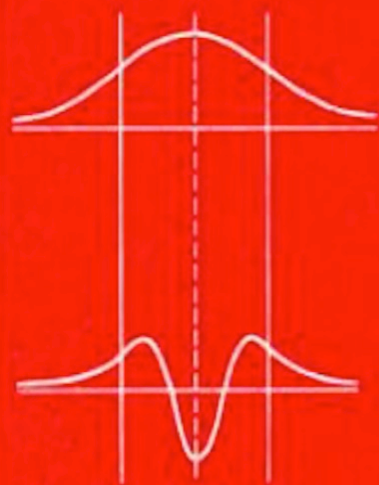




# فیزیک کوانتومی

---



اسٹیون گازیورویچ

ترجمہ محی الدین شیخ الاسلامی

# فیزیک کو انتومی

استیون گازیورویچ

ترجمہ محی الدین شیخ الاسلامی

مرکز نشر دانشگاهی، تهران



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

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

فهرست‌نویسی پیش از انتشار کتابخانه ملی جمهوری اسلامی ایران

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

فهرست‌نویسی بر اساس اطلاعات فیبا.

عنوان اصلی:  
Quantum Physics, 2nd ed. 1996.  
این کتاب با ناشران و مترجمان مختلف در سالهای متفاوت نیز منتشر شده است.  
واژه‌نامه.  
کتابنامه.  
نمایه.

چاپ پنجم: ۱۳۸۴.

۱. کوانتوم. الف. شیخ الاسلامی، محی الدین، مترجم. ب. مرکز نشر دانشگاهی. ج. عنوان.

۵۳۰/۱۲

QC۱۷۴/۱۲/گ۲ف ۹۹

۷۸ - ۱۵۵۰۶ م

کتابخانه ملی ایران

# بسم الله الرحمن الرحيم

## فهرست

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



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

## پیشگفتار و برایش اول

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

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

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

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

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

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

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

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

استیون گازیورویچ

## پیشگفتار ویرایش دوم

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

### آموزش

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

### کاربردها

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

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

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

## سیاسگزاری

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

استیون گازیروویچ



# محدودیت‌های فیزیک کلاسیک

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

---

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

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

همچنین مراجعه کنید به

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

## تابش جسم سیاه تابش جسم سیاه کلاسیک

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

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

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

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

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

کار ویلهلم وین حاصل شد که، باز هم با استفاده از استدلالهای کلی<sup>۲</sup>، نشان داد چگالی انرژی باید به صورت زیر باشد

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

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

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

قانون وین به صورت زیر در می آید

$$u(\nu, T) = \nu^2 g\left(\frac{\nu}{T}\right) \quad (۴-۱)$$

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

۱. با داشتن توزیع طیفی تابش جسم سیاه در یک دمای معین، می توان توزیع در هر دمای دیگر را با استفاده از روابط بالا به دست آورد.
۲. اگر تابع  $f(x)$  — یا معادل آن، تابع  $g(x)$  — به ازای یک مقدار  $x > 0$  بیشینه ای داشته باشد، طول موج  $\lambda_{(\max)}$  که در آن چگالی انرژی و در نتیجه توان گسیل بیشینه است با رابطه زیر داده می شود

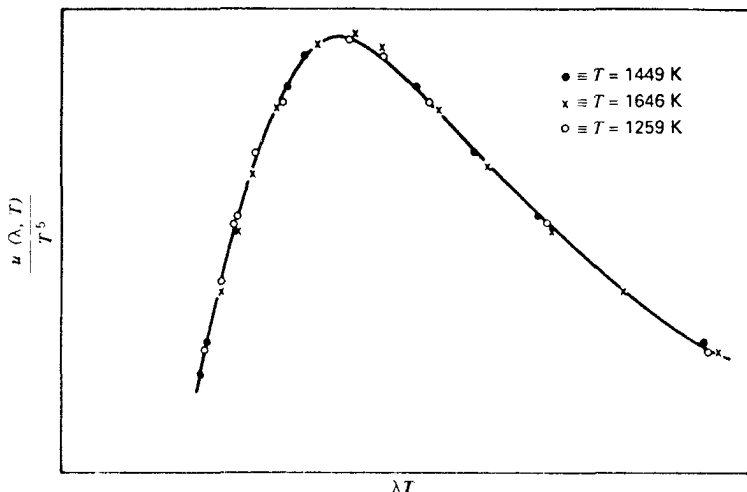
$$\lambda_{(\max)} = \frac{b}{T} \quad (۵-۱)$$

که در آن  $b$  یک ثابت جهانی است. مقدار این ثابت، بنابه آزمایشهای اوتولومر و ای پرینگنرهایم (۱۸۹۷)، برابر است با  $b = 0.2898 \text{ cm K}$ .

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

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





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

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

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

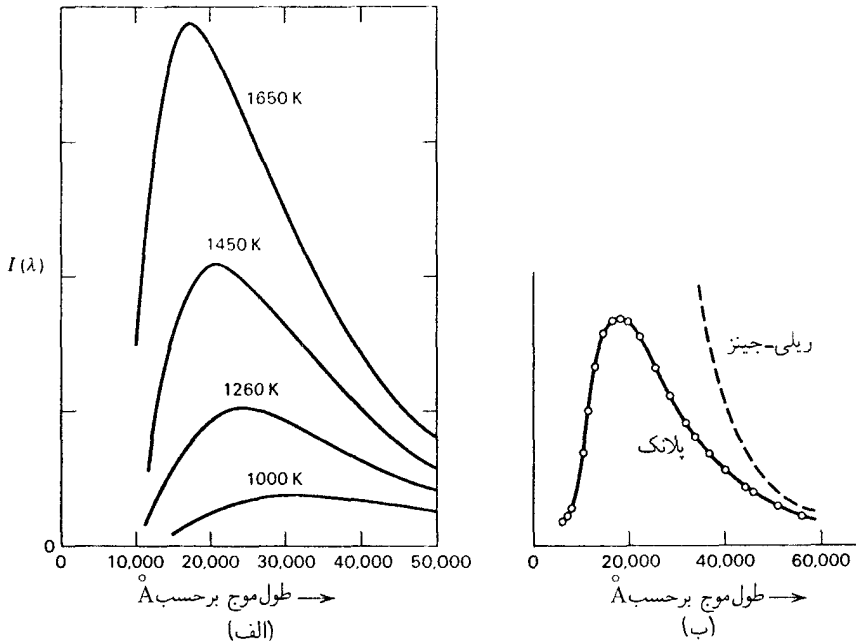
و بسیار عجیب است که این تابع، که حاوی دو پارامتر قابل تنظیم است، با داده‌های بسامد زیاد (طول موج کم) کاملاً جور در می‌آید، اما با بعضی از مفاهیم بسیار کلی فیزیک کلاسیک سازگار نیست. جان ویلیام استروت ریلی، در سال ۱۹۰۰، نتیجهٔ زیر را به دست آورد

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

که در آن ثابت بولتزمن  $(۱٫۳۸ \times ۱۰^{-۱۷} \text{erg/K})$  و  $c$  سرعت نور است،  $(۳ \times ۱۰^{۱۰} \text{cm/s})$  است. محاسبهٔ فرمول ۷-۱ شامل دو قسمت بود: (۱) تعیین انرژی میانگین به‌ازای هر درجهٔ آزادی برای یک دستگاه دینامیکی در حال تعادل گرمایی بر مبنای قانون کلاسیک همپاری انرژی،<sup>۴</sup> و (۲) تعیین تعداد مدها (یعنی درجه‌های آزادی) برای تابش الکترومغناطیسی محبوس در یک کاواک با بسامدی در بازهٔ  $(\nu, \nu + d\nu)$ .<sup>۵</sup>

۴. قانون همپاری پیش‌بینی می‌کند که انرژی میانگین به‌ازای هر درجهٔ آزادی  $kT/۲$  است. برای یک نوسانگر — و مدهای میدان الکترومغناطیسی نوسانگرهای هماهنگ ساده هستند — یک سهم  $kT/۲$  از انرژی جنبشی با یک سهم مساوی از انرژی پتانسیل جمع می‌شود و نتیجه  $kT$  است.

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



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

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

### توزیع پلانک و کوانتوم انرژی

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

$$u(\nu, T) = \frac{\lambda \pi^4 h^3}{15 \epsilon^3} \frac{\nu^3}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad (1-8)$$

در این فرمول،  $h$ ، ثابت پلانک، یک پارامتر قابل تنظیم است که معلوم شد مقدار آن برابر است با  $6.626 \times 10^{-27} \text{ erg s}$ . این قانون به‌ازای  $1 \ll h\nu/kT$  به‌صورت قانون ریلی-جینز در می‌آید،

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

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

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

$$\cong \frac{\lambda\pi h}{c^3} \nu^3 e^{-h\nu/kT} \quad (9-1)$$

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

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

$$= \frac{\lambda\pi\nu^3}{c^3} kT \frac{h\nu/kT}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad (10-1)$$

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

$$U(T) = \frac{\lambda\pi h}{c^3} \int_0^\infty d\nu \frac{\nu^3}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

$$= \frac{\lambda\pi h}{c^3} \left(\frac{kT}{h}\right)^3 \int_0^\infty \frac{(h\nu/kT)^3 d(h\nu/kT)}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad (11-1)$$

$$= \frac{\lambda\pi k^3}{h^3 c^3} T^3 \int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x - 1}$$

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

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

6.  $\int_0^\infty dx x^3 (e^x - 1)^{-1} = \int_0^\infty dx x^3 e^{-x} \sum_{n=0}^\infty e^{-nx} = \sum_{n=0}^\infty \int_0^\infty dx x^3 e^{-(n+1)x} = \sum_{n=0}^\infty \frac{1}{(n+1)^4} \int_0^\infty dy y^3 e^{-y} = 6 \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^4} = \frac{\pi^4}{15}$

که در آن  $a = 7.56 \times 10^{-16} \text{ erg/cm}^2 \text{K}^4$ . صورت کلی ۱-۱۲ الف مدتها قبل با استفاده از استدلال ترمودینامیکی به دست آمده بود. این نتیجه را می‌توان به صورت توان گسیل کل جسم سیاه نیز نوشت:

$$E(T) = \sigma T^4 \quad (12-1 \text{ ب})$$

که در آن  $\sigma = 5.67 \times 10^{-8} \text{ erg/cm}^2 \text{s K}^4$ .

انحراف از قانون همپاری محض کاملاً هم غیرمنتظره نبود: یک پیامد قانون همپاری قانون گرمای ویژه دولون-پتی بود که بنابه آن حاصلضرب وزن اتمی (یا مولکولی) و گرمای ویژه برای تمام جامدها مقداری ثابت است. اما انحرافهایی از پیش‌بینی‌های دولون-پتی از سال ۱۸۷۲ به بعد مشاهده شدند.<sup>۷</sup> این انحرافها نشان می‌دادند که گرمای ویژه در دماهای کم کاهش می‌یابد.<sup>۸</sup>

موفقیت بی‌چون و چرای رابطه ۱-۸ باعث شد که پلانک به جستجوی منشأ آن پردازد و پس از دو ماه به این نتیجه رسید که می‌توان آن را با این فرض به دست آورد که انرژی وابسته به هر مد میدان الکترومغناطیسی به‌طور پیوسته (با مقدار میانگین  $kT$ ) تغییر نمی‌کند بلکه مضرب درستی از یک کوانتوم انرژی کمیته  $\epsilon$  است. در این شرایط، با استفاده از توزیع احتمال بولترمن برای دستگاهی در تعادل گرمایی در دمای  $T$

$$P(E) = \frac{e^{-E/kT}}{\sum_E e^{-E/kT}} \quad (13-1)$$

انرژی میانگین وابسته به هر مد را محاسبه می‌کنیم:

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

۷. بنابه قانون همپاری، مجموعه‌ای از  $N$  نوسانگر — و شبکه‌ای از آنها با نیروهای کشسان بین آنها را می‌توان چنین در نظر گرفت — دارای انرژی  $3NkT$  است که در آن ضریب ۳ ناشی از این است که برخلاف نوسانگرهای مربوط به میدان تابش در کاواک که دویعدی هستند، در یک جسم جامد نوسانگرها سه‌بعدی‌اند. گرمای ویژه برای یک مول از مشتق‌گیری نسبت به  $T$  و قرار دادن  $N = N_0$ ، عدد آووگادرو، به دست می‌آید:  $k = 3R$ ،  $k = 3N_0$  که در آن  $R = 8.31 \times 10^7 \text{ erg/K}$ .

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

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

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

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

و تعداد مدها را تغییر ندهیم.

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

$$h\nu = h \frac{c}{\lambda} = \frac{6.63 \times 10^{-27} \times 3.00 \times 10^8}{6 \times 10^{-5}} \simeq 3.3 \times 10^{-12} \text{ erg}$$

و در نتیجه تعداد کوانتومهای نور با این طول‌موج که به‌عنوان مثال از یک چشمهٔ ۱۰۰ واتی گسیل می‌شوند برابر است با

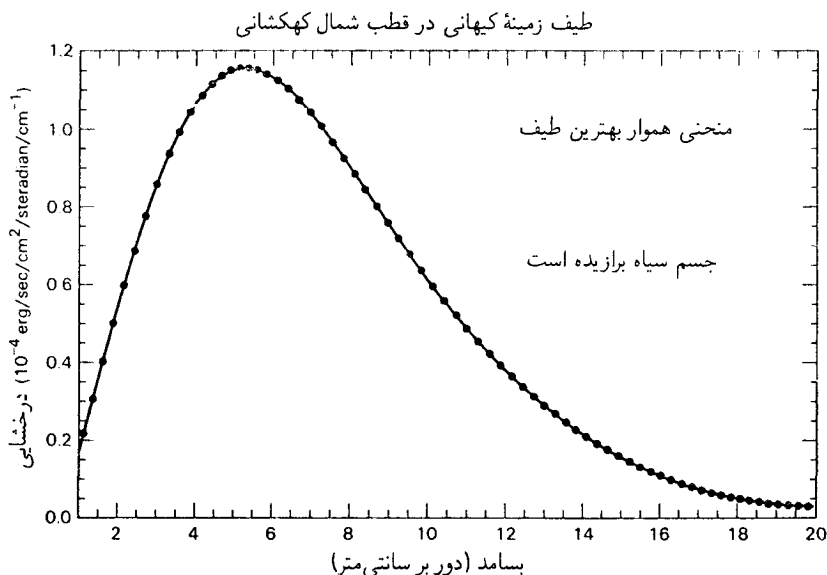
$$N = \frac{100 \times 10^7}{3.3 \times 10^{-12}} \simeq 3 \times 10^{20} \text{ quanta/s}$$

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

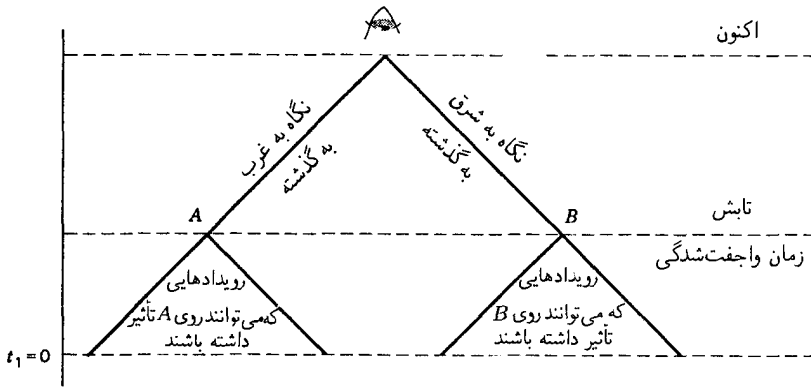
۹. به‌ازای یک بسامد معین  $\nu$ ، کوانتومها می‌توانند با هر تعداد درست موجود باشند و در نتیجه انرژی می‌تواند مقادیر  $nh\nu$  با  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$  داشته باشد.

## تابش میکروموج کیهانی زمینه

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



شکل ۳-۱ نتایج اندازه‌گیریهای کوبه روی تابش زمینه.



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

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

## اثر فوتوالکتریک

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

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

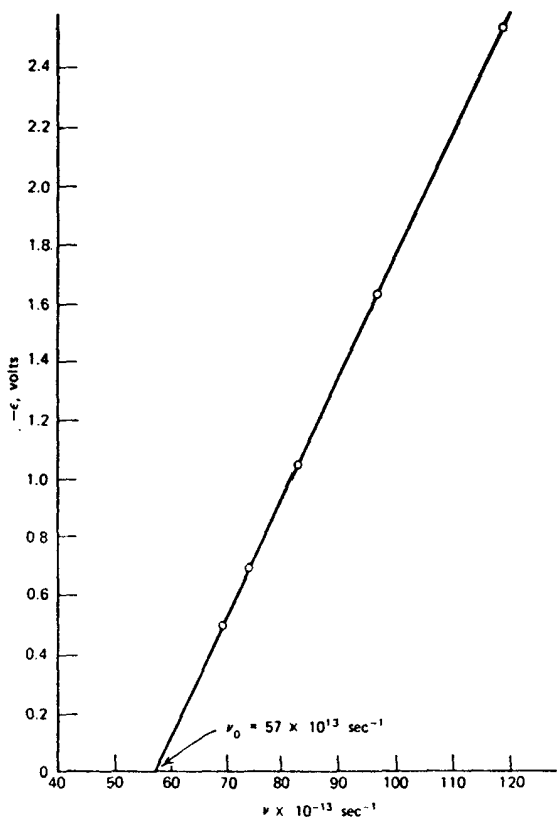
۱. وقتی یک صفحه فلزی صیقلی شده در معرض نور قرار می‌گیرد ممکن است الکترون گسیل کند،<sup>۱۰</sup> اما هیچ یون مثبتی گسیل نمی‌کند.
۲. گسیل الکترون از این صفحه به بسامد نور بستگی دارد. آستانه‌ای وجود دارد که به طور کلی از یک فلز به فلز دیگر فرق می‌کند: نور به شرطی می‌تواند جریان فوتوالکتریک تولید کند که بسامدش بزرگتر از بسامد آستانه فلز باشد.
۳. بزرگی این جریان، اگر تولید شود، متناسب با شدت چشمه نور است.
۴. انرژی فوتوالکترونها مستقل از شدت چشمه نور است اما با بسامد نور فرودی به صورت خطی تغییر می‌کند.

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

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

<sup>۱۰</sup> این را می‌توان با یک آزمایش  $e/m$  اثبات کرد.





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

سرعت الکترون  $v$  و بسامد نور  $\nu$  برقرار باشد

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

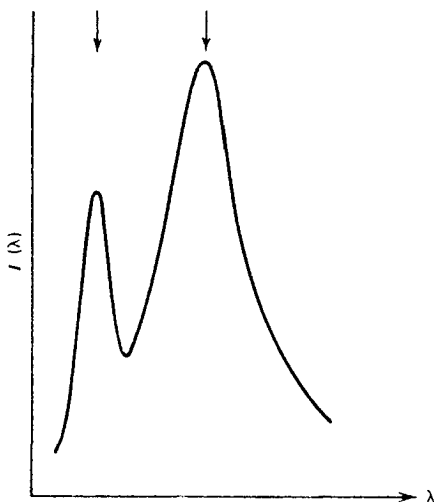
این فرمول متضمن وجود آستانه و رابطه خطی بین انرژی جنبشی الکترون و بسامد است. تناسب میان جریان و شدت چشمه را نیز می‌توان برحسب این کوانتومهای نور، که بعداً فوتون نامیده شدند، توضیح داد: چشمه نور هر چه شدیدتر باشد فوتونهای بیشتری گسیل می‌کند، و این فوتونها به نوبه خود می‌توانند الکترونها را بیشتری آزاد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

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

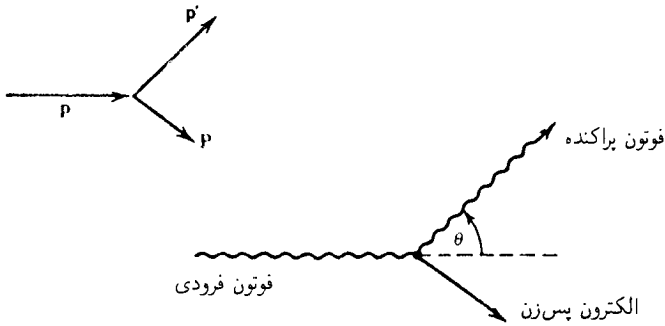
از ذره‌ها رفتار می‌کند، و ثانیاً این "ذرات" می‌توانند منفرداً عمل کنند، و در نتیجه می‌توان وجود یک فوتون منفرد را پذیرفت و خواص آن را بررسی کرد. معلوم شده است که تابع کار  $W$  از مرتبه چند الکترون ولت است ( $1\text{eV} = 1.6 \times 10^{-12} \text{erg}$ )، و این نتیجه را می‌توان به خواص دیگر فلزات مربوط کرد.

## اثر کامپتون

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



شکل ۱-۶ طیف تابش پراکنده از کربن، نشان‌دهنده خط تغییر یافته در  $0.7078 \text{ \AA}$  (که طول موج تابش اولیه است) در سمت چپ و خط انتقال یافته در  $0.7214 \text{ \AA}$  در سمت راست.



شکل ۱-۷ سینماتیک اثر کامپتون.

نسبیتی، نشان می‌دهیم که

$$p = \frac{h\nu}{c} \quad (۱۷-۱)$$

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

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

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

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

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

$$E = pc \quad (۲۰-۱)$$

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

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

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}' + \mathbf{P} \quad (21-1)$$

که از آن به دست می‌آوریم

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

رابطه پایستگی انرژی به صورت زیر است

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

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

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

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

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

یا

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

که در آن  $\theta$  زاویه پراکندگی فوتون است. بنابراین،

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

یا، هم‌ارز آن

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

اندازه‌گیری‌های مؤلفه تغییر یافته با این پیش‌بینی کاملاً توافق دارند. خط تغییر نیافته ناشی از پراکندگی از تمام اتم است؛ اگر به جای  $m$  جرم اتم را قرار دهیم، انتقال طول موج بسیار کوچک می‌شود زیرا

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

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

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

### خواص موجی و پراش الکترون

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

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

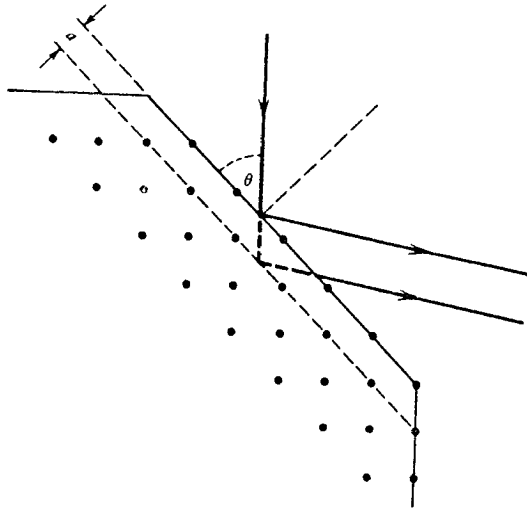
که در آن  $h$  ثابت پلانک و  $p$  تکانهٔ ذره است. کار دوبروی توجه بسیاری را به‌خود جلب کرد، و اشخاصی بر آن شدند تا با مشاهدهٔ پراش الکترون آن را تأیید کنند.<sup>۱۲</sup> مشاهدهٔ تجربی این اثر در آزمایش‌های کلینتون جوزف دیویسون و گرمر صورت گرفت. دیویسون و گرمر دریافتند که در پراکندگی الکترونها از سطح یک بلور، پراکندگی ممتازی در بعضی راستاها دیده می‌شود.

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

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

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

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



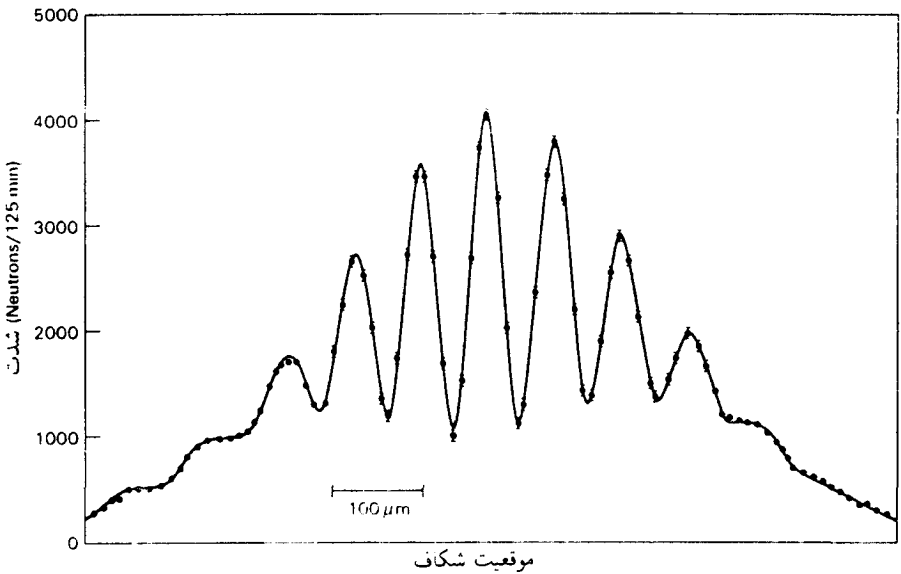
شکل ۸-۱ طرح کلی هندسه پراکندگی الکترون.

نقش تداخلی را که دیویسون و گرمر در پراکندگی الکترون مشاهده کردند می‌توان با توجه به رابطه ۱-۲۷ به فرمول بالا مربوط کرد. این تأیید گام مهمی در تکوین مکانیک موجی بود.

آزمایشهای پراش ذره از آن پس با باریکه‌های مولکول هیدروژن و هلیوم، و با نوترونهای کند (شکل ۹-۱)، صورت گرفته‌اند. پراش نوترون مخصوصاً در مطالعه ساختار بلورها مفید است. برای اینکه تصویری از نوع انرژی‌هایی که برای این آزمایشهای پراش لازم‌اند به دست آوریم، متذکر می‌شویم که فاصله‌های بلوری از مرتبه آنگستروم هستند. این ثابت توری در آزمایش دیویسون-گرمر، که در آن از نیکل استفاده شد، برابر بود با  $a = ۲۱۵ \text{ \AA}$ . بنابراین،  $\lambda$  از مرتبه  $۱۰^{-۸} \text{ cm}$  است، و در نتیجه  $p = h/\lambda \cong ۶۶۶ \times ۱۰^{-۱۹} \text{ gm cm/s}$ . بدین ترتیب، انرژی جنبشی الکترون برابر است با  $p^2/2m_e = (۶۶۶ \times ۱۰^{-۱۹})^2 / (۲ \times ۰.۹ \times ۱۰^{-۲۷}) \cong ۲.۵ \times ۱۰^{-۱۰} \text{ ergs}$  داریم

$$p^2/2m_e = (m_e/m_n) \times (\text{انرژی الکترون}) \cong (۱/۱۸۳۶) \times ۲.۵ \times ۱۰^{-۱۰} \text{ ergs} \\ \cong ۱.۳ \times ۱۰^{-۱۲} \text{ ergs}$$

این انرژیها برحسب واحد مناسبتر الکترون ولت به ترتیب تقریباً برابر با  $۱۶۰ \text{ eV}$  و  $۰.۰۸ \text{ eV}$  هستند. در یک مقیاس ماکروسکوپی، جنبه‌های موجی ذره‌ها را نمی‌توان مشاهده کرد. طول موج دوپروی برای قطره‌ای به اندازه  $۱ \text{ mm}$  که با سرعت  $۱ \text{ cm/s}$  حرکت می‌کند برابر است با  $۱.۰^{-۲۲} \text{ cm}$  چون "اندازه" پروتون حدود  $۱.۰^{-۱۲} \text{ cm}$  است.



شکل ۹-۱. نقش پراش دوشکافی با طول موج  $18.5 \text{ \AA} \approx 13.8 \text{ \AA}$

است، بدیهی است که هیچ راهی برای مشاهده خواص موجی جسمی که اندازه آن بسیار بیشتر از  $10^{-4} \text{ cm}$  است وجود ندارد. در مورد خواص ذره‌ای تابش، این کوچکی  $h$  است که ویژگی کلاسیک را تعیین می‌کند، به این معنی که جنبه‌های دوگانه تنها وقتی ظاهر می‌شوند که حاصلضرب تکانه و اندازه از مرتبه  $h$  باشد. خواهیم دید که صورتبندی مکنک کوانتومی بن وضعیت  $r$  به خوبی توصیف می‌کند.

## اتم بور

### الگوی سیاره‌ای رادرفورد

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

۱۳. اعیاس مجاز از مقاله

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

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

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

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

### اصول موضوعه بور

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

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

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



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

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

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

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

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

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

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

و

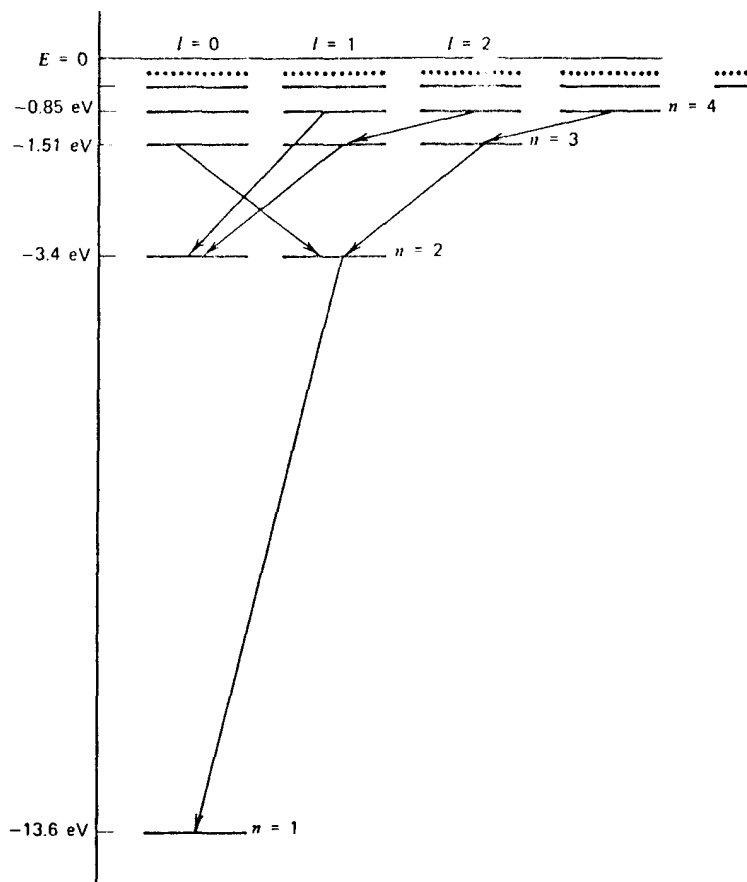
$$r = \frac{1}{4\pi^2} \frac{n^2 h^2}{Ze^2 m} \quad (34-1)$$

انرژی برابر است با

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

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

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



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

و از اینرو آن‌را با یک نماد خاص نشان می‌دهیم:

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

ثانیاً، برای اینکه رابطه‌های مربوط به انرژی ساده بمانند، به جای  $\nu$  از بسامد زاویه‌ای  $\omega$  استفاده می‌کنیم:

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

بنابراین، ۱۳-۱ به صورت زیر در می‌آید

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

همچنین، کوانتوم تابش حامل انرژی زیر است

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

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

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

بنابراین، رابطه دو بروی به صورت زیر نوشته می‌شود

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

شرط کوانتشی تکانه زاویه‌ای بور به صورت زیر در می‌آید

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

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

$$\alpha = \frac{e^2}{hc} = \frac{1}{137,03597} \quad (43-1)$$

که تقریباً  $1/137$  است. برحسب این کمیت‌های جدید، رابطه‌های ساده‌تر زیر را به دست می‌آوریم

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

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

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

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

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

نتیجه می‌گیریم که

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

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

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

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

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

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

طول موج متناظر با آن برابر است با

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

که در ناحیه فرابنفش قرار دارد.

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

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

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

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

## اصل تطابق

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

حرکتش تابش کند، یعنی با بسامد

$$\nu_{c1} = \frac{v}{2\pi r} = \frac{Z\alpha c}{n} \frac{Z\alpha mc}{2\pi n^2 h} = \frac{(Z\alpha)^2 mc^2}{2\pi h} \frac{1}{n^2} \quad (50-1)$$

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

$$\nu = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{1}{2\pi h} \frac{mc^2}{2} (Z\alpha)^2 \left[ \frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2} \right] \quad (51-1)$$

که به ازای  $1 \gg n$  به  $\nu_{c1}$  میل می‌کند. توجه کنید که این نتیجه بسیار مهم است، زیرا تنها بسامد وابسته به گذار  $n \rightarrow n+1$  است که با بسامد اصلی کلاسیک متناظر است. تابش وابسته به جهش  $n \rightarrow n+2$ ، حتی در حد  $n$  بزرگ، همتای کلاسیک ندارد. در فصل ۲۱ خواهیم دید که در مکانیک کوانتومی برای "مدارهای دایره‌ای" گذارهای  $n \rightarrow n+1$  وجود ندارند.

## مسئله ذره-موج

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

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

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

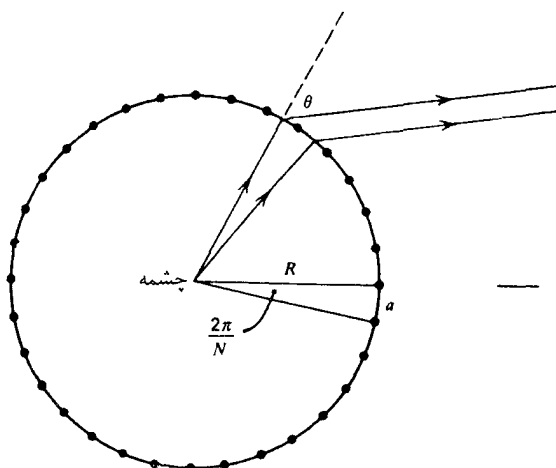
”۲“، می‌توانیم فوتونها را به دو دسته، وابسته به دو شکاف، تقسیم کنیم. برای دسته اول، می‌توانستیم شکاف ۲ را ببندیم، زیرا فوتون از آن نمی‌گذشت؛ برای دسته دوم، می‌توانستیم شکاف ۱ را ببندیم. بنابراین، اگر آزمایش را با یک شکاف بسته در نیمی از زمان، و شکاف بسته دیگر در نیمه دیگر زمان، تکرار کنیم انتظار داریم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

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

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

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

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



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

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

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

یعنی

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

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

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

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

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

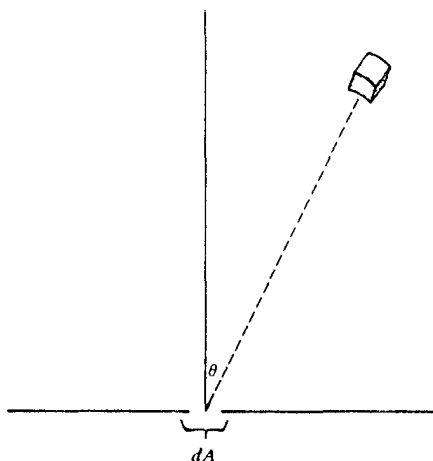


یعنی، تکانه زاویه‌ای کوانتیده است! عامل  $N$ ، چنانکه بعداً روشن خواهد شد، به این واقعیت مربوط می‌شود که اگر قفس را به اندازه زاویه  $2\pi/N$  بچرخانیم تغییری در وضعیت آن داده نمی‌شود. در سال ۱۹۲۵ نظریه جدید مکانیک کوانتومی با کارهای ورنر هایزنبرگ، ماکس بورن، پاسکال یوردان، اروین شرودینگر، و پل دیراک آغاز شد. این نظریه راهی بود برای آشتی مفاهیم متعارض به‌بهای کنار گذاشتن مقداری از تفکرات کلاسیک. یکی از لذت‌های دانشجوی فیزیک بودن همین توانایی پی بردن به این نظریه زیبا و پیشرفته‌های عظیمی است که این نظریه در درک ما از خواص ماده به‌وجود آورده است.

## مسائل

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

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



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

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

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

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

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

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

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

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

۸-۱ الکترونی با انرژی  $100 \text{ MeV}$  با فوتونی به طول موج  $10^7 \text{ \AA}$  ( $3 \times 10^7$ ) (مربوط به زمینه جهانی تابش جسم سیاه) برخورد می‌کند. بیشترین انرژی که این الکترون از دست می‌دهد چقدر است؟  
۹-۱ باریکه‌ای از پروتهای  $x$  توسط الکترونها ساکن پراکنده می‌شود. اگر طول موج پروتهای  $x$  که در زاویه  $60^\circ$  نسبت به محور باریکه پراکنده شده اند  $35 \text{ \AA}$  باشد، انرژی پروتهای  $x$  باریکه را به دست آورید.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

۱-۲۰ مولکول‌ها گاهی مانند چرخنده‌ها رفتار می‌کنند. اگر طیفهای دورانی با تابشی مشخص شوند که طول موج آن از مرتبه  $10^7 \text{ \AA}$  است و این مشخصه برای برآورد فاصله‌های بین اتمی در مولکول مانند  $\text{H}_2$  به کار رود، چه نوع فاصله‌هایی را (برحسب  $\text{Å}$ ) به دست می‌آوریم.

### مراجع

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

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

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

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

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

## بسته‌های موج و رابطه‌های عدم قطعیت

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

### بسته‌های موج جایگزیده

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

۱. رهیافت دیگری را می‌توان در کتاب زیر یافت

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

به عنوان مثال، تابعی را در نظر بگیرید که با رابطه زیر تعریف می‌شود

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk g(k) e^{ikx} \quad (1-2)$$

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

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

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

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

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

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\alpha k^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad (3-2)$$

به دست می‌آوریم

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

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

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

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

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

پهنای این بسته موج را می‌توان  $2\sqrt{2\alpha}$  گرفت، زیرا تابع به  $1/e$  مقدار قله خود کاهش می‌یابد. پهنای  $|f(x)|^2$  و  $|g(k)|^2$  همبسته‌اند. در مثال بالا، مجذور  $g(x)$  تابعی است که حول  $k = 0$  به اوج می‌رسد و پهنای آن  $2/\sqrt{2\alpha}$  است. در اینجا یک دوجانبگی وجود دارد: تابعی که برحسب  $x$  شدیداً جایگزیده است برحسب  $k$  گسترده است، و برعکس. حاصلضرب این دو "پهنا" برابر است با

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

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

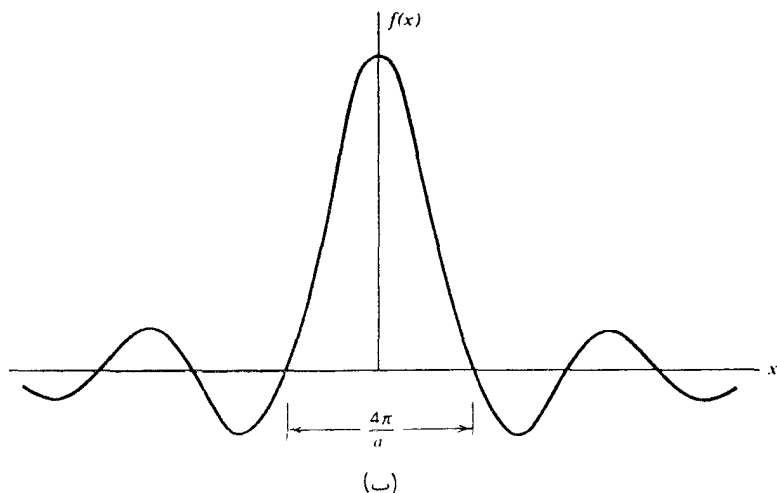
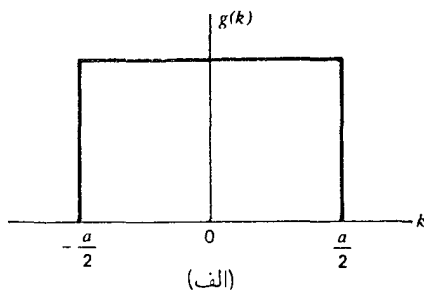
$$\Delta x \Delta k \gtrsim O(1) \quad (7-2)$$

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

## انتشار بسته‌های موج

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

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



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

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

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

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

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



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

$$f(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk g(k) e^{ik(x-ct)} = f(x-ct) \quad (10-2)$$

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

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

$$f(x, t) = \int dk g(k) e^{ikx - i\omega(k)t} \quad (11-2)$$

فعلاً نمی‌دانیم تابع  $\omega(k)$  چه صورتی دارد، اما می‌کشیم آنرا با این شرط تعیین کنیم که  $f(x, t)$  شبیه یک ذرهٔ کلاسیک باشد که آزادانه حرکت می‌کند.

بستهٔ موجی را در نظر می‌گیریم که در فضای  $k$ ، حول مقدار  $k_0$ ، شدیداً جایگزیده است. این بستهٔ موج متناظر با انتخاب تابعی مانند ۲-۲ با ۱-۱ بزرگ است. البته این بستهٔ موج در فضای  $x$  دقیقاً جایگزیده نیست، اما محاسبهٔ ما آسانتر می‌شود، و علاوه بر این می‌خواهیم حدسه‌های هوشمندانه‌ای بزنیم. چون سهم عمدهٔ انتگرال ۱۱-۲ بیشتر در اطراف  $k = k_0$  است،  $\omega(k)$  را حول  $k_0$  بسط می‌دهیم و فرض می‌کنیم  $\omega(k)$  برحسب  $k$  به‌سرعت تغییر نمی‌کند. بنابراین، می‌توان نوشت

$$\omega(k) \approx \omega(k_0) + (k - k_0) \left( \frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} + \frac{1}{2} (k - k_0)^2 \left( \frac{d^2\omega}{dk^2} \right)_{k_0} \quad (12-2)$$

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

$$\left( \frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} = v_g \quad (13-2)$$

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

$$\frac{1}{2} \left( \frac{d^2 \omega}{dk^2} \right)_{k_0} = \beta \quad (14-2)$$

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

$$\begin{aligned} f(x, t) &= e^{ik_0 x - i\omega(k_0)t} \int_{-\infty}^{\infty} dk' e^{-\alpha k'^2} e^{ik'(x - v_g t)} e^{-ik'' \beta t} \\ &= e^{ik_0 x - i\omega(k_0)t} \int_{-\infty}^{\infty} dk' e^{ik'(x - v_g t)} e^{-(\alpha + i\beta t)k'^2} \end{aligned} \quad (15-2)$$

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

$$f(x, t) = e^{i[k_0 x - \omega(k_0)t]} \left( \frac{\pi}{\alpha + i\beta t} \right)^{1/2} e^{-[(x - v_g t)^2 / 4(\alpha + i\beta t)]} \quad (16-2)$$

مجذور قدرمطلق این تابع به صورت زیر است

$$|f(x, t)|^2 = \left( \frac{\pi^2}{\alpha^2 + \beta^2 t^2} \right)^{1/2} e^{-[\alpha(x - v_g t)^2 / 2(\alpha^2 + \beta^2 t^2)]} \quad (17-2)$$

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

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

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

## از بسته موج تا معادله شرودینگر

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

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{p}{m} \quad (18-2)$$

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

$$E = h\omega \quad (19-2)$$

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

$$\omega = \frac{p^2}{2mh} \quad (20-2)$$

آنگاه سازگاری ایجاب می‌کند رابطه زیر برقرار باشد

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{h} \quad (21-2)$$

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

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi h}} \int dp \phi(p) e^{i(px - Et)/h} \quad (22-2)$$

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

$$\begin{aligned} ih \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi h}} \int dp \phi(p) E e^{i(px - Et)/h} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi h}} \int dp \phi(p) \frac{p^2}{2m} e^{i(px - Et)/h} \\ &= \frac{h^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} \end{aligned} \quad (23-2)$$

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

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

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

## رابطه‌های عدم قطعیت

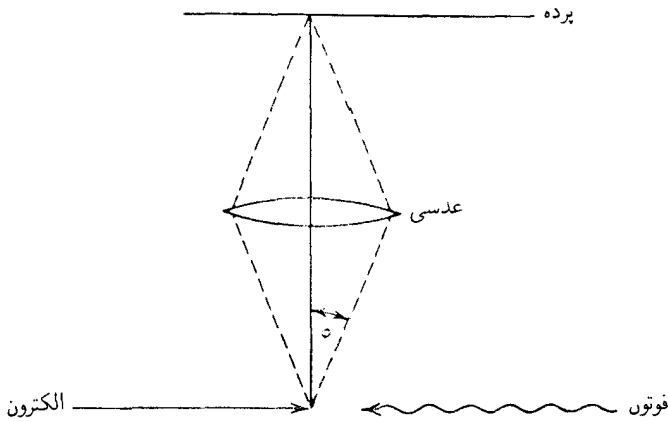
یکی از مهمترین مشاهد‌های کیفی که در بحث بسته موج داشتیم رابطه دوجانبگی میان پهنای در فضاهای  $x$  و  $p$  است:

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

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

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

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



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

تنها برای دستگاه‌های میکروسکوپی کارایی نداشته باشند. به‌عنوان مثال، برای ذره غباری به جرم  $10^{-4}$  و سرعت  $10^4 \text{ cm/s}$ ، عدم قطعیت یک قسمت در میلیون در حاصلضرب آنها ایجاب می‌کند که  $\Delta p \sim 10^{-6} \text{ gcm/s}$  و در نتیجه  $\Delta x \sim 10^{-21} \text{ cm}$ ، که  $10^8$  بار کوچکتر از شعاع پروتون است! این وضعیت برای الکترونی که در یک مدار بور حرکت می‌کند صادق نیست. اگر بگیریم  $\Delta p \sim p \sim m c \alpha$ ، آنگاه  $\Delta x \sim \hbar / m c \alpha$  که از مرتبه بزرگی شعاع مدارهای بور است. اکنون چند آزمایش ذهنی را بررسی می‌کنیم که در آنها به تفصیل نشان خواهیم داد چگونه دوگانگی موج-ذره نمی‌گذارد رابطه ۲-۲۵ نقض شود.

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

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

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

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

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

بنابراین،

$$\Delta p_x \Delta x \sim 2 \frac{h\nu}{c} \sin \phi \frac{\lambda}{\sin \phi} \sim 4\pi\hbar \quad (28-2)$$

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

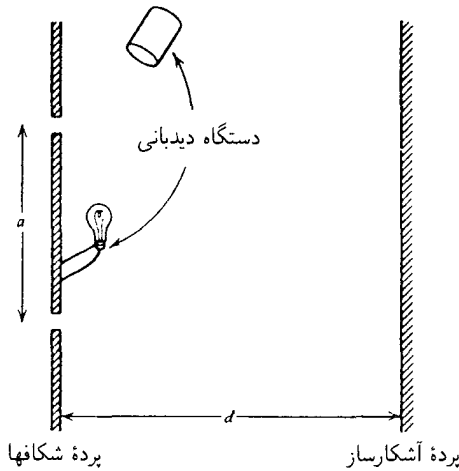
(ب) آزمایش دوشکافی. در فصل ۱ دیدیم که نقش تداخلی که در عبور الکترونها<sup>۵</sup> از دو شکاف مشاهده می‌شود منطقاً با توانایی ما برای دانستن اینکه الکترون از کدام شکاف عبور می‌کند ناسازگار است، زیرا این آگاهی ایجاب می‌کند که این نقش نتیجه برهم‌نهمش الکترونها<sup>۵</sup> باشد که از این یا آن شکاف آمده‌اند.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

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

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

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

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



شکل ۳-۲ آزمایش دوشکافی با دیدبان.

نادقیق است. در نتیجه

$$\frac{\Delta p_y}{p} > \frac{2}{a} \frac{h}{p} = \frac{2\lambda}{a} \quad (31-2)$$

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

$$\Delta p_y \Delta y > h \quad (32-2)$$

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

$$\Delta x \ll R_n - R_{n-1} \cong \frac{2hn}{\alpha mc} \quad (33-2)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

### برآوردهای مرتبه بزرگی

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

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

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



از اینجا می‌توان انرژی را برحسب  $r$  بیان کرد:

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

مقدار کمینه انرژی از رابطه زیر به دست می‌آید

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

بنابراین،

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

و مقدار  $E$  متناظر برابر است با

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

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

به عنوان مثالی دیگر، مسئله نیروهای هسته‌ای را در نظر بگیرید. برد این نیروها از مرتبه یک فرمی، یعنی  $10^{-12}$  cm است. این ایجاب می‌کند که  $h/r \sim 10^{-14}$  g cm/s. انرژی جنبشی متناظر با این تکانه عبارت است از

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

که در آن  $M$  جرم نوکلئون (پروتون یا نوترون) و برابر است با  $g = 10^{-24} \times 10^6$ . چون پتانسیلی که باعث بستگی می‌شود باید بیشتر از این مقدار باشد، نتیجه می‌گیریم که

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

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

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

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

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

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

## مسائل

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

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

(الف) تابع  $f(x)$  را به‌دست آورید.

(ب) مقدار  $N$  را طوری تعیین کنید که

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

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

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

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

به دست می‌دهد

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

که به مقدار  $K$  بستگی ندارد.

۲-۲ با فرض اینکه

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

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

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

که مستقل از مقدار  $\alpha$  است.

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

برقرار است

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

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

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

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

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

نمایش داده می‌شود.

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

[تذکر: رابطه میان انرژی جنبشی و تکانه همیشه  $p^2/2m$  نیست!]

۵-۲ رابطه میان طول‌موج و بسامد در یک موجبر به‌صورت زیر است

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

سرعت گروه این امواج را تعیین کنید.

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

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

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

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

سرعت گروه و سرعت فاز را تعیین کنید.

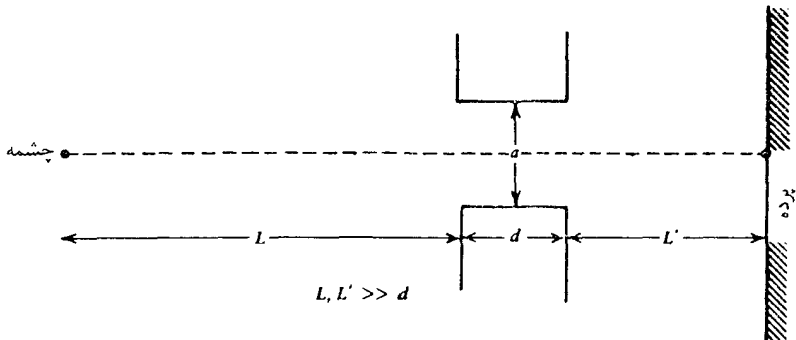
۷-۲ انرژی حالت پایه نوسانگر هماهنگ را با استفاده از رابطه عدم قطعیت برآورد کنید. انرژی نوسانگر هماهنگ برابر است با

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

۸-۲ با استفاده از رابطه عدم قطعیت، انرژی حالت پایه ذره‌ای در پتانسیل  $V(x) = gx^2$  را برآورد کنید. ابعاد جواب خود را واریسی کنید.

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

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



۲-۱۱ عدم قطعیت انرژی (پهنای خط) را برای حالتی که طول عمر آنها برابر است با (الف)  $10^{-10} \times 2,76$  s، (ب)  $10^{-23}$  s، و (ج) ۱۲ دقیقه (برحسب الکترون ولت) به دست آورید. ۲-۱۲ نور تکفامی به طول موج  $6000 \text{ \AA}$  از یک بستاور سریع که برای  $10^{-9}$  s باز است عبور می‌کند. پهن‌شدگی طول موجهای نور (ناتکفام) عبور کرده را تعیین کنید.

## مراجع

بسته‌های موج در بسیاری از کتابهای درسی توضیح داده می‌شوند. مفیدترین آنها در سطح این کتاب عبارت‌اند از  
پاول جی، ال و ب کریسمن، مکانیک کوانتومی، ترجمه پاشایی‌راد و سعادت، تهران مرکز نشر دانشگاهی، ۱۳۶۸، ۵۴۸ صفحه.

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

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

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

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

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

## معادله موج شرودینگر و تعبیر احتمالاتی

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

$$ih \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} \quad (1-3)$$

که آنرا معادله درست برای توصیف ذره آزاد می‌گیریم. با وارون کردن روندی که با آن به ۲-۲۳ رسیدیم، می‌بینیم که عمومی‌ترین جواب این معادله عبارت است از

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

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

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

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

یا از صورت عمومی‌ترین جواب آشکار است. با داشتن  $\psi(x, 0)$  می‌توان تابع  $\phi(p)$  را از ۳-۲ به دست آورد. انتگرال فوری<sup>۲</sup>

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

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

## تعبیر احتمالاتی

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

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

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

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

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

برای صادق بودن این تعبیر باید شرط زیر برقرار باشد

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

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

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

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

### اهمیت فازها

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

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

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

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

که نشان می‌دهد فاز نسبی مهم است. از فاز کل در  $\psi(x, t)$  می‌توان صرف‌نظر کرد؛ تنها فاز نسبی  $\theta_1 - \theta_2$  بین توابع موج  $\psi_1$  و  $\psi_2$  در  $|\psi|^2$  ظاهر می‌شود.



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

### جریان احتمال

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

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

در مشتق زمانی چگالی جاگذاری کنیم:

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

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

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

می‌بینیم که

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

با انتگرال‌گیری به‌دست می‌آوریم

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

زیرا برای توابع انتگرال‌پذیر مجذوری  $j(x, t)$  در بینهایت صفر می‌شود. در ضمن، اگر ناپوستگی‌هایی برای  $\psi(x)$  در نظر می‌گرفتیم به تکنیک‌هایی به صورت تابع دلتا<sup>۲</sup> در شار، و در نتیجه در چگالی احتمال، می‌رسیدیم که برای یک کمیت فیزیکی مشاهده‌پذیر قابل قبول نیست. رابطهٔ ۱۲-۳ یک قانون پایستگی است، و این واقعیت را بیان می‌کند که هر تغییری در چگالی در ناحیه‌ای از  $x$ : با تغییری در شار خالص به درون این ناحیه جبران می‌شود:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_a^b dx P(x, t) &= - \int_a^b dx \frac{\partial}{\partial x} j(x, t) \\ &= j(a, t) - j(b, t) \end{aligned} \quad (14-3)$$

اگر معادلهٔ ۱۳-۱ را به صورت زیر بنویسیم

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x, t) \quad (15-3)$$

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

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

یعنی

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t) \quad (16-3)$$

و تعمیم معادلهٔ ۱۲-۳ عبارت است از

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (17-3)$$

که در آن

$$P(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (18-3)$$

۲. برای بحثی دربارهٔ توابع دلتا به پیوست الف مراجعه کنید.

و

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{\imath m} [\psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t) - \nabla \psi^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t)] \quad (۱۹-۳)$$

### مقادیر انتظاری، و تکانه ذره

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

$$\langle f(x) \rangle = \int dx f(x) P(x, t) = \int dx \psi^*(x, t) f(x) \psi(x, t) \quad (۲۰-۳)$$

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

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

$$p = mv = m \frac{dx}{dt} \quad (۲۱-۳)$$

می‌نویسیم

$$\langle p \rangle = m \frac{d}{dt} \langle x \rangle = m \frac{d}{dt} \int dx \psi^*(x, t) x \psi(x, t) \quad (۲۲-۳)$$

یا

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

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

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

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

بنابراین، انتگرالده به صورت زیر است

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

و در نتیجه

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

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

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

با پذیرفتن این نتیجه کلی تر زیر می رسمیم

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

بنابراین، به عنوان مثال داریم

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

### تابع موج در فضای تکانه

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

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

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

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

یا

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

بنابراین، داریم

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

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

اکنون می‌نویسیم

$$\begin{aligned}
 \langle p \rangle &= \int dx \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{d\psi(x)}{dx} \\
 &= \int dx \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \phi(p) e^{ipx/\hbar} \\
 &= \int dp \phi(p) p \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \psi^*(x) e^{ipx/\hbar} \\
 &= \int dp \phi(p) p \phi^*(p)
 \end{aligned} \tag{۲۸-۳}$$

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

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \phi(p, t) e^{ipx/\hbar} \tag{۲۹-۳}$$

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

$$\langle x \rangle = \int dp \psi^*(p, t) \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right) \phi(p, t) \tag{۳۰-۳}$$

به‌عبارت دیگر، نمایش عملگر  $x$  در فضای تکانه به‌صورت زیر است

$$x = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \tag{۳۱-۳}$$

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

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

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

(الف) چگالی احتمال  $P(x) = |\psi(x)|^2$  به ازای چه مقداری از  $x$  بیشینه می‌شود؟  
 (ب) مقادیر  $\langle x \rangle$  و  $\langle x^2 \rangle$  را محاسبه کنید.

(ج) احتمال وجود ذره در بازه  $x = 0$  تا  $x = 1/\alpha$  را به دست آورید.

(د) تابع  $\phi(p)$  را تعیین کنید و با استفاده از آن  $\langle p \rangle$  و  $\langle p^2 \rangle$  را به دست آورید.

(الف) چگالی احتمال  $P(x)$  جایی بیشینه است که  $dP(x)/dx = 0$ :

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

یعنی در  $x = 1/\alpha$   
 (ب)

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

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

(ج) احتمال مزبور برابر است با

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

(د)

$$\begin{aligned} \phi(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^{\infty} dx e^{-ipx/\hbar} (2\alpha\sqrt{\alpha}) x e^{-\alpha x} \\ &= \sqrt{\frac{2\alpha^2}{2\pi\hbar}} \frac{d}{d\alpha} \int_0^{\infty} dx e^{-(\alpha+ip/\hbar)x} = -\sqrt{\frac{2\alpha^2}{2\pi\hbar}} \frac{1}{(\alpha+ip/\hbar)^2} \end{aligned}$$

که از آن به دست می‌آوریم

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

$$\langle p^2 \rangle = \frac{2\alpha^2}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp \frac{p^2}{(\alpha^2 + p^2/\hbar^2)^2} = \frac{4\alpha^2}{2\pi\hbar} \int_0^{\infty} dp \frac{p^2}{(\alpha^2 + p^2/\hbar^2)^2}$$

با تعویض متغیر  $\theta = \tan^{-1} p/h\alpha$  داریم

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

## معادله شرودینگر برای ذره در یک پتانسیل معادله

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

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

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

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

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

یا به طور صریحتر

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

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

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

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



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

۱. برخلاف اعداد معمولی، عملگرها همیشه جابه‌جا نمی‌شوند. اگر تعریف کنیم

$$[A, B] = AB - BA \quad (۳۶-۳)$$

آنگاه

$$\begin{aligned} [p, x]\psi(x, t) &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} x\psi(x, t) - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \\ &= \frac{\hbar}{i} \psi(x, t) \end{aligned} \quad (۳۷-۳)$$

بنابراین، رابطه جابه‌جایی زیر را به دست می‌آوریم

$$[p, x] = \frac{\hbar}{i} \quad (۳۸-۳)$$

این جابه‌جانپذیری در تبدیل یک تابع کلاسیک  $f(x, p)$  به صورت عملگری آن ابهام به وجود می‌آورد، و این قاعده را می‌پذیریم که  $f(x, p)$  باید نسبت به  $x$  و  $p$  متقارن شود. برای مثال

$$\begin{aligned} xp &\rightarrow \frac{1}{2}(xp + px) \\ x^2 p &\rightarrow \frac{1}{4}(x^2 p + 2xpx + px^2) \end{aligned} \quad (۳۹-۳)$$

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

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

$$\begin{aligned} \langle p \rangle - \langle p \rangle^* &= \int dx \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} - \int dx \psi(x) \left( -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) \\ &= \frac{\hbar}{i} \int dx \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right) \\ &= \frac{\hbar}{i} \int dx \frac{\partial}{\partial x} (\psi^* \psi) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (۴۰-۳)$$

و این به شرطی است که تابع موج در بینهایت صفر شود، که برای هر تابع انتگرال‌پذیر مجذوری صدق می‌کند. گاهی از تابعهایی استفاده می‌کنیم که انتگرال‌پذیر مجذوری نیستند اما شرایط دوره‌ای مشخصی دارند، برای مثال

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

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

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

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

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

به‌طور خلاصه:

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

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

که در آن  $H$  عملگر  $\frac{p^2}{2m} + V(x)$  است.

۲. تابعهای موج به تابعهای انتگرال‌پذیر مجذوری محدود می‌شوند.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

و در فضای  $p$ ، صورت عملگر  $x$  عبارت است از

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

و هر دو با رابطه جابه‌جایی اساسی زیر سازگار هستند

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

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

## مسائل

۱-۳ با محاسبه صریح نشان دهید

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

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

۲-۳ نشان دهید قانون پایستگی ۱۱-۳، که در آن  $\psi(x, t)$  جواب معادله شرودینگر ۱۵-۳ با

پتانسیل  $V(x)$  است، وقتی برقرار است که  $V(x)$  حقیقی باشد.

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

۴-۳ فرض کنید

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

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

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

۵-۳ (الف) تابع  $\phi(p)$  را برای دستگاهی که با تابع موج مسئله ۳-۴ توصیف می‌شود محاسبه کنید.

(ب) مقدار  $\langle p^n \rangle$  را محاسبه کنید و نشان دهید که به‌ازای  $n$ ‌های فرد صفر می‌شود.

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

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

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

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

با استفاده از این نتیجه‌ها،  $\Delta x \Delta p$  را به دست آورید.

[تذکر: با استفاده از انتگرالهای پربندی می‌توان نشان داد

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

از این نتیجه، یا

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

(و مشتقهای آن نسبت به  $a^2$ ) می‌توان برای محاسبه انتگرالها استفاده کرد.]  
 ۷-۳ مقادیر  $\langle p \rangle$  و  $\langle p^2 \rangle$  را برای تابع موج  $\psi(x) = R(x)e^{iS(x)/\hbar}$  که در آن  $R(x)$  و  $S(x)$  توابع حقیقی از  $x$  هستند، به دست آورید.  
 ۸-۳× نشان دهید رابطه عملگری زیر برقرار است

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

عملگر  $e^A$  با رابطه زیر تعریف می‌شود

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

[راهنمایی:  $e^{ipa/\hbar} x e^{-ipa/\hbar} f(p)$  را، که در آن  $f(p)$  یک تابع اختیاری از  $p$  است، محاسبه کنید و نمایش  $x = i\hbar d/dp$  را به کار ببرید.]  
 ۹-۳  $\psi(\theta)$  را که تابعی از متغیر زاویه‌ای  $\theta$  است و به بازه  $-\pi \leq \theta \leq \pi$  محدود می‌شود در نظر بگیرید. اگر شرط  $\psi(\pi) = \psi(-\pi)$  برقرار باشد، نشان دهید عملگر

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

دارای مقدار انتظاری حقیقی است.  
 ۱۰-۳  $\phi(p)$  را که تابع موج یک ذره در فضای تکانه است در نظر بگیرید. اگر  $\phi(p)$  تنها برای مقادیر مثبت  $p$  تعریف شده باشد، این تابع باید چه شرایطی را برآورده کند تا مقدار انتظاری حقیقی باشد؟ (از ۳-۳۱ استفاده کنید.)

## ویژه‌تابعها و ویژه‌مقدارها

معادلهٔ شرودینگر وابسته به زمان را که در فصل ۳ به دست آوردیم در نظر بگیریم:

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

این معادله را با تبدیل به یک جفت معادلهٔ دیفرانسیل معمولی برحسب یک متغیر می‌توان حل کرد. می‌نویسیم

$$\psi(x, t) = T(t)u(x) \quad (۲-۴)$$

که ایجاب می‌کند

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

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

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

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

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

عبارت است از

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

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

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

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

## معادله‌های ویژه‌مقداری

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

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

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

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

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

و، به‌ازای عدد مختلط اختیاری  $c$ ،

$$Lcf(x) = cLf(x) \quad (۹-۴)$$

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

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

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

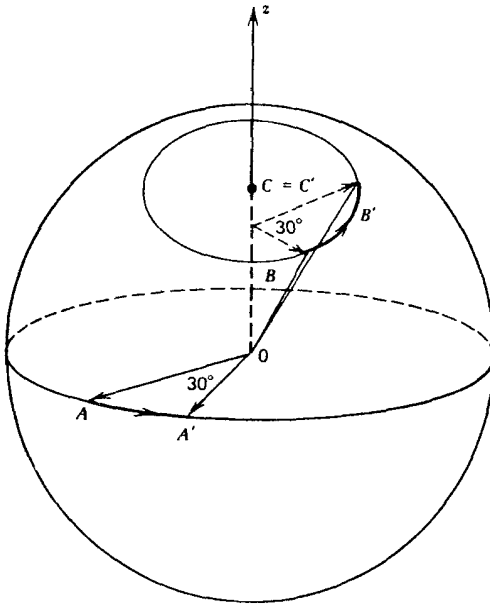
$$Hu_E(x) = Eu_E(x) \quad (۱۰-۴)$$

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

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

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





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

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

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

یا

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

جواب عبارت است از

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

یا

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

شرط  $f(a) = f(-a)$  ایجاب می‌کند که  $e^{i\lambda a} = e^{-i\lambda a}$  یا  $e^{2i\lambda a} = 1$ . بنابراین، ویژه مقدرارها با رابطه زیر داده می‌شوند

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

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

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

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

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

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

### مسئله ویژه مقدراری برای ذره در جعبه ۶-۴ را با پتانسیل زیر در نظر می‌گیریم

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

از ۶-۴ دیده می‌شود که

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

و داخل چاه، که در آن  $V(x) = 0$ ، معادلهٔ ۶-۴ را به صورت زیر می‌نویسیم

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

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

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

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

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

معادلهٔ ۱۵-۴ به صورت زیر در می‌آید

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

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

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

شرط  $u(a) = 0$  ایجاب می‌کند که

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

بنابراین، ویژه‌مقدارهای انرژی با رابطهٔ زیر داده می‌شوند

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

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

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

این جوابها دارای این ویژگی هستند که

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

این نتیجه که

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

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

بعضی اطلاعات فیزیکی را می‌توان از ویژه‌جوابها به‌دست آورد:

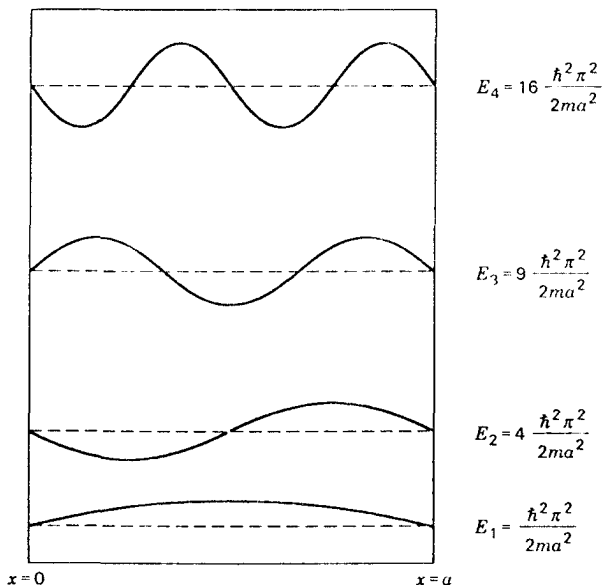
۱. حالت مربوط به کمترین انرژی، حالت پایه، با  $u_1(x)$  توصیف می‌شود، و کمترین انرژی برابر است با

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

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

۲. چون جوابها حقیقی هستند داریم

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



شکل ۲-۴ ویژه‌جوابها برای ذره در جعبه.

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

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

$$\langle p^2 \rangle = 2mE_n = \frac{h^2 \pi^2 n^2}{a^2} \quad (26-4)$$

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

$$\begin{aligned} \langle K \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int dx u^*(x) \frac{d^2 u(x)}{dx^2} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int dx \left[ \frac{d}{dx} \left( u^*(x) \frac{du(x)}{dx} \right) - \frac{du^*(x)}{dx} \frac{du(x)}{dx} \right] \end{aligned} \quad (27-4)$$

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

می‌ماند

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

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

### اصل بسط و تعبیر فیزیکی آن

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

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

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

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

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

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

و بنابراین،

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

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

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

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

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

به‌دست می‌آوریم

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

علاوه بر این، شرط

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

ایجاب می‌کند که

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

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

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

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

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

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

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

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

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

که در آن  $A = \sqrt{12/a}$ ، و در نتیجه  $\int_0^a dx |\psi(x)|^2 = 1$  این احتمال را محاسبه کنید که اندازه‌گیری انرژی ویژه مقدار  $E_n$  را به دست دهد.  
حل: باید ضریب بسط  $A_n$  را محاسبه کنیم:

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

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

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

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



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

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

بنابراین،

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

$$= 0 \quad \text{به ازای } n \text{ زوج،}$$

با استفاده از این واقعیت که  $\sum_{\text{همه}} n^{-2} = \pi^2/6$  و

$$\sum_{\text{همه}} n^{-2} = \sum_{\text{زوج}} n^{-2} + \sum_{\text{فرد}} n^{-2} = \sum_{\text{فرد}} n^{-2} + (1/6) \sum_{\text{همه}} n^{-2}$$

به آسانی می‌توان دید که مجموع تمام احتمالها برابر با ۱ است:

$$\frac{96}{\pi^2} \sum_{\text{فرد}} n^{-2} = \frac{96}{\pi^2} \left(1 - \frac{1}{6}\right) \sum_{\text{همه}} n^{-2} = \frac{96}{\pi^2} \cdot \frac{5}{6} \cdot \frac{\pi^2}{6} = 1$$

## ویژه‌تابع تکانه، و ذره آزاد

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

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

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

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

و جواب آن عبارت است از

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

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

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

با انتخاب

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

۴-۴۰ به صورت زیر در می‌آید

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

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

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

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

بنابه تعبیر تلویحی در ۴-۳۶، مجذور قدرمطلق

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

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

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

حل: تابع موج اولیه به صورت زیر است

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

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

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

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

$$\phi(p) = -e^{-ip0/h} \frac{2\pi/a}{\sqrt{\pi h a}} \frac{\cos pa/2h}{(\pi/a)^2 - (p/h)^2}$$

و در نتیجه

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

اگر  $n$  فرد باشد، به روش مشابه به‌دست می‌آوریم

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

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

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

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

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

در این مورد، جوابها عبارت‌اند از

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

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

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

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

یک مورد خاص از ۴۳-۴ است که در آن

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

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

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

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

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

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

$$j(x) = \frac{\hbar}{2im} \left[ \psi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx} - \frac{d\psi^*(x)}{dx} \psi(x) \right] \quad (54-4)$$

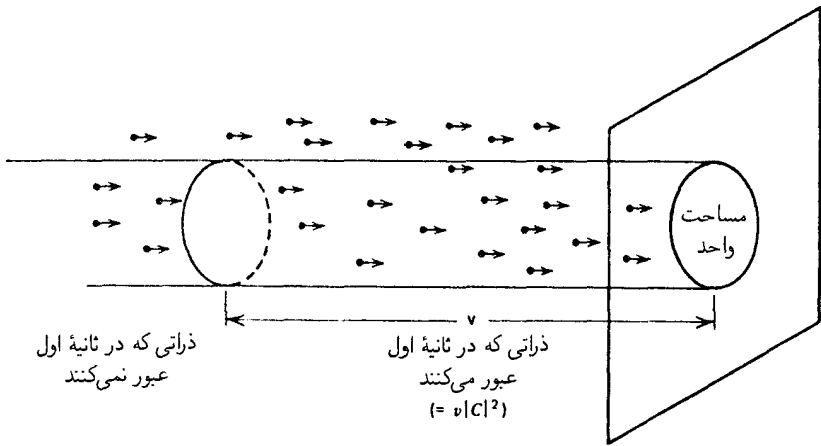
است که در اوایل فصل ۳ معرفی کردیم. برای تابع موج  $Ce^{ipx/\hbar}$ ، شار برابر است با  $|C|^2 p/m$ ؛ برای تابع موج  $Ce^{-ipx/\hbar}$ ، شار برابر است با  $-|C|^2 p/m$ . با توجه به اینکه در یک مسئله یک‌بعدی، شار ذرات با چگالی ۱ ذره بر سانتی‌متر که با سرعت  $v = p/m$  حرکت می‌کنند — یعنی تعدادی که از یک نقطه مانند  $x = x_0$  در هر ثانیه می‌گذرد — درست برابر با  $v$  است، می‌بینیم که  $|C|^2$  نشاندهنده چگالی ذرات بر سانتی‌متر است. بنابراین، ۴-۱۱ ذراتی با چگالی  $1/2\pi\hbar$  بر سانتی‌متر را نمایش می‌دهد. در سه بعد، با

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

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

## واگنی

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



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

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

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx (e^{-ikx})^* e^{ikx} = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{\cancel{ik}x} = 0 \quad (56-4)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \sin kx \cos kx = 0$$

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

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

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

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

### پارایته

ویژه‌تابعهای ذرهٔ آزاد  $(\sin kx, \cos kx)$  و همچنین ویژه‌تابعهای ذره در جعبه‌ای بین  $-a/2$  تا  $a/2$  که با  $47-4$  و  $48-4$  داده شده‌اند، تحت تعویض  $x \rightarrow -x$  یا زوج هستند یا فرد. ذره را

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

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

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

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

یعنی تابع موج در زمانهای بعد باز هم نسبت به  $x$  زوج است. به همین ترتیب، تابع موجی که ابتدا فرد است فرد باقی می‌ماند. بنابراین، برای جعبهٔ مزبور که حول  $x = 0$  تقارن دارد، زوجیت و فردیت ویژگیهایی مستقل از زمان هستند. می‌توان گفت که زوجیت و فردیت ثابتهای حرکت‌اند. چون هر ثابت حرکتی برای ما مهم است، این بحث را تا اندازه‌ای فرمولبندی می‌کنیم.

این کار را با معرفی عملگر پارسته انجام می‌دهیم که قاعدهٔ عمل آن انعکاس  $x \rightarrow -x$  است. بنابراین، برای هر تابع موج  $\psi(x)$  داریم

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

در نتیجه، برای تابع موج زوج می‌توان نوشت

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

و برای تابع موج فرد

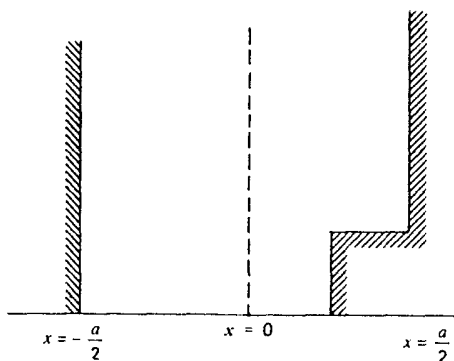
$$P\psi^{(-)}(x) = -\psi^{(-)}(x) \quad (62-4)$$

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

مقادیر  $\pm 1$  تنها ویژه‌مقدارهای ممکن‌اند. فرض کنید

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





شکل ۴-۴ جعبه‌ای که تحت انعکاس تقارن ندارد.

با اعمال دوباره  $P$ ، به دست می‌آوریم

$$P^2 u(x) = P \lambda u(x) = \lambda^2 u(x) \quad (۶۴-۴)$$

اما  $P^2 u(x) = u(x)$ ، زیرا دو انعکاس متوالی نباید چیزی را تغییر دهند. در نتیجه،  $\lambda^2 = 1$ ، یعنی  $\lambda = \pm 1$ . هر تابع اختیاری را می‌توان به صورت مجموع یک تابع زوج و یک تابع فرد نوشت:

$$\psi(x) = \frac{1}{2}[\psi(x) + \psi(-x)] + \frac{1}{2}[\psi(x) - \psi(-x)] \quad (۶۵-۴)$$

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

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

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

دید. فرض کنید

$$\psi(x, 0) = \psi(-x, 0) \equiv \psi^{(+)}(x) \quad (۶۶-۴)$$

تحول زمانی با معادله زیر داده می‌شود

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

اگر  $P$  را بر این معادله اعمال کنیم به دست می‌آوریم

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

تحت شرایط خاصی که

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

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

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

بنابراین، توابع

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

و

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

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

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

یعنی اگر  $P$  و  $H$  با هم جابه‌جا شوند:

$$[P, H] = 0 \quad (۷۴-۴)$$

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

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

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

## مسائل

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

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

$$O_2\psi(x) = e^{\psi(x)} \quad (\text{د}) \quad O_2\psi(x) = \lambda\psi^*(x) \quad (\text{ج})$$

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

۲-۴ مسئلهٔ ویژه‌مقداری زیر را حل کنید

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

به‌ازای چه مقادیری از ویژه‌مقدار  $\lambda$  ویژه‌تابعها انتگرال‌پذیر مجذوری هستند؟

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

۳-۴ جابه‌جاگرهای زیر را به دست آورید: (الف)  $[O_2, O_6]$ ; (ب)  $[O_1, O_7]$ . روش محاسبه  $[A, B]$  نوشتن  $A(B\psi) - B(A\psi)$  به صورت  $C\psi$  است.  
۴-۴ عدم قطعیت

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

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

$$\Delta p \Delta x$$

را به دست آورید. توجه کنید که برای حالت‌های بالاتر عدم قطعیت با  $n$  افزایش می‌یابد.  
۵-۴ ذره‌ای در حالت پایهٔ جعبه‌ای است که دیواره‌های آن در  $x = \pm a$  قرار دارند. دیواره‌های جعبه ناگهان به  $x = \pm b$  (که در آن  $b > a$ ) برده می‌شوند. احتمال اینکه ذره در پتانسیل جدید در حالت پایه یافت شود چقدر است؟ احتمال اینکه ذره در اولین حالت برانگیخته باشد چقدر است؟ جواب سادهٔ این مورد توضیح ساده‌ای دارد. این توضیح چیست؟  
۶-۴ فرض کنید ذره‌ای با تابع موج

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

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

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

(ب) اگر انرژی ذره را اندازه‌گیری کنیم، انرژی حالت پایه و انرژی اولین حالت برانگیخته با چه احتمالی به دست می‌آیند؟  
۷-۴ برای پتانسیلی به صورت

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

ویژه‌تابعها عبارت‌اند از

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

فرض کنید تابع موج اولیهٔ بهنجار شدهٔ ذره‌ای در این پتانسیل به صورت زیر باشد

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

(الف)  $\psi(x, t)$  را تعیین کنید.

(ب)  $A$  را بدون محاسبهٔ انتگرال  $\int d\theta \sin^{\delta} \theta$  به دست آورید.

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

[راهنمایی:  $[(e^{i\theta} - e^{-i\theta})/2i]^{\delta}$  را به صورت رشتهٔ توانی  $e^{i\delta\theta} + \dots - e^{-i\delta\theta}$  بسط دهید و آن را به یک رشتهٔ شامل  $\sin \delta\theta$  و غیره تبدیل کنید.]

۸-۴ محاسبه‌های مثال صفحهٔ ۸۲ را برای ذره‌ای که ابتدا در  $n$  امین ویژه‌حالت است تکرار کنید. نشان دهید احتمال مربوط عبارت است از

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

این توزیع را ترسیم کنید و نشان دهید که با رابطهٔ عدم قطعیت و به‌ازای  $n$  بزرگ با اصل تطابق سازگار است.

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

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

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

(ب) مقدار انتظاری انرژی را به دست آورید. آیا می‌توانید با استدلالی تقریبی، بر مبنای "اندازهٔ" تابع موج و اصل عدم قطعیت، نشان دهید که چرا این جواب باید تقریباً همین باشد.

۱۰-۴ تابع موج ذره‌ای به صورت زیر است

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

شار مربوط به آن را به دست آورید.

۱۱-۴ شار وابسته به ذره‌ای را تعیین کنید که با تابع موج زیر توصیف می‌شود

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

که در آن  $u(x)$  یک تابع حقیقی است.

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

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

برای تمام ویژه‌تابعها صفر می‌شود.

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

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

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

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

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

## مراجع

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

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

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

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



## پتانسیلهای یک بعدی

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

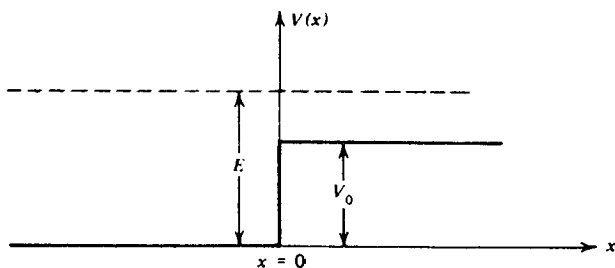
### پله پتانسیل

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

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

معادله شرودینگر

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



شکل ۱-۵ پله پتانسیل.

را به صورت زیر می نویسیم

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

مطابق معمول، قرار می دهیم

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

و همچنین می نویسیم

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

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

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

اندازه شار خالص در جهت مثبت  $x$  برابر است با

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

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



می‌دهیم. این پتانسیل باعث به‌وجود آمدن موج بازتابیده  $R e^{-ikx}$  با شار بازتابیده  $hk|R|^2/m$  می‌شود.

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

$$u(x) = T e^{iqx} \quad (۸-۵)$$

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

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

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

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

پیوستگی تابع موج ایجاب می‌کند که

$$1 + R = T \quad (۱۱-۵)$$

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

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

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

انتگرال گیری از معادله ۳-۵ از  $a - \epsilon$  تا  $a + \epsilon$  به دست می آوریم

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

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

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

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

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

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

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

متذکر می شویم که:

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

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

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

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

$$u(x) = T e^{-|q|x} \quad (17-5)$$

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

$$|R|^2 = \left( \frac{k - i|q|}{k + i|q|} \right) \left( \frac{k - i|q|}{k + i|q|} \right)^* = 1 \quad (18-5)$$

بنابراین، مانند مکانیک کلاسیک، اکنون بازتاب کلی داریم. اما توجه کنید که ضریب

$$T = \frac{2k}{k + i|q|} \quad (19-5)$$

صفر نیست، و قسمتی از موج به درون ناحیه ممنوع نفوذ می‌کند. این پدیده نفوذ نیز مشخصه امواج است، و به زودی خواهیم دید که "تونل‌زدن" در سدهایی را امکانپذیر می‌سازد که در توصیف کلاسیک باید کاملاً مانع عبور ذرات باشند. هیچ شاری به طرف راست وجود ندارد، زیرا برای جواب حقیقی صفر می‌شود حتی اگر ضریب جلو آن را مختلط بگیریم. پدیده بازتاب کلی از لحاظ ریاضی همان پدیده‌ای است که برای نور روی می‌دهد وقتی نور با زاویه‌ای بزرگتر از زاویه حد به فصل مشترک دو محیط (از محیطی با  $n$  بزرگتر به محیطی با  $n$  کمتر) می‌تابد. این نور بازتاب داخلی کلی می‌یابد، اما در واقع یک میدان الکترومغناطیسی که به طور نمایی کاهش می‌یابد به درون ناحیه ممنوع نفوذ می‌کند.

۵. یک ویژگی پتانسیل فوق‌العاده نیز این است که  $R$  و  $T$  را می‌توان تنها برحسب  $E$  و  $(E - V_0)$  نوشت، یعنی مستقل از  $\hbar$  که ظاهراً می‌توانیم آن را در اینجا برابر با صفر بگیریم. به نظر می‌رسد که با یک تناقض روبه‌رو هستیم، زیرا  $\hbar = 0$  را به حد کلاسیک مربوط می‌کنیم. آیا این وضعیت به معنای آن است که می‌توانستیم برای چنین پتانسیلی بازتاب جزئی را در حد کلاسیک به دست آوریم؟ تناقضی در کار نیست، زیرا یک شرط رسیدن به حد کلاسیک این است که طول موج دو بروی  $(\lambda = 2\pi\hbar/p)$  در مقایسه با اندازه‌های مربوط دستگاه کوچک باشد. در این مثال، اندازه مربوط پهنای ناحیه‌ای است که در آن پتانسیل از صفر تا  $V_0$  تغییر می‌کند، و این پهنای در وضعیت حدی صفر است. بنابراین، برای این پتانسیل ایده‌آل ناحیه کلاسیک وجود ندارد. اگر این پتانسیل را گرد می‌کردیم آنگاه در انرژی‌های به اندازه کافی زیاد شرط مربوط به رفتار کلاسیک را واقعاً به دست می‌آوردیم، اما چنانکه قبلاً گفتیم اگر انرژی به اندازه کافی زیاد باشد بازتابی وجود ندارد.

## چاه پتانسیل

اکنون پتانسیل زیر را در نظر می‌گیریم (شکل ۲-۵)

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 & x < -a \\ &= -V_0 & -a < x < a \\ &= 0 & a < x \end{aligned} \quad (20-5)$$

با در نظر گرفتن مورد  $E > 0$ ، باز هم می‌نویسیم

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (21-5)$$

و

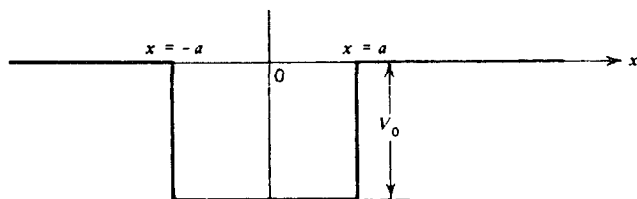
$$q^2 = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2} \quad (22-5)$$

جوابهای معادله شرودینگر در سه ناحیه متمایز برای ذره‌ای که از سمت چپ می‌آید به صورت زیر هستند

$$\begin{aligned} u(x) &= e^{ikx} + R e^{-ikx} & x < -a \\ u(x) &= A e^{iqx} + B e^{-iqx} & -a < x < a \\ u(x) &= T e^{ikx} & a < x \end{aligned} \quad (23-5)$$

این جوابها به ترتیب به شار ورودی  $\hbar k/m$  از سمت چپ، شار بازتابیده  $\hbar k|R|^2/m$  و شار تراگسیلیده  $\hbar k|T|^2/m$  به سمت راست مربوط‌اند. در داخل چاه امواجی هستند که به علت بازتاب در دو ناپیوستگی در  $\pm a$  در دو جهت حرکت می‌کنند. بنابه پایستگی شار باید داشته باشیم

$$\frac{\hbar k}{m}(1 - |R|^2) = \frac{\hbar q}{m}(|A|^2 - |B|^2) = \frac{\hbar k}{m}|T|^2 \quad (24-5)$$



شکل ۲-۵ چاه پتانسیل.

با جور کردن توابع موج و همچنین مشتقهای آنها، چهار معادله زیر به دست می‌آیند

$$\begin{aligned} e^{-ika} + R e^{ika} &= A e^{-iq a} + B e^{iq a} \\ ik(e^{-ika} - R e^{ika}) &= iq(A e^{-iq a} - B e^{iq a}) \\ A e^{iq a} + B e^{-iq a} &= T e^{ika} \\ iq(A e^{iq a} - B e^{-iq a}) &= ikT e^{ika} \end{aligned} \quad (25-5)$$

که از آنها، با کمی عملیات جبری، به نتایج زیر می‌رسیم

$$\begin{aligned} R &= i e^{-2ika} \frac{(q^2 - k^2) \sin 2qa}{2kq \cos 2qa - i(q^2 + k^2) \sin 2qa} \\ T &= e^{-2ika} \frac{2kq}{2kq \cos 2qa - i(q^2 + k^2) \sin 2qa} \end{aligned} \quad (26-5)$$

باز هم، اگر  $E \gg V_0$ ، عملاً هیچ بازتابی وجود ندارد زیرا  $2kq \ll q^2 - k^2$ ؛ وقتی  $E \rightarrow 0$ ، تراگسیل به صفر نزدیک می‌شود. یک نکته مخصوصاً جالب توجه این است که در مورد خاصی که  $\sin 2qa = 0$ ، یعنی برای انرژیهای مثبتی که از رابطه زیر به دست می‌آیند

$$E = -V_0 + \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{4ma^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (27-5)$$

هیچ بازتابی وجود ندارد. این در واقع الگویی است برای آنچه در پراکندگی الکترونیهای کم انرژی ( $1\text{eV}$ ) از اتمهای گاز خنثی، مانند نئون و آرگون، روی می‌دهد که در آن تراگسیل به‌طور غیرعادی بزرگ است. این اثر، که رامساتر و تاونزند آن را کشف کردند، به‌عنوان تشدید در تراگسیل توصیف می‌شود. البته در بحث دقیقتر باید ملاحظات سه‌بعدی را دخالت داد. به زبان موجی، این اثر ناشی از تداخل ویرانگر بین موج بازتابیده در  $x = -a$  و موجی است که یک بار، دو بار، سه بار، ... در لبه  $x = a$  بازتابیده می‌شود. شرط تشدید  $2qa = n\pi$ ، که می‌توان آن را به صورت زیر نوشت

$$\lambda = \frac{2\pi}{q} = \frac{4a}{n} \quad (28-5)$$

درست همان شرطی است که تداخل سنج فابری-پرو را توصیف می‌کند.

## سد پتانسیل

در اینجا پتانسیل عبارت است از

$$\begin{aligned}
 V(x) &= 0 & x < -a \\
 &= V_0 & -a < x < a \\
 &= 0 & a < x
 \end{aligned} \quad (29-5)$$

تنها انرژیهای  $E < V_0$  را در نظر می‌گیریم، یعنی انرژیهایی که به‌ازای آنها در فیزیک کلاسیک هیچ نفوذی به درون سد صورت نمی‌گیرد (شکل ۳-۵).  
در داخل سد معادلهٔ زیر را داریم

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) u(x) = 0$$

یعنی

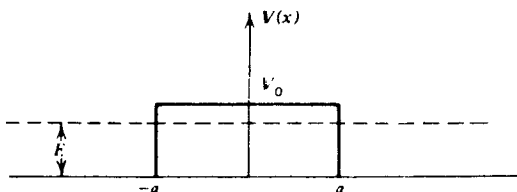
$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} - \kappa^2 u(x) = 0 \quad (30-5)$$

جواب عمومی

$$u(x) = A e^{-\kappa x} + B e^{\kappa x} \quad |x| < a \quad (31-5)$$

را با جوابهای زیر جور می‌کنیم

$$\begin{aligned}
 u(x) &= e^{ikx} + R e^{-ikx} & x < -a \\
 &= T e^{ikx} & x > a
 \end{aligned} \quad (32-5)$$



شکل ۳-۵ سد پتانسیل. انرژی به گونه‌ای است که ذرهٔ کلاسیک کاملاً توسط سد بازتابیده می‌شود.

عملاً لزومی ندارد که معادله‌های مربوطه را حل کنیم، زیرا می‌توان نتایج را از ۵-۲۶ با جاگذاری زیر به دست آورد

$$q \rightarrow i\kappa = i\sqrt{(2m/h^2)(V_0 - E)} \quad (33-5)$$

بنابراین، برای مثال داریم

$$T = e^{-\tau_1 \kappa a} \frac{\tau_2 \kappa \kappa}{\tau_2 \kappa \kappa \cosh \tau_2 \kappa a + i(k^2 - \kappa^2) \sinh \tau_2 \kappa a} \quad (34-5)$$

و در نتیجه

$$|T|^2 = \frac{(\tau_2 \kappa \kappa)^2}{(k^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2 \tau_2 \kappa a + (\tau_2 \kappa \kappa)^2} \quad (35-5)$$

اگرچه انرژی کمتر از ارتفاع سد است اما تراگسیل وجود دارد. این یک پدیده موجی است، و در مکانیک کوانتومی نیز ذرات همین پدیده را از خود نشان می‌دهند. اغلب با این پدیده تونل‌زنی ذره در سد مواجه می‌شویم، و بعضی کاربردهای آن را بعداً بررسی خواهیم کرد.

در اینجا لختی به تحلیل یک مشکل ظاهری می‌پردازیم. تابع موج در داخل سد صفر نمی‌شود، و از این رو به نظر می‌رسد احتمالی برای یافتن ذره با انرژی جنبشی منفی وجود دارد. این را چگونه می‌توان تعبیر کرد؟ برای اجتناب از تناقض با فیزیک کلاسیک باید از رابطه عدم قطعیت استفاده کنیم. هر آزمایشی برای مطالعه ذره در داخل سد پتانسیل باید مکان آن را با دقت زیر مشخص کند

$$\Delta x \ll 2a \quad (36-5)$$

این اندازه‌گیری باعث می‌شود تکانه‌ای با عدم قطعیت زیر به ذره منتقل شود

$$\Delta p \gg h/2a \quad (37-5)$$

که متناظر است با انتقال انرژی

$$\Delta E \gg h^2 / \lambda m a^2 \quad (38-5)$$

برای مشاهده انرژی جنبشی منفی، این عدم قطعیت باید بسیار کوچکتر از  $|E - V_0|$  باشد، و در نتیجه داریم

$$\frac{h^2 \kappa^2}{2m} \gg E \gg \frac{h^2}{\lambda m a^2} \quad (39-5)$$

که ایجاب می‌کند  $1 \gg 2\kappa a$ ، و تحت این شرایط احتمال نفوذ به درون سد، که از رابطه زیر به دست می‌آید

$$|T|^2 \simeq \left( \frac{2\kappa a}{k^2 + \kappa^2} \right)^2 e^{-2\kappa a} \quad (40-5)$$

تا حد صفر کوچک می‌شود (به عنوان مثال، به ازای  $\kappa a = 10$  داریم  $e^{-2\kappa a} = 10^{-18}$ ). رابطه تقریبی برای نسبت شار تراگسیلیده به شار فرودی،  $|T|^2$ ، تابع فوق‌العاده حساسی از پهنای سد و اختلاف میان ارتفاع سد و انرژی فرودی است، زیرا

$$\kappa a = \left[ \frac{2ma^2}{h^2} (V_0 - E) \right]^{1/2} \quad (41-5)$$

به طور کلی، سدهای موجود در پدیده‌های فیزیکی مستطیلی نیستند، و برای بررسی بعضی از کاربردها باید ابتدا رابطه‌ای تقریبی برای ضریب تراگسیل  $|T|^2$  از سدی که شکل نامنظم دارد به دست آورد. راه درست انجام این کار، با توجه به این واقعیت که برای اکثر پتانسیلها جواب دقیقی وجود ندارد، استفاده از روش تقریب وتزل-کرامرز-بریلوتن (WKB) است.<sup>۱</sup> بحثی که در اینجا بیان می‌کنیم کمتر ریاضی است.

چنانکه دیده می‌شود رابطه ۴۰-۵ حاصلضرب دو جمله است که در آن جمله‌نمایی اهمیت بسیار بیشتری دارد. اگر بنویسیم

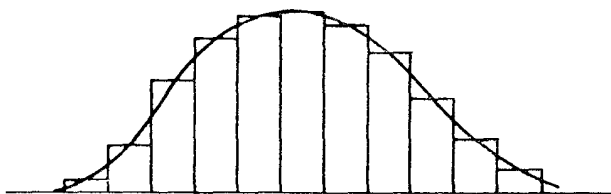
$$\ln|T|^2 \simeq -2\kappa(2a) + 2 \ln \frac{2(ka)(\kappa a)}{(ka)^2 + (\kappa a)^2}$$

می‌بینیم که در اکثر شرایط جمله اول به ازای هر مقدار معقولی برای  $\kappa a$  بر جمله دوم غلبه دارد. روشی که در اینجا به کار می‌بریم این است که یک سد خمیده هموار را به صورت تعدادی سد مستطیلی در نظر می‌گیریم که کنار هم قرار گرفته‌اند (شکل ۴-۵). چون ضریبهای تراگسیل را وقتی کوچک باشند می‌توان در هم ضرب کرد<sup>۲</sup> (در واقع، وقتی بیشتر شار بازتابیده می‌شود، تراگسیل از

۱. برای تقریب WKB به میحت ویژه ۳ مراجعه کنید.

۲. این حکم تنها برای قسمت‌هایی که بیشترین اهمیت را دارد درست است، زیرا می‌توان دید که با دو برابر کردن پهنای ضریب تراگسیل  $|T|^2$  تقریباً مجذور می‌شود.





شکل ۴-۵ تقریب سد خمیده هموار با سدهای پتانسیل مستطیلی کنار هم.

هر لایه یک رویداد مستقل و نامحتمل است)، می توان با تقریب نوشت

$$\begin{aligned} \ln|T|^2 &\approx \sum_{\text{سدهای جزئی}} \ln|T_{\text{جزئی}}|^2 \\ &\approx -2 \sum \Delta x \langle \kappa \rangle \\ &\approx -2 \int_{\text{سد}} dx \sqrt{(2m/\hbar^2)[V(x) - E]} \end{aligned} \quad (42-5)$$

در هر سد جزئی،  $\Delta x$  پهنای سد و  $\langle \kappa \rangle$  مقدار میانگین  $\kappa$ ی مربوط به این سد است. در آخرین گام، حد سدهای بینهایت باریک را گرفته ایم. در عبارت بالا واضح است که این تقریب در نزدیکی "نقاط برگشت" که در آنها انرژی و پتانسیل تقریباً برابرند کمترین دقت را دارد، زیرا در این نقاط رابطه ۴-۵ تقریب خوبی برای ۳۵-۵ نیست. همچنین مهم است که  $V(x)$  تابع کند تغییری از  $x$  باشد، زیرا در غیر این صورت تقریب سد منحنی با تعدادی سد مستطیلی تنها هنگامی ممکن است که این سدها باریک باشند، و در اینجا باز هم ۴-۵ تقریب بدی است. بررسی مناسب، با استفاده از تقریب WKB، متضمن بحث درباره رفتار در نزدیکی نقاط برگشت است. با وجود این، برای اکثر کاربردها، با تقریب خوب می توان نوشت

$$|T|^2 \approx e^{-2 \int dx \sqrt{(2m/\hbar^2)[V(x) - E]}} \quad (43-5)$$

که در آن انتگرال روی ناحیه ای گرفته می شود که ریشه دوم حقیقی است.

## پدیده های تونل زنی

پدیده تونل زنی ذره در فیزیک اتمی و هسته ای کاملاً متداول است، و در اینجا چند مثال از آن را بررسی می کنیم.

## گسیل سرد

الکترونهاى درون یک فلز را در نظر بگیريد. چنانکه در بحث اثر فوتوالکتریک در فصل ۱ گفته شد، این الکترونها را پتانسیلی در فلز نگه می‌دارد که در تقریب اول می‌توان آن را با جعبه‌ای به ارتفاع متناهی، مطابق شکل ۵-۵الف، نشان داد. این الکترونها عملاً در ترازهای انرژی انباشته شده‌اند که بسیار چگال‌اند، زیرا جعبه بسیار پهن است. ویژگی الکترونها این است که بیشتر از دو الکترون نمی‌توانند یک تراز معین انرژی را اشغال کنند<sup>۳</sup>؛ بنابراین، در پایینترین حالت انرژی فلز، تمام ترازها تا یک انرژی مشخص که انرژی فرمی نامیده می‌شود (و به چگالی الکترونهاى آزاد بستگی دارد) پر شده‌اند. وقتی دما از صفر مطلق بیشتر است، تعداد کمی از الکترونها به علت برانگیختگی گرمایی به ترازهای بالاتر می‌روند، اما این تعداد حتی در دمای اتاق هم کم است. اختلاف میان انرژی فرمی و لبهٔ چاه انرژی لازم برای خارج ساختن یک الکترون است؛ این انرژی را تابع کار می‌نامند، که در بحث مربوط به اثر فوتوالکتریک گفته شد. الکترونها را می‌توان با انتقال انرژی به آنها، توسط فوتون یا با گرم کردن، از فلز خارج کرد. همچنین می‌توان آنها را با اعمال یک میدان الکتریکی خارجی  $\mathcal{E}$  از فلز جدا کرد. این گسیل سرد به این دلیل روی می‌دهد که میدان خارجی پتانسیلی را که الکترون "می‌بیند"، اگر این الکترون در سطح "دریا"ی ترازها باشد، از  $W$  به  $(W - e\mathcal{E}x)$  تغییر می‌دهد (شکل ۵-۵ب). در این مورد، ضریب تراکسیل عبارت است از

$$|T|^2 = e^{-2} \int_0^{\infty} dx [2m(W - e\mathcal{E}x)/\hbar^2]^{1/2} \quad (44-5)$$

که چون

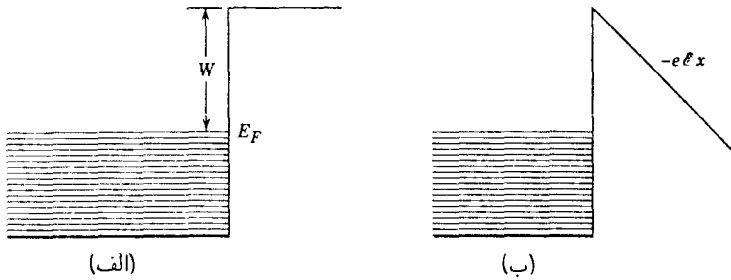
$$\int dx (A + Bx)^{1/2} = \frac{(A + Bx)^{3/2}}{3B/2}$$

به صورت زیر در می‌آید

$$|T|^2 = e^{-4} \sqrt{2/3} \sqrt{mW/\hbar^2} (W/e\mathcal{E}) \quad (45-5)$$

این رابطه، که فرمول فاؤلر-نوردهایم نامیده می‌شود، تنها یک توصیف تقریبی از گسیل سرد است. یک اثر اضافی، که به آسانی می‌توان آن را در محاسبه وارد کرد، جذب الکترون به صفحه توسط بار تصویر است. یک اثر دیگر، که بررسی آن بسیار مشکلتر است، این است که ناکاملیهایی در سطح فلز وجود دارند که میدان الکتریکی را به صورت موضعی تغییر می‌دهند، و چون  $\mathcal{E}$  در نما ظاهر می‌شود این تغییر می‌تواند تفاوت زیادی به وجود آورد. در ضمن، می‌بینیم که نما را می‌توان برحسب ضخامت سد در سطح دریای فرمی نوشت، زیرا این ضخامت از رابطهٔ زیر به دست می‌آید

۳. این ویژگی الکترونها را اصل طرد پاؤلی توصیف می‌کند که آن را در فصل ۸ بررسی می‌کنیم.



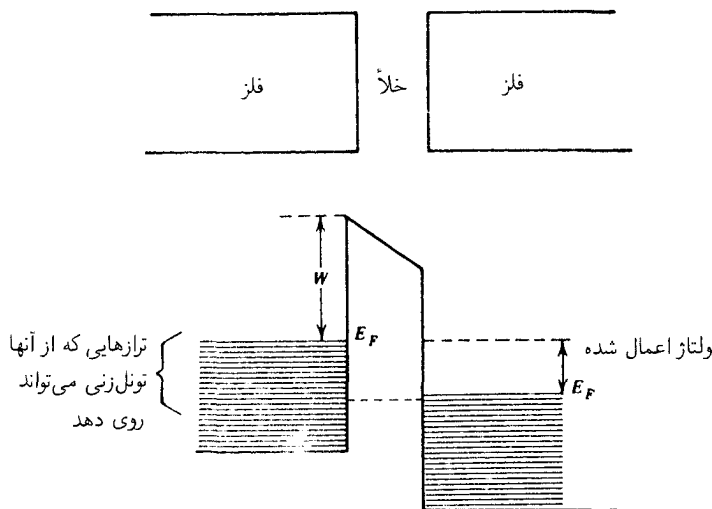
شکل ۵-۵ (الف) ترازهای انرژی الکترون در فلز.  $E_F$  انرژی فرمی و  $W$  تابع کار است. (ب) پتانسیل به علت وجود میدان الکتریکی خارجی تغییر کرده است.

$$a = \frac{W}{e\mathcal{E}} \quad (۴۶-۵)$$

در پانزده سال گذشته نوعی گسیل سرد کاربرد مهمی در میکروسکوپ تونل زنی روبشی (STM) یافته است. این ابزار مبتنی بر حساسیت بسیار زیاد گسیل سرد به فاصله است. جریان الکتریکی حاصل از اختلاف پتانسیل الکتریکی بین سطح یک فلز و نوک یک میله بسیار تیز تنگستن بالای سطح برحسب فاصله از سطح به طور نمایی تغییر می کند، و از این راه مطالعه بسیار تفصیلی توپوگرافی سطح فلز ممکن می شود. کار STM به بعضی پدیده های غیرمنتظره و پیشرفتهای فن آوری بستگی دارد.

قبل از هر چیز، برای به دست آوردن تفکیک ۱ آنگسترومی (یا کمتر) حد پراش متداول ایجاب می کند تابشی از مرتبه  $10 \text{ keV}$  به کار ببریم. مطالعه غیرتخریبی سطح با این انرژی ممکن نیست. در یک میکروسکوپ الکترونی به الکترونیایی از مرتبه  $150 \text{ eV}$  نیاز داریم، که باز هم برای روبش سطوح بیش از حد زیاد است. چنانکه اوکیف در سال ۱۹۵۶ بیان داشته است، می توان با نوعی میکروسکوپ جدید از حد پراش اجتناب کرد. در این نوع میکروسکوپ، نور از یک حفره کوچک به شیئی که مستقیماً جلو حفره قرار دارد می تابد، و این شیئی نور تراگسیلیده یا بازتابیده را تغییر می دهد. در این میکروسکوپ جدید، این اندازه حفره است که توان تفکیک میکروسکوپ را تعیین می کند. STM بر این اساس کار می کند. نوک تنگستن، که پتانسیل به آن اعمال می شود، به منزله "حفره" عمل می کند.

اختلاف پتانسیل  $10$  ولتی در بازه حدود  $5 \text{ \AA}$  میدانهای الکتریکی بسیار بزرگی به وجود می آورد، و این میدانها تعدادی اتم از نوک، برای تیز کردن آن، "بیرون می کشند". برای مثال، یک نوک که شعاع آن با ماشینکاری به  $1000 \text{ \AA}$  رسیده است به طور کاملاً عادی باید بتواند، به علت حساسیت جریان به فاصله از سطح نمونه، فاصله های عرضی تا  $45 \text{ \AA}$  را تفکیک کند. برآمدگیهای اتمی ریز این توان تفکیک را به  $1$  تا  $2$  آنگستروم کاهش می دهند.



شکل ۶-۵ نمودار انرژی برای تونل‌زنی بین دو فلز که با خلأ از هم جدا شده‌اند. تونل‌زنی بین فلزها تنها وقتی ممکن است که حالت‌های خالی در طرف راست وجود داشته باشند. این حالت‌های خالی وقتی به وجود می‌آیند که برای پایین آوردن تراز فرمی در طرف راست ولتاژ  $eV$  اعمال شود.

مفید بودن STM به توانایی آزمایشگر برای ثابت نگه داشتن فاصله از سطح، یا به عبارتی جریان، بستگی دارد. اکنون این کار را می‌توان با پایه‌های سرامیکی (پیزوالکتریک) انجام داد، که وقتی میدان الکتریکی به آنها اعمال می‌شود منبسط یا منقبض می‌شوند. محل آنها را می‌توان با دقت بسیار زیاد با تداخل‌سنج تعیین کرد، و از این راه می‌توان فاصله ثابتی بین نوک و سطح روییده برقرار کرد.

از STM برای مطالعه سطوح فلزات و بعضی نیم‌رساناها استفاده کرده‌اند. به‌تازگی، اتمها و مولکولها را روی سطوح، یا با لغزاندن آنها توسط نوک یا با بلند کردن آنها از سطح و نشانیدن آنها در جای دیگر توسط نوک، جابه‌جا کرده‌اند.

پدیده تونل‌زنی همچنین وقتی روی می‌دهد که دو صفحه فلزی را به هم نزدیک کنیم. شکل ۶-۵ وضعیت را بدون اختلاف پتانسیل و با اختلاف پتانسیل نشان می‌دهد. بدون اختلاف پتانسیل، تونل‌زنی ممکن نیست زیرا ترازها در دو طرف سد پر هستند. اعمال حتی یک میدان الکتریکی ضعیف باعث تغییر شکل جزئی سد — اثری که قابل چشمپوشی است — و پایین رفتن دریای فرمی در یک طرف سد می‌شود. در نتیجه، چند تراز خالی متناظر با ترازهای پر در طرف دیگر سد به وجود می‌آیند، و اکنون تونل‌زنی می‌تواند با ضریب تراگسیل زیر روی دهد

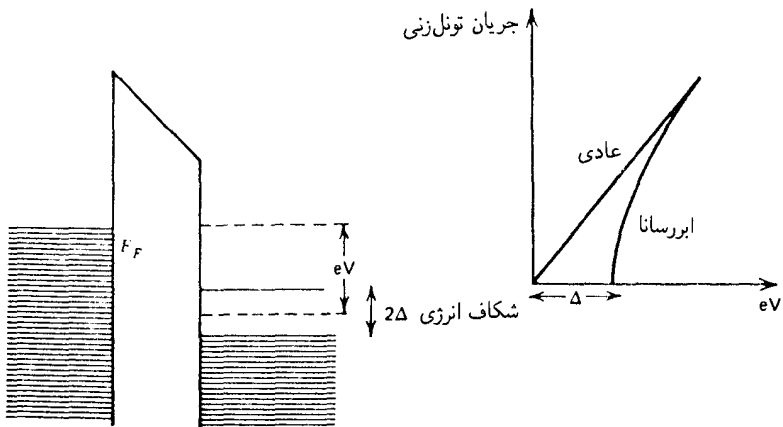
$$|T|^2 \simeq e^{-2\sqrt{(2mW/h^2)a}} \quad (۴۷-۵)$$

این عامل مانند مقاومت عمل می‌کند. متأسفانه این رابطه به عرض گاف  $\alpha$  بسیار حساس است، و چون برای تابع کاری از مرتبه چند الکترون ولت این عرض باید از مرتبه چند آنگستروم باشد، صاف کردن و موازی کردن صفحه‌های فلزی به اندازه کافی امکانپذیر نیست. این فرمول برای توضیح جریانهایی به کار می‌رود که بین دو صفحه‌ای برقرارند که با یک اکسید از هم جدا شده‌اند (Ni - NiO - Pb) و فاصله آنها را می‌توان تا  $5 \text{ \AA}$  کوچک کرد، و در این مورد با آزمایش توافق دارد.

### تونل‌زنی در ابررساناها

یک اثر جالب توجه وقتی روی می‌دهد که فلز طرف راست در حالت ابررسانایی باشد. یک مشخصه چنین حالتی این است که در بالای تراز فرمی گافی در چگالی تراز وجود دارد، یعنی بین انرژیهای  $E_F + \Delta$  و  $E_F - \Delta$ ، که در آنها  $\Delta$  از مرتبه  $10^{-2} \text{ eV}$  و انرژی فرمی  $E_F$  از مرتبه  $1 \text{ eV}$  است، هیچ حالت مجازی وجود ندارد. این ترازها از بین نمی‌روند بلکه به بالا و پایین فشرده می‌شوند، و در نتیجه چگالی تراز درست در پایین و بالای گاف بسیار زیاد است. اگر میدان الکتریکی به اندازه کافی کوچک باشد، یعنی اگر  $a\mathcal{E} \leq \Delta/e$ ، تونل‌زنی روی نخواهد داد زیرا الکترونها جایی برای رفتن ندارند. ویژگیهای کیفی رابطه جریان-ولتاژ و نمودار انرژی در شکل ۷-۵ نشان داده شده‌اند. این ویژگیها با آزمایشهایی که جیائور برای نخستین بار در سال ۱۹۶۰ انجام داد. به خوبی توافق دارند.

از این آزمایشهای تونل‌زنی می‌توان برای مطالعه جزئیات حالت ابررسانایی استفاده کرد. اعتقاد بر این است که گاف موجود در چگالی تراز انرژی در بالای دریای فرمی ناشی از جاذبه میان



شکل ۷-۵ نمودار انرژی برای تونل‌زنی از فلز به ابررسانا. در اینجا، برخلاف تونل‌زنی فلز-فلز در شکل ۶-۵، تونل‌زدن به درون گاف انرژی مجاز نیست. این وضعیت، چنانکه نشان داده شده است، بر مشخصه جریان-ولتاژ تأثیر می‌گذارد.

زوجهای الکترون است، و برابر است با انرژی لازم برای شکستن این زوج. با این تصویر، می‌توان انتظار داشت که پرتوهای به "ساندویچ" ابررسانا-اکسید-ابررسانا بعضی از زوجها را بشکند، و تک‌الکترونیایی که از فوتونها انرژی جنبشی می‌گیرند می‌توانند به ناحیه ترازهای اشغال‌نشده در بالای گاف بروند، و سپس در گاف تونل بزنند، و در نتیجه جریان افزایش می‌یابد. این تونل‌زنی "فوتون-یاری" مشاهده شده است. در مثالهای دیگر تونل‌زنی در ابررساناها اتصالهای جوزفسون دخالت دارند.<sup>۴</sup>

### تونل‌زنی در فیزیک هسته‌ای

پدیده تونل‌زنی در فیزیک هسته‌ای نیز اهمیت دارد. هسته‌ها دستگاههای بسیار پیچیده‌ای هستند، اما در شرایط خاصی می‌توان آنها را به صورت ذرات مستقلی در نظر گرفت که ترازهای یک چاه پتانسیل را اشغال کرده‌اند. با این تصویر ذهنی، واپاشی یک هسته به ذره  $\alpha$  (هسته هلیوم با  $Z = 2$ ) و هسته فرزند را می‌توان تونل‌زنی ذره  $\alpha$  در سدی توصیف کرد که از پتانسیل کولنی میان هسته فرزند و ذره  $\alpha$  ناشی می‌شود. ذره  $\alpha$  را نباید در حالت مقید در نظر گرفت؛ اگر چنین بود، هسته نمی‌توانست واپاشد. در واقع، باید انرژی این ذره را مثبت گرفت، و تنها مانع واپاشی آن وجود سد است.<sup>۵</sup>

می‌نویسیم

$$|T|^2 = e^{-G} \quad (48-5)$$

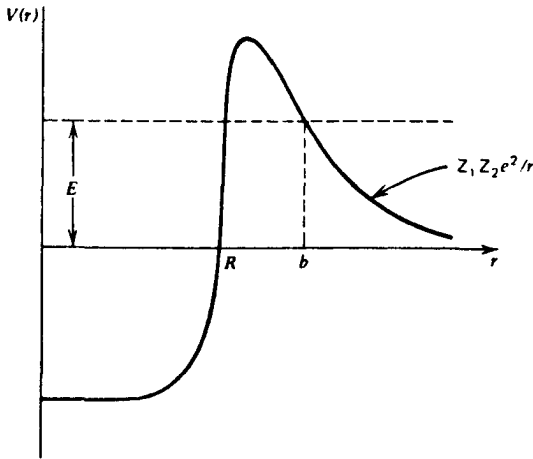
که در آن

$$G = 2 \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{1/2} \int_R^b dr \left( \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} - E \right)^{1/2} \quad (49-5)$$

$R$  شعاع هسته است<sup>۶</sup>، و  $b$  نقطه برگشت است که از صفر شدن انتگرالده به دست می‌آید (شکل ۵-۸)؛  $A_1$  بار هسته فرزند، و  $Z_2$  بار ذره‌ای است که گسیل می‌شود (در اینجا برابر با ۲ است). انتگرال را

۴. بحث زیبایی درباره ابررسانایی و اثرهای مختلف جوزفسون را می‌توان در فصل ۲۱ از جلد سوم کتاب زیر یافت: R H Feynman, R B Leighton and M Sands, *Feynman Lectures on Physics*, Addison-Wesley, Reading Mass, 1965.

۵. اگر تصور این امر برای شما مشکل است که دافعه مانع جدا شدن دو جسم می‌شود، فرایند وارون، یعنی گیراندازی  $\alpha$ ، را در نظر بگیرید. بدیهی است که سد می‌خواهد ذره  $\alpha$  را دور نگه دارد.  
 ۶. در واقع، اولین برآوردهای شعاع هسته از مطالعه واپاشی آلفاها به دست آمدند. امروزه از اندازه توزیع بار که با پراکندگی الکترونها از هسته‌ها به دست می‌آید برای تعیین شعاع هسته‌ها استفاده می‌کنند. البته نباید انتظار داشت که این دو رهافت دقیقاً نتیجه یکسانی به دست دهند.



شکل ۸-۵ سد پتانسیل برای واباشی آلفاها.

می توان دقیقاً محاسبه کرد:

$$\int_R^b dr \left( \frac{1}{r} - \frac{1}{b} \right)^{1/2} = \sqrt{b} \left[ \cos^{-1} \left( \frac{R}{b} \right)^{1/2} - \left( \frac{R}{b} - \frac{R^2}{b^2} \right)^{1/2} \right] \quad (50-5)$$

در انرژیهای کم (نسبت به ارتفاع سد کولنی در  $r = R$  داریم  $b \gg R$  و در نتیجه

$$G \simeq 2 \left( \frac{2mZ_1 Z_2 e^2 b}{h^2} \right)^{1/2} \left[ \frac{\pi}{2} - \left( \frac{R}{b} \right)^{1/2} \right] \quad (51-5)$$

که در آن  $b = Z_1 Z_2 e^2 / E$ . اگر برای انرژی ذره  $\alpha$  بنویسیم  $E = mv^2/2$  که در آن  $v$  سرعت نهایی ذره است، به دست می آوریم

$$G \simeq \frac{2\pi Z_1 Z_2 e^2}{hv} = 2\pi\alpha Z_1 Z_2 \left( \frac{c}{v} \right) \quad (52-5)$$

زمانی را که طول می کشد تا ذره  $\alpha$  از هسته خارج شود می توان به روش زیر برآورد کرد: احتمال عبور از سد در هر برخورد  $e^{-G}$  است. بنابراین، تعداد برخوردهای لازم برای خروج برابر است با  $n \simeq e^G$ . زمان بین برخوردها از مرتبه  $2R/v$  است که در آن  $R$  شعاع هسته و  $v$  سرعت ذره  $\alpha$  در داخل هسته است. بنابراین، طول عمر برابر است با

$$\tau \simeq \frac{2R}{v} e^G \quad (53-5)$$

سرعت ذره  $\alpha$  در داخل هسته مفهوم مبهمی است، و کل تصویر در واقع کلاسیک است، و از این‌رو عامل جلو  $e^G$  را نمی‌توان بدون یک نظریه مناسبتر به‌درستی پیش‌بینی کرد. از ملاحظات بالا تنها مرتبه بزرگی آن را به‌دست می‌آوریم. برای ذره  $\alpha$  با انرژی  $1\text{ MeV}$  داریم

$$v = \sqrt{\frac{2E}{m}} = c \sqrt{\frac{2E}{mc^2}} = 3 \times 10^{10} \sqrt{\frac{2}{4 \times 940}} \approx 7.0 \times 10^8 \text{ cm/s}$$

علاوه بر این، برای  $R$  می‌گیریم

$$R \approx 1.5 \times 10^{-12} A^{1/2} \text{ cm} \quad (54-5)$$

و به‌ازای  $A = 216$ ، عامل مزبور را  $2.6 \times 10^{-21}$  به‌دست می‌آوریم. همچنین، می‌توان  $G$  را به‌صورت زیر نوشت

$$G \approx 4 \frac{Z_1}{\sqrt{E(\text{MeV})}} \quad (55-5)$$

بنابراین، برای  $\alpha$ های کم‌انرژی، خط راست زیر به‌دست می‌آید

$$\log_{10} \frac{1}{\tau} \approx \text{const.} - 1.73 \frac{Z_1}{\sqrt{E(\text{MeV})}} \quad (56-5)$$

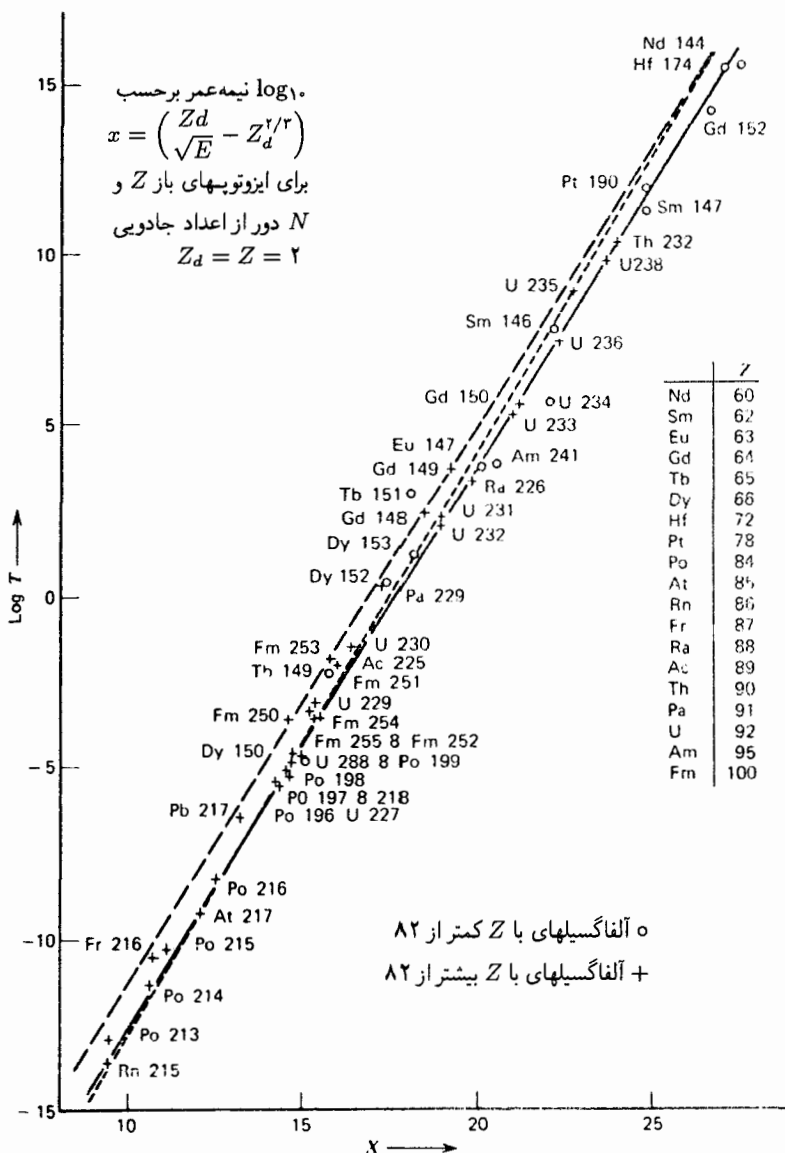
که ثابت آن، وقتی  $\tau$  به‌جای ثانیه به‌حساب سال سنجیده می‌شود، از مرتبه ۲۷ تا ۲۸ است. شکل ۹-۵ نشان می‌دهد که با داده‌های مربوط به طول عمر تعداد زیادی گسیلنده‌های  $\alpha$  برازش خوبی با فرمول زیر به‌دست می‌آید

$$\log_{10} \frac{1}{\tau} = C_2 - C_1 \frac{Z_1}{\sqrt{E}}$$

که در آن  $C_1 = 1.61$  و  $C_2 = 28.9 + 1.6 Z_1^{1/2}$ . بدین ترتیب، ملاحظات بسیار ساده برازش نسبتاً چشمگیری با داده‌ها به‌دست می‌دهند.

برای انرژی‌های بزرگتر  $\alpha$ ، عامل  $G$  تابع  $R$  است، و با  $R = r_0 A^{1/2}$  می‌بینیم که  $r_0$  ثابت است، یعنی این تصور که یک سد کولنی جای پتانسیل واقعی را در خارج از هسته به‌عهده گرفته است چندان بی‌اعتبار نیست. در اینجا نیز با بررسی‌های ساده کیفی می‌توان داده‌ها را توجیه کرد. این واقعیت که احتمال یک واکنش (مثلاً گیراندازی) بین هسته‌ها با عامل  $e^{-2(Z_1 Z_2 / \sqrt{E})}$  (برای  $\alpha$ ،  $Z_2 = 2$ ) کاهش می‌یابد ایجاب می‌کند که در انرژی‌های کم و یا برای  $Z$ های بزرگ این



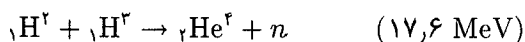
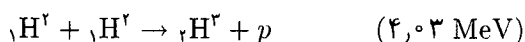
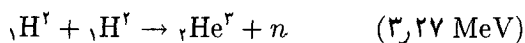


شکل ۹-۵ نمودار  $\log_{10} T$  بر حسب  $C_7 = 1.61 \times 10^{-4} Z^{-1} + 2.89 \times 10^{-4} Z^{1/3}$  و  $C_8 = 1.61 \times 10^{-4} Z^{-1} - 1.61 \times 10^{-4} Z / \sqrt{E}$  که کند تغییر است.<sup>۷</sup>

واکنشها نادر باشند. به همین دلیل است که تمام کوششها برای ساختن رآکتورهای گرمایسته‌ای را

7. E. K. Hyde, I. Perlman, and G. T. Seaborg, *The Nuclear Properties of the Heavy Elements*, Vol. 1, Prentice Hall, Englewood Cliffs, N. J. (1964), reprinted by permission.

روی سوختن هیدروژن (در واقع هیدروژن سنگین — دوتریم) متمرکز می‌کنند:



زیرا واکنشهایی که در آنها عناصری با  $Z$ های بزرگتر دخیل‌اند به انرژیهای بسیار بیشتر، یعنی دماهای بسیار زیادتر، نیاز دارند، و از این رو مسائل محصورسازی آنها جدی‌تر است. به همین دلیل، در رآکتورهای هسته‌ای برای شکافت عناصر سنگین از نوترون استفاده می‌کنند. پروتونها، در انرژیهای کم موجود، نمی‌توانند برای انجام واکنش با هسته‌ها به اندازه کافی به آنها نزدیک شوند.

### حالت‌های مقید در چاه پتانسیل

علاوه بر جوابهای مربوط به  $E > 0$  که در بخش چاه پتانسیل بررسی کردیم، جالب توجه است که برای پتانسیل منفی، یعنی  $V_0 > 0$  در  $V_0 < 0$ ، جوابهایی به‌ازای  $E < 0$  نیز وجود دارند. خواهیم دید که این جوابها گسسته‌اند. با نمادنگاری

$$\kappa^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} \quad (57-5)$$

جوابهای مربوط به ناحیه‌های خارج از چاه که در بینهایت کراندار هستند عبارت‌اند از

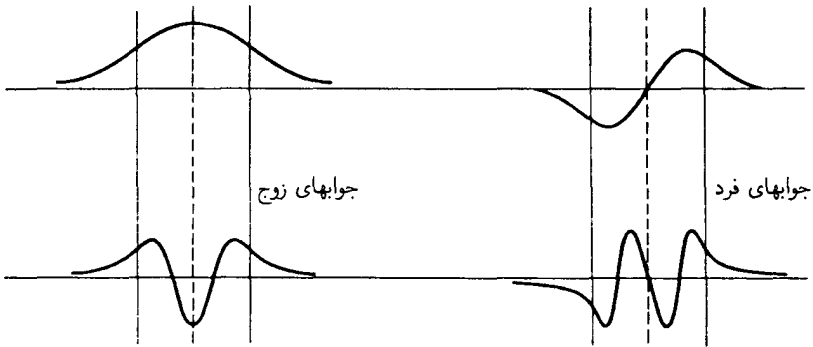
$$\begin{aligned} u(x) &= C_1 e^{\kappa x} & x < -a \\ u(x) &= C_2 e^{-\kappa x} & a < x \end{aligned} \quad (58-5)$$

چون با تابعهای حقیقی سروکار داریم، بهتر است جواب داخل چاه را به‌صورت زیر بنویسیم

$$u(x) = A \cos qx + B \sin qx \quad -a < x < a \quad (59-5)$$

توجه کنید که

$$q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - |E|) > 0 \quad (60-5)$$



شکل ۱۰-۵ جوابهای مربوط به طیف گسسته در چاه پتانسیل جاذب.

از جور کردن جوابها و مشتقها در لبه‌های  $x = \pm a$  داریم

$$C_1 e^{-\kappa a} = A \cos qa - B \sin qa$$

$$\kappa C_1 e^{-\kappa a} = q(A \sin qa + B \cos qa)$$

(۶۱-۵)

$$C_2 e^{-\kappa a} = A \cos qa + B \sin qa$$

$$-\kappa C_2 e^{-\kappa a} = -q(A \sin qa - B \cos qa)$$

از ترکیب این معادله‌ها به دست می‌آوریم

$$\kappa = q \frac{A \sin qa - B \cos qa}{A \cos qa + B \sin qa}$$

(۶۲-۵)

$$= q \frac{A \sin qa - B \cos qa}{A \cos qa + B \sin qa}$$

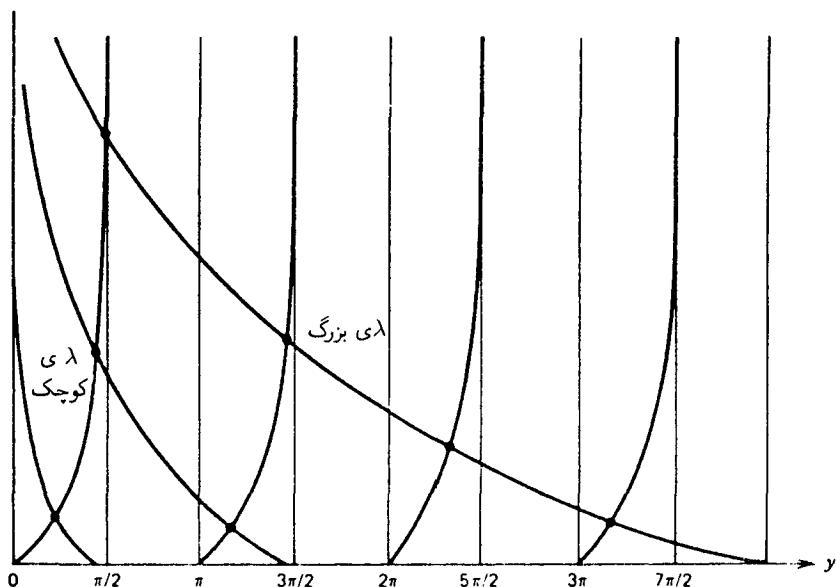
این تساوی ایجاب می‌کند که  $AB = 0$ ، یعنی جوابها نسبت به  $x$  یا زوج‌اند ( $B = 0$ ) یا فرد ( $A = 0$ ). این توابع موج تقریباً به صورتی هستند که در شکل ۱۰-۵ نشان داده شده‌اند. حالت پایه، که گره ندارد، زوج است. این یک ویژگی کلی دستگاههای ساده است. شرایط تعیین‌کننده انرژی از ۶۲-۵ به دست می‌آیند:

$$\kappa = q \tan qa \quad \text{جوابهای زوج}$$

$$\kappa = -q \cot qa \quad \text{جوابهای فرد}$$

(۶۳-۵)

این رابطه‌ها را جدا از هم بررسی می‌کنیم.



شکل ۱۱-۵ موقعیت ویژه‌مقدارهای گسسته برای جوابهای زوج در چاه مربعی. منحنیهای صعودی نمودار  $\tan y$  هستند؛ منحنیهای نزولی تابع  $\sqrt{\lambda - y^2}/y$  را به‌ازای مقادیر مختلف  $\lambda$  نمایش می‌دهند.

(الف) جوابهای زوج:

با نمادنگاری

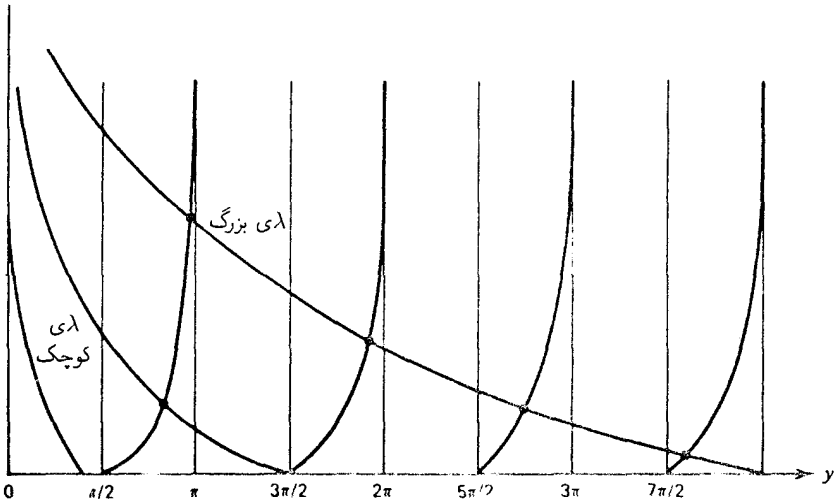
$$\lambda = \frac{2mV_0 a^2}{h^2} \quad (۶۴-۵)$$

$$y = qa$$

اولین رابطه از ۶۳-۵ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y} = \tan y \quad (۶۵-۵)$$

اگر  $\tan y$  و  $\sqrt{\lambda - y^2}/y$  را برحسب  $y$  ترسیم کنیم (شکل ۱۱-۵)، نقاط تلاقی آنها ویژه‌مقدارها را تعیین می‌کنند. این ویژه‌مقدارها یک مجموعه گسسته تشکیل می‌دهند. هر چه  $\lambda$  بزرگتر باشد، منحنیهای مربوط به  $\sqrt{\lambda - y^2}/y$  دورتر می‌روند، یعنی وقتی پتانسیل عمیقتر و یا پهنتر است تعداد حالت‌های مقید بیشتر است. این شکل همچنین نشان می‌دهد که هر قدر هم  $\lambda$  کوچک باشد، همیشه دست‌کم یک حالت مقید وجود دارد. این مشخصه چاه جاذب یک‌بعدی است و برای



شکل ۱۲-۵ موقعیت ویژه مقدارهای گسسته برای جوابهای فرد در چاه مربعی. منحنیهای صعودی نمودار  $-\cot y$  هستند؛ منحنیهای نزولی تابع  $\sqrt{\lambda - y^2}/y$  را به ازای مقادیر مختلف  $\lambda$  نمایش می دهند. توجه کنید که به ازای  $(\pi/2)^2 < \lambda$  هیچ ویژه مقدار فردی وجود ندارد.

پتانسیلهای سه بعدی، که رفتاری بسیار شبیه به مسئله جوابهای فرد دارند که بعداً بررسی می کنیم، صادق نیست. با بزرگتر شدن  $\lambda$ ، فاصله ویژه مقدارها برحسب  $y$  به مقدار ثابتی میل می کند، و نقاط تلاقی از رابطه تقریبی زیر به دست می آیند

$$y \simeq \left(n + \frac{1}{4}\right) \pi \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (۶۶-۵)$$

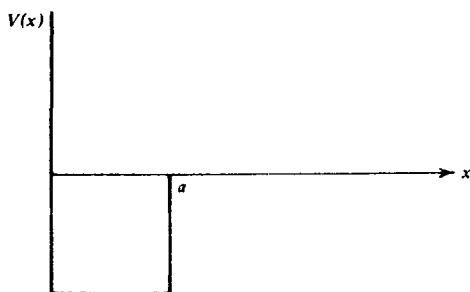
که همان رابطه ویژه مقدار برای جوابهای زوج در یک چاه نامتناهی است که مرکز آن در مبدأ است (ویژه تابها در ۴-۴۸ داده شده اند). این نتیجه غیرمنتظره نیست، زیرا برای حالتی که در اعماق چاه قرار دارند نامتناهی بودن آن اهمیت چندانی ندارد.

(ب) جوابهای فرد:

در اینجا رابطه ویژه مقدار به صورت زیر است

$$\frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y} = -\cot y \quad (۶۷-۵)$$

چون  $-\cot y = \tan(\pi/2 + y)$ ، نمودار شکل ۱۲-۵ همان نمودار شکل ۱۱-۵ است با این تفاوت که منحنیهای تانژانت به اندازه  $\pi/2$  جابه جا شده اند. رفتار  $\lambda$  بزرگ کم و بیش یکسان است.



شکل ۱۳-۵ پتانسیل معادل برای جوابهای فرد مسئله حالت مقید چاه مربعی.

