اتفاقاً از نظر کوانتوم مکانیکی و کلاسیکی دقیق است (این کمیت توسط رادرفورد به صورت کلاسیکی محاسبه شده بود و سطح مقطع رادرفورد نامیده می‌شود). اگر چه با گرفتن حد $\mu_0 \rightarrow 0$ از محاسبه پتانسیل بوکاووا به $d\sigma/d\Omega$ صحیح رسیدیم اما چند نکته ظریف وجود دارد که باید مورد توجه قرار گیرند. قبل از همه، پتانسیل کولنی نمی‌تواند با فرمول‌بندی که ارائه کرده‌ایم مورد بحث قرار گیرد چون این پتانسیل سریعتر از $1/r$ صفر نمی‌شود. به عبارتی دیگر، شکل مجانبی

$$\psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ikz} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r}$$

در اینجا قابل کاربرد نیست چون ذره هرگز از تأثیر پتانسیل مصّون نیست (این موضوع خود را در این حقیقت نشان می‌دهد که سطح مقطع کل نامتناهی است: اگر تلاش کنیم تا از $d\sigma/d\Omega$ روی θ انتگرال بگیریم، انتگرال، همچون $\int d\theta/\theta^3$ در وضعیت $\theta \rightarrow 0$ ، واگرا می‌شود). اما می‌توانیم یک دامنه پراکندگی $f_c(\theta)$ در مفهوم زیر تعریف کنیم. دیده می‌شود که وقتی $r \rightarrow \infty$ میل می‌کند ویژه جواب‌هایی با انرژی مثبت برای هامیلتونی کولنی به شکل زیر^۱ وجود دارند

$$\psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ikz} + f_c(\theta) \left(\frac{e^{ikr}}{r} \right) \tag{۱۹-۳-۱۳}$$

که علامت \sim بالایی نشان می‌دهد که اینها واقعاً امواج تخت یا کروی نیستند، بلکه به وسیله نیروی دور-برد کولنی تصحیح یافته‌اند. برای مثال،

$$\frac{\widetilde{e^{ikr}}}{r} = \frac{e^{i(kr - \gamma \ln kr)}}{r} \tag{۱۹-۳-۱۴}$$

$$\gamma = \frac{Ze^2\mu}{\hbar^2 k} \tag{۱۹-۳-۱۵}$$

موج کروی واپیچیده یا تغییر شکل یافته است که از بخش ۱۲-۶ برای ما آشناست. با مقایسه نسبت شار به درون $d\Omega$ به شار ورودی (مربوط به این امواج واپیچیده)، داریم

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_c|^2$$

که در آن

$$f_c(\theta) = -\frac{\gamma}{2k(\sin \theta/2)^2} \exp(-i\gamma \ln \sin^2 \theta/2 + \text{const}) \quad (19-3-16)$$

و ثابت واقع در آن موهومی محض است. با مقایسه این با دامنه یوکاوا، معادله (۱۹-۳-۱۰)، بعد از قرار دادن $\mu_0 = 0$ و $g = Ze^2$ ، صرف نظر از عامل فاز نمایی، توافق دیده می شود. این تفاوت در $d\sigma/d\Omega$ دیده نمی شود اما وقتی پراکندگی ذره- یکسان را در این فصل بررسی می کنیم ظاهر خواهد شد.

تمرین ۱۹-۳-۱: نشان دهید که

$$\sigma_{\text{Yukawa}} = 16\pi r_0^2 \left(\frac{g\mu r_0}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{1+4k^2 r_0^2}$$

که در آن $r_0 = 1/\mu_0$ برد است. σ را با سطح مقطع هندسی مربوط به این برد مقایسه کنید.

تمرین ۱۹-۳-۲: الف- نشان دهید که اگر $V(r) = -V_0 \theta(r_0 - r)$ باشد،

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 4r_0^2 \left(\frac{\mu V_0 r_0^2}{\hbar^2} \right)^2 \frac{(\sin qr_0 - qr_0 \cos qr_0)^2}{(qr_0)^6}$$

ب- نشان دهید وقتی $kr_0 \rightarrow 0$ میل می کند، پراکندگی همسانگرد می شود و

$$\sigma \cong \frac{16\pi r_0^2}{9} \left(\frac{\mu V_0 r_0^2}{\hbar^2} \right)^2$$

تمرین ۱۹-۳-۳: نشان دهید که برای پتانسیل گوسی $V(r) \equiv V_0 e^{-r^2/a_0^2}$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\pi r_0^2}{4} \left(\frac{\mu V_0 r_0^2}{\hbar^2} \right)^2 e^{-q^2 r_0^2/2}$$

$$\sigma = \frac{\pi^2}{2k^2} \left(\frac{\mu V_0 r_0^2}{\hbar^2} \right)^2 (1 - e^{-2k^2 r_0^2})$$

[راهنمایی: چون $q^2 = 2k^2(1 - \cos \theta)$ است، $d(\cos \theta) = -d(q^2)/2k^2$]

این بخش را با بررسی برخی ویژگی های $f(\theta)$ به پایان می بریم. از معادله (۱۹-۳-۸) می بینیم که در انرژی های پایین $(k \rightarrow 0)$ ، $q = 2k \sin(\theta/2) \rightarrow 0$

$$f(\theta) \sim -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int V(r') d^3r' \quad (19-3-17)$$

$$\cong -\frac{\mu V_0 r_0^3}{\hbar^2}$$

که در آن V_0 ارتفاع مؤثر V و r_0 برد مؤثر است. در انرژی های بالا، عامل نمایی $e^{-iqr' \cos \theta'}$ به تندی نوسان می کند. این یعنی امواج پراکنده شده ای که از نقاط مختلف r' می آیند اساساً با فازهای تصادفی جمع می شوند، به جز در ناحیه کوچکی که در آن فاز ثابت است:

$$qr' \cos \theta' \lesssim \pi$$

$$2k \sin(\theta/2)r_0 \lesssim \pi \quad (\text{چون } r' \cos \theta' \cong r_0)$$

$$k\theta r_0 \lesssim \pi \quad (\sin \theta/2 \simeq \theta/2)$$

لذا دامنه پراکندگی فقط در مخروط مستقیم کوچک با زاویه (با حذف ثابت‌های از مرتبه واحد)

$$\theta \lesssim \frac{1}{kr_0} \quad (19-3-18)$$

قابل توجه است. در این بحث‌ها فرض می‌شود که $V(r')$ نزدیک $r'=0$ منظم است. اما در بعضی موارد تکین [مثلاً $V \propto (r')^{-3}$] انتگرال r' با r' کوچک غالب شده و $k r' \cos \theta'$ لزوماً فاز بزرگی نیست. هم پتانسیل یوکاوا و هم پتانسیل گوسی (تمرین ۱۹-۳-۳) عاری از چنین مشکلاتی بوده و این قله مستقیم را در انرژی‌های بالا نشان می‌دهند.

تمرین ۱۹-۳-۴: ادعای فوق را برای پتانسیل گوسی ثابت کنید.

در چه صورتی می‌توانیم به تقریب بورن اعتماد کنیم؟ از آنجا که پتانسیل را به‌عنوان اختلال در نظر گرفتیم، می‌توانیم حدس بزنیم که در انرژی‌های بالا قابل اعتماد است. در بخش بعد خواهیم دید که این واقعاً درست است اما تقریب بورن می‌تواند در انرژی‌های پایین هم به کار رود به شرطی که یک شرط جزئی دیگر برآورده شود.

۱۹-۴- تقریب بورن (توصیف وابسته به زمان)

در این رویکرد، مسئله اصلی پیدا کردن جواب‌های معادله شرودینگر کامل

$$(\nabla^2 + k^2)\psi_k = \frac{2\mu}{\hbar^2} V\psi_k \quad (19-4-1)$$

به شکل

$$\psi_k = e^{ikr} + \psi_{sc} \quad (19-4-2\text{الف})$$

است که در آن

$$\psi_{sc} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (19-4-2\text{ب})$$

در بالا، θ و ϕ نسبت به \mathbf{k} ، که در امتداد محور z انتخاب می‌شود، اندازه‌گیری می‌شوند (شکل ۱۹-۱). به این مسئله می‌شود به‌صورت زیر نزدیک شد. یک تابع گرین $G^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ می‌یابیم که معادله

$$(\nabla^2 + k^2)G^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (19-4-3)$$

را برآورده کند و برحسب آن، جواب عمومی صوری معادله (۱۹-۴-۱) عبارتست از

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \psi^0(\mathbf{r}) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \int G^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' \quad (۴-۱۹)$$

که $\psi^0(\mathbf{r})$ یک جواب دلخواه ذره - آزاد با انرژی $\hbar^2 k^2 / 2\mu$ است:

$$(\nabla^2 + k^2)\psi^0 = 0 \quad (۵-۱۹)$$

به زودی با استفاده از شرایط مرزی، ψ^0 را معین و محدود خواهیم کرد.

با اعمال $\nabla^2 + k^2$ به هر دو طرف معادله (۴-۱۹) به راحتی می شود اثبات کرد که $\psi_{\mathbf{k}}$ واقعاً جوابی از معادله (۴-۱۹) است. ایده به کار رفته در اینجا کاملاً شبیه ایده‌ای است که در حل معادله پواسون برای پتانسیل الکتروستاتیک بر حسب چگالی بار ρ به کار می رود:

$$\nabla^2 \phi = -4\pi\rho$$

ابتدا G ، پاسخ به یک بار نقطه‌ای در \mathbf{r}' ، را پیدا می کنیم:

$$\nabla^2 G = -4\pi\delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

تمرین ۱۲-۶-۴ بیان می کند که

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

پس به ρ به عنوان برهمنهی بارهای نقطه‌ای نگاه کرده و چون معادله پواسون خطی است، ϕ را به صورت مجموع ϕ های ناشی از این بارها به دست می آوریم:

$$\phi(\mathbf{r}) = \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' = \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3\mathbf{r}'$$

با اثر ∇^2 به دو طرف و استفاده از $\nabla^2 G = -4\pi\delta^3$ ، می توانید ثابت کنید که ϕ معادله پواسون را برآورده می کند.

می توانیم به این $\phi(\mathbf{r})$ هر ϕ^0 را، که $\nabla^2 \phi^0 = 0$ را برآورده می کند، اضافه کنیم. با استفاده از شرط مرزی $\phi = 0$ وقتی $\rho = 0$ است از شرط ϕ^0 خلاص می شویم.

در مسئله پراکندگی، ادعا می کنیم که سمت راست معادله (۴-۱۹) یک چشمه معلوم است و معادله (۴-۱۹) برای $\psi_{\mathbf{k}}$ را بر حسب تابع گرین می نویسیم. تنها معما این است که چشمه $\psi_{\mathbf{k}}$ ، خود $\psi_{\mathbf{k}}$ است. لذا معادله (۴-۱۹) واقعاً یک جواب نیست بلکه یک معادله انتگرالی برای $\psi_{\mathbf{k}}$ است. انگیزه تبدیل معادله دیفرانسیل به یک معادله انتگرالی شبیه انگیزه برای مورد $U_1(t, t_0)$ است: برای به دست آوردن یک بسط اختلالی برای $\psi_{\mathbf{k}}$ نسبت به توان های V ، تا مرتبه صفرم از V ، معادله (۴-۱۹) (الف) بیان می کند که $\psi_{\mathbf{k}}$ ، $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ است چون اگر V نادیده گرفته شود موج پراکنده شده‌ای وجود ندارد، در حالی که معادله (۴-۱۹) بیان می کند که $\psi_{\mathbf{k}} = \psi^0$ ، چون انتگرال روی \mathbf{r}' دارای توانی صریح از V در خود است در حالی که ψ^0

هیچ وابستگی به V ندارد [چون جواب معادله (۱۹-۴-۵) است]. لذا قادر هستیم تا تابع دلخواه ψ^0 را در معادله (۱۹-۴-۴) محدود کنیم:

$$\psi^0 = e^{ik \cdot r} \quad (۱۹-۴-۶)$$

و نتیجه بگیریم که در مسئله پراکندگی کنونی،

$$\psi_k = e^{ik \cdot r} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \int G^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi_k(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' \quad (۱۹-۴-۷)$$

است. از مقایسه این با معادله (۱۹-۴-۲ الف) می بینیم که قسمت دوم مربوط به موج پراکنده شده است. برای سازگاری تعبیر، این موج باید شامل امواج خالصاً برون‌رو در بی نهایت فضایی باشد. از آنجا که $G^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ موج پراکنده شده تولید شده به وسیله یک چشمه نقطه‌ای در \mathbf{r}' است لازم است که $G^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ به طور مجانبی، خالصاً برون‌رو باشد. این یک قید فیزیکی اضافی روی G^0 گذشته از معادله (۱۹-۴-۷) است. همان‌طور که خواهیم دید این قید همراه با معادله (۱۹-۴-۳)، G^0 را به طور منحصره‌فرد برای ما مشخص خواهند کرد.

تصور کنید که G^0 را پیدا کرده‌ایم. اکنون در موقعیتی هستیم که باید با شروع از معادله (۱۹-۴-۷) یک جواب اختلالی برای ψ_k به دست آوریم. تا مرتبه صفرم دیده‌ایم که $\psi_k = e^{ik \cdot r}$ است. برای رفتن به مرتبه اول، ψ_k مرتبه صفر را در سمت راست قرار می‌دهیم:

$$\psi_k = e^{ik \cdot r} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \int G^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') e^{ik \cdot \mathbf{r}'} d^3\mathbf{r}' + O(V^2) \quad (۱۹-۴-۸)$$

اگر این نتیجه مرتبه اول را در سمت راست معادله (۱۹-۴-۷) قرار دهیم به نتیجه‌ای می‌رسیم (در شکل نمادین) که تا مرتبه دوم خوب است:

$$\psi_k = \psi^0 + \frac{2\mu}{\hbar^2} G^0 V \psi^0 + \left(\frac{2\mu}{\hbar^2} \right)^2 G^0 V G^0 V \psi^0 + O(V^3)$$

و قس علی هذا.

اینک با شروع از معادله (۱۹-۴-۳) به تعیین G^0 برمی‌گردیم.

$$(\nabla^2 + k^2)G^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

توجه کنید که این معادله جواب منحصره‌فردی ندارد زیرا با داشتن یک جواب می‌توانیم با جمع کردن تابعی، مثل η^0 ، با آن که از معادله همگن زیر پیروی می‌کند به جوابی دیگر برسیم

$$(\nabla^2 + k^2)\eta^0 = 0$$

بالعکس، هر دو جواب G^0 و $G^{0'}$ فقط می‌توانند به اندازه یک η^0 تفاوت داشته باشند. بنابراین ابتدا ساده‌ترین G^0 ممکن را به دست می‌آوریم و سپس η^0 هایی را با آن جمع می‌کنیم که جمع را خالصاً برون رو سازند.

از آنجا که $(\nabla^2 + k^2)$ و $\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ تحت انتقال کلی \mathbf{r} و \mathbf{r}' ناوردا هستند، می‌دانیم که معادله جواب‌هایی را می‌پذیرد که ناوردای انتقالی هستند:^۱

$$G^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G^0(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

برای سادگی $\mathbf{r}-\mathbf{r}'$ را با \mathbf{r} جایگزین کنید [همین که $G^0(\mathbf{r})$ را به دست آوردیم می‌توانیم \mathbf{r} را با $\mathbf{r}-\mathbf{r}'$ جایگزین کنیم]. لذا می‌خواهیم معادله زیر را حل کنیم

$$(\nabla^2 + k^2)G^0(\mathbf{r}) = \delta^3(\mathbf{r}) \quad (19-4-9)$$

به دلایل مشابه فوق، به دنبال جواب‌های دارای ناوردایی چرخشی هستیم،^۱

$$G^0(\mathbf{r}) = G^0(r)$$

با نوشتن

$$G^0(r) = \frac{U(r)}{r}$$

می‌بینیم که برای $r \neq 0$ ، $U(r)$ معادله زیر را برآورده می‌کند

$$\frac{d^2U}{dr^2} + k^2U = 0$$

که جواب عمومی آن عبارتست از

$$U(r) = A e^{ikr} + B e^{-ikr}$$

یا

$$G^0(r) = \frac{A e^{ikr}}{r} + \frac{B e^{-ikr}}{r} \quad (19-4-10)$$

که A و B ثابت‌های دلخواه در این نقطه اند. چون می‌خواهیم G^0 خالصاً برون رو باشد $B = 0$ قرار می‌دهیم:

۱- توجه کنید که اگر معادله‌ای دارای یک تقارن باشد، مثل ناوردایی چرخشی، مفهوم آن این است که فقط جواب‌های ناوردای چرخشی موجودند نه اینکه همه جواب‌ها ناوردای چرخشی هستند. برای مثال هامیلتونی اتم هیدروژن ناوردای چرخشی است اما ویژه توابع در حالت کلی ناوردای چرخشی نیستند. اما بعضی جواب‌ها (با $l = m = 0$) هستند که ناوردای چرخشی‌اند.

$$G^0(\mathbf{r}) = \frac{A e^{ikr}}{r} \quad (11-4-19)$$

A را با محاسبه $(\nabla^2 + k^2)G^0(\mathbf{r})$ وقتی $r \rightarrow 0$ میل می‌کند محاسبه می‌کنیم^۱

$$(\nabla^2 + k^2)G^0(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow 0} -4\pi A \delta^3(\mathbf{r}) \quad (12-4-19)$$

که نتیجه می‌دهد

$$G^0(\mathbf{r}) = -\frac{e^{ikr}}{4\pi r} \quad (13-4-19)$$

ما نمی‌توانیم هر η^0 را به این جواب اضافه کنیم بدون اینکه ماهیت خالصاً برون رو بودن آن به هم بخورد، چون شکل کلی جواب ذره - آزاد، که در تمام فضا منظم است، عبارتست از

$$\eta^0(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l C_{lm} j_l(kr) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (14-4-19)$$

و چون وقتی $r \rightarrow \infty$ میل می‌کند توابع کروی بسل متشکل از امواج برون رو و درون رو با دامنه برابر هستند،

$$j_l(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} = \frac{e^{i(kr - l\pi/2)} - e^{-i(kr - l\pi/2)}}{2ikr} \quad (15-4-19)$$

اکنون

$$G^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G^0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (16-4-19)$$

را در معادله (۷-۴-۱۹) قرار می‌دهیم تا نتیجه شود:

$$\psi_{\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{2\mu}{4\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' \quad (17-4-19)$$

$$= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \psi_{sc}$$

اینک ثابت می‌کنیم که وقتی $r \rightarrow \infty$ میل می‌کند ψ_{sc} شکل مورد نظر e^{ikr}/r $f(\theta, \phi)$ را دارد. اولین تقریب می‌تواند تقریب

$$\frac{e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \cong \frac{e^{ikr}}{r}$$

در انتگرال \mathbf{r}' باشد چون \mathbf{r}' محدود به (برد) $|\mathbf{r}'| \leq (r_0)$ است در حالی که $r \rightarrow \infty$ میل می‌کند. غلط بودن این کار واضح است چون اگر این کار را انجام دهیم f متناظر هیچ وابستگی به θ و ϕ نخواهد داشت! اگر دقیق‌تر باشیم، ابتدا تقریب زیر را به کار می‌بریم

^۱ از $-\nabla^2(\psi\chi) = \psi\nabla^2\chi + \chi\nabla^2\psi + 2\nabla\psi\cdot\nabla\chi$ ، $\nabla^2 \equiv r^{-2}(\partial/\partial r)r^2 \partial/\partial r$ روی تابعی فقط از r استفاده می‌کنیم.

$$\begin{aligned}
 |\mathbf{r}-\mathbf{r}'| &= (r^2+r'^2-2\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}')^{1/2} \\
 &= r \left[1 + \left(\frac{r'}{r}\right)^2 - 2\frac{\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'}{r^2} \right]^{1/2} = \\
 &= r \left(1 - 2\frac{\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'}{r^2} \right)^{1/2} + O \left[\left(\frac{r'}{r}\right)^2 \right] r \\
 &\cong r \left(1 - \frac{\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'}{r^2} \right)
 \end{aligned}
 \tag{19-4-18}$$

جمله درجه دوم از (r'/r) را حذف کرده و از تقریب $(1+x)^n \cong 1+nx$ برای x کوچک استفاده کرده‌ایم. بنابراین

$$\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = \frac{1}{r[1-(\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}')/r^2]} \cong \frac{1}{r} \left(1 + \frac{\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'}{r^2} \right)
 \tag{19-4-19}$$

در حالی که جاگذاری $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^{-1}$ در انتگرال منجر به خطاهایی می‌شود که وقتی $r \rightarrow \infty$ میل می‌کند صفر می‌شوند، برای عامل $e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$ اینگونه نیست. داریم

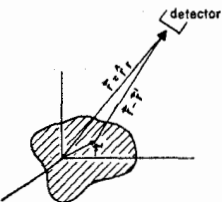
$$\begin{aligned}
 k|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| &= kr \left(1 - \frac{\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'}{r^2} \right) \\
 &= kr - k\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{r}' \\
 &= kr - \mathbf{k}_f\cdot\mathbf{r}'
 \end{aligned}
 \tag{20-4-19}$$

که در آن \mathbf{k}_f بردار موج ذره آشکار شده است: بزرگی آن (k) با بزرگی بردار موج ذره فرودی یکسان است و سوی آن در جهت مشاهده (\hat{r}) قرار دارد (شکل ۱۹-۲). در نتیجه

$$\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \cong \frac{e^{ikr}}{r} e^{-i\mathbf{k}_f\cdot\mathbf{r}'}
 \tag{21-4-19}$$

و

$$\psi_{\mathbf{k}} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{e^{ikr}}{r} \frac{2\mu}{4\pi\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{k}_f\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') d^3r'
 \tag{22-4-19}$$



شکل ۱۹-۲- ذره در نقطه \mathbf{r} مشاهده می‌شود. انتگرال گیری \mathbf{r}' به ناحیه هاشور خورده محدود می‌شود که برد پتانسیل را مشخص می‌کند.

بنابراین جوابی که یافته‌ایم دارای شکل مورد نظر در وضعیت $r \rightarrow \infty$ است. البته معادله (۱۹-۴-۲۲) $f(\theta, \phi)$ را معین نمی‌کند چون ψ_k در انتگرال \mathbf{r}' قرار دارد. اما تا هر مرتبه مورد نظر این ψ_k می‌تواند با تقریب مرتبه پایین‌تر قابل محاسبه جایگزین شود. بویژه تا مرتبه اول،

$$f(\theta, \phi) = -\frac{2\mu}{4\pi\hbar^2} \int e^{-ik_r r'} V(\mathbf{r}') e^{ik_r r'} d^3\mathbf{r}' \quad (19-4-23)$$

که اندیس i را به \mathbf{k} افزوده‌ایم تا خاطر نشان کند که بردار موج اولیه یا فرودی است. اعتراف می‌کنیم که $f(\theta, \phi)$ همان تقریب بورن محاسبه شده در بخش قبل است [معادله (۱۹-۳-۷)]. عامل فاز 1 -نسبت به موج فرودی در آنجا فقط فرض شده بود. توافق بین محاسبات وابسته به زمان و مستقل از زمان f تا همه مرتبه‌ها در بسط اختلال برقرار می‌ماند.

روش دیگری (مستلزم قضیه کوشی) برای حل معادله زیر وجود دارد

$$(\nabla^2 + k^2)G^0(\mathbf{r}) = \delta^3(\mathbf{r}) \quad (19-4-24)$$

با تبدیل فوریه دو طرف داریم:

$$\left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/2} \int e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} (\nabla^2 + k^2)G^0(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/2} \quad (19-4-25)$$

اگر ∇^2 را به سمت چپ اثر دهیم (با به‌خاطر داشتن اینکه هرمیتی است) داریم

$$(k^2 - q^2) \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/2} \int e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} G^0(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/2} \quad (19-4-26)$$

$$(k^2 - q^2)G^0(\mathbf{q}) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/2} \quad (19-4-27)$$

مثل همیشه رفتن به فضای تکانه، معادله دیفرانسیل را به یک معادله جبری تقلیل داده است. جواب به جز در نقطه $q = k$ که در آن $G^0(\mathbf{q})$ واگرا می‌شود عبارتست از

$$G^0(\mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}(k^2 - q^2)} \quad (19-4-28)$$

دلیل این واگرایی به شرح زیر است: معادله (۱۹-۴-۲۴) نسخه معادله مجرد زیر در فضای مختصه است:

$$(D^2 + k^2)G^0 = I \quad (19-4-29)$$

که در آن

$$D^2 = D_x^2 + D_y^2 + D_z^2 \quad (19-4-30)$$

D_x همان عملگر مشتق D نسبت به x معرفی شده در بخش (۱۰-۱) است و D_y و D_z عملگرهای مشتق نسبت به y و z هستند). بنابراین G^0 معکوس $(D^2 + k^2)$ است:

$$G^0 = (D^2 + k^2)^{-1} \quad (۱۹-۴-۳۱)$$

می‌دانیم که نمی‌توانیم عملگری را که دارای دترمینان صفر است یا به‌طور معادل (برای یک عملگر هرمیتی، چون می‌تواند قطری شود) یک ویژه مقدار صفر دارد معکوس کنیم. عملگر $(D^2 + k^2)$ دارای ویژه مقدار صفر است چون

$$(\nabla^2 + k^2)\psi = 0 \quad (۱۹-۴-۳۲)$$

جواب‌های غیر بديهی (موج تخت) دارد. بنابراین عملگر کمی متفاوت $D^2 + k^2 + i\varepsilon$ را در نظر می‌گیریم که ε مثبت و بی‌نهایت کوچک است. این هم ویژه مقدار صفر دارد اما ویژه توابع متناظر امواج تخت با عدد موج مختلط هستند. چنین توابعی قسمتی از فضایی که ما خود را به آن محدود کرده‌ایم، یعنی فضای توابع بهنجار شده به یک یا تابع دلتای دیراک، نیستند.^۱ بنابراین $D^2 + k^2 + i\varepsilon$ می‌تواند درون فضای هیلبرت فیزیکی معکوس شود. تابع گرین متناظر را با G_ε^0 نشان می‌دهیم. در پایان محاسبه ε را به صفر میل می‌دهیم.^۲ واضح است که

$$G_\varepsilon^0(\mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{k^2 + i\varepsilon - q^2} \quad (۱۹-۴-۳۳)$$

تابع فضای مختصه با تبدیل معکوس به دست می‌آید:

$$G_\varepsilon^0(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}}{k^2 + i\varepsilon - q^2} d^3\mathbf{q} \quad (۱۹-۴-۳۴)$$

محور q_z را موازی با \mathbf{r} انتخاب می‌کنیم. اگر θ و ϕ زوایا در فضای \mathbf{q} باشند،

$$G_\varepsilon^0(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi^3} \int \frac{e^{iqr \cos \theta}}{k^2 + i\varepsilon - q^2} d(\cos \theta) d\phi q^2 dq \quad (۱۹-۴-۳۵-الف)$$

$$= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty \frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{iqr} \frac{q^2 dq}{k^2 + i\varepsilon - q^2}$$

$$= \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\infty}^\infty \frac{e^{iqr}}{iqr} \frac{q^2 dq}{k^2 + i\varepsilon - q^2} \quad (۱۹-۴-۳۵-ب)$$

۱- از بخش (۱۰-۱) به‌خاطر بیاورید که اگر k مختلط باشد نرم به‌صورت نمایی واگرا می‌شود.
 ۲- این «دستور العمل $i\varepsilon$ » نامیده می‌شود. در سراسر تحلیل ε فقط تا مرتبه اول در نظر گرفته خواهد شد.

$$= \frac{-i}{4\pi^2 r} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{iqr} q dq}{k^2 + i\varepsilon - q^2} \quad (19-4-35 \text{ ج})$$

[در رفتن از (19-4-35 الف) به (19-4-35 ب) در قسمت e^{-iqr} ، q را به $-q$ تغییر دادیم].
 انتگرال فوق را به وسیله قضیه مانده کوشی محاسبه می کنیم که بیان می کند برای هر تابع تحلیلی $f(z)$ از متغیر مختلط z ،

$$\oint f(z) dz = 2\pi i \sum_j R(z_j) \quad (19-4-36)$$

که \oint انتگرال گیری حول یک پربند بسته در صفحه مختلط z را نشان داده و $R(z_j)$ مانده قطب در نقطه z_j واقع در داخل پربند است.^۱

q را به عنوان یک متغیر مختلط می گیریم که فقط مقادیر حقیقی $-\infty$ تا $+\infty$ را در معادله (19-4-35) اتخاذ می کند.

تلاش می کنیم تا انتگرال تابع

$$w(q) = \frac{-i}{4\pi^2 r} \frac{e^{iqr} q}{k^2 + i\varepsilon - q^2} \quad (19-4-37)$$

را در امتداد محور حقیقی از $-\infty$ تا $+\infty$ محاسبه کنیم.

این تابع دارای قطب هایی است که در آن ها

$$k^2 + i\varepsilon - q^2 = 0$$

یا (تا مرتبه اول از ε)،

$$(k + q + i\eta)(k - q + i\eta) = 0 \quad (\eta \cong \varepsilon/2k) \quad (19-4-38)$$

است. این قطب ها در شکل (19-4-3) نشان داده شده است.

ما هنوز برای استفاده از قضیه کوشی آماده نیستیم چون یک پربند بسته نداریم. این پربند را به وسیله یک نیم دایره بزرگ C_ρ که شعاعش $\rho \rightarrow \infty$ میل می کند می بندیم. اکنون می توانیم قضیه کوشی را به کار ببریم. اما آیا کمیتی را که می خواستیم محاسبه کنیم تغییر داده ایم؟ خیر چون C_ρ وقتی $\rho \rightarrow \infty$ میل می کند در انتگرال سهمی ندارد. برای مشاهده این مطلب، روی C_ρ ، $q = \rho e^{i\theta}$ ، می نویسیم آنگاه

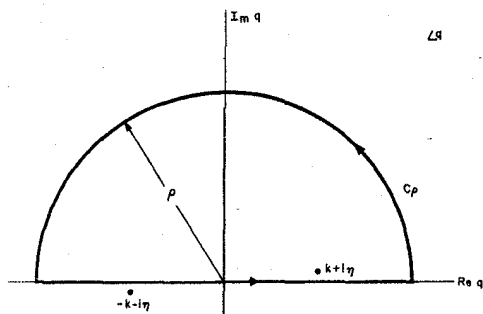
$$w(q) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} (\text{const}) \frac{e^{iqr}}{q} \quad (19-4-39)$$

۱- به خاطر بیاورید که اگر

$$f(z) \xrightarrow{z \rightarrow z_j} \frac{R(z_j)}{z - z_j}$$

آنگاه

$$R(z_j) = \lim_{z \rightarrow z_j} f(z)(z - z_j)$$



شکل ۱۹-۳: قطب های $W(q)$ در صفحه مختلط q . ما انتگرال در امتداد محور حقیقی از $-\infty$ تا $+\infty$ را می‌خواهیم. سهم امتداد C_ρ را (که وقتی ρ به بی نهایت می‌رود صفر می‌شود) به آن اضافه می‌کنیم تا پربند انتگرال گیری را جهت استفاده از قضیه کوشی ببندیم.

$$\int_{C_\rho} w(q) dq \sim \int_{C_\rho} e^{iqr} \frac{dq}{q} = \int_0^\pi e^{i\rho r(\cos\theta + i\sin\theta)} i d\theta \quad (40-4-19)$$

به جز برای ناحیه کوچک نزدیک $\theta = 0$ (که فقط سهم بسیار کوچکی دارد) انتگرال صفر می‌شود چون وقتی $\rho \rightarrow \infty$ میل می‌کند $e^{-\rho r \sin\theta} \rightarrow 0$ میل می‌کند. اینک از قضیه کوشی استفاده می‌کنیم. تنها قطب محاط شده در $q = k + i\eta$ قرار دارد. مانده در اینجا برابر است با

$$R(k + i\eta) = \lim_{q \rightarrow k + i\eta} (q - k - i\eta)w(q) = \frac{i}{8\pi^2 r} e^{i(k+i\eta)r} \quad (41-4-19)$$

$$G^0(r) = \lim_{\eta \rightarrow 0} 2\pi i R = -\frac{e^{ikr}}{4\pi r} \quad (42-4-19)$$

توجه کنید که اگر چه دستورالعمل $i\varepsilon \langle 0$ اتفاقاً در اینجا جواب صحیح به دست می‌دهد، روش‌های دیگری برای محاسبه انتگرال وجود دارند که در موارد دیگر می‌توانند مناسب باشند. برای مثال اگر $\varepsilon < 0$ انتخاب کنیم موجی خالصاً درون رونده به دست می‌آوریم چون η تغییر علامت می‌دهد و قطب نزدیک $q \cong -k$ به داخل پربند می‌رود.

اعتبار تقریب بورن

از آنجا که در تقریب بورن $\psi_k = e^{ikr'} + \psi_{sc}$ را با $e^{ikr'}$ در سمت راست انتگرال معادله (۱۷-۴-۱۹) جایگزین می‌کنیم، این تقریب فقط در صورتی تقریب خوبی است که در ناحیه $|r'| \leq r_0$ ، $|\psi_{sc}| \ll |e^{ikr'}|$ باشد. از آنجا که انتظار داریم ψ_{sc} نزدیک مبدا بزرگترین باشد. با استفاده از معادله (۱۷-۴-۱۹) برای محاسبه $\psi_{sc}(0)$ یک مقایسه در آنجا انجام می‌دهیم:

$$\frac{|\psi_{sc}(0)|}{|e^{ikz}(0)|} = |\psi_{sc}(0)| = \left| \frac{2\mu}{4\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ikr'}}{r'} V(r') e^{-ikr'} d^3r' \right| \quad (43-4-19)$$

فرض می‌کنیم $V(\mathbf{r}) = V(r)$ است در این مورد یک معیار تقریبی برای اعتبار تقریب بورن عبارت است از:

$$\frac{2\mu}{\hbar^2 k} \left| \int e^{ikr'} \sin kr' V(r') dr' \right| \ll 1 \quad (۴۴-۴-۱۹)$$

تمرین ۱۹-۴-۱: نامساوی (۴۴-۴-۱۹) را به دست آورید.

در انرژی‌های پایین، $kr' \rightarrow 0$ ، $e^{ikr'} \rightarrow 1$ ، $\sin kr' \rightarrow kr'$ و به شرط زیر می‌رسیم

$$\frac{2\mu}{\hbar^2} \left| \int r' V(r') dr' \right| \ll 1 \quad (۴۵-۴-۱۹)$$

اگر $V(r)$ دارای عمق مؤثر (یا ارتفاع) V_0 و برد r_0 باشد این شرط (با حذف ثابت‌های از مرتبه واحد) به شکل زیر در می‌آید:

$$\frac{\mu V_0 r_0^2}{\hbar^2} \ll 1 \quad (۴۶-۴-۱۹)$$

در انرژی‌های بالا، $kr \rightarrow \infty$ ، و تابع نمایی و سینوسی سریعاً نوسان می‌کنند. با شناسه فاز ثابت، آنها انتگرال را به ازای $r' \geq \pi/k$ قطع می‌کنند. لذا شرط مذکور باز هم با حذف ثابت‌های از مرتبه واحد می‌شود:

$$\frac{\mu}{\hbar^2 k} \left| \int V(r') dr' \right| \ll 1 \quad (۴۷-۴-۱۹)$$

یا با وارد کردن r_0^2 به هر دو طرف،

$$\frac{\mu V_0 r_0^2}{\hbar^2} \ll kr_0 \quad (۴۸-۴-۱۹)$$

شکل (۴۷-۴-۱۹) که بیان می‌کند $V_0 \ll T$ است در پایان بخش قبل به صورت شهودی به دست آمد. در اینجا می‌بینیم که تقریب بورن می‌تواند در صورتی که نامساوی (۴۶-۴-۱۹) برآورده شود حتی در انرژی‌های پایین خوب باشد. در واقع اگر آن نامساوی برآورده شود تقریب بورن در همه انرژی‌ها خوب خواهد بود یعنی معادله (۴۸-۴-۱۹) به طور خودکار برآورده می‌شود.

۱۹-۵- بسط موج جزئی

اشاره کرده‌ایم که اگر $V(\mathbf{r}) = V(r)$ باشد، $f(\theta, \phi) = f(\theta)$ خواهد شد. در واقع f تابعی از انرژی $E = \hbar^2 k^2 / 2\mu$ هم هست، اگر چه این وابستگی هرگز صریحاً نشان داده نشد. از آنجا که هر تابع θ می‌تواند بر حسب چند جمله‌ای‌های لژاندر بسط داده شود،

$$P_l(\cos \theta) = \left(\frac{4\pi}{2l+1} \right)^{1/2} Y_l^0 \quad (۱-۵-۱۹)$$

می‌توانیم $f(\theta, k)$ را بر حسب $P_l(\cos \theta)$ ها، با ضرایب وابسته به k بسط دهیم:

$$f(\theta, k) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) a_l(k) P_l(\cos \theta) \quad (2-5-19)$$

$a_l(k)$ دامنه موج جزئی نامیده می‌شود و دارای اهمیت زیر است: موج تخت فرودی e^{ikz} مرکب از حالت‌های همه تکانه‌های زاویه‌ای است [از معادله (۱۲-۶-۴۱)]:

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (3-5-19)$$

چون پتانسیل مذکور تکانه زاویه‌ای را پایسته نگه می‌دارد، هر مولفه تکانه زاویه‌ای به‌طور مستقل پراکنده می‌شود. دامنه a_l معیاری از پراکندگی در بخش (سکتور) l تکانه زاویه‌ای است.

در واقع بسط معادله (۱۹-۵-۲) کاری برای ما صورت نداده است: ما یک تابع از دو متغیر (k, θ) را با تعدادی نامتناهی از توابع $a_l(k)$ از متغیر k عوض کرده‌ایم. آنچه این بسط را مفید واقع می‌کند این است که در انرژی‌های پایین، فقط چند $a_l(k)$ اول تفاوت محسوسی با صفر دارند. در این مورد، به توصیف پراکندگی برحسب چند تابع a_0, a_1, \dots از یک متغیر رهنمون می‌شویم. بحث ذهنی زیر (تأیید شده به‌وسیله محاسبات صریح) ارائه می‌شود تا توضیح دهد که چرا پراکندگی به چند مقدار پایین l در k ی پایین محدود می‌شود. خروجی شتابدهنده، باریکه‌ای یکنواخت از ذراتی است که در جهت محور z حرکت می‌کنند. همه ذرات واقع در استوانه‌ای به شعاع ρ و ضخامت $d\rho$ (ρ پارامتر برخورد است) دارای تکانه

$$\hbar l \cong \hbar k \rho \quad (4-5-19)$$

هستند. اگر برد پتانسیل r_0 باشد ذرات با $r_0 > \rho$ به هدف «اصابت» نخواهند کرد لذا پراکندگی تا

$$l_{\max} = k \rho_{\max} \cong k r_0 \quad (5-5-19)$$

وجود خواهد داشت [بالعکس، با اندازه‌گیری l_{\max} (از وابستگی زاویه‌ای f) می‌توانیم برد پتانسیل را استنتاج کنیم].

تمرین ۱۹-۵-۱: نشان دهید که برای نوترونی با انرژی جنبشی 100 MeV که روی هسته‌ای ثابت فرود می‌آید، $l_{\max} = 2$ است (راهنمایی: برد نیروی هسته‌ای تقریباً یک فرمی (10^{-5} \AA) است. همین‌طور $\hbar c \cong 200 \text{ MeV}$ نکته‌ای مفید در فیزیک هسته‌ای است).

با داشتن پتانسیل $V(r)$ ، چطور $a_l(k)$ برحسب آن محاسبه می‌شود؟ به عبارت دیگر، a_l چگونه به جواب معادله شرودینگر برای تکانه زاویه‌ای l مربوط می‌شود؟ با در نظر گرفتن یک ذره آزاد شروع می‌کنیم. با استفاده از

$$j_l(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} \quad (6-5-19)$$

و از معادله (۱۹-۵-۳) و با استفاده از $i = e^{i\pi/2}$ می‌رسیم به

$$e^{ikz} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \left(\frac{e^{i(kr - l\pi/2)}}{r} - \frac{e^{-i(kr - l\pi/2)}}{r} \right) P_l(\cos \theta) \quad (7-5-19)$$

$$= \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left(\frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-(ikr-l\pi)}}{r} \right) P_l(\cos \theta) \quad (۸-۵-۱۹)$$

لذا در هر تکانه زاویه‌ای، امواج درون رو و برون رو با دامنه‌های یکسان داریم (فاز آنها به اندازه $l\pi$ فرق دارد چون حتی برای ذره آزاد پتانسیل سد گریز از مرکز دافع در $l \neq 0$ وجود دارد) جریان‌های احتمال مربوط به دو موج، مساوی و مخالف هستند.^۱ این مساوی بودن مورد انتظار است چون در این حالت پایا نباید شار احتمال خالص شارش کننده به درون ناحیه یا خروجی از آن وجود داشته باشد (این تعادل باید به‌طور جداگانه برای هر l اتفاق بیفتد، چون پراکندگی در هر l به‌واسطه پایستگی تکانه زاویه‌ای، مستقل است).

اگر یک پتانسیل روشن کنیم چه اتفاقی می‌افتد؟ وقتی $r \rightarrow \infty$ میل می‌کند توابع موج شعاعی به تابع موج ذره آزاد تبدیل می‌شوند اگر چه یک جابه‌جایی فاز $\delta_l(k)$ مربوط به پتانسیل می‌تواند وجود داشته باشد:

$$R_l(r) = \frac{U_l(r)}{r} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{A_l \sin[kr - l\pi/2 + \delta_l(k)]}{r} \quad (۹-۵-۱۹)$$

که A_l یک ثابت است. بنابراین

$$\psi_k(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^{\infty} A_l \frac{(e^{i(kr-l\pi/2+\delta_l)} - e^{-i(kr-l\pi/2+\delta_l)}) P_l(\cos \theta)}{r} \quad (۱۰-۵-۱۹)$$

برای پیدا کردن A_l ، توجه می‌کنیم که چون $V(r)$ فقط یک موج برون رو تولید می‌کند، امواج درون رو می‌بایست برای ψ_k و موج تخت $e^{ikz} = e^{ikr}$ یکی باشند. از مقایسه ضرایب e^{-ikr}/r در معادلات (۸-۵-۱۹) و (۱۰-۵-۱۹) داریم

$$A_l = \frac{2l+1}{2ik} e^{i(l\pi/2+\delta_l)} \quad (۱۱-۵-۱۹)$$

با قرار دادن این در معادله (۱۰-۵-۱۹) به

$$\psi_k(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [e^{ikr} e^{2i\delta_l} - e^{-i(kr-l\pi)}] P_l(\cos \theta) \quad (۱۲-۵-۱۹)$$

$$= e^{ikz} + \left[\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left(\frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} \right) P_l(\cos \theta) \right] \frac{e^{ikr}}{r} \quad (۱۳-۵-۱۹)$$

می‌رسیم. از مقایسه این با معادله (۲-۵-۱۹) داریم:

$$a_l(k) = \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} \quad (۱۴-۵-۱۹)$$

۱- یکبار دیگر آیا می‌توانیم از جریان مربوط به یک l معین و امواج درون رو و برون رو در یک l معین صحبت کنیم؟! بله، اگر l را حساب کنیم (که وقتی $r \rightarrow \infty$ میل می‌کند فقط قسمت شعاعی خواهد داشت) و روی همه زوایا انتگرال بگیریم، متعامد بودن P_l ها همه جملات تداخلی بین l های مختلف را حذف خواهد کرد. همین‌طور هیچ تداخلی بین امواج درون رو و برون رو وجود نخواهد داشت. [پاورقی مربوط به معادله (۱۳-۲-۱۹) را ببینید].

لذا برای محاسبه $a_l(k)$ ، باید جابه‌جایی فاز δ_l در تابع موج مجانبی محاسبه شود.

مقایسه معادلات (۱۹-۵-۱۲) و (۱۹-۵-۸) بیان می‌کند که اثر پتانسیل، الحاق کردن یک عامل فاز $e^{2i\delta_l}$ به موج برون‌رو است. این عامل جریان احتمال مربوط به آن را تغییر نمی‌دهد و تعادل بین جریان‌های کل درون‌رو و برون‌رو حفظ می‌شود. این به معنی نبودن پراکندگی نیست چون توزیع زاویه‌ای به وسیله این جابه‌جایی فاز تغییر می‌کند. به

$$S_l(k) = e^{2i\delta_l(k)} \quad (19-5-15)$$

عنصر ماتریس S موج جزئی یا ماتریس S برای تکانه زاویه‌ای l گفته می‌شود. به یاد بیاورید که ماتریس S همان حد $t \rightarrow \infty$ عملگر $U(t, -t)$ است بنابراین تابعی از هامیلتونی است. از آنجا که در این مسئله L پایسته است، S (مثل H) در ویژه پایه مشترک انرژی $(E = \hbar^2 k^2 / 2\mu)$ ، تکانه زاویه‌ای (l) ، و مولفه z تکانه زاویه‌ای $(m = 0)$ قطری خواهد بود. چون S یکانی است (به خاطر یکانی بودن U)، ویژه مقادیر آن $S_l(k)$ می‌بایست به شکل $e^{i\theta}$ باشند که در اینجا، $\theta = 2\delta_l$ است. اگر به پایه دیگری، مثلاً پایه $|\mathbf{p}\rangle$ ، برویم، $\langle \mathbf{p}' | S | \mathbf{p} \rangle$ ها هنوز عناصر یک ماتریس یکانی خواهند بود ولی دیگر قطری نخواهد بود چون \mathbf{p} فرایند پراکندگی پایسته نمی‌ماند. اگر $a_l(k)$ را به صورت

$$a_l(k) = \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} = \frac{e^{i\delta_l} \sin \delta_l}{k} \quad (19-5-16)$$

بازنویسی کنیم به

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) \quad (19-5-17)$$

می‌رسیم. سطح مقطع کل

$$\sigma = \int |f|^2 d\Omega$$

به وسیله

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (19-5-18)$$

داده می‌شود که از رابطه تعامد برای چند جمله‌ای‌های لژاندر،

$$\int P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) d(\cos \theta) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}$$

استفاده شده است. توجه کنید که δ مجموع سطح مقطع‌های جزئی در هر l است:

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l, \quad \sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (19-5-19)$$

هر δ_l دارای یک کران بالای δ_l^{\max} ، موسوم به کران یونیتاریتی، است

$$\sigma_l < \sigma_l^{\max} = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \quad (19-5-20)$$

این کران وقتی $\delta_l = n\pi/2$ ، با n فرد، باشد اشباع می شود.

با مقایسه معادلات (19-5-17) و (19-5-18) و با استفاده از $P_l(\cos\theta) = 1$ در $\theta = 0$ به

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im } f(0) \quad (19-5-21)$$

می رسم. این، قضیه اپتیکی نامیده می شود. اینکه یک رابطه بین سطح مقطع کل و دامنه مستقیم وجود دارد خیلی عجیب نیست. به این دلیل که: موج تخت فرودی یک چگالی جریان در جهت z همراه دارد که مقداری از آن در جهت های مختلف پراکنده می شود. این موضوع می بایست خود را در شکل یک کاهش در چگالی جریان در آنسوی هدف، یعنی در جهت $\theta = 0$ ، منعکس کند. این کاهش می تواند اتفاق بیفتد چون موج تخت فرودی و موج پراکنده شده در جهت مستقیم به طور ویرانگر تداخل می کنند. البته روشن نیست که چرا فقط قسمت موهومی $f(0)$ دخیل است یا عامل $4\pi/k$ از کجا می آید. برای مشخص شدن اینها باید تمرین 19-5-6 را انجام دهید.

نمونه ای از محاسبه δ_l : کره سخت

کره سختی را در نظر بگیرید که به وسیله پتانسیل زیر نمایش داده می شود

$$V(r) = \infty, \quad r < r_0 \\ = 0, \quad r > r_0 \quad (19-5-22)$$

اکنون اقدام به حل معادله شرودینگر شعاعی کرده، و با نگاهی به جواب در وضعیت $r \rightarrow \infty$ ، جابه جایی فاز را تعیین می کنیم. واضح است که تابع شعاعی (بهنجار نشده) $R_l(r)$ داخل $r \leq r_0$ صفر می شود. خارج از آن، با تابع ذره آزاد مشخص می شود:

$$R_l(r) = A_l j_l(kr) + B_l n_l(kr) \quad (19-5-23)$$

تابع n_l را نکه می داریم چون برای $r=0$ (منظم است) ضرایب A_l و B_l می بایست طوری انتخاب شوند که

$$R_l(r_0) = 0 \quad (19-5-24)$$

باشد تا پیوستگی تابع موج در $r = r_0$ تضمین شود. لذا

$$\frac{B_l}{A_l} = -\frac{j_l(kr_0)}{n_l(kr_0)} \quad (19-5-25)$$

از معادله (12-6-32)، که شکل مجانبی j_l و n_l را به دست می دهد،

$$R_l(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{kr} [A_l \sin(kr - l\pi/2) - B_l \cos(kr - l\pi/2)] \quad (19-5-26)$$

$$= \frac{(A_l^2 + B_l^2)^{1/2}}{kr} \left[\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) \right]$$

که در آن،

$$\delta_l = \tan^{-1} \left(\frac{-B_l}{A_l} \right) = \tan^{-1} \left[\frac{j_l(kr_0)}{n_l(kr_0)} \right] \quad (19-5-27)$$

برای نمونه [از معادله (۱۲-۶-۳۱)]،

$$\delta_0 = \tan^{-1} \left[\frac{\sin(kr_0)/kr_0}{-\cos(kr_0)/kr_0} \right] \quad (19-5-28)$$

$$= -\tan^{-1} \tan(kr_0)$$

$$= -kr_0$$

درک نتیجه آسان است: کره سخت تابع موج را به عقب رانده و آنرا وادار می کند تا نوسان های سینوسی اش را به جای $r=0$ از $r=r_0$ شروع کند. در حالت کلی، پتانسیل های دافع، جابه جایی های فاز منفی به دست می دهند (چون سرعت ذره را کم کرده و جابه جایی فاز در واحد طول را کاهش می دهند) در حالی که پتانسیل های جاذب جابه جایی های فاز مثبت به دست می دهند (به دلیلی برعکس فوق). این تناظر البته فقط در صورتی درست است که δ کوچک باشد، چون δ فقط بر مبنای (برحسب) π تعریف می شود. برای مثال اگر جابه جایی فاز $kr_0 = \pi$ باشد، a_0 صفر می شود و پراکندگی موج s - کره سخت متمرکز در مبداء را نمایش نمی دهد.

جابه جایی فاز کره سخت را وقتی $k \rightarrow 0$ میل می کند در نظر بگیرید. با استفاده از

$$j_l(x) \xrightarrow{x \rightarrow 0} x^{l+1}/(2l+1)!!$$

$$n_l(x) \xrightarrow{x \rightarrow 0} -x^{-(l+1)}(2l-1)!!$$

داریم

$$\tan \delta_l \cong \delta_l \propto (kr_0)^{2l+1} \quad (19-5-29)$$

این با انتظار شهودی مبنی بر اینکه در انرژی های پایین باید پراکندگی در حالت های با تکانه زاویه ای بالا ناچیز باشد توافق دارد. وابستگی δ_l به $(kr_0)^{2l+1}$ در انرژی های پایین برای هر پتانسیل معقولی درست است، که r_0 مقیاس طول و مشخص کننده برد است [چون هیچ تعریف سفت و سختی از برد وجود ندارد می توانیم برد هر پتانسیل را r_0 ی تعریف کنیم که در معادله (۱۹-۵-۲۹) ظاهر می شود]. توجه کنید که اگر چه $\delta_0 \propto k^{-1}$ است سطح مقطع جزئی صفر نمی شود چون وقتی $k \rightarrow 0$ میل می کند $\sigma_0 \propto k^{-2} \sin^2 \delta_l \sim k^{-2} \delta_l^2 \rightarrow 0$

تشدیدها

سطح مقطع جزئی δ_l عموماً در انرژی‌های پایین بسیار کوچک است. چون وقتی $k \rightarrow 0$ میل می‌کند $\delta_l \propto (k)^{2l+1}$ است. اما گاهی اتفاق می‌افتد که δ_l در یک گستره بسیار کوچک از k یا E بسیار سریع از 0 تا π [یا به طور کلی از $n\pi$ تا $(n+1)\pi$] زیاد می‌شود. در این ناحیه، نزدیک $k = k_0$ یا $E = E_0$ ، می‌شود δ_l را به شکل زیر بنویسیم:

$$\delta_l = \delta_b + \tan^{-1} \left(\frac{\Gamma/2}{E_0 - E} \right) \quad (۱۹-۵-۳۰)$$

که δ_b یک فاز زمینه یا پایه ($\cong n\pi$) است که بسیار کم تغییر می‌کند. سطح مقطع متناظر، با نادیده گرفتن δ_b عبارت است از:

$$\begin{aligned} \sigma_l &= \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l \\ &= \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \frac{(\Gamma/2)^2}{(E_0 - E)^2 + (\Gamma/2)^2} \end{aligned} \quad (۱۹-۵-۳۱)$$

δ_b به وسیله یک منحنی کاسه‌ای شکل (زنگ‌دیس)، موسوم به شکل بریت - ویگنر، با ارتفاع بیشینه σ_l^{\max} (کران یونیتری) و نیم پهنای $\Gamma/2$ توصیف شود، این پدیده تشدید نامیده می‌شود. در معادله (۱۹-۵-۳۱) برای δ_l ، که فقط نزدیک E_0 معتبر است، با Γ به عنوان یک ثابت رفتار کرده‌ایم. وابستگی آن به k می‌تواند با توجه به این مطلب نتیجه شود که وقتی $k \rightarrow 0$ میل می‌کند، [از معادله (۱۹-۵-۲۹)] داریم:

$$\sigma_l \sim \frac{1}{k^2} \sin^2 \delta_l \cong \frac{1}{k^2} \delta_l^2 \cong \frac{(kr_0)^{4l+2}}{k^2}$$

که اشاره می‌کند که

$$\Gamma/2 = (kr_0)^{2l+1} \gamma \quad (۱۹-۵-۳۲)$$

که در آن γ ثابتی با بعد انرژی است. لکن عبارت مربوط به σ_l که روی گستره وسیعتری معتبر است عبارتست از

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \frac{[\gamma(kr_0)^{2l+1}]^2}{(E - E_0)^2 + [\gamma(kr_0)^{2l+1}]^2} \quad (۱۹-۵-۳۳)$$

برای هر $l \neq 0$ در سراسر ناحیه انرژی - پایین به وسیله عامل k^{4l} خالص میرا می‌شود به جز نزدیک E_0 که در آنجا، یک عامل مشابه در مخرج، اثر آنرا خنثی می‌کند. واضح است که وقتی l زیاد می‌شود تشدیدها تیزتر می‌شوند. این وضعیت در $l = 0$ (که σ_0 شروع به غیر صفر شدن در $k = 0$ می‌کند) به پتانسیل بستگی دارد. در این مورد بعداً بیشتر صحبت می‌کنیم.

می‌خواهیم بصیرت بیشتری در مورد دینامیک تشدیدها کسب کنیم. پرسش ما این است که در وضعیت تشدید دقیقاً برحسب معادله شرودینگر زمینه چه اتفاقی می‌افتد؟ تصمیم داریم مسئله را از طریق ماتریس S تحلیل کنیم. نزدیک یک تشدید داریم:

$$S_l(k) = e^{2i\delta_l} = \frac{e^{i\delta_l}}{e^{-i\delta_l}} = \frac{1 + i \tan \delta_l}{1 - i \tan \delta_l} = \frac{E - E_0 - i\Gamma/2}{E - E_0 + i\Gamma/2} \quad (19-5-34)$$

اگر چه k و E در هر آزمایشی حقیقی هستند (و تاکنون در تحلیل ما)، اجازه دهید به $S_l(k)$ بی‌بندیشیم که تابعی از E یا k مختلط است. در این صورت می‌بینیم که تشدید با یک قطب در S_l در نقطه مختلط

$$E = E_0 - i\Gamma/2 \quad (19-5-35)$$

یا

$$k = k_0 - i\eta/2 \quad (19-5-36)$$

متناظر است که در آن $E_0 = \hbar^2 k_0^2 / 2\mu$ و $\Gamma = \eta \hbar^2 k_0 / \mu$ (برای η و Γ کوچک). چون Γ و η کوچک اند قطب خیلی نزدیک به محور حقیقی است و دلیل اعتماد ما به آن شکل از S_l است که نزدیک نقطه $E = E_0$ روی محور حقیقی معتبر است.

مفهوم ضمنی این گفته که تشدید با یک قطب (نزدیک) در $S_l(k)$ متناظر است چیست؟ برای پی بردن به این نگاه جدیدی به حالت‌های مقید برحسب ماتریس S می‌اندازیم. به خاطر بیاورید که برای k حقیقی و مثبت اگر

$$R_{kl}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{A e^{ikr}}{r} + \frac{B e^{-ikr}}{r} \quad (19-5-37)$$

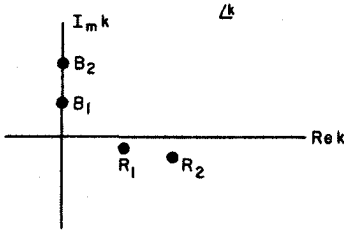
آنگاه [از معادلات (19-5-9) و (19-5-10) یا معادله (19-5-12)]

$$e^{2i\delta_l} = S_l(k) = \frac{A}{B} = \frac{\text{outgoing wave amplitude}}{\text{incoming wave amplitude}} \quad (19-5-38)$$

(صرف نظر از یک عامل ثابت i^{2l}). اینک $S_l(k)$ را برای k مختلط به صورت زیر تعریف می‌کنیم: معادله شعاعی را با k به عنوان یک عدد مختلط حل کرده و $R(r \rightarrow \infty)$ را به دست آورده و نسبت A/B را حساب کنید. حال مورد $k = i\kappa (\kappa > 0)$ را در نظر بگیرید که با E حقیقی و منفی متناظر است. در اینجا خواهیم دید که

$$R_{kl}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{A e^{-\kappa r}}{r} + \frac{B e^{\kappa r}}{r} \quad (19-5-39)$$

در حالی که $S_l(k = i\kappa)$ خوش تعریف است، $R_{k,l}$ مورد نظر ما نیست چون قابل بهنجارش نیست. اما یادآوری می‌شود که برای برخی مقادیر خاص k ، $R_{k,l}$ به طور نمایی میرا می‌شود و تابع موج یک حالت مقید را توصیف می‌کند. این حالت‌های مقید متناظر با k هایی هستند که $B = 0$ یا $S_l(k) = 0$ است. لذا قطب‌های $S_l(k)$ در $k = i\kappa$ با حالت‌های مقید متناظرند.



شکل ۱۹-۴: برخی از تکینگی‌های $S_l(k)$ در صفحه مختلط k ، نقطه‌های روی محور موهومی مثبت، نشان‌دهنده قطب‌های حالت مقید و نقاط زیر محور حقیقی نشانگر قطب‌های تشدید هستند. ناحیه قابل دسترس فیزیکی یا تجربی در امتداد محور حقیقی است که در آن S_l به شکل $e^{2i\delta_l}$ است.

بنابراین یک تشدید، که یک قطب در $k = k_0 - i\eta$ است می‌بایست نوعی حالت مقید باشد (شکل ۱۹-۴) را برای قطب‌های ماتریس S ببینید). استدلال ذهنی بدین صورت است که چون حالت مقید در $E = E_B$ (یک عدد منفی) دارای وابستگی زمانی

$$e^{-iE_B t/\hbar}$$

است، تشدید باید دارای وابستگی زمانی زیر باشد

$$e^{-i(E_0 - i\Gamma/2)t/\hbar} = e^{-iE_0 t/\hbar} e^{-\Gamma t/2\hbar}$$

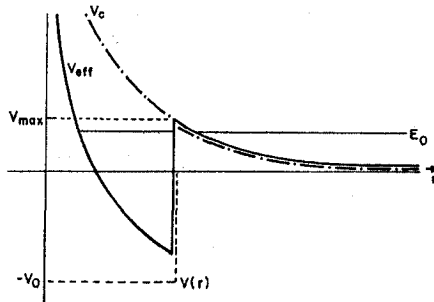
این حالتی با انرژی مثبت E_0 را توصیف می‌کند اما نرم آن با نیمه عمر $t \sim \hbar/\Gamma$ به طور نمایی افت می‌کند. لذا یک تشدید، متناظر با یک قطب در $E = E_0 - i\Gamma/2$ ، یک حالت مقید شبه پایدار با انرژی E_0 و طول عمر $t = \hbar/\Gamma$ را توصیف می‌کند.^۲

از این رو می‌بایست بفهمیم چطور یک ذره انرژی - مثبت موفق به تشکیل یک حالت مقید شبه پایدار می‌شود. حالتی را در نظر بگیرید که، مثل یک چاه مربعی به عمق V_0 و گستره r_0 ، $V(r)$ جاذب است. پتانسیلی که در معادله شعاعی ظاهر می‌شود $V_{eff} = V + V_c$ است که در آن V_c پتانسیل دافع گریز از مرکز است (شکل ۱۹-۵). نکته اصلی این است که V_{eff} در فواصل کوتاه، جاذب و در فواصل دور، دافع است. حال ذره‌ای را با انرژی $E_0 < V_{max}$ در نظر بگیرید به طوری که اگر تونل‌زنی نادیده گرفته شود، ذره می‌تواند یک حالت مقید درون ناحیه جاذب تشکیل دهد یعنی می‌توانیم درون آن تعداد درستی از نصف طول موج‌ها را جا دهیم. اما تونل‌زنی مسلماً وجود دارد و ذره می‌تواند به صورت ذره‌ای آزاد با انرژی E_0 به بی‌نهایت فرار کند. برعکس، یک ذره آزاد با انرژی E_0 وقتی به درون پتانسیل انداخته شود می‌تواند از سد نفوذ کرده و یک حالت مقید شبه پایدار تشکیل دهد و مجدداً به بیرون نشت کند. این وقتی است که می‌گوییم تشدید ایجاد شده است. این تصویر همچنین توضیح می‌دهد که چرا با افزایش l ، تشدیدها باریکتر می‌شوند: با افزایش l ، V_c زیاد می‌شود، تونل‌زنی متوقف شده و طول عمر حالت شبه پایدار زیاد می‌شود. همین طور می‌توان دید که چرا $l = 0$ متفاوت است: هیچ سد دافعی به واسطه V_c وجود ندارد. اگر $V = V_{eff}$ خالصاً جاذب باشد فقط حالت‌های مقید حقیقی ممکن هستند (انرژی منفی). نزدیکترین چیز به یک تشدید، تشکیل حالت مقید نزدیک

۱- این نتیجه ممکن است به سختی اثبات شود.

۲- انرژی دقیقاً E_0 نیست، چون اصل عدم قطعیت به ما اجازه نمی‌دهد تا انرژی دقیقی را برای یک حالت دارای طول عمر متناهی تعریف کنیم، E_0 انرژی میانگین است.

انرژی صفر است (تمرین ۱۹-۵-۴). اما اگر V خودش شکل V_{eff} شکل ۱۹-۵ را داشته باشد، تشدیدها امکان پذیر هستند.



شکل ۱۹-۵: یک پتانسیل نوعی که می تواند تشدیدها را تأیید کند. دافعه گریز از مرکز V_c (خط - نقطه چین) به علاوه پتانسیل جاذب واقعی (نقطه چین) پتانسیل موثر V_{eff} را به دست می دهد (خط کامل). این شکل مثالی را نشان می دهد که در آن می توانسته یک حالت مقید در E_0 باشد مگر اینکه تونل زنی وجود داشته باشد. اما به دلیل تونل زنی، ذره می تواند خارج شود (نشت کند) و به همین اعتبار، یک ذره می تواند با انرژی مثبت E_0 از بیرون آمده و یک حالت مقید شبه پایدار تشکیل دهد (با طول عمری که با احتمال تونل زنی نسبت عکس دارد) و سپس فرار کند. این، تشدید نامیده می شود.

تمرین ۱۹-۵-۲: معادله (۱۹-۵-۱۸) را به دست آورده و مراحل منجر به قضیه اپتیکی، معادله (۱۹-۵-۲۱)، را بنویسید.

تمرین ۱۹-۵-۳: الف- نشان دهید که برای یک کره سخت وقتی $k \rightarrow 0$ میل می کند، $\sigma_0 \rightarrow 4\pi r_0^2$.
ب- kr_0 خیلی بزرگ را در نظر بگیرید. از معادله (۱۹-۵-۲۷) و شکل های مجانبی j_l و n_l نشان دهید که

$$\sin^2 \delta_l \xrightarrow{kr_0 \rightarrow \infty} \sin^2(kr_0 - l\pi/2)$$

به طوری که

$$\begin{aligned} \sigma &= \sum_{l=0}^{l_{\max}=kr_0} \sigma_l \cong \frac{4\pi}{k^2} \int_0^{kr_0} (2l) \sin^2 \delta_l dl \\ &\cong 2\pi r_0^2 \end{aligned}$$

اگر که جمع روی l را با یک انتگرال، $2l + 1$ را با $2l$ و تابع نوسان کننده $\sin^2 \delta$ را با مقدار میانگین آن، $\frac{1}{2}$ ، تقریب بزنیم.

تمرین ۱۹-۵-۴: نشان دهید که جابه جایی فاز موج s - برای چاه مربعی به عمق V_0 و برد (گستره) r_0 برابر است با

$$\delta_0 = -kr_0 + \tan^{-1} \left(\frac{k}{k'} \tan k'r_0 \right)$$

که k' و k اعداد موج در درون و بیرون چاه هستند. برای k کوچک، kr_0 یک عدد کوچک است و آن را نادیده می گیریم. بینیم وقتی عمق چاه، یعنی k' ، را تغییر می دهیم چه اتفاقی برای δ_0 می افتد. نشان دهید

که هر وقت $k' \cong k'_n = (2n+1)\pi/2r_0$ باشد، δ_0 شکل تشدید می‌گیرد. با شروع از یک چاه که آنقدر کم عمق است که حالت مقید ندارد نشان دهید که k'_1 مربوط است به چاهی که در حال تکمیل کردن (آشکار کردن) اولین حالت مقید خود در انرژی صفر است (تمرین ۱۲-۶-۹ را ببینید) (توجه: یک حالت مقید انرژی - صفر به $k=0$ مربوط می‌شود). با عمیق تر شدن چاه این تراز به پایین حرکت کرده و طولی نخواهد کشید که در k'_2 ، حالت مقید انرژی - صفر دیگر تشکیل می‌شود و قس علی هذا.

تمرین ۱۹-۵-۵: نشان دهید که حتی اگر پتانسیلی ذرات را جذب کند می‌توانیم آنرا به وسیله

$$S_l(k) = \eta_l(k) e^{2i\delta_l}$$

توصیف کنیم، که $\eta (< 1)$ ضریب ناکشسانی است.
الف- با در نظر گرفتن جریان‌های احتمال نشان دهید که

$$\sigma_{inel} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [1 - \eta_l^2]$$

$$\sigma_{el} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (1 + \eta_l^2 - 2\eta_l \cos 2\delta_l)$$

و اینکه باز هم

$$\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k} \text{Im } f(0)$$

ب- یک «قرص سیاه» را در نظر بگیرید که به ازای $r \leq r_0$ هر چیزی را جذب کرده و فراتر از آن بی‌اثر است. آن را با $\eta = 0$ برای $l \leq kr_0$ و $\eta = 1$ و $\delta = 0$ برای $l > kr_0$ تصور کنید. نشان دهید که $\sigma_{el} = \sigma_{inel} \approx \pi r_0^2$ به جای جمع، انتگرال قرار داده و فرض کنید $1 \gg kr_0$ است (تمرین ۱۹-۵-۳) را ببینید). چرا همیشه σ_{el} با σ_{inel} همراه است؟

تمرین ۱۹-۵-۶ (قضیه اپتیکی): الف- نشان دهید که مولفه شعاعی چگالی جریان مربوط به تداخل بین امواج فرودی و پراکنده شده عبارتست از

$$j_r^{int} \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{r} \text{Im} \left[i e^{ikr(\cos\theta-1)} f^*(\theta) \cos\theta + i e^{ikr(1-\cos\theta)} f(\theta) \right]$$

ب- استدلال کنید که تا وقتی $\theta \neq 0$ است متوسط j_r^{int} روی هر زاویه فضایی کوچک، به دلیل $r \rightarrow \infty$ صفر است [فرض کنید $f(\theta)$ تابعی یکنواخت است].

ج- از j_r^{int} روی یک مخروط کوچک در جهت مستقیم انتگرال گرفته و نشان دهید که (راهنمایی را ببینید):

$$\int_{\text{forward cone}} j_r^{int} r^2 d\Omega = - \left(\frac{\hbar k}{\mu} \right) \frac{4\pi}{k} \text{Im } f(0)$$

از آنجا که j_{inc} برابر $\hbar k / \mu$ است، جریان «آنسوی» هدف برابر است با

$$\frac{\hbar k}{\mu} \left[1 - \frac{4\pi}{k} \text{Im } f(0) \right]$$

با مساوی قرار دادن اتلاف جریان با جریان رپوده شده به وسیله سطح مقطع کل σ ، قضیه ایتنکی را مجدداً به دست آورید (راهنمایی: چون θ کوچک است، از $\sin \theta \cong \theta$ ، $1 - \theta^2/2$ یا $\cos \theta = 1$ به تشخیص خودتان استفاده کنید). در محاسبه حد بالایی در انتگرال گیری از θ ، از ایده ارائه شده در فصل ۱ استفاده کنید یعنی اینکه حد تابعی که، هنگام میل شناسه اش به بی نهایت، نوسان می کند برابر با مقدار متوسط آن است).

۱۹-۶- پراکندگی دو- ذره ای

در این بخش خواهیم دید که چطور سطح مقطع دیفرانسیلی برای پراکندگی دو- ذره ای می تواند از جواب معادله شرودینگر برای مختصه نسبی با پتانسیل $V(\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ استخراج شود. با بررسی سطح مقطع های کل و دیفرانسیلی برای پراکندگی دو- جسمی شروع می کنیم. فرض کنید σ سطح مقطع کل برای پراکندگی دو ذره باشد. باریکه ای از پرتابه ها را با چگالی ρ_1 و بزرگی سرعت v_1 تصور کنید که با باریکه ای از هدف ها با پارامترهای ρ_2 و v_2 برخورد مستقیم می کنند. چند برخورد در هر ثانیه اتفاق خواهد افتاد؟ می دانیم که اگر فقط یک هدف در حال سکون موجود باشد،

$$\begin{aligned} \text{سطح / ثانیه / پرتابه های فرودی } \sigma \times \text{ ثانیه / تعداد برخوردها} \\ = \sigma \rho_1 v_1 \end{aligned} \quad (19-6-1)$$

در اینجا این نتیجه را تصحیح می کنیم تا لحاظ کنیم که: ۱- تعداد ρ_2 هدف در واحد حجم وجود دارد (فرض می شود ρ_2 آنقدر کوچک است که هدف ها از همدیگر به طور مستقل پراکنده می شوند) و ۲- هدف ها در حال حرکت به سمت پرتابه ها با سرعت نسبی $v_{rel} = v_1 + v_2$ هستند در نتیجه داریم

$$\begin{aligned} \text{حجم برهم کنش / ثانیه / تعداد برخوردها} \\ = \sigma \rho_1 (v_1 + v_2) \rho_2 \\ = \sigma \rho_1 \rho_2 v_{rel} \end{aligned} \quad (19-6-2)$$

توجه کنید که σ برای همه ناظرهایی که در امتداد محور باریکه - هدف حرکت می کنند یکسان است. در مورد سطح مقطع دیفرانسیلی چطور؟ این کمیت به چارچوب بستگی خواهد داشت. در چارچوب آزمایشگاه که در آن هدف ابتدا در حال سکون است در مقایسه با معادله (۱۹-۶-۲) تعریف می کنیم:

$$d(\cos \theta_L) d\phi_L = \frac{d\sigma}{d\Omega_L} d\Omega_L \rho_1 \rho_2 v_{rel} \quad (19-6-3)$$

در اینجا v_{rel} همان سرعت پرتابه و θ_L و ϕ_L زوایا در چارچوب آزمایشگاه هستند که نسبت به جهت پرتابه اندازه گیری می شوند (همچنین می توانیم یک $d\sigma/d\Omega_L$ برحسب اینکه چه تعداد ذرات هدف به درون $d\Omega_L$ پراکنده می شوند تعریف کنیم اما کمیت مستقلی نمی شود چون پایستگی تکانه سرنوشت هدف را با معلوم بودن سرنوشت پرتابه معین خواهد کرد) تنها چارچوب دیگری که در نظر می گیریم چارچوب مرکز

جرم است که در آن $(d\sigma/d\Omega)d\Omega$ به صورت معادله (۱۹-۶-۳) تعریف می شود. $d\sigma/d\Omega$ را به شرح زیر به $d\sigma/d\Omega_L$ مربوط می کنیم. آشکارسازی را در چارچوب آزمایشگاه با زاویه (θ_L, ϕ_L) تصور کنید که رو به زاویه $d\Omega_L$ قرار دارد. تعداد شمارش هایی که آشکارساز ثبت می کند یک کمیت مطلق مستقل از چارچوب است ولو اینکه سمت گیری آن و زاویه دریافت ممکن است از یک چارچوب به چارچوب دیگر بیزیر کند (برای مثال ذره های با زاویه ۹۰ درجه در چارچوب آزمایشگاه به طرف محور باریکه می آید در چارچوبی که به عقب می رود به سمت جلو کج خواهد شد) بنابراین با توجه به ناوردایی چارچوبی $\rho_1 \rho_2 v_{rel}$ از معادله (۱۹-۶-۲) تساوی زیر را نتیجه می گیریم:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_L} d\Omega_L = \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad (۱۹-۶-۴)$$

یا

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_L} = \frac{d\sigma}{d\Omega} \frac{d\Omega}{d\Omega_L} \quad (۱۹-۶-۵)$$

ابتدا محاسبه $d\sigma/d\Omega$ و سپس $d\sigma/d\Omega_L$ را انجام خواهیم داد. فرض کنید حالت دو ذره برخورد کننده را، زمان زیادی قبل از شروع به برهم کنش، با تابع موج حاصل ضرب (در یک چارچوب عام) زیر نمایش دهیم:

$$\psi_{inc} = e^{ik_1 r_1} e^{ik_2 r_2} \quad (۱۹-۶-۶)$$

باید به خاطر داشته باشیم که این امواج تخت، اشکال ایده آل سازی شده بسته موج های پهن هستند. با فرض اینکه هر دو در امتداد محور z حرکت می کنند،

$$\begin{aligned} \psi_{inc} &= e^{ik_1 z_1} e^{ik_2 z_2} \\ &= \exp \left[i(k_1 + k_2) \left(\frac{z_1 + z_2}{2} \right) \right] \exp \left[i \left(\frac{k_1 - k_2}{2} \right) (z_1 - z_2) \right] \\ &= \psi_{inc}^{CM}(z_{CM}) \psi_{inc}^{rel}(z) \end{aligned} \quad (۱۹-۶-۷)$$

چون پتانسیل فقط مختصه نسبی را تحت تاثیر قرار می دهد، این موج تخت، مرکز جرم را به طور کامل توصیف می کند؛ برای مرکز جرم به عنوان یک کل هیچ پراکندگی وجود ندارد. از طرف دیگر، یک موج پراکنده شده ظاهر خواهد کرد و خواهد شد:

$$\begin{aligned} \psi(z) &= e^{ikz} + \psi_{sc}(r) \\ &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ikz} + f(\theta, \phi) e^{ikr}/r \end{aligned} \quad (۱۹-۶-۸)$$

که در آن بالانویس «rel» را حذف کرده‌ایم چون شناسه z آن را روشن می‌کند، و $(k_1 - k_2)/2$ را مساوی k قرار داده‌ایم. لذا جواب ایستا برای کل سیستم عبارتست از

$$\psi_{\text{system}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi^{CM}(z_{CM}) [e^{ikz} + \psi_{sc}(\mathbf{r})] \quad (19-6-9)$$

$$\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \psi^{CM}(z_{CM}) [e^{ikz} + f(\theta, \phi) e^{ikr}/r]$$

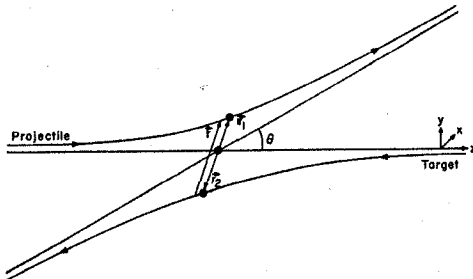
اگر به چارچوب مرکز جرم برویم، $\psi^{CM}(z_{CM}) = e^{i(k_1+k_2)z_{CM}} = 1$ چون $k_1 + k_2 = 0$ این چارچوب را تعریف می‌کنند. بنابراین می‌توانیم همه چیز را در مورد مختصه مرکز جرم فراموش کنیم. پراکندگی در چارچوب CM در شکل ۱۹-۶ نشان داده شده است. مسیرهای کلاسیکی قرار نیست در مفهوم لغوی تعبیر شوند، آنها صرفاً مختصه نسبی \mathbf{r} و مختصه‌های منفرد \mathbf{r}_1 (پرتابه) و \mathbf{r}_2 (هدف) را تعریف می‌کنند.

آنچه می‌خواهیم، آهنگی است که پرتابه با آن به درون $d\Omega$ پراکنده می‌شود. اما چون \mathbf{r}_1 موازی با \mathbf{r} است، این برابر آهنگی است که با آن ذرات پنداری (خیالی)، توصیف شونده به وسیله \mathbf{r} ، به درون زاویه فضایی $d\Omega$ پراکنده می‌شوند. این آهنگ را با حل معادله شرودینگر برای مختصه نسبی به دست می‌آوریم. با انجام این کار،

$$\psi(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ikz} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (19-6-10)$$

از معادله (۱۹-۲-۱۷) یادآوری می‌کنیم که آهنگ پراکندگی به درون $d\Omega$ برابر است با

$$R_{i \rightarrow d\Omega} = |f(\theta, \phi)|^2 \frac{\hbar k}{\mu} d\Omega \quad (19-6-11)$$



شکل ۱۹-۶: پراکندگی دو-جسمی در چارچوب CM. مختصه‌های پرتابه و هدف به ترتیب \mathbf{r}_1 و \mathbf{r}_2 هستند. مختصه نسبی $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ برای وضوح کمی در شکل جابه‌جا شده است. چون \mathbf{r}_1 و \mathbf{r}_2 همیشه موازی‌اند، احتمال اینکه پرتابه به $d\Omega$ پراکنده شود با احتمال اینکه ذره پنداری، که با \mathbf{r} توصیف می‌شود، به $d\Omega$ پراکنده شود یکسان است. برای به دست آوردن این احتمال دوم می‌بایست معادله شرودینگر را برای \mathbf{r} حل کنیم.

توجه کنید که این آهنگ بر واحد حجم برهم کنش هدف - باریکه است، چون چگالی احتمال برای CM، یک است. برای استخراج $d\sigma/d\Omega$ از $R_{i \rightarrow d\Omega}$ فوق به معادله (۱۹-۶-۳) بر می‌گردیم که $d\sigma/d\Omega$ را

تعریف می کند (با حذف اندیس L)، از آنجا که این تعریف فقط برای شاری از بسته موج ها معنی دارد و چون در اینجا با امواج تخت سرو کار داریم، تعداد پراکنده شده به $d\Omega$ در هر ثانیه را با احتمال شارش به $d\Omega$ در هر ثانیه و چگالی های ذرات ρ_1 و ρ_2 را با چگالی های احتمال باریکه های برخورد کننده جایگزین می کنیم. چون باریکه های برخورد کننده ($e^{ikz} = e^{ik(z_1 - z_2)} = e^{ikz_1} \cdot e^{-ikz_2}$) امواج تخت با مدول واحد هستند، $\rho_1 = \rho_2 = 1$ است. در مورد v_{rel} چطور؟ به یاد بیاورید که در چارچوب CM ،

$$m_1 v_1 = m_2 v_2$$

است. بنابراین

$$v_{rel} = v_1 + v_2 = v_1 \left(1 + \frac{m_1}{m_2} \right) = v_1 \left(\frac{m_2 + m_1}{m_2} \right) = m_1 v_1 \left(\frac{m_2 + m_1}{m_1 m_2} \right) \quad (19-6-12)$$

$$= \hbar k \left(\frac{m_2 + m_1}{m_1 m_2} \right) = \frac{\hbar k}{\mu}$$

لذا

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{R_{i \rightarrow d\Omega}}{\rho_1 \rho_2 (v_1 + v_2)} = \frac{|f|^2 (\hbar k / \mu)}{\hbar k / \mu} d\Omega$$

یا

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 \quad (19-6-13)$$

در نتیجه $d\sigma/d\Omega$ محاسبه شده در بخش های قبل برای پراکندگی ذره ای منفرد از پتانسیل $V(r)$ می تواند به عنوان سطح مقطع مرکز جرم CM برای دو جسم برهم کنش کننده از طریق پتانسیل $V(\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ تعبیر شود.

گذر به چارچوب آزمایشگاه

اینک گذر به چارچوب آزمایشگاه، یعنی محاسبه $d\sigma/d\Omega_L$ ، را بررسی می کنیم. حالت جرم- مساوی را در نظر گرفته و حالت جرم- غیر مساوی را به عنوان تمرین واگذار می کنیم. شکل ۱۹-۷ الف ذراتی را نشان می دهد که در چارچوب CM با تکانه های p و $-p$ در امتداد محور z به طرف هم می آیند. اگر \mathbf{p}' تکانه نهایی پرتابه باشد،

$$\tan \theta = \frac{(p_x'^2 + p_y'^2)^{1/2}}{p_z'} \equiv \frac{p'_\perp}{p'_z} \quad (19-6-14 \text{ الف})$$

$$\tan \phi = p'_y / p'_x \quad (19-6-14 \text{ ب})$$

برای رفتن به چارچوب آزمایشگاه می‌بایست با سرعت p/m به سمت چپ حرکت کنیم. در این چارچوب، همه تکانه‌ها در جهت z (فقط) به اندازه p افزایش پیدا می‌کنند (لذا هدف T ، قبل از برخورد در حالت سکون خواهد بود). زوایای پراکندگی در چارچوب آزمایشگاه با

$$\tan \theta_L = p'_z / (p'_x + p) \quad (19-6-15 \text{ الف})$$

$$\tan \phi_L = p'_y / p'_x \quad (19-6-15 \text{ ب})$$

مشخص می‌شوند. از مقایسه معادلات (19-3-14) و (19-3-15) داریم

$$\phi_L = \phi$$

$$\begin{aligned} \tan \theta_L &= \frac{p'_z}{p'_x + p} = \frac{p'_z/p}{p'_x/p + 1} = \frac{\sin \theta}{\cos \theta + 1} \quad (19-6-16) \\ &= \tan(\theta/2) \quad (\text{using } |p'| = p) \end{aligned}$$

بنابراین

$$\theta_L = \theta/2 \quad (19-6-17)$$

یکی از پیامدهای این نتیجه این است که $\theta_L \leq \pi/2$ است. با داشتن معادلات (19-6-16) و (19-6-17) ربط دادن $d\sigma/d\Omega$ به $d\sigma/d\Omega_L$ کار ساده‌ایست.

تمرین ۱۹-۶-۱: الف- با شروع از معادلات (19-6-16) و (19-6-17) نشان دهید که رابطه بین $d\sigma/d\Omega$ به $d\sigma/d\Omega_L$ به صورت زیر است

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\theta_0} = \left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{2\theta_0} 4 \cos \theta_0$$

ب- با استفاده از بایستگی انرژی و تکانه نشان دهید که $\theta_L \leq \pi/2$ است.

ج- برای پراکندگی جرم‌های نامساوی، نشان دهید که

$$\tan \theta_L = \frac{\sin \theta}{\cos \theta + (m_1/m_2)}$$

که m_2 جرم هدف است.

پراکندگی ذرات یکسان

پراکندگی دو بوزون اسپین - صفر یکسان را در چارچوب مرکز جرمشان در نظر بگیرید. این دو ذره را باید با تابع موج متقارن شده توصیف کنیم. تحت تعویض $\mathbf{r}_1 \leftrightarrow \mathbf{r}_2$ ؛ $\mathbf{r}_{CM} = \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2/2$ ناورد است در حالی که $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ تغییر علامت می‌دهد. بنابراین $\psi^{CM}(\mathbf{r}_{CM})$ به طور خودکار متقارن است. $\psi(\mathbf{r})$ را باید دستی متقارن کنیم:

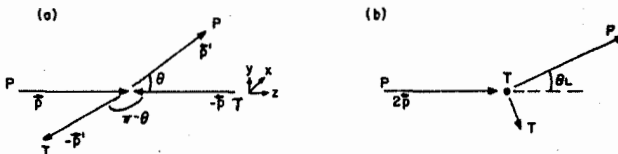
$$\Psi_{\text{sym}}(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} (e^{ikz} + e^{-ikz}) + [f(\theta, \phi) + f(\pi - \theta, \phi + \pi)] e^{ikr} / r \quad (19-6-19)$$

از این مطلب استفاده کرده‌ایم که تحت $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ ، $\theta \rightarrow \pi - \theta$ و $\phi \rightarrow \phi + \pi$ می‌رود. لذا دامنه پراکندگی به صورت زیر است

$$f_{\text{sym}}(\theta, \phi) = f(\theta, \phi) + f(\pi - \theta, \phi + \pi) \quad (19-6-19)$$

توجه کنید که f_{sym} با این موضوع که چون ذرات یکسانند نمی‌توان گفت که کدامیک به (θ, ϕ) و کدامیک به $(\pi - \theta, \phi + \pi)$ پراکنده می‌شوند سازگار است (شکل ۱۹-۷). سطح مقطع دیفرانسیلی برابر است با

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= |f(\theta, \phi) + f(\pi - \theta, \phi + \pi)|^2 \\ &= |f(\theta, \phi)|^2 + |f(\pi - \theta, \phi + \pi)|^2 + 2\text{Re}[f(\theta, \phi)f^*(\pi - \theta, \phi + \pi)] \end{aligned} \quad (19-6-20)$$



شکل ۱۹-۷: الف - برخورد دو جرم مساوی در چارچوب مرکز جرم. برجسب‌های P و T مربوط به پرتابه و هدف هستند. زاویه ϕ در شکل $\pi/2$ است. (ب) - همان برخورد در چارچوب آزمایشگاه (T ابتدا در حالت سکون است).

دو جمله اول، جملاتی هستند که اگر دو ذره قابل تمییز می‌داشتیم و آهنگی را که یکی یا دیگری به درون $d\Omega$ می‌رود را می‌خواستیم به دست می‌آوردیم. جمله سوم تداخل کوانتوم مکانیکی متداول است که با ذرات یکسان همراه است. دو ویژگی آموزنده در معادله (۱۹-۶-۲۰) وجود دارد:

(۱) - برای به دست آوردن σ باید روی 2π رادیان انتگرال بگیریم نه 4π رادیان (وگرنه، هر رویداد تمییز پذیر را دوبار به حساب خواهیم آورد).

(۲) - به یاد بیاورید که وقتی سطح مقطع رادرفورد را با گرفتن حد $\mu_0 \rightarrow 0$ از سطح مقطع بوکاوا به دست آوردیم به جواب صحیح رسیدیم اگر چه $f(\theta)$ درست نبود: چون عامل فاز نمایی را، که ناشی از بحث دقیق پتانسیل کولنی بود، شامل نمی‌شد [معادله (۱۹-۳-۱۶)] و جملات بعد از آن را بینید. وقتی پراکندگی کولنی بوزون‌های یکسان (مثلاً با بار e) را در نظر می‌گیریم جملات تداخلی، بی‌کفایتی روش $\mu_0 = 0$ را نشان می‌دهند. سطح مقطع صحیح عبارتست از:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{e^2}{4E} \right)^2 \left[\frac{1}{\sin^4 \theta/2} + \frac{1}{\cos^4 \theta/2} + \frac{2 \cos(\gamma \ln \tan^2 \theta/2)}{\sin^2 \theta/2 \cos^2 \theta/2} \right] \quad (19-6-21)$$

در حالی که ترفند $\mu_0 = 0$ عامل $\cos(\gamma \ln \tan^2 \theta/2)$ را نمی‌داد (بحث کلاسیکی رادرفورد ابداً جمله سوم را به دست نمی‌داد. اما توجه کنید که وقتی $\hbar \rightarrow 0$ میل می‌کند، این جمله شدیداً نوسان می‌کند و متوسط آن روی هر آشکارساز واقعی صفر می‌شود).

اینک پراکندگی دو فرمیون اسپین $-\frac{1}{2}$ یکسان، مثلاً دو الکترون، را در نظر بگیرید. اجازه دهید فرض کنیم که متغیرهای اسپینی نظاره کننده‌هایی باشند که فقط در آمار نقش دارند: در حالت سه‌تایی، تابع فضایی پاد متقارن است در حالی که تک‌تایی متقارن است. اگر فرض شود که الکترون‌ها با مقادیر s_z تصادفی می‌آیند، سه‌تایی سه برابر محتمل‌تر از تک‌تایی بوده و سطح مقطع متوسط خواهد شد:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} = & \frac{3}{4} |f(\theta, \phi) - f(\pi - \theta, \phi + \pi)|^2 \\ & + \frac{1}{4} |f(\theta, \phi) + f(\pi - \theta, \phi + \pi)|^2 \end{aligned} \quad (19-6-22)$$

برای پراکندگی کولنی الکترون‌ها، این مقدار خواهد شد:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{e^2}{4E}\right)^2 \left[\frac{1}{\sin^4 \theta/2} + \frac{1}{\cos^4 \theta/2} - \frac{\cos(\gamma \ln \tan^2 \theta/2)}{\sin^2 \theta/2 \cos^2 \theta/2} \right] \quad (19-6-23)$$

تمرین ۱۹-۶-۲: معادله (۱۹-۶-۲۱) را با استفاده از معادله (۱۹-۳-۱۶) برای $f_c(\theta)$ به دست آورید.

تمرین ۱۹-۶-۳: با فرض $f = f(\theta)$ نشان دهید که برای فرمیون‌ها در حالت سه‌تایی، $(d\sigma/d\Omega)_{\pi/2} = 0$.

مکانیک کوانتومی غیرنسبیتی که در فصول قبل بحث و بررسی شده وقتی برای مسائلی نظیر اتم هیدروژن که در آن سرعت نوعی (به زبان نیمه کلاسیکی) نسبت به c کوچک است بسیار موفق است (یادآوری: در حالت پایه $v/c = \beta = \alpha \cong 1/137$). اما حتی در این مورد تصحیحات قابل اندازه گیری (ساختار ریز) از مرتبه $(v/c)^4$ وجود دارند که باید به طور دستی در آن قرار گیرند. اگر این تصحیحات قرار باشد به طور طبیعی ظاهر شده و سیستم های نسبیتی (مثلاً اتم های Z -بالا) خوب توصیف شوند واضح است که معادله ای برای الکترون نیاز داریم که نسبیت از ابتدا در آن شکل گرفته باشد. چنین معادله ای توسط دیراک کشف شد و ما آن را با این هدف اصلی مطالعه می کنیم که ظهور منسجم چند مفهومی را که به طور جداگانه در مراحل مختلف معرفی شدند، از جمله اسپین الکترون، گشتاور مغناطیسی آن ($g = 2$)، تصحیحات اسپین-مدار، و دیگر تصحیحات ساختار ریز، ببینیم.

۲۰-۱- معادله دیراک ذره آزاد

ساده ترین حالت، یعنی ذره آزاد را در نظر می گیریم. با بیان رابطه بین مکانیک کلاسیک و معادله شرودینگر ذره آزاد شروع می کنیم تا حدی که تعمیم را تسهیل کند. اگر با رابطه غیر نسبیتی زیر شروع کرده

$$\mathcal{H} = \frac{|p|^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} \quad (1-1-20)$$

و جانشینی زیر را انجام دهیم

$$p \rightarrow P$$

$$\mathcal{H} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (2-1-20)$$

و دو طرف را روی بردار حالت $|\psi\rangle$ اثر دهیم به معادله شرودینگر می رسیم

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \frac{P^2}{2m} |\psi\rangle \quad (3-1-20)$$

نقطه شروع طبیعی برای معادله نسبیتی، رابطه متناظر مربوط به انیشتین است

$$\mathcal{H} = (c^2 p^2 + m^2 c^4)^{1/2} \quad (4-1-20)$$

اگر جانشینی مذکور در بالا را انجام دهیم داریم

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = (c^2 P^2 + m^2 c^4)^{1/2} |\psi\rangle \quad (۵-۱-۲۰)$$

این معادله مطلوب نیست چون رفتار نامتقارن با فضا و زمان دارد. برای دیدن این مطلب، ابتدا به پایه تکانه می‌رویم که در آن \mathbf{P} همان \mathbf{p} است و ریشه دوم می‌تواند به صورت سری بسط داده شود:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{p}, t)}{\partial t} = mc^2 \left(1 + \frac{p^2}{2m^2 c^2} - \frac{p^4}{8m^4 c^4} + \dots \right) \psi(\mathbf{p}, t) \quad (۶-۱-۲۰)$$

حال اگر به پایه مختصه تبدیل کنیم، هر p^2 ، $-\hbar^2 \nabla^2$ می‌شود و بی‌تقارنی بین فضا و زمان ظاهر می‌شود. آنچه می‌خواهیم معادله‌ای است که نسبت به فضا و زمان از یک مرتبه باشد. دو راه وجود دارد. یک راه این است که معادله (۴-۱-۲۰) را با

$$\mathcal{H}^2 = c^2 p^2 + m^2 c^4 \quad (۷-۱-۲۰)$$

جایگزین کرده و با جانشینی عملگر معادله زیر را به دست آوریم

$$\frac{\partial^2 |\Psi\rangle}{\partial t^2} = \left(-\frac{c^2 P^2}{\hbar^2} - \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} \right) |\Psi\rangle \quad (۸-۱-۲۰ \text{ الف})$$

در پایه مختصه معادله فوق به صورت زیر می‌شود

$$\left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \left(\frac{mc^2}{\hbar} \right)^2 \right] \Psi = 0 \quad (۸-۱-۲۰ \text{ ب})$$

این معادله، معادله کلایین-گوردون نامیده می‌شود و تقارن مورد نظر را بین فضا و زمان دارد. اما عقب‌تر می‌رویم چون Ψ در اینجا یک نرده‌ای است و نمی‌تواند الکترون را توصیف کند. هر چند که نامزد خوبی برای پیون‌ها، کائون‌ها و غیره، که بدون اسپین هستند، است.

روش دیگر، منسوب به دیراک، به شرح زیر است: فرض کنیم که کمیت زیر رادیکال در معادله (۱-۲۰) را بتوانیم به صورت یک مربع کامل کمیتی بنویسیم که نسبت به \mathbf{P} خطی است. در این صورت می‌توانیم ریشه دوم گرفته (که هامیلتونی ما را به دست خواهد داد) و معادله‌ای به دست آوریم که نسبت به فضا و زمان از مرتبه اول است. بنابراین می‌نویسیم

$$c^2 P^2 + m^2 c^4 = (c\alpha_x P_x + c\alpha_y P_y + c\alpha_z P_z + \beta mc^2)^2 \quad (۹-۱-۲۰)$$

$$= (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{P} + \beta mc^2)^2$$

که $\boldsymbol{\alpha}$ و β باید با تطبیق دو طرف

$$c^2 (P_x^2 + P_y^2 + P_z^2) + m^2 c^4$$

$$= [c^2 (\alpha_x^2 P_x^2 + \alpha_y^2 P_y^2 + \alpha_z^2 P_z^2) + \beta^2 m^2 c^4]$$

$$+ [c^2 P_x P_y (\alpha_x \alpha_y + \alpha_y \alpha_x) + \text{and cyclic permutations}]$$

$$+ [mc^3 P_x (\alpha_x \beta + \beta \alpha_x) + x \rightarrow y + x \rightarrow z]$$

(۱۰-۱-۲۰)

تعیین می‌شوند (فرض کرده‌ایم که α و β مستقل از فضا هستند که برای ذره آزاد فرض معقولی است). این معادلات بیان می‌کند که

$$\begin{aligned} \alpha_i^2 = \beta^2 = 1 \quad (i=x, y, z) \\ \alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = [\alpha_i, \alpha_j]_+ = 0 \quad (i \neq j) \\ \alpha_i \beta + \beta \alpha_i = [\alpha_i, \beta]_+ = 0 \end{aligned} \quad (11-1-20)$$

واضح است که α و β اعداد c نیستند. آنها ماتریس هستند و به علاوه هرمیتی (به طوری که هامیلتونی $H = c\alpha \cdot P + \beta mc^2$ هرمیتی است)، بدون رد (رد صفر) و دارای ویژه مقادیر ± 1 هستند (نتایج تمرین ۱-۸-۸ را به خاطر بیاورید). همین طور اگر قرار باشد دو ویژگی آخر سازگار باشند آنها باید دارای بُعد زوج باشند. آنها ماتریس های 2×2 هم نمی‌توانند باشند چون همان‌طور که در تمرین ۱۴-۳-۸ دیدیم، مجموعه سه ماتریس پائولی با این ویژگی‌ها نمی‌توانند توسعه یابند تا یک ماتریس چهارم را هم در بر بگیرند. لذا آنها باید ماتریس های 4×4 باشند. آنها منحصر به فرد نیستند (چون $\alpha \rightarrow S^+ \alpha S$ ، اگر S یکانی باشد $\beta \rightarrow S^+ \beta S$ ویژگی مورد نظر را حفظ می‌کند) غالباً چهار ماتریس زیر به کار می‌روند و ما نیز از آنها استفاده خواهیم کرد:

$$\alpha = \begin{bmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{bmatrix}, \quad \beta = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{bmatrix} \quad (12-1-20)$$

σ و I ماتریس های 2×2 هستند. اینک معادله دیراک را داریم:

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = (c\alpha \cdot P + \beta mc^2) |\psi\rangle \quad (13-1-20)$$

که α و β معلومند. بعد از این منحصراً در پایه مختصه کار می‌کنیم اما از قرار داد خود فاصله گرفته و نماد P را، که برای عملگر تکانه در شکل مجرد به کار می‌رفت، برای نمایش آن در پایه مختصه (به جای استفاده از $-i\hbar \nabla$) استفاده می‌کنیم این کار برای ساده کردن نمادگذاری در ادامه کار صورت می‌گیرد. اینکه α و β در

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = (c\alpha \cdot P + \beta mc^2) \psi \quad (14-1-20)$$

ماتریس های 4×4 هستند اشاره می‌کند که ψ یک موجود چهار مؤلفه‌ای است و اسپینور لورنتز نامیده می‌شود. واکنش ما آمیخته است. ما خوشحالیم که نسبت، به علاوه این شرط که معادله نسبت به زمان و فضا مرتبه اول باشد، به طور طبیعی به یک تابع موج چند مؤلفه‌ای منجر شده است اما ناراحت هستیم که ψ به جای دو مؤلفه، چهار مؤلفه دارد. در دو بخش بعدی خواهیم دید که چطور، علی‌رغم این مشکل آشکار، معادله دیراک الکترون‌ها را توصیف می‌کند.

برای استفاده بعدی توجه کنید که چون هامیلتونی هرمیتی است، ثرم حالت پایسته است. در پایه مختصه این بدین معنی است که

۱- برای مثال β یک ماتریس قطری 4×4 است که دو درایه اول آن $+1$ و دو درایه بعدی -1 هستند.

$$\int \psi^\dagger \psi d^3\mathbf{r} = \text{const} \quad (15-1-20)$$

درست مثل مورد غیر نسبیته، این قانون پایستگی کلی، نسخه موضعی هم دارد (تمرین زیر را ببینید).
تمرین ۱-۱-۲۰: معادله پیوستگی

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$$

را به دست آورید، که در آن $P = \psi^\dagger \psi$ و $\mathbf{j} = c\psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \psi$ است.

۲-۲۰- برهمکنش الکترومغناطیسی ذره دیراک

در این بخش اصلی، می‌بینیم که چگونه و چگونه ویژگی الکترون به‌طور طبیعی از معادله دیراک بیرون می‌آیند. به عنوان گام اول، ذره را به پتانسیل (\mathbf{A}, ϕ) جفت می‌کنیم. سپس معادله را تا مرتبه $(v/c)^2$ در نظر گرفته و نشان می‌دهیم که ذره می‌تواند به وسیله یک تابع موج دو-مؤلفه‌ای توصیف شود و دارای $g = 2$ است. سرانجام معادله را تا مرتبه $(v/c)^4$ در نظر گرفته و می‌بینیم که ساختار ریز بیرون می‌آید. جفت‌شدگی پتانسیل‌های الکترومغناطیسی توسط هامیلتونی کلاسیکی برای ذره‌ای با بار q بیان می‌شود:

$$\mathcal{H} = [(\mathbf{p} - q\mathbf{A}/c)^2 c^2 + m^2 c^4]^{1/2} + q\phi \quad (1-2-20)$$

که منجر می‌شود به

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = [c\boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{P} - q\mathbf{A}/c) + \beta mc^2 + q\phi] \psi \quad (2-2-20)$$

گشتاور مغناطیسی و اسپین الکترون

برای مشاهده ظهور این دو جنبه، می‌توانیم $\phi = 0$ قرار داده و تا مرتبه $(v/c)^2$ کار کنیم. اگر به دنبال ویژه حالت‌های انرژی

$$\psi(t) = \psi e^{-iEt/\hbar}$$

معادله (۲-۲-۲۰) باشیم می‌رسیم به

$$E\psi = (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\pi} + \beta mc^2)\psi \quad (3-2-20)$$

که در آن،

$$\boldsymbol{\pi} = \mathbf{P} - q\mathbf{A}/c \quad (4-2-20)$$

عملگر تکانه جنبشی ($m\mathbf{v}$) است. حال ψ را به صورت زیر می‌نویسیم

$$\psi = \begin{bmatrix} \chi \\ \Phi \end{bmatrix} \quad (۵-۲-۲۰)$$

که χ و Φ اسپینورهای دو-مؤلفه‌ای هستند. معادله (۲۰-۲-۳)، وقتی α و β صریحاً نوشته شوند، به صورت زیر در می‌آید:

$$\begin{bmatrix} E - mc^2 & -c\sigma \cdot \pi \\ -c\sigma \cdot \pi & E + mc^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \chi \\ \Phi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (۶-۲-۲۰)$$

که بدین معنی است که

$$(E - mc^2)\chi - c\sigma \cdot \pi \Phi = 0 \quad (۷-۲-۲۰)$$

و

$$(E + mc^2)\Phi - c\sigma \cdot \pi \chi = 0 \quad (۸-۲-۲۰)$$

معادله دوم بیان می‌کند که

$$\Phi = \left(\frac{c\sigma \cdot \pi}{E + mc^2} \right) \chi \quad (۹-۲-۲۰)$$

جمله داخل کروشه را در سرعت‌های پایین بررسی می‌کنیم. مخرج آن عبارتست از

$$E + mc^2 = E_S + 2mc^2 \quad (۱۰-۲-۲۰)$$

که $E_S = E - mc^2$ آن انرژی هست که در معادله شرویدینگر ظاهر می‌شود. در سرعت‌های پایین، چون $E_S \ll mc^2$ است^۱

$$E + mc^2 \cong 2mc^2 \quad (۱۱-۲-۲۰)$$

صورت از مرتبه mc است که در آن mv تکانه نوعی حالت است. بنابراین

$$\left| \frac{\Phi}{\chi} \right| \cong \frac{1}{2} \left(\frac{v}{c} \right) \ll 1 \quad (۱۲-۲-۲۰)$$

به همین دلیل χ و Φ به ترتیب مؤلفه‌های بزرگ و کوچک نامیده می‌شوند. این نامگذاری البته فقط در حوزه غیرنسبیتی مناسب است. در این حوزه،

$$\Phi \cong \frac{\sigma \cdot \pi}{2mc} \chi \quad (۱۳-۲-۲۰)$$

و معادله (۲۰-۲-۷) می‌شود

۱- $E_S = T + V = \frac{\pi^2}{2m} + V \cong \alpha \left(\frac{\pi^2}{m} \right) = mv^2$, $\frac{E_S}{mc^2} \cong \left(\frac{v}{c} \right)^2 \ll 1$

$$E_S \chi = c \sigma \cdot \pi \Phi = \frac{(\sigma \cdot \pi)(\sigma \cdot \pi)}{2m} \chi \quad (14-2-20)$$

این معادله، معادله پائولی نامیده می‌شود.^۱ اگر از اتحاد

$$\sigma \cdot \mathbf{A} \sigma \cdot \mathbf{B} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + i \sigma \cdot \mathbf{A} \times \mathbf{B} \quad (15-2-20)$$

و

$$\pi \times \pi = \frac{iq\hbar}{c} \mathbf{B} \quad (16-2-20)$$

استفاده کنیم داریم

$$\left[\frac{(\mathbf{P} - q\mathbf{A}/c)^2}{2m} - \frac{q\hbar}{2mc} \sigma \cdot \mathbf{B} \right] \chi = E_S \chi \quad (17-2-20)$$

بدیهی است که این معادله، ذره‌ای با اسپین $-\frac{1}{2}$ و $g = 2$ را توصیف می‌کند و لذا مختص الکترون‌هاست. (با اینکه $g = 2$ خیلی طبیعی از معادله دیراک ظاهر می‌شود، درست نیست بگوییم که برای رسیدن به این نتیجه به نسبت نیاز داریم. اگر معادله شرودینگر ذره آزاد را به صورت

$$\frac{(\sigma \cdot \mathbf{P})^2}{2m} \chi = E_S \chi$$

بنویسیم [چون $(\sigma \cdot \mathbf{P}) = P^2$] و سپس پتانسیل برداری \mathbf{A} را طبق دستور مکانیک غیر نسبیتی $(\mathbf{P} \rightarrow \mathbf{P} - q\mathbf{A}/c)$ به آن ارتباط دهیم به $g = 2$ می‌رسیم. البته اسپین در اینجا بصورت مصنوعی وارد می‌شود اما $g = 2$ این طور نیست. تمرین ۲۰-۲-۱: معادله (۱۶-۲-۲) را به دست آورید.

تمرین ۲۰-۲-۲: ترازهای انرژی دقیق ذره دیراک را در یک میدان مغناطیسی یکنواخت $\mathbf{B} = B_0 \hat{k}$ به دست آورید. فرض کنید $\mathbf{A} = B_0/2(-y\hat{i} + x\hat{j})$ است. از تمرین ۱۲-۳-۸ کمک بگیرید (معادله را برای χ بنویسید).