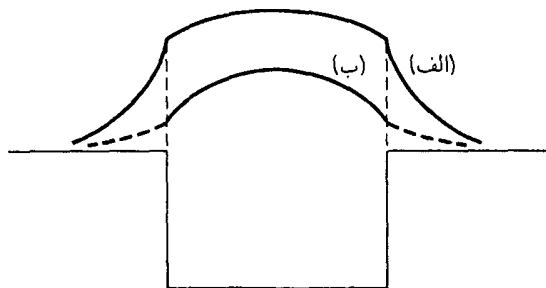
و به جای ۶۶-۵ داریم

$$y \simeq n\pi \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (۶۸-۵)$$

برخلاف مورد جوابهای زوج، در اینجا به شرطی تلاقی روی می‌دهد که  $\sqrt{\lambda^2 - \pi^2/4} > 0$ ، یعنی اگر

$$\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} \geq \frac{\pi^2}{4} \quad (۶۹-۵)$$

جوابهای فرد همگی در  $x = 0$  صفر می‌شوند، و در نتیجه مسئله حالت مقید برای جوابهای فرد با مورد چاه پتانسیل شکل ۱۳-۵ یکسان است، زیرا برای این چاه باید شرط  $u(0) = 0$  را اعمال کنیم. خواهیم دید که چنین شرایطی بر توابع موج در جهان سه‌بعدی اعمال می‌شوند. محاسبات مفصلی که انجام دادیم به درک کیفی علت وجود ویژه‌مقدارهای گسسته کمک می‌کنند. این ویژه‌مقدارها از این رو ظاهر می‌شوند که توابع موج باید در بینهایت صفر شوند. این را می‌توان به صورت نموداری در شکل ۱۴-۵ دید. تابع موج حالت پایه زوج-پاریته در داخل چاه، که به صورت  $\cos qx$  است، باید به‌طور پیوسته به یک نمایی نزولی  $e^{-\alpha|x|}$  با  $\alpha^2 = 2mE_B/\hbar^2$  متصل شود. انرژی بستگی بزرگ به معنای یک نمایی است که به سرعت افت می‌کند. چون  $q^2 = (2mV_0/\hbar^2 - \alpha^2)$ ، انرژی بستگی بزرگ به معنای  $q^2$ ی کوچک است، یعنی تابع موج کاملاً تخت است؛ بنابراین، جور کردن ناممکن است. به تدریج که  $E_B$ ی آزمونی را کاهش می‌دهیم، نمایی با سرعت کمتری افت می‌کند و تابع موج داخل چاه خمیدگی بیشتری می‌یابد، و در نتیجه در یک نقطه جور کردن (شیب پیوسته) ممکن می‌شود. اگر مقدار  $\alpha$  را از این نقطه کمتر کنیم، منحنی خارجی تخت‌تر از آن خواهد بود که با تابع موج خمیده‌تر داخلی جور شود. برای اولین حالت برانگیخته، تابع موج فرد-پاریته در مبدأ صفر می‌شود، و در نتیجه اگر بتواند در داخل چاه پتانسیل به طرف محور افقی برگردد تنها می‌تواند به یک نمایی نزولی متصل شود. شرط برگشت آن درست



شکل ۵-۱۴ (الف) ناجوری با  $E_B$  بیش از حد بزرگ. (ب) ناجوری با  $E_B$  بیش از حد کوچک.

به اندازه‌ای که بتواند به یک خط راست ( $\alpha = 0$ ) متصل شود این است که  $\sin qa = 1$ ، و در نتیجه  $qa = \pi/2$ ، که با شرط ۵-۶۹ متناظر است.

### پتانسیلهای تابع دلتا

پتانسیلی را در نظر می‌گیریم که رفتار فضایی آن به صورت  $\delta(x)$  است. چون  $\delta(x)$  دارای بعد عکس طول است، بهتر است که پتانسیل جاذب  $V(x)$  را به صورت زیر بنویسیم

$$V(x) = -\frac{\hbar^2 \lambda}{2ma} \delta(x) \quad (70-5)$$

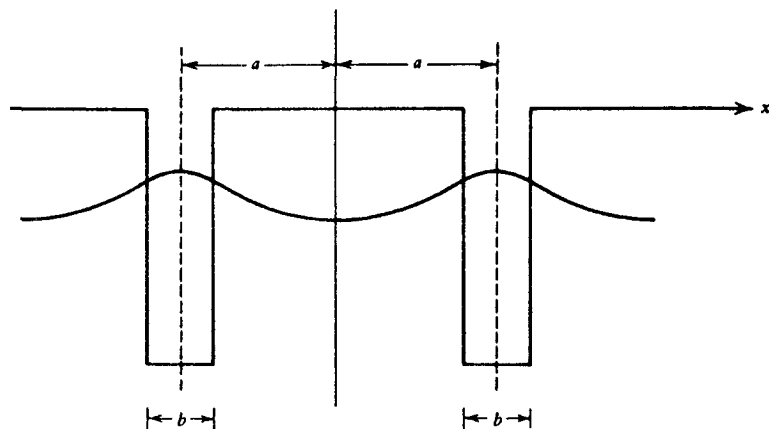
در اینجا  $a$  یک کمیت اختیاری با بعد طول است، و در نتیجه  $\lambda$  کمیت بی‌بعدی است که آن را برای مشخص کردن قدرت پتانسیل نوشته‌ایم. معادله‌ای که باید حل کنیم، به ازای  $E < 0$ ، عبارت است از

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} - \kappa^2 u(x) = -\frac{\lambda}{a} \delta(x) u(x) \quad (71-5)$$

که در آن  $\kappa^2 = 2m|E|/\hbar^2$ . جواب باید در همه جا، بجز  $x = 0$ ، در معادله  $d^2 u/dx^2 - \kappa^2 u = 0$  صدق کند، و اگر بخواهیم در  $x \rightarrow \pm\infty$  صفر شود باید بنویسیم

$$u(x) = \begin{cases} e^{-\kappa x} & x > 0 \\ e^{\kappa x} & x < 0 \end{cases} \quad (72-5)$$

به دلیل پیوستگی تابع موج، ضرایب جوابهای دو ناحیه یکسان هستند (و در اینجا آنها را برابر با  $1$  گرفته‌ایم—می‌توان بعداً تابع را بهنجار کرد). مشتق تابع موج در این مورد پیوسته نیست. چنانکه



شکل ۱۵-۵ چاه پتانسیل یک بعدی دوگانه. تابع موج یک حالت مقید ترسیم شده است. وضعیت حدی ۷۵-۵ را در نظر می‌گیریم.

قبلاً گفتیم (معادله ۱۳-۵)، داریم

$$\left(\frac{du}{dx}\right)_{x=0^+} - \left(\frac{du}{dx}\right)_{x=0^-} = -\frac{\lambda}{a}u(0) \quad (73-5)$$

از اینجا رابطه ویژه مقدار به دست می‌آید:

$$-\kappa - \kappa = -\frac{\lambda}{a}$$

یعنی

$$\kappa = \frac{\lambda}{2a} \quad (74-5)$$

پتانسیل تابع دلتای دوگانه جالبتر است زیرا راه سریعی برای مطالعه خواص چاه دوگانه عمیق و کم عرض، که در شکل ۱۵-۵ نشان داده شده است، فراهم می‌کند. می‌نویسیم

$$(2m/\hbar^2)V(x) = -\frac{\lambda}{a}[\delta(x-a) + \delta(x+a)] \quad (75-5)$$

در اینجا  $a$  در توصیف بزرگی پتانسیل دیگر یک طول اختیاری نیست، بلکه به شکل پتانسیل بستگی دارد. چون پتانسیل تحت تعویض  $x \rightarrow -x$  متقارن است، جوابها باید پارامتر معین داشته باشند، و ابتدا جوابهای زوج را در نظر می‌گیریم.



۱. برای جواب زوج می نویسیم

$$\begin{aligned} u(x) &= e^{-\kappa x} & x > a \\ &= A \cosh \kappa x & a > x > -a \\ &= e^{\kappa x} & x < -a \end{aligned} \quad (۷۶-۵)$$

و از پیوستگی تابع موج به دست می آوریم

$$e^{-\kappa a} = A \cosh \kappa a \quad (۷۷-۵)$$

به علت تقارن، کافی است شرط ناپوستگی برای مشتق در  $x = a$  را به کار ببریم. چیز جدیدی از  $x = -a$  حاصل نمی شود. به دست می آوریم

$$-\kappa e^{-\kappa a} - \kappa A \sinh \kappa a = -\frac{\lambda}{a} e^{-\kappa a} \quad (۷۸-۵)$$

و رابطه ویژه مقدار عبارت است از

$$\tanh \kappa a = \frac{\lambda}{\kappa a} - 1 \quad (۷۹-۵)$$

این رابطه را می توان به صورت زیر نوشت

$$\frac{\lambda}{\kappa a} - 1 = \frac{e^{\kappa a} - e^{-\kappa a}}{e^{\kappa a} + e^{-\kappa a}} = \frac{1 - e^{-2\kappa a}}{1 + e^{-2\kappa a}}$$

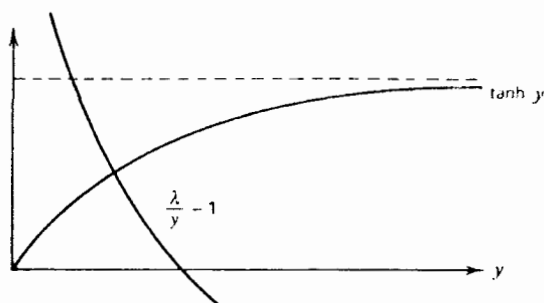
که از آن به دست می آوریم

$$e^{-2\kappa a} = \frac{2\kappa a}{\lambda} - 1 \quad (۸۰-۵)$$

برای  $\lambda$  بزرگ باید  $2\kappa a$  اندکی بزرگتر از  $\lambda$  باشد. اگر  $2\kappa a = \lambda + \epsilon$  را امتحان کنیم، معادله ۸۰-۵ تا مرتبه  $\epsilon$  به صورت  $\epsilon/\lambda \approx e^{-\lambda}$  در می آید، و بنابراین

$$2\kappa a = \lambda + \lambda e^{-\lambda} \quad (۸۱-۵)$$

می توان دید که برای جواب زوج همواره یک تک حالت مقید وجود دارد. شکل ۱۶-۵ نمودار معادله

شکل ۱۶-۵ حل معادله ویژه مقدار  $\lambda/y - 1 = \tanh y$ .

ویژه مقدار ۷۹-۵ را با  $\kappa a = \lambda/y$  نشان می‌دهد. از این شکل واضح است که، منحنی  $\tanh y$  با  $\lambda/y - 1$  تنها در یک نقطه تلاقی می‌کند. بدیهی است که در  $y = \lambda$  طرف راست ۷۹-۵ صفر می‌شود، در حالی که  $\tanh y > 0$ . بنابراین، تلاقی به‌ازای  $y < \lambda$  روی می‌دهد. از طرف دیگر، چون  $\tanh y < 1$ ، باید در نقطه تلاقی داشته باشیم  $\lambda/y < 2$ ، یعنی

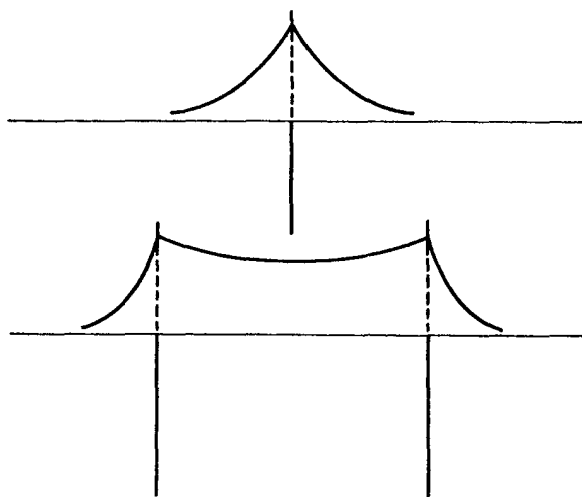
$$\kappa > \frac{\lambda}{2a} \quad (۸۲-۵)$$

از مقایسه این رابطه با ۷۴-۵ می‌بینیم که انرژی برای چاه دوگانه عدد منفی بزرگتری است، یعنی انرژی در این مورد کمتر است. توجه کنید که علت این امر این نیست که قدرت یک جفت پتانسیل از قدرت یک تک پتانسیل بیشتر است، چنانکه برای یک الکترون مقید به دو پروتون در مقایسه با یک الکترون مقید به یک پروتون صادق است. علت وابستگی شدیدتر آن است که، همان‌طور که شکل ۱۷-۵ نشان می‌دهد، همساز کردن یک نمایی سریعاً نزولی به یک تابع متقارن (در اینجا  $\cosh x$ ) با یک ناپوستگی در شیب به‌صورتی که داده شده است، آسانتر از همساز کردن آن با یک نمایی به همان اندازه نزولی در طرف دیگر پتانسیل است. در جهان واقعی، انرژی یک تک الکترون مقید به دو پروتون که فاصله کمی از یکدیگر دارند کمتر از انرژی یک تک پروتون به‌علاوه یک اتم هیدروژن در دور دست است، اگرچه برای مورد اول دافعه مؤثرتری بین پروتونها وجود دارد. در اینجا نیز اثر غالب، نحوه همسازی تابع موج با وضعیت هندسی است.

۲. جواب فرد به‌صورت زیر است

$$\begin{aligned} u(x) &= e^{-\kappa x} & x > a \\ &= A \sinh \kappa x & a > x > -a \\ &= -e^{\kappa x} & x < -a \end{aligned} \quad (۸۳-۵)$$

باز هم، به‌دلیل یاد تقارن، کافی است شرایط را در مثلاً  $x = a$  به‌کار ببریم. از پیوستگی تابع موج



شکل ۱۷-۵ توابع موج حالت مقید برای پتانسیلهای تابع دلتای جاذب تک و دوگانه. قدرت پتانسیل را ناپوستگی شیبهای تابع موج در پتانسیلها تعیین می‌کند. این در هر سه مورد یکسان است و نشان می‌دهد که برای پتانسیل دوگانه افت با شیب تندتر به طرف راست و به طرف چپ امکانپذیر است.

داریم

$$A \sinh \kappa a = e^{-\kappa a} \quad (۱۴-۵)$$

و معادله ناپوستگی عبارت است از

$$-\kappa e^{-\kappa a} - \kappa A \cosh \kappa a = -\frac{\lambda}{a} e^{-\kappa a} \quad (۱۵-۵)$$

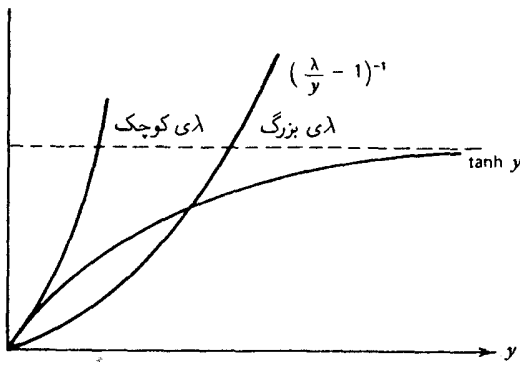
از ترکیب این دو معادله شرط ویژه مقدار به دست می‌آید:

$$\coth \kappa a = \frac{\lambda}{\kappa a} - 1 \quad (۱۶-۵)$$

این معادله را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\frac{\lambda}{\kappa a} - 1 = \frac{e^{\kappa a} + e^{-\kappa a}}{e^{\kappa a} - e^{-\kappa a}} = \frac{1 + e^{-2\kappa a}}{1 - e^{-2\kappa a}}$$

درست مانند مورد ویژه مقدار حالت پایه، می‌توان جواب را به ازای  $\lambda \gg 1$  تعیین کرد. این جواب



شکل ۱۸-۵ حل رابطه ویژه مقدار  $(\lambda/y - 1)^{-1}$   $\tanh y =$

از تغییر علامت  $e^{-2\kappa a}$  به دست می‌آید، و در نتیجه داریم

$$2\kappa a = \lambda - \lambda e^{-\lambda} \quad (۱۷-۵)$$

می‌توان نشان داد که این جواب فرد حداکثر یک حالت مقید دارد. شکل ۱۸-۵ نمودار عکس معادله ویژه مقدار یعنی

$$\tanh \kappa a = \left( \frac{\lambda}{\kappa a} - 1 \right)^{-1}$$

را با  $y = \kappa a$  نشان می‌دهد.

تنها در صورتی یک نقطه تلاقی وجود دارد که در مبدأ شیب  $\tanh y$  بزرگتر از شیب  $(\lambda/y - 1)^{-1}$  باشد، یعنی اگر

$$\lambda > 1 \quad (۱۸-۵)$$

در  $y = \lambda/2$ ، جمله  $(\lambda/y - 1)^{-1}$  برابر با ۱ است، در نتیجه تلاقی باید به ازای  $y < \lambda/2$  روی دهد، یعنی

$$\kappa < \frac{\lambda}{2a} \quad (۱۹-۵)$$

بنابراین، جواب فرد، اگر حالت مقیدی وجود داشته باشد، نسبت به جواب زوج با شدت کمتری مقید است. تابع موج، که باید از صفر بگذرد، باید بین دیواره‌ها شیب تندی داشته باشد، و از این رو

تنها می‌تواند به یک نمایی همساز شود که با سرعت کمتری افت می‌کند. بسته به اندازه  $\lambda$ ، ممکن است یک حالت مقید با پارامتر فرد وجود داشته باشد یا نداشته باشد.

اکنون برهم‌نهی از حالت پایه  $u_e(x)$  با انرژی  $E_e$  و حالت برانگیخته  $u_o(x)$  با انرژی  $E_o$  را به صورت زیر در نظر می‌گیریم ( $e$  و  $o$  به ترتیب معرف زوج و فرد هستند)

$$\psi(x) = \frac{u_e(x) + \alpha u_o(x)}{\sqrt{1 + \alpha^2}} \quad (90-5)$$

که در آن  $\alpha$  را به گونه‌ای انتخاب می‌کنیم که  $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2$  تا حد امکان کوچک شود، یعنی "الکترون" در دورترین فاصله ممکن در طرف راست جایگزیده باشد. پس از زمان  $t$ ، تابع موج به صورت زیر درمی‌آید

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= (u_e(x)e^{-iE_e t/\hbar} + \alpha u_o(x)e^{-iE_o t/\hbar})/\sqrt{1 + \alpha^2} \\ &= e^{-iE_e t/\hbar} [u_e(x) + \alpha e^{-i(E_o - E_e)t/\hbar} u_o(x)]/\sqrt{1 + \alpha^2} \end{aligned} \quad (91-5)$$

یعنی رابطه فاز میان دو قسمت تغییر می‌کند. به ویژه، در زمانی که به ازای آن

$$e^{-i(E_o - E_e)t/\hbar} = -1 \quad (92-5)$$

"الکترون"، دقیقاً همان گونه که در  $t = 0$  در طرف راست جایگزیده بود، در طرف چپ جایگزیده می‌شود. بنابراین، الکترون رفتاری نوسانی دارد که می‌توان آن را با رفت و برگشت الکترون بین دو پتانسیل با بسامد زیر بیان کرد

$$\omega = \omega_{oe} = \frac{E_o - E_e}{\hbar} \quad (93-5)$$

با استفاده از مقادیر انرژی به ازای  $\lambda$  بزرگ به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{1}{\hbar} \frac{\hbar^2}{2ma^2} (-(\kappa_o a)^2 - (-(\kappa_e a)^2)) \\ &= \frac{\hbar}{2ma^2} ((\lambda + \lambda e^{-\lambda})^2 - (\lambda - \lambda e^{-\lambda})^2) \\ &= \frac{\hbar \lambda^2}{2ma^2} e^{-\lambda} \\ &= \frac{\hbar}{2ma^2} e^{-\lambda + 2 \ln \lambda} \end{aligned} \quad (94-5)$$

که در آن عامل  $\hbar/2ma^2$  دارای ابعاد بسامد است، و عامل نمایی نشاندهنده وابستگی پارامتری به  $\lambda$  است. می‌توان ثابت کرد که دوره نوسانی که در بالا توصیف کردیم تقریباً برابر با زمان تونل‌زنی در سدی است که دو چاه را از هم جدا می‌کند.<sup>۸</sup>

## الگوی کرونیک-پنی

فلزات معمولاً دارای ساختار بلوری هستند، یعنی یونها آرایشی دارند که از لحاظ فضایی دوره‌ای است. این دوره‌مندی بر حرکت الکترونهاي آزاد در فلز تأثیر می‌گذارد، و این اثر با الگوی ساده‌ای نشان داده می‌شود که اکنون بررسی می‌کنیم. دوره‌مندی ساختار بلوری موجب می‌شود پتانسیل نیز دوره‌ای باشد، و از این رو می‌توان نوشت

$$V(x+a) = V(x) \quad (95-5)$$

چون جمله انرژی جنبشی  $(\hbar^2/2m)(d^2/dx^2)$  با تبدیل  $x \rightarrow x+a$  تغییر نمی‌کند، تمام هامیلتونی تحت جابه‌جایی  $x \rightarrow x+a$  ناوردا است. برای مورد پتانسیل صفر، یعنی وقتی جواب مربوط به یک انرژی معین  $E = \hbar^2 k^2/2m$  به صورت زیر است

$$\psi(x) = e^{ikx} \quad (96-5)$$

جابه‌جایی ایجاب می‌کند

$$\psi(x+a) = e^{ik(x+a)} = e^{ika} \psi(x) \quad (97-5)$$

که جواب اصلی ضرب در یک عامل فاز است، و در نتیجه

$$|\psi(x+a)|^2 = |\psi(x)|^2 \quad (98-5)$$

بنابراین، مشاهده‌پذیرها در  $x$  و  $x+a$  یکسان هستند، یعنی نمی‌توان گفت در  $x$  هستیم یا در  $x+a$ . همچنین در این مثال تأکید می‌کنیم که تفاوت  $\psi(x)$  با  $\psi(x+a)$  تنها در یک عامل فاز است، اما این عامل الزاماً به صورت  $e^{ikx}$  نخواهد بود.

در اینجا به اختصار به بررسی صورتی‌ترین شرط می‌پردازیم. ناوردایی هامیلتونی در جابه‌جایی  $x \rightarrow x+a$  را می‌توان به صورت زیر بررسی کرد. فرض کنید  $D_a$  عملگری است که قاعده عمل

۸. این را می‌توان برای پتانسیلهای شکل ۱۵-۵ توجه کرد. رابطه‌های تقریبی که برای احتمال تراگسیل به دست آورده‌ایم در مورد پتانسیلهای تابع دلنا قابل استفاده نیستند.

آن عبارت است از

$$D_a f(x) = f(x+a) \quad (۹۹-۵)$$

ناوردایی مزبور ایجاب می‌کند که

$$[H, D_a] = 0 \quad (۱۰۰-۵)$$

اکنون به تعیین ویژه‌مقدارهای عملگر  $D_a$  می‌پردازیم. از معادله ویژه‌مقداری

$$D_a \psi(x) = \lambda_a \psi(x) \quad (۱۰۱-۵)$$

و با توجه به

$$D_{-a} D_a f(x) = D_a D_{-a} f(x) = f(x) \quad (۱۰۲-۵)$$

می‌بینیم که  $\lambda_a \lambda_{-a} = 1$ ، و در نتیجه  $\lambda_a$  باید به صورت  $e^{\sigma a}$  باشد. اکنون  $\psi(x)$ ، ویژه‌تابع همزمان  $H$  و  $D_a$ ، را در نظر می‌گیریم و تابع زیر را تعریف می‌کنیم

$$u(x) = e^{-\sigma x} \psi(x) \quad (۱۰۳-۵)$$

با اعمال  $D_a$  به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} D_a u(x) &= u(x+a) = e^{-\sigma(x+a)} D_a \psi(x) \\ &= e^{-\sigma(x+a)} e^{\sigma a} \psi(x) \\ &= e^{-\sigma x} \psi(x) = u(x) \end{aligned} \quad (۱۰۴-۵)$$

بنابراین،  $u(x)$  یک تابع دوره‌ای با دوره‌ای  $a$  است:

$$u(x+a) = u(x) \quad (۱۰۵-۵)$$

و  $\psi(x) = e^{\sigma x} u(x)$ . باید توجه کرد که انتگرال‌پذیری مجذوری ایجاب می‌کند که قسمت حقیقی  $\sigma$  صفر باشد، و در نتیجه ویژه‌تابع همزمان  $H$  و  $D_a$  باید به صورت زیر باشد

$$\psi(x) = e^{i \operatorname{Im} \sigma x} u(x) \quad (۱۰۶-۵)$$

که در آن  $u(x) = u(x + a)$ . بهتر است بنویسیم  $\text{Im}\sigma = \phi/a$ . رابطه ۵-۱۰۶ را، که قضیه بلوخ نامیده می‌شود، نخستین بار فلیکس بلوخ در مکانیک کوانتومی به‌کار برد، اما آن را در متون ریاضی قضیه فلوکه می‌نامند.

برای ساده کردن جبر مسئله، پتانسیل  $V(x)$  را به‌صورت رشته‌ای از پتانسیلهای تابع دلتای دافعه می‌گیریم:

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\lambda}{a} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na) \quad (107-5)$$

در غیر از نقاط  $x = na$ ، جواب عبارت است از جواب معادله ذره آزاد است، یعنی ترکیبی خطی از  $\sin kx$  و  $\cos kx$  است (برای سادگی با توابع حقیقی کار می‌کنیم). در ناحیه  $R_n$  که با  $na \leq x \leq (n+1)a$  تعریف می‌شود، فرض می‌کنیم

$$\psi(x) = A_n \sin k(x - na) + B_n \cos k(x - na) \quad (108-5)$$

و در ناحیه  $R_{n+1}$  که با  $na \leq x \leq (n+1)a$  تعریف می‌شود داریم

$$\psi(x) = A_{n+1} \sin k[x - (n+1)a] + B_{n+1} \cos k[x - (n+1)a] \quad (109-5)$$

پیوستگی تابع موج (در  $x = na$ ) ایجاب می‌کند که

$$-A_{n+1} \sin ka + B_{n+1} \cos ka = B_n \quad (110-5)$$

و شرط ناپیوستگی ۵-۱۳ در اینجا به‌صورت زیر در می‌آید

$$kA_{n+1} \cos ka + kB_{n+1} \sin ka - kA_n = \frac{\lambda}{a} B_n \quad (111-5)$$

از این دو معادله به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} A_{n+1} &= A_n \cos ka + (g \cos ka - \sin ka) B_n \\ B_{n+1} &= (g \sin ka + \cos ka) B_n + A_n \sin ka \end{aligned} \quad (112-5)$$

که در آنها  $g = \lambda/ka$ .



بنابه قضیه بلوخ باید

$$\psi(x+a) = e^{i(x+a)\text{Im}\sigma} u(x+a) = e^{i\phi} e^{ix\text{Im}\sigma} u(x) = e^{i\phi} \psi(x) \quad (113-5)$$

که ایجاب می‌کند

$$\psi(R_{n+1}) = e^{i\phi} \psi(R_n) \quad (114-5)$$

این در صورتی صادق است که

$$\begin{aligned} A_{n+1} &= e^{i\phi} A_n \\ B_{n+1} &= e^{i\phi} B_n \end{aligned} \quad (115-5)$$

با جاگذاری در ۱۱۲-۵، یک شرط سازگاری به دست می‌آوریم که عبارت است از

$$(e^{i\phi} - \cos ka)(e^{i\phi} - g \sin ka - \cos ka) = \sin ka(g \cos ka - \sin ka)$$

یعنی

$$e^{2i\phi} - e^{i\phi}(2 \cos ka + g \sin ka) + 1 = 0$$

با ضرب کردن در  $e^{-i\phi}$ ، به رابطه زیر می‌رسیم

$$\cos \phi = \cos ka + \frac{1}{2} g \sin ka \quad (116-5)$$

اگر شرایط مرزی دوره‌ای برای "بلور" را به‌گونه‌ای بگیریم که

$$\psi(R_{n+N}) = \psi(R_n) \quad (117-5)$$

آنگاه از ۱۱۴-۵ به این نتیجه می‌رسیم که  $e^{iN\phi} = 1$  یعنی

$$\phi = \frac{2\pi}{N} m \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (118-5)$$

با استفاده از انتگرال‌پذیری مجذوری نشان دادیم که  $\sigma$  باید انگاری باشد. اگر مقادیر  $x$  تا بینهایت ادامه نداشته باشند، باید بنویسیم  $(e^{\sigma a})^N = 1$  و در نتیجه باید  $\sigma a = i\phi$ ، که باز هم یک عدد انگاری محض است.

$\phi$  را با  $qa$  نشان می‌دهیم که در آن  $q$  عدد موج الکترون در جعبه‌ای است به طول  $Na$  با شرایط مرزی دوره‌ای و بدون پتانسیل، یعنی وقتی هیچ یونی وجود ندارد. بنابراین، رابطه ۵-۱۱۶ باید به صورت زیر نوشته شود

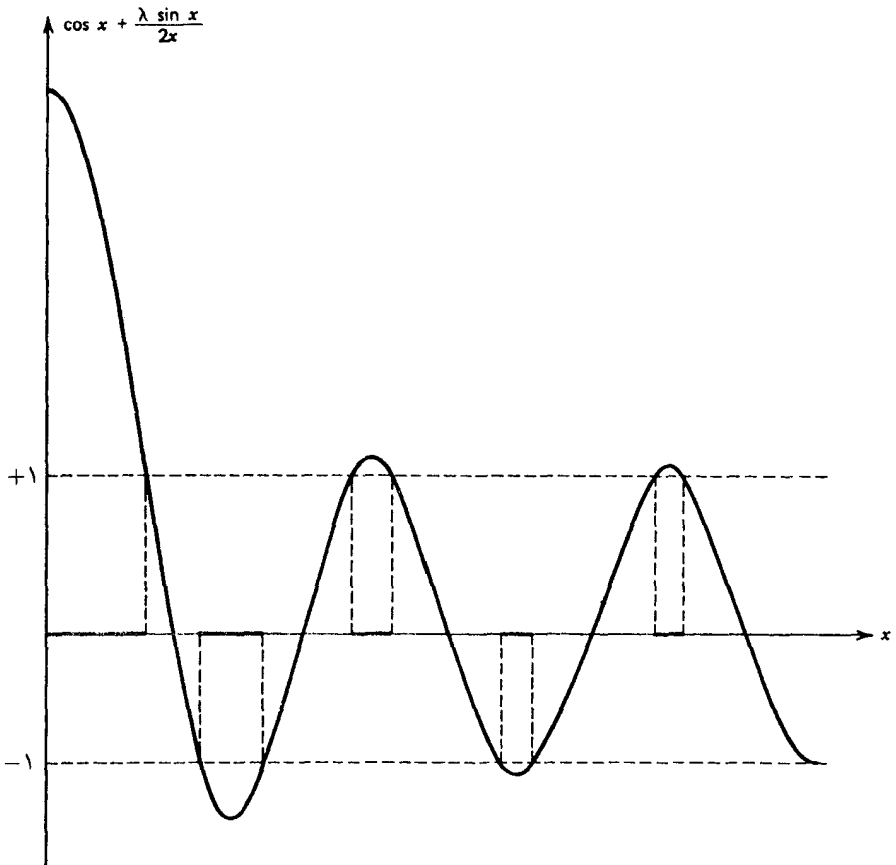
$$\cos qa = \cos ka + \frac{1}{2} \lambda \frac{\sin ka}{ka} \quad (5-119)$$

این نتیجه بسیار جالب توجه است زیرا نشان می‌دهد قدرمطلق طرف راست نمی‌تواند از ۱ بزرگتر باشد، یعنی روی گستره‌های ممکن انرژی  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$  محدودیتهایی وجود دارند که تابع پارامترهای "بلور" هستند. شکل ۵-۱۹ نمودار  $\cos x + \lambda(\sin x) / 2x$  را برحسب  $x = ka$  نشان می‌دهد. خطهای افقی کرانه‌های  $\cos qa$  هستند، و ناحیه‌هایی از  $x$  که در آنها منحنی خارج از این محدوده می‌افتد ناحیه‌های ممنوع هستند. بنابراین، نوارهای انرژی مجازی وجود دارند که با ناحیه‌های ممنوع از هم جدا شده‌اند. توجه کنید که آغاز یک نوار ممنوع متناظر است با شرط

$$qa = n\pi \quad n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (5-120)$$

اما این رابطه دقیقاً شرط بازتاب براگ در فرود عمودی است. وجود گافهای انرژی را می‌توان به طور کیفی درک کرد. در تقریب اول، الکترونها آزاد هستند مگر اینکه بازتاب براگ، وقتی اختلاف فاز امواجی که از اتمهای متوالی بازتابیده می‌شوند مضرب درستی از  $2\pi$  است روی دهد، یعنی وقتی شرط ۵-۱۲۰ برقرار است. این بازتابها امواج ساکن، با موجهای زوج و فردی که به ترتیب به صورت  $\cos \pi x/a$  و  $\sin \pi x/a$  هستند، به وجود می‌آورند. ترازهای انرژی متناظر با این امواج ساکن واگن‌اند. هرگاه برهم‌کنش جاذبه میان الکترونها و یونهای مثبت در  $x = ma$  (که در آن  $m$  عدد درست است) را منظور کنیم، انرژی حالتی زوج که در محل یونها به اوج می‌رسد افت می‌کند و انرژی حالتی فرد که بین آنها حداکثر است افزایش می‌یابد. بنابراین، واگنی انرژی در  $k = n\pi/a$  شکافته می‌شود که نتیجه آن، چنانکه در شکل ۵-۱۹ نشان داده شده است، گافهای انرژی است.

الگوی کرونیگ-پنی به نظریه فلزها، عایقها، و نیمرساناها مربوط می‌شود، زیرا (چنانکه بعداً خواهیم دید) ترازهای انرژی اشغال شده توسط الکترونها نمی‌توانند الکترونهای دیگری بپذیرند. در واقع، یک فلز می‌تواند نوار انرژی داشته باشد که کاملاً پر نشده است. با اعمال میدان الکتریکی خارجی، الکترونها شتاب می‌گیرند و اگر حالتی تکانه‌ای برای آنها موجود باشد این الکترونها تحت تاثیر میدان الکتریکی این حالتی تکانه را اشغال می‌کنند. اما عایقها دارای نوارهای کاملاً پر

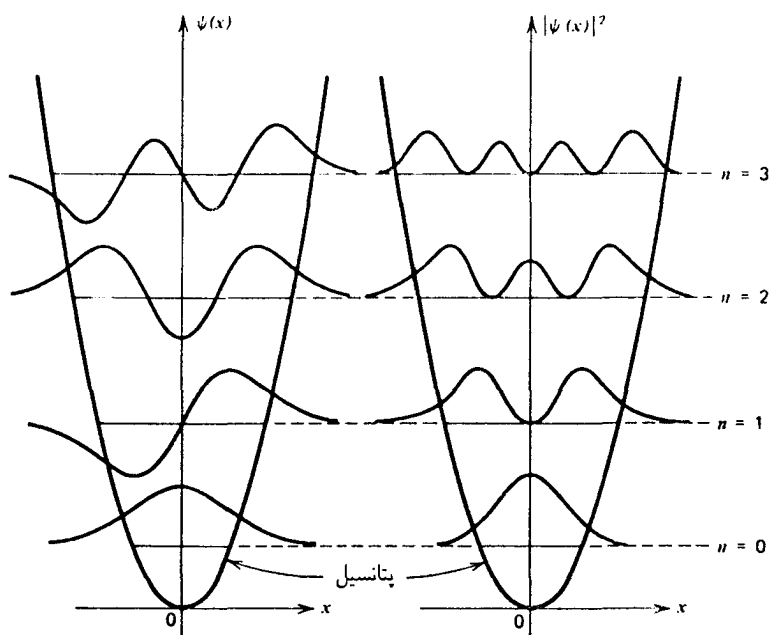


شکل ۱۹-۵ نمودار  $\cos x + (\lambda \sin x) / 2x$  بر حسب  $x$ . خطهای افقی کرانه‌های  $\pm 1$  را نشان می‌دهند. ناحیه‌هایی از  $x$  که در آنها منحنی خارج از باریکه  $(-1, +1)$  قرار می‌گیرد ممنوع هستند.

هستند، و الکترونها نمی‌توانند در میدان الکتریکی شتاب بگیرند زیرا هیچ حالت خالی نزدیکی وجود ندارد. اگر میدان الکتریکی به اندازه کافی شدید باشد، این الکترونها می‌توانند از گاف انرژی ممنوع "بجهند" و به یک نوار انرژی مجاز خالی بروند. این جهش متناظر است با خراب شدن عایق. نیمرسانا عایقی است که گاف ممنوع آن بسیار باریک است. در اینجا، تغییر وضعیت کوچکی، مثلاً افزایش دما، می‌تواند باعث "جهش" شود و عایق به رسانا تبدیل می‌شود.

## نوسانگر هماهنگ

به‌عنوان آخرین مثال، نوسانگر هماهنگ را در نظر می‌گیریم (شکل ۲۰-۵). برخلاف مثالهایی که تاکنون بررسی کردیم، حل معادله دیفرانسیل نوسانگر هماهنگ چندان ساده نیست، و یک دلیل



شکل ۵-۲۰ ویژه تابعهای نوسانگر هماهنگ، و چگالیهای احتمال برای چهار ویژه مقدار اول. به زوج و فرد بودن ویژه تابعها توجه کنید.

بررسی این مسئله یادگیری روش حل این نوع معادلات است. هامیلتونی کلاسیک برای نوسانگر هماهنگ عبارت است از

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 \quad (۱۲۱-۵)$$

و در نتیجه معادله ویژه مقداری آن به صورت زیر است

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2 u(x) = E u(x) \quad (۱۲۲-۵)$$

با استفاده از بسامد نوسانگر

$$\omega = \sqrt{k/m} \quad (۱۲۳-۵)$$

و با معرفی

$$\epsilon = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (۱۲۴-۵)$$

و تعویض متغیر

$$y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad (125-5)$$

صورت ساده‌تر زیر را برای معادله به‌دست می‌آوریم

$$\frac{d^2 u}{dy^2} + (\epsilon - y^2)u = 0 \quad (126-5)$$

که در آن تمام کمیتهای بی‌بعد هستند. وقتی  $y^2 \rightarrow \infty$ ، جمله شامل  $\epsilon$  به‌ازای هر ویژه‌مقدار  $\epsilon$  قابل چشمپوشی است، و از این رو  $u(y)$  باید در معادلهٔ مجانبی زیر صدق کند

$$\frac{d^2 u_0(y)}{dy^2} - y^2 u_0(y) = 0 \quad (127-5)$$

که با ضرب کردن در  $2 du_0/dy$  می‌توان آن را به‌صورت زیر نوشت

$$\frac{d}{dy} \left( \frac{du_0}{dy} \right)^2 - y^2 \frac{d}{dy} (u_0^2) = 0 \quad (128-5)$$

یا

$$\frac{d}{dy} \left[ \left( \frac{du_0}{dy} \right)^2 - y^2 u_0^2 \right] = -2yu_0^2 \quad (129-5)$$

اگر جملهٔ طرف راست را حذف کنیم این معادله تا حد زیادی ساده می‌شود. فرض می‌کنیم این کار را می‌توان انجام داد، و سپس درستی این فرض را واریسی می‌کنیم. با حذف طرف راست به‌دست می‌آوریم

$$\frac{du_0}{dy} = (C + y^2 u_0^2)^{1/2}$$

که در آن  $C$  ثابت انتگرال‌گیری است. چون  $u_0(y)$  و  $du_0/dy$  باید در بینهایت صفر شوند، باید داشته باشیم  $C = 0$ . بنابراین،

$$\frac{du_0}{dy} = \pm y u_0 \quad (130-5)$$

که جواب آن، که در بینهایت قابل قبول است، عبارت است از

$$u_0(y) = e^{-y^2/2} \quad (131-5)$$

اکنون می‌توان دید که جمله  $2yu_0' = 2ye^{-y^2}$  در مقایسه با

$$\frac{d}{dy}(y^2 u_0') = \frac{d}{dy}(y^2 e^{-y^2}) \simeq -4y^2 e^{-y^2}$$

به‌ازای  $y$ های بزرگ واقعاً قابل چشمپوشی است. اگر تابع جدیدی مانند  $h(y)$  را وارد کنیم به‌طوری که

$$u(y) = h(y)e^{-y^2/2} \quad (132-5)$$

آنگاه معادلهٔ دیفرانسیل به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{d^2 h(y)}{dy^2} - 2y \frac{dh(y)}{dy} + (\epsilon - 1)h(y) = 0 \quad (133-5)$$

این نتیجه ممکن است ساده‌سازی چندانی به‌نظر نرسد، اما اکنون می‌توان با دانستن رفتار جواب در بینهایت رفتار آن‌را در نزدیکی  $y = 0$  بررسی کرد. رشتهٔ توانی زیر را امتحان می‌کنیم

$$h(y) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m y^m \quad (134-5)$$

با قرار دادن این رشته در معادلهٔ ۱۳۳-۵، معلوم می‌شود که ضرایب  $y^m$  در رابطهٔ بازگشتی زیر صدق می‌کنند

$$(m+1)(m+2)a_{m+2} = (2m - \epsilon + 1)a_m \quad (135-5)$$

بنابراین، با داشتن  $a_0$  و  $a_1$ ، می‌توان رشته‌های زوج و فرد جداگانه‌ای به‌دست آورد. اینکه این رشته‌ها با هم مخلوط نمی‌شوند نتیجهٔ ناوردایی هامیلتونی تحت بازتاب است. به‌ازای یک مقدار اختیاری  $\epsilon$ ، برای  $m$ های بزرگ (مثلاً  $m > N$ ) به‌دست می‌آوریم

$$a_{m+2} \simeq \frac{2}{m} a_m \quad (136-5)$$

بنابراین، جواب تقریباً برابر است با

$$h(y) = (y \text{ یک چندجمله‌ای بر حسب } y) + \\ + a_N \left[ y^N + \frac{2}{N} y^{N+2} + \frac{2^2}{N(N+2)} y^{N+4} + \frac{2^3}{N(N+2)(N+4)} y^{N+6} + \dots \right]$$

در اینجا برای سادگی تنها جواب زوج را در نظر گرفته‌ایم. رشته نامتناهی را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$A_N y^r \left( \frac{N}{2} - 1 \right)! \left[ \frac{(y^2)^{N/2-1}}{(N/2-1)!} + \frac{(y^2)^{N/2}}{(N/2)!} + \frac{(y^2)^{N/2+1}}{(N/2+1)!} + \dots \right]$$

بهرتر است قرار می‌دهیم  $N = 2k$ ، و در نتیجه رشته به صورت زیر درمی‌آید

$$y^r (k-1)! \left[ \frac{(y^2)^{k-1}}{(k-1)!} + \frac{(y^2)^k}{k!} + \frac{(y^2)^{k+1}}{(k+1)!} + \dots \right] \\ = y^r (k-1)! \left[ e^{y^2} - \left\{ 1 + y^2 + \frac{(y^2)^2}{2!} + \dots + \frac{(y^2)^{k-2}}{(k-2)!} \right\} \right]$$

که به صورت یک چندجمله‌ای + یک ثابت  $\times y^r e^{y^2}$  است. وقتی این را در ۵-۱۳۲ می‌گذاریم جوابی به دست می‌آوریم که در بینهایت صفر نمی‌شود. جواب قابل قبول وقتی به دست می‌آید که رابطه بازگشتی ۳-۱۳۵ در جایی قطع شود. بنابراین، باید

$$\epsilon = 2N + 1 \quad (137-5)$$

به‌ازای این مقدار خاص  $\epsilon$ ، از ترکیب روابط بازگشتی به دست می‌آوریم

$$a_{2k} = (-2)^k \frac{N(N-2) \dots (N-2k+4)(N-2k+2)}{(2k)!} a_0 \quad (138-5)$$

و

$$a_{2k+1} = (-2)^k \frac{(N-1)(N-3) \dots (N-2k+3)(N-2k+1)}{(2k+1)!} a_1 \quad (139-5)$$

بنابراین، به نتیجه‌های زیر می‌رسیم:  
 ۱. ویژه‌مقدارها گسسته و هم‌فاصله هستند. معادلهٔ ۱۳۷-۵ تبدیل می‌شود به

$$E = h\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (140-5)$$

که صورت آشنایی دارد، زیرا این رابطهٔ میان انرژی و بسامد همان رابطه‌ای است که پلانک برای مدهای میدان تابش کشف کرد. این نتیجه اتفاقی نیست، زیرا تجزیهٔ میدان الکترومغناطیسی به مدهای بهنجار اساساً تجزیه به نوسانگرهای هماهنگی است که واجفته‌اند.

۲. چندجمله‌ایهای  $h(y)$ ، با تقریب ثابتهای بهنجارش، چندجمله‌ایهای هرمیت  $H_n(y)$  هستند که ویژگیهای آنها را می‌توان در بیشتر کتابهای درسی ریاضی فیزیک یافت. در اینجا تنها به بیان کلی ویژگیهای آنها بسنده می‌کنیم:

$H_n(y)$  در معادلهٔ دیفرانسیل زیر صدق می‌کند

$$\frac{d^2 H_n(y)}{dy^2} - 2y \frac{dH_n(y)}{dy} + 2n H_n(y) = 0 \quad (141-5)$$

رابطه‌های بازگشتی برای چندجمله‌ایهای هرمیت عبارت‌اند از

$$H_{n+1} - 2y H_n + 2n H_{n-1} = 0 \quad (142-5)$$

$$H_{n+1} + \frac{dH_n}{dy} - 2y H_n = 0 \quad (143-5)$$

همچنین داریم

$$\sum_n H_n(y) \frac{z^n}{n!} = e^{z^2 - yz} \quad (144-5)$$

و

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2} \quad (145-5)$$

بهنجارش چندجمله‌ایهای هرمیت به‌گونه‌ای است که

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2} H_n(y)^2 = 2^n n! \sqrt{\pi} \quad (146-5)$$



صورت صریح تعدادی از چند جمله‌ایهای هرمیت را در اینجا می‌نویسیم

$$\begin{aligned} H_0(y) &= 1 \\ H_1(y) &= 2y \\ H_2(y) &= 4y^2 - 2 \\ H_3(y) &= 8y^3 - 12y \\ H_4(y) &= 16y^4 - 48y^2 + 12 \\ H_5(y) &= 32y^5 - 160y^3 + 120y \end{aligned} \quad (147-5)$$

تعامد ویژه‌تابعهای متناظر با مقادیر مختلف  $n$  را می‌توان به‌سادگی اثبات کرد. اگر معادله‌های ویژه‌مقداری

$$\frac{d^2 u_n}{dx^2} = \frac{mk}{\hbar^2} x^2 u_n - \frac{2mE_n}{\hbar^2} u_n$$

و

$$\frac{d^2 u_l^*}{dx^2} = \frac{mk}{\hbar^2} x^2 u_l^* - \frac{2mE_l}{\hbar^2} u_l^*$$

را به‌ترتیب در  $u_n$  و  $u_l^*$  ضرب کنیم و سپس معادلهٔ دوم را از معادلهٔ اول کم کنیم، به‌دست می‌آوریم

$$\frac{d}{dx} \left( u_l^* \frac{du_n}{dx} - \frac{du_l^*}{dx} u_n \right) = \frac{2m}{\hbar^2} (E_l - E_n) u_l^* u_n$$

با انتگرال‌گیری از این معادله روی  $x$  از  $-\infty$  تا  $+\infty$ ، طرف چپ صفر می‌شود زیرا ویژه‌تابعها و مشتقهای آنها در  $x = \pm\infty$  صفر می‌شوند. بنابراین، داریم

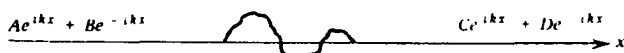
$$(E_l - E_n) \int_{-\infty}^{\infty} dx u_l^*(x) u_n(x) = 0 \quad (148-5)$$

که نشان می‌دهد ویژه‌تابعهایی که برای آنها  $E_l \neq E_n$  متعامد هستند. دلیل اهمیت نوسانگر هماهنگ در مکانیک کوانتومی، همچون در مکانیک کلاسیک، این است که هراختلال کوچک دستگاه از حالت تعادل آن باعث نوسانهایی کوچکی می‌شود که در نهایت به مدهای بهنجار، یعنی نوسانگرهای مستقل، قابل تجزیه‌اند.

۳. چنانکه ۵-۱۴۰ نشان می‌دهد، حتی پایینترین حالت دارای مقداری انرژی است، که انرژی نقطهٔ صفر نامیده می‌شود. وجود این انرژی یک اثر صرفاً کوانتوم-مکانیکی است، و می‌توان آن را با توجه به اصل عدم قطعیت تعبیر کرد. همین انرژی نقطهٔ صفر است که باعث می‌شود هلیوم در دماهای فوق‌العاده کم "منجمد" نشود بلکه در فشارهای عادی تا دماهایی از مرتبهٔ  $10^{-2} K$  مایع باقی بماند. برای اتمهای سبکتر بسامد  $\omega$  بزرگتر است، و به همین دلیل این اثر برای مثلاً نیتروژن روی نمی‌دهد. این اثر همچنین به جزئیات نیروهای میان اتمی نیز بستگی دارد، و از این رو است که هیدروژن مایع منجمد می‌شود.

## مسائل

۱-۵ یک پتانسیل اختیاری جایگزیده در یک بخش متناهی از محور  $x$  را در نظر بگیرید. جوابهای معادلهٔ شرودینگر در ناحیه‌های چپ و راست این پتانسیل در شکل زیر داده شده‌اند



نشان دهید اگر بنویسیم

$$C = S_{11}A + S_{12}D$$

$$B = S_{21}A + S_{22}D$$

یعنی امواج "ورودی" و امواج "خروجی" را با معادلهٔ ماتریسی زیر به هم مربوط کنیم

$$\begin{pmatrix} C \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix}$$

آنگاه رابطه‌های زیر برقرارند

$$|S_{11}|^2 + |S_{21}|^2 = 1$$

$$|S_{12}|^2 + |S_{22}|^2 = 1$$

$$S_{11}S_{12}^* + S_{21}S_{22}^* = 0$$

با استفاده از این رابطه‌ها نشان دهید ماتریس پراکندگی

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}$$

و ترانزهاذ آن یکانی هستند.

[راهنمایی: از پایستگی شار و اینکه  $A$  و  $B$  می‌توانند اعداد مختلط اختیاری باشند استفاده کنید.]

۲-۵ عناصر ماتریسی پراکندگی  $S_{11}, S_{12}, S_{21}$  و  $S_{22}$  را برای پتانسیل زیر محاسبه کنید

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

و نشان دهید شرایط کلی مسئله ۱-۵ واقعاً برقرار هستند.  
۳-۵ عناصر ماتریسی  $S_{11}, \dots, S_{22}$  تابعی از  $k$  هستند. نشان دهید

$$S_{11}(-k) = S_{11}^*(k)$$

$$S_{22}(-k) = S_{22}^*(k)$$

$$S_{12}(-k) = S_{12}^*(k)$$

یعنی ماتریس  $S$  دارای خاصیت زیر است

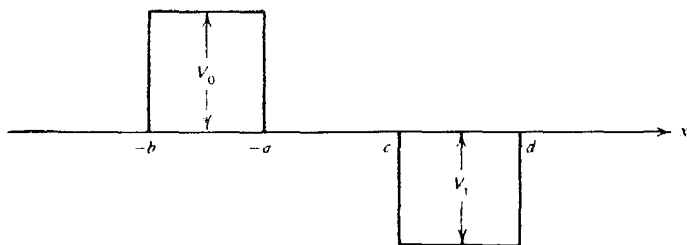
$$S(-k) = S^+(k)$$

۴-۵ جواب فرد مربوط به چاه پتانسیل (مثلاً معادله ۵-۶۷) را در نظر بگیرید، که می‌توان از آن به عنوان الگو برای پتانسیل سه‌بعدی با تکانه زاویه‌ای صفر استفاده کرد. اگر عرض چاه را  $1.4 \times 10^{-13}$  cm و انرژی بستگی دستگاه را  $2.2$  MeV - بگیریم، و اگر جرم مربوط  $1.6 \times 10^{-24}$  g باشد، عمق چاه پتانسیل را برحسب MeV به دست آورید.

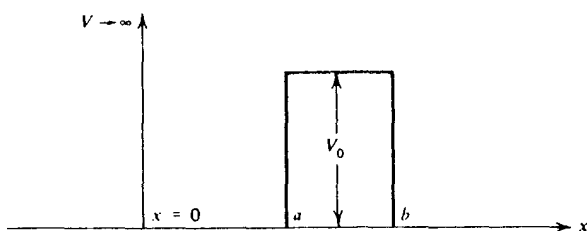
[راهنمایی: (۱) ابتدا فاصله‌ها و جرمها را برحسب جرمی بیان کنید، که در نتیجه عرض چاه به صورت  $d(h/\mu c)$  و انرژی بستگی به صورت  $\epsilon(\mu c^2)$  درآید. جرم داده شده می‌تواند جرم مناسبی باشد. (۲) انرژی بستگی بسیار کوچک، تقریباً برابر با صفر، است. اگر این انرژی صفر می‌بود ۵-۶۹ مقدار  $V_0$  را به دست می‌داد. حول این مقدار بسط دهید.]

۵-۵ بدون حل معادله شرودینگر جوابها را برای موارد زیر به دست آورید به طوری که تنها جور

کردن ویژه‌تابعها و مشتقهای آنها باقی بماند.



(الف) اگر پتانسیل نبود شار  $\hbar k/m$  از سمت چپ می‌آمد؛ فرض کنید  $E < V_0$ .



(ب) اگر پتانسیل نبود شار  $\hbar k/m$  از سمت راست می‌آمد؛ فرض کنید  $E < V_0$ .

۵-۶ نشان دهید شرایط مربوط به حالت مقید ۵-۶۳ را می‌توان با صفر کرن مخرج کسرها در

۵-۲۶ به ازای  $k = ik$  به دست آورد. ثابت کنید که این نتیجه انفاقی نیست.

۵-۷ نشان دهید که برای پتانسیل

$$\frac{\gamma m}{\hbar^2} V(x) = \frac{\lambda}{a} \delta(x - b)$$

ماتریس پراکندگی به صورت زیر است

$$\begin{pmatrix} \frac{\gamma ika}{\gamma ika - \lambda} & \frac{\lambda}{\gamma ika - \lambda} e^{-\gamma ikb} \\ \frac{\lambda}{\gamma ika - \lambda} e^{\gamma ikb} & \frac{\gamma ika}{\gamma ika - \lambda} \end{pmatrix}$$

ثابت کنید این ماتریس یکانی است، و اگر عناصر آن بینهایت شوند شرط مربوط به حالت‌های مقید به دست می‌آید. (این نتیجه تنها برای  $\lambda < 0$  برقرار است.)

۵-۸ مقدار  $r$  در ۵-۹ را چنان محاسبه کنید که ذره تا حد امکان دور از مبدأ و در سمت راست آن جایگزین شود.

۵-۹ توابع موج مربوط به سه ویژه‌مقدار اوُن نوسانگر هماهنگ را به تفصیل محاسبه کنید.

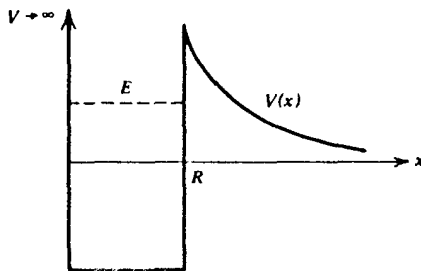
۱۰-۵ پتانسیل نوسانگر هماهنگ ساده را که با یک جمله کوچک درجه سوم مختل شده است در نظر بگیرید:

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 \left( x^2 - \frac{1}{a}x^3 \right)$$

اگر  $a$  در مقایسه با اندازه مشخصه  $(\hbar/m\omega)^{1/2}$  بزرگ باشد، مدت زمانی را برآورد کنید که طول می کشد تا ذره ای در حالت پایه به ناحیه دور در سمت راست "نشت" کند. توجه کنید که فقط با این اختلال حالت کمترین انرژی وجود ندارد، زیرا به ازای  $x$  های به اندازه کافی بزرگ پتانسیل بینهایت عمیق می شود.

۱۱-۵ پتانسیلی را که با شکل زیر نشان داده شده است در نظر بگیرید، که در آن

$$V(x) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mx^2} \quad x > R_0.$$



طول عمر ذره ای با انرژی  $E$  را در این چاه پتانسیل برآورد کنید. (پتانسیل  $V(x)$  نمایشگر یک سد مرکزگریز در جهان سه بعدی است.) نتیجه را برحسب کمیت بی بعد  $l/kR$  بیان کنید، که در آن  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$  و  $l \gg 1$ .

۱۲-۵ پتانسیل کرونیک-پنی را با شرط زیر در نظر بگیرید

$$\lambda = 3\pi$$

(الف) نمودار تفصیلی

$$\cos x + \frac{\lambda}{2} \frac{\sin x}{x}$$

را برحسب  $x = ka$  ترسیم کنید.

(ب) نشان دهید نوارهای انرژی ممنوع درست بالاتر از  $ka = n\pi$  شروع می‌شوند.

(ج) نشان دهید با افزایش  $\lambda$  نوارهای انرژی مجاز باریکتر می‌شوند.

(د) انرژی  $\hbar^2 k^2 / 2m$  را برحسب  $q$  ترسیم کنید.

۱۳-۵ پتانسیل زیر را در نظر بگیرید

$$\begin{aligned} V(X) &= \infty & x < 0 \\ &= -V_0 & 0 < x < a \\ &= 0 & a < x \end{aligned}$$

فرض کنید موج تختی با تکانه  $\hbar k$  و شار  $\hbar k/m$  از  $+\infty$  فرستاده شده است. (الف) نشان دهید دامنه موج بازتابیده را می‌توان به صورت  $Ce^{i\delta}$  نوشت. (ب)  $C$  را محاسبه کنید و رابطه‌ای به دست آورید که از آن بتوان  $\delta$  را تعیین کرد.

۱۴-۵ استدلال زیر را در نظر بگیرید: اگر الکترونی در پتانسیلی به عرض  $a$  داشته باشیم، انرژی جنبشی آن بنابه اصل عدم قطعیت بزرگتر از  $\hbar^2 / 2ma^2$  است. بنابراین، برای اینکه حالت مقیدی وجود داشته باشد، انرژی پتانسیل نه تنها باید منفی باشد بلکه قدرمطلق آن باید بزرگتر از  $\hbar^2 / 2ma^2$  باشد. از طرف دیگر، چنانکه دیدیم، برای چاه یک‌بعدی هر قدر هم که عمق چاه کم باشد همیشه یک حالت مقید وجود دارد. در این استدلال چه چیزی غلط است؟

۱۵-۵ پتانسیل زیر را در نظر بگیرید

$$\begin{aligned} V(x) &= \infty & x < 0 \\ &= 0 & x > a \\ &= \text{یک تابع منفی از } a \end{aligned}$$

فرض کنید تابع موج داخلی به‌گونه‌ای است که

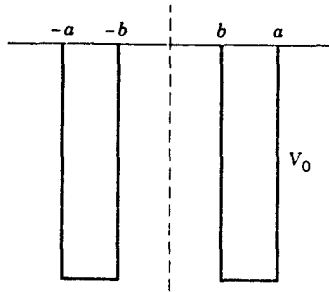
$$\frac{1}{u} \frac{du}{dx} \Big|_{x=a} = f(E)$$

(الف) انرژی بستگی یک حالت مقید را برحسب  $f(E_B)$  تعیین کنید.

(ب) فرض کنید  $f(E)$  برحسب  $E$  به‌کندی تغییر می‌کند به طوری که می‌توان آن را ثابت گرفت.

اگر تابع موج برای  $x > a$  به صورت  $e^{-ikx} + R(k)e^{ikx}$  باشد، دامنه موج بازتابیده  $R(k)$  را

به دست آورید، و تحقیق کنید که  $|R(k)|^2 = 1$ .  
 ۱۶-۵ ذره‌ای را در چاه دوگانه شکل زیر در نظر بگیرید



نشان دهید شرایط ویژه مقدار را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\tan q(a-b) = \frac{q\alpha(1 + \tanh \alpha b)}{q^2 - \alpha^2 \tanh \alpha b}$$

و

$$\tan q(a-b) = \frac{q\alpha(1 + \coth \alpha b)}{q^2 - \alpha^2 \coth \alpha b}$$

که به ترتیب مربوط به جوابهای زوج و فرد هستند، و در آنها

$$E + V_0 = \hbar^2 q^2 / 2m \quad \text{و} \quad -E = \hbar^2 \alpha^2 / 2m$$

۱۷-۵ مثال مسئله ۱۶-۵ را در نظر بگیرید.

(الف) نشان دهید وقتی  $b \rightarrow 0$  شرایط ویژه مقدار به شرایط مربوط به چاه منفرد میل می‌کنند.  
 (ب) موردی را در نظر بگیرید که فاصله بین مراکز چاهها زیاد می‌شود اما عرض چاهها ثابت می‌ماند. نشان دهید ویژه مقدارهای زوج و فرد به یکدیگر نزدیک می‌شوند. اختلاف انرژی میان کمترین ویژه مقدارهای زوج و فرد را برآورد کنید.

[راهنمایی: به ازای مقادیر بزرگ  $z$  داریم  $\tanh z = 1 - 2e^{-2z}$ .  $e^{-2z}$  را تا کمترین مرتبه در نظر بگیرید.]

۱۸-۵ قضیهٔ ویرال را ثابت کنید، که در یک بعد به صورت زیر است

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \frac{1}{2} \left\langle x \frac{dV}{dx} \right\rangle$$

برای این کار (الف) نشان دهید برای توابع موج حقیقی  $\psi(x)$  داریم

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x) x \frac{dV(x)}{dx} \psi(x) = -\langle V \rangle + 2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{d\psi}{dx} x V(x) \psi(x)$$

(ب) با استفاده از معادله ویژه مقدری انرژی ثابت کنید

$$2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{d\psi}{dx} x V(x) \psi(x) = E + \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left( \frac{d\psi}{dx} \right)^2$$

## مراجع

الگوی کرونیگ-پنی در کتاب زیر نیز به تفصیل بررسی شده است

E Merzbacher, *Quantum Mechanics* (2nd edition), John Wiley & Sons, New York, 1970.

برای بحث مفصلتری درباره "نظریه نواری" مراجعه کنید به

C Kittel, *Introduction to Solid State Physics* (6th edition), John Wiley & Sons, New York, 1986, Chapter 9.

برای بحث کاملتری درباره نفوذ در سد، با استفاده از تقریب WKB، به کتابهای پیشرفته‌تری که در آخر این کتاب معرفی شده‌اند مراجعه کنید.



## ساختار کلی مکانیک موجی

در این فصل به گردآوری و تشریح مفصل اصول و مفاهیمی می‌پردازیم که قبلاً در ضمن حل چندمسئله خاص به تدریج بیان کردیم. اصل موضوعه بسط و معنای فیزیکی آن، عملگرها، بردارهای حالت، واگنی، و حد کلاسیک از این جمله هستند. در این فصل نمادنگاری دیراک را نیز معرفی می‌کنیم. از این نمادنگاری گاهی در بقیه کتاب استفاده خواهیم کرد، اما موجز بودنش ارزش ارائه در این مرحله از مطالعه مکانیک کوانتومی را به آن می‌دهد.

### ویژه‌تابعها و ویژه‌مقدارها عملگر هامیلتونی

حالت یک دستگاه فیزیکی با یک تابع موج توصیف می‌شود که حاوی تمام اطلاعات درباره دستگاه است. تابع موج به زمان وابسته است، و تحول زمانی آن با معادله زیر داده می‌شود

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = H\psi(x, t) \quad (۱-۶)$$

عملگر  $H$ ، هامیلتونی، که در مکانیک کوانتومی دارای نقشی اساسی است، روی تابع موج  $\psi(x, t)$  عمل می‌کند. این عملگر برای دستگاه ساده متشکل از یک ذره در پتانسیل  $V$  به صورت زیر است

$$H = \frac{p_{op}^2}{2m} + V(x) \quad (2-6)$$

اگر  $V(x)$  بستگی صریح به زمان نداشته باشد، می‌توان جواب معادله ۱-۶ را به صورت زیر نوشت

$$\psi(x, t) = u_E(x)e^{-iEt/\hbar} \quad (3-6)$$

که در آن  $u_E(x)$  جواب معادله زیر است

$$Hu_E(x) = Eu_E(x) \quad (4-6)$$

$u_E(x)$  را ویژه تابع هامیلتونی و  $E$  را ویژه مقدار می‌نامند.

در این فصل روی دو ویژگی مهم ویژه تابعهای  $H$  تأکید می‌کنیم:

۱. ویژه تابعهای مربوط به ویژه مقادیر مختلف (یعنی مقادیر مختلف ثابت  $E$ ) متعامند — به این معنی که

$$\int dx u_E^*(x)u_{E'}(x) = 0 \quad E \neq E' \quad (5-6)$$

۲. این ویژه تابعها یک مجموعه کامل تشکیل می‌دهند — به این معنی که تابع اختیاری  $\psi(x)$  را که انتگرال پذیر مجذوری است به طوری که

$$\int dx \psi^*(x)\psi(x) < \infty \quad (6-6)$$

می‌توان برحسب ویژه تابعهای هامیلتونی بسط داد:

$$\psi(x) = \sum_E C_E u_E(x) \quad (7-6)$$

طیف  $H$  ممکن است گسسته باشد، مانند مورد چاه نامتناهی و نوسانگر هماهنگ. اگر وقتی  $x \rightarrow \infty$  پتانسیل  $V(x)$  به صفر میل کند، ویژه مقادیر می‌توانند هم گسسته باشند و هم یک پیوستار تشکیل دهند. این وضعیت برای پتانسیل جاذبه‌ای روی می‌دهد که به اندازه کافی عمیق

است تا یک یا چند حالت مقید ایجاد کند. در این مورد، مجموعه کامل از تمام ویژه‌تابعهای گسسته و پیوستار تشکیل می‌شود، و باید به جای ۷-۶ نوشت

$$\psi(x) = \sum_n C_n u_n(x) + \int dp C(p) u_p(x) \quad (۸-۶)$$

در اینجا عدد درست  $n$  معرف حالت‌های مقید و  $p$  معرف حالت‌های پیوستار است. این نشان‌گذاری به این مناسبت است که به‌ازای مقادیر بزرگ  $x$  انرژی پتانسیل صفر می‌شود و ویژه‌مقدار انرژی با رابطه  $E = p^2/2m$  به‌مقدار تکانه مربوط می‌شود. ویژه‌تابعها را می‌توان در ثابت‌هایی ضرب کرد تا به‌نجار شوند. شرایط راست‌هنجاری عبارت‌اند از

$$\begin{aligned} \int dx u_m^*(x) u_n(x) &= \delta_{mn} \\ \int dx u_q^*(x) u_p(x) &= \delta(p - q) \\ \int dx u_n^*(x) u_p(x) &= 0 \end{aligned} \quad (۹-۶)$$

با توجه به اینکه هر ویژه‌تابع وابستگی زمانی ساده‌ای دارد که با رابطه زیر داده می‌شود

$$u_E(x, t) = u_E(x) e^{-iEt/\hbar} \quad (۱۰-۶)$$

می‌توان تابع موج  $\psi(x, t)$  را تعیین کرد. بنابراین، به‌دست می‌آوریم

$$\psi(x, t) = \sum_E C_E u_E(x) e^{-iEt/\hbar} \quad (۱۱-۶)$$

که صورت کلی‌تر آن عبارت است از

$$\psi(x, t) = \sum_n C_n u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} + \int dp C(p) u_p(x) e^{-ip^2 t/2m\hbar} \quad (۱۲-۶)$$

### مشاهده‌پذیرهای دیگر

انرژی تنها یکی از ویژگی‌های قابل‌مشاهده یک دستگاه است. درباره مشاهده‌پذیرهای دیگر مانند تکانه قبلاً بحث کردیم، و تکانه زاویه‌ای را در یک فصل بعد بررسی می‌کنیم. درست همان‌طور که

انرژی ویژه مقدار عملگر انرژی (هامیلتونی  $H$ ) است، تکانه نیز ویژه مقدار عملگر تکانه  $p_{op}$  است. معادله ویژه مقدار عملگر تکانه به صورت زیر است

$$p_{op} u_p(x) \equiv \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} u_p(x) = p u_p(x) \quad (۱۳-۶)$$

ویژه مقدارها یک پیوستار تشکیل می دهند  $(-\infty < p < \infty)$ ، و ویژه تابعها به صورت زیر هستند

$$u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \quad (۱۴-۶)$$

این ویژه تابعها یک مجموعه راست هنجار تشکیل می دهند:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx u_{p_1}^*(x) u_{p_2}(x) = \delta(p_1 - p_2) \quad (۱۵-۶)$$

قضیه بسط معمولاً به صورت زیر نوشته می شود

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dp \phi(p) u_p(x) \quad (۱۶-۶)$$

عملگر تکانه، مانند هامیلتونی، دارای ویژه مقدارهای حقیقی است.

عملگرهایی که تمام ویژه مقدارهای آنها حقیقی هستند عملگرهای هرمیتی نامیده می شوند. چون تمام مشاهده پذیرهای فیزیکی در این خاصیت شریک اند، باید آنها را با عملگرهای هرمیتی توصیف کرد.

## اصل موضوعه بسط و مانستگی برداری

برای یک مشاهده پذیر اختیاری، که با  $A$  نشان می دهیم، ویژه تابعهایی متناظر با ویژه مقدارهای حقیقی  $a$  وجود دارند:

$$A u_a(x) = a u_a(x) \quad (۱۷-۶)$$

ویژه تابعهای  $u_a(x)$  یک مجموعه متعامد تشکیل می دهند، و می توان آنها را بهنجار کرد:

$$\int dx u_{a_1}^*(x) u_{a_2}(x) = \delta_{a_1 a_2} \quad (۱۸-۶)$$

در اینجا  $\delta_{a_1 a_2}$  دلتای کرونکر برای ویژه مقدارهای گسسته و تابع دلتای دیراک برای ویژه مقدارهای پیوسته است.

ویژه تابعهای  $u_a(x)$  نیز یک مجموعه کامل تشکیل می دهند؛ به عبارت دیگر، یک تابع (انتگرال پذیر مجذوری) اختیاری  $\psi(x)$  را می توان برحسب ویژه تابعهای  $u_a(x)$  بسط داد:

$$\psi(x) = \sum_a C_a u_a(x) \quad (۱۹-۶)$$

از شرط راست هنجاری نتیجه می گیریم که

$$C_a = \int dx u_a^*(x) \psi(x) \quad (۲۰-۶)$$

### تعبیر ضرایب بسط

تعبیر ضرایب بسط  $C_a$  به صورت زیر است: اگر مشاهده پذیر  $A$  را برای مجموعه ای از دستگاههایی اندازه گیری کنیم که هر یک از آنها با تابع موج  $\psi(x)$  توصیف می شوند که به یک بهنجار شده است، یعنی

$$\int dx \psi^*(x) \psi(x) = 1 \quad (۲۱-۶)$$

آنگاه

۱. نتیجه هر اندازه گیری تنها می تواند یکی از ویژه مقدارهای  $a$  باشد.
۲. احتمال اینکه ویژه مقدار  $a$  به دست آید، یا به عبارت دیگر معلوم شود چه کسری از دستگاهها در این مجموعه دارای ویژه مقدار  $a$  هستند، برابر است با  $|C_a|^2$ .
۳. اگر از اندازه گیری روی یک عضو این مجموعه یک ویژه مقدار معین مثلاً  $a_1$  به دست آمده باشد، این اندازه گیری باید حالت این دستگاه خاص را روی ویژه حالت  $u_{a_1}(x)$  تصویر کرده باشد. تنها از این راه است که می توان اطمینان یافت که اندازه گیری بعدی مشاهده پذیر  $A$  همین نتیجه را می دهد.

یک پیامد این تعبیر این است که احتمال اینکه مقدار مشاهده پذیر  $A$  برای یک دستگاه یکی از ویژه مقدارهای آن باشد برابر با یک است، یعنی

$$\sum_a |C_a|^2 = 1 \quad (۲۲-۶)$$

که ناشی از رابطه زیر است

$$\begin{aligned} 1 &= \int dx \psi^+(x)\psi(x) = \int dx \left( \sum_a C_a^* u_a^+(x) \right) \psi(x) \\ &= \sum_a C_a^* C_a \end{aligned}$$

از این فرمول نتیجه می‌گیریم

$$\begin{aligned} \sum_a C_a C_a^* &= \sum_a \int dx u_a^*(x)\psi(x) \int dy u_a(y)\psi^+(y) \\ &= \iint dx dy \psi^+(y)\psi(x) \sum_a u_a(y)u_a^*(x) = 1 \end{aligned} \quad (23-6)$$

که نشان می‌دهد

$$\sum_a u_a(y)u_a^*(x) = \delta(x - y) \quad (24-6)$$

این خاصیت ویژه‌تابعها را رابطه تمامیت می‌نامیم، و با حکم قضیه بسط هم‌ارز است.

### مانستگی با فضای برداری

قضیه بسط را می‌توان تعمیمی از بسط یک بردار  $\mathbf{A}$  برحسب بردارهای یکه راست‌هنجار در یک فضای برداری  $N$  بعدی دانست:

$$\mathbf{A} = A_1 \mathbf{i}_1 + A_2 \mathbf{i}_2 + \dots + A_N \mathbf{i}_N \quad (25-6)$$

بردارهای یکه در رابطه راست‌هنجاری زیر صدق می‌کنند

$$\mathbf{i}_k \cdot \mathbf{i}_l = \delta_{kl} \quad (26-6)$$

و مانسته ویژه‌تابعهای  $u_n(x)$  هستند. ضرایب  $A_n$  با رابطه زیر داده می‌شوند

$$A_n = \mathbf{i}_n \cdot \mathbf{A} \quad (27-6)$$

و مانسته  $C_a$  هستند. غالباً در بحثهای کوانتوم-مکانیکی زبان فضاهای برداری را به کار می‌بریم. به عنوان مثال، ضرایب  $C_a$  را تصاویر  $\psi(x)$  روی بردارهای پایه  $u_a(x)$  می‌نامیم، و کمیت

$$C_a = \int dx u_a^*(x) \psi(x)$$

را حاصلضرب زده‌ای  $u_a$  و  $\psi$  می‌گوییم.

در واقع، مانستگی میان توابع موج  $\psi(x)$  و بردارهای  $N$  بعدی کاملاً عمیق است. در هر دو مورد، با فضاهای خطی سروکار داریم: درست همان‌طور که از جمع دو بردار در فضای برداری یک بردار به دست می‌آید،

$$\mathbf{A} + \mathbf{B} = \mathbf{C}$$

مجموع دو تابع موج نیز یک تابع موج قابل قبول است، و در هر دو مورد یک ضرب زده‌ای تعریف می‌کنیم.

تفاوت میان فضای برداری مکانیک کوانتومی و یک فضای برداری ساده  $N$  بعدی در این است که فضای برداری در مکانیک کوانتومی به صورت پیوسته بینهایت بعدی است. بنابراین، جمع گسسته در حاصلضرب زده‌ای  $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = \sum_i A_i B_i$  به انتگرال در  $\int dx \phi^*(x) \psi(x)$  تبدیل می‌شود. این نشان می‌دهد که در مکانیک کوانتومی باید به همگرایی انتگرالها توجه کنیم، و اثبات قضیه بسط بسیار پیچیده می‌شود. در زبان ریاضی، فضای برداری در مکانیک کوانتومی را فضای هیلبرت می‌نامند. در توضیح مکانیک کوانتومی، هرگاه بتوانیم از پیچیدگیهای ریاضی صرفنظر می‌کنیم و از شباهت با فضای برداری معمولی آزادانه استفاده می‌کنیم.

### عملگرها و مشاهده‌پذیرها

عملگر در فضاهای برداری یک بردار را به بردار دیگری تبدیل می‌کند. عملگرهای خطی به‌گونه‌ای هستند که

$$A(\alpha_1 \psi_1(x) + \alpha_2 \psi_2(x)) = \alpha_1 A\psi_1(x) + \alpha_2 A\psi_2(x) \quad (28-6)$$

و اگر بخواهیم مشاهده‌پذیرها را نمایش دهند باید هرمیتی باشند. برای عملگرهای هرمیتی داریم

$$\langle A \rangle = \langle A \rangle^*$$

یعنی، به ازای حالت  $\Psi$

$$\int dx \Psi^*(x) A \Psi(x) = \int dx (A \Psi(x))^* \Psi(x) \quad (29-6)$$

از اینجا نتیجه می‌گیریم که برای عملگرهای هرمیتی، به ازای دو تابع اختیاری  $\phi$  و  $\psi$ ، می‌توان نوشت

$$\int dx \phi^{\dagger} A \psi = \int dx (A \phi)^* \psi \quad (30-6)$$

برای اثبات، فرض کنید

$$\Psi(x) = \phi(x) + \lambda \psi(x) \quad (31-6)$$

که در آن  $\lambda$  یک ثابت مختلط اختیاری است. بنابراین، از ۲۹-۶ داریم

$$\int dx \Psi^{\dagger} A \Psi = \int dx (\phi^{\dagger} + \lambda^{\dagger} \psi^{\dagger}) A (\phi + \lambda \psi) = \int dx \phi^{\dagger} A \phi \quad (32-6)$$

$$+ |\lambda|^2 \int dx \psi^{\dagger} A \psi + \lambda \int dx \phi^{\dagger} A \psi + \lambda^* \int dx \psi^{\dagger} A \phi$$

که همیوغ مختلط آن به صورت زیر است

$$\begin{aligned} \int dx (A \Psi)^{\dagger} \Psi &= \int dx (A \phi)^{\dagger} \phi + |\lambda|^2 \int dx (A \psi)^{\dagger} \psi \\ &+ \lambda^{\dagger} \int dx (A \psi)^{\dagger} \phi + \lambda \int dx (A \phi)^{\dagger} \psi \end{aligned}$$

برای عملگر هرمیتی، در دو معادله بالا طرفهای چپ و همچنین دو جمله اول طرفهای راست برابرند. چون  $\lambda$  یک پارامتر مختلط است،  $\lambda$  و  $\lambda^*$  مستقل از یکدیگرند و می‌توان ضریب آنها را جداگانه با هم برابر گرفت، و ۳۰-۶ به دست می‌آید.

اگر عملگر  $A$  هرمیتی نباشد، می‌توان عملگر همیوغ هرمیتی  $A^{\dagger}$  را، برای هر جفت تابع موج، با رابطه زیر تعریف کرد

$$\int dx (A \phi)^{\dagger} \psi = \int dx \phi^{\dagger} A^{\dagger} \psi \quad (33-6)$$



## نمادنگاری دیراک

پل آدرین موريس دیراک یک نمادنگاری بسیار مختصر و مفید معمول کرد که هم برای فضاهای برداری با بعد متناهی و هم در مورد فضاهای هیلبرت به کار می‌رود. به هر تابع موج  $\psi$  یک بردار حالت، که با  $|\psi\rangle$  نشان می‌دهیم و آن را *کت* می‌نامیم، نسبت می‌دهیم. همچنین، به هر تابع موج همیوگ مختلط  $\phi^*$  کمیت  $\langle\phi|$  را نسبت می‌دهیم و آن را *برا* می‌نامیم. حاصلضرب نرده‌ای  $\phi^*$  و  $\psi$  را با یک "براکت" <sup>۱</sup> نشان می‌دهیم:

$$\int dx \phi^* \psi = \langle\phi|\psi\rangle \quad (۳۴-۶)$$

بلافاصله نتیجه می‌شود که

$$\langle\phi|\psi\rangle^* = \langle\psi|\phi\rangle \quad (۳۵-۶)$$

انتگرال شامل یک عملگر را می‌توان به دو طریق هم‌ارز زیر نوشت

$$\int dx \phi^* A\psi = \langle\phi|A\psi\rangle = \langle\phi|A|\psi\rangle \quad (۳۶-۶)$$

عملگر همیوگ هرمیتی برای هر جفت حالت با رابطه زیر تعریف می‌شود

$$\langle A\phi|\psi\rangle = \langle\phi|A^\dagger|\psi\rangle \quad (۳۷-۶)$$

اگر  $A$  یک عدد باشد می‌توان آن را از براکت خارج کرد:

$$\langle\phi|a\psi\rangle = a\langle\phi|\psi\rangle \quad (۳۸-۶)$$

و

$$\langle a\phi|\psi\rangle = a^*\langle\phi|\psi\rangle \quad (۳۹-۶)$$

معادله‌های ویژه‌مقداری به صورت زیر نوشته می‌شوند

$$A|a\rangle = a|a\rangle \quad (۴۰-۶)$$

۱. دیراک "برا" و "کت" را از تقسیم واژه انگلیسی *bracket*، معادل واژه فرانسوی *crochet*، گرفته است.

که در آن ویژه حالت را با ویژه مقدار خودش نشانگذاری کرده ایم. چگونگی تبدیل این معادله به یک معادله وابسته به  $x$  از نوع ۴-۶ را در فصل ۷ بیان می کنیم. شرط راست هنجاری در نمادنگاری دیراک به صورت زیر درمی آید

$$\langle a_1 | a_2 \rangle = \delta_{a_1 a_2} \quad (41-6)$$

و قضیه بسط به صورت زیر نوشته می شود

$$|\psi\rangle = \sum_a C_a |a\rangle \quad (42-6)$$

با ضرب کردن در یک ویژه حالت خاص از سمت چپ، به دست می آوریم

$$\langle b | \psi \rangle = \sum_a C_a \langle b | a \rangle = \sum_a C_a \delta_{ab} = C_b \quad (43-6)$$

بنابراین، می توان نوشت

$$\langle \phi | \psi \rangle = \sum_a C_a \langle \phi | a \rangle = \sum_a \langle \phi | a \rangle \langle a | \psi \rangle \quad (44-6)$$

چون این نتیجه برای هر  $\psi$  و  $\phi$  صادق است، می توان رابطه بالا را "تفکیک" کرد و مانسته ۲۴-۶ در نمادنگاری دیراک را به دست آورد:

$$\sum_a |a\rangle \langle a| = 1 \quad (45-6)$$

این بخش را با مثالی درباره استفاده از نمادنگاری دیراک در اثبات تعامد ویژه تابعهای عملگرهای هرمیتی متناظر با ویژه مقدارهای مختلف به پایان می رسانیم. رابطه زیر را در نظر بگیرید

$$\langle b | A | a \rangle = a \langle b | a \rangle \quad (46-6)$$

از طرف دیگر، می توان نوشت

$$\langle b | A^\dagger | a \rangle = \langle A(b) | a \rangle = b^* \langle b | a \rangle \quad (47-6)$$

زیرا  $|b\rangle$  یک ویژه حالت عملگر  $A$  با ویژه مقدار  $b$  است، و این کمیت در برا ظاهر می شود. اما برای عملگر هرمیتی داریم  $A = A^\dagger$ ، و در نتیجه

$$a\langle b|a\rangle = b^*\langle b|a\rangle \quad (۴۸-۶)$$

اگر قرار دهیم  $\langle a| = |b\rangle$ ، بلافاصله می بینیم که ویژه مقدارها باید حقیقی باشند. بنابراین،  $b = b^*$  و از ۴۸-۶ به رابطه زیر می رسیم.

$$(a - b)\langle b|a\rangle = 0 \quad (۴۹-۶)$$

که همان چیزی است که می خواستیم ثابت کنیم، زیرا به ازای  $a \neq b$  باید  $\langle b|a\rangle$  صفر شود.

### واگنی و مشاهده پذیرهای همزمان

در دو مسئله ای که در فصل ۴ بررسی کردیم، یعنی ذره در جعبه و ذره آزاد، دیدیم که ویژه تابعها به طور همزمان ویژه تابعهای  $H$  و یک عملگر دیگر، در مورد اول پارینه و در مورد دوم تکانه، بودند و دیدیم که در هر دو مورد  $H$  با عملگرهای مزبور جابه جا می شد. اکنون شرایط کلی امکان این جابه جایی را بررسی می کنیم.

ویژه تابعهای  $u_n$  مربوط به ویژه مقدار  $a$ ی عملگر  $A$ ،

$$Au_n(x) = au_n(x) \quad (۵۰-۶)$$

هنگامی ویژه تابعهای همزمان عملگر دیگری مانند  $B$  هستند که

$$Bu_n(x) = bu_n(x) \quad (۵۱-۶)$$

اما این ایجاب می کند که

$$ABu_n(x) = ABu_n(x) = bAu_n(x) = abu_n(x)$$

و

$$BAu_n(x) = BAu_n(x) = aBu_n(x) = abu_n(x)$$

از این رو به دست می‌آوریم

$$(AB - BA)u_a(x) = 0 \quad (52-6)$$

اگر این رابطه تنها برای یک  $u_a$  برقرار باشد چندان جالب توجه نیست، اما اگر برای مجموعه کامل  $u_a$  صادق باشد به این معنی است که برای تمام تابعهای انتگرال‌پذیر مجذوری  $\psi(x) = \sum_a C_a u_a(x)$  می‌توان نوشت

$$\begin{aligned} \sum_a C_a (AB - BA)u_a(x) &= (AB - BA) \sum_a C_a u_a(x) \\ &= (AB - BA) \psi(x) = 0 \end{aligned} \quad (53-6)$$

یعنی عملگرها جابه‌جا می‌شوند:

$$[A, B] = 0 \quad (54-6)$$

برعکس، اگر دو عملگر هرمیتی  $A$  و  $B$  جابه‌جا شوند، یعنی رابطه ۵۴-۶ برقرار باشد، آنگاه

$$\begin{aligned} ABu_a(x) &= BAu_a(x) \\ &= aBu_a(x) \end{aligned} \quad (55-6)$$

یعنی

$$A[Bu_a(x)] = a[Bu_a(x)] \quad (56-6)$$

بنابراین، تابع  $Bu_a(x)$  نیز یک ویژه‌تابع  $A$  با ویژه‌مقدار  $a$  است. اگر به‌ازای هر ویژه‌مقدار  $a$  تنها یک ویژه‌تابع عملگر  $A$  وجود داشته باشد، آنگاه  $Bu_a(x)$  باید متناسب با  $u_a(x)$  باشد:

$$Bu_a(x) = bu_a(x) \quad (57-6)$$

بنابراین،  $u_a(x)$  ویژه‌تابع همزمان  $A$  و  $B$  است. این وضعیت، که در آن ویژه‌تابعهای  $A$  واکن نیستند، موردی است که برای ذره در جعبه دیدیم. از طرف دیگر، اگر دو ویژه‌تابع  $A$  متناظر با ویژه‌مقدار  $a$  وجود داشته باشند، یعنی، چنانکه در مثال ذره آزاد دیدیم، واکنی دوگانه داشته باشیم:

$$\begin{aligned} Au_a^{(1)}(x) &= au_a^{(1)}(x) \\ Au_a^{(2)}(x) &= au_a^{(2)}(x) \end{aligned} \quad (58-6)$$

تنها می‌توان گفت که  $Bu_a^{(1)}(x)$  و  $Bu_a^{(2)}(x)$  باید ترکیبهای خطی  $u_a^{(1)}(x)$  و  $u_a^{(2)}(x)$  باشند:

$$\begin{aligned} Bu_a^{(1)}(x) &= b_{11}u_a^{(1)}(x) + b_{12}u_a^{(2)}(x) \\ Bu_a^{(2)}(x) &= b_{21}u_a^{(1)}(x) + b_{22}u_a^{(2)}(x) \end{aligned} \quad (59-6)$$

اما بدیهی است که می‌توان از ترکیبهای خطی این دو معادله معادله‌هایی از نوع زیر به دست آورد

$$\begin{aligned} Bv_a^{(1)}(x) &= b_+v_a^{(1)}(x) \\ Bv_a^{(2)}(x) &= b_-v_a^{(2)}(x) \end{aligned} \quad (60-6)$$

برای مثال،

$$\begin{aligned} B(u_a^{(1)} + \lambda u_a^{(2)}) &= (b_{11} + \lambda b_{21})u_a^{(1)} + (b_{12} + \lambda b_{22})u_a^{(2)} \\ &= b_{\pm}(u_a^{(1)} + \lambda u_a^{(2)}) \end{aligned}$$

با این شرط که  $\lambda$  را طوری انتخاب کنیم که

$$\frac{b_{12} + \lambda b_{22}}{b_{11} + \lambda b_{21}} = \lambda$$

این یک معادلهٔ درجهٔ دوم است، و دو مقدار برای  $\lambda$ ، متناظر با دو ویژه‌مقدار  $b_{\pm}$ ، وجود دارند. بهتر است که ویژه‌تابعهای همزمان  $A$  و  $B$  در ۶۰-۶ را با  $u_{ab}^{(1)}(x)$  و  $u_{ab}^{(2)}(x)$  نشان دهیم. چون این ویژه‌تابعها متناظر با ویژه‌مقدارهای مختلف عملگر  $B$  هستند با هم متعامدند. در عمل، برای واگنی دوگانه، اگر ویژه‌تابعهای واگن  $A$  را عمود بر یکدیگر بگیریم (مثلاً،  $e^{ikx}$  و  $e^{-ikx}$  برای ذرهٔ آزاد) خودبه‌خود ویژه‌تابعهای  $B$  نیز هستند.

حتی پس از یافتن ویژه‌تابعهای  $A$  و تعیین ترکیبهای خطی که ویژه‌تابعهای عملگر جابه‌جاشوندهٔ  $B$  هستند، ممکن است واگنی کاملاً از بین نرفته باشد، یعنی چند ویژه‌تابع همزمان  $A$  و  $B$  با همان  $a$  و  $b$  وجود داشته باشند. این نشان می‌دهد که باید عملگر سومی مانند  $C$  وجود داشته باشد که با  $A$  و  $B$  جابه‌جا شود و تابع را می‌توان چنان بازترکیب کرد که ویژه‌تابعهای همزمان  $A$  و  $B$  و  $C$  باشد و ویژه‌مقدارهای آن ویژه‌تابعهای واگن  $A$  و  $B$  را متمایز کنند. این روند تا از بین رفتن کامل واگنی ادامه می‌یابد. مجموعهٔ عملگرهای دو به دو جابه‌جاشوندهٔ  $A$ ،  $B$ ،  $C$ ، ...،  $M$ ، که ویژه‌تابعهای مشترک آنها را تعیین می‌کنیم، مجموعهٔ کامل مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده نامیده

می‌شود. داریم

$$\begin{aligned} [A, B] &= [A, C] = \dots = [A, M] = 0 \\ [B, C] &= [B, D] = \dots = [B, M] = 0 \end{aligned} \quad (۶۱-۶)$$

و غیره، با ویژه‌تابع‌های همزمان  $u_{ab\dots m}(x)$ :

$$\begin{aligned} Au_{ab\dots m}(x) &= au_{ab\dots m}(x) \\ Bu_{ab\dots m}(x) &= bu_{ab\dots m}(x) \\ Mu_{ab\dots m}(x) &= mu_{ab\dots m}(x) \end{aligned} \quad (۶۲-۶)$$

برای حالتی که با  $u_{abc\dots m}(x)$  توصیف می‌شود مقادیر مشاهده‌پذیرهای  $A, B, C, \dots, M$  معین هستند. این بیشترین اطلاعاتی است که می‌توان یکباره راجع به دستگاه داشته باشیم، زیرا اگر عملگر دیگری را در نظر بگیریم که تابعی از  $A, B, C, \dots, M$  نباشد (چون اینها جابه‌جا می‌شوند، چنین تابعی بدون ابهام تعریف می‌شود) از اندازه‌گیری آن یک مقدار دقیق در حالت  $u_{ab\dots m}(x)$  به‌دست نمی‌آید. به‌طور کلی، اگر دو عملگر با هم جابه‌جا نشوند نوعی رابطه عدم قطعیت برای دقتی که می‌توان این دو مشاهده‌پذیر را تعیین کرد وجود دارد.

## رابطه‌های عدم قطعیت

یک راه ساده برای تعریف عدم قطعیت وابسته به یک عملگر  $A$  توصیف آن با استفاده از افت‌وخیز حول مقدار میانگین است. عملگر  $A$  و یک حالت بهنجارشده کلی را در نظر می‌گیریم که با  $\psi$  توصیف می‌شود. مقدار میانگین  $A$  همان مقدار انتظاری  $\langle \psi | A | \psi \rangle$  است که آن را با نماد اختصاری  $\langle A \rangle$  نشان می‌دهیم. مجذور انحراف از میانگین معیاری از افت‌وخیز است. با این کمیت است که مجذور عدم قطعیت  $(\Delta A)^2$  را تعریف می‌کنیم:

$$\begin{aligned} (\Delta A)^2 &\equiv \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \rangle \\ &= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \end{aligned} \quad (۶۳-۶)$$

زیرا مقدار میانگین عددی مانند  $\langle A \rangle^2$  درست برابر با همان عدد است.

در پیوست ب نشان می‌دهیم که اگر دو عملگر هرمیتی  $A$  و  $B$  جابه‌جا نشوند عدم قطعیت‌های  $\Delta A$  و  $\Delta B$  همبسته‌اند، و رابطه آنها به‌صورت زیر است

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4} \langle i[A, B] \rangle^2 \quad (۶۴-۶)$$

که در آن  $[A, B] = AB - BA$ .  
توجه کنید که اگر حالت  $\psi$  اتفاقاً یک ویژه حالت یکی از عملگرها، مثلاً  $A$ ، باشد آنگاه

$$\begin{aligned}(\Delta A)^2 &= \langle a|A^2|a\rangle - \langle a|A|a\rangle^2 \\ &= a^2 \langle a|a\rangle - [a \langle a|a\rangle]^2 = 0\end{aligned}\quad (۶۵-۶)$$

که برخلاف انتظار نیست، زیرا عدم قطعیتی وجود ندارد. بنابراین، طرف چپ  $۶۴-۶$  صفر می شود. در طرف راست هم صفر به دست می آید زیرا

$$\begin{aligned}\langle a|[A, B]|a\rangle &= \langle a|AB|a\rangle - \langle a|BA|a\rangle \\ &= \langle A(a)|B|a\rangle - \langle a|B|A(a)\rangle \\ &= a \langle a|B|a\rangle - a \langle a|B|a\rangle = 0\end{aligned}$$

برای عملگرهای  $x$  و  $p$ ، که برای آنها  $[x, p] = i\hbar$ ، به دست می آوریم

$$(\Delta x)^2 (\Delta p)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (۶۶-۶)$$

توجه کنید که در محاسبه های بالا هیچ استفاده ای از ویژگیهای موجی، توابع موج فضای  $x$  و فضای  $p$ ، یا دوگانگی موج-ذره نشده است. نتیجه به دست آمده تنها به ویژگیهای عملگری مشاهده پذیرهای  $A$  و  $B$  بستگی دارد.

## وابستگی زمانی و حد کلاسیک

اکنون به مسئله مهم حد کلاسیک نظریه کوانتومی می پردازیم. برای این کار ابتدا باید تغییرات زمانی مقدار انتظاری عملگرها را بررسی کنیم. به طور کلی، مقدار انتظاری یک عملگر با زمان تغییر می کند. این تغییر می تواند به دلیل وابستگی صریح خود عملگر به زمان باشد، مانند عملگر  $x + pt/m$ ، و یا می تواند به این دلیل باشد که مقدار انتظاری نسبت به تابع موجی گرفته می شود که خودش با زمان تغییر می کند. اگر بنویسیم

$$\langle A \rangle_t = \int \psi^*(x, t) A \psi(x, t) dx \quad (۶۷-۶)$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle A \rangle_t &= \int \psi^*(x, t) \frac{\partial A}{\partial t} \psi(x, t) dx \\
&+ \int \frac{\partial \psi^*(x, t)}{\partial t} A \psi(x, t) dx \\
&+ \int \psi^*(x, t) A \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} dx \\
&= \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle_t + \int \left( \frac{\lambda}{i\hbar} H \psi(x, t) \right)^* A \psi(x, t) \\
&+ \int \psi^*(x, t) A \left( \frac{\lambda}{i\hbar} H \psi(x, t) \right) \\
&= \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle_t + \frac{i}{\hbar} \int \psi^*(x, t) H A \psi(x, t) dx \\
&- \frac{i}{\hbar} \int \psi^*(x, t) A H \psi(x, t) dx
\end{aligned}$$

بنابراین

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle_t = \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle_t + \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle_t \quad (68-6)$$

در این محاسبه از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که  $H$  یک عملگر هرمیتی است. نتیجه می‌گیریم که اگر  $A$  وابستگی صریح به زمان نداشته باشد، تغییر مقدار انتظاری برای هر حالتی به صورت زیر است

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle_t = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle_t \quad (69-6)$$

هرگاه این عملگر با  $H$  جابه‌جا شود، مقدار انتظاری آن همیشه ثابت است، و می‌توان گفت این مشاهده‌پذیر یک ثابت حرکت است. اگر  $H$  عضوی از مجموعه کامل مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده باشد، تمام مشاهده‌پذیرهای دیگر این مجموعه ثابتهای حرکت خواهند بود.



در اینجا به ترتیب  $A = x$  و  $A = p$  را در نظر می‌گیریم. ابتدا، داریم

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle x \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle [H, x] \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \left\langle \left[ \frac{p^2}{2m} + V(x), x \right] \right\rangle\end{aligned}$$

اما  $x$  با هر تابعی از  $x$  جابه‌جا می‌شود:

$$[V(x), x] = 0 \quad (۷۰-۶)$$

و از این رو تنها باید  $[p^2, x]$  را محاسبه کنیم:

$$\begin{aligned}[p^2, x] &= p[p, x] + [p, x]p \\ &= \frac{2\hbar}{i} p\end{aligned} \quad (۷۱-۶)$$

بنابراین، به دست می‌آوریم

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \left\langle \frac{p}{m} \right\rangle \quad (۷۲-۶)$$

اکنون می‌نویسیم

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle p \rangle &= \frac{i}{\hbar} \left\langle \left[ \frac{p^2}{2m} + V(x), p \right] \right\rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} \langle [p, V(x)] \rangle\end{aligned} \quad (۷۳-۶)$$

زیرا بدیهی است که  $p^2$  با  $p$  جابه‌جا می‌شود. برای محاسبه آخرین جابه‌جاگر، می‌نویسیم

$$\begin{aligned}pV(x)\psi(x) - V(x)p\psi(x) &= \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} [V(x)\psi(x)] - \frac{\hbar}{i} V(x) \frac{d}{dx} \psi(x) \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{dV(x)}{dx} \psi(x)\end{aligned} \quad (۷۴-۶)$$

بنابراین،

$$[p, V(x)] = \frac{\hbar}{i} \frac{dV(x)}{dx} \quad (۷۵-۶)$$

و در نتیجه

$$\frac{d}{dt} \langle p \rangle_t = - \left\langle \frac{dV(x)}{dx} \right\rangle_t \quad (۷۶-۶)$$

از ترکیب ۷۲-۶ و ۷۶-۶ به دست می آوریم

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle_t = - \left\langle \frac{dV(x)}{dx} \right\rangle_t \quad (۷۷-۶)$$

این رابطه بسیار شبیه معادله حرکت ذره کلاسیک در پتانسیل  $V(x)$  است:

$$m \frac{d^2 x_{cl}}{dt^2} = - \frac{dV(x_{cl})}{dx_{cl}} \quad (۷۸-۶)$$

تنها چیزی که ما را از پذیرفتن اتحاد

$$x_{cl} = \langle x \rangle \quad (۷۹-۶)$$

باز می دارد این است که

$$\left\langle \frac{dV}{dx} \right\rangle \neq \frac{d}{d\langle x \rangle} V(\langle x \rangle) \quad (۸۰-۶)$$

تحت شرایطی که نامساوی بالا به یک تساوی تقریبی تبدیل می شود، حرکت اساساً کلاسیک است، و اهرنفتست برای نخستین بار متوجه این نکته شد. این تساوی تقریبی ایجاب می کند که پتانسیل تابعی کند تغییر از شناسه خود باشد. اگر بنویسیم

$$F(x) = - \frac{dV(x)}{dx} \quad (۸۱-۶)$$

آنگاه

$$F(x) = F(\langle x \rangle) + (x - \langle x \rangle)F'(\langle x \rangle) + \frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2!}F''(\langle x \rangle) + \dots$$

اگر عدم قطعیت  $(\Delta x)^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$  کوچک باشد، و بتوان از جمله‌های بالاتر در بسط صرف‌نظر کنیم، به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \langle F(x) \rangle &\cong F(\langle x \rangle) + \langle x - \langle x \rangle \rangle F'(\langle x \rangle) \\ &\cong F(\langle x \rangle) \end{aligned} \quad (۸۲-۶)$$

این رابطه می‌تواند حتی برای الکترونها و ذرات زیراتمی دیگر معتبر باشد، و برای میدانهای ماکروسکوپی تقریب خوبی است، و به این دلیل می‌توان مدار الکترون یا پروتون در شتابدهنده‌ها را با معادله‌های کلاسیک حرکت توصیف کرد.

## مسائل

۱-۶ اگر  $A$  و  $B$  عملگرهای هرمیتی باشند، ثابت کنید (۱) عملگر  $AB$  تنها به شرطی هرمیتی است که  $A$  و  $B$  جابه‌جا شوند، یعنی  $AB = BA$ ، و (۲) عملگر  $(A + B)^n$  هرمیتی است.  
 ۲-۶ ثابت کنید عملگر  $A$  هر چه باشد،  $A + A^\dagger$  و  $i(A - A^\dagger)$ ، و همچنین  $AA^\dagger$ ، هرمیتی هستند.

۳-۶ ثابت کنید اگر  $H$  عملگر هرمیتی باشد همیوگ هرمیتی عملگر  $e^{iH}$  (که با  $i^n H^n/n!$  که  $\sum_{n=0}^{\infty}$  تعریف می‌شود) به صورت  $e^{-iH}$  است.  
 ۴-۶ نامساوی شوارتز را اثبات کنید:

$$\langle \psi | \psi \rangle \langle \phi | \phi \rangle \geq |\langle \psi | \phi \rangle|^2$$

توجه کنید که این نامساوی هم‌ارز  $\cos^2 \theta \leq 1$  برای بردارهای سه‌بعدی است. [راهنمایی:  $\langle \psi + \lambda \phi | \psi + \lambda \phi \rangle \geq 0$  را در نظر بگیرید و مقدار  $\lambda$  را که به‌ازای آن طرف چپ کمینه می‌شود محاسبه کنید].  
 ۵-۶ برای پتانسیل

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

ویژه‌تابعهای بهنجار شده عبارت‌اند از  $u_n(x) = \sqrt{2/a} \sin(n\pi x/a)$ . نشان دهید

$$\sum_n \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi y}{a} = \delta(x - y) \quad 0 \leq x, y \leq a$$

۶-۶ اگر  $A$  هرمیتی باشد، نشان دهید  $\langle A^\dagger \rangle \geq 0$ .

۶-۷ عملگر هرمیتی  $H$  دارای ویژگی زیر است

$$H^\dagger = \lambda$$

ویژه‌مقدارهای این عملگر  $H$  را به دست آورید. اگر  $H$  هرمیتی نباشد، ویژه‌مقدارهای آن را تعیین کنید.

۶-۸ عملگر  $U$  را یکانی می‌گوییم اگر دارای ویژگی زیر باشد

$$UU^\dagger = U^\dagger U = \lambda$$

نشان دهید اگر  $\langle \psi / \psi \rangle = \lambda$  آنگاه  $\langle U\psi / U\psi \rangle = \lambda$ .

۶-۹ نشان دهید اگر  $A$  هرمیتی باشد  $e^{iA}$  یکانی است.

۶-۱۰ نشان دهید اگر مجموعه کامل  $\{u_a\}$  راست‌هنجار باشد:

$$\langle u_a | u_b \rangle = \delta_{ab}$$

مجموعه بردارهای

$$|v_a\rangle = U|u_a\rangle$$

که در آن  $U$  یکانی است نیز راست‌هنجار است.

۶-۱۱ برای ذره‌ای در یک جعبه نامتناهی در حالتی که با عدد کوانتومی  $n$  مشخص می‌شود،

نشان دهید

$$\Delta p \Delta x \sim hn$$

۶-۱۲ با استفاده از رابطه جابه‌جایی میان تکانه  $p$  و مکان  $x$ ، معادله‌هایی را به دست آورید که

وابستگی زمانی  $\langle x \rangle$  و  $\langle p \rangle$  را به ازای هامیلتونیهای زیر بیان کنند

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m(\omega_1^2 x^2 + \omega_2 x + \epsilon) \quad (\text{الف})$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - \frac{A}{x^2} \quad (\text{ب})$$

اولین مجموعه معادله‌ها (هامیلتونی الف) را حل کنید.  
۱۳-۶ هامیلتونی الکترونی در یک میدان الکتریکی نوسانی به صورت زیر است

$$H = \frac{p^2}{2m} - (eE_0 \cos \omega t)x$$

$(dx/dt)$ ،  $(dp/dt)$ ، و  $(dH/dt)$  را محاسبه کنید.

### مراجع

ساختار کلی مکانیک موجی در تمام کتابهای مکانیک کوانتومی بررسی می‌شود. برای مثال، می‌توانید به کتابهای زیر مراجعه کنید  
پاول جی، ال و ب کریسمن، مکانیک کوانتومی، ترجمه پاشایی راد و سعادت، تهران، مرکز نشر دانشگاهی، ۱۳۶۸، ۵۴۸ صفحه.

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

R H Dicke and J P Wittke, *Introduction to Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, Reading, Mass, 1960

و کتاب پیشرفته‌تر

E Merzbacher, *Quantum Mechanics*, John Wiley & Sons, New York, 1970.



## روشهای عملگری در مکانیک کوانتومی

در بحث ساختار کلی مکانیک موجی، به عملگرهای معرف مشاهده‌پذیرها و ویژه‌تابعهای آنها به یک اندازه اهمیت دادیم. اگرچه در یک جا ویژه‌تابعها را همانند یک پایه راست‌هنجار از بردارهای یک فضای برداری  $N$  بعدی توصیف کردیم — که مسلماً از اهمیت آنها می‌کاهد — اما به‌نظر می‌رسید که آنها، نه عملگرها، در بررسی مسائل فیزیکی در فصل ۵ نقش اول را به‌عهده دارند. در این فصل، با استفاده از یک مثال ساده، نشان خواهیم داد که (الف) برای یافتن طیف ویژه‌مقدار تنها با استفاده از عملگرها می‌توان نتیجه‌های بسیاری به‌دست آورد، و (ب) توصیف ویژه‌تابعها به‌عنوان پایه را می‌توان اندکی مجردتر کرد. این توصیف به این دلیل اهمیت دارد که تاکنون تنها توابعی را در نظر گرفته‌ایم که به  $\psi$  یا به  $\psi$  بستگی دارند، اما در آینده نشان خواهیم داد که مشاهده‌پذیرهایی وجود دارند که نمی‌توان آنها را مستقیماً به فضای  $\psi$  وابسته کرد، و برای آنها باید مفهوم مجردتر ویژه‌حالت را تعریف کرد. این نکات در جریان بررسی مثال مزبور، مسئله نوسانگر هماهنگ، روشنتر خواهند شد.<sup>۱</sup>

---

۱. مسائلی که حل دقیق دارند، چه به‌صورت معادله‌های دیفرانسیل چه به‌صورت عملگری، اندک هستند. مسئله نوسانگر هماهنگ از همه ساده‌تر و از این‌رو برای اهداف ما از همه مناسبتر است.

## طیف انرژی نوسانگر هماهنگ

هامیلتونی نوسانگر هماهنگ به صورت زیر است

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (۱-۷)$$

که در آن  $x$  و  $p$  عملگر هستند. بر نمایش  $p$  به صورت  $(\hbar/i)(d/dx)$  تأکید نمی‌کنیم. تنها نتیجه این نمایش صریح، که در فصل ۳ به دست آوردیم، رابطه جابه‌جایی بنیادی زیر است

$$[p, x] = \frac{\hbar}{i} \quad (۲-۷)$$

به لحاظ کلاسیک، هامیلتونی نوسانگر هماهنگ را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$H = \omega \left( \sqrt{\frac{m\omega}{2}} x - i \frac{p}{\sqrt{2m\omega}} \right) \left( \sqrt{\frac{m\omega}{2}} x + i \frac{p}{\sqrt{2m\omega}} \right)$$

اما چون  $p$  و  $x$  جابه‌جا نمی‌شوند، داریم

$$\begin{aligned} & \omega \left( \sqrt{\frac{m\omega}{2}} x - i \frac{p}{\sqrt{2m\omega}} \right) \left( \sqrt{\frac{m\omega}{2}} x + i \frac{p}{\sqrt{2m\omega}} \right) \\ &= \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 - \frac{i\omega}{2} (px - xp) \\ &= H - \frac{1}{2} \hbar \omega \end{aligned} \quad (۳-۷)$$

در اینجا برای عملگرهایی که  $H - \hbar\omega/2$  به آنها تجزیه شده است یک نمادنگاری خاص معرفی می‌کنیم:

$$\begin{aligned} A &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + i \frac{p}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \\ A^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - i \frac{p}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \end{aligned} \quad (۴-۷)$$

که در آنها عامل اضافی  $\sqrt{1/\hbar}$  را برای این وارد کرده‌ایم که  $A$  و  $A^\dagger$  بی‌بعد باشند. چون  $x$  و  $p$  هرمیتی هستند،  $A^\dagger$  واقعاً همیوگ هرمیتی  $A$  است. توجه کنید که

$$[A, A^\dagger] = \left[ \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x, -i \frac{p}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \right] + \left[ i \frac{p}{\sqrt{2m\omega\hbar}}, \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x \right] = 1 \quad (۵-۷)$$

هامیلتونی به صورت زیر درمی آید

$$H = h\omega \left( \frac{1}{2} + A^\dagger A \right) \quad (۶-۷)$$

این سادگی هامیلتونی موجب سادگی رابطه‌های جابه‌جایی  $A$  و  $A^\dagger$  با  $H$  می‌شود. داریم<sup>۲</sup>

$$[H, A] = [h\omega A^\dagger A, A] = h\omega [A^\dagger, A]A = -h\omega A \quad (۷-۷)$$

و

$$[H, A^\dagger] = [h\omega A^\dagger A, A^\dagger] = h\omega A^\dagger [A, A^\dagger] = h\omega A^\dagger \quad (۸-۷)$$

توجه کنید که یک راه ساده برای به دست آوردن رابطه‌های جابه‌جایی شامل عملگرهای الحاقی هرمیتی استفاده از اتحاد زیر است

$$[A, B]^\dagger = (AB - BA)^\dagger = B^\dagger A^\dagger - A^\dagger B^\dagger = [B^\dagger, A^\dagger] \quad (۹-۷)$$

مخصوصاً داریم

$$\begin{aligned} [H, A]^\dagger &= [A^\dagger, H] = -[H, A^\dagger] \\ &= (-h\omega A)^\dagger \end{aligned} \quad (۱۰-۷)$$

که از آن رابطه ۷-۸ به دست می‌آید.  
اکنون معادله ویژه‌مقداری را می‌نویسیم:

$$H u_E = E u_E \quad (۱۱-۷)$$

در گذشته، هرگاه چنین معادله‌ای را می‌نوشتیم، منظور آن بود که  $H$  شامل عملگرهای دیفرانسیلی مانند  $d/dx$  است و  $u_E$  تابعی از  $x$  است. این فرض مناسب بود زیرا با عملگرهایی سروکار داشتیم

۲. از قاعده‌های جابه‌جایی که در پیوست ب نشان داده شده‌اند مکرراً استفاده خواهیم کرد، از جمله

$$[A + B, C] = [A, C] + [B, C] \quad \text{و} \quad [AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$$

بدیهی است که ترتیب عملگرها نباید به هم بخورد.



که مشخصاً به فضایی مربوط می‌شدند که با تمام تابعهای انتگرال‌پذیر مجذوری از  $x$  تعریف شده بود، اما در آنچه اکنون انجام می‌دهیم چیزهایی را که عملگرها روی آنها عمل می‌کنند چندان مشخص نمی‌کنیم. تنها فرض می‌کنیم که آنها در یک فضای برداری مجرد تعریف شده‌اند، و این فضا را بعداً به فضای توابع  $x$  مربوط خواهیم کرد. برای انتقال این تجرید به زبانی که برای توصیف معادله‌ها از آن استفاده می‌کنیم، به جای ویژه‌تابع از ویژه‌حالت صحبت می‌کنیم، و آنچه را تابع موج یا بسته‌موج نامیدیم اکنون بردار حالت می‌نامیم. بنابراین، به جای ویژه‌تابع  $u_{ab\dots m}$  مربوط به بزرگترین مجموعه مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده می‌توان ویژه‌بردار یا ویژه‌حالت  $u_{ab\dots m}$  را به کار برد؛ شاخصهای  $a, b, \dots, m$  معرف ویژه‌مقدارهای عملگرهای  $A, B, \dots, M$  هستند، و این توصیف، بدون  $x$ ، به روشنی حاوی بیشترین اطلاعات ممکن است.

اکنون ۷-۷ را بر  $u_E$  اعمال می‌کنیم:

$$H A u_E - A H u_E = -\hbar\omega A u_E$$

با استفاده از ۷-۱۱، به دست می‌آوریم

$$H A u_E = (E - \hbar\omega) A u_E \quad (۱۲-۷)$$

این معادله نشان می‌دهد که اگر  $u_E$  ویژه‌حالت  $H$  با ویژه‌مقدار  $E$  باشد،  $A u_E$  نیز ویژه‌حالت  $H$  با ویژه‌مقدار  $E - \hbar\omega$  است، یعنی متناظر با ویژه‌مقداری است که به اندازه یک

$$\epsilon = \hbar\omega \quad (۱۳-۷)$$

کمتر است. بنابراین، می‌توان نوشت

$$A u_E = c(E) u_{E-\epsilon} \quad (۱۴-۷)$$

وجود ثابت  $c(E)$  لازم است، زیرا حتی اگر  $u_E$  به  $\epsilon$  بهنجار شده باشد  $A u_E$  الزاماً چنین نیست. در تأکید بر جدایی از وابستگی به  $x$ ، شرط بهنجارش که همیشه به صورت

$$\int u_E^*(x) u_E(x) dx = 1$$

نوشته می‌شد اکنون با استفاده از نمادنگاری دیراک به صورت زیر نوشته می‌شود

$$\langle u_E | u_E \rangle = 1 \quad (۱۵-۷)$$

ویژه‌حالتها را همیشه به ۱ بهنجار خواهیم کرد مگر اینکه متعلق به پیوستار باشند، که در این مورد

$$\langle u_E | u_{E'} \rangle = \begin{cases} \delta(E - E') \\ \text{یا } \delta(p - p') \end{cases} \quad (۱۶-۷)$$

اکنون اگر ۷-۷ را بر حالت  $u_{E-\epsilon}$  اعمال کنیم، دقیقاً به همان طریق می‌بینیم که  $Au_{E-\epsilon}$ ، یا معادل آن  $A^\dagger u_E$ ، حالتی با انرژی  $E - 2\epsilon$  را می‌دهد. بنابراین، با اعمال مکرر  $A$  روی یک  $u_E$  می‌توان حالت‌های با انرژی کمتر و کمتر را تولید کرد. عملگر  $A$  را به همین مناسبت عملگر کاهنده می‌نامند. حدی برای تکرار اعمال  $A$  وجود دارد زیرا یک پیامد ۷-۷ این است که مقدار انتظاری  $H$  باید همیشه مثبت باشد. در واقع، برای یک تابع موج اختیاری داریم

$$\begin{aligned} \langle \psi | p^\dagger | \psi \rangle &= \int \psi^*(x) p^\dagger \psi(x) dx = \int [p^\dagger \psi(x)]^* (p\psi) dx \\ &= \int [p\psi(x)]^* [p\psi(x)] dx \\ &= \hbar^2 \int |d\psi(x)/dx|^2 dx \geq 0 \end{aligned} \quad (۱۷-۷)$$

که در نمادنگاری بی‌مختصات به صورت زیر بیان می‌شود

$$\begin{aligned} \langle \psi | p^\dagger | \psi \rangle &= \langle p^\dagger \psi | p\psi \rangle \\ &= \langle p\psi | p\psi \rangle \geq 0 \end{aligned} \quad (۱۸-۷)$$

به همین ترتیب، چون  $x$  نیز یک عملگر هرمیتی است، داریم

$$\begin{aligned} \langle \psi | x^\dagger | \psi \rangle &= \langle x^\dagger \psi | x\psi \rangle \\ &= \langle x\psi | x\psi \rangle \geq 0 \end{aligned} \quad (۱۹-۷)$$

و حاصلضرب نرده‌ای هر بردار در خودش مجذور طول آن است که یک عدد مثبت است. بنابراین، روند کاهش باید در جایی که حالت پایه است قطع شود. یعنی، اگر حالت پایه را با  $u_0$  نشان دهیم، باید

$$Au_0 = 0 \quad (۲۰-۷)$$

انرژی حالت پایه برابر است با

$$Hu_0 = (\hbar\omega A^\dagger A + \frac{1}{4}\hbar\omega)u_0 = \frac{1}{4}\hbar\omega u_0 \quad (21-7)$$

اکنون ۷-۸ را بر حالت پایه اعمال می‌کنیم:

$$HA^\dagger u_0 - A^\dagger Hu_0 = \hbar\omega A^\dagger u_0$$

یعنی،

$$HA^\dagger u_0 = (\hbar\omega + \frac{1}{4}\hbar\omega)A^\dagger u_0 \quad (22-7)$$

انرژی به اندازه یک  $\hbar\omega$  افزایش یافته است، و از این رو  $A^\dagger$  را عملگر افزایشده می‌نامند. نمادنگاری خود را اندکی تغییر می‌دهیم، به این معنی که هر حالت را با تعداد  $\hbar\omega$ های افزون بر انرژی حالت پایه  $\hbar\omega/2$  نشانگذاری می‌کنیم. بنابراین، می‌نویسیم

$$A^\dagger u_0 = cu_1 \quad (23-7)$$

توجه کنید که ۷-۱۲ ایجاب می‌کند که

$$Au_1 = c'u_0 \quad (24-7)$$

یعنی  $A^\dagger$  و  $A$  روی یک "نردبان" پله به پله حرکت می‌کنند. تمام حالتها را می‌توان با اعمال مکرر  $A^\dagger$  بر  $u_0$  تولید کرد. در نتیجه، طیف انرژی با رابطه زیر داده می‌شود

$$E = \left(n + \frac{1}{4}\right) \hbar\omega \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (25-7)$$

بدین ترتیب، توانسته‌ایم طیف انرژی را بدون حل هیچ معادله دیفرانسیلی به دست آوریم. همچنین یک نمایش کلی از ویژه‌بردارها داریم:

$$u_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (A^\dagger)^n u_0 \quad (26-7)$$

که در آن ثابت درست بهنجارش را وارد کرده‌ایم. یک راه به‌دست آوردن این ثابت این است که با توجه به رابطهٔ جابه‌جایی

$$[A, A^\dagger] = 1$$

از تساوی صوری زیر استفاده کنیم

$$A = \frac{d}{dA^\dagger} \quad (27-7)$$

بنابراین، می‌توانیم بنویسیم

$$\langle u_o | A^m (A^\dagger)^n | u_o \rangle = \left\langle u_o \left| \left( \frac{d}{dA^\dagger} \right)^m (A^\dagger)^n \right| u_o \right\rangle$$

به‌ازای  $m < n$ ، برای طرف راست به‌دست می‌آوریم

$$n(n-1)(n-2)\cdots(n-m+1)\langle u_o | (A^\dagger)^{n-m} | u_o \rangle$$

به‌آسانی دیده می‌شود که براکت برابر با صفر است:

$$\langle u_o | (A^\dagger)^{n-m} | u_o \rangle = \langle Au_o | (A^\dagger)^{n-m-1} | u_o \rangle = 0$$

زیرا  $Au_o = 0$ . به‌ازای  $m > n$ ، طرف چپ را به‌صورت زیر می‌نویسیم

$$\langle u_o | A^m (A^\dagger)^n | u_o \rangle = \left\langle u_o \left| A^{m-n} \left( \frac{d}{dA^\dagger} \right)^n (A^\dagger)^n \right| u_o \right\rangle$$

پس از مشتق گرفتن به این نتیجه می‌رسیم که  $n! \langle u_o | A^{m-n} | u_o \rangle = 0$  به‌ازای  $m = n$  داریم

$$\langle u_o | A^n (A^\dagger)^n | u_o \rangle = \left\langle u_o \left| \left( \frac{d}{dA^\dagger} \right)^n (A^\dagger)^n \right| u_o \right\rangle = n!$$

بنابراین، ضریب بهنجارش در ۲۶-۷ درست است، و همچنین نشان داده‌ایم که

$$\langle u_m | u_n \rangle = 0 \quad m \neq n \quad (28-7)$$

این حکم که هر بردار حالت اختیاری را می‌توان برحسب ویژه‌حالت‌های  $H$  بسط داد اکنون به‌صورت مستقل از مختصات زیر نوشته می‌شود

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} C_n u_n \quad (29-7)$$

و چون  $\langle u_m | u_n \rangle = \delta_{mn}$  داریم

$$C_m = \langle u_m | \psi \rangle \quad (30-7)$$

### نمایشهای حالت‌های مجرد: از عملگرها تا معادلهٔ شرودینگر

نشان دادیم که می‌توان ویژه‌مقدارهای انرژی نوسانگر هماهنگ را تنها با استفاده از روشهای عملگری به‌دست آورد. در این مسئله تنها چیزی که برای تعیین ویژه‌حالت‌ها به آن احتیاج داریم انرژی است، یعنی اعداد درست  $n = 0, 1, 2, \dots$  که در رابطهٔ زیر ظاهر می‌شوند

$$E = \left( n + \frac{1}{2} \right) h\omega$$

و از این رو مجموعهٔ کامل مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده تنها شامل  $H$  است.<sup>۳</sup> بدین ترتیب، شاخص  $n$  در  $u_n$  تمام محتوای آن را توصیف می‌کند. بنابراین، می‌توانیم نقش ممتاز ویژه‌تابع در فضای  $x$ ،  $u_n(x)$ ، را کنار بگذاریم، بجز اینکه:  $u_n(x)$  اطلاعات بیشتری به ما می‌دهد زیرا چگالی احتمال یافتن ذره در  $x$  را (از طریق  $|u_n(x)|^2$ ) تعیین می‌کند. با وجود این، آیا این مضمون اضافی می‌تواند تابع موج فضای  $x$  را ممتاز کند؟ برای مثال، نقش تابع موج  $\phi(p)$  را در فضای تکانه یادآور می‌شویم. چنانکه در فصل ۳ دیدیم،  $\phi(p)$  تبدیل فوریهٔ تابع موج فضای  $x$  است و از این رو ممکن است برای آن نقش ممتازی در نظر بگیریم، اما بعداً توضیح دادیم که  $\phi(p)$ ، مثلاً در ۴-۴، "صرفاً" یک ضریب بسط در بسط تابع موج اختیاری  $\psi(x)$  برحسب ویژه‌تابع‌های عملگر تکانه است، و به همین دلیل مجذور قدرمطلق آن احتمال یافتن تکانهٔ  $p$  برای آن حالت را به‌دست می‌دهد. به همین ترتیب، این واقعیت که  $|u_n(x)|^2$  چگالی احتمال یافتن  $x$  برای مکان دستگاه است را می‌توان چنین تعبیر کرد که  $u_n(x)$  ضریب بسط یک حالت مجرد اختیاری برحسب ویژه‌حالت‌های عملگر مکان  $x_{\text{op}}$  است. معادلهٔ ویژه‌مقداری مربوط را به‌صورت زیر می‌نویسیم

$$x_{\text{op}} \phi_x = x \phi_x \quad (31-7)$$

۳. عدد  $n$  معرف پاریته نیز هست. حالت‌هایی که با اعداد زوج  $n$  مشخص می‌شوند پاریتهٔ مثبت و آنهایی که با اعداد فرد مشخص می‌شوند پاریتهٔ منفی دارند. این خاصیت از فرد بودن  $A$  و  $A^\dagger$  تحت انعکاس ناشی می‌شود.

که در آن  $x$  را به‌عنوان شاخص نوشته‌ایم تا تأکید کنیم که  $\phi_x$  ویژه‌حالت مربوط به  $x$  است، درست همان‌گونه که  $u_n$  ویژه‌حالت مربوط به  $n$  است. طیف عملگر هرمیتی  $x_{op}$  پیوسته است، به‌طوری که قضیه بسط، به‌جای اینکه به‌صورت ۲۹-۷ باشد، در واقع به‌صورت زیر است

$$\psi = \int dx C(x)\phi_x \quad (۳۲-۷)$$

چون ویژه‌حالت‌هایی که در ۳۱-۷ آمده‌اند یک مجموعه راست‌هنجار تشکیل می‌دهند، یعنی

$$\langle \phi_x | \phi_{x'} \rangle = \delta(x - x') \quad (۳۳-۷)$$

به‌دست می‌آوریم

$$C(x) = \langle \phi_x | \psi \rangle \quad (۳۴-۷)$$

و این کمیت دامنه احتمال یافتن ذره در  $x$  است — یا به‌عبارت مشخصتر، از اندازه‌گیری مشاهده‌پذیر  $x$  ویژه‌مقدار  $x$  با احتمال  $|C(x)|^2$  به‌دست می‌آید. کافی است نمادنگاری را تغییر دهیم و ۳۲-۷ را به‌صورت

$$\psi = \int dx \psi(x) \phi_x \quad (۳۵-۷)$$

بنویسیم تا نشان دهیم تابع‌موج فضای  $x$  نقش ممتازی ندارد، و استفاده از آن تنها برای آسانی است. اصول اساسی با عملگرها و ویژه‌بردارها و ویژه‌مقدارهای آنها در یک فضای مجرد سروکار دارند، و بقیه چیزها به نمایش مربوط می‌شوند. البته این نمایش در به‌دست آوردن مقادیر عددی، که هدف فیزیک است، اهمیت فوق‌العاده‌ای دارد. به همین دلیل است که بر ساختار صوری نظریه تأکید چندانی نمی‌کنیم، و همچنان از توابع‌موج استفاده خواهیم کرد. بعداً با عملگرهایی سروکار خواهیم داشت که مانسته کلاسیک ندارند، مانند اسپین الکترون و سایر ذرات، و در آنجا آزادی استفاده از نمایشهای دیگر را خواهیم دید.

برای مراجعه آینده بهتر است دامنه به‌دست آمدن مقدار  $x$  در اندازه‌گیری مکان را برای یک ویژه‌حالت تکانه  $u_p$  محاسبه کنیم، یعنی می‌خواهیم  $\psi(x)$  را که با رابطه زیر تعریف می‌شود محاسبه کنیم

$$u_p = \int dx \psi(x)\phi_x \quad (۳۶-۷)$$

بنابه قواعدی که گفتیم، داریم

$$\psi(x) = \langle \phi_x | u_p \rangle \quad (37-7)$$

اما می‌دانیم که دامنه یافتن ذره‌ای با تکانه  $p$  در نقطه  $x$  با تابع موج ذره آزاد زیر داده می‌شود

$$\psi(x) = \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad (38-7)$$

بنابراین، به این نتیجه می‌رسیم که

$$\langle x | p \rangle = \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad (39-7)$$

که در آن برای ساده‌نویسی از تغییر نمادنگاری  $|u_p\rangle \rightarrow |p\rangle, |\phi_x\rangle \rightarrow |x\rangle$  استفاده کرده‌ایم. توجه کنید که

$$\int dp \langle x | p \rangle \langle p | x' \rangle = \delta(x - x') \quad (40-7)$$

و

$$\int dx \langle p | x \rangle \langle x | p' \rangle = \delta(p - p') \quad (41-7)$$

با تعمیم رابطه کاملیت ۴۵-۶،

$$\sum_a |u_a\rangle \langle u_a| = 1 \quad (42-7)$$

به متغیرهای پیوسته، به دست می‌آوریم

$$\int dp |p\rangle \langle p| = 1 \quad (43-7)$$

و

$$\int dx |x\rangle \langle x| = 1 \quad (44-7)$$

بنابراین، رابطه‌های ۴۰-۷ و ۴۱-۷ به ترتیب معادل‌اند با

$$\langle x|x' \rangle = \delta(x - x') \quad (۴۵-۷ \text{ الف})$$

و

$$\langle p|p' \rangle = \delta(p - p') \quad (۴۵-۷ \text{ ب})$$

توجه کنید که ۴۵-۷ الف همان ۳۳-۷ با نمادنگاری ساده است.

چگونه از این ساختار مجرد به معادله شرویدینگر می‌رسیم؟ ابتدا ۲۰-۷ را در نظر بگیرید:

$$A|u_0 \rangle = 0$$

بنابراین، داریم

$$\langle x|A|u_0 \rangle = 0$$

یعنی

$$\left\langle x \left| \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x_{\text{op}} + i \frac{p_{\text{op}}}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \right| u_0 \right\rangle = 0 \quad (۴۶-۷)$$

اکنون از اعمال عملگر  $x$  روی حالت  $|x\rangle$  به دست می‌آوریم

$$x_{\text{op}}|x\rangle = x|x\rangle \quad (۴۷-۷)$$

و در نتیجه

$$\langle x|x_{\text{op}}|u_0 \rangle = x\langle x|u_0 \rangle = xu_0(x) \quad (۴۸-۷)$$



$$\begin{aligned}
 \langle x|p_{op}|u_0\rangle &= \int dp \langle x|p_{op}|p\rangle \langle p|u_0\rangle \\
 &= \int dp p \langle x|p\rangle \langle p|u_0\rangle \\
 &= \int dp p \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \langle p|u_0\rangle \\
 &= \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \int dp \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \langle p|u_0\rangle \\
 &= \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \int dp \langle x|p\rangle \langle p|u_0\rangle \\
 &= \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} u_0(x)
 \end{aligned} \tag{۴۹-۷}$$

بنابراین، رابطه  $A|u_0\rangle = 0$  در فضای  $x$  به صورت معادله دیفرانسیل زیر درمی آید

$$\left( m\omega x + \hbar \frac{d}{dx} \right) u_0(x) = 0 \tag{۵۰-۷}$$

جواب این معادله دیفرانسیل ساده عبارت است از

$$u_0(x) = C e^{-m\omega x^2/2\hbar} \tag{۵۱-۷}$$

ثابت  $C$  از شرط بهنجارش  $u_0(x)$  به  $1$  به دست می آید:

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

یا

$$C = \left( \frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/2} \tag{۵۲-۷}$$

همچنین می‌توان حالت‌های بالاتر انرژی را مستقیماً با استفاده از رابطه زیر به دست آورد

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (A^\dagger)^n u_0(x) \quad (53-7)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left( \frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/2} \left( \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{d}{dx} \right)^n e^{-m\omega x^2/2\hbar}$$

به‌طور کلی، معادله

$$H|u_E\rangle = E|u_E\rangle \quad (54-7)$$

وقتی به صورت

$$\langle x|H|u_E\rangle = E\langle x|u_E\rangle \quad (55-7)$$

نوشته شود به معادله دیفرانسیل زیر برای  $\langle x|u_E\rangle = u_E(x)$  تبدیل می‌شود

$$H u_E(x) = E u_E(x) \quad (56-7)$$

که در آن در  $H$ ،  $x$  به جای  $x_{op}$  و  $(\hbar/i)(d/dx)$  به جای  $p_{op}$  گذاشته می‌شود.

## وابستگی زمانی عملگرها

این فصل را با بررسی تحول زمانی یک دستگاه به روش مستقل از نمایش به پایان می‌رسانیم. معادله شرودینگر وابسته به زمان

$$i\hbar \frac{d\psi(t)}{dt} = H\psi(t) \quad (57-7)$$

در اینجا یک معادله عملگری در یک فضای مجرد است.  $\psi(t)$  یک بردار است، و راستای آن تابع زمان است. این معادله را می‌توان به آسانی حل کرد. جواب آن، اگر  $H$  وابستگی صریح به زمان نداشته باشد، عبارت است از

$$\psi(t) = e^{-iHt/\hbar} \psi(0) \quad (58-7)$$

که در آن  $\psi(0)$  بردار در زمان  $t = 0$  است، و عملگر  $e^{-iHt/\hbar}$  با رابطه زیر تعریف می‌شود

$$e^{-iHt/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-iHt/\hbar)^n}{n!} \quad (59-7)$$

جواب ۵۸-۷ امکان توصیف تغییر زمانی مقدار انتظاری عملگری مانند  $B$  را، که وابستگی صریح به زمان نداشته باشد، فراهم می‌سازد:

$$\begin{aligned} \langle B \rangle_t &= \langle \psi(t) | B \psi(t) \rangle \\ &= \langle e^{-iHt/\hbar} \psi(0) | B e^{-iHt/\hbar} \psi(0) \rangle \\ &= \langle \psi(0) | e^{iHt/\hbar} B e^{-iHt/\hbar} \psi(0) \rangle \\ &= \langle \psi(0) | B(t) \psi(0) \rangle \\ &= \langle B(t) \rangle_0 \end{aligned} \quad (60-7)$$

در اینجا از

$$(e^{-iHt/\hbar})^\dagger = e^{iH^\dagger t/\hbar} = e^{iHt/\hbar} \quad (61-7)$$

و از تعریف زیر استفاده کرده‌ایم

$$B(t) = e^{iHt/\hbar} B e^{-iHt/\hbar} \quad (62-7)$$

بنابه ۶۰-۷، مقدار انتظاری عملگر مستقل از زمان  $B$  را برای حالتی که به صورت ۵۸-۷ با زمان تغییر می‌کند می‌توان به صورت مقدار انتظاری عملگر وابسته به زمان  $B(t)$  (که با ۶۲-۷ داده می‌شود) برای حالت مستقل از زمان  $\psi(0)$  نوشت. این نتیجه در بررسی صوری مکانیک کوانتومی بسیار مفید است، زیرا به آسانی می‌توان یک بار برای همیشه پایه‌ای از ویژه‌بردارهای راست‌همنجار در فضای برداری مجرد ساخت و نگران این نبود که بردارهای پایه چگونه با زمان تغییر می‌کنند. این روش را نمایش هایزنبرگ می‌نامند، در حالی که اگر  $B$  را مستقل از زمان بگیریم در نمایش شرودینگر کار می‌کنیم. از هر نمایشی که استفاده کنیم، نتیجه یکی است: مانند این است که در توصیف چرخش یک جسم نسبت به یک دستگاه مختصات، جسم را بچرخانیم و دستگاه مختصات را ثابت بگیریم یا جسم را ساکن بگیریم و دستگاه مختصات را بچرخانیم. انتخاب به سهولت کار بستگی دارد. اگر با نمایش هایزنبرگ کار کنیم، بردارهای حالت ثابت‌اند، و در بررسی تحول زمانی

دستگاه احتیاجی به استفاده از آنها نداریم. چگونگی تغییر یک مشاهده‌پذیر با زمان از ۶۲-۷ به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}B(t) &= \frac{i}{\hbar}He^{iHt/\hbar}B e^{-iHt/\hbar} - \frac{i}{\hbar}e^{iHt/\hbar}BH e^{-iHt/\hbar} \\ &= \frac{i}{\hbar}HB(t) - \frac{i}{\hbar}B(t)H \\ &= \frac{i}{\hbar}[H, B(t)] \end{aligned} \quad (۶۳-۷)$$

که شباهت زیادی به ۶۹-۶ دارد. معادله ۶۹-۶ برای مقدار انتظاری است، اما چون صورت آن مستقل از حالتی است که در آن مقدار انتظاری محاسبه می‌شود باید حاکی از خواص عملگر باشد، و معادله ۶۳-۷ این را صریحاً نشان می‌دهد. برای نوسانگر هماهنگ داریم

$$H = \hbar\omega A^\dagger A + \frac{1}{2}\hbar\omega$$

و چون  $H$  یک ثابت حرکت است، می‌توانیم بنویسیم

$$H = \hbar\omega A^\dagger(t)A(t) + \frac{1}{2}\hbar\omega \quad (۶۴-۷)$$

همچنین با استفاده از ۶۲-۷ می‌توان نشان داد که

$$[A(t), A^\dagger(t)] = 1 \quad (۶۵-۷)$$

بنابراین، ۷-۷ و ۸-۷ به همان صورت باقی می‌مانند، و به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}A(t) &= -i\omega A(t) \\ \frac{d}{dt}A^\dagger(t) &= i\omega A^\dagger(t) \end{aligned} \quad (۶۶-۷)$$

بدین ترتیب، وابستگی زمانی  $A(t)$  و  $A^\dagger(t)$  از حل ۶۶-۷ به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} A(t) &= e^{-i\omega t}A(0) \\ A^\dagger(t) &= e^{i\omega t}A^\dagger(0) \end{aligned} \quad (۶۷-۷)$$

با استفاده از رابطهٔ ۴-۷ به سادگی می‌توان نشان داد که

$$\begin{aligned} p(t) &= p(\circ) \cos \omega t - m\omega x(\circ) \sin \omega t \\ x(t) &= x(\circ) \cos \omega t + \frac{p(\circ)}{m\omega} \sin \omega t \end{aligned} \quad (۶۸-۷)$$

که عملگرهای  $x(t)$  و  $p(t)$  را برحسب عملگرهای  $x(\circ)$  و  $p(\circ)$  بیان می‌کنند.

## مسائل

۱-۷ با استفاده از رابطهٔ جابه‌جایی ۵-۷ و تعریف حالت  $u_n$  که با ۲۶-۷ داده شده است، ثابت کنید

$$Au_n = \sqrt{n} u_{n-1}$$

[راهنمایی: از روش استقراء استفاده کنید، یعنی نشان دهید اگر این رابطه برای  $n$  برقرار باشد برای  $n+1$  هم برقرار است، و آن را مستقیماً برای  $n=1$  اثبات کنید.]

۲-۷ با استفاده از رابطهٔ قبل نشان دهید اگر  $f(A^\dagger)$  یک چندجمله‌ای برحسب  $A^\dagger$  باشد، آنگاه

$$Af(A^\dagger)u_0 = \frac{df(A^\dagger)}{dA^\dagger}u_0$$

توجه کنید که نمایش  $A$  به صورت

$$A = \frac{d}{dA^\dagger}$$

با رابطهٔ جابه‌جایی ۵-۷ سازگار است و کاملاً شبیه به نمایش زیر است

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$$

۳-۷  $\langle u_n | x | u_m \rangle$  را محاسبه کنید و نشان دهید که بجز برای  $n = m \pm 1$  مقدار آن برابر صفر است.

[راهنمایی: با توجه به  $\langle u_m | A | u_n \rangle^* = \langle u_n | A^\dagger | u_m \rangle$ ، کافی است  $\langle u_n | A | u_m \rangle$  را به دست آورید. از نتایج مسئلهٔ ۱-۷ استفاده کنید.]

۴-۷  $\langle u_n | p | u_m \rangle$  را محاسبه کنید.

۵-۷ با استفاده از نتایج مسئله‌های ۳-۷ و ۴-۷،  $\langle u_m | p x | u_n \rangle$  را با محاسبه

$$\sum_k \langle u_m | p | u_k \rangle \langle u_k | x | u_n \rangle$$

۶-۷  $\langle u_m | x p | u_n \rangle$  را به روش مسئله ۵-۷ محاسبه کنید.

۷-۷ با استفاده از نتایج مسئله‌های ۵-۷ و ۶-۷ نشان دهید

$$\langle u_m | [p, x] | u_n \rangle = \frac{\hbar}{i} \delta_{mn}$$

۸-۷  $\langle u_n | x^2 | u_n \rangle$  و  $\langle u_n | x | u_n \rangle$  را به دست آورید.

۹-۷  $\langle u_n | p^2 | u_n \rangle$  و  $\langle u_n | p | u_n \rangle$  را محاسبه کنید.

۱۰-۷ با استفاده از تعریف متداول

$$(\Delta x)^2 = \langle u_n | x^2 | u_n \rangle - (\langle u_n | x | u_n \rangle)^2$$

$(\Delta x)^2 (\Delta p)^2$  را محاسبه کنید.

۱۱-۷ یک جفت عملگر  $A$  و  $A^\dagger$  را که در رابطه جابه‌جایی زیر صدق می‌کنند در نظر بگیرید

$$[A, A^\dagger] = 1$$

(الف) نشان دهید عملگر  $N = A^\dagger A$  دارای ویژه‌مقدارهای  $n = 0, 1, 2, \dots$  است.

(ب) نشان دهید هامیلتونی نوسانگر هماهنگ را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$H = \hbar\omega \left( N + \frac{1}{2} \right)$$

۱۲-۷ حالت  $|\alpha\rangle$  را که در معادله زیر صدق می‌کند حالت همدوس می‌نامند

$$A|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$$

(الف) نشان دهید حالت  $|\alpha\rangle$  را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$|\alpha\rangle = C e^{\alpha A^\dagger} |0\rangle$$

(ب)  $C$  را با استفاده از نتیجه مسئله ۷-۲ به دست آورید.

(ج) حالت  $|\alpha\rangle$  را برحسب ویژه حالت‌های عملگر شمار  $N$ ،  $|n\rangle$ ، بسط دهید و با استفاده از آن احتمال این را که حالت همدوس حاوی  $n$  کوانتوم باشد به دست آورید. این توزیع را توزیع پواسون می‌نامند.

(د)  $\langle \alpha | N | \alpha \rangle$  را که میانگین تعداد کوانتومها در حالت همدوس است محاسبه کنید.

۷-۱۳ با استفاده از معادله عمومی عملگری حرکت ۷-۶۳، وابستگی زمانی عملگر  $x(t)$  را که در هامیلتونی زیر وارد می‌شود به دست آورید

$$H = \frac{p^2(t)}{2m} + mgx(t)$$

۷-۱۴ هامیلتونی توصیف‌کننده نوسانگر یک‌بعدی در میدان الکتریکی خارجی را در نظر بگیرید:

$$H = \frac{p^2(t)}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2(t) - e\mathcal{E}x(t)$$

معادله حرکت عملگرهای  $p(t)$  و  $x(t)$  را با استفاده از ۷-۶۳ و رابطه جابه‌جایی زیر به دست آورید

$$[p(t), x(t)] = \frac{\hbar}{i}$$

نشان دهید این معادله حرکت درست همان معادله کلاسیک حرکت است.  $x(t)$  و  $p(t)$  را برحسب  $x(0)$  و  $p(0)$  به دست آورید. ثابت کنید

$$[x(t_1), x(t_2)] \neq 0 \quad t_1 \neq t_2$$

این نتیجه نشان می‌دهد که عملگرهایی که در یک زمان جابه‌جا می‌شوند در زمانهای مختلف الزاماً جابه‌جا نمی‌شوند.

۷-۱۵ با استفاده از ۷-۵۳، ویژه‌تابعهای مربوط به  $n$  مساوی با ۱، ۲ و ۳ را محاسبه کنید. (تذکر: ترتیب  $x$  و  $d/dx$  را در بسط دوجمله‌ای رعایت کنید).

۷-۱۶ با استفاده از نتایج مسئله ۷-۲ نشان دهید

$$e^{\lambda A} f(A) u_0 = f(A + \lambda) u_0$$

[راهنمایی: جمله‌نمایی را بسط دهید و از رابطه‌های

$$f(x+a) = \sum \frac{a^n}{n!} f^{(n)}(x)$$

$$f^{(n)}(x) = \frac{d^n}{dx^n} f(x)$$

در حل مسئله استفاده کنید.]

۱۷-۱۷ با استفاده از نتایج مسئله ۷-۱۶، رابطه عملگری زیر را ثابت کنید

$$e^{\lambda A} f(A^\dagger) e^{-\lambda A} = f(A^\dagger + \lambda)$$

توجه کنید که یک رابطه عملگری باید وقتی روی یک حالت اختیاری عمل می‌کند برقرار باشد. یک حالت اختیاری به صورت  $g(A^\dagger)u_0$  در نظر بگیرید. بنابراین، باید نشان دهید

$$e^{\lambda A} f(A^\dagger) e^{-\lambda A} g(A^\dagger) u_0 = f(A^\dagger + \lambda) g(A^\dagger) u_0$$

این رابطه را می‌توان از رابطه کلی زیر نیز به دست آورد

$$e^{\lambda A} A^\dagger e^{-\lambda A} = A^\dagger + \lambda [A, A^\dagger] + \frac{\lambda^2}{2!} [A, [A, A^\dagger]] + \dots$$

۱۸-۱۷ با استفاده از رابطه قبل نشان دهید

$$e^{aA+bA^\dagger} = e^{aA} e^{bA^\dagger} e^{-(1/2)ab}$$

روش اثبات این است که ابتدا فرض می‌کنیم

$$e^{\lambda(aA+bA^\dagger)} \equiv e^{\lambda aA} F(\lambda)$$

نسبت به  $\lambda$  مشتق می‌گیریم:

$$(aA + bA^\dagger) e^{\lambda(aA+bA^\dagger)} = aA e^{\lambda aA} F(\lambda) + e^{\lambda aA} \frac{dF}{d\lambda}$$



یا

$$(aA + bA^\dagger)e^{\lambda aA}F(\lambda) = aA e^{\lambda aA}(F\lambda) + e^{\lambda aA}\frac{dF}{d\lambda}$$

با استفاده از مسئله ۷-۱۷، به دست می‌آوریم

$$\frac{dF}{d\lambda} = (bA^\dagger - \lambda ab)F(\lambda)$$

و در نتیجه

$$F(\lambda) = e^{\lambda bA^\dagger} e^{-(\lambda/2)\lambda^\dagger ab}$$

۱۹-۷ با استفاده از راهکار مسئله ۷-۱۷، نشان دهید

$$e^{\lambda A^\dagger} f(A) e^{-\lambda A^\dagger} = f(A - \lambda)$$

و از این رابطه، با استفاده از روشی که در مسئله ۷-۱۸ گفته شد، ثابت کنید

$$e^{aA+bA^\dagger} = e^{bA^\dagger} e^{aA} e^{(\lambda/2)ab}$$

۲۰-۷ با استفاده از نتیجه بالا نشان دهید

$$e^{ikx} = e^{ik\sqrt{\hbar/2m\omega} A^\dagger} e^{ik\sqrt{\hbar/2m\omega} A} e^{-(\hbar k^2/4m\omega)}$$

با توجه به رابطه

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(A + A^\dagger)$$

را محاسبه کنید.

۲۱-۷ نشان دهید نتیجه مسئله قبل درست همان است که از انتگرال زیر به دست می‌آید

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx u_0^*(x) e^{ikx} u_0(x)$$

## مراجع

مطالب این فصل تقریباً در تمام کتابهایی که در پایان کتاب معرفی شده‌اند یافت می‌شوند. توصیه می‌شود به چندتایی از آنها مراجعه کنید، زیرا مطالعهٔ یک مبحث پایه از دیدگاههای مختلف همواره مفید است.



## دستگاههای $N$ ذره‌ای

بحث مربوط به ذره منفرد را می‌توان به آسانی به دستگاههای  $N$  ذره‌ای تعمیم داد. دستگاه  $N$  ذره‌ای بایک تابع موج  $\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$  توصیف می‌شود، که به صورت زیر بهنجار شده است

$$\int \cdots \int dx_1 dx_2 \cdots dx_N |\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)|^2 = 1 \quad (1-8)$$

تعبیر  $|\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)|^2$  تعمیم تعبیر  $|\psi(x)|^2$  است، یعنی این کمیت چگالی احتمال یافتن ذره ۱ در  $x_1$ ، ذره ۲ در  $x_2$ ، ... و ذره  $N$  در  $x_N$  است. تحول زمانی این تابع موج از حل معادله دیفرانسیل زیر به دست می‌آید

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x_1, \dots, x_N; t) = H \psi(x_1, \dots, x_N; t) \quad (2-8)$$

که در آن هامیلتونی باز هم مطابق صورت کلاسیک

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} + V(x_1, x_2, \dots, x_N) \quad (3-8)$$

به صورت زیر ساخته می‌شود

$$H = -\hbar^2 \left( \frac{1}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \dots + \frac{1}{2m_N} \frac{\partial^2}{\partial x_N^2} \right) + V(x_1, \dots, x_N) \quad (4-8)$$

تمام صورتبندی مکانیک کوانتومی که قبلاً به دست آوریم به آسانی قابل تعمیم است، به شرطی که عملگرهایی که مشاهده‌پذیرهای تک‌ذره‌ای را توصیف می‌کنند وقتی به ذره‌های مختلف مربوط می‌شوند با هم جابه‌جا شوند؛ برای مثال

$$[p_i, x_j] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij} \quad (5-8)$$

اگر میدانهای خارجی، مانند میدان گرانش زمین یا میدانهای الکتریکی و مغناطیسی که از خارج اعمال می‌شوند، وجود نداشته باشند انرژی پتانسیل تنها به فاصله نسبی ذرات بستگی دارد:

$$V = V(x_1 - x_2, x_1 - x_3, \dots, x_{N-1} - x_N), \quad (6-8)$$

همین‌طور هم باید باشد، زیرا در غیاب عامل خارجی که به نحوی یک "مبدأ" تعیین می‌کند، جابه‌جایی کل دستگاه نباید هیچ یک از خواص فیزیکی آن را تغییر دهد. به عبارت دیگر، شکل پتانسیل ۶-۸ پیامد ناوردایی تمام کمیت‌های مهم فیزیکی تحت تبدیل زیر است

$$x_i \rightarrow x_i + a \quad (7-8)$$

یک مورد خاص بسیار مهم از ۶-۸، مورد نیروهای دوجسمی است که برای آن

$$V = \sum_{i>j} V(x_i - x_j) \quad (8-8)$$

جمع روی تمام شاخصهای  $i$  و  $j$ ، با قید  $i > j$  برای اجتناب از دوباره‌شماری و شمارش  $i = j$ ، انجام می‌شود. در واقع در توصیف الکترونها در یک اتم، با پتانسیل کولنی مشترک و همچنین دافعه الکترون-الکترون سروکار خواهیم داشت، و در اینجا هسته یک مبدأ به وجود می‌آورد. پتانسیل در این مورد تعمیم سه‌بعدی کمیت زیر است

$$\sum_{i=1}^N W(x_i) + \sum_{i>j} V(x_i - x_j) \quad (9-8)$$

## پایستگی تکانه کل

در مکانیک کلاسیک، وقتی نیروهای خارجی وجود ندارند تکانه کل پایسته است. این پایستگی از معادله‌های حرکت زیر به دست می‌آید

$$m_i \frac{d^2 x_i}{dt^2} = - \frac{\partial}{\partial x_i} V(x_1 - x_2, x_1 - x_3, \dots, x_{N-1} - x_N) \quad (10-8)$$

که یک پیامد آن عبارت است از

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sum_i m_i \frac{dx_i}{dt} &= - \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} V(x_1 - x_2, \dots, x_{N-1} - x_N) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (11-8)$$

دلیل صفر شدن طرف راست معادله بالا این است که به ازای هر شناسه در  $V$  از اعمال  $\partial/\partial x_i$  جمله‌های مساوی و مخالف به دست می‌آیند. برای مثال، با  $u = x_1 - x_2$  و  $v = x_1 - x_3$  داریم

$$\left( \frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x_2} + \frac{\partial}{\partial x_3} \right) V(u, v, w) = \frac{\partial V}{\partial u} + \frac{\partial V}{\partial v} - \frac{\partial V}{\partial u} + \frac{\partial V}{\partial w} - \frac{\partial V}{\partial v} - \frac{\partial V}{\partial w} = 0$$

بنابراین، کمیت

$$P = \sum_i m_i \frac{dx_i}{dt} \quad (12-8)$$

یک ثابت حرکت است.

در مکانیک کوانتومی نیز همین نتیجه‌گیری صادق است. این مطلب را با استفاده از نوردایی هامیلتونی تحت تبدیل ۷-۸ نشان می‌دهیم. این نوردایی ایجاب می‌کند که هر دو معادله

$$Hu_E(x_1, x_2, \dots, x_N) = Eu_E(x_1, x_2, \dots, x_N) \quad (13-8)$$

و

$$Hu_E(x_1 + a, x_2 + a, \dots, x_N + a) = Eu_E(x_1 + a, x_2 + a, \dots, x_N + a) \quad (14-8)$$

برقرار باشند،  $a$  را بینهایت کوچک می‌گیریم، به طوری که بتوان از جمله‌های  $O(a^2)$  را صرف نظر کرد. بنابراین،

$$\begin{aligned} u(x_1 + a, \dots, x_N + a) &\simeq u(x_1, \dots, x_N) + a \frac{\partial}{\partial x_1} u(x_1, \dots, x_N) \\ &\quad + a \frac{\partial}{\partial x_2} u(x_1, \dots, x_N) + \dots \\ &\simeq u(x_1, \dots, x_N) + a \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} u(x_1, \dots, x_N) \end{aligned}$$

با کم کردن  $13-8$  از  $14-8$  به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} aH \left( \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial x_i} \right) u_E(x_1, \dots, x_N) &= aE \left( \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial x_i} \right) u_E(x_1, \dots, x_N) \\ &= a \left( \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial x_i} \right) E u_E(x_1, \dots, x_N) \quad (15-8) \\ &= a \left( \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial x_i} \right) H u_E(x_1, \dots, x_N) \end{aligned}$$

اکنون اگر تعریف کنیم

$$P = \frac{\hbar}{i} \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial x_i} \equiv \sum_{i=1}^N p_i \quad (16-8)$$

به طوری که  $P$  عملگر تکانه کل است، می‌بینیم که نشان داده‌ایم

$$(HP - PH)u_E(x_1, \dots, x_N) = 0 \quad (17-8)$$

چون ویژه‌حالت‌های انرژی برای دستگاه  $N$  ذره‌ای یک مجموعه کامل تشکیل می‌دهند، به این معنی که هر تابعی از  $x_1, x_2, \dots, x_N$  را می‌توان برحسب تمام  $u_E(x_1, \dots, x_N)$  ها بسط داد، معادله بالا نشان می‌دهد که به‌ازای هر تابع اختیاری  $\psi(x_1, \dots, x_N)$  می‌توان نوشت

$$[H, P]\psi(x_1, \dots, x_N) = 0 \quad (18-8)$$

بنابراین،

$$[H, P] = 0 \quad (۱۹-۸)$$

اما این رابطه عملگری نشان می‌دهد که تکانه کل  $P$  مربوط به دستگاہ  $N$  ذره‌ای یک ثابت حرکت است. این یک پیامد بسیار مهم حکمی دربارهٔ ماهیت فضا است. این حکم که مبدایی وجود ندارد، یعنی قوانین فیزیک تحت یک جابه‌جایی ثابت ناوردا هستند، به یک قانون پایستگی منجر می‌شود. در مکانیک کوانتومی نسبییتی هیچ پتانسیلی به‌صورتی که در اینجا در نظر می‌گیریم وجود ندارد؛ با این همه، این اصل ناوردایی باز هم به پایستگی تکانه کل منجر می‌شود.

## دستگاہ دو ذره‌ای

ما بیشتر با دستگاہ دودره‌ای سروکار داریم که اکنون به بررسی آن می‌پردازیم. برای دو ذره بدون برهم‌کنش، هامیلتونی به‌صورت ساده زیر است

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} \quad (۲۰-۸)$$

چون این دو ذره کاملاً ناهمبسته‌اند، می‌توان احتمال یافتن یک ذره در  $x_1$  و دیگری در  $x_2$  را به‌صورت حاصلضرب دو احتمال مستقل نوشت:

$$P(x_1, x_2) = P(x_1)P(x_2) \quad (۲۱-۸)$$

بنابراین، جواب معادله

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) u(x_1, x_2) = Eu(x_1, x_2) \quad (۲۲-۸)$$

باید به‌صورت زیر قابل جداسازی باشد

$$u(x_1, x_2) = \phi_1(x_1)\phi_2(x_2) \quad (۲۳-۸)$$

با جاگذاری این جواب در ۲۲-۸ و تقسیم بر  $u(x_1, x_2)$  به‌دست می‌آوریم

$$\frac{-(\hbar^2/2m_1)(d^2\phi_1(x_1)/dx_1^2)}{\phi_1(x_1)} + \frac{-(\hbar^2/2m_2)(d^2\phi_2(x_2)/dx_2^2)}{\phi_2(x_2)} = E \quad (۲۴-۸)$$

دو جمله این معادله به متغیرهای مختلفی بستگی دارند، و به این دلیل آنها را به ترتیب مساوی با ثابتهای  $E_1$  و  $E_2$  قرار می‌دهیم:

$$E = E_1 + E_2$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2 \phi_1(x_1)}{dx_1^2} = E_1 \phi_1(x_1) \quad (25-8)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{d^2 \phi_2(x_2)}{dx_2^2} = E_2 \phi_2(x_2)$$

این دو معادله به سادگی حل می‌شوند، و در نتیجه به دست می‌آوریم

$$u(x_1, x_2) = C e^{ik_1 x_1 + ik_2 x_2} \quad (26-8)$$

که در آن

$$k_1^2 = \frac{2m_1 E_1}{\hbar^2} \quad k_2^2 = \frac{2m_2 E_2}{\hbar^2} \quad (27-8)$$

اکنون می‌خواهیم این جواب را بر حسب مختصات زیر بیان کنیم

$$x = x_1 - x_2 \quad (28-8)$$

$$X = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2}$$

که به ترتیب عبارت‌اند از فاصله میان دو ذره و مختصه مرکز جرم. می‌نویسیم

$$k_1 x_1 + k_2 x_2 = \alpha(x_1 - x_2) + \beta \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2}$$

و از آن، با توجه به مستقل بودن  $x_1$  و  $x_2$ ، به دست می‌آوریم

$$\beta = k_1 + k_2 \equiv K$$

$$\alpha = \frac{m_2 k_1 - m_1 k_2}{m_1 + m_2} \equiv k$$

بنابراین، جواب ۲۶-۸ به صورت زیر درمی‌آید

$$u(x_1, x_2) = C e^{iKX} e^{ikx} \quad (29-8)$$



که در آن  $K = k_1 + k_2$  عدد موج مربوط به تکانه کل و  $k$  عدد موج مربوط به تکانه نسبی است. در ۸-۲۹، عامل اول حرکت مرکز جرم را نشان می‌دهد و عامل دوم تابع موج "داخلی" است. انرژی را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2(m_1 + m_2)} + \frac{\hbar^2 k^2}{2} \left( \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \quad (۳۰-۸)$$

که در آن جمله اول انرژی یک دستگاه دودره‌ای به جرم  $m_1 + m_2$  است که آزادانه با تکانه کل حرکت می‌کند؛ جمله دوم انرژی داخلی است. اگر جرم کاهیده  $\mu$  را با رابطه زیر تعریف کنیم

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \quad (۳۱-۸)$$

آنگاه انرژی داخلی به صورت  $\hbar^2 k^2 / 2\pi$  درمی‌آید که عملاً یک انرژی تک‌ذره‌ای است، یعنی انرژی یک ذره آزاد به جرم  $\mu$  و تکانه  $\hbar k$  است.

اگر به هامیلتونی ۸-۲۰ پتانسیلی که تنها به  $x_1 - x_2$  بستگی دارد افزوده شود، خواهیم داشت

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) u(x_1, x_2) + V(x_1 - x_2)u(x_1, x_2) = Eu(x_1, x_2) \quad (۳۲-۸)$$

از روابط ۸-۲۸ داریم

$$\begin{aligned} x_1 &= X + \frac{\mu}{m_1} x \\ x_2 &= X - \frac{\mu}{m_2} x \end{aligned} \quad (۳۳-۸)$$

با استفاده از این مختصات و با اندکی محاسبه، معادله ۸-۳۲ به صورت زیر درمی‌آید

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) u(x, X) = Eu(x, X) \quad (۳۴-۸)$$

اگر بنویسیم

$$u(x, X) = e^{iKX} \phi(x) \quad (۳۵-۸)$$

نتیجه می‌گیریم که معادلهٔ مربوط به  $\phi(x)$  به صورت زیر است

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + V(x)\phi(x) = \epsilon\phi(x) \quad (۳۶-۸)$$

که یک معادلهٔ شرودینگر تک‌ذره‌ای با جرم کاهیده است، و در آن انرژی  $\epsilon$  عبارت است از

$$\epsilon = E - \frac{\hbar^2 K^2}{2(m_1 + m_2)} \quad (۳۷-۸)$$

در فصل ۹ این جداسازی را از راه نسبتاً پیچیده‌تری به دست خواهیم آورد.

## ذرات یکسان

شواهد قانع‌کننده‌ای وجود دارند که نشان می‌دهند الکترون‌ها تمایزناپذیرند. اگر الکترون‌ها تمایزپذیر بودند طیف یک اتم، مثلاً هلیوم، می‌بایست از یک آزمایش به آزمایش دیگر، بسته به اینکه ”چه نوع“ الکترونی‌هایی در اتم وجود می‌داشتند، تغییر می‌کرد. چنین تغییری هرگز مشاهده نشده است. به همین ترتیب، طیفهای هسته‌ای نیز همیشه یکسان هستند، که نشان می‌دهد پروتون‌ها و همچنین نوترون‌ها تمایزناپذیرند. شواهد مشابهی از آزمایشهای فیزیک انرژی زیاد قاطعانه نشان می‌دهند که سایر ذره‌ها، مثلاً مزونهای پی، نیز تمایزناپذیر هستند. این یک ویژگی صرفاً کوانتوم-مکانیکی است: در مکانیک کلاسیک می‌توان (اصولاً) مسیر همهٔ ذرات را دنبال کرد، و در نتیجه آنها واقعاً تمایزپذیر هستند.

بعداً خواهیم دید که الکترون‌ها با یک عدد کوانتومی درونی که اسپین نامیده می‌شود مشخص می‌شوند. بنابراین، مجموعهٔ کامل اعداد کوانتومی برای توصیف الکترون باید شامل نشان اسپینی هم باشد، که آن را با  $\sigma$  مشخص می‌کنیم. در آینده (از فصل ۱۴ به بعد) خواهیم دید که این نشان اسپینی  $\sigma$  دومقداری است، یعنی دو الکترون را که از هر لحاظ (غیر از اسپین) یکسان هستند می‌توان از روی مقدار  $\sigma$  آنها از هم تمیز داد. یک الکترون سوم، با همان اعداد کوانتومی دو الکترون دیگر، باید یک نشان اسپینی داشته باشد که مقدار آن با مقدار نشان اسپینی یکی از دو الکترون اول مساوی است، زیرا  $\sigma$  تنها می‌تواند دو مقدار داشته باشد که آنها را معمولاً با  $(\pm)$  نشان خواهیم داد. وجود نشان اسپینی تأثیر دیگری بر پیامدهای تمایزناپذیری دارد که اکنون دربارهٔ آن بحث می‌کنیم.

هامیلتونی ذرات تمایزناپذیر باید نسبت به مختصات ذرات کاملاً متقارن باشد. برای دستگاه دوزره‌ای، اگر پتانسیل به نشان اسپینی ذرات بستگی نداشته باشد، هامیلتونی به صورت زیر است

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + V(x_1, x_2) \quad (۳۸-۸)$$

که در آن

$$V(x_1, x_2) = V(x_2, x_1) \quad (39-8)$$

این تقارن را به صورت نمادین زیر می‌نویسیم

$$H(1, 2) = H(2, 1) \quad (40-8)$$

و اگر هامیلتونی شامل عملگرهایی مربوط به اسپینهای دوزره باشد، باید آن را نیز در نشانگذاری "۱" و "۲" وارد کرد.

تابع موج دستگاہ  $N$  ذره‌ای که، به عنوان مثال، با انرژی کل نشاندار شده است اکنون باید با نشانهای اسپینی  $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N$  نیز نشاندار شود. بنابراین، برای یک دستگاہ دوزره‌ای، معادله ویژه‌مقداری عبارت است از

$$H(1, 2)u_{E\sigma_1\sigma_2}(1, 2) = Eu_{E\sigma_1\sigma_2}(1, 2) \quad (41-8)$$

چون جای نشانها اهمیتی ندارد، می‌توان با تعویض نشانهای "۱" و "۲" معادله ۴۱-۸ را به صورت زیر نوشت

$$H(2, 1)u_{E\sigma_2\sigma_1}(2, 1) = Eu_{E\sigma_2\sigma_1}(2, 1) \quad (42-8)$$

از طرف دیگر، با توجه به ۴۰-۸ داریم

$$H(1, 2)u_{E\sigma_2\sigma_1}(2, 1) = Eu_{E\sigma_2\sigma_1}(2, 1) \quad (43-8)$$

اکنون از رهیافت صوری بحث پاریته استفاده می‌کنیم. با معرفی عملگر تبادل  $P_{12}$  که وقتی روی یک حالت عمل کند دو ذره یکسان را که با ۱ و ۲ نشاندار شده‌اند تعویض می‌کند:

$$P_{12}u_{E\sigma_1\sigma_2}(1, 2) = u_{E\sigma_2\sigma_1}(2, 1) \quad (44-8)$$

معادله ۴۳-۸ را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} H(1, 2)P_{12}u_{E\sigma_1\sigma_2}(1, 2) &= Eu_{E\sigma_1\sigma_2}(2, 1) \\ &= EP_{12}u_{E\sigma_1\sigma_2}(1, 2) \\ &= P_{12}Eu_{E\sigma_1\sigma_2}(1, 2) \\ &= P_{12}H(1, 2)u_{E\sigma_1\sigma_2}(1, 2) \end{aligned} \quad (45-8)$$

چون این نتیجه برای مجموعه کامل ویژه‌تابعهای همزمان  $H$  و عملگرهای اسپین  $u_{E\sigma_1\sigma_2}(1, 2)$  برقرار است، رابطه عملگری زیر را به دست می‌آوریم

$$[H, P_{12}] = 0 \quad (46-8)$$

بنابراین،  $P_{12}$  نیز مانند پاریته یک ثابت حرکت است. علاوه بر این، چون با دو تبادل متوالی  $1 \rightarrow 2$  و  $2 \rightarrow 1$  به حالت اول برمی‌گردیم، داریم

$$(P_{12})^2 = 1 \quad (47-8)$$

که نشان می‌دهد ویژه‌مقدارهای  $P_{12}$  عبارت‌اند از  $\pm 1$ . درست همان‌طور که توابع زوج و فرد ویژه‌تابعهای عملگر پاریته هستند، ویژه‌تابعهای عملگر تبادل حالت‌های متقارن و پادمقارن زیر هستند

$$\begin{aligned} \psi^{(S)}(1, 2) &= \frac{1}{N_{rS}} [\psi(1, 2) + \psi(2, 1)] \\ \psi^{(A)}(1, 2) &= \frac{1}{N_{rA}} [\psi(1, 2) - \psi(2, 1)] \end{aligned} \quad (48-8)$$

که در آنها  $N_r$ ها ثابت‌های بهنجارش‌اند. این واقعیت که  $P_{12}$  یک ثابت حرکت است ایجاب می‌کند که حالتی که در یک زمان اولیه متقارن است همواره متقارن بماند و یک حالت پادمقارن همیشه پادمقارن باشد.

## اصل پاؤلی

تقارن یا پادتقارن تحت تعویض دو ذره یک مشخصه ذرات است و چیزی نیست که بتوان آن را در آماده‌سازی حالت اولیه تدارک دید. بنابه این قانون مهم طبیعت، که پاؤلی آن را کشف کرد،

۱. دستگاههای متشکل از ذرات یکسان با اسپین نیم فرد (یعنی  $1/2, 3/5, 5/2, \dots$ ) با توابع موج پادمقارن توصیف می‌شوند. این نوع ذرات را فرمیون می‌نامند. فرمیونها از آمار فرمی-دیراک پیروی می‌کنند.

۲. دستگاههای متشکل از ذرات یکسان با اسپین درست (یعنی  $0, 1, 2, \dots$ ) با توابع موج پادمقارن توصیف می‌شوند. این ذرات بوزون نامیده می‌شوند و از آمار بوز-اینشتین پیروی می‌کنند. ما بیشتر با الکترونها، پروتونها و نوترونها که اسپین  $1/2$  دارند و با بوزونهای اسپین  $0$ ، که بدون نشان اسپینی هستند، سروکار داریم.

قانون بالا به حالت‌های  $N$  ذره‌ای گسترش می‌یابد. برای دستگاهی متشکل از  $N$  فرمیون یکسان، تابع موج تحت تعویض هر جفت ذره پادمقارن است. برای مثال، یک تابع موج سه ذره‌ای، که درست پادمقارن شده است، به صورت زیر است

$$\begin{aligned} \psi^{(A)}(1, 2, 3) = \frac{1}{N_{ra}} & [\psi(1, 2, 3) - \psi(2, 1, 3) + \psi(2, 3, 1) \\ & - \psi(3, 2, 1) + \psi(3, 1, 2) - \psi(1, 3, 2)] \end{aligned} \quad (49-8)$$

در حالی که تابع موج سه بوزون یکسان عبارت است از

$$\begin{aligned} \psi^{(S)}(1, 2, 3) = \frac{1}{N_{rs}} & [\psi(1, 2, 3) + \psi(2, 1, 3) + \psi(2, 3, 1) \\ & + \psi(3, 2, 1) + \psi(3, 1, 2) + \psi(1, 3, 2)] \end{aligned} \quad (50-8)$$

باید تأکید کنیم که برای بیشتر از دو ذره یکسان اصولاً می‌توان مقارن آمیخته داشت: به عنوان مثال، تابع موج تحت تبدلهای  $(1, 2)$  و  $(1, 3)$  پادمقارن اما تحت تبادل  $(2, 3)$  مقارن است. اما اصل باؤلی این حالت‌های مقارن آمیخته را رد می‌کند.

$N$  فرمیون در یک چاه پتانسیل

اکنون یک مورد خاص بسیار جالب توجه را بررسی می‌کنیم که در آن  $N$  فرمیون با یکدیگر برهم‌کنش ندارند اما با یک پتانسیل مشترک برهم‌کنش می‌کنند. در این مورد داریم

$$H = \sum_{i=1}^N H_i \quad (51-8)$$

که در آن

$$H_i = \frac{p_i^2}{2m} + V(x_i) \quad (52-8)$$

ویژه‌حالت‌های هامیلتونی تک‌ذره‌ای را با  $u_{E\sigma_k}(x_k)$  نشان می‌دهیم:

$$H_k u_{E\sigma_k}(x_k) = E_k u_{E\sigma_k}(x_k) \quad (53-8)$$

واضح است که به‌ازای هر مقدار  $E_k$  دو مقدار ممکن برای نشان اسپینی  $\sigma_k$  داریم. جواب معادله

$$H u_E(1, 2, \dots, N) = E u_E(1, 2, \dots, N) \quad (54-8)$$

عبارت است از

$$u_E(1, 2, 3, \dots, N) = u_{E_1\sigma_1}(x_1) u_{E_2\sigma_2}(x_2), \dots, u_{E_N\sigma_N}(x_N) \quad (55-8)$$

که با حذف نشانهای  $\sigma_i$  که با  $E_i$  همراه هستند، آن‌را به‌صورت زیر می‌نویسیم

$$u_E(1, 2, 3, \dots, N) = u_{E_1}(x_1) u_{E_2}(x_2), \dots, u_{E_N}(x_N) \quad (56-8)$$

همچنین داریم

$$E = E_1 + E_2 + \dots + E_N \quad (57-8)$$

اکنون باید تابع موج ۵۶-۸ را پادمتقارن کنیم. اگر تنها دو ذره داشته باشیم، بدیهی است که

$$u^{(A)}(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [u_{E_1}(x_1) u_{E_2}(x_2) - u_{E_1}(x_2) u_{E_2}(x_1)] \quad (58-8)$$

با سه ذره، تابع موج پادمتقارن شده به‌صورت زیر است

$$\begin{aligned} u^{(A)}(1, 2, 3) = & \frac{1}{\sqrt{6}} [u_{E_1}(x_1) u_{E_2}(x_2) u_{E_3}(x_3) - u_{E_1}(x_2) u_{E_2}(x_1) u_{E_3}(x_3) \\ & + u_{E_1}(x_2) u_{E_2}(x_3) u_{E_3}(x_1) - u_{E_1}(x_3) u_{E_2}(x_2) u_{E_3}(x_1) \\ & + u_{E_1}(x_3) u_{E_2}(x_1) u_{E_3}(x_2) - u_{E_1}(x_1) u_{E_2}(x_3) u_{E_3}(x_2)] \end{aligned} \quad (59-8)$$

برای  $N$  ذره، جواب را می‌توان در قالب یک دترمینان، که دترمینان اسلیتر نامیده می‌شود، نوشت:

$$u^{(A)}(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} u_{E_1}(x_1) & u_{E_1}(x_2) & \cdots & u_{E_1}(x_N) \\ u_{E_2}(x_1) & u_{E_2}(x_2) & \cdots & u_{E_2}(x_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{E_N}(x_1) & u_{E_N}(x_2) & \cdots & u_{E_N}(x_N) \end{vmatrix} \quad (۶۰-۸)$$

توجه کنید که در سه معادله بالا نشان  $\sigma_k$  را که با  $E_k$  همراه است حذف کرده‌ایم. بدیهی است که تعویض دو ذره به معنای تعویض دو ستون در این دترمینان است و این به نوبه خود باعث تغییر علامت دترمینان می‌شود. اگر دو الکترون در ویژه‌حالت انرژی یکسانی باشند، به‌عنوان مثال  $E_1 = E_2$ ، و اگر در یک حالت اسپینی باشند، یعنی  $\sigma_1 = \sigma_2$ ، آنگاه دترمینان به‌ازای  $x_1 = x_2$  صفر می‌شود، یعنی این دو الکترون نمی‌توانند در یک مکان باشند. بدین ترتیب، شرط پادتقارن عامل ایجاد یک برهم‌کنش مؤثر بین دو فرمیون است: می‌بینیم که دو ذره از این نوع می‌خواهند از یکدیگر دور بمانند، زیرا وقتی فاصله بین آنها به صفر میل می‌کند تابع موج مشترک صفر می‌شود. بنابراین، حتی ذرات بدون برهم‌کنش به‌گونه‌ای رفتار می‌کنند که انگار یک برهم‌کنش دافعه میان آنها وجود دارد. خواهیم دید که مجموعه کامل مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده برای الکترون‌ها شامل یک مشاهده‌پذیر اضافی دومقداری وابسته به اسپین نیز هست. پس حالتی که در آن انرژی، تکانه زاویه‌ای پاریته، و غیره معین هستند حداکثر با دو الکترون (با متغیر اسپینی مخالف) اشغال می‌شود. این مورد خاصی از اصل طرد پاولی است.

## کی پادمتقارن‌سازی لازم است؟

این حکم که "دو الکترون نمی‌توانند در یک حالت کوانتومی باشند" ایجاب می‌کند که تابع موج دستگاه دو الکترونی نسبت به مختصات این دو الکترون پادمتقارن باشد. این سؤال پیش می‌آید که وقتی یک اتم هیدروژن را روی زمین و یک اتم هیدروژن دیگر را در ماه بررسی می‌کنیم باید نگران این موضوع باشیم؟ اگر این دو اتم در حالت پایه باشند آیا الزاماً باید حالت‌های اسپینی مخالف داشته باشند؟ اگر یک اتم هیدروژن سوم در حالت پایه را در نظر بگیریم چه پیش می‌آید؟ درک شهودی به ما می‌گوید که نگرانی بی‌مورد است، و اشتباه نمی‌کند. برای مشاهده درستی این نتیجه‌گیری، تفاوت میان استفاده از تابع موج کاملاً ناهمبسته دو الکترون

$$\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) \quad (۶۱-۸)$$

۱. برای  $N$  بوزون یکسان، تابع موج کاملاً متقارن است، و صورت کلی را می‌توان با بسط دترمینان ۶۰-۸ و تغییر تمام علامتهای منفی به مثبت به دست آورد.

و تابع موج پادمتقارن شده

$$\frac{1}{N}(\psi_a(x_1) \psi_b(x_2) - \psi_a(x_2) \psi_b(x_1)) \quad (۶۲-۸)$$

را بررسی می‌کنیم. ضریب بهنجارش  $N$  از شرط زیر تعیین می‌شود

$$\frac{1}{N^2} \int dx_1 \int dx_2 |\psi_2(x_1)\psi_b(x_2) - \psi_a(x_2)\psi_b(x_1)|^2 = 1 \quad (۶۳-۸)$$

که با

$$\int dx |\psi_a(x)|^2 = \int dx |\psi_b(x)|^2 = 1 \quad (۶۴-۸)$$

به صورت زیر درمی‌آید

$$\begin{aligned} N^2 &= 2 \left( 1 + \left| \int dx \psi_a^*(x)\psi_b(x) \right|^2 \right) \\ &\equiv 2(1 + |S_{ab}|^2) \end{aligned} \quad (۶۵-۸)$$

فرض کنید بخواهیم احتمال یافتن الکترون  $a$  را در یک ناحیه فضایی  $R$  محاسبه کنیم. برای تابع موج ناهمبسته ۶۱-۸ که آن را با  $\Psi(x, y) = \psi_a(x)\psi_b(y)$  نشان می‌دهیم، چگالی احتمال از رابطه زیر به دست می‌آید

$$P(R) = \int_R dx \int dy |\psi_a(x)|^2 |\psi_b(y)|^2 = \int_R dx |\psi_a(x)|^2 \quad (۶۶-۸)$$

روی تمام گستره مختصات الکترون  $b$  انتگرال گرفته‌ایم زیرا جای آن برای ما مهم نیست. برای تابع موج پادمتقارن داریم

$$|\Psi(x, y)|^2 = \frac{1}{N^2} [\psi_a^*(x)\psi_b^*(y) - \psi_b^*(x)\psi_a^*(y)][\psi_a(x)\psi_b(y) - \psi_b(x)\psi_a(y)]$$

که باید از آن روی متغیرهای وابسته به الکترون  $a$  در ناحیه  $R$  و روی گستره کامل مختصات مربوط



به الکترون  $b$  انتگرال بگیریم. به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}
 P_a(R) &= \frac{1}{N^2} \int_R dx |\psi_a(x)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dy |\psi_b(y)|^2 \\
 &+ \frac{1}{N^2} \int_R dy |\psi_a(y)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_b(x)|^2 \\
 &- \frac{1}{N^2} \int_R dx \int_R dy [\psi_a^*(x)\psi_b(x)\psi_b^*(y)\psi_a(y) \\
 &+ \psi_b^*(x)\psi_a(x)\psi_a^*(y)\psi_b(y)] \\
 &= \frac{2}{N^2} \int_R dx |\psi_a(x)|^2 - \frac{2}{N^2} \int_R dx \int_R dy \psi_a^*(x)\psi_b(x)\psi_b^*(y)\psi_a(y)
 \end{aligned} \tag{۶۷-۸}$$

در جمله تداخلی هر دو انتگرال روی ناحیه  $R$  گرفته می‌شوند، زیرا در هر دو انتگرال تابع موجی با شاخص  $a$  وجود دارد. تفاوت میان دو چگالی احتمال وقتی حائز اهمیت می‌شود که انتگرال همپوشی  $\int_R dx \psi_a^*(x)\psi_b(x)$  در ناحیه  $R$  برای متغیر  $x$  قابل ملاحظه باشد. چون توابع موج برای حالت‌های مقید به‌طور نمایی کاهش می‌یابند، واضح است که این انتگرال وقتی مهم است که آنها به یکدیگر بسیار نزدیک باشند.

برای مثال، یک دستگاه دو الکترونی را در نظر بگیرید که دو الکترون آن با دو بسته موج گاوسی، یکی حول مبدأ و دیگری حول  $x = L$ ، نمایش داده می‌شوند. در محاسبه احتمال یافتن یک الکترون در یک ناحیه  $R$  انتگرال همپوشی  $Ce^{-\beta x}$  و  $Ce^{-\beta(x-L)}$  به صورت زیر وارد می‌شود

$$C^2 \int_R dx e^{-\beta(x^2 + (x-L)^2)}$$

که به سادگی می‌توان دید که متناسب با  $e^{-\beta L^2}/2$  است. بنابراین، اگر  $L$  بزرگ باشد انتگرال همپوشی به سرعت صفر می‌شود، و این درک شهودی که لازم نیست تابع موج الکترون مورد نظر با همه یا با هر یک از الکترونهای دور پادمتقارن باشد درست از آب درمی‌آید

اصل طرد پاؤلی را باید در آنها و مولکولها به حساب آورد نه در وضعیتهایی که فاصله آنها از یکدیگر بسیار زیاد است. حتی در شبکه‌های بلوری، که در آنها فاصله بین آنها چند آنگستروم است، همپوشی اغلب کوچک است، و پادمتقارن‌سازی ضرورت ندارد.

انرژی حالت پایه برای ذرات آزاد در یک جعبه

یک پیامد جالب اصل طرد پاؤلی این است که حالت پایه برای  $N$  الکترون در یک پتانسیل تفاوت بسیاری با حالت پایه برای  $N$  بوزون یا  $N$  ذره تمایزپذیر دارد. به عنوان مثال، جعبه پتانسیل نامتناهی

زیر را در نظر بگیرید

$$\begin{aligned}
 V(x) &= \infty & x < 0 \\
 &= 0 & 0 < x < b \\
 &= \infty & b < x
 \end{aligned}
 \tag{۶۸-۸}$$

جواب معادلهٔ شرودینگر که در  $x = 0$  و  $x = L$  صفر می‌شود به صورت زیر است

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{b}} \sin \frac{n\pi x}{b}
 \tag{۶۹-۸}$$

که در آن  $n = 1, 2, 3, \dots$ . ویژه‌مقدارهای انرژی عبارت‌اند از

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mb^2}
 \tag{۷۰-۸}$$

برای  $N$  بوزون بدون برهم‌کنش، حالت پایه شامل تمام ذرات در حالت  $n = 1$  است، و در نتیجه انرژی با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$E = N \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mb^2}
 \tag{۷۱-۸}$$

و انرژی به‌ازای هر ذره عبارت است از

$$\frac{E}{N} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mb^2}
 \tag{۷۲-۸}$$

برای  $N$  فرمیون بدون برهم‌کنش وضعیت کاملاً متفاوت است. در هر یک از حالت‌های  $n = 1, 2, 3, \dots$  تنها دو الکترون می‌توانند وجود داشته باشند، و در نتیجه تعداد حالت‌های اشغال شده  $N/2$  است. بنابراین، انرژی کل برابر است با

$$E = 2 \sum_{n=1}^{N/2} \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mb^2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{mb^2} \frac{N^2}{24}
 \tag{۷۳-۸}$$

در محاسبهٔ نتیجهٔ بالا،  $N$  را بزرگ گرفته‌ایم، و از این‌رو مهم نیست که آخرین تراز با یک الکترون اشغال شده است یا با دو الکترون، و از تقریب زیر استفاده کرده‌ایم

$$\sum_{n=1}^{N/2} n^2 \approx \int_1^{N/2} n^2 dx \simeq \frac{1}{3} \left( \frac{N}{2} \right)^3$$

بنابراین، انرژی به‌ازای هر ذره عبارت است از

$$\frac{E}{N} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{24mb^2} N^2 \quad (۷۴-۸)$$

که با  $N^2$  افزایش می‌یابد. به عبارت دیگر، به‌ازای یک انرژی معین، تعداد بوزونهایی که چاه را اشغال می‌کنند متناسب با  $E$  است، در حالی که تعداد فرمیونهای اشغال‌کننده چاه با  $E^{1/2}$  متناسب است. بالاترین ترازی که فرمیونها اشغال می‌کنند ترازی است که برای آن  $n = N/2$ ، و انرژی آن برابر است با

$$E_F = \frac{\hbar^2 \pi^2 N^2}{\lambda mb^2} \quad (۷۵-۸)$$

شاخص پایین  $F$  را به این دلیل نوشته‌ایم که این انرژی را انرژی فرمی می‌نامند. انرژی فرمی را می‌توان برحسب چگالی فرمیونها، که در این مسئله یک‌بعدی برابر است با  $N/b = \rho$ ، نوشت:

$$E_F = \frac{\hbar^2 \pi^2}{\lambda m} \rho^2 \quad (۷۶-۸)$$

اهمیت این مطالب را در فصل ۹ خواهیم دید. اصل طرد نقش فوق‌العاده مهمی در ساختار اتمها دارد. تنوع بسیار زیاد خواص شیمیایی عناصر مختلف مستقیماً ناشی از این واقعیت است که تعداد محدودی الکترون می‌توانند یک ویژه‌حالت انرژی معین را اشغال کنند. در این باره در فصل ۱۹ بحث خواهیم کرد.

## مسائل

۱-۸ جرم کاهیده یک دستگاه الکترون-پروتون را به‌دست آورید و آن را با جرم کاهیده دستگاه الکترون-دوترون مقایسه کنید. جرم کاهیده دستگاهی متشکل از دو ذره یکسان را تعیین کنید.

۲-۸ ثابت کنید عملگر تبادل  $P_{12}$  هرمیتی است.

۳-۸ دو الکترون بدون برهم‌کنش را در یک چاه پتانسیل نامتناهی در نظر بگیرید. اگر این دو الکترون در حالت اسپینی یکسان باشند تابع موج حالت پایه را به‌دست آورید.

۴-۸ دو الکترون در یک حالت اسپینی یکسان را در نظر بگیرید که با پتانسیل زیر برهم‌کنش دارند

$$V(|x_1 - x_2|) = -V_0 \quad |x_1 - x_2| \leq a$$

$$= 0 \quad \text{هر جای دیگر}$$

کمترین انرژی این حالت دو الکترونی را با فرض اینکه تکانه کل این الکترونها صفر است به دست آورید

[راهنمایی: معادله را به روشی که به ۸-۳۷ از آن حاصل شد جدا کنید و سپس اصل پاؤلی را به کار ببرید.]

۸-۵ دو ذره یکسان را که با عملگر انرژی زیر توصیف می شوند در نظر بگیرید

$$H = H(p_1, x_1) + H(p_2, x_2)$$

که در آن

$$H(p, x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

حرکت مرکز جرم را جدا کنید، و طیف انرژی این دستگاه را به دست آورید. نشان دهید این طیف با طیفی که از حل

$$H\psi(x_1, x_2) = E\psi(x_1, x_2)$$

با

$$\psi(x_1, x_2) = u_1(x_1)u_2(x_2)$$

به دست می آید توافق دارد. درباره واگنی طیف انرژی بحث کنید.  
۸-۶ دو الکترون را که با هامیلتونی زیر توصیف می شوند در نظر بگیرید

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + V(x_1) + V(x_2)$$

که در آن به ازای  $x < 0$  و  $x > a$  داریم  $V(x) = \infty$ ، و در بازه  $0 < x < a$  داریم  $V(x) = 0$ . فرض کنید الکترونها در حالت اسپینی یکسانی باشند، یعنی  $\sigma_1 = \sigma_2$ .

(الف) کمترین انرژی این حالت دو الکترونی را تعیین کنید.

(ب) ویژه تابع انرژی را برای این حالت پایه به دست آورید.

(ج) انرژی و تابع موج اولین حالت برانگیخته را، باز هم با فرض  $\sigma_1 = \sigma_2$ ، به دست آورید.

۸-۷ یک دستگاه دو الکترونی را در نظر بگیرید که برای آن  $\sigma_1 = \sigma_2$ ، و از این رو لازم نیست اسپین را در نظر بگیریم. فرض کنید الکترونها به صورت بسته های موج گاؤسی حول  $x = a$

و  $x = -a$  هستند، یعنی توابع موج آنها به ترتیب عبارت‌اند از  $(\sqrt{\pi}/\mu)e^{-\mu^2(x-a)^2/2}$  و  $(\sqrt{\pi}/\mu)e^{-\mu^2(x+a)^2/2}$ . یک تابع موج دو الکترونی با بهنجارش مناسب بسازید. فرض کنید  $\Delta r = 0.1 \text{ \AA}$ . برآورد کنید که به‌ازای چه مقادیری از  $a$  می‌توان اثرات اصل پاولی را تا دقت ۱ روی ۱۰۰۰ نادیده گرفت.

۸-۸ با استفاده از تابع موج دستگاه دو الکترونی مسئله ۷-۸، احتمال این را محاسبه کنید که فاصله بین دو الکترون در بازه  $(x, x + dx)$  باشد. همچنین نشان دهید که مقدار انتظاری مرکز جرم این دستگاه دو الکترونی برابر است با  $\langle (x_1 + x_2)/2 \rangle = 0$ .

[راهنمایی:  $x_1$  و  $x_2$  را برحسب مختصه مرکز جرم  $X = (x_1 + x_2)/2$  و فاصله  $x = x_1 - x_2$  بنویسید، و تابع موج را برحسب این متغیرها بیان کنید.]

۹-۸ چگالی احتمال مربوط به مسئله ۸-۸ را برحسب  $x$  برای دو مورد (الف)  $1/a = \mu/2$ ، و (ب)  $1/a = 2\mu$  ترسیم کنید. مفهوم فیزیکی نتایج را بیان کنید.

۱۰-۸ فرض کنید در مسئله‌های ۷-۸ تا ۹-۸ به جای الکترون بوزون داریم. تغییر در فرمولها را بنویسید، چگالی احتمال را برحسب  $x$  برای دو فاصله ترسیم کنید، و تفاوت میان فرمیونها و بوزونها را از لحاظ چگالی احتمال توضیح دهید.

## مراجع

به هریک از مراجع آخر فصل ۶ و همچنین دو کتاب زیر مراجعه کنید.

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

D Park *Introduction to the Quantum Theory*, (3rd Ed) McGraw-Hill, New York, 1992.

## معادله شرودینگر در سه بعد (۱)

هامیلتونی یک ذره که در فضای سه بعدی حرکت می‌کند عبارت است از

$$H = \frac{P_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(x, y, z) \quad (1-9)$$

در این فصل پتانسیلی را در نظر می‌گیریم که به صورت زیر است

$$V(x, y, z) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z) \quad (2-9)$$

به آسانی می‌توان دید که معادله

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) u_E(x, y, z) \quad (3-9)$$

$$+ [V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)]u_E(x, y, z) = Eu_E(x, y, z)$$

با جداسازی زیر حل می‌شود

$$u_E(x, y, z) = u_{\epsilon_1}(x)v_{\epsilon_2}(y)w_{\epsilon_3}(z) \quad (4-9)$$

که در آن تابعهای سمت راست جوابهای معادله‌های زیر هستند

$$\begin{aligned} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_1(x) \right] u_{\epsilon_1}(x) &= \epsilon_1 u_{\epsilon_1}(x) \\ \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + V_2(y) \right] v_{\epsilon_2}(y) &= \epsilon_2 v_{\epsilon_2}(y) \\ \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + V_3(z) \right] w_{\epsilon_3}(z) &= \epsilon_3 w_{\epsilon_3}(z) \end{aligned} \quad (5-9)$$

و

$$E = \epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3$$

### ذرهٔ آزاد در جعبه

یک مثال مخصوصاً جالب تعمیم سه‌بعدی چاه پتانسیل نامتناهی است. اگر جعبهٔ سه‌بعدی مکعبی به ضلع  $L$  باشد، آنگاه

$$\begin{aligned} V_1(x) &= \infty & x < 0 \\ &= 0 & 0 < x < L \\ &= \infty & L < x \end{aligned} \quad (6-9)$$

و غیره. بنابراین، جواب عمومی عبارت است از

$$u_E(x, y, z) = \left( \frac{2}{L} \right)^{3/2} \sin \frac{n_1 \pi x}{L} \sin \frac{n_2 \pi y}{L} \sin \frac{n_3 \pi z}{L} \quad (7-9)$$

و

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \quad (8-9)$$

توجه کنید که واگنی در این مسئله بسیار زیاد است: تعداد جوابها به‌ازای یک مقدار معین  $E$  برابر است با تعداد مجموعه‌های اعداد درست  $\{n_1, n_2, n_3\}$  که در ۸-۹ صدق می‌کنند. واگنی معمولاً

ناشی از وجود عملگرهای جابه‌جاشونده است، و این مثال نیز از این قاعده مستثنی نیست. در اینجا عملگرهای جابه‌جاشونده  $H_x$ ،  $H_y$  و  $H_z$  هستند، که به صورت زیر تعریف می‌شوند

$$\begin{aligned} H_x &= \frac{p_x^2}{2m} + V_1(x) \\ H_y &= \frac{p_y^2}{2m} + V_2(y) \\ H_z &= \frac{p_z^2}{2m} + V_3(z) \end{aligned} \quad (۹-۹)$$

و

$$H_x + H_y + H_z = H \quad (۱۰-۹)$$

## اثرات اصل طرد

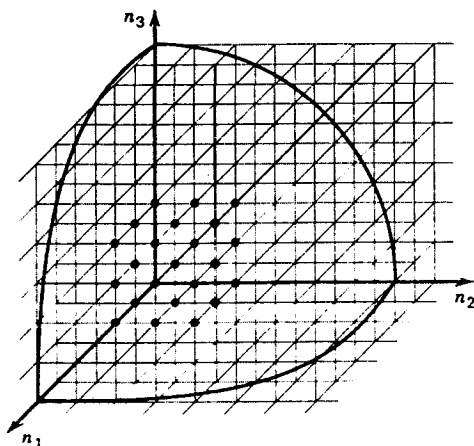
پتانسیلی که در بالا در نظر گرفتیم چنان ساده است که می‌توان از آن برای بحث درباره انرژیهای الکترونیهای بدون برهم‌کنش (و سایر فرمیونهای یکسان) در جعبه سه‌بعدی استفاده کرد. به عنوان اولین گام، بهتر است انرژی حالت پایه  $N$  فرمیون یکسان بدون برهم‌کنش، مثلاً الکترون، را در جعبه‌ای به حجم  $L^3$  به دست آوریم. برای هر سه‌تایی اعداد درست  $(n_1, n_2, n_3)$ ،  $(1, 2, 1)$ ،  $(2, 1, 1)$ ،  $(1, 1, 1)$ ، ... می‌توان دو الکترون در نظر گرفت. مسئله یافتن انرژی را به صورت آسانتری مطرح می‌کنیم: چند سه‌تایی اعداد درست  $(n_1, n_2, n_3)$  وجود دارند که برای آنها  $E$  در ۸-۹ کمتر از انرژی  $E_F$  است؟ هر سه‌تایی یک نقطه شبکه در یک فضای سه‌بعدی تشکیل می‌دهد، و اگر تعداد این نقاط بسیار زیاد باشد، با تقریب بسیار خوب می‌توان گفت که آنها باید در کره‌ای به شعاع  $R$  قرار داشته باشند که بنابه ۸-۹ با رابطه زیر داده می‌شود

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = R^2 = \frac{2mE_F}{\hbar^2 \pi^2} L^2 \quad (۱۱-۹)$$

این تعداد برابر است با حجم یک هشتم کره که برای آن تمام  $n_i$ ها مثبت‌اند (شکل ۹-۱). بنابراین، تعداد نقطه‌های شبکه برابر است با

$$\frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} R^3 = \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} \left( \frac{2mE_F}{\hbar^2 \pi^2} L^2 \right)^{3/2} \quad (۱۲-۹)$$





شکل ۹-۱. شمارش حالتها برای دستگاه ذرات مستقل.

و تعداد الکترونها با انرژی کمتر از انرژی  $E_F$  دو برابر این است، یعنی

$$N = \frac{\pi}{3} L^3 \left( \frac{2mE_F}{\hbar^2 \pi^2} \right)^{3/2} \quad (۹-۱۳)$$

تعداد الکترونها، چنانکه باید، متناسب با حجم جعبه است. برحسب چگالی الکترونها،

$$n = \frac{N}{L^3} \quad (۹-۱۴)$$

داریم

$$E_F = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left( \frac{3n}{\pi} \right)^{2/3} \quad (۹-۱۵)$$

انرژی  $E_F$  متعلق به پرانرژی‌ترین الکترون در حالت پایه یک گاز الکترونی به چگالی  $n$  است. این انرژی را انرژی فرمی می‌نامند، و نشان‌گذاری آن با  $F$  به همین دلیل است. برای محاسبه انرژی کل، می‌توان تعداد نقاط شبکه را به صورت

$$\frac{1}{8} \int_{|\mathbf{n}| \leq R} d^3 \mathbf{n} \quad (۹-۱۶)$$

نوشت که در آن ضریب  $1/8$  از قید مثبت بودن اعداد درست در ۹-۸ ناشی می‌شود؛ در انتگرال ۹-۱۶ این قید برداشته شده است و ضریب جلو انتگرال به جای آن گذاشته شده است.

این انرژی باید دو برابر شود، زیرا برای هر نقطه شبکه دو الکترون با یک انرژی وجود دارند. بنابراین انرژی کل برابر است با

$$\begin{aligned} E_{\text{کل}} &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{mL^3} \frac{1}{\lambda} \int \mathbf{n}^2 d^3 \mathbf{n} \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{\lambda m L^3} 4\pi \int_0^R n^2 dn \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{\lambda^3 m L^3} R^5 \end{aligned} \quad (17-9)$$

چون رابطه  $R$  با تعداد الکترونها به صورت زیر است

$$N = 2 \cdot \frac{1}{\lambda} \cdot \frac{4\pi}{3} R^3 \quad (18-9)$$

در نهایت به دست می آوریم

$$E_{\text{کل}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{\lambda^3 m L^3} \left( \frac{3N}{\pi} \right)^{5/3} \quad (19-9)$$

که برحسب چگالی  $n = N/L^3$  به صورت زیر درمی آید

$$E_{\text{کل}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{\lambda^3 m} \left( \frac{3n}{\pi} \right)^{5/3} L^3 \quad (20-9)$$

پیامدهای اصل طرد پاولی کاملاً گیج کننده هستند. تعدادی از آنها را پس از ملاحظات زیر بررسی می کنیم:

(الف) عدد موج که با  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$  در سطح "دریای فرمی" تعریف می شود با رابطه زیر داده می شود

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} \quad (21-9)$$

چون  $k = 2\pi/\lambda$ ، برای طول موج دوبروی به دست می آوریم

$$\lambda = 2r_0 3n^{-1/3} \quad (22-9)$$

از آنجا که  $n^{-1/3}$  تقریباً برابر با فاصله میان ذره‌های  $d$  است، نتیجهٔ بالا را می‌توان به صورتی که به آسانی به خاطر سپرده می‌شود بیان کرد:

$$d = \frac{\lambda_F}{2} \quad (23-9)$$

این رابطه چیزی با ارزشتر از یک وسیلهٔ یادسپاری است. چون اصل طرد نمی‌گذارد دو الکترون با اعداد کوانتومی یکسان کنار هم قرار گیرند رابطهٔ بالا به معنای این است که آنها باید دست‌کم به اندازهٔ یک نیم‌موج از هم فاصله داشته باشند.

(ب) اگر تعداد الکترونها را ثابت بگیریم، آنگاه ۹-۱۹ برحسب حجم حاوی الکترونها به صورت زیر درمی‌آید

$$E_{کل} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{10m} \left( \frac{3N}{\pi} \right)^{5/3} V^{-2/3} \quad (24-9)$$

اگر  $N$  بزرگ باشد، این نتیجه عملاً مستقل از شکل حجم است. در محاسبات بالا از مکعب استفاده کردیم زیرا این راه برای محاسبه از همه ساده‌تر است.

## فشار واگنی و کاربردهای اختریفیزیکی

اگر گاز الکترونی را متراکم کنیم الکترونها به یکدیگر نزدیکتر می‌شوند، و در نتیجه طول‌موج دو بروی کاهش می‌یابد، یعنی انرژی زیاد می‌شود. بنابراین، مقاومتی در برابر تراکم ظاهر می‌شود؛ فشار مانع تراکم را فشار واگنی می‌نامند. این فشار با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$\begin{aligned} p_{واگنی} &= -\frac{\partial E_{tot}}{\partial V} \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{10m} \left( \frac{3n}{\pi} \right)^{5/3} \end{aligned} \quad (25-9)$$

مدول کپهای  $B$  (عکس تراکم‌پذیری) برای یک ماده به صورت زیر تعریف می‌شود

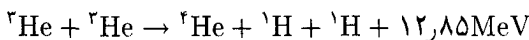
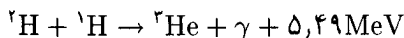
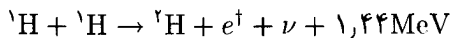
$$B = -V \frac{\partial p}{\partial V} \quad (26-9)$$

و اگر به جای  $p$  فشار واگنی را قرار دهیم به دست می‌آوریم  $B = 5p$ ، و در نتیجه

$$B = \frac{\hbar^2 \pi^2}{9m} \left( \frac{3n}{\pi} \right)^{5/3} \quad (27-9)$$

استفاده از الگوی گاز الکترونی واگن برای ماده مرتبه بزرگی درست مدول کپه‌ای  $B$  را به دست می‌دهد. به عنوان مثال، برای سدیم  $n = 2.65 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ ، و در نتیجه  $B = 9.2 \times 10^{10} \text{ dyne/cm}^2$ . مقدار تجربی  $10^{10} \text{ dyne/cm}^2 \times 6.4$  است.

مقاومت در برابر تراکم که منشأ آن در اصل طرد پاؤلی است نقش مهمی در تکامل ستاره‌ای دارد. ستاره‌ها با واکنشهای هسته‌ای متوالی "می‌سوزند". هیدروژن با واکنشهای زیر به هلیوم تبدیل می‌شود



وقتی تمام هیدروژن به هلیوم تبدیل شد این سوختن متوقف می‌شود. انقباض گرانشی هلیوم را متراکم می‌کند تا اینکه هلیوم با واکنش زیر شروع به سوختن می‌کند



انواع فرایندهای هسته‌ای زیادتر می‌شوند، و فرایند ترکیب هسته‌ها را اکنون کاملاً می‌دانیم. در یک مرحله، وقتی که ستاره عمدتاً از آهن، سیلیسیم، و عنصرهای مجاور تشکیل شده است، سوختن متوقف می‌شود. آنگاه ماده انقباض گرانشی را از سر می‌گیرد، و تنها مانع در برابر رمبش گرانشی کامل اثر فشار واگنی است.

اگر فرض کنیم چگالی ماده  $\rho$  مستقل از شعاع است و شکل ستاره کروی است، فشار گرانشی به آسانی محاسبه می‌شود. انرژی پتانسیل ماده در پوسته‌ای بین شعاعهای  $r$  و  $r + dr$  برابر است با

$$dV_g = -G \frac{(\frac{4}{3}\pi r^3 \rho)(4\pi r^2 dr)}{r} = -\frac{(\frac{4}{3}\pi)^2 G \rho^2}{3} r^4 dr \quad (28-9)$$

و در نتیجه انرژی پتانسیل ماده موجود در کره‌ای به شعاع  $R$  عبارت است از

$$V_g = -\frac{(\frac{4}{3}\pi)^2 G \rho^2}{3} \int_0^R r^4 dr = -\frac{(\frac{4}{3}\pi)^2}{15} G \rho^2 R^5 \quad (29-9)$$

رابطه میان  $\rho$ ،  $R$  و جرم ستاره  $M$  را هم داریم. ستاره از  $N$  نوکلئون (به صورت آهن، سیلیسیم و

غیره) هر یک به جرم  $m_n$  تشکیل شده است، و از این رو

$$\frac{4\pi}{3}\rho R^3 = M = (NM_n) \quad (۳۰-۹)$$

بنابراین، رابطه انرژی پتانسیل گرانشی برحسب حجم ستاره به صورت زیر است

$$V_g = -\frac{3}{5}\left(\frac{4\pi}{3}\right)^{1/3} G(Nm_n)^2 V^{-1/3} \quad (۳۱-۹)$$

فشار گرانشی برابر است با

$$p_g = -\frac{\partial V_g}{\partial V} = -\frac{1}{5}\left(\frac{4\pi}{3}\right)^{1/3} G(Nm_n)^2 V^{-4/3} \quad (۳۲-۹)$$

این فشار با فشار واکنشی، که بنابه ۲۵-۹ به صورت زیر است، مخالفت می‌کند

$$p_{\text{واکنشی}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{15m_e} \left(\frac{3n}{\pi}\right)^{5/3} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{15m_e} \left(\frac{3N_e}{\pi}\right)^{5/3} V^{-5/3} \quad (۳۳-۹)$$

که در آن  $N_e$  تعداد الکترونهاست ستاره است و با تعداد پروتونهاى آن برابر است. با فرض مساوی بودن تعداد پروتونها و نوترونها، داریم  $N_e = N/2$ .

این دو فشار، به‌ازای یک مقدار معین  $N$ ، وقتی با هم موازنه می‌کنند که

$$\frac{1}{5}\left(\frac{4\pi}{3}\right)^{1/3} G(Nm_n)^2 V^{-4/3} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{15m_e} \left(\frac{3N_e}{\pi}\right)^{5/3} V^{-5/3}$$

یعنی وقتی که شعاع ستاره برابر است با  $R^*$ :

$$R^* = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/3} V^{1/3} = \left(\frac{81\pi^2}{128}\right)^{1/3} \frac{\hbar^2}{Gm_e m_n^2} N^{-1/3} \quad (۳۴-۹)$$

برای ستاره‌ای با جرم خورشید داریم

$$N \approx \frac{2 \times 10^{33} \text{g}}{1.67 \times 10^{-24} \text{g}} = 1.2 \times 10^{57}$$

و شعاع ستاره واگن برابر است با  $R^* \approx 1.1 \times 10^4 \text{ km}$ . شعاع یک ستاره ناواگن مانند خورشید تقریباً  $7 \times 10^8 \text{ km}$  است.

اگر جرم ستاره اندکی بیشتر از جرم خورشید باشد انرژی میانگین الکترونها افزایش می‌یابد. وقتی الکترونها به انرژیهای نسبیتی می‌رسند رابطه بالا برای فشار واگنی تغییر عمده‌ای پیدا می‌کند. در واقع، انرژی الکترون دیگر  $p^2/2m_e$  نیست بلکه  $pc$  است. می‌توان نشان داد (مسئله ۹-۱) که در این وضعیت فشار واگنی با  $V^{-2/3}$  تغییر می‌کند، و اگر مقدار  $N$  به اندازه کافی بزرگ باشد فشار گرانشی بر فشار واگنی غالب می‌شود. یک نتیجه این فشار خالص زیاد این است که واکنش زیر روی می‌دهد

$$e^- + p \rightarrow n + \nu$$

نوترونها فرار می‌کنند زیرا ماده، حتی ماده واگن، برای آنها شفاف است، و آنچه می‌ماند یک ستاره نوترونی است. فشار واگنی نوترونها را، که فرمیون هستند و بنابراین از اصل طرد پیروی می‌کنند، می‌توان به همان روش مربوط به فشار الکترون محاسبه کرد و البته به جای  $N_e$  باید  $N$  و به جای  $m_e$  باید  $m_n$  گذاشت. در این مورد به دست می‌آوریم

$$R_n^* = \left( \frac{81\pi^2}{16} \right)^{1/2} \frac{\hbar^2}{Gm_n^2} N^{-1/2} \quad (35-9)$$

برای ستاره‌ای که جرمش دو برابر خورشید است سرانجام به نتیجه  $R_n^* \approx 10 \text{ km}$  می‌رسیم. اگر جرم (یا معادل آن  $N$ ) چنان بزرگ باشد که نوترونها نسبیتی شوند آنگاه موازنه‌ای در برابر فشار گرانشی بسیار زیاد وجود نخواهد داشت، و یک سیاهچاله شکل می‌گیرد.

## مسائل

۹-۱ انرژی فرمی برای گازی از فرمیونها را با این فرض که فرمیونها بدون جرم هستند، و در نتیجه رابطه انرژی-تکانه به صورت  $E = pc$  است، از نو محاسبه کنید.

۹-۲ واگنی حالتها در یک جعبه مکعبی با حجم  $L^3$  را برحسب  $E$  محاسبه کنید، یعنی تعداد حالتها را در بازه  $(E, E + dE)$  به دست آورید و با استفاده از آن چگالی حالتها را یک گاز الکترونی را، با توجه به اینکه به ازای هر حالت انرژی دو الکترون داریم، تعیین کنید.

[راهنمایی: چند  $(n_1, n_2, n_3)$  وجود دارند که برای آنها  $\sum_i n_i^2 = 2mEL^2/\hbar^2\pi^2$ ]

۹-۳ طیف انرژی الکترونها را در جعبه‌ای به اضلاع  $a$  و  $L$ ، با فرض  $a \ll L$ ، به دست آورید. درباره فاصله الکترونها به ازای  $a = 10^{-4} \text{ cm}$  و  $L = 10^{-2} \text{ cm}$  بحث کنید.

۹-۴ چگالی انرژی یک گاز فوتونی را در یک جعبه مکعبی با حجم  $L^3$ ، با توجه به اینکه به ازای

هر حالت انرژی دو فوتون (دو حالت قطبش) وجود دارند، محاسبه کنید.

۵-۹ طیف انرژی یک گاز فوتونی را در جعبه‌ای به اضلاع  $a$ ،  $L$  و  $a$ ، با  $L \ll a$ ، به دست آورید. ۶-۹ با توجه به اینکه چگالی تعداد الکترونهاى آزاد در مس  $10^{22} \text{ cm}^{-3}$   $\times 8.5$  است، (۱) انرژی فرمی را برحسب الکترون ولت، و (۲) سرعت الکترونی را که انرژی جنبشی آن برابر با انرژی فرمی است محاسبه کنید.

۷-۹ یک هسته از  $N$  نوترون و  $Z$  پروتون، با  $N + Z = A$ ، تشکیل شده است. اگر شعاع هسته با  $R = r_0 A^{1/3}$  داده شود، که در آن  $r_0 = 1.1 \text{ fm}$ ، و اگر جرمهای نوترون و پروتون تقریباً  $1.67 \times 10^{-24} \text{ g}$  باشند، رابطه انرژی فرمی را برای "گاز" پروتون و "گاز" نوترون، با فرض حرکت آزاد پروتونها و نوترونها، به دست آورید. این انرژیهای فرمی را به ازای  $N = 126$  و  $Z = 82$  تعیین کنید.

۸-۹ یک گاز نوترونی را در حالت پایه در نظر بگیرید که برای آن چگالی جرم  $\rho$  از  $10^{11}$  تا  $10^{16}$  گرم بر سانتیمتر مکعب تغییر می‌کند. انرژی فرمی را برحسب  $\rho$  به دست آورید. توجه کنید که در یک نقطه این گاز نوترونی نسبیته می‌شود. در چه گستره‌ای از چگالیها باید از فرمولهای نسبیته استفاده کنیم؟

## معادله شرودینگر در سه بعد (۲)

### پتانسیل مرکزی

در این فصل مورد بسیار مهمی را در نظر می‌گیریم که در آن پتانسیل  $V(x, y, z)$  تنها به  $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$  بستگی دارد. برای یک دستگاه دوزره‌ای با پتانسیلی که تنها به فاصله بین دو ذره بستگی دارد، هامیلتونی به صورت زیر است

$$H = \frac{P_1^2}{2m_1} + \frac{P_2^2}{2m_2} + V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \quad (۱-۱۰)$$

با تجزیه متداول به مختصات مرکز جرم و نسبی

$$\mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2} \quad (۲-۱۰)$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$$



و با تکانه‌های کل و نسبی

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= \mathbf{p}_\lambda + \mathbf{p}_\tau \\ \mathbf{p} &= \frac{m_\tau \mathbf{p}_\lambda - m_\lambda \mathbf{p}_\tau}{m_\lambda + m_\tau} \end{aligned} \quad (3-10)$$

هامیلتونی به صورت زیر درمی‌آید

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(|\mathbf{r}|) \quad (4-10)$$

در اینجا  $M$  جرم کل دستگاه است که با رابطه زیر داده می‌شود

$$M = m_\lambda + m_\tau \quad (5-10)$$

و جرم کاهشده  $\mu$  عبارت است از

$$\mu = \frac{m_\lambda m_\tau}{M} \quad (6-10)$$

به سادگی می‌توان دید که

$$[P_i, R_j] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij} \quad (7-10)$$

$$[p_i, r_j] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij}$$

و تمام جابه‌جاگرهای دیگر صفر هستند. چون پتانسیل تابع مختصه مرکز جرم  $\mathbf{R}$  نیست، عملگر تکانه کل  $\mathbf{P}$  با  $H$  جابه‌جا می‌شود، و می‌توان ویژه‌تابعهای مشترکی برای  $\mathbf{P}$  و  $H$  به دست آورد. ویژه‌تابعهای  $\mathbf{P}$  عبارت‌اند از

$$U(\mathbf{P}, \mathbf{R}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{P}\cdot\mathbf{R}/\hbar} \quad (8-10)$$

بنابراین، ویژه‌تابع  $H$  به صورت زیر است

$$\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = U(\mathbf{P}, \mathbf{R}) u_E(\mathbf{r}) \quad (9-10)$$

به طوری که  $u_E(\mathbf{r})$  در معادله ویژه مقدراری انرژی زیر صدق می‌کند

$$\left( \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(r) \right) u_E(\mathbf{r}) = E u_E(\mathbf{r}) \quad (10-10)$$

که در آن  $E$  انرژی داخلی، یعنی انرژی کل منهای انرژی حرکت دستگاه دودره‌ای  $P^2/2M$ ، است. معادله  $10-10$  را به صورت زیر می‌نویسیم

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r) \right) u_E(\mathbf{r}) = E u_E(\mathbf{r}) \quad (11-10)$$

### پیامدهای ناوردایی چرخشی

در این بخش نشان می‌دهیم که  $11-10$  را می‌توان به گونه‌ای جداسازی کرد که تنها مختص شعاعی  $r$  در معادله ویژه مقدراری انرژی ظاهر شود. در مکانیک کلاسیک این جداسازی با استفاده از تکانه زاویه‌ای انجام می‌شود. با

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (12-10)$$

به دست می‌آوریم

$$\mathbf{L}^2 = (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) = \mathbf{r}^2 \mathbf{p}^2 - (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p})^2$$

و در نتیجه

$$\begin{aligned} \mathbf{p}^2 &= \frac{1}{r^2} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p})^2 + \frac{1}{r^2} \mathbf{L}^2 \\ &= p_r^2 + \frac{1}{r^2} \mathbf{L}^2 \end{aligned} \quad (13-10)$$

برای پتانسیل مرکزی (وقتی  $V$  تنها به  $r$  بستگی دارد) نیرو شعاعی است و لنگری بر دستگاه وارد نمی‌شود. بنابراین،  $\mathbf{L}$  یک ثابت حرکت است و  $\mathbf{L}^2$  تنها یک عدد است. در نتیجه، معادله

$$E = \frac{1}{2\mu} \mathbf{p}^2 + V(r)$$

تنها شامل مختص شعاعی است. همین نتیجه برای مکانیک کوانتومی صدق می‌کند. در بقیه این بخش:

۱. عملگر تکانه زاویه‌ای را از شرط ناوردی بودن هامیلتونی تحت چرخش تعیین می‌کنیم؛ و  
 ۲. معادله شعاعی را به دست می‌آوریم.

ناوردایی تحت چرخش حول محور  $z$

مورد خاص چرخش حول محور  $z$  به اندازه زاویه  $\theta$  را در نظر بگیرید: با

$$\begin{aligned}x' &= x \cos \theta - y \sin \theta \\y' &= x \sin \theta + y \cos \theta\end{aligned}\quad (۱۴-۱۰)$$

به آسانی می‌توان دید که

$$r'^2 = (x'^2 + y'^2 + z'^2)^{1/2} = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2} = r$$

و

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial}{\partial x'}\right)^2 + \left(\frac{\partial}{\partial y'}\right)^2 &= \left(\cos \theta \frac{\partial}{\partial x} - \sin \theta \frac{\partial}{\partial y}\right)^2 + \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial x} + \cos \theta \frac{\partial}{\partial y}\right)^2 \\&= \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial}{\partial y}\right)^2\end{aligned}$$

چون هامیلتونی یک ویژگی ناوردایی دارد، انتظار داریم، همچنانکه در مورد پاریته و ناوردایی تحت جابه‌جایی دیدیم، یک قانون پایستگی به دست آوریم. برای تعیین عملگرهایی که با  $H$  جابه‌جا می‌شوند، یک چرخش بینهایت کوچک حول محور  $z$  در نظر می‌گیریم. با نگره داشتن جمله‌هایی که تنها تا مرتبه  $\theta$  هستند، یعنی

$$\begin{aligned}x' &= x - \theta y \\y' &= y + \theta x\end{aligned}\quad (۱۵-۱۰)$$

می‌نویسیم

$$Hu_E(x - \theta y, y + \theta x, z) = Eu_E(x - \theta y, y + \theta x, z) \quad (۱۶-۱۰)$$

اگر این معادله را تا مرتبه اول بر حسب  $\theta$  بسط دهیم و معادله

$$Hu_E(x, y, z) = Eu_E(x, y, z) \quad (۱۷-۱۰)$$

را از آن کم کنیم، به دست می‌آوریم

$$H \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) u_E(x, y, z) = E \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) u_E(x, y, z) \quad (۱۸-۱۰)$$

طرف راست این معادله را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) E u_E(x, y, z) = \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) H u_E(x, y, z) \quad (۱۹-۱۰)$$

اگر تعریف کنیم

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = xp_y - yp_x \quad (۲۰-۱۰)$$

آنگاه از ترکیب ۱۸-۱۰ و ۱۹-۱۰ به دست می‌آوریم

$$(HL_z - L_zH)u_E(x, y, z) = 0$$

چون  $u_E(\mathbf{r})$  ها یک مجموعه کامل تشکیل می‌دهند، این رابطه موجب رابطه عملگری زیر می‌شود

$$[H, L_z] = 0 \quad (۲۱-۱۰)$$

$L_z$  در اینجا مؤلفه  $z$  عملگر تکانه زاویه‌ای زیر است

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (۲۲-۱۰)$$

اگر چرخش را حول محورهای  $x$  و  $y$  در نظر بگیریم به دو معادله زیر می‌رسیم

$$\begin{aligned} [H, L_x] &= 0 \\ [H, L_y] &= 0 \end{aligned} \quad (۲۳-۱۰)$$

بنابراین، سه مؤلفه عملگر تکانه زاویه‌ای با هامیلتونی جابه‌جا می‌شوند، یعنی تکانه زاویه‌ای یک ثابت حرکت است. این نتیجه با این قانون کلاسیک که نیروهای مرکزی پایستگی تکانه زاویه‌ای را ایجاد می‌کنند همسنگ است.

## رابطه جابه‌جایی تکانه زاویه‌ای

عملگرهای  $L_z$  و  $L_y$ ,  $L_x$ ,  $H$  یک مجموعه کامل از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده تشکیل نمی‌دهند و از این رو نمی‌توانند ویژه‌تابعهای همزمان داشته باشند. برای مثال،

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= [yp_z - zp_{y'}, zp_x - xp_z] \\ &= [yp_z, zp_x] - [zp_{y'}, zp_x] - [yp_z, xp_z] + [zp_{y'}, xp_z] \\ &= y[p_z, z]p_x + x[z, p_z]p_y \\ &= \frac{\hbar}{i}(yp_x - zp_y) \quad (24-10) \\ &= i\hbar L_z \end{aligned}$$

به همین ترتیب، به دست می‌آوریم

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x \quad (25-10)$$

$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y \quad (26-10)$$

رابطه‌های جابه‌جایی ۲۴-۱۰ تا ۲۷-۱۰ را می‌توان در فرمول زیر خلاصه کرد

$$\mathbf{L} \times \mathbf{L} = i\hbar \mathbf{L}$$

یک پیامد این رابطه‌های جابه‌جایی این است که تنها یک مؤلفه  $\mathbf{L}$  را می‌توان با  $H$  برای تشکیل مجموعه مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده برگزید. برای اثبات، فرض کنید ویژه‌تابعی از  $L_x$  با ویژه‌مقدار  $l_1$  داریم که به‌طور همزمان ویژه‌تابع  $L_y$  با ویژه‌مقدار  $l_2$  نیز هست:

$$L_x u = l_1 u$$

$$L_y u = l_2 u$$

بنابراین، باید  $L_x L_y u = l_1 l_2 u$  و  $L_y L_x u = l_2 l_1 u$  در نتیجه، با توجه به ۲۴-۱۰ به دست می‌آوریم  $L_z u = 0$ . اما آنگاه

$$L_y u = \frac{1}{i\hbar} (L_z L_x - L_x L_z) u = \frac{1}{i\hbar} L_z l_1 u = 0$$

این نتیجه ایجاب می‌کند که  $l_z = 0$ ، و با استدلال مشابهی می‌توان نشان داد که  $l_x = 0$ . بنابراین، تنها برای  $l = 0$  هر سه مؤلفه  $\mathbf{L}$  می‌توانند ویژه‌تابعهای همزمان داشته باشند.

بدین ترتیب، برای تشکیل مجموعه مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده تنها یک مؤلفه  $\mathbf{L}$  را می‌توان با  $H$  برگزید. اما می‌توان وضعیت را تا حدی بهتر کرد، زیرا، چنانکه  $10-24$  تا  $10-26$  ایجاب می‌کنند،  $\mathbf{L}^2$  با هر سه مؤلفه  $\mathbf{L}$  جابه‌جا می‌شود:

$$\begin{aligned} [L_z, \mathbf{L}^2] &= [L_z, L_x^2 + L_y^2 + L_z^2] = [L_z, L_x^2] + [L_z, L_y^2] \\ &= L_x[L_z, L_x] + [L_z, L_x]L_x + L_y[L_z, L_y] + [L_z, L_y]L_y \\ &= i\hbar L_x L_y + i\hbar L_y L_x - i\hbar L_y L_x - i\hbar L_x L_y \quad (27-10) \\ &= 0 \end{aligned}$$

و غیره. بنابراین، عملگرهای  $H$ ،  $\mathbf{L}^2$  و  $L_z$  (که این یکی صرفاً قراردادی است) را به‌عنوان مجموعه کامل مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده انتخاب می‌کنیم. می‌توانستیم پارینه را هم اضافه کنیم زیرا واضح است که هامیلتونی تحت  $x \rightarrow -x$ ،  $y \rightarrow -y$ ،  $z \rightarrow -z$  ناوردا است، اما چنانکه بعداً خواهیم دید با تعیین  $\mathbf{L}^2$  پارینه نیز تعیین می‌شود.

### جداسازی متغیرها برای معادله شرودینگر

در فصل ۱۱ ویژه‌مقدارها و ویژه‌تابعهای  $L_z$  و  $\mathbf{L}^2$  را به‌دست می‌آوریم؛ در اینجا تنها متذکر می‌شویم که با استفاده از آنها حل معادله شرودینگر بسیار ساده‌تر می‌شود. این وضعیت پیامد رابطه‌ای است که در زیر به‌دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 &= (\mathbf{r} \times \mathbf{p})^2 = [(\mathbf{r} \times \mathbf{p})_x]^2 + [(\mathbf{r} \times \mathbf{p})_y]^2 + [(\mathbf{r} \times \mathbf{p})_z]^2 \\ &= -\hbar^2 \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ &\quad - \hbar^2 \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ &\quad - \hbar^2 \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \\ &= -\hbar^2 \left[ x^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + y^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \right] \end{aligned}$$

$$+ z^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - 2xy \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} - 2yz \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} \\ - 2zx \frac{\partial^2}{\partial z \partial x} - 2x \frac{\partial}{\partial x} - 2y \frac{\partial}{\partial y} - 2z \frac{\partial}{\partial z} \Big]$$

و همچنین داریم

$$\begin{aligned} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p})^2 &= -\hbar^2 \left( x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\partial}{\partial z} \right) \left( x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ &= -\hbar^2 \left( x^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + y^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + z^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} + 2xy \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} + 2yz \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} \right. \\ &\quad \left. + 2zx \frac{\partial^2}{\partial z \partial x} + x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\partial}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (28-10)$$

مجموع این دو برابر است با

$$-\hbar^2 (x^2 + y^2 + z^2) \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \hbar^2 \left( x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (29-10)$$

بنابراین، اتحاد زیر را به دست می آوریم

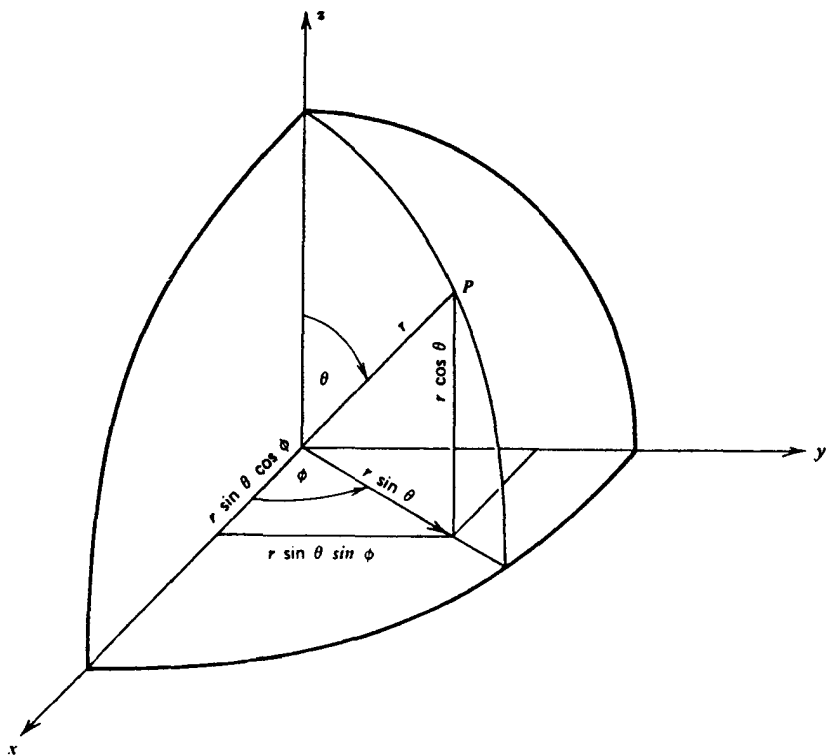
$$\mathbf{L}^2 + (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p})^2 = r^2 \mathbf{p}^2 + i\hbar \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \quad (30-10)$$

چون با عملگرها سروکار داریم، رعایت ترتیب عوامل ضروری است. از اتحاد بالا نتیجه می گیریم که

$$\mathbf{p}^2 = \frac{1}{r^2} \left[ \mathbf{L}^2 + (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p})^2 - i\hbar \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \right] \quad (31-10)$$

این رابطه به این دلیل با نتیجه کلاسیک ۱۳-۱۰ تفاوت دارد که  $\mathbf{p}$  و  $\mathbf{r}$  جابه جا نمی شوند. با

$$\mathbf{p}^2 = \frac{1}{r^2} \mathbf{L}^2 - \hbar^2 \frac{1}{r^2} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 - \hbar^2 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \quad (32-10)$$



شکل ۱-۱۰ تعریف مختصات کروی  $(r, \theta, \phi)$  و رابطه آنها با مختصات دکارتی  $(x, y, z)$ .

معادله شرودینگر به صورت زیر درمی آید

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{1}{r^2} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{\hbar^2 r^2} \mathbf{L}^2 \right] u_E(\mathbf{r}) + V(r)u_E(\mathbf{r}) = E u_E(\mathbf{r}) \quad (33-10)$$

اگر در مختصات کروی کارکنیم (شکل ۱-۱۰)، که طبعاً باید چنین باشد، آنگاه تنها عملگری که زاویه‌های قطبی  $\theta$  و  $\phi$  در آن دخالت دارند  $\mathbf{L}^2$  است. بنابراین، اگر ویژه‌تابعها را به صورت زیر بنویسیم

$$u_E(\mathbf{r}) = Y_\lambda(\theta, \phi) R_{E\lambda}(r) \quad (34-10)$$

که در آن  $Y_\lambda$  ویژه‌تابع عملگر  $\mathbf{L}^2$  است:

$$\mathbf{L}^2 Y_\lambda(\theta, \phi) = \lambda Y_\lambda(\theta, \phi) \quad (35-10)$$



آنگاه معادله ۱۰-۳۴ به معادله ویژه‌مقداری  $L^2$  (معادله ۱۰-۳۵) و یک معادله صرفاً شعاعی (معادله ۱۰-۳۹) تفکیک می‌شود. روش بالا واقعاً تفاوتی با روش مرسوم جداسازی متغیرها ندارد، اما در آن بر نقش تقارن در تعیین مجموعه کامل عملگرهای جابه‌جاشونده تأکید شده است.  $\lambda$  چنانکه باید دارای ابعاد  $\hbar^2$  است، و آن را به صورت زیر می‌نویسیم

$$\lambda = l(l+1)\hbar^2 \quad (36-10)$$

در فصل بعد ثابت می‌کنیم که  $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ ، و در تحلیل زیر از این نتیجه استفاده خواهیم کرد. ویژه‌تابعهای عملگر  $L^2$  را در واقع به صورت  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  می‌نویسیم که در آن شاخص پایین  $m$  نشان می‌دهد که  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  ویژه‌تابع همزمان  $L^2$  و  $L_z$  است:

$$L_z Y_{lm}(\theta, \phi) = m\hbar Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (37-10)$$

قبلاً گفتیم که  $l$  یک عدد درست است، و خواهیم دید که  $m$  نیز یک عدد درست است که در  $-l \leq m \leq l$  صدق می‌کند. چون  $Y_{lm}$  ویژه‌تابع عملگرهای هرمیتی است،  $Y_{lm}$ های متناظر با ویژه‌مقدارهای مختلف متعامد هستند. در فصل بعد ثابت می‌کنیم که وقتی این ویژه‌تابعها به طور مناسب بهنجار شده باشند، داریم

$$\int d\Omega Y_{l_1 m_1}(\theta, \phi)^* Y_{l_2 m_2}(\theta, \phi) \\ \equiv \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi Y_{l_1 m_1}(\theta, \phi)^* Y_{l_2 m_2}(\theta, \phi) = \delta_{l_1 l_2} \delta_{m_1 m_2} \quad (38-10)$$

## معادله شعاعی

اگر ۱۰-۳۴، ۱۰-۳۵ و ۱۰-۳۶ را در ۱۰-۳۳ بگذاریم، معادله شرودینگر شعاعی زیر را به دست می‌آوریم

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left( r \frac{d}{dr} \right) + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{Elm}(r) + V(r)R_{Elm}(r) = ER_{Elm} \quad (39-10)$$

توجه کنید که در این معادله وابستگی به  $m$  وجود ندارد. بنابراین، به‌ازای یک مقدار معین  $l$  همیشه یک واگنی  $(2l+1)$  تایی داریم، زیرا تمام مقادیر ممکن  $m$  دارای یک انرژی هستند. معادله ۱۰-۳۹

را، با حذف شاخص زائد  $m$  و نوشتن  $n$  به جای شاخص  $E$  در توابع شعاعی، می توان به صورت زیر درآورد

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) R_{nl}(r) - \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[ V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] R_{nl}(r) + \frac{2\mu E}{\hbar^2} R_{nl}(r) = 0 \quad (40-10)$$

جوابهای این معادله را برای انواعی از پتانسیل بررسی می کنیم که در بینهایت سریعتر از  $1/r$  به صفر میل می کنند، به استثنای مورد مهم پتانسیل کولنی که در فصل ۱۲ بیان خواهیم کرد. همچنین فرض می کنیم این پتانسیلها در مبدأ به اندازه  $1/r^2$  تکین نیستند، و در نتیجه

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^2 V(r) = 0 \quad (41-10)$$

گاهی بهتر است تابع زیر را وارد کنیم

$$u_{nl}(r) = r R_{nl}(r) \quad (42-10)$$

از آنجا که

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) \frac{u_{nl}(r)}{r} = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} u_{nl}(r) \quad (43-10)$$

به دست می آوریم

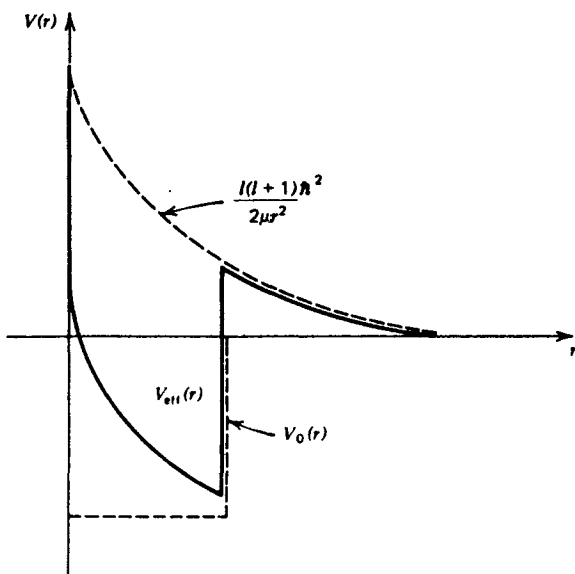
$$\frac{d^2 u_{nl}(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[ E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] u_{nl}(r) = 0 \quad (44-10)$$

این معادله شباهت بسیار زیادی با معادله یک بعدی دارد، بجز اینکه (الف) به پتانسیل  $V(r)$  یک سد دافعه مرکزگریزی اضافه شده است:

$$V(r) \rightarrow V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \quad (45-10)$$

(ب) تعریف  $u_{nl}(r)$  و متناهی بودن تابع موج در مبدأ ایجاب می کنند که

$$u_{nl}(0) = 0 \quad (46-10)$$



شکل ۱-۲ بتانسیل مؤثر در معادله شعاعی برای  $u = rR(r)$  وقتی بتانسیل واقعی یک چاه مستطیلی است.

که در نتیجه معادله بیشتر شبیه مسئله یک بعدی می شود که برای آن در ناحیه سمت چپ مبدأ  $V = +\infty$  (شکل ۱-۲).

ابتدا معادله شعاعی را، با حذف تمام شاخصهای پایین برای سادگی، در نزدیکی مبدأ در نظر می گیریم. وقتی  $r \rightarrow 0$ ، با نگر داشتن جمله های مهم، معادله شعاعی به صورت زیر درمی آید

$$\frac{d^2 u}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} u \simeq 0 \quad (47-10)$$

زیرا بتانسیل به ازای مقادیر به اندازه کافی کوچک  $r$  وقتی شرط ۱-۴ برقرار باشد سهمی ندارد. اگر حدس زیر را به کار ببریم

$$u(r) \sim r^s \quad (48-10)$$

می بینیم که معادله به شرطی صادق است که

$$s(s-1) - l(l+1) = 0 \quad (49-10)$$

یعنی  $s = l+1$  یا  $s = -l$ . جوابی که در شرط  $u(0) = 0$  صدق می کند، یعنی جوابی که مانند  $r^{l+1}$  رفتار می کند، جواب منظم نامیده می شود. جوابی که مانند  $r^{-l}$  رفتار می کند جواب

نامنظم است. برای تابع موج شعاعی  $R(r)$ ، جواب منظم به صورت  $r^l$  و جواب نامنظم به صورت  $r^{-l-1}$  است.

به ازای مقادیر بزرگ  $r$  می توان جمله های پتانسیل را حذف کرد، و معادله به صورت زیر در می آید

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2} u \simeq 0 \quad (50-10)$$

شرط انتگرال پذیری مجذوری ایجاب می کند که

$$\begin{aligned} 1 &= \int d^3 r |\psi(\mathbf{r})|^2 = \int_0^\infty r^2 dr \int d\Omega |R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 \\ &= \int_0^\infty r^2 dr |R_{nl}(r)|^2 \end{aligned} \quad (51-10)$$

یعنی

$$\int_0^\infty dr |u_{nl}(r)|^2 = 1 \quad (52-10)$$

بنابراین، تابع موج باید در بینهایت صفر شود. اگر  $E < 0$ ، و در نتیجه

$$\frac{2\mu E}{\hbar^2} = -\alpha^2 \quad (53-10)$$

جواب مجانبی به صورت زیر است

$$u(r) \sim e^{-\alpha r} \quad (54-10)$$

اگر  $E > 0$ ، جوابهایی که به دست می آوریم تنها در جعبه هنجارپذیر هستند (به بحث مربوط در فصل ۴ مراجعه کنید). با

$$\frac{2\mu E}{\hbar^2} = k^2 \quad (55-10)$$

جواب به ازای مقادیر به اندازه کافی بزرگ  $r$  به طوری که  $V(r)$  قابل چشمپوشی باشد به صورت ترکیبی خطی از  $e^{-ikr}$  و  $e^{ikr}$  است، و ترکیب مناسب از این شرط تعیین می شود که جواب مجانبی به طور پیوسته به جوابی که در مبدأ منظم است متصل شود. اکنون به بررسی چند مثال می پردازیم.

## ذره آزاد

در این مثال  $V(r) = 0$ ، اما هنوز هم یک سد مرکزگریزی وجود دارد. معادله شعاعی  $40-10$  به صورت زیر درمی آید

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) + k^2 R(r) = 0 \quad (56-10)$$

با معرفی متغیر  $\rho = kr$  به دست می آوریم

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} R + R = 0 \quad (57-10)$$

یا

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} u + u = 0$$

این معادله به ازای  $l = 0$  به صورت  $d^2 u/d\rho^2 + u = 0$  درمی آید که جوابهای آن  $\sin \rho$  و  $\cos \rho$  هستند، یعنی جواب منظم عبارت است از

$$R_0(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho} \quad (58-10)$$

و جواب نامنظم به صورت زیر است

$$R_0(\rho) = \frac{\cos \rho}{\rho} \quad (59-10)$$

به ازای مقادیر دیگر  $l$ ، جوابها را می توان برحسب توابع ساده ای بیان کرد. جواب منظم تابع بسلی کروی است که با رابطه زیر داده می شود

$$j_l(\rho) = (-\rho)^l \left( \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \left( \frac{\sin \rho}{\rho} \right) \quad (60-10)$$

و جواب نامنظم که تابع نویمان کروی نامیده می شود به صورت زیر است

$$n_l(\rho) = -(-\rho)^l \left( \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \left( \frac{\cos \rho}{\rho} \right) \quad (61-10)$$

از این توابع چند تای اول را در زیر می‌نویسیم

$$\begin{aligned}
 j_0(\rho) &= \frac{\sin \rho}{\rho} & n_0(\rho) &= -\frac{\cos \rho}{\rho} \\
 j_1(\rho) &= \frac{\sin \rho}{\rho^2} - \frac{\cos \rho}{\rho} & n_1(\rho) &= -\frac{\cos \rho}{\rho^2} - \frac{\sin \rho}{\rho} \\
 j_2(\rho) &= \left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho}\right) \sin \rho - \frac{3}{\rho^2} \cos \rho \\
 n_2(\rho) &= -\left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho}\right) \cos \rho - \frac{3}{\rho^2} \sin \rho
 \end{aligned} \tag{۶۲-۱۰}$$

ترکیبهای مناسب برای مقادیر بزرگ  $\rho$  عبارت‌اند از توابع هنکل کروی

$$h_1^{(1)}(\rho) = j_1(\rho) + i n_1(\rho) \tag{۶۳-۱۰}$$

و

$$h_l^{(1)}(\rho) = [h_1^{(1)}(\rho)]^l \tag{۶۴-۱۰}$$

چند تابع هنکل کروی را هم در زیر می‌نویسیم

$$\begin{aligned}
 h_0^{(1)}(\rho) &= \frac{e^{i\rho}}{i\rho} \\
 h_1^{(1)}(\rho) &= -\frac{e^{i\rho}}{\rho} \left(1 + \frac{i}{\rho}\right) \\
 h_2^{(1)}(\rho) &= \frac{i e^{i\rho}}{\rho} \left(1 + \frac{3i}{\rho} - \frac{3}{\rho^2}\right)
 \end{aligned} \tag{۶۵-۱۰}$$

موارد زیر مخصوصاً قابل توجه‌اند.

(الف) رفتار در نزدیکی مبدأ: به‌ازای  $\rho \ll l$  به‌دست می‌آوریم

$$j_l(\rho) \approx \frac{\rho^l}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdots (2l+1)} \tag{۶۶-۱۰}$$

و

$$n_l(\rho) \approx -\frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2l-1)}{\rho^{l+1}} \tag{۶۷-۱۰}$$

(ب) به ازای  $l \gg \rho$  رابطه‌های مجانبی زیر را به دست می‌آوریم

$$j_l(\rho) \simeq \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right) \quad (۶۸-۱۰)$$

و

$$n_l(\rho) \simeq -\frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right) \quad (۶۹-۱۰)$$

و در نتیجه

$$h_l^{(1)}(\rho) \simeq -\frac{i}{\rho} e^{i(\rho - l\pi/2)} \quad (۷۰-۱۰)$$

جوابی که در مبدأ منظم است به صورت زیر است

$$R_l(r) = j_l(kr) \quad (۷۱-۱۰)$$

و صورت مجانبی آن، با استفاده از ۶۸-۱۰، عبارت است از

$$R_l(r) \simeq -\frac{1}{\sqrt{ikr}} [e^{-i(kr - l\pi/2)} - e^{i(kr - l\pi/2)}] \quad (۷۲-۱۰)$$

### چاه پتانسیل نامتناهی

چاه پتانسیل نامتناهی سه بعدی زیر را در نظر بگیرید

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r < a \\ \infty & r > a \end{cases} \quad (۷۳-۱۰)$$

در این مورد، با

$$\frac{\hbar^2 \mu E}{\hbar^2} = k^2 \quad (۷۴-۱۰)$$

جوابی که در  $r = 0$  منظم است عبارت است از

$$R(r) = A j_l(kr) \quad (۷۵-۱۰)$$

و ویژه‌مقدارها از شرط صفر شدن جواب در  $r = a$  به دست می‌آیند، یعنی از

$$j_l(ka) = 0 \quad (76-10)$$

ریشه‌های این معادله به‌ازای چند مقدار  $l$  در جدول زیر نوشته شده‌اند

$l = 0$	۱	۲	۳	۴	۵
۳٫۱۴	۴٫۴۹	۵٫۷۶	۶٫۹۹	۸٫۱۸	۹٫۳۶
۶٫۲۸	۷٫۷۳	۹٫۱۰	۱۰٫۲۴		
۹٫۴۲					

از  $68-10$  نتیجه می‌گیریم که به‌ازای مقادیر بزرگ  $ka$  (در واقع  $ka \gg l$ ) این ریشه‌ها از  $ka \approx n\pi + l\pi/2$  به دست می‌آیند.

مجموعه کامل ویژه‌تابعهای همزمان  $H$ ،  $L^2$  و  $L_z$  عبارت‌اند از

$$u_{nl}(r) = A j_l(k_{nl}r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (77-10)$$

که در آن  $k_{nl}$ ها از  $j_l(k_{nl}a) = 0$  به دست می‌آیند، و  $A$  ضریب بهنجارش است. توجه کنید که به‌ازای هر یک از نامساویهای  $n \neq n'$  و  $l \neq l'$  داریم

$$\int d^3r u_{n'l'}(\mathbf{r}) u_{nl}(\mathbf{r}) = 0 \quad (78-10)$$

تعامل نسبت به اعداد کوانتومی  $l$  و  $m$  به  $Y_{lm}$ ها مربوط می‌شود. تعامل نسبت به عدد  $n$ ، که ویژه‌مقدارهای مختلف انرژی را به‌ازای مقادیر ثابت  $l$  و  $m$  متمایز می‌کند، نیز مسلماً باید وجود داشته باشد، و در واقع در بحث توابع بسل داریم

$$\int_0^1 dt j_l(\alpha_m t) j_l(\alpha_n t) = 0 \quad m \neq n \quad (79-10)$$

که در آن  $j_l(\alpha_n) = 0$ . این رابطه هم‌ارز رابطه تعامل توابع شعاعی مربوط به مقادیر مختلف عدد کوانتومی شعاعی  $n$  است.

طیف چاه مستطیلی نامتناهی را می‌توان به صورت زیر توصیف کرد: اگر به‌ازای یک مقدار معین  $l$ ، اولین ریشه را با  $n = 1$  نشانگذاری کنیم، دومین ریشه را با  $n = 2$ ، و غیره، و اگر از



نمادنگاری مرسوم طیف نمایی برای مقادیر مختلف  $l$  استفاده کنیم:

$$S : l = 0$$

$$P : l = 1$$

$$D : l = 2$$

$$F : l = 3$$

$$G : l = 4$$

آنگاه ترتیب ترازها به صورت زیر خواهد بود

$$1S; 1P; 1D; 2S; 1F; 2P; 1G; 2D; 1H; 3S; \dots$$

به عنوان یک الگو، هسته را متشکل از نوترونها و پروتونها در یک چاه نامتناهی می‌گیریم. چون نوترونها و پروتونها ذراتی با اسپین  $1/2$  یعنی فرمیون هستند، بیشتر از دو نوترون و بیشتر از دو پروتون نمی‌توانند یک حالت معین را اشغال کنند. اگر تنها پروتونها را در نظر بگیریم، می‌بینیم که در حالت  $1S$  تنها دو پروتون می‌توانند وجود داشته باشند. برای تراز بعدی ( $1D$ ) داریم  $l = 1$ ، و در نتیجه سه حالت (متناظر با سه مقدار ممکن  $m$ ) وجود دارند، و از این رو این تراز با شش پروتون پر می‌شود. برای تراز  $1D$ ، با پنج مقدار ممکن  $m$  (زیرا  $l = 2$ )، ده پروتون برای پر کردن این "پوسته" لازم‌اند. بدین ترتیب، ترازها وقتی پر می‌شوند که تعداد پروتونها برابر باشد با  $2, 8 (= 2 + 6), 18 (= 2 + 6 + 6), 20 (= 2 + 18), 32 (= 20 + 12), 40, 58, 90, 92, 106, \dots$  و همچنین است برای نوترونها. بررسی هسته‌های واقعی نشان می‌دهد که برای اعداد "جادویی"  $2, 8, 20, 28, 50, 82, 126, \dots$  هسته‌ها ویژگیهای خاصی از خود نشان می‌دهند که می‌توان آنها را به ترازهای پر، یعنی پوسته‌های بسته، نسبت داد. تفاوت میان اعداد "جادویی" واقعی و آنهایی که از الگوی ابتدایی بالا به دست می‌آیند ناشی از آن است که یک پتانسیل اضافی وابسته به اسپین وجود دارد و این پتانسیل ترازها را کم و بیش جابه‌جا می‌کند و از این رو ترتیب اعداد تغییر می‌کند. الگوی پوسته‌ای هسته، اگر به طور مناسب ساخته شود، بسیاری از خواص هسته‌ها را توضیح می‌دهد.

شاید اینکه در نظر گرفتن هسته‌ها به صورت ذرات مستقل در یک چاه تقریب خوبی به دست می‌دهد کمی اسرارآمیز به نظر برسد، چون می‌دانیم نیروهای بین نوکلئونها بسیار قوی هستند. توضیح در اصل طرد نهفته است. هسته‌ها در یک چاه از طریق برخورد با یکدیگر برهم‌کنش می‌کنند. یک برخورد به طور کلی باعث می‌شود که نوکلئون به حالت کوانتومی دیگری پراکنده شود. در حالت پایه،

پراکندگی صورت نمی‌گیرد زیرا تمام ترازهای پایین اشغال شده‌اند، و در نتیجه نمی‌توانند به‌عنوان حالت‌های نهایی قابل دسترسی به‌کار آیند.

در زیر مثال دیگری را بررسی می‌کنیم که مانستهٔ سه‌بعدی تراکسیل و بازتاب از چاهها یا سدهای یک‌بعدی است.

### جوابهای پیوستار برای چاه مربعی پتانسیل زیر را در نظر بگیرید

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r < a \\ 0 & r > a \end{cases} \quad (۸۰-۱۰)$$

بنابراین، معادلهٔ شعاعی به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2\mu}{\hbar^2} (V_0 + E) R = 0 \quad r < a \quad (۸۱-۱۰)$$

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2\mu E}{\hbar^2} R = 0 \quad r > a$$

جواب برای  $r > a$  ترکیبی از جوابهای منظم و نامنظم معادلهٔ بدون میدان است:

$$R_l(r) = B j_l(\kappa r) + C n_l(\kappa r) \quad (۸۲-۱۰)$$

در حالی‌که جواب برای  $r < a$  باید جواب منظم باشد، یعنی

$$R_l(r) = A j_l(\kappa r) \quad (۸۳-۱۰)$$

که در آن، مانند سابق،

$$\kappa^2 = \frac{2\mu(E + V_0)}{\hbar^2} \quad (۸۴-۱۰)$$

از جور کردن  $(1/R_l)dR_l/dr$  در  $r = a$  داریم

$$\kappa \left[ \frac{dj_l(\rho)/d\rho}{j_l(\rho)} \right]_{\rho=\kappa a} = k \left[ \frac{B dj_l/d\rho + C dn_l/d\rho}{B j_l(\rho) + C n_l(\rho)} \right]_{\rho=ka} \quad (۸۵-۱۰)$$

که از آن می‌توان  $C/B$  را به دست آورد. جواب مجانبی عبارت است از

$$\begin{aligned} R_{nl}(r) &\approx \frac{B}{\sqrt{kr}} (e^{i(kr-l\pi/2)} - e^{-i(kr-l\pi/2)}) \\ &\quad - \frac{C}{\sqrt{kr}} (e^{i(kr-l\pi/2)} + e^{-i(kr-l\pi/2)}) \quad (۸۶-۱۰) \\ &\approx \frac{-C + iB}{\sqrt{kr}} \left[ e^{-i(kr-l\pi/2)} + \frac{C + iB}{C - iB} e^{i(kr-l\pi/2)} \right] \end{aligned}$$

ضریب جلو کרוشه، غیر از وابستگی لازم  $l/r$ ، اهمیتی ندارد زیرا دامنه را شرط بهنجارش تعیین می‌کند. رابطه میان دو تابع نمایی دارای اهمیت فیزیکی است. قبل از هر چیز، متذکر می‌شویم که این دو جمله امواج کروی را نشان می‌دهند که یکی ورودی و دیگری خروجی است. در غیاب پتانسیل داریم  $C = 0$ ، و ضریب موج کروی خروجی  $l = 0$  می‌شود. در حضور پتانسیل، این ضریب دارای قدرمطلق  $l$  است، زیرا از  $۸۵-۱۰$  می‌توان دید که  $B/C$  حقیقی است. بنابراین،

$$\left| \frac{C + iB}{C - iB} \right|^2 = \frac{1 + iB/C}{1 - iB/C} \times \frac{1 - iB/C}{1 + iB/C} = 1 \quad (۸۷-۱۰)$$

این ضریب را بنابه قرارداد به صورت زیر می‌نویسیم

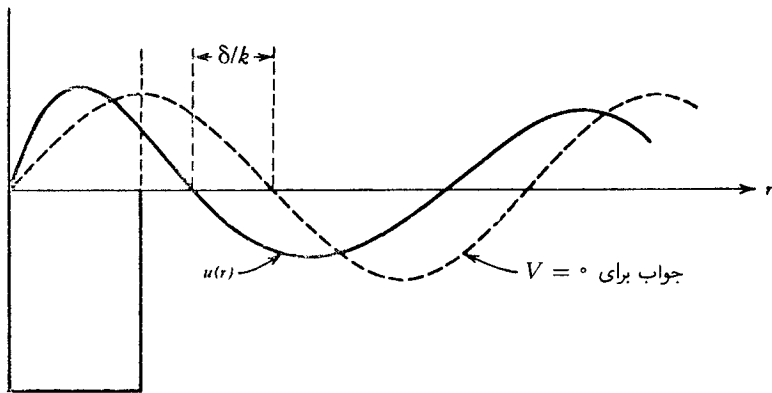
$$\frac{C + iB}{C - iB} \equiv -e^{2i\delta_l(k)} \quad (۸۸-۱۰)$$

(که معادل است با  $C/B = -\tan \delta_l(k)$ )، و در نتیجه صورت مجانبی جواب شعاعی  $R_{nl}(r)$  عبارت است از

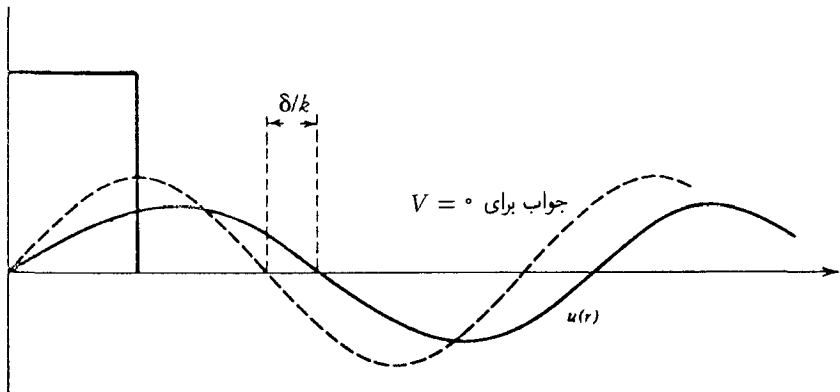
$$R_{nl}(r) \approx \frac{\text{const.}}{r} \sin \left( kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l(k) \right) \quad (۸۹-۱۰)$$

کمیت  $\delta_l(k)$  را به همین دلیل انتقال فاز می‌نامند. در واقع،  $۸۹-۱۰$  صورت مجانبی به‌ازای هر پتانسیل حقیقی است، زیرا مجذور قدرمطلق ضریب موج کروی ورودی باید با مجذور قدرمطلق ضریب موج خروجی برابر باشد. این همان بیان پایستگی شار است: برای یک پتانسیل حقیقی، ذرات نه به وجود می‌آیند و نه پتانسیل آنها را جذب می‌کند.

محاسبه  $C/B$  از  $۸۵-۱۰$  بجز برای  $l = 0$  عملاً پرزحمت است. همچون در مسئله حالت مقید، استفاده از  $u(r) = rR(r)$  محاسبه را تا حد زیادی ساده می‌کند. تنها کافی است  $A \sin kr + C$  را با  $B \sin kr + C$  در  $r = a$  جور کنیم تا رابطه‌ای برای  $\tan \delta$  به دست آید.



شکل ۳-۱° جواب بی‌ستار  $u(r) = rR(r)$  برای پتانسیل جاذبه (با  $l = 0$ ).



شکل ۴-۱° جواب بی‌ستار  $u(r) = rR(r)$  برای پتانسیل دافعه (با  $l = 0$ ).

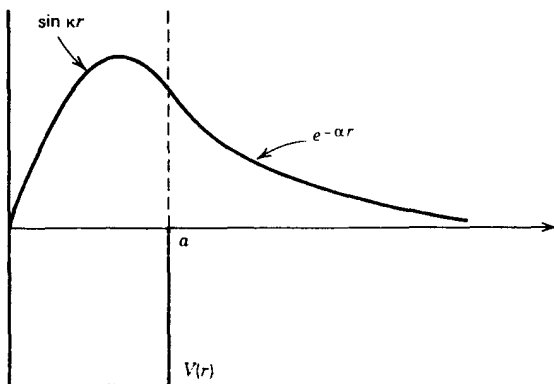
برای این مورد، نمودار کلی نتایج را در شکل‌های ۳-۱° و ۴-۱° ترسیم کرده‌ایم. این شکل‌ها نشان می‌دهند که پتانسیل جاذبه تمایل دارد تابع موج را "به درون بکشد"، در حالی که پتانسیل دافعه می‌خواهد آن را "به بیرون براند". در فصل ۴، در بحث نظریه برخورد، به این مطالب باز می‌گردیم.

## چاه مربعی، حالت‌های مقید

می‌خواهیم جواب‌های حالت مقید را، که برای آنها  $E < 0$ ، به دست آوریم. می‌نویسیم

$$\frac{\mu}{\hbar^2}(V_0 + E) = \kappa^2 \quad (90-10)$$

$$\frac{\mu}{\hbar^2}E = -\alpha^2$$



شکل ۵-۱۰ نمودار کلی تابع موج  $u(r) = rR(r)$  برای چاه مربعی جاذبه وقتی تنها یک حالت مقید وجود دارد (با  $l = 0$ ).

جواب در  $r < a$ ، که باید در مبدأ منظم باشد، عبارت است از

$$R(r) = A j_l(kr) \quad (91-10)$$

جواب در  $r > a$  باید به ازای  $r \rightarrow \infty$  صفر شود. معادله دوم ۸۱-۱۰ درست معادله مربوط به این تابع بسل کروی است بجز اینکه  $i\alpha$  به جای  $k$  می‌نشیند. جوابی که مانند  $e^{ikr}$  رفتار می‌کند اکنون نمایی نزولی می‌شود، یعنی برای  $r > a$  داریم

$$R(r) = B h_l^{(1)}(i\alpha r) \quad (92-10)$$

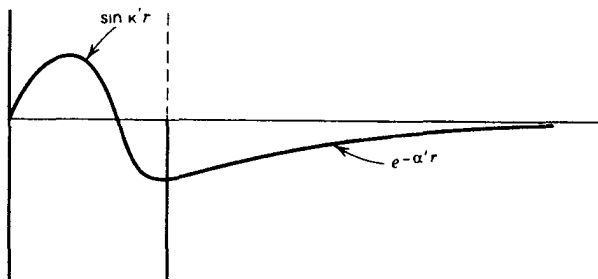
این دو جواب، و همچنین مشتقات آنها، باید در  $r = a$  جور شوند. بنابراین، شرط زیر را به دست می‌آوریم

$$\kappa \left[ \frac{dj_l(\rho)/d\rho}{j_l(\rho)} \right]_{\rho=\kappa a} = i\alpha \left[ \frac{dh_l^{(1)}(\rho)/d\rho}{h_l^{(1)}(\rho)} \right]_{\rho=i\alpha a} \quad (93-10)$$

این یک معادله غیرجبری بسیار پیچیده است که در آن  $l$ ،  $V_0$  و  $E$  دخیل اند. به ازای  $l = 0$  مسئله بسیار ساده می‌شود. برحسب  $u(r) = rR(r)$ ، باز هم به وضعیتی می‌رسیم که با پتانسیل یک بعدی با  $V(x) = \infty$  در  $x < 0$  یکسان است. از فصل ۵ (رابطه ۵-۶۹) می‌دانیم که در این مورد تنها به شرطی یک یا چند حالت مقید داریم که

$$\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} > \frac{\pi^2}{4}$$

شکلهای ۵-۱۰ و ۶-۱۰ توابع موج مربوط به دو حالت مقید اول را به ازای  $l = 0$  نشان می‌دهند.



شکل ۱۰-۶ نمودار کلی تابع موج  $u(r) = rR(r)$  برای چاه مربعی جاذبه وقتی دو حالت مقید وجود دارند (با  $l = 0$ ). در اینجا تنها تابع موج مربوط به دومین حالت مقید ترسیم شده است.

## مسائل

۱-۱۰ تحقیق کنید که  $P_i, R_i, p_i$  و  $r_i$  در روابط جابه جایی ۱-۷ صدق می کنند.  
 ۲-۱۰ فرض کنید دوترون (متشکل از یک نوترون و یک پروتون، با جرم مساوی) یک حالت مقید با  $l = 0$  است، و پتانسیل یک چاه مربعی به گستره  $10^{-12} \text{ cm} \times 8.2 = r_0$  است. اگر انرژی بستگی  $2.18 \text{ MeV} -$  باشد، عمق پتانسیل را به دست آورید.

[راهنمایی: حول انرژی بستگی صفر که برای آن  $V_0$  با  $5-41$  داده می شود بسط دهید].  
 ۳-۱۰ انتقال فاز  $l = 0$  را برای چاه پتانسیل مربعی محاسبه کنید. با استفاده از روشی که در ۱-۸۵ خلاصه شده است، مورد پتانسیل جاذبه و دافعه را به تفصیل بررسی کنید. درباره حدهای مختلف، مانند مقادیر بزرگ و کوچک  $E$ ، و مقادیر بزرگ و کوچک  $V_0$ ، بحث کنید.  
 ۴-۱۰ نشان دهید برای پراکندگی  $l = 0$  از یک چاه مستطیلی با گستره اختیاری و عمق  $V_0$  همواره می توان انتقال فاز را به صورت زیر نوشت

$$k \cot \delta_0 = -\frac{1}{a} + \frac{r_{\text{eff}} k^2}{2} + \dots (k^4)$$

رابطه ای برای  $a$  و  $r_{\text{eff}}$  برحسب پارامترهای چاه به دست آورید.  
 ۵-۱۰ یک پتانسیل با صورت اختیاری که به ازای  $r \geq a$  صفر می شود در نظر بگیرید. فرض کنید مشتق لگاریتمی تابع شعاعی در داخل چاه، یعنی

$$\frac{1}{R} \frac{dR(r)}{dr} \Big|_{r=a} = f_l(E)$$

برحسب انرژی به کنده تغییر می کند. برای  $l = 0$ :  
 (الف) اگر پتانسیل دارای حالت مقیدی با انرژی  $E_B$  باشد، مقدار  $f_0(E_B)$  را محاسبه کنید.

(ب) اگر  $f_0(E)$  مستقل از  $E$  باشد، انتقال فاز را برحسب انرژی به دست آورید.  
 (ج) اگر  $f_0(E) = f_0(E_B) + (E - E_B)f_0'$ ، چگونه در انتقال فاز وارد می شود؟  
 ساده تر این است که (ب) و (ج) را برحسب  $k \cot \delta_0(k)$  حل کنید، و این راه بهتری برای ارائه نتایج است.  
 ۶-۱۰ پتانسیل زیر را در نظر بگیرید

$$\begin{aligned} V(r) &= \infty & r < a \\ V(r) &= 0 & r > a \end{aligned}$$

انتقال فاز  $l = 0$  را محاسبه کنید، و آن را در حد مقادیر بسیار کوچک  $ka$  و همچنین در حد مقادیر بسیار بزرگ  $ka$  به دست آورید. توجه کنید که این پتانسیل الگویی برای کره نفوذناپذیر است.  
 ۷-۱۰ شرط ویژه مقدار مربوط به یک چاه پتانسیل مربعی به گستره  $a$  و عمق  $V_0$  را به ازای  $l = 1$  در نظر بگیرید. رابطه ای به دست آورید که از آن بتوانید مقدار  $V_0$  را برای انرژی بستگی صفر تعیین کنید.  
 ۸-۱۰ نشان دهید که برای چاه مربعی وقتی  $k \rightarrow 0$ ، داریم

$$k^{2l+1} \cot \delta_l(k) \rightarrow \text{const.}$$

۹-۱۰ شار سه بعدی با رابطه زیر داده می شود

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2im} [\psi^*(\mathbf{r}) \nabla \psi(\mathbf{r}) - \nabla \psi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r})]$$

انتگرال شار شعاعی روی تمام زاویه ها، یعنی  $\int d\Omega \mathbf{i}_r \cdot \mathbf{j}$ ، را برای توابع موج

$$\psi(\mathbf{r}) = C \frac{e^{\pm ikr}}{r} Y_{lm}(\theta, \phi)$$

با

$$\int d\Omega |Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 = 1$$

محاسبه کنید، و نشان دهید این توابع به امواج کروی ورودی و یا خروجی مربوط می شوند.  
 ۱۰-۱۰ نشان دهید شار در راستای سمتی،  $\mathbf{j} \cdot \mathbf{i}_\theta$ ، در مقیاسه با  $j_r$  به ازای مقادیر بسیار بزرگ  $r$  قابل چشمپوشی است.

۱۱-۱۰ معادله شعاعی  $l = 0$  را برای پتانسیل زیر (که پتانسیل مورس نامیده می شود) در نظر بگیرید

$$V(r) = V_0 [e^{-2(r-r_0)/a} - 2e^{-(r-r_0)/a}]$$

ویژه مقدارهای انرژی را با ساده کردن معادله دیفرانسیل به دست آورید. این کار را با وارد کردن متغیر جدید  $x = Ce^{-r/a}$  انجام دهید که در آن  $C$  چنان انتخاب می شود که معادله تا حد امکان ساده شود. سپس معادله را به روشی که برای مسئله نوسانگر هماهنگ ساده در فصل ۵ به کار برده شد بررسی کنید. پتانسیل را ترسیم کنید. نشان دهید برای پتانسیل عریض و عمیق حالت‌های مقید پایین تقریباً همان حالت‌های نوسانگر هماهنگ هستند، و علت را توضیح دهید.

### مراجع

خواص عمومی معادلات دیفرانسیل مرتبه دوم در زمینه مکانیک کوانتومی در کتاب زیر بررسی شده‌اند.  
پاول جی ل و ب کریسمن، مکانیک کوانتومی، ترجمه پاشایی راد و سعادت، تهران، مرکز نشر دانشگاهی، ۱۳۶۸.

بحث جامعی درباره این معادله‌ها را می‌توان در کتاب زیر ملاحظه کرد

P M Morse and H Feshbach, *Methods of Theoretical Physics*, McGraw-Hill, New York, 1953.



## تکانه زاویه‌ای

### عملگرهای تکانه زاویه‌ای در مختصات کروی

در این فصل ویژه‌مقدارها و ویژه‌تابعهای عملگرهای  $L_z$  و  $L^2$  را به دست می‌آوریم. چون تکانه زاویه‌ای دارای ابعاد  $\hbar$  است، می‌توان معادله‌های ویژه‌مقداری را به صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} L_z Y_{lm} &= m \hbar Y_{lm} \\ L^2 Y_{lm} &= l(l+1) \hbar^2 Y_{lm} \end{aligned} \quad (۱-۱۱)$$

که در آن  $m$  و  $l(l+1)$  اعداد حقیقی هستند. مناسب نوشتن ویژه‌مقدار  $L^2$  به این صورت خاص بعداً معلوم خواهد شد. چند روش برای محاسبه وجود دارند. روش مرسوم این است که مؤلفه‌های  $L$  را در مختصات کروی بنویسیم. داریم

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \phi \\ y &= r \sin \theta \sin \phi \\ z &= r \cos \theta \end{aligned} \quad (۲-۱۱)$$

در نتیجه

$$\begin{aligned} dx &= \sin \theta \cos \phi dr + r \cos \theta \cos \phi d\theta - r \sin \theta \sin \phi d\phi \\ dy &= \sin \theta \sin \phi dr + r \cos \theta \sin \phi d\theta + r \sin \theta \cos \phi d\phi \quad (3-11) \\ dz &= \cos \theta dr - r \sin \theta d\theta \end{aligned}$$

که از حل آنها به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} dr &= \sin \theta \cos \phi dx + \sin \theta \sin \phi dy + \cos \theta dz \\ d\theta &= \frac{1}{r} (\cos \theta \cos \phi dx + \cos \theta \sin \phi dy - \sin \theta dz) \quad (4-11) \\ d\phi &= \frac{1}{r \sin \theta} (-\sin \phi dx + \cos \phi dy) \end{aligned}$$

با استفاده از این معادله‌ها نتیجه می‌گیریم که

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ &= \sin \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \phi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \sin \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \phi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ \frac{\partial}{\partial z} &= \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \end{aligned} \quad (5-11)$$

بنابراین،

$$L_z = \frac{h}{i} \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = \frac{h}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (6-11)$$

با معرفی عملگرهای زیر می‌توان دو مؤلفه دیگر تکانه زاویه‌ای را فشرده‌تر بیان کرد

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y \quad (7-11)$$

در مختصات دکارتی و کروی داریم

$$\begin{aligned}
 L_{\pm} &= \frac{h}{i} \left[ y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \pm i \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \right] \\
 &= \frac{h}{i} \left[ \pm iz \left( \frac{\partial}{\partial x} \pm i \frac{\partial}{\partial y} \right) \mp i(x \pm iy) \frac{\partial}{\partial z} \right] \quad (۸-۱۱) \\
 &= \pm hr \cos \theta \left( \sin \theta e^{\pm i\phi} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta e^{\pm i\phi} \frac{\partial}{\partial \theta} \pm \frac{i e^{\pm i\phi}}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\
 &\quad \mp hr \sin \theta e^{\pm i\phi} \left( \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right)
 \end{aligned}$$

بنابراین،

$$L_{\pm} = h e^{\pm i\phi} \left( \pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (۹-۱۱)$$

اکنون با استفاده از رابطه

$$\begin{aligned}
 L_+ L_- &= (L_x + iL_y)(L_x - iL_y) \\
 &= L_x^2 + L_y^2 - i[L_x, L_y] \quad (۱۰-۱۱)
 \end{aligned}$$

عملگر  $L^2$  را به صورت زیر به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}
 L^2 &= L_z^2 + L_+ L_- + i[L_x, L_y] \\
 &= L_+ L_- + L_z^2 - hL_z \quad (۱۱-۱۱)
 \end{aligned}$$

در سطر دوم از ۱۰-۲۴ استفاده کرده‌ایم. بدین ترتیب، یک عملگر دیفرانسیلی مرتبه دوم شامل  $\theta$  و  $\phi$  به دست می‌آید، و اکنون می‌توانیم به حل معادله‌های دیفرانسیلی مربوط به ۱۱-۱ بپردازیم. حل این معادله‌ها در بسیاری از کتابهای درسی مکانیک کوانتومی یا الکتروپدینامیک کلاسیک بیان می‌شود. در اینجا معادله دوم ۱۱-۱ را به روش جبری حل می‌کنیم، اما قبل از آن ویژه‌تابعهای  $L_z$  را به دست می‌آوریم.

## ویژه‌تابعها و ویژه‌مقدارهای $L_z$

معادله ویژه‌مقداری

$$L_z Y_{lm} = m\hbar Y_{lm} \quad (۱۲-۱۱)$$

با استفاده از ۱۱-۶ به صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{\partial}{\partial \phi} Y_{lm}(\theta, \phi) = im Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (۱۳-۱۱)$$

و در نتیجه جواب به صورت  $Y_{lm}(\theta, \phi) = \Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\phi)$  است، که در آن  $\Phi_m(\phi)$  جواب معادله زیر است

$$\frac{d\Phi_m(\phi)}{d\phi} = im\Phi_m(\phi) \quad (۱۴-۱۱)$$

این جواب با شرط بهنجارش

$$\int_0^{2\pi} d\phi |\Phi_m|^2 = 1 \quad (۱۵-۱۱)$$

عبارت است از

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \quad (۱۶-۱۱)$$

گاهی گفته می‌شود که چون چرخش  $360^\circ$  درجه‌ای، یعنی تبدیل  $\phi \rightarrow \phi + 2\pi$ ، نباید تغییری در دستگاه ایجاد کند لازم است که

$$e^{2\pi im} = 1 \quad (۱۷-۱۱)$$

و در نتیجه  $m$  یک عدد درست است. این استدلال کاملاً صحیح نیست، زیرا کمیت‌هایی که در مشاهده‌پذیرهای فیزیکی وارد می‌شوند از نوع  $A\psi(\phi) = \psi^*(\phi)$  هستند که در آن توابع موج  $\psi(\phi)$  به صورت زیر بیان می‌شوند

$$\psi(\phi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} C_m \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}} \quad (۱۸-۱۱)$$

اگر بخواهیم این توابع موج اختیاری تحت تبدیل  $\phi \rightarrow \phi + 2\pi$  تغییر نکنند (بجز برای یک عامل فاز کلی) به این نتیجه می‌رسیم که کلی‌ترین مقادیر مجاز  $m$  عبارت‌اند از  $m = \text{عدد درست} + c$ ، که  $c$  در اینجا یک مقدار ثابت است. تنها اگر عملگر  $L_z$  را بخشی از کل مجموعه  $(L_x, L_y, L_z)$  در نظر بگیریم می‌توان چیزی دربارهٔ ثابت  $c$  گفت. بعداً استدلال خواهیم کرد که ویژه‌مقدارها حول صفر به صورت متقارن توزیع شده‌اند، و در نتیجه  $c = 0$  یا  $c = 1/2$ ، و برای عملگرهای این فصل تنها مقدار  $c = 0$ ، یعنی این شرط که  $m$  یک عدد درست است، را می‌پذیریم. معادلهٔ ویژه‌مقداری  $L_z$  در زمینهٔ دیگری نیز ظاهر می‌شود. یک چرخندهٔ کلاسیک را در نظر بگیرید که در صفحهٔ  $xy$  می‌چرخد. اگر گشتاور لختی  $I$  باشد، انرژی آن برابر است با

$$E = \frac{L_z^2}{2I} \quad (11-19)$$

و در نتیجه هامیلتونی عبارت است از

$$H = \frac{L_z^2}{2I} \quad (11-20)$$

اما به آسانی می‌توان دید که ویژه‌مقدارهای این هامیلتونی به صورت زیر هستند

$$E_m = \frac{h^2 m^2}{2I} \quad (11-21)$$

ویژه‌تابعها عبارت‌اند از  $e^{\pm im\phi}$ . واگنی وجود دارد، زیرا  $H$  با  $L_z$  جابه‌جا می‌شود، و به‌ازای یک مقدار معین  $E_m$  دو ویژه‌تابع متناظر با دو جهت چرخش وجود دارند. اگر  $N$  ذره را با فاصله‌های زاویه‌ای مساوی  $2\pi/N$  روی یک دایره به‌طور صلب مستقر کنیم، و اگر این ذرات یکسان باشند، جواب معادلهٔ ویژه‌مقداری انرژی

$$H\Phi_E(\phi) = E\Phi_E(\phi) \quad (11-22)$$

باز هم به صورت  $e^{\pm i\lambda\phi}$  خواهد بود. این دستگاه فیزیکی تحت چرخش  $2\pi/N$  رادبان (یا مضرب درستی از این زاویه) بدون تغییر می‌ماند، و جوابها باید حاکی از این ناوردایی باشند. همان نوع استدلالهایی که نشان می‌دهند  $m$  باید یک عدد درست باشد اکنون ایجاب می‌کنند که (عدد درست)  $\lambda = N \times$ . بنابراین، انرژی برابر است با

$$E = \frac{h^2 (Nm)^2}{2I} \quad (11-23)$$

## عملگرهای افزایشنده و کاهشنده برای تکانه زاویه‌ای

اکنون به معادله‌های ۱-۱۱ بازمی‌گردیم، و می‌خواهیم ویژه‌مقدارها را به روشی شبیه به مورد نوسانگر هماهنگ در فصل ۷ به دست آوریم. ویژه‌تابعهای عملگرهای هرمیتی  $L_x$  و  $L_z$ ، مربوط به ویژه‌مقدارهای مختلف، متعامد هستند، و با بهنجارش مناسب می‌نویسیم

$$\langle Y_{l'm'} | Y_{lm} \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (24-11)$$

از آنجا که

$$\begin{aligned} \langle Y_{lm} | (L_x^\dagger + L_y^\dagger + L_z^\dagger) Y_{lm} \rangle &= \langle L_x Y_{lm} | L_x Y_{lm} \rangle + \langle L_y Y_{lm} | L_y Y_{lm} \rangle + m^2 \hbar^2 \\ &\geq 0 \end{aligned} \quad (25-11)$$

نتیجه می‌گیریم که

$$l(l+1) \geq 0 \quad (26-11)$$

عملگرهای  $L_{\pm}$  که در ۷-۱۱ معرفی شدند در تحلیل زیر بسیار مفیدند، و خواهیم دید که در واقع عملگرهای افزایشنده و کاهشنده هستند. قبلاً دیدیم که

$$\mathbf{L}^2 = L_+ L_- + L_z^2 - \hbar L_z \quad (27-11)$$

و می‌توان نشان داد که

$$\mathbf{L}^2 = L_- L_+ + L_z^2 + \hbar L_z \quad (28-11)$$

از این دو رابطه، و همچنین مستقیماً از ۲۴-۱۰، به دست می‌آوریم

$$[L_+, L_-] = 2\hbar L_z \quad (29-11)$$

سایر رابطه‌های جابه‌جایی مربوط عبارت‌اند از

$$\begin{aligned} [L_+, L_z] &= [L_x + iL_y, L_z] = -i\hbar L_y - \hbar L_x \\ &= -\hbar L_+ \end{aligned} \quad (30-11)$$

$$[L_-, L_z] = \hbar L_- \quad (۳۱-۱۱)$$

همچنین، با توجه به  $[\mathbf{L}^2, \mathbf{L}] = 0$  نتیجه می‌گیریم که

$$\begin{aligned} [\mathbf{L}^2, L_{\pm}] &= 0 \\ [\mathbf{L}^2, L_z] &= 0 \end{aligned} \quad (۳۲-۱۱)$$

بنابراین، می‌توان نوشت

$$\mathbf{L}^2 L_{\pm} Y_{lm} = L_{\pm} \mathbf{L}^2 Y_{lm} = l(l+1)\hbar^2 L_{\pm} Y_{lm} \quad (۳۳-۱۱)$$

و این نشان می‌دهد که  $L_{\pm} Y_{lm}$  نیز ویژه‌تابعهای  $\mathbf{L}^2$  با ویژه‌مقداری هستند که با  $l$  مشخص می‌شود. از طرف دیگر، داریم

$$\begin{aligned} L_z L_+ Y_{lm} &= (L_+ L_z + \hbar L_+) Y_{lm} \\ &= m\hbar L_+ Y_{lm} + \hbar L_+ Y_{lm} \\ &= \hbar(m+1) L_+ Y_{lm} \end{aligned} \quad (۳۴-۱۱)$$

بنابراین،  $L_+ Y_{lm}$  نیز ویژه‌تابع  $L_z$  با ویژه‌مقدار  $\hbar(m+1)$  است، یعنی به  $m$  یک واحد افزوده شده است. به همین ترتیب، می‌توان نشان داد

$$L_z L_- Y_{lm} = \hbar(m-1) L_- Y_{lm} \quad (۳۵-۱۱)$$

پس  $L_- Y_{lm}$  ویژه‌تابع  $L_z$  است در حالی که از  $m$  یک واحد کاسته شده است. از این رو،  $L_+$  و  $L_-$  را به ترتیب عملگرهای افزایشنده و کاهشنده می‌نامیم. می‌توان نوشت

$$L_{\pm} Y_{lm} = C_{\pm}(l, m) Y_{l, m \pm 1} \quad (۳۶-۱۱)$$

با توجه به هرمیتی بودن  $L_x$  و  $L_y$  داریم

$$L_{\pm}^{\dagger} = (L_x \pm iL_y)^{\dagger} = L_x \mp iL_y = L_{\mp} \quad (۳۷-۱۱)$$

بنابراین، می‌توان رابطه

$$\langle L_{\pm} Y_{lm} | L_{\pm} Y_{lm} \rangle \geq 0 \quad (38-11)$$

را به صورت زیر نوشت

$$\langle Y_{lm} | L_{\mp} L_{\pm} Y_{lm} \rangle \geq 0 \quad (39-11)$$

و در نتیجه با استفاده از ۲۷-۱۱ و ۲۸-۱۱ به دست می‌آوریم

$$\langle Y_{lm} | (L^2 - L_z^2 \pm \hbar L_z) Y_{lm} \rangle \geq 0 \quad (40-11)$$

که نشان می‌دهد

$$l(l+1) \geq m^2 + m \quad (41-11)$$

$$l(l+1) \geq m^2 - m$$

چون  $l(l+1) \geq 0$ ، می‌توانیم بدون نقض کلیت قرار دهیم  $l \geq 0$ . بنابراین، از ۴۱-۱۱ نتیجه می‌گیریم که

$$-l \leq m \leq l \quad (42-11)$$

اگر  $m$  یک مقدار کمینه ( $m_-$ ) داشته باشد، آنگاه برای ویژه‌حالت مربوط داریم

$$L_- Y_{lm_-} = 0 \quad (43-11)$$

برای محاسبه  $m_-$ ، ۲۷-۱۱ را بر  $Y_{lm}$  اعمال می‌کنیم و به دست می‌آوریم

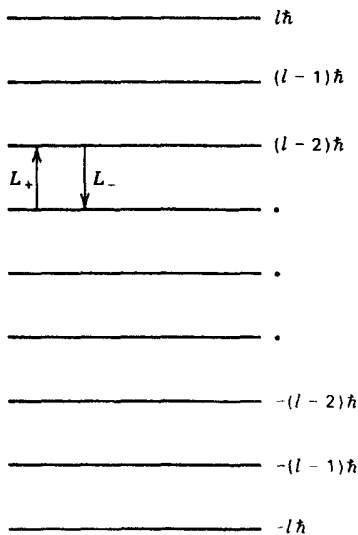
$$l(l+1)\hbar^2 = m_-^2 \hbar^2 - m_- \hbar^2 \quad (44-11)$$

به همین ترتیب، اگر  $m$  بیشینه‌ای داشته باشد ( $m_+$ ) باید

$$L_+ Y_{lm_+} = 0 \quad (45-11)$$

۲. اگر  $l+1 \geq 0$  را بگیریم کافی است تعریف کنیم  $L = -l-1$  و به جای  $l$  قدیمی  $L$  مثبت جدید را قرار دهیم. چیزی تغییر نمی‌کند زیرا  $l(l+1) = L(L+1)$ .