ساختار ریز هیدروژن

اینک معادله دیراک را برای مورد

$$V = e\phi = -e^2/r \quad (18-2-20)$$

مثلاً الکترون در اتم هیدروژن، به کار می‌بریم (فرض می‌شود پروتون ثابت باشد یعنی بی‌نهایت سنگین). مولفه‌های کوچک و بزرگ از معادلات جفت شده زیر پیروی می‌کنند:

۱- در واقع معادله پائولی. نسخه وابسته به زمان، با $i\hbar \dot{\chi}$ در سمت چپ، است.

$$(E - V - mc^2)\chi - c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P}\Phi = 0 \quad (19-2-20)$$

$$(E - V + mc^2)\Phi - c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P}\chi = 0 \quad (20-2-20)$$

دومی بیان می کند که

$$\Phi = (E - V + mc^2)^{-1} c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P}\chi \quad (21-2-20)$$

(چون \mathbf{P} می تواند از V مشتق بگیریید ترتیب عامل ها مهم است). اگر این را در معادله اول قرار دهیم داریم

$$(E - V - mc^2)\chi = c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P} \left[\frac{1}{E - V + mc^2} \right] c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P}\chi \quad (22-2-20)$$

اگر در سمت راست $E - V + mc^2$ را به صورت $2mc^2$ تقریب بزنیم می رسمیم به

$$\begin{aligned} E_S \chi &= \left[\frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P})^2}{2m} + V \right] \chi \\ &= \left[\frac{P^2}{2m} + V \right] \chi \end{aligned} \quad (23-2-20)$$

این همان معادله شرودینگر غیر نسبیتی است که در فصل ۱۳ حل کردیم. توجه کنید که هامیلتونی از مرتبه $(v/c)^2$ است چون نسبت به تکانه از درجه ۲ است. برای دیدن ساختار ریز می بایست تا مرتبه $(v/c)^4$ پیش برویم. با بسط $(E - V + mc^2)^{-1}$ در سمت راست تا یک مرتبه بیشتر نسبت به v^2/c^2 این کار را انجام می دهیم:

$$\begin{aligned} \frac{1}{E - V + mc^2} &= \frac{1}{2mc^2 + E_S - V} = \frac{1}{2mc^2} \left(1 + \frac{E_S - V}{2mc^2} \right)^{-1} \\ &\cong \frac{1}{2mc^2} \left(1 - \frac{E_S - V}{2mc^2} \right) = \frac{1}{2mc^2} - \frac{E_S - V}{4m^2 c^4} \end{aligned} \quad (24-2-20)$$

معادله (۲۲-۲-۲۰) به صورت زیر می شود

$$E_S \chi = \left[\frac{P^2}{2m} + V - \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P} (E_S - V) \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P}}{4m^2 c^2} \right] \chi \quad (25-2-20)$$

چون E_S در هر دو طرف ظاهر می شود نمی توانیم این معادله را معادله مستقل از زمان شرودینگر (یعنی به صورت $E_S \chi = H \chi$) تلقی کنیم. با این وجود راه حل این مشکل را می دانیم. سمت راست یک سری توانی بر حسب v^2/c^2 است. دو جمله اول از مرتبه v^2/c^2 بوده و انتظار می رود سومی از مرتبه v^4/c^4 باشد. حال دو عامل $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P}$ در سومی حداکثر یک عامل v^2/c^2 وارد می کنند، لذا $E_S - V$ را فقط تا مرتبه v^2/c^2 لازم داریم. از این معادله، قطع شده تا این مرتبه، داریم

$$(E_S - V)\chi = \frac{P^2}{2m}\chi \quad (26-2-20)$$

از این نتیجه نمی‌توان مستقیماً در معادله (25-2-20) استفاده کرد چون $E_S - V$ در آنجا مستقیماً روی χ اثر نمی‌کند و $\sigma \cdot \mathbf{P}$ در سر راهش وجود دارد. لذا اقدام زیر را انجام می‌دهیم:

$$\begin{aligned} (E_S - V)\sigma \cdot \mathbf{P}\chi &= \sigma \cdot \mathbf{P}(E_S - V)\chi + \sigma \cdot [E_S - V, \mathbf{P}]\chi \\ &= (\sigma \cdot \mathbf{P}) \frac{P^2}{2m}\chi + \sigma \cdot [\mathbf{P}, V]\chi \end{aligned} \quad (27-2-20)$$

با قرار دادن این معادله در (25-2-20) می‌رسیم به

$$\begin{aligned} E_S\chi &= \left\{ \frac{P^2}{2m} + V - \frac{P^4}{8m^3c^2} - \frac{(\sigma \cdot \mathbf{P})(\sigma \cdot [\mathbf{P}, V])}{4m^2c^2} \right\} \chi \\ &= \left\{ \frac{P^2}{2m} + V - \frac{P^4}{8m^3c^2} - \frac{i\sigma \cdot \mathbf{P} \times [\mathbf{P}, V]}{4m^2c^2} - \frac{\mathbf{P} \cdot [\mathbf{P}, V]}{4m^2c^2} \right\} \chi \\ &= H\chi \end{aligned} \quad (28-2-20)$$

که باز هم از اتحاد (15-2-20) استفاده کرده‌ایم. جمله سوم را به عنوان تصحیح نسیتی برای انرژی جنبشی می‌شناسیم و همان

$$H_T = -\frac{P^4}{8m^3c^2} \quad (29-2-20)$$

است [معادله (6-3-17) را به خاطر بیاورید]. جمله چهارم، برهمکنش اسپین-مدار، $H_{s.o}$ معادله (16-3-17)، است:

$$\begin{aligned} &\frac{-i\sigma \cdot \mathbf{P} \times [\mathbf{P}, V]}{4m^2c^2} \\ &= \frac{-i\sigma \cdot \mathbf{P} \times [-i\hbar\nabla(-e^2/r)]}{4m^2c^2} \left\{ [P, f(x)] = -i\hbar \frac{df}{dx} \text{ از استفاده از } \right\} \\ &= \frac{-\hbar e^2 \sigma \cdot \mathbf{P} \times \mathbf{r}}{4m^2c^2r^3} = \frac{\hbar e^2}{4m^2c^2r^3} \sigma \cdot \mathbf{r} \times \mathbf{P} \dagger \\ &= \frac{e^2}{2m^2c^2r^3} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} = H_{s.o}. \end{aligned} \quad (30-2-20)^1$$

توجه کنید که ضریب توماس در آن شکل گرفته است.

۱- اگر چه \mathbf{P} یک عملگر مشتق است، درست مثل وقتی که \mathbf{P} و \mathbf{r} اعداد c باشند، $\mathbf{P} \times \mathbf{r} = -\mathbf{r} \times \mathbf{P}$ است چون حاصل ضرب برداری هرگز شامل حاصل ضرب‌های یک مختصه معین و اندازه حرکت مزدوج آن نیست. قبلاً در همین کتاب، وقتی گفته شد که هیچ ابهامی در ترتیب هنگام رفتن از $\mathbf{I} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ به \mathbf{L} وجود ندارد، به این نکته عمل کردیم.

حال جمله پنجم و آخر را در نظر بگیرید که کل تعبیر را بر هم می زند چون هرمیتی نیست (بررسی کنید). بنابراین اگر کمیت داخل پرانتز در معادله (۲۰-۲-۲۸) به عنوان یک هامیلتونی به کار رود خواهیم دید که

$$\int |\chi|^2 d^3\mathbf{r} \neq \text{const in time}$$

اما این عجیب نیست چون قانون پایستگی که از معادله دیراک به دست می آید عبارتست از

$$\int \psi^\dagger \psi d^3\mathbf{r} = \int [|\chi|^2 + |\Phi|^2] d^3\mathbf{r} = \text{const} \quad (۳۱-۲-۲۰)$$

از این رو χ یک مختصه خوبی برای تابع موج شرودینگر تا این مرتبه از v/c نیست [در صورتی خوب بود که تا مرتبه $(v/c)^2$ کار می کردیم]. تابع موج صحیح را به صورت زیر پیدا می کنیم: توجه کنید که

$$\Phi = \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P}}{E - V + mc^2} \chi = \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P}}{2mc^2 + E_S - V} \chi \cong \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P}}{2mc^2} \chi \quad (۳۲-۲-۲۰)$$

(جملات چشم پوشی شده، در پایان تصحیحاتی از مرتبه v^6/c^6 ایجاد می کنند) در نتیجه

$$|\Phi|^2 = \frac{\chi^\dagger (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P}) \chi}{(2mc^2)^2} = \chi^\dagger \frac{P^2}{4m^2 c^2} \chi$$

و لذا از معادله (۳۱-۲-۲۰) و با استفاده از $(1+x) = (1+\frac{x}{2})(1+\frac{x}{2}) + O(x^2)$ و هرمیتی بودن P^2 ،

$$\begin{aligned} \int \chi^\dagger \left(1 + \frac{P^2}{4m^2 c^2}\right) \chi d^3\mathbf{r} &= \int \left[\left(1 + \frac{P^2}{8m^2 c^2}\right) \chi\right]^\dagger \cdot \left(1 + \frac{P^2}{8m^2 c^2}\right) \chi d^3\mathbf{r} \\ &= \text{const} \end{aligned} \quad (۳۳-۲-۲۰)$$

در نتیجه نامزد تابع موج شرودینگر عبارتست از

$$\chi_S = \left(1 + \frac{P^2}{8m^2 c^2}\right) \chi \quad (۳۴-۲-۲۰)$$

چون دارای نرم مستقل از زمان خواهد بود (تا دقت فعلی، اگر به مرتبه های بالاتر و بالاتر از v^2/c^2 برویم، Φ بیشتر و بیشتر در آن شاخه خواهد دوآید).

با حذف χ در معادله (۲۰-۲-۲۸)، معادله مربوط به χ_S به دست می آید:

$$E_s \left(1 + \frac{P^2}{8m^2c^2}\right)^{-1} \chi_s = H \left(1 + \frac{P^2}{8m^2c^2}\right)^{-1} \chi_s$$

$$E_s \chi_s = \left(1 + \frac{P^2}{8m^2c^2}\right) H \left(1 - \frac{P^2}{8m^2c^2}\right) \chi_s \quad (۳۵-۲-۲۰)$$

$$= \left(H + \left[\frac{P^2}{8m^2c^2}, H\right]\right) \chi_s \quad (\text{to this order in } v/c)$$

$$= H_s \chi_s$$

در محاسبه جابه‌جاگر فقط لازم است قسمت v^2/c^2 از H را در نظر بگیریم چون $P/8m^2c^2$ از $O(v^2/c^2)$ است و ما تا مرتبه v^4/c^4 کار می‌کنیم. بنابراین

$$H_s = H + \left[\frac{\mathbf{P} \cdot \mathbf{P}}{8m^2c^2}, V\right] \quad (۳۶-۲-۲۰)$$

هامیلتونی شرودینگر مورد نظر است. قسمت اضافی در تحلیل فوق ترکیب‌هایی با جزء غیر هرمیتی در معادله H_D (۲۸-۲-۲۰) به دست می‌دهد تا جمله داروین تشکیل شود:

$$H_D = \frac{1}{8m^2c^2} (-2\mathbf{P} \cdot [\mathbf{P}, V] + [\mathbf{P} \cdot \mathbf{P}, V])$$

$$= \frac{-1}{8m^2c^2} [\mathbf{P} \cdot [\mathbf{P}, V]] \quad (\text{با استفاده از قاعده زنجیره‌ای برای جابه‌جاگرهای حاصل ضرب‌ها}) \quad (۳۷-۲-۲۰)$$

$$= \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \nabla^2 V \quad \{ [P, f(x)] = -i\hbar df/dx \text{ از استفاده از } \}$$

$$= \frac{e^2 \hbar^2 \pi}{2m^2c^2} \delta^3(\mathbf{r})$$

لذا جمله داروین فقط حالت‌های s را تحت تأثیر قرار می‌دهد. ^۱ برای مثال در حالت پایه،

$$\langle 100 | H_D | 100 \rangle = \frac{e^2 \hbar^2 \pi}{2m^2c^2} \frac{1}{\pi a_0^3} = \frac{1}{2} mc^2 \alpha^4$$

و در حالت کلی

$$\langle n00 | H_D | n00 \rangle = \frac{1}{2} \frac{mc^2 \alpha^4}{n^3} \quad (۳۸-۲-۲۰)$$

به خاطر بیاورید که در بحث قبلی خود در مورد ساختار ریز یک جابجایی اسپین-مدار، معتبر برای فقط $l \neq 0$ ، به دست آوردیم و سپس آنرا برای $l = 0$ هم بدون هر نوع مجوز واقعی به کار بردیم. نتیجه‌ای که برای $l = 0$ رسیدیم درست همان چیزی است که از H_D در بالا به دست می‌آید و دلیل ما برای انجام کار فوق همین بود. لذا $H_{s,0}$ (مناسب برای $l \neq 0$) و H_D (مناسب برای فقط $l = 0$) دست به دست هم

^۱ - به یاد بیاورید که فقط در این حالت‌ها ψ در مبدا غیر صفر است.

می‌دهند تا یک جابه‌جایی ساختار ریز ایجاد کنند که نسبت به l یکنواخت است. فیزیک پشت سر جمله داروین ربطی به جفت‌شدگی اسپین - مدار ندارد (چون چنین چیزی برای $l=0$ وجود ندارد). در عوض این حقیقت را منعکس می‌کند که در نظریه نسیت، ذره نمی‌تواند بیشتر از طول موج کامپتون خود \hbar/mc جایگزیده شود. لذا پتانسیلی که مناسب است $V(\mathbf{r})$ نیست بلکه متوسط آن حول نقطه \mathbf{r} است:

$$\overline{V(\mathbf{r})} = V(\mathbf{r}) + \sum_i \frac{\partial V}{\partial r_i} \delta r_i + \frac{1}{2!} \sum_i \sum_j \frac{\partial^2 V}{\partial r_i \partial r_j} \delta r_i \delta r_j + O(\delta r^3) \quad (۲۰-۲-۳۹)$$

$$= V(\mathbf{r}) + \frac{1}{6} (\delta r)^2 \nabla^2 V + O(\delta r^3)^3$$

که در متوسط‌گیری فرض کرده‌ایم که افت و خیزها در جهات مختلف غیر همبسته بوده و دارای تقارن کروی هستند. حال اگر $\delta r = \hbar/mc$ را در آن قرار دهیم به علامت صحیح و تقریباً اندازه صحیح جمله داروین می‌رسیم [معادله (۲۰-۲-۳۷) را ببینید].

اگر چه، انتخاب کردیم که تا مرتبه v^4/c^4 کار کنیم ولی معادله دیراک می‌تواند در مورد پتانسیل کولنی $V = -e^2/r$ به صورت دقیق حل شود. طیف انرژی حاصل عبارتست از

$$E_{nj} = mc^2 \left[1 + \left(\frac{\alpha}{n - (j + \frac{1}{2}) + [(j + \frac{1}{2})^2 - \alpha^2]^{1/2}} \right)^2 \right]^{-1/2} \quad (۲۰-۲-۴۰)$$

اگر این را برحسب توان‌های α بسط دهیم به انرژی سکون، انرژی شرودینگر، انرژی ساختار ریز و غیره و غیره می‌رسیم. توجه کنید که حالت‌های با n و l معین تا هر مرتبه از α تبهگن هستند. در حالی که فرمول بالا در توافق عجیبی با آزمایش است^۱ اما حرف آخر نیست. برای مثال اندازه‌گیری‌های بسیار دقیق نشان می‌دهند که تراز $2S_{1/2}$ بالای تراز $2P_{1/2}$ است. این پدیده، موسوم به جابه‌جایی لمب، فقط در صورتی قابل درک است که میدان الکترومغناطیسی به صورت کوانتوم مکانیکی بحث شود.

۲۰-۳ - مطالبی بیشتر در مورد مکانیک کوانتومی نسیتی

با اینکه به هدف اصلی این فصل در بخش قبل رسیدیم توجه خود را به پدیده‌های خاصی معطوف می‌کنیم که از نظریه دیراک بیرون می‌آیند اما در چند صفحه گذشته خود را نشان ندادند. ابتدا توجه کنید که پیوند و تلفیق مکانیک کوانتومی با نسیت مشکل زیر را ایجاد می‌کند: نسیت اجازه تولید ذره را، با داشتن انرژی کافی، می‌دهد و مکانیک کوانتومی اجازه انحرافات انرژی به دلخواه بزرگ در زمان‌های کوتاه را می‌دهد. در نتیجه درجات آزادی یک سیستم نسیتی نه ثابت و معین هستند و نه متناهی؛ سیستمی که ابتدا دارای یک ذره است می‌تواند به حالتی با ۱۵ ذره تحول یابد. چرا این مسئله در نظریه دیراک که مثل یک نظریه تک ذره‌ای به نظر می‌رسد خود را نشان نمی‌دهد؟ پاسخ این است که ظاهر می‌شود اما در شکل جواب‌های انرژی - منفی، بینیم این جواب‌ها کدامند و چگونه منجر به ازدیاد درجات آزادی می‌شوند.

معادله دیراک ذره آزاد را ($\hbar=c=1$) در نظر بگیرید

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = (\alpha \cdot \mathbf{p} + \beta m) \psi \quad (1-3-20)$$

فرض کنید به دنبال جواب‌های موج تخت باشیم

$$\psi = w(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)} \quad (2-3-20)$$

که در آن $w(\mathbf{p})$ اسپینوری است که هیچ وابستگی فضا-زمانی ندارد و رابطه زیر را برآورده می‌کند:

$$Ew = (\alpha \cdot \mathbf{p} + \beta m)w \quad (3-3-20)$$

یا بر حسب χ و Φ ،

$$\begin{bmatrix} E-m & -\sigma \cdot \mathbf{p} \\ -\sigma \cdot \mathbf{p} & E+m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \chi \\ \Phi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4-3-20)$$

اگر $\mathbf{p} = 0$ باشد χ و Φ غیر جفت (واجفت) می‌شوند. معادله مربوط به χ می‌شود:

$$(E-m)\chi = 0 \rightarrow E = m \quad (5-3-20)$$

که بسیار عالی است و بیان می‌کند که یک ذره در حال سکون دارای انرژی $E = m$ است و به وسیله یک اسپینور دو مولفه‌ای دلخواه توصیف می‌شود که ما آن را به عنوان درجه آزادی اسپینی می‌شناسیم. معادله مربوط به Φ می‌شود:

$$(E+m)\Phi = 0 \rightarrow E = -m \quad (6-3-20)$$

حال حتی یک فرد غیر وارد به شما خواهد گفت که E برابر mc^2 فرض می‌شود نه $-mc^2$. اهمیت چهار مولفه ψ در چارچوب ساکن روشن می‌شود: دو سمت گیری ممکن برای اسپین و دو علامت برای انرژی وجود دارد. این مسئله برای $p \neq 0$ هم درست است و داریم

$$\chi = \frac{\sigma \cdot \mathbf{p}}{E-m} \Phi \quad (7-3-20)$$

$$\Phi = \frac{\sigma \cdot \mathbf{p}}{E+m} \chi \quad (8-3-20)$$

اینها فقط در صورتی سازگارند که داشته باشیم

$$\frac{p^2}{E^2 - m^2} = 1$$

یا


$$E^2 = p^2 + m^2$$

یا

$$E = \pm (p^2 + m^2)^{1/2} \quad (9-3-20)$$

ترازهای انرژی مربوط به این دو انتخاب در شکل (۲۰-۱) نشان داده شده‌اند. جواب‌های انرژی - منفی به چه درد ما می‌خورند؟ اگر هیچ برهمکنشی نباشد الکترون‌های انرژی - مثبت در همان جایی که هستند باقی خواهند ماند و می‌توانیم فرض کنیم که هیچ الکترون انرژی - منفی وجود ندارد. اما همیشه اختلال‌هایی وجود دارند که روی همه الکترون‌ها اثر می‌کنند و می‌توانند موجب شوند تا همه الکترون‌های انرژی - مثبت به صورت آبخاری به حالت‌های انرژی - منفی بروند. پایداری الکترون‌های انرژی - مثبت را چگونه درک می‌کنیم؟

شکل ۲۰-۱: در نظریه دیراک دو نوار پیوسته انرژی قابل دسترس برای ذره آزاد وجود دارد، یکی از $+m$ تا ∞ و دیگری از $-m$ تا $-\infty$.



دو روش کلی یکی منسوب به دیراک و دیگری منسوب به فاینمن وجود دارد.^۱ دیراک فرض کرد که حالت‌های انرژی - منفی همگی پر(اشغال شده) هستند، یعنی آنچه که ما خلاء می‌نامیم در واقع دریایی اشغال شده از الکترون‌های انرژی - منفی (اما غیر قابل مشاهده) است. اگر این را بپذیریم مسئله پایداری به وسیله اصل طرد، که مانع از فرو افت الکترون‌های انرژی - مثبت به حالت‌های انرژی - منفی اشغال شده می‌شود، حل می‌شود. این تصویر چند نتیجه عمیق دارد. فرض کنید به یک الکترون انرژی - منفی آنقدر انرژی بدهیم (حداقل $2m$) تا به یک حالت انرژی - مثبت برود. حال یک شیء انرژی - مثبت با بار e - داریم اما یک حفره هم در «دریای دیراک» خلق کرده‌ایم. از آنجا که دریای دیراک پر شده غیر قابل مشاهده فرض شد، این حفره قابل مشاهده است و افزایشی در بار به اندازه e (ناپدید شدن $-e$ = پدیدار شدن $+e$) و افزایشی در انرژی به اندازه $|E|$ ، اگر انرژی الکترون خارج شده از دریا $|E|$ - باشد، نشان می‌دهد.^۲ لذا این حفره که بار $+e$ و انرژی مثبت دارد همراه با الکترون خلق می‌شود و پوزیترون نامیده می‌شود. به راحتی می‌توان نشان داد که جرم آن m است. پوزیترون‌ها چند سال بعد از اینکه نظریه دیراک درباره حفره‌ها اثبات شد مشاهده شدند. وقتی یک الکترون با یک پوزیترون مواجه می‌شود، یعنی یک حفره در دریا، الکترون به داخل آن پریده و هر دو ذره را از دست می‌دهیم. هر چند مقداری انرژی (حداقل برابر $2m$) به شکل فوتون آزاد خواهد شد (بعد از این گاهی این ذرات را به ترتیب به صورت e^- و e^+ و γ نشان خواهیم داد).

مشکل روش دیراک این است که برای ذرات بدون اسپین، که از اصل پائولی پیروی نمی‌کنند اما همین مسئله جواب‌های انرژی - منفی را دارند و می‌توان با قرار دادن جواب موج تخت در معادله کلاین - گوردون آنرا ملاحظه کرد، به کار نمی‌رود (در واقع این دلیل رد شدن معادله کلاین - گوردون در روزهای اولیه و رفتن دیراک به دنبال یک معادله مرتبه اول بود) بنابراین به روش فاینمن می‌پردازیم که برای بوزون‌ها و فرمیون‌ها به کار می‌رود.

۱- ایده بهره‌برداری شده توسط فاینمن در شکل اصلی اش توسط Stueckelberg نشان داده شده بود.

۲- داستان مردی را به خاطر بیاورید که آنقدر به عبور قطار سریع‌السیر از کنار خانه‌اش در نیمه شب عادت کرده بود که روزی که آن اتفاق نیفتاد، با فریاد از خواب بیدار شد که «آن صدای چیست؟»

ایده فاینمن به شرح زیر است: ذرات انرژی - منفی فقط می‌توانند در زمان به عقب حرکت کنند. ابتدا ببینیم این موضوع چگونه مشکل را حل می‌کند و چطور این گفته عملاً در نظریه کوانتومی اجرا می‌شود. یک ذره انرژی - منفی را در نظر بگیرید که در نقطه فضا - زمان c خلق می‌شود و به عقب به سمت d ، جایی که نابود می‌شود، حرکت می‌کند (شکل ۲۰-۲-الف). برای ما که نسبت به زمان به جلو حرکت می‌کنیم و فضا - زمان را در بازه‌های زمانی - مساوی می‌بینیم این چیزی است که به نظر می‌رسد اتفاق خواهد افتاد:

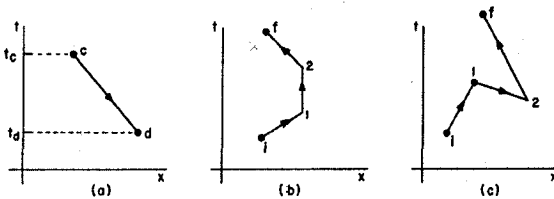
- ۱- $t_d < t_c$ هیچ چیزی در هیچ جایی وجود ندارد.
 - ۲- $t = t_d$ انرژی منفی $|E|$ و بار $-e$ نابود می‌شوند یعنی انرژی جهان نسبت به قبل به اندازه $|E|$ و بار آن به اندازه e افزایش می‌یابد. یک پوزیترون متولد می‌شود.
 - ۳- $t = t_c$ انرژی منفی خلق می‌شود، بار $-e$ خلق می‌شود. پوزیترون نابود می‌شود.
 - ۴- $t_c > t_d$ هیچ چیزی در هیچ جایی وجود ندارد.
- لذا این فرایند پوزیترونی را نشان می‌دهد که در d خلق و در c نابود می‌شود.

چطور فاینمن تضمین می‌کند که حالت‌های انرژی - منفی به عقب منتشر شوند؟ در اینجا یک توصیف ترسیمی وجود دارد. به خاطر بیاورید که انتشارگر شرودینگر که قبلاً به کار بردیم (در پایه مختصه) عبارتست از

$$U_S(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \sum_n \psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}') e^{-iE_n(t-t')} \quad (۱۰-۳-۲۰)$$

که ψ_n یک ویژه تابع انرژی بر حسب زده شده به وسیله عدد کوانتومی اصلی n است. از آنجا که هر جمله در جمع، معادله شرودینگر را برآورده می‌کند، واضح است که

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - H \right) U_S = 0 \quad (۱۱-۳-۲۰)$$



شکل ۲۰-۲: الف- یک ذره انرژی - منفی در c خلق می‌شود و در زمان به عقب به d حرکت می‌کند، جایی که در آنجا نابود می‌شود. برای ما که در زمان به جلو می‌رویم، چنین بنظر می‌رسد که گویی یک پاد ذره با انرژی مثبت در d خلق شده و در c نابود می‌شود. ب- یک فرآیند پراکندگی مرتبه دوم عادی. ج- یک فرآیند مرتبه دوم که شامل پراکندگی بازگشتی (پس پراکندگی) در زمان است. بین زمان‌های ۱ و ۲ علاوه بر ذره اصلی یک زوج ذره - پاد ذره خواهیم دید.

با داشتن این U_S و $\psi(t')$ در یک زمان اولیه می‌توانیم به $\psi(t)$ در زمان بعدی $(t) t'$ برسیم:

$$\psi(t) = U_S \psi(t') \quad (\text{شماتیک}) \quad (۱۲-۳-۲۰)$$

حال توجه کنید که اگر چه از U_S برای انتشار دادن ψ به جلو در زمان استفاده می کنیم، اما می تواند آنرا به عقب هم منتشر کند چون برای $t < t'$ ، $U_S \neq 0$ است. برای اجتناب صریح از این موضوع با

$$G_S(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = \theta(t-t') U_S(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') \quad (۱۳-۳-۲۰)$$

کار می کنیم که نمی تواند ψ را به سمت عقب منتشر کند. معادله ای که به وسیله G_S برآورده می شود عبارتست از

$$\begin{aligned} \left(i \frac{\partial}{\partial t} - H\right) G_S &= \left[i \frac{\partial}{\partial t} \theta(t-t')\right] \sum_n \psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}') e^{-iE_n(t-t')} \\ &= i\delta(t-t') \delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \\ &= i\delta^4(x-x') \quad [x = (t, \mathbf{r})] \end{aligned} \quad (۱۴-۳-۲۰)$$

[از کامل بودن ویژه توابع و $\dot{\theta}(t-t') = \delta(t-t')$ استفاده کرده ایم].
انتشارگر در نظریه دیراک، G_D ، از معادله مشابهی پیروی می کند. مورد ذره آزاد را در نظر بگیرید. در اینجا،

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - H^0\right) G_D^0 = i\delta^4(x-x') \quad (۱۵-۳-۲۰)$$

که H^0 هامیلتونی ذره آزاد دیراک است. جواب آن عبارتست از

$$G_D^0(x, x') = \theta(t-t') \left(\sum_{n+} + \sum_{n-} \right) \quad (۱۶-۳-۲۰)$$

که $\sum_{n\pm}$ به ترتیب جمع روی ویژه توابع انرژی - مثبت و انرژی - منفی را نشان می دهد [اگر \sum_n را حذف کنیم کامل بودن را از دست داده و به $i\delta^4$ در سمت راست معادله (۱۵-۳-۲۰) نخواهیم رسید]. با اینکه G_D^0 معادله لازم را برآورده می کند، دارای جواب های انرژی - منفی است که در زمان به جلو منتشر می شوند. در اینجا یک ترفند وجود دارد. G_D^0 جواب یکتایی برای معادله (۱۵-۳-۲۰) نیست و می توانیم هر جواب معادله دیراک - آزاد را به آن اضافه یا از آن کم کنیم به شرطی که آن را برای همه زمان ها کم کنیم (اگر آنرا فقط برای $t > 0$ کم کنیم، یک تابع θ ضربدر جواب کم می کنیم که از معادله همگن پیروی نمی کند). اجازه دهید همه جواب های انرژی - منفی را برای همه زمان ها کم کنیم. این کار انتشارگر فاینمن را به دست می دهد:

$$G_F^0(x, x') = \theta(t-t') \sum_{n+} - \theta(t'-t) \sum_{n-} \quad (۱۷-۳-۲۰)$$

حال حالت اولیه $\psi_i(t')$ را در نظر بگیرید که فقط مرکب از جواب های انرژی - مثبت است. G_F^0 آنرا در زمان به جلو منتشر خواهد کرد چون $\psi_i(t')$ بر هر جمله در \sum_{n-} عمود است. لذا $G_F^0 \psi_i(t') = \psi_f(t)$

فقط شامل مولفه‌های انرژی - مثبت است و حرکت به جلو را حفظ می‌کند. از سوی دیگر اگر $\psi_i(t')$ متشکل از فقط مولفه‌های انرژی - منفی باشد، بر هر جمله در \sum_{n^+} عمود است و از t' به t^0 به عقب انتشار می‌یابد. ما آنرا به عنوان پوزیترونی که از t به t' منتشر می‌شود تلقی خواهیم کرد. اینک الکترون را در پتانسیل خارجی V در نظر بگیریم. انتشار دقیق الکترون می‌تواند به وسیله یک سری اختلالی بر پایه G_F^0 و در شکل شماتیک زیر توصیف شود:

$$\psi_f(t) = G_F^0(t, t') \psi_i(t') + \sum_{t''} G_F^0(t, t'') V(t'') G_F^0(t'', t') \psi_i(t') + \dots$$

این رویدادهای پراکندگی چند گانه را به وسیله دیاگرام‌هایی نشان می‌دهیم که شباهت خیلی زیادی به دیاگرام‌های بخش ۱۸-۳ دارند. فقط یک تفاوت وجود دارد. یک فرآیند مرتبه دوم را در نظر بگیرید. مسلماً پراکندگی دو گانه‌ای وجود دارد که در آن الکترون در زمان به جلو (مستقیم) پراکنده می‌شود، شکل ۲۰-۲-ب. اما این امکان هم وجود دارد که پتانسیل آنرا در ۱ در زمان به عقب و سپس در ۲ به جلو پراکنده کند (شکل ۲۰-۲-ج). وقتی در زمان به جلو می‌رویم ابتدا الکترون، سپس یک زوج e^+e^- خلق شده در ۲، بعد نابودی e^+ با e^- اصلی در ۱ و سرانجام رسیدن e^- خلق شده به f را می‌بینیم. از آنجا که الکترون می‌تواند به هر تعداد دفعات جلو و عقب برود (وقتی به مرتبه‌های بالاتر بسط می‌رویم) مراحل میانی می‌توانند شامل هر تعداد زوج e^+e^- باشند. این چگونگی زیاد شدن درجات آزادی در یک نظریه نسبیتی است. اگر چه با یک معادله یک - ذره‌ای شروع کردیم، تولید ذره به واسطه جواب‌های انرژی - منفی در آن راه می‌یابد یا بدین دلیل که این جواب‌ها اشاره به دریایی نامتناهی از ذرات در حال خواب می‌کنند که می‌توانند بیدار شوند یا بدین دلیل که آنها اجازه می‌دهند که یک الکترون منفرد در زمان به عقب و جلو رفته و از این رو در یک زمان معین چندین ذره شود. اگر چه تولید ذره (حداقل تولید زوج) می‌تواند در فرمول‌بندی حاضر بحث شود، وقت آن است که نظریه میدان کوانتومی را بیاموزیم که چارچوبی طبیعی برای بحث خلق و نابودی ذرات فراهم می‌نماید. قبلاً با یک نمونه آشنا شده‌ایم یعنی میدان الکترومغناطیسی کوانتیده که کوانتوم‌های آن، فوتون‌ها، می‌توانند به وسیله عملگرهای a^+ و a خلق و نابود شوند. ما به نظریه‌ای نیاز داریم که در آن ذرات نظیر الکترون‌ها و پوزیترون‌ها بتوانند خلق و نابود هم بشوند. یا اتمام این کتاب شما برای آن مطلب آماده می‌شوید.^۱

۱- برای مثال

J. D. Bjorken and S. D. Drell, *Relativistic Quantum Mechanics and Relativistic Quantum Fields*, McGraw-Hill, New York (1964), or C. Itzykson and J. B. Zuber, *Quantum Field Theory*, McGraw-Hill, New York (1980).

در این فصل برای جزئیات بیشتر و بحث پیشرفته‌تر به انتگرال‌های مسیر برمی‌گردیم. ابزارهایی که در اینجا توصیف می‌شوند در بسیاری از شاخه‌های فیزیک آنقدر کاربردهای وسیعی دارند که شایسته است آنها را در یک کتاب نظیر این بگنجانیم. این فصل با فصول قبل از این نظر متفاوت است که تلاش می‌کند بدون ارائه استنتاج‌ها با همان جزئیاتی که قبلاً ارائه می‌شد شما را با انواع موضوعات جدید آشنا کند. همین‌طور در پایان فهرستی از مراجع ارائه می‌شود تا موضوعی را که به آن علاقه‌مند می‌شوید دنبال کنید. این فهرست، کامل و جامع نیست و بیشتر شامل مجلات آموزشی یا کتاب‌هاست. از مراجع داخل این مراجع می‌توانید موضوع دلخواه خود را با عمق بیشتری دنبال کنید. اینها گذر از کار دوره آموزشی به تحقیقات را تسهیل می‌کنند.

در فصل ۸ فرمول انتگرال مسیر برای انتشارگر فقط مسلم فرض شد و یا با محاسبه مستقیم انتشارگر (در مورد ذره آزاد) یا یک بار و برای همیشه از طریق نشان دادن اینکه معادله شرودینگر از دستورالعمل انتگرال مسیر برای محاسبه تحول زمانی به دست می‌آید، نشان داده شد که به نتایج یکسانی با روش‌های عملگری منجر می‌شود.

این فصل را به صورت معکوس شروع می‌کنیم. با هامیلتونی عملگر $H = P^2/2m + V$ شروع می‌کنیم و انتشارگر را برای آن به صورت یک انتگرال مسیر به دست می‌آوریم خواهیم دید که انواع زیادی از انتگرال‌های مسیر را می‌توان به دست آورد. ما بحث‌های زیر را ارائه خواهیم کرد:

- انتگرال مسیر فضای پیکربندی، که در فصل ۸ بحث شد.
- انتگرال مسیر فضای فاز.
- انتگرال مسیر حالت همدوس.

خواهید دید که وجود انتگرال‌های مسیر زیاد به وجود اشکال زیاد برای عملگر همانی، یعنی وجود پایه‌های زیاد، مربوط می‌شود.

بعد از این دو کاربرد را بحث خواهیم کرد: اثر کوانتومی هال (QHE) و یک پیشرفت اخیر موسوم به فاز بری^۱.

سپس به مکانیک کوانتومی زمان موهومی و رابطه آن با مکانیک آماری (کلاسیکی و کوانتومی) و همین‌طور محاسبه دامنه‌های تونل‌زنی به وسیله یک تعریف نیمه کلاسیکی بر خواهیم گشت. در مورد اینستانتون‌ها^۲، فرمول‌بندی ماتریس انتقال و غیره و غیره هم مطالبی فرا خواهیم گرفت.

1- Berry phase.

2- Instantons

سرانجام، انتگرال‌های مسیر را برای دو مسئله فاقد حد کلاسیکی، هامیلتونی اسپینی و نوسانگر فرمیونی، بحث خواهیم کرد.

۲۱-۱- به دست آوردن انتگرال مسیر

فرض کنید هامیلتونی مستقل از زمان بوده و به شکل

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(X) \quad (1-1-21)$$

است. انتشارگر به وسیله معادله زیر تعریف می‌شود:

$$U(xt; x'0) \equiv U(x, x', t) = \langle x | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Ht\right) | x' \rangle \quad (2-1-21)$$

در فصل ۸ گفته شد که U می‌تواند به صورت یک جمع روی مسیرهایی که از $(x'0)$ به (xt) می‌روند نوشته شود. اکنون خواهیم دید که این کار چگونه انجام می‌شود. ابتدا بدیهی است که می‌توان به ازای هر N چنین نوشت:

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} Ht\right) = \left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar} H \frac{t}{N}\right) \right]^N \quad (3-1-21)$$

این صرفاً بیان می‌کند که $U(t)$ ، انتشارگر برای زمان t ، حاصل ضرب N انتشارگر $U(t/N)$ است. تعریف زیر را انجام داده

$$\varepsilon = \frac{t}{N} \quad (4-1-21)$$

و حد $N \rightarrow \infty$ را در نظر می‌گیریم. اکنون می‌توان نوشت:

$$\exp\left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} (p^2/2m + V(X))\right) \simeq \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{2m\hbar} p^2\right) \cdot \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(X)\right) \quad (5-1-21)$$

چون داریم

$$e^A e^B = e^{A+B+1/2[A,B]+\dots} \quad (6-1-21)$$

که اجازه می‌دهد تا جابه‌جاگر نشان داده شده (و دیگر جابه‌جاگرهایی را که نشان نداده‌ایم) را به خاطر اینکه متناسب با توان‌های بالاتر ε هستند، که به سمت 0 می‌رود، حذف کنیم. در حالی که همه اینها در صورتی خوب هستند که A و B ماتریس‌های با بعد متناهی با عناصر ماتریسی متناهی باشند، واضح است که اینها برای عملگرهای فضای هیلبرت که می‌توانند عناصر ماتریسی بزرگ یا حتی تکینه داشته باشند حساس‌تر هستند. ما فرض خواهیم کرد که در حد $\varepsilon \rightarrow 0$ ، علامت \simeq در معادله (۵-۱-۲۱) به منظور محاسبه هر کمیت فیزیکی معقول، تساوی خواهد شد.

بنابراین مجبور هستیم عبارت زیر را حساب کنیم:

$$\underbrace{\langle x | \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{2m\hbar} P^2\right) \cdot \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(X)\right) \cdot \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{2m\hbar} P^2\right) \cdot \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(X)\right) \dots | x' \rangle}_{N \text{ times}} \quad (۷-۱-۲۱)$$

گام بعدی وارد کردن عملگر همانی

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle \langle x| \quad (۸-۱-۲۱)$$

بین هر دو عامل مجاور در $U(t/N)$ است. این کار را برای $N = 3$ انجام می‌دهیم و (با تغییر نام x و x' به x_0 و x_3 به دلایلی که بزودی مشخص می‌شوند) داریم

$$\begin{aligned} U(x_3, x_0, t) &= \int \prod_{n=1}^2 dx_n \langle x_3 | \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{2m\hbar} P^2\right) \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(X)\right) | x_2 \rangle \\ &\times \langle x_2 | \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{2m\hbar} P^2\right) \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(X)\right) | x_1 \rangle \\ &\times \langle x_1 | \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{2m\hbar} P^2\right) \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(X)\right) | x_0 \rangle \end{aligned} \quad (۹-۱-۲۱)$$

محاسبه عنصر ماتریسی

$$\langle x_n | \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{2m\hbar} P^2\right) \cdot \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(X)\right) | x_{n-1} \rangle \quad (۱۰-۱-۲۱)$$

را در نظر بگیرید. وقتی تابع نمایشی سمت راست روی کت سمت راست خود اثر می‌کند عملگر X با ویژه مقدار x_{n-1} جایگزین می‌شود. لذا

$$\begin{aligned} \langle x_n | \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{2m\hbar} P^2\right) \cdot \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(X)\right) | x_{n-1} \rangle \\ = \langle x_n | \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{2m\hbar} P^2\right) | x_{n-1} \rangle \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x_{n-1})\right) \end{aligned} \quad (۱۱-۱-۲۱)$$

حال عنصر ماتریسی باقی مانده را ملاحظه کنید. این همان انتشارگر ذره آزاد از x_{n-1} تا x_n در زمان ε است. این عنصر ماتریسی را [از معادله (۱۰-۱-۵) یا] از تمرین زیر می‌دانیم:

$$\langle x_n | \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{2m\hbar} P^2\right) | x_{n-1} \rangle = \left[\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right]^{1/2} \exp\left[\frac{im(x_n - x_{n-1})^2}{2\hbar \varepsilon} \right] \quad (۱۲-۱-۲۱)$$

تمرین ۱-۱-۲۱: نتیجه بالا را مستقل از معادله (۱۰-۱-۵) و با وارد کردن عملگر همانی بر حسب حالت‌های تکانه بین عملگر نمایشی و ویژه کت مکان در سمت چپ معادله (۱۲-۱-۲۱) به دست آورید. یعنی از

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} |p\rangle \langle p| \quad (۱۳-۱-۲۱)$$

استفاده کنید، که حالت‌های موج تخت دارای تابع موج زیرند

$$\langle x | p \rangle = e^{ipx/\hbar} \quad (21-1-14)$$

که پیمانه انتگرال‌گیری از p را توضیح می‌دهد.
سرانجام داریم:

$$\begin{aligned} \langle x_n | \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{2m\hbar} P^2\right) \cdot \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(X)\right) | x_{n-1} \rangle \\ = \left[\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right]^{1/2} \exp\left[\frac{im(x_n - x_{n-1})^2}{2\hbar\varepsilon}\right] \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x_{n-1})\right) \end{aligned} \quad (21-1-15)$$

با جمع‌آوری ضرایبی نظیر فوق (در مورد $N = 3$ سه ضریب وجود دارد) می‌توانیم به راحتی برای N کلی بنویسیم:

$$\begin{aligned} U(x_N, x_0, t) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{1/2} \left[\int \prod_{n=1}^{N-1} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{1/2} dx_n \right] \\ \times \exp\left[\sum_{n=1}^N \frac{im(x_n - x_{n-1})^2}{2\hbar\varepsilon} - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x_{n-1})\right] \end{aligned} \quad (21-1-16)$$

اگر جملات شامل V را حذف کنیم می‌بینیم که این در توافق دقیق با انتگرال مسیر ذره آزاد فصل ۸ است. برای مثال، پیمانه انتگرال‌گیری دقیقاً N ضریب B^{-1} چون معادله (۸-۴-۸) دارد که $N - 1$ از آنها با انتگرال‌های x همراه هستند. با وجود جمله V ، انتگرال‌ده همان نسخه گسسته شده $\exp(iS/\hbar)$ است:

$$\begin{aligned} \exp\left[\sum_{n=1}^N \frac{im(x_n - x_{n-1})^2}{2\hbar\varepsilon} - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x_{n-1})\right] \\ = \exp\frac{i}{\hbar} \varepsilon \sum_{n=1}^N \left[\frac{m(x_n - x_{n-1})^2}{2\varepsilon^2} - V(x_{n-1})\right] \end{aligned} \quad (21-1-17)$$

می‌توانیم به عقب و به نماد گذاری پیوسته برگشته و به صورت زیر بنویسیم:

$$U(x, x', t) = \int [\mathcal{D}x] \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathcal{L}(x, \dot{x}) dt\right] \quad (21-1-18)$$

که در آن

$$[\mathcal{D}x] = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{1/2} \int \left[\prod_{n=1}^{N-1} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{1/2} dx_n\right] \quad (21-1-19)$$

نماد گذاری پیوسته واقعاً یک نماد گذاری شماتیک برای نسخه گسسته شده است و این را برای توصیف مقصودمان از انتگرال مسیر نیاز داریم. اگر کسی این را فراموش کند به راحتی دچار اشتباهات زیادی می‌شود.

بویژه دلیلی ندارد که اعتقاد داشته باشیم که جاگذاری تفاضل‌ها به وسیله مشتقات همیشه معقول است. برای مثال در این مسئله، در یک زمان ε همان‌طور که در بحث قبل از معادله (۸-۵-۶) توضیح داده شد، متغیری که از آن انتگرال‌گیری می‌شود نوعاً به صورت $O(\varepsilon^{\frac{1}{2}})$ تغییر می‌کند نه $O(\varepsilon)$. کارهای صورت گرفته در مراجع آخر این فصل برخی از نکات ظریف را بحث می‌کنند. اما نسخه پیوسته برای به خاطر سپردن بسیار مفید است چون برخی از جنبه‌های این نظریه را که آنقدر نمایان نیستند در معرض نمایش قرار می‌دهد. این نسخه همین‌طور برای به دست آوردن یک تصویر در سطح نیمه کلاسیکی و یافتن اینکه چه ارتباطی بین دنیای ماکروسکوپی مسیرهای هموار و جهان کوانتومی وجود دارد بسیار مفید است. بعداً چند مثال ارائه خواهیم نمود.

انتگرال مسیر به دست آمده در بالا، انتگرال مسیر فضای پیکربندی یا فقط انتگرال مسیر نامیده می‌شود. اینک مورد بعدی را در نظر می‌گیریم. به عقب برمی‌گردیم:

$$\langle x_N | \underbrace{\exp\left(-\frac{i\varepsilon}{2m\hbar} P^2\right) \cdot \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(X)\right) \cdot \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{2m\hbar} P^2\right) \cdot \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(X)\right) \cdots}_{N \text{ times}} | x_0 \rangle \quad (21-1-21)$$

عملگر همانی را بین هر دو عملگر نمایی وارد می‌کنیم. به دو نسخه از عملگر همانی نیاز داریم:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle \langle x| \quad (21-1-21)$$

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} |p\rangle \langle p| \quad (22-1-21)$$

که حالت‌های موج تخت دارای تابع موج زیرند

$$\langle x|p\rangle = e^{ipx/\hbar} \quad (23-1-21)$$

فرض کنید ابتدا $N = 3$ قرار دهیم و سه عملگر همانی برحسب حالت‌های p و دو عملگر همانی برحسب حالت‌های x ، همانی‌های x و p به صورت یک در میان، وارد کنیم. این کار منجر می‌شود به

$$\begin{aligned} U(x_3, x_0, t) = & \int [\mathcal{D}p \mathcal{D}x] \langle x_3 | \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{2m\hbar} P^2\right) | p_3 \rangle \\ & \times \langle p_3 | \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(X)\right) | x_2 \rangle \langle x_2 | \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{2m\hbar} P^2\right) | p_2 \rangle \\ & \times \langle p_2 | \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(X)\right) | x_1 \rangle \langle x_1 | \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{2m\hbar} P^2\right) | p_1 \rangle \\ & \times \langle p_1 | \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(X)\right) | x_0 \rangle \end{aligned} \quad (24-1-21)$$

$$\int [\mathcal{D}p\mathcal{D}x] = \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty}}_{2N-1 \text{ times}} \prod_{n=1}^N \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \prod_{n=1}^{N-1} dx_n \quad (25-1-21)$$

محاسبه همه عناصر ماتریسی عملگرهای نمایی ساده است چون هر عملگر روی ویژه حالت سمت راست خود اثر می‌کند و با ویژه مقدار مربوطه جایگزین می‌شود. با جمع آوری همه ضرایب (که به‌عنوان تمرین بر آن تأکید می‌کنیم) داریم

$$U(x, x', t) = \int [\mathcal{D}p\mathcal{D}x] \exp \left[\sum_{l=1}^N \left(\frac{-i\varepsilon}{2m\hbar} p_n^2 + \frac{i}{\hbar} p_n (x_n - x_{n-1}) - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x_{n-1}) \right) \right] \quad (26-1-21)$$

این فرمول که برای $N=3$ به‌دست آمد برای هر N صحیح است. در حد $N \rightarrow \infty$ ، یعنی $\varepsilon \rightarrow 0$ ، به‌طور شماتیک برحسب زمان پیوسته (با ضرب و تقسیم جمله میانی در ε)، نسخه پیوسته زیر را داریم:

$$U(x, x', t) = \int [\mathcal{D}p\mathcal{D}x] \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t [p\dot{x} - \mathcal{H}(x, p)] dt \right] \quad (27-1-21)$$

که $\mathcal{H} = P^2/2m + V(x)$ و $(x(t), p(t))$ در اینجا به‌صورت تابعی از متغیر پیوسته t نوشته می‌شوند. این، انتگرال مسیر فضای فاز برای انتشار گر است. نسخه پیوسته بسیار زیباست [با لاگرانژی در توان، اما برحسب (x, p)] ولی فقط یک طرح واره برای نسخه گسسته شده مقدم بر آن است.

در مسئله ما، چون p به‌صورت درجه دو در هامیلتونی وارد می‌شود امکان انتگرال‌گیری از همه N متغیر p_n وجود دارد. با برگشتن به شکل گسسته شده، قسمتی که فقط به p ها بستگی دارد را جدا کرده و انتگرال‌ها را حل می‌کنیم:

$$\begin{aligned} & \prod_1^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp \left[\left(\frac{-i\varepsilon}{2m\hbar} p_n^2 + \frac{i}{\hbar} p_n (x_n - x_{n-1}) \right) \right] \\ &= \prod_1^N \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon} \right)^{1/2} \exp \left[\frac{im(x_n - x_{n-1})^2}{2\hbar\varepsilon} \right] \end{aligned} \quad (28-1-21)$$

حال اگر انتگرال‌های x را در نظر بگیریم خواهیم دید که این دقیقاً آن‌طور که باید انتگرال مسیر فضای پیکربندی را به‌دست می‌دهد.

توجه کنید که اگر p در هامیلتونی به‌صورت درجه دوی جدا شدنی وارد نشود امکان ندارد از آنها انتگرال گرفته و به یک انتگرال مسیر روی فقط x برسیم یعنی نمی‌دانیم چطور انتگرال‌های غیر گوسی را حل کنیم. در آن مورد فقط می‌توانیم انتگرال مسیر فضای فاز را بنویسیم. اکنون به دو کاربرد از انتگرال‌های مسیری که در بالا بحث شدند می‌پردازیم.

ترازهای لانداو

اکنون مسئله‌ای را بررسی می‌کنیم که در معادله QHE اهمیت نظری زیادی دارد (Prange و Girvin را ببینید). در اینجا برخی از جنبه‌های آن را مطالعه می‌کنیم، بررسی همه ویژگی‌ها با انتگرال‌های تابعی ضرورتی ندارد.

ذره‌ای به جرم μ و بار q را در صفحه $x - y$ با یک میدان مغناطیسی یکنواخت B در امتداد محور z در نظر بگیرید. این مسئله را در تمرین (۱۲-۳-۶) بحث کردیم. با استفاده از یک پتانسیل برداری

$$A = \frac{B}{2} (-y\mathbf{i} + x\mathbf{j}) \quad (21-1-29)$$

یک هامیلتونی به دست آوردیم

$$H = \frac{[P_x + qYB/2c]^2}{2\mu} + \frac{[P_y - qXB/2c]^2}{2\mu} \quad (21-1-30)$$

از شما خواسته شد تا ثابت کنید که

$$Q = \frac{(cP_x + qYB/2)}{qB} \quad P = (P_y - qBX/2c) \quad (21-1-31)$$

متغیرهای کانونیک با $[Q, P] = i\hbar$ هستند. نتیجه این شد که H با فرمول زیر مشخص می‌شود

$$H = \frac{P^2}{2\mu} + \frac{1}{2} \mu \omega_0^2 Q^2 \quad (21-1-32)$$

و دارای طیف یک نوسانگر با فاصله $\hbar\omega_0$ است که در آن

$$\omega_0 = qB/\mu c \quad (21-1-33)$$

فرکانس سیلیکوترونی (چرخش) است. برحسب

$$a = \left(\frac{\mu\omega_0}{2\hbar} \right)^{1/2} Q + i \left(\frac{1}{2\mu\omega_0\hbar} \right)^{1/2} P \quad (21-1-34)$$

و الحاقی آن، می‌توان نوشت:

$$H = [a^\dagger a + \frac{1}{2}] \hbar\omega_0 \quad (21-1-35)$$

به نظر می‌رسد که ما از یک مسئله دو بعدی به یک مسئله نوسانگر یک بعدی آمده‌ایم. این چگونه ممکن است؟ نکته این است که یک زوج کانونیک دیگر وجود دارد

$$P' = \frac{(cP_x - qYB/2)}{qB} \quad Q' = (P_y + qBX/2c) \quad (21-1-36)$$

که با Q و P جابه‌جا می‌شوند و در H وارد نمی‌شوند.