شکل ۱۱-۱ طیف عملگر  $L_z$  برای یک مقدار معین  $l$ .

و از اعمال ۱۱-۲۸ بر  $Y_{lm+}$  به دست می‌آوریم

$$l(l+1)\hbar^2 = m_+^2 \hbar^2 + m_+ \hbar^2 \quad (۴۶-۱۱)$$

در نتیجه

$$m_- = -l \quad (۴۷-۱۱)$$

$$m_+ = +l$$

چون مقدار بیشینه باید از مقدار کمینه با گامهای واحد (اعمال مکرر  $L_+$ ) به دست آید، معلوم می‌شود که (شکل ۱۱-۱): (الف) به ازای یک  $l$  معین  $(2l+1)$  حالت وجود دارند، یعنی  $2l+1$  یک عدد درست است. و (ب)  $m$  می‌تواند مقادیر زیر را بگیرد

$$m = -l, -l+1, -l+2, \dots, l-1, l$$

امکان نیم فرد بودن  $l$ ، یعنی  $l = 1/2, 3/2, \dots$  را در فصل ۱۴ در بحث اسپین بررسی می‌کنیم. در این فصل تنها مقادیر درست  $l$  را در نظر می‌گیریم.

همچنین می‌توان ضرایب  $C_{\pm}(l, m)$  را که در ۱۱-۳۶ وارد می‌شوند محاسبه کرد. می‌نویسیم

$$\begin{aligned} |C_{\pm}(l, m)|^2 \langle Y_{l, m \pm 1} | Y_{l, m \pm 1} \rangle &= \langle L_{\pm} Y_{lm} | L_{\pm} Y_{lm} \rangle \\ &= \langle Y_{lm} | L_{\mp} L_{\pm} Y_{lm} \rangle \\ &= \langle Y_{lm} | \mathbf{L}^2 - L_z^2 \mp \hbar L_z \rangle Y_{lm} \\ &= \hbar^2 [l(l+1) - m(m \pm 1)] \end{aligned}$$

بنابراین، با انتخاب فاز مناسب، به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} C_+(l, m) &= \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} = \hbar \sqrt{(l-m)(l+m+1)} \\ C_-(l, m) &= \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} = \hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)} \end{aligned} \quad (48-11)$$

## هماهنگهای کروی

آنچه را می‌توان از روشهای عملگری به‌دست آورد در بالا گفتیم. اکنون با استفاده از صورت صریح عملگرهای  $L_z$  و  $L_{\pm}$  رابطه‌های مربوط به ویژه‌تابعهای  $\mathbf{L}^2$  را برحسب زاویه‌های  $\theta$  و  $\phi$  به‌دست می‌آوریم. این مشابه با مورد ۷-۵۰ تا ۷-۵۳ است. بنابه آنچه قبلاً گفتیم، می‌نویسیم

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \Theta_{lm}(\theta) e^{im\phi} \quad (49-11)$$

و رابطه ۱۱-۴۵ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\hbar e^{i\phi} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \Theta_{lm}(\theta) e^{im\phi} = \hbar e^{i(l+1)\phi} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} - l \cot \theta \right) \Theta_{lm}(\theta) = 0 \quad (50-11)$$

به‌سادگی می‌توان دید که جواب این معادله، با تقریب یک ضریب ثابت که آنرا بعداً از شرط بهنجارش به‌دست می‌آوریم، عبارت است از

$$\Theta_{lm}(\theta) = (\sin \theta)^l \quad (51-11)$$

هر حالت اختیاری را می‌توان با اعمال عملگر کاهنده به‌دست آورد:

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = C(L_-)^{l-m} (\sin \theta)^l e^{il\phi} \quad (52-11)$$

ابتدا می‌نویسیم

$$\begin{aligned} L_- Y_{lm}(\theta, \phi) &= h e^{-i\phi} \left( -\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) (\sin \theta)^l e^{il\phi} \\ &= h e^{i(l-1)\phi} \left( -\frac{\partial}{\partial \theta} - l \cot \theta \right) (\sin \theta)^l \end{aligned}$$

اما برای یک تابع اختیاری  $f(\theta)$  می‌توان نشان داد

$$\left( \frac{d}{d\theta} + l \cot \theta \right) f(\theta) = \frac{1}{(\sin \theta)^l} \frac{d}{d\theta} [(\sin \theta)^l f(\theta)] \quad (53-11)$$

و در نتیجه داریم

$$Y_{l,l-1} = C' \frac{e^{i(l-1)\phi}}{(\sin \theta)^l} \left( -\frac{d}{d\theta} \right) [(\sin \theta)^l (\sin \theta)^l] \quad (54-11)$$

مرحله بعد نیز از همین قرار است، بجز اینکه به‌جای  $l$  می‌گذاریم  $l-1$  و  $53-11$  را بر  $54-11$  اعمال می‌کنیم:

$$\begin{aligned} Y_{l,l-2} &= C''' \frac{e^{i(l-2)\phi}}{(\sin \theta)^{l-1}} \left( -\frac{d}{d\theta} \right) \left[ (\sin \theta)^{l-1} \frac{1}{(\sin \theta)^l} \left( -\frac{d}{d\theta} \right) (\sin \theta)^{2l} \right] \\ &= C''' (-1)^2 \frac{e^{i(l-2)\phi}}{(\sin \theta)^{l-1}} \frac{d}{d\theta} \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} (\sin \theta)^{2l} \right] \end{aligned} \quad (55-11)$$

با وارد کردن متغیر جدید  $u = \cos \theta$  داریم  $u = \cos \theta$  و  $-(1/\sin \theta)(d/d\theta) = d/du$  و رابطه‌های  $54-11$  و  $55-11$  به‌صورت زیر درمی‌آیند

$$Y_{l,l-1} = C'' \frac{e^{i(l-1)\phi}}{(\sin \theta)^{l-1}} \frac{d}{du} [(\lambda - u^2)^l] \quad (56-11)$$

$$Y_{l,l-2} = C''' \frac{e^{i(l-2)\phi}}{(\sin \theta)^{l-2}} \frac{d^2}{du^2} [(\lambda - u^2)^l]$$

رابطه کلی عبارت است از

$$Y_{lm} = C \frac{e^{im\phi}}{(\sin \theta)^m} \left( \frac{d}{du} \right)^{l-m} [(\lambda - u^2)^l] \quad (57-11)$$

ویژه تابعها را باید بهنجار کنیم. چون با زاویه های کروی کار می کنیم، که گستره انتگرال گیری روی آنها  $0 \leq \theta \leq \pi$  و  $0 \leq \phi \leq 2\pi$  است (شکل ۱-۱۰)، و در اینجا انتگرال روی سطح کره (با  $r = \text{const.}$ ) عبارت است از

$$\int d\Omega = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \quad (58-11)$$

باید بنویسیم

$$\langle Y_{lm} | Y_{lm} \rangle = 1 = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 du |C|^2 \left[ \frac{1}{(\lambda - u^2)^{m/2}} \left( \frac{d}{du} \right)^{l-m} (\lambda - u^2)^l \right]^2$$

محاسبه این انتگرال پرزحمت است، و به نوشتن ویژه تابعهای بهنجار شده، با فازهایی که بنا به قرارداد به کار می روند، بسنده می کنیم: به ازای  $m \geq 0$  داریم

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = (-1)^m \left[ \frac{2l+l}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{1/2} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (59-11)$$

علاوه بر این،

$$Y_{l,-m} = (-1)^m Y_{lm}^* \quad (60-11)$$

چند جمله ایهای لژاندر وابسته (به ازای  $m \geq 0$ ) با رابطه زیر داده می شوند

$$P_l^m(u) = (-1)^{l+m} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \frac{(\lambda - u^2)^{-m/2}}{2^l l!} \left( \frac{d}{du} \right)^{l-m} (\lambda - u^2)^l \quad (61-11)$$

و برای مقادیر منفی  $m$  داریم

$$P_l^{-m}(u) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(u) \quad (62-11)$$

به‌ازای  $m = l$  (یا  $m = -l$ )، به‌دست می‌آوریم

$$Y_{ll}(\theta, \phi) = K (\sin \theta)^l e^{il\phi}$$

که در آن  $K$  مقداری ثابت است. بنابراین، توزیع احتمال برحسب زاویه قطبی نسبت به محور  $z$  به‌صورت زیر است

$$|Y_{ll}|^2 = K^2 (\sin \theta)^{2l} \quad (۶۳-۱۱)$$

مشاهده می‌کنیم که برای مقادیر بزرگ  $l$  این تابع تقریباً به صفحه استوایی محدود است. در واقع، بیشترین مقدار  $L_z$  به‌ازای  $m = l$  روی می‌دهد، و از این‌رو  $L_z^2 \approx L^2$ . در حد کلاسیک، که در آن  $l \gg 1$  داریم

$$\frac{L^2 - L_z^2}{L^2} = \frac{1}{l} \rightarrow 0 \quad (۶۴-۱۱)$$

یعنی می‌توان تکانه زاویه‌ای را در یک راستای خاص (در اینجا محور  $z$ ) قرار داد. این هم‌راستایی متناظر است با اینکه  $\langle L_x^2 \rangle = \langle L_y^2 \rangle = 0$ ، که وقتی اثرات مکانیک کوانتومی مهم می‌شوند غیرممکن است (به‌علت رابطه‌های جابه‌جایی).

چند ویژه‌تابع را در زیر می‌نویسیم

$$\begin{aligned} Y_{0,0} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ Y_{1,1} &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{i\phi} \sin \theta \\ Y_{1,0} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\ Y_{2,2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} e^{2i\phi} \sin^2 \theta \\ Y_{2,1} &= -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} e^{i\phi} \sin \theta \cos \theta \\ Y_{2,0} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) \end{aligned} \quad (۶۵-۱۱)$$

### قضیه بسط

$Y_{lm}(\theta, \phi)$  ها که توابع راست‌هنجاری از  $\theta$  و  $\phi$  هستند یک مجموعه کامل تشکیل می‌دهند. بنابراین، در اینجا قضیه بسط ایجاب می‌کند که هر تابعی از  $\theta$  و  $\phi$  را بتوان به صورت زیر بسط داد

$$f(\theta, \phi) = \sum_l \sum_m C_{lm} Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (۶۶-۱۱)$$

که در آن

$$C_{lm} = \int d\Omega Y_{lm}^*(\theta, \phi) f(\theta, \phi) \quad (۶۷-۱۱)$$

و انتگرال‌گیری روی زاویه فضایی با ۵۸-۱۱ تعریف می‌شود. همچنین بنابه قضیه بسط اگر  $f(\theta, \phi)$  تابع موج زاویه‌ای یک حالت باشد که به صورت زیر بهنجار شده است

$$\int d\Omega |f(\theta, \phi)|^2 = 1 \quad (۶۸-۱۱)$$

آنگاه  $|C_{lm}|^2$  احتمال این است که از اندازه‌گیری همزمان  $L_z$  و  $L^2$  در این حالت به ترتیب  $mh$  و  $l(l+1)\hbar^2$  به دست آید.

احتمال به دست آمدن  $l(l+1)\hbar^2$  از اندازه‌گیری  $L^2$  عبارت است از

$$P(l) = \sum_{m=-l}^l |C_{lm}|^2 \quad (۶۹-۱۱)$$

و به سادگی می‌توان دید که مقدار انتظاری  $L_z$  برابر است با

$$\langle L_z \rangle = \sum_l \sum_{m=-l}^l mh |C_{lm}|^2 \quad (۷۰-۱۱)$$

قضیه بسط ۶۶-۱۱ را با نمادنگاری مجرد زیر در نظر بگیرید

$$|\psi\rangle = \sum_{l,m} C_{lm} |Y_{lm}\rangle \quad (۷۱-۱۱)$$

با توجه به شرط راست‌هنجاری

$$\langle Y_{l'm'} | Y_{lm} \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (۷۲-۱۱)$$

به دست می‌آوریم

$$C_{lm} = \langle Y_{lm} | \psi \rangle \quad (۷۳-۱۱)$$

۷۱-۱۱ با جاگذاری ۷۳-۱۱ به صورت زیر درمی‌آید

$$|\psi\rangle = \sum_l \sum_{m=-l}^l |Y_{lm}\rangle \langle Y_{lm} | \psi \rangle$$

بنابراین، باید

$$\sum_l \sum_{m=-l}^l |Y_{lm}\rangle \langle Y_{lm}| = ۱ \quad (۷۴-۱۱)$$

که در آن ۱ عملگر واحد است.

با استفاده از قضیه بسط می‌توان به این پرسش که اغلب مطرح می‌شود پاسخ داد: راستای  $\hat{z}$  چه ویژگی خاصی دارد؟ آیا نمی‌توان تکانه زاویه‌ای را (تا جایی که ممکن است) با محور  $\hat{x}$  همراستا کرد؟ پاسخ این است که این کار واقعاً امکانپذیر است. چنین حالتی، که باید در نزدیکی صفحه استوایی حول محور  $\hat{x}$  (در مجاورت  $\phi = \pi/2$ ) محدود باشد، یک ترکیب خطی خاص از  $Y_{lm}$ ها خواهد بود، و خواص فیزیکی آن دقیقاً همان خواص حالت  $Y_{ll}$  است.

### موج تخت برحسب هماهنگهای کروی

جواب معادله ذره آزاد

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + k^2 \psi(\mathbf{r}) = 0$$

را می‌توان به دو صورت نوشت. یک صورت این جواب همان جواب موج تخت است:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (۷۵-۱۱)$$

راه دیگر این است که آن را به صورت یک برهم‌نهی خطی از جوابهای پاره‌موجی بنویسیم:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_l \sum_{m=-l}^l A_{lm} j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (۷۶-۱۱)$$

بنابراین، می‌توان  $A_{lm}$  را از مساوی قرار دادن ۷۵-۱۱ و ۷۶-۱۱ به دست آورد. توجه کنید که زاویه‌های کروی  $\theta$  و  $\phi$  مختصات بردار  $\mathbf{r}$  نسبت به یک راستای اختیاری هستند که آن را محور  $z$  می‌گیریم. اگر این محور  $z$  را با جهت  $\mathbf{k}$  (که تا اینجا یک جهت اختیاری است) تعریف کنیم آنگاه می‌توان نوشت

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = e^{ikr \cos \theta} \quad (۷۷-۱۱)$$

بنابراین، سمت چپ ۷۶-۱۱ تابع زاویه سمتی  $\phi$  نیست و از این رو در سمت راست تنها جمله‌هایی با  $m = 0$  می‌توانند ظاهر شوند؛ در نتیجه، با استفاده از

$$Y_{l0}(\theta, \phi) = \left(\frac{2l+1}{4\pi}\right)^{1/2} P_l(\cos \theta) \quad (۷۸-۱۱)$$

که در آن  $P_l(\cos \theta)$  چندجمله‌ای لژاندر است، به دست می‌آوریم

$$e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{2l+1}{4\pi}\right)^{1/2} A_l j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (۷۹-۱۱)$$

با توجه به رابطه

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) = \frac{\delta_{ll'}}{2l+1} \quad (۸۰-۱۱)$$

که پیامد مستقیم رابطه راست‌هنجاری برای  $Y_{lm}$  ها و ۷۸-۱۱ است، نتیجه می‌گیریم که

$$A_l j_l(kr) = \frac{1}{2} [4\pi(2l+1)]^{1/2} \int_{-1}^1 dz P_l(z) e^{ikrz} \quad (\text{الف } ۸۱-۱۱)$$

دو طرف این معادله را در حد  $kr \rightarrow 0$  با هم مقایسه می‌کنیم. جمله طرف چپ عبارت است از

$$A_l \frac{(kr)^l}{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \dots \cdot (2l+1)}$$

و در طرف راست، جمله شامل  $(kr)^l$  به صورت زیر است

$$\frac{1}{2} [4\pi(2l+1)]^{1/2} (ikr)^l \int_{-1}^1 dz P_l(z) z^l / l! \quad (\text{ب } ۸۱-۱۱)$$



انتگرال را می‌توان با توجه به اینکه  $P_l(z)$  یک چندجمله‌ای درجه  $l$  برحسب  $z$  است محاسبه کرد. ضریب جمله مربوط به بزرگترین توان،  $z^l$ ، با استفاده از ۶۱-۱۱ به دست می‌آید

$$(-1)^l \frac{1}{2^l l!} \left( \frac{d}{dz} \right)^l (1 - z^2)^l = \frac{2^l (2l - 1)(2l - 2) \cdots (l + 1)}{2^l l!} z^l + O(z^{l-2})$$

بنابراین، چون طرف چپ همان  $P_l(z)$  است و  $O(z^{l-2})$  شامل  $P_{l-2}(z)$ ،  $P_{l-4}(z)$ ، ... است، داریم

$$z^l = \frac{2^l l!}{2^l (2l - 1)(2l - 2) \cdots (l + 1)} P_l(z) + \text{شامل } P_{l-2}(z) \text{ و ماقبل}$$

با جاگذاری در ۸۱-۱۱ ب و استفاده از ۸۰-۱۱، سرانجام به دست می‌آوریم

$$A_l \frac{(kr)^l}{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2l + 1)} = \frac{1}{2} [4\pi(2l + 1)]^{1/2} (ikr)^l \frac{1}{l!} \frac{2^l l!}{2^l (2l - 1)(2l - 2) \cdots (l + 1)} \frac{2}{2l + 1}$$

با تعیین  $A_l$ ، بسط ۷۹-۱۱ به صورت زیر درمی‌آید

$$e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (82-11)$$

که در بحث نظریه برخورد بسیار مفید است.

## مسائل

۱-۱۱ یک مولکول از دو اتم یکسان تشکیل شده است که هر یک در حالت پایه خود دارای اسپین  $0$  است. در میان برانگیختگیهای ممکن این مولکول، برانگیختگیهای چرخشی را در نظر می‌گیریم. اگر این چرخش تنها حول محور  $z$  باشد، به طوری که  $H = L_z^2/2I$ ، و فاصله بین اتمها را ثابت بگیریم، طیف چرخشی را به دست آورید. اگر اسپین اتمها  $1/2$  باشد و هر دو اتم در یک حالت اسپینی باشند، طیف به چه صورتی درمی‌آید؟

۲-۱۱ هماهنگیهای کروی در ۶۵-۱۱ را برحسب  $x = r \sin \theta \cos \phi$ ،  $y = r \sin \theta \sin \phi$  و  $z = r \cos \theta$  بیان کنید.

۳-۱۱  $\langle Y_{lm_1} | L_x | Y_{lm_2} \rangle$  و  $\langle Y_{lm_1} | L_y | Y_{lm_2} \rangle$  را محاسبه کنید.

۴-۱۱  $\langle Y_{lm_1} | L_x^2 | Y_{lm_2} \rangle$  و  $\langle Y_{lm_1} | L_y^2 | Y_{lm_2} \rangle$  را محاسبه کنید.

[راهنمایی: با استفاده از ۳۶-۱۱ و ۴۸-۱۱،  $\langle Y_{lm_1} | L_z^2 | Y_{lm_2} \rangle$  و کمیت‌های لازم دیگر را محاسبه کنید.]

۵-۱۱ هامیلتونی یک چرخنده با تقارن محوری با رابطه زیر داده می‌شود

$$H = \frac{L_x^2 + L_y^2}{2I_1} + \frac{L_z^2}{2I_2}$$

ویژه‌مقدارهای  $H$  را به دست آورید. طیف را با فرض  $I_1 > I_2$  ترسیم کنید.

۶-۱۱ ثابت کنید  $\langle L_x^2 \rangle = \langle L_y^2 \rangle = 0$  فقط برای حالتی با تکانه زاویه‌ای کل  $l = 0$  ممکن است.

[راهنمایی: از رابطه کاملیت

$$\sum_l \sum_m |Y_{lm}\rangle \langle Y_{lm}| = 1$$

استفاده کنید.]

۷-۱۱ اگر محور کوانتش در راستای  $x$  باشد، یعنی  $L_x$  عملگر برگزیده باشد، می‌توان نقطه  $\mathbf{r}$  را با زاویه‌های  $\Theta$  و  $\Phi$  تعریف کرد که به ترتیب عبارت‌اند از زاویه‌ای که بردار مکان  $\mathbf{r}$  با محور  $x$  می‌سازد و زاویه‌ای که تصویر  $\mathbf{r}$  روی صفحه  $yz$  (عمود بر محور  $x$ ) با محور  $y$  می‌سازد. هماهنگ‌های کروی را در این مورد با  $Y_{LM}(\Theta, \Phi)$  نشان می‌دهیم، و اینها را می‌توان برحسب  $Y_{lm}(\theta, \phi)$ ‌ها بسط داد:

$$Y_{LM}(\Theta, \Phi) = \sum_l \sum_m C_{lm}(L, M) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

(الف)  $\Theta$  و  $\Phi$  را برحسب  $\theta$  و  $\phi$  به دست آورید.

(ب) تابع موج مربوط به  $M = L$  را در نظر بگیرید، و خواص  $C_{lm}(L, L)$  را تا جایی که می‌توانید تعیین کنید.

۸-۱۱ صورت صریح هماهنگ‌های کروی بهنجار شده  $Y_{lm}$ ،  $l = 3$ ،  $Y_{31}$ ،  $Y_{32}$  و  $Y_{30}$  را به دست آورید.

۹-۱۱ با استفاده از روشی که در این فصل به اختصار بیان شد، درباره چرخش در چهار بعد بحث کنید. تعمیم  $L$  در اینجا عبارت است از مجموعه عملگرهایی که می‌توان آنها را به صورت زیر نوشت

$$L_{ij} = -i(x_i \partial_j - x_j \partial_i)$$

که در آن  $\partial_i$  نشاندهنده  $\partial/\partial x_i$  است، و  $i$  و  $j = ۱, ۲, ۳, ۴$  با وارد کردن

$$(J_1, J_2, J_3) = (L_{23}, L_{31}, L_{12})$$

و

$$(K_1, K_2, K_3) = (L_{12}, L_{23}, L_{31})$$

(الف) رابطه‌های جابه‌جایی تمام این شش عملگر را بین خودشان به دست آورید.  
(ب) نشان دهید هر یک از عملگرهای

$$J^{(+)} = \frac{1}{2}(J + K); \quad J^{(-)} = \frac{1}{2}(J - K)$$

از رابطه‌های جابه‌جایی عملگر تکانه زاویه‌ای پیروی می‌کنند و با یکدیگر جابه‌جا می‌شوند. با استفاده از نتیجه نهایی، بزرگترین مجموعه مشاهده‌پذیرهای جابه‌جا شونده را به دست آورید، و از اینجا اعداد کوانتومی را که باید برای نشانگذاری ویژه‌تابعها به کار برده شوند تعیین کنید.  
۱۱-۱۰ ذره‌ای در یک پتانسیل متقارن کروی در حالتی است که با بسته موج زیر توصیف می‌شود

$$\psi(x, y, z) = C(xy + yz + zx)e^{-\alpha r}$$

احتمال اینکه از اندازه‌گیری مجذور تکانه زاویه‌ای مقدار  $0$  به دست آید چقدر است؟ احتمال به دست آمدن  $6\hbar^2$  را تعیین کنید. اگر معلوم شود که  $l$  برابر با  $2$  است، احتمالهای نسبی مربوط به  $m = 2, 1, 0, -1, -2$  را محاسبه کنید.

۱۱-۱۱ الگوی زیر را برای یک استوانه کاملاً هموار در نظر بگیرید: این حلقه‌ای است به شعاع  $R$  متشکل از ذرات یکسان هم‌فاصله به جرم  $M/N$ ، و در نتیجه جرم حلقه  $M$  و گشتاور لختی آن  $MR^2$  است. مقادیر ممکن تکانه زاویه‌ای و ویژه‌مقدارهای انرژی را محاسبه کنید. اختلاف انرژی بین حالت پایه با تکانه زاویه‌ای صفر و اولین حالت برانگیخته چقدر است؟ نشان دهید که این تفاضل به‌ازای  $N \rightarrow \infty$  به بینهایت میل می‌کند. این نتیجه را با انرژی یک استوانه "دندانه‌ای" که فاقد تقارن تحت چرخش  $2\pi/N$  رادیان است، مقایسه کنید. این مثال نشان می‌دهد که به چرخش درآوردن یک استوانه کاملاً هموار غیرممکن است، و این نتیجه سازگار با این واقعیت است که برای استوانه کاملاً هموار چنین چرخشی غیرقابل مشاهده است.

۱۱-۱۲  $L^2$  را برحسب  $\partial/\partial\theta$  و  $\partial/\partial\phi$  بیان کنید. معادله دیفرانسیل حاکم بر  $\Theta_{lm}$  را که در ۱۱-۴۹ وارد شده است بنویسید.

## مراجع

مطالب این فصل را می‌توان در هر یک از کتابهایی که در کتابشناسی معرفی شده‌اند پیدا کرد. برای نگاهی عمیقتر به پیامدهای ناوردایی تحت چرخش، مخصوصاً مراجعه کنید به

K Gottfried, *Quantum Mechanics*, Vol 1, W A Benjamin, New York, 1966.

M E Rose, *Elementary Theory of Angular Momentum*, John Wiley & Sons, New York, 1957.

## اتم هیدروژن

اتم هیدروژن از همه اتمها ساده تر است، زیرا بیش از یک الکترون ندارد. بنابراین، معادله شرودینگر پس از جدا کردن حرکت مرکز جرم یک معادله تک ذره ای می شود. اتمهای هیدروژن گونه را در نظر می گیریم، یعنی اتمهایی که تنها یک الکترون دارند اما هسته های آنها می توانند بیشتر از یک پروتون داشته باشند. بنابراین، پتانسیل عبارت است از

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad (۱-۱۲)$$

و معادله شرودینگر شعاعی به صورت زیر است

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) R + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[ E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] R = 0 \quad (۲-۱۲)$$

تنها حالت های مقید، یعنی جواب های مربوط به  $E < 0$ ، را بررسی می کنیم با استفاده از تعویض متغیر مناسب

$$\rho = \left( \frac{2\mu |E|}{\hbar^2} \right)^{1/2} r \quad (۳-۱۲)$$

معادله به صورت زیر درمی آید

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} R + \left( \frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} \right) R = 0 \quad (4-12)$$

که در آن پارامتری بعد  $\lambda$  عبارت است از

$$\lambda = \frac{Z e^2}{h} \left( \frac{\mu}{2|E|} \right)^{1/2} = Z \alpha \left( \frac{\mu c^2}{2|E|} \right)^{1/2} \quad (5-12)$$

صورت دوم معادله برای محاسبه ساده تر است، زیرا  $\alpha = 1/137$  و انرژی برحسب جرم سکون بیان شده است؛ اما صورت اول به روشنی نشان می دهد که سرعت نور  $c$  واقعاً در معادله شردیده ظاهر نمی شود، یعنی این معادله دقیقاً یک معادله غیرنسبیتی است.

## طیف انرژی

معادله ۴-۱۲ را به روشی که دیگر با آن آشنا هستیم حل می کنیم. ابتدا رفتار مجانبی آن را تعیین می کنیم. به ازای مقادیر بزرگ  $\rho$ ، معادله به صورت زیر درمی آید

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} - \frac{1}{4} R \simeq 0 \quad (6-12)$$

که جواب آن، با رفتار مناسب در بینهایت، به صورت  $R \sim e^{-\rho/2}$  است. مانند مورد نوسانگر هماهنگ، می نویسیم

$$R(\rho) = e^{-\rho/2} G(\rho) \quad (7-12)$$

در ۴-۱۲ جاگذاری می کنیم و معادله مربوط به  $G(\rho)$  را به دست می آوریم. پس از عملیات ریاضی لازم، به معادله زیر می رسیم

$$\frac{d^2 G}{d\rho^2} - \left( 1 - \frac{2}{\rho} \right) \frac{dG}{d\rho} + \left[ \frac{\lambda - 1}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] G = 0 \quad (8-12)$$

اکنون  $G(\rho)$  را به صورت بسط توانی زیر می نویسیم

$$G(\rho) = \rho^l \sum_{n=0}^{\infty} a_n \rho^n \quad (9-12)$$

این واقعیت که  $R(\rho)$  و در نتیجه  $G(\rho)$  در مبدأ مانند  $\rho^l$  رفتار می‌کنند در فصل ۱۰ برای تمام پانسیلهای صادق در ۱۰-۴۱ اثبات شد. با جاگذاری ۱۲-۹ در معادله دیفرانسیل، رابطه‌ای میان ضرایب مختلف  $a_n$  به دست می‌آوریم. این رابطه بازگشتی از معادله دیفرانسیل حاکم بر

$$H(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \rho^n \quad (10-12)$$

به دست می‌آید، که عبارت است از

$$\frac{d^2 H}{d\rho^2} + \left( \frac{2l+2}{\rho} - 1 \right) \frac{dH}{d\rho} + \frac{\lambda-1-l}{\rho} H = 0. \quad (11-12)$$

در واقع، با جاگذاری  $G(\rho) = \rho^l H(\rho)$  در ۱۲-۸ داریم

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left[ n(n-1)a_n \rho^{n-2} + n a_n \rho^{n-1} \left( \frac{2l+2}{\rho} - 1 \right) + (\lambda-1-l)a_n \rho^{n-1} \right] = 0. \quad (12-12)$$

یا

$$\sum_{n=0}^{\infty} \{ (n+1)[n a_{n+1} + (2l+2)a_{n+1}] + (\lambda-1-l-n)a_n \} \rho^{n-1} = 0$$

چون ضرایب توانهای مختلف  $\rho$  باید صفر باشند، رابطه بازگشتی زیر به دست می‌آید

$$\frac{a_{n+1}}{a_n} = \frac{n+l+1-\lambda}{(n+1)(n+2l+2)} \quad (13-12)$$

به‌ازای مقادیر بزرگ  $n$  این رابطه تبدیل می‌شود به

$$\frac{a_{n+1}}{a_n} \simeq \frac{1}{n} \quad (14-12)$$

و، مانند مورد مسئله نوسانگر هماهنگ، می‌توان نشان داد جوابی که در بینهایت خوشرفتار باشد به دست نمی‌آید مگر اینکه رشته ۱۲-۹ قطع شود. یعنی برای یک مقدار معین  $l$ ، به‌ازای یک  $n$  که آن را با  $n_r$  نشان می‌دهیم باید داشته باشیم

$$\lambda = n_r + l + 1 \quad (15-12)$$

با تعریف عدد کوانتومی اصلی  $n$  به صورت

$$n = n_r + l + 1 \quad (۱۶-۱۲)$$

از این واقعیت که  $n_r \geq 0$  نتیجه می‌گیریم که

$$n \geq l + 1 \quad (۱)$$

(۲)  $n$  یک عدد درست است

(۳) رابطه

$$\lambda = n \quad (۱۷-۱۲)$$

ایجاب می‌کند که

$$E = -\frac{1}{2} \mu c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2}$$

که از الگوی قدیمی بور با آن آشنا هستیم. توجه کنید که در این رابطه جرم کاهیده ظاهر می‌شود؛ البته این نتیجه منحصر به رهیافت معادله دیفرانسیلی نیست. در نظریه قدیمی بور نیز می‌توان با بررسی مناسب مدارهای کلاسیک، با شرط کوانتیده بودن تکانه زاویه‌ای، جرم کاهیده را در فرمول انرژی وارد کرد. وجود جرم کاهیده

$$\mu = \frac{mM}{m + M} \quad (۱۸-۱۲)$$

که در آن  $m$  جرم الکترون و  $M$  جرم هسته است، به معنای این است که بسامدهای

$$\omega_{ij} = \frac{E_i - E_j}{h} = \frac{mc^2/2h}{1 + m/M} (Z\alpha)^2 \left( \frac{1}{n_j^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad (۱۹-۱۲)$$

برای اتمهای هیدروژنگونهٔ مختلف اندکی متفاوت هستند. مخصوصاً، تفاوت میان طیف هیدروژن و طیف دوتریم — که در آن  $M$  بسیار نزدیک به دو برابر جرم پروتون است — باعث شد که یوری در سال ۱۹۳۲ دوتریم را کشف کند.



## واگنی طیف

اکنون واگنی طیف انرژی را بررسی می‌کنیم. در حالت پایه، یعنی وقتی  $\lambda = 1$ ، باید داشته باشیم  $n_r = 0$  و  $l = 0$ . تنها یک حالت پایه وجود دارد. به ازای  $\lambda = 2$ ، دو امکان وجود دارند:

(۱)  $n_r = 1$  و  $l = 0$ . در اینجا با نوشتن ۱۲-۱۳ به صورت

$$\frac{a_{n+1}}{a_n} = \frac{n - n_r}{(n+1)(n+2l+2)} \quad (20-12)$$

دید می‌شود که  $a_1/a_0 = -1/(1 \times 2)$  و در نتیجه

$$H(\rho) = a_0 (1 - \rho/2) \quad (21-12)$$

در حالی که توزیع زاویه‌ای تقارن کروی دارد. (۲)  $n_r = 0$  و  $l = 1$ . در اینجا تابع موج شعاعی ثابت است:  $H(\rho) = a_0$ ، اما قسمت زاویه‌ای تابع موج حاوی  $Y_{1m}(\theta, \phi)$  است. واگنی  $(2l+1)$  است، و در نتیجه سه حالت از این نوع وجود دارند. واگنی کل به ازای  $\lambda = n = 2$  برابر است با  $2^2 = 4 = 3 + 1$ .

به ازای  $\lambda = 3$ ، سه امکان وجود دارند: (۱)  $n_r = 2$  و  $l = 0$ . در اینجا یک حالت با  $a_1/a_0 = -1$  و  $a_2/a_1 = -1/6$  در نتیجه

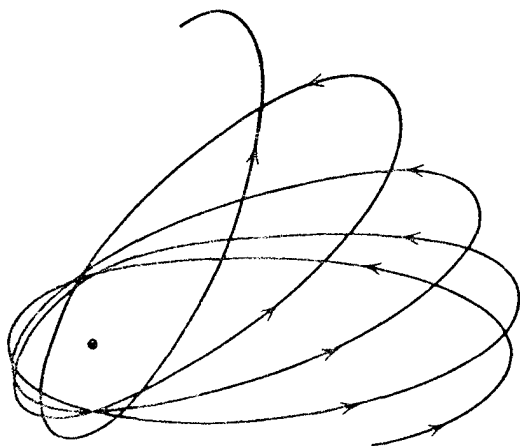
$$H(\rho) = a_0 \left( 1 - \rho + \frac{1}{6} \rho^2 \right) \quad (22-12)$$

(۲)  $n_r = 1$  و  $l = 1$ ، و سه حالت با  $H(\rho) = a_0 (1 - \rho/4)$  داریم. (۳)  $n_r = 0$  و  $l = 2$  که تعداد حالت‌های آن برابر است با  $(2l+1) = 5$ ، و در اینجا  $H(\rho) = a_0$ . بدین ترتیب  $3^2 = 9 = 5 + 3 + 1$  حالت واگن با ویژه مقدار  $\lambda = n = 3$  وجود دارند. به طور کلی، واگنی برای  $\lambda = n$  برابر است با

$$1 + 3 + 5 + \dots + [2(n-1) + 1] = n^2 \quad (23-12)$$

از پیش انتظار داریم که برای پتانسیل شعاعی واگنی  $(2l+1)$  باشد، زیرا هامیلتونی شعاعی تنها به  $L^2$  بستگی دارد و مستقل از  $L_z$  است. اما یک واگنی اضافی وجود دارد. این واگنی خاص مشخصه پتانسیل  $1/r$  است. اگر این پتانسیل کولنی را با افزودن یک جمله به صورت زیر تغییر دهیم

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{g^2}{r^2} \quad (24-12)$$



شکل ۱۲-۱ مدار برای پتانسیلی که دقیقاً به صورت  $1/r$  نیست روی خودش بسته نمی‌شود بلکه دارای حرکت تقدیمی است. اگر پتانسیل شعاعی باشد مدار هامنای باقی می‌ماند.

معادله شعاعی بدون تغییر می‌ماند، بجز اینکه به جای  $l(l+1)/r^2$  اکنون داریم  $l^*(l^*+1)/r^2$  که در آن  $l^*(l^*+1) = l(l+1) + g^2$  یعنی  $l^* = -1/2 + \sqrt{(l+1/2)^2 + g^2}$ . این تغییر باعث می‌شود انرژی به صورت زیر درآید

$$E = -\frac{1}{2}\mu c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{[n_r + 1/2 + \sqrt{(l+1/2)^2 + g^2}]^2} \quad (25-12)$$

که، به عنوان مثال، برای  $(n_r = 1, l = 2)$  و  $(n_r = 2, l = 1)$  دیگر واگن نیست. واگنی مشخصه پتانسیل  $1/r$  را سابقاً "انتقایی" می‌نامیدند، زیرا دلیل واضحی برای آن وجود نداشت اما باید دید که منظور از "واضح" چیست. از مکانیک کلاسیک می‌دانیم که پتانسیل  $1/r$  ویژگیهای خاصی دارد: مدارها بیضیهایی هستند که سمتگیری ثابتی در فضا دارند و حرکت تقدیمی (شکل ۱۲-۱) انجام نمی‌دهند. تغییرات کوچک در این پتانسیل باعث حرکت تقدیمی می‌شوند. این تغییرات می‌توانند ناشی از عوامل مختلف باشند، مثلاً اختلالهای ناشی از سایر سیارات در مسئله کپلر. در بررسی مدار عطارد معلوم شده بود که پس از احتساب اثر سایر سیارات باز هم یک حرکت تقدیمی حسیض عطارد به مقدار  $42''$  در هر قرن بدون توضیح می‌ماند. این حرکت تقدیمی را سرانجام نظریه نسبیت عام اینشتین توضیح داد: بر اساس این نظریه، باید دقیقاً پتانسیل  $1/r^2$  را به پتانسیل نیوتونی  $1/r$  اضافه کرد.

در اتم هیدروژن واقعی اختلالهای کوچکی ناشی از اثرات اسپینی و اثرات نسبیتی وجود دارند. این اثرات را در فصل ۱۷ بررسی می‌کنیم. اما با یک تقریب بسیار خوب، مقادیر ممکن  $l$  به ازای

یک مقدار معین  $n$  عبارت‌اند از  $l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$ ، و به‌ازای هر یک از اینها واگنی  $(2l+1)$  است. بنابراین، واگنی کل باز هم  $n^2$  است. چون برای الکترون دو حالت مربوط به اسپین آن وجود دارند، واگنی صحیح در واقع  $2n^2$  است. این موضوع نقش مهمی در توصیف کوانتوم-مکانیکی جدول تناوبی دارد.

### ویژه‌تاب‌های شعاعی

اکنون به معادله شعاعی بازمی‌گردیم. از رابطه بازگشتی ۱۲-۱۳ با تبدیل  $n$  به  $k$  و  $\lambda$  به  $n$ :

$$a_{k+1} = \frac{k+l+1-n}{(k+1)(k+2l+2)} a_k \quad (26-12)$$

به‌دست می‌آوریم

$$a_{k+1} = (-1)^{k+1} \frac{n-(k+l+1)}{(k+1)(k+2l+2)} \cdot \frac{n-(k+l)}{k(k+2l+1)} \cdots \frac{n-(l+1)}{1 \cdot (2l+2)} a_0 \quad (27-12)$$

با استفاده از این رابطه می‌توان بسط رشته توانی مربوط به  $H(\rho)$  را به‌دست آورد. در واقع،  $H(\rho)$  چندجمله‌ای لاگر وابسته است:

$$H(\rho) = L_{n-l-1}^{(l+1)}(\rho) \quad (28-12)$$

جدول این چندجمله‌ایها و ویژگیهای آنها را در اغلب کتابهای ریاضی و ریاضی فیزیک یافت می‌شوند.<sup>۱</sup>

با استفاده از

$$a_0 = \frac{h}{\mu c \alpha} \quad (29-12)$$

۱. یک کتاب بسیار مفید در این زمینه کتابدستی زیر است

چند تابع شعاعی را با تبدیل به مختصه شعاعی  $r$  و با بهنجارش در زیر می‌نویسیم

$$R_{10}(r) = 2 \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{r/2} e^{-Zr/a_0}$$

$$R_{20}(r) = 2 \left( \frac{Z}{2a_0} \right)^{r/2} \left( 1 - \frac{Zr}{2a_0} \right) e^{-Zr/2a_0}$$

$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}} \left( \frac{Z}{2a_0} \right)^{r/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0}$$

(۳۰-۱۲)

$$R_{30}(r) = 2 \left( \frac{Z}{3a_0} \right)^{r/2} \left[ 1 - \frac{2Zr}{3a_0} + \frac{2(Zr)^2}{27a_0^2} \right] e^{-Zr/3a_0}$$

$$R_{31}(r) = \frac{4\sqrt{2}}{3} \left( \frac{Z}{3a_0} \right)^{r/2} \frac{Zr}{a_0} \left( 1 - \frac{Zr}{6a_0} \right) e^{-Zr/3a_0}$$

$$R_{32}(r) = \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}} \left( \frac{Z}{3a_0} \right)^{r/2} \left( \frac{Zr}{a_0} \right)^2 e^{-Zr/3a_0}$$

ویژگی‌های کیفی زیر را می‌توان از بررسی ویژه‌جوابها به دست آورد:

الف) رفتار  $r^l$  به ازای مقادیر کوچک  $r$ ، که باعث می‌شود تابع موج درگستره‌ای از شعاعها که با  $l$  افزایش می‌یابد کوچک بماند، پیامد وجود سد مرکزگیزی دافعه‌ای است که الکترونها را از نزدیک شدن به هسته باز می‌دارد.

ب) رابطه ۱۲-۲۶ نشان می‌دهد  $H(\rho)$  یک چندجمله‌ای از درجه  $n - l - 1$  است، و از این رو  $n_r$  گره (صفر) شعاعی دارد. توزیع چگالی احتمال

$$P(r) = r^2 [R_{nl}]^2 \quad (۳۱-۱۲)$$

$n - 1$  "برآمدگی" دارد. وقتی  $l$ ، به ازای یک مقدار معین  $n$ ، دارای بیشترین مقدار خود است ( $l = n - 1$ ) تنها یک برآمدگی وجود دارد. چنانکه از ۱۲-۳۰ استنباط می‌شود، و چنانکه می‌توان از جواب معادله دیفرانسیل دید،

$$R_{n,n-1}(r) \propto r^{n-1} e^{-Zr/a_0} \quad (۳۲-۱۲)$$

بنابراین، چگالی احتمال  $P(r) \propto r^{2n} e^{-2Zr/a_0} n^n$  در یک  $r$  که از رابطه زیر به دست می‌آید بیشینه می‌شود

$$\frac{dP(r)}{dr} = \left( 2nr^{2n-1} - \frac{2Z}{a_0 n} r^{2n} \right) e^{-2Zr/a_0} n^n = 0 \quad (33-12)$$

یعنی در

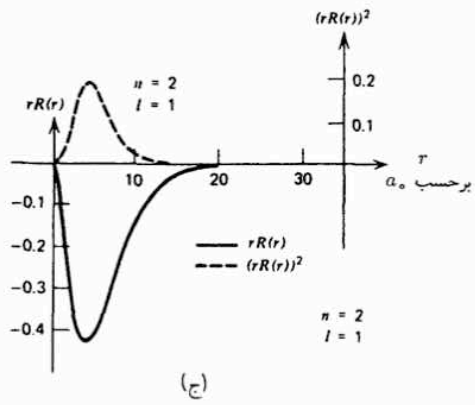
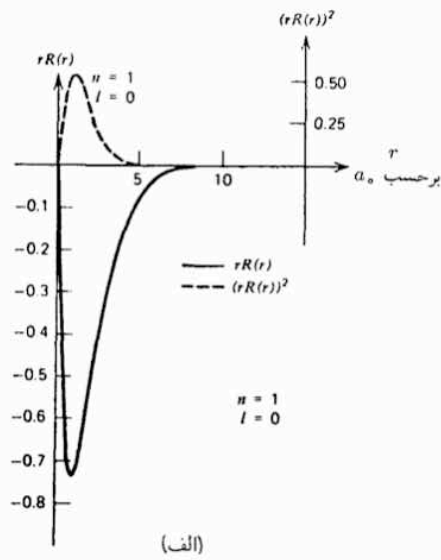
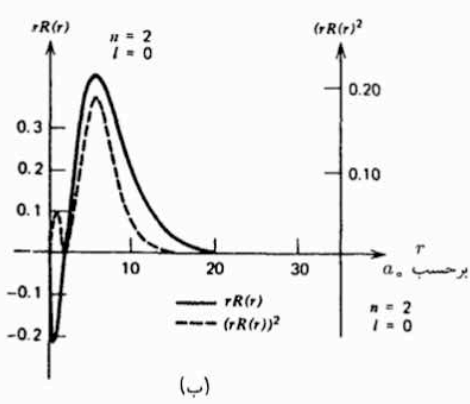
$$r = \frac{n^2 a_0}{Z} \quad (34-12)$$

که مقداری است که از اتم بور برای مدارهای دایره‌ای به دست می‌آید. چگالیهای احتمال مربوط به مقادیر کوچکتر  $l$  برآمدگیهای بیشتری دارند. می‌توان نشان داد که این برآمدگیها متناظر با مدارهای بیضوی در حد اعداد کوانتومی بزرگ هستند.

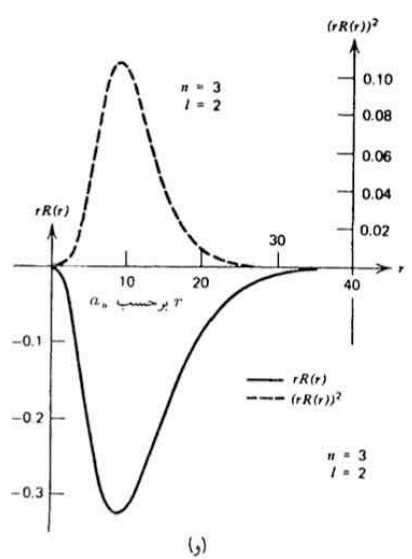
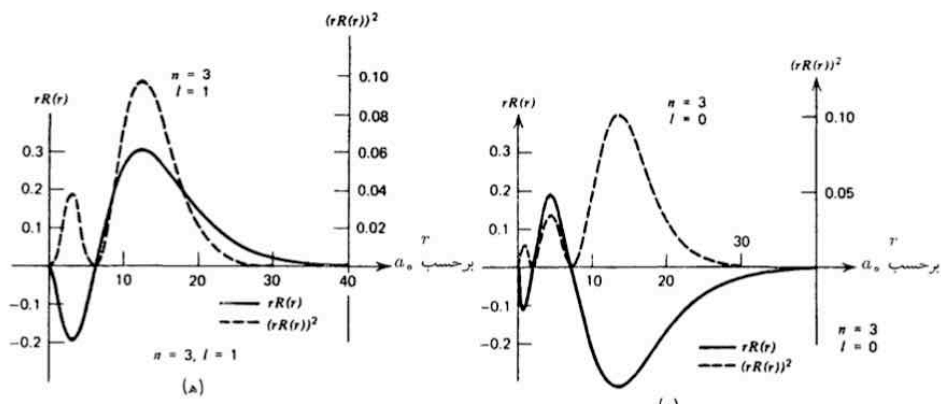
(ج) نمودارهای چگالی احتمال شعاعی  $P(r)$  برای یافتن الکترون در فاصله  $r$  از مبدأ را می‌توان با استفاده از توابع موج ترسیم کرد. شکل ۱۲-۲ طرح کلی را نشان می‌دهد. باید به خاطر داشت که تابع موج قسمت زاویه‌ای هم دارد، که مجذور قدرمطلق آن  $[P_l^m(\cos \theta)]^2$  است. نمودارهای توابع لژاندر وابسته  $P_l^m(\cos \theta)$  در شکل ۱۲-۳ داده شده‌اند. چنانکه دیده می‌شود، با افزایش  $m$  چگالی احتمال از محور  $z$  به سمت صفحه استوایی منتقل می‌شود. وقتی  $|m| = l$ ، چنانکه ۱۱-۶۳ نشان می‌دهد داریم  $|P_l^l(\cos \theta)|^2 \propto \sin^{2l} \theta$ . این تابع حول  $\theta = \pi/2$  به اوج می‌رسد. می‌توان نشان داد که با افزایش  $l$  پهنای قله مانند  $l^{-1/2}$  کاهش می‌یابد، و در نتیجه به‌ازای اعداد کوانتومی بزرگ به تصویر کلاسیک مدارهای هامنی می‌رسیم. پهنای متناهی قله را می‌توان با ملاحظات زیر توضیح داد. وقتی  $|m| = l$  داریم  $L_z^2 = l^2$  و در نتیجه  $L_x^2 + L_y^2 = l^2 - L_z^2 = 0$ . بنابراین، بردار تکانه زاویه‌ای هیچگاه نمی‌تواند کاملاً در راستای یک محور قرار گیرد. در ضمن، واگنی  $m$  به ما امکان می‌دهد تا "مدار" را نسبت به یک محور دیگر سمتیابی کنیم، و از این رو هیچ محور  $z$  متمایزی واقعاً وجود ندارد. بدین ترتیب، حالتی که یک ویژه حالت  $L_x$  با ویژه مقدار  $l$  است در راستای  $z$  "سمت‌گیری" می‌کند. تابع موج اکنون یک ترکیب خطی از توابع  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  است، اما انرژی به علت واگنی همان انرژی مربوط به مدارهایی است که در راستای  $z$  سمت‌گیری کرده‌اند.

(د) با داشتن توابع موج، می‌توان  $\langle r^k \rangle$  را با استفاده از رابطه زیر محاسبه کرد

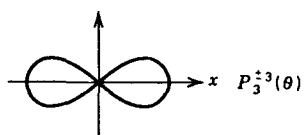
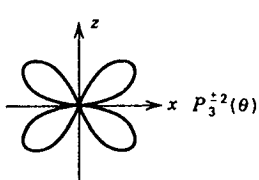
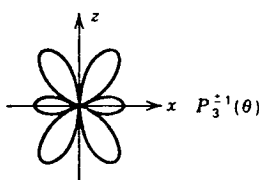
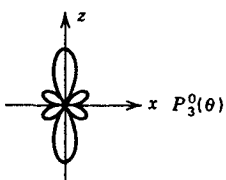
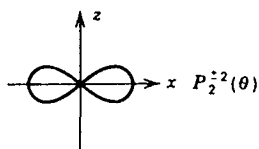
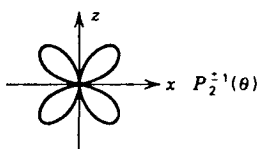
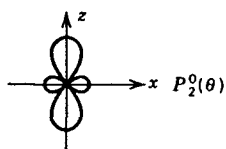
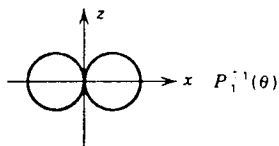
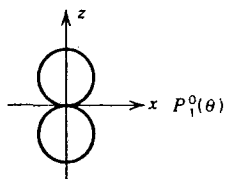
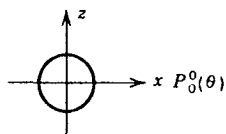
$$\langle r^k \rangle = \int_0^\infty dr r^{2+k} [R_{nl}(r)]^2 \quad (35-12)$$



شکل ۲-۱۲ توابع موج شعاعی  $u(r) = rR(r)$  و توابع چگالی احتمال شعاعی  $u^2(r)$  برای مقادیر  $n = 1, 2$ ،  
 ۳، و مقادیر ممکن  $l$ . محور طول چپ معرف  $u(r)$  و محور طول راست معرف  $u^2(r)$  است. توابع موج با خط پر و  
 توزیعهای احتمال با خط چین نشان داده شده‌اند. محور عرض معرف  $r$  برحسب  $a_0$  است.



شکل ۱۲-۲ ادامه.



شکل ۱۲-۳ نمودارهای چندجمله‌ای‌های لژاندر وابسته بر حسب  $\theta$  (زاویه میان محور  $z$  و صفحه استوایی که با محور  $x$  نشان داده شده است).

بعضی مقادیر انتظاری مفید عبارت‌اند از

$$\langle r \rangle = \frac{a_0}{\sqrt{Z}} [3n^2 - l(l+1)]$$

$$\langle r^2 \rangle = \frac{a_0^2 n^2}{\sqrt{Z} r} [5n^2 + 1 - 3l(l+1)]$$

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{Z}{a_0 n^2}$$



$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{Z^2}{a_0^2 n^2 \left( l + \frac{1}{2} \right)}$$

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{Z^2}{a_0^2 n^2 l \left( l + \frac{1}{2} \right) (l + 1)} \quad (۱۲-۳۶)$$

در پراکندگی الکترون (یا پروتون) با جوابهای معادله شرودینگر برای پتانسیل  $1/r$  به ازای  $E > 0$  نیز سروکار داریم. اینها شامل توابع خاص، توابع فوق هندسی همشار، هستند. بررسی این جوابها فراتر از اهداف این کتاب است.

## مسائل

۱-۱۲ طول موجهای مربوط به گذارهای  $2P \rightarrow 1S$  را در موارد زیر مقایسه کنید. (۱) هیدروژن، (۲) دوتریم (با جرم هسته‌ای دو برابر جرم پروتون)، (۳) پوزیترونیم (حالت مقید از یک الکترون و یک پوزیترون که جرم آن برابر با جرم الکترون است).  
 ۲-۱۲ یک الکترون در حالت پایه تریتم، که هسته آن متشکل از یک پروتون و دو نوترون است، قرار دارد. یک واکنش هسته‌ای باعث می‌شود هسته این اتم ناگهان به  $He^2$  متشکل از دو پروتون و یک نوترون، تبدیل شود. احتمال این را به دست آورید که الکترون در حالت پایه  $He^2$  باقی بماند.  
 ۳-۱۲ مانسته نسیتی معادله شرودینگر برای الکترونی با اسپین  $\sigma$  (که البته برای الکترون واقعی قابل استفاده نیست) صورت عملگری رابطه زیر است

$$(E - V)^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$$

یعنی

$$\left( \frac{E}{hc} + \frac{Ze^2}{hc} \frac{1}{r} \right)^2 \psi = -\nabla^2 \psi + \left( \frac{mc}{h} \right)^2 \psi$$

(الف) معادله شعاعی را به دست آورید.

(ب) طیف ویژه مقدارها را با توجه به ارتباط نزدیک معادله شعاعی قسمت (الف) با معادله شعاعی مربوط به مسئله اتم هیدروژن به دست آورید.

۴-۱۲ با استفاده از رابطه  $\langle 1/r \rangle_{n,l}$ ، کمیت

$$\langle T \rangle_{n,l} = \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle_{n,l}$$

را برای یک ویژه حالت اختیاری اتم هیدروژنگونه (با  $Z$  اختیاری) محاسبه کنید. نشان دهید که به طور کلی برای این پتانسیل داریم

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

این یک مثال خاص از قضیه ویرال است.

۵-۱۲ الکترونی در میدان کولنی یک پروتون در حالتی است که با تابع موج زیر توصیف می شود

$$\frac{1}{6} [4\psi_{100}(r) + 3\psi_{211}(r) - \psi_{210}(r) + \sqrt{10} \psi_{21-1}(r)]$$

(الف) مقدار انتظاری انرژی را محاسبه کنید.

(ب) مقدار انتظاری  $L^2$  را به دست آورید.

(ج) مقدار انتظاری  $L_z$  را تعیین کنید.

۶-۱۲ الکترونی در میدان کولنی یک پروتون در حالتی است که با تابع موج زیر توصیف می شود

$$\psi(\mathbf{r}) = \left( \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \right)^{3/2} e^{-\alpha^2 r^2 / 2}$$

رابطه ای برای احتمال یافتن الکترون در حالت پایه این اتم هیدروژن به دست آورید.

۷-۱۲ رابطه ۱۲-۳۲ را با استفاده از رابطه بازگشتی اثبات کنید.

۸-۱۲ الکترون یک اتم هیدروژن در حالت  $n = 2, l = 1, m = 0$  است. تابع موج آن را در

فضای تکانه به دست آورید.

۹-۱۲ مقدار انتظاری تابع  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$  در هر حالت پایا ثابت است. برای هامیلتونی

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r)$$

ثابت کنید

$$\circ = \frac{d}{dt} \langle \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, \mathbf{r} \cdot \mathbf{p}] \rangle$$

و نشان دهید

$$\left\langle \frac{\mathbf{p}^2}{m} \right\rangle = \langle \mathbf{r} \cdot \nabla V(r) \rangle$$

با استفاده از این رابطه، نتیجه مسئله ۱۲-۴ را اثبات کنید. همچنین با استفاده از این نتیجه،  $\langle 1/r \rangle$  را به دست آورید.

۱۲-۱۰ با استفاده از فونونی که در این فصل بیان شدند، مسئله نوسانگر هماهنگ سه بعدی را با

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$$

بررسی کنید. توجه کنید که چندجمله‌ایهای لاگر وابسته در این مسئله نیز ظاهر می‌شوند.

۱۲-۱۱ بنابه نظر جولین شوینگر، نیروی شعاعی متوسط باید برای حالت‌های پایا صفر شود. با استفاده از این نتیجه،  $\langle n, l | 1/r^2 | n, l \rangle$  را محاسبه کنید.

[راهنمایی: کمیت

$$\left\langle n, l \left| \frac{d}{dr} \left[ \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r} \right] \right| n, l \right\rangle$$

را محاسبه کنید.]

## مراجع

برای بحث مفصلی دربارهٔ اتم‌های هیدروژن‌گونه به کتاب زیر مراجعه کنید

E U Condon and G H Shortley, *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge University Press, Cambridge, England, 1959.

مسئلهٔ اتم هیدروژن در تمام کتابهای مکانیک کوانتومی بررسی می‌شود.

## برهم‌کنش الکترون با میدان الکترومغناطیسی

### نظریه کلاسیک

در فصل ۱۲ برهم‌کنش الکترون را با میدان ایستای کولنی ناشی از یک بار نقطه‌ای بررسی کردیم. برای تعمیم این بررسی به برهم‌کنش با میدان مغناطیسی یا الکتریکی خارجی باید ابتدا نظریه کلاسیک را مرور کنیم. معادلات ماکسول برای خلا در دستگاه گاوسی عبارت‌اند از

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (۱-۱۳)$$

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = 0 \quad (۲-۱۳)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = 4\pi \rho(\mathbf{r}, t) \quad (۳-۱۳)$$

$$\nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \quad (۴-۱۳)$$

که در آنها چگالیهای بار و جریان  $\rho(\mathbf{r}, t)$  و  $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$  چشمه‌های میدانهای الکترومغناطیسی  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$  و  $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$  هستند. معادله پایستگی بار

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (۵-۱۳)$$

خودبه‌خود صادق است.

الکترون به‌عنوان یک نقطهٔ مادی به جرم  $\mu$  و بار  $-e$  تابع معادلهٔ نیروی لورنتس است:

$$\mu \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = -e [(\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t))] \quad (۶-۱۳)$$

گذار به مکانیک کوانتومی با ساختن هامیلتونی برای این دستگاه انجام می‌گیرد. برای این کار باید پتانسیلهای این دستگاه الکترومغناطیسی را تعریف کنیم. با توجه به دو معادلهٔ اول ماکسول، ۱-۱۳ و ۲-۱۳، می‌توان پتانسیلهای برداری و نرده‌ای  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  و  $\phi(\mathbf{r}, t)$  را به‌گونه‌ای تعریف کرد که

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (۷-۱۳)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - \nabla \phi(\mathbf{r}, t)$$

در معادلهٔ حرکت الکترون پتانسیلهای  $\mathbf{A}$  و  $\phi$  مستقیماً دخالت ندارند. این پتانسیلهای خوش تعریف نیستند. اگر در معادلهٔ

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$$

را به  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - \nabla f(\mathbf{r}, t) \quad (۸-۱۳)$$

تبدیل کنیم معادله تغییر نمی‌کند زیرا  $\nabla \times \nabla f(\mathbf{r}, t) = 0$ . اگر، علاوه بر تبدیل ۸-۱۳،  $\phi$  را به

$$\phi'(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c} \frac{\partial f(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (۹-۱۳)$$

تبدیل کنیم میدان الکتریکی تغییر نمی‌کند. این ناوردایی، که ناوردایی تحت تبدیلات پیمانه‌ای نامیده می‌شود، به ما امکان می‌دهد تا پتانسیلهای را به‌صورت‌های مختلف، مناسب با منظوری که داریم، تعریف کنیم.

زوج معادله‌های وابسته به چشمة ۳-۱۳ و ۴-۱۳ اکنون به‌صورت زیر درمی‌آیند

$$-\nabla^2 \phi(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \cdot \mathbf{A}) = 4\pi \rho(\mathbf{r}, t) \quad (۱۰-۱۳)$$

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \nabla \phi = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$$

یا

$$-\nabla^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} + \nabla \left( \nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \quad (11-13)$$

اگر توزیع بار ایستا باشد، یعنی چگالی  $\rho$  مستقل از زمان باشد، بهتر است پیمانه را طوری انتخاب کنیم که

$$\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (12-13)$$

این انتخاب  $f(\mathbf{r}, t)$  را پیمانه کولن می‌نامند. در این مورد داریم

$$-\nabla^2 \phi(\mathbf{r}) = 4\pi \rho(\mathbf{r}) \quad (13-13)$$

یعنی یک پتانسیل نرده‌ای مستقل از زمان داریم، و معادله مربوط به  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  به صورت زیر درمی‌آید

$$-\nabla^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \quad (14-13)$$

وقتی توزیع بار ایستا نیست، بهتر است پیمانه لورنتس را انتخاب کنیم که برای آن

$$\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c} \frac{\partial \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = 0 \quad (15-13)$$

با این انتخاب، معادله مربوط به پتانسیل برداری بدون تغییر می‌ماند، اما اکنون پتانسیل نرده‌ای نیز از یک معادله موج پیروی می‌کند. نکته مهمی که باید تذکر دهیم این است که رابطه

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = -\nabla^2 \mathbf{A} + \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A})$$

که در به دست آوردن ۱۱-۱۳ به کار می‌رود تنها در مختصات دکارتی معتبر است. بنابراین، واضح است که  $\nabla^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  را باید بر حسب  $x, y, z$  محاسبه کنیم.

برای گذار به مکانیک کوانتومی باید از فرمولبندی هامیلتون برای معادله حرکت ۱۳-۶ استفاده کنیم. در غیاب برهم‌کنش با میدان الکترومغناطیسی، به آسانی می‌توان دید که از معادله‌های هامیلتون

$$\begin{aligned} \frac{dx_i}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \frac{dp_i}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial x_i} \end{aligned} \quad (۱۶-۱۳)$$

۵

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + V(r) \quad (۱۷-۱۳)$$

به دست می‌آوریم

$$\mu \frac{d^2 x_i}{dt^2} = -\frac{\partial V}{\partial x_i} = F_i \quad (۱۸-۱۳)$$

هامیلتونی برای برهم‌کنش الکترون با میدان الکترومغناطیسی خارجی، که با پتانسیلهای  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  و  $\phi(\mathbf{r}, t)$  نمایش داده می‌شود، به صورت زیر است

$$H = \frac{(\mathbf{p} + (e/c)\mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^2}{2\mu} + e\phi(\mathbf{r}, t) \quad (۱۹-۱۳)$$

معادله‌های حرکت هامیلتون عبارت‌اند از

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{p_i + (e/c)A_i}{\mu} \quad (۲۰-۱۳)$$

۶

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i} = -\frac{e}{\mu c} \left( p_k + \frac{e}{c} A_k \right) \frac{\partial A_k}{\partial x_i} + e \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \quad (۲۱-۱۳)$$

بنابراین،

$$\begin{aligned} \mu \frac{d^2 x_i}{dt^2} &= \frac{dp_i}{dt} + \frac{e}{c} \left( \frac{\partial A_i}{\partial t} + \frac{\partial A_i}{\partial x_k} \frac{dx_k}{dt} \right) \\ &= e \frac{\partial \phi}{\partial x_i} + \frac{e}{c} \frac{\partial A_i}{\partial t} - \frac{e}{c} \frac{\partial A_k}{\partial x_i} \frac{dx_k}{dt} + \frac{e}{c} \frac{\partial A_i}{\partial x_k} \frac{dx_k}{dt} \end{aligned} \quad (۲۲-۱۳)$$

دو جمله اول برابر با  $-eE_i$  و دو جمله بعدی برابر با  $(e/c)(\mathbf{v} \times \mathbf{B})_i -$  هستند. بدین ترتیب، ۱۳-۱۹ انتخاب درستی برای هامیلتونی  $H$  است.

## معادله شرویدینگر الکترون در میدان الکترومغناطیسی

معادله شرویدینگر برای الکترون در میدان الکترومغناطیسی به صورت زیر است

$$\left[ \frac{((\hbar/i)\nabla + (e/c)\mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^2}{2\mu} + e\phi(\mathbf{r}, t) \right] \psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (۱۳-۲۳)$$

که در آن  $(\hbar/i)\nabla$  را به جای عملگر  $\mathbf{p}$  نوشته‌ایم. قبل از اینکه به حل معادله ویژه‌مقداری انرژی پردازیم، لازم است ناوردایی پیمانه‌ای را بررسی کنیم. اگر معادله ۱۳-۲۳ را برحسب  $\mathbf{A}'$  و  $\phi'$  که با ۱۳-۸ و ۱۳-۹ تعریف می‌شوند بنویسیم، به دست می‌آوریم

$$\left[ \frac{((\hbar/i)\nabla + (e/c)\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) + (e/c)\nabla f(\mathbf{r}, t))^2}{2\mu} + e\phi'(\mathbf{r}, t) - \frac{e}{c} \frac{\partial f(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right] \psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}$$

که معادله متفاوتی به نظر می‌رسد. به آسانی می‌توان دید که اگر تبدیلهای ۱۳-۸ و ۱۳-۹ را با یک تغییر فاز در تابع موج،  $\psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \psi'(\mathbf{r}, t)$ ، همراه کنیم به طوری که

$$\psi'(\mathbf{r}, t) = e^{i\Lambda(\mathbf{r}, t)} \psi(\mathbf{r}, t) \quad (۱۳-۲۴)$$

آنگاه چون

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}(e^{-i\Lambda} \psi') = -i \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \psi + e^{-i\Lambda} \frac{\partial \psi'}{\partial t}$$

و

$$\frac{\hbar}{i} \nabla \psi = \frac{\hbar}{i} \nabla (e^{-i\Lambda} \psi') = -\hbar \nabla \Lambda \psi - e^{-i\Lambda} \frac{\hbar}{i} \nabla \psi'$$

معادله اصلی برحسب  $\mathbf{A}'$ ،  $\phi'$  و  $\psi'$  به دست می‌آید به شرط اینکه قرار دهیم

$$\Lambda(\mathbf{r}, t) = \frac{e}{\hbar c} f(\mathbf{r}, t) \quad (۱۳-۲۵)$$



اکنون به معادله شرو دینگر بازمی‌گردیم. تنها میدانهای مستقل از زمان را در نظر می‌گیریم، یعنی  $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{r})$  و  $\phi = \phi(\mathbf{r})$ . در این مورد، می‌توان نوشت

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-iEt/\hbar} \psi(\mathbf{r}) \quad (26-13)$$

و

$$\left[ \frac{1}{2\mu} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \cdot \left( \frac{\hbar}{i} \nabla + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) + e\phi(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (27-13)$$

که به صورت زیر درمی‌آید

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi - \frac{ieh}{\mu c} \mathbf{A} \cdot \nabla \psi - \frac{ieh}{2\mu c} (\nabla \cdot \mathbf{A}) \psi + \frac{e^2}{2\mu c^2} A^2 \psi + e\phi(\mathbf{r}) \psi = E\psi \quad (28-13)$$

اکنون با استفاده از آزادی انتخاب تابع پیمانه  $f(\mathbf{r})$  به گونه‌ای که

$$\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0 \quad (29-13)$$

به دست می‌آوریم

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi - \frac{ieh}{\mu c} \mathbf{A} \cdot \nabla \psi + \frac{e^2}{2\mu c^2} A^2 \psi + e\phi(\mathbf{r}) \psi = E\psi \quad (30-13)$$

## میدان مغناطیسی ثابت

برای میدان مغناطیسی یکنواخت ثابت  $\mathbf{B}$  می‌توان نوشت<sup>۱</sup>

$$\mathbf{A} = -\frac{1}{c} \mathbf{r} \times \mathbf{B} \quad (31-13)$$

بنابراین،  $\mathbf{A}$  برحسب سه مؤلفه‌اش عبارت است از

$$\mathbf{A} = -\frac{1}{c} (yB_z - zB_y, zB_x - xB_z, xB_y - yB_x)$$

۱. توجه کنید که این انتخاب یکتا نیست، زیرا می‌توان گرادیان هر تابعی را به  $\mathbf{A}$  اضافه کرد بدون اینکه  $\mathbf{B}$  تغییر کند. اما این انتخاب بسیار مناسب است.

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{A} &= \left( \frac{1}{r} B_x + \frac{1}{r} B_{x'}, B_y, B_z \right) \\ &= \mathbf{B} \end{aligned}$$

اکنون جمله دوم در ۱۳-۳۰ به صورت زیر در می آید

$$\begin{aligned} \frac{ie\hbar}{2\mu c} \mathbf{r} \times \mathbf{B} \cdot \nabla \psi &= -\frac{ie\hbar}{2\mu c} \mathbf{B} \cdot \mathbf{r} \times \nabla \psi \\ &= \frac{e}{2\mu c} \mathbf{B} \cdot \mathbf{r} \times \frac{\hbar}{i} \nabla \psi = \frac{e}{2\mu c} \mathbf{B} \cdot \mathbf{L} \psi \end{aligned} \quad (32-13)$$

و برای جمله سوم، اگر راستای  $\mathbf{B}$  را محور  $z$  بگیریم، داریم

$$\frac{e^2}{\lambda\mu c^2} (\mathbf{r} \times \mathbf{B})^2 \psi = \frac{e^2}{\lambda\mu c^2} [r^2 B^2 - (\mathbf{r} \cdot \mathbf{B})^2] \psi = \frac{e^2 B^2}{\lambda\mu c^2} (x^2 + y^2) \psi \quad (33-13)$$

نتیجه بالا به صورت پتانسیل نوسانگر هماهنگ دوبعدی است.

بزرگیهای این دو جمله را با هم مقایسه می کنیم. نسبت این دو را با گرفتن  $\langle L_z \rangle$  از مرتبه  $h$  و  $\langle x^2 + y^2 \rangle$  از مرتبه  $a_0^2$ ، که  $a_0$  شعاع بور است، برآورد می کنیم:

$$\begin{aligned} \frac{(e^2/\lambda\mu c^2)a_0^2 B^2}{(e/2\mu c)\hbar B} &\approx \frac{1}{2} \frac{e^2}{\hbar c} \frac{B}{e/a_0^2} \approx \frac{1}{548} \frac{B}{e/a_0^2} \\ &\approx \frac{B}{548(4.78 \times 10^{-10}) / (0.5 \times 10^{-8})^2} \\ &\approx \frac{B}{9 \times 10^9 \text{G}} \end{aligned} \quad (34-13)$$

بنابراین، در دستگاههای اتمی، با میدانهایی که نوعاً در آزمایشگاه در دسترس هستند، یعنی  $B \lesssim 10^4 \text{G}$ ، جمله درجه دوم مسلماً قابل چشمپوشی است. به روش مشابهی می توان جمله ای را که بر حسب  $B$  خطی است با مقایسه با انرژی پتانسیل کولنی برآورد کرد:

$$\frac{(e/2\mu c)\hbar B}{e^2/a_0} \approx \frac{1}{2} \frac{\hbar/\mu c}{e/a_0} B \approx \frac{1}{274} \frac{B}{e/a_0^2} \approx \frac{B}{5 \times 10^9 \text{G}} \quad (35-13)$$

بنابراین، جمله خطی ترازهای انرژی اتمی را تنها اندکی مختل می‌کند. جمله درجه دوم در دو وضعیت می‌تواند بسیار مهم شود: اگر میدان مغناطیسی بسیار شدید باشد؛ تصور می‌رود که میدانهایی به بزرگی  $10^{12}$  گاوس می‌توانند در سطح ستاره‌های نوترونی وجود داشته باشند، و این میدانها تغییرات بنیانی در ساختار آنها ایجاد می‌کنند.<sup>۱</sup> جمله درجه دوم در بررسی حرکت ماکروسکوپی الکترونها در میدان خارجی، مثلاً حرکت الکترون در یک سنکروترون، نیز اهمیت دارد.

### اثر بهنجار زیمان

ابتدا تنها جمله خطی را در نظر می‌گیریم، و محور  $z$  را در راستای  $\mathbf{B}$  انتخاب می‌کنیم. بنابراین، به هامیلتونی مربوط به  $\mathbf{B} = 0$  جمله زیر اضافه می‌شود

$$H_{\lambda} = \frac{e}{2\mu c} BL_z \quad (36-13)$$

اگر بسامد زیر را، که بسامد لارمور نامیده می‌شود، تعریف کنیم

$$\frac{eB}{2\mu c} = \omega_L \quad (37-13)$$

و ویژه‌حالت‌های انرژی را در نظر بگیریم که همزمان ویژه‌حالت‌های  $L_z$  و  $L^2$  هستند، آنگاه جمله اضافی ۳۶-۱۳ وقتی روی یک ویژه‌حالت اثر کند یک عدد به دست می‌دهد، یعنی

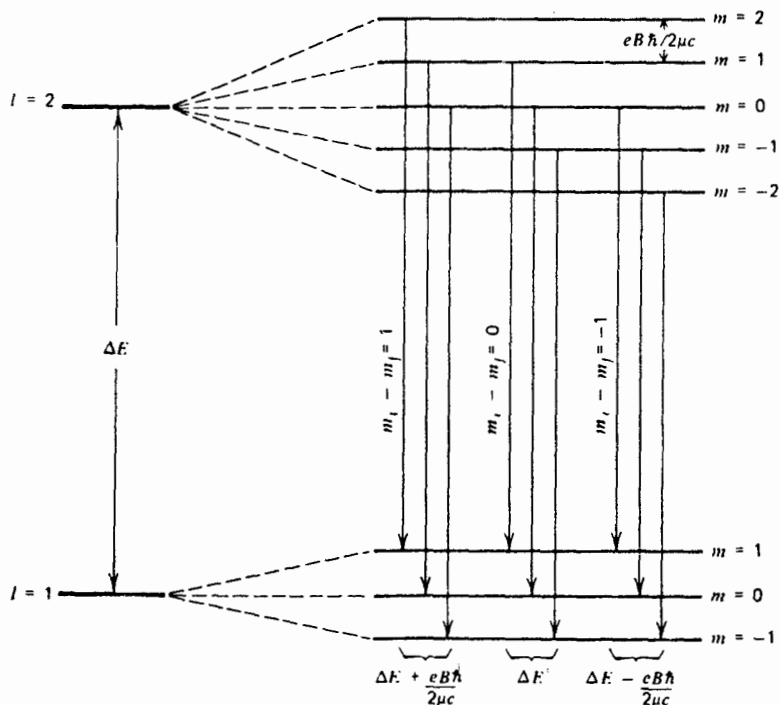
$$H_{\lambda} u_{nlm}(\mathbf{r}) = \hbar \omega_L m u_{nlm}(\mathbf{r}) \quad (38-13)$$

که در آن  $m$  ویژه‌مقدار مؤلفه  $z$  تکانه زاویه‌ای، با  $-l \leq m \leq l$ ، است. بنابراین، ترازهای انرژی موجود با واگنی  $(2l+1)$  تایی به  $2l+1$  مؤلفه همفاصله، با انرژیهای

$$E = -\frac{1}{4}\mu c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} + \hbar \omega_L m \quad (39-13)$$

شکافته می‌شوند. اندازه شکافتگی برابر است با

۲. مراجعه کنید به



شکل ۱۳-۱ اثر بهنجار زیمان: از پانزده گذار ممکن بین حالت‌های  $l = 1$  و  $l = 2$ ، که توسط میدان مغناطیسی شکافته شده‌اند، تنها نه گذار، مربوط به  $1, 0, -1$ ، در تشکیل سه خط دخالت دارند.

$$\begin{aligned}
 \frac{eB\hbar}{2\mu c} &= \frac{e\hbar}{2\mu c} \left( \frac{B}{e/a_0^2} \right) \frac{e}{a_0^2} \\
 &= \frac{e^2 \hbar}{2\mu c} \left( \frac{\mu c \alpha}{\hbar} \right)^2 \left( \frac{B}{e/a_0^2} \right) \\
 &= \left( \frac{1}{2} \alpha^2 \mu c^2 \right) \alpha \frac{B}{e/a_0^2} \\
 &= \left( \frac{B}{2.74 \times 10^4} \right) \times 13.6 \text{ eV}
 \end{aligned}$$

چون بنابه قاعده‌های گزینش (که بعداً خواهیم دید) تنها گذارهایی مجازند که در آنها  $m$  یا بدون تغییر بماند یا به اندازه ۱ تغییر کند، معلوم می‌شود که خط منفردی که گذار با  $B = 0$  را نشان می‌دهد به سه خط شکافته می‌شود شکل (۱۳-۱). این اثر را اثر بهنجار زیمان می‌نامند. در واقع، اگر حالت اسپینی الکترون در اتم حالتی با اسپین صفر نباشد، برهم‌کنش اسپین الکترون

با میدان مغناطیسی نقش قبلاً پیش‌بینی شد را تغییر می‌دهد. این اثر متداولتر را، که اثر ناهنجار زیمنان نامیده می‌شود، پس از بحث اسپین بررسی خواهیم کرد.

## میدانهای مغناطیسی بزرگ و حد کلاسیک

حل مسئله الکترون در میدان مغناطیسی ثابت تحت شرایطی که از نمی‌توان جمله  $B^2$  را صرف‌نظر کرد اما پتانسیل کولنی قابل چشم‌پوشی است جالب توجه است. در این شرایط، و باز هم با انتخاب راستای  $\mathbf{B}$  به‌عنوان محور  $z$ ، معادله شرودینگر با توجه به  $13-30$ ،  $13-32$  و  $13-33$  به‌صورت زیر درمی‌آید

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi + \frac{eB}{2\mu c} L_z \psi + \frac{e^2 B^2}{4\mu c^2} (x^2 + y^2) \psi = E \psi \quad (13-40)$$

حضور "پتانسیل"  $(x^2 + y^2)$  نشان می‌دهد که برای جداسازی متغیرها از مختصات استوانه‌ای استفاده کنیم. با نوشتن

$$\begin{aligned} x &= \rho \cos \phi \\ y &= \rho \sin \phi \end{aligned} \quad (13-41)$$

و به روشی که در آغاز فصل ۱۱ مطرح شد به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \cos \phi \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\sin \phi}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \sin \phi \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\cos \phi}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} \end{aligned} \quad (13-42)$$

و در نتیجه

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (13-43)$$

اکنون اگر بنویسیم

$$\psi(\mathbf{r}) = u_m(\rho) e^{im\phi} e^{ikz} \quad (13-44)$$

نتیجه می‌گیریم که معادله دیفرانسیل حاکم بر  $u_m(\rho)$  عبارت است از

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{du}{d\rho} - \frac{m^2}{\rho^2} u - \frac{e^2 B^2}{4\hbar^2 c^2} \rho^2 u + \left( \frac{2\mu E}{\hbar^2} - \frac{eB\hbar m}{\hbar^2 c} - k^2 \right) u = 0 \quad (45-13)$$

با وارد کردن متغیر

$$x = \sqrt{\frac{eB}{2\hbar c}} \rho \quad (46-13)$$

معادله به صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{d^2 u}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{du}{dx} - \frac{m^2}{x^2} u - x^2 u + \lambda u = 0 \quad (47-13)$$

که در آن

$$\lambda = \frac{2\mu c}{eB\hbar} \left( E - \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \right) - 2m \quad (48-13)$$

می‌توان به سادگی دید که (الف) رفتار  $u(x)$  در بینهایت که از

$$\frac{d^2 u}{dx^2} - x^2 u \approx 0$$

تعیین می‌شود به صورت  $u(x) \sim e^{-x^2/2}$  است، و (ب) رفتار  $u(x)$  در نزدیکی  $x = 0$  که از

$$\frac{d^2 u}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{du}{dx} - \frac{m^2}{x^2} u \approx 0$$

تعیین می‌شود به صورت  $u(x) \sim x^{|m|}$  است. بنابراین، می‌نویسیم

$$u(x) = x^{|m|} e^{-x^2/2} G(x) \quad (49-13)$$

و با جاگذاری در ۴۷-۱۳ معادله دیفرانسیل حاکم بر  $G(x)$  را به دست می‌آوریم:

$$\frac{d^2 G}{dx^2} + \left( \frac{2|m|+1}{x} - 2x \right) \frac{dG}{dx} + (\lambda - 2 - 2|m|)G = 0 \quad (50-13)$$

این معادله با تعویض متغیر

$$y = x^2 \quad (51-13)$$

به صورت معادله ۱۱-۱۲ در می‌آید:

$$\frac{d^2 G}{dy^2} + \left( \frac{|m| + 1}{y} - 1 \right) \frac{dG}{dy} + \frac{\lambda - 2 - 2|m|}{4y} G = 0 \quad (52-13)$$

اکنون می‌توان به روش فصل ۱۲ عمل کرد. مقایسه با ۱۱-۱۲ نشان می‌دهد که باید داشته باشیم

$$\frac{1}{4}\lambda - \frac{1 + |m|}{2} = n_r \quad (53-13)$$

که یک شرط ویژه مقدار با  $n_r = 0, 1, 2, 3, \dots$  است. این رابطه ایجاب می‌کند که  $E - \hbar^2 k^2 / 2\mu$ ، یعنی انرژی منهای انرژی جنبشی حرکت آزاد در راستای  $z$ ، از رابطه زیر به دست آید

$$E - \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} = \frac{eB\hbar}{2\mu c} (2n_r + 1 + |m| + m) \quad (54-13)$$

و

$$G(y) = L_{n_r}^{|m|}(y) \quad (55-13)$$

این جواب را تنها در حد کلاسیک بررسی می‌کنیم. برای این کار، ابتدا نظریه کلاسیک را مرور می‌کنیم. با فرض هامیلتونی ۱۳-۱۹، بدون جمله پتانسیل نرده‌ای، داریم

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{p} + (e/c)\mathbf{A}}{\mu} \quad (56-13)$$

و با  $\mathbf{A} = -(1/2)\mathbf{r} \times \mathbf{B}$  به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \mu \mathbf{r} \times \mathbf{v} &= \mathbf{r} \times \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{r} \times \left( -\frac{1}{2} \mathbf{r} \times \mathbf{B} \right) \\ &= \mathbf{L} - \frac{e}{2c} [\mathbf{r}(\mathbf{r} \cdot \mathbf{B}) - r^2 \mathbf{B}] \end{aligned} \quad (57-13)$$

که در آن از اتحاد زیر استفاده کرده‌ایم

$$\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \mathbf{b}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) - \mathbf{c}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) \quad (58-13)$$

مؤلفه معادله ۵۷-۱۳ در راستای  $\hat{z}$  عبارت است از

$$\mu(\mathbf{r} \times \mathbf{v})_z = L_z + \frac{e}{\gamma c} B(x^2 + y^2)$$

یا

$$\mu \rho v = L_z + \frac{eB}{\gamma c} \rho^2 \quad (59-13)$$

از رابطه نیروی وارد بر الکترون

$$\mathbf{F} = -\frac{e}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \quad (60-13)$$

برای حرکت دورانی به دست می‌آوریم

$$\frac{\mu v^2}{\rho} = \frac{evB}{c} \quad (61-13)$$

از ترکیب این معادله با ۵۹-۱۳ به دو رابطه زیر می‌رسیم

$$\frac{1}{\gamma} \mu v^2 = \frac{eB}{\mu c} L_z \quad (62-13)$$

و

$$\rho = \left[ \frac{\gamma c}{eB} L_z \right]^{1/2} \quad (63-13)$$

اکنون به رابطه انرژی ۵۴-۱۳ بازمی‌گردیم. به دلیل کوچکی  $\hbar$ ، انرژی فقط وقتی می‌تواند برای مقادیر معقول  $B$  اندازهٔ ماکروسکوپیک داشته باشد که  $(2n_r + 1 + |m| + m)$  بسیار بزرگ باشد. دو مورد وجود دارند: (الف) اگر  $m < 0$ ، آنگاه  $n_r$  بسیار بزرگ است. اما  $n_r$  درجهٔ چندجمله‌ای  $L_{n_r}^{(m)}(y)$  را تعیین می‌کند، یعنی تعداد صفرهای تابع را،<sup>۳</sup> و اگر این بسیار بزرگ باشد تابع نمی‌تواند

۳. نگاه کنید به بحث آغاز بخش مربوط به واگنی طیف در فصل ۱۲.



در گستره کوچکی از  $y$  که در آن مدار کلاسیک فرار دارد بزرگ باشد. (ب) اگر  $m > 0$ ، ضریب به صورت  $(2m + 1 + 2n_r)$  درمی‌آید، و این می‌تواند به‌ازای مقادیر کوچک  $n_r$  بزرگ باشد به شرط اینکه  $m$  بزرگ باشد. در اینجا انرژی عبارت است از

$$E - \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \simeq \frac{eB}{\mu c} \hbar m \quad (64-13)$$

که با نتیجه کلاسیک توافق دارد. توجه کنید که مقدار

$$L_z = \hbar m \quad (65-13)$$

همان‌طور که انتظار می‌رود مثبت است.

همچنین می‌توان نشان داد که شعاع مدار، که از بیشینه شدن توزیع احتمال شعاعی تعیین می‌شود، با مقدار کلاسیک تطابق دارد. فرض می‌کنیم  $n_r = 0$ . در این مورد،  $L_{n_r}^{|m|}(y)$  یک مقدار ثابت است، و مجذور تابع موج بنابر ۱۳-۴۹ و ۱۲-۵۵ عبارت است از

$$P(x) = x^{2|m|} e^{-x^2} \quad (66-13)$$

این کمیت در جایی بیشینه است که

$$\frac{dP}{dx} = (2|m|x^{2|m|-1} - 2x^{2|m|+1})e^{-x^2} = 0$$

یعنی در

$$x = \sqrt{|m|} \quad (67-13)$$

که به‌دست می‌دهد

$$\rho = \left( \frac{2c}{eB} \hbar m \right)^{1/2} \quad (68-13)$$

این مسئله مثال جالبی از اصل تطابق است.

## ترازهای لاندائو

انتخاب  $\mathbf{A} = (-yB/2, xB/2, 0)$  یکتا نیست. انتخاب

$$\mathbf{A} = (0, Bx, 0) \quad (۶۹-۱۳)$$

نیز همان میدان مغناطیسی را به دست می‌دهد. اختلاف این  $\mathbf{A}$  با  $\mathbf{A} = -\mathbf{r} \times \mathbf{B}/2$  در یک تبدیل پیمانه‌ای ساده است:

$$\left(\frac{-yB}{2}, \frac{xB}{2}, 0\right) = (0, Bx, 0) - \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right) \left(\frac{yxB}{2}\right) \quad (۷۰-۱۲)$$

با این انتخاب پتانسیل برداری، عملگر هامیلتونی برای الکترون در میدان مغناطیسی ثابت به صورت زیر درمی‌آید

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\mu} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 &= \frac{1}{2\mu} \left(p_x^2 + \left(p_y + \frac{eB}{c}x\right)^2 + p_z^2\right) \\ &= \frac{1}{2\mu} \left(p_x^2 + p_y^2 + \frac{2eB}{c}xp_y + \left(\frac{eB}{c}\right)^2 x^2 + p_z^2\right) \end{aligned} \quad (۷۱-۱۳)$$

بدیهی است که  $[H, p_y] = 0$  و  $[H, p_z] = 0$ ، و در نتیجه می‌توان توابعی ساخت که ویژه‌تابعهای همزمان  $p_y$ ،  $p_z$  و  $H$  باشند. باز هم این حالت را یک ویژه‌تابع  $p_z$  با ویژه‌مقدار صفر می‌گیریم. اگر ویژه‌مقدار  $p_y$  را به صورت  $hk$  بنویسیم آنگاه ویژه‌تابع همزمان به صورت زیر درمی‌آید

$$\psi(x, y) = e^{iky}v(x) \quad (۷۲-۱۳)$$

که در آن  $v(x)$  عبارت است از جواب معادله

$$\frac{1}{2\mu} \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + \left(\frac{eB}{c}\right)^2 \left(x + \frac{hck}{eB}\right)^2\right) v(x) = Ev(x) \quad (۷۳-۱۳)$$

که دقیقاً معادله یک نوسانگر هماهنگ است که نقطه تعادل آن به جای اینکه در  $x = 0$  باشد در  $x_0 = -hck/eB$  قرار دارد. بنابراین، می‌توان جواب را به صورت زیر نوشت

$$\psi(x, y) = e^{i\epsilon Bx_0 y/hc} u(x - x_0) \quad (۷۴-۱۳)$$

که در آن  $u(x)$  ویژه‌جواب نوسانگر هماهنگ با نقطهٔ تعادل  $x = 0$  است. مقایسه با پتانسیل نوسانگر هماهنگ  $\mu\omega^2 x^2/2$  نشان می‌دهد که

$$\omega = \frac{eB}{\mu c} \quad (۷۵-۱۳)$$

و ویژه‌مقدارهای انرژی عبارت‌اند از

$$E_n = h\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (۷۶-۱۳)$$

این ترازهای انرژی را ترازهای لانداؤ می‌نامند.

اگر الکترون در نواری محبوس باشد که دارای اندازه  $L_1$  در راستای  $x$  و اندازه  $L_2$  در راستای  $y$  است، شرط مرزی در راستای  $y$

$$\psi(y) = \psi(y + L_2) \quad (۷۷-۱۳)$$

ایجاب می‌کند که

$$\frac{eBx_0}{hc} L_2 = 2\pi n^1 \quad n^1 = 0, 1, 2, \dots \quad (۷۸-۱۳)$$

از آنجا که

$$0 < x_0 < L_1 \quad (۷۹-۱۳)$$

نتیجه می‌گیریم که

$$0 \leq n^1 \leq \frac{eB}{2\pi hc} L_1 L_2 \quad (۸۰-۱۳)$$

به‌سادگی می‌توان واریسی کرد که  $hc/eB$  دارای ابعاد مساحت است. (یک راه سریع این کار این است که توجه کنیم که  $eBv/c$  و در نتیجه  $eB$  ابعاد نیرو دارد:  $[eB] = [ML/T^2]$ ، در حالی که  $hc$  دارای ابعاد  $[ML^2/T^2] = [ML/T][L][L/T]$  است.) طول مغناطیسی  $l_B$  را با رابطهٔ زیر تعریف می‌کنیم

$$l_B^2 = \frac{hc}{eB} \quad (۸۱-۱۳)$$

بنابراین،

$$n_{\max}^* = \frac{L_x L_y}{2\pi l_B^2} = (\text{مساحت نمونه}) / 2\pi l_B^2 \quad (۸۲-۱۳)$$

اکنون بینیم وقتی پایستری تراز لاندائو ( $n = 0$ ) پر است چه پیش می‌آید. یک نمونه دوبعدی به مساحت  $A$  می‌تواند به‌ازای هر تراز انرژی یک الکترون بگیرد (شاید پرسید چرا در هر حالت انرژی مطابق معمول دو الکترون وجود ندارند، اما چنانکه در فصل بعد خواهیم دید الکترون‌ها دارای گشتاور مغناطیسی وابسته به اسپین هستند، و در نتیجه حالت‌های "بالا" و "پایین" الکترون انرژی‌های متفاوتی دارند). بنابراین، تعداد کل الکترون‌هایی که پایستری تراز لاندائو را پر می‌کنند برابر است با

$$n_{\max}^* = A / 2\pi l_B^2$$

### اثر کوانتومی هال با اعداد درست

بحث بالا به اثر کوانتومی هال با اعداد درست که اخیراً کشف شده است مربوط می‌شود (شکل ۱۳-۲). در اینجا به توصیف ساده‌ای از این پدیده بسنده می‌کنیم. اگر یک میدان الکتریکی را در جهت مثبت  $y$  به نمونه دوبعدی اعمال کنیم، الکترون‌ها در جهت منفی  $y$  حرکت می‌کنند، و چگالی جریان عبارت است از

$$j_y = \sigma_0 E_y \quad (۸۳-۱۳)$$

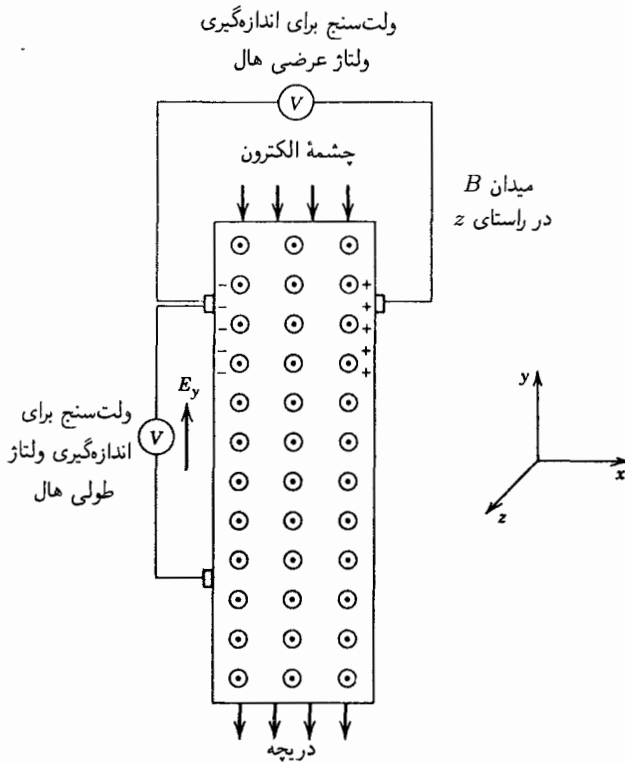
که در آن  $\sigma_0 = n_e^* \tau_0 / m_e^*$ . در اینجا  $n_e^*$  چگالی الکترون،  $m_e^*$  جرم مؤثر الکترون در ماده، و  $\tau_0$  کمیتی با بعد زمان است، که می‌توان آن را زمان بین برخوردهای الکترون با ناخالصیها و رویدادهای دیگری تعبیر کرد که باعث می‌شوند الکترون انرژی از دست بدهد و به‌طور نامحدود از میدان الکتریکی شتاب نگیرد.

اگر میدان مغناطیسی  $B$  را در جهت  $z$  اعمال کنیم، به هر الکترون نیروی اضافی  $\mathbf{F} = -e(\mathbf{v} \times \mathbf{B})/c$  وارد می‌شود. رابطه سرعت  $\mathbf{v}$  با چگالی جریان به صورت  $\mathbf{j} = -n_e e \mathbf{v}$  است، و در نتیجه الکترون‌ها به گونه‌ای رفتار می‌کنند که انگار میدان الکتریکی اضافی زیر به آنها اعمال می‌شود

$$\mathbf{E}' = \frac{(\mathbf{v} \times \mathbf{B})}{c} = \frac{-\mathbf{j} \times \mathbf{B}}{n_e c c}$$

بنابراین، در حضور میدان مغناطیسی چگالی جریان با رابطه زیر داده می‌شود

$$\mathbf{j} = \sigma_0 \mathbf{E} - \sigma_0 \mathbf{j} \times \mathbf{B} / n_e c c \quad (۸۴-۱۳)$$



شکل ۱۳-۲ طرح کلی برای اندازه‌گیری ولتاژ هال.

که در آن  $B$  در راستای عمود بر صفحه نمونه است. بنابراین، از حل معادله‌های

$$j_x = -\frac{\sigma_o B}{n_e e c} j_y$$

$$j_y = \sigma_o E_y + \frac{\sigma_o B}{n_e e c} j_x$$

و با توجه به تعریف  $\tau_o$  به دست می‌آوریم

$$j_y = \frac{\sigma_o}{1 + (eB\tau_o/m_e^+ c)^2} E_y$$

$$j_x = -\frac{n_e e c}{B} \left( 1 - \frac{1}{1 + (eB\tau_o/m_e^+ c)^2} \right) E_y \quad (۸۵-۱۳)$$

تعداد کل الکترونها را می‌توان با  $f n_{\max}^+$  نشان داد که در آن  $f$  نسبت تعداد کل الکترونها به

تعداد حالت‌های لاندائو  $n_{\max}^*$  است، و در نتیجه

$$n_e = \frac{f n_{\max}^*}{A} = f \frac{eB}{hc} \quad (۱۳-۸۶)$$

با استفاده از این رابطه به دست می‌آوریم

$$\frac{j_y}{E_y} = \sigma_0 \frac{\lambda}{\lambda + (eB\tau_0/m_e^*c)^2} \quad (۱۳-۸۷)$$

$$\frac{j_x}{e_y} = -\frac{fc^2}{h} + \frac{n_e ec/B}{\lambda + (eB\tau_0/m_e^*c)^2}$$

چگالی الکترونها و میدان مغناطیسی  $B$  در اختیار آزمایشگر است. اگر  $n_e$  ثابت باشد و  $B$  تغییر کند، آنگاه نسبت‌های ۱۳-۸۷ را می‌توان برحسب  $B$  اندازه گرفت. از طرف دیگر، اگر  $B$  ثابت و  $n_e$  متغیر باشد، این نسبت‌ها را می‌توان برحسب  $n_e$  اندازه گرفت. فون کلیتسینگ، دوردا، و پیر در سال ۱۹۸۰ نشان دادند که مقادیر  $B$  که به‌زای آنها  $f = 1, 2, 3, \dots$  باعث می‌شوند که (الف)  $(j_y|E_y) = 0$  و (ب)  $(j_x|E_y) = f(e^2/h)$ . یک توضیح ساده این اثر این است که وقتی ترازهای لاندائو پر هستند الکترون نمی‌تواند به‌طور کشسان پراکنده شود، زیرا این الکترون نمی‌تواند به حالت دیگری با همان انرژی پس‌زده شود. الکترون نمی‌تواند با برانگیختگی گرمایی به تراز لاندائو بعدی برود، زیرا در دماهای کم ( $T \approx 1\text{K}$ ) و میدانهای مغناطیسی بزرگ ( $B \approx 10^5\text{G}$ )،  $kt \ll eBh/\mu c$ . بنابراین  $\tau_0 \rightarrow \infty$ ، و نتیجه مشاهده شده پیامد ۱۳-۸۷ است. این بحث بیش از حد ساده شده است، زیرا در آن اثرهای بسیار زیادی که در وضعیت واقعی روی می‌دهند به حساب نیامده‌اند. برای مثال، بعضی از الکترون‌ها در ناکاملیهای شبکه بلوری به دام می‌افتند. ترازهای لاندائو به‌علت اثرات گرمایی و ناخالصی تیز نیستند، و برهم‌کنشهای الکترون-الکترون کاملاً نادیده گرفته شده‌اند. با وجود این، وقتی همه این پیچیدگیها را منظور کنیم، باز هم در مقادیر بحرانی  $B$  نسبت  $j_x/E_y$  را با دقتی بهتر از  $1^\circ$  روی  $1^\circ$  میلیون مضرب درستی از  $e^2/h$  به دست می‌آوریم.<sup>۴</sup>

۴. چنانکه آر لافلین نشان داده است، این کوانتش دقیق در واقع پیامد ناوردایی پیمانه‌ای است. نمونه‌ای از این استدلال را می‌توانید در کتاب زیر ببینید

C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, Sixth Edition, John Wiley & Sons, Inc New York (1986).

## کوانتس شار و اثر آهارانوف-بوهم

نیز به بحث پس از ۲۳-۱۳ باز می‌گردیم. در یک روش کاملاً صوری، می‌توانیم معادله

$$\frac{\lambda}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2 \psi(\mathbf{r}) + V(r) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) \quad (۸۸-۱۳)$$

نوشتن

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{-i(\epsilon/\hbar c) f(\mathbf{r})} \psi_0(\mathbf{r}) \quad (۸۹-۱۳)$$

حق کنیم. در اینجا  $\psi_0(\mathbf{r})$  جواب معادله زیر است

$$\frac{\lambda}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla \right)^2 \psi_0(\mathbf{r}) + V(r) \psi_0(\mathbf{r}) = E \psi_0(\mathbf{r}) \quad (۹۰-۱۳)$$

تابع  $f(\mathbf{r})$  انتگرال خطی زیر است که از یک نقطه ثابت معین  $P$  تا نقطه  $\mathbf{r}$  گرفته می‌شود

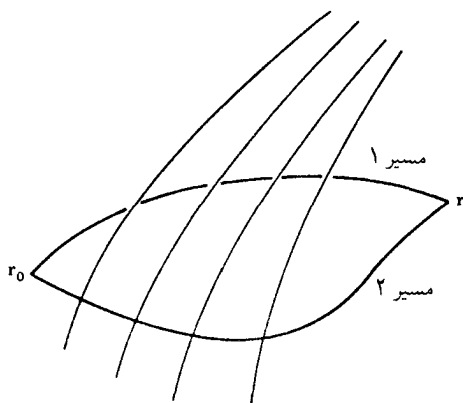
$$f(\mathbf{r}) = \int_P^{\mathbf{r}} d\mathbf{r}' \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}') \quad (۹۱-۱۳)$$

این سگرال تنها وقتی  $\mathbf{B} = 0$ ، یعنی در یک ناحیه آزاد از میدان، معنی دارد زیرا اختلاف انتگرال در دو مسیر مختلف، که آنها را با ۱ و ۲ نشانگذاری می‌کنیم، برابر است با

$$\begin{aligned} \int_{\gamma} d\mathbf{r}' \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}', t) - \int_{\gamma'} d\mathbf{r}' \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}', t) &= \oint d\mathbf{r}' \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}', t) \\ &= \int_S \nabla' \times \mathbf{A}(\mathbf{r}', t) \cdot d\mathbf{S} = \int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = \Phi \end{aligned} \quad (۹۲-۱۳)$$

که در آن از قضیه استوکس استفاده کرده‌ایم، و  $\Phi$  شار میدان مغناطیسی از سطحی است که بین دو مسیر قرار دارد (شکل ۱۳-۳). بنابراین، تنها اگر  $\Phi = 0$  ضریب فاز در ۸۹-۱۳ مستقل از انتخاب مسیر انتگرال خطی خواهد بود. این استقلال وقتی لازم است که بخواهیم تابع موج تک‌مقداری باشد

(اگر بین دو مسیر مساحت وجود داشته باشد نواح موج الکترونیایی که روی این دو مسیر حرکت می‌کنند با هم تداخل می‌پذیرند). یک پدیده جالب این است که اگر الکترونی در یک ناحیه رد در مسیر حرکت کند که همپدیده شده بیست بدکه "حفزه" ای را احاطه کرده باشد که



شکل ۱۳-۳ انتگرالهای  $\int_{r_0}^r A(r') \cdot dr'$  در دو مسیر ۱ و ۲ به طور کلی یکسان نیستند، زیرا اختلاف آنها برابر است با شار مغناطیسی  $\Phi$  در حلقه بسته.

حاوی شار  $\Phi$  است آنگاه این الکترون پس از تکمیل مدار ضریب فاز اضافی  $e^{ie\Phi/\hbar c}$  به دست می‌آورد. شرط تک مقدار بودن تابع موج الکترون، به طوری که ضریب فاز برابر واحد شود، ایجاب می‌کند که شار محصور کوانتیده باشد:

$$\Phi = \frac{2\pi\hbar c}{e} n \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (۱۳-۹۳)$$

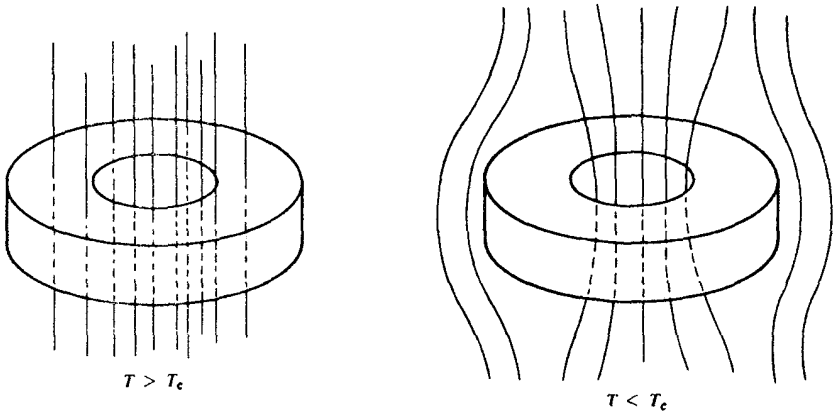
این وضعیت در حرکت الکترونها در یک حلقه ابررسانا که ناحیه حاوی شار را احاطه کرده است پیش می‌آید. نخستین آزمایشها، که در سال ۱۹۶۱ انجام شدند<sup>۵</sup>، مبتنی بر طرح زیر بودند: حلقه‌ای از ماده‌ای که می‌تواند ابررسانا شود در یک میدان مغناطیسی خارجی در دمایی بالاتر از دمای بحرانی قرار داده می‌شود، و از این رو حلقه ابررسانا نیست. چون ابررساناها خطوط میدان مغناطیسی را بجز در یک لایه سطحی نازک دفع می‌کنند، در داخل ابررساناها  $\mathbf{B} = 0$ . این پدیده را اثر مایسنر می‌نامند.<sup>۶</sup> اگر این حلقه را تا دمایی کمتر از دمای بحرانی سرد کنیم ابررسانا می‌شود، و شار مغناطیسی در داخل حلقه به دام می‌افتد (شکل ۱۳-۴). اندازه‌گیری ساده شار نشان می‌دهد که رابطه ۱۳-۹۳ با تقریب یک ضریب ثابت برقرار است، یعنی

$$\Phi = \frac{2\pi\hbar c}{(2e)} n \quad (۱۳-۹۴)$$

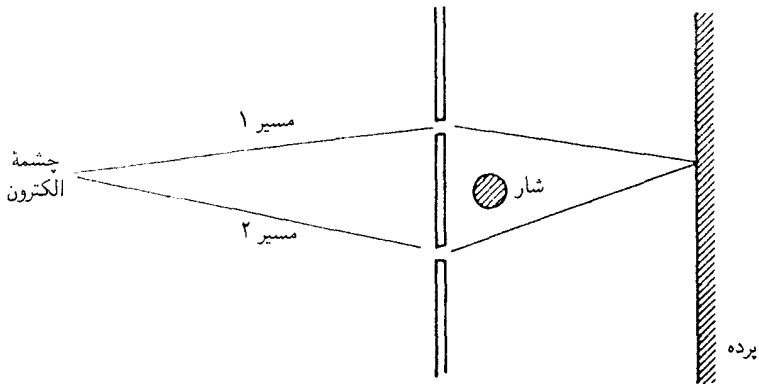
5. B S Deaver and W Fairbank, *Phys Rev Lett*, 7, 43 (1961); R Döll and M Nabauer; *ibid*, 7, 51 (1961).

۶. برای یک بحث عالی از این نشانه‌های ماکروسکوپی مکانیک کوانتومی مطالعه فصل ۲۱ از جلد سوم سخنرانیهای فاینمن درباره فیزیک اکیداً توصیه می‌شود.





شکل ۱۳-۴ یک ابررسانا در دمای  $T$  که بیشتر از دمای بحرانی  $T_c$  است مانند هر فلز معمولی دیگر رفتار می‌کند، و خطهای شار مغناطیسی می‌توانند به درون آن نفوذ کنند. وقتی دما کاهش داده می‌شود تا اینکه  $T < T_c$ ، حلقه ابررسانا می‌شود و خطهای شار مغناطیسی را دفع می‌کند. بعضی از این خطها در حلقه به دام می‌افتند. این شار محصور کوانتیده است.



شکل ۱۳-۵ طرح کلی آزمایش اندازه‌گیری انتقال نقش تداخل الکترون توسط شار مغناطیسی محصور.

این نتیجه با درک کنونی ما از پدیده ابررسانایی سازگار است، که بنابه آن "حالت‌های همبسته" زوجهای الکترون (با بار  $2e$ ) موجودات بنیادی هستند که در ابررساناها با آنها سروکار داریم. نشانه دیگری از وابستگی فاز تابع موج به شار را می‌توان، اصولاً، در یک آزمایش تداخل مشاهده کرد که در آن سیم‌نوله‌ای که شار مغناطیسی را محصور می‌کند بین شکافهای دستگاه دو شکافی قرار داده می‌شود (شکل ۱۳-۵). نقش تداخل روی پرده ناشی از برهم‌نهی دو قسمت

تابع موج است:

$$\psi = \psi_1 + \psi_2 \quad (۹۵-۱۳)$$

که در آن  $\psi_1$  معرف قسمتی از تابع موج است که الکترونی را توصیف می‌کند که مسیر ۱ را می‌پیماید، و  $\psi_2$  قسمت مربوط به مسیر ۲ است. در حضور سیمولوله، داریم

$$\begin{aligned} \psi &= \psi_1 e^{ie/\hbar c \int_1 dr \cdot A} + \psi_2 e^{ie/\hbar c \int_2 dr \cdot A} \\ &= (\psi_1 e^{ie\Phi/\hbar c} + \psi_2) e^{ie/\hbar c \int_2 dr \cdot A} \end{aligned} \quad (۹۶-۱۳)$$

بنابراین، شارباعت یک تغییر فاز نسبی بین  $\psi_1$  و  $\psi_2$  می‌شود و این فاز نسبی طرح تداخل را تغییر می‌دهد. این اثر، که ابتدا آهارانوف و بوهم متوجه آن شدند، به صورت تجربی مشاهده شده است.

## مسائل

۱-۱۳ یک ذره به جرم  $m$  در یک نوسانگر هماهنگ سه بعدی با انرژی پتانسیل  $m\omega^2 r^2/2$  دارای طیفی است که از رابطه زیر به دست می‌آید

$$E = \hbar\omega(2n_r + l + 3/2)$$

که در آن  $n_r$  عدد کوانتومی شعاعی ( $n_r = 0, 1, 2, 3, \dots$ ) و  $l$  تکانه زاویه‌ای مداری ( $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ ) است. فرض کنید ذره دارای بار  $q$  است و در میدان مغناطیسی ضعیف  $\mathbf{B}$  قرار دارد. طیف آن را برای سه حالت اول انرژی ترسیم کنید.

۲-۱۳ یک اتم پوزیترونیم، از یک الکترون و یک پوزیترون (با بار  $+e$  و جرم  $m_e$ ) را در حالت مقید هیدروژنگونه، را در نظر بگیرید. هامیلتونی این دستگاه را در یک میدان مغناطیسی خارجی ثابت بنویسید، و نشان دهید که (با نادیده گرفتن اسپینهای الکترون و پوزیترون) اثر زیمان روی نمی‌دهد. ۳-۱۳ ذره‌ای به جرم  $M$  به یک سر میله صلب بدون جرمی به طول ثابت  $R$  متصل شده است. سر دیگر میله در مبدأ ثابت است، و میله می‌تواند آزادانه حول این نقطه ثابت بچرخد. (الف) استدلال کنید که چرا هامیلتونی این دستگاه را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$H = \frac{\mathbf{L}^2}{2I} = \frac{(\mathbf{R} \times \mathbf{p})^2}{2I}$$

که در آن  $I = MR^2$

(ب) اگر ذره حامل بار  $q$  باشد و این چرخانه در میدان مغناطیسی ثابت  $\mathbf{B}$  گذاشته شود، هامیلتونی جدید را به دست آورید.

(ج) طیف انرژی را به ازای مقادیر کوچک  $B$  تعیین کنید.

۱۳-۴ طول موجهای سه خط زیمنان را در گذار  $2P \rightarrow 3D$  برای هیدروژن در میدان  $10^4 \text{ G}$  به دست آورید.

۱۳-۵ توزیع ۱۳-۵۵ را در نظر بگیرید:

$$P(x) = x^{2m} e^{-x^2} \quad (m > 0)$$

که می‌دانیم مقدار آن در  $x = \sqrt{m}$  بیشینه است. نشان دهید پهنای این توزیع تقریباً برابر است با  $1/2\sqrt{m}$ .

[راهنمایی: قرار دهید  $x = \sqrt{m}(1 + \delta)$  و  $P(x)/P_{\max}$  را محاسبه کنید.]

۱۳-۶ نشان دهید برای دستگاهی که با هامیلتونی

$$H = \frac{[\mathbf{p} + (e/c)\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)]^2}{2\mu}$$

توصیف می‌شود، شار  $\mathbf{j}$ ، که در معادله

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi^* \psi + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$$

صدق می‌کند، با رابطه زیر داده می‌شود

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2i\mu} \left[ \psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* + \frac{2ie}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \psi^* \psi \right]$$

۱۳-۷ مسئله ویژه‌مقداری را برای یک ذره باردار در میدان مغناطیسی  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$  و میدان الکتریکی متعامد  $\mathbf{E} = (E, 0, 0)$  حل کنید.

[راهنمایی: انتخاب مناسب پیمانه اهمیت دارد.]

۱۳-۸ این مسئله مثالی است که نشان می‌دهد چگونه شار مغناطیسی محصور تکانه زاویه‌ای یک ذره را در ناحیه خارج از لوله شار تغییر می‌دهد. یک میدان مغناطیسی محصور در ناحیه استوانه‌ای  $\rho < a$  را در نظر بگیرید. شار را  $\Phi$  بگیرید. در ناحیه  $\rho > a$  میدان مغناطیسی وجود ندارد، و در نتیجه پتانسیل برداری به صورت زیر است

$$\mathbf{A}(\rho, \theta, z) = \nabla \Lambda(\rho, \theta, z)$$

(الف) انتخاب پیمانه  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$  ایجاب می‌کند که

$$\nabla^2 \Lambda = 0$$

نشان دهید جواب این معادله، که در ۹۲-۱۳ صدق می‌کند، عبارت است از

$$\Lambda = \frac{1}{2\pi} \Phi \theta$$

(ب) تکانه زاویه‌ای حول محور تقارن

$$(\mu \mathbf{r} \times \mathbf{v})_z = \tilde{L}_z = \left[ \mathbf{r} \times \left( \frac{\hbar}{i} \nabla + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right]_z$$

را در مختصات استوانه‌ای محاسبه کنید، و نشان دهید به‌ازای  $\Lambda$  بالا برابر است با

$$\tilde{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{e}{c} \frac{\Phi}{2\pi}$$

(ج) مسئله ویژه‌مقداری  $\tilde{L}_z \psi = \lambda \psi$  را حل کنید، و نشان دهید تک‌مقدار بودن ویژه‌تابعها موجب کوانتس شار می‌شود.

۹-۱۳ الکترونی را در نظر بگیرید که در ناحیه بین دو استوانه به شعاعهای  $a$  و  $b$  ( $b > a$ ) محصور شده است. (الف) معادله شرودینگر را در مختصات استوانه‌ای جداسازی کنید (معادله ۱۳-۴۳)، و نشان دهید این معادله را می‌توان برحسب توابع بسل حل کرد. چه شرایطی ویژه‌مقدارهای انرژی را تعیین می‌کنند؟ (ب) درباره واگنی ویژه‌تابعهای انرژی بحث کنید. این واگنی از کجا ناشی می‌شود؟ برای توابع بسل به یادداشت زیر مراجعه کنید. یادداشت: جوابهای معادله بسل

$$\frac{d^2 u}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{du}{dz} + \left( 1 - \frac{n^2}{z^2} \right) u = 0$$

که در آن  $n$  عدد درست است دو نوع هستند: جوابهای منظم

$$J_n(z) = \left( \frac{z}{2} \right)^n \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(iz/2)^{2l}}{l!(n+l)!}$$

که توابع بسط نامیده می‌شوند، و جوابهای نامنظم

$$N_n(z) = \frac{\gamma}{\pi} J_n(z) \log \frac{\gamma z}{\gamma} - \frac{1}{\pi} \left(\frac{z}{\gamma}\right)^n \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(iz/\gamma)^{2l}}{l!(n+l)!} a_{nl}$$

$$- \frac{1}{\pi} \left(\frac{z}{\gamma}\right)^{-n} \sum_{l=0}^{n-1} \frac{(n-l-1)!}{l!} \left(\frac{z}{\gamma}\right)^{2l}$$

$$(\log \gamma = 0.5772 \dots) \quad a_{nl} = \left( \sum_{m=1}^l \frac{1}{m} + \sum_{m=1}^{l+n} \frac{1}{m} \right)$$

که توابع نویمان نامیده می‌شوند. رفتار مجانبی این توابع به صورت زیر است

$$J_n(z) \sim \left(\frac{\gamma}{\pi z}\right)^{1/2} \cos\left(z - \frac{n\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) \left[1 + O\left(\frac{1}{z^2}\right)\right]$$

$$N_n(z) \sim \left(\frac{\gamma}{\pi z}\right)^{1/2} \sin\left(z - \frac{n\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) \left[1 + O\left(\frac{1}{z^2}\right)\right]$$

بحث مفصل ویژگیهای این توابع را می‌توان در اکثر کتابهای ریاضی فیزیک که به توابع خاص می‌پردازند یافت.

## مراجع

درباره ویژگیهای مختلف حرکت الکترون در میدان مغناطیسی به روش بسیار جالبی در کتاب زیر بحث شده است

R P Feynman, R B Leighton and M Sands, *The Feynman Lectures on Physics*, Vol III, Addison- Wesley, Reading, Mass, 1965.

برای بحث مفصلی درباره آزمایشهایی که اثر آهارانوف-بوهم را بدون ابهام اثبات می‌کنند، و برای یک بحث عالی درباره نظریه مربوط مراجعه کنید به

M Peshkin and A Tonomura, *The Aharanov-Bohm Effect*, Lecture Notes in Physics, Vol 340, Springer-Verlag, Berlin/ New York, 1989.

## عملگرها، ماتریسها، و اسپین

### نمایش ماتریسی عملگرهای نوسانگر هماهنگ

بررسی صحیح آنها بدون در نظر گرفتن اسپین الکترون غیرممکن است. این ویژگی الکترونها مانسته کلاسیک ندارد، و چنانکه به زودی خواهیم دید باید آنرا به روشهای نسبتاً مجرد بررسی کنیم. خوشبختانه برای کنار گذاشتن توصیف وابسته به فضای مختصات تا حدی آماده‌گی داریم، زیرا نوسانگر هماهنگ (فصل ۷) و مسئله ویژه‌مقداری تکانه زاویه‌ای

$$\begin{aligned} L^2 Y_{lm} &= \hbar^2 l(l+1) Y_{lm} \\ L_z Y_{lm} &= \hbar m Y_{lm} \end{aligned} \quad (1-14)$$

را با روشهای عملگری بررسی کردیم. برای نوسانگر هماهنگ دیدیم که حالتها با رابطه زیر تعریف می‌شوند

$$u_n = \frac{1}{(n!)^{1/2}} (A^\dagger)^n u_0 \quad (2-14)$$

که برای آن معادله زیر برقرار است

$$Hu_n = h\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) u_n \quad (3-14)$$

و همچنین توانستیم تأثیر عملگرهای افزایشده و کاهشده را بر  $u_n$  محاسبه کنیم:

$$A^\dagger u_n = \sqrt{(n+1)} u_{n+1} \quad (4-14)$$

و

$$A u_n = \sqrt{n} u_{n-1} \quad (5-14)$$

همچنین نشان دادیم که

$$\langle u_m | u_n \rangle = \delta_{mn} \quad (6-14)$$

و این حکمی است که می‌توان آن را برای ویژه‌حالت‌های تمام عملگرهای هرمیتی (در اینجا  $H$ ) برقرار کرد. اگر  $u_m$  را در ۳-۱۴ تا ۵-۱۴ ضرب نرده‌ای کنیم به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \langle u_m | H u_n \rangle &\equiv \langle u_m | H | u_n \rangle = \left( n + \frac{1}{2} \right) h\omega \delta_{mn} \\ \langle u_m | A^\dagger u_n \rangle &\equiv \langle u_m | A^\dagger | u_n \rangle = \sqrt{(n+1)} \delta_{m,n+1} \\ \langle u_m | A u_n \rangle &\equiv \langle u_m | A | u_n \rangle = \sqrt{n} \delta_{m,n-1} \end{aligned} \quad (7-14)$$

که در آنها از نمادنگاری مقارنتر زیر استفاده کرده‌ایم

$$\langle u_i | O | u_j \rangle \equiv \langle u_i | O u_j \rangle \quad (8-14)$$

این کمیتها را می‌توان به‌صورت آرایه‌هایی که ماتریس نامیده می‌شوند مرتب کرد. در نمادنگاری قراردادی برای عنصر ماتریسی  $M_{ij}$  شاخص اول نشان سطر و شاخص دوم نشان ستون آرایه

است. بنابراین، اگر حاصلضرب زده‌ای  $\langle u_m | H | u_n \rangle$  را با  $H_{mn}$  نشان دهیم، به دست می‌آوریم

$$H = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 3/2 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 5/2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 7/2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \quad (9-14)$$

به همین ترتیب داریم

$$A^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \quad (10-14)$$

و

$$A = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \quad (11-14)$$

آرایه  $\langle u_m | F | u_n \rangle$  ها را، که در آن  $F$  یک عملگر است و  $u_i$  ها یک مجموعه کامل تشکیل می‌دهند، نمایش ماتریسی  $F$  در پایه متشکل از  $u_i$  می‌نامیم. باید نشان دهیم این نامگذاری موجه است. به عنوان مثال، ضرب ماتریسی با رابطه زیر تعریف می‌شود

$$(FG)_{ij} = \sum_n (F)_{in} (G)_{nj} \quad (12-14)$$

و باید این رابطه را برای "نمایشهای ماتریسی" عملگرهای  $F$  و  $G$  تحقیق کنیم. برای این کار، حالت  $Gu_j$  را در نظر می‌گیریم و با استفاده از کامل بودن مجموعه  $u_i$  ها آن را به صورت زیر بسط می‌دهیم

$$Gu_j = \sum_n C_n u_n \quad (13-14)$$



ضرایب  $C_n$  با رابطه زیر داده می‌شوند

$$C_n = \langle u_n | G | u_j \rangle \quad (14-14)$$

بنابراین،

$$\begin{aligned} \langle u_i | FG | u_j \rangle &= \left\langle u_i | F \left( \sum_n C_n u_n \right) \right\rangle \\ &= \sum_n C_n \langle u_i | F | u_n \rangle \\ &= \sum_n \langle u_i | F | u - N \rangle \langle u_n | G | u_j \rangle \end{aligned} \quad (15-14)$$

که همان ۱۲-۱۴ است به شرط اینکه بنویسیم

$$\langle u_i | F | u_n \rangle = F_{in} \quad (16-14)$$

و غیره. یادآوری می‌کنیم که کاملیت بردارهای پایه  $|u_n\rangle$  را می‌توان به صورت زیر بیان کرد

$$\sum_n |u_n\rangle \langle u_n| = 1 \quad (17-14)$$

با قرار دادن عملگر واحد ۱۴-۱۷ بین عملگرهای  $F$  و  $G$  در  $\langle u_i | FG | u_j \rangle$  بلافاصله ۱۴-۱۶ به دست می‌آید.

توجه دیگر ارتباط ماتریسی از رابطه زیر به دست می‌آید

$$\langle u_m | F | u_n \rangle^* = \langle F u_n | u_m \rangle = \langle u_n | F^\dagger | u_m \rangle \quad (18-14)$$

که نشان می‌دهد اگر عملگر  $F$  را با یک ماتریس نمایش دهیم عملگر همیوگ هرمیتی  $F^\dagger$  با ماتریس همیوگ هرمیتی متناظر نمایش داده می‌شود، زیرا  $F^\dagger$  با رابطه زیر تعریف می‌شود

$$(F^\dagger)_{mn} = F_{mn}^* \quad (19-14)$$

توجه کنید که در این بحث اشاره‌ای به این واقعیت نکردیم که شروع بررسی ما از ویژه‌حالت‌های هامیلتونی نوسانگر هماهنگ بود. تنها چیز خاصی که درباره این ویژه‌حالت‌ها می‌توان گفت این است که آنها ماتریس نمایشگر  $H$  را قطری می‌کنند. با هر مجموعه کاملی،  $H$  قطری نیست، و تعیین ویژه‌مقدارهای آن، یعنی عناصر ماتریس وقتی که قطری است، آسان نخواهد بود.

## نمایش ماتریسی عملگرهای تکانه زاویه‌ای

عناصر ماتریس  $L_z$  بین حالت‌های مختلف تکانه زاویه‌ای،  $\langle l'm'|L_z|lm\rangle$ ، را در نظر بگیرید. قبل از هر چیز، مشاهده می‌کنیم که رابطه

$$[L^2, L_z] = 0$$

ایجاب می‌کند که

$$\begin{aligned} 0 &= \langle l'm'|[L^2, L_z]|lm\rangle \\ &= \langle L^2 l'm'|L_z|lm\rangle - \langle l'm'|L_z|L^2 lm\rangle \quad (20-14) \\ &= \hbar^2 \{l'(l'+1) - l(l+1)\} \langle l'm'|L_z|lm\rangle \end{aligned}$$

از اینجا نتیجه می‌گیریم که اگر  $l' \neq l$ ، آنگاه  $\langle l'm'|L_z|lm\rangle$  صفر می‌شود. بنابراین،  $L_z$  تنها بین حالت‌هایی عناصر ماتریسی غیرصفر دارد که اعداد کوانتومی تکانه زاویه‌ای کل آنها یکسان هستند. برای  $L_{\pm}$  نیز همین نتیجه صادق است. بدین ترتیب، اگر  $l$  را ثابت نگه داریم، یعنی حالت‌هایی را در نظر بگیریم که برای آنها فقط  $m$  تغییر می‌کند، از معادلهٔ دوم ۱۴-۱، با یک نمادنگاری فشرده، به دست می‌آوریم

$$\langle lm'|L_z|lm\rangle = \hbar m \delta_{m',m} \quad (21-14)$$

علاوه بر این، از ۱۱-۳۶ و ۱۱-۴۸ به رابطهٔ زیر می‌رسیم

$$\langle lm'|L_{\pm}|lm\rangle = \hbar[l(l+1) - m(m \pm 1)]^{1/2} \delta_{m',m \pm 1} \quad (22-14)$$

در نتیجه، نمایش‌های ماتریسی زیر را برای عملگرهای تکانه زاویه‌ای  $l = 1$  به دست می‌آوریم

$$L_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (الف\ 23-14)$$

$$L_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (ب\ 23-14)$$

و

$$L_- = h \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \quad (۱۴-۲۳ج)$$

سطرها و ستونها به ترتیب از چپ به راست و از بالا به پایین با  $m = 1, 0, -1$  نشانگذاری می شوند. به سادگی می توان دید که برای این ماتریسها رابطه های جابه جایی برقرارند. برای مثال،

$$\begin{aligned} [L_+, L_-] &= h^2 \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} - h^2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= h^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - h^2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = 2h^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = 2hL_z \end{aligned} \quad (۱۴-۲۴)$$

رابطه های کلی میان حالتها را نیز می توان در نمایش ماتریسی نوشت. به عنوان مثال، رابطه زیر را در نظر بگیرید

$$\psi = A\phi \quad (۱۴-۲۵)$$

یکی از عضوهای مجموعه کامل  $u_i$  ها را در این رابطه ضرب نرده ای می کنیم:

$$\langle u_i | \psi \rangle = \langle u_i | A\phi \rangle \quad (۱۴-۲۶)$$

با قرار دادن عملگر واحد ۱۴-۱۷ بین  $A$  و  $\phi$ ، به دست می آوریم

$$\langle u_i | \psi \rangle = \sum_n \langle u_i | A | u_n \rangle \langle u_n | \phi \rangle \quad (۱۴-۲۷)$$

اگر  $\langle u_n | \phi \rangle$  را به صورت ماتریس ستونی زیر بنویسیم

$$\langle u_n | \phi \rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \langle u_1 | \phi \rangle \\ \langle u_2 | \phi \rangle \\ \langle u_3 | \phi \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (۱۴-۲۸)$$

و به همین ترتیب،

$$\langle u_n | \psi \rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \langle u_1 | \psi \rangle \\ \langle u_2 | \psi \rangle \\ \langle u_3 | \psi \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (29-14)$$

آنگاه برای نمایش ماتریسی رابطه ۲۵-۱۴ داریم

$$\beta_i = \sum_n A_{in} \alpha_n \quad (30-14)$$

بنابراین، ماتریسهای مربعی معرف عملگرها هستند و ماتریسهای ستونی حالتها را نمایش می‌دهند. حاصلضرب نرده‌ای  $\langle \phi | u_n \rangle = \langle u_n | \phi \rangle^*$  را بنا به قرارداد به صورت یک ماتریس سطری می‌نویسیم:

$$\langle \phi | u_n \rangle \rightarrow (\alpha_1^*, \alpha_2^*, \alpha_3^*, \dots) \quad (31-14)$$

بدین ترتیب، به عنوان مثال، حاصلضرب نرده‌ای  $\langle \phi | \psi \rangle$  را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} \langle \phi | \psi \rangle &= \sum_n \langle \phi | u_n \rangle \langle u_n | \psi \rangle \\ &= \sum_n \alpha_n^* \beta_n \end{aligned} \quad (32-14)$$

یک معادله ویژه‌مقداری مورد خاصی از رابطه ۲۵-۱۴ است:

$$A\phi = a\phi \quad (33-14)$$

که صورت ماتریسی آن عبارت است از

$$\sum_n A_{in} \alpha_n = a \alpha_i \quad (34-14)$$

این رابطه معادل اینست با

$$\begin{pmatrix} A_{11} - a & A_{12} & A_{13} & \dots \\ A_{21} & A_{22} - a & A_{23} & \dots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} - a & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = 0 \quad (35-14)$$

معادله بالا تنها وقتی جواب غیرصفر دارد که درمیان ماتریس صفر شود:

$$\det|A_{in} - a\delta_{in}| = 0 \quad (36-14)$$

این راه مناسبی برای یافتن ویژه مقدارها (و ویژه بردارها)ی عملگرهایی است که با ماتریسهای متناهی نمایش داده می‌شوند، اما برای ماتریسهای نامتناهی متأسفانه چندان ساده نیست.

### عملگر اسپین و نمایش ماتریسی آن

واقعاً جای خوشبختی است که برای نمایش عملگرها راه دیگری، غیر از استفاده از توابع و مشتقات، وجود دارد، زیرا تمام عملگرها را نمی‌توان از این راه نمایش داد. ساده‌ترین مثال در این مورد مربوط به تکانه زاویه‌ای  $l = 1/2$  است. معادله‌های ۵۱-۱۱ و ۶۰-۱۱ نشان می‌دهند که

$$Y_{1/2, \pm 1/2} = C_{\pm} \sqrt{\sin \theta} e^{\pm i\phi/2} \quad (37-14)$$

و با استفاده از ۵۴-۱۱ می‌توان نوشت

$$L_- Y_{1/2, 1/2} \propto \frac{\cos \theta}{\sqrt{\sin \theta}} e^{-i\phi/2} \quad (38-14)$$

اما این نتیجه متناسب با  $Y_{1/2, -1/2}$  نیست. بنابراین، گسترش قاعده‌های متداول به  $l = 1/2$  با مشکل مواجه می‌شود، و در نتیجه از نمایش ماتریسی استفاده می‌کنیم.<sup>۱</sup> به جای  $l = 1/2$  می‌نویسیم  $s = 1/2$ ، و حرف  $l$  را تنها برای تکانه زاویه‌ای مداری وابسته به  $\mathbf{r} \times \mathbf{p}$  به کار می‌بریم. عملگرهای اسپین عبارت‌اند از  $S_x$ ،  $S_y$  و  $S_z$  که با رابطه‌های جابه‌جایی مربوط به مؤلفه‌های تکانه‌های زاویه‌ای تعریف می‌شوند:

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z \quad (39-14)$$

۱. نشان داده شده است که  $Y_{1/2, \pm 1/2}$  به جریان احتمال از یک قطب کره ( $\theta = 0$ ) به قطب دیگر ( $\theta = \phi$ ) منجر می‌شود، به طوری که دو قطب به ترتیب به عنوان چشمه‌ها و چاهکهای احتمال عمل می‌کنند.

و غیره. عملگرهای اسپین  $1/2$  با ماتریسهای  $2 \times 2$  نمایش داده می‌شوند. از ۱۴-۲۱ به دست می‌آوریم

$$S_z = \hbar \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix} \quad (40-14)$$

و از ۱۴-۲۲ داریم

$$S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (41-14)$$

این نمایش را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$S = \frac{1}{2} \hbar \sigma \quad (42-14)$$

که در آن مؤلفه‌های

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (43-14)$$

ماتریسهای پاولی هستند. این ماتریسها در رابطه‌های جابه‌جایی زیر صدق می‌کنند

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z \quad (44-14)$$

و غیره، و همچنین برای آنها داریم

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \equiv 1 \quad (45-14)$$

ماتریسهای پاولی پاد جابه‌جاشونده هستند، به این معنی که

$$\sigma_x \sigma_y = -\sigma_y \sigma_x$$

$$\sigma_z \sigma_x = -\sigma_x \sigma_z \quad (46-14)$$

$$\sigma_y \sigma_z = -\sigma_z \sigma_y$$

این رابطه‌ها به نمایشهای اسپین  $1/2$  اختصاص دارند و مثلاً برای ماتریسهای  $l = 1$  صادق نیستند.

ویژه‌حالت‌های  $S_z$  با بردار ستونی دو مؤلفه‌ای، که آنرا اسپینور می‌نامند، نمایش داده می‌شوند. برای به دست آوردن این ویژه‌اسپینورها، معادله ویژه‌مقداری زیر را حل می‌کنیم

$$S_z \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \pm \frac{1}{2} h \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \quad (47-14)$$

یا

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

بنابراین،

$$\begin{pmatrix} u \\ -v \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \quad (48-14)$$

برای ویژه‌جواب با علامت به علاوه داریم  $v = 0$ ، و برای ویژه‌جواب با علامت منها  $u = 0$ . بنابراین، می‌نویسیم

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (49-14)$$

$\chi_+$  ویژه‌اسپینور مربوط به اسپین بالا  $[S_z = +(1/2)h]$  و  $\chi_-$  اسپین پایین  $[S_z = -(1/2)h]$  است.

یک اسپینور اختیاری را می‌توان برحسب این مجموعه کامل بسط داد:

$$\begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} = \alpha_+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_- \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (50-14)$$

بنابه قضیه بسط، اگر اسپینور درست بهنجار شده باشد به طوری که

$$|\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2 = 1 \quad (51-14)$$

آنگاه  $|\alpha_-|^2$  و  $|\alpha_+|^2$  احتمال این هستند که از اندازه‌گیری  $S_z$  روی حالت  $(\alpha_-^+)$  به ترتیب مقادیر  $-(1/2)\hbar$  و  $+(1/2)\hbar$  به دست آیند.

لازم نیست که  $S_z$  را قطری نگه داریم. برای تعیین ویژه‌حالت‌های  $S_x \cos \phi + S_y \sin \phi$  باید معادلهٔ زیر را حل کنیم

$$(S_x \cos \phi + S_y \sin \phi) \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \hbar \lambda \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \quad (52-14)$$

یا

$$\begin{pmatrix} \circ & \cos \phi - i \sin \phi \\ \cos \phi + i \sin \phi & \circ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

که ایجاب می‌کند

$$\begin{aligned} v e^{-i\phi} &= \lambda u \\ u e^{i\phi} &= \lambda v \end{aligned} \quad (53-14)$$

از ضرب طرفهای راست و همچنین طرفهای چپ این دو معادله در یکدیگر به دست می‌آوریم

$$uv(\lambda^2 - 1) = 0 \quad (54-14)$$

بنابراین،

$$\lambda = \pm 1 \quad (55-14)$$

ویژه‌بردار مربوط به  $\lambda = 1$  در رابطهٔ زیر صدق می‌کند

$$v = e^{i\phi} u$$

و در نتیجه صورت بهنجارشده عبارت است از

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\phi} \end{pmatrix}$$



با استفاده از این واقعیت که می‌توان هر بردار حالت را در یک ضریب فاز اختیاری ضرب کرد، از ضرب بردار بالا در  $e^{-i\phi/2}$  به دست می‌آوریم

$$u_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} \\ e^{i\phi/2} \end{pmatrix} \quad (56-14)$$

و به همین ترتیب، ویژه حالت مربوط به  $\lambda = -1$  را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$u_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} \\ -e^{i\phi/2} \end{pmatrix} \quad (57-14)$$

به سادگی می‌توان دید که  $u_+$  و  $u_-$  برهم عمودند:

$$\begin{aligned} u_+^\dagger u_- &= \frac{1}{2} (e^{i\phi/2}, e^{-i\phi/2}) \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} \\ -e^{i\phi/2} \end{pmatrix} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (58-14)$$

جالب توجه است که اگر  $\phi$  را به  $\phi + 2\pi$  تغییر دهیم جوابها تغییر علامت می‌دهند. این نتیجه مشخصه توابع موج اسپین نیم‌فرد (حالت‌های فرمیون) است، و مغایرتی با مکانیک کوانتومی ندارد، زیرا  $-1$  تنها یک ضریب فاز است، اما نشان می‌دهد هیچ بسته موج ماکروسکوپی یک کلاسیکی را نمی‌توان ساخت که دارای تکانه زاویه‌ای نیم‌فرد باشد.

برای یک حالت اختیاری مانند  $\alpha$ ، می‌توان مقدار انتظاری  $\mathbf{S}$  را محاسبه کرد:

$$\langle \alpha | \mathbf{S} | \alpha \rangle = \sum_i \sum_j \langle \alpha | i \rangle \langle i | \mathbf{S} | j \rangle \langle j | \alpha \rangle$$

که معادل است با

$$(\alpha_+^\dagger, \alpha_-^\dagger) \mathbf{S} \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}
 \langle S_x \rangle &= (\alpha_+^*, \alpha_-^*) \frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} \\
 &= \frac{1}{2} \hbar (\alpha_+^*, \alpha_-^*) \begin{pmatrix} \alpha_- \\ \alpha_+ \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \hbar (\alpha_+^* \alpha_- + \alpha_-^* \alpha_+) \\
 \langle S_y \rangle &= (\alpha_+^*, \alpha_-^*) \frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} \\
 &= \frac{1}{2} \hbar (\alpha_+^*, \alpha_-^*) \begin{pmatrix} -i \alpha_- \\ i \alpha_+ \end{pmatrix} = -\frac{i \hbar}{2} (\alpha_+^* \alpha_- - \alpha_-^* \alpha_+) \\
 &= (\alpha_+^*, \alpha_-^*) \frac{1}{2} \hbar \langle S_z \rangle \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} \\
 &= \frac{1}{2} \hbar (|\alpha_+^*|^2 - |\alpha_-^*|^2)
 \end{aligned} \tag{۵۹-۱۴}$$

توجه کنید که تمام اینها، همان‌طور که برای عملگرهای هرمیتی انتظار می‌رود، حقیقی هستند.

## گشتاور مغناطیسی ذاتی ذرات اسپین ۱/۲

بعداً خواهیم دید که اسپین الکترون مثلاً در هامیلتونی اتم هیدروژن به صورت جفت‌شده با تکانه زاویه‌ای مدار می‌ظاهر می‌شود. وقتی الکترون، به عنوان مثال، در یک جایگاه شبکه بلور جایگزیده باشد اغلب می‌توان اسپین را تنها درجه آزادی الکترون در نظر گرفت. الکترون به واسطه اسپین خود گشتاور دو قطبی مغناطیسی ذاتی دارد، و این گشتاور مغناطیسی<sup>۲</sup> عبارت است از

$$\mathbf{M} = -\frac{eg}{2mc} \mathbf{S} \tag{۶۰-۱۴}$$

۲. یک الکترون "کلاسیک" که با تکانه زاویه‌ای  $\mathbf{L}$  روی یک دایره حرکت می‌کند حلقه جریانی تشکیل می‌دهد که گشتاور مغناطیسی آن برابر است با  $\mathbf{M} = -e\mathbf{L}/2mc$ . چون اسپین یک متغیر صرفاً کوانتوم-مکانیکی است، ۶۰-۱۴ را تنها از روی شباهت می‌توان موجه دانست. برای توجیه این رابطه به معادله نسبی دیراک نیاز داریم، که مقدار  $g = 2$  نیز از آن به دست می‌آید. الکتروپدینامیک کوانتومی تصحیحاتی را بر  $g = 2$  اعمال می‌کند. جنبه‌های غیرکلاسیک اسپین را کاشفان آن، سامونل گاتسمیت و گورگ اولنیک، بیان کرده‌اند (۱۹۲۵).

که در آن  $g$ ، نسبت ژیرومغناطیسی، بسیار نزدیک به ۲ است:

$$g = 2 \left( 1 + \frac{\alpha}{2\pi} + \dots \right) = 2.0023192 \quad (61-14)$$

$m$  جرم الکترون، و  $\alpha$  ثابت ساختار ریز است. برای چنین الکترون جایگزیده‌ای، هامیلتونی در حضور میدان مغناطیسی خارجی تنها انرژی پتانسیل است:

$$H = -\mathbf{M} \cdot \mathbf{B} = \frac{eg\hbar}{4mc} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \quad (62-14)$$

معادله شرودینگر برای حالت  $\psi(t) = \begin{pmatrix} \alpha_+(t) \\ \alpha_-(t) \end{pmatrix}$  عبارت است از

$$i\hbar \frac{d\psi(t)}{dt} = \frac{eg\hbar}{4mc} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \psi(t) \quad (63-14)$$

اگر محور  $z$  را در راستای  $\mathbf{B}$  بگیریم، و بنویسیم

$$\psi(t) = \begin{pmatrix} \alpha_+(t) \\ \alpha_-(t) \end{pmatrix} = e^{-i\omega t} \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} \quad (64-14)$$

آنگاه معادله به صورت زیر درمی‌آید

$$\hbar\omega \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} = \frac{eg\hbar B}{4mc} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} \quad (65-14)$$

جوابها متناظر با بسامدهای مختلف  $\omega$  هستند. به‌ازای  $\omega = egB/4mc$  داریم  $\begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ، و به‌ازای  $\omega = -(egB/4mc)$  باید  $\begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ . بنابراین، اگر حالت اولیه به صورت زیر باشد

$$\psi(0) = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (66-14)$$

آنگاه حالت در یک زمان بعد عبارت خواهد بود از

$$\psi(t) = \begin{pmatrix} a e^{-i\omega t} \\ b e^{i\omega t} \end{pmatrix} \quad \omega = \frac{gcB}{4mc} \quad (67-14)$$

فرض کنید در  $t = 0$  اسپین یک ویژه حالت  $S_x$  با ویژه مقدار  $(1/2)\hbar$  است، یعنی "در جهت مثبت  $x$  قرار دارد". بنابراین،

$$\frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

یعنی  $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 1/\sqrt{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ . بدین ترتیب، در یک زمان بعد داریم

$$\begin{aligned} \langle S_x \rangle &= \frac{1}{2}\hbar \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{i\omega t}, e^{-i\omega t}) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{4} (e^{i\omega t}, e^{-i\omega t}) \begin{pmatrix} e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \cos 2\omega t \end{aligned} \quad (68-14)$$

به همین ترتیب، می‌توان نوشت

$$\begin{aligned} \langle S_y \rangle &= \frac{1}{2}\hbar \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{i\omega t}, e^{-i\omega t}) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{4} (-i e^{2i\omega t} + i e^{-2i\omega t}) \\ &= \frac{\hbar}{2} \sin 2\omega t \end{aligned} \quad (69-14)$$

بنابراین، اسپین با بسامد  $\omega$ ، که بسامد سیکلوترون نامیده می‌شود، حول راستای  $B$  حرکت تقدیمی دارد

$$2\omega = \frac{egB}{2mc} \approx \frac{eB}{mc} \equiv \omega_c \quad (70-14)$$

اگر اسپین ابتدا در یک راستای اختیاری باشد که با محور  $z$  زاویه  $\theta$  می‌سازد این حرکت تقدیمی روی می‌دهد. برای میدان مغناطیسی از مرتبه  $(1T) 10^4 G$  داریم

$$\omega_c = \frac{(4.8 \times 10^{-11} \text{esu})(10^4 G)}{(9.1 \times 10^{-28} \text{g})(3 \times 10^{10} \text{cm/s})} \approx 1.8 \times 10^{11} \text{rad/s}$$

که بسامد کاملاً بزرگی است.

## تشدید پارامغناطیسی

در یک جسم جامد عامل ژیرومغناطیسی  $g$ ی الکترون به ماهیت نیروهای فعال در این جسم بستگی دارد. دانستن  $g$  قیود بسیار مفیدی در این باره که این نیروها چگونه می‌توانند باشند به دست می‌دهد و از این رو اندازه‌گیری  $g$  اهمیت پیدا می‌کند. این اندازه‌گیری را می‌توان با روش تشدید پارامغناطیسی انجام داد. اصول این روش را در اینجا بیان می‌کنیم: یک میدان مغناطیسی در راستای  $z$  داریم و اسپین الکترون حول این راستا دارای حرکت تقدیمی است. سرعت این حرکت چقدر است؟ اگر بتوان یک میدان مغناطیسی اعمال کرد که بر محور  $z$  عمود باشد و با اسپین بچرخد آنگاه این میدان باید اسپین الکترون را ساکن "ببندد". مؤلفه اسپین الکترون که موازی با صفحه  $xy$  است ترجیحاً در جهت مخالف میدان مغناطیسی قرار می‌گیرد تا حالت کمترین انرژی به دست آید. برای الکترونی که قبلاً در این راستای کمترین انرژی قرار ندارند گذار به کمترین انرژی روی می‌دهد، و در این فرایند انرژی به صورت تابش آزاد می‌شود. این تابش را باید بتوان آشکارسازی کرد. ایجاد میدان مغناطیسی که با بسامدی از مرتبه  $10^{11}$  رادیان بر ثانیه بچرخد عملی نیست. اما اگر یک میدان مغناطیسی در راستایی مانند  $z$  داشته باشیم که با بسامد  $\omega$  نوسان کند، می‌توانیم آن را برهم‌نهی از یک میدان چرخان ساعتگرد با بسامد  $\omega$  و یک میدان چرخان پادساعتگرد با همان بسامد در صفحه  $xy$  در نظر بگیریم و فاز را چنان تنظیم کنیم که میدان برآیند در راستای  $z$  باشد. (این کار مانسته به دست آوردن قطبش خطی از جمع دو قطبش دایره‌ای است.) تنها یکی از مؤلفه‌ها در همان جهت حرکت تقدیمی اسپین حرکت می‌کند. حرکت مؤلفه دیگر در جهت مخالف حرکت تقدیمی اسپین خواهد بود و میانگین تأثیر آن روی اسپین الکترون صفر است. الکترونی را در نظر بگیرید که درجه‌های آزادی آن تنها حالت‌های اسپینی هستند، و تحت تأثیر میدان مغناطیسی بزرگ و ثابت  $B_0$  در جهت  $z$  و میدان مغناطیسی کوچک و نوسانی  $B_1 \cos \omega t$  در راستای  $x$  قرار دارد. در اینجا معادله شرودینگر عبارت است از

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} = \frac{eg\hbar}{4mc} \begin{pmatrix} B_0 & B_1 \cos \omega t \\ B_1 \cos \omega t & -B_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} \quad (71-14)$$

بنابراین، با

$$\omega_0 = \frac{egB_0}{4mc} = \frac{1}{2}\omega_c, \quad \omega_1 = \frac{egB_1}{4mc} \quad (72-14)$$

داریم

$$\begin{aligned} i \frac{da(t)}{dt} &= \omega_0 a(t) + \omega_1 \cos \omega t b(t) \\ i \frac{db(t)}{dt} &= \omega_1 \cos \omega t a(t) - \omega_0 b(t) \end{aligned} \quad (73-14)$$

فرض می‌کنیم

$$\begin{aligned} A(t) &= a(t)e^{i\omega_c t} \\ B(t) &= b(t)e^{-i\omega_c t} \end{aligned} \quad (۷۴-۱۴)$$

این توابع در معادله‌های زیر صدق می‌کنند

$$\begin{aligned} i \frac{dA(t)}{dt} &= \omega_1 \cos \omega t B(t) e^{i\omega_c t} \\ &\approx \frac{1}{2} \omega_1 e^{i(\omega_c - \omega)t} B(t) \\ i \frac{dB(t)}{dt} &= \omega_1 \cos \omega t A(t) e^{-i\omega_c t} \\ &\approx \frac{1}{2} \omega_1 e^{-i(\omega_c - \omega)t} A(t) \end{aligned} \quad (۷۵-۱۴)$$

که در آنها از تقریب زیر استفاده کرده‌ایم

$$\begin{aligned} \cos \omega t e^{i\omega_c t} &= \frac{1}{2} [e^{i(\omega_c + \omega)t} + e^{i(\omega_c - \omega)t}] \\ &\approx \frac{1}{2} e^{i(\omega_c - \omega)t} \end{aligned}$$

چون با مقادیر  $\omega = \omega_c$  سروکار داریم و هر دو بزرگ هستند، جمله‌ای را که بسیار سریع نوسان می‌کند حذف کرده‌ایم زیرا انتظار داریم میانگین سهم آن صفر باشد. یک بررسی مفصلتر این نتیجه‌گیری را تأیید می‌کند. می‌توان  $B(t)$  را برحسب  $dA(t)/dt$  تعیین کرد:

$$B(t) = \frac{2i}{\omega_1} \frac{dA(t)}{dt} e^{-i(\omega_c - \omega)t} \quad (۷۶-۱۴)$$

و با استفاده از این رابطه یک معادله دیفرانسیل مرتبه دوم برای  $A(t)$  به دست می‌آید:

$$\frac{d^2 A(t)}{dt^2} - i(\omega_c - \omega) \frac{dA(t)}{dt} + \frac{\omega_1^2}{4} A(t) = 0 \quad (۷۷-۱۴)$$

برای این معادله جوابی به صورت زیر در نظر می‌گیریم

$$A(t) = A(0)e^{i\lambda t} \quad (۷۸-۱۴)$$

با جاگذاری در ۷۷-۱۴ به معادله زیر می‌رسیم

$$-\lambda^2 + (\omega_c - \omega)\lambda + \frac{\omega_1^2}{4} = 0$$

که ریشه‌های آن مقادیر  $\lambda$  را تعیین می‌کنند:

$$\lambda_{\pm} = \frac{\omega_c - \omega \pm \sqrt{(\omega_c - \omega)^2 + \omega_1^2}}{2} \quad (79-14)$$

جواب عمومی عبارت است از

$$A(t) = A_+ e^{i\lambda_+ t} + A_- e^{i\lambda_- t} \quad (80-14)$$

و در نتیجه

$$B(t) = -\frac{2}{\omega_1} e^{-i(\omega_c - \omega)t} (\lambda_+ A_+ e^{i\lambda_+ t} + \lambda_- A_- e^{i\lambda_- t}) \quad (81-14)$$

سرانجام به دست می‌آوریم

$$a(t) = e^{-i\omega_c t/2} (A_+ e^{i\lambda_+ t} + A_- e^{i\lambda_- t})$$

$$b(t) = -\frac{2}{\omega_1} e^{-i(\omega_c/2 - \omega)t} (\lambda_+ A_+ e^{i\lambda_+ t} + \lambda_- A_- e^{i\lambda_- t}) \quad (82-14)$$

اگر در  $t = 0$  اسپین الکترون در جهت مثبت محور  $z$  باشد آنگاه  $a(0) = 1$  و  $b(0) = 0$ ، یعنی

$$A_+ + A_- = 1$$

$$\lambda_+ A_+ + \lambda_- A_- = 0$$

و در نتیجه

$$A_+ = \frac{\lambda_-}{\lambda_- - \lambda_+}$$

$$A_- = -\frac{\lambda_+}{\lambda_- - \lambda_+} \quad (83-14)$$

احتمال اینکه در یک زمان بعد مانند  $t$  اسپین در جهت منفی  $z$  باشد برابر است با  $|b(t)|^2$ :

$$\begin{aligned}
 |b(t)|^2 &= \frac{4}{\omega_1^2} \left| \frac{\lambda_+ \lambda_-}{\lambda_- - \lambda_+} e^{i\lambda_+ t} - \frac{\lambda_+ \lambda_-}{\lambda_- - \lambda_+} e^{i\lambda_- t} \right|^2 \\
 &= \frac{\omega_1^2/4}{(\omega_c - \omega)^2 + \omega_1^2} \left| 1 - e^{-i(\lambda_+ - \lambda_-)t} \right|^2 \quad (۸۴-۱۴) \\
 &= \frac{\omega_1^2}{(\omega_c - \omega)^2 + \omega_1^2} \frac{1 - \cos \sqrt{(\omega_c - \omega)^2 + \omega_1^2} t}{2}
 \end{aligned}$$

این کمیت کوچک است، زیرا  $\omega_1 \gg \omega, \omega_c$ . اگر میدان  $B_1$  را به گونه‌ای "تنظیم" کنیم که با  $\omega_c$  جور شود آنگاه احتمال به صورت زیر درمی‌آید

$$|b(t)|^2 \rightarrow \frac{1 - \cos \omega_1 t}{2} \quad (۸۵-۱۴)$$

یعنی به ۱ نزدیک می‌شود. چون انرژی حالت "بالا" با انرژی حالت "پایین" تفاوت دارد، این اختلاف انرژی که از میدان خارجی جذب می‌شود بسامد تشدید را مشخص می‌کند، و در نتیجه  $\omega_c$  و از روی آن  $g$  را می‌توان با دقت زیاد اندازه‌گیری کرد.

## مسائل

۱-۱۴ ✓ اگر بردار حالت پایه برای یک نوسانگر هماهنگ به صورت زیر باشد

$$u_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$u_1, u_2$  و  $u_3$  را با استفاده از ۱۴-۲ و ۱۴-۱۰ محاسبه کنید. طرح کلی چیست؟ نشان دهید

$$\langle u_m | u_n \rangle = \delta_{mn}$$



✓ ۱۴-۲ با داشتن بردار

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

کمیت‌های زیر را با استفاده از عملگرهای نوسانگر هماهنگ ۱۴-۹، ۱۴-۱۰ و ۱۴-۱۱ محاسبه کنید  
(الف)  $\langle H \rangle$ .

(ب)  $\langle x^2 \rangle$ ،  $\langle x \rangle$ ،  $\langle p^2 \rangle$  و  $\langle p \rangle$ .

(ج)  $\Delta p \Delta x$ .

[تذکر: رابطه‌های  $x$  و  $p$  برحسب  $A$  و  $A^\dagger$  را می‌توانید از ۷-۴ به دست آورید.]

۱۴-۳ عناصر چهار سطر و چهار ستون اول نمایش ماتریسی  $x^2$  را برای نوسانگر هماهنگ محاسبه کنید.

✓ ۱۴-۴ با استفاده از ۴-۲۱ و ۱۴-۲۲، نمایش ماتریسی  $L_x$ ،  $L_y$  و  $L_z$  را برای تکانه زاویه‌ای  $3/2$  به دست آورید. واریسی کنید که رابطه‌های جابه‌جایی

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z$$

و غیره برقرارند.

۱۴-۵ ویژه‌مقدارهای هامیلتونی

$$H = \frac{1}{2I_x} L_x^2 + \frac{1}{2I_y} L_y^2 + \frac{1}{2I_z} L_z^2$$

را با (الف) تکانه زاویه‌ای ۱، و (ب) تکانه زاویه‌ای ۲ به دست آورید.

[تذکر: برای تکانه زاویه‌ای ۲، نمایش ماتریسی  $L_z$  عبارت است از

$$L_z = \hbar \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}$$

و نمایشهای ماتریسی  $L_x$  و  $L_y$  را می‌توان از

$$L_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad L_- = (L_+)^\dagger$$

به‌دست آورد.

✓ ۶-۱۴ ویژه‌مقدارهای ماتریس زیر را محاسبه کنید

$$H = \begin{pmatrix} 8 & 4 & 6 \\ 4 & 14 & 4 \\ 6 & 4 & 8 \end{pmatrix}$$

و ویژه‌بردارهای آن‌ها به‌دست آورید

✓ ۷-۱۴ دستگاهی با اسپین  $1/2$  در نظر بگیرید که بردار حالت به‌نچارشده آن عبارت است از

$$\begin{pmatrix} \cos \alpha \\ \sin \alpha e^{i\beta} \end{pmatrix}$$

احتمال این را محاسبه کنید که از اندازه‌گیری  $S_y$  مقدار  $-h/2$  به‌دست آید.

۸-۱۴ نشان دهید که برای حالت تکانه زاویه‌ای ۱ ماتریسهای  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{n}$  که در آن  $\mathbf{n}$  یک بردار یکه اختیاری است، در معادلهٔ چندجمله‌ای زیر صدق می‌کنند

$$\sum \alpha_k (\mathbf{L} \cdot \mathbf{n})^k = 0$$

شکل این چندجمله‌ای را به‌چه صورت است؟ آیا می‌توان این معادله را به هر تکانه زاویه‌ای اختیاری  $l$  تعمیم داد؟

۹-۱۴ برای تکانه زاویه‌ای ۱، چنانکه در فصل ۱۰ گفتیم، می‌توان از  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  به‌عنوان ویژه‌حالت و از عملگرهای دیفرانسیلی برای نمایش  $\mathbf{L}$  استفاده کرد. با محاسبه

$$\int \sin \theta \, d\theta \, d\phi \, Y_{1k}^*(\theta, \phi) L_+ Y_{1m}(\theta, \phi)$$

و مقایسه آن با عنصر ماتریسی  $(L_+)_km$  یکسان بودن نتایج را نشان دهید.  
 ✓ ۱۴-۱۰ دستگاهی با تکانه زاویه‌ای ۱ با بردار حالت زیر نمایش داده می‌شود

$$u = \frac{1}{\sqrt{26}} \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ -3 \end{pmatrix}$$

احتمال اینکه از اندازه‌گیری  $L_x$  مقدار ۰ به دست آید چقدر است؟  
 ۱۴-۱۱ ویژه‌تابعها و ویژه‌مقدارهای عملگر  $L_x L_y + L_y L_x$  را برای دستگاهی با تکانه زاویه‌ای ۱ به دست آورید.

۱۴-۱۲ دستگاهی با اسپین ۱/۲ را در نظر بگیرید. ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای عملگر  $S_x + S_y$  را به دست آورید. فرض کنید این عملگر را اندازه‌گیری کرده‌ایم و دستگاه را در حالت مربوط به ویژه‌مقدار بزرگتر یافته‌ایم. احتمال این را محاسبه کنید که از اندازه‌گیری  $S_z$  مقدار  $h/2$  به دست آید.  
 ۱۴-۱۳ معادلهٔ آهنگ تغییر یک عملگر در نمایش هایزنبرگ با ۶۲-۷ داده می‌شود. اگر هامیلتونی به صورت زیر باشد

$$H = \frac{eg}{2mc} \mathbf{S}(t) \cdot \mathbf{B}$$

و رابطه‌های جابجایی  $[S_x(t), S_y(t)] = ihS_z(t)$  و غیره برقرار باشند، معادله‌های حرکت عملگرهای  $S_x(t)$ ، ... را به دست آورید. اگر  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ ،  $\mathbf{S}(t)$  را برحسب  $\mathbf{S}(0)$  تعیین کنید.

۱۴-۱۴ جسمی با اسپین ۱/۲ در زمان  $t = 0$  در یک ویژه‌حالت  $S_x$  با ویژه‌مقدار  $h/2 +$  است. در این زمان آن را در میدان مغناطیسی  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$  قرار می‌دهیم و می‌گذاریم برای مدت زمان  $T$  به حرکت تقدیمی انجام دهد. در این لحظه میدان را به سرعت به جهت  $y$  می‌چرخانیم، و در نتیجه مؤلفه‌های آن به صورت  $(0, B, 0)$  درمی‌آیند. پس از یک بازهٔ زمانی دیگر  $T$ ،  $S_x$  را اندازه می‌گیریم. احتمال اینکه مقدار  $h/2$  به دست آید چقدر است؟

۱۴-۱۵ رفتار ذره‌ای با اسپین ۱ را در میدان مغناطیسی خارجی بررسی کنید. فرض کنید به صورت  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$  است و حالت اولیه را یک ویژه‌حالت عملگر زیر به ترتیب با ویژه‌مقدارهای  $h$ ،  $0$ ،  $-\hbar$  بگیرد

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{n} = S_x \sin \theta \cos \phi + S_y \sin \theta \sin \phi + S_z \cos \theta$$

[راهنمایی: از نمایشهای ماتریسی ۱۴-۲۳ استفاده کنید.]

۱۴-۱۶ انرژی الکترونی به جرم  $\mu$  در میدان مغناطیسی  $\mathbf{B} = k\mathbf{B}$  با تکانهٔ صفر در راستای  $z$ ،

با رابطه زیر داده می‌شود

$$E = \frac{eB\hbar}{2\mu c} (2n + 1 + |m| + m) \quad \text{با} \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

(الف) با توجه به اینکه الکترون دارای اسپین  $1/2$  است، رابطه انرژی به چه صورت در می‌آید؟  
 (ب) طیف انرژی را با در نظر گرفتن اثر اسپین برای چهار حالت اول انرژی ترسیم کنید. برای هر یک از ترازهایی که ترسیم می‌کنید، مقادیر کوانتومی مربوط به آن انرژی الکترون، یعنی  $m$  و  $S_z$ ، را دقیقاً بنویسید.

### مراجع

مباحث مربوط به اسپین را می‌توان در تمام کتابهایی که در آخرین کتاب معرفی کرده‌ایم یافت.

## جمع تکانه‌های زاویه‌ای

### جمع دو اسپین

فرض کنید دو الکترون داریم که اسپینهای آنها با عملگرهای  $S_1$  و  $S_2$  توصیف می‌شوند. هر یک از این دو مجموعه عملگرها در رابطه‌های جابه‌جایی مشخصه تکانه‌های زاویه‌ای صدق می‌کنند:

$$[S_{1x}, S_{1y}] = i\hbar S_{1z}$$

و غیره، و

$$[S_{2x}, S_{2y}] = i\hbar S_{2z} \quad (۱-۱۵)$$

و غیره، اما دو مجموعه عملگر با یکدیگر جابه‌جا می‌شوند زیرا درجه‌های آزادی مربوط به ذرات مختلف مستقل از یکدیگرند، یعنی

$$[S_1, S_2] = 0 \quad (۲-۱۵)$$

اکنون اسپین کل را با رابطه زیر تعریف می‌کنیم

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 \quad (۳-۱۵)$$

رابطه‌های جابه‌جایی حاکم بر مؤلفه‌های  $\mathbf{S}$  عبارت‌اند از

$$\begin{aligned} [S_x, S_y] &= [S_{1x} + S_{2x}, S_{1y} + S_{2y}] \\ &= [S_{1x}, S_{1y}] + [S_{2x}, S_{2y}] \\ &= i\hbar(S_{1z} + S_{2z}) = i\hbar S_z \end{aligned} \quad (۴-۱۵)$$

و غیره. بنابراین، اینکه  $\mathbf{S}$  را اسپین کل گفتیم موجه است. اکنون می‌خواهیم ویژه‌مقدارها و ویژه‌تابع‌های  $\mathbf{S}^2$  و  $S_z$  را تعیین کنیم.

دستگاه دو اسپینی عملاً چهار حالت دارد. اگر اسپینورهای الکترون اول را با  $\chi_{\pm}^{(1)}$  نشان دهیم، به طوری که

$$\begin{aligned} S_x^2 \chi_{\pm}^{(1)} &= \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) \hbar^2 \chi_{\pm}^{(1)} \\ S_{1z} \chi_{\pm}^{(1)} &= \pm \frac{1}{2} \hbar \chi_{\pm}^{(1)} \end{aligned} \quad (۵-۱۵)$$

و به همین ترتیب اسپینورهای الکترون دوم  $\chi_{\pm}^{(2)}$  باشند، این چهار حالت عبارت‌اند از

$$\chi_+^{(1)} \chi_+^{(2)}, \chi_+^{(1)} \chi_-^{(2)}, \chi_-^{(1)} \chi_+^{(2)}, \chi_-^{(1)} \chi_-^{(2)} \quad (۶-۱۵)$$

ویژه‌مقدارهای  $S_z$  از رابطه‌های زیر تعیین می‌شود

$$\begin{aligned} S_z \chi_{\pm}^{(1)} \chi_{\pm}^{(2)} &= (S_{1z} + S_{2z}) \chi_{\pm}^{(1)} \chi_{\pm}^{(2)} \\ &= (S_{1z} \chi_{\pm}^{(1)}) \chi_{\pm}^{(2)} + \chi_{\pm}^{(1)} (S_{2z} \chi_{\pm}^{(2)}) \end{aligned}$$

یعنی

$$\begin{aligned} S_z \chi_+^{(1)} \chi_+^{(2)} &= \hbar \chi_+^{(1)} \chi_+^{(2)} \\ S_z \chi_+^{(1)} \chi_-^{(2)} &= S_z \chi_-^{(1)} \chi_+^{(2)} = 0 \\ S_z \chi_-^{(1)} \chi_-^{(2)} &= -\hbar \chi_-^{(1)} \chi_-^{(2)} \end{aligned} \quad (۷-۱۵)$$

به‌ازای  $m = 0$  دو حالت داریم. پیش‌بینی می‌کنیم که از یک ترکیب خطی این دو حالت یک حالت  $S = 1$  به‌دست می‌آید که با حالت‌های  $m = 1$  و  $m = -1$  یک سه‌تایی تشکیل می‌دهد، و از ترکیب متعامد یک حالت تک‌تایی  $S = 0$  به‌دست می‌آید. برای تحقیق درستی این پیش‌بینی، عسگر کاهنده زیر را می‌سازیم

$$S_- = S_{1-} + S_{r-} \quad (8-15)$$

و آن‌را بر حالت  $m = 1$  اعمال می‌کنیم. در نتیجه یک حالت  $m = 0$  به‌دست می‌آید که با ضریب یک ضریب به سه‌تایی  $S = 1$  تعلق دارد. در واقع، با استفاده از

$$S_-^{(1)} \chi_+^{(1)} = h \chi_-^{(1)} \quad (9-15)$$

که می‌توان آن‌را با توجه به رابطه زیر اثبات کرد

$$\frac{1}{\sqrt{2}} h \left[ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = h \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (10-15)$$

داریم

$$\begin{aligned} S_- \chi_+^{(1)} \chi_+^{(r)} &= (S_{1-} - \chi_+^{(1)}) \chi_+^{(r)} + \chi_+^{(1)} S_{r-} \chi_+^{(r)} \\ &= h \chi_-^{(1)} \chi_+^{(r)} + h \chi_+^{(1)} \chi_-^{(r)} \\ &= \sqrt{2} h \frac{\chi_+^{(1)} \chi_-^{(r)} + \chi_-^{(1)} \chi_+^{(r)}}{\sqrt{2}} \end{aligned} \quad (11-15)$$

این ترکیب خطی به‌نجارشده است، و ضریب جبران‌کننده  $\sqrt{2}h$  با آنچه از ۳۶-۱۱ و ۴۸-۱۱ به‌ازای  $l = m = 1$  انتظار داریم توافق دارد. با اعمال  $S_-$  بر این ترکیب خطی، و با توجه به اینکه

$$S_-^{(1)} \chi_-^{(1)} = 0 \quad (12-15)$$

به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} S_- \frac{\chi_+^{(1)} \chi_-^{(r)} + \chi_-^{(1)} \chi_+^{(r)}}{\sqrt{2}} &= \frac{h}{\sqrt{2}} (\chi_-^{(1)} \chi_-^{(r)} + \chi_-^{(1)} \chi_-^{(r)}) \\ &= \sqrt{2} h \chi_-^{(1)} \chi_-^{(r)} \end{aligned} \quad (13-15)$$

که همان چیزی است که برای حالت تکانه زاویه‌ای  $S = 1$  باید به دست آوریم. حالت باقی مانده، که طوری ساخته شده است که با ۱۵-۱۱ متعامد و درست بهنجار شده باشد، عبارت است از

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)} - \chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)}) \quad (14-15)$$

و چون همتایی ندارد حدس می‌زنیم که یک حالت  $S = 0$  باشد. برای واری این حدس،  $S^2$  را برای دو حالت زیر محاسبه می‌کنیم

$$X_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)} \pm \chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)}) \quad (15-15)$$

داریم

$$\begin{aligned} S^2 &= (S_1 + S_2)^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2S_{1z} \cdot S_{2z} \\ &= S_1^2 + S_2^2 + 2S_{1z}S_{2z} + S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+} \end{aligned} \quad (16-15)$$

ابتدا می‌نویسیم

$$\begin{aligned} S_1^2 X_{\pm} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_-^{(2)}S_{1z}\chi_+^{(1)} \pm \chi_+^{(2)}S_{1z}\chi_-^{(1)}) \\ &= \frac{3}{4}\hbar^2 X_{\pm} \end{aligned} \quad (17-15)$$

و به همین ترتیب،

$$S_2^2 X_{\pm} = \frac{3}{4}\hbar^2 X_{\pm} \quad (18-15)$$

سپس، برای جمله سوم ۱۵-۱۶ داریم

$$2S_{1z}S_{2z}X_{\pm} = 2\left(\frac{1}{2}\hbar\right)\left(-\frac{1}{2}\hbar\right)X_{\pm} = -\frac{1}{2}\hbar^2 X_{\pm} \quad (19-15)$$

و سرانجام

$$\begin{aligned} (S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+})X_{\pm} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(S_{1+}\chi_+^{(1)}S_{2-}\chi_-^{(2)} + S_{1-}\chi_+^{(1)}S_{2+}\chi_-^{(2)} \\ &\quad \pm S_{1+}\chi_-^{(1)}S_{2-}\chi_+^{(2)} \pm S_{1-}\chi_-^{(1)}S_{2+}\chi_+^{(2)}) \end{aligned}$$



که با توجه به ۹-۱۵ و ۱۲-۱۵ به صورت زیر درمی‌آید

$$(S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+})X_{\pm} = \pm \hbar^2 X_{\pm} \quad (20-15)$$

بنابراین، برای حالت‌های  $\pm$  متناظر با  $S = 1, 0$ ، به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} S^2 X_{\pm} &= \hbar^2 \left( \frac{3}{4} + \frac{3}{4} - \frac{1}{2} \pm 1 \right) X_{\pm} = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix} \hbar^2 X_{\pm} \quad (21-15) \\ &= \hbar^2 S(S+1)X_{\pm} \end{aligned}$$

آنچه نشان داده‌ایم این است که تمام چهار حالت ذرات اسپین  $1/2$  را می‌توان به صورت حالت‌های اسپین کل سه‌تایی و تک‌تایی بازترکیب کرد. باید توجه کرد که دو توصیف کاملاً هم‌ارز داریم. در یک مورد، مجموعه کامل مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده از  $S_x^2, S_y^2, S_z^2$  تشکیل می‌شود. در مورد دیگر، مجموعه کامل مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده  $S_x^2, S_y^2, S_z^2$  را داریم. بنابه قضیه بسط، هر تابعی را می‌توان برحسب مجموعه کاملی از ویژه‌حالت‌ها بسط داد. آنچه در اینجا نشان داده‌ایم بسط ویژه‌حالت‌های مجموعه دوم مشاهده‌پذیرها برحسب مجموعه کامل حالت‌های مجموعه اول مشاهده‌پذیرها است. این کاملاً شبیه به نوشتن ویژه‌حالت‌های اتم هیدروژن برحسب ویژه‌حالت‌های عملگر تکانه است، که در آن ضرایب بسط (مانسته‌های ضرایب  $1/\sqrt{2}$  در اینجا) توابع موج فضای تکانه هستند. به سادگی می‌توان این فرایند را وارونه کرد و حاصلضربهای  $\chi^{(1)}, \chi^{(2)}$  را برحسب ترکیب‌های سه‌تایی و تک‌تایی به دست آورد.

در مسائل فیزیکی، اغلب اتفاق می‌افتد که در تقریب اول این دو مجموعه مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده کامل برای ساختن ویژه‌حالت‌ها به یک اندازه مفید هستند. در تقریب بعد، وقتی جمله‌های اضافی در هامیلتونی به حساب آورده می‌شوند، تنها یکی از این دو مجموعه مفید خواهد بود. یک مثال ساده در فیزیک هسته‌ای کم انرژی پیش می‌آید.

در مطالعات اولیه پتانسیل  $V(r)$  که برهم‌کنش میان نوترون‌ها و پروتون‌ها کم‌انرژی را توصیف می‌کند معلوم شد که شدت برهم‌کنش بستگی به این دارد که دو ذره برهم‌کنش‌کننده در حالت اسپین کل  $S = 1$  باشند یا در حالت  $S = 0$ . به‌عنوان مثال، برای دوترون  $S = 1$ ، در حالی که حالت  $S = 0$  برای یک نوترون و یک پروتون حالت مقید نیست. این وضعیت را می‌توان برحسب یک پتانسیل وابسته به اسپین توصیف کرد. فرض کنید

$$V(r) = V_1(r) + \frac{1}{\hbar^2} S_1 \cdot S_2 V_2(r) \quad (22-15)$$

به سادگی می‌توان دید که  $S_1$  و  $S_2$  با جمله دوم جابه‌جا نمی‌شوند، و در نتیجه ویژه‌حالت‌های هامیلتونی حاوی این پتانسیل نمی‌توانند صرفاً حاصلضرب‌های ساده‌ای از ویژه‌حالت‌های  $S_{1z}$  و  $S_{2z}$

باشند. اما با توجه به اینکه

$$S_1 \cdot S_2 = \frac{1}{4}(S^2 - S_1^2 - S_2^2) \quad (۲۳-۱۵)$$

به طوری که می‌توان به جای این جمله، وقتی روی ویژه تابع  $S^2$ ،  $S_1^2$  و  $S_2^2$  عمل می‌کند، ویژه مقدار آن را قرار داد، می‌توانیم بنویسیم

$$\begin{aligned} V(r) &= V_1(r) + \frac{1}{4}V_2(r) \left[ S(S+1) - \frac{3}{4} \right] \\ &= V_1(r) + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 \\ -3 \end{pmatrix} V_2(r) \begin{cases} S = 1 \\ S = 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (۲۴-۱۵)$$

این نوع پتانسیل وابسته به اسپین در واقع در دستگاه نوترون-پروتون مشاهده شده است. حالت مقید یک حالت  $S = 1$  است — یعنی همان دوترون است — اما حالت نامقید  $S = 0$  نیز وجود دارد. بنابراین،  $V_1 - (3/4)V_2$  باید پتانسیلی باشد که جاذبه آن از  $V_1 + (1/4)V_2$  کمتر است. تنها اگر  $V_2(r) \neq 0$  وضعیت امکانپذیر است.

تابع موج تکتابی اسپین ۱۵-۱۴ ایجاب می‌کند که اگر در یک اندازه‌گیری معلوم شد الکترون (۲) حالت اسپین ”بالا“ است الکترون (۱) باید در حالت اسپین ”پایین“ باشد. اگرچه الکترونها یکسان هستند می‌توان یک حالت تکتابی در نظر گرفت که در آن الکترونها با تکانه‌های مساوی و مخالف به راست و به چپ حرکت می‌کنند، به طوری که دستگاه دو الکترونی باز هم نسبت به مرکز جرم ساکن است. الکترون (۲) می‌تواند الکترونی باشد که به راست حرکت می‌کند و الکترون (۱) الکترونی که به چپ حرکت می‌کند، و این گفته که الکترون سمت راست در حالت ”بالا“ است معنای کاملاً معینی دارد.

می‌توان پرسش جالبتری را مطرح کرد. فرض کنید  $S_z$  را برای الکترون (۲) اندازه گرفته‌ایم و معلوم شده است که ویژه مقدار آن  $+\hbar/2$  است. یعنی الکترون (۲) در امتداد محور  $z$  در حالت ”بالا“ست. اندازه‌گیری  $S_z$  برای الکترون (۱) چه نتیجه‌ای به دست خواهد داد؟ چون فاصله دو الکترون از یکدیگر بسیار زیاد است، ممکن است فکر کنیم که هر یک از دو مقدار  $+\hbar/2$  یا  $-\hbar/2$ ، و شاید با احتمال یکسان، می‌تواند به دست آید، زیرا اطلاعات مربوط به نتیجه ”تصویر“ الکترون (۲) بزرگ و ویژه حالت خاص  $S_z$  نمی‌تواند با سرعت نامتناهی منتشر شود تا بر اندازه‌گیری روی الکترون (۱) تأثیر بگذارد. این در واقع چیزی است که باید انتظار داشته باشیم اگر بپذیریم که یک نظریه فیزیکی کامل باید دارای معیارهای مشخصی باشد، چنانکه در یک مقاله آلبرت اینشتین، روزن، و پادولسکی به دقت بیان شده است.<sup>۱</sup> از طرف دیگر، بنابه مکانیک کوانتومی دستگاه دو

۱. این موضوع به خوبی در کتاب نظریه کوانتومی دیوید بوهم و از یک دیدگاه جدیدتر، در ارتباط با پژوهشهای جی

اسپینی با یک تک تابع موج توصیف می‌شود که در آن اسپینها همبسته‌اند. اندازه‌گیری روی بخشی از دستگاه، در اینجا  $S_x$ ، برای یکی از الکترونها، همراه با این آگاهی که دستگاه در یک حالت اسپینی تکتابی است، در واقع اندازه‌گیری روی تمام تابع موج است. بنابراین، اگر از اندازه‌گیری  $S_x$  برای الکترون (۲) مقدار  $\hbar/2$  به دست آید، آنگاه نتیجه اندازه‌گیری  $S_x$  برای الکترون (۱) باید  $-\hbar/2$  باشد. برای اثبات صوری این نتیجه، توجه کنید که ویژه‌حالت‌های  $\chi_{\pm}$  را می‌توان به ویژه‌حالت‌های  $S_x$ ، که آنها را با  $\xi_{\pm}$  نشان می‌دهیم، تجزیه کرد. قبلاً دیدیم (رابطه‌های ۱۴-۵۶ و ۱۴-۵۷ به‌ازای  $\phi = 0$ ) که

$$\xi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\lambda_{+} \pm \lambda_{-})$$

یا معادل آن

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi_{+} \pm \xi_{-})$$

با جاگذاری در

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{4}}(\lambda_{+}^{(1)} \lambda_{-}^{(2)} - \lambda_{-}^{(1)} \lambda_{+}^{(2)})$$

به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \psi &= (1/\sqrt{4})^{(2)} [(\xi_{+}^{(1)} + \xi_{-}^{(1)})(\xi_{+}^{(2)} - \xi_{-}^{(2)}) - (\xi_{+}^{(1)} - \xi_{-}^{(1)})(\xi_{+}^{(2)} + \xi_{-}^{(2)})] \\ &= \frac{1}{\sqrt{4}}(\xi_{+}^{(1)}\xi_{-}^{(2)} - \xi_{-}^{(1)}\xi_{+}^{(2)}) \end{aligned} \quad (15-25)$$

که به روشنی نشان می‌دهد اگر الکترون (۲) در حالت "بالا" باشد آنگاه الکترون (۱) باید در حالت "پایین" باشد.

## جمع اسپین ۱/۲ و تکانه زاویه‌ای مداری

آنچه در کاربردهای بعدی اهمیت فراوان دارد ترکیب اسپین با تکانه زاویه‌ای مداری است. چون  $\mathbf{L}$  وابسته به مختصات فضایی است و  $\mathbf{S}$  نیست، با هم جابه‌جا می‌شوند:

$$[\mathbf{L}, \mathbf{S}] = 0 \quad (15-26)$$

اس بل، در مکانیک کوانتومی نوین ساکورایی بررسی شده است. همچنین مراجعه کنید به سخن آخر در کتاب آشنایی با مکانیک کوانتومی دیوید جی گریفیث.

بنابراین، بدیهی است که مؤلفه‌های تکانه زاویه‌ای کل  $\mathbf{J}$  که با رابطه زیر تعریف می‌شود

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (۲۷-۱۵)$$

در رابطه‌های جابه‌جایی تکانه‌های زاویه‌ای صدق می‌کنند. برای یافتن ترکیبهای خطی  $Y_{lm}$  و  $\chi_{\pm}$  که ویژه‌حالتهای

$$J_z = L_z + S_z \quad (۲۸-۱۵)$$

و

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2 &= \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \\ &= \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2L_z S_z + L_+ S_- + L_- S_+ \end{aligned} \quad (۲۹-۱۵)$$

هستند، باز هم ضریبهای بسط یک مجموعه کامل از ویژه‌تابعها را برحسب مجموعه کامل ویژه‌تابعهای دیگر به دست می‌آوریم  
ترکیب خطی زیر را در نظر بگیرید

$$\psi_{j,m+\frac{1}{2}} = \alpha Y_{lm} \chi_+ + \beta Y_{l,m+1} \chi_- \quad (۳۰-۱۵)$$

این ترکیب، بنابه ساختارش، یک ویژه‌تابع  $J_z$  با ویژه‌مقدار  $(m + 1/2)\hbar$  است. اکنون  $\alpha$  و  $\beta$  را چنان تعیین می‌کنیم که ترکیب بالا ویژه‌تابع  $J^2$  هم باشد. با استفاده از رابطه‌های

$$\begin{aligned} L_+ Y_{lm} &= [l(l+1) - m(m+1)]^{1/2} \hbar Y_{l,m+1} \\ &= [(l+m+1)(l-m)]^{1/2} \hbar Y_{l,m+1} \\ L_- Y_{lm} &= [(l-m+1)(l+m)]^{1/2} \hbar Y_{l,m-1} \\ S_+ \chi_+ &= S_- \chi_- = 0 \quad S_{\pm} \chi_{\mp} = \hbar \chi_{\pm} \end{aligned} \quad (۳۱-۱۵)$$

می‌نویسیم

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2 \psi_{j,m+\frac{1}{2}} &= \alpha \hbar^2 \{ l(l+1) Y_{lm} \chi_+ + \frac{3}{4} Y_{lm} \chi_+ + 2m \left( \frac{1}{2} \right) Y_{lm} \chi_+ \\ &\quad + [(l-m)(l+m+1)]^{1/2} Y_{l,m+1} \chi_- \} + \beta \hbar^2 \{ l(l+1) Y_{l,m+1} \chi_- \\ &\quad + \frac{3}{4} Y_{l,m+1} \chi_- + 2(m+1) \left( -\frac{1}{2} \right) Y_{l,m+1} \chi_- \\ &\quad + [(l-m)(l+m+1)]^{1/2} Y_{l,m} \chi_+ \} \end{aligned} \quad (۳۲-۱۵)$$

که به صورت

$$\hbar^2 j(j+1)\psi_{j,m+\frac{1}{2}} = \hbar^2 j(j+1)(\alpha Y_{lm}\chi_+ + \beta Y_{l,m+1}\chi_-) \quad (۳۳-۱۵)$$

است به شرط اینکه

$$\alpha \left[ l(l+1) + \frac{3}{4} + m \right] + \beta [(l-m)(l+m+1)]^{1/2} = j(j+1)\alpha \quad (۳۴-۱۵)$$

$$\beta \left[ l(l+1) + \frac{3}{4} - m - 1 \right] + \alpha [(l-m)(l+m+1)]^{1/2} = j(j+1)\beta$$

از اینجا به دست می‌آوریم

$$(l-m)(l+m+1) = \left[ j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} - m \right] \\ \times \left[ j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} + m + 1 \right]$$

که به وضوح دارای دو جواب زیر است

$$j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} = \begin{cases} -l-1 \\ l \end{cases} \quad (۳۵-۱۵)$$

یعنی

$$j = \begin{cases} 1 - \frac{1}{2} \\ l + \frac{1}{2} \end{cases} \quad (۳۶-۱۵)$$

به ازای  $j = l + 1/2$ ، به دست می‌آوریم

$$\alpha = \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}} \quad \beta = \sqrt{\frac{1-m}{2l+1}} \quad (۳۷-۱۵)$$

در واقع نسبت را به دست می‌آوریم؛ اینها مقادیر بهنجار شده هستند. بنابراین،

$$\psi_{l+1/2,m+1/2} = \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}} Y_{lm}\chi_+ + \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}} Y_{l,m+1}\chi_- \quad (۳۸-۱۵)$$

می‌توان حدس زد که جواب مربوط به  $l - 1/2 = j$ ، برای متعامد بودن با جواب مربوط به  $l + 1/2 = j$ ، باید به صورت زیر باشد

$$\psi_{l-1/2, m+1/2} = \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}} Y_{lm} \chi_+ - \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}} Y_{l, m+1} \chi_- \quad (39-15)$$

## قاعده‌های کلی جمع تکانه‌های زاویه‌ای، و پیامدهای آن برای ذرات یکسان

دو مثال بالا ویژگیهای کلی جمع تکانه‌های زاویه‌ای را نشان می‌دهند: با داشتن ویژه‌حالت‌های  $Y_{l_1 m_1}^{(1)}$ ، مربوط به  $\mathbf{L}_1^2$  و  $L_{1z}$ ، و ویژه‌حالت‌های  $Y_{l_2 m_2}^{(2)}$ ، مربوط به  $\mathbf{L}_2^2$  و  $L_{2z}$ ، می‌توان تعداد  $(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)$  حاصلضرب توابع زیر را تشکیل داد

$$Y_{l_1 m_1}^{(1)} Y_{l_2 m_2}^{(2)} \left\{ \begin{array}{l} -l_1 \leq m_1 \leq l_1 \\ -l_2 \leq m_2 \leq l_2 \end{array} \right\} \quad (40-15)$$

این توابع موج را می‌توان با ویژه‌مقدار عملگر

$$J_z = L_{1z} + L_{2z} \quad (41-15)$$

که  $m_1 + m_2$  است و از مقدار بیشینه  $l_1 + l_2$  تا مقدار کمینه  $l_1 - l_2$  تغییر می‌کند، رده‌بندی کرد. مانند دو مورد ساده‌ای که قبلاً بررسی کردیم، ترکیب‌های خطی مختلف تابع‌های مربوط به مقدار یکسان  $m$  به مقادیر مختلف  $z$  متعلق هستند. در جدول زیر ترکیب‌های ممکن مربوط به مثال خاص  $l_1 = 4$  و  $l_2 = 2$  را می‌بینید. در این جدول از نماد اختصاری  $(m_1, m_2)$  به جای  $Y_{l_1 m_1}^{(1)} Y_{l_2 m_2}^{(2)}$  استفاده کرده‌ایم. جمعاً ۴۵ ترکیب داریم، که با  $(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)$  سازگار است.

بالاترین حالت دارای تکانه زاویه‌ای کل  $l_1 + l_2$  است، چنانکه می‌توان به سادگی از اعمال  $J^2$  بر  $Y_{l_1 l_1}^{(1)} Y_{l_2 l_2}^{(2)}$  دید:

$$\begin{aligned} J^2 Y_{l_1 l_1}^{(1)} Y_{l_2 l_2}^{(2)} &= (\mathbf{L}_1^2 + \mathbf{L}_2^2 + 2L_{1z}L_{2z} + L_{1+}L_{2-} + L_{1-}L_{2+}) Y_{l_1 l_1}^{(1)} Y_{l_2 l_2}^{(2)} \\ &= \hbar^2 [l_1(l_1 + 1) + l_2(l_2 + 1) + 2l_1 l_2] Y_{l_1 l_1}^{(1)} Y_{l_2 l_2}^{(2)} \\ &= \hbar^2 (l_1 + l_2)(l_1 + l_2 + 1) Y_{l_1 l_1}^{(1)} Y_{l_2 l_2}^{(2)} \end{aligned} \quad (42-15)$$

تعداد	ترکیبهای $m_1$ و $m_2$	مقدار $m$
۱	(۴, ۲)	۶
۲	(۴, ۱)(۳, ۲)	۵
۳	(۴, ۰)(۳, ۱)(۲, ۲)	۴
۴	(۴, -۱)(۳, ۰)(۲, ۱)(۱, ۲)	۳
۵	(۴, -۲)(۳, -۱)(۲, ۰)(۱, ۱)(۰, ۲)	۲
۵	(۳, -۲)(۲, -۱)(۱, ۰)(۰, ۱)(-۱, ۲)	۱
۵	(۲, -۲)(۱, -۱)(۰, ۰)(-۱, ۱)(-۲, ۲)	۰
۵	(۱, -۲)(۰, -۱)(-۱, ۰)(-۲, ۱)(-۳, ۲)	-۱
۵	(۰, -۲)(-۱, -۱)(-۲, ۰)(-۳, ۱)(-۴, ۲)	-۲
۴	(-۱, -۲)(-۲, -۱)(-۳, ۰)(-۴, ۱)	-۳
۳	(-۲, -۲)(-۳, -۱)(-۴, ۰)	-۴
۲	(-۳, -۲)(-۴, -۱)	-۵
۱	(-۴, -۲)	-۶

این حالت مربوط به  $z = 6$  در جدول بالا است. با اعمال پی‌درپی عملگر

$$J_- = L_{1-} + L_{2-} \quad (۴۳-۱۵)$$

یک ترکیب خطی از هر سطر جدول به دست می‌آید. این ترکیبها ۱۳ حالت تشکیل می‌دهند که متعلق به  $z = 6$  هستند. پس از انجام این کار، یک حالت با  $m = 5$ ، دو حالت با  $m = 4$ ، ...، یک حالت با  $m = -5$  باقی می‌ماند. این نتیجه‌گیری موجه است، و در واقع می‌توان واریسی کرد که حالت  $m = 5$  به  $z = 5$  مربوط می‌شود. باز هم با اعمال پی‌درپی  $L_-$  یک ترکیب خطی دیگر از هر سطر جدول به دست می‌آوریم، که جمعاً ۱۱ حالت مربوط به  $z = 5$  تشکیل می‌دهند. با ادامه این روند مجموعه‌هایی مربوط به  $z = 4$ ،  $z = 3$  و سرانجام  $z = 2$  به دست می‌آیند. تعداد اینها به ۴۵ می‌رسد:

$$۱۳ + ۱۱ + ۹ + ۷ + ۵ = ۴۵$$

جزئیات این تجزیه را بررسی نمی‌کنیم زیرا این کار فراتر از اهداف این کتاب است. تنها به بیان نتایج می‌پردازیم.

(الف) حاصلضربهای  $Y_{l_1, m_1}^{(1)} Y_{l_2, m_2}^{(2)}$  را می‌توان به ویژه حالت‌های  $J^2$  با ویژه‌مقدارهای  $\hbar^2 z(z+1)$  تجزیه کرد؛  $z$  می‌تواند مقادیر زیر را بگیرد

$$z = l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1, \dots, |l_1 - l_2| \quad (۴۴-۱۵)$$

می‌توان تحقیق کرد که تعداد حالتها با ۱۵-۴۴ تطبیق می‌کند: اگر تعداد حالتها را جمع بزینم به‌دست می‌آوریم ( $l_1 \geq l_2$ )

$$\begin{aligned} & [2(l_1 + l_2) + 1] + [2(l_1 + l_2 - 1) + 1] + \dots + [2(l_1 - l_2) + 1] \\ &= \sum_{n=0}^{2l_2} [2(l_1 - l_2 + n) + 1] \\ &= (2l_2 + 1)(2l_1 + 1) \end{aligned} \quad (45-15)$$

(ب) رابطه‌های ۱۵-۳۸ و ۱۵-۳۹ را می‌توان تعمیم داد و رشتهٔ کلبش-گوردان را به‌دست آورد:

$$\psi_{jm} = \sum_{m_1} C(jm; l_1 m_1 l_2 m_2) Y_{l_1 m_1}^{(1)} Y_{l_2 m_2}^{(2)} \quad (46-15)$$

ضرایب  $C(jm; l_1 m_1 l_2 m_2)$  را ضرایب کلبش-گوردان می‌نامند؛ این ضرایب را به‌ازای مقادیر زیادی از شناسه‌ها جدول‌بندی کرده‌اند. در اینجا این ضرایب را به‌ازای  $l_2 = 1/2$  محاسبه کرده‌ایم، و خلاصهٔ ۱۵-۳۷ و ۱۵-۳۸ را در جدول زیر نوشته‌ایم. توجه کنید که  $m = m_1 + m_2$ ، و در نتیجه  $m$  در این رابطه‌ها همان  $m_1$  در جدول زیر است.

	$C(jm; l_1 m_1, 1/2, m_2)$	
	$m_2 = 1/2$	$m_2 = -1/2$
$j = l_1 + 1/2$	$\sqrt{\frac{l_1 + m + 1/2}{2l_1 + 1}}$	$\sqrt{\frac{l_1 - m + 1/2}{2l_1 + 1}}$
$j = l_1 - 1/2$	$-\sqrt{\frac{l_1 - m + 1/2}{2l_1 + 1}}$	$\sqrt{\frac{l_1 + m + 1/2}{2l_1 + 1}}$

یک جدول مفید دیگر عبارت است از

	$C(jm; l_1 m_1, 1, m_2)$		
	$m_2 = 1$	$m_2 = 0$	$m_2 = -1$
$j = l_1 + 1$	$\sqrt{\frac{(l_1 + m)(l_1 + m + 1)}{(2l_1 + 1)(2l_1 + 2)}}$	$\sqrt{\frac{(l_1 - m + 1)(l_1 + m + 1)}{(2l_1 + 1)(l_1 + 1)}}$	$\sqrt{\frac{(l_1 - m)(l_1 - m + 1)}{(2l_1 + 1)(2l_1 + 2)}}$
$j = l_1$	$-\sqrt{\frac{(l_1 + m)(l_1 - m + 1)}{2l_1(l_1 + 1)}}$	$\frac{m}{\sqrt{l_1(l_1 + 1)}}$	$\sqrt{\frac{(l_1 - m)(l_1 + m + 1)}{2l_1(2l_1 + 1)}}$
$j = l_1 - 1$	$\sqrt{\frac{(l_1 - m)(l_1 - m + 1)}{2l_1(2l_1 + 1)}}$	$-\sqrt{\frac{(l_1 - m)(l_1 + m)}{l_1(2l_1 + 1)}}$	$\sqrt{\frac{(l_1 + m)(l_1 + m + 1)}{2l_1(2l_1 + 1)}}$



$\chi$  صغیرون  $\chi$  با  $\chi$

و در پایان باید نکته‌ای را تذکر دهیم: در بحث ذرات یکسان گفتیم که دستگاه متشکل از دو الکترون (یا به‌طور کلی دو فرمیون) باید در حالتی باشد که تحت تعویض دو ذره پادمتقارن است. در این تعویض، علاوه بر تبادل مختصات فضایی، تبادل نشانهای اسپینی نیز دخیل است. برای دستگاهی متشکل از دو ذره یکسان با اسپین  $1/2$ ، حالت‌های سه‌تایی  $S = 1$ ، یعنی

$$\begin{aligned} & \chi_+^{(1)} \chi_+^{(2)} \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_+^{(1)} \chi_-^{(2)} + \chi_-^{(1)} \chi_+^{(2)}) \\ & \chi_-^{(1)} \chi_-^{(2)} \end{aligned} \quad (47-15)$$

تحت تعویض نشان اسپینی متقارن هستند، در حالی که حالت تک‌تایی  $S = 0$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_+^{(1)} \chi_-^{(2)} - \chi_-^{(1)} \chi_+^{(2)}) \quad (48-15)$$

پادمتقارن است. بنابراین، تابع موج فضایی باید برای حالت سه‌تایی پادمتقارن و برای حالت تک‌تایی متقارن باشد. تابع موج فضایی دستگاه دو ذره‌ای در چارچوب مرکز جرم به‌صورت کلی زیر است

$$u(\mathbf{r}) = R_{nlm}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (49-15)$$

تعویض مختصات دو ذره هم‌ارز تبدیل زیر است

$$\begin{aligned} r & \rightarrow r \\ \theta & \rightarrow \pi - \theta \\ \phi & \rightarrow \phi + \pi \end{aligned} \quad (50-15)$$

بنابراین، تابع شعاعی تغییر نمی‌کند. اما تحت این تبدیل داریم

$$\begin{aligned} Y_{lm}(\theta, \phi) & \rightarrow Y_{lm}(\pi - \theta, \phi + \pi) \\ & = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \phi) \end{aligned} \quad (51-15)$$

در نتیجه، تکانه زاویه‌ای مداری  $l$  باید برای حالت‌های سه‌تایی فرد و برای حالت‌های تک‌تایی زوج باشد. در بحث اتم هلیم کاربرد این نتیجه را خواهیم دید.

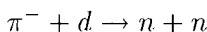
## نکاتی دربارهٔ پارینه

استدلال بالا را می‌توان برای بررسی خواص  $Y_{lm}$  تحت وارونی به‌کار برد. تبدیل  $x \rightarrow -x$ ،  $y \rightarrow -y$  و  $z \rightarrow -z$  با  $15^\circ - 5^\circ$  است. بنابراین، می‌بینیم که ذره‌ای در یک حالت تکانهٔ زاویه‌ای مداری دارای تابع موجی است که با  $(-1)^l$  تغییر می‌کند. حالت‌های مداری با  $l$  زوج حالت‌های پارینهٔ زوج نیز هستند، و حالت‌های مداری با  $l$  فرد حالت‌های پارینهٔ فرد هستند. اما باید توجه داشت که ذرات می‌توانند پارینهٔ ذاتی هم داشته باشند. می‌توان پارینهٔ الکترون و نوترون و پروتون را زوج تعریف کرد. آنگاه، به‌عنوان مثال، پارینهٔ حالت  $l = 1$  برای هیدروژن، فرد است، در حالی‌که پارینهٔ حالت پایهٔ آن زوج است.

در مکانیک کوانتومی نسبیتی می‌توان نشان داد که پارینهٔ ذاتی پادذرهٔ یک فرمیون مخالف پارینهٔ ذاتی فرمیون است. مثلاً  $e^+$  دارای پارینهٔ ذاتی منفی است، و در نتیجه حالت پایهٔ پوزیترونیم که برای آن  $l = 0$  پارینهٔ منفی دارد.

یک کاربرد جالب این نکات را در فیزیک ذرات بنیادی می‌توان دید. یکی از اولین ذرات بنیادی ناپایدار که بنابه پیش‌بینی یوکاوا باید کشف می‌شد مزون  $\pi$  بود. این ذره که دارای سه حالت بار  $\pi^+$ ،  $\pi^0$  و  $\pi^-$  است نقش مهمی در نیروهای هسته‌ای دارد. معلوم شد که این ذره دارای اسپین ۰ است، و این سؤال پیش آمد که با فرض اینکه ذرات شناخته‌شدهٔ پروتون و نوترون پارینهٔ ذاتی مثبت داشته باشند، تابع موج مزون پی — که بعداً پیون نامیده شد — تحت انعکاس زوج است یا فرد؟ آزمایش زیر پیشنهاد شد.

گیراندازی  $\pi^-$  توسط دوترون را در نظر بگیرید. یک پیون کند در دوتریم مایع از راه‌های مختلفی انرژی از دست می‌دهد تا سرانجام در پایین‌ترین مدار بور حول هستهٔ  $(pn)$  قرار گیرد، و سپس تحت تأثیر نیروهای هسته‌ای گیر می‌افتد. در واکنش هسته‌ای



تکانهٔ زاویه‌ای برابر با ۱ است؛ اسپین پیون صفر است، و تکانهٔ زاویه‌ای مداری در پایین‌ترین حالت بور صفر است، و در نتیجه تنها تکانهٔ زاویه‌ای دوترون که ۱ است، در این مورد سهم است. بنابراین، دو نوترون باید در حالت تکانهٔ زاویه‌ای ۱ باشند. اگر اسپین کل دو نوترون ۰ باشد، تکانهٔ زاویه‌ای مداری باید ۱ باشد. اگر اسپین کل حالت دو نوترون ۱ باشد، تکانهٔ زاویه‌ای مداری می‌تواند ۰، ۱، و ۲ باشد، زیرا جمع دو تکانهٔ زاویه‌ای که هر یک از آنها برابر واحد است می‌تواند ۰، ۱، و ۲ باشد، و افزودن یک واحد به دو واحد تکانهٔ زاویه‌ای می‌تواند ۳، ۲، و ۱ را به‌دست دهد. اما حالت تکتابی دو فرمیون یکسان باید تکانهٔ زاویه‌ای زوج داشته باشد، و از این رو کنار گذاشته می‌شود. یک حالت سه‌تابی باید تکانهٔ زاویه‌ای مداری فرد داشته باشد، و این در صورتی ممکن است که تکانهٔ زاویه‌ای مداری ۱ باشد. اما این حالت بنابه  $15-5$  دارای پارینهٔ فرد است، و در نتیجه پیون باید پارینهٔ

فرد داشته باشد. با نمادنگاری طیف‌نمایی، که در آن یک حالت با

$${}^{2S+1}L_J \quad (52-15)$$

نشانگذاری می‌شود، حالت‌های دونوترون، از تمام رده‌ی حالت‌های  ${}^1S_0, {}^1P_1, {}^1D_2, {}^1F_3, \dots, {}^2S_1, {}^2P_1, {}^2P_2, {}^2P_0, {}^2D_2, {}^2D_3, {}^2D_1, {}^2D_3, {}^2F_4, {}^2F_3, {}^2F_2, {}^2F_1, \dots$  با توجه به آمار فرمی-دیراک به  ${}^1S_0, {}^1D_2, \dots, {}^2P_{1,1,0}, {}^2F_{3,2,2}, \dots$  محدود می‌شوند، و از اینها تنها یک حالت، حالت  ${}^2P_1$ ، دارای تکانه‌ی زاویه‌ای ۱ است.

## مسائل ۴

✓ ۱-۱۵-۱۵ تعمیم ۳۸-۱۵ و ۳۹-۱۵ به جمع تکانه‌ی زاویه‌ای مداری با اسپین ۱ را به تفصیل بنویسید. (الف) ویژه‌حالت‌های  $S^2$  و  $S_z$  را به دست آورید. در این مورد،

$$S_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(ب) اگر این ویژه‌حالت‌ها را با  $\xi_{+1}, \xi_0$  و  $\xi_{-1}$  نشان دهیم، نتیجه‌ی اعمال  $S_+$  و  $S_-$  بر این حالت‌ها را به دست آورید.  
(ج) تأثیر

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2L_z S_z + L_+ S_- + L_- S_+$$

را بر ترکیب‌هایی مانند

$$\psi_{j,m+1} = \alpha Y_{l,m+1} \xi_1 + \beta Y_{l,m+1} \xi_0 + \gamma Y_{l,m+2} \xi_{-1}$$

محاسبه کنید.

(د) رابطه‌های میان  $\alpha, \beta$  و  $\gamma$  را با استفاده از معادله‌ی زیر تعیین کنید

$$\mathbf{J}^2 \Psi_{j,m} = \hbar^2 j(j+1) \Psi_{j,m}$$

✓ ۱۵-۲ مانسته ۴۷-۱۵ را برای دو ذره با اسپین ۱، که از ترکیب آنها حالت‌های اسپین ۱، ۲ و ۰

به دست می‌آیند، محاسبه کنید. از نمادنگاری  $\xi_{+1}^{(i)}$ ،  $\xi_{0}^{(i)}$  و  $\xi_{-1}^{(i)}$  برای بردارهای اسپین تک‌ذره‌ای استفاده کنید.

۳-۱۵ دو ترون دارای اسپین ۱ است. حالت‌های ممکن اسپین و تکانه زاویه‌ای کل دو دوترون را در یک حالت تکانه زاویه‌ای اختیاری  $L$  به دست آورید. قواعد مقارن‌سازی را فراموش نکنید.

۴-۱۵ ذره‌ای با اسپین ۱ در پتانسیل مرکزی زیر حرکت می‌کند

$$V(r) = V_1(r) + \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}}{\hbar^2} V_2(r) + \frac{(\mathbf{S} \cdot \mathbf{L})^2}{\hbar^2} V_3(r)$$

مقادیر  $V(r)$  را در حالت‌های  $J = L - 1$  و  $L$  و  $L + 1$  به دست آورید.

۵-۱۵ بحث تعیین پاریته  $\pi^-$  را در نظر بگیرید. فرض کنید  $\pi^-$  اسپین ۱ دارد اما باز هم در واکنش

$$\pi^- + d \rightarrow 2n$$

در یک حالت مداری  $L = 0$  گیر می‌افتد. حالت‌های ممکن دو نوترون را به دست آورید. اگر پاریته  $\pi^-$  منفی باشد چه حالت‌هایی مجاز هستند؟

۶-۱۵ فرض کنید  $\pi^-$  اسپین ۰ و پاریته منفی دارد اما در واکنش

$$\pi^- + d \rightarrow 2n$$

از مدار  $P$  گیر می‌افتد. نشان دهید که این دو نوترون باید در حالت تکتابی باشند.

۷-۱۵ هامیلتونی یک دستگاه اسپین‌دار عبارت است از

$$H = A + \frac{BS_1 \cdot S_2}{\hbar^2} + \frac{C(S_{1z} + S_{2z})}{\hbar}$$

ویژه‌مقدارها و ویژه‌تابعهای دستگاه دودره‌ای را به دست آورید اگر (الف) هر دو ذره اسپین  $1/2$  داشته باشند؛ (ب) یکی از ذرات اسپین  $1/2$  و دیگری اسپین ۱ داشته باشد. در قسمت (الف) فرض کنید دو ذره یکسان هستند.

۸-۱۵ دو ذره با اسپین  $1/2$  را در نظر بگیرید؛ اسپین‌های این دو ذره با عملگرهای پاولی  $\sigma_1$  و  $\sigma_2$  توصیف می‌شوند.  $\hat{e}$  را بردار واحد راستایی بگیرید که دو ذره را به هم وصل می‌کند و عملگر زیر را تعریف کنید

$$S_{12} = 3(\sigma_1 \cdot \hat{e})(\sigma_2 \cdot \hat{e}) - \sigma_1 \cdot \sigma_2$$

نشان دهید اگر این دو ذره در حالت  $S = 0$  (تکتایی) باشند آنگاه

$$S_{1z} X_{\text{تکتایی}} = 0$$

برای حالت سه‌تایی داریم

$$(S_{1z} - 2)(S_{1z} + 4) X_{\text{سه‌تایی}} = 0$$

[راهنمایی:  $\hat{e}$  را در راستای  $z$  بگیرید.]

۹-۱۵ در یک دستگاه نوترون-پروتون کم‌انرژی (که دارای تکانه زاویه‌ای مداری صفر است) انرژی پتانسیل با رابطه زیر داده می‌شود

$$V(r) = V_1(r) + V_2(r) \left( 3 \frac{(\sigma_1 \cdot r)(\sigma_2 \cdot r)}{r^2} - \sigma_1 \cdot \sigma_2 \right) + V_3(r) \sigma_1 \cdot \sigma_2$$

که در آن  $r$  برداری است که دو ذره را به هم متصل می‌کند. انرژی پتانسیل این دستگاه پروتون-نوترون را در حالت‌های زیر محاسبه کنید.

(الف) در حالت تکتایی اسپین.

(ب) در حالت سه‌تایی.

✓ ۱۵-۱۰ دو الکترون را در حالت تکتایی اسپین در نظر بگیرید.

(الف) اگر اندازه‌گیری اسپین یکی از الکترون‌ها نشان دهد که این الکترون در حالتی با  $s_z = 1/2$  است، احتمال این را تعیین کنید که اندازه‌گیری مؤلفه  $z$  اسپین الکترون دیگر مقدار  $s_z = 1/2$  را به دست دهد.

(ب) اگر اندازه‌گیری اسپین یکی از الکترون‌ها نشان دهد که این الکترون در حالتی با  $s_y = 1/2$  است، احتمال اینکه از اندازه‌گیری مؤلفه  $x$  اسپین مقدار  $s_x = -1/2$  برای الکترون دوم به دست آید چقدر است؟

(ج) اگر الکترون (۱) در حالتی باشد که با  $\cos \alpha_1 \chi_+ + \sin \alpha_1 e^{i\beta_1} \chi_-$  و الکترون (۲) در حالتی باشد که با  $\cos \alpha_2 \chi_+ + \sin \alpha_2 e^{i\beta_2} \chi_-$  توصیف می‌شود، احتمال این را به دست آورید که حالت دو الکترون یک حالت سه‌تایی باشد.

## مراجع

مطالب این فصل، با روش‌های مختلفی، در تمام کتابهای درسی مکانیک کوانتومی بیان می‌شوند. بسیاری از جزئیات را می‌توان در کتاب زیر یافت

M E Rose, *Elementary Theory of Angular Momentum*, John Wiley & Sons, New York, 1957.

## نظریهٔ اختلال مستقل از زمان

### نظریهٔ اختلال برای حالت‌های ناواکن

تعداد پتانسیلهای  $V(r)$  که برای آنها معادلهٔ شرودینگر حل دقیق دارد اندک است، و بیشتر آنها را قبلاً بررسی کردیم. بنابراین، برای معادله‌هایی که حل دقیق ندارند باید از روشهای تقریبی برای تعیین ویژه‌مقدارها و ویژه‌تابعها استفاده کنیم. در این فصل به بررسی نظریهٔ اختلال می‌پردازیم. فرض می‌کنیم ویژه‌مقدارها و مجموعهٔ کامل ویژه‌تابعهای بهنجارشدهٔ هامیلتونی  $H_0$  را داریم:

$$H_0 \phi_n = E_n^0 \phi_n \quad (۱-۱۶)$$

و می‌خواهیم ویژه‌مقدارها و ویژه‌تابعهای هامیلتونی زیر را به دست آوریم

$$H = H_0 + \lambda H_1 \quad (۲-۱۶)$$

یعنی می‌خواهیم معادلهٔ ویژه‌مقداری زیر را حل کنیم

$$(H_0 + \lambda H_1) \psi_n = E_n \psi_n \quad (۳-۱۶)$$

کمیت‌های مطلوب را به صورت رشته‌های توانی برحسب  $\lambda$  بیان می‌کنیم. مسئلهٔ همگرایی این رشته‌ها را بررسی نمی‌کنیم. اغلب این رشته‌ها نمی‌توانند همگرا باشند، اما باز هم چند جملهٔ اول آنها، وقتی  $\lambda$  کوچک است، دستگاه فیزیکی را به خوبی توصیف می‌کنند. فرض می‌کنیم اگر  $\lambda \rightarrow 0$ ، آنگاه  $\psi_n \rightarrow \phi_n$  و  $E_n \rightarrow E_n^{(0)}$ .

چون  $\phi_i$  ها یک مجموعهٔ کامل تشکیل می‌دهند، می‌توان  $\psi_n$  را برحسب آنها بسط داد. می‌نویسیم

$$\psi_n = N(\lambda) \left\{ \phi_n + \sum_{k \neq n} C_{nk}(\lambda) \phi_k \right\} \quad (4-16)$$

ضریب  $N(\lambda)$  برای بهنجار کردن  $\psi_n$  است. در انتخاب فاز  $\psi_n$  آزادیم، و آن را به گونه‌ای انتخاب می‌کنیم که ضریب  $\phi_n$  در بسط بالا حقیقی و مثبت باشد. چون وقتی  $\lambda \rightarrow 0$  می‌خواهیم  $\psi_n \rightarrow \phi_n$ ، باید

$$\begin{aligned} N(0) &= 1 \\ C_{nk}(0) &= 0 \end{aligned} \quad (5-16)$$

به‌طور کلی داریم

$$C_{nk}(\lambda) = \lambda C_{nk}^{(1)} + \lambda^2 C_{nk}^{(2)} + \dots \quad (6-16)$$

و

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \quad (7-16)$$

بنابراین، معادلهٔ شرودینگر به صورت زیر در می‌آید

$$(H_0 + \lambda H_1) \left\{ \phi_n + \sum_{k \neq n} \lambda C_{nk}^{(1)} \phi_k + \sum_{k \neq n} \lambda^2 C_{nk}^{(2)} \phi_k + \dots \right\} \quad (8-16)$$

$$= (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots) \left\{ \phi_n + \sum_{k \neq n} \lambda C_{nk}^{(1)} \phi_k + \sum_{k \neq n} \lambda^2 C_{nk}^{(2)} \phi_k + \dots \right\}$$

توجه کنید که ضریب بهنجارش  $N(\lambda)$  در این معادلهٔ خطی ظاهر نمی‌شود. با مساوی قرار دادن ضرایب مربوط به توانهای یکسان  $\lambda$  در دو طرف، یک رشته معادله به دست می‌آوریم. اولین معادله عبارت است از

$$H_0 \sum_{k \neq n} C_{nk}^{(1)} \phi_k + H_1 \phi_n = E_n^0 \sum_{k \neq n} C_{nk}^{(1)} \phi_k + E_n^{(1)} \phi_n \quad (9-16)$$

با استفاده از  $H_0 \phi_k = E_k^0 \phi_k$  به دست می‌آوریم

$$E_n^{(1)} \phi_n = H_1 \phi_n + \sum_{k \neq n} (E_k^0 - E_n^0) C_{nk}^{(1)} \phi_k \quad (10-16)$$

که اگر آن را در  $\phi_n$  ضرب نرده‌ای کنیم، با توجه به شرط راست‌هنجاری

$$\langle \phi_k | \phi_l \rangle = \delta_{kl} \quad (11-16)$$

به نتیجهٔ زیر می‌رسیم

$$\lambda E_n^{(1)} = \langle \phi_n | \lambda H_1 | \phi_n \rangle \quad (12-16)$$

این فرمول بسیار مهم است، و نشان می‌دهد که جابه‌جایی انرژی مرتبهٔ اول برای یک حالت معین همان مقدار انتظاری پتانسیل اختلالی در آن حالت است. اگر تغییر پتانسیل دارای علامت معینی باشد، جابه‌جایی انرژی نیز همان علامت را خواهد داشت. صورت صریح

$$\lambda E_n^{(1)} = \int d^3r \phi_n^*(\mathbf{r}) \lambda H_1(\mathbf{r}) \phi_n(\mathbf{r}) \quad (13-16)$$

نشان می‌دهد برای اینکه این جابه‌جایی قابل ملاحظه باشد باید هم تغییر پتانسیل و هم چگالی احتمال  $|\phi_n(\mathbf{r})|^2$  بزرگ باشند.

اگر  $\phi_m$  را، با  $m \neq n$  در ۱۰-۱۶ ضرب نرده‌ای کنیم به دست می‌آوریم

$$\langle \phi_m | H_1 | \phi_n \rangle + (E_m^0 - E_n^0) D_{nm}^{(1)} = 0$$

یعنی

$$\lambda C_{nk}^{(1)} = \frac{\langle \phi_k | \lambda H_1 | \phi_n \rangle}{E_n^0 - E_k^0} \quad (14-16)$$



صورت کسر عنصر ماتریس  $H_1$  در پایه‌ای است که در آن  $H_0$  قطری است. این فرمول در معادلهٔ زیر به‌کار می‌رود، که از تساوی جمله‌های متناسب با  $\lambda^2$  به‌دست می‌آید:

$$H_0 \sum_{k \neq n} C_{nk}^{(r)} \phi_k + H_1 \sum_{k \neq n} C_{nk}^{(l)} \phi_k = E_n^\circ \sum_{k \neq n} C_{nk}^{(r)} \phi_k + E_n^{(l)} \sum_{k \neq n} C_{nk}^{(l)} \phi_k + E_n^{(r)} \phi_n \quad (15-16)$$

از ضرب نرده‌ای در  $\phi_n$  داریم

$$E_n^{(r)} = \sum_{k \neq n} \langle \phi_n | H_1 | \phi_k \rangle C_{nk}^{(l)} = \sum_{k \neq n} \frac{\langle \phi_n | H_1 | \phi_k \rangle \langle \phi_k | H_1 | \phi_n \rangle}{E_n^\circ - E_k^\circ} = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \phi_k | H_1 | \phi_n \rangle|^2}{E_n^\circ - E_k^\circ} \quad (16-16)$$

در سطر آخر از هرمیتی بودن  $H_1$  استفاده کرده‌ایم:

$$\langle \phi_n | H_1 | \phi_k \rangle = \langle \phi_k | H_1 | \phi_n \rangle^* \quad (17-16)$$

فرمول ۱۶-۱۶ نیز بسیار مهم است، مخصوصاً از این لحاظ که جابه‌جایی مرتبهٔ اول غالباً به دلیل تقارن صفر می‌شود. این فرمول را می‌توان به‌صورت زیر تعبیر کرد: جابه‌جایی انرژی مرتبهٔ دوم برابر است با مجموع جمله‌هایی که بزرگی آنها با مجذور قدرمطلق عنصر ماتریسی داده می‌شود که حالت معین  $\phi_n$  را توسط پتانسیل اختلالی به تمام حالت‌های دیگر مربوط می‌کند، و با معکوس اختلاف انرژی بین حالتها موزون شده است. از این فرمول می‌توان نتایج زیر را به‌دست آورد:

(الف) اگر  $\phi_n$  حالت پایه، یعنی حالت کمترین انرژی، باشد آنگاه مخرج کسر همیشه منفی است، و در نتیجه ۱۶-۱۶ همیشه منفی است.

(ب) اگر تمام چیزهای دیگر یکسان باشند، یعنی اگر تمام عناصر ماتریس  $H_1$  تقریباً از یک مرتبهٔ بزرگی باشند (که می‌توان بدون آگاهی خاص بیشتری حدس زد) آنگاه ترازهای نزدیک تأثیر زیادتری بر جابه‌جایی انرژی مرتبهٔ دوم نسبت به ترازهای دور دارند.

(ج) اگر یک تراز مهم "k" — مهم از این نظر که در نزدیکی قرار دارد، یا اینکه  $\langle \phi_k | H_1 | \phi_n \rangle$  بزرگ است — بالای تراز معین "n" قرار داشته باشد آنگاه جابه‌جایی مرتبهٔ دوم به طرف پایین است، و اگر پایینتر باشد جابه‌جایی به طرف بالا است. در این مورد می‌گوییم ترازها می‌خواهند یکدیگر را دفع کنند.

رابطه  $C_{nk}^{(2)}$  را می‌توان از ضرب نرده‌ای  $\phi_m$  با  $m \neq n$  در ۱۶-۱۵ به دست آورد، اما نازی به این فرمول نداریم. همچنین می‌توان  $N(\lambda)$  را از رابطه زیر تعیین کرد

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle = N^2(\lambda) \left\{ 1 + \lambda^2 \sum_{k \neq n} |C_{nk}^{(1)}|^2 + \dots \right\} \quad (18-16)$$

$$= 1$$

که نشان می‌دهد  $N(\lambda)$  تا مرتبه اول  $\lambda$  برابر با ۱ است. بنابراین، تا مرتبه اول  $\lambda$ ، می‌توان نوشت

$$\psi_n = \phi_n + \sum_{k \neq n} \frac{\langle \phi_k | \lambda H_1 | \phi_n \rangle}{E_n^0 - D_k^0} \phi_k \quad (19-16)$$

این فرمول گاهی به کار می‌آید.

## نظریه اختلال واگن

اگر واگنی وجود داشته باشد باید تغییراتی در بررسی قبلی وارد کنیم، زیرا برحسب ظاهر، اختلاف انرژی در مخرج کسرها می‌تواند صفر شود. مشکل به این واقعیت مربوط است که به جای تنها یک  $\phi_n$  چندین  $\phi_n^{(i)}$  وجود دارند که همه آنها دارای انرژی یکسان  $E_n^{(0)}$  هستند. این ویژه‌تابعها را می‌توان نسبت به نشان  $i$  راست‌هنجار کرد، زیرا چنانکه در فصل ۴ دیدیم این نشان  $i$  می‌تواند به ویژه‌مقدارهای عملگرهای هرمیتی دیگری، که به طور همزمان جابه‌جا شوند هستند، وابسته باشد. بنابراین، مجموعه  $\phi_n^{(i)}$  را به‌گونه‌ای انتخاب می‌کنیم که

$$\langle \phi_m^{(j)} | \phi_n^{(i)} \rangle = \delta_{mn} \delta_{ij} \quad (20-16)$$

روش بدیهی برای به حساب آوردن واگنی این است که به جای ۱۶-۴ رابطه‌ای بگذاریم که در آن ترکیبهای خطی ویژه‌تابعهای واگن  $H_0$  وارد می‌شوند:

$$\psi_n = N(\lambda) \left\{ \sum_i \alpha_i \phi_n^{(i)} + \lambda \sum_{k \neq n} C_{nk}^{(1)} \sum_i \beta_i \phi_k^{(i)} + \dots \right\} \quad (21-16)$$

ضرایب  $\alpha_i, \beta_i, \dots$  را باید تعیین کنیم. با جاگذاری  $\psi_n$  از ۱۶-۲۱ در معادلهٔ شرودینگر ۱۶-۳، تا مرتبهٔ اول  $\lambda$  به دست می‌آوریم

$$H_0 \sum_{k \neq n} C_{nk}^{(1)} \sum_i \beta_i \phi_k^{(i)} + H_1 \sum_i \alpha_i \phi_n^{(i)} = E_n^{(1)} \sum_i \alpha_i \phi_n^{(i)} + E_n^0 \sum_{k \neq n} C_{nk}^{(1)} \sum_i \beta_i \phi_k^{(i)} \quad (22-16)$$

از ضرب زرده‌ای  $\phi_n^{(j)}$  در رابطه بالا، به معادلهٔ جابه‌جایی مرتبهٔ اول می‌رسیم:

$$\sum_i \alpha_i \langle \phi_n^{(j)} | \lambda H_1 | \phi_n^{(i)} \rangle = \lambda E_n^{(1)} \alpha_j \quad (23-16)$$

این یک مسئلهٔ ویژه‌مقداری با بعد متناهی است. برای مثال، اگر واگنی دوگانه باشد، با استفاده از نمادنگاری

$$\langle \phi_n^{(j)} | H_1 | \phi_n^{(i)} \rangle = h_{ji} \quad (24-16)$$

معادلهٔ ۱۶-۲۳ به صورت زیر درمی‌آید

$$\begin{aligned} h_{11} \alpha_1 + h_{12} \alpha_2 &= E_n^{(1)} \alpha_1 \\ h_{21} \alpha_1 + h_{22} \alpha_2 &= E_n^{(1)} \alpha_2 \end{aligned} \quad (25-16)$$

ویژه‌مقدارها و  $\alpha_i$ ها را می‌توان، با اضافه کردن شرط

$$\sum_i |\alpha_i|^2 = 1 \quad (26-16)$$

از معادلهٔ ۱۶-۲۳ به دست آورد. ضرایب  $\beta_i$  را تعیین نمی‌کنیم، زیرا از نظریهٔ اختلال واگن تنها برای ویژه‌مقدارهای انرژی مرتبهٔ اول در کاربردهای آینده استفاده خواهیم کرد. اگر به ازای  $i \neq j$  داشته باشیم  $h_{ij} = 0$ ، یعنی اگر ماتریس قطری  $h_{ij}$  باشد، آنگاه جابه‌جاییهای مرتبهٔ اول همان عناصر قطری این ماتریس خواهند بود. این ماتریس وقتی قطری است که اختلال  $H_1$  با عملگری که ویژه‌مقدارهای آن با نشانه‌های "i" مشخص می‌شوند جابه‌جا شود. به عنوان مثال، در اتم هیدروژن ویژه‌مقدارهای  $L_z$  واگن هستند، یعنی تمام مقادیر  $m$  انرژی یکسانی دارند. اگر داشته باشیم

$$[H_1, L_z] = 0 \quad (27-16)$$

و  $\phi_n^{(i)}$  ها را ویژه تابعهای  $L_z$  بگیریم آنگاه  $h_{ij}$  قطری خواهد بود. برای اثبات، می نویسیم

$$L_z \phi_n^{(i)} = h m^{(i)} \phi_n^{(i)} \quad (28-16)$$

$$\begin{aligned} \langle \phi_n^{(j)} | [H, L_z] | \phi_n^{(i)} \rangle &= \langle \phi_n^{(j)} | H J_z - L_z H | \phi_n^{(i)} \rangle \quad (29-16) \\ &= h(m^{(i)} - m^{(j)}) h_{ji} \\ &= 0 \end{aligned}$$

یعنی ۲۷-۱۶ ایجاب می کند که

$$h_{ji} = 0 \quad m^{(i)} \neq m^{(j)} \text{ بازای} \quad (30-16)$$

بعضی از این ویژگیها را در مثال زیر و بعضی را بعداً در بحث اتم هیدروژن واقعی خواهیم دید.

## اثر اشتراک

به عنوان مثالی از کاربرد نظریه اختلال در یک مسئله واقعی، تأثیر میدان الکتریکی خارجی بر ترازهای انرژی اتمهای هیدروژنگونه را بررسی می کنیم. این پدیده را اثر اشتراک می نامند. هامیلتونی نامختل عبارت است از

$$H_0 = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r} \quad (31-16)$$

که ویژه تابعهای آن را با  $\phi_{nlm}(\mathbf{r})$  نشان می دهیم. پتانسیل اختلالی در اینجا به صورت زیر است

$$\lambda H_1 = e \mathcal{E} \cdot \mathbf{r} = e \mathcal{E} z \quad (32-16)$$

که در آن  $\mathcal{E}$  میدان الکتریکی است. کمیت  $e \mathcal{E}$  همان نقش پارامتر  $\lambda$  را دارد. جابه جایی انرژی حالت پایه، که ناواکن است، با رابطه زیر داده می شود

$$E_{10}^{(1)} = e \mathcal{E} \langle \phi_{100} | z | \phi_{100} \rangle = e \mathcal{E} \int d^3r |\phi_{100}(r)|^2 z \quad (33-16)$$

این انتگرال صفر می شود، زیرا مجذور تابع موج تحت پاریته همیشه یک تابع زوج است، و پتانسیل اختلالی تحت انعکاس در اینجا یک تابع فرد است. بنابراین، برای حالت پایه هیچ جابه جایی انرژی وجود ندارد که نسبت به میدان الکتریکی  $\mathcal{E}$  خطی باشد. به لحاظ کلاسیک، انرژی دستگاهی که

گشتاور دوقطبی الکتریکی آن  $d$  است به اندازه  $d \cdot \mathcal{E}$  - جابه‌جا می‌شود. بدین ترتیب، ۱۶-۳۳ نشان می‌دهد که اتم در حالت پایه گشتاور دوقطبی دائمی ندارد. هرگاه هامیلتونی نامختل تحت انعکاس ناورد باشد می‌توان از استدلال پاریته استفاده کرد، و می‌توان نتیجهٔ بالا را به این حکم تعمیم داد که دستگاهها در حالت‌های ناواکن نمی‌توانند گشتاور دوقطبی دائمی داشته باشند. این حکم ناواکنی مهم است: تنها در این وضعیت است که حالتها ویژه‌حالت‌های عملگر پاریته نیز هستند، و  $|\phi(\mathbf{r})|^2$  زوج است و مقدار انتظاری  $z$  صفر می‌شود.

بسیاری از مولکول‌ها گشتاور دوقطبی دائمی ندارند، و غالباً گفته می‌شود که این به دلیل واکن بودن حالت‌های پایه است. مقدار انتظاری  $z$  در حالتی مانند  $\alpha\psi_+ + \beta\psi_-$ ، که در آن شاخص‌های پایین نشان‌دهندهٔ پاریته هستند، مسلماً صفر نیست، و اگر دو حالت  $\psi_+$  و  $\psi_-$  انرژی یکسانی داشته باشند حالت مزبور با حالت وارون فضایی آن  $\alpha\psi_+ - \beta\psi_-$  واکن خواهد بود. این توضیح کاملاً درست نیست، به این دلیل که حالت‌های پایین هیچگاه کاملاً واکن نیستند. به عنوان مثال، مولکولی مانند آمونیم،  $\text{NH}_3$ ، را در نظر بگیرید. ساختار این مولکول یک چهاروجهی است که در آن سه هستهٔ H یک مثلث متساوی‌الاضلاع تشکیل می‌دهند. N می‌تواند (بسته به شرط کمینه بودن انرژی) "بالا" یا "پایین" این مثلث باشد. ترکیب‌های خطی زوج و فرد این دو حالت دارای انرژی کاملاً یکسانی نیستند، اگرچه اختلاف انرژی بسیار کوچک ( $-10^{-4} \text{eV}$ ) است، و علت آن سد بزرگی است که بین موقعیت‌های "بالا" و "پایین" وجود دارد. بنابراین، به بیان دقیق، حالت پایه ناواکن است. اما اگر  $d$ ، که در آن

$$d = e \int \psi_{\text{پایین}}^* z \psi_{\text{بالا}} = -e \int \psi_{\text{پایین}} z \psi_{\text{بالا}} \quad (۱۶-۳۴)$$

بسیار بزرگتر از این اختلاف کوچک باشد آنگاه جابه‌جایی انرژی برحسب میدان الکتریکی خطی خواهد بود، و مولکول به‌گونه‌ای رفتار می‌کند که انگار گشتاور دوقطبی الکتریکی دارد. اکنون جملهٔ مرتبهٔ دوم را بررسی می‌کنیم، که عبارت است از

$$E_{\lambda_{00}} = e^2 \mathcal{E}^2 \left\{ \sum_{nlm} \frac{|\langle \phi_{nlm} | z | \phi_{\lambda_{00}} \rangle|^2}{E_{\lambda} - E_n} + \sum_k \frac{|\langle \phi_k | z | \phi_{\lambda_{00}} \rangle|^2}{E_{\lambda} - \hbar^2 k^2 / 2m} \right\} \quad (۱۶-۳۵)$$

دلیل وجود جملهٔ دوم این است که در ۱۶-۱۶ باید روی مجموعهٔ کاملی از ویژه‌حالت‌های  $H_0$  جمع بزنیم. برای آنها، این مجموعه شامل حالت‌های مقید  $\phi_{nlm}$  و همچنین حالت‌های پیوستاری است که در آنها انرژی الکترون مثبت است. حالت‌های پیوستار را با  $k$  نشان‌گذاری می‌کنیم، که در اینجا  $k$  با  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$  به انرژی جنبشی مثبت مربوط می‌شود. محاسبهٔ مستقیم این جمع بسیار مشکل است، زیرا متضمن انتگرال روی  $k$  است که در جواب‌های پیوستاری نسبتاً پیچیدهٔ مسئله کولن ظاهر می‌شود (این انتگرال را می‌توان با یک فن، که در اینجا بیان نمی‌کنیم، محاسبه کرد).

اما کاری که در اینجا می‌توان انجام داد این است که مقدار  $E_{100}$  را با یافتن یک کران بالا برای آن برآورد کرد. رابطه ۱۶-۳۵ را به صورت نمادین تر زیر می‌نویسیم

$$E_{100} = e^{\epsilon} \mathcal{E}^{\epsilon} \sum_E \frac{\langle \phi_{100} | z | \phi_E \rangle \langle \phi_E | z | \phi_{100} \rangle}{E_1 - E} \quad (36-16)$$

که در آن مجموعه کامل را اکنون با  $\phi_E$  نشان داده‌ایم. چون انرژی حالت پایه است، و تمام انرژیها از آن بیشتر هستند، داریم

$$\frac{1}{E_1 - E} \leq \frac{1}{E_1 - E_1} \quad (37-16)$$

در نتیجه

$$E_{100} \leq \frac{e^{\epsilon} \mathcal{E}^{\epsilon}}{E_1 - E_1} \sum_E \langle \phi_{100} | z | \phi_E \rangle \langle \phi_E | z | \phi_{100} \rangle \quad (38-16)$$

با توجه به اینکه برای یک مجموعه کامل

$$\sum_E |\phi_E\rangle \langle \phi_E| = 1 \quad (39-16)$$

به دست می‌آوریم

$$E_{100} < \frac{e^{\epsilon} \mathcal{E}^{\epsilon}}{E_1 - E_1} \langle \phi_{100} | z^2 | \phi_{100} \rangle \quad (40-16)$$

که می‌توان آن را به سادگی محاسبه کرد. چون حالت پایه تقارن کروی دارد، می‌توان نوشت

$$\begin{aligned} \langle \phi_{100} | z^2 | \phi_{100} \rangle &= \langle \phi_{100} | y^2 | \phi_{100} \rangle = \langle \phi_{100} | x^2 | \phi_{100} \rangle \\ &= \frac{1}{3} \langle \phi_{100} | r^2 | \phi_{100} \rangle = a_0^2. \end{aligned} \quad (41-16)$$

که در آن در آخرین مرحله از ۱۲-۳۶ استفاده کرده‌ایم. بنابراین

$$E_{100} < \frac{8e^{\epsilon} \mathcal{E}^{\epsilon} a_0^2}{3mc^2 \alpha^2} = \frac{8}{3} \mathcal{E}^{\epsilon} a_0^2 \quad (42-16)$$

توجه کنید که  $\int d^3r \mathcal{E}^2$  انرژی است، و از این رو تحلیل ابعادی حکم می‌کند که نتیجه باید به صورت  $a_0^2 \mathcal{E}^2 \times$  ثابت باشد، زیرا  $a_0$  تنها طول موجود در مسئله است. محاسبهٔ دقیق مرتبهٔ دوم مقدار  $\mathcal{E}^2 a_0^2$  را برای ضریب  $\mathcal{E}^2 a_0^2$  به دست می‌دهد. برای اتمهای هیدروژنگونه باید  $a_0/Z$  را به جای  $a_0$  قرار دهیم.

اگر از این جابه‌جایی انرژی نسبت به میدان الکتریکی مشتق بگیریم رابطه‌ای برای گشتاور دوقطبی به دست می‌آوریم

$$d = -\frac{\partial E_{1,0}}{\partial \mathcal{E}} = -\frac{9}{4} \mathcal{E} a_0^2 \quad (43-16)$$

گشتاور دوقطبی با میدان الکتریکی  $\mathcal{E}$  متناسب است، یعنی گشتاور دوقطبی القا شده است. قطبش‌پذیری که با رابطهٔ زیر تعریف می‌شود

$$P = \frac{d}{\mathcal{E}} \quad (44-16)$$

برابر است با  $P = 4.5 a_0^2$ .

به‌عنوان مثالی از کاربرد نظریهٔ اختلال واگن، اثر اشتراک مرتبهٔ اول (خطی نسبت به  $\mathcal{E}$ ) را برای حالت‌های  $n=2$  در اتم هیدروژن محاسبه می‌کنیم. این حالتها عبارت‌اند از

$$\begin{aligned} \phi_{2,0} &= (2a_0)^{-2/2} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0} Y_{0,0} \\ \phi_{2,1} &= (2a_0)^{-2/2} \sqrt{3/2} \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0} Y_{1,1} \\ \phi_{2,1} &= (2a_0)^{-2/2} \sqrt{3/2} \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0} Y_{1,0} \\ \phi_{2,1,-1} &= (2a_0)^{-2/2} \sqrt{3/2} \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0} Y_{1,-1} \end{aligned} \quad (45-16)$$

حالت  $l=0$  پاریتهٔ زوج و حالت  $l=1$  پاریتهٔ فرد دارد. نمی‌خواهیم معادله‌ای مانند ۱۶-۲۳ را حل کنیم، و ظاهراً با چهار معادله سروکار داریم. اما اگر توجه کنیم که اولاً پتانسیل اختلالی (یعنی  $\tilde{V}$ ) با  $l=1$  جابه‌جا می‌شود و در نتیجه تنها حالت‌هایی را به هم مربوط می‌کند که دارای مقدار یکسان  $m$  هستند، و ثانیاً ملاحظات پاریته باعث می‌شود تنها جمله‌هایی را در نظر بگیریم که در آنها پتانسیل اختلالی حالت  $l=1$  را به  $l=0$  مربوط می‌کند، یعنی

$$\langle \phi_{2,1,\pm 1} | \tilde{V} | \phi_{2,1,\pm 1} \rangle = 0 \quad (46-16)$$

آنگاه می‌بینیم که در ۲۳-۱۶ تنها یک ماتریس  $2 \times 2$  داریم. در واقع، معادله عبارت است از

$$e^{\mathcal{E}} \begin{pmatrix} \langle \phi_{200} | z | \phi_{200} \rangle & \langle \phi_{200} | z | \phi_{210} \rangle \\ \langle \phi_{210} | z | \phi_{200} \rangle & \langle \phi_{210} | z | \phi_{210} \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = E^{(1)} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} \quad (47-16)$$

عناصر قطری به علت پاریده صفر هستند، و عناصر غیرقطری با هم برابرند، زیرا همیوگ مختلط یکدیگر هستند و هر یک از آنها را می‌توان حقیقی گرفت. داریم

$$\begin{aligned} \langle \phi_{200} | z | \phi_{210} \rangle &= \int_0^\infty r^2 dr (2a_0)^{-2} e^{-r/a_0} \frac{2r}{\sqrt{3}a_0} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) r \\ &\cdot \int d\Omega Y_{00}^+ (\sqrt{4\pi/3} Y_{10}) Y_{10} \\ &= -3a_0 \end{aligned} \quad (48-16)$$

و در نتیجه ۴۷-۱۶ به صورت زیر درمی‌آید

$$\begin{pmatrix} -E^{(1)} & -3e\mathcal{E}a_0 \\ -3e\mathcal{E}a_0 & -E^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = 0 \quad (49-16)$$

ویژه‌مقدارهای این ماتریس عبارت‌اند از

$$E^{(1)} = \pm 3e\mathcal{E}a_0 \quad (50-16)$$

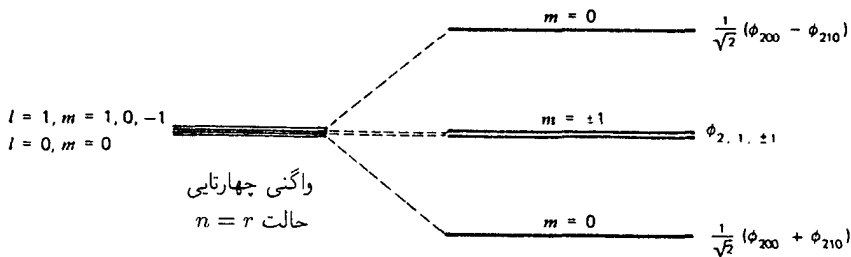
و ویژه‌حالت‌های بهنجار شده مربوط به صورت زیر هستند

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \text{و} \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

بدین ترتیب، در اثر اشتراک خطی برای حالت‌های  $n = 2$  ترازهای واگن مطابق شکل ۱-۱۶ شکافته می‌شوند.

نقش شکافتگی شکل ۱-۱۶ را می‌توان به صورت کیفی درک کرد. توزیع بار الکترون برای  $\phi_{2,1,\pm 1}$  با  $|\phi_{2,1,\pm 1}|^2$  داده می‌شود و وابستگی زاویه‌ای به صورت  $\sin^2 \theta$  است. بنابراین، بار به صورت پره‌هایی در صفحه  $xy$  توزیع شده است که حول محور  $z$  تقارن استوانه‌ای دارند. گشتاور دوقطبی وجود ندارد، زیرا بار مثبت در مبدأ است، و در نتیجه جمله  $\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}$  صفر می‌شود. از طرف





شکل ۱۶- نقش شکافتگی اشتراک برای اتم هیدروژن در حالت  $n = 2$ . اختلال تا اندازه‌ای واگنی چهارتابی را از میان می‌برد. حالت‌های  $m = \pm 1$  واگن باقی می‌ماند و در اثر اشتراک جابه‌جا نمی‌شوند.

دیگر، ترکیب‌های خطی  $\phi_{200} \pm \phi_{210}$  توزیع‌های باری به صورت  $A + B \cos^2 \theta + C \cos \theta$  به وجود می‌آورند. جمله‌ای که علامت به اضافه دارد توزیع بار الکترون را در جهت مثبت  $z$  منتقل می‌کند، و در نتیجه گشتاور دوقطبی در جهت مثبت  $z$ ، موازی با میدان  $E$ ، است. بنابراین،  $-\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}$  منفی است، و انرژی کم می‌شود. جمله‌ای که علامت منها دارد باعث افزایش انرژی می‌شود، و این با نتیجهٔ محاسبه سازگار است.

نتیجهٔ محاسبات بالا را می‌توان به صورت کلی زیر خلاصه کرد.

(الف) در حضور میدان الکتریکی، حالت‌ها دیگر ویژه‌حالت‌های  $L^2$  نیستند. به‌عنوان مثال، برای مورد بالا دیدیم حالت‌هایی که اختلال را قطری می‌کنند مخلوط‌هایی مساوی از  $l = 1$  و  $l = 0$  هستند، اگرچه هنوز ویژه‌حالت‌های  $L_z$  هستند. علت آن است که اختلال هامیلتونی را تغییر می‌دهد، و در نتیجه دیگر با  $L^2$  جابه‌جا نمی‌شود. این را می‌توان به تفصیل بررسی کرد، اما در واقع آشکار است که میدان خارجی راستای متمایزی را مشخص می‌کند، و از این رو دستگاه فیزیکی تحت چرخش‌های اختیاری دیگر ناوردا نیست، اما هنوز هم تحت چرخش حول محور متمایز در اینجا  $z$ ، ناوردا است؛ بنابراین،  $L_z$  باز هم ثابت خوبی برای حرکت است.

(ب) عموماً، هرگاه اختلالی وجود داشته باشد که کمیتی را (به عنوان مثال، در اینجا  $L^2$ ) پایسته نگه ندارد آنگاه حالت‌هایی که هامیلتونی جدید را در هر تقریبی "قطری می‌کنند" برهم‌نهم‌هایی از حالت‌هایی با مقادیر مختلف اعداد کوانتومی هستند که قبلاً پایسته بودند، و در نتیجه ترازهای واگن شکافته می‌شوند.

(ج) نظریهٔ اختلال واگن را می‌توان به زبان ماتریسی به صورت زیر خلاصه کرد. اگر  $H_0$  قطری باشد اما  $H_1$  نباشد، آنگاه از آنجا که  $H_0$  و  $H_1$  جابه‌جا نمی‌شوند نمی‌توان  $H_1$  را به‌خودی‌خود، بدون "غیرقطری کردن"  $H_0$ ، قطری کرد. باید با تمام هامیلتونی

$$H = H_0 + H_1$$

کار کنیم. اگر با زیرمجموعهٔ حالت‌های واگن، که ویژه‌حالت‌های  $H_0$  با ویژه‌مقدار یکسان هستند، کار

کنیم آنگاه تا آنجا که به این حالتها مربوط می‌شود  $H_0$  نه تنها قطری است بلکه با ماتریس واحد متناسب است. چون  $H_1$  (و هر چیز دیگر) با ماتریس واحد جابه‌جا می‌شود، می‌توان  $H_1$  را به‌خودی خود، بدون تأثیر بر  $H_0$ ، قطری کرد.

اتمهای هیدروژنگونه‌ای که در اینجا در نظر گرفتیم تا اندازه‌ای ایده‌آلی هستند. چنانکه در فصل ۱۷ خواهیم دید، اثرهای نسبیتی و جفت‌شدگی اسپین-مدار کوچکی وجود دارند که بعضی از واگنها را عملاً از بین می‌برند. بنابراین، آیا نیازی به استفاده از نظریهٔ اختلال واگن نداریم؟ در واقع، حتی اگر مثلاً  $\phi_{200}$  و  $\phi_{210}$  انرژی کاملاً یکسانی نداشته باشند، باز هم می‌توان ترکیب آنها را در بسط اختلال به‌کاربرد. برای مثال، اگر داشته باشیم

$$H_0 \phi_{200} = (E_2^0 - \Delta) \phi_{200} \quad (51-16)$$

$$H_0 \phi_{210} = (E_2^0 + \Delta) \phi_{210}$$

که در آنها  $\Delta$  کوچک است آنگاه معادلهٔ شرودینگر با ترکیبهای خطی به‌صورت زیر در می‌آید

$$\begin{aligned} & (H_0 + \lambda H_1) \left( \alpha_1 \phi_{200} + \alpha_2 \phi_{210} + \lambda \sum_{n \neq 2} C_n \phi_n \right) \\ & = E \left( \alpha_1 \phi_{200} + \alpha_2 \phi_{210} + \lambda \sum_{n \neq 2} C_n \phi_n \right) \end{aligned} \quad (52-16)$$

از ضرب نرده‌ای  $\phi_{200}$  و  $\phi_{210}$  در این معادله، تا مرتبهٔ  $\lambda$  به معادله زیر می‌رسیم

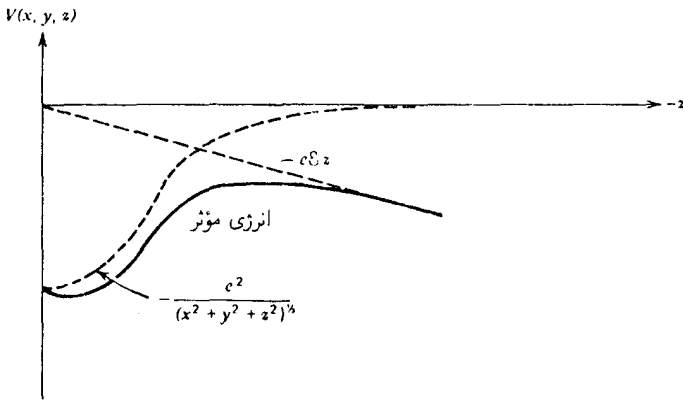
$$\begin{pmatrix} E_2^0 - \Delta - \langle \phi_{200} | \lambda H_1 | \phi_{200} \rangle & \langle \phi_{200} | \lambda H_1 | \phi_{210} \rangle \\ \langle \phi_{210} | \lambda H_1 | \phi_{200} \rangle & E_2^0 + \Delta - \langle \phi_{210} | \lambda H_1 | \phi_{210} \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} \quad (53-16)$$

اگر بنویسیم

$$\langle \phi_{200} | \lambda H_1 | \phi_{210} \rangle = \langle \phi_{210} | \lambda H_1 | \phi_{200} \rangle = a \lambda \quad (54-16)$$

با توجه به اینکه  $\langle \phi_{200} | H_1 | \phi_{210} \rangle = \langle \phi_{210} | H_1 | \phi_{200} \rangle = 0$ ، باید ویژه‌مقدارهای ماتریس زیر را به‌دست آوریم

$$\begin{pmatrix} E_2^0 - \Delta & \lambda a \\ \lambda a & E_2^0 + \Delta \end{pmatrix} \quad (55-16)$$



شکل ۱۶-۲ نمودار انرژی پتانسیل برحسب  $z$  با مقادیر ثابت  $\lambda$  و  $\mu$ . خط نقطه چین پتانسیل کولنی، خط چین انرژی پتانسیل ناشی از میدان خارجی، و خط پر انرژی کل را نشان می‌دهد.

این ویژه‌مقادیر عبارت‌اند از

$$E = E_0 \pm \sqrt{a^2 \lambda^2 + \Delta^2} \quad (۱۶-۵۶)$$

می‌بینیم که وقتی  $a\lambda \gg \Delta$ ، تنها یک اثر "درجهٔ دوم" به دست می‌آید. این نتیجه به واگنی مربوط نیست. وقتی  $a\lambda \ll \Delta$ ، نتیجه‌ای به صورت ۱۶-۵۰ به دست می‌آید. در ناحیهٔ میانی، روش دقیقتر بالا ضروری است. به علاوه، اگر از ترکیبهای خطی جدید استفاده کنیم آنگاه در نظریهٔ اختلال مرتبهٔ دوم دیگر اختلافهای انرژی بسیار کوچک در مخرج کسرها ظاهر نمی‌شوند. این موضوع را به تفصیل بررسی نمی‌کنیم، اما اثبات آن مشکل نیست.

به عنوان آخرین نکته، دو واقعیت ظاهراً متناقض را متذکر می‌شویم. (۱) آزمایش پیش‌بینیهای نظریهٔ اختلال را برای اثر اشتراک کاملاً تأیید می‌کند، و (۲) رشتهٔ اختلال بی‌تردید واگرا است، زیرا پتانسیل اختلالی  $\sim eE$  هر قدر هم که کوچک باشد وقتی  $\sim$  بسیار بزرگ می‌شود بدون کران افزایش می‌یابد. با توجه به اینکه یک رشتهٔ به لحاظ ریاضی واگرا را می‌توان از نو چنان مرتب کرد که بسطهای کاملاً مختلفی به دست آیند، این سؤال پیش می‌آید که آیا می‌توانیم دقت چند جملهٔ اول چنین رشته‌ای را قابل اعتماد بدانیم؟ پاسخ در فیزیک مسئله است نه در ریاضیات آن. علت واگرایی را می‌توان در شکل ۱۶-۲ دید، که در آن تصویری تقریبی از پتانسیل کل به ازای مقادیر ثابت  $\lambda$  و  $\mu$  داده شده است. چنانکه دیده می‌شود، سدی برای الکترون مقید ایجاد شده است. این سد در نهایت نفوذپذیر است، اگرچه به ازای مقادیر کوچک  $eE$  بسیار پهن است. آنچه واگرایی ریاضی رشته باعث آن است امکان این است که به عنوان مثال الکترون حالت پایه با احتمالی متناهی (اگرچه بسیار بسیار کوچک) به اندازهٔ کافی دور از هسته یافت شود، یعنی جایی که میدان

الکتریکی خارجی قویتر از میدان کولنی است و الکترون را جدا می‌کند. بنابراین، ترازهای انرژی "جابه‌جاشده" جدید اتم هیدروژن دیگر حالت‌های پایا نیستند بلکه حالت‌های شبه پایدار هستند. اما اگر میدان ضعیف باشد این حالتها می‌توانند در یک مقیاس زمانی از مرتبه سن جهان پایدار باشند، و در نتیجه مشاهدات با آنچه چند جمله اول رشته اختلال پیش‌بینی می‌کنند توافق کامل دارند.

## مسائل

۱-۱۶ ✓  $C_{nk}^{(2)}$  را محاسبه کنید و با استفاده از آن رابطه‌ای برای  $E_n^{(2)}$  به دست آورید.  
 ۲-۱۶ ✓ اتم هیدروژن را در نظر بگیرید و فرض کنید پروتون به جای اینکه یک چشمه نقطه‌ای برای میدان کولنی باشد یک کره باردار یکنواخت به شعاع  $R$  است، و در نتیجه پتانسیل کولنی اکنون به صورت زیر است

$$V(r) = -\frac{3e^2}{2R^2} \left( R^2 - \frac{1}{3}r^2 \right) \quad r < R (\ll a_0)$$

$$= -\frac{e^2}{r} \quad r > R$$

جابه‌جایی انرژی ناشی از این تغییر را برای حالت  $n=1$  و  $l=0$  و برای حالت‌های  $n=2$  با استفاده از توابع موج ۱۲-۳۰ محاسبه کنید.  
 ۳-۱۶ ✓ اگر به هامیلتونی نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی

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

اختلال

$$V = \lambda x^4$$

اضافه شود، جابه‌جایی انرژی در حالت پایه را به دست آورید.  
 ۴-۱۶ ✓ کف یک چاه نامتناهی را به صورت زیر تغییر داده‌ایم

$$V(x) = \epsilon \sin \frac{\pi x}{b} \quad 0 \leq x \leq b$$

۱. در واقع، یک محاسبه ساده نفوذ در سد از نوعی که در فصل ۵ انجام دادیم نشان می‌دهد که این مقیاس زمانی برای میدانهای معمولی چیزی نزدیک به  $10^{14}$  برابر طول عمر جهان است!

جابه‌جایی انرژی تمام حالت‌های برانگیخته را تا مرتبهٔ اول برحسب  $\epsilon$  محاسبه کنید. توجه کنید که چاه در اصل به صورت  $V(x) = 0$  برای  $0 \leq x \leq b$  و  $V = \infty$  در جاهای دیگر است. ۵-۱۶ قاعدهٔ جمع توماس-رایشم-کوهن را اثبات کنید:

$$\sum_n (E_n - E_a) |\langle n|x|a \rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{2m}$$

[راهنمایی: (الف) رابطهٔ جابه‌جایی  $[p, x] = \hbar/i$  را به صورت زیر بنویسید

$$\sum_n \left\{ \langle a|p|n \rangle \langle n|x|a \rangle - \langle n|p|a \rangle \right\} = \frac{\hbar}{i} \langle a|a \rangle = \frac{\hbar}{i}$$

(ب) از رابطه

$$\langle a|p|n \rangle = \left\langle a \left| m \frac{dx}{dt} \right| n \right\rangle = m \frac{i}{\hbar} \langle a|[H, x]|n \rangle$$

در حل مسئله استفاده کنید.]

۶-۱۶ قاعدهٔ جمع مسئلهٔ ۵-۱۶ را برای نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی، با فرض اینکه  $|a\rangle$  حالت پایه است، واریسی کنید.

۷-۱۶ اثر اشتراک مرتبهٔ اول را در حالت  $n = 3$  اتم هیدروژن محاسبه کنید. محاسبهٔ همهٔ انتگرال‌ها لازم نیست، بلکه فقط ترکیب خطی درست حالتها را به دست آورید. آیا می‌توانید دربارهٔ نقش جابه‌جایی‌های انرژی توضیحی کیفی بدهید؟

۸-۱۶ الکترونی را در پتانسیل نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی  $m\omega^2 x^2/2$  در نظر بگیرید که در یک میدان الکتریکی قرار گرفته است که در جهت  $x$  است. جابه‌جایی‌های انرژی مرتبهٔ اول و دوم را حساب کنید. جواب خود را با مقدار دقیق جابه‌جایی انرژی، که در این مورد می‌توانید به دست آورید، مقایسه کنید.

۹-۱۶ یک نوسانگر هماهنگ دوبعدی را در نظر بگیرید که با هامیلتونی زیر توصیف می‌شود

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2)$$

با تعمیم رهیافت فصل ۷ جوابهای این مسئله را برحسب عملگرهای افزایشنده که بر حالت پایه اثر می‌کنند تعیین کنید. جابه‌جایی انرژی حاصل از اختلال

$$V = 2\lambda xy$$

را در حالت پایه و در اولین حالتهای برانگیخته واگن با استفاده از نظریه اختلال مرتبه اول به دست آورید. آیا می‌توانید این نتیجه را بسیار ساده تعبیر کنید؟ جواب دقیق مسئله را به دست آورید، و آن را با جابه‌جایی حاصل از محاسبه اختلال مرتبه دوم مقایسه کنید.

✓ ۱۶-۱۰ هامیلتونی زیر را در نظر بگیرید

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & -E_0 \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} \alpha & U \\ U^* & \beta \end{pmatrix}$$

(الف) جابه‌جایی انرژی را تا مرتبه اول و دوم  $\lambda$  محاسبه کنید. نتیجه‌های خود را با ویژه‌مقدارهای دقیق مقایسه کنید.

(ب) فرض کنید  $V \neq U^*$  جانشین  $U^*$  شود. نشان دهید ویژه‌حالتهای هامیلتونی جدید ناهرمیتی که متناظر با ویژه‌مقدارهای متفاوت‌اند دیگر متعامد نیستند. (در این قسمت از مسئله برای ساده شدن کار می‌توانید فرض کنید  $\alpha = \beta = 0$ .)

۱۶-۱۱ ذره‌ای با بار  $q$  و پادذره آن (با بار  $-q$  و همان جرم) را در نظر بگیرید که از طریق یک پتانسیل کولنی برهم‌کنش می‌کنند. اگر پتانسیل با افزودن جمله  $V_1 = Kr$  تغییر کند، ترازهای انرژی پایین چقدر جابه‌جا می‌شوند.

[راهنمایی: از رابطه ۱۲-۳۰ استفاده کنید.]

۱۶-۱۲ هامیلتونی الکترون یک اتم هیدروژن در میدان مغناطیسی ثابت  $\mathbf{B}$  با نادیده گرفتن اسپین به صورت زیر است

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} + \left( \frac{e}{2mc} \right) \mathbf{L} \cdot \mathbf{B}$$

که در آن  $\mathbf{L}$  عملگر تکانه زاویه‌ای است. در غیاب میدان مغناطیسی، تنها یک خط در گذار از تراز  $(n=3, l=2)$  به تراز  $(n=4, l=3)$  وجود دارد. میدان مغناطیسی چه تأثیری بر این خط دارد؟ طیف جدید و گذارهای ممکن را با توجه به قید قاعده‌های گزینش  $\Delta l_z = \pm 1, 0$  ترسیم کنید. چند خط وجود دارد؟ تأثیر یک میدان الکتریکی ثابت  $\mathbf{E}$  موازی با  $\mathbf{B}$  چه خواهد بود؟

### مراجع

مثالهای بسیاری از کاربرد نظریه اختلال مرتبه اول در کتابهای درسی یافت می‌شوند، و مراجعی که فهرست آنها در پایان این کتاب آمده است می‌توانند منبعی از مثالهای بیشتر باشند. برای بحث درباره محاسبه اثر اشتراک مرتبه دوم، نگاه کنید به

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

## اتم هیدروژن واقعی

بحث اتمهای هیدروژنگونه در فصل ۱۲ مبتنی بر هامیلتونی زیر بود

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r} \quad (1-17)$$

در یک بررسی واقع‌بینانه‌تر، چندین تصحیح را باید به حساب آوریم. بررسی حرکت پروتون را کنار می‌گذاریم، و در نتیجه بحث اثرات نسبیتی و اثرات اسپین را با مسائل سینماتیک ساده‌ی مربوط به حرکت پروتون مخلوط نمی‌کنیم. در بررسی اولیه‌ی فصل ۱۲، با  $\mathbf{p} = \mathbf{p}_e = -\mathbf{p}_p$  در چارچوب مرکز جرم داشتیم

$$\mathbf{K} = \frac{\mathbf{p}_e^2}{2m_e} + \frac{\mathbf{p}_p^2}{2M_p} = \frac{1}{2}\mathbf{p}^2 \left( \frac{1}{m_e} + \frac{1}{M_p} \right) \equiv \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu}$$

جرم کاهش‌یافته  $\mu$  با جرم الکترون در اتم هیدروژن تفاوت بسیار کمی دارد:

$$\frac{\mu}{m_e} \approx 1 - \frac{m_e}{M_p} \approx 1 - 5.4 \times 10^{-4}$$

در بحث تصحیح طیفی که در فصل ۱۲ به دست آوردیم، جرم پروتون را بینهایت می‌گیریم و اثر حرکت آن را در بخش دیگری بررسی خواهیم کرد.

### اثرات انرژی جنبشی نسبیتی

رابطه نسبیتی برای انرژی جنبشی الکترون عبارت است از

$$K = \sqrt{(\mathbf{pc})^2 + (m_e c^2)^2} - m_e c^2 \approx \frac{p^2}{2m_e} - \frac{1}{8} \frac{(p^2)^2}{m_e^3 c^2} + \dots \quad (2-17)$$

جمله دوم،

$$H_1 = -\frac{1}{8} \frac{(p^2)^2}{m_e^3 c^2} \quad (3-17)$$

را با نظریه اختلال بررسی خواهیم کرد. می‌توان تأثیر نسبی آن را روی ویژه‌مقدار انرژی برآورد کرد، زیرا

$$\frac{\langle H_1 \rangle}{\langle H_0 \rangle} \approx \frac{p^2}{m_e^3 c^2} \approx (Z\alpha)^2 = (0.53 \times 10^{-2}) Z^2 \quad (4-17)$$

بنابراین، اثر نسبیتی به اندازه یک مرتبه بزرگی از اثر جرم کاهیده کوچکتر است. تصحیحهای جرم کاهیده بر جمله نسبیتی برای هیدروژن بسیار کوچک است، و درباره آنها بعداً بحث خواهیم کرد.

### جفت‌شدگی اسپین-مدار

وجود اسپین الکترون موجب تصحیح دیگری از همان مرتبه بزرگی می‌شود. این اثر را می‌توان به لحاظ کیفی به صورت زیر بیان کرد: اگر الکترون نسبت به پروتون ساکن بود (این بحث مبتنی بر دیدگاه کلاسیک است) تنها یک میدان الکتریکی ناشی از بار پروتون را "می‌دید". این همان جمله پتانسیل کولنی است که در  $H_0$  ظاهر می‌شود. چون الکترون حرکت می‌کند، اثرهای دیگر نیز وجود دارند. در چارچوب سکون الکترون، پروتون در حرکت است، و در نتیجه یک جریان برقرار است و الکترون یک میدان مغناطیسی "می‌بیند". اگر این حرکت نسبی راست‌خط بود، میدان مغناطیسی از دیدگاه الکترون  $\mathbf{v} \times \mathbf{E}/c$  می‌شد. این میدان مغناطیسی با اسپین الکترون، یا به بیان دقیقتر با گشتاور مغناطیسی الکترون، برهم‌کنش می‌کند.



الکترون دارای گشتاور مغناطیسی  $\mathbf{M}$  است که با  $14-6^\circ$  داده می‌شود:

$$\mathbf{M} = -\frac{eg}{2m_e c} \mathbf{S}$$

و در نتیجه جمله اضافی مورد نظر باید به صورت زیر باشد

$$\begin{aligned} -\mathbf{M} \cdot \mathbf{B} &= \frac{eg}{2m_e c} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} = -\frac{e}{m_e c^2} \mathbf{S} \cdot \mathbf{v} \times \mathbf{E} \\ &= \frac{e}{m_e^2 c^2} \mathbf{S} \cdot \mathbf{p} \times \nabla \phi(r) \\ &= \frac{e}{m_e^2 c^2} \mathbf{S} \cdot \mathbf{p} \times \mathbf{r} \frac{1}{r} \frac{d\phi(r)}{dr} \\ &= -\frac{e}{m_e^2 c^2} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \frac{1}{r} \frac{d\phi(r)}{dr} \end{aligned} \quad (5-17)$$

که در آن  $\phi(r)$  پتانسیل ناشی از بار هسته است، و  $g$  را برابر با ۲ گرفته‌ایم. در واقع، نتیجه بالا درست نیست. ثابت می‌شود که اثرات نسبیتی ناشی از این واقعیت که الکترون بر خط راست حرکت نمی‌کند (اثر حرکت تقدیمی توماس) باعث می‌شوند که نتیجه بالا با ضریب ۲ کاهش یابد. بنابراین، اختلال درست عبارت است از

$$H_2 = -\frac{1}{2m_e^2 c^2} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \frac{1}{r} \frac{d[e\phi(r)]}{dr} \quad (6-17)$$

اکنون با استفاده از نظریه اختلال مرتبه اول تأثیر  $H_1$  و  $H_2$  را بر طیف اتمهای هیدروژنگونه محاسبه می‌کنیم. با چشمپوشی از اثرات جرم کاهشیده، می‌توان  $H_1$  را به صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} H_1 &= -\frac{1}{\lambda} \frac{(\mathbf{p}^2)^2}{m_e^2 c^2} = -\frac{1}{2m_e c^2} \left( \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right)^2 \\ &= -\frac{1}{2m_e c^2} \left( H_0 + \frac{Zc^2}{r} \right) \left( H_0 + \frac{Zc^2}{r} \right) \end{aligned} \quad (7-17)$$

$$\begin{aligned}
 \langle \phi_{nlm} | H_1 | \phi_{nlm} \rangle &= -\frac{1}{2m_e c^2} \left\langle \phi_{nlm} \left| \left( H_0 + \frac{Ze^r}{r} \right) \left( H_0 + \frac{Ze^r}{r} \right) \right| \phi_{nlm} \right\rangle \\
 &= -\frac{1}{2m_e c^2} \left[ E_n^2 + 2E_n Z e^r \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nl} + (Ze^r)^2 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nl} \right] \\
 &= -\frac{1}{2m_e c^2} \left\{ \left[ \frac{m_e c^2 (Z\alpha)^2}{2n^2} \right]^2 - 2Ze^r \frac{m_e c^2 (Z\alpha)^2}{2n^2} \left( \frac{Z}{a_0 n^2} \right) \right. \\
 &\quad \left. + (Ze^r)^2 \frac{Z^2}{a_0^2 n^2 (l + 1/2)} \right\} \quad (8-17) \\
 &= -\frac{1}{2} m_e c^2 (Z\alpha)^2 \left[ \frac{(Z\alpha)^2}{n^2 (l + 1/2)} - \frac{3(Z\alpha)^2}{4n^2} \right]
 \end{aligned}$$

در این محاسبات از ۳۶-۱۲ برای کمیت‌های زیر استفاده کرده‌ایم

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nl} \equiv \left\langle \phi_{nlm} \left| \frac{1}{r} \right| \phi_{nlm} \right\rangle \quad \text{و} \quad \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nl} \equiv \left\langle \phi_{nlm} \left| \frac{1}{r^2} \right| \phi_{nlm} \right\rangle$$

اسپین الکترون در این جابه‌جایی انرژی وارد نمی‌شود، زیرا  $H_1$  بستگی به اسپین ندارد؛ اما  $H_2$  به اسپین بستگی دارد، و برای توابع موج نامختل باید توابع موج دو مؤلفه‌ای را در نظر بگیریم، زیرا چیزی که می‌خواهیم محاسبه کنیم مقدار انتظاری کمیت زیر است

$$-\frac{1}{2m_e c^2} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \frac{1}{r} \frac{ed\phi(r)}{dr} = \frac{Ze^r}{2m_e c^2} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \frac{1}{r^2} \quad (9-17)$$

در اینجا باز هم با مثالی از نظریهٔ اختلال واگن روبه‌رو هستیم. به‌ازای یک مقدار معین  $n$  و  $l$ ، با توجه به اینکه دو حالت برای اسپین داریم،  $2(l+1)$  ویژه‌حالت واگن مربوط به  $H_0$  وجود دارند. بنابراین، در محاسبهٔ جابه‌جایی انرژی قطری کردن یک زیرماتریس، همچون ۱۶-۲۳، وارد می‌شود. با توجه به اینکه از

$$S^z + 2S \cdot L + L^z = J^z$$

یعنی

$$S \cdot L = \frac{1}{4}(J^z - L^z - S^z) \quad (11-17)$$

می‌توان محاسبه را بسیار ساده‌تر کرد. بنابراین، اگر ویژه‌تابعهای واگن را به صورت ترکیب‌هایی خطی درآوریم که ویژه‌تابعهای  $J^z$  باشند (آنها هم‌اکنون نیز ویژه‌تابعهای  $S_z = L_z + S_z$  هستند) آنگاه این ترکیب‌های خطی  $H_2$  را قطری می‌کنند. ترکیب‌های خطی مناسب را به صورت رابطه‌های ۱۵-۳۸ و ۱۵-۳۹ در فصل ۱۵ به دست آورده‌ایم. با این ترکیب‌های خطی داریم

$$\begin{aligned} S \cdot L \psi_{\substack{j=l+(\frac{1}{2}) \\ m_j=m+(\frac{1}{2})}} &= \frac{1}{4} (J^z - L^z - S^z) \psi_{\substack{j=l+(\frac{1}{2}) \\ m_j=m+(\frac{1}{2})}} \\ &= \frac{1}{4} h^2 \left[ \left(1 + \frac{1}{4}\right) \left(l + \frac{3}{4}\right) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \psi_{\substack{j=l+(\frac{1}{2}) \\ m_j=m+(\frac{1}{2})}} \\ &= \frac{1}{4} h^2 l \psi_{\substack{j=l+(\frac{1}{2}) \\ m_j=m+(\frac{1}{2})}} \end{aligned} \quad (12-17)$$

و

$$\begin{aligned} S \cdot L \psi_{\substack{j=l-(\frac{1}{2}) \\ m_j=m+(\frac{1}{2})}} &= \frac{1}{4} h^2 \left[ \left(l - \frac{1}{4}\right) \left(l + \frac{1}{4}\right) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \psi_{\substack{j=l-(\frac{1}{2}) \\ m_j=m+(\frac{1}{2})}} \\ &= -\frac{1}{4} h^2 (l+1) \psi_{\substack{j=l-(\frac{1}{2}) \\ m_j=m+(\frac{1}{2})}} \end{aligned} \quad (13-17)$$

به‌ازای یک مقدار معین  $l$ ،  $[2(l - 1/2) + 1]$ ،  $[2(l + 1/2) + 1]$  حالت وجود دارند. آنچه رخ داده است این است که حالت‌های واگن تنها از نو مرتب شده‌اند، اما دو گروه حاصل از این حالت‌ها تحت کنش  $H_2$  رفتاری متفاوت دارند. اگر ترکیب‌های خطی را  $\phi_{j m, l}$  بنامیم، آنگاه به‌ازای

$j = l \pm 1/2$  به دست می‌آوریم

$$\langle \phi_{j m_j l} | H_{\text{r}} | \phi_{j m_j l} \rangle = \frac{Z e^2}{2 m_e c^2} \frac{\hbar^2}{2} \left\{ \begin{matrix} l \\ -l - 1 \end{matrix} \right\} \times \int_0^\infty dr r^2 [R_{nl}(r)]^2 \frac{1}{r^2} \quad (14-17)$$

را می‌توان محاسبه کرد، و نتیجه عبارت است از

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nl} = \frac{Z^2}{a_0^3} \frac{1}{n^2 l(l + 1/2)(l + 1)} \quad (15-17)$$

که به ازای  $l \neq 0$  معتبر است. توجه کنید که در اینجا

$$a_0 = \frac{\hbar}{\mu c \alpha}$$

زیرا با ویژه‌حالت‌هایی از  $H_0$  سروکار داریم که در آنها جرم کاهیده الکترون به کار می‌رود. بدین ترتیب، برای جابجایی انرژی، به ازای  $l \neq 0$  به دست می‌آوریم

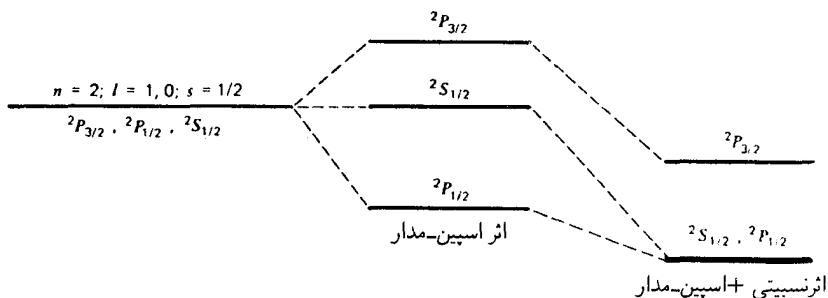
$$\Delta E = \frac{1}{4} m_e c^2 (Z\alpha)^2 \frac{\left\{ \begin{matrix} l \\ -l - 1 \end{matrix} \right\}}{n^2 l(l + 1/2)(l + 1)} \quad (16-17)$$

از ترکیب اثرات  $H_1$  و  $H_2$  پس از محاسبه به رابطه زیر می‌رسیم

$$\Delta E = -1/2 m_e c^2 (Z\alpha)^2 \frac{1}{n^2} \left[ \frac{1}{j + 1/2} - \frac{3}{4n} \right] \quad (17-17)$$

که برای هر دو مقدار  $l = j \pm 1/2$  برقرار است. با استفاده از معادله نسبتی دیراک می‌توان نشان داد که نتیجه بالا به ازای  $l = 0$  نیز درست است، اگرچه حاصلضرب در ۱۷-۱۴ کاملاً معین نیست.