تمرین ۲۱-۱-۲: اگر جزئیات تمرین (۱۲-۳-۸) را به خاطر نمی‌آورید، همه گام‌های حذف شده در استخراج را که از معادله (۲۱-۱-۲۹) شروع و به (۲۱-۱-۳۵) ختم می‌شوند بنویسید. قواعد جابه‌جایی را برای (Q', P') بررسی کنید.

مشخصه چرخه‌ای (Q', P') در این حقیقت منعکس می‌شود که ترازهای نوسانگر، موسوم به ترازهای لانداو، بی‌نهایت تبهگن هستند. برای مشاهده این تبهگنی، پایین‌ترین تراز لانداو را در نظر بگیرید که مخفف آن LLL است. حالت‌ها در این تراز از معادله زیر پیروی می‌کنند

$$a|0\rangle = 0 \quad (۳۷-۱-۲۱)$$

که در نمایش مختصه به صورت زیر می‌شود

$$\left[\frac{\partial}{\partial z^*} + \frac{qB}{4\hbar c} z \right] \psi_0(z, z^*) = 0 \quad (۳۸-۱-۲۱)$$

که در آن به مختصه‌های مختلط تغییر متغیر داده‌ایم

$$z = x + iy \quad z^* = x - iy \quad (۳۹-۱-۲۱)$$

اگر جواب زیر را در نظر بگیریم

$$\psi_0(z, z^*) = \exp\left[-\frac{qB}{4\hbar c} zz^*\right] u(z, z^*) \quad (۴۰-۱-۲۱)$$

به نتیجه زیبای زیر می‌رسیم

$$\frac{\partial}{\partial z^*} u(z, z^*) = 0 \quad (۴۱-۱-۲۱)$$

که به عنوان قاعده تعریف کننده LLL است. لذا u یک تابع تحلیلی یعنی تابعی از ترکیب $x + iy$ است. واضح است که خانواده چنین توابعی بی‌نهایت بزرگ است، با چند جمله‌ای‌های تکین $[z^m | m = 0, 1, 2, \dots]$ که به عنوان یک پایه مستقل خطی به کار می‌روند. لذا تابع حالت پایه ψ_0 مثل مورد نوسانگر یک بعدی تابعی منحصر بفرد نیست بلکه یک برهم‌نهی از توابع به شکل

$$\psi_{0,m} = z^m \exp\left[-\frac{qB}{4\hbar c} zz^*\right] \quad (۴۲-۱-۲۱)$$

است. اینک ادعا می‌کنیم که:

- برای m بزرگ، چگالی احتمال ذره در شعاع $r_m = \sqrt{2mr_0}$ متمرکز می‌شود، که $r_0 = \sqrt{\hbar/qB}$ طول مغناطیسی نامیده می‌شود.
- اگر سیستم از نظر اندازه بی‌نهایت نباشد بلکه قرصی به شعاع R ، باشد بزرگترین مقدار m که می‌تواند در دیسک قرار گیرد و در نتیجه N ، تعداد حالت‌های LLL که درون قرص جا می‌گیرند با رابطه زیر مشخص می‌شود

$$N = \frac{\pi R^2 B}{\Phi_0} \quad (۲۱-۱-۴۳)$$

که در آن، صورت شار گذرنده از نمونه و مخرج کوانتوم شار معادله (۱۸-۴-۳۹) است:

$$\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar c}{q} \quad (۲۱-۱-۴۴)$$

تمرین ۱۲-۱-۳: (منوط به اینکه بخواهید *QHE* را پیگیری کنید) معادله مربوط به *LLL* را در نمایش مختصه از طریق نوشتن مراحل حذف شده در استنتاج به دست آورید. ادعاهای فوق را ثابت کنید، توجه کنید که N ، تعداد حالت‌ها در *LLL* با شار عبوری از نمونه برحسب کوانتوم شار مشخص می‌شود. در ادامه بحث، N یعنی ابعاد میدان و نمونه را ثابت نگه خواهیم داشت.

در مطالعه *QHE* به مسائلی علاقه مند هستیم که در آنها یک گاز الکترون طراحی می‌شود تا در دو بعد باشد (چون بار الکترون $q = -e$ است، فرمول‌های ما با $q = e$ هم معتبر خواهند ماند اگر علامت پتانسیل برداری و میدان در ابتدا عوض شوند. از این پس تصور کنید که این کار انجام گرفته است و q نشان‌دهنده اندازه بار الکترون است). اسپین الکترون در امتداد میدان اعمال شده ثابت و منجمد می‌شود و هیچ دینامیک جالب توجهی ندارد. بویژه اینکه بار بر دوش تابع موج مداری است تا پاد متقارن بودن را تضمین کند. در یک مسئله واقعی می‌خواهیم برهمکنش بین الکترون‌ها و همین‌طور برهمکنش بین الکترون‌ها و هر پتانسیل اسکالر خارجی $V(x, y)$ مربوط به محیط زمینه را در نظر بگیریم. فرض می‌شود که هر دوی این برهمکنش‌ها دارای مقیاس بسیار کوچکتر از گاف $\hbar q B / \mu c$ بین ترازهای لاندائو هستند. لذا در دماهای پایین، یک مسئله ساده با فضای هیلبرت محدود شده به *LLL* داریم. این مسئله به چه چیزی شباهت دارد؟

انتگرال مسیر به این سوال پاسخ می‌دهد. پاسخ را برای موردی که برهمکنش الکترون - الکترون صفر است به دست خواهیم آورد (تنها در این صورت الکترون‌ها به‌طور مستقل منتشر می‌شوند و می‌توانیم یک انتگرال تابعی برای یک الکترون بنویسیم). کنش عبارتست از

$$S = \int \left[\frac{\mu}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2) + \frac{qB}{2c} (-y\dot{x} + x\dot{y}) - V(x, y) \right] dt \quad (۲۱-۱-۴۵)$$

که در آن جملات خطی از سرعت نشان‌دهنده $(q/c)\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}$ در لاگرانژی در پیمانه مورد استفاده است. برای رسیدن به فیزیک انرژی - پایین می‌بایست ترازهای لاندائو بالاتر را دور بریزیم. از آنجا که گاف تا ترازهای بالاتر، $\hbar q B / \mu c$ است این کار با گرفتن حد $\mu \rightarrow 0$ واقعاً صورت می‌گیرد (در این حد، انرژی نقطه صفر نوسانگر، که انرژی *LLL* را به دست می‌دهد، واگرا می‌شود. فرض می‌شود که این ثابت از هامیلتونی خارج می‌شود) این، کنش انرژی - پایین را به دست می‌دهد

$$S_{LLL} = \int \left[\frac{qB}{c} x\dot{y} - V(x, y) \right] dt \quad (۲۱-۱-۴۶)$$

که یک انتگرال گیری جزء به جزء انجام داده‌ایم تا دو جمله خطی نسبت به سرعت را ترکیب کنیم (جمله سطحی معادلات حرکت را تحت تاثیر قرار نخواهد داد).

به این نتیجه جالب توجه کنید که کنش، کنش انتگرال مسیر فضای فاز، با y و \bar{x} به عنوان متغیرهای به طور کانونیک مزدوج^۱ است. (\bar{x}, y) در اینجا نقش هامیلتونی را برای این مسئله بازی می‌کند. از آنجا که فقط یک مختصه و یک تکانه داریم، مسئله LLL اساساً یک بعدی است.

در تصویر نیمه کلاسیکی، مدارها از معادلات هامیلتون پیروی خواهند کرد:

$$\dot{y} = \frac{\partial V}{\partial \bar{x}} \quad \dot{\bar{x}} = -\frac{\partial V}{\partial y} \quad (۲۱-۱-۴۷)$$

و می‌توان تلاش کرد تا کوانتش بوهر - زومرفلد را انجام داد. در سطح کوانتومی، V می‌تواند یک عملگر دیفرانسیلی پیچیده باشد چون \bar{x} درون مشتق y خواهد بود. جزئیات و کاربردهای تصویر نیمه کلاسیکی را می‌توان در مراجع یافت.

در اینجا ممکن است اعتراض کنید که اگر ما جواب عملگری نداشتیم که بیان می‌کند ترازهای مسئله به صورت μ^{-1} تغییر می‌کنند برای ما امکان نداشت که حد $\mu \rightarrow 0$ را در نظر بگیریم تا فیزیک انرژی - پایین را جدا (منزوی) کنیم. اینگونه نیست. ثابت خواهیم کرد که در حد انرژی‌های پایین، یعنی فرکانس‌های پایین، جملات واقع در کنش با مشتق‌های زمانی بالاتر می‌توانند در مقایسه با مشتق‌های پایین‌تر نادیده گرفته شوند. این به ما امکان می‌داد تا همین جمله انرژی جنبشی را به دست آوریم (در اینجا شما می‌توانید این کار را حتی در یک مسئله در غیاب میدان مغناطیسی هم انجام دهید اما این کار دینامیک جالب توجه چندانی به شما ارائه نخواهد کرد. در اینجا برخی از مشتقات خطی را عجلتاً ننگه داشته‌ایم یعنی در اینجا فیزیک انرژی - پایین، فیزیک کل LLL بی‌نهایت تبهگن است). در مسائلی که چنین دینامیک غیر بدیهی و با اهمیتی رها می‌شود معمولاً می‌بینیم که متغیرهایی که برای جابه‌جا شدن به کار می‌روند، به طور کانونیک مزدوج می‌شوند.

تمرین ۲۱-۱-۴: مدارهای نیمه کلاسیکی را مطالعه کرده و نشان دهید که حرکت روی پربندهای V ثابت است (راهنمایی: گرادیان V را در نظر بگیرید).

چطور X و Y ناگهان غیر جابه‌جا شونده می‌شوند در صورتی که طبق فرض آنها جابه‌جا شونده هستند. پاسخ این است که اگر دو ماتریس در یک فضای معین (کل فضای هیلبرت) جابه‌جا شوند، با برش (کوتاه‌سازی)^۲ آنها به یک زیر فضا (در اینجا حالت‌های LLL) لزوماً جابه‌جا نمی‌شوند. آنچه خوب است این است که جابه‌جاگر X و Y به جای اینکه یک چیز آزار دهنده باشد یک ثابت است که این زوج را به طور کانونیک مزدوج می‌سازد (با مقیاس بندی مجدد بی‌اهمیت).

1- Canonically conjugate variables.

2- Truncation.

تمرین ۲۱-۱-۵: ماتریس‌های 3×3 جابه‌جا شونده Ω و Λ را از تمرین (۱-۸-۱۰) در نظر بگیرید. اگر آنها را با حذف سطر و ستون سوم برش دهید، نشان دهید که ماتریس‌های 2×2 برش داده شده (ناقص) جابه‌جا نمی‌شوند.

یک سیستم متناهی را با N الکترون در نظر بگیرید یعنی سیستمی با LLL کاملاً پر شده، با یک الکترون در هر حالت در LLL . تمام برهمکنش‌های بین الکترون‌ها یا الکترون‌ها با محیط را نادیده بگیرید. حالت پایه آن کدام است؟ از آنجا که اسپین آنها در امتداد میدان قطبیده است تابع موج فضایی می‌بایست نسبت به مختصه‌های فضایی الکترون پاد متقارن و همین‌طور تحلیلی باشد. یک تابع موج حاصل ضرب بهنجار شده برای N ذره عبارتست از

$$\Psi_P = z_1^0 z_2^1 z_3^2 \cdots z_N^{N-1} \exp\left(-\frac{qB}{4\hbar c} \sum_i z_i^* z_i\right) \equiv u_P \exp\left(-\frac{qB}{4\hbar c} \sum_i z_i^* z_i\right) \quad (48-1-21)$$

که وقتی پاد متقارن شود منجر می‌شود به

$$u_A = \prod_{i=1}^N \prod_{j=1}^{i-1} (z_i - z_j) \quad (49-1-21)$$

تمرین ۲۱-۱-۶: معادله بالا را برای مورد سه ذره ثابت کنید. با نوشتن دترمینان 3×3 به صورت معادله (۱۰-۳-۳۶) هم این را نشان دهید (در همه این عملیاتی که انجام می‌دهید، ضریب نمایی در تابع موج، که نسبت به مختصه‌ها کلاً متقارن است، هیچ نقشی ندارد).

این تابع موج منحصره‌فرد است چون فقط یک راه برای قرار دادن N الکترون (با اسپین قطبیده شده) در N حالت وجود دارد. بنابراین حالت پایه منحصره‌فرد را برای LLL کاملاً پر شده در حد بدون برهمکنش می‌دانیم. اما حتی اگر برهمکنش‌های بین الکترون‌ها را هم در نظر بگیریم، اگر نخواهیم به بالاتر از LLL برویم این تنها تابع موج پاد متقارن است که می‌توانیم برای این مسئله، که تعداد حالت‌ها برابر تعداد الکترون‌هاست، بنویسیم.

حال مسئله واقعاً جالب، مسئله‌ای است که در همین میدان و نمونه، تعداد کمتری الکترون، vN ، داریم، که $1/v$ یک عدد صحیح فرد است (این یکی از مواردی است که آزمایشات نتایج شگفت‌انگیزی نشان می‌دهند). می‌گوییم سیستم دارای یک ضریب پرشدگی v^1 است بدین معنی که دارای v برابر بیشینه تعداد مجاز از ذرات در حالت LLL است. لذا LLL کاملاً پر شده با $v=1$ مشخص می‌شود. در حالی که قبلاً یک الکترون در هر LLL قرار دادیم (و فقط یک راه و لذا یک تابع موج پاد متقارن داشتیم) در اینجا بیش از یک راه و لذا برهمکنش‌های ممکن زیادی از توابع موج LLL وجود دارد که می‌توانند نامزد حالت پایه سیستمی از الکترون‌های دارای برهمکنش کولنی باشند. لافلین^۲ تابع موج زیر را پیشنهاد کرد:

$$u_v = \prod_{i=1}^{vN} \prod_{j=1}^{i-1} (z_i - z_j)^{1/v} \quad (50-1-21)$$

ثابت می‌کنیم که این تابع موج با توصیف ما توافق دارد. یک مختصه ذره، مثلاً z_1 را انتخاب کرده (چون ذرات یکسانند) و ملاحظه کنید که بزرگترین توانی که وجود دارد (برای N بزرگ) عبارتست از

$$z_1^{1/\nu \cdot \nu N} = z_1^N$$

بنابراین اندازه بزرگترین تابع موج دقیقاً بر اندازه نمونه منطبق می‌شود. سپس توجه کنید که تابع تحت تعویض دو مختصه پادمقارن است چون $1/\nu$ فرد است. سرانجام توجه کنید که الکترون‌ها به خوبی از یکدیگر اجتناب می‌کنند (به واسطه صفر مرتبه - بالا، وقتی هر دو مختصه به یکدیگر میل می‌کنند). و بدین طریق برهمکنش دافعه خود را کمینه می‌نمایند. تعجب‌آور نیست، اتفاقاً این یک تابع موج حالت پایه بسیار خوب در این ضرایب پرشدگی است (برای $1/\nu$ کوچک).

فاز بری

مسئله مورد بحث می‌بایست در تقریب بی‌دررو بحث شود. مثال ذره در جعبه‌ای به طول L را به خاطر بیاورید. فرض می‌کنیم ذره در حالت پایه باشد. فرض کنید به صورت آرام با زمان به صورت تابع $L(t)$ گسترش یابد. اصل بی‌دررو بیان می‌کند که اگر انبساط بقدر کافی آرام باشد، ذره در لحظه T در حالت پایه جعبه به طول $L(T)$ خواهد بود. همین‌طور ذره که در حالت $|n(L(0))\rangle$ بود در لحظه t خودش را در ویژه حالت لحظه‌ای $|n(L(t))\rangle$ خواهد یافت.

به‌طور کلی‌تر، اگر هامیلتونی ذره با $H(R(t))$ مشخص شود که R یک مختصه خارجی است که به صورت آرام تغییر می‌کند و به صورت پارامتری در H ظاهر می‌شود، اصل بی‌دررو بیان می‌کند که اگر ذره در ابتدا در ویژه حالت n ام $H(R(0))$ باشد در لحظه t در ویژه کت لحظه‌ای n ام $H(R(t))$ قرار خواهد داشت.

جواب معادله شرودینگر در این تقریب چیست؟ در اینجا یک حدس معقول داریم:

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt'\right) |n(t)\rangle \quad (51-1-21)$$

که در آن

$$H(t)|n(t)\rangle = E_n(t)|n(t)\rangle \quad (52-1-21)$$

ابتدا توجه کنید که اگر H با زمان تغییر نکند، پاسخ فوق، با ضریب فازی که مربوط به انرژی E_n است، به‌وضوح درست است. فرمول فوق نشان می‌دهد که انرژی لحظه‌ای با زمان تغییر می‌کند و تغییر فاز انباشته^۱ را به‌دست می‌دهد، درست همان‌طور که تابع موج WKB این فاز را به‌صورت انتگرال فضایی یک تکانه وابسته به مکان برای ذره‌ای در حال حرکت در یک $V(x)$ غیر ثابت به‌دست می‌دهد.

طی سالها، بسیاری از مردم، بویژه هرزبرگ و لونگوت - هیگینز و میاد و تراهرلر^۱ مسائل مختلفی را با این فرمول مورد بررسی قرار دادند و روش‌هایی را برای تثبیت آنها پیدا کردند. کل مسئله توسط بری مورد مطالعه دقیق قرار گرفت. دعوت می‌کنیم که نوشته‌های بسیار روشن ایشان و مجموعه مقالات وابسته به آنها (با تفسیر مفید) که توسط شیپر و ویلکزک^۲ نوشته شده‌اند، را مطالعه کنید (آخر این فصل).

برای اینکه ببینید چه چیزی در حدس فوق کم است، آنرا به صورت زیر تصحیح می‌کنیم:

$$|\psi(t)\rangle = c(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt'\right) |n(t)\rangle \quad (۵۳-۱-۲۱)$$

که اگر حدس قبلی صحیح باشد ضریب اضافی $c(t)$ می‌بایست برابر یک باشد. معادله شرودینگر را برای این حالت به کار می‌بریم:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t)\right) |\psi(t)\rangle = 0 \quad (۵۴-۱-۲۱)$$

وقتی مشتق زمانی اثر می‌کند سه جمله به دست می‌آید: یکی از مشتق ضریب فاز انباشته (که اثر H روی ویژه کت را خنثی می‌کند)، یکی از مشتق $c(t)$ و یکی از مشتق ویژه کت لحظه‌ای. دو جمله آخر به معادله زیر منجر می‌شوند (با ضرب دو طرف در برای لحظه‌ای):

$$\dot{c}(t) = -c(t) \langle n(t) | \frac{d}{dt} |n(t)\rangle \quad (۵۵-۱-۲۱)$$

که جوابی به شکل زیر دارد:

$$c(t) = c(0) \exp\left(-\int_0^t \langle n(t') | \frac{d}{dt'} |n(t')\rangle dt'\right) = c(0) e^{i\gamma} \quad (۵۶-۱-۲۱)$$

$$\gamma = i \int_0^t \langle n(t') | \frac{d}{dt'} |n(t')\rangle dt' \quad (۵۷-۱-۲۱)$$

پیدا کردن این فاز اضافی، موسوم به فاز بری یا فاز هندسی، چیز مهمی نیست بلکه مهم است بدانیم که این فاز می‌تواند نتایج قابل اندازه‌گیری داشته باشد. روی هم‌رفته یاد گرفته‌ایم که فاز یک کت برای هیچ کمیت قابل اندازه‌گیری تفاوتی ایجاد نمی‌کند. از آنجا که کت‌های لحظه‌ای خودشان فقط صرفنظر از یک ضریب فاز تعریف می‌شوند می‌توانیم یک مجموعه جدید انتخاب کرده و فاز اضافی را تصحیح کنیم. اگر انتخاب زیر را انجام دهیم

$$|n'(t)\rangle = e^{i\chi(t)} |n(t)\rangle \quad (۵۸-۱-۲۱)$$

1- Herzberg, Longuet, Higgins, Mead, Truhlar.

2- Shapere and Wilczek.

آنگاه داریم

$$i\langle n'(t) | \frac{d}{dt} | n'(t) \rangle = i\langle n(t) | \frac{d}{dt} | n(t) \rangle - \frac{d\chi(t)}{dt} \quad (۲۱-۱-۵۹)$$

که پیشنهاد می‌کند که شاید می‌توانستیم $\chi(t)$ را طوری انتخاب کنیم که فاز اضافی را کاملاً خنثی کند. در حالت کلی فرض می‌شد که چنین انتخابی می‌تواند صورت گیرد و فاز اضافی به فراموشی سپرده می‌شد. در اینجا فرض کنید که پارامتری که با زمان تغییر می‌کند و موجب تغییر هامیلتونی می‌شود بعد از زمان T به مقدار اولیه خود برگردد به طوری که:

$$H(T) = H(0) \quad (۲۱-۱-۶۰)$$

شود. حالا دیگر واضح نیست که بتوانیم از شرط فاز اضافی خلاص شویم. می‌توانیم بنویسیم:

$$i \oint \langle n'(t) | \frac{d}{dt} | n'(t) \rangle dt = i \oint \langle n(t) | \frac{d}{dt} | n(t) \rangle dt - (\chi(T) - \chi(0)) \quad (۲۱-۱-۶۱)$$

حال انتخاب ضرایب فاز کاملاً اختیاری است، اما باید شرط تک مقدار بودن تخصیص فاز را، حداقل درون ناحیه شامل حلقه بسته مورد بحث، برآورده کند (یک انتخاب تک مقدار در کل فضای پارامتری در حالت کلی ناممکن خواهد بود). این موضوع ظریفی است که برای تمرین (۲۱-۱-۱۵) نگره می‌داریم. بنابراین اجازه دهید با پایه $|n(t)\rangle$ شروع کرده و به پایه دیگر $|n'(t)\rangle = e^{i\chi(t)} |n(t)\rangle$ برویم. از آنجا که پایه جدید طبق فرض تک - مقدار است، ضریب فاز اضافی هم می‌بایست تک مقدار باشد. به عبارتی دیگر، $\chi(T) - \chi(0) = 2m\pi$ باشد که m یک عدد صحیح است. این بنوبه خود بدین معنی است که پیش ضریب $e^{i\gamma} \equiv \exp \left[i \oint \langle n(t) | i (d/dt) | n(t) \rangle dt \right]$ که در یک مدار بسته ظاهر می‌شود نمی‌تواند از طریق انتخاب پایه تغییر کند. همین‌طور توجه کنید که چون dt در همه انتگرال‌ها حذف می‌شود نمی‌توانیم با آرام کردن تغییر پارامتر تغییر در این فاز ایجاد کنیم. ضریب فاز فقط به مسیر در فضای پارامتر بستگی دارد که دلیل نام «فاز هندسی» را توضیح می‌دهد. توجه کنید که ما نشان نداده‌ایم که $e^{i\gamma} \neq 1$ است بلکه فقط نشان داده‌ایم که مقدار آن با تعریف مجدد فازها برای بردارهای حالت تغییر نمی‌کند.

پس فرض می‌کنیم که یک γ غیر صفر داریم. این γ دقیقاً چه کاری انجام می‌دهد؟ برای دیدن این مطلب مسئله‌ای را در نظر می‌گیریم که در آن جعبه واقعاً یک جعبه نیست بلکه پتانسیل یک شیء سنگین است. برای مثال R مختصه هسته و r مختصه یک الکترون در حال چرخش حول آن است. در این بحث از نماد گذاری مرسوم خود فاصله می‌گیریم: حروف بزرگ برای مختصه‌ها و تکانه‌های هسته‌ای (کلاسیکی یا کوانتومی) و حروف کوچک برای نمایش الکترون به کار خواهند رفت. همین‌طور موقتاً از ماهیت برداری این متغیرها چشم پوشی خواهیم نمود. جعبه در اینجا چاه کولنی ایجاد شده توسط هسته است. وقتی هسته حرکت می‌کند جعبه حرکت می‌کند به جای اینکه اندازه‌اش تغییر کند، اما مسئله همان است. وقتی هسته از مکانی به مکان دیگر به آرامی می‌رود الکترون چابک در ویژه حالت لحظه‌ای می‌ماند. اگر چه هیچ توجهی به دینامیک

هسته نکرده‌ایم ولی خواهیم دید که فاز بری یک دینامیک برای آن ایجاد می‌کند. ضریب فاز را به صورت زیر باز نویسی می‌کنیم:

$$\exp\left(-\int_0^t \langle n(t') | \frac{d}{dt'} | n(t') \rangle dt'\right) \quad (62-1-21)$$

$$= \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle n(t') | \frac{d}{dt'} | n(t') \rangle dt'\right)$$

$$= \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle n(R(t')) | \frac{d}{dR} | n(R(t')) \rangle \frac{dR}{dt'} dt'\right) \quad (63-1-21)$$

$$= \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^t A^n(R) \frac{dR}{dt'} dt'\right) \quad (64-1-21)$$

که در آن

$$A^n(R) = i\hbar \langle n(R) | \frac{d}{dR} | n(R) \rangle \quad (65-1-21)$$

لذا می‌بینیم که درجه آزادی هسته‌ای آرام دارای یک جفت شدگی سرعتی به پتانسیل برداری $A^n(R)$ ، موسوم به پتانسیل بری، است. این پتانسیل به آن حالت کوانتومی $|n\rangle$ بستگی دارد که درجه آزادی الکترونی در آن قرار دارد. وقتی بردارهای حالت به وسیله تبدیلات فاز مجدداً تعریف می‌شوند این پتانسیل برداری متحمل یک تبدیل پیمانه‌ای می‌شود:

$$|n(R)\rangle \rightarrow e^{i\chi(R)} |n(R)\rangle \quad (66-1-21)$$

$$A^n(R) \rightarrow A^n(R) - \hbar \frac{d\chi}{dR} \quad (67-1-21)$$

اما انتگرال خطی آن حول یک حلقه بسته ناوردای پیمانه‌ای بوده و می‌توانست غیر صفر باشد. نادیده گرفتن این موجب رسیدن به دینامیکی غلط برای هسته می‌شد.

در اینجا برخی از شما ممکن است احساس ناخوشایندی داشته باشید و بگوئید: «ما می‌دانیم که چطور فرض می‌شود که پتانسیل برداری در لاگرائژی یا کنش وارد می‌شود اما شما آن را از یک ضریب فاز در تابع موج مختصات سریع بیرون آوردید». این اعتراض نسبتاً خوبی است و در پاسخ به آن به‌طور مفصل، خواهیم دید که یک پتانسیل اسکالر در کنار پتانسیل برداری وجود دارد.

با یک انتگرال مسیر برای درجه آزادی هسته‌ای شروع می‌کنیم چه عملگر همانی یی باید استفاده کنیم. عملگر مناسب برای مسئله ما عبارتست از:

$$I = \int dR \sum_n |R, n(R)\rangle \langle n(R), R| \quad (68-1-21)$$

که در آن $|R, n(R)\rangle \equiv |R\rangle \otimes |n(R)\rangle$. به عبارتی دیگر، در هر R ، یک پایه برای الکترون‌ها انتخاب می‌کنیم که هامیلتونی الکترونی لحظه‌ای $H_e(R, r, p)$ را قطری می‌کند

$$H_e(R, r, p)|R, n(R)\rangle = E_n(R)|R, n(R)\rangle \quad (۶۹-۱-۲۱)$$

البته، شما می‌توانید یک پایه برای الکترون‌ها انتخاب کنید که هیچ همبستگی با مختصه‌های هسته‌ای ندارد. در حالی که این از نظر ریاضی درست است ولی برای تقریب بی‌دررو عاقلانه نیست. برای مورد اخیر از این تقریب استفاده می‌کنیم که اگر الکترون در مقدار اولیه n آماده شود در آنجا باقی می‌ماند و همه مقادیر دیگر می‌توانند نادیده گرفته شوند. بنابراین می‌نویسیم:

$$I \simeq \int dR |R, n(R)\rangle \langle n(R), R| \quad (۷۰-۱-۲۱)$$

که جمع روی n حذف شده است. به‌دست آوردن انتگرال مسیر فضای پیکربندی نسبت به R مثل همیشه انجام می‌شود. یک ضریب نوعی در انتگرالده مسیر به‌صورت زیر خواهد بود:

$$\langle n(R(t+\varepsilon)), R(t+\varepsilon) | \exp\left[-\frac{i\varepsilon}{\hbar} H(R, P)\right] \exp\left[-\frac{i\varepsilon}{\hbar} H_e(R, r, p)\right] | n(R(t)), R(t) \rangle \quad (۷۱-۱-۲۱)$$

قسمت هسته‌ای، که بین ویژه حالت‌های مختصه هسته‌ای ساندریج شده است، ضریب زیر را به‌دست خواهد داد

$$\langle R(t+\varepsilon) | \exp\left[-\frac{i\varepsilon}{\hbar} H(R, P)\right] | R(t) \rangle \quad (۷۲-۱-۲۱)$$

$$= \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon}} \exp\left[\frac{i\varepsilon}{\hbar} \left[\frac{M}{2\varepsilon^2} (R(t+\varepsilon) - R(t))^2 - V(R)\right]\right]$$

در حالی که تابع نمایی الکترونی از سمت چپ روی ویژه کت خود اثر خواهد کرد و یک ضریب $\exp[-(i\varepsilon/\hbar)E_n(R)]$ به‌دست خواهد داد که پتانسیل هسته‌ای را به اندازه $E_n(R)$ تغییر خواهد داد. این چگونگی تحلیل مولکول‌ها توسط بورن و اوپنهایمر است که در آنها یک فاصله مشخص بین درجات آزادی سریع (الکترونی) و آرام (هسته‌ای) وجود دارد: درجات آزادی آرام را ثابت نگه می‌داریم، مسئله را برای درجات آزادی سریع در این مقدار حل می‌کنیم، و ویژه انرژی‌های سریع را به‌عنوان یک پتانسیل اضافی برای مسئله آرام که بعداً حل می‌شود به کار می‌بریم.

اما این کل ماجرا نیست. بعد از اینکه قسمت نمایی الکترونی روی ویژه کت خود اثر کرد و ضریب فاز نمایی $\exp[-(i\varepsilon/\hbar)E_n(R)]$ را به‌دست داد، هنوز یک ضرب نقطه‌ای داریم که در همه چیز ضرب می‌شود:

$$\langle n(R(t+\varepsilon)) | n(R(t)) \rangle \equiv \langle n(R') | n(R) \rangle \quad (۷۳-۱-۲۱)$$

همه نتایج از تحلیل این ضریب به دست می‌آیند. اولاً درست است که وقتی $R = R'$ می‌شود این ضریب برابر یک می‌شود. قصد داریم یک بسط تیلور از این ضرب برحسب تفاضل $R - R' = \eta$ انجام دهیم. تا کجا باید پیش برویم؟ اگر فصل ۸ را به یاد بیاوریم که معادله شرودینگر را از انتگرال مسیر با در نظر گرفتن انتشارگر برای زمان‌های بی‌نهایت کوچک یعنی یک بازه زمانی به طول ε به دست آوردیم پاسخ روشن می‌شود. فرمول مربوطه معادله (۷-۵-۸) را با دو تغییر باز می‌باییم: همه برهمکنش‌ها را حذف کرده و فقط انتشارگر ذره آزاد را نگه می‌داریم اما ضرب نقطه‌ای $\langle n(R') | n(R) \rangle$ را الحاق می‌کنیم. این کار برای هسته نتیجه می‌دهد:

$$\psi(R', \varepsilon) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{im\eta^2/2\hbar\varepsilon} \langle n(R') | n(R' + \eta) \rangle \psi(R' + \eta, 0) d\eta \quad (۷۴-۱-۲۱)$$

تابع نمایی اجازه می‌دهد تا η به اندازه

$$|\eta| \simeq \left(\frac{2\pi\hbar\varepsilon}{m} \right)^{1/2} \quad (۷۵-۱-۲۱)$$

افت و خیز کند (معادله (۶-۵-۸) را به‌خاطر بیاورید). این به مفهوم این است که می‌بایست تا مرتبه η^2 برویم چون می‌خواهیم تا مرتبه ε برویم تا معادله شرودینگر را به دست آوریم. پس ψ و $\langle \eta(R') | \eta(R' + \eta) \rangle$ را تا این مرتبه بسط می‌دهیم

$$\psi(R' + \eta, 0) = \psi(R', 0) + \eta \frac{\partial \psi}{\partial \eta} + \frac{\eta^2}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \eta^2} + \dots \quad (۷۶-۱-۲۱)$$

$$\langle n(R') | n(R' + \eta) \rangle = 1 + \eta \langle n | \partial n \rangle + \frac{\eta^2}{2} \langle n | \partial^2 n \rangle + \dots \quad (۷۷-۱-۲۱)$$

که همه مشتقات در نقطه R' گرفته می‌شوند و $|\partial n\rangle$ مشتق $|n\rangle$ نسبت به R' است و قس علی‌هذا. حال اگر این بسط‌ها را در معادله (۷۴-۱-۲۱) قرار دهیم و مثل فصل ۸ فقط توان‌های زوج η را نگه داریم با انجام انتگرال‌های گاوسی و حذف پریم از R' داریم

$$i\hbar(\psi(R, \varepsilon) - \psi(R, 0)) = \varepsilon \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial R^2} - \frac{\hbar^2}{m} \langle n | \partial n \rangle \frac{\partial \psi}{\partial R} - \frac{\hbar^2}{2m} \langle n | \partial^2 n \rangle \psi \right] \quad (۷۸-۱-۲۱)$$

تمرین ۲۱-۱-۷: مراحل منتهی به معادله فوق را بنویسید.

هامیلتونی می‌تواند از بالا به دست آید:

$$H = \frac{1}{2m} (P - A^n)^2 + \Phi^n \quad (۷۹-۱-۲۱)$$

$$A^n = i\hbar \langle n | \partial n \rangle \quad (۸۰-۱-۲۱)$$

$$\Phi^n = \frac{\hbar^2}{2m} [\langle \partial n | \partial n \rangle - \langle \partial n | n \rangle \langle n | \partial n \rangle] \quad (۸۱-۱-۲۱)$$

تمرین ۲۱-۱-۸: مراحل حذف شده را بنویسید. از $\langle \partial n | n \rangle = -\langle n | \partial n \rangle$ استفاده کنید که از $\partial \langle n | n \rangle = 0$ به دست می آید. پتانسیل Φ^n از اضافه کم کردن جمله (A^n) حاصل می شود. تابع کنش (گسسته شده) که دقیقاً همین نتایج را به دست خواهد داد جمله A^n v (با A^n محاسبه شده در نقطه میانی) و پتانسیل اسکالر اضافی Φ^n را خواهد داشت. چون هامیلتونی را داریم آنرا نخواهیم نوشت. تمرین زیر این نکته را با دقت بیشتر بررسی می کند.

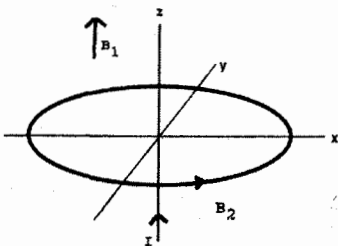
تمرین ۲۱-۱-۹: فرض کنید هامیلتونی را به شیوه فوق (با توسل به تابع موج) به دست نیاوریم بلکه بخواهیم تابع کنش گسسته شده صحیح را با شروع از معادله (۲۱-۱-۷۱) و بسط $\langle \eta(R') | \eta(R) \rangle$ تا مرتبه دوم $R' - R$ همچون معادله (۲۱-۱-۷۷) و نمایی کردن نتیجه به دست آوریم. همه مراحل فوق را انجام داده و نشان دهید که شناسه پتانسیل برداری که ظاهر می شود در نقطه میانی نیست تا با آن شروع کنیم، آن طور که باید باشد تا اثر را به خوبی نشان دهد [تمرین (۸-۶-۴)]. این را با یک سری تیلور تثبیت کنید، جمله دوم از $R' - R$ را با جمله ای که مجبور به شروع با آن بودید ترکیب کنید تا (برای یک بازه زمانی) به دست آورید:

$$S = \frac{im(R' - R)^2}{2\hbar\epsilon} + \frac{i}{\hbar} (R' - R) A^n \left(\frac{R + R'}{2} \right) - \frac{(R' - R)^2}{2} \langle \partial n | (I - |n\rangle \langle n|) | \partial n \rangle \quad (۲۱-۱-۸۲)$$

سوال این است که این چه شکل پیوسته ای را توصیف می کند. ضرب و تقسیم ϵ ، جمله اول را به انرژی جنبشی و جمله میانی را به جفت شدگی پتانسیل برداری تبدیل می کند. جمله آخر باید در ϵ^2 ضرب و تقسیم شود تا مربع سرعت شود. اما این کار آنرا با یک ϵ اضافی در کنش پیوسته باقی می گذارد. علی رغم این، این جمله مهم است چون مربع سرعت خیلی خاص است. اثر این جمله به بهترین شکل وقتی آشکار می شود که توجه کنیم که وقتی انتگرال تابعی گرفته شود ضریب $(R' - R)^2$ با $i \epsilon \hbar / m$ جایگزین می شود (به خاطر جمله انرژی جنبشی در کنش که واریانس $R - R'$ را کنترل می کند)، این جاگذاری را اکنون انجام دهید و این جمله را به پتانسیل اسکالر Φ^n تبدیل کنید که می دانیم هامیلتونی صحیح را توصیف می کند. نقش چنین جملاتی که در حد پیوسته (پیوستاری) صفر می شوند توسط کلاودر بحث شده است. (Klauder, ۱۹۸۵, Skagerstam).

باید واضح باشد که نتایج قبلی با جاگذاری بردارهای \mathbf{R} و \mathbf{A} ، درجات آزادی سریع تر و آرامتر و غیره به جای R و A تعمیم می یابند.

به مسئله ساده ای برمی گردیم که پتانسیل بری یک اختلاف ایجاد می کند. وضعیت را در شکل ۲۱-۱-۱ نظر بگیرید.



شکل ۲۱-۱: میدان B_2 و حرکت الکترون در امتداد دایره هستند. اسپین الکترون در جهت یا خلاف جهت میدان مغناطیسی موضعی، که مجموع B_1 و B_2 است، قرار دارد. جریان / میدان B_2 را ایجاد می‌کند.

۱- یک ذره خنثی از نظر الکتریکی و بدون اسپین به جرم M مقید به حرکت روی دایره‌ای به شعاع a می‌شود. این حرکت در مسئله ما درجه آزادی آرام خواهد بود این مدار تحت نفوذ شار مربوط به میدان $B_1 \hat{k}$ در امتداد محور z قرار می‌گیرد. به علاوه یک سیم حامل جریان در امتداد محور z در مرکز قرار داده می‌شود. این سیم یک میدان سمتی با شدت B_2 تولید می‌کند. میدان کل یک زاویه

$$\theta = \arctan B_2/B_1$$

با محور z می‌سازد و دارای بزرگی $B = \sqrt{B_1^2 + B_2^2}$ است. وقتی مختصه ذره ϕ است میدان B_2 بر دایره مماس است یعنی دارای یک زاویه سمتی $\phi + \pi/2$ در فضای \mathbf{B} است. هامیلتونی ذره (که هنوز با \mathbf{B} جفت نشده است) عبارت است از:

$$H = \frac{L^2}{2I} \quad (۲۱-۱-۸۳)$$

که در آن $I = Ma^2$ گشتاور لختی است که از این به بعد برابر $\frac{1}{2}$ است و $L = -i\hbar\partial/\partial\phi$ عملگر تکانه زاویه‌ای است. ویژه مقادیر انرژی عبارتند از

$$E_m = \hbar^2 m^2 \quad m = 0, \pm 1, \pm 2 \dots \quad (۲۱-۱-۸۴)$$

اکنون درجه آزادی سریع را وارد می‌کنیم. تصور کنید که ذره اسپین $\frac{1}{2}$ دارد. وقتی ذره دایره را دور می‌زند اسپین یک میدان مغناطیسی در حال تغییر، \mathbf{B} ، می‌بیند که جمع برداری میدان ثابت B_1 در امتداد محور z و میدان سمتی B_2 است. H را به صورت زیر تصحیح می‌کنیم

$$H = L^2 - C\sigma \cdot \mathbf{B}(\phi) \quad (۲۱-۱-۸۵)$$

که فرض می‌شود C و در نتیجه شکافتگی بین دو حالت اسپینی آنقدر بزرگ است (همان‌طور که غالباً با شکافتگی مرتبط است) که اسپین واقعاً یک درجه آزادی سریع است که وقتی ذره حول حلقه حرکت می‌کند (آرام) بین حالت‌های آن پرش نخواهد کرد. انرژی‌های مجاز چه چیزهایی خواهند بود؟ جواب خام عبارت است از

$$E_m = \hbar^2 m^2 \mp CB \quad (۲۱-۱-۸۶)$$

که $B = \sqrt{B_1^2 + B_2^2}$ و دو علامت با جهت گیری اسپینی (رو به بالا/پایین میدان مغناطیسی موضعی متناظر هستند، وقتی ذره دور می‌زند. اما این غلط است و می‌بایست پتانسیل‌های بری $A(\phi)$ و Φ لحاظ شوند. اجازه دهید روی جواب انرژی - پایین متمرکز شویم که در آن اسپین رو به میدان موضعی قرار می‌گیرد. اسپینور را

$$|\theta\phi\rangle = \begin{bmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ i \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{bmatrix} \quad (۸۷-۱-۲۱)$$

انتخاب می‌کنیم (i اضافی در مؤلفه پایینی مربوط به این است که زاویه مداری ϕ از زاویه سمتی میدان به اندازه $\pi/2$ فرق دارد، شکل (۱-۲۱). به راحتی می‌توان دید که

$$A^+(\phi) = i\hbar \langle \theta\phi | \frac{\partial}{\partial \phi} | \theta\phi \rangle = -\hbar \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (۸۸-۱-۲۱)$$

که مستقل از ϕ است و اینکه پتانسیل اسکالر بری عبارتست از

$$\Phi = \frac{\hbar^2 \sin^2 \theta}{4} \quad (۸۹-۱-۲۱)$$

که مستقل از این است که اسپین رو به میدان یا عکس میدان جهت گیری کرده باشد. از آنجا که θ در این مسئله ثابت شده است، Φ می‌تواند با انتخاب یک انرژی مرجع (مبداء) حذف شود و ما دیگر آن را در نظر نمی‌گیریم.

تمرین ۱-۲۱-۱۰: معادلات بالا را برای پتانسیل‌های برداری و اسکالر ثابت کنید. از آنجا که اثر پتانسیل برداری، تبدیل $L \rightarrow L - A^+$ است، نتیجه می‌شود که اگر

$$\left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} - A^+ \right] \psi = \lambda \psi \quad (۹۰-۱-۲۱)$$

را حل کنیم انرژی با رابطه زیر مشخص می‌شود

$$E^+ = \lambda^2 - BC \quad (۹۱-۱-۲۱)$$

ویژه توابع مداری یک بار دیگر عبارت می‌شوند از

$$\psi = e^{im\phi} \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (۹۲-۱-۲۱)$$

به طوری که

$$\lambda = m\hbar - A^+ = \left(m + \sin^2 \frac{\theta}{2} \right) \hbar \quad (۹۳-۱-۲۱)$$

و انرژی حالت اسپین بالا برابر می‌شود با

$$E^+ = \left(m + \sin^2 \frac{\theta}{2}\right)^2 \hbar^2 - BC \quad (۹۴-۱-۲۱)$$

بدیهی است که بدون پتانسیل برداری به جواب غلط می‌رسیدیم. برای مثال، بدون آن، تحت تبدیل $m \rightarrow -m$ یک تبهگنی دوگانه بوجود می‌آید.

تمرین ۲۱-۱-۱۱: این پتانسیل را برای حالت دیگر (اسپین پایین) به‌دست آورده و ویژه مقادیر انرژی را مشخص کنید.

اجازه دهید پتانسیل‌های برداری و اسکالر معادلات (۲۱-۱-۷۹) تا (۲۱-۱-۸۱) را بدون انتگرال‌های مسیر، با استخراج هامیلتونی مؤثر که می‌تواند روی درجات آزادی آرام R اثر کند، مجدداً به‌دست آوریم. در اینجا لازم نیست حالت، یک ویژه حالت مکان باشد بلکه می‌تواند در یک برهنه‌ی از $\psi(R)$ ها باشد:

$$|\psi\rangle = \int \psi(R) |R, n(R)\rangle dR \quad (۹۵-۱-۲۱)$$

توجه کنید که $|\psi\rangle$ یک کت در فضای حاصل ضرب مستقیم درجات آزادی آرام و سریع است. معمولاً ضرایب در چنین برهنه‌ی به هر دو برجسب بستگی پیدا می‌کردند. اما در مسئله ما درجه آزادی سریع اسیر درجه آزادی آرام می‌شود به‌طوری که دامنه بودن درجه آزادی آرام در $|R\rangle$ با دامنه بوهن کل سیستم در $|R, n(R)\rangle$ یکسان است. می‌خواهیم هامیلتونی را در نمایش مختصه با محاسبه

$$(H\psi)(R') \equiv \langle R', n(R') | H | \psi \rangle \quad (۹۶-۱-۲۱)$$

$$= \int \langle R', n(R') | H | R, n(R) \rangle \langle R, n(R) | \psi \rangle dR \quad (۹۷-۱-۲۱)$$

$$= \int \langle R', n(R') | H | R, n(R) \rangle \psi(R) dR \quad (۹۸-۱-۲۱)$$

پیدا کنیم. قرار می‌دهیم

$$H = P^2/2M + V(R) + H_f(r, p, R) \quad (۹۹-۱-۲۱)$$

بدیهی است که هامیلتونی سریع H_f که از چپ روی ویژه کت خود اثر می‌کند $E_n(R)$ را به‌دست خواهد داد و این با پیوستن به $V(R)$ یک جمله انرژی پتانسیل فراهم می‌کند. بنابراین فقط روی $P^2/2M$ متمرکز می‌شویم چون جایی است که کنش قرار دارد. یاد آوری می‌کنیم که

$$\langle R' | \frac{P^2}{2M} | R \rangle = -\frac{\hbar^2}{2M} \delta''(R' - R) \quad (۱۰۰-۱-۲۱)$$

و آنرا در معادله (۲۱-۱-۹۸) قرار دهیم:

$$\begin{aligned}
 (H\psi)(R') &= -\frac{\hbar^2}{2M} \int \langle n(R') | n(R) \rangle \delta''(R' - R) \psi(R) dR \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2M} \langle n(R') | [\partial^2 n(R) \psi(R) + 2 \partial n(R) \partial \psi(R) + |n(R)\rangle \partial^2 \psi(R)]_{R=R'} \rangle \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2M} [\langle n | \partial^2 n \rangle \psi(R') + 2 \langle n | \partial n \rangle \partial \psi(R') + \partial^2 \psi(R')]
 \end{aligned} \tag{۱۰۱-۱-۲۱}$$

که ∂ نشان دهنده مشتقات نسبت به R' است. نشان دادن اینکه عملگر سمت راست واقعاً عملگر معادله (۷۹-۱-۲۱) است سر راست است. جزئیات در تمرین زیر قرار دارند.

تمرین ۲۱-۱۲: جزئیات حذف شده را مشخص کنید. پیشنهاد: با معادله (۷۹-۱-۲۱) شروع کرده و $(P - A)^2$ را بسط دهید. توجه کنید که وقتی P در سمت چپ A می آید هم از A و هم از تابع موج ψ مشتق می گیرد که تصور می شود در سمت راست هامیلتونی قرار گیرند. حال به سراغ معادله (۱۰۱-۱-۲۱) بروید و جمله A^2 را کم و زیاد کنید و با استفاده از روابطی مثل $\partial \langle n | \partial n \rangle = \langle \partial n | \partial n \rangle + \langle n | \partial^2 n \rangle$ جملات را مجدداً دسته بندی کنید.

اکنون که حقیقت پتانسیل برداری بری را می پذیریم اجازه دهید کمی بیشتر در مورد آن بدانیم. به طور طبیعی وقتی یک پتانسیل برداری داریم، کرل آنرا می گیریم و میدان مغناطیسی متناظر، یک جریان به عنوان منشاء خود دارد. اگر تک قطبی مغناطیسی وجود می داشت، این چشمه می توانست یک تک قطبی باشد. پتانسیل بری را چه چیزی تولید می کند؟ ابتدا تصدیق می کنیم که چشمه این پتانسیل در فضای پیکربندی درجه آزادی سریع قرار نمی گیرد، بلکه در فضای پارامترهایی قرار می گیرد که در هامیلتونی سریع H_f کند تغییر هستند. البته این پارامتر آرام می توانست خودش یک درجه آزادی مؤثر واقعی باشد (چنانکه در مسئله حلقه ما) اما روی این تمرکز نمی کنیم. ما فقط متغیرهای آرام را به عنوان پارامترهای خارجی، که H_f را تعریف می کنند، بحث می کنیم. لذا اگر یک شی اسپین $\frac{1}{2}$ را با

$$H = -\sigma \cdot B \tag{۱۰۲-۱-۲۱}$$

در نظر بگیریم، آنگاه پتانسیل بری در فضای B خواهد بود (چون فقط روی متغیرهای سریع متمرکز می شویم اندیس H_f را حذف می کنیم). برای آسوده کردن خیال خود می خواهیم فضای B را به فضای R تغییر نام دهیم، اما نباید این موضوع را فراموش کنید. بنابراین می نویسیم:

$$H = -\sigma \cdot R \tag{۱۰۳-۱-۲۱}$$

هر نقطه در فضای R یک هامیلتونی اسپینی ممکن را تعریف می کند. ما به تعریف یک پتانسیل برداری در این فضا رهنمون شده ایم. این پتانسیل از حالت کوانتومی n ام هامیلتونی فوق به دست می آید و با رابطه زیر مشخص می شود

$$A^n = i\hbar \langle n(R) | \nabla | n(R) \rangle \tag{۱۰۴-۱-۲۱}$$

کرل آن چیست؟ برای مشخص شدن این به کمی زمینه نیاز داریم. با استفاده از

$$0 = \nabla \langle n | H | m \rangle \quad m \neq n \quad (1-105)$$

و با مشتق‌گیری از هر سه عامل و تغییر یک مشتق از کت به برا به بهای تغییر علامت (به واسطه $\langle \nabla | n \rangle = 0$) داریم

$$\langle n | \nabla | m \rangle = \frac{\langle n | (\nabla H) | m \rangle}{E_m - E_n} \quad (1-106)$$

اینک پیدا کردن یک فرمول برای تانسور میدان F_{ij} وابسته به پتانسیل بری آسان است:

$$\begin{aligned} F_{ij}^n &= \partial_i A_j^n - \partial_j A_i^n \\ &= i\hbar [\partial_i \langle n | \partial_j n \rangle - \partial_j \langle n | \partial_i n \rangle] \\ &= i\hbar \sum_{m \neq n} \frac{\langle n | (\partial_i H) | m \rangle \langle m | (\partial_j H) | n \rangle - \langle n | (\partial_j H) | m \rangle \langle m | (\partial_i H) | n \rangle}{(E_m - E_n)^2} \quad (1-107) \\ &= \left(\partial_j = \frac{\partial}{\partial R_j} \right) \end{aligned}$$

که m یک مجموعه کامل از حالت‌هایی را که در طی راه معرفی می‌کنیم برچسب می‌زند (جملات $m = n$ هم‌دیگر حذف می‌شوند). این فرمول در حالت کلی معتبر است (برای هر H) و اکنون آنرا برای مسئله خودمان به کار می‌بریم.

در مسئله ما چند جنبه ساده‌کننده وجود دارد:

- $\frac{\partial H}{\partial R_j} = -\sigma_j$
- فقط دو حالت و در نتیجه فقط یک جمله در جمع روی m وجود دارد. مربع انرژی مخرج $4R^2$ است چون اختلاف بین حالت‌های اسپین بالا و پایین $2R$ است (یادآوری می‌شود که R در اینجا اندازه میدان مغناطیسی است!).
- بنابراین ما این مخرج را بیرون می‌آوریم، که مستقل از m است، یک جمله با $m = n$ اضافه می‌کنیم (که با یاد متقارن بودن نسبت به i و j صفر می‌شود)، از کامل بودن برای حذف حالت‌های میانی استفاده می‌کنیم، از روابط جابه‌جایی برای ماتریس‌های پائولی استفاده می‌کنیم و سرانجام از این حقیقت که $\langle n | \sigma | n \rangle = \pm \hat{R}$ است (برای حالت‌های رو به بالا/پایین میدان).
 به جای بیان میدان برحسب تانسور F_{ij}^n ، برحسب میدان آشنا تر، که به وسیله $\mathcal{B}_k^n = F_{ij}^n$ تعریف می‌شود، می‌نویسیم (که در آن شاخص‌های i و j و k به صورت چرخه‌ای حرکت می‌کنند):

$$\mathcal{B}^n = \mp \hbar \frac{\hat{R}}{2R^2} \quad (1-108)$$

این میدان یک تک قطبی با قدرت $-\hbar/2$ واقع در مبدا است، که نقطه تبهگنی هامیلتونی است. **تمرین ۲۱-۱-۱۳:** مراحل حذف شده در استنتاج فوق را کامل کنید.