نمودار شکافتگی حالتها در شکل ۱۷-۱ نشان داده شده است. یک نتیجه بسیار جالب این است که تصحیحها به گونه‌ای با هم جمع می‌شوند که حالت‌های  $^2S_{1/2}$  و  $^2P_{1/2}$  واگن باقی می‌مانند. بحث دقیقتر بر اساس معادله نسبتی دیراک این نتیجه را تغییر نمی‌دهد. در سال ۱۹۴۷، لمب و



شکل ۱۷-۱ شکافتگی ترازهای  $n = 2$  به علت (۱) جفت‌شدگی اسپین-مدار (که تأثیری بر حالت  $S$  ندارد) و (۲) اثر نسبیستی. واگنی نهایی حالت‌های  ${}^2S_{1/2}$  و  ${}^2P_{1/2}$  عملاً با اثرهای الکترونیامیکی کوانتومی از میان می‌رود. جابه‌جایی کوچک حالت  ${}^2S_{1/2}$  به سمت بالا را انتقال لمب می‌نامند.

یادرفورد با یک آزمایش بسیار حساس جذب میکروموج نشان دادند که در واقع یک شکافتگی کوچک در این دو تراز وجود دارد. مقدار این شکافتگی را، که از مرتبه  $m_e c^2 (Z\alpha)^4 \alpha \log \alpha$  است، می‌توان با برهم‌کنش الکترون با میدان الکترومغناطیسی خودش، یعنی یک اثر خود-انرژی، توضیح داد. این بحث خارج از قلمرو این کتاب است.

## اثر نابهنجار زیمان

اکنون به بررسی رفتار اتمهای هیدروژن‌گونه در میدان مغناطیسی خارجی، یعنی اثر نابهنجار زیمان، می‌پردازیم. البته چیز نابهنجاری در این اثر وجود ندارد. واقعیت این است که اثر زیمانی، که می‌توان آن را به‌طور کلاسیک توضیح داد، تنها برای حالت‌هایی روی می‌دهد که اسپین الکترونی کل آنها صفر است. برای سایر حالتها نقش شکافتگی زیمان متفاوت است، و چون این اثر زیمان توضیح کلاسیک ندارد (چرا که در آن اسپین دخیل است) آن را "نابهنجار" نامیده بودند.

برای هامیلتونی نامختل،  $H_0$  را همراه با جمله اسپین-مدار در نظر می‌گیریم. دلیل این کار آن است که اختلال خارجی ممکن است در مقایسه با اثر آنچه  $H_2$  نامیدیم کوچک باشد. بنابراین می‌نویسیم

$$H_0 = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r} + \frac{1}{2m^2c^2} \frac{Zc^2}{r^3} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (18-17)$$

اخلال اکنون عبارت است از

$$H_1 = \frac{e}{2mc} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \cdot \mathbf{B} \quad (19-17)$$

جمله اول در واقع برهم‌کنش گشتاور دوقطبی مغناطیسی ناشی از دوران بار است، و جمله دوم سهم گشتاور دوقطبی ذاتی یک ذره با اسپین  $S$  است:

$$M = -\frac{eg}{2m_e c} S \quad (20-17)$$

که در آن  $g = 2$ .

انتخاب  $H_0$  نشان می‌دهد که باید مقدار انتظاری اختلال را در ویژه‌حالت‌های  $J_z$  و  $J^2$  (با توابع ۱۵-۳۸ و ۱۵-۳۹) محاسبه کنیم. اگر محور  $z$  را در راستای  $B$  بگیریم، داریم

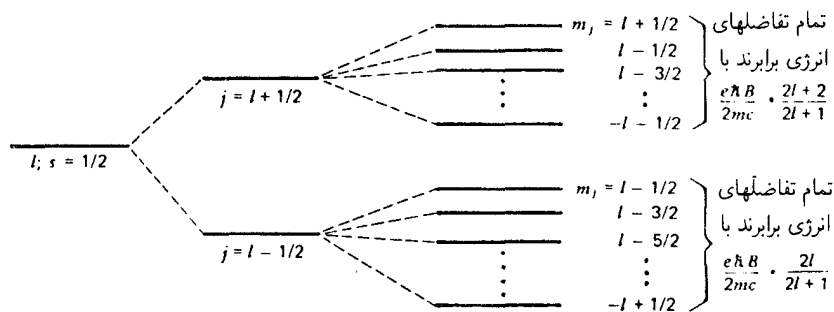
$$\begin{aligned} \left\langle \phi_{j m_j l} \left| \frac{eB}{2m_e c} (L_z + 2S_z) \right| \phi_{j m_j l} \right\rangle &= \left\langle \phi_{j m_j l} \left| \frac{eB}{2m_e c} (J_z + S_z) \right| \phi_{j m_j l} \right\rangle \\ &= \frac{eB}{2m_e c} (\hbar m_j + \langle \phi_{j m_j l} | S_z | \phi_{j m_j l} \rangle) \end{aligned} \quad (21-17)$$

آخرین عنصر ماتریسی در رابطه بالا را با استفاده از ویژه‌تابع‌های ۱۵-۳۸ و ۱۵-۳۹ صریحاً محاسبه می‌کنیم. به‌ازای  $j = l + 1/2$ ، داریم

$$\begin{aligned} \left\langle \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}} Y_{lm} \chi_+ + \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}} Y_{l,m+1} \chi_- \right| S_z \left| \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}} Y_{lm} \chi_+ \right. \\ \left. + \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}} Y_{l,m+1} \chi_- \right\rangle &= \frac{\hbar}{2} \left( \frac{l+m+1}{2l+1} - \frac{l-m}{2l+1} \right) \\ &= \frac{\hbar}{2} \frac{2m+1}{2l+1} = \frac{\hbar m_j}{2l+1} \end{aligned} \quad (22-17)$$

و به‌ازای  $j = l - 1/2$

$$\begin{aligned} \left\langle \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}} Y_{lm} \chi_+ - \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}} Y_{l,m+1} \chi_- \right| S_z \left| \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}} Y_{lm} \chi_+ \right. \\ \left. - \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}} Y_{l,m+1} \chi_- \right\rangle &= \frac{\hbar}{2} \left( \frac{l-m}{2l+1} - \frac{l+m+1}{2l+1} \right) \\ &= -\frac{\hbar}{2} \frac{2m+1}{2l+1} = -\frac{\hbar m_j}{2l+1} \end{aligned} \quad (23-17)$$



شکل ۱۷-۲. نمایش کلی اثر ناهنجار زیمان.

در هر دو رابطه بالا از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که  $m_j = m + 1/2$ . با جاگذاری نتایج ۱۷-۲۲ و ۱۷-۲۳ در ۱۷-۲۱، به دست می‌آوریم

$$\Delta E = \frac{e\hbar B}{2m_e c} m_j \left( 1 \pm \frac{1}{2l+1} \right) \quad j = l \pm \frac{1}{2} \quad (17-24)$$

شکافتگی در شکل ۱۷-۲ نشان داده شده است. قاعده‌گزینش<sup>۱</sup> برای گذارها باز هم به صورت زیر است

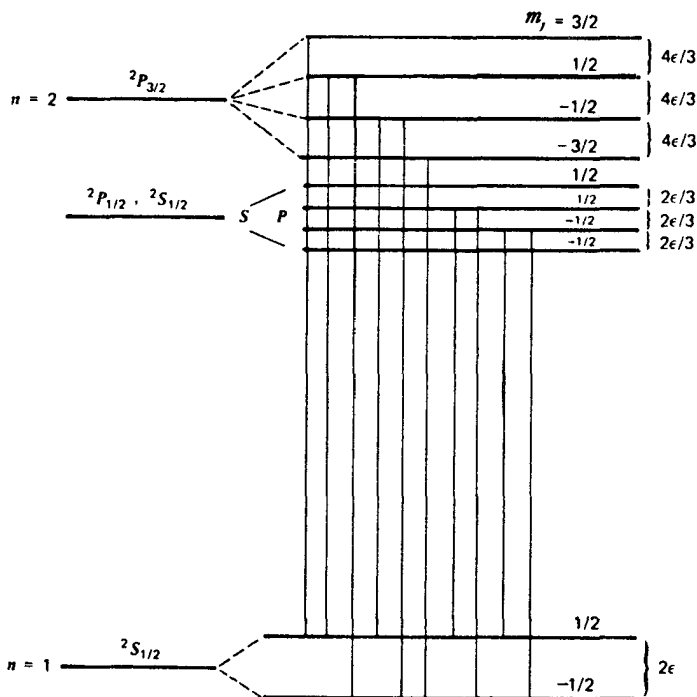
$$\Delta m_j = \pm 1, 0 \quad (17-25)$$

اما چون شکافتگی بین خطها برای تمام چندتاییها یکسان نیست، برخلاف مورد اثر بهنجار زیمان که در فصل ۱۳ بررسی کردیم درست سه خط به دست نمی‌آوریم. برای مثال، به ازای  $m = 2$  حالت  ${}^2P_{3/2}$  به چهار خط شکافته می‌شود که در آنها شکافتگی دو برابر شکافتگی مربوط به دو حالت در خطهای  ${}^2P_{1/2}$  است (شکل ۱۷-۳). اگر میدان خارجی بسیار شدید باشد، که در نتیجه جفت‌شدگی اسپین-مدار قابل چشمپوشی است، می‌توان از توابع موج هیدروژنی معمولی که در اسپینورها ضرب شده‌اند، یعنی ویژه‌حالتهای  $L_z, L_x, S_z, S_x$ ، استفاده کرد. اگر ویژه‌مقدارهای  $L_z$  و  $S_z$  را به ترتیب با  $m_l$  و  $m_s$  نشان دهیم، مقدار انتظاری  $H_1$  در ۱۷-۱۹، با  $B$  در راستای  $z$ ، عبارت خواهد بود از

$$\langle H_1 \rangle = \frac{e\hbar B}{2m_e c} (m_l + 2m_s) \quad (17-26)$$

بنابراین، حالت‌های  $m = 2$ ،  $l = 1$  به پنج تراز شکافته می‌شوند که به مقادیر  $1, 0, -1$  و  $m_s = 1/2, -1/2$  مربوط‌اند.

۱. محاسبه این قاعده‌گزینش (و سایر قاعده‌های گزینش) را در فصل ۲۱ بیان می‌کنیم.



شکل ۱۷-۳ اثر زیمان در هیدروژن،  $\epsilon$  نماینده انرژی  $ehB/2mc$  است. در این شکل گذارهایی نشان داده شده‌اند که برای آنها  $l = 1$  و  $l = 0, -1$ .  $\Delta m = 1, 0, -1$ . جای حالت‌های نامختل در شکل ۱۷-۱ داده شده است.

### ساختار فوق ریز

علاوه بر ساختار ریز ترازاها که ناشی از جفت‌شدگی اسپین-مدار است، یک شکافتگی فوق ریز بسیار کوچک وجود دارد که در واقع یک اثر دائمی زیمان ناشی از میدان مغناطیسی حاصل از گشتاور دوقطبی مغناطیسی هسته است. اگر اسپین هسته را با  $I$  نشان دهیم، عملگر گشتاور دوقطبی مغناطیسی به صورت زیر است

$$\mathbf{M} = \frac{Zeg_N}{2M_N c} \mathbf{I} \quad (27-17)$$

که در آن  $Ze$  بار هسته،  $M_N$  جرم و  $g_N$  نسبت ژیرومغناطیسی آن است. پتانسیل برداری ناشی از دوقطبی نقطه‌ای بنابه نظریه الکترومغناطیس عبارت است از

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} (\mathbf{M} \times \nabla) \frac{1}{r} \quad (28-17)$$



و در نتیجه برای میدان مغناطیسی داریم

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = -\frac{\mathbf{M}}{4\pi} \nabla^2 \frac{1}{r} + \frac{1}{4\pi} \nabla (\mathbf{M} \cdot \nabla) \frac{1}{r} \quad (29-17)$$

که می‌توان آن را به صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} B_i &= -M_i \frac{1}{4\pi} \nabla^2 \frac{1}{r} + \frac{1}{4\pi} M_j \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \frac{1}{r} \\ &= M_i \delta(r) + \frac{1}{4\pi} M_j \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \frac{1}{r} \end{aligned} \quad (30-17)$$

در اینجا از رابطه زیر استفاده کرده‌ایم<sup>۲</sup>

$$\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi \delta(r) \quad (31-17)$$

اختلال عبارت است از

$$H_{hf} = -\mathbf{M}_e \cdot \mathbf{B} = -M_{e_i} M_i \delta(r) + \frac{1}{4\pi} M_{e_i} M_j \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \frac{1}{r} \quad (32-17)$$

یک تحلیل ساده ابعادی نشان می‌دهد که این اختلال به صورت  $\mathbf{M}_e \cdot \mathbf{M} / a_0^3$  است، و در نتیجه

$$\langle H_{hf} \rangle \approx \frac{Z e^2 g_N}{m_e M_N c^2} \hbar^2 \left( \frac{Z \alpha m_e c}{\hbar} \right)^2 \approx g_N (Z \alpha)^2 m_e c^2 (m_e / M_N)$$

که با ضریب  $m_e / M_N$  کوچکتر از شکافتگی‌های اسپین-مدار نوعی است.

با شکافتگی حالت‌های  $l = 0$  در اتم هیدروژن سروکار خواهیم داشت، و از این رو باید انتگرال زیر را محاسبه کنیم

$$\int d^3r |\phi_n(\mathbf{r})|^2 \left( -M_{e_i} M_i \delta(r) + \frac{1}{4\pi} M_{e_i} M_j \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \frac{1}{r} \right)$$

۲. تنها با قسمت شعاعی  $\nabla^2$  سروکار داریم. برای اثبات، از این واقعیت استفاده می‌کنیم که به ازای  $r \neq 0$  داریم  $(1/r)^2 (d/dr)[r^2 (d/dr)](1/r) = 0$ ، و اینکه انتگرال  $\nabla^2(1/r)$  روی کره کوچکی به شعاع  $\epsilon$  برابر است با  $-4\pi$ ، که به  $\epsilon$  بستگی ندارد.

به علت تقارن کروی  $|\phi_{n^{\circ}}(\mathbf{r})|^2$  داریم

$$\int d^3r |\phi_{n^{\circ}}(\mathbf{r})|^2 \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \frac{1}{r} = \frac{1}{3} \delta_{ij} \int d^3r |\phi_{n^{\circ}}(\mathbf{r})|^2 \nabla^2 \frac{1}{r}$$

$$= \frac{4\pi}{3} \delta_{ij} \int d^3r |\phi_{n^{\circ}}(\mathbf{r})|^2 \delta(\mathbf{r}) \quad (33-17)$$

بنابراین، به دست می آوریم

$$\langle \phi_{n^{\circ}} | H_{hf} | \phi_{n^{\circ}} \rangle = -\frac{2}{3} \mathbf{M}_e \cdot \mathbf{M} |\phi_{n^{\circ}}(\circ)|^2 \quad (34-17)$$

از آنجا که

$$|\phi_{n^{\circ}}(\circ)|^2 = R_{n^{\circ}}(\circ)^2 = \frac{4}{n^2} \left( \frac{Z\alpha m_e c}{\hbar} \right)^2 \quad (35-17)$$

نتیجه می گیریم که

$$\langle H \rangle = \frac{4}{3} g_N \frac{m_e}{M_N} (Z\alpha)^2 m_e c^2 \frac{1}{n^2} \frac{1}{n^2} \left( \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{I}}{\hbar^2} \right) \quad (36-17)$$

اگر اسپین کل الکترون و هسته را با  $F$  نشان دهیم:

$$\mathbf{F} = \mathbf{S} + \mathbf{I} \quad (37-17)$$

آنگاه

$$\frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{I}}{\hbar^2} = \frac{\mathbf{F}^2 - \mathbf{S}^2 - \mathbf{I}^2}{2\hbar^2} = \frac{[F(F+1) - 3/4 - I(I+1)]}{2}$$

$$= \frac{1}{2} \begin{cases} I & F = I + \frac{1}{2} \\ -I - 1 & F = I - \frac{1}{2} \end{cases} \quad (38-17)$$

برای هیدروژن داریم  $g_N = g_p \cong 5.58$ ، و اختلاف انرژی بین حالت برانگیخته  $F = 1$  و حالت پایه  $F = 0$  برابر است با

$$\Delta E = \frac{4}{3} (5.58) \frac{1}{1840} \frac{1}{(137)^2} (m_e c^2) \quad (39-17)$$

طول موج تابش مربوط به گذار بین حالت‌های  $F = 1$  و  $F = 0$  عبارت است از

$$\lambda \simeq 21,1 \text{ cm} \quad (40-17)$$

و برای بسامد<sup>۴</sup> داریم

$$\nu = \frac{c}{\lambda} \simeq 1420 \text{ MHz} \quad (41-17)$$

تابش ناشی از این گذار نقش مهمی در اخترشناسی دارد. در گازی از اتم‌های خنثی، حالت  $F = 1$  نمی‌تواند با تابش معمولی برانگیخته شود، زیرا قاعدهٔ گزینش قویاً مانع گذارهایی است که در آنها تغییری در تکانهٔ زاویه‌ای مدار و وجود ندارد. حالت‌های  $F = 1$  و  $F = 0$  هر دو دارای تکانهٔ زاویه‌ای صفر هستند. از طرف دیگر، سازوکارهای دیگری وجود دارند که می‌توانند باعث این گذارها شوند. به‌عنوان مثال، حالت  $F = 1$  می‌تواند به‌علت برخورد برانگیخته شود، و بازگشت به حالت پایهٔ  $F = 0$  را می‌توان آشکارسازی کرد. اخترشناسان از تحلیل شدت تابش دریافت‌شدهٔ ۲۱ سانتیمتری اطلاعات بسیاری را دربارهٔ توزیع چگالی هیدروژن خنثی در فضای میان ستاره‌ای و همچنین حرکت و دمای ابرهای گازی حاوی هیدروژن به‌دست آورده‌اند. تعداد متوسط اتم‌های هیدروژن خنثی در صفحهٔ کهکشانی نزدیک خورشید ظاهراً حدود  $1 \text{ cm}^{-3}$  است، و دما از مرتبهٔ  $10^4 \text{ K}$  است.

## نکاتی دربارهٔ اثرات جرم کاهیده

در محاسبه‌های اختلال از اثرات جرم کاهیده به دلیل کوچکی مقدار  $m_e/M_p$  صرف‌نظر کردیم. در سی سال گذشته، امکان مطالعهٔ طیف‌های اتم‌های ناپایدار فراهم شده است، مانند اتمی که در آن یک  $\mu^-$  (الکترون سنگین با جرم  $m_\mu = 206,8 m_e$ ) که عمر کوتاهی دارد با یک پروتون حالت مقیدی تشکیل می‌دهد، یا پوزیترونیم که در آن الکترون  $e^-$  با پوزیترون  $e^+$  (ذره‌ای شبیه به الکترون اما با علامت بار و گشتاور مغناطیسی مخالف) یک حالت مقید تشکیل می‌دهد. در این موارد، اثرات جرم کاهیده اهمیت بیشتری دارند و چگونگی تأثیر آنها را بر اثرات نسبیتی به‌اختصار، و برای اتم هیدروژن، بیان می‌کنیم.

اگر انرژی جنبشی نسبیتی پروتون و همچنین الکترون را منظور کنیم آنگاه تصحیحات انرژی

۴. این بسامد یکی از دقیق‌ترین کمیتهای اندازه‌گیری‌شدهٔ فیزیک است:

$\pm 1420405751,800 \pm 0,28 \text{ Hz}$  و  $\nu_{\text{جرم}} = \pm 0,28 \text{ Hz}$ . در این عدد توزیع مغناطیدگی در پروتون دخیل است، اما نظریه‌ای که بتواند عددی با این دقت را توضیح دهد وجود ندارد.

جنشی غیرنسبیتی را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$H_{\lambda} = -\frac{\lambda}{\lambda} \frac{(\mathbf{p}^T)^T}{c^T} \left( \frac{\lambda}{m_e^T} + \frac{\lambda}{M_p^T} \right)$$

یا، پس از کمی محاسبه،

$$H_{\lambda} = \frac{\lambda}{\lambda} \frac{(\mathbf{p}^T)^T}{\mu m_e^T c^T} \left( \lambda - \frac{m_c}{M_p} + \left( \frac{m_c}{M_p} \right)^T \right) \quad (42-17)$$

در جمله اسپین-مدار  $M$  تغییر نمی‌کند اما  $\mathbf{v} = \mathbf{p}/\mu$  در بحث اثر نابهنجار زیمان، اختلال اکنون عبارت است از

$$H_T = \left( \frac{e}{2\mu c} \mathbf{L} + \frac{eg}{2m_e c} \mathbf{S} \right) \cdot \mathbf{B} \quad (43-17)$$

و به جای ۲۱-۱۷ داریم

$$\begin{aligned} & \left\langle \phi_{jml} \left| \frac{eB}{2\mu c} L_z + \frac{egB}{2m_e c} S_z \right| \phi_{jml} \right\rangle \\ &= B \left\langle \phi_{jml} \left| \frac{e}{2\mu c} J_z + \left( \frac{eg}{2m_e c} - \frac{e}{2\mu c} \right) S_z \right| \phi_{jml} \right\rangle \quad (44-17) \\ &= \frac{eB}{2\mu c} \left[ \hbar m_j + \left( g \frac{\mu}{m_e} - 1 \right) \langle \phi_{jml} | S_z | \phi_{jml} \rangle \right] \end{aligned}$$

در بحث ساختار فوق‌ریز برای هیدروژن می‌توان از اثرات جرم کاهیده صرف‌نظر کرد زیرا تمام اثر با ضریب  $m_e/M_N$  از اثرات اتمی مورد نظر کوچکتر است. به لحاظ عددی، اثرات جرم کاهیده کوچک هستند. جابه‌جایی‌های انرژی برحسب میلی‌الکترون‌ولت شامل جمله‌های نسبیتی و اسپین-مدار در جدول زیر نشان داده شده‌اند.<sup>۵</sup>

تراز	جابه‌جایی انرژی با $\mu = m_e$	جابه‌جایی انرژی شامل اثرات جرم کاهیده
۱ $S_{1/2}$	-۰٫۱۸۱۱۳	-۰٫۱۸۰۷۴
۲ $S_{1/2}$	-۰٫۰۵۶۶۰	-۰٫۰۵۶۴۸
۲ $P_{1/2}$	-۰٫۰۵۶۶۰	-۰٫۰۵۶۵۱
۲ $P_{3/2}$	-۰٫۰۱۱۳۲	-۰٫۰۱۱۲۸

اثرات جرم کاهیده بر جابه‌جایی انرژی از مرتبه  $4 \times 10^{-7} \text{eV}$  و اثرات کوانتوم-الکترودینامیکی (انتقال لمب) از مرتبه  $4 \times 10^{-6} \text{eV}$  هستند. بنابراین، منظور کردن اثرات جرم کاهیده برای هیدروژن ضرورتی ندارد، مگر اینکه بخواهیم محاسبات را با دقت بسیار بسیار زیاد انجام دهیم. از طرف دیگر، برای دستگاهی چون پوزیترونیم، یعنی حالت مقید  $e^-e^+$ ، اثرات جرم کاهیده بسیار مهم هستند زیرا این دو ذره جرم یکسانی دارند. در اینجا شکافتگی فوق‌ریز نسبت به اثر اسپین-مدار یا نسبیته کوچک نیست.

## مسائل

۱۷-۱ اگر جفت‌شدگی اسپین-مدار برای ذره‌ای به جرم  $m$  و اسپین  $S$  که در پتانسیل  $V(r)$  حرکت می‌کند به صورت کلی زیر باشد

$$H_{SO} = \frac{1}{2m^2c^2} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr}$$

تأثیر این جفت‌شدگی را بر طیف نوسانگر هماهنگ سه‌بعدی به دست آورید.

۱۷-۲ حالت‌های  $n = 2$  را در اتم هیدروژن واقعی در نظر بگیرید. طیف را در غیاب میدان مغناطیسی بنویسید. اگر اتم را در میدان مغناطیسی  $25000 \text{G}$  قرار دهیم، این طیف (با نادیده گرفتن ساختار فوق‌ریز) چگونه تغییر می‌کند؟

۱۷-۳ نشان دهید

$$\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi\delta(\mathbf{r})$$

از روشی که در پانوشت مربوط به معادله ۱۷-۳ پیشنهاد شده است استفاده کنید.

۱۷-۴ گاز هیدروژن را در حالت پایه در نظر بگیرید. تأثیر میدان مغناطیسی را بر ساختار فوق‌ریز تعیین کنید. طیف را برای  $B = 1 \text{G}$  و برای  $B = 10^4 \text{G}$  محاسبه کنید.

[راهنمایی: معادله ویژه‌مقداری را برای برهم‌کنش  $aS_z/\hbar + bI_z/\hbar + AS \cdot \mathbf{I}/\hbar^2$  با ماتریس  $2 \times 2$  را قطری کنید.]  
 $A = g_N(4m_e/3M_N)\alpha^2$  و  $b = -eg_N\hbar B/M_Nc$ ،  $a = \hbar B/m_e c$  بنویسید. باید یک

۱۷-۵ یک نوسانگر هماهنگ سه‌بعدی را در نظر بگیرید. با استفاده از رابطه نسبیته برای انرژی جنبشی، جابه‌جایی انرژی حالت پایه را به دست آورید.

۱۷-۶ یک دوترون متشکل از پروتون (با بار  $+e$ ) و نوترون (با بار  $0$ ) را در حالتی با اسپین کل  $1$  و

تکانه زاویه‌ای کل  $J = 1$  در نظر بگیرید. ضرایب  $g$  برای پروتون و نوترون عبارت‌اند از

$$g_P = 2(2,7896)$$

$$g_N = 2(-1,9103)$$

(الف) حالت‌های تکانه زاویه‌ای مداری ممکن را برای این دستگاه تعیین کنید. اگر بدانیم حالت در ابتدا  ${}^3S_1$  است، چه مخلوط مجازی با فرض پایسته بودن پارته به دست می‌آید.

(ب) رابطه‌ای برای برهم‌کنش دوترون با میدان مغناطیسی خارجی بنویسید و شکافتگی زیمان را محاسبه کنید. نشان دهید اگر برهم‌کنش با میدان مغناطیسی را به صورت

$$V = -\mu_{\text{eff}} \cdot \mathbf{B}$$

بنویسیم گشتاور مغناطیسی مؤثر دوترون مجموع گشتاورهای مغناطیسی پروتون و نوترون است، و هر انحرافی از این نتیجه ناشی از ترکیب حالت غیر  $S$  با تابع موج است.

۷-۱۷ پوزیترونیم، اتم هیدروژن‌گونه‌ای متشکل از یک الکترون و یک پوزیترون (با همان جرم اما بار مخالف)، را در نظر بگیرید. (الف) انرژیهای حالت پایه و حالت‌های  $2 = n$  را محاسبه کنید. (ب) اثر انرژی جنبشی نسبیتی و جفت‌شدگی اسپین-مدار را به دست آورید. (ج) شکافتگی فوق‌ریز حالت پایه را تعیین کنید. نتایج را با نتیجه‌های مربوط به اتم هیدروژن مقایسه کنید و تفاوت‌های عمده را توضیح دهید.

## مراجع

مفصلترین بحث درباره فیزیک اتمهای هیدروژن‌گونه را می‌توان در کتاب زیر یافت

H A Bethe and E E Salpeter, *Quantum Mechanics of One-and Two-Electron Atoms*. Springer Verlag, Berlin. New York, 1957.

حرکت تقدیمی توماس در کتاب زیر بررسی شده است

R M Eisberg, *Fundamentals of Modern Physics*. John Wiley & Sons, New York, 1961.

## اتم هلیم

## اتم هلیم بدون دافعه الکترون-الکترون

اتم هلیم از یک هسته با بار  $Z = 2$  و دو الکترون که آنها را با ۱ و ۲ نشانگذاری می‌کنیم تشکیل شده است. این دو الکترون یکدیگر را دفع می‌کنند و هسته آنها را جذب می‌کند. فرض می‌کنیم (و خواهیم دید که این فرض درست است) که هیچ نیرویی غیر از نیروهای الکترومغناطیسی (کولنی با تقریب بسیار خوب) برای توصیف دینامیک اتم هلیم در مکانیک کوانتومی لازم نیست.

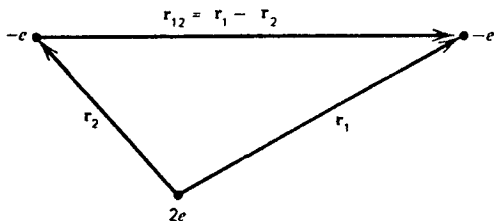
اگر هسته را در مبدأ بگیریم و مختصات الکترونها را با  $r_1$  و  $r_2$  نشان دهیم (شکل ۱۸-۱) هامیلتونی اتم هلیم را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$H = \frac{1}{2m} p_1^2 + \frac{1}{2m} p_2^2 - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} \quad (18-1)$$

که در آن  $m$  جرم الکترون است. اثرات کوچک ناشی از حرکت هسته<sup>۱</sup>، اثرات نسبیتی، اثرات

۱. اثر جرم کاهیده شکل نسبتاً متفاوتی پیدا می‌کند زیرا باید یک مسئله سه‌ذره‌ای را به مسئله عملاً دوزره‌ای تبدیل کنیم. جزئیات این تبدیل را در کتاب زیر ببینید

D) Park, *Introduction to the Quantum Theory*, McGraw-Hill, New York, Third Edition (1992).



شکل ۱-۱۸ مختصات مربوط به توصیف اتم هلیم.

اسپین-مدار، و تأثیر جریان ناشی از حرکت یکی از الکترونها بر الکترون دیگر را در نظر نمی‌گیریم. هامیلتونی ۱-۱۸ را به صورت زیر می‌نویسیم

$$H = H^{(1)} + H^{(2)} + V \quad (۲-۱۸)$$

که در آن

$$H^{(i)} = \frac{\lambda}{2m} \mathbf{p}_i^2 - \frac{Z e^2}{r_i} \quad (۳-۱۸)$$

و

$$V = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (۴-۱۸)$$

از این پس با بار هسته‌ای  $Z$  کار خواهیم کرد و هرگاه لازم باشد قرار می‌دهیم  $Z = ۲$ . از بحث اتم هیدروژن مجموعه‌های کامل ویژه‌تابعهای  $H^{(1)}$  و  $H^{(2)}$  را داریم. بنابراین، اگر در هامیلتونی کل از  $V$  صرف‌نظر کنیم، جواب مسئله ویژه‌مقداری را برای دستگاه دو الکترونی به دست می‌آوریم. ویژه‌تابعها عبارت‌اند از

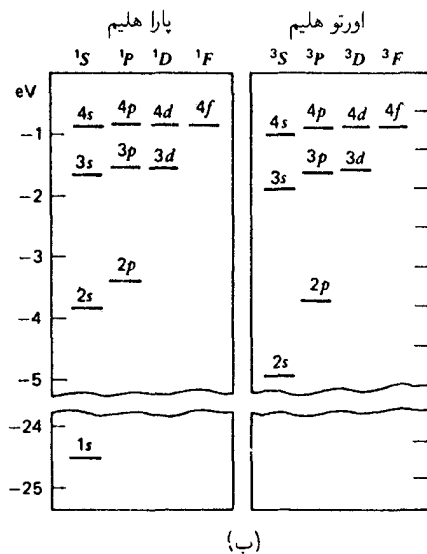
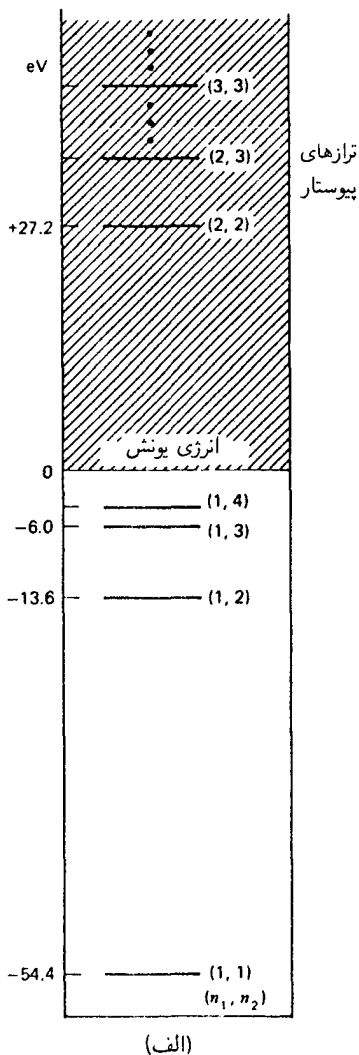
$$u(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \phi_{n_1 l_1 m_1}(\mathbf{r}_1) \phi_{n_2 l_2 m_2}(\mathbf{r}_2) \quad (۵-۱۸)$$

که در معادله زیر صدق می‌کنند

$$[H^{(1)} + H^{(2)}]u(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E u(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (۶-۱۸)$$

و انرژی با رابطه زیر داده می‌شود (شکل ۱۸-۲ الف)





شکل ۱۸-۲ (الف) طیف هلیم با چشمپوشی از برهم‌کنش الکترون-الکترون. نقطه انرژی صفر در انرژی یونش انتخاب شده است. (ب) طیف هلیم واقعی برای حالت‌های تک‌تابی (پاراهلیم) و سه‌تابی (اورتو هلیم). در نشانگذاری ترازها یک تراز بازداشته (1s) وجود دارد، و در نتیجه تراز (2p) تقریباً با اوربیتال (2p)(1s) توصیف می‌شود.

$$E = E_{n_1} + E_{n_2} \quad (۷-۱۸)$$

که در آن  $E_n = -(mc^2/2)(Z\alpha)^2/n^2$  بدین ترتیب، در این الگوی ایده‌آلی، که در آن الکترون‌ها

یکدیگر را "نمی‌بینند"، انرژی حالت پایه برابر است با

$$E = -2E_1 = -mc^2(\alpha)^2 = -10878 \text{ eV} \quad (8-18)$$

توجه کنید که این مقدار ۸ برابر انرژی حالت پایه هیدروژن است:  $2 \times Z^2 \times (-13.6 \text{ eV})$ . اولین حالت برانگیخته حالتی است که در آن یک الکترون در حالت پایه خود،  $n = 1$  است و الکترون دوم به اولین حالت برانگیخته خود،  $n = 2$  رفته است. بنابراین،

$$E = E_1 + E_2 = -6890 \text{ eV} \quad (9-18)$$

انرژی یونش، یعنی انرژی لازم برای بردن الکترون از حالت پایه به بینهایت، عبارت است از

$$E_{\text{یونش}} = (E_1 + E_\infty) - 2E_1 = 5474 \text{ eV} \quad (10-18)$$

و کاملاً جالب است که ابتدای پیوستار پایستر از حالت برانگیخته‌ای قرار دارد که در آن هر دو الکترون در حالت  $n = 2$  هستند. انرژی این حالت برابر است با

$$E = 2E_2 = -2772 \text{ eV} \quad (11-18)$$

و پدیده تازه‌ای نمایان می‌شود: وجود یک حالت گسسته در پیوستار مربوط به هامیلتونی  $H^{(1)} + H^{(2)}$ . مضامین این پدیده را به اختصار در پایان این فصل بررسی خواهیم کرد.

## اثرات اصل طرد

چون این دو الکترون فرمیونهای یکسان هستند، باید تابع موج کل را تحت تعویض مختصات فضا و اسپین آنها پادمتقارن کنیم. بنابراین، توصیف درست حالت پایه این دستگاه ایده‌آلی به صورت زیر است

$$u_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \phi_{100}(\mathbf{r}_1)\phi_{100}(\mathbf{r}_2)\chi_{\text{تکتایی}} \quad (12-18)$$

قسمت فضایی تابع موج الزاماً متقارن است و به همین دلیل است که قسمت اسپینی را یک حالت تکتایی گرفته‌ایم:

$$\chi_{\text{تکتایی}} = \frac{1}{\sqrt{3}}(\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)} - \chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)}) \quad (13-18)$$

برای اولین حالت برانگیخته می‌توان دو تابع موج داشت که به‌ازای  $V = 0$  از لحاظ انرژی واکن هستند: یکی تابع متقارن فضایی-پادمقارن اسپینی

$$u_{\lambda}^{(s)} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{100}(\mathbf{r}_1) \phi_{21m}(\mathbf{r}_2) + \phi_{21m}(\mathbf{r}_1) \phi_{100}(\mathbf{r}_2)] \chi_{\text{تک‌تایی}} \quad (14-18)$$

و دیگری تابع پادمقارن فضایی-متقارن اسپینی

$$u_{\lambda}^{(t)} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{100}(\mathbf{r}_1) \phi_{21m}(\mathbf{r}_2) - \phi_{21m}(\mathbf{r}_1) \phi_{100}(\mathbf{r}_2)] \chi_{\text{سه‌تایی}} \quad (15-18)$$

که در آن توابع اسپین

$$\chi_{\text{سه‌تایی}} = \begin{cases} \chi_+^{(1)} \chi_+^{(2)} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_+^{(1)} \chi_-^{(2)} + \chi_-^{(1)} \chi_+^{(2)}) \\ \chi_-^{(1)} \chi_-^{(2)} \end{cases} \quad (16-18)$$

بر تک‌تایی عمود هستند.

### اثر دافعه الکترون-الکترون

در تقریب اول می‌توان برهم‌کنش کولنی الکترون-الکترون  $V$  را به‌صورت اختلال در نظر گرفت. ابتدا جابه‌جایی انرژی حالت پایه را تا مرتبه اول برحسب  $V$  محاسبه می‌کنیم. داریم

$$\Delta E = \int d^3r_1 d^3r_2 u_0^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} u_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (17-18)$$

چون اسپین در این اختلال دخالت ندارد، تنها کافی است بنویسیم

$$\Delta E = \int d^3r_1 d^3r_2 |\phi_{100}(\mathbf{r}_1)|^2 \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} |\phi_{100}(\mathbf{r}_2)|^2 \quad (18-18)$$

این انتگرال تعبیر فیزیکی ساده‌ای دارد. چون  $|\phi_{100}(\mathbf{r}_1)|^2$  چگالی احتمال یافتن الکترون ۱ در  $\mathbf{r}_1$  است، می‌توان  $e|\phi_{100}(\mathbf{r}_1)|^2$  را چگالی بار الکترون ۱ تعبیر کرد. در نتیجه کمیت

$$U(\mathbf{r}_2) = - \int d^3r_1 \frac{e|\phi_{100}(\mathbf{r}_1)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (19-18)$$

پتانسیل در  $r_2$  ناشی از توزیع بار الکترون ۱ است، و از این رو کمیت

$$\Delta E = - \int d^3 r_2 e |\phi_{100}(r_2)|^2 U(r_2) \quad (20-18)$$

انرژی الکتروستاتیک برهم‌کنش الکترون ۲ با این پتانسیل است. این انتگرال را می‌توان محاسبه کرد. با  $\phi_{100} = (\frac{1}{\sqrt{4\pi}})(Z/a_0)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$  داریم

$$\Delta E = \left[ \frac{1}{\pi} (Z/a_0)^3 \right]^2 e^2 \int_0^\infty r_1^2 dr_1 e^{-2Zr_1/a_0} \int_0^\infty r_2^2 dr_2 e^{-2Zr_2/a_0} \int d\Omega_1 \int d\Omega_2 \frac{1}{|r_1 - r_2|} \quad (21-18)$$

در نوشتن این رابطه از تفکیک زیر استفاده کرده‌ایم

$$\int d^3 r = \int_0^\infty r^2 dr d\Omega$$

و جمله‌ای را که به زاویه میان  $r_2$  و  $r_1$  بستگی دارد جدا کرده‌ایم. در واقع، داریم

$$\frac{1}{|r_1 - r_2|} = \frac{1}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta)^{1/2}} \quad (22-18)$$

که در آن  $\theta$  زاویه میان  $r_2$  و  $r_1$  است. در اینجا می‌توان به دو روش کار کرد.

(الف) در یک روش مستقیم، برای انتگرال‌گیری روی  $d\Omega_2$  راستای  $r_1$  را محور  $z$  می‌گیریم، و به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \int d\Omega_2 \frac{1}{|r_1 - r_2|} &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \frac{1}{(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta)^{1/2}} \\ &= -2\pi \frac{1}{r_1 r_2} \left[ (r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta)^{1/2} \right]_{\cos \theta = -1}^{\cos \theta = +1} \\ &= \frac{2\pi}{r_1 r_2} (r_1 + r_2 - |r_1 - r_2|) \end{aligned} \quad (23-18)$$

انتگرال‌گیری روی  $d\Omega_1$  ساده است، زیرا هیچ چیز به زاویه بستگی ندارد، و در نتیجه

$$\int d\Omega_1 = 4\pi \quad (24-18)$$

بنابراین، طرف راست ۲۱-۱۸ به صورت زیر درمی آید

$$\lambda e^{\gamma} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^6 \int_0^{\infty} r_1 dr_1 e^{-\gamma Z r_1 / a_0} \int_0^{\infty} r_2 dr_2 e^{-\gamma Z r_2 / a_0} \times (r_1 + r_2 - |r_1 - r_2|) \quad (25-18)$$

(ب) یک بسط بسیار مفید، که وقتی لازم می شود که بستگی زاویه ای اضافی در صورت کسر وجود داشته باشد، با رابطه زیر داده می شود. برای  $r_1 > r_2$

$$\begin{aligned} (r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta)^{1/2} &= r_1^{-1} \left( 1 + \frac{r_2^2}{r_1^2} - 2 \frac{r_2}{r_1} \cos \theta \right)^{-1/2} \\ &= \frac{1}{r_1} \sum_{L=0}^{\infty} \left( \frac{r_2}{r_1} \right)^L P_L(\cos \theta) \quad (26-18) \end{aligned}$$

و برای  $r_2 > r_1$  کافی است جای  $r_2$  و  $r_1$  را عوض کنیم. بنابراین،

$$\int d\Omega_1 \int d\Omega_2 \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \int d\Omega_1 \int d\Omega_2 \sum_{L=0}^{\infty} \frac{r_{<}^L}{r_{>}^{L+1}} P_L(\cos \theta) \quad (27-18)$$

که در آن  $r_{<}$  و  $r_{>}$  به ترتیب یکی از  $r_2$  و  $r_1$  است که بزرگتر و کوچکتر است. با استفاده از

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) P_L(\cos \theta) = \delta_{L,0} \quad (28-18)$$

به عنوان مورد خاصی از

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) P_L(\cos \theta) P_{L'}(\cos \theta) = \frac{\delta_{LL'}}{2L+1} \quad (29-18)$$

اکنون می توان مانند سابق عمل کرد. با هر دو روش، ۲۵-۱۸ به صورت زیر درمی آید

$$\begin{aligned} \Delta E &= \lambda e^{\gamma} (Z/a_0)^6 \int_0^{\infty} r_1 dr_1 e^{-\gamma Z r_1 / a_0} \left\{ 2 \int_0^{r_1} r_2^2 dr_2 e^{-\gamma Z r_2 / a_0} \right. \\ &\quad \left. + 2r_1 \int_{r_1}^{\infty} r_2 dr_2 e^{-\gamma Z r_2 / a_0} \right\} \quad (30-18) \end{aligned}$$

انتگرالها محاسبه ساده‌ای دارند، و در نهایت به دست می‌آوریم

$$\Delta E = \frac{5}{8} \frac{Ze^2}{a_0} = \frac{5}{4} Z \left( \frac{1}{2} mc^2 \alpha^2 \right) \quad (31-18)$$

که سهم آن مثبت است، زیرا ناشی از نیروی دافعه است، و به ازای  $Z = 2$  برابر است با  $3.4\text{eV}$ . وقتی این سهم را به نتیجه مرتبه صفر  $10.818\text{eV}$  اضافه کنیم، تا مرتبه اول به دست می‌آوریم

$$E \simeq -74.8\text{ eV} \quad (32-18)$$

که با مقدار تجربی

$$E_{\text{تجربی}} = -78.975\text{ eV} \quad (33-18)$$

اختلاف قابل ملاحظه‌ای دارد. به لحاظ فیزیکی، می‌توان این اختلاف را به این واقعیت نسبت داد که در محاسبات بالا "استار" را به حساب نیاورده‌ایم، یعنی این اثر را که وجود یکی از الکترونها باعث کاهش بار خالصی می‌شود که الکترون دیگر "می‌بیند". با تساهل زیاد، می‌توان گفت که اگر، به عنوان مثال، الکترون ۱ نیمی از زمان "بین" الکترون ۲ و هسته باشد آنگاه الکترون ۲ نیمی از زمان بار  $Z$  و نیمی از زمان بار  $Z - 1$  را می‌بیند، یعنی عملاً در رابطه

$$E + \Delta E = -\frac{1}{4} mc^2 \alpha^2 \left( 2Z^2 - \frac{5}{4} Z \right) \quad (34-18)$$

باید  $(Z - 1/2)$  را به جای  $Z$  قرار دهیم. در نتیجه، اختلاف کمتر می‌شود اما استدلال خام بالا نمی‌تواند برای توجیه انتخاب  $50\%$  درصد احتمال استار مؤثر کافی باشد. بعداً در این فصل، وقتی درباره اصل وردشی ریلی-ریتر بحث می‌کنیم، به این موضوع باز خواهیم گشت.

## اصل طرد و برهم‌کنش تبدلی

اکنون اولین حالت برانگیخته هلیوم را بررسی می‌کنیم. کافی است جابه‌جایی انرژی را با حالت‌های تک‌تابی و سه‌تابی  $m = 0$  که در  $1s-1s$  و  $1s-2s$  داده شده‌اند محاسبه کنیم، زیرا این جابه‌جایی ناشی از اختلالی است که با  $L_z$  جابه‌جا می‌شود. برای چنین اختلالی، جابه‌جایی باید مستقل از

مقدار  $m$  باشد. باز هم، به دلیل نابستگی پتانسیل اختلالی  $V$  به اسپین، داریم

$$\begin{aligned} \Delta E_{\lambda}^{(s,t)} &= \frac{1}{V} e^2 \int d^3 r_{\lambda} \int d^3 r_{\lambda'} [\phi_{\lambda 0}(\mathbf{r}_{\lambda}) \phi_{\lambda' 0}(\mathbf{r}_{\lambda'}) \pm \phi_{\lambda' 0}(\mathbf{r}_{\lambda}) \phi_{\lambda 0}(\mathbf{r}_{\lambda'})]^* \\ &\quad \times \frac{1}{|\mathbf{r}_{\lambda} - \mathbf{r}_{\lambda'}|} [\phi_{\lambda 0}(\mathbf{r}_{\lambda}) \phi_{\lambda' 0}(\mathbf{r}_{\lambda'}) \pm \phi_{\lambda' 0}(\mathbf{r}_{\lambda}) \phi_{\lambda 0}(\mathbf{r}_{\lambda'})] \\ &= e^2 \int d^3 r_{\lambda} \int d^3 r_{\lambda'} |\phi_{\lambda 0}(\mathbf{r}_{\lambda})|^2 |\phi_{\lambda' 0}(\mathbf{r}_{\lambda'})|^2 \frac{1}{|\mathbf{r}_{\lambda} - \mathbf{r}_{\lambda'}|} \quad (35-18) \\ &\quad \pm e^2 \int d^3 r_{\lambda} \int d^3 r_{\lambda'} \phi_{\lambda 0}^*(\mathbf{r}_{\lambda}) \phi_{\lambda' 0}^*(\mathbf{r}_{\lambda'}) \frac{1}{|\mathbf{r}_{\lambda} - \mathbf{r}_{\lambda'}|} \phi_{\lambda' 0}(\mathbf{r}_{\lambda}) \phi_{\lambda 0}(\mathbf{r}_{\lambda'}) \end{aligned}$$

در به دست آوردن این صورت ساده، از تقارن  $V$  تحت تعویض  $\mathbf{r}_{\lambda} \leftrightarrow \mathbf{r}_{\lambda'}$  استفاده کرده‌ایم. دیده می‌شود که جابه‌جایی انرژی از دو جمله تشکیل شده است: جمله اول دارای شکل آشنای برهم‌کنش الکتروستاتیکی میان دو "ابر الکترونی" است که مطابق با توابع موج دو الکترون توزیع شده‌اند. این جمله صرفاً تعمیم ساده جمله‌ای است که برای جابه‌جایی انرژی حالت پایه به دست آورده‌ایم. جمله دوم تغییر کلاسیک ندارد. منشأ آن در اصل پاؤلی است، و علامت آن بستگی به این دارد که اسپین حالت  $^{\circ}$  است یا  $^1$ . در نتیجه، به علت این سهم تبادلی، جمله‌های سه‌تایی و تک‌تایی دیگر واگن نیستند. اگرچه در اینجا  $n = 2$  را در نظر گرفته‌ایم، اما به‌طور کلی داریم

$$\begin{aligned} \Delta E_{n,l}^{(t)} &= J_{nl} - K_{nl} \\ \Delta E_{n,l}^{(s)} &= J_{nl} + K_{nl} \end{aligned} \quad (36-18)$$

انتگرالها را می‌توان به دقت محاسبه کرد (۲۷-۱۸) همین جا به‌کار می‌آید، اما این محاسبه را انجام نمی‌دهیم. انتگرال  $J_{nl}$  به‌وضوح مثبت است، و معلوم می‌شود که  $K_{nl}$  هم مثبت است. این نتیجه به‌ازای  $l = n - 1$  بدیهی است: در این مورد، توابع موجی که در ۳۵-۱۸ ظاهر می‌شوند گره ندارند. با استدلال کیفی زیر می‌توان نشان داد که حالت سه‌تایی باید انرژی کمتری از حالت تک‌تایی داشته باشد، یعنی

$$J_{nl} - K_{nl} < J_{nl} + K_{nl}$$

یا معادل آن

$$K_{nl} > 0 \quad (37-18)$$

در واقع، تابع موج برای حالت سه‌تایی پادمتقارن است، و در نتیجه الکترونها تا حدی مقیدند دور از یکدیگر قرار گیرند. این باعث تضعیف اثر استتار می‌شود، یعنی هر الکترون مقدار بیشتری از بار هسته را "می‌بیند"، و همچنین باعث می‌شود دافعه میان الکترونها نسبت به حالت متقارن فضایی تک‌تایی کمتر شود. یک جنبه جالب توجه این نتیجه آن است که، اگرچه پتانسیل اختلالی  $e^2/|r_1 - r_2|$  به اسپینهای الکترونها بستگی ندارد، تقارن تابع موج باعث می‌شود پتانسیل به‌گونه‌ای رفتار کند که انگار وابسته به اسپین است. می‌توان ۱۸-۳۶ را به صورتی نوشت که این وابستگی را نشان دهد. اگر اسپینهای الکترونها را با  $s_1$  و  $s_2$  نشان دهیم، اسپین کل عبارت خواهد بود از  $S = s_1 + s_2$  و

$$S^2 = s_1^2 + s_2^2 + 2s_1 \cdot s_2 \quad (38-18)$$

با اعمال این عملگر روی حالت‌های تک‌تایی و سه‌تایی ۱۸-۱۳ و ۱۸-۱۶، که ویژه‌حالت‌های  $s_1^2$  و  $s_2^2$  نیز هستند، به دست می‌آوریم

$$S(S+1)\hbar^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + 2s_1 \cdot s_2$$

بنابراین،

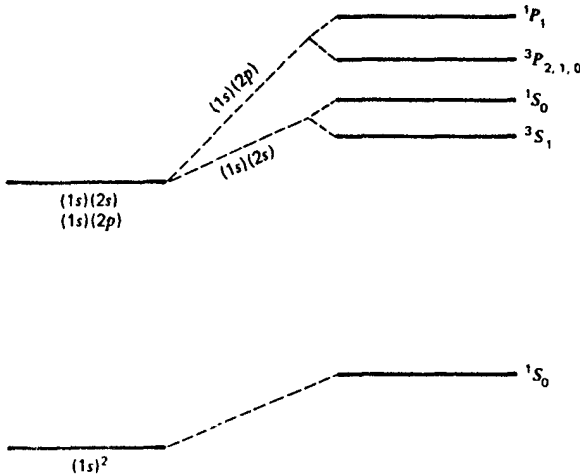
$$2s_1 \cdot s_2 / \hbar^2 = S(S+1) - \frac{3}{2} = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{سه‌تایی} \\ \frac{3}{2} \\ -\frac{1}{2} & \text{تک‌تایی} \end{cases} \quad (39-18)$$

بدین ترتیب، برحسب  $\sigma$  ها که در  $s_i = (1/2)\hbar\sigma_i$  صدق می‌کنند، می‌توان نوشت

$$\Delta E_{n,l} = J_{n,l} - \frac{1}{4}(1 + \sigma_1 \cdot \sigma_2)K_{nl} \quad (40-18)$$

در بحث مولکول  $H_2$  باز هم این رابطه را خواهیم دید. معمولاً نیروهای وابسته به اسپین بین آنها کاملاً ضعیف هستند. چنانکه در مثال جفت‌شدگی اسپین-مدار دیدیم، نیروهای وابسته به اسپین اغلب ناشی از تصحیحات نسبیتی روی نیروهای استاتیک هستند. در مثال اسپین-مدار، این نیروها به نسبت ضریب  $\alpha^2$ ، که همان  $(v/c)^2$  است، کاهش می‌یابند. این نیروها به اندازه کافی قوی نیستند که بتوانند اسپینهای الکترونها را در یک فرومغناطیس هم‌راستا نگه دارند، بجز در دماهای کمی که غیرواقعی‌اند. وابستگی اسپینی ناشی از تبادل بسیار قویتر از آن است: این نیرو از همان مرتبه بزرگی نیروی الکتروستاتیک است و، چنانکه هایزنبرگ برای نخستین بار متوجه شد، باعث پدیده فرومغناطیس است.





شکل ۱۸-۳ نمودار شکافتگی چند حالت اول برانگیخته در هلیم.

طیف چند حالت اول برانگیخته در هلیم در شکل ۱۸-۳ نشان داده شده است. نمادنگاری به کار برده شده برای حالت‌های نامختل به اوربیتالها، یعنی اعداد کوانتومی الکترونیهای نامختل، مربوط می‌شود. بنابراین، هر دو الکترون در حالت پایه در حالت‌های  $l = 0$ ،  $m = 1$  هستند، و این را با  $(1s, 1s)$ ، و در واقع به صورت فشرده‌تر  $(1s)^2$ ، نشان داده‌ایم. باید توجه کرد که وقتی مثلاً برای اولین حالت برانگیخته می‌نویسیم  $(1s)(2p)$ ، منظور این نیست که یک الکترون در یک حالت است و الکترون دیگر در حالت دیگر، زیرا برای الکترونها باید توابع موج کاملاً پادمتقارن باشند. راه دیگر نشانگذاری حالت استفاده از نمادنگاری  $2S+1L_J$  است، که برای حالت‌های مختل در شکل به کار برده‌ایم. می‌بینیم، در یک چندتایی معین حالت‌های تکتابی بالاتر از حالت‌های سه‌تایی قرار می‌گیرند. این پیامد تقارن است (به استدلال مربوط به  $K_{nl} > 0$  مراجعه کنید) و مثال خاصی از یکی از قاعده‌های هوند است: اگر تمام چیزهای دیگر یکسان باشند، حالت‌های مربوط به بیشترین اسپین کمترین انرژی را دارند.<sup>۲</sup>

اگر هلیم را با تاباندن نور فرابنفش به آن از حالت پایه برانگیخته کنیم، قاعده‌گزینش  $\Delta L = 1$ ، که بعداً آن را به دست می‌آوریم، برانگیختگی به حالت‌های  $P$  را ایجاب می‌کند. علاوه بر آن، یک قاعده‌گزینش  $\Delta S = 0$  وجود دارد که نشان می‌دهد تنها گذارهای تکتابی  $\leftarrow$  سه‌تایی  $\leftarrow$  سه‌تایی غالب هستند.<sup>۳</sup> بنابراین، قویترین حالت برانگیخته از حالت پایه حالت  $1P_1$  است. ترازهای دیگر نیز می‌توانند با سازوکارهای دیگری، مانند برانگیختگی برخوردی، اشغال شوند. اگر حالت پایه اشغال باشد، احتمال گذارهای تابشی به حالت پایه بسیار کم می‌شود. حالت  $2P$ ، که در برخورد آنها در حالت  $1P_1$  با آنها دیگر گاز ممکن است اشغال شود، تنها می‌تواند به حالت  $2S_1$  افت کند، و

۲. درباره قاعده‌های هوند با تفصیل بیشتری در فصل ۱۹ بحث خواهیم کرد.

۳. قاعده‌های گزینش را در فصل ۲۱ بررسی می‌کنیم.

این حالت را شبه پایدار می‌نامند زیرا نمی‌تواند به آسانی به حالت پایه افت کند. این واقعیت که با تقریب خوب، بین حالت‌های سه تایی و حالت‌های تک‌تایی گذاری روی نمی‌دهد زمانی موجب این باور شد که دو نوع هلیوم وجود دارند: اورتولیم (سه تایی) و پاراهلیوم (تک تایی).

طیف هلیوم در شکل ۱۸-۲ نشان می‌دهد که انرژی حالت‌های برانگیخته  $(nl)(1s)$  اختلاف چندانی با انرژی‌های ترازهای اتم هیدروژن ندارند. برای مثال، انرژی بستگی یک الکترون در اتم هلیوم  $24,6eV$  است:

$$24,6eV = 54,4 - 79,0 = (\text{انرژی بستگی هلیوم یک بار یونیده}) - (\text{انرژی بستگی کل})$$

در حالی که انرژی لازم برای آزاد شدن یک الکترون از حالت  $2s$  از مرتبه ۴ تا ۵ الکترون ولت است، که با انرژی  $3,4eV (= 13,6/n^2 eV)$  برای هیدروژن قابل مقایسه است. دلیل این اثر آن است که الکترون "خارجی" تنها یک بار مثبت واحد را می‌بیند، زیرا الکترون "داخلی" اوربیتال  $(1s)$  هسته را استتار می‌کند، و بار کل مؤثر برابر با  $Z - 1$  باقی می‌ماند. این وضعیت برای حالت پایه وجود ندارد، زیرا هر دو الکترون به هسته دسترسی دارند. بنابراین، حالت پایه در عمق اندکی بیشتر از حالت پایه هیدروژن قرار دارد.

در بحث مربوط به محاسبه مرتبه اول انرژی حالت پایه هلیوم اختلافی در حدود  $4 eV$  با مقدار تجربی به دست آوردیم. به جای برآورد نتیجه مرتبه دوم، که کار بسیار پرزحمتی است، از روش کاملاً متفاوتی برای محاسبه انرژی حالت پایه - روش وردشی ریتز - استفاده می‌کنیم.

## اصل وردشی

یک هامیلتونی  $H$  و یک تابع انتگرال پذیر مجذوری  $\Psi$  را در نظر بگیرید. فرض کنید  $\Psi$  به  $1$  بهنجار شده است:

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = 1 \quad (41-18)$$

ویژه حالت‌های  $H$  را با  $\psi_n$  نشان می‌دهیم:

$$H\psi_n = E_n\psi_n \quad (42-18)$$

تابع  $\Psi$  را می‌توان برحسب مجموعه کامل ویژه تابع‌های  $\psi_n$  بسط داد:

$$\Psi = \sum_n C_n \psi_n \quad (43-18)$$

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi | H | \Psi \rangle &= \sum_n \sum_m C_n^* \langle \psi_n | H | \psi_m \rangle C_m \\
 &= \sum_n \sum_m C_n^* C_m E_m \langle \psi_n | \psi_m \rangle \\
 &= \sum_n |C_n|^2 E_n \\
 &\geq E_0 \sum_n |C_n|^2
 \end{aligned} \tag{۴۴-۱۸}$$

چون ۴۱-۱۸ ایجاب می‌کند که

$$\sum_n |C_n|^2 = 1 \tag{۴۵-۱۸}$$

نتیجه می‌گیریم که

$$E_0 \leq \langle \Psi | H | \Psi \rangle \tag{۴۶-۱۸}$$

با استفاده از این نتیجه می‌توان یک کران بالا برای  $E_0$  محاسبه کرد. این کار را می‌توان با انتخاب یک  $\Psi$  که به تعدادی پارامتر  $(\alpha_1, \alpha_2, \dots)$  بستگی دارد، محاسبه  $\langle \Psi | H | \Psi \rangle$ ، و کمینه کردن این کمیت نسبت به پارامترهای مزبور انجام داد.

کارایی این روش را با محاسبه انرژی حالت پایه هلم نشان می‌دهیم، و بدین منظور  $\Psi$  را به صورت حاصلضرب توابع موج هیدروژنگونه در اوربیتالهای (۱s) اما با بار اختیاری  $Z$  انتخاب می‌کنیم. می‌نویسیم

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{100}(\mathbf{r}_1) \psi_{100}(\mathbf{r}_2) \tag{۴۷-۱۸}$$

به طوری که توابع موج  $\psi_{100}(\mathbf{r})$  در معادله ویژه مقدری زیر صدق می‌کنند

$$\left( \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{Z^+ e^2}{r} \right) \psi_{100}(\mathbf{r}) = \epsilon \psi_{100}(\mathbf{r}) \tag{۴۸-۱۸}$$

که در آن  $\epsilon = -(\lambda/2)mc^2(Z^+\alpha)^2$  باید انتگرال زیر را محاسبه کنیم

$$\int d^3r_1 \int d^3r_2 \psi_{1..}^*(\mathbf{r}_1)\psi_{1..}^*(\mathbf{r}_2) \left( \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right) \psi_{1..}(\mathbf{r}_1)\psi_{1..}(\mathbf{r}_2) \quad (49-18)$$

داریم

$$\begin{aligned} & \int d^3r_1 \int d^3r_2 \psi_{1..}^*(\mathbf{r}_1)\psi_{1..}^*(\mathbf{r}_2) \left( \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} \right) \psi_{1..}(\mathbf{r}_1)\psi_{1..}(\mathbf{r}_2) \\ &= \int d^3r_1 \psi_{1..}^*(\mathbf{r}_1) \left( \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} - \frac{Z^+e^2}{r_1} + \frac{(Z^+ - Z)e^2}{r_1} \right) \psi_{1..}(\mathbf{r}_1) \\ &= \epsilon + (Z^+ - Z)e^2 \int d^3r_1 |\psi_{1..}(\mathbf{r}_1)|^2 \frac{1}{r_1} \quad (50-18) \\ &= \epsilon + (Z^+ - Z)e^2 \frac{Z}{a_0} \\ &= \epsilon + Z^+(Z^+ - Z)mc^2\alpha^2 \end{aligned}$$

جمله یکسانی برای الکترون ۲ به دست می‌آوریم، و مقدار انتظاری دافعه الکترون-الکترون را قبلاً در ۱۸-۳۱ محاسبه کرده‌ایم، با این تفاوت که به جای  $Z$  اکنون باید  $Z^-$  را قرار دهیم. از جمع این جمله‌ها به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \langle \Psi | H | \Psi \rangle &= -\frac{1}{4}mc^2\alpha^2 \left( 2Z^{*2} + 4Z^+(Z - Z^+) - \frac{5}{4}Z^+ \right) \\ &= -\frac{1}{4}mc^2\alpha^2 \left( 4ZZ^* - 2Z^{*2} - \frac{5}{4}Z^+ \right) \quad (51-18) \end{aligned}$$

از کمینه کردن این کمیت نسبت به  $Z^+$  نتیجه می‌گیریم که

$$Z = Z - \frac{5}{16} \quad (52-18)$$

که بهتر از حدس قبلی  $(Z - 1/2)$  است. بدین ترتیب، به ازای  $Z = 2$  به دست می آوریم

$$E_0 \leq -\frac{1}{4} mc^2 \alpha^2 \left[ 2 \left( Z - \frac{5}{16} \right)^2 \right] = -77.38 \text{ eV} \quad (53-18)$$

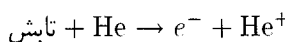
این نتیجه بسیار بهتر از نتیجه اختلال مرتبه اول است.

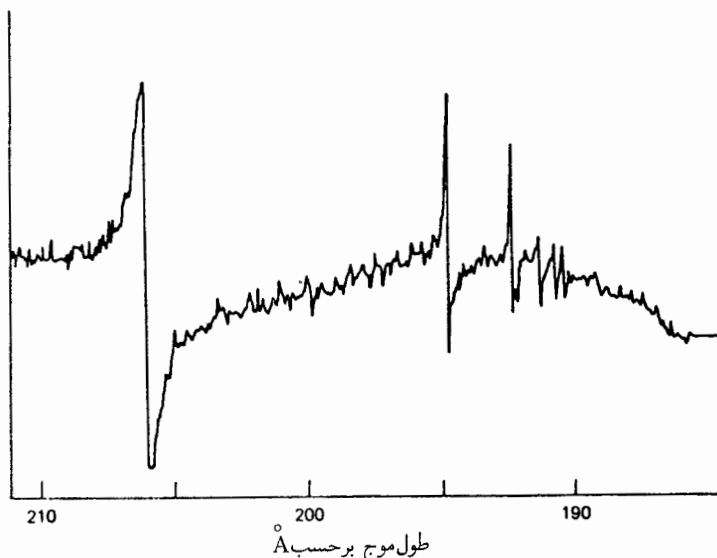
محاسبه وردشی را می توان با توابع موج آزمونی پیچیده تری انجام داد. پکریس<sup>۲</sup> با استفاده از یک تابع موج  $1075$  جمله ای  $\langle \Psi | H | \Psi \rangle$  را با کامپیوتر کمینه کرد. کران به دست آمده، با توجه به خطاهای آزمایش، با مقدار اندازه گیری شده توافق دارد. بدیهی است که چنین تابع موج پیچیده ای به صورتی نیست که مانند  $47-18$ ، با اثرات استتاری جزئی اش، به آسانی قابل تعبیر باشد. اما این تابع موج تأیید محکمی بر صحت مکانیک کوانتومی و بر این فرض است که برای توضیح ساختار اتمها نیروهای الکترومغناطیسی کفایت می کنند.

### خودیونش

در پایان، به اختصار به بررسی این مشاهده قبلی خود می پردازیم که ویژه مقدارهایی از  $H^{(1)} + H^{(2)}$  بالاتر از آستانه یونش قرار می گیرند و در عین حال گسسته هستند. به عنوان مثال، حالتی که با اوربیتالهای  $(2s)^2$  و  $(2p)(2s)$  مشخص می شوند کاملاً بالاتر از انرژی یونش قرار دارند. این پدیده پیامدهای فیزیکی جالب توجهی دارد. برای مثال، حالت  $(2p)(2s)$  را در نظر بگیرید. اگر الکترونها یک حالت اسپین تکتایی تشکیل دهند، این حالت یک  $^1P_1$  خواهد بود، و الکترونها می توانند از حالت پایه با جذب تابش به این حالت برانگیخته شوند، زیرا قاعده های گزینش  $\Delta l = 1$  و  $\Delta S = 0$  نقض نمی شوند. پس از برانگیختگی، لازم نیست که این حالت به حالت پایه  $(^1S_0)$  یا به هر حالت دیگری که بنابه قاعده های گزینش مجاز است (مثلاً حالت  $^1D_2$ ) افت کند، زیرا می تواند در مجرای دیگری قرار گیرد: این حالت می تواند به یک الکترون و هلم یک بار یونیده،  $\text{He}^+$ ، واپاشد. انرژی الکترون از پایستگی انرژی تعیین می شود. این فرایند را خودیونش می نامند.

حالت  $(2p)(2s)$  در پوستار به وضوح در پراکندگی الکترونها از یونهای  $\text{He}^+$  مشاهده می شود. وقتی انرژی الکترون به اندازه ای است که حالت مرکب می تواند تشکیل شود، یک قله بسیار بارز در آهنگ پراکندگی ظاهر می شود. همچنین، در جذب تابش توسط هلم، در نزدیکی انرژی حالت مرکب  $(e^- - \text{He}^+)$  یک قله تیز در جذب رخ می دهد (شکل  $4-18$ ). جذب در انرژیهای دیگر نیز صورت می گیرد، زیرا فرایند





شکل ۱۸-۴ تشدید در طیف جذبی هلیوم بالاتر از آستانه پیوستار: اولین قله در انرژی متناظر با محل تراز  $(2p)(2s)$  واقع می‌شود.<sup>۵</sup>

می‌تواند روی دهد، اما تغییرات جذب برحسب انرژی در انرژیهای دور از انرژی حالت مرکب بسیار هموار است. این حالت را می‌توان به‌گونه دیگری به‌عنوان حالت تشدید نیز توصیف کرد. چون این حالت به اجزاء تشکیل‌دهنده اش  $e^- + He^+$  وامی‌باشد نمی‌تواند برای همیشه پایدار بماند. در نتیجه، بنابه رابطه عدم قطعیت  $\Delta E \gtrsim \hbar/\Delta t$ ، انرژی آن دقیقاً معین نیست، که به نظر می‌رسد با این واقعیت که حالت  $(2p)(2s)$  انرژی کاملاً معینی دارد ناسازگار است. اگر جفت‌شدگی حالت گسسته به حالت پیوستار را به حساب آوریم، آن حالت دیگر گسسته نخواهد بود، و انرژی آن می‌تواند در هر جایی از یک گستره باریک حول انرژی محاسبه شده بدون جفت‌شدگی قرار داشته باشد. در فصل ۲۳ و در مبحث خاص ۴، ”طول عمر، پهنای خط، و تشدید“، به این موضوع باز خواهیم گشت.

## مسائل

۱۸-۱ اتم هلیوم را در تقریبی در نظر بگیرید که در آن از برهم‌کنش الکترون-الکترون صرف‌نظر شده است. پایینترین حالت اورتوهلیوم (اسپین ۱) را به دست آورید. واگنی آن را در این تقریب تعیین کنید. رابطه شکافتگی ناشی از دافعه الکترون-الکترون را در نظریه اختلال مرتبه اول بنویسید و بزرگی آن را برآورد کنید.

۵. اقتباس مجاز از

۲-۱۸ جابه‌جایی انرژی پایینترین مرتبه  $\Delta E_{1,0}^{(1)}$  ( $l = 0, 1$ ) را محاسبه کنید.

۳-۱۸ گشتاور مغناطیسی پایینترین حالت اورتو هلیوم را به دست آورید، یعنی برهم‌کنش با میدان مغناطیسی خارجی را محاسبه کنید.

۴-۱۸ کمیت

$$\langle E \rangle = \langle \Psi | H | \Psi \rangle$$

را در نظر بگیرید که در آن  $\Psi$  یک تابع موج آزمونی اختیاری است. نشان دهید اگر  $\Psi$  با تابع موج صحیح حالت پایه  $\psi_0$  با جمله‌هایی از مرتبه  $\epsilon$  اختلاف داشته باشد آنگاه  $\langle E \rangle$  با انرژی حالت پایه با جمله‌هایی از مرتبه  $\epsilon^2$  تفاوت خواهد داشت.

[تذکر: شرط بهنجارش  $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$  را فراموش نکنید.]

۵-۱۸ با استفاده از اصل وردشی، انرژی حالت پایه نوسانگر هماهنگ سه‌بعدی را با به‌کار بردن تابع‌موج آزمونی زیر برآورد کنید

$$\Psi = N e^{-\alpha r}$$

۶-۱۸ بستگی یک پروتون و یک نوترون (هر دو تقریباً با  $mc^2 = 938 \text{ MeV}$ ) با پتانسیل

$$V(r) = V_0 \frac{e^{-r/r_0}}{r/r_0}$$

را وقتی دستگاه در حالت  $l = 0$  است در نظر بگیرید.  $r_0$  گستره پتانسیل است. با استفاده از روش زیر، عمق پتانسیل لازم برای تعیین انرژی بستگی  $E_B$  را محاسبه کنید. (الف) مقدار تقریبی انرژی بستگی را با استفاده از اصل وردشی به دست آورید. (ب) در رابطه میان مقدار تقریبی  $r_0$  و عمق پتانسیل، مقدار تجربی  $E_B$  را قرار دهید. در محاسبات عددی از  $10^{-12} \text{ cm} = 2.8 \times 10^{-12} \text{ cm}$  و  $E_B = -2.23 \text{ MeV}$  (جرم کاهیده را فراموش نکنید.)

۷-۱۸ ماتریس  $H_{1,1}$  با بعد متناهی را در نظر بگیرید. نشان دهید شرط کمینه کردن

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = \sum_{i,j=1}^n a_i^* H_{ij} a_j$$

تحت شرط

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \sum_{i=1}^n a_i^* a_i = 1$$

ویژه مقدارهای ماتریس  $H$  را به دست می‌دهد.

[راهنمایی: از روش ضرایب لاگرانژ استفاده کنید.]

۸-۱۸ با استفاده از اصل وردشی نشان دهید که پتانسیل جاذبه یک بعدی همیشه دارای حالت مقید است.

[راهنمایی:  $\langle \Psi | H | \Psi \rangle$  را با یک تابع آزمونی مناسب، مانند  $N e^{-\beta^2 x^2}$ ، محاسبه کنید و نشان دهید این مقدار انتظاری را همیشه می‌توان منفی کرد.]

۹-۱۸ با استفاده از داده‌های شکل ۴-۱۸، محل تراز  $(2p)$  ( $2s$ ) را در بالای حالت پایه هلیوم محاسبه کنید و سرعت الکترون گسیل شده در خودیونش را، اگر یون  $\text{He}^+$  سرانجام در پایینترین حالت خود باشد، به دست آورید. اگر یون  $\text{He}^+$  در اولین حالت برانگیخته خود باشد این سرعت را تعیین کنید.

۱۰-۱۸ تابع موج  $\psi(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$  را در نظر بگیرید، که در آن تنها وابستگی به چند پارامتر نشان داده شده است. این تابع موج بهنجار شده است:

$$\langle \psi(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) | \psi(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) \rangle = 1$$

و وابستگی به پارامترها به گونه‌ای انتخاب شده است که کمیت زیر کمینه باشد

$$\mathcal{E} = \langle \psi(\alpha_1, \dots) | H | \psi(\alpha_1, \dots) \rangle$$

نشان دهید پارامترها از مجموعه معادله‌های زیر به دست می‌آیند

$$\left\langle \psi(\alpha_1, \dots) | H \left| \frac{\partial \psi}{\partial \alpha_i} \right. \right\rangle - \mu \left\langle \psi(\alpha_1, \dots) \left| \frac{\partial \psi}{\partial \alpha_i} \right. \right\rangle = 0 \quad i = 1, 2, \dots, n$$

که در آنها  $\mu$  ضریب لاگرانژ است. فرض کنید  $H$  به پارامتر  $\lambda$  بستگی دارد (که می‌تواند، به عنوان مثال، بار هسته یا یک فاصله، مانند فاصله بین هسته‌ای در یک مولکول، باشد). آنگاه پارامترهای  $\alpha_i$  به  $\lambda$  بستگی خواهند داشت. ثابت کنید

$$\frac{d\mathcal{E}}{d\lambda} = \left\langle \psi(\alpha_1, \dots) \left| \frac{\partial H}{\partial \lambda} \right| \psi(\alpha_1, \dots) \right\rangle$$

که آن را قضیه فاینمن-هلن می‌نامند و در محاسبات فیزیک مولکولی بسیار مفید است.

۱۱-۱۸ با استفاده از اصل وردشی، انرژی حالت پایه نوسانگر ناهماهنگی را برآورد کنید که برای آن

$$H = \frac{p^2}{2m} + \lambda r^2$$



نتیجه خود را با نتیجه دقیق زیر مقایسه کنید

$$E_0 = 1.060 \lambda^{1/2} \left( \frac{\hbar^2}{2m} \right)^{2/3}$$

[راهنمایی: از تابع آزمونی گاوسی استفاده کنید.]

۱۸-۱۲ با توجه به اینکه در قسمت شعاعی هامیلتونی اتم هیدروژن پتانسیل با رابطه زیر داده می‌شود

$$V_{\text{eff}} = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$$

و ویژه‌مقدارها عبارت‌اند از

$$E(n_r, l) = -\frac{1}{4}\mu c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{(n_r + l + 1)^2}$$

با استفاده از قضیه فاینمن-هلمن کمیت‌های  $\langle 1/r \rangle_{nl}$  و  $\langle 1/r^2 \rangle_{nl}$  را با انتخاب مناسب پارامتر  $\lambda$  محاسبه کنید.

۱۸-۱۳ با استفاده از نتیجه دقیقی که در مسئله ۱۸-۱۱ داده شده است و قضیه فاینمن-هلمن،  $\langle p^2 \rangle$  و  $\langle r^2 \rangle$  را برای حالت پایه نوسانگر ناهماهنگ به دست آورید.

۱۸-۱۴ بنابه اصل وردشی ریتز، مقدار انتظاری هامیلتونی  $H$  در یک حالت بهنجار شده اختیاری  $\psi$  از رابطه زیر پیروی می‌کند

$$\langle \psi | H | \psi \rangle > E_0$$

که در آن  $E_0$  کمترین ویژه‌مقدار  $H$  است. فرض کنید  $H$  یک ماتریس هرمیتی  $N \times N$  با عناصر  $H_{ij}$  ( $i, j = 1, 2, 3, \dots, N$ ) است و  $E_0$  کمترین ویژه‌مقدار آن است. با انتخاب مناسب  $\psi$  ثابت کنید  $E_0$  از هر یک از عناصر قطری  $H_{ii}$  کوچکتر است.

۱۸-۱۵ دو ذره یکسان با اسپین  $1/2$  را در پتانسیل نوسانگر هماهنگ در نظر بگیرید، به طوری که هامیلتونی این دستگاه به صورت زیر است

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{4}m\omega^2(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2$$

فرض کنید نکانه مرکز جرم این دستگاه دودره‌ای صفر است و دو ذره در حالت‌های  $l = 0$  هستند.

(الف) تابع موج حالت پایه، شامل حالت اسپینی، را بنویسید.

(ب) اولین حالت‌های برانگیخته را برحسب حالت‌های اسپین تک‌تایی و سه‌تایی بنویسید.

(ج) فرض کنید برهم‌کنش کوتاه‌بردی میان این ذرات وجود دارد که می‌توان آن را در حالت

$l = 0$  با  $C[\delta(r)/r^2]$  تقریب گرفت. تأثیر این اختلال را روی حالت‌های به‌دست آمده در قسمت

(ب) محاسبه کنید.

## مراجع

یک بحث بسیار جالب درباره طیف هلیوم را می‌توان در کتاب زیر یافت

H A Bethe and R W Jackiw, *Intermediate Quantum Mechanics*, W. A Benjamin, New York, 1968.

## ساختار اتمها

### تقریب هارتری

مسئله ویژه مقدراری انرژی برای اتمی با  $Z$  الکترون به صورت زیر است

$$\left( \sum_{i=1}^Z \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{i>j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z) = E \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z) \quad (۱-۱۹)$$

که یک معادله دیفرانسیل جزئی در  $3Z$  بعد است. برای اتمهای سبک می توان این معادله را با کامپیوتر حل کرد، اما این نوع راه حلها تنها برای متخصصان مفید است. بحث ما درباره ساختار اتمی در اینجا مبتنی بر هیافت دیگری است. مانند مثال هلیوم ( $Z = 2$ )، در نظر گرفتن این مسئله به صورت مسئله ای شامل  $Z$  الکترون مستقل در یک پتانسیل منفرد، و منظور کردن برهم کنش الکترون-الکترون در مرحله بعد، هم عملی است و هم روشنگر. چنانکه دیدیم، نظریه اختلال برای  $Z = 2$  مناسب است، اما با افزایش تعداد الکترونها اثرات استتار، که در نظریه اختلال مرتبه اول منظور نمی شوند، اهمیت بیشتری می یابند. اصل وردشی، که آن را در اواخر فصل ۱۸ بررسی کردیم، این حسن را دارد که تصویر تک ذره ای را حفظ می کند، و در عین حال توابع تک ذره ای را با در نظر گرفتن تصحیحات استتار به دست می دهد.

برای به‌کار بردن اصل وردشی، فرض می‌کنیم تابع موج آزمونی به‌صورت زیر است

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z) = \phi_1(\mathbf{r}_1)\phi_2(\mathbf{r}_2)\cdots\phi_Z(\mathbf{r}_Z) \quad (۲-۱۹)$$

هر یک از توابع  $\phi_i(\mathbf{r}_i)$  به ۱ به‌نچار شده‌اند. اگر مقدار انتظاری  $H$  را در این حالت محاسبه کنیم، به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \langle H \rangle = & \sum_{i=1}^Z \int d^3\mathbf{r}_i \phi_i^*(\mathbf{r}_i) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{r_i} \right) \phi_i(\mathbf{r}_i) \\ & + e^2 \sum_{i>j} \sum_j \int \int d^3\mathbf{r}_i d^3\mathbf{r}_j \frac{|\phi_i(\mathbf{r}_i)|^2 |\phi_j(\mathbf{r}_j)|^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \end{aligned} \quad (۳-۱۹)$$

در روش وردشی  $\phi_i(\mathbf{r}_i)$ ها را به‌گونه‌ای انتخاب می‌کنیم که  $\langle H \rangle$  کمینه شود. اگر بخواهیم  $\phi_i(\mathbf{r}_i)$ ها را توابع موج هیدروژن‌گونه، با مقادیر مختلف  $Z_i$  برای هر الکترون (و با هر الکترون در یک حالت کوانتومی متفاوت برای رعایت اصل طرد پاولی) بگیریم، مجموعه‌ای از معادله‌هایی مانند ۱۸-۵۱ و ۱۸-۵۲ به‌دست می‌آوریم. یک رهیافت کلی‌تر تقریب هارتری است. اگر  $\phi_i(\mathbf{r}_i)$ ها توابع موج تک‌ذره‌ایی باشند که  $\langle H \rangle$  را کمینه می‌کنند، آنگاه یک وردش بینهایت کوچک در این توابع،

$$\phi_i(\mathbf{r}_i) \rightarrow \phi_i(\mathbf{r}_i) + \lambda f_i(\mathbf{r}_i) \quad (۴-۱۹)$$

$\langle H \rangle$  را تنها به‌اندازه جمله‌ای از مرتبه  $\lambda^2$  تغییر خواهد داد. این وردشها باید به‌گونه‌ای باشند که

$$\int d^3\mathbf{r}_i |\phi_i(\mathbf{r}_i) + \lambda f_i(\mathbf{r}_i)|^2 = 1 \quad (۵-۱۹)$$

یعنی تا مرتبه اول برحسب  $\lambda$  داریم

$$\int d^3\mathbf{r}_i [\phi_i^*(\mathbf{r}_i) f_i(\mathbf{r}_i) + \phi_i(\mathbf{r}_i) f_i^*(\mathbf{r}_i)] = 0 \quad (۶-۱۹)$$

اکنون جمله‌های خطی برحسب  $\lambda$  ناشی از جاگذاری ۴-۱۹ در ۳-۱۹ را محاسبه می‌کنیم. جمله

به جمله، به دست می آوریم

$$\sum_i \int d^r r_i \left[ \phi_i^*(\mathbf{r}_i) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \right) \lambda f_i(\mathbf{r}_i) + \lambda f_i^*(\mathbf{r}_i) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \right) \phi_i(\mathbf{r}_i) \right] \quad (۷-۱۹)$$

$$= \lambda \sum_i d^r r_i \left\{ f_i(\mathbf{r}_i) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \phi_i^*(\mathbf{r}_i) \right] + f_i^*(\mathbf{r}_i) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \phi_i(\mathbf{r}_i) \right] \right\}$$

برای به دست آوردن این نتیجه، دوبار انتگرال جزء به جزء گرفته ایم و از این واقعیت استفاده کرده ایم که  $f_i(\mathbf{r}_i)$  باید در بینهایت صفر شود تا وردش قابل قبولی برای تابع انتگرال پذیر مجذوری باشد. سپس داریم

$$-\lambda \sum_i \int d^r r_i \left[ f_i^*(\mathbf{r}_i) \frac{Ze^{\chi}}{r_i} \phi_i(\mathbf{r}_i) + \phi_i^*(\mathbf{r}_i) \frac{Ze^{\chi}}{r-i} f_i(\mathbf{r}_i) \right] \quad (۸-۱۹)$$

و سرانجام،

$$\lambda e^{\chi} \sum_{i>j} \sum_j \int d^r r_i \int d^r r_j \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \{ [f_i^*(\mathbf{r}_i) \phi_i(\mathbf{r}_i) + f_i(\mathbf{r}_i) \phi_i^*(\mathbf{r}_i)] |\phi_j(\mathbf{r}_j)|^2 + [f_j^*(\mathbf{r}_j) \phi_j(\mathbf{r}_j) + f_j(\mathbf{r}_j) \phi_j^*(\mathbf{r}_j)] |\phi_i(\mathbf{r}_i)|^2 \} \quad (۹-۱۹)$$

نمی توان این سه جمله را صرفاً با هم جمع کرد و این مجموع را برابر با صفر قرار داد، زیرا  $f_i(\mathbf{r}_i)$  ها تحت قید ۶-۱۹ هستند. راه مناسب برای منظور کردن این قید استفاده از ضرایب لاگرانژ است، یعنی هر یک از رابطه های قیدی ۶-۱۹ را در یک ثابت ("ضریب") ضرب می کنیم و مجموع اینها را به سه جمله قبل اضافه می کنیم. اکنون می توان این مجموع جدید را برابر صفر قرار داد، زیرا قیدهای روی  $f_i(\mathbf{r}_i)$  ها به حساب آمده اند. با کمی آینده نگری در نمادنگاری، ضرایب را با  $\epsilon_i$  - نشان می دهیم، و در نتیجه به دست می آوریم

$$\sum_i \int d^r r_i \left\{ f_i^*(\mathbf{r}_i) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \phi_i(\mathbf{r}_i) \right] - f_i^*(\mathbf{r}_i) \frac{Ze^{\chi}}{r_i} \phi_i(\mathbf{r}_i) \right\}$$

$$+ e^{\chi} \sum_{i \neq j} \sum_j \int \int d^r r_i d^r r_j f_i^*(\mathbf{r}_i) \frac{|\phi_j(\mathbf{r}_j)|^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \phi_i(\mathbf{r}_i) \quad (۱۰-۱۹)$$

$$- \epsilon_i \int d^r r_i f_i^*(\mathbf{r}_i) \phi_i(\mathbf{r}_i) + (\text{جمله همیوغ مختلط}) = 0$$

در به دست آوردن سطر دوم، ابتدا جمع دوگانه  $\sum_{i>j} \sum_j$  را به  $\sum_{i \neq j} (1/2)$  تبدیل کرده‌ایم، که قیدی روی آن نیست مگر این شرط که باید  $i \neq j$ ، و سپس از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که جمله زیر انتگرال در ۱۹-۹ نسبت به  $i$  و  $j$  متقارن است. اکنون  $f_i(\mathbf{r}_i)$ ها کاملاً بدون قید هستند، و در نتیجه می‌توان  $f_i(\mathbf{r}_i)$  و  $f_i^*(\mathbf{r}_i)$  را کاملاً مستقل از یکدیگر در نظر گرفت (هر یک از آنها یک قسمت حقیقی و یک قسمت انکجاری دارد). علاوه بر این، آنها کاملاً اختیاری هستند بجز اینکه باید انتگرالپذیر مجذوری باشند، و در نتیجه برای اینکه ۱۹-۱۰ برقرار باشد باید ضرایب مربوط به  $f_i(\mathbf{r}_i)$  و  $f_i^*(\mathbf{r}_i)$  جداگانه در هر نقطه  $\mathbf{r}_i$  صفر شوند، زیرا می‌توان وردشهای موضعی در توابع  $f_i(\mathbf{r}_i)$  و  $f_i^*(\mathbf{r}_i)$  ایجاد کرد. بدین ترتیب، به رابطه زیر می‌رسیم

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{r_i} + e^2 \sum_{j \neq i} \int d^3 \mathbf{r}_j \frac{|\phi_j(\mathbf{r}_j)|^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right] \phi_i(\mathbf{r}_i) = \epsilon_i \phi_i(\mathbf{r}_i) \quad (11-19)$$

و رابطه همیوغ مختلط آن.

معادله ۱۹-۱۱ تعبیر روشنی دارد: این معادله عبارت است از یک معادله ویژه مقدراری انرژی برای الکترون "i" واقع در  $\mathbf{r}_i$  که در پتانسیل زیر حرکت می‌کند

$$V_i(\mathbf{r}_i) = -\frac{Ze^2}{r_i} + e^2 \sum_{j \neq i} \int d^3 \mathbf{r}_j \frac{|\phi_j(\mathbf{r}_j)|^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (12-19)$$

که تشکیل شده است از یک پتانسیل جاذبه کولنی ناشی از هسته‌ای با بار  $Z$  و یک پتانسیل دافعه ناشی از چگالی بار تمام الکترونهاى دیگر. البته چگالیهای بار

$$\rho_j(\mathbf{r}_j) = -e|\phi_j(\mathbf{r}_j)|^2 \quad (13-19)$$

مربوط به تمام الکترونهاى دیگر را نمی‌دانیم، و از این رو باید یک مجموعه خودسازگار از  $\phi_i(\mathbf{r}_i)$ ها به دست آوریم که با جاگذاری آنها در پتانسیل بالا به ویژه تابعی برسیم که خودشان را باز تولید می‌کنند. معادله ۱۹-۱۱ معادله انتگرالی نسبتاً پیچیده‌ای است، اما هر چه باشد دست‌کم یک معادله سه‌بعدی است (و می‌توان در آن متغیر  $\mathbf{r}_i$  را با  $\mathbf{r}$  تعویض کرد) و این محاسبه عددی را بسیار ساده‌تر می‌کند، و حتی از این هم ساده‌تر خواهد شد اگر به جای  $V_i(\mathbf{r})$  متوسط زاویه‌ای آن را قرار دهیم:

$$V_i(r) = \int \frac{d\Omega}{4\pi} V_i(\mathbf{r}) \quad (14-19)$$

زیرا پتانسیل خودسازگار با این تعویض مرکزی می‌شود، و می‌توان جوابهای خودسازگار را به توابع

زاویه‌ای و شعاعی تجزیه کرد، یعنی توابعی که می‌توان با  $l_i, m_i, n_i$  و  $\sigma_i$  که این یکی به حالت اسپینی (با  $s_{iz} = \pm 1/2$ ) مربوط می‌شود، مشخص کرد.

در تابع موج آزمونی ۱۹-۲ اصل طرد منظور نشده است. این اصل نقش مهمی دارد، زیرا اگر تمام الکترون‌ها می‌توانستند در حالت کوانتومی یکسان باشند انرژی وقتی کمینه می‌شد که تمام الکترون‌ها در "اوربیتال"  $l = 0, m = 1$  باشند. آنها چنین ساختار ساده‌ای ندارند. برای به حساب آوردن اصل طرد، به توابع موج آزمونی ۱۹-۲ قاعده زیر را اضافه می‌کنیم: اگر حالت‌های اسپینی در نشانگذاری دخالت داشته باشند، هر الکترون باید در حالت متفاوتی باشد. یک راه پیچیده‌تر برای منظور کردن خودبه‌خود اصل طرد این است که به جای ۱۹-۲ از یک تابع موج آزمونی به صورت دترمینان اسلیتر (رابطه ۸-۶) استفاده کنیم. تفاوت معادله‌های حاصل با ۱۹-۱۱ در اضافه شدن یک جمله تبادلی است. معادله‌های جدید هارتری-فوک دارای ویژه‌مقدارهایی هستند که، به دلیل وضعیت ناشی از اصل طرد، ۱۰ تا ۲۰ درصد با ویژه‌مقدارهای حاصل از معادله‌های هارتری تفاوت دارند. بحث درباره فیزیک ساختار اتمی با استفاده از دیدگاه هارتری کمی آسانتر است، و از این رو معادله‌های هارتری-فوک را بررسی نخواهیم کرد.

پتانسیل ۱۹-۱۴ دیگر به صورت  $1/r$  نیست، و در نتیجه برای هیچ یک از حالتها با یک مقدار معین  $n$  و  $l \leq n - 1$  دیگر واگنی نخواهیم داشت. اما می‌توان پیش‌بینی کرد، دست‌کم برای  $Z$  های کوچک، که شکافتگی به‌ازای مقادیر مختلف  $l$  با یک مقدار معین  $n$  کوچکتر از شکافتگی به‌ازای مقادیر مختلف  $n$  خواهد بود، و در نتیجه الکترون‌های واقع در اوربیتالهای  $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d, 4f, \dots$  متوالیاً بستگی ضعیفتری خواهند داشت.<sup>۱</sup> اثرات استتار این وضعیت را تشدید می‌کنند: در حالی‌که اوربیتالهای  $s$  به‌طور قابل‌ملاحظه‌ای در ناحیه  $r$  های کوچک واقع می‌شوند، و از این رو تحت جاذبه هسته‌ای کامل قرار دارند، اوربیتالهای  $p, d, \dots$  را سد مرکزگریزی به‌خارج می‌رانند، و تحت جاذبه‌ای کمتر از جاذبه کامل هستند. این اثر چنان شدید است که سبب می‌شود انرژی الکترون‌های  $3d$  بسیار نزدیک به انرژی الکترون‌های  $4s$  باشد، و در نتیجه ترتیب پیش‌بینی شده گاهی به هم می‌خورد. همین وضعیت برای الکترون‌های  $4d$  و  $5s$  الکترون‌های  $4f$  و  $6s$ ، و غیره نیز صادق است. چنانکه در بحث جدول تناوبی خواهیم دید، وقتی به مقادیر بزرگتر  $Z$  می‌رسیم غلبه وابستگی به  $l$  بر وابستگی به  $n$  اهمیت بیشتری می‌یابد.

تعداد الکترونیایی که می‌توانند در اوربیتالهای مربوط به یک زوج معین  $(n, l)$  قرار گیرند  $(2l + 1)2$  است، زیرا به‌ازای یک مقدار معین  $m$  هر الکترون می‌تواند دو حالت اسپینی داشته باشد. وقتی تمام این  $(2l + 1)2$  حالت پر شدند، می‌گوییم یک پوسته بسته داریم. چگالی بار

۱. این نمادنگاری همان است که برای هیدروژن به‌کار می‌رود. یک نمادنگاری گویاتر، که فیزیکدانهای هسته‌ای ساختار پوسته‌ای به‌کار می‌برند، قرار دادن  $n - l$  به جای  $n$  است که دقیقاً شاخصی است که ترتیب مربوط به یک حالت معین  $l$  را نشان می‌دهد. بنابراین، به‌جای شروع از حالت‌های  $3d$ ، برای مثال، بهتر است که پایینترین حالت  $d$  را حالت  $1d$  بنامیم، و غیره. با این همه، باز هم از همان نمادنگاری مرسوم استفاده خواهیم کرد، اگرچه مقدار  $n$  کار چندانی با ترتیب ترازهای آنها بزرگ  $Z$  ندارد.

برای یک پوسته بسته به صورت

$$-e \sum_{m=-l}^l |R_{nl}(r)|^2 |Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 \quad (۱۵-۱۹)$$

است که تقارن کروی دارد، زیرا هماهنگهای کروی دارای این خاصیت اند که

$$\sum_{m=-l}^l |Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 = \frac{2l+1}{4\pi} \quad (۱۶-۱۹)$$

## اصل تشکیل

در این بخش درباره تشکیل آنها با افزودن تدریجی الکترونها به هسته بحث، که نقش آن با تقریب خوب تنها فراهم آوردن بار مثبت  $Ze$  است، بحث می‌کنیم

هیدروژن ( $Z = 1$ ). در اینجا فقط یک الکترون داریم، و پیکربندی حالت پایه ( $1s$ ) است. انرژی یونش برابر است با  $۱۳٫۶eV$ ، و انرژی لازم برای برانگیختن به اولین حالت بالای حالت پایه  $۱۰٫۲eV$  است. شعاع اتم  $۰٫۵\text{\AA}$  است، و توصیف طیف نمایی آن  $2S_{1/2}$  است.

هلیم ( $Z = 2$ ). پایینترین حالت دو الکترونی، چنانکه در فصل ۱۸ دیدیم، حالتی است که در آن هر دو الکترون در اوربیتال ( $1s$ ) هستند. این پیکربندی را با  $(1s)^2$  نشان می‌دهیم. در نمادنگاری طیف نمایی، حالت پایه یک حالت تکتابی اسپینی  $l = 0$ ، یعنی  $1S_0$ ، است زیرا با اثر تبادل سازگار است. انرژی بستگی کل برابر است با  $۷۹eV$ . پس از جدا شدن یک الکترون، الکترون باقی‌مانده در اوربیتال ( $1s$ ) حول هسته  $Z = 2$  خواهد بود. بنابراین، انرژی بستگی آن برابر است با  $۵۴٫۴eV = ۱۳٫۶Z^2eV$ . بدین ترتیب، انرژی لازم برای جدا کردن اولین الکترون، انرژی یونش، برابر است با  $۲۴٫۶eV = ۵۴٫۴ - ۷۹$ . یک برآورد تقریبی از انرژی اولین حالت برانگیخته، با پیکربندی  $(1s)(2s)$ ، از رابطه زیر به‌آزای  $Z = 2$  و  $n = 2$  به‌دست می‌آید

$$-۱۳٫۶Z^2 - ۱۳٫۶(Z - 1)^2/n^2 \approx -۵۸ eV$$

در این رابطه استتار در جمله دوم منظور شده است. بنابراین، انرژی برانگیختگی عبارت است از  $۲۱eV \approx ۵۸eV - ۷۹eV$ . بدین ترتیب، در هر واکنشی با یک ماده دیگر، حدود  $۲۰eV$  برای بازاریابی الکترونها لازم می‌شود، و از این رو هلیم به لحاظ شیمیایی بسیار غیرفعال است. تمام اتمهایی که الکترونها آنها پوسته‌های بسته می‌سازند همین ویژگی را دارند، اما انرژی لازم

۲. این یک برآورد خام است که در آن از دافعه الکترون-الکترون و اثرات تبادل صرف‌نظر شده‌اند. اختلاف  $۲۱eV$  و  $۲۴٫۶eV$  بین ۴ تا ۵ الکترون ولت است که وقتی اتم برانگیخته به حالت پایه خود افت می‌کند آزاد می‌شود (شکل ۱۸-۲ب).



مخصوصاً برای هلیوم زیاد است.

لیتیم ( $Z = 3$ ). اصل طرد پیکربندی  $(1s)^2$  را ممنوع می‌کند، و پیکربندی الکترونی با کمترین انرژی  $(1s)^2(2s)$  است. بنابراین، به پوستهٔ بسته یک الکترون می‌افزاییم، و چون این پوسته در حالت  $1s_0$  است، توصیف طیف نمایی حالت پایه، درست مانند مورد هیدروژن،  $1s_{1/2}$  است. اگر استتار کامل بود، انرژی بستگی  $4eV$  می‌شد (زیرا  $n = 2$ ). استتار کامل نیست، و مخصوصاً چون الکترون ظرفیت خارجی در حالت  $s$  است، تابع موج آن همپوشی قابل ملاحظه‌ای با هسته در  $r = 0$  دارد. می‌توان بار مؤثر را از انرژی یونش اندازه‌گیری شده  $5.4eV$  برآورد کرد، و نتیجه عبارت است از  $Z^* = 1.3$ . برای برانگیختن اتم لیتیم به انرژی بسیار کمی نیاز داریم. شش حالت الکترونی  $(2p)$  درست کمی بالاتر از حالت  $(2s)$  قرار می‌گیرند، و این حالت‌های  $(2p)$  وقتی اشغال شوند اتم را از لحاظ شیمیایی فعال می‌کنند (بحث گسترده‌تر مربوط به کربن را ببینید). لیتیم، مانند هر عنصر دیگری که یک الکترون در خارج از پوستهٔ بسته دارد، عنصر بسیار فعالی است.

بریلیم ( $Z = 4$ ). مکان طبیعی برای الکترون چهارم فضای خالی در اوربیتال  $(2s)$  است، و در نتیجه پیکربندی به صورت  $(1s)^2(2s)^2$  خواهد بود. باز هم یک پوستهٔ بسته داریم و نمادنگاری طیف نمایی  $1s_0$  است. تا آنجا که به انرژی مربوط می‌شود، وضعیت بسیار شبیه به مورد هلیوم است. اگر استتار کامل بود، انتظار یک انرژی بستگی مانند انرژی بستگی هلیوم را داشتیم، زیرا الکترونهای داخلی بار مؤثر را به مقداری مانند  $Z = 2$  کاهش می‌دهند. چون  $n = 2$ ، انرژی یونش  $6.7eV = 24.6n^2$  را باید پیش‌بینی کنیم. وضعیت استتار تا اندازه‌ای مانند مورد لیتیم است، و اگر برای انرژی بستگی افزایشی حدود  $5^\circ$  درصد حدس بزینم تقریباً مقدار  $9eV$  به دست می‌آوریم. مقدار تجربی  $9.3eV$  است. اگرچه پوستهٔ بسته است، برانگیزش یکی از الکترونها به اوربیتال  $(2p)$  به انرژی چندان زیادی احتیاج ندارد. بنابراین، در حضور یک عنصر دیگر بازآرایی الکترونها می‌تواند انرژی کافی برای شکستن پوستهٔ بسته فراهم کند. در نتیجه، پیش‌بینی می‌کنیم که بریلیم به اندازه هلیوم خنثی نباشد. واقعیت این است که به طور کلی اتمهایی که در آنها اسپینهای الکترونهای خارجی در حالت‌های تک‌تایی "جفت‌شده" اند کمتر واکنش‌پذیر هستند.

بور ( $Z = 5$ ). پس از بسته شده پوستهٔ  $(2s)$ ، الکترون پنجم می‌تواند یا به اوربیتال  $(3s)$  برود یا به اوربیتال  $(2p)$ . اوربیتال  $(2p)$  از لحاظ انرژی پایینتر است، و در نتیجه پوستهٔ  $(2p)$  از بور به بعد شروع به پر شدن می‌کند. پیکربندی به صورت  $(1s)^2(2s)^2(2p)$  و نمادنگاری طیف نمایی این حالت  $2P_{1/2}$  است. این مورد نیاز به توضیح دارد: اگر اسپین  $1/2$  را به حالت مداری  $l = 1$  اضافه کنیم، مقدار  $J$  می‌تواند  $3/2$  یا  $1/2$  باشد. این حالتها با برهم‌کنش اسپین-مدار زیر شکافته شده‌اند

$$\frac{1}{2m^2c^2} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} = \frac{1}{4m^2c^2} [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)] \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \quad (17-19)$$

که نتیجه آن انرژی بیشتر برای مقدار بزرگتر  $J$  است، زیرا مقدار انتظاری  $(1/r)(dV/dr)$  باز هم مثبت است، اگرچه دیگر با مقدار رابطه ۱۷-۱۶ برابر نیست. این نتیجه بستگی به این دارد که پوسته تا چه حد پر شده باشد، که مشخصاً با قاعده‌های هوند داده می‌شود. این قاعده‌ها را در بخش بعد بررسی می‌کنیم. انرژی یونش برابر است با  $۸,۳\text{eV}$ ، که با این پیش‌بینی که این انرژی باید اندکی کمتر از انرژی یونش بریلیم باشد، زیرا انرژی حالت  $2p$  تا اندازه‌ای بیشتر از انرژی اوربیتال  $2s$  است، توافق دارد.

کربن ( $Z = 6$ ). پیکربندی برای کربن به صورت  $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$  است. دو الکترون آخر می‌توانستند در یک حالت  $p$ ، با یک زوج اسپین بالا-پایین، باشند. اما برای این الکترون‌ها بهتر این است که سر راه یکدیگر قرار نگیرند و در نتیجه دافعه بین آنها کاهش یابد. این کار شدنی است زیرا حالت‌های ممکن  $l = 1$  (یعنی  $Y_{1,0}$ ,  $Y_{1,1}$ ) ترکیب‌های خطی  $\sin \theta \cos \phi$ ,  $\sin \theta \sin \phi$  و  $\cos \theta$  را، که به ترتیب با محورهای  $x$ ,  $y$  و  $z$  هم‌راستا هستند، امکان‌پذیر می‌سازند. وقتی دو الکترون در بازوهای متعام قرار می‌گیرند، همپوشی کمینه می‌شود و دافعه کاهش می‌یابد. این الکترون‌ها در حالت‌های فضایی مختلفی هستند، و در نتیجه لازم نیست اسپین‌های آنها پادمازای باشند. شاید انتظار داشته باشیم که کربن دوظرفیتی باشد. اما به دلیل ظرافتهای ناشی از ترازهای انرژی کم فاصله چنین نیست. برای بردن یکی از الکترون‌های ( $2s$ ) به سومین حالت اشغال‌نشده  $l = 1$  انرژی بسیار کمی لازم است. پیکربندی  $(1s)^2(2s)(2p)^3$  چهار الکترون "جفت‌نشده" دارد، و انرژی حاصل از تشکیل چهار پیوند با اتم‌های دیگر بیش از انرژی لازم برای برانگیختن الکترون ( $2s$ ) است. کاهش دافعه باعث انرژی یونش بیشتری نسبت به بور می‌شود:  $۱۱,۳\text{eV}$ . توصیف طیف نمایی حالت پایه  ${}^2P$  است. اسپین کل دو الکترون  $2p$  می‌تواند  $0$  یا  $1$  باشد، و چون دو حالت  $l = 1$  را جمع می‌کنیم تکانه زاویه‌ای مدار کل می‌تواند  $0$ ،  $1$  یا  $2$  باشد. از حالت‌های مختلف،  ${}^1S$ ،  ${}^3P_{2,1,0}$  و  ${}^1D_2$ ، حالتی که اسپین بزرگتری دارد دارای انرژی کمتری است (به بحث مربوط به هلیوم مراجعه کنید) و بنابه یکی دیگر از قاعده‌های هوند انرژی حالت  ${}^3P$  از همه کمتر است.

نیترژن ( $Z = 7$ ). در اینجا پیکربندی  $(1s)^2(2s)^2(2p)^3$  است، که گاهی برای اختصار با  $(2p)^3$  توصیف می‌شود (پوسته‌ها و زیرپوسته‌های بسته حذف می‌شوند). سه الکترون آخر می‌توانند همگی در حالت‌های ناهمپوش  $p$  باشند، و از این رو انتظار داریم افزایش انرژی یونش برابر با افزایش از بور به کربن باشد، و این با مقدار اندازه‌گیری شده  $۱۴,۵\text{eV}$  توافق دارد.

اکسیژن ( $Z = 8$ ). پیکربندی را می‌توان به صورت مختصر  $(2p)^4$  نوشت، و بیشتر از نصف پوسته پر است. چون در اینجا چهار الکترون وجود دارند، به نظر می‌رسد که تعیین وضعیت طیف نمایی حالت پایه بسیار مشکل باشد. اما می‌توان به صورت دیگر به این پوسته نگریست. می‌دانیم که اگر دو الکترون دیگر اضافه کنیم تا یک پیکربندی  $(2p)^6$  به وجود آید پوسته پر می‌شود، و برای حالت کل داریم  $l = s = 0$ . بنابراین، می‌توان اکسیژن را به صورت یک پوسته بسته  $(2p)$  با دو

حفره در آن در نظر گرفت. این حفره‌ها درست مانند پادالکترون هستند، و می‌توان پیکربندیهای دوحفره‌ای را بررسی کرد. این پیکربندی همان پیکربندی دوالکترونی است زیرا اسپین حفره‌ها نیز  $1/2$  است. بنابراین، مانند مورد کربن، حالت‌های ممکن که با پادتقارن تابع موج دو فرمیونی (دوحفره‌ای) سازگار هستند عبارت‌اند از  $^1D$ ،  $^3P$ ، و  $^1S$ ، و آن چهار الکترون باید در حالت‌های یکسان باشند، زیرا همراه با دستگاه دوحفره‌ای مقادیر  $S = 0$  و  $L = 0$  را می‌دهند. بیشترین اسپین عبارت است از  $S = 1$ ، و از این رو باید یک حالت  $^3P$  داشته باشیم. قاعده هوند، که در بخش بعد به آن می‌پردازیم حالت  $^3P_2$  را می‌دهد. وقتی الکترون چهارم به پیکربندی نیتروژن اضافه شد باید به اوربیتالی با یک مقدار  $m$  برود که قبلاً اشغال شده است. در نتیجه دو تا از توابع موج الکترونی روی هم می‌افتند، و این به واسطه دافعه باعث زیاد شدن انرژی می‌شود. بنابراین، تعجب‌آور نیست که انرژی یونش به  $13.6\text{eV}$  کاهش می‌یابد.

فلوئور ( $Z = 9$ ). در اینجا پیکربندی به صورت  $(2p)^5$  است. افزایش یکنوای انرژی یونش از سر گرفته می‌شود: مقدار تجربی  $17.4\text{eV}$  است. فلوئور به لحاظ شیمیایی بسیار فعال است، زیرا می‌تواند یک الکترون "بگیرد" و یک پوسته بسته،  $(2p)^6$ ، تشکیل دهد که بسیار پایدار است. چون اضافه کردن یک الکترون با  $s = 1/2$  و  $l = 1$  یک حالت  $^1S_0$  می‌سازد، پوسته با حفره موجود در آن باید دارای  $s = 1/2$  و  $l = 1$  باشد. بنابراین، یک حالت  $^2P$  داریم و بنابه قاعده هوند، چنانکه خواهیم دید، این حالت  $^2P_{3/2}$  است.

نئون ( $Z = 10$ ). با  $Z = 10$  پوسته  $(2p)$  پر است، و تمام الکترونها جفت شده هستند. انرژی یونش برابر است با  $21.6\text{eV}$ ، که نشان می‌دهد روند یکنوا ادامه دارد. در اینجا، همچون در هلیم، اولین حالت اشغال نشده‌ای که یک الکترون می‌تواند به آن برانگیخته شود حالتی است که  $n$  بزرگتری داشته باشد، و از این رو انرژی بسیار زیادی برای مختل کردن اتم لازم است. نئون، مانند هلیم، یک گاز بی‌اثر است.

در این مرحله، برای اضافه کردن یک الکترون دیگر باید به مداری با یک  $n$  بزرگتر ( $n = 3$ ) برویم. بنابراین، نئون نیز مانند هلیم نشانه پایان یک دوره در جدول تناوبی است. دوره بعد نیز هشت عنصر دارد. ابتدا پوسته  $(3s)$ ، با سدیم ( $Z = 11$ ) و منیزیم ( $Z = 12$ )، پر می‌شود و سپس پوسته  $(3p)$ ، که به ترتیب آلومینیم ( $Z = 13$ )، سیلیسیم ( $Z = 14$ )، فسفر ( $Z = 15$ )، گوگرد ( $Z = 16$ )، کلر ( $Z = 17$ ) و آرگون ( $Z = 18$ )، با پوسته بسته، را دربردارد. این عناصر به لحاظ شیمیایی بسیار شبیه به رشته لیتیم، ...، نئون هستند و حالت‌های پایه آنها همان توصیف طیف نمایی را دارند. تنها تفاوت در این است که، چون  $n = 3$ ، انرژیهای یونش آنها با توجه به جدول تناوبی در آخرین فصل تا اندازه‌ای کمترند.

ممکن است کمی عجیب به نظر برسد که این دوره به آرگون ختم می‌شود، زیرا پوسته  $(3d)$ ، شامل ده عنصر، هنوز پر نشده است. واقعیت این است که پتانسیل خودسازگار به صورت  $1/r$  نیست، و شکافتگی درون پوسته‌ای در اینجا به اندازه کافی بزرگ است که بتواند حالت  $(4s)$  را، هر چند به مقدار کم، پایتتر از حالت  $(3d)$  قرار دهد. بنابراین، رقابتی به وجود می‌آید، و در دوره

بعد به ترتیب داریم  $(4s)^2$ ،  $(4s)^2(3d)$ ،  $(4s)^2(3d)^2$ ،  $(4s)^2(3d)^3$ ،  $(4s)^2(3d)^4$ ،  $(4s)^2(3d)^5$ ،  $(4s)^2(3d)^6$ ،  $(4s)^2(3d)^7$ ،  $(4s)^2(3d)^8$ ،  $(4s)^2(3d)^9$ ،  $(4s)^2(3d)^{10}$  و  $(4s)^2(3d)^{11}$  را به ترتیب در پست‌های ۱ تا ۱۱ قرار می‌دهیم. در پست ۱۱،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^1$  قرار می‌گیرد. در پست ۱۲،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^2$  قرار می‌گیرد. در پست ۱۳،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^3$  قرار می‌گیرد. در پست ۱۴،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^4$  قرار می‌گیرد. در پست ۱۵،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^5$  قرار می‌گیرد. در پست ۱۶،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^6$  قرار می‌گیرد. در پست ۱۷،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^7$  قرار می‌گیرد. در پست ۱۸،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^8$  قرار می‌گیرد. در پست ۱۹،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^9$  قرار می‌گیرد. در پست ۲۰،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{10}$  قرار می‌گیرد. در پست ۲۱،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{11}$  قرار می‌گیرد. در پست ۲۲،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{12}$  قرار می‌گیرد. در پست ۲۳،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{13}$  قرار می‌گیرد. در پست ۲۴،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{14}$  قرار می‌گیرد. در پست ۲۵،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{15}$  قرار می‌گیرد. در پست ۲۶،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{16}$  قرار می‌گیرد. در پست ۲۷،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{17}$  قرار می‌گیرد. در پست ۲۸،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{18}$  قرار می‌گیرد. در پست ۲۹،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{19}$  قرار می‌گیرد. در پست ۳۰،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{20}$  قرار می‌گیرد. در پست ۳۱،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{21}$  قرار می‌گیرد. در پست ۳۲،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{22}$  قرار می‌گیرد. در پست ۳۳،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{23}$  قرار می‌گیرد. در پست ۳۴،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{24}$  قرار می‌گیرد. در پست ۳۵،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{25}$  قرار می‌گیرد. در پست ۳۶،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{26}$  قرار می‌گیرد. در پست ۳۷،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{27}$  قرار می‌گیرد. در پست ۳۸،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{28}$  قرار می‌گیرد. در پست ۳۹،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{29}$  قرار می‌گیرد. در پست ۴۰،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{30}$  قرار می‌گیرد. در پست ۴۱،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{31}$  قرار می‌گیرد. در پست ۴۲،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{32}$  قرار می‌گیرد. در پست ۴۳،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{33}$  قرار می‌گیرد. در پست ۴۴،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{34}$  قرار می‌گیرد. در پست ۴۵،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{35}$  قرار می‌گیرد. در پست ۴۶،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{36}$  قرار می‌گیرد. در پست ۴۷،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{37}$  قرار می‌گیرد. در پست ۴۸،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{38}$  قرار می‌گیرد. در پست ۴۹،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{39}$  قرار می‌گیرد. در پست ۵۰،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{40}$  قرار می‌گیرد. در پست ۵۱،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{41}$  قرار می‌گیرد. در پست ۵۲،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{42}$  قرار می‌گیرد. در پست ۵۳،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{43}$  قرار می‌گیرد. در پست ۵۴،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{44}$  قرار می‌گیرد. در پست ۵۵،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{45}$  قرار می‌گیرد. در پست ۵۶،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{46}$  قرار می‌گیرد. در پست ۵۷،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{47}$  قرار می‌گیرد. در پست ۵۸،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{48}$  قرار می‌گیرد. در پست ۵۹،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{49}$  قرار می‌گیرد. در پست ۶۰،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{50}$  قرار می‌گیرد. در پست ۶۱،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{51}$  قرار می‌گیرد. در پست ۶۲،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{52}$  قرار می‌گیرد. در پست ۶۳،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{53}$  قرار می‌گیرد. در پست ۶۴،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{54}$  قرار می‌گیرد. در پست ۶۵،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{55}$  قرار می‌گیرد. در پست ۶۶،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{56}$  قرار می‌گیرد. در پست ۶۷،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{57}$  قرار می‌گیرد. در پست ۶۸،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{58}$  قرار می‌گیرد. در پست ۶۹،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{59}$  قرار می‌گیرد. در پست ۷۰،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{60}$  قرار می‌گیرد. در پست ۷۱،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{61}$  قرار می‌گیرد. در پست ۷۲،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{62}$  قرار می‌گیرد. در پست ۷۳،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{63}$  قرار می‌گیرد. در پست ۷۴،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{64}$  قرار می‌گیرد. در پست ۷۵،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{65}$  قرار می‌گیرد. در پست ۷۶،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{66}$  قرار می‌گیرد. در پست ۷۷،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{67}$  قرار می‌گیرد. در پست ۷۸،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{68}$  قرار می‌گیرد. در پست ۷۹،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{69}$  قرار می‌گیرد. در پست ۸۰،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{70}$  قرار می‌گیرد. در پست ۸۱،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{71}$  قرار می‌گیرد. در پست ۸۲،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{72}$  قرار می‌گیرد. در پست ۸۳،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{73}$  قرار می‌گیرد. در پست ۸۴،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{74}$  قرار می‌گیرد. در پست ۸۵،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{75}$  قرار می‌گیرد. در پست ۸۶،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{76}$  قرار می‌گیرد. در پست ۸۷،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{77}$  قرار می‌گیرد. در پست ۸۸،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{78}$  قرار می‌گیرد. در پست ۸۹،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{79}$  قرار می‌گیرد. در پست ۹۰،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{80}$  قرار می‌گیرد. در پست ۹۱،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{81}$  قرار می‌گیرد. در پست ۹۲،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{82}$  قرار می‌گیرد. در پست ۹۳،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{83}$  قرار می‌گیرد. در پست ۹۴،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{84}$  قرار می‌گیرد. در پست ۹۵،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{85}$  قرار می‌گیرد. در پست ۹۶،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{86}$  قرار می‌گیرد. در پست ۹۷،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{87}$  قرار می‌گیرد. در پست ۹۸،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{88}$  قرار می‌گیرد. در پست ۹۹،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{89}$  قرار می‌گیرد. در پست ۱۰۰،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{90}$  قرار می‌گیرد. در پست ۱۰۱،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{91}$  قرار می‌گیرد. در پست ۱۰۲،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{92}$  قرار می‌گیرد. در پست ۱۰۳،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{93}$  قرار می‌گیرد. در پست ۱۰۴،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{94}$  قرار می‌گیرد. در پست ۱۰۵،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{95}$  قرار می‌گیرد. در پست ۱۰۶،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{96}$  قرار می‌گیرد. در پست ۱۰۷،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{97}$  قرار می‌گیرد. در پست ۱۰۸،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{98}$  قرار می‌گیرد. در پست ۱۰۹،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{99}$  قرار می‌گیرد. در پست ۱۱۰،  $(4s)^2(3d)^{10}(4p)^{100}$  قرار می‌گیرد.

## توصیف طیف نمایی حالت‌های پایه

در بررسی اتم‌های سبک غالباً توصیف طیف نمایی حالت‌های پایه، به‌عنوان مثال  $2P_{1/2}$  برای اکسیژن،  $2P_{3/2}$  برای فلور، و غیره را بیان کردیم. دانستن  $S$ ،  $L$  و  $J$  برای حالت‌های پایه اهمیت دارد، زیرا قاعده‌های گزینش تعیین این کمیتها را برای حالت‌های برانگیخته آنها امکانپذیر می‌سازند. در تعیین این حالتها از قاعده‌های هوند نام بردیم، و این قاعده‌ها موضوع بحث این بخش هستند.

آنچه اعداد کوانتومی حالت پایه را تعیین می‌کند تأثیر متقابل جفت‌شدگی اسپین-مدار و اثر تبادل است که در ارتباط با هلم در فصل ۱۸ بیان کردیم. برای اتم‌های سبکتر ( $Z < 40$ )، که در آنها حرکت الکترون‌ها غیرنسبیتی است، اثرات دافعه الکترون-الکترون مهمتر از جفت‌شدگی اسپین-مدار هستند. بنابراین، با تقریب بسیار خوب می‌توان  $L$  و  $S$  را جداگانه اعداد کوانتومی خوب در نظر گرفت: تمام اسپینها را با هم جمع می‌کنیم تا یک  $S$  به‌دست آید و تمام تکانه‌های زاویه‌ای مدار الکترون‌ها را با هم جمع می‌کنیم تا یک  $L$  به‌دست آید و آنگاه از جفت‌شدن این دو یک  $J$  کل به‌دست می‌آید. برای اتم‌های سنگینتر، تقریب بهتر این است که ابتدا اسپین و تکانه زاویه‌ای مدار الکترون را با هم جفت کنیم تا یک تکانه زاویه‌ای کل برای آن الکترون به‌دست آید، و سپس تمام این  $J$ ها را با هم جفت می‌کنیم. مورد اول را جفت‌شدگی راسل-ساندرز و مورد دوم را جفت‌شدگی  $J$ - $J$  می‌نامند. فریدریش هوند برای جفت‌شدگی راسل-ساندرز نتایج محاسبات

مختلف را در مجموعه‌ای از قاعده‌هایی خلاصه کرد که اعداد کوانتومی کل را برای پایینترین حالتها تعیین می‌کنند. این قاعده‌ها عبارت‌اند از

۱. حالتی که دارای بزرگترین  $S$  است از همه پایینتر قرار می‌گیرد.

۲. برای یک مقدار معین  $S$ ، حالتی که بزرگترین  $L$  را دارد از همه پایینتر است.

۳. به‌ازای مقادیر معین  $S$  و  $L$ ، اگر پوسته‌ی ناکامل بیش از نیمه پر نباشد پایینترین حالت دارای مقدار کمینه‌ی  $J = |L - S|$  است؛ اگر این پوسته بیشتر از نیمه پر باشد حالت کمترین انرژی دارای  $J = L + S$  است.

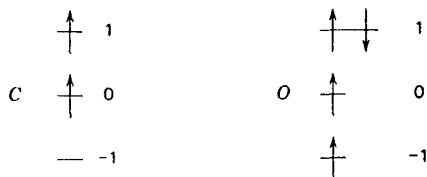
در به کار بردن این قاعده‌ها، اصل پاؤلی نباید نقض شود.

اولین قاعده‌ی هوند به‌آسانی قابل درک است: حالت مربوط به بزرگترین  $S$  نسبت به تمام اسپینها متقارن است (زیرا شامل حالت  $S_z = S_{\max}$  می‌شود که برای آن تمام اسپینها موازی هستند) و در نتیجه تابع موج فضایی پادمقارن است، که همپوشی الکترونی و از این رو مقدار انتظاری پتانسیلهای دافعه را کمینه می‌کند.

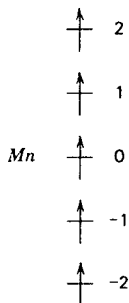
قاعده‌ی دوم به‌طور کیفی ناشی از این واقعیت است که هر چه مقدار  $L$  بزرگتر باشد تابع موج، چنانکه در شکل ۱۲-۳ نشان داده شده است، از قطعه‌های بیشتری تشکیل می‌شود. این به الکترونها امکان می‌دهد که دور از یکدیگر قرار گیرند، و اثر دافعه‌ی کولنی را کاهش می‌دهد.

قاعده‌ی سوم پیامد جفت‌شدگی اسپین-مدار است. چون مقدار انتظاری  $[(1/r)dV(r)/dr]$  مثبت است، اختلال ناشی از جفت‌شدگی اسپین-مدار باعث می‌شود حالت‌های واگن  $J$  (به‌ازای مقادیر معین  $L$  و  $S$ ) تفکیک شوند، و از ۱۹-۱۷ واضح است که کمترین مقدار  $J$  پایینترین حالت را تعیین می‌کند. وقتی به مرحله‌ای برسیم که پوسته‌ای داشته باشیم که بیشتر از نصف پر باشد، بهتر است اتم را دارای یک پوسته‌ی پر با تعدادی حفره در نظر بگیریم، چنانکه در توصیف اکسیژن گفتیم. این حفره‌ها به‌گونه‌ای رفتار می‌کنند که انگار بار مثبت دارند، و برای برهم‌کنش اسپین-مدار حفره‌ها علامت  $[(1/r)dV(r)/dr]$  عوض می‌شود. بنابراین، چندتایی وارون می‌شود، یعنی در اینجا بزرگترین مقدار  $J$  پایینترین حالت را به‌دست می‌دهد.

کاربرد قاعده‌های هوند در آنها، و لزوم رعایت اصل پاؤلی، را با مثال توضیح می‌دهیم. اعداد کوانتومی کربن  $(2p)^2$ ، اکسیژن  $(2p)^4$  و منگنز  $(3d)^5$  را بررسی می‌کنیم. در دو مورد اول با حالت‌های  $p$  سروکار داریم؛ بنابراین، می‌توان یک رشته "تاقچه" متناظر با  $L_z = 1, 0, -1$  ترسیم کرد. الکترونها را تا جایی که ممکن است، برای کمینه کردن دافعه، در ردیفهای مختلف قرار می‌دهیم. برای کربن، آنها را در ردیفهای مربوط به حالت‌های  $L_z = 1$  و  $L_z = 0$  می‌گذاریم. بنابه قاعده‌ی اول هوند، اسپینها موازی خواهند بود (شکل ۱۹-۱) — به‌بیان دقیق، آنها در یک حالت سه‌تایی هستند. بنابراین، بزرگترین مقدار ممکن  $S_z$  برابر با ۱ است، و یک حالت سه‌تایی به‌دست می‌آوریم. بزرگترین مقدار ممکن  $L_z$  مقدار  $L$  را تعیین می‌کند، که ۱ است. آنگاه از قاعده‌ی سوم معلوم می‌شود که  $J = |L - S| = 0$ ، و یک حالت  $^1P_0$  به‌دست می‌آوریم. برای مورد  $(2p)^4$ ، در هر ردیف یک الکترون قرار می‌دهیم و سپس ردیف مربوط به یکی از حالتها مثلاً  $L_z = 1$  را با الکترون



شکل ۱-۱۹



شکل ۲-۱۹

چهارم پر می‌کنیم. اصل پاؤلی ایجاب می‌کند که این دو الکترون در حالت  $L_z = 1$  یک تک‌نمایی تشکیل دهند. بنابراین، تنها با دو الکترون دیگر سروکار داریم، و چون  $S_z = 1$  پس  $S = 1$ . مقدار بیشه  $L_z$  عبارت است از  $1 = [2 + 0 + (-1)]$  و در نتیجه  $L = 1$ . اما اکنون پوسته‌ای داریم که نصف بیشتر آن پر است، و از این رو بنابه قاعده سوم هوند  $J = L + S = 2$ ، و اکسیژن دارای حالت پایه  ${}^2P_2$  است.

برای منگنز "ناقچه‌ها" متناظر با  $L_z = 2, 1, 0, -1, -2$  هستند (شکل ۲-۱۹). پنج الکترون وجود دارند، و در نتیجه هر الکترون در یک ردیف قرار می‌گیرد. با اسپینهای موازی، به دست می‌آوریم  $S_z = 5/2$ ، که ایجاب می‌کند  $S = 5/2$ . مقدار کل  $L_z$  برابر با صفر است، و از این رو یک حالت  $S$  داریم. بنابراین، حالت پایه  ${}^6S_{5/2}$  است.

محدودیت حجم کتاب مانع از بررسی مفصلتر جدول تناوبی می‌شود، اما تذکر چند نکته دیگر ضرورت دارد.

(الف) در ساختار اتمی چیزی که تعداد عنصرها را محدود کند وجود ندارد. دلیل اینکه در طبیعت اتمهایی با  $Z \gtrsim 100$  یافت نمی‌شوند این است که برای هسته‌های سنگین شکافت خودبه‌خود روی می‌دهد. اگر هسته‌های (شبه) پایدار فوق‌سنگین جدیدی کشف شوند اتمهای مربوط به آنها نیز به احتمال زیاد وجود خواهند داشت و ساختار آنها باید با پیش‌بینی رهیافت تشکیل اتمها که در این فصل بیان کردیم مطابقت داشته باشد.

(ب) انرژیهای یونش اتمها همگی در حدود ۵ تا ۱۵ الکترون ولت هستند. دلیل این وضعیت این است که با وجود افزایش تعداد الکترونها، خارجی ترین الکترونها باری را "می بینند" که در گستره  $Z = 1$  تا  $Z = 2$  قرار دارد. علاوه بر این، به علت انحراف از توزیع بار نقطه‌ای، وابستگی انرژی دیگر به صورت  $1/n^2$  نیست. در نتیجه، توابع موج خارجی ترین الکترونها از تابع موج الکترون اتم هیدروژن چندان فراتر نمی روند. اتمها کم و بیش اندازه یکسانی دارند!

(ج) تعیین اعداد کوانتومی  $S$ ،  $L$  و  $J$  برای حالت‌های پایه عناصر مختلف، چنانکه دیدید، کار پردردسری است. علت توجه به این اعداد کوانتومی آن است که در طیف نمایی به دلیل قاعده‌های گزینش

$$\Delta S = 0$$

$$\Delta L = \pm 1 \quad (18-19)$$

$$\Delta J = 0, \pm 1 \quad (\text{no } 0 - 0)$$

که بعداً آنها را به دست می آوریم، این اعداد دارای اهمیت خاصی هستند، و به علاوه برای تعیین اعداد کوانتومی حالت‌های برانگیخته به کار می آیند. طیف نمایی اتمها، از هیدروژن و هلیم که بگذریم، بسیار پیچیده است. به عنوان یک مثال نسبتاً ساده، چند حالت اول کربن را در نظر بگیرید که تشکیل شده‌اند از یکبربندیهای مختلف دو الکترون که خارج از پوسته بسته در اوربیتالهای  $(2p)^2$  قرار دارند. چنانکه قبلاً گفتیم، حالت‌های ممکن عبارت‌اند از  $^1S_0$ ،  $^3P_{2,1,0}$  و  $^1D_2$ . حالت  $^3P_0$  از همه پاینتر است، اما حالت‌های دیگر نیز وجود دارند. اولین حالت برانگیخته را می توان با اوربیتال‌های  $(3s)(3p)$  توصیف کرد. در اینجا  $S$  برابر است با ۰ یا ۱، اما  $L$  تنها برابر با ۱ است. چون مقادیر  $n$  مختلف‌اند، اصل طرد حالتها را به هیچ وجه محدود نمی کند، و تمام حالت‌های  $^1P_1$  و  $^3P_{2,1,0}$  ممکن هستند، اما حالت‌های برانگیخته‌ای که از اوربیتال‌های  $(3s)(3p)$  ناشی می شوند می توانند دارای ۱،  $S = 0$  و  $L = 2, 1, 0$  باشند، که تمام حالت‌های  $^1D_2$ ،  $^1P_1$ ،  $^1S_0$ ،  $^3P_{2,1,0}$  و  $^3P_{1,1,0}$  را به وجود می آورند. حتی با محدودیتهای ناشی از قاعده‌های گزینش، تعداد زیادی گذار وجود دارند. احتیاجی به گفتن ندارد که مرتب کردن این ترازها موازنه ظریفی را بین اثرات رقیب گوناگون نشان می دهد، و پیش بینی طیفهای پیچیده تر بسیار دشوار است. این کار واقعاً مورد توجه ما نیست، زیرا هدف عمده ما این است که نشان دهیم مکانیک کوانتومی توضیح کیفی و کمی مفصلی از خواص شیمیایی اتمها و طیفهای آنها را، بدون در نظر گرفتن برهم کنشی غیر از برهم کنش الکترومغناطیسی بین ذرات باردار، فراهم می آورد. در مواردی باز هم به مبحث طیفها باز می گردیم.

$z$	عنصر	بیکر بندی	جمله طیفی *	پتانسیل یونش (eV)	شعاع ** ( $\text{\AA}$ )
۱	H	(۱s)	$^1S_{1/2}$	۱۳٫۶	۰٫۵۳
۲	He	(۱s) <sup>۲</sup>	$^1S_0$	۲۴٫۶	۰٫۲۹
۳	Li	(He)(۲s)	$^2S_{1/2}$	۵٫۴	۱٫۵۹
۴	Be	(He)(۲s) <sup>۲</sup>	$^1S_0$	۹٫۳	۱٫۰۴
۵	B	(He)(۲s) <sup>۲</sup> (۲p)	$^2P_{1/2}$	۸٫۳	۰٫۷۸
۶	C	(He)(۲s) <sup>۲</sup> (۲p) <sup>۲</sup>	$^3P_0$	۱۱٫۳	۰٫۶۲
۷	N	(He)(۲s) <sup>۲</sup> (۲p) <sup>۳</sup>	$^4S_{3/2}$	۱۴٫۵	۰٫۵۲
۸	O	(He)(۲s) <sup>۲</sup> (۲p) <sup>۴</sup>	$^3P_2$	۱۳٫۶	۰٫۴۵
۹	F	(He)(۲s) <sup>۲</sup> (۲p) <sup>۵</sup>	$^2P_{3/2}$	۱۷٫۴	۰٫۴۰
۱۰	Ne	(He)(۲s) <sup>۲</sup> (۲p) <sup>۶</sup>	$^1S_0$	۲۱٫۶	۰٫۳۵
۱۱	Na	(Ne)(۳s) <sup>۲</sup> (۳p)	$^2S_{1/2}$	۶٫۰	۱٫۷۱
۱۲	Mg	(Ne)(۳s) <sup>۲</sup>	$^1S_0$	۷٫۶	۱٫۲۸
۱۳	Al	(Ne)(۳s) <sup>۲</sup> (۳p)	$^2P_{1/2}$	۶٫۰	۱٫۳۱
۱۴	Si	(Ne)(۳s) <sup>۲</sup> (۳p) <sup>۲</sup>	$^3P_0$	۸٫۱	۱٫۰۷
۱۵	P	(Ne)(۳s) <sup>۲</sup> (۳p) <sup>۳</sup>	$^4S_{3/2}$	۱۱٫۰	۰٫۹۲
۱۶	S	(Ne)(۳s) <sup>۲</sup> (۳p) <sup>۴</sup>	$^3P_2$	۱۰٫۴	۰٫۸۱
۱۷	Cl	(Ne)(۳s) <sup>۲</sup> (۳p) <sup>۵</sup>	$^2P_{3/2}$	۱۳٫۰	۰٫۷۳
۱۸	Ar	(Ne)(۳s) <sup>۲</sup> (۳p) <sup>۶</sup>	$^1S_0$	۱۵٫۸	۰٫۶۶
۱۹	K	(Ar)(۴s)	$^2S_{1/2}$	۴٫۳	۲٫۱۶
۲۰	Ca	(Ar)(۴s) <sup>۲</sup>	$^1S_0$	۶٫۱	۱٫۶۹
۲۱	Sc	(Ar)(۴s) <sup>۲</sup> (۳d)	$^2D_{3/2}$	۶٫۵	۱٫۵۷
۲۲	Ti	(Ar)(۴s) <sup>۲</sup> (۳d) <sup>۲</sup>	$^3F_2$	۶٫۸	۱٫۴۸
۲۳	V	(Ar)(۴s) <sup>۲</sup> (۳d) <sup>۳</sup>	$^4F_{3/2}$	۶٫۷	۱٫۴۰
۲۴	Cr	(Ar)(۴s) <sup>۲</sup> (۳d) <sup>۵</sup>	$^5S_2$	۶٫۷	۱٫۴۵
۲۵	Mn	(Ar)(۴s) <sup>۲</sup> (۳d) <sup>۵</sup>	$^6S_{5/2}$	۷٫۴	۱٫۲۸
۲۶	Fe	(Ar)(۴s) <sup>۲</sup> (۳d) <sup>۶</sup>	$^5D_4$	۷٫۹	۱٫۲۳
۲۷	Co	(Ar)(۴s) <sup>۲</sup> (۳d) <sup>۷</sup>	$^4F_{3/2}$	۷٫۸	۱٫۱۸
۲۸	Ni	(Ar)(۴s) <sup>۲</sup> (۳d) <sup>۸</sup>	$^3F_4$	۷٫۶	۱٫۱۴
۲۹	Cu	(Ar)(۴s) <sup>۲</sup> (۳d) <sup>۱۰</sup>	$^2S_{1/2}$	۷٫۷	۱٫۱۹
۳۰	Zn	(Ar)(۴s) <sup>۲</sup> (۳d) <sup>۱۰</sup>	$^1S_0$	۹٫۴	۱٫۰۷
۳۱	Ga	(Ar)(۴s) <sup>۲</sup> (۳d) <sup>۱۰</sup> (۴p)	$^2P_{1/2}$	۶٫۰	۱٫۲۵
۳۲	Ge	(Ar)(۴s) <sup>۲</sup> (۳d) <sup>۱۰</sup> (۴p) <sup>۲</sup>	$^3P_0$	۸٫۱	۱٫۰۹
۳۳	As	(Ar)(۴s) <sup>۲</sup> (۳d) <sup>۱۰</sup> (۴p) <sup>۳</sup>	$^4S_{3/2}$	۱۰٫۰	۱٫۰۰
۳۴	Se	(Ar)(۴s) <sup>۲</sup> (۳d) <sup>۱۰</sup> (۴p) <sup>۴</sup>	$^3P_2$	۹٫۸	۰٫۹۲
۳۵	Br	(Ar)(۴s) <sup>۲</sup> (۳d) <sup>۱۰</sup> (۴p) <sup>۵</sup>	$^2P_{3/2}$	۱۱٫۸	۰٫۸۵
۳۶	Kr	(Ar)(۴s) <sup>۲</sup> (۳d) <sup>۱۰</sup> (۴p) <sup>۶</sup>	$^1S_0$	۱۴٫۰	۰٫۸۰



## جدول تناوبی

$z$	عنصر	پیکربندی	جمله طیفی *	پتانسیل یونش (eV)	شعاع ** (Å)
۳۷	Rb	(Kr)(5s)	${}^2S_{1/2}$	۴٫۲	۲٫۲۹
۳۸	Sr	(Kr)(5s) <sup>۲</sup>	${}^1S_0$	۵٫۷	۱٫۸۴
۳۹	Y	(Kr)(5s) <sup>۲</sup> (۴d)	${}^2D_{3/2}$	۶٫۶	۱٫۶۹
۴۰	Zr	(Kr)(5s) <sup>۲</sup> (۴d) <sup>۲</sup>	${}^3F_2$	۷٫۰	۱٫۵۹
۴۱	Nb	(Kr)(5s) <sup>۲</sup> (۴d) <sup>۴</sup>	${}^6D_{1/2}$	۶٫۸	۱٫۵۹
۴۲	Mo	(Kr)(5s) <sup>۲</sup> (۴d) <sup>۵</sup>	${}^5S_2$	۷٫۲	۱٫۵۲
۴۳	Tc	(Kr)(5s) <sup>۲</sup> (۴d) <sup>۵</sup>	${}^6S_{5/2}$	نامعلوم	۱٫۳۹
۴۴	Ru	(Kr)(5s) <sup>۲</sup> (۴d) <sup>۶</sup>	${}^5F_5$	۷٫۵	۱٫۴۱
۴۵	Rh	(Kr)(5s) <sup>۲</sup> (۴d) <sup>۸</sup>	${}^4F_{1/2}$	۷٫۷	۱٫۳۶
۴۶	Pd	(Kr)(۴d) <sup>۱۰</sup>	${}^1S_0$	۷٫۳	۰٫۵۷
۴۷	Ag	(Kr)(5s)(۴d) <sup>۱۰</sup>	${}^2S_{1/2}$	۷٫۶	۱٫۲۹
۴۸	Cd	(Kr)(5s) <sup>۲</sup> (۴d) <sup>۱۰</sup>	${}^1S_0$	۷٫۰	۱٫۱۸
۴۹	In	(Kr)(5s) <sup>۲</sup> (۴d) <sup>۱۰</sup> (۵p)	${}^2P_{1/2}$	۵٫۸	۱٫۳۸
۵۰	Sn	(Kr)(5s) <sup>۲</sup> (۴d) <sup>۱۰</sup> (۵p) <sup>۲</sup>	${}^3P_0$	۷٫۳	۱٫۲۴
۵۱	Sb	(Kr)(5s) <sup>۲</sup> (۴d) <sup>۱۰</sup> (۵p) <sup>۳</sup>	${}^4S_{3/2}$	۸٫۶	۱٫۱۹
۵۲	Te	(Kr)(5s) <sup>۲</sup> (۴d) <sup>۱۰</sup> (۵p) <sup>۴</sup>	${}^3P_2$	۹٫۰	۱٫۱۱
۵۳	I	(Kr)(5s) <sup>۲</sup> (۴d) <sup>۱۰</sup> (۵p) <sup>۵</sup>	${}^2P_{3/2}$	۱۰٫۴	۱٫۰۴
۵۴	Xe	(Kr)(5s) <sup>۲</sup> (۴d) <sup>۱۰</sup> (۵p) <sup>۶</sup>	${}^1S_0$	۱۲٫۱	۰٫۹۹
۵۵	Cs	(Xe)(۶s)	${}^2S_{1/2}$	۳٫۹	۲٫۵۲
۵۶	Ba	(Xe)(۶s) <sup>۲</sup>	${}^1S_0$	۵٫۲	۲٫۰۶
۵۷	La	(Xe)(۶s) <sup>۲</sup> (۵d)	${}^2D_{3/2}$	۵٫۶	۱٫۹۲
۵۸	Ce	(Xe)(۶s) <sup>۲</sup> (۴f)(۵d)	${}^3H_5$	۶٫۹	۱٫۹۸
۵۹	Pr	(Xe)(۶s) <sup>۲</sup> (۴f) <sup>۲</sup>	${}^3I_{1/2}$	۵٫۸	۱٫۹۴
۶۰	Nd	(Xe)(۶s) <sup>۲</sup> (۴f) <sup>۴</sup>	${}^5I_7$	۶٫۳	۱٫۹۲
۶۱	Pm	(Xe)(۶s) <sup>۲</sup> (۴f) <sup>۵</sup>	${}^6H_{5/2}$	نامعلوم	۱٫۸۸
۶۲	Sm	(Xe)(۶s) <sup>۲</sup> (۴f) <sup>۶</sup>	${}^7F_6$	۵٫۶	۱٫۸۴
۶۳	Eu	(Xe)(۶s) <sup>۲</sup> (۴f) <sup>۷</sup>	${}^8S_{7/2}$	۵٫۷	۱٫۸۳
۶۴	Gd	(Xe)(۶s) <sup>۲</sup> (۴f) <sup>۷</sup> (۵d)	${}^6D_7$	۶٫۲	۱٫۷۱
۶۵	Tb	(Xe)(۶s) <sup>۲</sup> (۴f) <sup>۹</sup>	${}^6H_{15/2}$	۶٫۷	۱٫۷۸
۶۶	Dy	(Xe)(۶s) <sup>۲</sup> (۴f) <sup>۱۰</sup>	${}^5I_8$	۶٫۸	۱٫۷۵
۶۷	He	(Xe)(۶s) <sup>۲</sup> (۴f) <sup>۱۱</sup>	${}^4I_{15/2}$	نامعلوم	۱٫۷۳
۶۸	Er	(Xe)(۶s) <sup>۲</sup> (۴f) <sup>۱۲</sup>	${}^3H_6$	نامعلوم	۱٫۷۰
۶۸	Er	(Xe)(۶s) <sup>۲</sup> (۴f) <sup>۱۲</sup>	${}^3H_6$	نامعلوم	۱٫۷۰
۶۹	Tm	(Xe)(۶s) <sup>۲</sup> (۴f) <sup>۱۳</sup>	${}^4F_{7/2}$	نامعلوم	۱٫۶۸
۷۰	Yb	(Xe)(۶s) <sup>۲</sup> (۴f) <sup>۱۴</sup>	${}^1S_0$	۶٫۲	۱٫۶۶
۷۱	Lu	(Xe)(۶s) <sup>۲</sup> (۴f) <sup>۱۴</sup> (۵d)	${}^2D_{3/2}$	۵٫۰	۱٫۵۵
۷۲	Hf	(Xe)(۶s) <sup>۲</sup> (۴f) <sup>۱۴</sup> (۵d) <sup>۲</sup>	${}^3F_2$	۵٫۵	۱٫۴۸
۷۳	Ta	(Xe)(۶s) <sup>۲</sup> (۴f) <sup>۱۴</sup> (۵d) <sup>۳</sup>	${}^4F_{3/2}$	۷٫۹	۱٫۴۱
۷۴	W	(Xe)(۶s) <sup>۲</sup> (۴f) <sup>۱۴</sup> (۵d) <sup>۴</sup>	${}^5D_0$	۸٫۰	۱٫۳۶

لانتانیدها

$z$	عنصر	یکریندی	جمله طیفی*	پتانسیل یونش (eV)	شعاع ** ( $\text{\AA}$ )	
۷۵	Re	$(Xe)(6s)^2(4f)^4(5d)^5$	$^6S_{5/2}$	۷٫۹	۱٫۳۱	
۷۶	Os	$(Xe)(6s)^2(4f)^4(5d)^6$	$^5D_4$	۸٫۷	۱٫۲۷	
۷۷	Ir	$(Xe)(6s)^2(4f)^4(5d)^7$	$^4F_{1/2}$	۹٫۲	۱٫۲۳	
۷۸	Pt	$(Xe)(6s)(4f)^4(5d)^9$	$^3D_2$	۹٫۰	۱٫۲۲	
۷۹	Au	$(Xe)(6s)(4f)^4(5d)^{10}$	$^2S_{1/2}$	۹٫۲	۱٫۱۹	
۸۰	Hg	$(Xe)(6s)^2(4f)^4(5d)^{10}$	$^1S_0$	۱۰٫۴	۱٫۱۳	
۸۱	Tl	$(Xe)(6s)^2(4f)^4(5d)^{10}(6p)$	$^3P_{1/2}$	۶٫۱	۱٫۳۲	
۸۲	Pb	$(Xe)(6s)^2(4f)^4(5d)^{10}(6p)^2$	$^3P_0$	۷٫۴	۱٫۳۳	
۸۳	Bi	$(Xe)(6s)^2(4f)^4(5d)^{10}(6p)^3$	$^3S_{1/2}$	۷٫۳	۱٫۳۰	
۸۴	Po	$(Xe)(6s)^2(4f)^4(5d)^{10}(6p)^4$	$^3P_2$	۸٫۴	۱٫۲۱	
۸۵	At	$(Xe)(6s)^2(4f)^4(5d)^{10}(6p)^5$	$^3P_2$	نامعلوم	۱٫۱۵	
۸۶	Rn	$(Xe)(6s)^2(4f)^4(5d)^{10}(6p)^6$	$^1S_0$	۱۰٫۷	۱٫۰۹	
۸۷	Fr	$(Rn)(7s)$		نامعلوم	۲٫۴۸	
۸۸	Ra	$(Rn)(7s)^2$	$^1S_0$	۵٫۳	۲٫۰۴	
۸۹	اکتیوها Ac	$(Rn)(7s)^2(6d)$	$^3D_{3/2}$	۶٫۹	۱٫۹۰	
۹۰		Th	$(Rn)(7s)^2(6d)^2$	$^3F_2$		
۹۱		Pa	$(Rn)(7s)^2(5f)^2(6d)$	$^3K_{11/2}$		
۹۲		U	$(Rn)(7s)^2(5f)^2(6d)$	$^5L_6$		
۹۳		Np	$(Rn)(7s)^2(5f)^2(6d)$	$^6L_{11/2}$		
۹۴		Pu	$(Rn)(7s)^2(5f)^6$	$^7F_0$		
۹۵		Am	$(Rn)(7s)^2(5f)^7$	$^8S_{7/2}$		
۹۶		Cm	$(Rn)(7s)^2(5f)^7(6d)$	$^4D_2$		
۹۷		Bk	$(Rn)(7s)^2(5f)^9$	$^6H_{15/2}$		
۹۸		Cf	$(Rn)(7s)^2(5f)^{10}$	$^5I_8$		
۹۹	Es	$(Rn)(7s)^2(5f)^{11}$	$^7I_{15/2}$			
۱۰۰	Fm	$(Rn)(7s)^2(5f)^{12}$	$^7H_6$			
۱۰۱	Md	$(Rn)(7s)^2(5f)^{13}$	$^7F_{7/2}$			
۱۰۲	No	$(Rn)(7s)^2(5f)^{14}$	$^1S_0$			

\* جمله طیفی مترادف با نمادنگاری طیف‌نمایی است.

\*\* شعاع با قله توزیع بار محاسبه شده برای خارجی‌ترین اوربیتال تعریف می‌شود.

## مسائل

۱-۱۹. حالت‌های طیف‌نمایی (به صورت  $^{2S+1}L_J$ ) حاصل از ترکیب‌های زیر را بنویسید

$$S = 1/2, L = 3$$

$$S = 2, L = 1$$

$$S_1 = 1/2, S_2 = 1, L = 4$$

$$S_1 = 1, S_2 = 1, L = 3$$

$$S_1 = 1/2, S_2 = 1/2, L = 2$$

اگر ذرات یکسان باشند، از موارد دو اسپینی چه حالتیایی طرد می‌شوند؟  
۱۹-۲ مقادیر مختلف  $J$  مربوط به هر یک از حالتیای زیر را تعیین کنید.

$${}^1D, {}^3P, {}^3F, {}^3G, {}^3D, {}^3H$$

۱۹-۳ حالتیای  ${}^1D, {}^3P, {}^3S, {}^3G, {}^5P, {}^5S$  را در نظر بگیرید. با فرض اینکه هر یک از این حالتها به دو ذره با بزرگترین اسپین ممکن آنها مربوط می‌شود، حالتیایی را تعیین کنید که بنابه اصل طرد مجاز نیستند.

۱۹-۴ با استفاده از قاعده‌های هوند، توصیف طیف نمایی حالتیای پایه اتمهای زیر را به دست آورید

$$N(Z = 7), K(Z = 19), Sc(Z = 21), Co(Z = 27)$$

بیکرنبدیهای الکترونی را تا جایی که می‌توانید تعیین کنید.

۱۹-۵ با استفاده از قاعده‌های هوند، اعداد کوانتومی  $(S, L, J)$  را برای عناصر  $Z = 14, 15, 24, 30, 34$  واری کنید.

۱۹-۶ با استفاده از رابطه

$$\text{پتانسیل یونش} = \frac{13.6 Z_{\text{eff}}^2}{n^2} \text{eV}$$

$Z_{\text{eff}}$  را برای الکترونهاي ظرفیت تعريف کنید، و آن را برای  $Z = 1$  تا  $Z = 40$  بنویسید و درباره نقشهایی که می‌بینید بحث کنید.

۱۹-۷ عنصر  $Z = 11$  را در نظر بگیرید. انتظار دارید  $L, S, J$  برای اولین حالت برانگیخته چه مقادیری داشته باشند؟ مقادیر ممکن این اعداد کوانتومی را تعیین کنید. با استفاده از برآوردهای سد مرکزگریزی و مقدار  $Z_{\text{eff}}$  که در مسئله ۱۹-۶ به دست آورده‌اید، انرژی برانگیختگی را برآورد کنید. [راهنمایی: توجه کنید که شکستن پوسته بسته  $Z = 10$  به انرژی زیادی احتیاج دارد].

۱۹-۸ پتانسیلهای یونش را که در جدول تناوبی داده شده‌اند برحسب  $Z$  ترسیم کنید. قله‌هایی را که نشاندهنده ساختار پوسته‌ای اتمها هستند در نظر بگیرید.

مقادیری داشته باشند؟ مقادیر ممکن این اعداد کوانتومی را تعیین کنید. با استفاده از برآوردهای سد مرکزگریزی و مقدار  $Z_{\text{eff}}$  که در مسئله ۶-۱۹ به دست آورده‌اید، انرژی برانگیختگی را برآورد کنید. [راهنمایی: توجه کنید که شکستن پوسته پسته  $Z = 10$  به انرژی زیادی احتیاج دارد.]

۸-۱۹ پتانسیل‌های یونش را که در جدول تناوبی داده شده‌اند برحسب  $Z$  ترسیم کنید. قله‌هایی را که نشاندهنده ساختار پوسته‌ای آنها هستند در نظر بگیرید.

## مراجع

یک بررسی مقدماتی عالی درباره ساختار اتمی را می‌توانید در کتاب زیر ببینید

G Herzberg, *Atomic Spectra and Atomic Structure*, Dover, New York, 1944.

برای یک بررسی پیشرفته و قاطع به کتاب زیر مراجعه کنید

I I Sobelman, *Introduction to the Theory of Atomic Spectra*, Pergamon Press, New York, 1972.

این کتاب بسیار پیشرفته است.

# ۲۰

## مولکولها

همچنانکه هر اتم تجمعی از الکترونها و یک هسته است، مولکولها نیز از الکترونها و چند هسته تشکیل شده‌اند. مولکولها در پایبندترین حالت انرژی خود پایدار هستند، یعنی برای تجزیه آنها به مؤلفه‌هایشان باید مقداری انرژی صرف شود. چون وقتی انرژی کافی به مولکول داده شود مولکول بیش از هر چیز به اتمهای تشکیل‌دهنده خود تجزیه می‌شود، می‌توان مولکولها را حالت‌های مقید آنها نامید، اگرچه خواهیم دید که این توصیف بسیاری از ویژگیهای ساختار مولکولها را پنهان می‌کند. هدف این فصل آن است که نشان دهد مکانیک کوانتومی در توصیف خواص و رفتار مولکولها موفق است.

ساده‌ترین مولکولها آنهایی هستند که شامل دو هسته‌اند، یعنی از دو اتم تشکیل شده‌اند. حتی اینها نیز نسبت به اتمها دستگاههای پیچیده‌تری هستند، زیرا پس از تثبیت مرکز جرم در فضا هسته‌ها هنوز می‌توانند حرکت کنند، و این به معنای افزایش تعداد درجات آزادی است. به‌عنوان مثال، برای ساده‌ترین مولکول، یعنی  $H_2^+$  که از دو پروتون و یک الکترون تشکیل شده است، باز هم شش درجه آزادی باقی می‌ماند که سه تا به الکترون و سه تا به حرکت نسبی دو پروتون مربوط‌اند. همچون مورد اتمها، بررسی مسئله دینامیک مولکولها به روش مستقیم، یعنی حل عددی معادله شرودینگر چندبعدی، امکانپذیر است. برای اهداف ما، رهیافتهای ابتدایی اما فیزیکی‌تر آموزنده‌تر هستند.

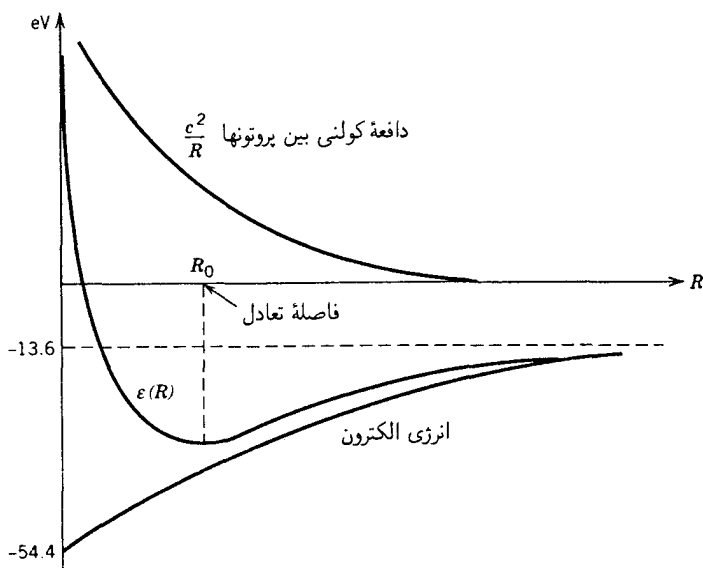
با استفاده از این واقعیت که هسته‌ها بسیار سنگینتر از الکترون‌ها هستند ( $M/m_e \gg 10^3$ ) و در نتیجه حرکت آنها بسیار کندتر است، می‌توان بینشی دربارهٔ دینامیک مولکول‌ها به دست آورد. برای بررسی حرکت الکترون‌ها می‌توان هسته‌ها را در فضا ثابت فرض کرد. از طرف دیگر، حرکت هسته‌ها در یک میدان متوسط ناشی از الکترون‌ها صورت می‌گیرد. به‌ازای یک مجموعهٔ معین از مختصات هسته‌ای، یک هامیلتونی برای الکترون‌ها خواهیم داشت. کمترین ویژه‌مقدار این هامیلتونی تابع این مختصات است، و مقدار کمیتهٔ آن مکان هسته‌ها را تعیین می‌کند. این تصویر را باید برای هسته‌هایی که جرم چندانی ندارند کمی تغییر داد، زیرا اینها هم می‌توانند حرکت کنند. حرکت این هسته‌ها به الکترون‌ها وابسته است، اما آنها تنها یک توزیع بار متوسط ناشی از حرکت سریع الکترون‌ها را "می‌بینند"، و در تقریب اول در یک پتانسیل سهموی حول مکان‌هایی حرکت می‌کنند که از کمیتهٔ انرژی الکترون‌ها به دست می‌آیند.

## مولکول $H_2^+$

بررسی مولکول‌ها را از ساده‌ترین آنها، که یون  $H_2^+$  است و از دو پروتون و یک الکترون تشکیل شده است، شروع می‌کنیم. در دستگاه مرکز جرم دو هسته، هسته‌ها در  $\mathbf{R}/2$  و  $-\mathbf{R}/2$  قرار دارند، و انرژی جنبشی هسته‌ای با  $-\frac{\hbar^2}{2M^*} \nabla_{\mathbf{R}}^2$  توصیف می‌شود که در آن  $M^*$  جرم کاهیدهٔ دو پروتون است ( $M^* = M/2$ ). مکان الکترون را با  $\mathbf{r}$  نشان می‌دهیم. معادلهٔ ویژه‌مقداری انرژی به صورت زیر است

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2M^*} \nabla_{\mathbf{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 - \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}/2|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r} + \mathbf{R}/2|} + \frac{e^2}{R} \right) \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = E \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \quad (۱-۲۰)$$

اولین جمله انرژی جنبشی پروتون‌ها و دومین جمله انرژی جنبشی الکترون است. دو جملهٔ بعد نشان‌دهندهٔ جاذبهٔ میان الکترون واقع در  $\mathbf{r}$  و دو پروتون واقع در  $\pm \mathbf{R}/2$  هستند، و آخرین جمله معرف دافعهٔ بین دو پروتون است که به فاصلهٔ  $R = |\mathbf{R}|$  از یکدیگر قرار دارند. شکل ۱-۲۰ ویژگی‌های کیفی پتانسیل را نشان می‌دهد. به‌ازای مقادیر بزرگ  $R$ ، الکترون به یکی از پروتون‌ها وابسته است، و انرژی دستگاه  $13.6\text{eV}$  - یعنی انرژی یک اتم هیدروژن است. وقتی  $R \rightarrow 0$ ، دافعهٔ پروتون-پروتون را کنار بگذاریم، الکترون به یک هستهٔ  $Z = 2$  وابسته خواهد بود، و انرژی بستگی برابر است با  $54.4\text{eV} = -13.6Z^2\text{eV}$ . انرژی الکترون برحسب  $R$  بین این دو مقدار به صورت هموار تغییر می‌کند. اگر این انرژی را با انرژی دافعهٔ  $e^2/R$  جمع کنیم منحنی  $E(R)$  به دست می‌آید. این منحنی از انرژی بستگی یک الکترون به یک پروتون پایین‌تر می‌رود، و این نشان می‌دهد انرژی دستگاه متشکل از دو پروتون و یک الکترون از انرژی یک پروتون و یک اتم



شکل ۲۰-۱ اجزاء "پتانسیل هسته‌ای". از ترکیب دافعه کولنی و انرژی الکترون یک منحنی به دست می‌آید که در  $R_0$  کمینه است.

هیدروژن جدا از آن کمتر است. این فرورفتگی همیشه وجود ندارد، و از این رو چنانکه به زودی خواهیم دید بعضی از اتمها مولکول تشکیل نمی‌دهند.

برای به دست آوردن  $E(R)$  باید معادله ویژه مقدراری انرژی الکترون را حل کنیم:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 - \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}/2|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r} + \mathbf{R}/2|} + \frac{e^2}{R} \right) u(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = E(R)u(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \quad (2-20)$$

این معادله را می‌توان در مختصات بیضوی حل کرد، اما با استفاده از اصل وردشی با توابع موج آزمونی که از شهود فیزیکی نسبت به دستگاه ناشی می‌شوند می‌توان بینش بیشتری به دست آورد.

### اوربیتالهای مولکولی

یک تابع موج آزمونی مناسب عبارت است از یک ترکیب خطی از  $u_{100}(r_2, \mathbf{R})$  و  $u_{100}(r_1, \mathbf{R})$  که توابع موج حالت پایه الکترون وابسته به هر یک از پروتونها هستند، و در نتیجه  $r_1 = |\mathbf{r} - \mathbf{R}/2|$  و  $r_2 = |\mathbf{r} + \mathbf{R}/2|$  چون هسته‌ها یکسان‌اند، هامیلتونی نسبت به انعکاس در صفحه عمود منصف خط واصل آنها متقارن است، یعنی تحت تبدیلهای  $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$  و  $\mathbf{R} \rightarrow -\mathbf{R}$  ناوردا است. بنابراین، می‌توان ترکیبهایی را انتخاب کرد که ویژه تابعهای پاریته هم باشند. اینها ترکیبهای زوج و فرد از توابع

زیر هستند

$$u_{100}(r_1, \mathbf{R}) \equiv \psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \left( \frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} e^{-|r-\mathbf{R}/2|/a_0} \quad (3-20)$$

و

$$u_{100}(r_2, \mathbf{R}) \equiv \psi_2(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \left( \frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} e^{-|r+\mathbf{R}/2|/a_0} \quad (4-20)$$

توابع موج آزمونی ما الکترون را به هر یک از پروتونها وابسته می‌کنند، و آنها را اوربیتالهای مولکولی ( $MO$ ) می‌نامند.  
می‌نویسیم

$$\begin{aligned} \psi_g(\mathbf{r}, \mathbf{R}) &= C_+(R)[\psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R}) + \psi_2(\mathbf{r}, \mathbf{R})] \\ \psi_u(\mathbf{r}, \mathbf{R}) &= C_-(R)[\psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R}) - \psi_2(\mathbf{r}, \mathbf{R})] \end{aligned} \quad (5-20)$$

ضرایب بهنجارش با رابطه‌های زیر داده می‌شوند

$$\begin{aligned} \frac{1}{C_{\pm}^2} &= \langle \psi_1 \pm \psi_2 | \psi_1 \pm \psi_2 \rangle \\ &= 2 \pm 2 \int d^3r \psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \psi_2(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \end{aligned} \quad (6-20)$$

انتگرال بالا را انتگرال همپوشی می‌نامند، و می‌توان آن را محاسبه کرد. محاسبه

$$\begin{aligned} S(R) &= \int d^3r \psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \psi_2(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \\ &= \frac{1}{\pi a_0^3} \int d^3r e^{-|r-\mathbf{R}/2|/a_0} e^{-|r+\mathbf{R}/2|/a_0} \\ &= \frac{1}{\pi a_0^3} \int d^3r' e^{-|r'-\mathbf{R}/2|/a_0} e^{-r'/a_0} \end{aligned} \quad (7-20)$$

سراسر است اما پرزحمت است. نتیجه عبارت است از

$$S(R) = \left( 1 + \frac{R}{a_0} + \frac{R^2}{3a_0^2} \right) e^{-R/a_0} \quad (8-20)$$

۱. این نشانگذاری جنبه تاریخی دارد:  $g$  از واژه آلمانی "gerade" به معنای زوج گرفته شده است و  $u$  از "ungerade" به معنای فرد.



برای مقدار انتظاری  $H_0$  در دو حالت داریم

$$\begin{aligned}
 \langle H \rangle_{g,u} &= \frac{1}{\sqrt{1 \pm S(R)}} \langle \psi_1 \pm \psi_2 | H_0 | \psi_1 \pm \psi_2 \rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{1 \pm S(R)}} \{ \langle \psi_1 | H_0 | \psi_1 \rangle + \langle \psi_2 | H_0 | \psi_2 \rangle \\
 &\quad \pm \langle \psi_1 | H_0 | \psi_2 \rangle \pm \langle \psi_2 | H_0 | \psi_1 \rangle \} \quad (9-20) \\
 &= \frac{\langle \psi_1 | H_0 | \psi_1 \rangle \pm \langle \psi_1 | H_0 | \psi_2 \rangle}{1 \pm S(R)}
 \end{aligned}$$

که در آن از تقارن تحت  $\mathbf{R} \rightarrow -\mathbf{R}$  استفاده کرده‌ایم. صورت کسر را می‌توان محاسبه کرد:

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_1 | H_0 | \psi_1 \rangle &= \int d^3r \psi_1^*(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \left( \frac{p_c^2}{2m} - \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}/2|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r} + \mathbf{R}/2|} + \frac{e^2}{R} \right) \\
 &\quad \times \psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \\
 &= E_1 + \frac{e^2}{R} - e^2 \int d^3r \frac{|\psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R})|^2}{|\mathbf{r} + \mathbf{R}/2|} \quad (10-20)
 \end{aligned}$$

جمله اول درست انرژی اتم هیدروژن منفرد است:  $E_1 = -13.6 \text{ eV}$ ؛ جمله دوم دافعه پروتون-پروتون است، و جمله سوم انرژی پتانسیل الکتروستاتیکی مربوط به توزیع بار الکترون حول یک پروتون است که به پروتون دیگر نیز جذب شده است. این انتگرال را می‌توان محاسبه کرد، و در نهایت داریم

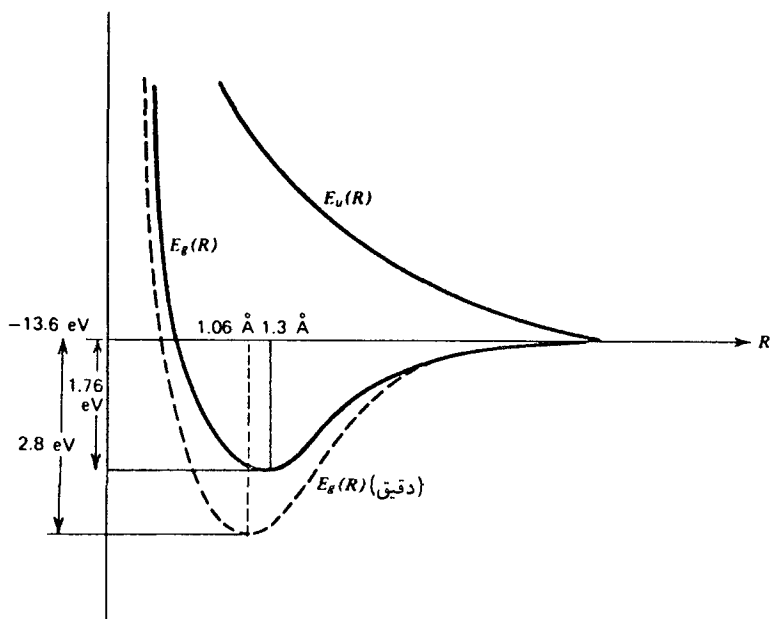
$$\langle \psi_1 | H_0 | \psi_1 \rangle = E_1 + \frac{e^2}{R} \left( 1 + \frac{R}{a_0} \right) e^{-2R/a_0} \quad (11-20)$$

به همین ترتیب، می‌نویسیم

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_1 | H_0 | \psi_2 \rangle &= \int d^3r \psi_1^*(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \left( E_1 + \frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{|\mathbf{r} + \mathbf{R}/2|} \right) \psi_2(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \\
 &= \left( E_1 + \frac{e^2}{R} \right) S(R) - e^2 \int d^3r \frac{\psi_1^*(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \psi_2(\mathbf{r}, \mathbf{R})}{|\mathbf{r} + \mathbf{R}/2|} \quad (12-20)
 \end{aligned}$$

آخرین جمله انتگرال تبادلی است، که آن را نیز می‌توان محاسبه کرد:

$$e^2 \int d^3r \frac{\psi_1^*(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \psi_2(\mathbf{r}, \mathbf{R})}{|\mathbf{r} + \mathbf{R}/2|} = \frac{e^2}{a_0} \left( 1 + \frac{R}{a_0} \right) e^{-R/a_0} \quad (13-20)$$



شکل ۲۰-۲۱ نتایج محاسبه وردشی برای  $H_2^+$ .

از مجموع نتایج بالا، با استفاده از  $R/a_0 = y$  و  $E_1 = -2e^2/a_0$ ، به دست می آوریم

$$\langle H \rangle_{g,u} =$$

$$E_1 \frac{1 - (2/y)(1+y)e^{-2y} \pm \{ (1 - 2/y)(1+y + y^2/3)e^{-y} - 2(1+y)e^{-y} \}}{1 \pm (1+y - y^2/3)e^{-y}} \quad (14-20)$$

شکل ۲۰-۲۱ این انرژیها را برحسب  $R = a_0 y$  نشان می دهد.

جواب دقیق، که بنابه اصل وردشی باید پایینتر از منحنیهای به دست آمده قرار گیرد، تفاوت اندکی با کمینه دارد. در این تقریب می بینیم که جواب زوج مقید است، اما جواب فرد مقید نیست. تفاوت میان جوابهای زوج و فرد این است که برای جواب زوج الکترون به احتمال زیاد بین دو پروتون، جایی که سهم جاذبه بیشینه است، قرار دارد؛ برای جواب فرد، که یک گره در فاصله میان دو پروتون دارد، الکترون می خواهد از این ناحیه دور باشد.

فاصله بین پروتونها که از آزمایش به دست آمده است  $1.06 \text{ \AA}$  است، و انرژی بستگی تجربی  $2.78 \text{ eV}$  است. محاسبات مبتنی بر ۲۰-۱۴ فاصله  $1.3 \text{ \AA}$  و انرژی بستگی  $1.76 \text{ eV}$  را به دست می دهند. بنابراین، تابع موج ما به اندازه ای که باید دقیق نبوده است. دلیل آن این است که وقتی  $R$  کوچک است، این تابع موج باید به تابع موج یون  $He^+$  نزدیک شود و ۲۰-۵ چنین

نیست. می‌توان با معرفی یک بار مؤثر برای پروتون و کمینه کردن  $\langle H_0 \rangle_{\psi}$  نسبت به این پارامتر، علاوه بر  $R$ ، مانند آنچه در بررسی اتم هلیم انجام دادیم، محاسبه را بهتر کرد. چون بیشتر به درک کیفی مسئله توجه داریم تا به اصلاح محاسبه و ردشی، این نظر را دنبال نمی‌کنیم.

اوربیتالهایی که در نظر گرفته‌ایم به زاویه سمتی حول محور مولکول بستگی ندارند. چون هامیلتونی تحت چرخشهای حول این محور ناوردا است، می‌توان جوابها را از روی مؤلفه تکانه زاویه‌ای در راستای این محور دسته‌بندی کرد. اگر راستای  $\mathbf{R}$  را محور  $z$  بگیریم، ویژه‌حالتهای ما ویژه‌حالتهای همزمان  $L_z$  خواهند بود. جوابها به‌طور کلی دارای وابستگی  $e^{im\phi}$ ، با  $\dots, \pm 2, \pm 1, 0 = m$  هستند. اینها را، نظیر  $S, P, D, \dots$ ، با  $\delta, \pi, \sigma, \dots$  نشانگذاری می‌کنیم. نشانهای "g" و "u" نیز هستند، که برای تمام مولکولهای دواتمی با اتمهای یکسان (مولکولهای هم‌هسته) به‌کار می‌روند. بنابراین، در مثال کنونی، می‌توان حالت پایه را با  $1s\sigma_g$  و حالت پادمقارن را با  $1s\sigma_u$  نشان داد، که در آن ستاره به‌معنای نامقید بودن حالت است. حالتهای برانگیخته مولکول  $H_2^+$  را می‌توان با اوربیتالهای بالاتر تشکیل داد.

## مولکول $H_2$

اکنون مولکول  $H_2$  را به تفصیل بررسی می‌کنیم، زیرا در اینجا (برخلاف مولکول  $H_2^+$ ) دو الکترون داریم و ملاحظات اصل طرد و اسپین الکترون برای نخستین بار ظاهر می‌شوند. مانند مورد مولکول  $H_2^+$ ، هسته‌ها را ثابت می‌گیریم.

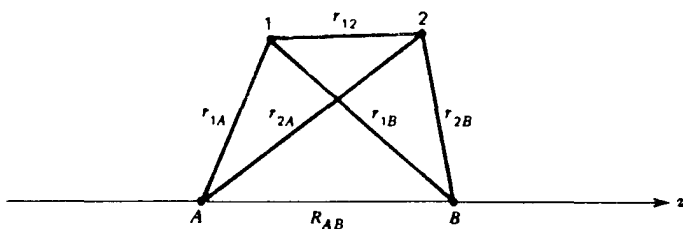
هسته‌ها (پروتونها) را با  $A$  و  $B$  و الکترونها را با "۱" و "۲" نشان می‌دهیم (شکل ۳-۲۰)

هامیلتونی به‌صورت زیر است

$$H = H_1 + H_2 + \frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{R_{AB}} \quad (15-20)$$

که در آن جمله‌های

$$H_i = \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} - \frac{e^2}{r_{Ai}} - \frac{e^2}{r_{Bi}} \quad (i = 1, 2) \quad (16-20)$$



شکل ۳-۲۰ نشانهای مختصاتی در بررسی مولکول  $H_2$ .

تنها به مختصات الکترون  $i$  نسبت به هسته‌ها بستگی دارند. در اینجا نیز با محاسبه مقدار انتظاری  $H$  با استفاده از یک تابع موج آزمونی، یک کران بالا برای  $E(R_{AB})$  به دست می‌آوریم. از اینکه هامیلتونیهای

$$\tilde{H}_i = H_i + \frac{e^2}{R_{AB}} \quad (۱۷-۲۰)$$

درست هامیلتونی مولکول  $H_2^+$  هستند (معادله ۲-۲۰) پی می‌بریم که تابع موج آزمونی را به صورت حاصلضرب دو تابع  $1s\sigma_g$  (معادله ۵-۲۰) برای مولکول  $H_2^+$  انتخاب کنیم:

$$\psi_g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2[1 + S(R_{AB})]}} [\psi_A(\mathbf{r}_1) + \psi_B(\mathbf{r}_1)][\psi_A(\mathbf{r}_2) + \psi_B(\mathbf{r}_2)] \chi_{\text{تکتابی}} \quad (۱۸-۲۰)$$

حالت اسپینی الکترون تکتابی است زیرا قسمت فضایی تابع موج را متقارن گرفته‌ایم. در این تابع موج آزمونی، هر الکترون وابسته به دو پروتون است، یعنی تابع موج آزمونی حاصلضرب اوربیتالهای مولکولی است. توصیف برحسب اوربیتالهای مولکولی را گاهی روش  $MO$  می‌نامند. از محاسبه  $\langle \psi_g | H | \psi_g \rangle$  به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} & \left\langle \psi_g \left| \left( \tilde{H}_1 - \frac{e^2}{R_{AB}} \right) + \left( \tilde{H}_2 - \frac{e^2}{R_{AB}} \right) + \frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{R_{AB}} \right| \psi_g \right\rangle \\ &= E(R_{AB}) + E(R_{AB}) + \left\langle \psi_g \left| \frac{e^2}{r_{12}} \right| \psi_g \right\rangle - \frac{e^2}{R_{AB}} \quad (۱۹-۲۰) \\ &= 2E(R_{AB}) - \frac{e^2}{R_{AB}} + \left\langle \psi_g \left| \frac{e^2}{r_{12}} \right| \psi_g \right\rangle \end{aligned}$$

که در آن  $E(R_{AB})$  انرژی مولکول  $H_2^+$  است که در ۱۴-۲۰ محاسبه شد. جمله دافعه الکترون-الکترون مرتبه اول را نیز می‌توان محاسبه کرد، و هنگامی که انرژی کل حاصل را نسبت به فاصله  $R_{AB}$  کمینه کنیم، برای انرژی بستگی و فاصله بین مولکولی به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} E_b &= -۲,۶۸ \text{ eV} \\ R &= ۰,۸۵ \text{ \AA} \end{aligned} \quad (۲۰-۲۰)$$

مقادیر تجربی عبارت‌اند از

$$E_b = -۴,۷۵ \text{ eV} \quad (۲۱-۲۰)$$

$$R = ۰,۷۴ \text{ \AA}$$

بدیهی است که این تقریب زیاد خوب نیست. در بحث مولکول  $H_2^+$  متذکر شدیم که آن توابع موج آزمونی ( $MO$ ها) برای فاصله‌های کوچک پروتون-پروتون دقت ندارند، و گستردگی بیش از حد فضایی اوربیتالهای مولکولی اثر خود را در اعداد بالا نشان می‌دهد. این تابع موج آزمونی همچنین ویژگیهای نامطلوبی برای مقادیر بزرگ  $R_{AB}$  دارد. قسمت فضایی  $۱۸-۲۰^\circ$  را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$[\psi_A(\mathbf{r}_1) + \psi_B(\mathbf{r}_1)][\psi_A(\mathbf{r}_2) + \psi_B(\mathbf{r}_2)] \quad (۲۲-۲۰)$$

$$= [\psi_A(\mathbf{r}_1)\psi_A(\mathbf{r}_2) + \psi_B(\mathbf{r}_1)\psi_B(\mathbf{r}_2)] + [\psi_A(\mathbf{r}_1)\psi_B(\mathbf{r}_2) + \psi_A(\mathbf{r}_2)\psi_B(\mathbf{r}_1)]$$

جمله اول را جمله "یونی" می‌نامند زیرا دو الکترون وابسته به این یا آن پروتون را توصیف می‌کند. جمله دوم، که جمله "کووالانسی" نامیده می‌شود، توصیفی برحسب ترکیبهای خطی اوربیتالهای اتمی (LCAO) است. این تابع موج آزمونی ایجاب می‌کند که، چون دو جمله با وزن مساوی ظاهر می‌شوند، برای مقادیر بزرگ  $R_{AB}$  احتمال اینکه مولکول به یونهای  $H^+$  و  $H^-$  یا به دو اتم هیدروژن تجزیه شود یکسان است و این پیش‌بینی به وضوح غلط است.

### روش پیوند والانس

مشکل بالا را می‌توان با استفاده از روش پیوند والانس (یا هایتلر-لندن) که در آن ترکیبهای خطی اوربیتالهای اتمی به‌کار برده می‌شوند، برطرف کرد. تابع موج تکتایی را که در محاسبهٔ وردنهای به‌عنوان تابع موج آزمونی به‌کار می‌رود به صورت زیر انتخاب می‌کنیم

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \left\{ \frac{1}{2[1 + S^2(R_{AB})]} \right\}^{1/2} [\psi_A(\mathbf{r}_1)\psi_B(\mathbf{r}_2) + \psi_A(\mathbf{r}_2)\psi_B(\mathbf{r}_1)] \chi_{\text{تکتایی}} \quad (۲۳-۲۰)$$

که در آن، مانند قبل،  $\psi_A(\mathbf{r}_i)$ ها توابع موج هیدروژنی برای  $n$ امین الکترون حول پروتون  $A$  هستند. اصولاً می‌توان یک جملهٔ سه‌تایی به این تابع موج آزمونی اضافه کرد. اما تابع موج سه‌تایی باید از لحاظ فضایی پادمتقارن باشد و احتمال اندکی برای اینکه الکترونها در ناحیهٔ بین پروتونها واقع شوند به دست می‌دهد. در بحث مولکول  $H_2^+$  دیدیم که درست همین پیکربندی به کمترین

انرژی منجر شد. اگرچه بلاناصله واضح نیست که جاذبه در این پیکربندی با دو الکترون که یکدیگر را دفع می‌کنند باز هم از همه بزرگتر باشد، اما در واقع چنین است. نتایج محاسبهٔ وردشی با تابع موج آزمونی پیوند والانس (VB) عبارت‌اند از

$$E_b = -3.14 \text{ eV} \quad (24-20)$$

$$R = 0.87 \text{ \AA}$$

این پیشرفت قابل ملاحظه‌ای نسبت به نتایج اوربیتالهای مولکولی (MO) نیست، به این دلیل ساده که نارسایی توابع موج آزمونی برای مقادیر کوچک  $R_{AB}$  تأثیر بیشتری دارد. نباید تردیدی دربارهٔ موفقیت‌های کمی مکانیک کوانتومی در فیزیک مولکولی وجود داشته باشد. باید از توابع موج آزمونی پیچیده‌تری استفاده کنیم. به عنوان مثال، یک تابع موج آزمونی  $5^\circ$  جمله‌ای باعث سازگاری کامل با مشاهدات مربوط به مولکول  $H_2$  می‌شود، اما این تابع، برخلاف MO و VB، درکی کیفی دربارهٔ آنچه بین اتمها می‌گذرد به دست نمی‌دهد. در زیر، به جستجوی ارتباط این رهیافتها با درک کیفی بعضی از جنبه‌های شیمی می‌پردازیم.

مقدار انتظاری  $H$  برای مولکول  $H_2$  در رهیافت VB با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \frac{1}{2(1+S^2)} \langle \psi_{A1}\psi_{B2} + \psi_{A2}\psi_{B1} | H | \psi_{A1}\psi_{B2} + \psi_{A2}\psi_{B1} \rangle$$

$$= \frac{1}{1+S^2} \left\langle \psi_{A1}\psi_{B2} \left| \left( T_1 + T_2 - \frac{e^2}{r_{A1}} - \frac{e^2}{r_{A2}} - \frac{e^2}{r_{B1}} - \frac{e^2}{r_{B2}} + \frac{e^2}{r_{12}} \right) \right. \right.$$

$$\left. \left. + \frac{e^2}{R_{AB}} \right| \psi_{A1}\psi_{B2} + \psi_{A2}\psi_{B1} \right\rangle \quad (25-20)$$

که در آن  $T_i$  انرژی جنبشی الکترون  $i$ ام است، و چون

$$\left( T_1 - \frac{e^2}{r_{A1}} \right) \psi_{A1} = E_1 \psi_{A1}$$

و غیره، می‌توان آن را به صورت ساده‌تر زیر درآورد

$$\frac{1}{1+S^2} \left( \left\langle \psi_{A1}\psi_{B2} \left| 2E_1 - \frac{e^2}{r_{B1}} - \frac{e^2}{r_{A2}} + \frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{R_{AB}} \right| \psi_{A1}\psi_{B2} \right\rangle \right.$$

$$\left. + \left\langle \psi_{A1}\psi_{B2} \left| 2E_1 - \frac{e^2}{r_{B2}} - \frac{e^2}{r_{A1}} + \frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{R_{AB}} \right| \psi_{A2}\psi_{B1} \right\rangle \right)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{1+S^2} \left\{ \left( 2E_1 + \frac{e^2}{R_{AB}} \right) (1+S^2) - 2e^2 \left\langle \psi_{A1} \left| \frac{1}{r_{B1}} \right| \psi_{A1} \right\rangle \right. \\
&\quad - 2e^2 S \left\langle \psi_{A1} \left| \frac{1}{r_{A1}} \right| \psi_{B1} \right\rangle + e^2 \iint \frac{|\psi_{A1}|^2 |\psi_{B2}|^2}{r_{12}} \\
&\quad \left. + e^2 \iint \frac{\psi_{A1}^* \psi_{B1} \psi_{B2}^* \psi_{A2}}{r_{12}} \right\} \quad (26-20)
\end{aligned}$$

در به دست آوردن این رابطه از تقارن نیز استفاده کرده‌ایم. جمله‌هایی که می‌توانند این رابطه را منفی تر کنند عبارت‌اند از

$$\left\langle \psi_{A1} \left| \frac{1}{r_{B1}} \right| \psi_{A1} \right\rangle \quad \text{و} \quad \frac{S}{1+S^2} \left\langle \psi_{A1} \left| \frac{1}{r_{A1}} \right| \psi_{B1} \right\rangle$$

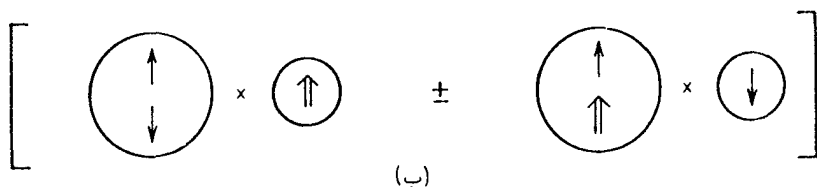
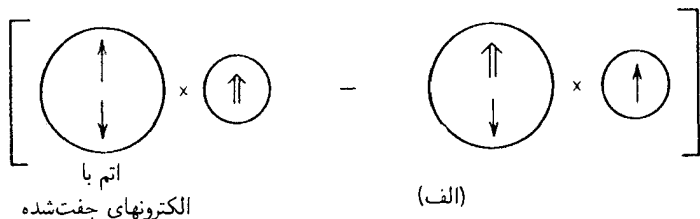
اولی صرفاً جذب ابرالکترونی حول یک پروتون به پروتون دیگر است؛ دومی همپوشی دو الکترون (با وزن  $1/r_{A1}$ ) است. اگر این جمله بزرگ باشد بستگی وجود خواهد داشت. اما این دو الکترون تنها وقتی می‌توانند همپوشی قابل ملاحظه‌ای داشته باشند که اسپینهای آنها پدموازی باشند؛ این پیامدی است از اصل طرد. ناحیه همپوشی بین دو هسته قرار دارد، و در این ناحیه جذب به هسته‌ها به طور کلی بر دافعه الکتروستاتیک بین الکترونها غلبه دارد.

در روش *MO* نیز یک جمله همپوشی وجود دارد — آخرین جمله در  $20-12$  — که برای پیوند بسیار مهم است، و باز هم پیوند به این دلیل روی می‌دهد که توزیع بار الکترون بین هسته‌ها بزرگ است. بنابراین، اگرچه در اینجا اوربیتالها به تمام مولکول تعلق دارند و نه به اتمهای منفرد، اما دلیل فیزیکی برای پیوند یکی است.

باید توجه کرد که به طور کلی هسته‌ها می‌توانند چندین حالت مقید، متناظر با پیکربندیهای مختلف الکترونی، داشته باشند. به عنوان مثال، اگر در  $20-23$  تابع موج  $\psi(r_2)$  را ویژه تابع  $u_{200}$  بگیریم، در حالی که  $\psi(r_1)$  باز هم ویژه تابع  $u_{100}$  است، همپوشی می‌تواند چنان باشد که یک حالت مقید دوم با پیوند ضعیفتر برای پروتونها ایجاد کند. این بحث را ادامه نمی‌دهیم، و تنها این واقعیت مهم را متذکر می‌شویم که  $E(R)$  برای هر حالت الکترونی تفاوت دارد.

## اهمیت الکترونهای ظرفیت جفت نشده

بعضی از مولکولها را با استفاده از این دو رهیافت برای توصیف توزیع بار الکترون بررسی می‌کنیم. این بررسی بسیار ساده است زیرا لازم نیست تمام الکترونها را عملاً به حساب آوریم. در ساختن اوربیتالها، خواه ظرفیتی باشند خواه مولکولی، تنها خارجی‌ترین الکترونهایی که در پوسته‌های



شکل ۲-۴ نمایش اینکه چرا الکترونیهای جفت شده باعث پیوند نمی شوند. (الف) اگر الکترونیهای موازی تبادل کنند، تابع موج به لحاظ فضایی پادمقارن است. (ب) اگر الکترونیهای پادموازی تبادل کنند، یک جمله در تابع موج دارای الکترونیهایی در حالت اسپینی یکسان است، و می تواند به مداری با انرژی زیادتر برود.

بسته نیستند، یعنی الکترونیهای ظرفیت، می توانند در پیوند مؤثر باشند. الکترونیهای داخلی، که به هسته نزدیکترند، کمتر تحت تأثیر وجود اتم مجاور قرار می گیرند.<sup>۲</sup> علاوه بر این، تمام الکترونیهای ظرفیت سهم مساوی ندارند: اگر دو الکترون در حالت اسپینی<sup>۰</sup> باشند — آنها را الکترون جفت شده می نامیم — باعث پیوند نمی شوند. برای اینکه ببینیم چرا در این مورد پیوند نداریم، بررسی می کنیم که وقتی اتمی با یک الکترون ظرفیت به اتمی با دو الکترون جفت شده نزدیک می شود چه پیش می آید. در اینجا دو وضعیت را باید در نظر گرفت (شکل ۲-۴).

(الف) اگر الکترونیهایی که موازی هستند تحت تبادل قرار گیرند (یعنی به صورتی مانند ۲۰-۲۳ با علامت  $\pm$  بین جمله ها درآیند) باید در یک حالت سه تایی باشند، و در نتیجه تابع موج فضایی این زوج باید پادمقارن باشد. این باعث کاهش همپوشی می شود، و معلوم می شود که انتگرال تبادل یک سهم دافعه در انرژی دارد.

(ب) اگر الکترونیهایی که پادموازی هستند تبادل کنند، یکی از اتمها برای مدتی دارای دو الکترون است که در یک حالت اسپینی هستند. این حالت اولیه<sup>۱</sup> اتم غالباً نمی تواند تداوم داشته باشد، و یکی از الکترونها باید به یک اوربیتال اتمی دیگر صعود کند. گاهی این کار به انرژی بسیار کمی نیاز دارد،

۲. ممکن است در اتمها حتی الکترونیهای ظرفیت نسبتاً به هسته نزدیک باشند. این وضعیت برای خاکهای کمیاب صدق می کند. نتیجه این واقعیت که الکترونیهای خارجی تر در پوسته های  $d$  و  $f$  ۴ نزدیک به هسته قرار دارند آن است که خاکهای کمیاب به لحاظ شیمیایی کمتر از فلزات واسطه ( $Z \approx 20$  تا  $30$ ) فعال هستند.

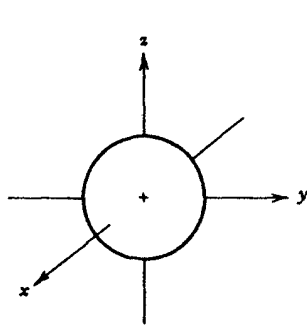


اما معمولاً این طور نیست و باز هم پیوندی حاصل نمی‌شود. فعالیت شیمیایی به وجود الکترونهاى خارجی جفت‌نشده بستگی دارد. مثالی در این مورد، یافت نشدن مولکول  $H - He$  است. هلیوم دو الکترون در حالت  $1s$  دارد؛ صعود یکی از آنها به یک حالت  $2s$  به مقدار زیادی انرژی نیاز دارد. به همین دلیل است که اتمهایی که پوستهٔ خارجی آنها بسته است بی‌اثر هستند. تمام الکترونهاى جفت‌شده اهمیت یکسانی ندارند. چنانکه قبلاً گفتیم، الکترونهاى جفت‌نشدهٔ  $d$  و  $f$  در عناصر واسطه می‌خواهند به هسته نزدیک باشند، و در نتیجه غیرفعال هستند. بنابراین، عمدتاً الکترونهاى  $s$  و  $p$  در پوسته‌های خارجی در فعالیت شیمیایی شرکت می‌کنند. اثر جفت‌شدگی همچنین مسبب چیزی است که "اشباع نیروهای بستگی شیمیایی" نامیده می‌شود: وقتی دو الکترون جفت‌نشده از اتمهای مختلف یک حالت تکتابی تشکیل می‌دهند (و پیوند به وجود می‌آورند) جفت می‌شوند؛ الکترون اتم سوم باید یک الکترون جفت‌نشده در جای دیگر پیدا کند، یعنی در پیوند دیگری شرکت کند. یک پیامد دیگر این است که مولکولها در اکثر موارد اسپین  $^{\circ}$  دارند.

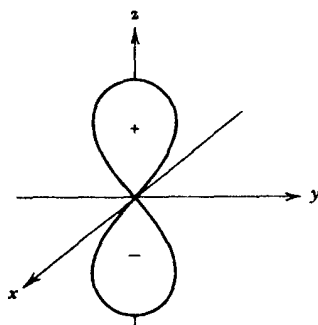
### بررسی چند مولکول ساده

اکنون به بررسی فرایندی شبیه تشکیل پوسته‌های الکترونی در اتمها می‌پردازیم. در شکل ۲۰-۵ تصویر اوربیتالهای اتمی، مشخصاً اوربیتال  $s$  ( $Y_{00}$ ) و اوربیتالهای  $p$ ، نشان داده شده‌اند. برای اوربیتالهای  $p$  ترکیبهای خطی  $(Y_{11} + Y_{1,-1})p_x$  و  $(Y_{11} - Y_{1,-1})p_y$  علاوه بر  $(Y_{10})p_z$  ترسیم شده‌اند. نمودارهای مربوط به اوربیتالهای  $d$ ، یعنی نمودارهای  $d_{xx} - d_{yy}$  و  $d_{zz}$ ،  $d_{yz}$ ،  $d_{xz}$ ،  $d_{xy}$  نشان داده شده‌اند، زیرا الکترونهاى  $d$  نقشی در این بحث ندارند. شکل ۲۰-۶ نشان می‌دهد که وقتی اوربیتالهای اتمی به هم نزدیک شوند و تبادل روی دهد چه پیش می‌آید. به عنوان مثال، دو اوربیتال اتمی  $1s$  می‌توانند در یک اوربیتال مولکولی متقارن فضایی (و از این رو با اسپین  $^{\circ}$ ) یا در یک اوربیتال مولکولی پادمقارن فضایی، که ضد پیوندی است، زیرا تابع موج بین هسته‌ها کوچک است، ترکیب شوند. به همین ترتیب، تشکیل اوربیتالهای مولکولی پیوندی و ضد پیوندی از اوربیتالهای  $p$  در شکل نمایش داده شده‌اند. توجه کنید که (۱) پارته‌های "y" و "u" را می‌توان از روی نمودارها تشخیص داد، زیرا علامت تابع موج در این نمودارها نشان داده شده است؛ توابعهایی که تحت انعکاس در صفحه  $xz$ ، که با خط قائم نمایش داده شده است، تغییر علامت می‌دهند فرد هستند؛ (۲) چون اوربیتالهای  $p_x$  و  $p_y$  دارای  $m_l = \pm 1$  هستند، اوربیتال مولکولی حاصل از آنها یک اوربیتال  $\pi$  است. باید تأکید کنیم که در این شکل تنها دو توزیع بار را گرد هم نمی‌آوریم بلکه دامنهٔ احتمال حاصل از ترکیب توابع موج یعنی اوربیتالهای مولکولی مانند  $\psi_{1s}(\mathbf{r}_A) \pm \psi_{1s}(\mathbf{r}_B)$  و  $\psi_{2p_y}(\mathbf{r}_A) \pm \psi_{2p_y}(\mathbf{r}_B)$  را به‌ازای مقادیر کوچک و بزرگ  $R_{AB}$  نشان می‌دهیم. با استفاده از این اوربیتالهای مولکولی می‌توان خواص چند مولکول دو اتمی هم هسته را بررسی کرد.

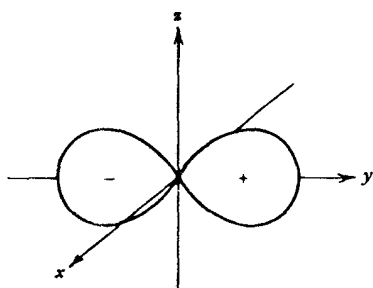
$H_2$  دربارهٔ این مولکول نسبتاً به تفصیل بحث کردیم. تنها تکرار می‌کنیم که دو الکترون می‌توانند



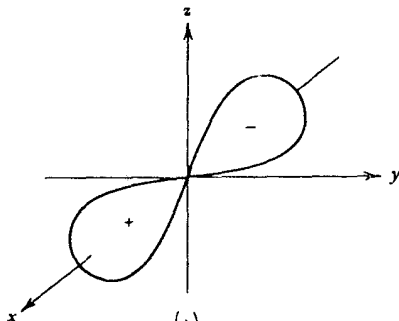
(الف)



(ب)



(ج)



(د)

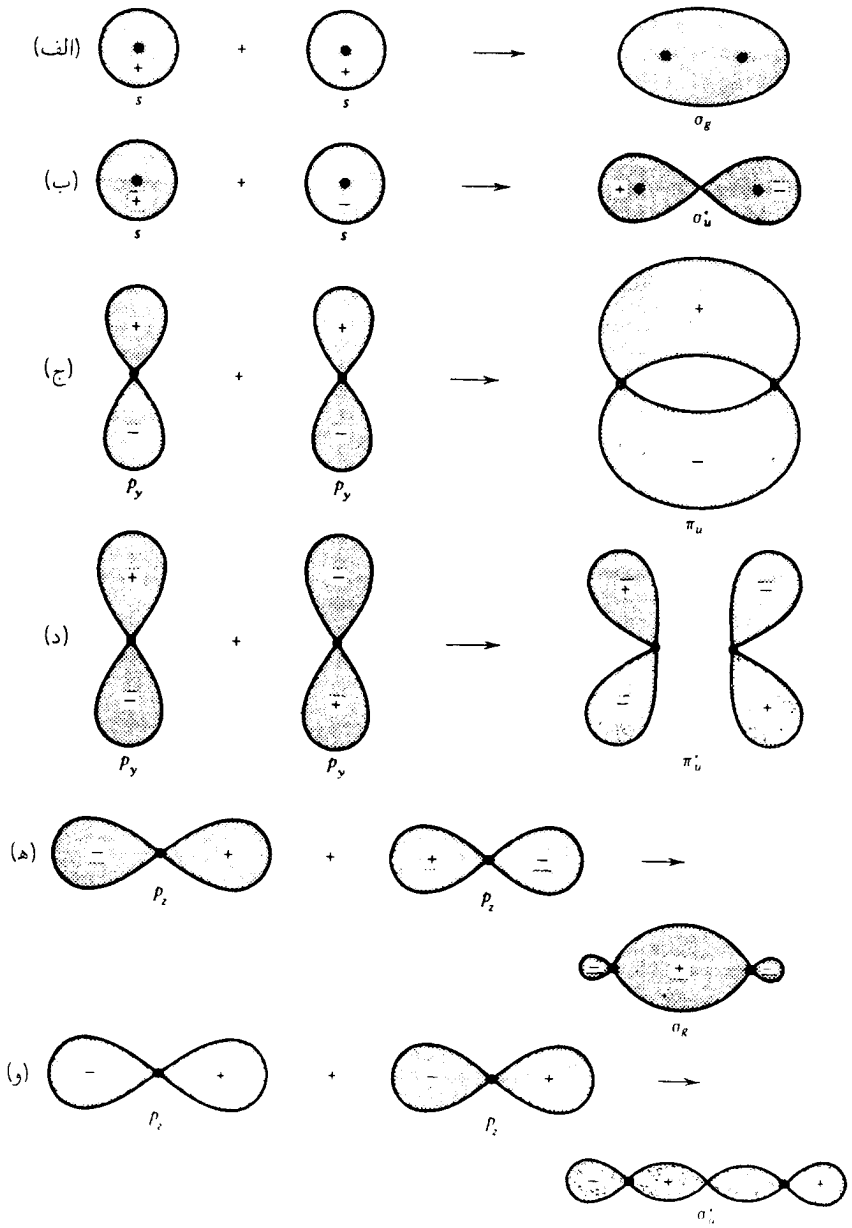
شکل ۲-۵ نمایش نمودار (الف) اوربیتال  $s$ ، و اوربیتالهای (ب)  $(Y_{10})p_z$ ، (ج)  $(Y_{11} - Y_{1,-1})p_y$ ، و (د)  $(Y_{11} + Y_{1,-1})p_x$ . علامت تابع موج در ناحیه‌های مربوط نیز مشخص شده است.

به یک اوربیتال مولکولی  $1s\sigma_g$  بروند، و چون انرژی این اوربیتال از انرژی اوربیتالهای اتمی جداگانه  $1s$  کمتر است پایداری وجود دارد.

از چهار الکترون، تنها دو الکترون می‌توانند به اوربیتال پیوندی  $1s\sigma_g$  بروند؛ دو الکترون دیگر باید یک اوربیتال ضد پیوندی  $1s\sigma_u^*$  تشکیل دهند. انرژی کل از انرژی اتمهای جداگانه  $He$  بیشتر است، و در نتیجه این مولکول تشکیل نمی‌شود. بنابه دیدگاه پیوند ظرفیتی، هر دو اتم الکترونهاى جفت شده دارند، و نتیجه یکسان است. به طور کلی، الکترونها در اوربیتالهای پیوندی و اوربیتالهای ضد پیوندی می‌خواهند یکدیگر را خنثی کنند. چون در یک پیوند کامل دو الکترون دخیل‌اند، می‌توان یک عدد پیوند به صورت زیر تعریف کرد

$$(\text{عدد پیوند}) = \frac{1}{2} \left[ (\text{الکترونهاى اوربیتال ضد پیوندی}) - (\text{الکترونهاى اوربیتال پیوندی}) \right]$$

این عدد برای  $He_2$  صفر است.



شکل ۶-۲۰ اوربیتالهای مولکولی حاصل از گردآمدن دو اوربیتال اتمی. (الف) از ترکیب دو اوربیتال  $s$  اوربیتال مولکولی متقارن فضایی  $\sigma_g$  به وجود می آید که باعث پیوند می شود. (ب) از ترکیب دو اوربیتال  $s$  اوربیتال مولکولی بادمقارن فضایی ضدپیوندی  $\sigma_u^*$  تشکیل می شود. (ج) و (د) نمایش پیوند و ضد پیوند از اوربیتالهای اتمی  $p_y$ . (ه) و (و) نمایش پیوند و ضد پیوند از اوربیتالهای  $p_z$ . محور  $z$  در امتداد خط واصل هسته ها، که با نقطه های سیاه نشان داده شده اند، قرار دارد.

$Li_2$  ساختار اتمی  $Li$  به صورت  $(2s)^2(1s)$  است. بنابراین، الکترونهای  $2s$  جفت نشده هستند، و می‌توانند اوربیتالهای پیوندی  $2s\sigma_g$  تشکیل دهند. در نتیجه انتظار داریم این مولکول وجود داشته باشد، اما به دلیل مقدار  $n = 2$  برای این اوربیتال انتظار داریم که انرژی بستگی به طور قابل ملاحظه‌ای کمتر از مورد مولکول  $H_2$  باشد.

$Be_2$  ساختار اتمی در اینجا  $(2s)^2(1s)$  است؛ الکترون جفت نشده‌ای وجود ندارد، و از این رو انتظار داریم مولکولی وجود نداشته باشد. در واقع همین طور است.

$B_2$  ساختار اتمی نشان می‌دهد که در هر اتم یک الکترون جفت نشده وجود دارد. این الکترون می‌تواند در هر یک از حالت‌های  $2p_x$ ،  $2p_y$  یا  $2p_z$  باشد. این حالتها می‌توانند در یک اوربیتال مولکولی  $2p\pi_u$  یا  $2p\sigma_g$  ترکیب شوند. اولی انرژی کمتری دارد، و از این رو در اینجا حالت پایه یک سه تایی است. این نتیجه با قاعده هوند توافق دارد: حالتی که بیشترین چندگانگی را دارد دارای کمترین انرژی است.

دلیل اینکه چرا  $2p\sigma_g$  انرژی بیشتری دارد وجود اوربیتالهای  $2s\sigma_g$  است. هرگاه حالت‌هایی با اعداد کوانتومی یکسان داشته باشیم، "آمیختگی" صورت می‌گیرد، و حالت‌های تقریباً واگن می‌خواهند یکدیگر را دفع کنند. حالتی که عمده‌تاً  $2p\sigma_g$  است صعود می‌کند. می‌بینیم پیچیدگی‌هایی نظیر آنچه در بحث ساختار اتمی دیدیم ظاهر می‌شوند.

$C_2$  ساختار اتمی  $(2p)^2(2s)^2(1s)$  است، یعنی هر اتم دو الکترون جفت نشده دارد. چون هر الکترون می‌تواند در یکی از سه حالت  $p$  باشد، دو اوربیتال مولکولی پیوندی می‌توانند تشکیل شوند. توصیف اوربیتال مولکولی به صورت  $(2p\pi_u)(2p\sigma_g)$  است.

$N_2$  در اینجا وضعیت بسیار شبیه به مورد  $C_2$  است بجز اینکه سه اوربیتال مولکولی پیوندی می‌توانند تشکیل شوند. توصیف اوربیتال مولکولی به صورت  $(2p\pi_u)(2p\sigma_g)$  است.

$O_2$  در اینجا وضعیت تا اندازه‌ای جالبتر است، زیرا ساختار اتمی به صورت  $(2p)^4(2s)^2(1s)$  است، یعنی چهار الکترون ظرفیت وجود دارند. برحسب اوربیتالهای مولکولی، همچون در  $N_2$ ، سه پیوند می‌توانند تشکیل شوند، و در نتیجه دو الکترون باقی می‌مانند که نمی‌توانند اوربیتال پیوندی تشکیل دهند. کم‌ضررترین اوربیتال ضد پیوندی کدام است؟ این دو الکترون باید تا جایی که ممکن است از یکدیگر دوری کنند، و این را می‌توان با یک حالت سه تایی انجام داد که در آن الکترونها در اوربیتالهای متعام، برای مثال یکی در یک حالت  $p_x$  و دیگری در یک حالت  $p_y$  با قسمتهای فضایی پادمقارن شده، قرار دارند. در این مورد، اسپین  $O_2$  برابر با ۱ است، و این یک استثنا بر تمایل قوی به اسپین صفر است که قبلاً متذکر شدیم.

در تصویر پیوند ظرفیتی، دو الکترون از چهار الکترون ظرفیت باید جفت شده باشند، و در نتیجه دو پیوند وجود دارند که بر هم عمودند، مانند  $p_x$  و  $p_z$ . می‌توان تأثیر این راستایی بودن را در مولکولی مانند  $H_2O$  دید. هر  $H$  یک پیوند را به‌کار می‌برد، و باید انتظار داشت که مولکول به شکل یک  $L$ ، با زاویه  $90^\circ$  بین بازوهای مساوی، باشد. در عمل، هسته‌های دو هیدروژن یکدیگر را دفع می‌کنند، و می‌توان پیش‌بینی کرد که این زاویه اندکی بزرگتر از  $90^\circ$  است. مقدار تجربی آن در

حدود  $10^5$  است. این راستایی بودن اوربیتالهای  $p$  است که شکل مولکولهای ساده را توضیح می‌دهد. با وجود بزرگتر بودن گستره امکانات در ساختار مولکولها، ما آن را حتی کمتر از مورد آنها بررسی کرده‌ایم.

## چرخش مولکولها

مولکولها را باز هم در تقریب استاتیک در نظر می‌گیریم. این ساختار صلب، که در آن توزیع الکترونی هسته‌ها را ثابت نگه می‌دارد، می‌تواند بچرخد. برای مثال، توزیع جرمی مولکول  $H_2$  مانند یک دمبل است، با دو جرم نقطه‌ای که به فاصله  $R_{AB}$  از یکدیگر قرار گرفته‌اند. این دستگاه دو درجه آزادی چرخشی دارد: اگر خط واصل هسته‌ها را محور  $z$  بگیریم، دستگاه می‌تواند حول محورهای  $x$  و  $y$  بچرخد. تکانه زاویه‌ای حول محور  $z$  وجود ندارد، یعنی  $L_z = 0$ . نوعاً می‌توان نوشت

$$E_{\text{چرخشی}} = \frac{L_x^2 + L_y^2}{2\mathcal{I}} = \frac{L^2 - L_z^2}{2\mathcal{I}} = \frac{L(L+1)\hbar^2}{2\mathcal{I}} \quad (27-20)$$

که در آن  $\mathcal{I}$  گشتاور لختی مولکول است. برای مولکولهای همقطب داریم  $\mathcal{I} = MR^2/2$ . چون  $R \approx 2a_0$ ، به دست می‌آوریم

$$E_{\text{چرخشی}} \simeq (m/M)E_{\text{الکترونی}} \quad (28-20)$$

یعنی شکافتگی چرخشی حدود سه مرتبه بزرگی کوچکتر از شکافتگی الکترونی و نوعاً در حدود چند میلی الکترون ولت است. بنابراین، طول موج تابش گسیل شده در گذارهای میان ترازهای چرخشی از مرتبه  $1\text{mm} = 10^6 \text{\AA}$  است.

بیش از این به جزئیات طیفهای چرخشی مولکولها نمی‌پردازیم، و تنها متذکر می‌شویم که اصل پاؤلی نقش مهمی در مولکولهای همقطب دارد. برای مثال، مولکول  $H_2$  را در نظر بگیرید که در آن دو هسته یکسان هستند و هر یک اسپین  $1/2$  دارند. بنابراین، تابع موج کل باید تحت تعویض دو هسته پادمتقارن باشد. دو پروتون در این مثال می‌توانند در حالت اسپینی پادمتقارن نکتابی ( $S=0$ ) باشند، که در نتیجه حالت چرخشی باید با یک تابع متقارن توصیف شود، و از این رو تکانه زاویه‌ای زوج است. اگر دو پروتون در حالت اسپینی متقارن سه‌تابی ( $S=1$ ) باشند، تکانه زاویه‌ای چرخش باید فرد باشد. برخوردهای میان مولکولهای  $H_2$  در گاز هیدروژن توزیع حالت‌های اسپینی را کاتوره‌ای می‌کنند، و با فرض اینکه آنها دارای احتمالهای مساوی هستند تعداد مولکولها در یک حالت اسپینی معین متناسب با مرتبه واگنی  $(2S+1)$  است. بنابراین، تعداد مولکولهای  $H_2$  که برای آنها  $L$  فرد است سه برابر تعداد مولکولهایی

است که برای آنها  $L$  زوج است. این نسبت در شدت خطوط طیفی مربوط به گذارهای بین ترازهای چرخشی ظاهر می‌شود. به‌طور کلی، اگر اسپین هر هسته  $I$  باشد، حالت‌های اسپینی  $2I, 2I - 2, 2I - 4, \dots$  و حالت‌های اسپینی  $1 - 2I, 3 - 2I, \dots$  تقارن مخالف خواهند داشت. برای مثال، اگر  $I$  عدد درست باشد، رشته اول حالت‌های اسپینی به تکانه زاویه‌ای مداری زوج مربوط می‌شود، زیرا هسته‌ها در این مورد بوزون هستند. تعداد کل آنها برابر است با

$$\sum_{k=0}^I [2(2I - 2k) + 1] = (4I + 1)(I + 1) - \frac{4I(I + 1)}{2} \quad (29-20)$$

$$= (2I + 1)(I + 1)$$

در حالی که بقیه حالتها با تعداد

$$(2I + 1)^2 - (2I + 1)(I + 1) = (2I + 1)I \quad (30-20)$$

به تکانه زاویه‌ای مداری فرد مربوط می‌شوند. بنابراین، به‌ازای مقادیر درست  $I$ ، نسبت شدت‌های  $L$  زوج به  $L$  فرد برای یک مقدار معین  $L$  برابر با  $(I + 1)/I$  است. برای فرمیونها این نسبت برعکس است.

انرژی حالت‌های چرخشی با رابطه زیر داده می‌شود

$$E_L = \frac{\hbar^2 L(L + 1)}{2\mathcal{I}} \quad (31-20)$$

که در آن  $\mathcal{I}$  گشتاور لختی مولکول هم‌هسته است. گذارهای بین مقادیر مجاور  $L$  (برای سازگاری با قاعده گزینش  $\Delta L = \pm 1$ )، که به‌دست خواهیم آورد) تابشهایی با بسامدهای زیر تولید می‌کنند

$$\omega(L + 1 \rightarrow L) = \frac{\hbar}{2\mathcal{I}} [(L + 1)(L + 2) - L(L + 1)] \quad (32-20)$$

$$= \frac{\hbar}{\mathcal{I}} (L + 1)$$

## ارتعاش هسته‌ها در مولکولها

تاکنون هسته‌ها را در مولکولها ثابت در نظر گرفته‌ایم. این توزیع ثابت بارهای مثبت باعث یک توزیع الکترونی می‌شود که تابع موقعیت هسته‌ها است. الکترون‌ها بسیار سریعتر از هسته‌ها حرکت می‌کنند،  $v_e/v_N \approx M/m$ ، و توزیع الکترونی می‌تواند خود را با هر حرکت هسته‌ها به‌صورت

بی‌دررو تطبیق دهد. بنابراین، انتظار نمی‌رود که انرژی الکترون  $E(R)$  تغییر کند، اگرچه هسته‌ها مکان خود را حول کمینهٔ منحنی  $E(R)$  به‌کندی تغییر می‌دهند. مخصوصاً، یک تغییر کند در موقعیت هسته‌ها حالت الکترونی را تغییر نخواهد داد. بسامد مربوط به تغییر  $\Delta R$  در مکان هسته‌ها از مرتبهٔ  $\nu \approx v_N/\Delta R$  است، در حالی که بسامد مربوط به تغییر در انرژی الکترونی از مرتبهٔ  $\nu_e \approx \alpha c/a_0$  است. چون  $\Delta R$  از همان مرتبهٔ بزرگی  $a_0$  است و  $v_N/\alpha c \approx 10^{-2}$ ، تغییر حرکت هسته برحسب زمان نمی‌تواند سبب گذار بین حالت‌های الکترونی شود. درک جامع‌تر این نکات از مطالعهٔ فصل ۲۱ به‌دست می‌آید.

در تقریب بی‌دررو، می‌توان  $E(R)$  را به‌صورت یک پتانسیل ثابت در نظر گرفت که هسته‌ها در آن حرکت می‌کنند. مخصوصاً، حرکت دور از  $R_0$  که مکان کمینهٔ  $E(R)$  است هماهنگ ساده خواهد بود:

$$E(R) \approx E(R_0) + \frac{1}{2}(R - R_0)^2 \left( \frac{\partial^2 E(R)}{\partial R^2} \right). \quad (33-20)$$

زیرا در  $R = R_0$  داریم  $\partial E(R)/\partial R = 0$ . بنابراین، برای جابه‌جایی‌های کوچک، هسته‌ها به‌صورت یک نوسانگر هماهنگ حرکت می‌کنند که بسامد زاویه‌ای آن عبارت است از

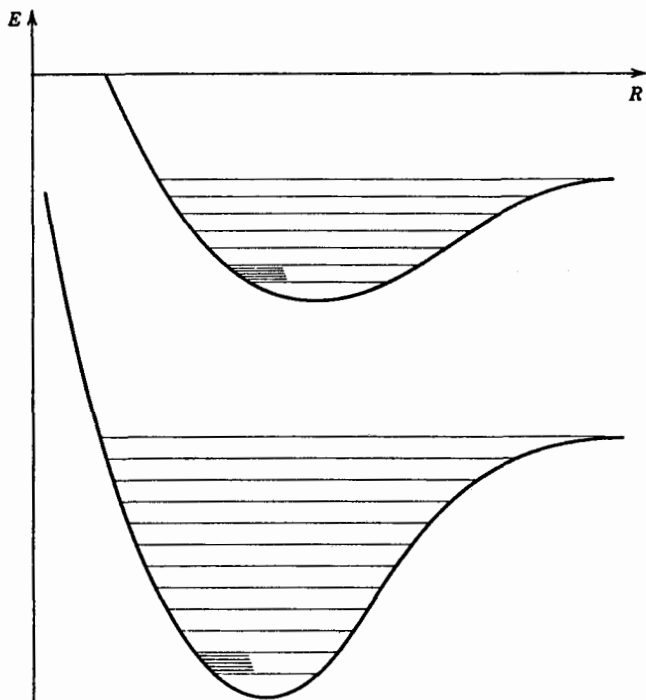
$$\omega = \sqrt{\frac{1}{M} \left( \frac{\partial^2 E}{\partial R^2} \right)}. \quad (34-20)$$

برای مولکولهای همقطب، این حرکت یک‌بعدی است و در راستای خط واصل دو هسته صورت می‌گیرد، و ویژه‌مقدارهای انرژی برای این حرکت عبارت‌اند از

$$E_{\text{ارتعاشی}} = \left( n_v + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad (35-20)$$

که در آن  $n_v = 0, 1, 2, 3, \dots$ . از روی شکل ۲۰-۱ می‌توان این انرژی را برآورد کرد. در حوالی کمینه،  $E(R)$  عبارت است از مجموع  $e^2/R$  و انرژی الکترونی کند تغییر که می‌توان آن را در نزدیکی کمینه به‌صورت  $\kappa(R = R_0)$  در نظر گرفت. بنابراین، مشتق دوم عمدتاً ناشی از جملهٔ  $e^2/R$  است، و از این رو

$$\left( \frac{\partial^2 E(R)}{\partial R^2} \right)_0 \approx \frac{2e^2}{R_0^3} \quad (36-20)$$



شکل ۲۰-۷ ترازهای ارتعاشی که بر روی دو تراز الکترونی یک مولکول دو اتمی نهاده شده‌اند. ترازهای چرخشی مربوط به پایینترین تراز ارتعاشی نیز ترسیم شده‌اند. توجه کنید که هیچ یک از اینها به مقیاس نیستند.

چون  $R_0 \approx 2a_0$ ، به دست می‌آوریم

$$h\omega \approx \sqrt{\frac{\hbar^2 e^2}{4Ma_0^3}} \approx \sqrt{\frac{m}{M}} \quad (۲۰-۳۷)$$

که نشان می‌دهد طول موج تابش ناشی از گذار میان ترازهای ارتعاشی از مرتبه  $10^5 \text{ \AA}$  است. طیفهای مولکولی سلسله مراتب ترازها را نشان می‌دهند. فاصله ترازهای انرژی الکترونی از مرتبه الکترون‌ولت است. بر روی هر تراز انرژی الکترونی یک رشته ترازهای ارتعاشی وجود دارند که با انرژی‌هایی از مرتبه چند ده میلی‌الکترون‌ولت از هم جدا شده‌اند، و به هر تراز الکترونی مجموعه‌ای از ترازهای انرژی چرخشی وابسته است. شکل ۲۰-۷ ساختار مرکب طیف انرژی مولکولی را نشان می‌دهد. در بحث بالا، این ترازها را کاملاً جدا از هم گرفته‌ایم، اما در واقع یک جفت‌شدگی ضعیف بین تمام آنها وجود دارد. برای مثال، حرکت چرخشی باعث یک واپیچش مرکزگریزی (مشابه با برآمدگی استوایی در چرخش زمین) می‌شود که عملاً روی ترازهای انرژی چرخشی تأثیر می‌گذارد، زیرا  $R_0$  تغییر می‌کند (مسئله ۲۰-۴). شکل  $E(R)$  برای هر تراز الکترونی تفاوت می‌کند، و از این رو نقش



خطوط طیفی (که تنها با قاعده‌های گزینش  $\Delta L = 1$  و  $\Delta n_v = 1$  ساده شده است) واقعاً پیچیده است. از تقریب بی‌دررو که در اینجا به‌کار بردیم فراتر نخواهیم رفت. راهکار بورن-اینهایمر روش منظمی برای بهتر کردن تقریبها فراهم می‌آورد، اما این روش فراتر از اهداف این کتاب است.

## مسائل

۱-۲۰ در HCl تعدادی خط جذبی با اعداد موج  $۸۳۰۰۳$ ،  $۱۰۳۷۳$ ،  $۱۲۴۳۰$ ،  $۱۴۵۰۳$ ،  $۱۶۵۵۱$ ،  $۱۸۵۸۶$  (برحسب  $\text{cm}^{-1}$ ) مشاهده شده‌اند. این خطها گذارهای ارتعاشی هستند یا چرخشی؟ اگر ارتعاشی هستند، بسامد مشخصه را تعیین کنید. اگر چرخشی هستند، به چه مقادیری از  $J$  مربوط می‌شوند؟ در این مورد، گشتاور لختی HCl را به‌دست آورید، و فاصله بین هسته‌ها را برآورد کنید. (در تابش، اعداد کوانتومی به‌اندازه یک واحد تغییر می‌کنند).

۲-۲۰ گازی از مولکولهای HCl در دمای  $300\text{K}$  است. نسبت تعداد مولکولها در حالت  $J = 10$  به تعداد مولکولها در حالت  $J = 0$  را به‌دست آورید.

۳-۲۰ بسامد ارتعاش مولکول CO در پایینترین حالت برابر است با  $2 \times 10^{12} \text{Hz}$ .  $\nu_0$  طول موج تابشی ناشی از پایینترین برانگیختگی ارتعاشی را تعیین کنید. اگر دما  $300\text{K}$  باشد، احتمال اینکه CO در اولین حالت برانگیخته ارتعاشی باشد نسبت به احتمال اینکه در حالت پایه ارتعاشی باشد چقدر است؟

۴-۲۰ انرژی ارتعاشی و چرخشی یک مولکول را در تقریب زیر در نظر بگیرید

$$E_J(R) = \frac{1}{2} m \omega^2 (R - R_0)^2 + \frac{J(J+1)\hbar^2}{2mR^2}$$

مکانی را که در آن انرژی کمینه است به‌دست آورید. اگر گشتاور لختی این مولکول را با استفاده از فاصله میان-هسته‌ای جدید محاسبه کنیم، نشان دهید انرژی چرخشی را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$E_J = AJ(J+1) + B[J(J+1)]^2 + \dots$$

ضرایب  $A$  و  $B$  را تعیین کنید ( $B$  معرف تأثیر واپیچش مرکزگریزی است).

## مراجع

این فصل تا اندازه زیادی براساس بحث مولکولها در کتاب زیر نوشته شده است

G Baym, *Lectures on Quantum Mechanics*, W A Benjamin. New York, 1969.

خواننده علاقه‌مند می‌تواند برای اطلاعات بیشتر به کتابهای زیر مراجعه کند

M Karplus and R N Porter, *Atoms and Molecules*, W A Benjamin New York, 1970.

M W Hanna, *Quantum Mechanics in Chemistry*, W A Benjamin, New York, 1969.

U Fano and L Fano, *Physics of Atoms and Molecules*, Chicago University Press, Chicago, 1972.

G W King, *Spectroscopy and Molecular Structure*, Holt, Rinehart & Winston, New York, 1964.

البته دهها کتاب درباره شیمی کوانتومی، ساختار مولکولی و طیف‌نمایی مولکولی وجود دارند، و کتابهای بالا صرفاً آنهایی هستند که مؤلف می‌شناسد. برای مراجع مناسبتر، بهتر است با شیمی-فیزیکدانها مشورت کنید.

## تابش اتمی

در مطالعه طیفها، یعنی مطالعه گذارهای بین ترازهای اتمی که با گسیل یا جذب تابش همراه است، با برهم‌کنش بین اتمها و میدان الکترومغناطیسی سروکار داریم. چون میدان تابش نوسان می‌کند وابسته به زمان است. بنابراین، لازم است اثر اختلالهای وابسته به زمان را بررسی کنیم.

### نظریه اختلال وابسته به زمان

مسئله این است که با داشتن مجموعه کامل جوابهای معادله

$$H_0 \phi_n = E_n^0 \phi_n \quad (۱-۲۱)$$

$\psi(t)$  را که در معادله زیر صدق می‌کند به دست آوریم

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = [H_0 + \lambda V(t)] \psi(t) \quad (۲-۲۱)$$

راهکار متعارف عبارت است از بسط دادن  $\psi(t)$  بر حسب مجموعه کامل حالتها:

$$\psi(t) = \sum_n c_n(t) e^{-iE_n^\circ t/\hbar} \phi_n \quad (3-21)$$

وابستگی زمانی مربوط به  $\phi_n$  به صراحت در این بسط گنجانده شده است، به طوری که اگر  $V(t) = 0$  آنگاه  $c_n(t)$ ها باید ثابت باشند. ضرایب بسط  $c_n(t)$  در مجموعه‌ای از معادله‌هایی صدق می‌کنند که می‌توان آنها را با قرارداد  $3-21$  در معادله شرودینگر وابسته به زمان  $2-21$  به دست آورد. در نتیجه داریم

$$\begin{aligned} \sum_n \left[ i\hbar \frac{dc_n(t)}{dt} + E_n^\circ c_n(t) \right] e^{-iE_n^\circ t/\hbar} \phi_n &= H\psi(t) \\ &= \sum_n [E_n^\circ + \lambda V(t)] c_n(t) e^{-iE_n^\circ t/\hbar} \phi_n \end{aligned}$$

یا

$$i\hbar \sum_n \frac{dc_n(t)}{dt} e^{-iE_n^\circ t/\hbar} \phi_n = \lambda \sum_n V(t) c_n(t) e^{-iE_n^\circ t/\hbar} \phi_n \quad (4-21)$$

از ضرب زده‌ای با  $\phi_m$  و با استفاده از راست‌هنجاری  $\phi_m$ ، یعنی

$$\langle \phi_m | \phi_n \rangle = \delta_{mn} \quad (5-21)$$

پس از حذف عامل  $e^{-iE_m^\circ t/\hbar}$  به مجموعه معادله‌های زیر می‌رسیم

$$i\hbar \frac{dc_m(t)}{dt} = \lambda \sum_n c_n(t) e^{i(E_m^\circ - E_n^\circ)t/\hbar} \langle \phi_m | V(t) | \phi_n \rangle \quad (6-21)$$

این معادله‌ها را تا مرتبه اول بر حسب پارامتر  $\lambda$  حل خواهیم کرد. به عنوان یک شرط اولیه در  $t = 0$ ، دستگاه را در یک حالت خاص  $\phi_k$  می‌گیریم، و در نتیجه  $\psi(0) = \phi_k$ ، یعنی

$$c_n(0) = \delta_{nk} \quad (7-21)$$

گاهی حالت اولیه در گذشته دور مشخص می‌شود. در این مورد،  $7-21$  به صورت زیر درمی‌آید

$$\lim_{t_0 \rightarrow -\infty} c_n(t_0) = \delta_{nk}$$

چون هر انحرافی از این مقادیر در زمانهای بعد به  $\lambda$  بستگی دارد، برای یک محاسبه مرتبه اول می توان ۷-۲۱ را در طرف راست ۶-۲۱ قرار داد. در نتیجه معادله دیفرانسیل زیر (با  $m \neq k$ ) به دست می آید

$$i\hbar \frac{dc_m(t)}{dt} = \lambda e^{i(E_m^{\circ} - E_k^{\circ})t/\hbar} \langle \phi_m | V(t) | \phi_k \rangle \quad (۸-۲۱)$$

که به آسانی حل می شود:

$$c_m(t) = \frac{\lambda}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i(E_m^{\circ} - E_k^{\circ})t'/\hbar} \langle \phi_m | V(t') | \phi_k \rangle \quad (۹-۲۱)$$

احتمال اینکه در زمان بعدی  $t$  حالت  $\psi(t)$  یک ویژه حالت  $H_0$  با انرژی  $E_n^{\circ}$ ، یعنی  $\phi_n$ ، باشد بنابه قضیه بسط برابر است با

$$P_n(t) = |\langle \phi_n | \psi(t) \rangle|^2 = |c_n(t)|^2 \quad (۱۰-۲۱)$$

این نتیجه کلی را تنها در صورتی می توان مشخص تر کرد که  $V(t)$  معلوم باشد.

مثال: یک اتم هیدروژن در حالت پایه در میدان الکتریکی زیر که قطع و وصل می شود قرار دارد

$$\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0 e^{-t^2/\tau^2}$$

احتمال این را به دست آورید که اتم هیدروژن پس از یک مدت طولانی ( $t \gg \tau$ ) در حالت  $m=0, l=1, n=2$  باشد.

حل: از ۱۶-۳۲ می بینیم که اختلال به صورت زیر است

$$\lambda V(t) = eE_0 z e^{-t^2/\tau^2}$$

چون  $t \gg \tau$ ، می توان حدود بالا و پایین انتگرال زمانی در ۹-۲۱ را به ترتیب  $\infty$  و  $-\infty$  گرفت. بنابراین

$$\begin{aligned} c_{210}(\infty) &= \frac{eE_0}{i\hbar} \langle \phi_{210} | z | \phi_{100} \rangle \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{i(E_{210} - E_{100})t'/\hbar} e^{-t'^2/\tau^2} \\ &= \frac{eE_0}{i\hbar} \langle \phi_{210} | z | \phi_{100} \rangle \tau \sqrt{\pi} e^{-\omega^2 \tau^2/4} \end{aligned}$$

که در آن کمیت  $\omega = (E_{\tau_{10}} - E_{100})/\hbar$  برابر است با بسامد زاویه‌ای فوتونی که در گذار  $(1, 0, 0) \rightarrow (2, 1, 0)$  گسیل می‌شود. احتمال عبارت است از مجذور قدرمطلق نتیجه بالا:

$$P = \frac{e^{\gamma} E_0^{\gamma} \tau^{\gamma} \pi}{\hbar^{\gamma}} |\langle \phi_{\tau_{10}} | z | \phi_{100} \rangle|^{\gamma} e^{-\omega^{\gamma} \tau^{\gamma} / \gamma}$$

توجه کنید که به‌ازای  $\tau \rightarrow \infty$  داریم  $P \rightarrow 0$ . وقتی میدان الکتریکی به آرامی برقرار شود، احتمال گذار به صفر میل می‌کند، یعنی اتم خود را به‌طور بی‌دررو با میدان الکتریکی برقرار شده سازگار می‌کند، بدون اینکه برای انجام دادن گذار "تکان" بخورد.

## تغییر زمانی هماهنگ پتانسیل

در بسیاری از مثالها، وابستگی زمانی پتانسیل به صورت زیر است

$$V(t) = V e^{-i\omega t} + V^{\dagger} e^{i\omega t} \quad (11-21)$$

که در آن  $V$  و  $V^{\dagger}$  عملگرهایی هستند که وابستگی صریح به زمان ندارند. در این مورد،

$$c_m(t) = \frac{\lambda}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega_{mk} t'} [e^{-i\omega t'} \langle \phi_m | V | \phi_k \rangle + e^{i\omega t'} \langle \phi_m | V^{\dagger} | \phi_k \rangle] \quad (12-21)$$

که در آن  $\omega_{mk} = (E_m^0 - E_k^0)/\hbar$ . در اکثر موارد با  $t \rightarrow \infty$  سروکار داریم. انتگرالهای زمانی را محاسبه می‌کنیم:

$$\int_0^t dt' e^{i(\omega_{mk} - \omega)t'} = \frac{e^{i(\omega_{mk} - \omega)t} - 1}{i(\omega_{mk} - \omega)} = e^{i(\omega_{mk} - \omega)t/2} \frac{\sin(\omega_{mk} - \omega)t/2}{(\omega_{mk} - \omega)/2} \quad (13-21)$$

انتگرال دوم را می‌توان با تعویض  $\omega \rightarrow -\omega$  به دست آورد. اکنون باید کمیت زیر را محاسبه کنیم

$$\begin{aligned} & |e^{i(\omega_{mk} - \omega)t/2} \frac{\sin(\omega_{mk} - \omega)t/2}{(\omega_{mk} - \omega)/2} \langle \phi_m | V | \phi_k \rangle \\ & + e^{i(\omega_{mk} - \omega)t/2} \frac{\sin(\omega_{mk} + \omega)t/2}{(\omega_{mk} + \omega)/2} \langle \phi_m | V^{\dagger} | \phi_k \rangle|^2 \end{aligned} \quad (14-21)$$

از محتوای این کمیت می‌توان استنباط کرد که تنها وقتی  $\omega = \pm \omega_{mk}$  جمله‌ها مهم خواهند بود. سه جمله داریم: یکی از آنها عبارت است از

$$\left( \frac{\sin(\omega_{mk} - \omega)t/2}{(\omega_{mk} - \omega)/2} \right)^2 |\langle \phi_m | V | \phi_k \rangle|^2 \quad (15-21)$$

و جمله دوم برابر است با جمله بالا که در آن  $\omega \rightarrow -\omega$ ؛ جمله سوم دارای وابستگی زمانی به صورت زیر است

$$e^{i\omega t} \frac{\sin(\omega_{mk} - \omega)t/2}{(\omega_{mk} - \omega)/2} \frac{\sin(\omega_{mk} + \omega)t/2}{(\omega_{mk} + \omega)/2} + \text{همیوگ مختلط} \quad (۱۶-۲۱)$$

با استفاده از یک قضیه ریاضی که لم ریمن- لیبگ نامیده می شود، می توان نشان داد وقتی  $t \rightarrow \infty$  آنگاه  $t^n \sin \alpha t$  سریعتر از هر توان  $t$  به صفر میل می کند، و همچنین است برای  $t^n \cos \alpha t$ . وقتی این نتیجه را برای جمله های ۱۶-۲۱ به کار ببریم، می بینیم تنها یک جمله مستقل از  $t$  باقی می ماند (مسئله ۹-۲۱)، اما این جمله نسبت به جمله هایی مانند آنچه در ۱۵-۲۱ ظاهر می شوند و چنانکه نشان خواهیم داد به طور خطی با  $t$  افزایش می یابند قابل چشمپوشی است. این جمله ها به صورت زیر هستند

$$F(t) = \frac{4}{\Delta^2} \sin^2 \frac{t\Delta}{2} \quad (۱۷-۲۱)$$

که در آن

$$\Delta = \frac{E_m^0 - E_k^0 \mp h\omega}{\hbar} \quad (۱۸-۲۱)$$

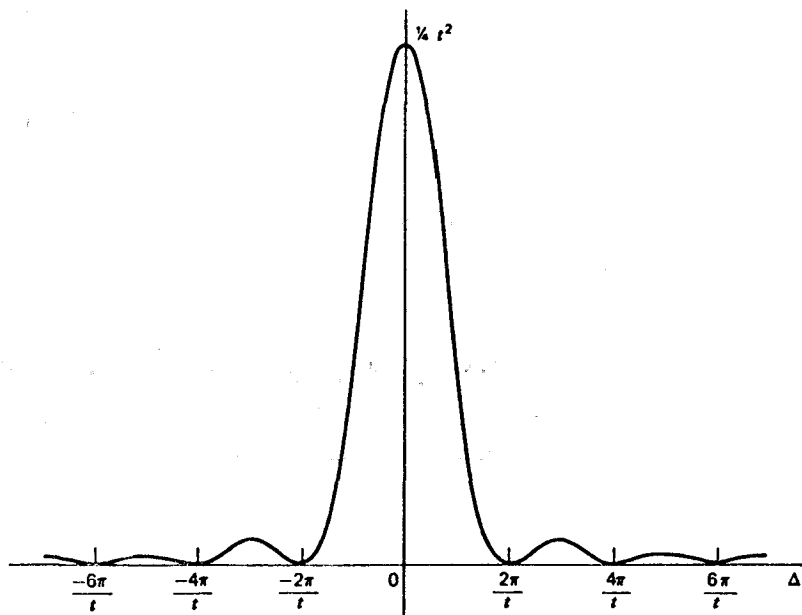
شکل ۱۷-۲۱ رفتار این تابع را نشان می دهد. به ازای مقادیر بزرگ  $t$ ، این تابع در  $\Delta = 0$  یک قله تیز دارد، و دور از  $\Delta = 0$  به سرعت نوسان می کند. این نوع رفتار را به تابع دلتا نسبت می دهیم. در واقع، اگر  $f(\Delta)$  تابع همواری از  $\Delta$  باشد، به ازای مقادیر بزرگ  $t$  داریم

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} f(\Delta) \frac{4}{\Delta^2} \sin^2 \frac{t\Delta}{2} d\Delta &\approx f(0) \int_{-\infty}^{\infty} d\Delta \frac{4}{\Delta^2} \sin^2 \frac{t\Delta}{2} \\ &= 2\pi t f(0) \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{1}{y^2} \sin^2 y = 2\pi t f(0) \end{aligned} \quad (۱۹-۲۱)$$

یعنی به ازای مقادیر بزرگ  $t$ ،

$$\frac{4}{\Delta^2} \sin^2 \frac{t\Delta}{2} \rightarrow 2\pi t \delta(\Delta) = 2\pi \hbar t \delta(E_m^0 - E_k^0 \mp h\omega) \quad (۲۰-۲۱)$$

بنابراین، احتمال گذار در ۱۴-۲۱ به طور خطی با زمان زیاد می شود، و جمله تداخلی که مستقل از  $t$  است در زمانهای طولانی اهمیت کمتری می یابد. بدین ترتیب، برای احتمال گذار در واحد زمان



شکل ۱-۲۱ نمودار تابع  $\frac{1}{2} \sin^2 t \Delta / \Delta^2$  بر حسب  $\Delta$ .

به دست می آوریم

$$\Gamma_{k \rightarrow m} = \frac{\gamma \pi}{\hbar} |\langle \phi_m | V | \phi_k \rangle|^2 \delta(E_m^{\circ} - E_k^{\circ} - \hbar \omega) \quad (21-21)$$

$$+ \frac{\gamma \pi}{\hbar} |\langle \phi_m | V^{\dagger} | \phi_k \rangle|^2 \delta(E_m^{\circ} - E_k^{\circ} + \hbar \omega)$$

چون  $E_m^{\circ} - E_k^{\circ}$  ثابت است، تنها یکی از دو جمله می تواند به ازای یک مقدار ثابت  $\omega$  مؤثر باشد. توابع دلتا تضمین می کنند که اگر  $E_k^{\circ} > E_m^{\circ}$ ، یعنی اگر اتم گذاری از یک حالت انرژی بیشتر به یک حالت انرژی کمتر داشته باشد، آنگاه تنها جمله دوم مؤثر خواهد بود، و این تنها به شرطی است که  $\hbar \omega = E_k^{\circ} - E_m^{\circ}$ . اگر جمله پتانسیل مربوط در ۱۱-۲۱ به صورت زیر بود

$$\lambda V(t) = \int_0^{\infty} d\omega' V(\omega') e^{-i\omega' t} + \int_0^{\infty} d\omega' V^{\dagger}(\omega') e^{i\omega' t}$$

آنگاه تابع دلتا جمله دوم را، که برای آن  $\hbar \omega' = E_k^{\circ} - E_m^{\circ}$  برابر است با  $\Delta E = E_k^{\circ} - E_m^{\circ}$ ، انتخاب می کرد.



معادله ۶-۶۷ با  $A = H$  نشان می دهد که

$$\left\langle \frac{dH}{dt} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial H}{\partial t} \right\rangle \quad (22-21)$$

و در نتیجه با پتانسیل وابسته به زمان، انرژی یک ثابت حرکت نیست. در اینجا با صراحت بیشتری می بینیم که پتانسیل وابسته به زمان چه مقدار انرژی می تواند جذب یا گسیل کند.

### جفت شدگی آنها به میدان الکترومغناطیسی

هامیلتونی توصیف کننده برهم کنش الکترون در پتانسیل استاتیک  $V(r)$  با یک میدان الکترومغناطیسی که با پتانسیل برداری  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  توصیف می شود، چنانکه در فصل ۱۳ دیدیم، به صورت زیر است

$$H = \frac{[\mathbf{p} + (e/c)\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)]^2}{2m} + V(r) \quad (23-21)$$

بنابراین، با

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r) \quad (24-21)$$

نتیجه می گیریم که

$$\lambda V(t) = \frac{e}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{p} \quad (25-21)$$

در به دست آوردن رابطه بالا پیمانه را به گونه ای مشخص کرده ایم که

$$\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (26-21)$$

در این شرایط،  $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ ، و جمله درجه دوم برحسب  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  را حذف کرده ایم. اگر بار الکترون  $e$  را به عنوان پارامتر کوچکی  $\lambda$  در نظر بگیریم، جمله  $\mathbf{A}^2$  یک جمله مرتبه دوم خواهد بود. خواهیم دید که جمله  $\mathbf{A}^2$  در پراکندگی نور توسط اتم و در گذار همراه با گسیل دو فوتون مؤثر است، اما در گذار همراه با گسیل (یا جذب) یک فوتون تأثیری ندارد. در احتمال گذار دو فوتونی عامل  $(e^2)^2$  دخیل است، در حالی که احتمال گذار تک فوتونی متناسب با  $e^2$  است. با یادآوری اینکه عدد بدون بعد مناسبی که شامل  $e^2$  باشد عبارت است از  $1/137$ ،  $\alpha = e^2/\hbar c \cong 1/137$ ، توجه به گذارهایی که با گسیل تنها یک فوتون همراه هستند موجه است.

برای توجیه واقعی ارتباط هر  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  با گسیل یا جذب یک تک فوتون — به طوری که توانهای بالاتر  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  وجود فوتونهای بیشتری را ایجاد کند — باید میدان الکترومغناطیسی را به زبان مکانیک کوانتومی بیان کرد، یعنی میدان در هر نقطه  $\mathbf{r}$  را عملگر در نظر گرفت. این کار اصولاً چندان پیچیده نیست، اما خارج از اهداف این کتاب است. بنابراین، حکمهای زیر را بدون استدلال می‌پذیریم.

اگر بنویسیم

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_*^*(\mathbf{r}) e^{i\omega t} + \mathbf{A}_*(\mathbf{r}) e^{-i\omega t} \quad (27-21)$$

آنگاه در گسیل فوتون تنها جمله اول، با وابستگی زمانی  $e^{i\omega t}$ ، را باید در  $\lambda V(t)$  دخالت داد، در حالی که در جذب فوتون فقط جمله دوم، با وابستگی زمانی  $e^{-i\omega t}$ ، ظاهر می‌شود. این پیامدی است از ارتباط کلی  $\mathbf{A}_*^*(\mathbf{r})$  با ایجاد فوتون و  $\mathbf{A}_*(\mathbf{r})$  با نابودی فوتون، و وابستگی زمانی دقیقاً همان است که باید از نوسانگر هماهنگ  $67-7$  انتظار داشت. شباهت با مسئله نوسانگر هماهنگ اتفاقی نیست، زیرا در کوانتس میدان الکترومغناطیسی آنچه انجام می‌شود تجزیه مد بهنجار است که بنابر آن درمی‌یابیم میدان واقعاً مجموعه‌ای از نوسانگرهای هماهنگ ساده است؛ و اینها نیز کوانتیده هستند. "عدد اشغال"  $n$ ، که نشان بردار حالت نوسانگر هماهنگ است، را می‌توان به تعداد فوتونها مربوط کرد، و در نتیجه  $\mathbf{A}_*^*$  تعداد فوتونها را یکی زیاد می‌کند و  $\mathbf{A}_*$  تعداد فوتونها را یکی کم می‌کند.

در توصیف کمی‌تر  $\mathbf{A}_*^*(\mathbf{r})$  و  $\mathbf{A}_*(\mathbf{r})$ ، خوشبختانه به ابزارهای کامل الکترودینامیک کوانتومی نیازی نیست. بنابراین می‌توان با استدلالهای مبتنی بر اصل تطابق این کمیتها را به دست آورد، و سپس تنها تغییرات کوانتوم مکانیکی را منظور کرد. میدان الکترومغناطیسی در نقاط دور از چشمه رفتار فضایی بسیار ساده‌ای دارد. با جاگذاری  $27-21$  در  $13-14$ ، به دست می‌آوریم

$$-\nabla^2 \mathbf{A}_*(\mathbf{r}) - \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{A}_*(\mathbf{r}) = 0 \quad (28-21)$$

که جواب آن به صورت زیر است

$$\mathbf{A}_*(\mathbf{r}) = \mathbf{A}_* e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (29-21)$$

که در آن

$$\mathbf{k}^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \quad (30-21)$$

انتخاب پیمانه ۲۱-۲۶ ایجاب می‌کند که

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_0 = 0 \quad (31-21)$$

میدانهای الکتریکی و مغناطیسی مربوط به این پتانسیل برداری عبارت‌اند از

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = \frac{i\omega}{c} \mathbf{A}_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + \text{همیوچ مختلط} \\ \mathbf{B} &= \nabla \times \mathbf{A} = i\mathbf{k} \times \mathbf{A}_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + \text{همیوچ مختلط} \end{aligned} \quad (32-21)$$

چگالی انرژی این میدان الکترومغناطیسی با رابطه زیر داده می‌شود

$$\frac{1}{8\pi} (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2) = \frac{1}{8\pi} \left[ 2 \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{A}_0^* + 2(\mathbf{k} \times \mathbf{A}_0) \cdot (\mathbf{k} \times \mathbf{A}_0^*) + \text{جمله‌های نوسانی} \right] \quad (33-21)$$

اگر نسبت به زمان میانگین بگیریم، که در نتیجه جمله‌های نوسانی حذف می‌شوند، و از این واقعیت استفاده کنیم که با توجه به ۲۱-۳۱

$$(\mathbf{k} \times \mathbf{A}_0) \cdot (\mathbf{k} \times \mathbf{A}_0^*) = k^2 \mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{A}_0^* \quad (34-21)$$

و همچنین  $k^2 = \omega^2/c^2$ ، به دست می‌آوریم

$$\frac{1}{8\pi} (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2) = \frac{\omega^2}{4\pi c^2} \mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{A}_0^* \quad (35-21)$$

اگر دستگاه در جعبه‌ای به حجم  $V$  محبوس باشد، انرژی کل در میدان الکترومغناطیسی برابر است با

$$\int d^3r \frac{1}{8\pi} (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2) = \frac{\omega^2 V}{4\pi c^2} |\mathbf{A}_0|^2 \quad (36-21)$$

با فرض اینکه این انرژی توسط  $N$  فوتون، هر یک با انرژی  $\hbar\omega$  حمل می‌شود، داریم

$$\frac{\omega^2 V}{4\pi c^2} |\mathbf{A}_0|^2 = N\hbar\omega \quad (37-21)$$

جهت  $\mathbf{A}_0$  را قطبش میدان الکتریکی. تعیین می‌کند، و آن را با بردار یکه  $\epsilon$  نشان می‌دهیم. این بردار یکه در رابطه‌های زیر صدق می‌کند

$$\epsilon \cdot \epsilon = 1 \quad (38-21)$$

$$\epsilon \cdot \mathbf{k} = 0$$

بنابراین، به دست می‌آوریم

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \left( \frac{2\pi c^2 N \hbar}{\omega V} \right)^{1/2} \epsilon e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad (39-21)$$

تغییر کوانتوم-الکترودینامیکی به صورت زیر است: برای اینکه ذرهٔ باردار یک کوانتوم نور از حالت اولیه‌ای که  $N$  فوتون با بسامد زاویه‌ای  $\omega$  دارد جذب کند، می‌نویسیم

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \left( \frac{2\pi c^2 N \hbar}{\omega V} \right)^{1/2} \epsilon e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad (40-21)$$

و برای گسیل یک کوانتوم نور توسط یک ذرهٔ باردار به یک حالت نهایی با  $N + 1$  کوانتوم، یعنی از حالت اولیه‌ای با  $N$  کوانتوم با بسامد زاویه‌ای  $\omega$ ، می‌نویسیم

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \left[ \frac{2\pi c^2 (N + 1) \hbar}{\omega V} \right]^{1/2} \epsilon e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad (41-21)$$

در نتیجه، برای گسیل یک فوتون با بسامد  $\omega$  از حالتی که هیچ فوتونی ندارد، بنابه ۲۱-۲۵ به دست می‌آوریم

$$\lambda V(t) = \frac{e}{mc} \left( \frac{2\pi c^2 \hbar}{\omega V} \right)^{1/2} \epsilon \cdot \mathbf{p} e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad (42-21)$$

اکنون آهنگ گذار در واحد زمان ۲۱-۲۱ را در نظر می‌گیریم و فرض می‌کنیم  $E_k^\circ > E_m^\circ$ ، یعنی گذار مورد نظر به گسیل یک فوتون با انرژی  $\hbar\omega$  مربوط می‌شود. آهنگ گذار به صورت زیر است

$$\Gamma_{k-m} = 2\pi \hbar \frac{2\pi e^2}{m^2 \hbar \omega V} |\langle \phi_m | e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \epsilon \cdot \mathbf{p} | \phi_k \rangle|^2 \delta(E_k^\circ - E_m^\circ - \hbar\omega) \quad (43-21)$$

در این وضعیت، خواننده بدون شک احساس بی‌اعتمادی می‌کند. عملیاتی که به ۲۱-۲۱ منجر شدند مسلماً سراسر نیستند. اولاً، در آنها مفاهیم مبهمی مانند "مقادیر بزرگ  $t$ " دخیل‌اند که نمی‌توان آنها را چندان جدی گرفت، زیرا احتمال‌گذاری که به‌طور خطی با زمان زیاد می‌شود دیر یا زود از ۱ می‌گذرد. ثانیاً، به یک فرمول بی‌معنی می‌رسیم که بنا به آن یک کمیت کاملاً منطقی مانند آهنگ گذار با یک تابع دلتا متناسب است. بحث رضایت‌بخش‌تری را می‌توانید در مبحث ویژه طول عمر، پهنای خط و تشدید ببینید. در اینجا تنها نشان می‌دهیم که ۲۱-۲۳ اگر به‌صورت مناسب به‌کار رود درست است.

بدین منظور، متذکر می‌شویم که  $\Gamma_{k \rightarrow m}$  در واقع احتمال گذار اتم در واحد زمان از حالت  $\phi_k$  به حالت  $\phi_m$  همراه با گسیل یک فوتون با انرژی  $\hbar\omega$  است. تابع دلتا، با وجود ناخوشایند بودنش، می‌گوید که انرژی باید پایسته باشد، یعنی

$$\hbar\omega = E_k^{\circ} - E_m^{\circ} \quad (۴۴-۲۱)$$

در واقع روی تابع دلتا انتگرال گرفته می‌شود، زیرا انرژی فوتون  $\hbar\omega$  به‌تنهایی حالت فوتون را مشخص نمی‌کند. فوتون به‌طور کلی در یک بازه تکانه  $(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \Delta\mathbf{k})$  در حوالی  $|\mathbf{k}| = \omega/c$  آشکارسازی می‌شود، و آهنگ‌گذاری که اندازه‌گیری می‌شود عملاً به‌صورت زیر است

$$R_{k \rightarrow m} = \sum_{\Delta\mathbf{k}} \Gamma_{k \rightarrow m} \quad (۴۵-۲۱)$$

که در آن روی تمام حالت‌های ممکن فوتون در این بازه جمع زده می‌شود. توجه کنید که حالت‌های نهایی مختلف در بازه  $\Delta\mathbf{k}$  اصولاً تمایز پذیرند، و در نتیجه این احتمالها هستند که جمع زده می‌شوند. خواهیم دید که مجموع ۲۱-۴۵ کاملاً معین است، زیرا در واقع شامل انتگرال روی یک تابع دلتا و یک تابع هموار است. این جمع را در بخش بعد محاسبه می‌کنیم.

## فضای فاز

اکنون تعداد حالت‌های فوتون در بازه تکانه  $(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \Delta\mathbf{k})$ ، یعنی چگالی حالت‌های فوتون، را محاسبه می‌کنیم. برای این منظور، پتانسیل برداری  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  را به‌صورت زیر می‌نویسیم

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \mathbf{a} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + \text{همیوگ مختلط} \quad (۴۶-۲۱)$$

که در آن  $V$  حجم محفظه‌ای است که محاسبه در آن انجام می‌شود. این "جعبه" صرفاً وسیله‌ای است برای رهایی از زحمت کار با بسته‌های موج برای ذرات آزاد (در اینجا فوتونها) — به فصل ۴

مراجعه کنید). شکل آن و شرایط مرزی را می‌توان به دلخواه انتخاب کرد، اما جعبه باید بزرگ باشد. در پایان، حد  $V \rightarrow \infty$  را می‌گیریم. بهتر است جعبه را مکعبی به ضلع  $L$  بگیریم، و شرایط مرزی دوره‌ای را تحمیل کنیم، یعنی

$$\mathbf{A}(x+L, y, z, t) = \mathbf{A}(x, y, z, t) \quad (۴۷-۲۱)$$

و غیره. در نتیجه، اعداد موج و تکانه‌ها، همچون مسئله ذره در جعبه یک‌بعدی، کوانتیده خواهند بود. رابطه ۴۶-۲۱ ایجاب می‌کند که

$$e^{ik_x L} = e^{ik_y L} = e^{ik_z L} = 1 \quad (۴۸-۲۱)$$

یعنی اعداد موج باید به صورت زیر باشند

$$k_x = \frac{\gamma\pi}{L} n_x, \quad k_y = \frac{\gamma\pi}{L} n_y, \quad k_z = \frac{\gamma\pi}{L} n_z \quad (۴۹-۲۱)$$

که در آنها  $n_x, n_y$  و  $n_z$  اعداد درست هستند. همچنین داریم

$$\Delta \mathbf{k} = \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z = \left( \frac{\gamma\pi}{L} \right)^3 \Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z \quad (۵۰-۲۱)$$

و

$$\omega = |\mathbf{k}|c = \frac{\gamma\pi c}{L} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)^{1/2} \quad (۵۱-۲۱)$$

در رابطه‌ای مانند ۴۵-۲۱، روی تمام مقادیر  $(n_x, n_y, n_z)$  در گستره‌ای که با ۲۱-۵۰ مشخص می‌شود و با قید تابع دلتا سازگار است جمع می‌زنیم. بنابراین،

$$R_{k \rightarrow m} = \sum_{\Delta \mathbf{k}} \Gamma_{k \rightarrow m} \quad (۵۲-۲۱)$$

در این فصل حجم  $V$  را بسیار بزرگ می‌گیریم، و در نتیجه حالتها بسیار چگال می‌شوند و جمع در ۲۱-۵۰ را می‌توان به انتگرال تبدیل کرد. در این مورد داریم

$$\begin{aligned} R_{k \rightarrow m} &= \int d^3 \mathbf{n} \Gamma_{k \rightarrow m} = \int \frac{L^3 d^3 \mathbf{k}}{(\gamma\pi)^3} \Gamma_{k \rightarrow m} \\ &= \int \frac{V d^3 \mathbf{p}}{(\gamma\pi \hbar)^3} \Gamma_{k \rightarrow m} \end{aligned} \quad (۵۳-۲۱)$$

در آخرین مرحله از رابطه  $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$  استفاده کرده ایم. انتگرال گیری روی حجمی در فضای تکانه صورت می گیرد که با آرایش تجربی مشخص می شود. اگر بنویسیم

$$d^3 \mathbf{p} = d\Omega_{\mathbf{p}} p^2 dp = d\Omega_{\mathbf{p}} \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 d\left(\frac{\omega}{c}\right) \hbar^3 \quad (54-21)$$

که در آن  $d\Omega_{\mathbf{p}}$  جزء زاویه فضایی است، می بینیم که روی تابع دلتایی که انرژی را پایسته می دارد انتگرال گرفته می شود، و نتیجه عبارت است از

$$R_{k \rightarrow m} = \int \frac{4\pi^2 e^2}{m^2 \omega V} |\langle \phi_m | e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{p} | \phi_k \rangle|^2 d\Omega_{\mathbf{p}} \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \\ \times \hbar^3 \frac{\omega^2}{c^2} \frac{d(\hbar\omega)}{\hbar} \delta(E_k^0 - E_m^0 - \hbar\omega) \quad (55-21)$$

$$= \int d\Omega_{\mathbf{p}} \frac{\alpha}{4\pi} \omega_{km} \left| \frac{1}{mc} \langle \phi_m | e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{p} | \phi_k \rangle \right|^2$$

که در آن

$$\omega_{km} = \frac{E_k^0 - E_m^0}{\hbar} \quad (56-21)$$

اگر دستگاه تجربی حالت های قطبش فوتون را از هم تمیز ندهد، محاسبه آهنگ باید شامل یک جمع روی این دو حالت نهایی مستقل باشد. به علاوه، اگر حالت های نهایی اتم واکن باشند این جمع باید شامل تمام آنها باشد. درباره این مورد در یک بخش دیگر بحث خواهیم کرد. فضای فاز

$$d^3 \mathbf{n} = \frac{V d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \quad (57-21)$$

تنها منحصر به فوتونها نیست. الکترون آزاد تابع موج تخت  $(1/\sqrt{V})e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar}$  توصیف می شود و دارای همان چگالی حالتها است. تنها تفاوت در این است که رابطه میان انرژی (که در تابع دلتا ظاهر می شود) و تکانه به جای اینکه  $E = pc$  باشد به صورت  $E = \mathbf{p}^2/2m$  [یا به صورت نسبیستی  $E = (\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4)^{1/2}$ ] است.

اگر چند ذره آزاد در حالت نهایی داشته باشیم، چگالی حالتها به صورت حاصلضرب زیر است

$$\prod_k \frac{V d^3 \mathbf{p}_k}{(2\pi\hbar)^3} \quad (58-21)$$

رابطه ۵۳-۲۱ در ترکیب با ۲۱-۲۱ به رابطه زیر تعمیم می‌یابد

$$R_{i \rightarrow j} = \frac{2\pi}{\hbar} \int_{\text{تکانه‌های مستقل}} \prod_k \frac{V d^3 \mathbf{p}_k}{(2\pi\hbar)^3} |M_{fi}|^2 \delta \left( E_f^\circ + \sum_k E_k - E_i^\circ \right) \quad (59-21)$$

که در آن  $M_{fi}$  عنصر ماتریس اختلال بین حالت‌های اولیه و نهایی دستگاه نامختل است. تابع دلتا باز هم پایستگی انرژی را نشان می‌دهد: انرژی که ذرات آزاد همراه خود می‌برند برابر است با تغییر انرژی دستگاه؛ و انتگرال روی تکانه‌های مستقل گرفته می‌شود. برای مثال، اگر دستگاه به سه ذره واپاشد، تنها دو تکانه مستقل وجود دارند، زیرا تکانه سوم از پایستگی انرژی تعیین می‌شود. اما توجه کنید که ضرب عاملها در ۵۸-۲۱ روی تمام ذرات در حالت نهایی انجام می‌شود، یعنی اگر  $n$  ذره در حالت نهایی وجود داشته باشند حاصلضرب شامل  $V^n$  خواهد بود. همچنین می‌توان ۵۹-۲۱ را به صورت یک انتگرال روی تمام تکانه‌ها، با یک تابع دلتا که متضمن بیان پایستگی تکانه است، نوشت. دلیل اینکه چنین تابع دلتایی در محاسبه ظاهر نمی‌شود این است که هسته اتم را در فضا ثابت گرفته‌ایم، که موجه است زیرا اتم از الکترونها بسیار سنگین‌تر است. در این شرایط، تکانه اتم یک متغیر دینامیکی نیست. در هر صورت، نتیجه کلی

$$R_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \int \prod_k \frac{V d^3 \mathbf{p}_k}{(2\pi\hbar)^3} \times |M_{fi}|^2 \delta \left( E_i^\circ - E_f^\circ - \sum E_k \right) \delta \left( \mathbf{p}_i - \mathbf{p}_f - \sum \mathbf{p}_k \right) \quad (60-21)$$

یک نتیجه اساسی است و می‌توان آن را به صورت زیر، که فرمی آن را قاعده طلایی نامیده است، خلاصه کرد

$$R_{i \rightarrow j} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{fi}|^2 \rho(E) \quad (61-21)$$

که در آن  $\rho(E)$  چگالی حالتها است.

توجه کنید که حجم جعبه همیشه حذف می‌شود. برای  $n$  ذره در حالت نهایی، یک  $V^n$  از چگالی حالتها (فضای فاز) و یک  $1/\sqrt{V}$  برای هر ذره آزاد در عنصر ماتریسی داریم، که از



تابع موج آنها

$$\prod_k \frac{e^{i\mathbf{p}_k \cdot \mathbf{r} / \hbar}}{\sqrt{V}} \quad (۶۲-۲۱)$$

ناشی می‌شود. تعداد این عاملها  $n$  است، و در نتیجه وابستگی مجذور عنصر ماتریس به  $V$  با  $V^n$  از فضای فاز حذف می‌شود. در آینده باز هم از قاعدهٔ طلایی استفاده خواهیم کرد، اما اکنون به محاسبهٔ عنصر ماتریس برای گذار تابشی می‌پردازیم.

### عنصر ماتریس و قاعده‌های گزینش

می‌خواهیم کمیت زیر را محاسبه کنیم

$$\langle \phi_m | e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{p} | \phi_k \rangle \quad (۶۳-۲۱)$$

ابتدا مرتبهٔ بزرگی آن را برآورد می‌کنیم. برای یک گذار اتمی نوعی داریم

$$\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{p} \sim |\mathbf{p}| \sim Zm c \alpha \quad (۶۴-۲۱)$$

باید نما را نیز برآورد کنیم، زیرا در اینجا یک عامل نوسانی داریم که می‌تواند نتیجه را به‌طور قابل ملاحظه‌ای تغییر دهد. با

$$r \sim \frac{\hbar}{mcZ\alpha} \quad (۶۵-۲۱)$$

و

$$|k| \sim \frac{\hbar\omega}{\hbar c} \sim \frac{\frac{1}{2}mc^2(Z\alpha)^2}{\hbar c} \sim \frac{mc}{2\hbar}(Z\alpha)^2 \quad (۶۶-۲۱)$$

به‌دست می‌آوریم

$$kr \sim \frac{1}{2}Z\alpha \quad (۶۷-۲۱)$$

در نتیجه، به ازای  $1 \ll Z\alpha$ ، مرتبه بزرگی عنصر ماتریس همان  $Zm\alpha$  است، و از این رو

$$\begin{aligned} R_{k-m} &\sim 2\alpha\omega(Z\alpha)^2 \sim \alpha(Z\alpha)^2 \frac{mc^2(Z\alpha)^2}{h} \\ &\sim \alpha(Z\alpha)^2 \frac{mc^2}{h} \sim 2 \times 10^{10} Z^2 s^{-1} \end{aligned} \quad (۶۸-۲۱)$$

چون در بسط

$$e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} (\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})^n \quad (۶۹-۲۱)$$

جمله‌های متوالی بنابه برآورد بالا به صورت  $Z\alpha$  کاهش می‌یابند محاسبه ساده می‌شود. بنابراین، تا مرتبه  $Z\alpha$  داریم

$$\langle \phi_m | e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{p} | \phi_k \rangle \simeq \langle \phi_m | \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{p} | \phi_k \rangle \quad (۷۰-۲۱)$$

این نتیجه را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \langle \phi_m | \mathbf{p} | \phi_k \rangle &= m\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \langle \phi_m | d\mathbf{r}/dt | \phi_k \rangle \\ &= \frac{im}{h} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \langle \phi_m | [H, \mathbf{r}] | \phi_k \rangle \\ &= im \frac{(E_m^0 - E_k^0)}{h} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \langle \phi_m | \mathbf{r} | \phi_k \rangle \\ &= im\omega\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \langle \phi_m | \mathbf{r} | \phi_k \rangle \end{aligned} \quad (۷۱-۲۱)$$

بدین ترتیب، با محاسبه عنصر ماتریس عملگر  $\mathbf{r}$  سروکار داریم، و این دلیلی است برای اینکه تقریب ۷۰-۲۱ را تقریب دوقطبی بنامیم. شایان تذکر است که در تقریب دوقطبی، اختلال ۲۵-۲۱، یعنی

$$\lambda V(t) = \frac{e}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{p}$$

را می‌توان با استفاده از ۳۲-۲۱ و ۷۱-۲۱ به صورت زیر نوشت

$$\lambda V(t) = e\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{r} \quad (۷۲-۲۱)$$

که در واقع انرژی پتانسیل برهم‌کنش یک دوقطبی با گشتاور  $\mathbf{d} = -e\mathbf{r}$  در میدان الکتریکی  $\mathbf{E}$  است.

اگر  $\phi_k$  یک حالت اولیه هیدروژنگونه باشد که با اعداد کوانتومی  $n_i$  و  $l_i$  و  $m_i$  مشخص می‌شود، و  $\phi_m$  حالت نهایی با اعداد کوانتومی  $n_f$  و  $l_f$  و  $m_f$  باشد، آنچه باید محاسبه کرد عبارت است از

$$\begin{aligned} \langle \phi_m | \mathbf{e} \cdot \mathbf{r} | \phi_k \rangle &= \int_0^\infty r^2 dr \int d\Omega R_{n_f l_f}^*(r) Y_{l_f m_f}^*(\theta, \phi) \mathbf{e} \cdot \mathbf{r} R_{n_i l_i}(r) Y_{l_i m_i}(\theta, \phi) \\ &= \int_0^\infty r^2 dr R_{n_f l_f}^*(r) r R_{n_i l_i}(r) \\ &\quad \times \int d\Omega Y_{l_f m_f}^*(\theta, \phi) \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{r}} Y_{l_i m_i}(\theta, \phi) \end{aligned} \quad (73-21)$$

در باره انتگرال شعاعی برای یک مورد خاص در بخش بعد بحث خواهیم کرد. در اینجا انتگرال زاویه‌ای را بررسی می‌کنیم. داریم

$$\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{r}} = \epsilon_x \sin \theta \cos \phi + \epsilon_y \sin \theta \sin \phi + \epsilon_z \cos \theta$$

با توجه به اینکه

$$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} Y_{1,0}(\theta, \phi) = \cos \theta \quad \sqrt{\frac{3}{4\pi}} Y_{1,\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \sin \theta e^{\pm i\phi} \quad (74-21)$$

به دست می‌آوریم

$$\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{r}} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \left( \epsilon_z Y_{1,0} + \frac{-\epsilon_x + i\epsilon_y}{\sqrt{2}} Y_{1,1} + \frac{\epsilon_x + i\epsilon_y}{\sqrt{2}} Y_{1,-1} \right) \quad (75-21)$$

بنابراین، انتگرال زاویه‌ای در ۷۳-۲۱ به صورت زیر درمی‌آید

$$\int d\Omega Y_{l_f m_f}^*(\theta, \phi) Y_{1,m}(\theta, \phi) Y_{l_i m_i}(\theta, \phi) \quad (76-21)$$

ابتدا روی زاویه سمتی انتگرال می‌گیریم:

$$\int_0^{2\pi} d\phi e^{-im_f \phi} e^{im \phi} e^{im_i \phi} = 2\pi \delta_{m, m_f - m_i} \quad (77-21)$$

بدین ترتیب، اولین قاعده گزینش به دست می‌آید:

$$m_f - m_i = m = 1, 0, -1 \quad (78-21)$$

این قاعده گزینشی است که در بحث اثر زیمان متذکر شدیم. مخصوصاً، اگر محور  $z$  را در راستای تکانه فوتون  $k$  بگیریم آنگاه شرط ۲۱-۳۸ ایجاب می‌کند که  $\epsilon_z = 0$  و در نتیجه  $m = \pm 1$  به دست می‌آید. بنابراین،

$$m_f - m_i = \pm 1 \quad (79-21)$$

به عنوان یک مورد خاص، متذکر می‌شویم که اگر حالت نهایی یک حالت پایه با  $l_f = m_f = 0$  باشد آنگاه  $m = -m_i$ . برای مثال، اگر  $m_i = 1$  آنگاه  $m = -1$  و در نتیجه بردار قطبش فوتون عبارت است از  $(\epsilon_x + i\epsilon_y)/\sqrt{2}$ . مضمون این نتیجه این است که اگر اتم در حالت اولیه با  $m_i = 1$  در راستای محور  $z$  قطبیده باشد، آنگاه در یک واپاشی به حالتی با تکانه زاویه‌ای صفر پایستگی مؤلفه  $z$  تکانه زاویه‌ای ایجاب می‌کند که فوتون حامل این مقدار باشد. بنابراین، اسپین فوتون باید در جهت مثبت محور  $z$  باشد، یعنی باید پیچیدگی مثبت  $(+1)$  داشته باشد، یا، معادل آن، باید قطبش دایره‌ای چپگرد داشته باشد. این درست همان چیزی است که جمله  $(\epsilon_x + i\epsilon_y)/\sqrt{2}$  نشان می‌دهد.

از انتگرال‌گیری روی  $\theta$  قاعده گزینش دیگری به دست می‌آید. ابتدا مورد خاص  $l_f = 0$  را در نظر می‌گیریم. چون  $Y_{0,0} = 1/\sqrt{4\pi}$ ، انتگرال‌گیری زاویه‌ای ۲۱-۷۶ به صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int d\Omega Y_{l,m}(\theta, \phi) Y_{l,m_i}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \delta_{l,1} \delta_{m_i, -m} \quad (80-21)$$

که نشان می‌دهد حالت اولیه باید دارای  $l_i = 1$  باشد. در هیدروژن، گذارهای غالب به حالت پایه عبارت‌اند از  $1s \rightarrow np$ .

به طور کلی، وقتی  $l_i$  و  $l_f$  صفر نیستند، باز هم یک قاعده گزینش به دست می‌آوریم. در به دست آوردن این قاعده، که فراتر از سطح اطلاعات ریاضی درباره توابع خاص است که در این کتاب فرض شده است، از قضیه جمع برای هماهنگی‌های کروی استفاده می‌شود که عبارت است از

$$Y_{l_1, m_1}(\theta, \phi) Y_{l_2, m_2}(\theta, \phi) = \sum_{L=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} C(L, m_1 + m_2; l_1, l_2, m_1, m_2) Y_{L, m_1+m_2}(\theta, \phi) \quad (81-21)$$

ضرایب  $C(L, m_1 + m_2; l_1, l_2, m_1, m_2)$  همان ضرایب کلبش-گوردان هستند که در ۱۵-۴۶ دیده می‌شوند. تکانه‌های زاویه‌ای ممکن در طرف راست درست همانهایی هستند که از

جمع تکانه‌های زاویه‌ای  $l_1$  و  $l_2$  می‌توان به دست آورد. با جاگذاری در ۲۱-۷۶ به نتیجه زیر می‌رسیم

$$\int d\Omega Y_{l_1 m_1}^*(\theta, \phi) \sum_{L=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} C(L, m+m_1, l_1, l_2, m, m_1) Y_{L, m+m_1}(\theta, \phi) = 0$$

مگر اینکه

$$l_f = l_i + 1, l_i, |l_i - 1| \quad (۲۱-۸۲)$$

از اینجا صورت کلی قاعده گزینش برای تابش دوقطبی الکتریکی به دست می‌آید:

$$\Delta l = 1, 0, -1 \quad (۲۱-۸۳)$$

که با این قید، چنانکه رابطه ۲۱-۸۰ به روشنی نشان می‌دهد، همراه است که گذارهای صفر-صفر روی نمی‌دهند. قید دیگری نیز وجود دارد که ناشی از پابستگی پاریته است. چون  $\mathbf{r}$  تحت انعکاس فرد است، یک قاعده گزینش اضافی برای گذارهای دوقطبی الکتریکی وجود دارد:

$$\text{حالت اتمی باید تغییر پاریته دهد} \quad (۲۱-۸۴)$$

چون پاریته از  $l^1 (-1)^l$  به دست می‌آید، این قاعده ایجاب می‌کند که مقدار  $l$  باید عملاً تغییر کند. بنابراین، برای مثال گذارهای  $2p \rightarrow 3p$  تا مرتبه  $Z\alpha$  مجاز نیستند. تا جایی که احتمال منحصر به جفت‌شدگی زیر باشد

$$\frac{e}{mc} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (۲۱-۸۵)$$

وابستگی به اسپین در آن وجود ندارد، و از این رو اسپینها نمی‌توانند در گذار تغییر جهت دهند. بنابراین، به یک قاعده گزینش اضافی می‌رسیم:

$$\Delta S = 0 \quad (۲۱-۸۶)$$

که قبلاً در بحث طیف هلیم متذکر شدیم. قاعده‌های گزینشی که در بالا بیان کردیم مطلق نیستند. قوانین پابستگی تکانه زاویه‌ای و پاریته (برای فرایندهای الکترومغناطیسی) مطلق هستند، اما ۲۱-۸۳ فقط تقریباً درست است. گذارهای

بین حالتها که در آنها  $l$  بیشتر از یک واحد تغییر می‌کند نمی‌توانند از طریق سازوکار دوقطبی الکتریکی روی دهند. این گذارها در صورتی انجام می‌شوند که عنصر ماتریس

$$\langle \phi_f | e^{-ik \cdot r} \mathbf{e} \cdot \mathbf{p} | \phi_i \rangle \quad (۸۷-۲۱)$$

مخالف صفر باشد. برای  $\Delta l = ۲$ ، توان اول  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$  سهمی مخالف صفر دارد. می‌توان نوشت

$$\begin{aligned} \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} \mathbf{e} \cdot \mathbf{p} &= \frac{1}{4} (\mathbf{e} \cdot \mathbf{p} \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + \mathbf{e} \cdot \mathbf{r} \mathbf{p} \cdot \mathbf{k}) + \frac{1}{4} (\mathbf{e} \cdot \mathbf{p} \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \mathbf{e} \cdot \mathbf{r} \mathbf{p} \cdot \mathbf{k}) \\ &= \frac{1}{4} (\mathbf{e} \cdot \mathbf{p} \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + \mathbf{e} \cdot \mathbf{r} \mathbf{p} \cdot \mathbf{k}) + \frac{1}{4} (\mathbf{k} \times \mathbf{e}) \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \quad (۸۸-۲۱) \end{aligned}$$

جمله اول را جمله چارقطبی الکتریکی می‌نامند، و جمله دوم را که به  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{B}$  مربوط است جمله دوقطبی مغناطیسی می‌نامند. برای این گذارها، که عنصر ماتریس آنها را  $Z\alpha$  بارکوچکتر از جمله اصلی برآورد کردیم، به ترتیب داریم  $\Delta l = ۲$  و  $\Delta l = ۰$ . چون عملگرهای رابطه ۸۸-۲۱ زوج هستند، بین حالت‌های اتمی تغییر پاریته نخواهیم داشت. برای مثال، گذارهای  $۱s \rightarrow ۳d$  نمی‌توانند از طریق سازوکار دوقطبی الکتریکی روی دهند اما با سازوکار چارقطبی الکتریکی مجاز هستند. در واقع، معلوم می‌شود که به احتمال زیاد حالت  $۳d$  ابتدا به حالت  $۲p$  افت می‌کند و سپس از حالت اخیر گذار مطلوب  $۱s \rightarrow ۲p$  صورت می‌گیرد، یعنی دو فوتون متوالی گسیل می‌شوند.