توجه کنید که دو میدان مغناطیسی متفاوت در مسئله وجود دارد. یکی میدان واقعی \mathbf{B} است که با اسپین الکترون جفت می شود و در فضای واقعی قرار می گیرد. این میدان به وسیله جریان های موجود در فضای واقعی ایجاد می شود (هیچ چشمه تک قطبی شناخته شده ای برای این میدان ها وجود ندارد). میدان دیگر، کرل پتانسیل برداری بری است که در فضای پارامتر قرار می گیرد. مؤلفه های آن با \mathcal{B}_k^n نشان داده می شوند که در مسئله ما اتفاقاً یک تک قطبی را در فضای پارامتر توصیف می کنند. اکنون خواهیم دید که تک قطبی بری در هر مسئله ای که در آن هامیلتونی (که لزوماً شامل میدان های مغناطیسی نیست) به صورت دو گانه تبهگن می شود ظاهر خواهد شد.

با فرض اینکه فضای پارامتر سه بعدی است، اجازه بدهید فقط روی دو تراز تقریباً تبهگن متمرکز شویم. هر عملگر هریتی 2×2 می تواند به صورت

$$H = \sum_{\mu=0}^3 \sigma_{\mu} f_{\mu} \quad (21-1-109)$$

نوشته شود که $\sigma_0 = I$ چهارمین عضو ماتریس های پائولی است و f_{μ} ها چهار تابع از سه مختصه مستقل فضای پارامتر هستند. واضح است که ویژه مقادیر H عبارتند از

$$E = f_0 \pm \sqrt{f_x^2 + f_y^2 + f_z^2}. \quad (21-1-110)$$

تبهگنی در $f_x = f_y = f_z = 0$ اتفاق می افتد که ما آنرا مبدا مختصات انتخاب می کنیم. همین طور صفر انرژی را طوری انتقال می دهیم که ویژه مقدار تبهگن $f_0(0)$ صفر شود. حال خود سه f را به عنوان مختصه های جدید به کار می بریم که در این مورد f_0 یک تابع از این مختصه ها شده و در مبدا صفر خواهد شد. لذا

$$H = f_0(\mathbf{f})I + \sigma \cdot \mathbf{f} \quad (21-1-111)$$

توجه کنید که f_0 در مبدا صفر می شود ولی لزوماً در هر جای دیگر صفر نمی شود. اجازه دهید همان تحلیلی را تکرار کنیم که در مسئله اسپین به کار بردیم و با رابطه زیر شروع کنیم

$$\partial_i H = \partial_i f_0 I + \sigma_i \quad (21-1-112)$$

اگر تانسور میدان را به شکل معادله (۲۱-۱-۱۰۷) محاسبه کنیم می بینیم که قسمت متناسب با همانی اهمیتی ندارد (چون برای $m \neq n$ ، $\langle m | n \rangle = 0$ است)، مسئله با مسئله معادله (۲۱-۱-۱۰۳) هم شکل می شود و فقط به تک قطبی واقع در مبدا می رسیم.

تمرین ۲۱-۱-۱۴: نگاهی دیگر به مسئله یک ذره در حال حرکت حول یک حلقه با میدان‌های در جهت‌های سمتی و z که مطالعه کردیم بیندازید. وقتی ذره یکبار دایره را دور می‌زند، انتگرال خطی پتانسیل برداری A^+ خواهد شد:

$$\oint A^+ d\phi = -2\pi\hbar \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

اجازه دهید به همین مدار بسته در فضای \mathbf{B} نگاهی بیندازیم که در آن، یک حلقه با شعاع ثابت B_2 در یک ارتفاع ثابت B_1 بالای صفحه $B_x - B_y$ می‌شود. لذا متمم عرض جغرافیایی (با زاویه θ که از قطب شمال اندازه‌گیری می‌شود) کره‌ای به شعاع $\sqrt{B_1^2 + B_2^2}$ را تعریف می‌کند. در این فضا طبق معادله (۲۱-۱-۱۰۸) یک تک قطبی با قدرت $-\hbar/2$ در مبداء داریم. پس شار عبوری از این حلقه، شار تک قطبی نفوذکننده در سطح کلاهک محصور شده به وسیله این عرض جغرافیایی است. با به کارگیری قضیه استوکس نشان دهید که این شار، همان‌طور که باید، برابر $-2\pi\hbar \sin 2\theta/2$ است (توجه کنید که پتانسیل برداری بری در فضای واقعی و فضای پارامتر متفاوت است. انتگرال خطی آن روی یک حلقه بسته، که تغییر فاز انباشته در هر دور چرخش را اندازه می‌گیرد، مسلماً یکسان است. در حالت کلی یک نگاشت از مینفولد (بسیلا) X با نقاط برچسب زده شده با x به Y با نقاط برچسب زده شده با y ، را در نظر بگیرید به طوری که هر x به یک y منحصر بفرد می‌رود. اگر $A(y)$ یک پتانسیل برداری در Y باشد می‌توانیم آنرا با تعریف یک پتانسیل برداری $A(x)$ (با حذف شاخص‌ها) به X ببریم به طوری که

$$(21-1-113)$$

$$A(x) dx = A(y) dy$$

با ترسیم کردن، حلقه‌های بسته در X به حلقه‌های بسته در Y می‌روند. در این صورت انتگرال خطی $A(x)$ حول یک حلقه بسته در X برابر با انتگرال خطی $A(y)$ حول حلقه تصویر در Y خواهد شد.

تمرین ۲۱-۱-۱۵: مسئله اختصاص فازها به بردارهای حالت در فضای پارامتر را از طریق یک مثال بحث می‌کنیم. فرض کنید $\mathbf{R} \equiv (R, \theta, \phi)$ مختصه در فضای پارامتر باشد. هامیلتونی $H = -\sigma \cdot \mathbf{R}$ را در نظر بگیرید. حالت پایه را برای این مسئله برای همه نقاط می‌نویسیم. این حالت حالتی است که اسپین در هر جا به صورت شعاعی رو به بیرون قرار می‌گیرد. یک انتخاب برای اسپینور عبارتست از

$$|+, \theta, \phi\rangle = \begin{bmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{bmatrix}$$

این همان کتی است که در مسئله الکترون در حال حرکت حول یک حلقه به کار بردیم (به استثنای ضرب i در مؤلفه پایینی که به خاطر تفاوت $\pi/2$ بین زوایای سمتی در فضای واقعی و پارامتر ظاهر می‌شود). از آنجا که اسپینور هیچ وابستگی به R ندارد، اجازه دهید به آن روی یک کره واحد $R = 1$ نگاه کنیم. ملاحظه کنید که وقتی از جهات مختلف به قطب جنوب میل می‌کنیم مؤلفه پایینی به یک مقدار منحصر بفردی میل نمی‌کند

(این مسئله در قطب شمال وجود ندارد چون در آنجا $\sin \theta/2 = 0$ است). لذا ما واقعاً اسپینور را سراسری و غیر موضعی تعریف نکرده‌ایم. حال اگر اسپینور کل را در عامل فاز تک مقدار $e^{-i\phi}$ ضرب کنیم یک اسپینور خوش تعریف در نزدیکی قطب جنوب اما تکین در قطب شمال داریم. نتیجه اینکه ما فقط می‌توانیم اسپینور را در قطعات فضای پارامتر تعریف کنیم. در مسئله ما دو قطعه وجود خواهد داشت، یکی قطب شمال را مستثنی می‌کند و یکی قطب جنوب را.

از آنجا که پتانسیل بری را با گرفتن مشتقات کت به دست آوردیم نتیجه می‌شود که پتانسیل بری هم فقط در قطعات تعریف می‌شود نه به صورت سراسری و غیر موضعی. به عبارت دیگر، معادله (۲۱-۱-۸۸) برای A^+ باید دور (بیرون) از $\theta = \pi$ به کار رود. برای توصیف قطب جنوب، برای مثال می‌توانیم پتانسیلی که از اسپینور با رفتار خوب در قطب جنوب اما رفتار بد در قطب شمال ناشی می‌شود استفاده کنیم.

در اینجا ثابت خواهیم کرد که تلاش‌ها برای یافتن یک پتانسیل برداری غیر موضعی در حضور یک تک قطبی محکوم به شکست هستند. فرض کنید یک پتانسیل برداری غیر تکین غیر موضعی داشتیم. انتگرال خطی آن را در امتداد جهت افزایش ϕ روی یک عرض جغرافیایی نزدیک قطب شمال روی کره‌ای واحد که تک قطبی را محاط کرده است در نظر بگیرید. طبق قضیه استوکس، این با شار عبوری از کلاهک (طاق) بالای این عرض جغرافیایی برابر است. اگر حلقه را بزرگ کنیم و به طرف خط استوا برویم انتگرال خطی به طور یکنواخت افزایش خواهد یافت. سرانجام اجازه دهید حلقه را به یک حلقه بی‌نهایت کوچک حول قطب جنوب کوچک کنیم. با کوچک شدن این حلقه انتگرال خطی صفر نمی‌شود؛ بلکه با شار کل تک قطبی برابر می‌شود. در نتیجه می‌بایست یک تکینگی در قطب جنوب باشد چون انتگرال یک پتانسیل غیر تکین حول یک حلقه بی‌نهایت کوچک می‌بایست بی‌نهایت کوچک باشد و با اندازه حلقه صفر شود (همین طور ممکن است که تکینگی در هر جای دیگر روی کره باشد، اما باید طبق استدلال مشابه موجود باشد).

با شروع از گرادیان در مختصات کروی نشان دهید که پتانسیل برداری وابسته به (θ, ϕ) با رابطه زیر مشخص می‌شود

$$A = -\frac{\hbar}{2} e_{\phi} \frac{(1 - \cos \theta)}{R \sin \theta}$$

تکینگی در قطب جنوب را ملاحظه کنید، این، ریسمان دیراک^۲ نامیده می‌شود. نشان دهید که انتگرال خطی آن حول یک حلقه کوچک حول قطب جنوب، شار کل تک قطبی است. آنچه روی می‌دهد همین است. این پتانسیل برداری یک تک قطبی واقع در مبدا را توصیف نمی‌کند بلکه یک تک قطبی را توصیف می‌کند که در جایی است که یک لوله کوچک (ریسمان دیراک) از محور z منفی بالا می‌آید و شار کل را به مبدا می‌فرستد و از این نقطه به صورت شعاعی گسیل می‌شود. این شار ریسمان دلیل این است که چرا حلقه کوچک حول قطب جنوب یک جواب غیر صفر مساوی با شار کل به دست می‌دهد.

حالا وقتی به تک قطبی نگاه می‌کنیم هیچ چیز خاصی در مورد قطب جنوب وجود ندارد، چون تک قطبی تقارن کروی دارد. این مطلب در این حقیقت منعکس می‌شود که ریسمان دیراک می‌تواند به وسیله یک تبدیل پیمانه‌ای حرکت داده شود. پتانسیل برداری A' را برای اسپینور به دست آمده با ضرب دو مؤلفه (θ, ϕ) در $e^{-i\phi}$ محاسبه کنید. نشان دهید که این پتانسیل در قطب شمال مشکل داشته و دو پتانسیل برداری به وسیله تبدیل پیمانه‌ای وابسته به تعریف مجدد $(\theta, \phi) \rightarrow e^{-i\phi}(\theta, \phi)$ به هم مربوط می‌شوند.

اگر مجاز باشیم تا از کلمات به جای معادلات استفاده کنیم می‌توانیم اثر تک قطبی را بدون ریسمان‌ها توصیف کنیم: وقتی ذره باردار حول یک حلقه دور می‌زند یک فاز متناسب با زاویه فضایی روبروی حلقه در مبدا (جایی که تک قطبی در آنجاست) انتخاب می‌کند. پتانسیل برداری، شیوه تحلیلی برای تولید زاویه فضایی از طریق قضیه استوکس است اما این کار نمی‌تواند آنرا غیر موضعی نماید.

دیراک به این مسئله پرداخت و تلاش کرد تا بفهمد که چگونه یک تک قطبی واقعی (نه بری) با بار g در فضای حقیقی را توصیف می‌کنیم. این تک قطبی یک میدان شعاعی دارد که به صورت g/R^2 افت می‌کند. در آنجا مشکلی وجود ندارد، اما مکانیک کوانتومی ما را مجبور می‌کند که با پتانسیل‌های برداری کار کنیم. حال هر پتانسیل برداری که ما می‌توانیم مطرح کنیم یک ریسمان دارد. طبق معمول دیراک مشکل پتانسیل را به یک پیش بینی خیره کننده تبدیل کرد و استدلال کرد که اگر یک تک قطبی وجود داشته باشد و ما هیچ انتخابی جز توصیف آن با یک پتانسیل برداری نداشته باشیم، ریسمان می‌بایست غیر قابل مشاهده باشد. انتگرال خطی پتانسیل برداری حول ریسمان در قطب جنوب $4\pi g$ ، شار کل تک قطبی، است. برای ذره‌ای با بار q ، این همچون معادله (۱۸-۴-۳۸) از طریق عامل

$$e^{A_{\mu}iqg/\hbar c}$$

در دینامیک وارد می‌شود (به یک آزمایش آهارنوف - بوم فکر کنید که در آن یک ذره از هر دو طرف ریسمان می‌رود). اگر قرار باشد که این عامل غیر قابل مشاهده باشد لازم داریم که

$$q = \frac{\hbar nc}{2g}$$

باشد که n یک عدد صحیح است. این نکته قابل توجه بیان می‌کند که حتی اگر یک تک قطبی در جهان موجود باشد، وادار می‌کند که همه بارهای الکتریکی مضرب‌هایی از $\hbar c/2g$ باشند. این برای مثال توضیح می‌دهد که چرا پروتون و الکترون دقیقاً بار یکسانی دارند. هر چند هیچ تک قطبی تاکنون دیده نشده است، اما بحث آنقدر جذاب است که من یک نفر مطمئن هستم که حداقل یک تک قطبی وجود دارد. و گر نه، طبیعت فرصت بزرگ تفسیر شدن به وسیله انیشتین را از دست می‌داد.

در بحث‌های نوین، دو قطعه به کار می‌برند، مثلاً یکی بدون قطب جنوب و یکی بدون قطب شمال، با یک پتانسیل برداری متفاوت در هر کدام. با درخواست اینکه جایی که قطعات همپوشانی می‌کنند، مثلاً خط استوا، دو پتانسیل به اندازه یک تبدیل پیمانه‌ای تک - مقدار با هم فرق داشته باشند، شرط کوانتس دیراک بازیابی می‌شود (اگر به خاطر بیاورید که (۱) - تفاوت انتگرال‌های خطی دو پتانسیل قطعات حول خط استوا، انتگرال شار بیرون رونده روی کل کره است؛ (۲) - وقتی تابع موج یک ذره با بار q به اندازه یک ضرب فاز

$\psi \rightarrow e^{i\chi} \psi$ تغییر کند، پتانسیل برداری به صورت $A \rightarrow A + \hbar c / q \partial \chi$ تغییر می‌کند؛ (۳) - تغییر در χ حول یک حلقه بسته می‌بایست مضرب صحیحی از 2π باشد، می‌توانید خودتان اثبات کنید).

در مسئله فاز بری دیدیم که پتانسیل برداری A در هامیلتونی دارای یک ضرب q/c ، برابر با ۱ بود، $g = \hbar/2$ و در نتیجه $n = 1$ است.

به‌عنوان کاربرد دیگری از فاز بری، به مسئله اثر هال برمی‌گردیم. لافلین پیشنهاد کرد که حالت برانگیخته (بالای حالت پایه)، موسوم به حالت شبه حفره، با

$$u_{qh} = \prod_{i=1}^{vN} (z_i - z_0) u_v \quad (21-1-114)$$

مشخص می‌شود. واضح است که این، وضعیتی را توصیف می‌کند که در آن تابع موج در مجاورت z_0 تصحیح می‌شود. می‌گوییم این یک شبه حفره متمرکز در z_0 را توصیف می‌کند. توجه کنید که الکترون‌ها از نقطه z_0 به‌واسطه صفرهای اضافی به شکل $z - z_0$ اجتناب می‌کنند. این بدین معنی است که چگالی بار در نزدیک این نقطه کمتر از مقدار طبیعی است. اگر کسی از کمبود بار مربوط به این تصحیح در تابع موج انتگرال بگیرد (که بار شبه حفره است)، به vq می‌رسد که q بار بنیادی e است. لذا یک نظریه با بارهای بنیادی که بارهای صحیح (الکترون‌ها) هستند انگیزش‌هایی دارد که دارای بار کسری هستند! بار کسری می‌تواند به‌صورت زیر هم توضیح داده شود: ابتدا توجه کنید که مکان z_0 شبه حفره دلخواه است. فرض کنید که یک پتانسیل زمینه ذیل گاز الکترون وجود دارد که کمینه آن یک مکان مرجحی را انتخاب می‌کند (برمی‌گزیند) فرض کنید این پتانسیل را به آرامی تغییر دهیم و مختصه z_0 در u_{qh} را حول یک حلقه بسته بکشیم (حرکت دهیم) و فاز بری انباشته را برای این مدار بسته حساب کنیم. (چون تابع موج را برای هر z_0 صریحاً می‌دانیم، این کار به راحتی انجام می‌شود). این می‌بایست با شار (مربوط به میدان مغناطیسی خارجی B که ترازهای لاندائو را ایجاد می‌کند) محصور شده ضربدر $\bar{q}/\hbar c$ برابر باشد که \bar{q} بار شبه حفره است. این محاسبه یک بار v ضربدر بار بنیادی به دست می‌دهد. به‌طور مشابه می‌شود نشان داد که شبه حفره‌ها نه بوزون هستند نه فرمیون بلکه **آنیان**^۱ هستند (اصطلاحی که توسط ویلکزک ابداع شد، کتابنامه را ببینید): آنها تحت تعویض، یک عامل فاز $e^{i\pi v}$ به دست می‌آورند، با انتخاب یک حالت با دو شبه حفره (واقع در z_0 و z_0') و تعویض آنها به‌صورت بی‌دررو (یعنی مراکز آنها) و محاسبه تغییر فاز بری در تابع موج. تحلیل بی‌دررو معتبر است چون حالت‌های شبه حفره به‌وسیله یک گاف از حالت‌های دیگر جدا می‌شوند. برای جزئیات، شیر و ویلکزک (۱۹۹۰) ببینید.

با یک تاریخچه به پایان می‌بریم.

چرا بورن و اوپنهایمر فاز بری را از نظر رد کردند؟ پاسخ بسیار ظریف است. آنها با یک هامیلتونی حقیقی کار می‌کردند که توابع موج آن می‌توانستند حقیقی انتخاب شوند. آنها فرض کردند که چنین انتخابی صورت گرفته است و این انتخاب، ناویژه و غیر تکین است. در حالی که این برای هر منحنی باز در فضای پارامتر درست است این امکان وجود دارد که در منحنی‌های بسته مجبور به بازگشت به منفی تابع موج شروع باشیم. بری،

هامیلتونی‌های مختلط (هم شکل برای مثال اسپین) در نظر گرفت که امکان یک پیوستار از مقادیر ممکن برای فاز (به جای فقط ± 1) را ایجاد کرد و این پدیده را نمایان‌تر نمود.

سرانجام اگر چه ما فاز بری را در ارتباط با مکانیک کوانتومی بحث کردیم ولی در اپتیک در چندین دهه قبل توسط پنچاراتنام (۱۹۵۸)^۱ کشف شده بود، کسی که یک باریکه قطبیده از نور به جای یک حالت کوانتومی در نظر گرفت که روی یک مسیر بسته در فضای پارامتر حرکت می‌کرد (کتابنامه را ببینید). برای مروری خوب بر حتی پیشروان قبلی، مقاله بری در فیزیک تودی را ببینید (کتابنامه).

انتگرال مسیر حالت همدوس

در اینجا یک عملگر همانی دیگر و انتگرال مسیر وابسته به آن را بحث می‌کنیم. اینها بر پایه حالت‌های همدوس قرار دارند که ویژه حالت‌های عملگر نابودی در مسئله نوسانگر هماهنگ تعریف می‌شوند. هر حالت همدوس یک برچسب مختلط z داشته و با

$$|z\rangle = \exp[za^\dagger]|0\rangle \quad (21-1-115)$$

مشخص می‌شود. که $|0\rangle$ حالت پایه نوسانگر است. اگر یادآوری کنیم که

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle \quad (21-1-116)$$

می‌بینیم که

$$|z\rangle = \sum_0^\infty \frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle \quad (21-1-117)$$

حالت‌های برچسب زده شده با مقادیر مختلف z راست هنجار نیستند. این متعامد نبودن را باید انتظار داشته باشیم چون پایه $|n\rangle$ که به وسیله اعداد صحیح مثبت برچسب زده می‌شود یک پایه کامل تشکیل می‌دهد و در اینجا برای هر عدد مختلط z یک حالت داریم! بنابراین همه آنها نمی‌توانند متعامد باشند. همین‌طور ممکن است که علی‌رغم تعداد زیاد آنها، آنها یک مجموعه کامل نباشند. اما خواهیم دید که آنها یک پایه فرا کامل^۲ هستند یعنی یک پایه با بردارهای کافی برای بسط هر بردار اما با بیش از کمترین تعدادی که می‌شود با آنها آغاز کرد. در اینجا ویژگی کلیدی

$$a|z\rangle = z|z\rangle \quad (21-1-118)$$

را به صورت زیر ثابت خواهیم کرد:

$$a|z\rangle = a \sum_0^\infty \frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle \quad (21-1-119)$$

1- Pancharatnam.
2- Overcomplete basis.

$$= \sum_1^{\infty} \frac{z^n \sqrt{n}}{\sqrt{n!}} |n-1\rangle \quad (120-1-21)$$

$$= z|z\rangle \quad (121-1-21)$$

که در رفتن به خط آخر یک بر حسب ساختگی $n' = n - 1$ را تعریف کرده ایم که از 0 تا ∞ تغییر می کند. همین طور با گرفتن الحاقی از معادله (118-1-21) دیده می شود که برای حالت همدوس

$$\langle z| = \langle 0| \exp[z^* a] \quad (122-1-21)$$

از رابطه زیر پیروی می کند

$$\langle z| a^\dagger = \langle z| z^* \quad (123-1-21)$$

حال ضرب داخلی زیر را در نظر می گیریم

$$\langle z_2 | z_1 \rangle = \langle 0 | \exp[z_2^* a] \exp[z_1 a^\dagger] | 0 \rangle \quad (124-1-21)$$

اگر از اتحاد

$$e^A e^B = e^B e^A e^{[A, B]} \quad (125-1-21)$$

استفاده کنیم که در صورتی معتبر است که $[A, B]$ با A و B جابه جا شود، داریم

$$\langle z_2 | z_1 \rangle = e^{z_2^* z_1} \quad (126-1-21)$$

با توجه به اینکه وقتی توان ها تعویض شده و بسط داده شوند، فقط جمله اول، بدون هیچیک از a ها که به

سمت راست اثر می کنند یا a^\dagger ها که به چپ اثر می کنند، باقی می ماند.

کامل بودن با اثبات عملگر همانی زیر نشان داده می شود

$$I = \int \frac{dx dy}{\pi} |z\rangle \langle z| e^{-z^* z} \equiv \int \frac{dz dz^*}{2\pi i} |z\rangle \langle z| e^{-z^* z} \quad (127-1-21)$$

که $z = x + iy$ و $z^* = x - iy$ است. توجه کنید که انتگرال زوی کل صفحه $x - y$ است و بعد از

جاگذاری هر z و z^* در انتگرالده به وسیله $x \pm iy$ ، می تواند با استفاده از مختصات دیگر انجام شود.

برای مثال در تمرین (121-1-16) مختصات قطبی در اثبات رابطه کامل بودن فوق پیشنهاد می شود. همچنین

می توان رسماً از (x, y) به (z, z^*) رفت (بعد از قرار دادن ژاکوبی $1/2i$)، اما انتگرال گیری

روی (z, z^*) مسئله ظریفی است که ما وارد آن نخواهیم شد. ما آن معیار را به هر جهت بر حسب (z, z^*)

تعیین می کنیم لذا اگر هر وقت دوباره به آن برخورد کردید مفهوم آنرا خواهید دانست.

برای نشان دادن معادله (۲۱-۱-۱۲۷)

$$|z\rangle = \sum_0^{\infty} \frac{z^m}{\sqrt{m!}} |n\rangle \quad (۲۱-۱-۱۲۸)$$

و الحاقی آن استفاده می‌کنیم، انتگرال $dx dy$ را در مختصات قطبی انجام داده و جمع مرسوم روی $|n\rangle\langle n|$ را بازیابی می‌کنیم.

تمرین ۲۱-۱-۱۶: عملگر همانی فوق را ثابت کنید. برای انتگرال تابع گوسین به ضمیمه A3 مراجعه کنید. از آنجا که حالت‌های همدوس ویژه حالت‌های راست a و ویژه حالت‌های چپ a^+ هستند،

$$\langle z_2 | : H(a^\dagger, a) : | z_1 \rangle = \langle z_2 | H(z_2^*, z_1) | z_1 \rangle \quad (۲۱-۱-۱۲۹)$$

که در آن H : هر عبارت مرتب شده بهنجار^۱ است؛ یعنی عبارتی با همه عملگرهای نابودی در راست و عملگرهای خلق در چپ. لذا $a^+ a^2$ یک عبارت مرتب شده بهنجار است در حالی که $a^2 a^+$ اینگونه نیست. با داشتن هر عبارت، همیشه می‌توانیم با بردن a ها به راست ضمن توجه به جابه‌جاگرها آنرا به صورت بهنجار مرتب کرد.

تمرین ۲۱-۱-۱۷: نشان دهید که $a^2 a^+ = a^2 a^+ + 2a$. (یک توان از a را یک بار به راست ببرید یا از $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$ استفاده کنید).

اکنون نتیجه مهم زیر را ثابت می‌کنیم: اگر H هامیلتونی نوسانگر باشد:

$$H = \hbar \omega a^\dagger a \quad (۲۱-۱-۱۳۰)$$

(برای این بحث انرژی ثابت نقطه صفر را حذف می‌کنیم) آنگاه

$$U(t)|z\rangle = U(t) \exp[a^\dagger z] U^\dagger(t) U(t)|0\rangle = \exp[a^\dagger e^{-i\omega t} z] |0\rangle = |z e^{-i\omega t}\rangle \quad (۲۱-۱-۱۳۱)$$

که از معادلات حرکت هایزنبرگ برای a^+ استفاده کرده‌ایم (در تصویر هایزنبرگ $(U^+(t)\Omega U(t) = \Omega(t))$ در اینجا $U^+(t) = U(-t)$ به جای $U(t)$ ظاهر می‌شود. ما نتیجه $a^+(t) = a^+(t) e^{i\omega t}$ را به کار می‌بریم و علامت t را عوض می‌کنیم).

شایان توجه است که تحت تحول زمانی، حالت همدوس، یک حالت همدوس باقی می‌ماند، اما با برچسبی جدید. این یکی از دلایل علاقمند شدن به آنها در وهله اول است. آنها به مراتب ویژگی‌های جالب زیادی دارند که بتوان همگی آنها را در اینجا بحث کرد. در عوض دعوت می‌کنیم به مراجع مربوطه مراجعه کنید.

تمرین ۲-۱-۱۸: نشان دهید که تابع موج حالت همدوس عبارت است از

$$\psi_z(x) = \langle x|z\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-z^2/2} e^{-(m\omega/2\hbar)x^2} e^{\sqrt{(2m\omega/\hbar)}zx} \quad (۲۱-۱-۱۳۲)$$

با استفاده از $\langle z'|z \rangle = \langle z|z \rangle = 1$ در نمایش مختصه شروع کنید. بهنجارش را با درخواست اینکه $\langle z'|z \rangle = e^{z^*z}$ باشد ثابت و معین کنید. تکانه و مکان میانگین آن را مشخص کنید. با داشتن اینکه $\langle z'|z \rangle \rightarrow \langle z|e^{-j\omega t} \rangle$ ، نشان دهید که اینها با زمان مثل مختصه‌های کلاسیکی تحول می‌یابند. پیشنهاد: به معادله (۹-۳-۷) نگاه کرده و z را به صورت $z = \sqrt{(m\omega/2\hbar)}x_0 + i\sqrt{(1/2m\omega\hbar)}p_0$ پارامتری کنید. پیدا کردن انتشارگر برای نوسانگر در این پایه بسیار راحت است:

$$U(z_N, z_0, t) = \langle z_N | U(t) | z_0 \rangle = \langle z_N | z_0 e^{-i\omega t} \rangle = \exp[z_N^* z_0 e^{-i\omega t}] \quad (1-21-133)$$

که در آن اندیس‌های روی نقاط انتهایی بحث زیر را می‌طلبند. نمایش انتگرال مسیر را برای انتشارگر در نظر بگیرید. ابتدا تصور کنید که فقط سه بازه زمانی میانی وجود دارد (به طوری که $\varepsilon = t/4$) و از سه عملگر همانی استفاده می‌شود که نتیجه می‌دهند:

$$\begin{aligned} \langle z_4 | U^4(t/4) | z_0 \rangle &= \int [\mathcal{D}z \mathcal{D}z^*] \langle z_4 | \left(I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} H(a^\dagger a) \right) | z_3 \rangle e^{-z_3^* z_2} \langle z_3 | \left(I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} H(a^\dagger a) \right) | z_2 \rangle e^{-z_2^* z_1} \langle z_2 | \\ &\quad \times \left(I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} H(a^\dagger a) \right) | z_1 \rangle e^{-z_1^* z_0} \langle z_1 | \left(I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} H(a^\dagger a) \right) | z_0 \rangle \end{aligned}$$

که در آن

$$[\mathcal{D}z \mathcal{D}z^*] = \prod_1^{N-1} \frac{dz_i dz_i^*}{2\pi i} = \prod_1^{N-1} \frac{dx_i dy_i}{\pi} \quad (1-21-134)$$

یک ضریب نوعی که با آن برخورد می‌کنیم به صورت زیر است

$$\langle z_{n+1} | \left(I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} H(a^\dagger a) \right) | z_n \rangle = \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} H(z_{n+1}^*, z_n)\right) \langle z_{n+1} | z_n \rangle \quad (1-21-135)$$

$$= \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} H(z_{n+1}^*, z_n)\right) \exp(z_{n+1}^* z_n) \quad (1-21-136)$$

که ε را بی‌نهایت کوچک گرفته‌ایم چون در نهایت وقتی $N \rightarrow \infty$ میل دهیم اینگونه خواهد شد. اگر همه عامل‌های نمایی را یکپارچه کنیم یک جزء مرتبط با هامیلتونی وجود خواهد داشت که در نمادگذاری پیوسته یک عامل

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \hbar \omega z^*(t) z(t) dt\right) \quad (1-21-137)$$

به دست خواهد داد که $z(t = n\varepsilon)$ ، z_n شده است (همچنین تقریب $H(z^*(t+\varepsilon), z(t)) \approx H(z^*(t), z(t))$ را هم به کار برده‌ایم).

عامل دیگر در نما عبارتست از

$$z_4^* z_3 - z_3^* z_3 + z_3^* z_2 - z_2^* z_2 + z_2^* z_1 - z_1^* z_1 + z_1^* z_0 \quad (138-1-21)$$

$$= (z_4^* - z_3^*) z_3 + (z_3^* - z_2^*) z_2 + (z_2^* - z_1^*) z_1 + z_1^* z_0 \quad (139-1-21)$$

که در نمادگذاری پیوسته به صورت

$$\frac{i}{\hbar} \left[\int_0^t (-i\hbar) \frac{dz^*}{dt'} z dt' \right] + z^*(0)z(0) \quad (140-1-21)$$

می‌نویسیم که در آن $z(0) = z_0$ و $z^*(0) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} z^*(\varepsilon)$ است. به عبارتی دیگر در نسخه گسسته، z_0 تعریف شده بود نه z_0^* . فقط در تصویر پیوسته، که روی مسیرهای یکنواخت متمرکز می‌شویم، این شیء به صورت حد فوق تعریف می‌شود.

جمع در معادله (۱۳۹-۱-۲۱) می‌تواند مجدداً مرتب شود تا نتیجه دهد

$$\left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t (i\hbar) \left(z^* \frac{dz}{dt} \right) dt \right] + z^*(t)z(t) \quad (141-1-21)$$

که $z(t)$ باز هم به شکلی بیگانه به صورت حد $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} z(t - \varepsilon)$ وارد می‌شود. معمولاً می‌بینیم که دو روش متوسط‌گیری می‌شوند تا شکل نهایی نتیجه پیوستار زیر را به دست دهند:

$$\langle z_f | U(t) | z_i \rangle = \exp \left[\frac{z_f^* z_f + z_i^* z_i}{2} + \frac{i}{\hbar} \int_0^t \left[\frac{i\hbar}{2} \left(z^* \frac{dz}{dt} - \frac{dz^*}{dt} z \right) - H(z^*, z) \right] dt \right] \quad (142-1-21)$$

ما شکل بی‌تقارن را به کار خواهیم برد که با انجام یک انتگرال‌گیری جزء به جزء به دست می‌آید:

$$\langle z_f | U(t) | z_i \rangle = \exp \left[z_f^* z_f + \frac{i}{\hbar} \left[\int_0^t \left[i\hbar z^* \frac{dz}{dt} - H(z^*, z) \right] dt \right] \right] \quad (143-1-21)$$

این خطر که این فقط یک طرحواره برای عبارت گسسته شده قبلی است در اینجا از همه درست‌تر است چون چیز زیادی در کنش برای تضمین مسیرهای هموار وجود ندارد. اما در حد $\hbar \rightarrow 0$ ، انتگرال به صورت مجانبی با مسیرهای هموار تقریب زده می‌شود. این انتگرال را در چنین حدی با به دست آوردن نقطه مانای کنش، یعنی جواب کلاسیکی، حل می‌کنیم. از کنش، که دارای شکل فضای فاز $(p\dot{x} - \mathcal{H})$ است، واضح است که z و $i\hbar z^*$ متغیرهای به صورت کانونیک مزدوج هستند. با داشتن این کنش، اگر کسی بخواهد کوانتیده کند، آنها را به عملگرهای تابع روابط جابه‌جایی زیر ارتقا می‌دهد

$$[Z, i\hbar Z^\dagger] = i\hbar \quad (144-1-21)$$

که می‌بینیم همان قواعد جابه‌جایی برای a و a^+ هستند. البته ما نمی‌خواهیم نظریه کوانتومی را از نظریه کلاسیکی بسازیم بلکه عکس این کار را انجام می‌دهیم. معادله هامیلتونی عبارتست از

$$\dot{z} = \frac{\partial(\hbar\omega z^* z)}{\partial(i\hbar z^*)} = -i\omega z \quad (145-1-21)$$

که جواب آن عبارت می شود از

$$z(t) = z(0) e^{-i\omega t} \quad (146-1-21)$$

به طور مشابه به دست می آوریم:

$$z^*(t) = z^*(0) e^{i\omega t} \quad (147-1-21)$$

برای محاسبه

$$\langle z_f | U(T) | z_i \rangle \quad (148-1-21)$$

در تقریب نیمه کلاسیکی لازم است جوابی را پیدا کنیم که از روابط زیر پیروی کند

$$z(0) = z_i \quad (149-1-21)$$

$$z^*(T) = z_f^* \quad (150-1-21)$$

در اینجا مسئله ای را می بینیم که در نسخه فضای پیکربندی نداشتیم: چون معادلات در اینجا نسبت به زمان از مرتبه اول هستند، z_i برای همه زمان ها $z(t)$ را مشخص می کند. چطور می توانیم $z^*(T)$ را مساوی با یک z_f مستقلاً معلوم قرار دهیم؟ پاسخ این است که می بایست z^* را به صورت مستقل در نظر بگیریم و $z(t)$ را به $t=0$ و $z^*(t)$ را به $t=T$ محدود کنیم. در این صورت جواب ها عبارت می شوند از

$$z(t) = z_i e^{-i\omega t} \quad (151-1-21)$$

$$z^*(t) = z_f^* e^{i\omega(t-T)} \quad (152-1-21)$$

توجه کنید که $z^*(T)$ مزدوج مختلط $z(T)$ نیست. این یعنی x و y کمک گرفته شده در تعریف $z = x + iy$ روی این مسیر، حقیقی نیستند. اما یک انتگرال گوسین به وسیله نقطه زینی اش مشخص می شود حتی اگر این نقطه دور از محور اصلی انتگرال گیری باشد. این مطلب در کنفرانس فادیو توضیح داده شد (کتابنامه را ببینید).

اگر این جواب را در کنش قرار دهیم می بینیم که انتگرال t به واسطه حذف دو جمله توسط یکدیگر در انتگرالده صفر می شود و تنها جزئی که می ماند عبارتست از

$$z^*(T)z(T) = z_f^* z_i e^{-i\omega T}$$

که نتیجه می‌دهد:

$$\langle z_f | U(T) | z_i \rangle = \exp(z_f^* z_i e^{-i\omega T}) \quad (153-1-21)$$

که جواب دقیق است!

تمرین ۲۱-۱-۱۹: کنش را برای مسیر بالا محاسبه کنید و جواب داده شده را چک کنید.

تمرین ۲۱-۱-۲۰: انتگرال‌های گوسی را در معادلات (۴-۲-A) و (۵-۲-A) در نظر گرفته نشان دهید که اگر فقط وابستگی نمایی جواب را بخواهیم، با پیدا کردن قسمت نمایی مشخص می‌شود که در آن مانا است. این ویژگی عمومی انتگرال‌های گوسی است.

تمرین ۲۱-۱-۲۱: با داشتن $\langle z_f | U(T) | z_i \rangle = \exp[z_f^* z_i e^{-i\omega T}]$ انتشارگر نوسانگر $\langle x_2 | U(T) | x_1 \rangle$ را مجدداً به دست آورید. دو عملگر همانی به هر دو طرف $U(T)$ در $\langle x_2 | U(T) | x_1 \rangle$ وارد کنید. از توابع موج بهنجار شده به شکل مناسب $\langle x | z \rangle$ از تمرین (۱۸-۱-۲۱) استفاده کنید. مجبور خواهید شد تا یک انتگرال گوسی را روی دو زوج از متغیرهای میانی حالت همدوس حل کنید. انتگرال را با نقطه زینی حل کنید یعنی نقطه مانای کنش را پیدا کرده و انتگرالده را در آنجا محاسبه کنید. فقط روی ضریب نمایی متمرکز شده و نشان دهید که به جواب تمرین (۸-۶-۲) می‌رسید.

۲-۲۱- فرمالیزم زمان موهومی

انتشارگر زمان موهومی را در نظر بگیرید

$$U(\tau) = \exp\left(-\frac{1}{\hbar} H \tau\right) \quad (1-2-21)$$

این با قرار دادن

$$t = -i\tau \quad (2-2-21)$$

در انتشارگر همیشگی به دست می‌آید. به عبارتی دیگر اگر معادله شرودینگر عبارت می‌بود از

$$-\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \quad (3-2-21)$$

این انتشارگر می‌شد.

دلایل توجه به این عملگر با جلو رفتن روشن خواهد شد. اما ابتدا توجه می‌کنیم که می‌توانیم این فرمول را به صورت زیر بنویسیم:

$$U(\tau) = \sum |n\rangle \langle n| \exp\left(-\frac{1}{\hbar} E_n \tau\right) \quad (4-2-21)$$

که در آن،

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (5-2-21)$$

نکته اصلی که باید توجه شود این است که اگر چه زمان موهومی است، ویژه مقادیر و ویژه توابعی که در فرمول $U(\tau)$ وارد می شوند همان همیشگی ها هستند. بالعکس اگر $U(\tau)$ را داشتیم می توانیم معادله شرودینگر، ویژه مقادیر و ویژه توابع را استخراج کنیم.

انتگرال مسیر برای انتشارگر زمان موهومی عنصر ماتریسی

$$U(x, x', \tau) = \langle x|U(\tau)|x'\rangle \quad (6-2-21)$$

را در نظر بگیرید. می توانیم دقیقاً با همان مراحل قبلی یک انتگرال مسیر برای آن بنویسیم. جواب نهایی در نمادگذاری پیوسته عبارتست از

$$\langle x|U(\tau)|x'\rangle = U(x, x', \tau) = \int [\mathcal{D}x] \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^t \mathcal{L}_E(x, \dot{x}) dt\right] \quad (7-2-21)$$

$$\int [\mathcal{D}x] = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon}\right)^{1/2} \prod_0^{N-1} \left(\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon}\right)^{1/2} dx_i \quad (8-2-21)$$

$$\mathcal{L}_E = \frac{m}{2} \left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 + V(x) \quad (9-2-21)$$

که $\epsilon = t/N$ و \mathcal{L}_E لاگرانژی اقلیدسی نامیده می شود. صفت «اقلیدسی» به این معنی است که فضا و زمان اکنون شبیه هم رفتار می کنند. علامت های منفی فضای منکوفسکی در این فرمول برای ناورداها عوض می شوند. مثلاً $x^2 - c^2t^2$ ناوردا، $x^2 + c^2t^2$ می شود. توجه کنید که \mathcal{L}_E مجموع انرژی جنبشی اقلیدسی و انرژی پتانسیل زمان-حقیقی (بلادرنگ) است. لذا ذره تابع معادلات حرکت اقلیدسی، پتانسیل را وارونه شده خواهد دید. از این مطلب بعداً استفاده می کنیم.

ما تأکید کرده ایم که شکل پیوسته انتگرال مسیر یک مختصرنویسی برای نسخه گسسته است. این مطلب در اینجا درست است اما از همه انتگرال های مسیر، این خوش رفتارترین آنهاست. مسیرهای تند تغییر به وسیله عامل نمایی نزولی (به جای نوسانی سریع) حذف می شوند.

فرض کنید بخواهیم انتگرال مسیر اقلیدسی را برای یک ذره آزاد حساب کنیم. می توانیم مثل فصل ۸ عمل کرده و به دست آوریم

$$\langle x|U(\tau)|x'\rangle = \left(\frac{m}{2\pi\hbar\tau}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{m(x-x')^2}{2\hbar\tau}\right] \quad (10-2-21)$$

اگر این انتشارگر به ما داده می‌شود می‌توانستیم جواب فضای مینکوفسکی را با قرار دادن

$$(11-2-21)$$

$$\tau = it$$

به دست آوریم. این تداوم تحلیلی^۱ نامیده می‌شود.

یک ویژگی بسیار مهم مکانیک کوانتومی اقلیدسی این است که عملگر $U(\tau)$ یکانی نیست اما هر میتی است. لذا نرم حالت نسبت به زمان ثابت باقی نمی‌ماند. در واقع آنچه اتفاق می‌افتد این است که بعد از یک زمان طولانی هر حالت به حالت پایه $|0\rangle$ تحول می‌یابد:

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \langle x|U(\tau)|x'\rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \sum \langle x|n\rangle \langle n|x'\rangle \exp\left(-\frac{1}{\hbar} E_n \tau\right) \quad (12-2-21)$$

$$\simeq \langle x|0\rangle \langle 0|x'\rangle \exp\left(-\frac{1}{\hbar} E_0 \tau\right) \quad (13-2-21)$$

$$= \psi_0(x) \psi_0^*(x') \exp\left(-\frac{1}{\hbar} E_0 \tau\right) \quad (14-2-21)$$

بنابراین همه حالت‌ها به حالت پایه منتهی می‌شوند تا وقتی که نقطه شروع با آن همپوشانی دارد. این یک روش برای به دست آوردن حالت پایه در هر مسئله است: یک حالت اولیه برداشته، اجازه دهید برای مدت طولانی تحول یابد. شما باید به حالت پایه برسید مگر اینکه یک حالت اولیه عمود بر حالت پایه انتخاب کرده باشید (گاهی ممکن است این کار را با هدف به دست آوردن اولین حالت برانگیخته انجام دهید. برای نمونه اگر مسئله دارای ناوردایی پاریته باشد و شما حالت اولیه‌ای با پاریته فرد انتخاب کنید به یک حالت برانگیخته خواهید رسید).

برای مثال انتشارگر برای نوسانگر عبارتست از

$$U(x, x', \tau) = A(\tau) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar \sinh \omega \tau} [(x^2 + x'^2) \cosh \omega \tau - 2xx']\right) \quad (15-2-21)$$

که مثلاً از طریق تداوم تحلیلی از زمان‌های حقیقی جواب تمرین (۸-۶-۲) به دست آمد. توجه کنید که وقتی $t \rightarrow \infty$ میل می‌کند این متناسب با حاصل ضرب توابع موج حالت پایه می‌شود. ضریب جلوبی را به تمرین زیر واگذار می‌کنیم.

تمرین ۲۱-۲-۱: $A(t)$ را از تمرین (۸-۶-۳) به دست آورده و به زمان موهومی ربط دهید و ثابت کنید که این در حد τ بزرگ پیش ضریب درست را به دست می‌دهد.

تونلزنی با انتگرال‌های مسیر: چاه و چاه!

در اینجا یک کاربرد از فرمالیزم اقلیدسی را در نظر می‌گیریم. دیده‌ایم که چگونه می‌توان تابع موج WKB را برای حالت‌های نامقید با به کارگیری انتگرال‌های مسیر به دست آورد. این روش برای دامنه‌های تونلزنی از سدها

1- Analytic continuation.

کار نمی‌کند چون نمی‌توانیم یک مسیر کلاسیکی پیدا کنیم که از سد بگذرد. از طرف دیگر، در دینامیک اقلیدسی، پتانسیل وارونه می‌گردد و آنچه در فضای مینکوفسکی ممنوع است به‌طور ناگهانی در ناحیه اقلیدسی مجاز می‌شود!

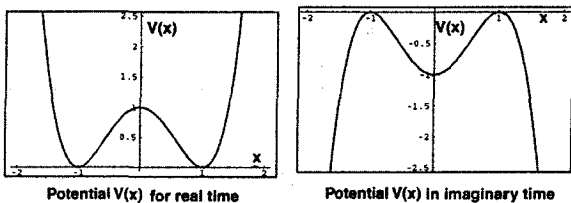
در اینجا مسئله‌ای وجود دارد که این نکته و بسیاری نکات دیگر را توضیح می‌دهد. ذره‌ای را در یک پتانسیل چاه دو گانه در نظر بگیرید:

$$V(x) = A^2(x^2 - a^2)^2 \quad (16-2-21)$$

کمینه‌های کلاسیکی در

$$x_{L/R} = \pm a \quad (17-2-21)$$

واقع‌اند. شکل ۲۱-۲ یک نمایش هندسی در فضای مینکوفسکی و فضای اقلیدسی برای مورد $a=1$ نشان می‌دهد.



شکل ۲۱-۲: پتانسیل چاه دو گانه در زمان حقیقی و موهومی.

توجه کنید که در مسئله اقلیدسی، چاه دو گانه به تپه دو گانه تبدیل شده است.

حالت پایه سیستم کدام است؟ حالت پایه کلاسیکی به صورت دو گانه تبهگن است: ذره می‌تواند در هر یک از دو کمینه قرار گیرد. در تقریب نیمه کلاسیکی، می‌توانیم اینها را به گوسین‌هایی پهن کنیم که حالت‌های پایه $|\pm a\rangle$ در پتانسیل نوسانگر هماهنگ گونه حول هر کمینه در $x = \pm a$ هستند. این کار هر حالت پایه تبهگن را به اندازه $\hbar\omega$ جابه‌جا خواهد کرد که ω معیاری از انحنای پتانسیل در نزدیکی کمینه است. می‌توانیم به تقریب‌های مرتبه بالاتر برویم که بیانگر این هستند که انتهای چاه دقیقاً درجه ۲ نیست و انرژی‌های حالت پایه را با توان‌های بالاتر \hbar جابه‌جا می‌کنند. اما هیچ چیز این، تبهگنی حالت‌های پایه را نخواهد شکافت چون هر آنچه که در کمینه چپ بیابیم در کمینه راست هم از طریق تقارن تحت بازتاب خواهیم یافت. برچیدن تبهگنی فقط در صورتی اتفاق خواهد افتاد که تونل‌زنی بین دو چاه را در نظر بگیریم. بنابراین این مسئله را در شکل ساده شده زیر مطالعه می‌کنیم. ابتدا همه حالت‌ها به جز حالت‌های پایه تبهگن $|\pm a\rangle$ را کنار می‌گذاریم (گوسین‌های متمرکز حول دو کمینه، کاملاً متعامد بر هم نیستند. فرض کنید آنها به وسیله فرایند گرام - اشمیت متعامد شده باشند). هامیلتونی تقریبی در این زیرفضا به صورت زیر است:

$$H = \begin{bmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_0 \end{bmatrix} \quad (18-2-21)$$

مبدأ انرژی را طوری جابه‌جا می‌کنیم که $E_0 = 0$ شود.

توجه کنید که هیچ عنصر ماتریسی غیر قطری وجود ندارد. اگر این یک نتیجه دقیق می‌بود باید بدین معنی می‌بود که اگر ذره‌ای از یک چاه شروع نماید هرگز در چاه دیگر یافت نخواهد شد. اما از رویکرد تابع موج می‌دانیم که اگر ذره از یک طرف شروع کند می‌تواند به طرف دیگر تونل بزند. این یعنی به‌طور مؤثر یک عنصر ماتریسی غیر قطری غیر صفر $\langle a|H|-a\rangle = H_{+-} = H_{-+}$ در این پایه وجود دارد. پیدا کردن آن عنصر در تقریب نیمه کلاسیکی چالش ماست. همین که آنرا پیدا کنیم، بدیهی است که ترازهای انرژی به

$$E = \pm H_{+-} \quad (2-21-19)$$

خواهند شکافت و ویژه حالت‌ها، $|S/A\rangle$ ، مجموع و تفاضل $|\pm a\rangle$ ، خواهد شد.
رابطه زیر را در نظر بگیرید

$$\langle a|U(\tau)|-a\rangle = \langle a|\exp\left(-\frac{1}{\hbar}H\tau\right)|-a\rangle \quad (2-21-20)$$

در این بحث تونل‌زنی، $U(\tau)$ انتشارگر از $-\tau/2$ تا $\tau/2$ است نه از 0 تا τ . توجه کنید که جمله خطی نسبت به τ عنصر ماتریسی غیر قطری را به دست می‌دهد:

$$\langle a|\exp\left(-\frac{1}{\hbar}H\tau\right)|-a\rangle \simeq 0 - \frac{1}{\hbar}\tau\langle a|H|-a\rangle + \mathcal{O}\tau^2 \quad (2-21-21)$$

ما $\langle a|e^{-(1/\hbar)H\tau}|-a\rangle$ را با تقریب نیمه کلاسیکی برای انتگرال مسیر اقلیدسی محاسبه خواهیم نمود و عنصر ماتریسی تقریبی H_{+-} را استخراج خواهیم کرد. یکبار دیگر، مانند تقریب نیمه کلاسیکی زمان - حقیقی، فقط روی عامل نمایی متمرکز می‌شویم و از بقیه پیش ضریب‌ها چشم‌پوشی می‌کنیم. در تقریب نیمه کلاسیکی،

$$\langle a|\exp\left(-\frac{1}{\hbar}H\tau\right)|-a\rangle \simeq \exp\left(-\frac{1}{\hbar}S_{cl}\right) \quad (2-21-22)$$

که S_{cl} کنش اقلیدسی برای مسیر کلاسیکی متصل کننده تپه چپ به تپه راست است. نکته کلیدی این است که در پتانسیل تپه دوگانه مکانیک اقلیدسی، حالت‌های پایه کلاسیکی به وسیله یک سد از هم جدا نمی‌شوند، به طوری که در یافتن یک مسیر کلاسیکی برای رفتن از یک تپه به تپه دیگر هیچ مشکلی وجود نخواهد داشت. معادلات حرکت اقلیدسی همان معادلات حرکت زمان‌های حقیقی هستند بجز در وارونه کردن پتانسیل. لذا یک انرژی پایسته E_e وجود خواهد داشت که با

$$E_e = \frac{m}{2}\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 - V(x) \quad (2-21-23)$$

مشخص می‌شود. با استفاده از این می‌توانیم با انتگرال گیری، مسیر را به دست آوریم:

$$\int_{x_1}^{x_2} \frac{\sqrt{m} dx}{\sqrt{2(E_e + V(x))}} = \int_{t_1}^{t_2} dt \quad (24-2-21)$$

حال ما تونلرزی از حالت $-a$ به حالت a را می‌خواهیم. اینها ویژه حالت‌های مکان نیستند بلکه گوسین‌های متمرکز در $x = \pm a$ هستند. اما ما دامنه تونلرزی از ویژه حالت مکان $x = -a$ به ویژه حالت مکان $x = +a$ را محاسبه خواهیم کرد. به استثنای همپوشانی‌های $\langle x = a | a \rangle$ و $\langle -a | x = -a \rangle$ ، این همان $\langle a | U | -a \rangle$ است. این همپوشانی‌ها چیزی در مورد سد تونلرزی نمی‌دانند. آنها پیش ضرایب نامعین را در جلوی وابستگی نمایی به سد تشکیل خواهند داد که ما تنها در پی آن هستیم. برای استخراج فیزیک حد انرژی پایین، می‌بایست $\tau \rightarrow \infty$ قرار دهیم. برای خاتمه دادن به این، مسیری را در نظر می‌گیریم که دارای $E_e = 0$ است. این مسیر با حل انتگرال فوق با $E_e = 0$ مشخص می‌شود:

$$x(\tau) = a \tanh \left[\sqrt{\frac{2}{m}} A \tau \right] \quad (25-2-21)$$

توجه کنید که در این مسیر، ذره در $t \rightarrow -\infty$ در بیشینه چپ شروع کرده و از تپه به پایین می‌غلتد و فقط در $\tau \rightarrow \infty$ به بیشینه راست می‌رسد. اگر نقطه شروع و پایان دقیقاً $x = \pm a$ باشند، تونلرزی، بی‌نهایت زمان می‌خواهد چون فقط در این حد، $\tan h$ مقدار حدی $\pm a$ خود را می‌گیرد. از نظر فیزیکی، این تا ابد طول می‌کشد چون ذره می‌بایست از حال سکون در انتهای چپ شروع کند تا انرژی اقلیدسی صفر داشته باشد. از سوی دیگر، برای نقاطی که کمی زیر کیمه در هر انتها هستند، زمان حرکت متناهی خواهد بود چون ذره می‌تواند با سرعتی غیرصفر شروع نماید: از آنجا که این نقاط هم تقریباً همان همپوشانی را با حالت‌های $|\pm a\rangle$ خواهند داشت می‌توانیم به جای $x = \pm a$ با آنها شروع کنیم که در این صورت تونلرزی در مدت متناهی اتفاق خواهد افتاد. در ادامه متوجه این مطلب خواهید شد.

کنش برای جواب بالا عبارتست از (با استفاده از $T = V$ برای جواب انرژی صفر)،

$$S_{cl} = \int (T + V) dt = \int 2T dt = \int_{-a}^a p(x) dx = \int_{-a}^a \sqrt{2mV(x)} dx \quad (26-2-21)$$

و دامنه تونلرزی (با نادیده گرفتن پیش ضرایب) می‌شود:

$$\langle a | U | -a \rangle \approx \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^a \sqrt{2mV(x)} dx \right) \quad (27-2-21)$$

که در توافق با تونلرزی به دست آمده در رویکرد شرودینگر، معادله (۱۶-۲-۲۴) با $E = 0$ ، است.

اکنون اقدام به استخراج عنصر ماتریسی، از طریق جستجو برای جمله خطی از τ در جواب، می‌نماییم. اما

ما هیچ وابستگی صریح این چنینی به τ در جواب نمی‌بینیم! راه حل را می‌توان به دو شیوه بیان کرد:

- اولی به این حقیقت مربوط می‌شود که در حد τ بزرگ، مسئله ناوردای انتقال در زمان می‌شود. به عبارت دیگر اگر نگاهی دقیق به جواب کلاسیکی بالا بیندازیم می‌بینیم که $\tan h$ بیشتر زمان را به $\pm a$ محدود می‌شود و سریعاً از $-a$ به a در یک زمان کوتاه حول $\tau = 0$ می‌پرد. به صورت

تجسمی، ذره زمان زیادی طول می‌کشد تا از نوک بغلتد، اما همین که شروع به حرکت می‌کند بسیار سریع به یک نقطه نزدیک به نقطه انتهای دیگر می‌غلتد (به این دلیل، این جواب یک *اینستا-تون* نامیده می‌شود، اصطلاحی که توسط هوفت^۱ ارائه شد: بجز برای «لحظه» کوتاه، وقتی تونلزنی رخ می‌دهد، سیستم اساساً در یکی از حالت‌های پایه کلاسیکی خود قرار دارد) اگر یک مسیر جدید رسم کنید که در آن همین تونلزنی در همین بازه زمانی، اما متمرکز حول زمان $\tau = \tau_0 \neq 0$ ، رخ دهد، این هم به کمینه کنش بودن نزدیک خواهد بود (وقتی $\tau \rightarrow \infty$ میل می‌کند آن هم دقیقاً همان کنش را خواهد داشت). به عبارتی دیگر جوابی که ما به دست می‌آوریم همراهان زیادی دارد که همگی دارای کنش تقریباً یکسان اما لحظات تونلزنی τ_0 متفاوت هستند. ما باید روی همه این مسیرها جمع کنیم یعنی روی لحظه تونلزنی τ_0 انتگرال بگیریم. از آنجا که آنها همگی دارای کنش تقریباً یکسان هستند، حاصل ضرب کردن جواب در τ است چون τ_0 مجبور است درون دوره $\tau/2 < \tau_0 < \tau/2$ قرار بگیرد.

- روش دیگر برای استدال این است که همین که یک مسیر کلاسیکی پیدا می‌کنیم می‌بایست از تابعی روی همه افت و خیزهای $x_{cl}(\tau) = x(\tau) - x_{cl}(\tau)$ انتگرال بگیریم (بخش ۸-۶ را ببینید). اگر کنش را نزدیک x_{cl} بسط دهیم هیچ جمله خطی وجود نخواهد داشت چون کنش در اینجا مانا است و ما با یک عبارت درجه ۲ در $\delta x(\tau)$ شروع خواهیم کرد. با قطری کردن این شکل درجه دوم می‌توانیم به جواب، به صورت حاصل ضرب انتگرال‌های گاوسی، برسیم. مثال یک بعدی یک تابع تقرب زده شده به وسیله یک گاوسین متمرکز در $x=0$ را در نظر بگیرید:

$$I(a) = \int_{x_1}^{x_2} e^{-ax^2} dx \quad (21-2-28)$$

اگر $\alpha > 0$ باشد می‌توانیم فرض کنیم که حدود می‌توانند به بی‌نهایت میل داده شوند و جواب با عبارت زیر تقرب زده شود

$$I(a) \approx \sqrt{\pi/\alpha} \quad (21-2-29)$$

وقتی $\alpha \rightarrow 0$ میل می‌کند چه اتفاقی می‌افتد؟ جواب تقریبی و اگر می‌شود اما می‌دانیم که جواب واقعی عبارتست از

$$I = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_{x_1}^{x_2} e^{-\alpha x^2} dx = x_2 - x_1 \quad (21-2-30)$$

این اساساً چیز است که در انتگرال تابعی اتفاق می‌افتد. فرض کنید $x(\tau)$ یک جواب کلاسیکی است آنگاه $x(\tau - \tau_0)$ هم یک جواب است و

$$(۲۱-۲-۳۱)$$

$$\delta x(\tau) = x(\tau - \tau_0) - x(\tau)$$

یک افت و خیز است که به هزینه کنش زیادی تمام نمی‌شود، یعنی گوسین که فرض می‌شود این افت و خیز را میرا کند دارای $\alpha \rightarrow 0$ است در این صورت انتگرال گوسی با گستره انتگرال گیری متناظر با این درجه آزادی، که اساساً $\int d\tau_0 \approx \tau$ است، جایگزین می‌شود.

پس ما برای یک پیش ضریب τ ، که از در نظر گرفتن یک افت و خیز حول جواب کلاسیکی ناشی می‌شود، استدلال کرده‌ایم. ما مجبور به در نظر گرفتن آن بودیم چون یک تقارن دقیق (تحت انتقال در زمان) را منعکس کرد که به عنوان نتیجه‌ای از آن، هیچ α بی در گوسین نبود تا آن را قطع کند. اما ما از انتگرال‌های گوسین روی بقیه افت و خیزها چشم‌پوشی می‌کنیم چون آنها به وسیله α های غیر صفر قطع می‌شوند. با پیش ضریب τ در جلوی

$$\langle +a|U(\tau)|-a\rangle = \tau \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_{cl}\right) \quad (۲۲-۲-۲۱)$$

آماده هستیم تا آن را با

$$\langle a|\exp\left(-\frac{1}{\hbar} H\tau\right)|-a\rangle \approx 0 - \frac{1}{\hbar} \tau \langle a|H|-a\rangle + \mathcal{O}r^2 \quad (۲۳-۲-۲۱)$$

مقایسه کنیم و از روی آن نتیجه بگیریم که

$$H_{-+} \approx -\exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_{cl}\right) \quad (۲۴-۲-۲۱)$$

که باز هم همه پیش ضریب‌ها را حذف کرده‌ایم، به جز علامت منفی که مهم است (همه دامنه‌های گذار اقلیدسی مثبت هستند چون تابعی مثبت است. علامت منفی از $e^{-(1/\hbar)Ht}$ می‌آید). اکنون واضح است که با H_{-+} منفی، انرژی‌ها و ویژه حالت‌های جدید به صورت زیرند:

$$|S\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}[|+a\rangle + |-a\rangle] \quad E_S = -\exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_{cl}\right) \quad (۲۵-۲-۲۱)$$

$$|A\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}[|+a\rangle - |-a\rangle] \quad E_S = \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_{cl}\right) \quad (۲۶-۲-۲۱)$$

شکست خودبه‌خودی تقارن

چرا به جمله‌ای توجه می‌کنیم که وقتی $\hbar \rightarrow 0$ میل می‌کند به صورت نمایی سریع صفر می‌شود در صورتی که همه تصحیحات اختلالی برای حالت‌های $|a \pm\rangle$ را نادیده گرفتیم که به صورت توان‌های متناهی \hbar صفر شدند؟ دلیل این است که جمله کوچک به صورت نمایی، جمله پیشرو در شکافتگی دو حالت پایه تبهگن به صورت کلاسیکی است.

اما یک مفهوم خیلی مهم دیگر در محاسبه تونل‌زنی وجود دارد. این مفهوم به پدیده شکست خودبه‌خودی تقارن مربوط می‌شود که در اینجا توصیف می‌شود.

یک هامیلتونی در نظر بگیرید که دارای یک تقارن، مثلاً تحت پارته، است. اگر پایین‌ترین حالت انرژی مسئله خودش تحت این تقارن ناوردا نباشد می‌گوییم تقارن به صورت خودبه‌خودی می‌شکند. شکست خود بخودی تقارن در مکانیک کلاسیک بسیار راحت اتفاق می‌افتد. نوسانگر تک-چاه را در نظر بگیرید. هامیلتونی تحت پارته ناوردا است. حالت پایه، ذره‌ای واقع در انتهای چاه است. این حالت، تقارن را محترم می‌شمارد: اثر پارته روی این حالت، پس دادن حالت است. حال چاه دو گانه را با کمینه‌های واقع در $x = \pm a$ در نظر بگیرید. دو پیکربندی پایین‌ترین انرژی برای ذره قابل دسترسی است: واقع بودن در انتهای هر یک از این حیث که چیزی در هامیلتونی نبود تا شاخص‌ها را به یک طرف متمایل کند. همین که ذره یک انتخاب انجام داد (بسته به اتفاقات شروط اولیه)، انتخاب دیگر در دینامیک آن وارد نمی‌شود. به نشانه‌های دوتایی بودن شکست تقارن توجه کنید: بیش از یک حالت پایه وجود دارد و این حالت‌ها تحت تقارن ناوردا نیستند (یک مشاهده پذیر که تحت تقارن ناوردا نیست دارای مقدار غیر صفر است)، اما در عوض با عمل تقارن به یکدیگر نگاشته می‌شوند.

حال مورد کوانتومی چاه دو گانه را در نظر بگیرید ولی با یک سد نامتناهی بین چاه‌ها (سد را به این معنی به کار می‌بریم که تونل‌زنی از آن در رویکرد انتگرال‌های مسیر یا رویکرد تابع موج غیرممکن است. بنابراین یک تابع دلتای تیز چنین سدی نیست). باز هم ذره دو انتخاب دارد، اینها توابع گوسین گونه متمرکز در دو پاستیغ (فرورفتگی) هستند: $|\pm a\rangle$. آنها جنبه‌های دوتایی بودن شکست تقارن را نشان می‌دهند: آنها تبهگن بوده و تحت پارته غیر ناوردا هستند $(\langle X \rangle \neq 0)$. اما یک پیچیدگی وجود دارد. در نظریه کوانتومی، یک ذره می‌تواند در یک لحظه در دو جا باشد. بویژه می‌توانیم ترکیباتی از این ویژه بردارهای تبهگن تشکیل دهیم:

$$|S/A\rangle = \frac{[|+a\rangle \pm |-a\rangle]}{\sqrt{2}} \quad (37-2-21)$$

$$\Pi |S/A\rangle = \pm |S/A\rangle \quad (38-2-21)$$

که ویژه حالت‌های پارته هستند. در واقع در نظر کوانتومی رابطه

$$[\Pi, H] = 0 \quad (39-2-21)$$

تضمین می‌کند که چنین ویژه حالت‌های پارته‌ای می‌توانند تشکیل شوند. اما آیا آنها باید تشکیل شوند؟ جواب در این مسئله به خاطر سد نامتناهی منفی است. دلیل این است: فرض کنید ذره مورد بحث در طی یک آزمایش در یک طرف رؤیت شود. آنگاه هیچ راهی برای تابع موج آن برای ایجاد تکیه گاهی (جای پای) در سمت دیگر وجود ندارد (گفته می‌شود که حرکت ارگودیک^۱ نیست). حتی در نظریه کوانتومی، که انرژی می‌تواند روی زمان‌های کوچک نقض شود نفوذ کردن در سد در صورتی که نامتناهی باشد ممنوع است. این بویژه

بدین معنی است که توابع متقارن و پادمقارن به وسیله ذره‌ای که همیشه در یک طرف دیده شده است هرگز صورت خارجی پیدا نمی‌کنند (تحقق نمی‌یابند). در این صورت کار صحیحی که باید صورت گیرد، ساخت یک فضای هیلبرت از توابعی است که فقط در یک طرف جا دارند. اینکه هر حالت که این طور ساخته می‌شود دارای یک شریک تبهگن در چاه غیر قابل دسترس آنطرف سد است یک فرضیه است. ذره حتی نخواهد دانست که یک جهان موازی و همگام درست مثل جهان خودش وجود دارد. عمر (موجودیت) حقیقی در چنین مسئله‌ای متقارن نخواهد بود و توابع موج متقارن و پاد متقارن (با $\langle X \rangle$ صفر) وضعیت‌های غیر قابل تحقق را نمایش می‌دهند و تقارن به صورت خودبه‌خودی می‌شکند.

در اینجا به مسئله نوعی تر با سد متناهی می‌پردازیم. در این مورد ذره‌ای که یکبار در سمت چپ دیده شده می‌تواند بعداً در سمت راست دیده شود و بالعکس. توابع موج متقارن و پادمقارن از نظر فیزیکی معقول هستند و می‌توانیم ویژه حالت‌های انرژی را انتخاب کنیم که ویژه حالت‌های پارته هم هستند. این حالت‌ها دیگر تبهگن نخواهند بود. در مسائل عادی، حالت متقارن، یا به‌طور کلی تر حالت با ویژه مقدار یک برای عمل تقارنی، حالتی ناوردا تحت عمل تقارن، حالت پایه منحصربه‌فرد خواهد بود. به‌خاطر بیاورید که در مسئله نوسانگر، حالت پایه نه تنها پارته معینی داشت، بلکه تکانه زاویه‌ای صفر و تحت چرخش‌ها ناوردا بود. همین طور در اتم هیدروژن، حالت پایه نه تنها تکانه زاویه‌ای معینی داشت، بلکه تکانه زاویه‌ای صفر و تحت چرخش‌ها ناوردا بود. اما در هر دوی این مسائل چندگانگی در حالت‌های پایه کلاسیکی نبوده و هیچ شانس حقیقی برای شکست تقارن نبود (نوسانگر فقط یک حالت پایه کلاسیکی در انتهای چاه داشت و اتم هیدروژن یک حالت بی‌نهایت عمیق داخل چاه کولنی داشت) آنچه محاسبه اینستانتون بیان می‌کند این است که چاه دو گانه علی‌رغم داشتن دو حالت پایه کلاسیکی که تقارن را می‌شکنند، در نظریه کوانتومی یک حالت پایه متقارن منحصربه‌فرد دارد.

لذا اگر چه محاسبه تونل‌زنی بسیار خام و تقریبی بود ولی منجر به یک نتیجه خیلی عمیق شد: تقارن هامیلتونی، تقارن حالت پایه است، شکستن تقارن در مسئله چاه دو گانه اتفاق نمی‌افتد.

این مفهوم بازبایی تقارن به وسیله تونل‌زنی (که به نوبه خود به وجود جواب‌های اقلیدسی کلاسیکی با کنش متناهی که از یک حالت پایه تبهگن مفروض به دیگری می‌رود مربوط می‌شود) بسیار عمیق است و نقش بزرگی در بسیاری از مسائل بازی می‌کند. مسائلی وجود داشته‌اند (کرومودینامیک کوانتومی) که کسی حتی تصور نمی‌کرد که کمینه‌ای که برای سال‌ها منحصربه‌فرد فرض شده بود یکی از خانواده نامتناهی کمینه‌های تبهگن بوده است تا اینکه یک اینستانتون (با کنش متناهی) که دو کمینه کلاسیکی را به هم ربط می‌داد به دست آمد و تفسیر شد. ما مثال مشابهی را بحث می‌کنیم تا عمومیت مفهوم را نشان دهیم. ذره‌ای در یک پتانسیل دوره‌ای $V(x) = 1 - \cos 2\pi x$. کمینه‌ها در $x = n$ هستند که n عددی صحیح است. تقارن مسئله، انتقال گسسته $x \rightarrow x + 1$ است. حالت‌های تقریبی، $|n\rangle$ ها، که گوسین‌های متمرکز حول کمینه‌های کلاسیکی هستند تقارن را می‌شکنند و به وسیله T به یکدیگر تبدیل می‌شوند، عملگری که انتقال $x \rightarrow x + 1$ را انجام می‌دهد:

$$T|n\rangle = |n+1\rangle$$

اما کمینه‌های کلاسیکی مجاور هم به وسیله یک دامنه تونل‌زنی غیر صفر از نوعی که محاسبه کردیم به هم مربوط می‌شوند و H دارای دامنه‌های غیر قطری بین $|n\rangle$ و $|n \pm 1\rangle$ است (همین‌طور جواب‌هایی وجود دارند که تونل‌زنی را تا نزدیکترین کمینه‌های همسایه بعدی توصیف می‌کنند اما اینها کنشی دو برابر کنش مربوط به فرایند تونل‌زنی نزدیکترین همسایه دارند و به یک عنصر ماتریسی غیرقطری منجر می‌شوند که تقریباً مربع عنصر ماتریسی مربوط به تونل‌زنی نزدیکترین همسایه است). فرض کنید که جهان یک بعدی، متناهی باشد و یک حلقه بسته با اندازه N تشکیل دهد به طوری که N کمینه کلاسیکی وجود داشته باشد. اینها به N تراز غیر تبه‌گن (مانسته $|S/A\rangle$)، به واسطه مخلوط‌شدگی (آمیختگی) مربوط به تونل‌زنی، تحول می‌یافتند. حالت پایه یک ترکیب متقارن می‌شد:

$$|S\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_0^N |n\rangle \quad (۴۱-۲-۲۱)$$

جزئیات را به تمرین زیر واگذار می‌کنیم.
تمرین ۲۱-۲-۲: (خیلی مهم). فرض کنید که

$$H = \sum_1^N E_0 |n\rangle \langle n| - t(|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|) \quad (۴۲-۲-۲۱)$$

هامیلتونی انرژی - پایین یک ذره را در یک پتانسیل دوره‌ای با کمینه‌های واقع در اعداد صحیح n توصیف می‌کند. اعداد صحیح n از 1 تا N می‌روند چون فرض می‌شود که جهان حلقه‌ای به طول N است به طوری که نقطه $N+1$ ام نقطه اول است. لذا مسئله دارای تقارن تحت انتقال به اندازه یک جایگاه، علی‌رغم طول متناهی جهان، است. جمله اول در H انرژی حالت گزین متمرکز در $x = n$ را نشان می‌دهد. جمله دوم تونل‌زنی به کمینه‌های مجاور با دامنه تونل‌زنی t را نشان می‌دهد. حالت

$$|\theta\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_0^N e^{in\theta} |n\rangle \quad (۴۳-۲-۲۱)$$

را در نظر بگیرید. نشان دهید که این یک ویژه حالت T است. ویژه مقدار را پیدا کنید. از شرط $T^N = I$ برای محدود کردن مقادیر مجاز θ استفاده کرده و مطمئن شوید که ما هنوز هم درست N حالت داریم. نشان دهید که $|\theta\rangle$ یک ویژه حالت H با ویژه مقدار $E(\theta) = E_0 - 2t \cos \theta$ است. $N=2$ را در نظر گرفته و نتیجه چاه دو گانه را مجدداً به دست آورید (ممکن است با ضرب $\cos \theta$ کمی مشکل داشته باشید. به خاطر داشته باشید که در یک حلقه با فقط دو جایگاه، هر جایگاه هم جلو و هم پشت دیگری است و H آنها را دوبار جفت می‌کند).

آیا حالت پایه همیشه تحت عمل تقارن که با H جابه‌جا می‌شود ناوردا خواهد بود؟ پاسخ مثبت است تا وقتی که ارتفاع سد متناهی است یا تا وقتی که یک جواب کنش متناهی برای معادلات حرکت اقلیدسی متصل‌کننده کمینه‌های کلاسیکی وجود دارد. معمولاً برای مکانیک کوانتومی تعداد متناهی از درجات آزادی با پارامترهای متناهی در هامیلتونی، وضعیت اینگونه است. از سوی دیگر، اگر در پتانسیل دوره‌ای $V_0 \rightarrow \infty$ میل کند، عملاً N کمینه تبه‌گن، با ذراتی که در هر یک از کمینه‌ها برای همیشه گیر افتاده اند، وجود خواهد

داشت. در نظریه کوانتومی میدان، که بی‌نهایت درجات آزادی وجود دارد، حتی اگر پارامترها متناهی باشند، سد اغلب بی‌نهایت بلند است در صورتی که همه درجات آزادی تلاش کنند تا از روی یک سد جهش کنند. به عبارتی دیگر شکست تقارن می‌تواند اتفاق بیفتد.

برای بحثی کاملتر از مسئلهٔ تونل‌زنی، می‌بایست به کتابنامه بویژه کارهای کولیمن و راجارامن مراجعه کنید. این مراجع به سؤالات دیگر شما، نظیر جواب‌های ذره‌ای که بین دو نوک تپه در پتانسیل چاه دوگانه وارونه شده به عقب و جلو می‌رود؟، هم پاسخ خواهند داد (اینها سهم‌هایی به دست می‌دهند که در آنها پیش ضریب‌ها توان‌های بالاتر از τ می‌گردند). آیا روشی وجود دارد که شکافتگی بین $|S/A\rangle$ را مستقیماً از $\langle a|U(\tau)|-a\rangle$ بدون استفاده از جمله خطی از τ به دست آورد (بله، با جمع روی تعدادی نامتناهی از عقب و جلو رفتن‌ها). شما نکات جالب بسیاری را برای تفکر کردن خواهید یافت، اما ثابت خواهد شد که نتیجهٔ ما تا مرتبهٔ پیشرو در کمیت کوچک به صورت نمایی $e^{-(\hbar/k)Scl}$ درست است.

انتگرال‌های مسیر زمان موهومی و مکانیک آماری کوانتومی

اکنون دو دلیل دیگر را برای مطالعه کردن انتگرال‌های مسیر زمان موهومی بحث می‌کنیم. اولی به مکانیک آماری کوانتومی و دومی به مکانیک آماری کلاسیکی مربوط می‌شوند. تابع پارش را برای یک سیستم کوانتومی در نظر بگیرید:

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n} \quad (۴۴-۲-۲۱)$$

که دمای T و ثابت بولتزمن k در ترکیب $\beta = 1/kT$ قرار دارند و E_n انرژی ویژه حالت n ام هامیلتونی H است. می‌توانیم این را به صورت زیر بازنویسی کنیم

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H} \quad (۴۵-۲-۲۱)$$

که تریس (رد) در ویژه پایهٔ H گرفته می‌شود. حال از این حقیقت استفاده می‌کنیم که رد، تحت تبدیل یکانی پایه ناورداست و به پایه x می‌رویم تا برسیم به

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x| e^{-\beta H} |x\rangle dx \quad (۴۶-۲-۲۱)$$

انتگرالده مسلماً برای ما آشناست:

$$\langle x| \exp(-\beta H) |x\rangle = \langle x| \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \beta \hbar H\right) |x\rangle = U(x, x, \beta \hbar) \quad (۴۷-۲-۲۱)$$

به عبارتی دیگر، Z ، جمع روی دامنه هاست تا از نقطهٔ x به نقطهٔ x در زمان موهومی $\tau = \beta \hbar$ برگردند یعنی روی مسیرهای بسته.

تمرین ۲۱-۲-۳: با شروع از $U(x, x, \tau)$ برای نوسانگر (معادله (۲۱-۲-۱۵)) و تمرین (۲۱-۲-۱) انتگرال روی x را حل کرده و Z را به دست آورید. این را با جمع زیر مقایسه کنید

$$Z = \sum_0^{\infty} e^{-\beta \hbar \omega (n+1/2)} \quad (۴۸-۲-۲۱)$$

این ارتباط بین مکانیک آماری کوانتومی و مکانیک کوانتومی زمان موهومی نقطه شروع برای تمام صنعت است. بعضی از کاربردها در کتاب فاینمن و هییز بحث می‌شوند. این کار ما را از رسیدن به عمق این مطالب باز می‌داشت. در اینجا فقط نشان می‌دهیم که چطور حد کلاسیکی این فرمول را می‌گیریم. یک ذره منفرد به جرم m را در پتانسیل $V(x)$ در نظر بگیرید. در این صورت

$$Z(\beta) = \int dx \int_x^x [\mathcal{D}x] \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta \hbar} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 + V(x(\tau)) \right] d\tau \right] \quad (۴۹-۲-۲۱)$$

که حدود روی انتگرال تابعی یادآوری می‌کنند که مسیرها در یک نقطه x شروع شده و پایان می‌پذیرند و سپس از طریق انتگرال معمولی روی آن (x) انتگرال گیری می‌شود. حد $\beta \hbar \rightarrow 0$ را، مربوط به دماهای بالا یا \hbar صفر (حد کلاسیکی)، در نظر بگیرید. به هر مقدار x نگاه کنید. لازم است روی مسیرهایی جمع کنیم که در x شروع می‌شوند و در مدت خیلی کوتاه $\beta \hbar$ به جایی رفته و به x برمی‌گردند. اگر ذره فاصله Δx را پیماید، انرژی جنبشی نوعی $m(\Delta x / \beta \hbar)^2$ است و ضریب موقوف‌سازی^۱ عبارتست از

$$\simeq \exp \left(-\frac{1}{\hbar} m(\Delta x / \beta \hbar)^2 \beta \hbar \right) \quad (۵۰-۲-۲۱)$$

که از آن نتیجه می‌شود

$$\Delta x \simeq \sqrt{\frac{\beta}{m}} \hbar \quad (۵۱-۲-۲۱)$$

اگر پتانسیل روی چنین مقیاس طولی تغییر نکند [موسوم به طول موج گرمایی، تمرین (۴-۲-۲۱) را ببینید] می‌توانیم آنرا با یک ثابت برابر با مقدار آن در نقطه شروع x تقریب زده و بنویسیم:

$$\begin{aligned} Z(\beta) &\simeq \int dx e^{-\beta V(x)} \int_x^x [\mathcal{D}x] \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta \hbar} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 \right] d\tau \right] \\ &= \int dx e^{-\beta V(x)} \sqrt{\frac{m}{2\pi \hbar \beta \hbar}} \end{aligned} \quad (۵۲-۲-۲۱)$$

که در گام آخر از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که با $V(x)$ بیرون کشیده شده، انتگرال تابعی همان دامنه رفتن یک ذره آزاد از x به x در مدت $\beta \hbar$ است. این چگونه با مکانیک آماری کلاسیکی مقایسه می‌شود؟ در آنجا جمع روی حالت‌ها به‌وسیله یک انتگرال روی فضای فاز جایگزین می‌شود:

$$Z = A \int dx \int dp \exp \left[-\beta \left(\frac{p^2}{2m} + V(x) \right) \right] \quad (۵۳-۲-۲۱)$$

که پیش ضریب دلخواه A ، آزادی عمل در ضرب Z در یک ثابت بدون هیچ چیز (نتیجه) فیزیکی را نشان می‌دهد چون Z یک جمع روی احتمالات نسبی است و هر پیش ضریبی در فرایند متوسط گیری حذف خواهد شد. به طور معادل آن متناظر با این حقیقت است که تعداد حالت‌های کلاسیکی در یک ناحیه $dx dp$ فضای فاز به صورت یگانه‌ای تعریف نمی‌شود. اگر انتگرال p را انجام داده و با حد کلاسیکی انتگرال مسیر مقایسه کنیم می‌بینیم که نظریه کوانتومی تعیین می‌کند که

$$A = \frac{1}{2\pi\hbar} \quad (۵۴-۲-۲۱)$$

که در توافق با اصل عدم قطعیت است که به هر حالت کوانتومی یک مساحت از مرتبه $\Delta X \Delta P \approx \hbar$ در فضای فاز وابسته می‌کند.

تمرین ۲۱-۲-۴: ذره‌ای را در دمای T با میانگین انرژی از مرتبه KT در نظر بگیرید. با فرض جنبشی بودن همه انرژی، تکانه آنرا برآورد کرده و به طول موج دو بروی تبدیل کنید. نشان دهید که این، عددی از مرتبه طول موج گرمایی به ما می‌دهد. این کمینه اندازه‌ای است که روی آن ذره می‌تواند جایگزیده باشد.

رابطه با مکانیک آماری کلاسیکی

تاکنون رابطه بین انتگرال مسیر زمان موهومی و مکانیک آماری کوانتومی را بحث کرده‌ایم. در اینجا رابطه بین آن با مکانیک آماری کلاسیکی را بررسی می‌کنیم. یک سیستم کلاسیکی با $N + 1$ جایگاه و یک درجه آزادی x_n در هر جایگاه را در نظر بگیرید. متغیرها در انتهای زنجیر، x_0 و x_N ، ثابت هستند. در این صورت

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_1^{N-1} dx_i \exp\left(-\frac{1}{kT} E(x_0, \dots, x_N)\right) \quad (۵۵-۲-۲۱)$$

که E تابع انرژی بوده و β را برحسب متغیر دمای آشناتر به صورت $\beta = 1/kT$ نوشته‌ایم. فرض کنید E شکل زیر را داشته باشد

$$E = \sum_1^{N-1} [K_1(x_n - x_{n-1})^2 + K_2 x_n^2] \quad (۵۶-۲-۲۱)$$

که جمله اول نشان‌دهنده جفت شدگی فترگونه بین نزدیکترین همسایه هاست که آنها را وادار می‌کند تا فاصله ثابتی را حفظ کنند و دومی یک پتانسیل درجه دو فراهم می‌کند که از منحرف شدن هر x از مکان تعادل $x = 0$ جلوگیری می‌کند. اگر این را با انتگرال مسیر فاینمن زمان موهومی گسسته شده برای نوسانگر کوانتومی مقایسه کنیم:

$$U(x_0, x_N, \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_1^{N-1} dx_i \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \sum_1^{N-1} \varepsilon \left(\frac{m}{2} \frac{(x_n - x_{n-1})^2}{\varepsilon^2} + \frac{m\omega^2}{2} x_n^2\right)\right] \quad (۵۷-۲-۲۱)$$

تناظر زیر را می‌بینیم:

• انتگرال مسیر فاینمن از x_0 تا x_N از نظر شکل با یک تابع پارش کلاسیکی سیستم دارای $N + 1$ مختصه x_n با شرط مرزی ثابت بودن ابتدا و انتها در x_0 و x_N یکسان است. متغیرهای x_n به‌عنوان برجسب‌های حالت میانی مسئله کوانتومی و به‌عنوان متغیرهای کلاسیکی که در تابع پارش روی آنها جمع زده می‌شود تعبیر می‌شوند.

• نقش \hbar توسط T ایفا می‌شود. بویژه وقتی هر یک از دو متغیر به صفر میل می‌کنند، جمع روی پیکربندی‌ها به‌وسیله کمینه کنش یا انرژی غالب می‌شود و افت و خیزها موقوف می‌شوند.

• پارامترها در مسائل کلاسیکی و کوانتومی می‌توانند به یکدیگر نگاشته شوند. برای مثال $\beta K_2 = m\omega^2 \varepsilon / 2\hbar$ و $\beta K_1 = m / 2\hbar \varepsilon$.

• از آنجا که در مسئله کوانتومی $\varepsilon \rightarrow 0$ میل می‌کند پارامترهای مسئله کلاسیکی می‌بایست برخی مقادیر حدی ($K_1 \rightarrow \infty$ و $K_2 \rightarrow 0$ به شیوه‌ای خاص) را بگیرند تا واقعاً در تناظر با مسئله کوانتومی با $H = P^2 / 2m + m\omega^2 x^2 / 2$ قرار گیرند.

• تنها درجه آزادی کوانتومی، با آرایه‌ای یک بعدی از درجات آزادی کلاسیکی تعویض می‌شود. این یک ویژگی عمومی است: وقتی از مسئله کوانتومی به کلاسیکی می‌رویم بُعد به اندازه یک واحد زیاد می‌شود. برای مثال آرایه یک بعدی از نوسانگرهای کوانتومی به تابع پارش یک آرایه دو بعدی از متغیرهای کلاسیکی نگاشته می‌شود.

تأکید ما بر این مفهوم بوده است که مسئله نوسانگر کوانتومی می‌تواند به‌صورت یک انتگرال مسیر نوشته شود که اکنون می‌دانیم یک تابع پارش کلاسیکی هم هست. درست همان قدر جالب است که یک مسئله کلاسیکی را در نظر گرفته و آنرا به نسخه عملگری ترجمه کنیم (برگردانیم). در مسئله کلاسیکی به انرژی آزاد و متوسط‌های گرمایی روی توزیع بولتزمن، یعنی توابع همبستگی نظیر

$$\langle x_{12} x_{78} \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \prod_1^{N-1} dx_i x_{12} x_{78} e^{-\beta E(x_0, \dots, x_N)}}{\int_{-\infty}^{\infty} \prod_1^{N-1} dx_i e^{-\beta E(x_0, \dots, x_N)}} \quad (58-2-21)$$

علاقه‌مند هستیم که از براکت‌های $\langle \rangle$ برای نشان دادن متوسط‌های گرمایی استفاده می‌کنیم همان‌طور که برای متوسط‌های کوانتومی انجام دادیم، با این امید که شما خواهید توانست از متن در جریان مفهوم آن قرار بگیرید. در نظریه کوانتومی به دنبال ویژه حالت‌های H ، بویژه حالت پایه، عملگرهای هایزنبرگ و غیره هستیم. در اینجا فرهنگ لغات را بین دو رویکرد توسعه می‌دهیم. به جای استفاده از نوسانگر، به یک مسئله با فضای هیلبرت ساده‌تر برمی‌گردیم: مسئله اسپین $\frac{1}{2}$.

برای این منظور مدل ایزینگ^۱ را در یک بعد در نظر بگیرید. در اینجا شبکه یک آرایه از $N + 1$ نقطه شماره گذاری شده از ۰ تا N است. در هر نقطه یک اسپین ایزینگ قرار می‌گیرد که می‌تواند فقط دو مقدار $s = \pm 1$ را بگیرد. تابع پارش عبارت می‌شود از

1- Ising model.

$$Z = \sum_{s_i = \pm 1} \exp \left[\sum_{i=0}^{N-1} K(s_i s_{i+1} - 1) \right] \quad (59-2-21)$$

که K فاکتور $-\beta$ را در خود دارد. برای موردی که ما علاقه مندیم، $K > 0$ ، وقتی $s_i = s_{i+1}$ باشد وزن بولتزمن بزرگ و وقتی $s_i = -s_{i+1}$ باشد کوچک است. لذا جفت شدگی نزدیکترین همسایه نشانگر تمایل فرومغناطیسی اسپین‌ها برای همسو شدن با همسایه‌های خودشان است. انرژی مستقل از اسپین اضافی منفی $-K$ هر جایگاه، یک جابه‌جایی در انرژی است که برای راحتی صورت گرفته است. با داشتن این فرمول برای Z می‌توانیم به همه سؤالات ترمودینامیکی پاسخ دهیم. این مسئله کلاسیکی ماست. با نگاه کلاسیکی به مسئله ابتدا آنرا برای انرژی آزاد و تابع همبستگی حل خواهیم کرد. سپس این را به مسئله کوانتومی خواهیم نگاشت و همین نتایج و قاموس خود را مجدداً به دست خواهیم آورد.

ابتدا s_0 را در یک مقدار ثابت نگه می‌داریم و یک متغیر نسبی تعریف می‌کنیم:

$$t_i = s_i s_{i+1} \quad (60-2-21)$$

واضح است که با داشتن s_0 و t_i می‌توانیم حالت سیستم را بازسازی کنیم. لذا می‌توانیم بنویسیم:

$$Z = \sum_{t_i} \exp \left[\sum_{i=0}^{N-1} K(t_i - 1) \right] = \sum_{t_i} \prod_i e^{K(t_i - 1)} \quad (61-2-21)$$

از آنجا که تابع نمایی به یک حاصل ضرب روی t_i تجزیه می‌شود می‌توانیم جمع‌های روی هر t_i را انجام داده و (بعد از الحاق یک ضریب ۲ برای دو انتخاب ممکن برای s_0) به دست آوریم:

$$Z = 2(1 + e^{-2K})^N \quad (62-2-21)$$

در حالت کلی انرژی آزاد بر جایگاه در حد ترمودینامیکی $N \rightarrow \infty$ مورد نظر است:

$$f(K) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z \quad (63-2-21)$$

(این تعریف از f به اندازه یک ضریب $-\beta$ از تعریف مرسوم فرق دارد. این کار را برای کاهش شلوغی انجام می‌دهیم). می‌بینیم که

$$f(K) = \ln(1 + e^{-2K}) \quad (64-2-21)$$

که در آن $\ln 2/N$ را در حد ترمودینامیکی حذف کرده‌ایم. اگر می‌خواستیم s_0 را در یکی از دو مقدارش ثابت کنیم ضریب ۲ در معادله (۶۲-۲-۲۱) وجود نمی‌داشت اما هیچ تفاوتی در معادله (۶۴-۲-۲۱) برای انرژی آزاد بر جایگاه ایجاد نمی‌شد. شرایط مرزی در حد ترمودینامیکی در این مفهوم بی‌اهمیت هستند.

تابع همبستگی را در نظر بگیرید (که معیاری است از احتمال اینکه اسپین‌های s_i و s_j موازی باشند):

$$\langle s_j s_i \rangle = \frac{\sum_{s_k} s_j s_i \exp \left[\sum_k K (s_k s_{k+1} - 1) \right]}{Z} \quad (۶۵-۲-۲۱)$$

برای $i > j$. با استفاده از اینکه $s_i^2 \equiv 1$ است می‌توانیم بنویسیم:

$$s_j s_i = s_i s_{i+1} s_{i+1} s_{i+2} \cdots s_{j-1} s_j = t_i t_{i+1} \cdots t_{j-1} \quad (۶۶-۲-۲۱)$$

لذا

$$\langle s_i s_j \rangle = \langle t_i \rangle \langle t_{i+1} \rangle \cdots \langle t_{j-1} \rangle \quad (۶۷-۲-۲۱)$$

که جواب روی i تجزیه می‌شود چون وزن بولتزمن، وقتی بر حسب t_i نوشته شود روی i تجزیه می‌شود. متوسط برای هر یک t راحت است:

$$\langle t \rangle = \frac{1 e^{0 \cdot K} - 1 e^{-2K}}{e^{0 \cdot K} + e^{-2K}} = \tanh K \quad (۶۸-۲-۲۱)$$

به طوری که سرانجام

$$\langle s_j s_i \rangle = (\tanh K)^{j-i} = \exp[(j-i) \ln \tanh K] \quad (۶۹-۲-۲۱)$$

توجه کنید که نتیجه به تفاضل مختصه‌ها بستگی دارد. این یک نتیجه کلی نیست بلکه ویژگی این مدل است. دلیل این است که مسئله $N + 1$ نقطه (برای هر N متناهی) از نظر انتقالی ناوردا نیست. همبستگی‌های بین دو اسپین می‌توانستند به جایی که دو اسپین نسبت به انتهاها قرار دارند بستگی داشته باشند و عموماً اینگونه است. از سوی دیگر در همه مدل‌ها انتظار داریم که وقتی $N \rightarrow \infty$ می‌رود، دور از انتهاها و در عمق درون، ناوردایی انتقالی را ببینیم. برای داشتن ناوردایی انتقالی در یک سیستم متناهی می‌بایست شرایط مرزی دوره‌ای را به کار ببریم: اکنون جهان شکل یک حلقه را دارد و هر نقطه با هر نقطه دیگر معادل است. توابع همبستگی اینک به تفاضل بین دو مختصه بستگی خواهند داشت اما با فاصله به صورت یکنواخت نخواهند کرد! این به این خاطر است که وقتی یک نقطه شروع به دور شدن از نقطه دیگر می‌کند، نهایتاً شروع به میل کردن به نقطه اول از سمت دیگر می‌نماید! لذا تابع همبستگی یک جمع روی دو جمله خواهد بود که یکی از آنها با افزایش $j - i$ به مقادیری از مرتبه N ، بزرگ می‌شود. اما اگر قول دهیم که هرگز فواصل قابل مقایسه با N را در نظر نگیریم این پیچیدگی می‌تواند نادیده گرفته شود [تمرین (۲۱-۲-۹) را ببینید]. (محاسبه همبستگی‌های ما بر حسب t_i ها می‌بایست در مواجهه با شرایط مرزی دوره‌ای اصلاح شود تا اطمینان دهد که جمع روی t_i به پیکربندی‌هایی محدود می‌شود که برای آنها حاصل ضرب t_i ها روی حلقه برابر یک می‌شود).

طول همبستگی ξ با فرمول زیر تعریف می‌شود

$$\lim_{j-i \rightarrow \infty} \langle s_j s_i \rangle \rightarrow e^{-(j-i)/\xi} \quad (۷۰-۲-۲۱)$$

لذا در مسئله ما،

$$\xi^{-1} = -\ln \tanh K \quad (۷۱-۲-۲۱)$$

(ما در تحلیل خود فرض کرده‌ایم $i > z$ است. در حالت کلی در این تعریف‌ها $i - z$ باید با $|z - i|$ جایگزین شود. همین طور مدل مورد بحث رفتار نمایی به ازای همه فواصل نشان می‌دهد نه فقط در حد $|z - i| \rightarrow \infty$. این هم خاص مدل ماست و از این جا ناشی می‌شود که این مدل در یک بعد فضایی است و اسپین ایزینگ فقط می‌تواند دو مقدار اتخاذ کند).

اکنون این نتایج را در نسخه کوانتومی مجدداً به دست خواهیم آورد. اگر Z نماینده یک انتگرال مسیر باشد متغیرهای ایزینگ می‌بایست برچسب‌های حالت میانی باشند که در قرار دادن عملگر همانی برای یک مسئله کوانتومی ظاهر می‌شوند. واضح است که این مسئله کوانتومی، مسئله اسپین $\frac{1}{2}$ است. برای ادامه کار نگاهی دیگر به

$$Z = \sum_{s_i} \prod_i e^{K(s_{i+1} - s_i)} \quad (۷۲-۲-۲۱)$$

می‌اندازیم. هر عامل نمایی به وسیله دو شاخص گسسته برچسب زده می‌شود که می‌توانند هر کدام دو مقدار بگیرند. به علاوه برچسب دوم برای هر عامل، برچسب اول برای بعدی است. سرانجام، روی این برچسب‌ها جمع زده می‌شود. واضح است که در اینجا یک ضرب ماتریسی می‌بینیم. بنابراین می‌نویسیم:

$$Z = \sum_{s_i} T_{s_N s_{N-1}} \cdots T_{s_2 s_1} T_{s_1 s_0} \quad (۷۳-۲-۲۱)$$

که در آن یک ماتریس 2×2 ، T ، وارد کرده‌ایم که سطرها و ستون‌هایش به وسیله یک جفت از اسپین‌ها برچسب زده می‌شوند و عنصر آن $T_{ss'}$ برابر وزن بولتزمن وابسته به یک جفت از اسپین‌های همسایه در حالت s و s' است لذا

$$T_{++} = T_{--} = 1, T_{+-} = T_{-+} = \exp(-2K)$$

بنابراین این ماتریس، موسوم به ماتریس انتقال، با رابطه زیر مشخص می‌شود

$$T = I + e^{-2K} \sigma_1 \quad (۷۴-۲-۲۱)$$

و

$$Z = \langle s_N | T^N | s_0 \rangle \quad (۷۵-۲-۲۱)$$

برای مورد شرایط مرزی ثابت شده (که ما روی آن متمرکز می‌شویم) که در آن اسپین اول در s_0 و آخر در s_N ثابت می‌شود. اگر روی اسپین‌های آخر جمع بزنیم (شرایط مرزی آزاد)

$$Z = \sum_{s_N} \langle s_N | T^N | s_0 \rangle \quad (۷۶-۲-۲۱)$$

اگر شرایط مرزی دوره‌ای را در نظر بگیریم، که در آن $s_0 = s_N$ است، و روی اینها جمع بزنیم

$$Z = \text{Tr } T^N \quad (۷۷-۲-۲۱)$$

اکنون حساس نبودن انرژی آزاد بر جایگاه را به شرایط مرزی در حد ترمودینامیکی نشان خواهیم داد. فرض کنید ما شرایط مرزی ثابت شده را به کار بردیم. آنگاه اگر بنویسیم:

$$T = \lambda_0 |0\rangle \langle 0| + \lambda_1 |1\rangle \langle 1| \quad (۷۸-۲-۲۱)$$

که $|i\rangle$ ها و λ_i ها $[i = 0, 1]$ ویژه بردارها (راست هنجار فرض می‌شوند) و ویژه مقادیر T هستند، داریم

$$T^N = \lambda_0^N |0\rangle \langle 0| + \lambda_1^N |1\rangle \langle 1| \quad (۷۹-۲-۲۱)$$

با فرض اینکه λ_0 ویژه مقدار بزرگتر است،

$$T^N \lim_{N \rightarrow \infty} \simeq \lambda_0^N |0\rangle \langle 0| \left(1 + \mathcal{O} \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0} \right)^N \right) \quad (۸۰-۲-۲۱)$$

و

$$Z \simeq \langle s_N | 0 \rangle \langle 0 | s_0 \rangle \lambda_0^N \left(1 + \mathcal{O} \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0} \right)^N \right) \quad (۸۱-۲-۲۱)$$

و انرژی آزاد بر جایگاه در حد حجم نامتناهی،

$$f = \lambda_0 + \frac{1}{N} \ln(\langle s_N | 0 \rangle \langle 0 | s_0 \rangle) + \dots \quad (۸۲-۲-۲۱)$$

به وضوح مستقل از اسپین‌های مرزی است تا وقتی که $\langle 0 | s_0 \rangle$ و $\langle s_N | 0 \rangle$ صفر نشوند. **تمرین ۲۱-۲-۵:** این ادعا را برای شرایط مرزی دوره‌ای با شروع از معادله (۷۵-۲-۲۱) اثبات کنید. T را به شرح ذیل بازنویسی می‌کنیم. اتحاد زیر را در نظر بگیرید

$$e^{K^* \sigma_1} = \cosh K^* + \sinh K^* \sigma_1 \quad (۸۳-۲-۲۱)$$

$$= \cosh K^* (I + \tanh K^* \sigma_1) \quad (۸۴-۲-۲۱)$$

که K^* راحت به K مربوط نمی‌شود؛ بویژه که مزدوج آن نیست! اگر انتخاب کنیم

$$\tanh K^* = e^{-2K} \quad (۸۵-۲-۲۱)$$

از معادله (۷۲-۲-۲۱) می بینیم که صرف نظر از یک پیش ضریب $\cosh K^*$ ،

$$T = e^{K^* \sigma_1} \quad (۸۶-۲-۲۱)$$

ما این پیش ضریب را موقتاً حذف می کنیم اما به خاطر می سپاریم که $\ln \cosh K^*$ را از انرژی آزاد بر هر جایگاه کم کنیم. اما این ضریب تابع همبستگی را، که دیده خواهد شد که فقط به نسبت های ویژه مقادیر T بستگی دارد، تغییر نخواهد داد. توجه کنید K^* ، که همزاد K نامیده می شود، وقتی K کوچک باشد بزرگ است و بالعکس.

برای استفاده بعدی توجه کنید که در این مورد، ویژه مقادیر T ، $e^{\pm K^*}$ و ویژه بردارهای متناظر،

$$|0\rangle, |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{bmatrix} \quad (۸۷-۲-۲۱)$$

هستند.

فرض کنید بنویسیم

$$T = e^{-H} \quad (۸۸-۲-۲۱)$$

آنگاه T می تواند به عنوان عملگر تحول زمانی برای یک مرحله زمانی در جهت زمان موهومی تعبیر شود. شاخص جایگاه فضایی i مسئله کلاسیکی، شاخص گسسته زمان موهومی برای مسئله کوانتومی شده است. انرژی آزاد فقط به E_0 ، انرژی حالت پایه H ، مربوط می شود:

$$H = -K^* \sigma_1 \quad (۸۹-۲-۲۱)$$

$$f = -E_0 = K^* \quad (۹۰-۲-۲۱)$$

تمرین ۶-۲-۲۱: نشان دهید که f بالا با معادله (۶۴-۲-۲۱) توافق دارد، با به خاطر داشتن اینکه $\ln \cosh K^*$ باید کم شود و استفاده از تعریف K^* .

اکنون تابع همبستگی $\langle s_j s_i \rangle$ را برای $j > i$ در نظر بگیرید. ادعا می کنیم که اگر اسپین های مرزی در s_0 و s_N ثابت شوند،

$$\langle s_j s_i \rangle = \frac{\langle s_N | T^{N-j} \sigma_3 T^{j-i} \sigma_3 T^i | s_0 \rangle}{\langle s_N | T^N | s_0 \rangle} \quad (۹۱-۲-۲۱)$$

برای دیدن صحت این، به صورت کسر نگاه کنید. با وارد کردن یک مجموعه کامل از ویژه حالت های σ_3 بین هر عامل از T ، استنتاج ما را پیگیری کنید. با قرائت از راست به چپ به وزن های بولتزمن می رسیم تا به جایگاه i برسیم. در آنجا وقتی σ_3 روی ویژه حالتش اثر می کند، s_j ، مقدار اسپین در آنجا، را می دهد. سپس طبق معمول به j می رویم و این را تکرار می کنیم تا به جایگاه N ام برسیم (وابستگی $\langle s_j s_i \rangle$ به

شرط مرزی در حد ترمودینامیکی از بین خواهد رفت). اجازه دهید معادله (۲۱-۱-۸۹) را به شیوه دیگری بنویسیم. عملگرهای هایزنبرگ را تعریف می‌کنیم

$$\sigma_3(n) = T^{-n} \sigma_3 T^n \quad (۲۱-۲-۹۲)$$

برحسب این‌ها،

$$\langle s_j s_i \rangle = \frac{\langle s_N | T^N \sigma_3(j) \sigma_3(i) | s_0 \rangle}{\langle s_N | T^N | s_0 \rangle} \quad (۲۱-۲-۹۳)$$

حال حد $\infty \rightarrow N$ و i و j ثابت شده در مقادیر دور از نقاط انتهایی برجسب زده شده با 0 و N را در نظر بگیرید به طوری که $N - j$ و i بزرگ باشند و بتوانیم تقریب زیر را بنویسیم

$$T^a \simeq |0\rangle \langle 0| \lambda_0^a \quad a = N, N-j, i \quad (۲۱-۲-۹۴)$$

در این حد از معادله (۲۱-۲-۹۱) داریم

$$\langle s_j s_i \rangle = \frac{\langle s_N | 0 \rangle \langle 0 | \lambda_0^{N-j} \sigma_3 T^{-j} \sigma_3 \lambda_0^i | 0 \rangle \langle 0 | s_0 \rangle}{\langle s_N | 0 \rangle \lambda_0^N \langle 0 | s_0 \rangle} = \langle 0 | \sigma_3(j) \sigma_3(i) | s_0 \rangle \quad (۲۱-۲-۹۵)$$

و وابستگی به مرز حذف شده است. برای مورد $i > j$ به عملگرها در ترتیبی دیگر خواهیم رسید. در این صورت در حالت کلی،

$$\langle s_j s_i \rangle = \langle 0 | \mathcal{T}(\sigma_3(j) \sigma_3(i)) | 0 \rangle \quad (۲۱-۲-۹۶)$$

که نماد زمان - مرتب‌کننده^۱ \mathcal{T} عملگرها را با افزایش زمان از راست به چپ مرتب خواهد کرد:

$$\mathcal{T}(\sigma_3(j) \sigma_3(i)) = \theta(j-i) (\sigma_3(j) \sigma_3(i)) + \theta(i-j) (\sigma_3(i) \sigma_3(j)) \quad (۲۱-۲-۹۷)$$

محاسبه این تابع همبستگی را با استفاده از ویژه بردارهای T پی خواهیم گرفت. اما ابتدا اجازه دهید در بالا $\sigma_3(j)$ را با عملگر واحد جایگزین کنیم تا مغناطش میانگین را به دست آوریم

$$\langle s_i \rangle = \langle 0 | \sigma_3(0) | 0 \rangle \quad (۲۱-۲-۹۸)$$

در مثال ما $|0\rangle$ ویژه کت σ_1 است به طوری که هیچ مغناطش میانگینی وجود ندارد. تنها استثناء در دمای صفر یا K^* صفر است: در اینجا ویژه مقادیر مساوی‌اند و می‌توانیم ترکیبات خطی متناظر با هر یک از ویژه حالت‌های کاملاً مرتب شده σ_3 (بالا یا پایین) را تشکیل دهیم.

اجازه دهید شکست تقارن و بازیابی آن در مسئله ایزینگ را با آنچه در چاه دوگانه رخ می‌دهد مقایسه

کنیم.

• در حد $\hbar \rightarrow 0$ ، ذره در چاه دو گانه کمینه کنش اقلیدسی را جستجو می کند:

$$S_E = \int \left(\frac{m}{2} (dx/d\tau)^2 + V(x(\tau)) \right) d\tau \quad (۹۹-۲-۲۱)$$

که با $x = \pm a$ و $dx/d\tau = 0$ ، کمینه های پتانسیل چاه دو گانه، مشخص می شود. در حالت پایه شکست تبهگنی و تقارن وجود دارد. یک ذره که در یک چاه شروع می کند در طی زمان هرگز به دیگری نخواهد رفت. اگر چه Π با H جابه جا می شود، ما ویژه حالت های پاریته را تشکیل نمی دهیم بلکه ویژه حالت های مکان (یا دقیق تر، شاخص چاه، چپ یا راست) را تشکیل می دهیم. در مسئله ایزینگ، در حد دمای صفر، تابع پارش به وسیله حالت با انرژی کمینه، با همه اسپین های بالا یا همه اسپین های پایین در همه جایگاه ها (که می توانند به صورت نقاط گسسته در زمان موهومی مسئله اسپین $-\frac{1}{2}$ تلقی شوند)، غالب می شود. به زبان عملگری، T و H با σ_1 در حالت کلی جابه جا می شوند و ویژه حالت های H ، ویژه حالت های σ_1 هم انتخاب می شوند. اما در K^* صفر، دو ویژه حالت تبهگن می شوند و ترکیباتی تشکیل می دهیم که ویژه حالت های σ_3 هم باشند. این به خاطر این است که یک حالت که نسبت به σ_3 بالا/پایین باشد برای همیشه به همان شکل خواهد ماند (در اصطلاح مکانیک آماری کلاسیکی، اگر اسپین در یکی از جایگاه های زنجیر بالا/پایین باشد، همه در دمای صفر بالا/پایین خواهند شد).

• برای \hbar غیر صفر، بین چاه ها تونل زنی وجود دارد، تبهگنی برچیده می شود و تقارن در حالت پایه بازگردانده می شود. این به یک پیکربندی اینستانتون مربوط می شود که دارای کنش متناهی است و دو حالت پایه کلاسیکی را به هم وصل می کند. در مسئله ایزینگ، برای K^* غیر صفر، یعنی دمای غیر صفر، پیکربندی های اینستانتون ماندنی وجود خواهند داشت که در آنها اسپین در یک انتهای زنجیر با اسپین بالا شروع می کند (یعنی گذشته دور به تعبیر زمان موهومی) و در یک نقطه به پایین می چرخد و بالعکس. این، انرژی متناهی دارد (تنها یک جفت از اسپین های نزدیکترین همسایه پادموازی است و انرژی اضافی لازم $2K$ است). ویژه حالت های ماتریس انتقال (یا هامیلتونی اسپینی) اکنون ترکیب های متقارن و پادمقارن از حالت های بالا و پایین هستند یعنی ویژه حالت های σ_1 . حالت پایه منحصر به فرد و متقارن است.

تمرین ۲۱-۲-۷: هامیلتونی مسئله اسپین $-\frac{1}{2}$ را در نظر بگیرید که در بحث ماتریس انتقال زنجیر ایزینگ ظاهر می شود

$$(۱۰۰-۲-۲۱)$$

$$H = -K^* \sigma_1$$

عنصر ماتریسی غیر قطری (بعد از بیرون آمدن علامت)، یعنی K^* ، می بایست دامنه پراکندگی (برای رفتن از حالت پایه بالا به پایین) بر واحد زمان را در حد دما - پایین نشان دهد (که شبه حد $\hbar \rightarrow 0$ است). بحث قبلی بیان می کند که این همان e^{-2K} است که $2K$ انرژی لازم حد فاصل حالت های پایه بالا و پایین است. با رفتن به سراغ تعریف K^* ثابت کنید که این دو نتیجه برای دماهای پایین توافق دارند.

به معادله (۲۱-۲-۹۶) بر می‌گردیم. اگر چه به نظر می‌رسد که هر چیزی به همان حالت پایه بستگی دارد، دانستن همهٔ حالت‌ها حتی در حد حجم نامتناهی برای محاسبه همبستگی لازم است. با رفتن به معادله (۲۱-۲-۹۶) برای $i > j$ ، مجموعه کامل (دو) ویژه بردارهای T را بین ماتریس‌های پائولی قرار می‌دهیم. وقتی $|0\rangle\langle 0|$ را قرار دهیم به $\langle s \rangle^2$ ، مربع مغناطش، می‌رسیم، که اتفاقاً در اینجا صفر می‌شود. با بردن آن به سمت چپ به تابع همبستگی همبند (پیوسته)^۱ می‌رسیم

$$\langle s_j s_i \rangle_c \equiv \langle s_j s_i \rangle - \langle s \rangle^2 = \langle 0 | T^{-j} \sigma_3(0) T^{j-i} | 1 \rangle \langle 1 | \sigma_3(0) T^i | 0 \rangle \quad (۱۰۱-۲-۲۱)$$

$$= \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0} \right)^{j-i} |\langle 0 | \sigma_3 | 1 \rangle|^2 \quad (۱۰۲-۲-۲۱)$$

$$= e^{-2K*(j-i)} |\langle 0 | \sigma_3 | 1 \rangle|^2 \quad (۱۰۳-۲-۲۱)$$

توجه کنید که:

- همبستگی فقط به نسبت ویژه مقادیر T بستگی دارد و با ضریب $2K^*$ به صورت نمایی با فاصله افت می‌کند. حال $2K^*$ همان گاف تا اولین حالت برانگیخته هامیلتونی H ، که با $T = e^{-H}$ تعریف می‌شود، است که در مثال ما $\sigma_1 - K^*$ است. نتیجه

$$\xi^{-1} = E_1 - E_0 \equiv m \quad (۱۰۴-۲-۲۱)$$

هم بسیار کلی است. دلیل استفاده از نماد m برای گاف (موسوم به گاف جرم) این است که در نظریه میدان، حالت با پایین‌ترین انرژی بالای خلاء یک ذره در حال سکون است و این انرژی m دارد (برحسب $c=1$).

- تابع همبستگی همبند به وسیله عنصر ماتریسی عملگر مورد بحث (σ_3) بین حالت پایه و حالت برانگیخته بعدی مشخص می‌شود. این هم یک ویژگی کلی است. اگر این عنصر ماتریسی صفر شود می‌بایست به ترازهای بالاتر برویم تا حالتی پیدا کنیم که با اثر این عملگر به حالت پایه مربوط می‌شود (در این مسئله می‌دانیم که $|\langle 0 | \sigma_3 | 1 \rangle|^2 = 1$)، چون σ_3 عملگر اسپین - چرخان^۲ برای ویژه حالت‌های σ_1 است.

این مثال ساده بسیاری از ویژگی‌های کلی مسئله را روشن کرده است. تنها تفاوت آن است که برای یک ماتریس انتقال بزرگتر، جمع روی حالت‌ها بیش از دو جمله خواهد داشت. لذا تابع همبستگی، جمع توابع نمایی تحلیل رونده (نزولی) خواهد بود و وقتی کوچکترین گاف جرم غالب می‌شود یک طول همبستگی یکتا به صورت مجانبی بیرون خواهد آمد. همین‌طور در مسائل پیچیده‌تر (در ابعاد بالاتر) امکان وجود اینستانتون‌های با کنش متناهی متصل‌کننده کمینه‌های کلاسیکی چندگانه وجود ندارد. و حالت‌های پایه بسیاری از H

1- Connected Correlation Function.

2- Spin - Flip Operator.

می‌توانند با تقارن شکسته شده وجود داشته باشند. با فرض وقوع این، همان‌طور که در مدل دو بعدی ایزینگ (زیر دمای T_c) اتفاق می‌افتد، می‌توانید سوال کنید که: چطور حالت پایه از بین اسپین بالا و پایین انتخاب می‌نماید چون هیچ بایاسی در وزن بولتزمن وجود ندارد تا انتخاب را صورت دهد؟ پاسخ این است که در واقع اگر هیچ بایاسی را در نظر نگیریم، سیستم همیشه مغناطش میانگین صفر را انتخاب می‌کند. در این صورت چگونه می‌دانیم که سیستم مایل است تا مغناطیده شود؟ ما از یک اصل موسوم به خوشه‌ای شدن استفاده می‌کنیم. این اصل بیان می‌کند که وقتی i و j از هم دور می‌شوند، $\langle s_i \rangle \langle s_j \rangle \rightarrow \langle s_i s_j \rangle$ می‌شود. مفهوم مطلب این است که اگر i در کهکشان ما و j در کهکشانی دیگر قرار گیرد، آنها از نظر آماری مستقل می‌شوند. اکنون مدل دو بعدی ایزینگ را زیر T_c در نظر بگیرید. در میدان صفر خواهیم دید که $\langle s_i s_j \rangle$ به $\langle s_i \rangle \langle s_j \rangle$ (که صفر است چون هیچ حقی به سیستم ندادیم تا یک مقدار از مغناطش را در خلاف جهت خودش انتخاب کند) میل نمی‌کند بلکه اینکه $\langle s_i s_j \rangle$ به مربع مغناطشی میل می‌کند که سیستم خواهد داشت در صورتی که شما کمترین حقی به سیستم برای انتخاب یکی از علامت‌ها بدهید. در این نقطه که شکست خوشه‌ای شدن را برای متغیر اسپین دیده‌اید، باید تابع پارش را برای بازگرداندن خوشه‌ای شدن به دو شیوه معادل تصحیح کنید. یکی محدود کردن جمع روی حالت‌ها به آنهایی است که دارای مغناطش مثبت (منفی) خالص، هستند. در این صورت $\langle s \rangle \neq 0$ می‌شود و دیگر هیچ، و خواهید دید که $\langle s \rangle^2 \rightarrow \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle$. گزینه دیگر، اعمال یک میدان کوچک و محاسبه مغناطش و میل دادن میدان به صفر است (این هم اساساً نیمی از حالت‌ها را در جمع از بین می‌برد. هر دو دستورالعمل این حقیقت را منعکس می‌کنند که یک آهنربا پایین T_c خود قادر نخواهد بود تا به‌طور دینامیکی از سمت گیری به بالا به سمت گیری پایین تحول یابد. ذره‌ای را به یاد بیاورید که در یک طرف سد نامتناهی بین دو چاه گیر افتاده است. لذا جمع زدن روی چیزهایی که سیستم نمی‌تواند انجام دهد یک اشتباه است) حال، مغناطش، مشتق انرژی آزاد نسبت به میدان اعمال شده h است. به راحتی می‌توان نشان داد که مغناطش تابعی زوج از h است [تمرین ۲۱-۲-۸]. اگر سیستم نخواهد مغناطیده شود، خواهیم دید که $f \sim h^2$ می‌شود به طوری که وقتی $h \rightarrow 0$ میل می‌کند $df/dh \rightarrow 0$ از سوی دیگر اگر سیستم بخواهد مغناطیده شود خواهیم دید که $f \sim |h|$ و $df/dh \sim \text{sign } h$.

تمرین ۲۱-۲-۸: مدل ایزینگ را در یک میدان مغناطیسی در نظر بگیرید، با اضافه کردن جمله $h \sum s_i$ به نما در معادله (۲۱-۲-۵۹). نشان دهید که $Z(h) = Z(-h)$ است. نشان دهید که ماتریس انتقال $T = e^{K^* \sigma_1} e^{h \sigma_3} \equiv T_K T_h$ وزن بولتزمن را مجدداً به دست می‌دهد. توجه کنید که T هرمیتی نیست. با شکافتن جفت شدگی به h به دو عامل، نشان دهید که $T_h^{\frac{1}{2}} T_K T_h^{\frac{1}{2}}$ هم به همان خوبی بوده و هرمیتی هم هست. ویژه مقادیر و ویژه بردارهای آنرا به دست آورده، نشان دهید که فقط برای $h = K^* = 0$ تبهگنی وجود دارد. با محاسبه $\langle s \rangle = \langle 0 | \sigma_3 | 0 \rangle$ مغناطش را به صورت تابعی از h به دست آورید. با شروع از تابع پارش نشان دهید که

$$\langle s \rangle = \frac{1}{N} \frac{\partial \ln Z}{\partial h} = \frac{\partial f}{\partial h}$$

f را از بزرگترین ویژه مقدار T محاسبه کرده و پاسخ را برای $\langle s \rangle$ به دست آمده از $\langle s | \sigma_3 | 0 \rangle = \langle s \rangle$ مجدداً به دست آورید.

تمرین ۲۱-۲-۹: تابع همبستگی را برای مسئله دارای شرایط مرزی دوره‌ای در نظر گرفته و آنرا به صورت دو رد (تریس) بنویسید. مخرج را با بزرگترین ویژه کت اشباع کنید اما هر دو ویژه بردار را در صورت نگه دارید و نشان دهید که جواب تحت $(j-i) - N \leftrightarrow -i$ j ناورداست. استفاده از اینکه σ_3 ، $|0\rangle$ و $|1\rangle$ را تعویض می‌کند باید کار را تسریع کند. تفسیر کنید. استدلال کنید که تا وقتی $i-j$ بسیار کوچکتر از N باشد فقط یک جمله لازم است.

تمرین ۲۱-۲-۱۰: به خاطر بیاورید که تابع همبستگی $\langle s_j s_i \rangle$ در مدل ایزینگ در زنجیر باز متناهی با یک انتهای ثابت شده در s_0 ناوردای انتقالی بود. این نتیجه را با استفاده از فرمالیسم ماتریس انتقال به شرح زیر به دست آورید:

با محاسبه $T^{-j} \sigma_3 T^j$ بر حسب σ_1 و $\sigma_3(j)$ ، $\sigma_3(j)$ را صریحاً حساب کنید. با استفاده از اتحادهای مربوط به توابع هیربولیک نشان دهید که $\sigma_3(j) \sigma_3(i)$ تابعی از فقط $i-j$ است. ادامه دهید تا به تابع همبستگی برسید. می‌توانید از $(I + \sigma_1) |s_0\rangle = \sum_{s_N} |s_N\rangle$ کمک بگیرید.

۲۱-۳- انتگرال‌های مسیر اسپینی و فرمیونی

در اینجا به انتگرال‌های مسیر برای دو سیستم بدون حد کلاسیکی می‌پردازیم: یک سیستم با اسپین S و نوسانگر فرمیونی که بعداً توصیف می‌شود. مسئله فرمیون در این مرحله کمی انتزاعی خواهد بود اما در اینجا ارائه می‌شود چون احتمالاً شما آنرا در بسیاری از شاخه‌های مختلف فیزیک خواهید دید.

حالت‌های هم‌دوس اسپینی و انتگرال مسیر

درجه آزادی اسپینی S را در نظر بگیرید. فضای هیلبرت $2S + 1$ بعدی است. با انتخاب ویژه حالت‌های S_z ، به عنوان پایه خودمان می‌توانیم انتشارگر $U(t)$ را با استفاده از رابطه زیر به صورت یک جمع روی پیکربندی‌ها بنویسیم.

$$I = \sum_{-S}^S |S_z\rangle \langle S_z| \quad (1-3-21)$$

حالت‌های میانی، برچسب‌های گسسته خواهند داشت (مثل مدل ایزینگ). در اینجا روش دیگری در نظر می‌گیریم که در آن پایه فرا کامل به کار می‌رود. حالت هم‌دوس اسپینی زیر را در نظر بگیرید

$$|\Omega\rangle \equiv |\theta, \phi\rangle = U(R(\Omega)) |SS\rangle \quad (2-3-21)$$

که $|\Omega\rangle$ حالت به دست آمده از طریق چرخاندن حالت کاملاً قطبیده بهنجار شده $|SS\rangle$ به اندازه θ حول محور x و سپس به اندازه ϕ حول محور z با استفاده از عملگر چرخش یکانی $U(R(\Omega))$ است.

با داشتن

$$\langle SS|S|SS\rangle = kS \quad (3-21)$$

واضح است که (مثلاً با در نظر گرفتن U^+SU)

$$\langle \Omega|S|\Omega\rangle = S(i \sin \theta \cos \phi + j \sin \theta \sin \phi + k \cos \theta) \quad (4-3-21)$$

توجه کنید که عملگرهای اسپینی ما با یک \hbar تعریف نمی‌شوند. لذا برای اسپین - 1، ویژه مقادیر S_z عبارتند از $0, \pm 1$.

تمرین 21-3-1: نتیجه بالا را با توسل به معادله (12-4-13) نشان دهید.

حالت هم‌دوس حالتی است که در آن عملگر اسپینی دارای مقدار چشم‌داشتی خوب است: برابر با یک اسپین به طول S رو به جهت Ω . این حالت یک ویژه بردار عملگر اسپینی نیست (اصلاً انتظار نمی‌رود چون سه مؤلفه اسپین با هم جابه‌جا نمی‌شوند) و توان‌های بالاتر عملگرهای اسپینی مقادیر چشم‌داشتی برابر با توان‌های متناظر اسپین کلاسیکی را ندارند. برای مثال، $\langle \Omega|S_x^2|\Omega\rangle \neq S^2 \sin^2 \theta \cos^2 \phi$ است. اما تفاوت بین این جواب غلط و جواب درست از مرتبه S است. در کل توان n ام عملگر اسپینی یک مقدار چشم‌داشتی برابر با توان n ام مقدار چشم‌داشتی آن عملگر به‌علاوه تصحیحاتی است که از مرتبه S^{n-1} هستند. اگر S بزرگ باشد، این تصحیحات می‌توانند نادیده گرفته شوند. وقتی معمولاً از این فرمالیزم استفاده می‌کنیم اینگونه است. معادله زیر را بررسی می‌کنیم

$$\langle \Omega_2|\Omega_1\rangle = \left(\cos \frac{\theta_2}{2} \cos \frac{\theta_1}{2} + e^{i(\phi_1 - \phi_2)} \sin \frac{\theta_2}{2} \sin \frac{\theta_1}{2} \right)^{2S} \quad (5-3-21)$$

نتیجه برای $S = \frac{1}{2}$ درست است و مشخص می‌کند که اسپینور بالا در امتداد جهت $\theta\phi$ عبارتست از

$$|\Omega\rangle \equiv |\theta\phi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |1/2, 1/2\rangle + e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} |1/2, -1/2\rangle \quad (6-3-21)$$

برای اسپین بالاتر، $2S$ ذره اسپین - $\frac{1}{2}$ را تصور کنید که به هم متصل می‌شوند تا یک حالت اسپینی S تشکیل دهند. فقط یک حالت حاصل ضرب مستقیم با $S_z = S$ وجود دارد: که در آن همه اسپین - $\frac{1}{2}$ ها رو به بالا قرار می‌گیرند. لذا حالت کاملاً قطبیده به‌نجار شده عبارت می‌شود از

$$|SS\rangle = |1/2, 1/2\rangle \otimes |1/2, 1/2\rangle \otimes \dots \otimes |1/2, 1/2\rangle \quad (7-3-21)$$

اگر این حالت را بچرخانیم، یک ضرب تانسوری حالت‌های چرخیده می‌شود و وقتی ضرب داخلی سمت چپ معادله (21-3-5) را تشکیل دهیم سمت راست را به‌دست می‌آوریم.

عملگر همانی بر حسب این حالت‌ها عبارت می‌شود از

$$I = \frac{2S+1}{4\pi} \int d\Omega |\Omega\rangle \langle \Omega| \quad (۸-۳-۲۱)$$

که $d\Omega = d \cos \theta d\phi$. اثبات را می‌توان در مراجع یافت. از شما می‌خواهیم تا تمرین زیر را که به $S = \frac{1}{2}$ مربوط می‌شود حل کنید.

تمرین ۲۱-۳-۲: رابطه کامل بودن را برای $S = \frac{1}{2}$ با انجام انتگرال روی Ω و با استفاده از معادله (۲۱-۳-۳) ثابت کنید.

وقتی با انتگرال‌های مسیر کار می‌کنیم ضرب عامل‌ها را به شکل زیر خواهیم دید:

$$\dots \langle \Omega(t+\varepsilon) | I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} H(S) | \Omega(t) \rangle \dots \quad (۹-۳-۲۱)$$

ما تا مرتبه ε کار می‌کنیم. از آنجا که H یک ضرب ε در مقابل خود دارد، قرار می‌دهیم:

$$\langle \Omega(t+\varepsilon) | -\frac{i\varepsilon}{\hbar} H(S) | \Omega(t) \rangle \simeq -\frac{i\varepsilon}{\hbar} \langle \Omega(t) | H(S) | \Omega(t) \rangle \equiv -i\varepsilon \mathcal{H}(\Omega) \quad (۱۰-۳-۲۱)$$

اگر هامیلتونی نسبت به S خطی باشد فقط عملگر اسپینی کوانتومی را با بردار کلاسیکی واقع در جهت θ و ϕ جایگزین می‌کنیم، اگر نه، می‌توانیم این عملگر را با مقدار چشم‌داشتی مناسب در حالت $|\Omega(t)\rangle$ جایگزین نماییم. این همان چیز است که در معادله قبلی $\mathcal{H}(\Omega)$ نامیدیم. به ضرب زیر برمی‌گردیم

$$\langle \Omega(t+\varepsilon) | \Omega(t) \rangle \simeq 1 - i\varepsilon S(1 - \cos \theta) \dot{\phi} \simeq e^{iS(\cos \theta - 1)\dot{\phi}\varepsilon} \quad (۱۱-۳-۲۱)$$

که معادله (۲۱-۳-۵) را تا مرتبه اول از $\Delta\theta$ و $\Delta\phi$ بسط داده‌ایم. این، نمایش زیر از انتشارگر را در حد پیوسته به ما می‌دهد:

$$\langle \Omega_f | U(t) | \Omega_i \rangle = \int \mathcal{D}\Omega \exp \left[i \int_{t_i}^{t_f} [S \cos \theta \dot{\phi} - \mathcal{H}(\Omega)] dt \right] \quad (۱۲-۳-۲۱)$$

که در آن مشتق کل نسبت به ϕ حذف شده است و $\int \mathcal{D}\Omega$ پیمانه‌ای با همه ضرایب π در خود است. حتی طبق استانداردهای انتگرال‌های تابعی پیوسته، ما به موضوع جدیدی رسیده‌ایم؛ ما تفاضلات را با مشتقات جایگزین کرده‌ایم گویی که مسیرها هموار (یکنواخت) هستند. در انتگرال مسیر پیکربندی، دیدیم که بین یک لحظه و لحظه بعدی، افت و خیز در x از مرتبه $\varepsilon^{\frac{1}{2}}$ بود که دلیل بر این بود که چرا ما مجبور بودیم $\langle n(R') | n(R) \rangle$ را تا مرتبه $(R' - R)^2$ در محاسبه برهمکنش مؤثر بری بسط دهیم. عاملی که هر نوع میرایی را با تغییر مختصه ایجاد می‌کرد جمله انرژی جنبشی $\exp[im(x' - x)^2 / 2\hbar\varepsilon]$ بود. در مسئله کنونی چنین جمله‌ای وجود ندارد. هیچ دلیلی ندارد که چرا تفاوت در Ω از یک لحظه به لحظه دیگر باید به صورت یک کمیت کوچک بحث شود. لذا اگر چه انتگرال تابعی گسسته شده هرگز غلط نیست (چون تمام

چیزی که استفاده می‌کنیم وارد کردن عملگر همانی است) هر فرض دیگری در مورد کوچک بودن تغییر Ω از یک لحظه به لحظه بعدی مشکوک است. یک استثناء وجود دارد. فرض کنید $\infty \rightarrow S$ میل کند. در این صورت از (۲۱-۳-۵) می‌بینیم که همپوشانی یک است در صورتی که دو حالت مساوی باشند و به تندی افت می‌کند در صورتی که متفاوت باشند (راحت تر است که مورد $\phi_2 = \phi_1$ را در نظر بگیرید). معمولاً در همین حد ($S \rightarrow \infty$) است که این فرمالیزم را به کار می‌برند.

اکنون دو کاربرد ساده را در نظر می‌گیریم. ابتدا فرض کنید

$$H = \hbar S_2 \quad (21-3-13)$$

می‌دانیم که ویژه مقادیر مجاز عبارتند از $\hbar(-S, -S+1, \dots, S)$. این را از انتگرال مسیر پیوسته به دست می‌آوریم.

با داشتن $\langle \Omega | H | \Omega \rangle = \hbar S \cos \theta$ نتیجه می‌شود که $\mathcal{H} = S \cos \theta$ است و انتگرال تابعی به صورت زیر است

$$\left[\int \mathcal{D} \cos \theta \mathcal{D} \phi \right] \exp \left[iS \int (\cos \theta \dot{\phi} - \cos \theta) dt \right] \quad (21-3-14)$$

توجه کنید که

- این یک انتگرال مسیر فضای فاز با $\cos \theta$ به عنوان تکانه مزدوج با ϕ است!
 - فضای فاز در اینجا فشرده است (کره واحد)، در مقایسه با مسئله ذره در حال حرکت روی کره‌ای که برای آن فضای پیکربندی فشرده است اما همه تکانه‌ها مجازند و گستره فضای فاز نامتناهی است.
 - اسپین S نقش $1/\hbar$ را بازی می‌کند.
 - هامیلتونی برای این دینامیک $\cos \theta$ است چون S را بیرون کشیدیم. بویژه این یعنی $\cos \theta$ یک ثابت حرکت است یعنی مدارها در امتداد عرض جغرافیایی ثابت خواهند بود.
- قاعده کوانتس WKB را برای مسئله‌ای بدون نقاط بازگشت به خاطر بیاورید،

$$\oint p dq = 2\pi n \hbar \quad (21-3-15)$$

در مسئله ما، $p = \cos \theta$ همان انرژی پایسته E است. از تمام مدارهای کلاسیکی در امتداد خطوط عرض جغرافیایی ثابت، آنها که به وسیله WKB انتخاب می‌شوند تابع رابطه زیرند

$$\oint E d\phi = 2\pi n S^{-1} \quad (21-3-16)$$

چون S^{-1} نقش \hbar را بازی می‌کند. انرژی‌های مجاز عبارتند از

$$E_n = \frac{n}{S} \quad [-S \leq n \leq S] \quad (21-3-17)$$

توجه کنید که دقیقاً محیط کافی در این فضای فاز فشرده برای $2S + 1$ مدار وجود دارد و وقتی عامل $\hbar S$ را در طی راه بیرون کشیده شده بود دوباره بگماریم مقادیر مجاز E به معنی مقادیر مجاز H می‌شوند. بنابراین با این مسئله به موفقیت رسیدیم. در حالت کلی اگر H پیچیده‌تر باشد نمی‌توانیم امیدى به موفقیت زیاد داشته باشیم مگر اینکه S بزرگ باشد. اکنون ممکن است سؤال شود که چرا خودمان را با این فرمالیزم درگیر می‌کنیم با اینکه می‌دانیم اسپین‌های سیستم‌های حقیقی بسیار کوچک هستند. در اینجا حداقل یک دلیل وجود دارد بر پایه مسئله‌ای که من با آن آشنا هستم. در فیزیک هسته‌ای یک فرمالیزم شبه اسپین معرفی می‌شود که در آن پروتون، اسپین بالا و نوترون، اسپین پایین نامیده می‌شود. یک هسته بزرگ می‌تواند شبه اسپین بزرگی، مثلاً ۲۵، داشته باشد. هامیلتونی مسئله می‌تواند برحسب عملگرهای شبه اسپینی نوشته شود و آنها می‌توانند ماتریس‌های 50×50 باشند. امیدى به پیدا کردن ترازهای انرژی به صورت تحلیلی نیست. اما می‌توانیم با انجام یک کوانتش WKB با استفاده از H مناسب به S بزرگ برگردیم.

حالت‌های همدوس هم در مطالعه اسپین‌های کوانتومی برهمکنش کننده بسیار مفیدند. برای مثال در مدل یک بعدی هایزنبرگ، هامیلتونی یک جمع روی ضرب‌های نقطه‌ای عملگرهای اسپینی نزدیکترین همسایه‌ها روی خطی از نقاط است. چون هر عملگر اسپینی به صورت خطی ظاهر می‌شود، هامیلتونی در کنش همان هامیلتونی کوانتومی با S جایگزین شده با یک بردار کلاسیکی به طول S است. اگر چه در این مسائل اسپین هرگز خیلی بزرگ نیست، حد S بزرگ را مطالعه می‌کنند تا احساسی از موضوع به دست آورده و تقریب‌های کنترل شده‌ای از $1/S$ انجام دهند.

نوسانگر فرمیونی و حالت‌های همدوس

یادآوری می‌کنیم که در مورد نوسانگر هماهنگ، اینکه ترازهای انرژی به شکلی یکنواخت هم فاصله بودند:

$$(21-3-18)$$

$$E = n\hbar\omega$$

(با حذف حرکت نقطه صفر) اجازه داد تا مفهوم کوانتوم‌ها را معرفی کنیم. به جای اینکه بگوییم نوسانگر هماهنگ در حالت n ام است می‌توانیم بگوییم یک ترازى کوانتومی با انرژی $\hbar\omega$ وجود دارد و در آن n کوانتوم وجود دارد. فونون‌ها، فوتون‌ها و غیره هم همین گونه تلقی می‌شوند و یک مفهوم بسیار اصلی است. اینکه این تراز می‌توانست به وسیله هر تعداد از کوانتوم‌ها اشغال شود بدین معنی بود که آنها بوزون هستند. در واقع درک و احساس ما از میدان الکتریکی و مغناطیسی کلاسیکی به این ویژگی مربوط می‌شود. اکنون یک مسئله از نوع دیگر را در نظر می‌گیریم که در آن کوانتوم‌ها فرمیون هستند لذا این تراز می‌تواند بدون کوانتوم بوده یا یک کوانتوم داشته باشد. هیچ میدان ماکروسکوپی وابسته به این حالت نمی‌تواند وجود داشته باشد که علت این است که مسئله فرمیونی در آغاز برای ما ناآشناست. در اینجا نظریه نوسانگر فرمیونی را ارائه می‌کنیم.

با نوشتن هامیلتونی شروع می‌کنیم:

$$(21-3-19)$$

$$H_0 = \Psi^\dagger \Psi \Omega_0$$

آنچه این مسئله را از مسئله بوزونی متمایز می کند روابط پادجابیه جایی هستند:

$$\{\Psi^\dagger, \Psi\} = \Psi^\dagger\Psi + \Psi\Psi^\dagger = 1 \quad (20-3-21)$$

$$\{\Psi, \Psi\} = \{\Psi^\dagger, \Psi^\dagger\} = 0 \quad (21-3-21)$$

توجه کنید که معادله آخر بیان می کند که

$$\Psi^{\dagger 2} = \Psi^2 = 0 \quad (22-3-21)$$

این معادله همیشه بدون هشدار صریح به کار خواهد رفت. خواهیم دید که این معادله اصل پائولی را، که اشغال دو گانه را ممنوع می کند، نشان می دهد. عملگر تعداد

$$N = \Psi^\dagger\Psi \quad (23-3-21)$$

از رابطه زیر پیروی می کند

$$N^2 = \Psi^\dagger\Psi\Psi^\dagger\Psi = \Psi^\dagger(1 - \Psi^\dagger\Psi)\Psi = N \quad (24-3-21)$$

لذا ویژه مقادیر N می توانند فقط ۰ یا ۱ باشند. ویژه حالت های بهنجار شده متناظر از روابط زیر تبعیت می کنند

$$N|0\rangle = 0|0\rangle \quad (25-3-21)$$

$$N|1\rangle = 1|1\rangle \quad (26-3-21)$$

اینک ثابت خواهیم کرد که

$$\Psi^\dagger|0\rangle = |1\rangle \quad (27-3-21)$$

$$\Psi|1\rangle = |0\rangle \quad (28-3-21)$$

برای اولی،

$$N\Psi^\dagger|0\rangle = \Psi^\dagger\Psi\Psi^\dagger|0\rangle = \Psi^\dagger(1 - \Psi^\dagger\Psi)|0\rangle = \Psi^\dagger|0\rangle \quad (29-3-21)$$

که نشان می دهد که $\Psi^\dagger|0\rangle$ دارای $N = 1$ است. نرم آن یک است:

$$|\Psi^\dagger|0\rangle|^2 = \langle 0|\Psi\Psi^\dagger|0\rangle = \langle 0|(1 - \Psi^\dagger\Psi)|0\rangle = \langle 0|0\rangle = 1 \quad (30-3-21)$$

به طور مشابه می توان نشان داد که $\Psi|1\rangle = |0\rangle$ است، بعد از اینکه ابتدا ثابت کنیم که $\Psi|1\rangle$ بردار صفر نیست و اینکه دارای نرم یک است.

بردار دیگری در فضای هیلبرت وجود ندارد: هر تلاشی برای تولید حالت‌های بیشتر به وسیله $\Psi^2 = \Psi^{\dagger 2} = 0$ باطل می‌شود. به بیانی دیگر، اصل پائولی بردارهای بیشتر را رد می‌کند: حالت یا خالی است یا با یک ذره اشغال می‌شود. لذا هامیلتونی نوسانگر فرمی،

$$H_0 = \Omega_0 \Psi^\dagger \Psi \quad (21-3-31)$$

دارای ویژه مقادیر صفر و Ω_0 است. ما با H_0 کار نخواهیم کرد بلکه با

$$H = H_0 - \mu N \quad (21-3-32)$$

کار خواهیم کرد که μ پتانسیل شیمیایی نامیده می‌شود. برای نوسانگر، چون

$$H = (\Omega_0 - \mu) \Psi^\dagger \Psi \quad (21-3-33)$$

است، این صرفاً به اندازه‌گیری همه انرژی‌ها نسبت به پتانسیل شیمیایی می‌انجامد. نقش پتانسیل شیمیایی بزودی مشخص خواهد شد.

به ترمودینامیک برمی‌گردیم. موجود اصلی در اینجا تابع پارش بزرگ (کل) است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta(H_0 - \mu N)} = e^{A(\mu, \beta)} \quad (21-3-34)$$

که رد روی هر مجموعه کامل از ویژه حالت‌هاست و β عکس دماست، $1/KT$ ، A انرژی آزاد است (که از انرژی آزاد مرسوم به اندازه ضریب β - متفاوت است). عبارت تابع پارش بزرگ نشان می‌دهد که ما روی حالت‌های تعداد متفاوتی از ذرات یا کوانتوم‌ها جمع می‌زنیم. به این دلیل انرژی آزاد با A نشان داده می‌شود و نه f . درست همان‌طور که β مقدار انرژی که سیستم از منبع می‌گیرد را کنترل می‌کند، μ تعداد ذرات را کنترل می‌کند (این توصیف برای نوسانگر بوزونی هم ممکن است. در عوض به جای گفتن اینکه فقط یک نوسانگر داریم که می‌تواند در هر حالت برچسب زده شده با n باشد و تلقی جمع روی حالت‌های به صورت تابع پارش یک نوسانگر، می‌توانیم روی کوانتوم‌ها متمرکز شده و بگوییم که روی حالت‌ها با تعداد متغیر از کوانتوم‌ها جمع می‌زنیم و جمع معمول روی حالت‌ها را به صورت یک تابع پارش بزرگ تعبیر کنیم). اگر از پایه N استفاده کنیم این جمع بدیهی می‌شود:

$$Z = 1 + e^{-\beta(\Omega_0 - \mu)} \quad (21-3-35)$$

همه کمیت‌های ترمودینامیکی می‌توانند از این تابع نتیجه شوند. برای مثال از معادله (۳۶-۳-۲۱) واضح است که عدد اشغال میانگین برابر است با

$$\langle N \rangle = \frac{1}{\beta Z} \frac{\partial Z}{\partial \mu} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial \mu} = \frac{1}{e^{\beta(\Omega_0 - \mu)} + 1} \quad (36-3-21)$$

تمرین ۳-۳-۲۱: فرمول را برای $\langle N \rangle$ در حالت کلی ثابت کنید. از معادله (۳۶-۳-۲۱) شروع کنید. (رد را در پایه مشترک H و N به صورت یک جمع روی ترازهای انرژی در هر N و سپس یک جمع روی N بنویسید).

در دمای صفر از معادله (۳۶-۳-۲۱) داریم:

$$\langle N \rangle = \theta(\mu - \Omega_0) \quad (37-3-21)$$

یعنی فرمیون وجود دارد در صورتی که انرژی آن زیر پتانسیل شیمیایی باشد و وجود ندارد اگر که اینگونه نباشد. در دماهای متناهی، تعداد میانگین با μ به شکلی هموارتر تغییر می‌کند.

اکنون یک فرمول انتگرال مسیر برای تابع پارش ارائه می‌کنیم.

در قیاس با نوسانگر بوزونی با تلاش برای یافتن یک حالت همدوس فرمیونی $|\psi\rangle$ پیش می‌رویم که یک ویژه حالت عملگر نابودی است

$$\Psi|\psi\rangle = \psi|\psi\rangle \quad (38-3-21)$$

ویژه مقدار Ψ یک موجود ویژه است چون اگر یک بار دیگر Ψ را اثر دهیم داریم

$$\psi^2 = 0 \quad (39-3-21)$$

چون $\Psi^2 = 0$ است. هر متغیر معمولی که مربع آن صفر باشد خودش صفر است اما این Ψ متغیر معمولی نیست بلکه یک متغیر گرسمن^۱ است. این متغیرها با یکدیگر و با همه عملگرهای خلق و نابودی فرمیونی پادجابه‌جا می‌شوند (بنابراین آنها با یک رشته شامل تعدادی زوج از این عملگرها جابه‌جا می‌شوند). این چگونگی تعریف آنهاست. متغیر Ψ نسبتاً انتزاعی است و به وسیله ماهیت پاد جابه‌جاشوندگی اش تعریف می‌شود. هیچ متغیر گرسمن بزرگ یا کوچکی وجود ندارد. درست مثل اعداد مختلط به آنها عادت خواهید کرد و حتی یاد می‌گیرید که آنها را دوست داشته باشید (مطمئناً وقتی اولین بار آنها شنیدید به راحتی این مفهوم را نپذیرفتید که $4i$ یک جواب مشروع به این سؤال است که «چه عددی ضربدر خودش عدد -16 می‌دهد؟» احتمالاً شما احساس کردید که ممکن است این جواب درست باشد اما مطمئناً این یک عدد نیست). اکنون حالت همدوس را می‌نویسیم:

$$|\psi\rangle = |0\rangle - \psi|1\rangle \quad (40-3-21)$$

که Ψ یک عدد گرمسمن است. این حالت از روابط زیر پیروی می‌کند:

$$\Psi|\psi\rangle = \Psi|0\rangle - \Psi\psi|1\rangle \quad (۴۱-۳-۲۱)$$

$$= 0 + \psi\Psi|1\rangle \quad (۴۲-۳-۲۱)$$

$$= \psi|0\rangle \quad (۴۳-۳-۲۱)$$

$$= \psi(|0\rangle - \psi|1\rangle) \quad (۴۴-۳-۲۱)$$

$$= \psi|\psi\rangle \quad (۴۵-۳-۲۱)$$

که از این حقیقت کمک گرفته‌ایم که ψ با Ψ پادجابه‌جایی می‌شود و $\psi^2 = 0$ است. اگر Ψ را به دو طرف معادله (۴۵-۳-۲۱) اثر دهیم، سمت چپ به‌خاطر $\Psi^2 = 0$ صفر می‌شود و سمت راست به‌خاطر $\psi^2 = 0$ به شکلی مشابه می‌شود ثابت کرد که

$$\langle \bar{\psi} | \Psi^\dagger = \langle \bar{\psi} | \bar{\psi} \quad (۴۶-۳-۲۱)$$

که در آن

$$\langle \bar{\psi} | = \langle 0 | - \langle 1 | \bar{\psi} = \langle 0 | + \bar{\psi} \langle 1 | \quad (۴۷-۳-۲۱)$$

به دو نکته توجه کنید. اول، بردارهای حالت همدوس، بردارهای معمولی از فضای برداری مختلط نیستند چون آنها ترکیب‌های خطی با ضرایب گرمسمن هستند. دوم، $\bar{\psi}$ به هیچ عنوان مزدوج مختلط ψ نبوده و $\langle \bar{\psi} |$ الحاقی $|\psi\rangle$ نیست. بنابراین باید آماده باشید تا یک تغییر از متغیرهای گرمسمن را ببینید که در آن $\bar{\psi}$ و ψ متحمل تبدیلات کلاً غیر وابسته می‌شوند. ضرب داخلی دو حالت همدوس به‌صورت زیر است

$$\langle \bar{\psi} | \psi \rangle = (\langle 0 | - \langle 1 | \bar{\psi})(|0\rangle - \psi|1\rangle) \quad (۴۸-۳-۲۱)$$

$$= \langle 0|0\rangle + \langle 1 | \bar{\psi} \psi |1\rangle \quad (۴۹-۳-۲۱)$$

$$= 1 + \bar{\psi} \psi \quad (۵۰-۳-۲۱)$$

$$= e^{\bar{\psi} \psi} \quad (۵۱-۳-۲۱)$$

هر تابع از یک متغیر گرمسمن می‌تواند به‌صورت زیر بسط داده شود:

$$F(\psi) = F_0 + F_1 \psi \quad (۵۲-۳-۲۱)$$

توان‌های بالاتری امکان‌پذیر نیستند.

اکنون انتگرال‌ها را روی اعداد گرمسمن تعریف خواهیم کرد (دستانان را بالا نبرید: با یک چشم به هم زدند از این قسمت رد می‌شویم). اینها هیچ اهمیت هندسی (به صورت مساحت یا حجم) ندارند و به صورت صوری تعریف می‌شوند. فقط مجبوریم بدانیم از ۱ و ψ چگونه انتگرال بگیریم چون همه توابع ممکن را تأمین می‌کنند. در اینجا لیست انتگرال‌ها ارائه می‌شود:

$$\int \psi d\psi = 1 \quad (53-3-21)$$

$$\int 1 d\psi = 0 \quad (54-3-21)$$

همین! همان‌طور که می‌بینید، جدول انتگرال‌های گرمسمن کم تعداد است (برای آنهایی که در به خاطر سپردن همه این انتگرال‌ها مشکل دارند یک نکته مفید وجود دارد: انتگرال هر تابع مثل مشتق است! این را ثابت کنید). هیچ حدودی روی این انتگرال‌ها وجود ندارد. انتگرال‌گیری یک عمل خطی فرض می‌شود. دیفرانسیل $d\psi$ هم یک عدد گرمسمن است. لذا $\int d\psi \psi = -1$. انتگرال‌ها برای $\bar{\psi}$ یا هر متغیر گرمسمن دیگر به همین صورت هستند. به این انتگرال‌ها فقط این مقادیر اختصاص می‌یابد. آنها بسیار مهم‌اند چون برای اولین بار اعداد معمولی را در سمت راست می‌بینیم. هر چیز عددی که در این نظریه محاسبه کنیم به این انتگرال‌ها برمی‌گردد. نتیجه‌ای که اغلب به کار می‌بریم این است:

$$\int \bar{\psi} \psi d\psi d\bar{\psi} = 1 \quad (55-3-21)$$

توجه کنید که اگر دیفرانسیل‌ها یا متغیرها با ترتیب دیگری قرار گیرند یک تغییر علامت ایجاد می‌کنند. برای مثال از این نتیجه هم بهره خواهیم گرفت:

$$\int \bar{\psi} \psi d\bar{\psi} d\psi = -1 \quad (56-3-21)$$

در اینجا برخی انتگرال‌های گوسی را در نظر می‌گیریم. از شما می‌خواهیم که نشان دهید که

$$\int e^{-a\bar{\psi}\psi} d\bar{\psi} d\psi = a \quad (57-3-21)$$

$$\int e^{-\bar{\psi}M\psi} [d\bar{\psi} d\psi] = \det M \quad (58-3-21)$$

که در فرمول دوم M یک ماتریس $2-2$ ، ψ یک بردار ستونی با ورودی‌های ψ_1 و ψ_2 ، $\bar{\psi}$ یک بردار ستونی با ورودی‌های $\bar{\psi}_1$ و $\bar{\psi}_2$ و $[d\bar{\psi} d\psi] = d\bar{\psi}_1 d\psi_1 d\bar{\psi}_2 d\psi_2$ است. این نتیجه برای ماتریس‌های دارای هر اندازه درست است. برای اثبات اینها فقط توابع نمایی را بسط داده و انتگرال بگیرید.

تمرین ۲۱-۳-۴: معادله بالا را ثابت کنید.

حالا «متوسط» روی پیمانه گوسی را در نظر بگیرید:

$$\langle \bar{\psi} \psi \rangle = \frac{\int \bar{\psi} \psi e^{a\bar{\psi}\psi} d\bar{\psi} d\psi}{\int e^{a\bar{\psi}\psi} d\bar{\psi} d\psi} = \frac{1}{a} = -\langle \psi \bar{\psi} \rangle \quad (21-3-59)$$

اثبات سر راست است و به‌عنوان تمرین واگذار می‌شود.

تمرین ۲۱-۳-۵: جزئیات حذف شده در محاسبه انتگرال فوق را بنویسید.

تمرین ۲۱-۳-۶: ژاکوبی‌ها برای تغییر متغیرهای گرمس، عکس آن چیز است که شما انتظار دارید. با

$\int a \phi d\phi = a$ شروع کنید. $\chi = a\phi$ تعریف کنید $d\phi = J(\phi/\chi) dx$ نوشته و نشان دهید که $J(\phi/\chi) = 1/a$. (ژاکوبی را به‌عنوان یک ثابت بگیرید که می‌تواند از انتگرال بیرون بیاید). معادله (۲۱-۳-۵۷) را با وارد کردن $\chi = a\psi$ محاسبه کنید. توجه کنید که نیازی به تغییر $\bar{\psi}$ نیست.

حال دو مجموعه از متغیرهای گرمس (با برجسب‌های ۱ و ۲) را در نظر بگیرید. به راحتی می‌توان نشان داد که

$$\langle \bar{\psi}_i \psi_j \rangle = \frac{\int \bar{\psi}_i \psi_j e^{a_1 \bar{\psi}_1 \psi_1 + a_2 \bar{\psi}_2 \psi_2} d\bar{\psi}_1 d\psi_1 d\bar{\psi}_2 d\psi_2}{\int e^{a_1 \bar{\psi}_1 \psi_1 + a_2 \bar{\psi}_2 \psi_2} d\bar{\psi}_1 d\psi_1 d\bar{\psi}_2 d\psi_2} \quad (21-3-60)$$

$$= \frac{\delta_{ij}}{a_i} \equiv \langle \bar{i} j \rangle \quad (21-3-61)$$

تمرین ۲۱-۳-۷: نتیجه بالا را ثابت کنید.

تمرین ۲۱-۳-۸: نشان دهید که

$$\langle \bar{\psi}_i \bar{\psi}_j \psi_k \psi_l \rangle = \frac{\int \bar{\psi}_i \bar{\psi}_j \psi_k \psi_l e^{a_1 \bar{\psi}_1 \psi_1 + a_2 \bar{\psi}_2 \psi_2} d\bar{\psi}_1 d\psi_1 d\bar{\psi}_2 d\psi_2}{\int e^{a_1 \bar{\psi}_1 \psi_1 + a_2 \bar{\psi}_2 \psi_2} d\bar{\psi}_1 d\psi_1 d\bar{\psi}_2 d\psi_2} \quad (21-3-62)$$

$$= \frac{\delta_{il} \delta_{jk}}{a_i a_j} - \frac{\delta_{ik} \delta_{jl}}{a_i a_j} \quad (21-3-63)$$

$$\equiv \langle \bar{i} l \rangle \langle \bar{j} k \rangle - \langle \bar{i} k \rangle \langle \bar{j} l \rangle \quad (21-3-64)$$

این قضیه **ویک** نامیده می‌شود و در نظریه میدان و نظریه بس - ذره‌ای بسیار مفید است. قبل از نوشتن انتگرال مسیر به دو نتیجه دیگر نیاز داریم. اولی عملگر همانی زیر است:

$$I = \int |\psi\rangle \langle \bar{\psi}| e^{-\bar{\psi}\psi} d\bar{\psi} d\psi \quad (21-3-65)$$

در اثبات این نتیجه در زیر همهٔ ویژگی‌هایی را که قبلاً توصیف کردیم به کار خواهیم برد و جملاتی را که در انتگرال گیری صفر می‌شوند کنار خواهیم گذاشت (یادآوری می‌کنیم که فقط $\bar{\psi}\psi = -\psi\bar{\psi}$ دارای انتگرال غیر صفر است):

$$\begin{aligned}
 \int |\psi\rangle\langle\bar{\psi}| e^{-\bar{\psi}\psi} d\bar{\psi} d\psi &= \int |\psi\rangle\langle\bar{\psi}|(1-\bar{\psi}\psi) d\bar{\psi} d\psi \\
 &= \int (|0\rangle-\psi|1\rangle)(\langle 0|-\langle 1|\bar{\psi})(1-\bar{\psi}\psi) d\bar{\psi} d\psi \\
 &= \int (|0\rangle\langle 0|+\psi|1\rangle\langle 1|\bar{\psi})(1-\bar{\psi}\psi) d\bar{\psi} d\psi \quad (۶۶-۳-۲۱) \\
 &= |0\rangle\langle 0| \int (-\bar{\psi}\psi) d\bar{\psi} d\psi + |1\rangle\langle 1| \int \psi\bar{\psi} d\bar{\psi} d\psi \\
 &= I
 \end{aligned}$$

آخرین نتیجه‌ای که لازم داریم این است که برای هر عملگر بوزونی (عملگری که از تعداد زوجی از عملگرهای فرمی ساخته شده باشد)،

$$\text{Tr } \Omega = \int \langle -\bar{\psi}|\Omega|\psi\rangle e^{-\bar{\psi}\psi} d\bar{\psi} d\psi \quad (۶۷-۳-۲۱)$$

اثبات این بسیار شبیه اثباتی است که ارائه شد و به‌عنوان تمرین واگذار می‌شود.

انتگرال مسیر فرمیونی

تابع پارش را برای یک نوسانگر منفرد در نظر بگیرید:

$$Z = \text{Tr } e^{-\beta(\Omega_0 - \mu)\Psi^\dagger\Psi} \quad (۶۸-۳-۲۱)$$

$$= \int \langle -\bar{\psi}| e^{-\beta(\Omega_0 - \mu)\Psi^\dagger\Psi} |\psi\rangle e^{-\bar{\psi}\psi} d\bar{\psi} d\psi \quad (۶۹-۳-۲۱)$$

نمی‌توانیم Ψ^+ و Ψ را به ترتیب با $-\bar{\psi}$ و ψ در تابع نمایی جایگزین کنیم چون وقتی تابع نمایی را بسط می‌دهیم نه همه Ψ ها از سمت چپ روی ویژه حالت‌هایشان اثر خواهند کرد و نه همه Ψ^+ ها از راست روی ویژه حالت‌هایشان (یادآوری می‌کنیم که در اینجا با عملگرها سر و کار داریم نه اعداد گرسمن. تابع نمایی تعدادی نامتناهی جمله در بسط خود خواهد داشت). لازم است تا تابع نمایی را به شکل مرتب شده بهنجار آن تبدیل کنیم که در آن همه عملگرهای خلق در چپ و همه عملگرهای نابودی در راست قرار گیرند. خوشبختانه می‌توانیم جواب را به‌طور نظری بنویسیم:

$$e^{-\beta(\Omega_0 - \mu)\Psi^\dagger\Psi} = 1 + (e^{-\beta(\Omega_0 - \mu)} - 1)\Psi^\dagger\Psi \quad (۷۰-۳-۲۱)$$

که صحت آن را می‌توانیم با ملاحظه دو مقدار ممکن $\Psi^\dagger\Psi$ ثابت کنیم (به روش دیگر، می‌توانید تابع نمایی را بسط داده و از این استفاده کنید که برای هر k غیر صفر، $N^k = N$ است). اکنون می‌توان نوشت

$$Z = \int \langle -\bar{\psi}| 1 + (e^{-\beta(\Omega_0 - \mu)} - 1)\Psi^\dagger\Psi |\psi\rangle e^{-\bar{\psi}\psi} d\bar{\psi} d\psi \quad (۷۱-۳-۲۱)$$

$$= \int \langle -\bar{\psi} | \psi \rangle (1 + (e^{-\beta(\Omega_0 - \mu)} - 1)(-\bar{\psi}\psi)) e^{-\bar{\psi}\psi} d\bar{\psi} d\psi \quad (۷۲-۳-۲۱)$$

$$= \int (1 - (e^{-\beta(\Omega_0 - \mu)} - 1)\bar{\psi}\psi) e^{-2\bar{\psi}\psi} d\bar{\psi} d\psi \quad (۷۳-۳-۲۱)$$

$$= 1 + e^{-\beta(\Omega_0 - \mu)} \quad (۷۴-۳-۲۱)$$

که انتظارش را داشتیم. در حالی که این جواب صحیح است، اما رویکرد انتگرال مسیر نیست. هر چند که صحت همه انتگرال‌گیری‌های گرمی و علامت‌های منفی را تأیید می‌کند. همانند رویکرد انتگرال مسیر، روش کار همان روش مرسوم است. تابع زیر را در نظر بگیرید

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H} \quad (۷۵-۳-۲۱)$$

که H عملگر مرتب شده بهنجار $H(\Psi^+, \Psi)$ است. قسمت نمایی را به صورت زیر می‌نویسیم:

$$e^{-\beta H} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\exp\left(-\frac{\beta}{N} H\right) \right)^N \quad (۷۶-۳-۲۱)$$

$$= \underbrace{(1 - \varepsilon H) \dots (1 - \varepsilon H)}_{N \text{ times}} \quad \varepsilon = \beta/N \quad (۷۷-۳-۲۱)$$

با توجه به معادله (۶۷-۳-۲۱) تریس این عبارت را با انتگرال‌گیری روی $\bar{\psi}_0 \psi_0$ و $N-1$ بار وارد کردن عملگر همانی:

$$Z = \int \langle -\bar{\psi}_0 | (1 - \varepsilon H) | \psi_{N-1} \rangle e^{-\bar{\psi}_{N-1} \psi_{N-1}} \langle \bar{\psi}_{N-1} | (1 - \varepsilon H) | \psi_{N-2} \rangle e^{-\bar{\psi}_{N-2} \psi_{N-2}} \quad (۷۸-۳-۲۱)$$

$$\times \langle \bar{\psi}_{N-2} | \dots | \psi_1 \rangle e^{-\bar{\psi}_1 \psi_1} \langle \bar{\psi}_1 | (1 - \varepsilon H) | \psi_0 \rangle e^{-\bar{\psi}_0 \psi_0} \prod_{i=0}^{N-1} d\bar{\psi}_i d\psi_i$$

می‌گیریم. اکنون می‌توانیم به طور مشروع جاگذاری زیر را انجام دهیم:

$$\begin{aligned} \langle \bar{\psi}_{i+1} | 1 - \varepsilon H(\Psi^\dagger, \Psi) | \psi_i \rangle &= \langle \bar{\psi}_{i+1} | 1 - \varepsilon H(\bar{\psi}_{i+1}, \psi_i) | \psi_i \rangle \\ &= e^{\bar{\psi}_{i+1} \psi_i} e^{-\varepsilon H(\bar{\psi}_{i+1}, \psi_i)} \end{aligned} \quad (۷۹-۳-۲۱)$$

که در مرحله آخر؛ حد ε بی‌نهایت کوچک را پیش‌بینی می‌کنیم. در اینجا یک جفت دیگر از متغیرها را تعریف می‌کنیم (که روی آنها انتگرال‌گیری نمی‌شود)

$$\bar{\psi}_N = -\bar{\psi}_0 \quad (۸۰-۳-۲۱)$$

$$\psi_N = -\psi_0 \quad (۸۱-۳-۲۱)$$

معادله اول اجازه می دهد تا سمت چپ ترین برا در معادله (۷۸-۳-۲۱)، $\langle -\bar{\psi}_0 |$ ، را با $\langle \bar{\psi}_N |$ جایگزین کنیم. دلیل معرفی ψ_N بزودی مشخص می شود.

با بهم گرفتن همه عامل (شامل همپوشانی حالت های هم دوس) به نتیجه زیر می رسیم

$$Z = \int \prod_{i=0}^{N-1} e^{\bar{\psi}_{i+1}\psi_i} e^{-\varepsilon H(\bar{\psi}_{i+1}, \psi_i)} e^{-\bar{\psi}_i\psi_i} d\bar{\psi}_i d\psi_i \quad (۸۲-۳-۲۱)$$

$$= \int \prod_{i=0}^{N-1} \exp \left[\left[\left(\frac{\bar{\psi}_{i+1} - \bar{\psi}_i}{\varepsilon} \psi_i - H(\bar{\psi}_{i+1}, \psi_i) \right) \varepsilon \right] d\bar{\psi}_i d\psi_i \right] \quad (۸۳-۳-۲۱)$$

$$\cong \int \exp \left(\int_0^\beta \bar{\psi}(\tau) \left(-\frac{\partial}{\partial \tau} - \Omega_0 + \mu \right) \psi(\tau) d\tau \right) [\mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi] \quad (۸۴-۳-۲۱)$$

که مرحله آخر نیاز به کمی توضیح دارد. با وجود عامل های ε به نظر می رسد که در فرمول آخر به عبارت پیوسته می رسیم. اما مفهوم جاگذاری دیفرانسیل ها با مشتقات برای متغیرهای گرمین کاملاً نمادین است. اینکه $\bar{\psi}_{i+1} - \psi_i$ کوچک است معنی ندارد، در واقع این اشیاء هیچ مقادیر عددی ندارند. اینکه این واقعاً در اینجا چه معنی می دهد در زیر توضیح داده می شود. گاهی $\psi(\tau)$ را با $\psi(\omega)$ عوض می کنیم که با تبدیل فوریه به هم مربوط می شوند. در آن مرحله به جای $-\partial/\partial\tau$ ، $i\omega$ قرار خواهیم داد در حالی که جواب دقیق $1 - e^{i\omega}$ است. اگر این جاگذاری را انجام ندهیم انتگرال های گرمین، وقتی برحسب اعداد معمولی محاسبه شوند، نتایج دقیق را برای هر چیزی که می خواهیم محاسبه کنیم، مثلاً انرژی آزاد، به دست خواهند داد. با این تقریب، فقط کمیت های غیر حساس به فرکانس های بالا به صورت درست مشخص خواهند شد. انرژی آزاد غلط در خواهد آمد اما توابع همبستگی به درستی باز تولید خواهند شد (دلیل این است که این توابع با مشتقات انرژی آزاد مشخص می شوند و این مشتقات انتگرال ها را به قدر کافی به فرکانس های بالا غیر حساس می کنند). همین طور توجه کنید که با همین جرات به جای $H(\bar{\psi}_{i+1}, \psi_i) = H(\bar{\psi}(\tau + \varepsilon), \psi(\tau))$ قرار می دهیم.

اکنون به بسط های فوریه اشاره شده در بالا می پردازیم. می نویسیم

$$\bar{\psi}(\tau) = \sum_n \frac{e^{i\omega_n \tau}}{\beta} \bar{\psi}(\omega) \quad (۸۵-۳-۲۱)$$

$$\psi(\tau) = \sum_n \frac{e^{-i\omega_n \tau}}{\beta} \psi(\omega) \quad (۸۶-۳-۲۱)$$

که فرکانس های مجاز، موسوم به فرکانس های متسویار^۱، طوری انتخاب می شوند که شرایط مرزی پاد متقارن در معادلات (۸۰-۳-۲۱) و (۸۱) را ارضا کنند. لذا

$$\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta} \quad (۸۷-۳-۲۱)$$

که n یک عدد صحیح است. توجه کنید که ما بسط‌های فوریه را طوری انتخاب کرده‌ایم که گویی ψ و $\bar{\psi}$ مزدوج‌های مختلط هستند، که اینگونه نیستند. اما این انتخاب محاسبات را ساده می‌کند. برای مراجعات بعدی توجه کنید که اگر $\beta \rightarrow \infty$ میل کند از معادله (۲۱-۳-۸۷) نتیجه می‌شود که وقتی n یک واحد افزایش می‌یابد، ω_n به اندازه $d\omega = 2\pi/\beta$ تغییر می‌کند. بنابراین

$$\frac{1}{\beta} \sum_n \rightarrow \int \frac{d\omega}{2\pi} \tag{۲۱-۳-۸۸}$$

تبدیلات معکوس عبارتند از

$$\psi(\omega) = \int_0^\beta \psi(\tau) e^{i\omega_n \tau} d\tau \tag{۲۱-۳-۸۹}$$

$$\bar{\psi}(\omega) = \int_0^\beta \bar{\psi}(\tau) e^{-i\omega_n \tau} d\tau \tag{۲۱-۳-۹۰}$$

که ویژگی متعامد بودن زیر را به کار می‌بریم

$$\int_0^\beta e^{i\omega_n \tau} e^{-i\omega_m \tau} d\tau = \frac{e^{i(\omega_n - \omega_m)\beta} - 1}{i(\omega_n - \omega_m)} = \beta \delta_{mn} \tag{۲۱-۳-۹۱}$$

با انجام تبدیلات فوریه در کنش و تغییر متغیرهای انتگرال‌گیری تابعی به $\psi(\omega)$ و $\bar{\psi}(\omega)$ (ژاکوبی یک است) و رفتن به حد $\beta \rightarrow \infty$ ، که جمع‌های روی فرکانس‌های گسسته را به انتگرال‌های روی ω پیوسته، مثل معادله (۲۱-۳-۸۸)، تبدیل می‌کند خواهیم داشت

$$Z = \int \exp \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \bar{\psi}(\omega)(i\omega - \Omega_0 + \mu)\psi(\omega) \right] [\mathcal{D}\bar{\psi}(\omega) \mathcal{D}\psi(\omega)] \tag{۲۱-۳-۹۲}$$

اگر چه β از تصویر حذف شده است ولی به صورت $2\pi\delta(0)$ ظاهر خواهد شد که می‌دانیم نماینده زمان موهومی کل β است (محاسبات قاعده طلایی فرعی را به‌خاطر بیاورید). به‌زودی یک مثال ارائه خواهیم کرد. ابتدا توجه می‌کنیم که تابع همبستگی فضای فرکانس به انتگرال روی فقط یک جفت از متغیرها مربوط می‌شود [معادله (۲۱-۳-۵۹)] و به‌صورت زیر مشخص می‌شود

$$\begin{aligned} \langle \bar{\psi}(\omega_1)\psi(\omega_2) \rangle &= \frac{\int \bar{\psi}(\omega_1)\psi(\omega_2) \exp \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \bar{\psi}(\omega)(i\omega - \Omega_0 + \mu)\psi(\omega) \right] [\mathcal{D}\bar{\psi}(\omega) \mathcal{D}\psi(\omega)]}{\int \exp \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \bar{\psi}(\omega)(i\omega - \Omega_0 + \mu)\psi(\omega) \right] [\mathcal{D}\bar{\psi}(\omega) \mathcal{D}\psi(\omega)]} \\ &= \frac{2\pi\delta(\omega_1 - \omega_2)}{i\omega_1 - \Omega_0 + \mu} \end{aligned} \tag{۲۱-۳-۹۳}$$

بویژه،

$$\langle \bar{\psi}(\omega)\psi(\omega) \rangle = \frac{2\pi\delta(0)}{i\omega - \Omega_0 + \mu} = \frac{\beta}{i\omega - \Omega_0 + \mu} \quad (۹۴-۳-۲۱)$$

تمرین ۲۱-۳-۱۰: تلاش کنید تا دو معادله بالا را توضیح دهید. قبل از همه توجه کنید که اگر $\omega_1 = \omega_2$ نباشد به صفر می‌رسیم چون فقط زوج $\bar{\psi}\psi$ شانس داشتن انتگرال غیر صفر را دارد. این تابع δ را توضیح می‌دهد. و اما 2π ، به مرحله‌ای برگردید که یک جمع روی فرکانس‌ها داشتیم نه یک انتگرال، یعنی در معادله (۲۱-۳-۸۸) خلاف جهت فلش عمل کنید و آنرا در نمای معادله (۲۱-۳-۹۳) به کار ببرید. اکنون عدد اشغال میانگین $\langle N \rangle$ را حساب می‌کنیم:

$$\langle N \rangle = \frac{1}{\beta Z} \frac{\partial Z}{\partial \mu} \quad (۹۵-۳-۲۱)$$

$$= \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \langle \bar{\psi}(\omega)\psi(\omega) \rangle \quad (۹۶-۳-۲۱)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{i\omega_0^+}}{i\omega - \Omega_0 + \mu} \quad (۹۷-۳-۲۱)$$

$$= \theta(\mu - \Omega_0) \quad (۹۸-۳-۲۱)$$

که مانند رویکرد عملگری است.

توجه کنید که ما مجبور بودیم ضریب $e^{i\omega_0^+}$ را به داخل انتگرال ω بیاوریم. این مطلب را به صورت زیر می‌توان درک کرد. اگر محاسبه را با استفاده از زمان τ به جای فرکانس ω انجام می‌دادیم متوسط $\Psi^+\Psi$ را حساب می‌کردیم. این وقتی وارد انتگرال مسیر شد به طور خودکار به $\bar{\psi}(\tau + \varepsilon)\psi(\tau)$ تغییر کرد، چون برا حالت همدوس در سمت چپ عملگر نسبت به کت سمت راست از بازه زمانی بعدی می‌آمد [به یاد بیاورید که چگونه $H(\Psi^+, \Psi)$ به $H(\bar{\psi}(i+1), \psi(i))$ تغییر کرد] توجه کنید که انتگرال روی ω همگرا نبود و به صورت $d\omega/\omega$ تغییر می‌کرد. بنابراین به فرکانس‌های بالا حساس بود و مجبور بودیم عامل $e^{i\omega_0^+}$ را در وسط مداخله دهیم. این عامل اجازه می‌دهد تا پرنده را در نیم صفحه بالایی ببندیم. اگر $\mu > \Omega_0$ باشد قطب انتگرال در آن نیم صفحه قرار می‌گیرد و یک سهم ایجاد می‌کند. در غیر این صورت به صفر می‌رسیم. در توابع همبستگی که شامل انتگرال‌هایی نباشند که دارای توان‌های ۲ یا بیشتر ω در مخرج هستند و لذا همگرا می‌باشند این عامل را وارد نخواهیم کرد.

تمرین ۲۱-۳-۱۱: پیشرفته.

در نظریه میدان و فیزیک بس - ذره‌ای توابع گرین مورد نظر ما هستند:

$$G(\tau) = \langle \mathcal{T}(\Psi(\tau)\Psi^\dagger(0)) \rangle \quad (۹۹-۳-۲۱)$$

که $\langle \rangle$ نشان‌دهنده متوسط نسبت به Z است و

$$\Omega(\tau) = e^{H\tau} \Omega e^{-H\tau}$$

عملگرهای زیرگ، و \mathcal{T} نماد زمان - مرتب کننده برای عملگرهای فرمیونی است:

$$\mathcal{T}(\Psi(\tau)\Psi^\dagger(0)) = \theta(\tau)\Psi(\tau)\Psi^\dagger(0) - \theta(-\tau)\Psi^\dagger(0)\Psi(\tau) \quad (100-3-21)$$

به علامت منفی، وقتی ترتیب عملگرها عوض می‌شود، توجه کنید. نشان دهید که برای مسئله نوسانگر منفرد ما $\Psi(\tau) = \Psi e^{-(\Omega_0 - \mu)\tau}$ است.

با استفاده از فرمالیزم عملگری نشان دهید که در مسئله ما

$$G(\tau) = \frac{\theta(\tau) e^{-(\Omega_0 - \mu)\tau} - \theta(-\tau) e^{-(\Omega_0 - \mu)(\tau + \beta)}}{1 + e^{-\beta(\Omega_0 - \mu)}} \quad (101-3-21)$$

و اینکه در حد دما - صفر این تقیلیل می‌یابد به

$$G(\tau) = \theta(\tau) e^{-(\Omega_0 - \mu)\tau} \quad \mu < \Omega_0 \quad (102-3-21)$$

$$= -\theta(-\tau) e^{-(\Omega_0 - \mu)\tau} \quad \mu > \Omega_0 \quad (103-3-21)$$

با تعریف زوج تبدیلات زیر:

$$G(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} G(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau \quad (104-3-21)$$

$$G(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} G(\omega) e^{-i\omega\tau} \frac{d\omega}{2\pi} \quad (105-3-21)$$

نشان دهید که

$$G(\omega) = \frac{1}{\Omega_0 - \mu - i\omega} \quad (106-3-21)$$

مستقل از اینکه Ω_0 بزرگتر باشد یا μ .

در مطالعه مدل ایزینگ دیدیم که تابع همبستگی دو - نقطه در انتگرال تابعی به متوسط حالت پایه حاصل ضرب زمان - مرتب شده تبدیل شد (برای سیستم بی‌نهایت طویل در جهت زمان موهومی) و بالعکس. همین‌طور در اینجا درست است که

$$\langle \mathcal{T}(\Psi(\tau)\Psi^\dagger(0)) \rangle = \langle \bar{\psi}(\tau)\psi(0) \rangle \quad (107-3-21)$$

که متوسط روی سمت راست به وسیله انتگرال تابعی گرسمن انجام می‌شود. با کار کردن در دمای صفر این را برای تبدیل فرکانسی دو طرف ثابت کنید (در سمت راست با استفاده از نسخه دمای صفر معادلات (۲۱-۳-۸۵ و ۸۶) و (۲۱-۳-۹۳) $\psi(\tau)$ را بر حسب $\psi(\omega)$ بنویسید و الی آخر).

در اینجا به پایان بحث انتگرال‌های مسیر فرمیونی می‌رسیم. واضح است که این درست شروع کار است و بحث ما فقط یک مقدمه بوده است.

۲۱-۴- خلاصه

آنچه در این فصل انجام شده است را به اختصار بیان می‌کنیم. ما با یادگیری اینکه چطور از عملگرهای همانی برای به دست آوردن انتگرال‌های مسیر مختلف استفاده می‌کنیم شروع کردیم و نگاهی به انتگرال‌های مسیر فضای پیکربندی، فضای فاز و حالت همدوس کردیم. ما پی بردیم که در حالی که وارد کردن عملگر همانی یک تقریب نیست، هر فرضی مبنی بر اینکه تغییرات در مختصه‌هایی که روی آنها انتگرال‌گیری می‌شود بین بازه‌های زمانی کوچک است باید بدقت بررسی شود. در انتگرال‌های فضای پیکربندی، جمله انرژی جنبشی موجب میرایی افت و خیزها برای هر چیزی از مرتبه $\frac{1}{2}$ شد. در انتگرال‌های دیگر چنین اطمینانی نبود. بویژه شکل‌های پیوسته کنش، اشیای کاملاً صوری بودند و فقط نسخه گسسته، انتگرال مسیر را تعریف می‌کرد، با این فرض که حد تعداد نامتناهی از انتگرال‌ها موجود باشد. علی‌رغم این، انتگرال‌های مسیر برای نظر کردن به نظریه کوانتومی به عنوان یک کل قبل از ما، به عنوان یک جواب سازنده و مثبت برای مسئله تحول کوانتومی، بسیار مفید بود. بویژه در حد کلاسیکی کوچک بودن \hbar به ما اجازه داد تا به مسیرهای هموار فکر کنیم. مطالعه LLL (در رابطه با QHE) و تحلیل فاز بری برخی از کاربردهای درست انتگرال مسیر را نشان داد.

سپس به مکانیک کوانتومی زمان موهومی پرداختیم. نشان دادیم که از آن می‌توان انرژی‌ها و توابع موج زمان - حقیقی را استخراج کرد. به علاوه، انتگرال‌های مسیر زمان موهومی مستقیماً مکانیک آماری کوانتومی را تعریف و معین کردند و از نظر صوری شبیه مکانیک آماری کلاسیکی بودند. ماتریس انتقال نقش عملگر تحول زمانی موهومی گسسته را بازی می‌کرد. شکست تقارن از زوایای مختلف تحلیل شد.

سرانجام دو سیستم بدون حد کلاسیکی را مطالعه کردیم: اسپین‌های کوانتومی و نوسانگرهای فرمیونی. اگر چه ما فقط یک نوسانگر فرمیونی را مطالعه کردیم، ولی تعمیم به چند نوسانگر مستقیم است و نباید مشکلی در آن داشته باشید. انتگرال‌های گرسمن بی‌شک انتزاعی‌ترین مفهوم در این کتاب هستند. اما شکی نیست که وقتی آنها را به کار می‌برید (با مقایسه با جواب عملگری به عنوان یک محک) بزودی یاد خواهید گرفت که مستقیماً بر حسب آنها فکر کنید. اما این را به خاطر داشته باشید: در اینجا هیچ تصور واقعی از یک تحلیل نیمه کلاسیکی وجود ندارد چون کنش، یک موجود عدد - مقدار^۱ است و نمی‌توان گفت که در یک نقطه، مانا است. همین طور توجه کنید که هر انتگرال گرسمن که می‌نویسید نهایتاً برابر با یک عدد معمولی می‌شود ولو اینکه انتگرالده و پیمانه انتگرال‌گیری عدد نیستند. این اعداد با موجودات فیزیکی مثل انرژی پایه یا تابع همبستگی یک سیستم فرمیونی متناظر هستند.

تنها انتگرال تابعی که محاسبه کردیم انتگرال گوسی بود. این اساساً تمام چیزی است که می‌دانیم چگونه با آن عمل کنیم. اگر کنش درجه دو نباشد اما دارای جملات چارین^۱ باشد چطور؟ در این صورت از نظریه اختلال استفاده می‌کنیم جمله چارین را از تابع نمایی پایین می‌آوریم (به شکل یک سری نامتناهی) و جمله به جمله حساب می‌کنیم چون می‌دانیم که چگونه از " x ضربدر یک گوسین انتگرال بگیریم. ضمیمه $A-2$ و همین‌طور قضیه ویک برای فرمیون‌ها در تمرین (۲۱-۳-۶۴) را به‌خاطر بیاورید، اما داستان فرق می‌کند.

- M. Berry, Proc. R. Soc. Lond., Ser. A392 45, 1984. A fascinating account of the history of the subject may be found in M. Berry, physics Today, 43, 12 1990.
- S. Coleman, Aspects of Symmetry (Cambrhdge University Press, New York, 1985). Included here for the article on instantons.
- L.D.Faddeev, in Methods in Field Theory, Les Houches Lectures, 1975 (R. Balian and J. Zinn-Justin, eds.) (North-Holland/World Scientific, Singapore, 1981). Look in particular at the discussion of holomorphic form of the Functional integral, i.e., the coherent state integral.
- M. Gutzwiller, Chaos in Classical and Quantum Mechanics (Springer Verlag, New York, 1990). For a solid introduction to many aspects of path integrals, especially the semiclassical limit.
- J.R. Klauder and B. Skagerstam, eds., Coherent States (World Scientific, Singapore, 1985). Everything you ever wanted to know about coherent states.
- S. Pancharatnam, Ind. Acad. Sci., 44(5), Sec. A, 1958. Reprinted in Shapere and Wilczek (1989) (see below). Discusses the geometric phase in the context of optics.
- R. E. Prange and S. M. Girvin, eds., the Quantum Hall Effect (Springer, New York, 1987). Has many contributed papers by leaders in the Field as well as helpful commentaries.
- R. Rajaraman, Instantons and Solitons (North Holland, New York, 1982). Extremely clear discussion of the subject, usually starting with a warmup toy example from elementary quantum mechanics. Very few details are "left to the reader."
- L. S. Schulman, Techniques and Applications of Path Integrals (Wiley Interscience, New York, 1981). A very readable and clear discussion of functional integrals, and pitfalls and fine points (such as the midpoint prescription for vector potential coupling).
- A. Shapere and F. Wilczek, eds., Geometric phases in Physics (World Scientific, Singapore, 1989). Collec-tion of all key papers and some very good introductions to each subtopic. Saves countless trips to the library.
- M. Stone, ed., the Quantum Hall Effect (World Scientific, Singapore, 1992). A nice collection of reprints with commentary.
- t Hooft, Phys. Rev. Lett., 37,8 (1976).
- F.Wilczek, ed., Fractional Statistics and Anyon Superconductivity (World Scientific, Singapore, 1990). Referenced here for its applications to the Quantum Hall Effect. However, other topics like fractional statistics discussed there should be within your reach after this book.

A-1 - معکوس سازی ماتریس

این بخش مختصر فقط برای کمک به فهم معادله (1-8-5) در متن اصلی گنجانده شده و به هیچ وجه جامع نیست.

معکوس سازی ماتریس 3×3 زیر را در نظر بگیرید

$$M = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \\ c_1 & c_2 & c_3 \end{bmatrix} \quad (1-1-A)$$

عناصر M به جای M_{ij} به ترتیب فوق نامگذاری شده‌اند چون در بحث زیر سطرها را به عنوان مولفه‌های بردارهای A ، B و C در نظر می‌گیریم یعنی در نمادگذاری آنالیز برداری (که در این بخش از آن پیروی می‌کنیم)،

$$A = a_1 \mathbf{i} + a_2 \mathbf{j} + a_3 \mathbf{k}$$

حال یک سه تایی از بردارها را در نظر بگیرید

$$A_R = B \times C$$

$$B_R = C \times A$$

$$C_R = A \times B$$

$$(2-1-A)$$

که گفته می‌شود وارون‌های A ، B و C هستند. در حالت کلی

$$A \cdot A_R \neq 0, \quad A \cdot B_R = A \cdot C_R = 0 \quad (\text{جایگشت دوره‌ای}) \quad (3-1-A)$$

اگر ماتریس \bar{M} را که ستون‌هایش بردارهای وارون هستند تشکیل دهیم (موسوم به ماتریس همسازه M)

$$\bar{M} = \begin{bmatrix} (a_R)_1 & (b_R)_1 & (c_R)_1 \\ (a_R)_2 & (b_R)_2 & (c_R)_2 \\ (a_R)_3 & (b_R)_3 & (c_R)_3 \end{bmatrix}$$

$$M \cdot \bar{M} = \begin{bmatrix} \mathbf{A} \cdot \mathbf{A}_R & \mathbf{A} \cdot \mathbf{B}_R & \mathbf{A} \cdot \mathbf{C}_R \\ \mathbf{B} \cdot \mathbf{A}_R & \mathbf{B} \cdot \mathbf{B}_R & \mathbf{B} \cdot \mathbf{C}_R \\ \mathbf{C} \cdot \mathbf{A}_R & \mathbf{C} \cdot \mathbf{B}_R & \mathbf{C} \cdot \mathbf{C}_R \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{A} \cdot \mathbf{A}_R & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{B} \cdot \mathbf{B}_R & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{C} \cdot \mathbf{C}_R \end{bmatrix} \quad (4-1-A)$$

هر سه عنصر قطری برابرند:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}_R = \mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = \mathbf{B} \cdot (\mathbf{C} \times \mathbf{A}) = \mathbf{B} \cdot \mathbf{B}_R = \mathbf{C} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) = \mathbf{C} \cdot \mathbf{C}_R \quad (5-1-A)$$

$$= \det M$$

که مساوی آخر به این دلیل است که ضرب برداری را می توان به صورت یک دترمینال نوشت:

$$\mathbf{B} \times \mathbf{C} = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ b_1 & b_2 & b_3 \\ c_1 & c_2 & c_3 \end{vmatrix} \quad (6-1-A)$$

(از قرار دادی استفاده می کنیم که برای نشان دادن دترمینال از دو خط موازی استفاده می کند).

در نتیجه معکوس ماتریس M به صورت زیر داده می شود

$$M^{-1} = \frac{\bar{M}}{\det M} \quad (7-1-A)$$

$\det M$ چه زمانی صفر می شود؟ اگر یکی از بردارها مثلاً \mathbf{C} ، ترکیب خطی از دو بردار دیگر باشد. زیرا اگر

$$\mathbf{C} = \alpha \mathbf{A} + \beta \mathbf{B}$$

باشد آنگاه

$$\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = \mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \alpha \mathbf{A}) + \mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \beta \mathbf{B}) = \mathbf{B} \cdot (\alpha \mathbf{A} \times \mathbf{A}) = 0$$

لذا دترمینال در صورتی صفر می شود که سطرهای ماتریس مستقل خطی (LI) نباشند و بالعکس. اگر ماتریس برای نمایش دادن سه معادله همزمان به کار رود بدین معنی است که هر سه معادله مستقل اند. این روش می تواند برای معکوس سازی ماتریس های $n \times n$ ، با عناصر حقیقی یا مختلط، به کار رود. ضرب برداری $n-1$ بردار به صورت زیر تعریف می شود:

$$\mathbf{A}_1 \times \mathbf{A}_2 \times \dots \times \mathbf{A}_{n-1} = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} & \dots \\ (a_1)_1 & (a_1)_2 & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ (a_{n-1})_1 & (a_{n-1})_2 & \dots & (a_{n-1})_n \end{vmatrix} \quad (8-1-A)$$

بردار حاصل بر تک تک بردارهای حاصل ضرب عمود است و وقتی هر دو بردار مجاور را عوض می کنیم تغییر علامت می دهد و قس علی هذا، درست مثل نظیر سه بعدی اش. اگر یک ماتریس M داشته باشیم که n سطر آن بتواند با n بردار مشخص شوند، \mathbf{A}_1 ، \mathbf{A}_2 ، \dots ، \mathbf{A}_n ، آنگاه همسازه، بردارهای \mathbf{A}_{1R} ، \dots ، \mathbf{A}_{nR} را به عنوان ستون های خود دارد، که در آن

$$A_{jR} = A_{j+1} \times A_{j+2} \times \dots \times A_n \times A_1 \times \dots \times A_{j-1} \quad (A-1-9)$$

یک نکته: ضرب برداری عمود بر بردارهای حاصل ضرب، نسبت به حاصل ضرب داخلی

$$A \cdot B = \sum A_i B_i$$

تعریف می شود و نه

$$A \cdot B = \sum A_i^* B_i$$

حتی وقتی مولفه های A مختلط باشند. در اینجا هیچ تناقضی وجود ندارد، چون بردارهای A_1 ، A_2 ، ...، A_n اشیاء پنداری هستند نه عناصر فضای $V^n(C)$ که عملگر روی آنها اثر می کند.
تمرین A-1-1: با استفاده از روش بالا نشان دهید که

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 3 \\ 0 & 1 & 2 \\ -1 & 1 & 1 \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \\ 2 & -5 & 4 \\ -1 & 3 & -2 \end{bmatrix}$$

و

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 3 \\ 4 & 1 & 2 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}^{-1} = \frac{1}{12} \begin{bmatrix} -4 & 5 & 1 \\ 8 & -4 & -8 \\ 4 & -2 & 2 \end{bmatrix}$$

قضیه A-1-1: اگر $\Omega|V\rangle = |0\rangle$ به معنی $|V\rangle = |0\rangle$ باشد آنگاه Ω^{-1} موجود است.

اثبات: فرض کنید $|V_1\rangle, \dots, |V_n\rangle$ یک پایه مستقل خطی در V^n باشد. آنگاه پایه مستقل خطی دیگر با اثر Ω تولید می شود، یعنی $\Omega|V_1\rangle, \dots, \Omega|V_n\rangle$ هم یک پایه مستقل خطی است. برای دیدن این موضوع، عکس مطلب را فرض می کنیم یعنی اینکه رابطه ای به شکل

$$\sum_i \alpha_i \Omega|V_i\rangle = 0$$

وجود دارد که همه $\alpha_i = 0$ ها نیستند. با بیرون کشیدن Ω به خاطر خطی بودن آن می رسمیم به

$$\Omega \left(\sum_i \alpha_i |V_i\rangle \right) = 0$$

که وقتی با خاصیت فرض شده Ω ترکیب شود بیان می کند که

$$\sum_i \alpha_i |V_i\rangle = |0\rangle$$

که همه $\alpha_i = 0$ ها نیستند، و این صحیح نیست. لذا می‌توانیم نتیجه بگیریم که هر بردار $|V'\rangle$ در V^n می‌تواند به صورت یک ترکیب خطی منحصربه‌فرد در پایه جدید تولید شده توسط Ω به صورت زیر نوشته شود

$$|V'\rangle = \sum_i \alpha_i \Omega |V_i\rangle$$

برحسب $|V\rangle = \sum \alpha_i |V_i\rangle$ ، می‌بینیم که هر $|V'\rangle$ در V^n می‌تواند به صورت

$$|V'\rangle = \Omega |V\rangle$$

نوشته شود که $|V\rangle$ یکتاست. به عبارت دیگر، می‌توانیم تصور کنیم که هر $|V'\rangle$ در V^n از یک منشاء منحصربه‌فرد $|V\rangle$ در V^n ، تحت اثر Ω ، به دست می‌آید. یک عملگر Λ تعریف کنید که اثر آن روی هر بردار $|V'\rangle$ در V^n بردن آن به عقب و به منشاء منحصربه‌فرد آن $|V\rangle$ است (اگر منشاء $|V'\rangle$ منحصربه‌فرد نبود، مثلاً بدلیل وجود دو بردار $|V_1\rangle$ و $|V_2\rangle$ که به وسیله Ω به $|V'\rangle$ نگاشته می‌شوند، آنگاه نمی‌توانستیم Λ را تعریف کنیم، چون با اثر کردن روی $|V'\rangle$ معلوم نبود که $|V_1\rangle$ را می‌دهد یا $|V_2\rangle$ را). اثر Λ عبارتست از

$$\Lambda |V'\rangle = |V\rangle$$

که در آن

$$|V'\rangle = \Omega |V\rangle$$

می‌توانیم Λ را به عنوان معکوس Ω بدانیم،

$$\Lambda = \Omega^{-1} \quad \text{یا} \quad \Lambda \Omega = I$$

چون برای هر $|V'\rangle$ در V^n

$$\Lambda (\Omega |V\rangle) = \Lambda \Omega |V\rangle = |V\rangle \quad \text{Q.E.D.}$$

A-۲- انتگرال‌های گاوسی

در اینجا تمام انتگرال‌هایی را که نیاز خواهیم داشت بحث می‌کنیم. انتگرال زیر را ملاحظه کنید

$$I_0(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx, \quad \alpha > 0 \quad (1-2-A)$$

این انتگرال با روش‌های مرسوم قابل محاسبه نیست. ترفندی که به کار می‌رود این است که

$$I_0^2(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha y^2} dy = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha(x^2+y^2)} dx dy$$

با رفتن به مختصات قطبی در صفحه $x-y$ ،

$$I_0^2(\alpha) = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} e^{-\alpha \rho^2} \rho \, d\rho \, d\phi$$

$$= \pi/\alpha$$

بنابراین

$$I_0(\alpha) = (\pi/\alpha)^{1/2} \tag{۲-۲-A}$$

با مشتق‌گیری نسبت به α می‌توانیم به همه انتگرال‌های به شکل

$$I_{2n}(\alpha) = \int_{-\infty}^\infty x^{2n} e^{-\alpha x^2} dx$$

برسیم. برای مثال

$$I_2(\alpha) = \int_{-\infty}^\infty x^2 e^{-\alpha x^2} dx = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \int_{-\infty}^\infty e^{-\alpha x^2} dx$$

$$= -\frac{\partial}{\partial \alpha} I_0(\alpha) = \frac{1}{2\alpha} \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{1/2} \tag{۳-۲-A}$$

انتگرال‌های $I_{2n+1}(\alpha)$ صفر می‌شوند چون انتگرال‌های توابع فرد روی یک بازه زوج (متقارن) $-\infty$ تا $+\infty$ هستند. معادلات (۲-۲-A) و (۳-۲-A) حتی اگر α موهومی محض باشد معتبرند. حال انتگرال زیر را در نظر بگیرید

$$I_0(\alpha, \beta) = \int_{-\infty}^\infty e^{-\alpha x^2 + \beta x} dx \tag{۴-۲-A}$$

با تبدیل نما به مربع کامل داریم

$$I_0(\alpha, \beta) = e^{\beta^2/4\alpha} \int_{-\infty}^\infty e^{-\alpha(x-\beta/2\alpha)^2} dx = e^{\beta^2/4\alpha} \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{1/2} \tag{۵-۴-A}$$

این نتایج حتی در صورتی که α و β مختلط باشند معتبرند به شرطی که $\text{Re } \alpha > 0$ باشد. سرانجام با اعمال عملگر $(-d/d\alpha)^n$ به دو طرف معادله

$$\int_0^\infty e^{-ar} dr = \frac{1}{\alpha}$$

به دست می‌آوریم:

$$\int_0^\infty r^n e^{-ar} dr = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$$

این انتگرال را با $\alpha = 1$ و $z - 1$ به جای n در نظر بگیرید که z یک عدد مختلط دلخواه است. این، تابع گاما $\Gamma(z)$ را تعریف می کند

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} r^{z-1} e^{-r} dr$$

برای z حقیقی، مثبت و صحیح،

$$\Gamma(z) = (z-1)!$$

A-۳- اعداد مختلط

یک متغیر مختلط z می تواند بر حسب دو متغیر حقیقی x و y و $i = (-1)^{\frac{1}{2}}$ به صورت زیر نوشته شود

$$z = x + iy \quad (1-3-A)$$

مزدوج مختلط آن z^* به صورت زیر تعریف می شود

$$z^* = x - iy \quad (2-3-A)$$

این دو معادله را می توان معکوس نمود و قسمت های حقیقی و موهومی x و y را به صورت زیر نوشت

$$x = \frac{1}{2}(z + z^*), \quad y = (z - z^*)/2i \quad (3-3-A)$$

مربع مدول z که $z z^*$ تعریف می شود برابر است با

$$z z^* \equiv |z|^2 = (x + iy)(x - iy) = x^2 + y^2 \quad (4-3-A)$$

می توانید با در نظر گرفتن مدول $z - z'$ ثابت کنید که $z = z'$ ایجاب می کند که $x = x'$ و $y = y'$ باشد.

از بسط های سری توانی

$$\sin x = x - x^3/3! + x^5/5! - \dots$$

$$\cos x = 1 - x^2/2! + x^4/4! - \dots$$

می توان نتیجه گرفت که

$$e^{ix} = \cos x + i \sin x \quad (5-3-A)$$

واضح است که e^{ix} مدول یک دارد (x حقیقی است). عبارت $z = x + iy$ ، z را در شکل دکارتی به دست می دهد. شکل قطبی به صورت زیر است

$$z = x + iy = (x^2 + y^2)^{1/2} \left[\frac{x}{(x^2 + y^2)^{1/2}} + i \frac{y}{(x^2 + y^2)^{1/2}} \right]$$

$$= \rho (\cos \theta + i \sin \theta)$$

$$= \rho e^{i\theta}$$

که در آن

$$\rho = (x^2 + y^2)^{1/2} \quad \text{و} \quad \theta = \tan^{-1}(y/x) \quad (6-3-A)$$

واضح است که

$$|z| = \rho \quad (7-3-A)$$

هر عدد مختلط $z = x + iy$ می تواند به صورت یک نقطه (x, y) در صفحه $x - y$ تصور شود. این صفحه، صفحه مختلط z هم نامیده می شود.

A - ۴ - دستور العمل $i\varepsilon$

در اینجا فرمول زیر را به دست آورده و تفسیر می کنیم

$$\frac{1}{x \mp i\varepsilon} = \mathcal{P} \frac{1}{x} \pm i\pi \delta(x) \quad (1-4-A)$$

که در آن $\varepsilon \rightarrow 0$ یک کمیت بی نهایت کوچک مثبت است. انتگرالی به شکل زیر را در نظر بگیرید

$$I = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x) dx}{x - i\varepsilon} \quad (2-4-A)$$

با در نظر گرفتن این انتگرال به عنوان انتگرالی روی محور حقیقی صفحه مختلط $z = x + iy$ می بینیم که انتگرالده یک قطب مشخص و صریح در $z = i\varepsilon$ ، علاوه بر تکیگی هایی که ممکن است f داشته باشد، دارد. فرض می کنیم f هیچ تکیگی روی محور حقیقی یا در فاصله بی نهایت نزدیک به آن ندارد. تا وقتی ε ثابت نگه داشته شود مشکلی در انتگرال نداریم. برای مثال اگر f قطب هایی در نیم صفحه بالایی داشته باشد و بقدر کافی سریع صفر شود تا اجازه دهد پربند را در نیم صفحه بالایی ببندیم، انتگرال $2\pi i$ برابر جمع مانده های قطب های f و قطب واقع در $z = i\varepsilon$ می شود. همین طور اگر جمله ε را عوض کنیم، فقط سهم ناشی از قطب صریح را کنار می گذاریم که حالا در نیم صفحه پایینی قرار دارد.

اگر $\varepsilon \rightarrow 0$ میل کند چطور؟ در این صورت قطب در داخل پربند ما که دور محور x قرار می گیرد (از بالا) میخکوب می شود. از آنجا که فقط تکیگی نزدیک محور حقیقی، قطب صریح به صورت $z = i\varepsilon$ است تغییر شکل زیر را در پربند ایجاد می کنیم بدون اینکه مقدار I تغییر کند: پربند در طول محور حقیقی از $-\infty$ تا ε' حرکت می کند (ε' یک بی نهایت کوچک دیگر است) حول مبدا از زیر یک نیم دایره به شعاع ε' به صورت پادساعتگرد می چرخد و در طول محور حقیقی از $x = \varepsilon'$ تا ∞ دوباره از سر می گیرد. نکته جالب

این است که اکنون می‌توانیم $\varepsilon = 0$ قرار دهیم که قطب را به مبدا می‌آورد. سه قسمت پربند انتگرال گیری به صورت زیر سهیم می‌شوند:

$$I = \lim_{\varepsilon' \rightarrow 0} \left[\int_{-\infty}^{-\varepsilon'} \frac{f(x) dx}{x} + \int_{\varepsilon'}^{\infty} \frac{f(x) dx}{x} + i\pi f(0) \right] \quad (3-4-A)$$

$$\equiv \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x) dx}{x} + i\pi f(0).$$

جمع دو انتگرال در حد $\varepsilon' \rightarrow 0$ به عنوان انتگرال مقدار اصلی تعریف می‌شود و با نماد \mathcal{P} نشان داده می‌شود. در جمله آخر که به همسایگی بی‌نهایت کوچک مبدا محدود می‌شود شناسه تابع یکنواخت f را صفر قرار داده‌ایم و انتگرال dz/z را پاد ساعتگرد حول نیم دایره گرفته‌ایم تا به $i\pi$ برسیم.

معادله (1-4-A) روشی فشرده برای بیان همه اینهاست. بدیهی است که معادله (1-4-A) فقط داخل یک انتگرال استفاده می‌شود و داخل انتگرال، عامل $1/x - i\varepsilon$ به دو جمله منجر می‌شود: اولی، $\mathcal{P}(1/x)$ ، به انتگرال مقدار اصلی منجر می‌شود و دومی، $i\pi\delta(x)$ ، به $i\pi f(0)$.

واضح است که اگر علامت جمله ε را عوض کنیم علامت تابع δ را عوض می‌کنیم چون حالا نیم دایره حول قطب در جهت ساعتگرد قرار می‌گیرد. قسمت اصلی به این تغییر جهت حساس نیست و بدون تغییر می‌ماند.

روشن است که اگر به جای $x - a$ ، x قرار دهیم قطب از مبدا به $x - a$ می‌رود و $f(0)$ با $f(a)$ جایگزین می‌گردد به طوری که می‌توان نوشت:

$$\frac{1}{(x-a) \mp i\varepsilon} = \mathcal{P} \frac{1}{(x-a)} \pm i\pi\delta(x-a) \quad (4-4-A)$$

بدیهی است که حدود روی x لازم نیست $\pm\infty$ باشند تا فرمول درست باشد.

سرانجام توجه کنید که طبق معادله (4-4-A) تفاضل بین انتگرال‌ها با دو علامت ε فقط $2\pi i f(a)$ است. این هم با تحلیل فعلی برحسب انتگرال I در معادله (2-4-A) توافق دارد چون در تفاضل دو انتگرال، سهم در امتداد محور حقیقی به واسطه حرکت مخالف خنثی می‌شود به جز برای قسمت نزدیک قطب که در آنجا تفاضل دو نیم دایره (که یکی از بالای قطب و یکی از پایین قطب می‌روند) یک دایره روی قطب است.

پاسخ تمرین‌های منتخب

فصل ۱

$$|\omega=1\rangle \rightarrow \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |\omega=2\rangle \rightarrow \frac{1}{(30)^{1/2}} \begin{bmatrix} -5 \\ -2 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |\omega=4\rangle \rightarrow \frac{1}{(10)^{1/2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 3 \end{bmatrix} \quad (۱) \quad ۱-۸-۱$$

(۲) خیر.

(۱) ۲-۸-۱ بله.

$$|\omega=0\rangle \rightarrow \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |\omega=1\rangle \rightarrow \frac{1}{2^{1/2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |\omega=-1\rangle \rightarrow \frac{1}{2^{1/2}} \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (۲)$$

$$\omega = 0, 0, 2; \lambda = 2, 3, -1.$$

۱۰-۸-۱

فصل ۴

$$1, 0, -1$$

(۱) ۱-۲-۴

$$\langle L_x \rangle = 0, \langle L_x^2 \rangle = 1/2, \Delta L_x = 1/2^{1/2} \quad (۲)$$

$$|L_x=1\rangle \rightarrow \begin{bmatrix} 1/2 \\ 1/2^{1/2} \\ 1/2 \end{bmatrix}, \quad |L_x=0\rangle \rightarrow \begin{bmatrix} -1/2^{1/2} \\ 0 \\ 1/2^{1/2} \end{bmatrix}, \quad (۳)$$

$$|L_x=-1\rangle \rightarrow \begin{bmatrix} 1/2 \\ -1/2^{1/2} \\ 1/2 \end{bmatrix}$$

$$P(L_x=1) = 1/4, \quad P(L_x=0) = 1/2, \quad P(L_x=-1) = 1/4 \quad (۴)$$

$$(۵) \text{ تصویر } |\psi\rangle \text{ روی ویژه فضای } L_z^2 = 1 = \frac{1}{(1/4 + 1/2)^{1/2}} \begin{bmatrix} 1/2 \\ 0 \\ 1/2^{1/2} \end{bmatrix}$$

اگر L_z اندازه گیری شود، $P(L_z = 1) = 1/3$ ، $P(L_z = -1) = 2/3$ ، بله، حالت تغییر می کند.

(۶) خیر. برای دیدن این مطلب توجه کنید که اگر $\delta_1 = \delta_2 = \delta_3 = 0$ باشد، $|\psi\rangle = 1|L_x = 1\rangle$ ، و اگر $\delta_1 = \delta_3 = 0$ و $\delta_2 = \pi$ باشد، $|\psi\rangle = |L_x = -1\rangle$ [جواب قسمت (۳) را ببینید]. بردارهای $|\psi\rangle$ و $e^{i\theta}|\psi\rangle$ از نظر فیزیکی معادلند فقط از این حیث که آنها برای هر مشاهده پذیر توزیع احتمال یکسانی به دست می دهند. این بدین معنی نیست که وقتی بردار $|\psi\rangle$ به عنوان قسمتی از یک ترکیب خطی ظاهر می شود می تواند در یک ضریب فاز دلخواه ضرب شود. برای نمونه در مثال ما فقط می توان گفت که

$$|\psi\rangle' = e^{-i\delta_1}|\psi\rangle = \frac{1}{2}|L_z = 1\rangle + \frac{e^{i(\delta_2 - \delta_1)}}{2^{1/2}}|L_z = 0\rangle + \frac{e^{i(\delta_3 - \delta_1)}}{2}|L_z = -1\rangle$$

با $|\psi\rangle$ از نظر فیزیکی معادل است. اگر چه $|\psi\rangle'$ در بسط خطی ضرایبی متفاوت از $|\psi\rangle$ دارد ولی با $|\psi\rangle$ هم "جهت" است. پس به طور خلاصه همان طور که در محاسبه $P(L_x = 0)$ می توانید ببینید، $\delta_2 - \delta_1$ و $\delta_3 - \delta_1$ از نظر فیزیکی به هم مرتبط هستند اما فاز کل اینگونه نیست.

فصل ۵

$$R = (maV_0)^2 / (\hbar^4 k^2 + m^2 a^2 V_0^2); T = 1 - R \quad (۲-۴-۵ \text{ الف})$$

(ب) $T = (\cosh^2 2ka + a^2 \sinh^2 2ka)^{-1}$ که iK عدد موج مختلط برای $|x| \leq a$ است و $\alpha = (V_0 - 2E) / [4E(V_0 - E)]^{1/2}$.

فصل ۷

$$0, 0, (n+1/2)\hbar/m\omega, (n+1/2)m\omega\hbar, (n+1/2)\hbar \quad (۲-۴-۷)$$

$$(1/2^{1/2})(|0\rangle e^{-i\omega t/2} + |1\rangle e^{-3i\omega t/2}) \quad (۱) \quad ۵-۴-۷$$

$$\langle X(t) \rangle = (\hbar/2m\omega)^{1/2} \cos \omega t, \langle P(t) \rangle = -(m\omega\hbar/2)^{1/2} \sin \omega t \quad (۲)$$

$$\langle \dot{X}(t) \rangle = (i\hbar)^{-1} \langle [X, H] \rangle = \langle P(t) \rangle / m, \langle \dot{P}(t) \rangle = -m\omega^2 \langle X(t) \rangle \quad (۳)$$

با حذف $\langle \dot{P} \rangle$ می‌توانیم به معادله‌ای برای $\langle X(t) \rangle$ برسیم (و برعکس) و آن را با استفاده از مقادیر اولیه $\langle X(0) \rangle$ و $\langle P(0) \rangle$ حل کنیم. مثلاً $\langle X(t) \rangle = \langle X(0) \rangle \cos \alpha t + [\langle P(0) \rangle / m] \sin \alpha t$.

فصل ۱۰

$$3^{-1/2}[|334\rangle + |343\rangle + |433\rangle] \quad ۲-۳-۱۰$$

فصل ۱۲

$$E = -\hbar^2 / 2\mu a_0^2, \quad V = -\hbar^2 / \mu a_0 r \quad ۱-۶-۱۲$$

فصل ۱۳

۲۰۰ MeV تقریباً ۱-۳-۱۳

1 Å تقریباً ۲-۳-۱۳

فصل ۱۴

$$M = \left(\frac{\alpha + \delta}{2}\right) I + \left(\frac{\beta + \gamma}{2}\right) \sigma_x + i \left(\frac{\beta - \gamma}{s}\right) \sigma_y + \left(\frac{\alpha - \delta}{2}\right) \sigma_z \quad ۵-۳-۱۴$$

$$2^{1/4} (\cos \pi/8 + i(\sin \pi/8) \sigma_x). \quad (۱) \quad ۷-۳-۱۴$$

$$2/3 I - 1/3 \sigma_x. \quad (۲)$$

$$\sigma_x \quad (۳)$$

۴-۴-۱۴ تقریباً 2×10^{-9} ثانیه.

$(e\hbar/2mc) \tanh(e\hbar B / 2mckT) k$ ۶-۴-۱۴

۲-۵-۱۴ (۱) تقریباً یک میلیونیم.

10^{10} G. (۲)

1/2, 1/4, 0 ۳-۵-۱۴

$$\left(\frac{1 + \cos \theta}{2}\right)^2 \quad ۴-۵-۱۴$$

فصل ۱۵

$$\begin{aligned} \langle 1\ 1, 1/2(-1/2) | 3/2\ 1/2 \rangle &= (1/3)^{1/2} \\ \langle 1\ 0, 1/2\ 1/2 | 3/2\ 1/2 \rangle &= (2/3)^{1/2} \\ \langle 1\ 1, 1/2(-1/2) | 1/2\ 1/2 \rangle &= (2/3)^{1/2} \\ \langle 1\ 0, 1/2\ 1/2 | 1/2\ 1/2 \rangle &= -(1/3)^{1/2} \end{aligned} \quad (۱) \quad ۲-۲-۱۵$$

$$\begin{aligned} |jm\rangle &= |2, 1\rangle = 2^{-1/2}|m_1=1, m_2=0\rangle + 2^{-1/2}|m_1=0, m_2=1\rangle \\ |2, 0\rangle &= 6^{-1/2}|1, -1\rangle + (\frac{2}{3})^{1/2}|0, 0\rangle + (\frac{1}{6})^{1/2}|1, 1\rangle \\ |1, 1\rangle &= 2^{-1/2}|1, 0\rangle - 2^{-1/2}|0, 1\rangle \\ |1, 0\rangle &= 2^{-1/2}|1, -1\rangle - 2^{-1/2}|1, 1\rangle \\ |0, 0\rangle &= 3^{-1/2}|1, -1\rangle - 3^{-1/2}|0, 0\rangle + 3^{-1/2}|1, 1\rangle \end{aligned} \quad (۲)$$

بقیه یا صفرند و بدیهی یا از معادله (۱۱-۲-۱۵) به دست می آیند.

$$P_+ = \frac{(2L \cdot S)/\hbar^2 + l + 1}{2l + 1}, \quad P_- = \frac{l - (2L \cdot S)/\hbar^2}{2l + 1} \quad ۶-۲-۱۵$$

فصل ۱۶

$$E(a_0) = 10E_0/\pi^2 \quad ۲-۱-۱۶$$

$$-ma_0^2 V_0^2 / \pi \hbar^2 \quad ۳-۱-۱۶$$

$$E(a_0) = \frac{1}{2} \hbar \omega \left(\frac{12}{\pi}\right)^{1/2} \quad ۴-۱-۱۶$$

۱-۲-۱۶ تقریباً 1.5×10^{17} ثانیه یا 10^{10} سال.

جدول ثابت‌ها

$$\hbar c = 1973.3 \text{ eV}\text{\AA}$$

$$\alpha = e^2 / \hbar c = 1/137.04$$

$$mc^2 = 0.511 \text{ MeV} \quad (m \text{ is the electron mass})$$

$$Mc^2 = 938.28 \text{ MeV} \quad (M \text{ is the proton mass})$$

$$a_0 = \hbar^2 / me^2 = 0.511 \text{\AA}$$

$$e\hbar / 2mc = 0.58 \times 10^{-8} \text{ eV/G} \quad (\text{Bohr magneton})$$

$$k = 8.62 \times 10^{-5} \text{ eV/K}$$

$$kT = 1/40 \text{ eV at } T = 300 \text{ K} \quad (\text{room temperature})$$

$$1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-12} \text{ erg}$$

نکاتی در مورد هیدروژن

در حالت پایه،

$$v/c \equiv \beta = \alpha$$

$$E_1 = -T = -\frac{1}{2}mv^2 = -\frac{1}{2}mc^2\alpha^2$$

$$mv\alpha_0 = \hbar$$

$$E_n = E_1 / n^2, \text{ در حالت‌های بالاتر،}$$