قاعده گزینش اسپین  $\Delta S = ۰$  نیز چندان خدشه‌ناپذیر نیست. علاوه بر جفت‌شدگی ۸۵-۲۱، جفت‌شدگی زیر، که در اثر نابهنجار زیمان بررسی شد، نیز وجود دارد

$$\lambda V(t) = \frac{g\mathbf{e}}{2mc} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \quad (۸۹-۲۱)$$

عنصر ماتریس برای جمله القاکننده گذار  $\Delta S \neq ۰$  را می‌توان از مقایسه آن با عنصر ماتریس دوقطبی الکتریکی برآورد کرد:

$$\frac{(eg/2mc)\hbar|\mathbf{k} \times \mathbf{e}|}{(2e/mc)|\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}|} \simeq \frac{\hbar|\mathbf{k}|}{|\mathbf{p}|} \simeq \frac{\hbar\omega}{|\mathbf{p}|c} \simeq \frac{mc^2(Z\alpha)^2}{mc^2(Z\alpha)} \simeq Z\alpha \quad (۹۰-۲۱)$$

و می‌بینیم که بازداشته می‌شود، درست مانند عنصر ماتریس دوقطبی مغناطیسی که شباهت صوری زیادی با آن دارد. به‌عنوان یک مثال از وضعیتی که در آن جفت‌شدگی ۸۹-۲۱ نقش مهمی دارد، فرایند هسته‌ای فروپاشی فوتونی دوترون را در نظر می‌گیریم

$$\gamma + d \rightarrow n + p \quad (۹۱-۲۱)$$

دوترون با تقریب بسیار خوب یک حالت  ${}^2S_1$  است. در گذار دو قطبی الکتریکی، دستگاه نهایی ( $n-p$ ) باید در حالت  ${}^2P$  باشد زیرا  $\Delta l = 1$  و  $\Delta S = 0$ . اما معلوم می‌شود که، درست بالاتر از آستانه واکنش، بعید است دو نوکلئون در یک حالت نسبی  $P$  باشند. به طور کلی، ذرات تنها به شرطی می‌توانند با احتمال محسوس در یک حالت نسبی تکانه زاویه‌ای  $L$  باشند که

$$|p|a \gtrsim hL \quad (92-21)$$

که در آن  $p$  تکانه نسبی و  $a$  اندازه دستگاه است. در مورد دوترون، وقتی انرژی  $\gamma$  کمتر از  $10 \text{ MeV}$  است، بعید است که دستگاه ( $n-p$ ) در یک حالت  $P$  باشد. اما جفت‌شدگی اضافی

$$-\frac{e}{2Mc}(g_p s_p + g_n s_n) \cdot \mathbf{B} \quad (93-21)$$

می‌تواند باعث گذار بین حالت  ${}^2S_1$  و حالت نامقید  ${}^3S_0$  شود. برهم‌کنش را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$-\frac{e}{2Mc} \left[ \frac{1}{2}(g_p + g_n)(s_p + s_n) + \frac{1}{2}(g_p - g_n)(s_p - s_n) \right] \cdot \mathbf{B} \quad (94-21)$$

جمله اول تحت تبادل  $n \leftrightarrow p$  متقارن است، و در نتیجه نمی‌تواند در گذار بین حالت اسپینی متقارن و حالت اسپینی پادمقارن سهمی داشته باشد، اما جمله دوم سهمی است. ضرایب در واقع بسیار بزرگ هستند، زیرا  $g_p \cong 5856$  و  $g_n = -381$ .

یک قاعده گزینش وجود دارد که خدشه‌ناپذیر است، و آن قاعده‌ای است که گذارهای صفر-صفر (مربوط به تکانه زاویه‌ای کل  $j = 0$ ) را در فرایندهای تک فوتونی ممنوع می‌کند. روش کلی اثبات مطلق بودن این قاعده گزینش به صورت زیر است: عنصر ماتریس، که یک کمیت نرده‌ای است باید به طور خطی شامل قطبش فوتون باشد، و از این رو باید به صورت  $\epsilon \cdot \mathbf{V}$  باشد که در آن  $\mathbf{V}$  برداری است که در مسئله وارد می‌شود. اگر حالت‌های اولیه و نهایی حالت‌های  $j = 0$  باشند، یعنی وابسته به هیچ راستایی نباشند، آنگاه تنها برداری که داریم تکانه فوتون  $\mathbf{k}$  است. اما  $\epsilon \cdot \mathbf{k} = 0$  و در نتیجه راهی برای ساختن عنصر ماتریس در دست نیست. بنابراین، چنین عنصری نباید وجود داشته باشد.<sup>۱</sup>

۱. رابطه  $\epsilon \cdot \mathbf{k} = 0$  مستقل از انتخاب پیمانه است، و بیان عرضی بودن میدان الکترومغناطیسی است. این نوع استدلالها "بنابر شمارش" در فیزیک ذرات بنیادی، که در آن برهم‌کنش واقعا شناخته نیست، فراوان به کار می‌رود.

گذار ۱s → ۲p

اکنون رابطه ۲۱-۷۳ را اختصاصاً برای گذار ۱s → ۲p بررسی می‌کنیم. باید انتگرال شعاعی را محاسبه کنیم:

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty dr r^2 R'_{1s}(r) R_{2p}(r) \\ &= \int_0^\infty dr r^2 \left[ 2 \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_0} \right] \left[ \frac{1}{\sqrt{24}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{5/2} r e^{-Zr/2a_0} \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^4 \int_0^\infty dr r^2 e^{-3Zr/2a_0} \quad (95-21) \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^4 \left( \frac{2a_0}{3Z} \right)^5 \int_0^\infty dx x^2 e^{-x} = \frac{24}{\sqrt{6}} \left( \frac{2}{3} \right)^5 Z^{-1} a_0 \end{aligned}$$

انتگرال زاویه‌ای به صورت زیر است

$$\begin{aligned} \int d\Omega Y_{1,0}^* \cdot \hat{r} Y_{1,m} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int d\Omega \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \left( \epsilon_z Y_{1,0} + \frac{-\epsilon_x + i\epsilon_y}{\sqrt{2}} Y_{1,1} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\epsilon_x + i\epsilon_y}{\sqrt{2}} Y_{1,-1} \right) Y_{1,m} \quad (96-21) \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left( \epsilon_z \delta_{m,0} + \frac{-\epsilon_x + i\epsilon_y}{\sqrt{2}} \delta_{m,-1} + \frac{\epsilon_x + i\epsilon_y}{\sqrt{2}} \delta_{m,1} \right) \end{aligned}$$

مجذور قدرمطلق حاصلضرب ۲۱-۹۵ و ۲۱-۹۶ عبارت است از

$$96 \left( \frac{2}{3} \right)^5 \left( \frac{a_0}{Z} \right)^4 \frac{1}{3} \left[ \delta_{m,0} \epsilon_z^2 + \frac{1}{2} (\delta_{m,1} + \delta_{m,-1}) (\epsilon_x^2 + \epsilon_y^2) \right] \quad (97-21)$$

و آهنگ گذار به‌ازای یک مقدار معین  $m$  برای اتم برانگیخته به صورت زیر است

$$\begin{aligned} R_{2p-1s} &= \int d\Omega_p \left( \frac{\omega}{2\pi} \right) \frac{\omega}{m^2 c^2} m^2 \omega^2 \frac{2^{15}}{3^{10}} \left( \frac{a_0}{Z} \right)^4 \\ &\quad \times \left[ \delta_{m,0} \epsilon_z^2 + \frac{1}{2} (\delta_{m,1} + \delta_{m,-1}) (\epsilon_x^2 + \epsilon_y^2) \right] \quad (98-21) \end{aligned}$$



که در آن کمیت

$$\begin{aligned}\omega &= \frac{1}{\hbar} \left[ \frac{1}{2} m c^2 (Z\alpha)^2 \left( 1 - \frac{1}{4} \right) \right] \\ &= \frac{3}{8} \frac{m c^2}{\hbar} (Z\alpha)^2\end{aligned}\quad (99-21)$$

بسامد تابش گسیل شده در گذار است.

انتگرال زاویه‌ای در ۹۸-۲۱ روی راستاهای فوتون گرفته می‌شود، و ساده نیست زیرا  $\epsilon$  مقید است که بر راستای نکانه فوتون عمود باشد. انتگرال‌گیری بسیار ساده خواهد بود اگر حالت اولیه  $p$  سمتگیری نداشته باشد، یعنی در سه حالت ممکن  $m = 1, 0, -1$  با احتمال برابر روی دهد. آنگاه آهنگ گذار به صورت زیر است

$$R_{\tau_{p-1s}} = \frac{1}{2} \sum_{m=-1}^1 R_{\tau_{p-1s}}(m) \quad (100-21)$$

چون

$$\sum_{m=-1}^1 [\delta_{m0} \epsilon_z^2 + \frac{1}{2} (\delta_{m1} + \delta_{m,-1}) (\epsilon_x^2 + \epsilon_y^2)] = \epsilon_x^2 + \epsilon_y^2 + \epsilon_z^2 = 1 \quad (101-21)$$

تابع زیر انتگرال مستقل از راستای فوتون می‌شود. نتیجه را باید در ۲ نیز ضرب کنیم، زیرا دو حالت قطبش ممکن برای فوتون داریم و هر دو را آشکارسازی می‌کنیم. بهتر است طرف راست رابطه ۵۵-۲۱ را به صورت دقیقتر زیر بنویسیم

$$\int d\Omega_{\mathbf{p}} \frac{\alpha}{2\pi} \frac{\omega_{km}}{m^2 c^2} \sum_{\lambda=1}^2 |\langle \phi_m | e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \boldsymbol{\epsilon}^{(\lambda)} \cdot \mathbf{p} | \phi_k \rangle|^2 \quad (102-21)$$

که در آن  $\lambda$  قطبشها را نشان می‌دهد. دو حالت قطبش برهم عمود هستند، و در نتیجه داریم

$$\boldsymbol{\epsilon}^{(\lambda)} \cdot \boldsymbol{\epsilon}^{(\lambda')} = \delta_{\lambda\lambda'} \quad (103-21)$$

از ترکیب تمام اینها، به دست می‌آوریم

$$R_{\gamma p \rightarrow \gamma s} = 2 \cdot 4\pi \frac{\alpha}{2\pi} \frac{1}{c^2} \left( \frac{3}{\lambda} \frac{mc^2}{\hbar} Z^2 \alpha^2 \right)^2 \frac{2^{10}}{3^{10}} \left( \frac{\hbar}{mcZ\alpha} \right)^2 \frac{1}{3}$$

$$= \frac{2^8}{3^8} \frac{mc^2}{\hbar} \alpha (Z\alpha)^4 \cong 0.6 \times 10^9 Z^4 s^{-1} \quad (104-21)$$

این نتیجه حدود  $3^0$  بار کوچکتر از برآورد ۶۸-۲۱ است. بنابراین، جزئیات عوامل در عنصرهای ماتریس اهمیت دارند و حدس نمی‌تواند جای محاسبه را بگیرد. با این همه، از ملاحظات ابعادی و احتساب مناسب توانهای  $\alpha$  می‌توان به عنوان راهنما برای تعیین مرتبه بزرگی کمیتهای فیزیکی در فیزیک اتمی استفاده کرد.

رابطه آهنگ گذار

$$R_{fi} = \frac{d\Omega_p}{2\pi} \frac{e^2}{\hbar c} \frac{\omega^2}{c^2} \sum_{\lambda=1}^2 |\langle f | \mathbf{r} | i \rangle \cdot \boldsymbol{\epsilon}^{(\lambda)}|^2 \quad (105-21)$$

را می‌توان با ضرب کردن انرژی کوانتوم نور  $h\omega$  در آن به فرمولی برای شدت تابش تبدیل کرد:

$$I_{fi} = d\Omega_p \frac{e^2}{2\pi c^2} \omega^2 \sum_{\lambda=1}^2 |\langle f | \mathbf{r} | i \rangle \cdot \boldsymbol{\epsilon}^{(\lambda)}|^2 \quad (106-21)$$

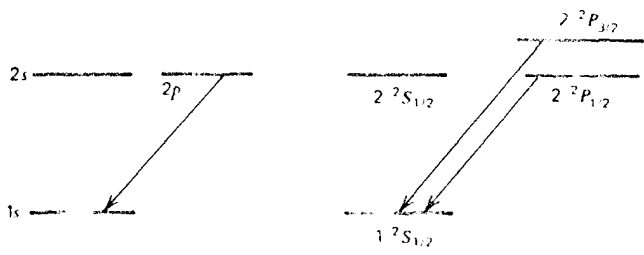
اما این درست فرمول کلاسیک برای شدت نوری است که یک دوقطبی نوسانی با گشتاور زیرگسیل می‌کند

$$\mathbf{d} = e \langle f | \mathbf{r} | i \rangle e^{-i\omega t} \quad (107-21)$$

و مثال دیگری از اصل تطابق را به دست می‌دهد.

## اسپین و قاعده‌های شدت

منظور کردن اسپین اوضاع را زیاد تغییر نمی‌دهد. البته هر یک از حالت‌های اولیه و نهایی می‌توانند در حالت‌های اسپین "بالا" یا "پایین" باشند، اما چون برهم‌کنش در گذارهای اتمی وابسته به اسپین نیست تنها گذارهای "بالا" ← "بالا" و "پایین" ← "پایین" مجاز هستند. بنابراین، آهنگهای گذار نه تنها از  $ml$  مستقل‌اند (چنانکه در بخش قبل دیدیم) بلکه به  $m_s$  و در نتیجه  $m_j$  نیز وابسته نیستند. با وارد کردن جفت‌شدگی اسپین-مدار، شکافتگیهای تراز کوچکی (بر مقیاس اختلاف



شکل ۲-۲۱ سکهنگی خط طیفی  $1s - 2p$  به علت جفت‌شدگی اسپین-مدار.

انرژی  $1s - 2p$  به دست می‌آوریم. برای مثال، ساختار ترازوی  $n = 1$  و  $m = 2$  چنانکه در شکل ۲-۲۱ نشان داده شده است، تغییر می‌کند. خط طیفی مربوط به گذار  $1s \rightarrow 2p$  به دو خط،  $2^2P_{3/2} - 1^2S_{1/2}$  و  $2^2P_{1/2} - 1^2S_{1/2}$  شکافته می‌شود. برای حالت‌های شکافته، انگرال شعاعی و فضای فاز نریبا بدون تغییر می‌مانند، و در نتیجه نسبت شدت دو خط را می‌توان تنها از قسمتهای زاویه‌ای انگرال، یعنی صرفاً از بررسیهای تکانه زاویه‌ای تعیین کرد. جدول زیر توابع موج حالت‌های مورد بحث را نشان می‌دهد.

$J$	$m_j$	پاریتته فرد	پاریتته زوج
		$l = 1$	$l = 0$
$3/2$	$3/2$	$Y_{111+}$	—
$3/2$	$1/2$	$\sqrt{2/3} Y_{10\lambda+} + \sqrt{1/3} Y_{111-}$	—
$3/2$	$-1/2$	$\sqrt{1/3} Y_{1,-1\lambda+} + \sqrt{2/3} Y_{10\lambda-}$	—
$3/2$	$-3/2$	$\sqrt{2/3} Y_{1,-1\lambda-}$	—
$1/2$	$1/2$	$\sqrt{1/3} Y_{10\lambda+} - \sqrt{2/3} Y_{111-}$	$Y_{00\lambda+}$
$1/2$	$-1/2$	$\sqrt{2/3} Y_{1,-1\lambda+} - \sqrt{1/3} Y_{10\lambda-}$	$Y_{00\lambda-}$

در مجذور عناصر ماتریس، قسمتهای شعاعی یکسان هستند. بنابراین، در بررسی آهنگهای مربوط به  $P_{3/2} \rightarrow S_{1/2}$  باید مجذور عناصر ماتریس گذار برای  $m_i = 3/2 \rightarrow m_f = 1/2$ ،  $m_i = 3/2 \rightarrow m_f = -1/2$ ،  $m_i = 3/2 \rightarrow m_f = -3/2$  را اضافه کنیم، در حالی که آهنگ مربوط به  $P_{1/2} \rightarrow S_{1/2}$  شامل مجموع مجذورهای عناصر ماتریس برای  $m_i = 1/2 \rightarrow m_f = 1/2$ ،  $m_i = 1/2 \rightarrow m_f = -1/2$ ،  $m_i = 1/2 \rightarrow m_f = -3/2$  را شامل می‌شود. این کار را می‌توان مستقیماً با استفاده از فوننی که کاملاً پیچیده و فراتر از حد این کتاب هستند انجام داد. اما می‌توان این کمیتهای را به تفصیل، با استفاده از این واقعیت که توابع موج متعامند، محاسبه کرد.

$P_{3/2} \rightarrow S_{1/2}$	
$m_j = 3/2 \rightarrow m_j = 1/2$	$ \langle Y_{11}   r \cdot \epsilon   Y_{00} \rangle ^2 = C$
$3/2 \rightarrow -1/2$	$\lambda_+ \lambda_- = 0$ زیرا
$1/2 \rightarrow 1/2$	$ \langle \sqrt{2/3} Y_{10}   r \cdot \epsilon   Y_{00} \rangle ^2 = 0 \quad (\Delta m = 0)$
$1/2 \rightarrow -1/2$	$ \langle \sqrt{1/3} Y_{11}   r \cdot \epsilon   Y_{00} \rangle ^2 = C/3$
$-1/2 \rightarrow 1/2$	$ \langle \sqrt{1/3} Y_{1,-1}   r \cdot \epsilon   Y_{00} \rangle ^2 = C/3$
$-1/2 \rightarrow -1/2$	$ \langle \sqrt{2/3} Y_{10}   r \cdot \epsilon   Y_{00} \rangle ^2 = 0 \quad (\Delta m = 0)$
$-3/2 \rightarrow 1/2$	$\cdot$
$-3/2 \rightarrow -1/2$	$ \langle Y_{1,-1}   r \cdot \epsilon   Y_{00} \rangle ^2 = C$

از جمع جمله‌ها به دست می‌آوریم

$$\sum R = \frac{4C'}{3} \quad (108-21)$$

همچنین داریم

$P_{1/2} \rightarrow S_{1/2}$	
$m_j = 1/2 \rightarrow m_j = 1/2$	$ \langle \sqrt{1/3} Y_{10}   \epsilon \cdot r   Y_{00} \rangle ^2 = 0$
$1/2 \rightarrow -1/2$	$ \langle -\sqrt{2/3} Y_{11}   \epsilon \cdot r   Y_{00} \rangle ^2 = 2C'/3$
$-1/2 \rightarrow 1/2$	$ \langle \sqrt{2/3} Y_{1,-1}   \epsilon \cdot r   Y_{00} \rangle ^2 = 2C'/3$
$-1/2 \rightarrow -1/2$	$ \langle -\sqrt{1/3} Y_{10}   \epsilon \cdot r   Y_{00} \rangle ^2 = 0$

و

$$\sum R = \frac{4C'}{3} \quad (109-21)$$

بنابراین، نسبت شدتها برابر است با

$$\frac{R(P_{3/2} \rightarrow S_{1/2})}{R(P_{1/2} \rightarrow S_{1/2})} = \frac{4C'/3}{4C'/3} = 2 \quad (110-21)$$

دلیل جمع‌زدن روی تمام حالت‌های اولیه این است که وقتی اتم برانگیخته است تمام ترازهای  $p$  به‌طور یکسان اشغال شده‌اند، زیرا اختلاف انرژی آنها در مقایسه با اختلاف انرژی  $s - 1p$  بسیار کوچک است. همچنین اگر آزمایشی انجام دهیم که بین حالت‌های نهایی تفاوت نگذارد، مانند اندازه‌گیری طیف نمایی، روی تمام آنها جمع می‌زنیم. در محاسبه آهنگ گذار  $1s \rightarrow 2p$ ، روی حالت‌های اولیه  $m$  میانگین گرفتیم. در آنجا این سؤال مطرح بود: "اگر  $N$  اتم در حالت‌های  $2p$  داشته باشیم، در هر

ثانیه چند اتم وامی باشد" میانگین‌گیری به این دلیل بود که در بیشتر موارد، وقتی  $N$  اتم برانگیخته شده باشند، حدود  $N/3$  در هر یک از حالت‌های  $m = 1, 0, -1$  هستند. در اینجا، این واقعیت دخیل است که تعداد ترازها در حالت  $P_{3/2}$  از حالت  $P_{1/2}$  بیشتر است. مجموعاً شش تراز (چهار تراز با  $z = 3/2$  و دو تراز با  $z = 1/2$ ) و به‌طور متوسط  $N/6$  اتم در هر حالت داریم. این واقعیت که در زیرمجموعه ترازهای  $z = 3/2$  اتم‌های بیشتری وجود دارند صرفاً به معنای واپاشی بیشتری است، و از این رو شدت نیز بیشتر خواهد بود.

## طول عمر و پهنای خط

عدد  $R(i \rightarrow f)$  که محاسبه آن را در این فصل آموختیم احتمال گذار  $f \rightarrow i$  تقسیم بر مدت زمان اعمال اختلال را نشان می‌دهد. این مدت زمان باید در مقایسه با  $h/(E_m^\circ - E_k^\circ + h\omega)$  بزرگ باشد تا احتمال گذار متناسب با  $t$  شود، اما بدیهی است که نمی‌تواند زیاد بزرگ باشد. احتمال اینکه حالت اولیه دست‌نخورده باقی بماند برابر است با

$$P_i(t) = 1 - \left[ \sum_{f \neq i} R(i \rightarrow f) \right] t \quad (111-21)$$

که در آن جمع روی تمام حالت‌های نهایی قابل حصول زده می‌شود. بدیهی است که این رابطه برای زمان‌های به اندازه کافی طولانی بی‌معنی است، زیرا احتمالها باید مثبت باشند. اگر تحول زمانی دستگاه را دقیقتر محاسبه کنیم<sup>۲</sup>، خواهیم دید که طرف راست ۱۱۱-۲۱ صرفاً یک تقریب (با پایستری مرتبه اختلال) از رابطه صحیح زیر است که این هم تنها برای زمان‌های طولانی اعتبار دارد

$$P_i(t) = e^{-t \sum_{f \neq i} R(i \rightarrow f)} \quad (112-21)$$

بنابراین، می‌توان برای حالت اولیه طول عمر تعریف کرد:

$$\tau = \frac{1}{R} = \frac{1}{\sum_{f \neq i} R(i \rightarrow f)} \quad (113-21)$$

آهنگ گذار کل  $R$  مجموع آهنگ‌های گذار جزئی به مجراهای ممکن  $f$  است. در مثالی که به تفصیل بررسی کردیم، گذار  $1s \rightarrow 2p$  در اتم‌های هیدروژن‌گونه، مجرای دیگری وجود ندارد، و از این رو

۲. این محاسبه در مبحث ویژه، بخش "طول عمر پهنای خط و تشدید" انجام شده است.

طول عمر حالت  $2p$  برابرست با

$$\tau = 1.6 \times 10^{-9} Z^{-2} \text{s} \quad (114-21)$$

که توافق آن با آزمایش عالی است. این نتیجه را (به ازای  $Z = 1$ ) با زمانی که طول می‌کشد تا الکترون "یک بار دور هسته بگردد" مقایسه می‌کنیم. سرعت  $\alpha c$  است و فاصله از مرتبه  $3 \times 10^{-8} \text{cm}$  است؛ بنابراین، زمان مشخصه از مرتبه  $10^{-16} \text{s}$   $1.4$  است. برحسب این زمان، عمر حالت  $2p$  بسیار طولانی است.

چون طول عمر حالت  $2p$  متناهی است، انرژی آن بنابه اصل عدم قطعیت باید عدم قطعیتی با بزرگی زیر داشته باشد

$$\Delta E \sim \frac{\hbar}{\tau} \quad (115-21)$$

این عدم قطعیت باعث می‌شود شدت خط به عنوان تابعی از بسامد در  $\omega_0 = (E_{2p} - E_{1s})/\hbar$  کاملاً تیز نباشد، بلکه توزیعی به صورت زیر داشته باشد

$$I(\omega) \propto \frac{(R/2)^2}{(\omega - \omega_0)^2 + R^2/4} \quad (116-21)$$

توجه کنید که در حد  $R \rightarrow 0$ ، یعنی در حدی که نظریه اختلال دقیقاً کاربرد دارد، از فرمول بالا به دست می‌آوریم

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\epsilon}{(\omega - \omega_0)^2 + \epsilon^2} = \pi \delta(\omega - \omega_0) \quad (117-21)$$

شکل خط با تابع دلتای پایستگی انرژی نشان داده شده است. پهنای خط ۱۱۶-۲۱ برابر است با  $R$ ، و این معیاری از عدم قطعیت در انرژی است. این شکل خط را شکل خط لورنتسی می‌نامند.

## مسائل

۱-۲۱ یک اتم هیدروژن در میدان الکتریکی یکنواخت  $\mathbf{E}(t)$  با وابستگی زمانی

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(t) &= 0 & t < 0 \\ &= \mathbf{E}_0 e^{-\gamma t} & t > 0 \end{aligned}$$

قرار دارد. اگر این اتم ابتدا در حالت پایه باشد، احتمال این را به دست آورید که در  $t \rightarrow \infty$  اتم به حالت  $2p$  گذار کند.

۲-۲۱ رابطه‌ای برای  $c_n(t)$  تا مرتبه دوم  $\lambda$  به دست آورید. بنویسید

$$c_n(t) = \delta_{nk} + \lambda c_n^{(1)}(t) + \lambda^2 c_n^{(2)}(t) + \dots$$

نشان دهید که معادله مرتبه اول برای  $c_n^{(1)}(t)$  تغییر نمی‌کند، و  $c_n^{(2)}(t)$  از معادله زیر پیروی می‌کند

$$c_m^{(2)}(t) = \frac{1}{i\hbar\lambda} \int_0^t dt' \sum_n c_n^{(1)}(t') e^{i(E_m^0 - E_n^0)t'/\hbar} \langle \phi_m | V(t') | \phi_n \rangle$$

جواب  $c_n^{(1)}(t')$  را جاگذاری کنید و رابطه خود را تا جایی که امکان دارد ساده کنید. ۳-۲۱ یک نوسانگر هماهنگ را در نظر بگیرید که با هامیلتونی زیر توصیف می‌شود

$$H = \frac{1}{2m} p_x^2 + \frac{1}{2} m \omega^2(t) x^2$$

که در آن

$$\omega(t) = \omega_0 + \delta\omega \cos ft$$

و  $\delta\omega \ll \omega_0$ . با فرض اینکه دستگاه در  $t = 0$  در حالت پایه است، احتمال گذار از حالت پایه را برحسب زمان به دست آورید. از نظریه اختلال استفاده کنید. توجه کنید که اگر  $n \neq 0$

$$\begin{aligned} \langle n | x^2 | 0 \rangle &= \hbar / \sqrt{2} m \omega & n = 2 \\ &= 0 & n \neq 2 \end{aligned}$$

۴-۲۱ فرض کنید ذره‌ای با جرم سکون  $M$  به دو ذره با جرمهای سکون  $m_1$  و  $m_2$  وامی‌باشد. با استفاده از رابطه نسبیتی میان انرژی و تکانه، چگالی حالت‌های  $\rho$  را که در ۶۱-۲۱ آمده است محاسبه کنید.

[راهنمایی: تنها یک تکانه مستقل  $\mathbf{p}$  وجود دارد، و به

$$\int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \delta(E_{\text{اولیه}} - \sum_{\text{حالت‌های نهایی}} E)$$

احتیاج دارید.]

۵-۲۱ محاسبه مسئله قبل را برای واپاشی زیر انجام دهید

$$A \rightarrow B + C + D$$

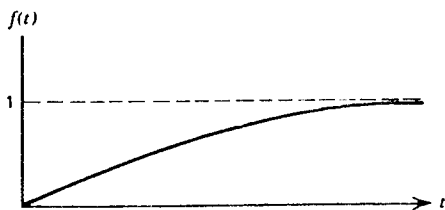
که در آن ذرات  $C$  و  $D$  بی جرم هستند.

[راهنمایی: در اینجا دو تکانه مستقل دارید.]

۶-۲۱ این مسئله مثالی از قضیه بی دررو است. بنابه این قضیه اگر تغییر هامیلتونی از  $H_0$  به  $H$  بسیار کند باشد، دستگاهی که در یک ویژه حالت معین  $H_0$  است به ویژه حالت متناظر  $H$  می رود بدون اینکه هیچ گذاری صورت گیرد. به عنوان یک مورد مشخص، حالت پایه را در نظر بگیرید، به طوری که

$$H_0 \phi_0 = E_0 \phi_0$$

فرض کنید  $V(t) = f(t)V$ ، که در آن  $f(t)$  یک تابع کند تغییر است که در نمودار زیر نشان داده شده است



اگر  $\omega_0$  حالت پایه مربوط به  $H = H_0 + V$  باشد، بنابه قضیه بی دررو کارهای زیر را باید انجام دهید

$$|\langle \omega_0 | \psi(t) \rangle| \rightarrow 1$$

(الف) نشان دهید برای زمانهایی که  $f(t) \rightarrow 1$

$$\frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i(E_m^\circ - E_0^\circ)t'/\hbar} f(t') \rightarrow \frac{e^{i(E_m^\circ - E_0^\circ)t/\hbar}}{E_m^\circ - E_0^\circ}$$

از رابطه زیر استفاده کنید.

$$\frac{df(t')}{dt'} \ll \frac{E_m^\circ - E_0^\circ}{\hbar} f(t')$$



$$e^{i\omega t'} = \frac{1}{i\omega} \frac{d}{dt'} e^{i\omega t'}$$

می‌توانید تابع  $f(t)$  را با یک مثال مشخص کنید، یا اینکه انتگرال جزء به جزء بگیرید، یعنی در انتگرال بالا بنویسید

(ب) با استفاده از ۳-۲۱ و ۹-۲۱، تابع  $\psi(t)$  را محاسبه کنید. نتیجه را با فرمول ۱۶-۱۹، که در این مورد به صورت

$$w_0 = \phi_0 + \sum_{m \neq 0} \frac{\langle \phi_m | V | \phi_0 \rangle}{E_0^0 - E_m^0} \phi_m$$

است مقایسه کنید و از اینجا نشان دهید

$$|\langle w_0 | \psi(t) \rangle| \rightarrow 1$$

۷-۲۱ آهنگ گذار  $1s \rightarrow 2p$  را برای نوسانگر سه‌بعدی، براساس طرحی که در این فصل ارائه شد، محاسبه کنید.

۸-۲۱ هسته‌ها گاهی با فرایندی که تبدیل داخلی نامیده می‌شود، و در آن یکی از الکترونهای  $1s$  به جای فوتون گسیل می‌شود، از حالت برانگیخته به حالت پایه وامی‌باشند. فرض کنید توابع موج اولیه و نهایی هسته عبارت باشند از

$$\phi_I(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_A) \quad \text{و} \quad \phi_F(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_A)$$

که در آن  $\mathbf{r}_i (i = 1, 2, \dots, Z)$  به پروتونها و  $\mathbf{r}_{Z+1}, \dots, \mathbf{r}_A$  به نوترونها مربوط می‌شوند. اختلالی که باعث این گذار می‌شود برهم‌کنش هسته-الکترون است:

$$V = - \sum_{i=1}^Z \frac{e^{\gamma}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|}$$

که در آن  $\mathbf{r}$  بردار مکان الکترون است. بنابراین، عنصر ماتریس عبارت است از

$$- \int d^{\gamma} \mathbf{r} \int d^{\gamma} \mathbf{r}_1 \cdots d^{\gamma} \mathbf{r}_A \phi_F^* \frac{e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / \hbar}}{\sqrt{V}} \sum_{i=1}^Z \frac{e^{\gamma}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|} \phi_I \psi_{1 \dots}(\mathbf{r})$$

(الف) اندازهٔ تکانهٔ الکترون آزاد  $\mathbf{p}$  را تعیین کنید.  
 (ب) با استفاده از بسط

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|} \simeq \frac{1}{r} + \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}_i}{r^3}$$

آهنگ مربوط به فرایند گذار دوقطبی را برحسب

$$\mathbf{d} = \sum \int d^3r_1 \cdots d^3r_A \phi_F^* \mathbf{r}_i \phi_I$$

محاسبه کنید.

۹-۲۱ نشان دهید وقتی  $t \rightarrow \infty$

$$e^{i\omega t} \sin(\omega_0 - \omega)t \sin(\omega_0 + \omega)t \rightarrow -\frac{1}{4}$$

[راهنمایی: از رابطهٔ  $\lim_{t \rightarrow \infty} \sin At = \lim_{t \rightarrow \infty} \cos At = 0$  استفاده کنید.]

### مراجع

قضیهٔ جمع که به محاسبهٔ عمومی‌تر قاعده‌های گزینش به‌کار می‌آید در تمام کتابهای پیشرفته‌تری که در آخرین کتاب معرفی شده‌اند و همچنین در کتاب زیر بررسی شده است

M E Rose, *Elementary Theory of Angular Momentum*, John Wiley & Sons, New York, 1957.

انتگرالهای شعاعی برای موارد کلی‌تر در کتابهای زیر بررسی شده‌اند

H A Bethe and R W Jackiw, *Intermediate Quantum Mechanics*, W A Benjamin, New York, 1968.

H A Bethe and E E Salpeter, *Quantum Mechanics of One-and Two-Electron Atoms*, Springer Verlag, Berlin/ New York, 1957.

E U Condon and G H Shortley, *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge University Press, Cambridge, England, 1959.

## مباحث برگزیده در نظریه تابش

در فصل ۲۱ (روابط ۲۱-۴۰ و ۲۱-۴۱) گفتیم که برای جذب یک کوانتوم نور از حالت اولیه‌ای که  $n$  فوتون با بسامد زاویه‌ای  $\omega$  و قطبش  $\lambda$  دارد پتانسیل برداری به صورت زیر است

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\frac{2\pi c^2 \hbar}{\omega V}} \sqrt{n} \boldsymbol{\epsilon}^{(\lambda)} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad (1-22)$$

و برای گسیل یک کوانتوم نور به حالت اولیه‌ای با  $n$  فوتون با بسامد زاویه‌ای  $\omega$  و قطبش  $\lambda$  داریم

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\frac{2\pi c^2 \hbar}{\omega V}} \sqrt{n+1} \boldsymbol{\epsilon}^{(\lambda)} e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad (2-22)$$

که در آنها حالت‌های قطبش نیز منظور شده‌اند. به بیان دقیق، تعداد فوتونها به تکانه و قطبش فوتون نیز بستگی دارد، و در واقع برای جذب باید بنویسیم

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\frac{2\pi c^2 \hbar}{\omega V}} \sqrt{n_{\lambda}(\mathbf{k})} \boldsymbol{\epsilon}^{(\lambda)} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad (3-22)$$

و برای گسیل

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\frac{2\pi c^2 \hbar}{\omega V}} \sqrt{n_{\lambda}(\mathbf{k}) + 1} e^{(\lambda)} e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} \quad (4-22)$$

به لحاظ فیزیکی، این عوامل ایجاب می‌کنند که حضور فوتونهایی با یک بسامد خاص احتمال گسیل فوتون دیگری با همان بسامد را تقویت کند. می‌گوییم این فوتونها گسیل تابش را القا می‌کنند یا برمی‌انگیزند.

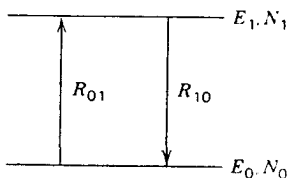
در فرایند "کوانتیده کردن" میدان الکترومغناطیسی یعنی وقتی میدانهای الکتریکی و مغناطیسی را، مانند  $p(t)$  و  $x(t)$  در حرکت یک بعدی ذره، متغیرهای دینامیکی در نظر می‌گیریم پیدایش این عوامل وابسته به  $n$  امری کاملاً عادی به نظر می‌رسد. این روش فراتر از سطح این کتاب است. به جای آن، عوامل  $\sqrt{n}$  و  $\sqrt{n+1}$  را به روش جالب اینشتین، که در سال ۱۹۱۷ یعنی قبل از کشف مکانیک کوانتومی ارائه شد، محاسبه می‌کنیم.

### ضرایب $A$ و $B$ اینشتین

اینشتین با استفاده از نظریه پلانک، نظریه بور و مکانیک آماری به روش زیر استدلال کرد. گازی متشکل از مولکولهایی را در نظر بگیرید که در یک کاواک در دمای  $T$  با تابش برهم‌کنش می‌کنند. بنابه نظریه بور، این مولکولها می‌توانند در حالت‌های پایای مختلفی باشند. در حالت تعادل، نسبت تعداد مولکولها در یک حالت  $m$  به تعداد مولکولها در یک حالت  $n$  با رابطه زیر داده می‌شود

$$\frac{N_m}{N_n} = \frac{g_m}{g_n} \frac{e^{-E_m/kT}}{e^{-E_n/kT}} = \frac{g_m}{g_n} e^{-(E_m - E_n)/kT} \quad (5-22)$$

که در آن  $g_m$  مرتبه واگنی است، یعنی تعداد ترازهایی که انرژی  $E_m$  دارند. (از مکانیک کوانتومی اکنون می‌دانیم که  $g_m = 2J_m + 1$  که در آن  $J_m$  تکانه زاویه‌ای کل حالتی است که انرژی  $E_m$  دارد، اما در آنچه در زیر می‌آید به این رابطه احتیاج نداریم.) اکنون یک زوج تراز  $E_1$  و  $E_0$  با



شکل ۱-۲۲. نمایش نموداری دستگاه دوترازی.

$E_1 > E_0$  در نظر بگیرید (شکل ۱-۲۲). آهنگ گذار  $R_{0,1}$  از تراز انرژی پایینتر به تراز انرژی بالاتر باید با تعداد مولکولهای  $N_0$  که انرژی  $E_0$  دارند و با شدت تابش در کاواک که نور جذب شده از آن بسامد  $\nu$  دارد متناسب باشد. بنابراین

$$R_{0,1} = N_0 u(\nu, T) B_{0,1} \quad (۶-۲۲)$$

که در آن  $B_{0,1}$  ضریبی است که جذب تابش توسط مولکولهای دارای انرژی  $E_0$  را توصیف می‌کند و ضریب جذب القایی نامیده می‌شود، زیرا تابش موجود باعث این فرایند می‌شود. برای آهنگ گذار از حالت بالاتر به حالت پایینتر، اینشتین از این اصل بور استفاده کرد که گسیل خودبه‌خود می‌تواند با آهنگی مستقل از تابش موجود روی دهد، اما در اینجا باید گسیل القایی نیز وجود داشته باشد. اگر  $N_1$  تعداد مولکولها در حالت ۱ باشد، داریم

$$R_{1,0} = N_1 (u(\nu, T) B_{1,0} + A_{1,0}) \quad (۷-۲۲)$$

$B_{1,0}$  گسیل القایی و  $A_{1,0}$  گسیل خودبه‌خود را توصیف می‌کند. در وضعیت تعادل، تعداد گذارهای  $0 \rightarrow 1$  باید برابر با تعداد گذارهای  $1 \rightarrow 0$  باشد، و در نتیجه

$$N_0 u(\nu, T) B_{0,1} = N_1 (u(\nu, T) B_{1,0} + A_{1,0}) \quad (۸-۲۲)$$

از ترکیب این رابطه با ۶-۲۲ به دست می‌آوریم

$$\frac{u(\nu, T) B_{1,0} + A_{1,0}}{u(\nu, T) B_{0,1}} = \frac{N_0}{N_1} = \frac{g_0}{g_1} e^{-(E_0 - E_1)/kT}$$

که می‌توان آن را به صورت زیر نوشت

$$g_1 A_{1,0} = u(\nu, T) (g_0 B_{0,1} e^{(E_1 - E_0)/kT} - g_1 B_{1,0}) \quad (۹-۲۲)$$

پیامدهای این رابطه عبارتند از  
 الف) به ازای مقدار ثابت  $E_1 - E_0$ ، اگر  $T \rightarrow \infty$  نگاه ۱  $e^{(E_1 - E_0)/kT} \rightarrow 1$  و از قانون ریلی-جینز (فصل ۱) به دست می‌آوریم  $u(\nu, T) \rightarrow (\lambda \pi \nu^2 / c^3) kT$ . چون طرف چپ معادله ۹-۲۲ مستقل از  $T$  است، نتیجه می‌گیریم

$$g_0 B_{0,1} = g_1 B_{1,0} \quad (۱۰-۲۲)$$

که نشان می‌دهد به‌ازای هر مولکول آهنگ گسیل القایی با آهنگ جذب القایی برابر است.  
(ب) از جاگذاری نتیجه بالا در ۹-۲۲ به دست می‌آوریم

$$g_1 A_{1_0} = u(\nu, T)(g_1 B_{1_0})(e^{(E_1 - E_0)/kT} - 1)$$

یا

$$u(\nu, T) = \frac{A_{1_0}/B_{1_0}}{e^{(E_1 - E_0)/kT} - 1} \quad (11-22)$$

طرف چپ از قانون وین ۴-۱ پیروی می‌کند، و در نتیجه

$$\nu^2 g \left( \frac{\nu}{T} \right) = \frac{A_{1_0}/B_{1_0}}{e^{(E_1 - E_0)/kT} - 1} \quad (12-22)$$

چون طرف چپ این معادله یک تابع عام است، و  $A_{1_0}/B_{1_0}$  نمی‌تواند تابع دما باشد، نتیجه می‌گیریم که باید  $A_{1_0}/B_{1_0}$  با  $\nu^2$  و  $(E_1 - E_0)$  با  $\nu$  متناسب باشد. بنابراین،  $E_1 - E_0 = h\nu$  که در آن  $h$  یک ثابت است، و می‌توان نوشت

$$u(\nu, T) = \frac{A_{1_0}/B_{1_0}}{\nu^2} \frac{\nu^2}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad (13-22)$$

از مقایسه این رابطه با فرمول پلانک می‌بینیم که

$$\frac{A_{1_0}}{B_{1_0}} = \frac{8\pi h\nu^2}{c^2} \quad (14-22)$$

برای محاسبه  $A_{1_0}$  چنانکه در فصل ۲۱ دیدیم به مکانیک کوانتومی نیاز داریم.  
آهنگ گسیل به‌ازای هر مولکول  $R_{1_0}/N_1$  را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} R_{1_0}/N_1 &= u(\nu, T)B_{1_0} + A_{1_0} = A_{1_0} \left( 1 + \frac{B_{1_0}}{A_{1_0}} u(\nu, T) \right) \\ &= A_{1_0} \left( 1 + \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} \right) \end{aligned} \quad (15-22)$$

اما میانگین تعداد فوتونها در واحد حجم در کاواک جسم سیاه در دمای  $T$  با رابطه زیر داده می شود

$$\langle n \rangle = \frac{\sum_n n e^{-nh\nu/kT}}{\sum_n e^{-nh\nu/kT}} = \frac{d/dx \sum_n e^{-nx}}{\sum_n e^{-nx}} \Big|_{x=h\nu/kT} \quad (۱۶-۲۲)$$

$$= \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

و در نتیجه که آهنگ گسیل به ازای هر مولکول به صورت زیر درمی آید

$$\frac{R_{\nu_0}}{N_0} = A_{\nu_0} (1 + \langle n(\nu, T) \rangle) \quad (۱۷-۲۲)$$

بنابراین، آهنگ گسیل به ازای هر مولکول با  $(n + 1)$  متناسب است که در آن میانگین تعداد فوتونهای موجود است. به همین ترتیب،  $R_{\nu_0}/N_0$  با میانگین تعداد فوتونهای موجود  $\langle n \rangle$  متناسب است. اگرچه آهنگهای جذب و گسیل به ترتیب با  $\langle n(\nu, T) \rangle$  و  $\langle n(\nu, T) + 1 \rangle$  متناسب هستند، که در آنها  $\langle n(\nu, T) \rangle$  تعداد متوسط فوتونها با بسامد مناسب در تابش جسم سیاه است، این عوامل از توزیع بسامد خاص تابش مستقل اند. در هر رویداد جذب یا گسیل تنها یک فوتون دخیل است، و از این رو دامنه های  $A(\mathbf{r}, t)$  به ترتیب شامل عوامل  $\sqrt{n(\nu) + 1}$  و  $\sqrt{n(\nu)}$  هستند. حیرت انگیز است که اینشتین چگونه توانسته است از ترکیب استدلال قوی آماری و آگاهی ابتدایی از اثرات کوانتومی تا این اندازه پیش برود.

## لیزرها

چشمگیرترین کاربرد فنی گسیل القایی در تولید تابش الکترومغناطیسی تکفام همدوس و بسیار جهتدار با استفاده از تقویت نور از طریق گسیل القایی در وسیله ای است که لیزر نامیده می شود.<sup>۱</sup> مؤلفه های اساسی یک لیزر عبارتند از

۱. یک محیط لیزری با دست کم دو تراز انرژی، که با یک گاف انرژی از هم جدا شده اند، به طوری که اتمهای تراز بالاتر بتوانند در حضور فوتونهای با بسامد مناسب گذار انجام دهند.
۲. سازوکاری برای پرجمعیت کردن مجدد تراز بالاتر برای تداوم عمل.
۳. یک کاواک مناسب که حاوی فوتونهای القاگر و همچنین محیط لیزری است.

۱. این پدیده برای تابش در تمام بسامدها معتبر است، و در واقع ابتدا در ناحیه میکروموج مطالعه شد. وسیله مربوط را میز می نامند.

### شرایط کار لیزر

ماده‌ای را در نظر بگیرید که در آن توجه خود را به دو تراز انرژی  $E_1$  و  $E_0$ ، با  $E_1 > E_0$ ، معطوف می‌کنیم. آهنگ تغییر  $n(\nu)$  تعداد فوتونها با بسامد  $\nu = (E - E_0)/h$  را می‌توان با استفاده از آهنگ افزایش ناشی از گسیل القایی و خودبه‌خود توسط  $N_1$  اتم در حالت  $E_1$ ، آهنگ کاهش ناشی از جذب القایی توسط  $N_0$  اتم در حالت  $E_0$ ، و آهنگ اتلاف فوتونها ناشی از نشت از کاواک، که متناسب با  $n(\nu)$  است، حساب کرد. معادلهٔ مربوط عبارت است از

$$\frac{dn(\nu)}{dt} = N_1(u(\nu)B_{10} + A_{10}) - N_0 u(\nu)B_{01} - \frac{n(\nu)}{\tau_0} \quad (18-22)$$

$\tau_0$  بعد زمان دارد، و کاواک باید به‌گونه‌ای طراحی شود که  $\tau_0$  در مقایسه با زمانی که فوتونها طول کاواک را می‌پیمایند کوچک باشد. رابطه‌ای میان چگالی انرژی فوتون و تعداد فوتونها برقرار است. فرمول

$$u(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} h\nu n(\nu) \quad (19-22)$$

که برای تابش جسم سیاه صادق است یک رابطهٔ کلی است، زیرا چگالی را به‌صورت حاصلضرب تعداد مدها در واحد بازهٔ بسامد، انرژی در این بسامد و تعداد فوتونهای دارای این انرژی توصیف می‌کند. بنابراین،

$$\frac{dn(\nu)}{dt} = n(\nu) \left[ \left( N_1 - \frac{g_1}{g_0} N_0 \right) A_{10} - \frac{1}{\tau_0} \right] + N_1 A_{10} \quad (20-22)$$

که نشان می‌دهد تعداد فوتونها با زمان افزایش می‌یابد مگر اینکه

$$N_1 - \frac{g_1}{g_0} N_0 > \frac{1}{A_{10}\tau} \quad (21-22)$$

چون در تعادل گرمایی داریم

$$\begin{aligned} N_1 - \frac{g_1}{g_0} N_0 &= N_1 \left( 1 - \frac{N_0/g_0}{N_1/g_1} \right) = N_1 (1 - e^{-(E_0 - E_1)/kT}) \\ &= N_1 (1 - e^{h\nu/kT}) < 0 \end{aligned} \quad (22-22)$$



می‌بینیم که لیزر باید در مد عدم تعادل کار کند. معادله ۲۱-۲۲ نشان می‌دهد که باید یک جمعیت اضافی در اتمها در تراز  $E_1$  ایجاد کنیم، یعنی باید وارونی جمعیت به وجود آوریم. یک راه انجام این کار را در زیر توصیف می‌کنیم

### پمپاژ اپتیکی

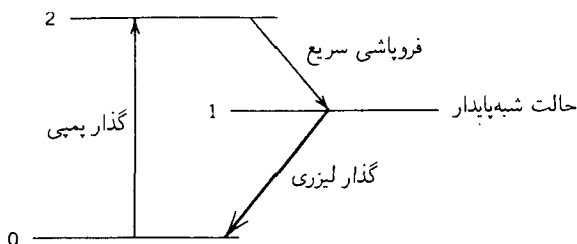
یک راه ایجاد وارونی جمعیت استفاده از ماده‌ای است که در آن فرایند شامل گذارهایی بین سه تراز است. شکل ۲-۲۲ یک دستگاه سه‌ترازی را نشان می‌دهد. معادله‌ها آهنگ تغییر  $N_1$ ،  $N_2$  و  $N_0$  را در حضور یک باریکه نور با چگالی انرژی  $u_p$  در بسامدی توصیف می‌کنند که اتمها را از حالت پایه "۰" به یکی از دو حالت برانگیخته که بالاتر است، حالت "۲"، پمپ می‌کند. عواملی که در تغییر  $N_2$  دخیل هستند عبارت‌اند از واپاشی خودبه‌خود و القایی به حالت‌های "۱" و "۰" که عدد اشغال تراز "۲" را کاهش می‌دهد و برانگیزش القایی از حالت‌های "۱" و "۰" که  $N_2$  را افزایش می‌دهد:

$$\begin{aligned} \frac{dN_2}{dt} = & N_2 A_{21} - N_2 A_{20} - N_2 B_{21} u(\nu_{12}) - N_2 B_{20} u_p(\nu_{02}) \\ & + N_1 B_{12} u(\nu_{12}) + N_0 B_{02} u_p(\nu_{02}) \end{aligned} \quad (23-22)$$

به همین ترتیب، داریم

$$\frac{dN_1}{dt} = -N_1 A_{10} - N_1 B_{12} u(\nu_{12}) - N_1 u(\nu_{01}) B_{10} + N_2 A_{21} + N_2 B_{21} u(\nu_{12}) \quad (24-22)$$

در وضعیت پایا هر دو مشتق زمانی صفر می‌شوند. فرض کنید ماده به‌گونه‌ای است که  $R_{21} \gg R_{10}$ . در این مورد، تجمع اتمها در حالت "۲" و افزایش چگالی تابش در  $\nu_{12}$  روی نخواهد داد. می‌توان به آسانی نشان داد که از معادله‌های



شکل ۲-۲۲ نمایش نموداری گذار پمپ‌شده، که به دنبال آن افت سریع به حالت شبه پایدار و از آنجا گذار لیزری روی می‌دهد.

وضعیت پایا، با  $u(\nu_{12}) = 0$  به دست می‌آوریم

$$\frac{N_1}{N_0} = \frac{R_{21}}{R_{10}} \frac{B_{02}u_p}{A_{21} + A_{20} + B_{02}u_p} \quad (25-22)$$

وقتی چگالی انرژی پمپاژ  $u_p$  بزرگ است عامل دوم از مرتبه ۱ است، و  $N_1 \gg N_2$ ، که وارونی جمعیت را نشان می‌دهد.

به لحاظ فیزیکی، آنها به حالت برانگیخته بالاتر "۲" پمپ می‌شوند و به سرعت به حالت شبه‌پایدار "۱" که در آن وارونی جمعیت ایجاد می‌شود افت می‌کنند، و گذارهای لیزری به حالت پایه روی می‌دهند. این دستگاه سه تراز در لیزر یاقوت به کار می‌رود. البته انواع دیگر لیزر نیز وجود دارند، و بحث بالا تنها به منظور نشان دادن راهی برای ایجاد وارونی جمعیت است. بدین ترتیب، سازوکارهای مختلف پمپاژ و مواد لیزری مختلف امکان لیزرهایی را فراهم می‌آورند که می‌توانند در قسمتهای مختلف طیف الکترومغناطیسی کار کنند. همچنین امکان دارد از موادی استفاده کنیم که در آنها تابش لیزری به ترازهای (کم فاصله) ارتعاشی نهایی مختلفی منتهی می‌شود، و در نتیجه می‌توان لیزرهای کوکپذیر ساخت.

## کاواک

تولید باریکه کم‌عرض موازی احتیاج به کاواکی با ساختار استوانه‌ای دارد که در دو سر آن آینه‌هایی با شفافیت کم تعبیه شده‌اند. این آینه‌ها برای نگه‌داشتن فوتونها در داخل کاواک هستند تا چگالی انرژی  $u(\nu_{10})$  افزایش یابد. یادآوری می‌کنیم که آهنگ تغییر تعداد فوتونها عبارت است از

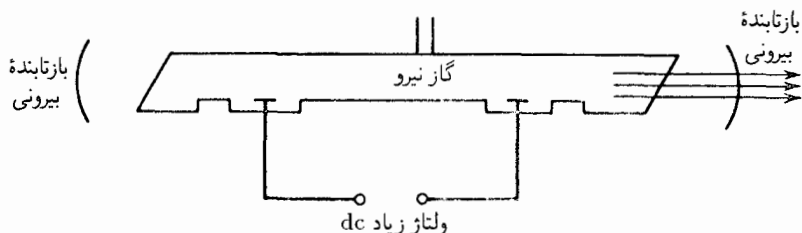
$$\frac{dn(\nu)}{dt} = N_1(u(\nu)B_{10} + A_{10}) - N_0 u(\nu)B_{01} - \frac{n(\nu)}{\tau_0}$$

که در آن  $N_1 \gg N_0$  می‌توان  $\tau_0$ ، "طول عمر فوتونها در کاواک"، را به روش زیر برآورد کرد: فرض کنید تابش در کاواک استوانه‌ای به طول  $L$  فقط جلو و عقب می‌رود. اگر  $n^*$  ضریب شکست محیط باشد، زمان پیمایش برابر با  $n^*L/c$  است. اگر ضریب بازتاب آینه  $r$  (۰٫۹۹  $\approx$ ) باشد، شدت نور پس از  $k$  پیمایش به  $r^k$  کاهش می‌یابد، و در نتیجه با  $1 - \epsilon = r$  داریم

$$I_k/I_0 = (1 - \epsilon)^k \approx e^{-k\epsilon} \quad (26-22)$$

پس از  $k = 1/\epsilon = 1/(1 - r)$  بار پیمایش، شدت به  $1/e$  مقدار اولیه خود کاهش می‌یابد. بنابراین، طول عمر تابش در کاواک برابر است با

$$\tau_0 \approx kn^*L/c = n^*L/c(1 - r) \quad (27-22)$$



شکل ۲۲-۳ تصویر نموداری لیزر.

اگر کاواک به دریچه‌هایی با زاویه بروستر (که تقریباً به‌طور کامل حاوی یک حالت قطبش تابش هستند) منتهی شود، که در پشت آنها آینه‌های کروی یکسان قرار دارند که فاصله میانشان برابر با شعاع خمیدگی مشترک آنها است (شکل ۲۲-۳)، ضریب بازتاب را می‌توان به ۱ نزدیک کرد. توجه کنید که پهنای خط تابش برابر است با

$$\Delta\nu = \nu/\tau_0 = c(1-r)n^2L \quad (22-28)$$

که در مقایسه با  $c/2n^2L$ ، یعنی فاصله بسامدی دو مد مجاور در کاواکی به اندازه  $L$ ، بسیار کوچک است. بنابراین، یک باریکه تقریباً تکفام تولید می‌شود.

## سرد کردن اتمها

در این بخش یک کاربرد لیزرها را بیان می‌کنیم که با مطالعه اتمها ارتباط مستقیم دارد، یعنی استفاده از آنها برای کند کردن اتمها و در نتیجه کاهش پهن شدن خط طیفی که از آنچه ۲۱-۱۱۶ توصیف می‌کند بیشتر است.

خطهای طیفی از چند راه پهن می‌شوند. اتمها به‌طور کلی به تنهایی مشاهده نمی‌شوند. در گازی از اتمها عموماً برخوردی روی می‌دهد، و زمان بین این برخوردها،  $\tau_c$ ، اگر از عمر متوسط حالت مورد بررسی کمتر باشد، پهنای خط طیفی را تعیین می‌کند، زیرا  $\tau_c$  عملاً طول عمر حالت است، و در نتیجه  $h/\tau_c$  بزرگتر از پهنای طبیعی خط است. پهن شدن برخوردی را می‌توان با کاهش چگالی (یا فشار) گاز اتمهای مورد بررسی کم کرد. پهن شدن دوپلری نیز وجود دارد. وقتی اتمی با سرعت  $v$  حرکت می‌کند، بسامد تابش گسیل شده از اتم به اندازه  $\Delta\omega = (v/c)\omega$  تغییر می‌کند. اگر سرعت اتم را برابر با اتم  $v_{rms} = \sqrt{3kT/M}$ ، یعنی سرعت ریشه میانگین مجذوری اتمها در گازی با دمای  $T$ ، بگیریم آنگاه به‌عنوان مثال برای هیدروژن داریم  $\sqrt{T} \approx 10^{-6} \times 3 \times 10^3 \approx 0.3 \times 10^{-6}$ . این نتیجه بسیار بیشتر از مقدار طبیعی  $\Delta\omega/\omega$  است، که برای خط  $1s \rightarrow 2p$  تقریباً برابر با  $3 \times 10^{-8}$  است. بنابراین، برای غلبه بر پهن شدن دوپلری باید اتمها را سرد کرد. این کار با قرار دادن اتم در باریکه لیزر انجام می‌شود. اتمی را در نظر بگیرید که در جهت مثبت  $z$  با سرعت

$v$  حرکت می‌کند. فرض کنید اختلاف انرژی بین دو تراز که بین آنها گذار انجام می‌شود  $h\omega_0$  و بسامد باریکه لیزر (تکفام)  $\omega$  باشد.  $\omega$  را کمی متفاوت با  $\omega_0$  می‌گیریم، و پارامتر واکوکی را به صورت  $\delta = \omega - \omega_0 < 0$  تعریف می‌کنیم. اگر باریکه لیزر در جهت مثبت  $z$  منتشر شود، اتم یک باریکه "می‌بیند" که به سرخ منتقل شده است زیرا به نظر می‌رسد که منشأ باریکه از اتم دور می‌شود. بنابراین، بسامدی که اتم می‌بیند  $\omega(1 - v/c)$  است. در نتیجه، مقدار واکوکی باریکه لیزر از بسامد تشدید برابر است با  $\omega(1 - v/c) - \omega_0 = \delta - \omega v/c$ . چون  $\delta < 0$ ، مقدار این واکوکی بزرگتر از مقدار  $\delta$  است، و احتمال جذب فوتونها کاهش می‌یابد، زیرا بسامد نوری که باید جذب شود روی منحنی تشدید در نقاط دورتر واقع می‌شود. از طرف دیگر، با یک باریکه لیزر دیگر که در جهت منفی  $z$  منتشر می‌شود، واکوکی برابر است با  $\omega(1 + v/c) - \omega_0 = \delta + \omega v/c$  و در نتیجه بسامد نوری که باید جذب شود به قله تشدید نزدیکتر است (تشدید در  $|\delta|$  در  $\omega v/c$  روی می‌دهد). بنابراین، احتمال جذب فوتون بزرگتر است. این نشان می‌دهد نیرویی در جهت منفی  $z$  بر اتم وارد می‌شود. اتم فوتون را بازگسیل می‌کند چون وامی‌باشد، اما این گسیل در راستای خاصی صورت نمی‌گیرد و به طور متوسط تقارن کروی دارد.<sup>۲</sup> بدین ترتیب، اتم در راستای  $z$  تکانه از دست می‌دهد. اگر سه جفت لیزر با شدت یکسان در راستای محورهای  $x$ ،  $y$  و  $z$  در جهت‌های مخالف داشته باشیم، تمام درجات آزادی به حساب آورده می‌شوند.

برای اینکه بحث بالا را بیش از این کمی کنیم، نیروی فشار تابشی را که باریکه بر اتم وارد می‌کند محاسبه می‌کنیم. فرض می‌کنیم تنها با دو تراز اتم سروکار داریم. این تقریب خوبی است اگر بسامد میدان الکتریکی نوسانی به بسامد مربوط به برانگیزش از حالت پایه نزدیک باشد. آهنگ جذب تکانه‌ای با بزرگی  $h\omega/c$  عبارت است از

$$R = \frac{\gamma\pi}{\hbar} |\langle 1 | \mathbf{er} \cdot \mathbf{E} | 0 \rangle|^2 \delta(E_1 - E_0 - h\omega) \quad (29-22)$$

$$= \frac{\gamma\pi}{\hbar^2} |\langle 1 | \mathbf{er} \cdot \mathbf{E} | 0 \rangle|^2 \delta(\omega_0 - \omega)$$

که در آن عملگر گشتاور دوقطبی  $\mathbf{er}$  باعث گذار می‌شود. اکنون باید تابع دلتا را برای منظور کردن پهنای خط حالت برانگیخته  $|1\rangle$  تغییر دهیم، و بدین منظور از جانشانی زیر استفاده می‌کنیم (برای توجیه این کار به مبحث ویژه ۴ مراجعه کنید)

$$\pi\delta(\omega_0 - \omega) \rightarrow \frac{R/\gamma}{(\omega_0 - \omega)^2 + R^2/\gamma^2} \quad (30-22)$$

۲. فرض می‌کنیم شدت باریکه لیزر چندان زیاد نیست، به طوری که برانگیختگی و واباشی بسین رویدادهایی هستند که کاملاً از هم فاصله دارند. بعداً در این فصل مواردی را خواهیم دید که در آنها دستگاه بین حالت پایه و حالت برانگیخته به سرعت نوسان می‌کند. در این مورد، گسیل با برانگیزش همدوس است، و اطلاعات راستایی از بین نمی‌رود.

که در آن  $R$  آهنگ واپاشی خودبه خود است. بنابراین، نیروی فشار تابش به صورت زیر است

$$F = \frac{\hbar\omega}{c} \frac{\gamma}{\hbar^2} |\langle \lambda | \mathbf{er} \cdot \mathbf{E} | \lambda^0 \rangle|^2 \frac{R/\gamma}{(\omega_0 - \omega)^2 + R^2/\gamma^2} \quad (31-22)$$

اکنون کمیت بی بعد زیر را معرفی می‌کنیم

$$I = \frac{|\langle \lambda | \mathbf{er} \cdot \mathbf{E} | \lambda^0 \rangle|^2}{(\hbar R/\gamma)^2} \quad (32-22)$$

که برحسب آن

$$F = \frac{\hbar\omega}{c} IR \frac{R^2/\gamma^2}{(\omega_0 - \omega)^2 + R^2/\gamma^2} \quad (33-22)$$

برای یک میدان ضعیف، یعنی برای مقادیر کوچک  $I$ ، این نیرو بسیار کوچک است. برای میدانهای بسیار شدید، یعنی برای مقادیر بزرگ  $I$ ، واپاشیهای القایی واپاشیهای خودبه خود را تحت الشعاع قرار می‌دهند، و در این شرایط اتم بین حالت پایه و حالت برانگیخته به سرعت نوسان می‌کند.<sup>۳</sup> مخصوصاً، فوتونهای گسیل شده با فوتونهای جذب شده هم‌دوس هستند، و از این رو اتم در مجموع هیچ تکانه‌ای جذب نمی‌کند. معلوم می‌شود که شدت بهینه لیزر به گونه‌ای است که  $I \approx 1$ . برای اتمی که در همان جهت باریکه حرکت می‌کند یک واکوکی انتقال دوپلری اضافی وجود دارد به طوری که

$$F = \frac{\hbar\omega}{c} IR \left[ \frac{R^2/\gamma^2}{(\omega - \omega_0 - \omega v/c)^2 + R^2/\gamma^2} \right] \quad (34-22)$$

اکنون اگر یک باریکه موج ایستاده در نظر بگیریم، یا معادل آن یک باریکه لیزر با همان بسامد  $\omega$  که در جهت منفی  $\approx$  انتشار می‌یابد اضافه کنیم، نیرویی در جهت مخالف، با بسامدی که به آبی منتقل شده است یعنی  $\omega(1 + v/c)$ ، به دست می‌آوریم. بنابراین، نیروی برابند وارد بر باریکه عبارت است از

$$F_{\text{برابند}} = \frac{\hbar\omega IR}{c} \left[ \frac{R^2/\gamma^2}{(\omega - \omega_0 - \omega v/c)^2 + R^2/\gamma^2} - \frac{R^2/\gamma^2}{(\omega - \omega_0 + \omega v/c)^2 + R^2/\gamma^2} \right]$$

۳. به‌بخش بعد مراجعه کنید.

تا کمترین مرتبه برحسب  $v/c$ ، به دست می آوریم

$$F_{\text{برایند}} = \hbar\omega IR/c^2 \frac{R^2/4}{(\omega - \omega_0)^2 + R^2/4} \frac{4\omega(\omega - \omega_0)^2}{(\omega - \omega_0)^2 + R^2/4} \quad (35-22)$$

$$= \frac{\hbar\omega IR}{c^2} \frac{R^2/4}{\delta^2 + R^2/4} \frac{4\omega\delta}{\delta^2 + R^2/4} v$$

از آنجا که  $\delta < 0$ ، یعنی بسامد لیزر اندکی پایین تر از قله تشدید  $\omega_0$  انتخاب شده است، این نیرو در جهت مخالف  $v$  است، یعنی یک نیروی مالشی به صورت  $F_{\text{برایند}} = -\beta v$  است. این نیرو تابع مقدار واکوکی است، و بیشترین مقدار آن وقتی است که  $dF/d\delta = 0$ ، یعنی وقتی که  $|\delta| = \omega_0 - \omega = R/2\sqrt{3}$ . حرکت اتم در هر سه بعد باید کند شود، و برای این منظور از سه جفت لیزر استفاده می شود تا محیطی به وجود آید که معمولاً آن را ملاس نوری می نامند. بنابراین، بیشینه نیروی مالشی به ازای  $I \approx 1$  عبارت است از

$$F \approx -\sqrt{\frac{27}{4}} \frac{\hbar\omega_0^2}{c^2} v \quad (36-22)$$

به اتمها همچنین یک نیروی کاتوره ای نیز وارد می شود که ناشی از برخورد های کاتوره ای با فوتونهایی است که باریکه لیزر را می سازند. بنابراین، اتمها مانند ذراتی رفتار می کنند که در یک شاره دارای حرکت براونی هستند. تفصیل فرایند سرد کردن فراتر از اهداف این بحث است، اما پیش بینی استدلال نیمه کلاسیک بالا این است که اتمها تا دمایی که با رابطه زیر داده می شود سرد می شوند

$$T = \frac{\hbar\omega}{kc}$$

که در آن  $k$  ثابت بولتزمن است. به طور کلی، این دما در گستره  $10^{-4} \times 2$  K است. بررسی عمیقتر جزئیات فرایند، که در آن واگنی ترازهای برانگیخته و قطبش فوتونها به حساب آورده می شوند، نشان می دهد که باید بتوان اتمها را تا دمایی از مرتبه  $10^{-5} \times 4$  K سرد کرد، که با آنچه از آزمایش به دست آمده است توافق دارد.<sup>۴</sup> در واقع، با پیشرفتهای اخیر در تکنولوژی سرد کردن لیزری اتمها، دماهای اتمی  $10^{-7} \times 7$  K حاصل شده اند. وقتی اتمها تا چنین دماهایی سرد می شوند، اندازه گیری پهنای خط طبیعی امکان پذیر می شود، و این تأثیر زیادی بر آزمون پیش بینیهای الکترو دینامیک کوانتومی دارد.

۴. برای یک بحث مفصل غیر فنی به مقاله زیر، که مراجع بسیاری در آن معرفی شده اند، مراجعه کنید

اتم دوترازی در میدان الکتریکی تکفام  
 دو حالت اتم مورد نظر را ویژه حالت‌های یک هامیلتونی  $H_0$  می‌گیریم:

$$\begin{aligned} H_0 |\phi_1\rangle &= E_1 |\phi_1\rangle \\ H_0 |\phi_0\rangle &= E_0 |\phi_0\rangle \end{aligned} \quad (37-22)$$

فرض می‌کنیم  $E_1 > E_0$ ، و از نمادنگاری

$$\omega_{d1} = (E_1 - E_0)/\hbar \quad (38-22)$$

و  $|\phi_1\rangle = |1\rangle$  و  $|\phi_0\rangle = |0\rangle$  استفاده خواهیم کرد. اکنون این دستگاه دوترازی را در یک میدان الکتریکی قرار می‌دهیم. فرض کنید این میدان الکتریکی به اندازه‌ای قوی است که اثرات مرتبه اول و دوم برحسب  $E$ ، برخلاف آنچه در بحث اثر اشتارک در فصل ۱۶ دیدیم، برای بررسی دستگاه کافی نیستند. بنابراین، از نظریه اختلال استفاده نخواهیم کرد. در اینجا هامیلتونی به صورت زیر است

$$H = H_0 + V(t) \quad (39-22)$$

که در آن، مانند سابق، داریم

$$V(t) = \frac{e}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{p} \quad (40-22)$$

$\mathbf{p}$  عملگر تکانه الکترون است، و در نتیجه

$$\mathbf{p} = \frac{im}{\hbar} [H_0, \mathbf{r}] \quad (41-22)$$

همچنین، از تقریب دو قطبی استفاده می‌کنیم، به طوری که

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_0 e^{-i\omega t} + \mathbf{A}_0^* e^{i\omega t} \quad (42-22)$$

یعنی پتانسیل برداری در پهنای اتم ثابت است. این پتانسیل را برحسب میدان الکتریکی می‌نویسیم. از رابطه

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \equiv \mathbf{E}_0 e^{-i\omega t} + \mathbf{E}_0^* e^{i\omega t}$$

نتیجه می‌گیریم که  $\mathbf{E}_0 = (i\omega/c)\mathbf{A}_0$  و  $\mathbf{E}_0^* = (-i\omega/c)\mathbf{A}_0^*$ . بنابراین،

$$V(t) = \frac{e}{\hbar\omega}(\mathbf{E}_0 e^{-i\omega t} - \mathbf{E}_0^* e^{i\omega t}) \cdot [H_0, \mathbf{r}] \quad (۴۳-۲۲)$$

بدین ترتیب، هر عنصر ماتریس عملگر  $V(t)$  به صورت زیر خواهد بود

$$\langle 0|V(t)|1\rangle = \frac{e}{\hbar\omega}(\langle 0|\mathbf{E}_0 \cdot E_0 - E_1\rangle\langle 1|\mathbf{r}|0\rangle e^{-i\omega t} - \langle 0|\mathbf{E}_0^* \cdot \mathbf{r}|1\rangle e^{i\omega t}) \quad (۴۴-۲۲)$$

اکنون جواب معادله شرودینگر وابسته به زمان را  $|\psi(t)\rangle$  می‌گیریم. با استفاده از قضیه بسط، مانند فصل ۲۱، می‌نویسیم

$$|\psi(t)\rangle = C_0(t)e^{-iE_0 t/\hbar}|0\rangle + C_1(t)e^{-iE_1 t/\hbar}|1\rangle \quad (۴۵-۲۲)$$

بنابراین، از

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = (H_0 + V(t))|\psi(t)\rangle$$

و ۴۵-۲۲، به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt}C_0(t)e^{-iE_0 t/\hbar}|0\rangle + i\hbar \frac{d}{dt}C_1(t)e^{-iE_1 t/\hbar}|1\rangle \\ = V(t)C_0(t)e^{-iE_0 t/\hbar}|0\rangle + V(t)C_1(t)e^{-iE_1 t/\hbar}|1\rangle \end{aligned}$$

اگر عناصر ماتریس این معادله را به ترتیب با ضرب کردن در  $\langle 0|$  و  $\langle 1|$  به دست آوریم، و با توجه به

$$\langle 0|\mathbf{r}|0\rangle = \langle 1|\mathbf{r}|1\rangle = 0 \quad (۴۶-۲۲)$$

به دو معادله زیر می‌رسیم

$$i\hbar \frac{d}{dt}C_0(t) = C_1(t)e^{-i\omega t}\langle 0|V(t)|1\rangle \quad (۴۷-۲۲)$$

و

$$i\hbar \frac{d}{dt}C_1(t) = C_0(t)e^{i\omega t}\langle 1|V(t)|0\rangle \quad (۴۸-۲۲)$$



صورت گسترده معادله ۲۲-۴۷ عبارت است از

$$i\hbar \frac{d}{dt} C_0(t) = \frac{\omega_d}{\omega} C_1(t) \{ -\langle 0 | e \mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r} | 1 \rangle e^{-i(\omega + \omega_d)t} + \langle 0 | e \mathbf{E}_0^* \cdot \mathbf{r} | 1 \rangle e^{-i(\omega_d - \omega)t} \}$$

ما با وضعیتهای فیزیکی کار خواهیم داشت که در آنها  $\omega$  نزدیک به  $\omega_d$  یا برابر با آن است. جمله شامل  $e^{-i(\omega_d + \omega)t}$  بسیار سریع نوسان می‌کند، و با میانگین‌گیری روی زمان سهمی به دست نمی‌دهد. مانند بحث تشدید پارامغناطیسی در فصل ۱۴، این‌گونه جمله‌ها را حذف می‌کنیم. این تقریب را غالباً تقریب موج چرخان می‌نامند. پس از حذف، به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} C_0(t) &= \frac{\omega_d}{\omega} C_1(t) \langle 0 | e \mathbf{E}_0^* \cdot \mathbf{r} | 1 \rangle e^{-i(\omega_d - \omega)t} \\ &\equiv \hbar \gamma C_1(t) e^{-i(\omega_d - \omega)t} \end{aligned} \quad (49-22)$$

که برحسب پارامتر واوکوی

$$\delta = \omega - \omega_d \quad (50-22)$$

به صورت زیر درمی‌آید

$$i\hbar \frac{d}{dt} C_0(t) = \hbar \gamma C_1 e^{i\delta t} \quad (51-22)$$

با همین تقریب، داریم

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} C_1(t) &= \frac{\omega_d}{\omega} C_0(t) \langle 1 | e \mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r} | 0 \rangle e^{i(\omega_d - \omega)t} \\ &= \hbar \gamma C_0(t) e^{-i\delta t} \end{aligned} \quad (52-22)$$

که در آن جمله

$$\gamma = \frac{\omega_d}{\hbar \omega} \langle 0 | e \mathbf{E}_0^* \cdot \mathbf{r} | 1 \rangle \quad (53-22)$$

را می‌توان حقیقی گرفت. با مشتق‌گیری از ۲۲-۴۹ نسبت به زمان، به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2} C_0(t) &= \gamma \delta C_1 e^{i\delta t} - i\gamma \frac{d}{dt} C_1(t) e^{i\delta t} \\ &= i\delta \frac{d}{dt} C_0(t) - \gamma^2 C_0(t) \end{aligned} \quad (54-22)$$

با یک جواب آزمونی به صورت

$$C_i(t) = e^{-i\Omega t} \quad (55-22)$$

نتیجه می‌گیریم که

$$\Omega^2 + \delta\Omega - \gamma^2 = 0 \quad (56-22)$$

یا

$$\Omega = \Omega_{\pm} = -\frac{1}{2}\delta \pm \sqrt{\frac{1}{4}\delta^2 + \gamma^2} \quad (57-22)$$

بنابراین، جواب عمومی به صورت زیر است

$$C_o(t) = e^{i\delta t/2} (A \cos \sqrt{\delta^2/4 + \gamma^2} t + B \sin \sqrt{\delta^2/4 + \gamma^2} t) \quad (58-22)$$

و

$$\begin{aligned} C_1(t) &= \frac{1}{\gamma} e^{-i\delta t} \frac{d}{dt} C_o(t) \\ &= -e^{-i\delta t/2} \left\{ \frac{\delta}{2\gamma} (A \cos \sqrt{\delta^2/4 + \gamma^2} t + B \sin \sqrt{\delta^2/4 + \gamma^2} t) \right. \\ &\quad \left. - i \frac{\sqrt{\delta^2/4 + \gamma^2}}{\gamma} (A \sin \sqrt{\delta^2/4 + \gamma^2} t - B \cos \sqrt{\delta^2/4 + \gamma^2} t) \right\} \end{aligned} \quad (59-22)$$

اگر دستگاه در  $t = 0$  در حالت  $|0\rangle$  باشد،  $C_o(0) = 1$  و  $C_1(0) = 0$ ، در نتیجه  $A = 1$  و  $B = 0$ ، یعنی  $B = 0$  و  $A = i\sqrt{\delta^2/4 + \gamma^2}$ ، بنابراین، در یک زمان بعد داریم

$$\begin{aligned} |C_o(t)|^2 &= \cos^2 \sqrt{\delta^2/4 + \gamma^2} t + \frac{\delta^2}{\delta^2 + 4\gamma^2} \sin^2 \sqrt{\delta^2/4 + \gamma^2} t \\ &= 1 - \frac{4\gamma^2}{\delta^2 + 4\gamma^2} \sin^2 \sqrt{\delta^2/4 + \gamma^2} t \end{aligned} \quad (60-22)$$

در مورد کوک کامل،  $\delta = 0$ ، از رابطه بالا به دست می آوریم

$$|C_0(t)|^2 = \cos^2 \gamma t \quad (61-22)$$

دستگاه با بسامد  $\gamma$  بین دو حالت نوسان می کند، و به طور متوسط نیمی از زمان را در حالت بالاتر و نیمی از زمان را در حالت پایتتر می گذرانند. این بسامد در  $\delta = 0$ ، یعنی وقتی  $\omega = \omega_0$ ، برابر است با

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \langle 0 | e \mathbf{E}_0^* \cdot \mathbf{r} | 1 \rangle \quad (62-22)$$

که بسامد رابی نامیده می شود. متذکر می شویم که  $\mathbf{E}_0^*$  متناسب با  $\mathbf{A}_0^*$  است، و از این رو هنگامی که حالت پایتتر  $|0\rangle$  نیز  $n$  فوتون با بسامد  $\omega$  داشته باشد آنگاه، بنابه ۲۲-۲،  $\mathbf{E}_0^*$  متناسب با  $\sqrt{n+1}$  است. بنابراین، می توان نوشت

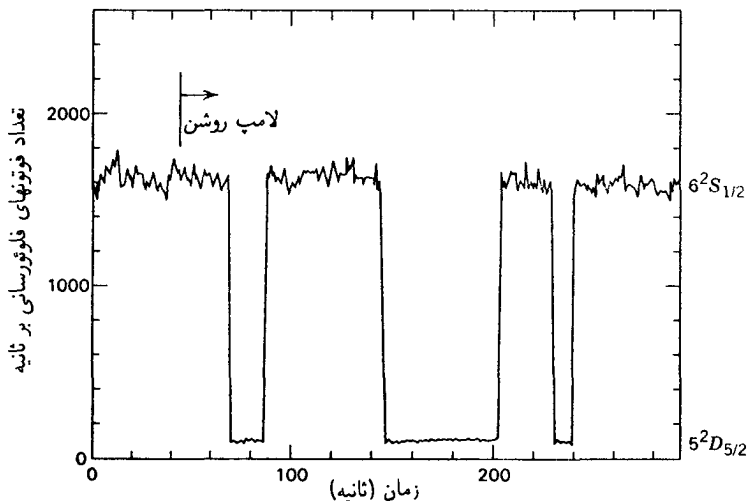
$$\gamma = \sqrt{n+1} \gamma_0 \quad (63-22)$$

به آسانی می توان نشان داد که اگر حالت اولیه دستگاه  $|1\rangle$  باشد، و این حالت  $n$  فوتون با بسامد  $\omega$  داشته باشد، آنگاه بسامد  $\gamma$  برابر است با  $\sqrt{n} \gamma_0$ .

بررسی اتمهای تک در یک کاواک که در آن تنها یک مد از میدان الکتریکی نوسانی موجود است با اختراع و ساخت دامهای بسامد رادیویی توسط ه داملت و همکارانش امکانپذیر شده است. نوسانهایی که معادله ۲۲-۶۱ پیش بینی می کند با آزمایش تأیید شده اند.

### مشاهده جهشهای کوانتومی

اختراع دامهایی که در آنها یونهای تک را بتوان مطالعه کرد روشهای مختلف جدیدی را برای بررسی اتمها فراهم می آورد. یک نظر ابتکاری را ابتدا ه داملت مطرح کرد و چند گروه تجربی در دهه گذشته آن را مشاهده کردند. اصول آزمایش را در اینجا بیان می کنیم. یک دستگاه سه ترازی شامل حالت پایه  $|0\rangle$  و حالت های برانگیخته  $|1\rangle$  و  $|2\rangle$  را در نظر بگیرید. گذار بین حالت های  $|0\rangle$  و  $|1\rangle$  مجاز است اما گذار بین حالت های  $|2\rangle$  و  $|0\rangle$  ممنوع است (البته نه مطلقاً)، و در نتیجه حالت  $|2\rangle$  شبه پایدار است. با یک چشمه شدید نور (لیزر) که برای بسامد زاویه ای  $\omega_{10} = (E_1 - E_0)/\hbar$  کوک شده است و همچنین یک چشمه ضعیف نور که برای بسامد زاویه ای  $\omega_{20} = (E_2 - E_0)/\hbar$  کوک شده است ام تم را در معرض تابش قرار می دهیم. تعداد گذارهای میان حالت پایه و حالت برانگیخته مجاز بسیار زیاد است. عملاً میدان قوی لیزری الکترون را با آهنگی بسیار تند به حالت  $|1\rangle$  برانگیخته می کند، و الکترون نیز با آهنگی بسیار تند به حالت پایه افت می کند. بنابراین، یک علامت



شکل ۲۲-۴ رد فلوتورسانی نوعی که جهشهای کوانتومی را نشان می‌دهد. در دوره‌های فلوتورسانی کم، اتم قطعاً در تراز شبه پایدار است.<sup>۵</sup>

پیوسته نور گسیلیده از اتم مشاهده می‌شود. این دقیقاً نمود نوسان رابی است که در بخش قبل بررسی شد. گاهی لیزر ضعیف الکترون را به حالت  $|2\rangle$  برانگیخته می‌کند. چون الکترون اکنون در یک حالت شبه پایدار است، افت آن به حالت پایه ممکن است چند ثانیه طول بکشد. در این مدت فلوتورسانی روی نمی‌دهد، یعنی اتم تاریک است. وقتی الکترون سرانجام به حالت پایه فرو افتاد، میدان لیزری قوی بلافاصله آن را به حالت برانگیخته مجاز برمی‌انگیزد، و الکترون به سرعت فرو می‌افتد، و بدین ترتیب باعث تداوم تابش فلوتورسان می‌شود. فلوتورسانی عملاً جهشهای کوانتومی بین حالت پایه و حالت شبه پایدار را دیدبانی می‌کند (شکل ۲۲-۴).

تحلیل ساده این فرایند به صورت زیر است. فرض کنید  $A_{10}$ ،  $B_{10}$  و  $A_{20}$  و  $B_{20}$  به ترتیب ضرایب اینشتین برای گذارهایی باشند که  $(0, 1)$  و  $(0, 2)$  را به هم مربوط می‌کنند. شرایط مربوط به گذارها ایجاب می‌کنند که  $A_{20} \gg A_{10}$ . اگر چگالیهای انرژی باریکه‌های لیزر به ترتیب  $U_1$  و  $U_2$  باشند، معادله آهنگ احتمال اینکه اتم در حالت برانگیخته  $|1\rangle$  باشد با فرض ناواگنی (و در نتیجه  $g_2 = 1$ ) عبارت است از

$$\frac{dP_1}{dt} = -P_1(A_{10} + B_{10}U_1) + B_{10}U_1P_0 \quad (۲۲-۶۴)$$

این معادله اتلاف احتمال ناشی از گسیل خودبه‌خود و القایی و افزایش احتمال به واسطه جذب

۵. اقتباس مجاز از

القایی از حالت پایه را توصیف می‌کند، و جملهٔ اخیر متناسب است با  $P_0$  یعنی احتمال اینکه الکترون در حالت پایه باشد. به همین ترتیب، معادلهٔ آهنگ احتمال اینکه اتم در حالت شبه‌پایدار (۲) باشد به صورت زیر است

$$\frac{dP_2}{dt} = -(A_{20} + B_{20}U_2)P_2 + B_{20}U_2P_0 \quad (۶۵-۲۲)$$

مجموع احتمالاتها برابر با ۱ است:  $P_0 + P_1 + P_2 = 1$ . اگر باریکهٔ لیزری که حالت پایه را به حالت برانگیخته (۱) جفت می‌کند شدید باشد آنگاه  $P_0 = P_1$  و  $U_1 \rightarrow \infty$ . بنابراین، اگر احتمال برانگیختگی به حالت شبه‌پایدار را با  $P_+$  نشان دهیم ( $P_+ = P_2$ ) و احتمال عدم برانگیختگی به این حالت را با  $P_-$  نشان دهیم ( $P_- = 1 - P_2 = P_0 + P_1$ )، این معادله‌ها منجر می‌شوند به

$$\frac{dP_+}{dt} = -R_-P_+ + R_+P_- \quad (۶۶-۲۲)$$

که در آن

$$\begin{aligned} R_+ &= \frac{1}{2}B_{20}U_2 \\ R_- &= A_{20} + B_{20}U_2 \end{aligned} \quad (۶۷-۲۲)$$

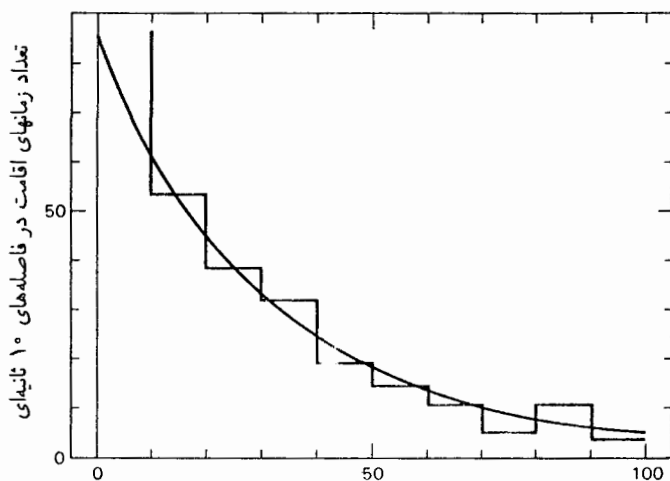
معادله

$$\frac{dP_-}{dt} = R_-P_+ - R_+P_- \quad (۶۸-۲۲)$$

خودبه‌خود با توجه به  $P_+ + P_- = 1$  به دست می‌آید. می‌توان این معادله‌ها را نمایشگر یک دستگاه دوترازی دانست که در آن آهنگ گذار به بالا  $R_+$  و آهنگ گذار به پایین  $R_-$  است. کمیتهایی که به لحاظ تجربی اهمیت دارند این احتمالات هستند که در بازهٔ زمانی  $t$  تا  $t + T$  هیچ گذاری روی ندهد و در انتهای این بازه الکترون به حالت برانگیخته برود ( $P_{0+}$ ) یا به حالت پایه ( $P_{0-}$ ). با کمی اندیشه می‌توان نتیجه گرفت که اگر آزمایش شروع شود و شدت باریکهٔ لیزر مستقل از زمان باشد، این احتمالات فقط تابع طول بازهٔ زمانی  $T$  هستند. معادله‌های آهنگ این احتمالات را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\frac{dP_{0+}}{dT} = -R_-P_{0+} \quad (۶۹-۲۲)$$

$$\frac{dP_{0-}}{dT} = -R_+P_{0-} \quad (۷۰-۲۲)$$



شکل ۲۲-۵ زمان اقامت در تراز شبه پایدار (برحسب ثانیه).<sup>۶</sup>

“شرایط اولیه” برای این معادله‌ها ایجاب می‌کنند که  $P_{0\pm}(T=0)$  را بدانیم. فرض کنید شدت فلوئورسانی در زمانی مانند  $t$  قطع شود. این زمان را به‌گونه‌ای انتخاب می‌کنیم که  $T=0$  و در نتیجه  $P_{0+}(T=0) = 1$ . جواب معادله با این شرط اولیه به‌صورت زیر است

$$P_{0+}(T) = e^{-R-T} \quad (۲۲-۷۱)$$

این احتمال آن است که پس از زمان  $T$  علامت هنوز “قطع” باشد. به‌همین ترتیب، می‌توان نشان داد که پس از برقرار شدن فلوئورسانی احتمال اینکه پس از بازه‌ی زمان  $T$  هنوز برقرار باشد به‌صورت زیر است

$$P_{0-}(T) = e^{-R+T} \quad (۲۲-۷۲)$$

از تحلیل آماری توزیع زمانهای برقراری و قطع، مانند آنچه در شکل ۲۲-۵ نشان داده شده است، می‌توان برای اندازه‌گیری  $A_2$  استفاده کرد. برای حالتی که عمر بسیار درازی دارند، اندازه‌گیری مستقیم  $A_2$  بسیار مشکل است، زیرا آهنگ گسیل فوتونها بسیار کوچک است، و فوتونها می‌توانند در همه‌ی راستاها گسیل شوند، و در نتیجه شمارش آنها فرایند بسیار کندی است. باید توجه کرد که در مکانیک کوانتومی معمولاً با مجموعه‌ی آماری بزرگی از دستگاههای یکسان سروکار داریم. در این مورد، یک اتم منفرد را بررسی می‌کنیم و به‌جای مجموعه‌ی آماری این عضو

۶. اقتباس مجاز از

مجموعه آماری را با شرایط اولیه یکسان بارها از نو آماده می‌کنیم. وقتی تابش به پیوستاری از حالتها گسیل می‌شود به‌طور کلی این کار امکانپذیر نیست، اما برای مورد خاص میدان الکتریکی تک‌مد امکانپذیر است.

## اثر موسباور

یک اتم (یا هر دستگاه کوانتومی دیگر) می‌تواند مانند یک ساعت دقیق کار کند، زیرا گذارهای آن را تابشهایی اعلام می‌کنند که بسامدهای کاملاً معینی دارند. اگر پهنای طبیعی خط تنها محدودیت موجود بود، می‌توانستیم به دقت بسیار زیادی دست یابیم.

متأسفانه، چنانکه در بحث سرد کردن اتمها گفته شد، حرکت اتمها باعث پهن‌شدگی دوبلری خط می‌شود. شاید فکر کنید استفاده از یک چشمه مایع یا جامد می‌تواند این اثر را حذف کند، اما آنگاه پهن‌شدگی ناشی از تأثیر اتمهای مجاور به همان اندازه مضر خواهد بود. گذارهای هسته‌ای را در نظر می‌گیریم. هسته‌ای مانند  $^{191}\text{Ir}$  یک پرتو  $\gamma$  با انرژی از مرتبه  $10^5 \text{ keV}$ ، با طول عمر  $10^{-12}$ ، گسیل می‌کند. در این مورد،

$$\frac{\Delta\omega}{\omega} = \frac{\Delta E}{E} = \frac{\hbar/\tau}{E} \cong \frac{10^{-27}/10^{-10}}{10^5 \times 1.6 \times 10^{-12}} \cong 0.6 \times 10^{-10} \quad (73-22)$$

متأسفانه یک جابه‌جایی خط ناشی از پس‌زنی وجود دارد. پرتو  $\gamma$  حامل تکانه  $\hbar\omega/c$  است، و هسته برای پایستگی تکانه باید با همین تکانه پس بزند. این پس‌زدن با انرژی پس‌زنی

$$\Delta E = \frac{P_{\text{پس‌زنی}}^2}{2M} = \frac{1}{2M} \left( \frac{\hbar\omega}{c} \right)^2 \quad (74-22)$$

و در نتیجه با کاهش انرژی تابش شده همراه است. تغییر نسبی بسامد برابر است با

$$\frac{\Delta E}{\hbar\omega} \cong \frac{\hbar\omega}{2Mc^2} \cong \frac{10^{-1}(\text{MeV})}{2 \times 940 \times 191(\text{MeV})} \cong 3 \times 10^{-7} \quad (75-22)$$

مشاهده تابشی با این انرژی را نمی‌توان با روشهای مرسوم، اگرچه بسیار دقیق‌اند، انجام داد بلکه باید از آشکارسازی استفاده کرد که دقیقاً برای این تابش "کوک" شده باشد. این کار به بهترین نحو با استفاده از همان ماده گسیلنده (مثلاً  $^{191}\text{Ir}$ ) به‌عنوان جاذب تابش صورت می‌گیرد. جذب در بسامد "تشدید" که در آن تابش گسیل شده است به مقدار بسیار زیادی تقویت می‌شود، اما در اینجا نیز جابه‌جایی پس‌زنی وجود خواهد داشت. بنابراین، جابه‌جایی کل برابر است با  $\omega/\omega \cong 6 \times 10^{-7}$ . بدین ترتیب، این "کوک دقیق" کارایی ندارد، زیرا خط به‌اندازه‌ای بیشتر

از پهنای خود، که از مرتبه  $\omega^{-1} \approx 10^{-10}$  است، جابه‌جا می‌شود. می‌توان این پس‌زدن را با حرکت دادن گسیلنده با سرعت پس‌زنی جبران کرد. این سرعت از رابطه زیر به دست می‌آید

$$\frac{v}{c} = \frac{P_{\text{پس‌زنی}}}{Mc} = \frac{\hbar\omega/c}{Mc} = \frac{\hbar\omega}{2Mc^2} \approx 6 \times 10^{-7} \quad (76-22)$$

یعنی  $v = 1.6 \times 10^2 \text{ cm/s}$ . این مقدار نشان‌دهنده مشکلات فنی است، اما با یک دستگاه فرامرکز‌گریز تحقق یافته است.

یک پیشرفت بزرگ با کشف موسباؤر در سال ۱۹۵۸ روی داد: در شرایط خاصی احتمال زیادی برای گسیل بدون پس‌زنی وجود دارد. البته گسیل همیشه با پس‌زدن همراه است، اما به جای هسته قسمت بزرگی از بلور که هسته در آن قرار دارد پس می‌زند. چون جرم بلور  $10^{22}$  بار بیشتر از جرم هسته است، انرژی پس‌زنی کاملاً قابل چشم‌پوشی است. برای اینکه درکی شهودی از آنچه روی می‌دهد به دست آوریم، فرض می‌کنیم هسته در یک چاه نوسانگر هماهنگ، با بسامد مشخصه  $\omega$ ، حرکت می‌کند. ترازهای نوسانگر عبارت‌اند از

$$E_n = \hbar\omega_0 \left( n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right) \quad (77-22)$$

این چاه هماهنگ در واقع یک توصیف تقریبی از نیروهای بلورینی است که خواص شبکه را تعیین می‌کنند. اگر نیروهایی که هسته را به همسایه‌هایش می‌پیوندد قوی باشند — اگر “فترها” سفت باشند — آنگاه  $\omega$  بزرگ است؛ اگر “فترها” نرم باشند،  $\omega$  کوچک است. فاصله ترازها برای “فتر سفت” زیاد است، یعنی چگالی حالت‌های آن کوچک است، در حالی که چگالی حالت برای “فتر نرم” بزرگ است. اکنون به بررسی عنصر ماتریس مربوط به گذار از حالت هسته‌ای  $\Psi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$  به حالت هسته‌ای  $\Psi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$  می‌پردازیم، و برهم‌کنش را به صورت

$$-\frac{e}{Mc} \sum_{\text{پروتونها}} \mathbf{p}_k \cdot \mathbf{A}_k(\mathbf{r}_k, t) \quad (78-22)$$

می‌گیریم. عنصر ماتریس مزبور متناسب است با

$$-\frac{e}{Mc} \int \dots \int d^3\mathbf{r}_1, \dots, d^3\mathbf{r}_N \Psi_f^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \sum_k \mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_k e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_k} \Psi_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (79-22)$$

اگر مختصه مرکز جرم  $\mathbf{R} = (1/N) \sum_i \mathbf{r}_i$  را وارد کنیم آنگاه (الف) جمله برهم‌کنش به صورت



زیر درمی آید

$$-\frac{e}{Mc} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \sum_{\text{بردونها}} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{p}_k e^{-i\mathbf{k}\cdot\rho_k} \quad (۸۰-۲۲)$$

که در آن  $\rho_i = \mathbf{r}_i - \mathbf{R}$  و (ب) تابع موج هسته به حاصلضربی که حرکت داخلی و حرکت مرکز جرم هسته را در پتانسیل هماهنگ توصیف می کند تجزیه می شود:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \psi_{n_x n_y n_z}(\mathbf{R}) \phi(\rho_1, \dots, \rho_{N-1}) \quad (۸۱-۲۲)$$

با جاگذاری در ۲۲-۷۹ به دست می آوریم

$$-\frac{e}{Mc} \int d^3\mathbf{R} \psi_{n_f}^*(\mathbf{R}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_{n_i}(\mathbf{R}) \quad (۸۲-۲۲)$$

$$\times \int d^3\rho_1, \dots, d^3\rho_{N-1} \phi_f^*(\rho_1, \dots, \rho_{N-1}) \sum_{\text{بردونها}} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{p}_k e^{-i\mathbf{k}\cdot\rho_k} \phi_i(\rho_1, \dots, \rho_{N-1})$$

بنابراین، می توان عنصر ماتریس را به صورت زیر نوشت

$$M = M_{\text{داخلی}} \int d^3\mathbf{R} \psi_{n_f}^*(\mathbf{R}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_o(\mathbf{R}) \quad (۸۳-۲۲)$$

که در آن قرار داده ایم  $n_i = 0$ ، زیرا هسته در ابتدا در حالت پایه شبکه است. احتمال اینکه گذار تابشی هسته را در حالت پایه شبکه باقی بگذارد عبارت است از

$$P_o(k) = \frac{|M_{\text{داخلی}}|^2 \left| \int d^3\mathbf{R} \psi_o^*(\mathbf{R}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_o(\mathbf{R}) \right|^2}{|M_{\text{داخلی}}|^2 \sigma_{n_f} \left| \int d^3\mathbf{R} \psi_{n_f}^*(\mathbf{R}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_o(\mathbf{R}) \right|^2} \quad (۸۴-۲۲)$$

$$= \left| \int d^3\mathbf{R} \psi_o^*(\mathbf{R}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_o(\mathbf{R}) \right|^2$$

که در آن حاصل جمع در مخرج کسر را، با استفاده از رابطه کاملیت، برابر با ۱ قرار داده ایم.<sup>۷</sup> برای

۷. اثبات صوری از همه سریعتر است. داریم

$$\sum_{n_f} |\langle n_f | e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} | o \rangle|^2 = \sum_{n_f} \langle o | e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} | n_f \rangle \langle n_f | e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} | o \rangle$$

با توجه به  $\langle n_f | n_f \rangle = 1$  به دست می آوریم  $\langle o | e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} | o \rangle = 1$ .

محاسبه این احتمال، از تابع موج حالت پایه بهنجارشده نوسانگر استفاده می‌کنیم. در فصل ۷ برای تابع موج حالت پایه یک بعدی به دست آوردیم

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-m\omega_0 x^2/2\hbar}$$

بنابراین، در سه بعد داریم

$$\psi_0(\mathbf{R}) = \psi_0(x)\psi_0(y)\psi_0(z) = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{3/4} e^{-m\omega_0 \mathbf{R}^2/2\hbar} \quad (۸۵-۲۲)$$

پس باید کمیت زیر را محاسبه کنیم

$$\left| \left(\frac{M_N\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{3/4} \int d^3\mathbf{R} e^{-M_N\omega_0 \mathbf{R}^2/\hbar} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \right|^2$$

که در آن  $M_N$  جرم هسته است. می‌نویسیم

$$\begin{aligned} P_0 &= \left(\frac{M_N\omega_0}{\pi\hbar}\right)^3 \left| \int d^3\mathbf{R} e^{-(M_N\omega_0/\hbar)[\mathbf{R}+i\mathbf{k}(\hbar/2M_N\omega_0)]^2} e^{-k^2\hbar/4M_N\omega_0} \right|^2 \\ &= e^{-\hbar k^2/2M_N\hbar\omega_0} \\ &= e^{-(\text{فاصله تراز}/\text{انرژی پس‌زنی})} \end{aligned} \quad (۸۶-۲۲)$$

زیرا  $P_{\text{پس‌زنی}} = \hbar k$ ، و  $\hbar\omega_0$  فاصله تراز در شبکه است. بنابراین، اگر فاصله تراز بزرگ باشد، یعنی یک فتر سفت داشته باشیم، گسیل بدون پس‌زنی محتمل‌تر می‌شود. الگویی که در اینجا برای شبکه به‌کار بردیم، که در آن هر هسته در پتانسیل هماهنگ خودش حرکت می‌کند، الگوی شبکه اینشتین است، و بسامد  $\omega_0$  بسامد دبی است، و از این رو باید به جای  $\omega_0$  در واقع  $\omega_D$  را به‌کار می‌بردیم، که رابطه آن با دمای دبی  $T_D$  به صورت زیر است

$$\hbar\omega_D = kT_D \quad (۸۷-۲۲)$$

یک بررسی دقیقتر با استفاده از الگوی دبی برای توصیف شبکه تنها نما را به اندازه ضریب  $3/2$  تغییر می‌دهد.

کاملاً درست نیست که بگوییم تمام بلور پس زده می شود؛ واقعیت این است که در یک زمان  $\tau$  برابر با طول عمر گذار ( $10^{-14} \times 1.4$  برای  $Fe^{57}$ ) تنها یک ناحیه از بلور با اندازه زیر پس زنی را جذب می کند

$$L = v_s \tau$$

که در آن  $v_s$  سرعت انتشار آشفستگی (یعنی سرعت صوت) در شبکه است. اما برآورد درستی از  $v_s$  از رابطه زیر به دست می آید

$$v_s \simeq \frac{a\omega_D}{2\pi}$$

که در آن  $a$  ثابت شبکه است. بنابراین،

$$\frac{L}{a} \simeq \frac{\omega_D \tau}{2\pi}$$

و با  $\omega_D \simeq 10^{13} \text{ s}^{-1}$  تعداد هسته های جذب کننده پس زنی، که از مرتبه  $(L/a)^2$  است، باز هم بسیار زیاد است.

با استفاده از برآوردهای بالا، همراه با رابطه عدم قطعیت، می توان نشان داد که نمی توان تعیین کرد که این یک هسته منفرد است که "واقعاً" پس می زند یا نه؟ برای اندازه گیری انرژی پس زنی  $\hbar k^2 / 2M_N$  به زمانی از مرتبه زیر احتیاج داریم

$$\Delta t \gg \frac{\hbar}{(\hbar^2 k^2 / 2M_N)}$$

شرط روی دادن اثر موسباور این است که

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2M_N} < \hbar\omega_D$$

در نتیجه، به دست می آوریم

$$\Delta t \gg \frac{1}{\omega_D}$$

در این مدت، آشفتنگی فاصله زیر را طی می‌کند

$$d \simeq v_s \Delta t \sim \frac{a\omega_D}{2\pi} \Delta t \gg \frac{a}{2\pi}$$

که چندین هسته را در برمی‌گیرد.

این سؤال پیش می‌آید که چگونه با استفاده از حالت‌های انرژی هسته در شبکه بلور می‌توان مسئلهٔ پس‌زنی و پایستگی تکانه را حل کرد؟ در کجای این رهیافت گفته می‌شود که بلور تکانه را جذب می‌کند؟ جواب کوانتوم-مکانیکی این است که اگر بخواهیم دربارهٔ تکانه صحبت کنیم باید در نمایش تکانه کار کنیم. اما این روش پیچیده است، زیرا توصیف نیروهای بلور در این نمایش مشکل است. آنچه باید انجام داد تجزیهٔ حرکت بلور-بلور در واقع تعدادی نوسانگر است که "فترهای" هر یک از آنها همسایگان مجاورش هستند— به مدهای بهنجار و کوانتیده کردن اینهاست. کوانتومهای حرکت شبکه، مانسته‌های فوتون، را فوتون می‌نامند. بنابراین، گسیل بدون پس‌زنی به معنای گذاری است که در آن فوتون گسیل نمی‌شود. فرمول حاصل بسیار شبیه به ۲۲-۸۶ است. در این شرایط، پهن‌شدگی ناشی از پس‌زنی در مقایسه با پهنای طبیعی خط بینهایت کوچک است. باز هم یک پهن‌شدگی دوپلری ناشی از حرکت گرمایی وجود خواهد داشت، اما این مشکل را می‌توان با سرد کردن گسیلنده و جاذب چاره کرد.

گسیلنده‌های بدون پس‌زنی یک ساعت عالی در اختیار ما می‌گذارند، و تحقیقات با استفاده از اثر موسباؤر در بسیاری از زمینه‌ها، مانند فیزیک حالت جامد و شیمی، صورت می‌گیرند. در اینجا تنها یک کاربرد، اندازه‌گیری زمینی انتقال به سرخ‌گرانشی، را بیان می‌کنیم. بنابه اصل هم‌ارزی، اگر فوتونی به اندازه  $x$  سقوط کند، انتقال بسامد آن عبارت است از

$$\frac{\Delta\omega}{\omega} = \frac{g \cdot r}{c^2} \quad (۸۸-۲۲)$$

این انتقال را می‌توان با پس‌زنی جاذب با سرعت  $v$ ، که از رابطهٔ زیر تعیین می‌شود، جبران کرد

$$v^2 = 2gr \quad (۸۹-۲۲)$$

(اگر فوتون و جاذب با هم سقوط آزاد می‌کردند، جذب تشدید روی می‌داد.) اگر جاذب یا چشمه را به نوسان سریع درآوریم—با استفاده از یک مبدل—و منحنی جذب را به این نوسانها ارتباط دهیم، می‌توانیم انتقال گرانشی را واریسی کنیم. چون سرعت، برای فاصلهٔ  $x = 20\text{ m}$  از مرتبهٔ  $20\text{ m/s}$  است، این آزمایش شدنی است، و چندین گروه آن را انجام داده‌اند. با توجه به خطاهای آزمایش، این اثر تأیید شده است. به‌عنوان مثال، برای  $\text{Fe}^{57}$  انتقال پیش‌بینی شده برابر است با  $10^{-15} \times 4.92 \times 10^8$ ، و مقدار تجربی که پوند و ربکا به‌دست آورده‌اند

$10^{-15} \times (51 \pm 13)$  ر. است. آزمایش مشابهی که در آن جابه‌جایی انرژی پرتو  $\gamma$  گسیل شده از  $Fe^{57}$  واقع بر یک میزچه چرخان اندازه‌گیری شده است باز هم نتایجی در تأیید اصل هم‌ارزی به‌دست داده است.

### مراجع

- بحث مناسبی دربارهٔ نظریهٔ کوانتومی نور، با کاربرد آن در لیزرها، را می‌توان در کتاب زیر یافت  
 R Loudon, *The Quantum Theory of Light*, Clarendon Press, Oxford, 1986.
- برای مبحث اثر موسباور مراجعه کنید به  
 H Lipkin, *Quantum Mechanics-New Approaches to Selected Topics*, North-Holland, Amsterdam, 1973.

## نظریه برخورد

کاوش در ساختار اتمی و مولکولی تا حد زیادی از طریق طیف نمایی انجام شده است. اگر بخواهیم نیروهای هسته‌ای و قانونهای حاکم بر برهم‌کنشهای ذرات بنیادی را درک کنیم، تنها روش موجود استفاده از پراکندگی ذرات گوناگون از هدفهای مختلف است. به یک معنا، طیف نمایی نیز صورتی از "پراکندگی" است. اتم در حالت پایه با پرتابه‌ای (که می‌تواند الکترون در لامپ تخلیه باشد) یا با برخورد با ذرات دیگر هدف (مثلاً در گرم کردن گاز) برانگیخته می‌شود، و سپس با بازگشت اتم به حالت پایه یا افت آن به یک حالت برانگیخته دیگر یک فوتون خروجی مشاهده می‌شود. معمولاً این فرایندها را "برخورد" نمی‌نامیم زیرا اتم ترازهای انرژی کاملاً معینی دارد که برای زمانهای بسیار طولانیتر از زمان برخورد در آنها توقف می‌کند،<sup>۱</sup> و در نتیجه می‌توان "واپاشی" را از فرایند برانگیزش متمایز کرد. مخصوصاً، مشخصه‌های واپاشی به مد خاص برانگیختگی حساس نیستند. هسته و ذرات بنیادی نیز دارای ترازهای انرژی هستند، اما معمولاً طول عمر آنها به اندازه کافی زیاد نیست که بتوان تفکیک به برانگیختگی و واپاشی را تضمین کرد، به خصوص چون همراه با پراکندگی "تشدید" یک پراکندگی غیرتشیددی "زمینه" نیز وجود دارد، و جدا کردن این دو از هم گاهی پیچیده است. بنابراین، در این فصل فرایند را به طور کلی بررسی خواهیم کرد.

۱. یادآوری می‌کنیم که طول عمر حالت  $2p$  در هیدروژن  $1.6 \times 10^{-8}$  s است، که در مقایسه با زمان مشخصه  $a_0/c \approx 2 \times 10^{-17}$  s بسیار بزرگ است.

## سطح مقطع برخورد

بهترین راه بررسی پراکندگی فرمولبندی کردن معادله‌هایی است که آنچه را روی می‌دهد به دقت توصیف کنند: یک ذره فرودی که با یک بسته موج توصیف می‌شود به هدف نزدیک می‌شود. این بسته موج باید از لحاظ فضایی بزرگ باشد، و از این رو در طی آزمایش به طور محسوسی پخش نمی‌شود، و باید در مقایسه با ذره هدف بزرگ اما در مقایسه با ابعاد آزمایشگاه کوچک باشد، یعنی نباید هدف و آشکارساز را به طور همزمان ببیند. در واقع، اندازه‌های جانبی را پهنای باریکه در شتابدهنده تعیین می‌کند. سپس برهم‌کنش با هدف روی می‌دهد، و در نهایت دو بسته موج خواهیم دید: یکی همچنان در جهت جلو حرکت می‌کند و قسمت ناپراکنده باریکه را نشان می‌دهد، و دیگری که تحت یک زاویه دور می‌شود نمایشگر ذرات پراکنده است. تعداد ذراتی که به ازای واحد شار فرودی در واحد زمان به درون یک زاویه فضایی پراکنده می‌شوند بنابه تعریف سطح مقطع دیفرانسیلی پراکندگی است. این رهیافت را مستقیماً به کار نمی‌بریم<sup>۲</sup>، و به جای آن از بعضی از مطالب فصل ۱۰ برای تعیین سطح مقطع دیفرانسیلی استفاده خواهیم کرد. اما به هنگام تعبیر نتایج صوری مفهوم بسته موج را در نظر خواهیم داشت.

در بحث جوابهای پیوستاری معادله شرودینگر در فصل ۱۰ نتیجه گرفتیم که (الف) جواب معادله شرودینگر در غیاب پتانسیل به صورت تخت  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  است که شار زیر را توصیف می‌کند

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{im}(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} \quad (1-23)$$

اگر راستای  $\mathbf{k}$  را محور  $z$  بگیریم، می‌توانیم رفتار این جواب به ازای مقادیر بزرگ  $r$  را به صورت مجموعی از امواج کروی ورودی و خروجی بنویسیم (به ۱۰-۷۲ مراجعه کنید):

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \Rightarrow \frac{i}{\sqrt{k}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \left[ \frac{e^{-i(kr-l\pi/2)}}{r} - \frac{e^{i(kr-l\pi/2)}}{r} \right] P_l(\cos \theta) \quad (2-23)$$

(ب) پایستگی ذرات به این نتیجه منجر می‌شود که وجود یک پتانسیل شعاعی تنها می‌تواند  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  را به تابعی تغییر دهد که صورت مجانبی آن عبارت است از

$$\psi(\mathbf{r}) \Rightarrow \frac{i}{\sqrt{k}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \left[ \frac{e^{-i(kr-l\pi/2)}}{r} - S_l(k) \frac{e^{i(kr-l\pi/2)}}{r} \right] P_l(\cos \theta) \quad (3-23)$$

۲. برای ملاحظه بحث جالبی با استفاده از این رهیافت به مقاله زیر، که از لحاظ ریاضی در سطح این کتاب است، مراجعه کنید:

که در آن<sup>۲</sup>

$$|S_l(k)| = 1 \quad (۴-۲۳)$$

صورت مجانبی ۳-۲۳ را می‌توان با استفاده از ۲-۲۳ تبدیل کرد به

$$\psi(\mathbf{r}) \Rightarrow e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \left[ \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{S_l(k) - 1}{2ik} P_l(\cos \theta) \right] \frac{e^{ikr}}{r} \quad (۵-۲۳)$$

که یک موج تخت به علاوه یک موج کروی خروجی را نان می‌دهد. توجه کنید که با معادله عملاً تک‌ذره‌ای شرودینگر کار می‌کنیم، و در نتیجه  $m$  جرم کاهیده است و  $\theta$  عبارت است از زاویه، در دستگاه مرکز جرم، میان راستای  $\mathbf{k}$  (محور  $z$ ) و نقطه مجانبی  $\mathbf{r}$  که شمارشگر احتمالاً در آنجا قرار داده می‌شود. وقتی هدف بسیار سنگینتر از پرتابه است، تفاوتی میان زاویه آزمایشگاه و زاویه مرکز جرم وجود ندارد. همچنین توجه کنید که می‌توانستیم جوابی به صورت یک موج تخت به علاوه یک موج کروی ورودی بسازیم، زیرا می‌توان جمله اول در ۳-۲۳ را با ضربی که در ۴-۲۳ صدق کند تغییر داد. اما جوابی که پراکندگی را توصیف می‌کند باید شامل موج خروجی باشد. اکنون شار مربوط به جواب مجانبی ۵-۲۳ را محاسبه می‌کنیم. می‌نویسیم

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2im} \left\{ \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right]^* \nabla \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right] - \text{همیوغ مختلط} \right\} \quad (۶-۲۳)$$

$f(\theta)$  در این رابطه عبارت است از

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l(k) P_l(\cos \theta) \quad (۷-۲۳)$$

که در آن

$$f_l(k) = [S_l(k) - 1] / 2ik \quad (۸-۲۳)$$

۳. بحث پس از ۱۰-۸۹ را ببینید.  $S_l(k)$  نمادنگاری متعارف برای  $e^{2i\theta_l(k)}$  است که در ۱۰-۸۸ تعریف شده است.



با محاسبه گرادیان به دست می آوریم

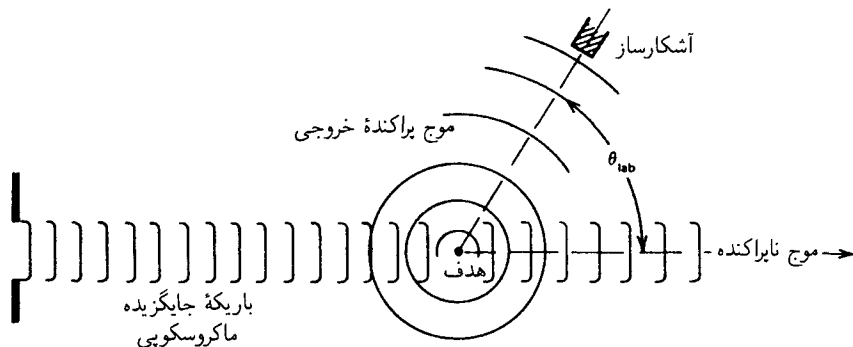
$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= \frac{\hbar}{\sqrt{im}} \left\{ \left[ e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f^*(\theta) \frac{e^{-ikr}}{r} \right] \left[ i\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \hat{l}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial f(\theta)}{\partial \theta} \frac{e^{ikr}}{r} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \hat{l}_r f(\theta) \left( ik \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{ikr}}{r^2} \right) \right] - \text{همیوغ مختلط} \right\} \\ &= \frac{\hbar}{\sqrt{im}} \left\{ i\mathbf{k} + ik f^*(\theta) \frac{e^{-ikr(1-\cos\theta)}}{r} + ik \hat{l}_r f(\theta) \frac{e^{ikr(1-\cos\theta)}}{r} + ik \hat{l}_r |f(\theta)|^2 \frac{1}{r^2} \right. \\ &\quad \left. - \hat{l}_r f(\theta) \frac{e^{ikr(1-\cos\theta)}}{r^2} + \hat{l}_\theta \frac{\partial f(\theta)}{\partial \theta} \frac{e^{ikr(1-\cos\theta)}}{r^2} - \text{همیوغ مختلط} \right\} \end{aligned}$$

در عوامل نمایی از  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = kr \cos \theta$  استفاده کرده ایم.  $\hat{l}_r$  بردار یکه در راستای  $\mathbf{r}$  است. در محاسبه بالا، جمله های  $1/r^2$  را کنار گذاشته ایم زیرا به ازای مقادیر بزرگ  $r$  تحت الشعاع جمله های  $1/r^2$  قرار می گیرند. باید شار را در مکان آشکارساز یعنی در فاصله  $r$  از مبدأ، که در آن پتانسیلی که باعث پراکندگی می شود جایگزیده است، به دست آورد و از این رو مقادیر بزرگ  $r$  را در نظر می گیریم. در نتیجه، این شار برابر است با

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= \frac{\hbar k}{m} + \frac{\hbar k}{m} \hat{l}_r |f(\theta)|^2 \frac{1}{r^2} \\ &\quad + \frac{\hbar k}{\sqrt{m}} \frac{1}{r} \left[ f^*(\theta) e^{-ikr(1-\cos\theta)} + f(\theta) e^{ikr(1-\cos\theta)} \right] \\ &\quad + \frac{\hbar k}{\sqrt{m}} \frac{\hat{l}_r}{r} \left[ f^*(\theta) e^{-ikr(1-\cos\theta)} + f(\theta) e^{ikr(1-\cos\theta)} \right] \quad (9-23) \\ &\quad - \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{\hat{l}_r}{r^2} \left[ f(\theta) e^{ikr(1-\cos\theta)} - f^*(\theta) e^{-ikr(1-\cos\theta)} \right] \\ &\quad + \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{\hat{l}_\theta}{r^2} \left[ \frac{\partial f(\theta)}{\partial \theta} e^{ikr(1-\cos\theta)} - \frac{\partial f^*(\theta)}{\partial \theta} e^{-ikr(1-\cos\theta)} \right] \end{aligned}$$

با توجه به اینکه  $\theta \neq 0$ ، زیرا هیچگاه آزمایش پراکندگی را مستقیماً در جهت جلو انجام نمی دهیم،<sup>۴</sup> و اینکه در یک اندازه گیری همیشه از شار روی یک زاویه فضایی کوچک اما متناهی انتگرال می گیریم، رابطه نسبتاً پیچیده بالا به طور قابل ملاحظه ای ساده می شود. بنابراین، در چهار جمله آخر

۴. چگونه می توان پراکندگی را با ذرات نابراکنده بررسی کرد؟



شکل ۱-۲۳ تصویر نموداری آزمایش پراکندگی. زاویه پراکندگی زاویه در آزمایشگاه است.

این رابطه باید به جای  $e^{ikr(1-\cos\theta)}$  انتگرال زیر را گذاشت

$$\int \sin\theta \, d\theta \, d\phi \, g(\theta, \phi) e^{ikr(1-\cos\theta)} \quad (۱۰-۲۳)$$

که در آن  $g(\theta, \phi)$  یک نوع تابع پذیرش جایگزیده هموار برای شمارشگر است. اکنون وقتی  $r \rightarrow \infty$  یک انتگرال روی حاصلضرب یک تابع هموار و تابعی که بسیار سریع تغییر می‌کند داریم، و این انتگرال سریعتر از هر توان  $1/r$  به صفر میل می‌کند. این چیزی است که در متون ریاضی لم ریمان-لیبگ نامیده می‌شود، و در مسئله ۷-۲۳ نشان داده شده است. بدین ترتیب، تنها دو جمله اول باقی می‌مانند، و در نتیجه

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar\mathbf{k}}{m} + \frac{\hbar k}{m} \hat{r}_r \frac{|f(\theta)|^2}{r^2} \quad (۱۱-۲۳)$$

در غیاب پتانسیل تنها جمله اول باقی می‌ماند. این جمله شار فرودی را نشان می‌دهد. در رهیافت بسته موجی، باید  $\hbar\mathbf{k}/m$  را در تابعی ضرب کنیم که ابعاد جانبی باریکه را تعیین می‌کند. بنابراین، اگر بخواهیم شار شعاعی  $\hat{r}_r \cdot \mathbf{j}$  را به دست آوریم، جمله مزبور مقدار  $\hbar\mathbf{k} \cdot \hat{r}_r / m = \hbar k (\cos\theta) / m$  را نشان می‌دهد (شکل ۱-۲۳). چون شمارشگر خارج از این ناحیه قرار دارد، این جمله اول در ناحیه مجانبی هیچ سهمی در شار شعاعی ندارد، و از این رو تنها جمله دوم در ۱۱-۲۳ مؤثر است، و داریم

$$\mathbf{j} \cdot \hat{r}_r = \frac{\hbar k}{m} \cdot \frac{|f(\theta)|^2}{r^2} \quad (۱۲-۲۳)$$

بنابراین، تعداد ذراتی که از سطحی می‌گذرند که در مبدأ (هدف) زاویه فضایی  $d\Omega$  را می‌سازد برابر

است با

$$\mathbf{j} \cdot \hat{i}_r dA = \frac{\hbar k}{m} \cdot \frac{|f(\theta)|^2}{r^2} r^2 d\Omega \quad (13-23)$$

توجه کنید که  $r^2$  حذف می‌شود، و از این رو حذف جمله‌های  $1/r^2$  در ۹-۲۳ توجیه می‌شود، زیرا این جمله‌ها باعث می‌شوند جمله‌هایی از مرتبه  $1/kr$  در تعداد ذرات دخالت داشته باشند. سطح مقطع دیفرانسیلی عبارت است از این تعداد تقسیم بر شار فرودی  $\hbar k/m$ ، یعنی

$$d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega \quad (14-23)$$

اگر پتانسیل به‌اسپین وابسته باشد، یک وابستگی سمتی نیز ظاهر می‌شود، و در نتیجه به‌طور کلی داریم

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \phi)|^2 \quad (15-23)$$

سطح مقطع کل از رابطه زیر به‌دست می‌آید

$$\sigma_{\text{کل}}(k) = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} \quad (16-23)$$

اکنون اگر از  $f(\theta)$  که برحسب  $S_l(k)$  بیان شده است استفاده کنیم و  $S_l(k)$  را برحسب تغییر فاز بیان کنیم، یعنی  $S_l(k) = e^{i\delta_l(k)}$  (به ۸۶-۱۰ تا ۸۹-۱۰ مراجعه کنید) به‌طوری که

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (\nu_l + 1) e^{i\delta_l(k)} \sin \delta_l(k) P_l(\cos \theta) \quad (17-23)$$

آنگاه

$$\sigma_{\text{کل}} = \int d\Omega \left[ \frac{1}{k} \sum_l (\nu_l + 1) e^{i\delta_l(k)} \sin \delta_l(k) P_l(\cos \theta) \right] \left[ \frac{1}{k} \sum_{l'} (\nu_{l'} + 1) e^{-i\delta_{l'}(k)} \sin \delta_{l'}(k) P_{l'}(\cos \theta) \right]$$

و با استفاده از

$$\int d\Omega P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) = \frac{4\pi}{2l+1} \delta_{ll'} \quad (18-23)$$

به دست می آوریم

$$\sigma_{js} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) \quad (19-23)$$

جالب توجه است که

$$\begin{aligned} \text{Im}f(\circ) &= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \text{Im}[e^{2i\delta_l(k)} \sin \delta_l(k)] P_l(1) \\ &= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) = \frac{k}{4\pi} \sigma_{js} \end{aligned} \quad (20-23)$$

این رابطه را قضیهٔ اپتیکی می نامند، و برای فرایندهای ناکشسان، مانند فرایندهای پراکندگی که در فیزیک هسته‌ای و ذره‌ای روی می دهند، نیز صادق است. این رابطه بسیار مفید است و به زبان موجی بیان کنندهٔ این واقعیت است که سطح مقطع کل نمایشگر حذف شار از باریکهٔ فرودی است. این حذف تنها می تواند پیامد تداخل ویرانگر باشد، و این تداخل تنها می تواند بین موج فرودی و موجی روی دهد که به طور کشسان در جهت جلو پراکنده شده است. به همین دلیل است که  $f(\circ)$  به صورت خطی ظاهر می شود.

این نوع استدلال سست توضیح نمی دهد که چرا قسمت انگاری باید دخیل باشد، اما می توان نشان داد که این مطلب عموماً درست است.<sup>۵</sup>

### پراکندگی کشسان و ناکشسان

شرط  $|S_l(k)| = 1$  پیامد پایستگی شار است. عملاً در بسیاری از آزمایشهای پراکندگی جذب باریکهٔ فرودی صورت می گیرد؛ هدف ممکن است صرفاً برانگیخته شود، یا تغییر حالت دهد، یا ممکن است ذرهٔ دیگری ظاهر شود. در این شرایط، بحث بالا تغییر نمی کند بجز اینکه باید از رابطهٔ زیر استفاده کنیم

$$S_l(k) = \eta_l(k) e^{2i\delta_l(k)} \quad (21-23)$$

که در آن

$$0 \leq \eta_l(k) \leq 1 \quad (22-23)$$

۵. مراجعه کنید به

زیرا با جذب سروکار داریم. دامنه پراکندگی پاره موج اکنون عبارت است از

$$f_l(k) = \frac{S_l(k) - 1}{2ik} = \frac{\eta_l(k)e^{i\delta_l(k)} - 1}{2ik} = \frac{\eta_l \sin 2\delta_l}{2k} + i \frac{1 - \eta_l \cos 2\delta_l}{2k} \quad (23-23)$$

و سطح مقطع کل کشسان به صورت زیر است

$$\begin{aligned} \sigma_{el} &= 4\pi \sum_l (2l+1) |f_l(k)|^2 \\ &= 4\pi \sum_l (2l+1) \frac{1 + \eta_l^2 - 2\eta_l \cos 2\delta_l}{4k^2} \end{aligned} \quad (24-23)$$

برای فرایندهای ناکشسان نیز سطح مقطع کل داریم. چون جزئیات فرایندهای ناکشسان را مشخص نمی‌کنیم، تنها می‌توان درباره سطح مقطع کل ناکشسان که اتلاف شار را توصیف می‌کند صحبت کرد. اگر یک جمله خاص را در ۲۳-۳ در نظر بگیریم، شار شعاعی درونسو که با

$$\frac{i}{2k} \frac{e^{-ikr}}{r} P_l(\cos \theta)$$

حمل می‌شود عبارت است از

$$\left( \frac{\hbar k}{m} \right) \left[ \frac{4\pi}{(2k)^2} \right]$$

(یادآوری می‌کنیم که  $Y_{l0} = P_l(\cos \theta) / \sqrt{4\pi}$ ). شار شعاعی برونسو

$$(\hbar k/m) |S_l(k)|^2 4\pi / 4k^2$$

است، و در نتیجه اتلاف کل شار به‌ازای هر مقدار  $l$  برابر است با

$$(\hbar k/m) (\pi/k^2) [1 - \eta_l^2(k)]$$

بنابراین، با تقسیم بر شار فرودی به دست می‌آوریم

$$\sigma_{\text{ناکشسان}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) [1 - \eta_l^2(k)] \quad (25-23)$$

بدین ترتیب، سطح مقطع کل عبارت است از

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{کل}} &= \sigma_{\text{کشسان}} + \sigma_{\text{ناکشسان}} \\ &= \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) (1 + \eta_l^2 - 2\eta_l \cos 2\delta_l + 1 - \eta_l^2) \\ &= \frac{2\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) (1 - \eta_l \cos 2\delta_l) \end{aligned} \quad (26-23)$$

همچنین از ۲۳-۲۳ نتیجه می‌گیریم که

$$\begin{aligned} \text{Im}f(\circ) &= \sum_l (2l+1) \text{Im}f_l(k) \\ &= \sum_l (2l+1) \frac{1 - \eta_l \cos 2\delta_l}{2k} = \frac{k}{4\pi} \sigma_{\text{کل}} \end{aligned} \quad (27-23)$$

که نشان می‌دهد قضیهٔ اپتیکی واقعاً صادق است.

اگر  $\eta_l(k) = 1$  جذب صورت نمی‌گیرد، و سطح مقطع ناکشسان صفر می‌شود. وقتی  $\eta_l(k) = 0$  جذب کامل داریم. با این همه، باز هم پراکندگی کشسان برای پاره موج روی می‌دهد. این پدیده در پراکندگی از قرص سیاه مشاهده می‌شود. قرص سیاه به این صورت توصیف می‌شود که (الف) دارای لبهٔ معین است و (ب) کاملاً جاذب است. چون پراکندگی در طول موجهای کوتاه را بررسی خواهیم کرد، یعنی وقتی مقادیر  $k$  بزرگ هستند، شرط (الف) ایجاب می‌کند که تنها پاره‌موجهای  $L \lesssim l$  را در نظر بگیریم.  $L$  در رابطهٔ زیر صدق می‌کند

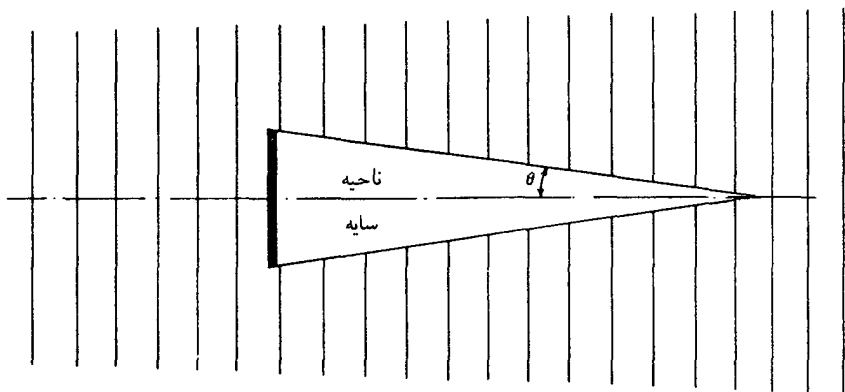
$$L = ka \quad (28-23)$$

که در آن  $a$  شعاع قرص است. شرط (ب) نشان می‌دهد که برای مقادیر مربوط  $l \leq L$  داریم  $\eta_l(k) = 0$ . بنابراین،

$$\sigma_{\text{ناکشسان}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^L (2l+1) = \frac{\pi}{k^2} L^2 = \pi a^2 \quad (29-23)$$

و

$$\sigma_{\text{کشسان}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^L (2l+1) = \pi a^2 \quad (30-23)$$



شکل ۲۳-۲ پراکندگی قرص سیاه و اثر سایه.

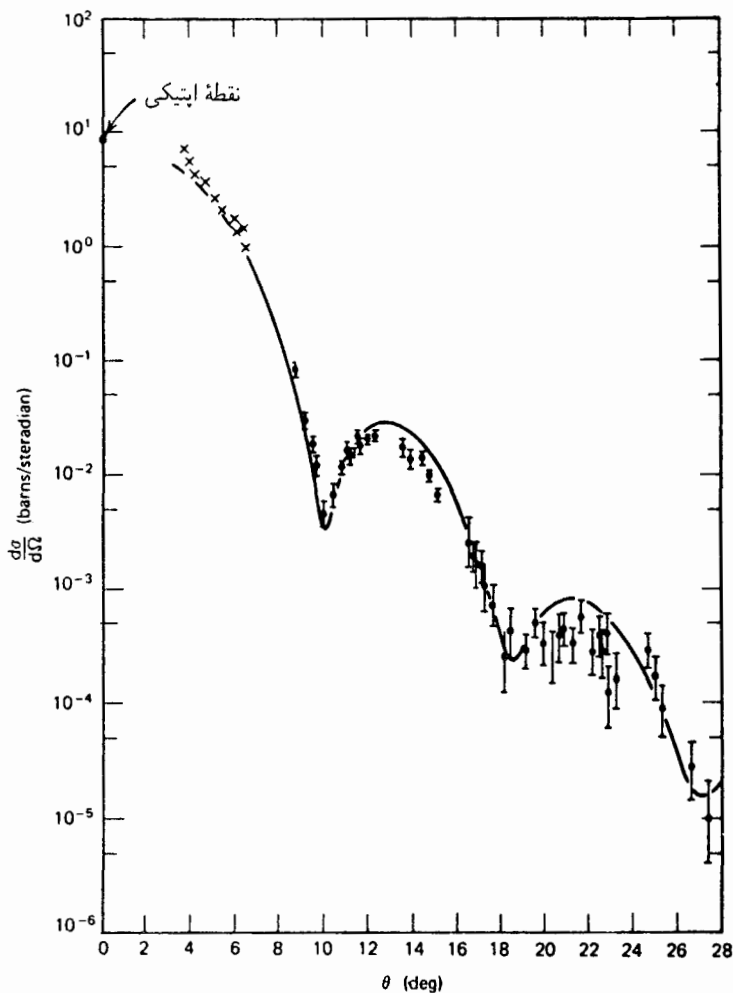
بدین ترتیب، سطح مقطع کل برابر است با

$$\sigma_{\text{کل}} = \sigma_{\text{کشسان}} + \sigma_{\text{ناکشسان}} = 2\pi a^2 \quad (۳۱-۲۳)$$

این نتیجه عجیب به نظر می‌رسد؛ به دلایل صرفاً کلاسیک شاید انتظار داشته باشیم که سطح مقطع کل نتواند بزرگتر از مساحت قرص باشد؛ همچنین ممکن است انتظار داشته باشیم وقتی جذب کامل داریم پراکندگی کشسان روی ندهد. اما این نتیجه‌گیری اشتباه است؛ قرص جاذب شاری متناسب با  $\pi a^2$  را از باریکه فرودی حذف می‌کند (شکل ۲۳-۲) و این باعث ایجاد سایه در پشت قرص می‌شود. اما در نقاط دور از قرص سایه پر می‌شود. در نقاط به اندازه کافی دور نمی‌تواند قرص را "دید" — و این محو شدن سایه تنها با پراش قسمتی از موج فرودی در لبه قرص می‌تواند روی دهد. مقداری از موج فرودی که باید پراشیده شود به همان اندازه است که برای ایجاد سایه از باریکه حذف شده است. بنابراین، شاری که به‌طور کشسان پراکنده می‌شود نیز باید متناسب با  $\pi a^2$  باشد. پراکندگی کشسانی که با جذب همراه است به دلیل بالا پراکندگی سایه نامیده می‌شود. این پراکندگی قله تیزی در جهت جلو دارد. زاویه محدودکننده آن را می‌توان از اصل عدم قطعیت برآورد کرد: عدم قطعیت در جهت جانبی به اندازه  $a$  باعث انتقال تکانه جانبی مهارناپذیری به اندازه  $p_{\perp} \sim \hbar/a$  می‌شود. اما این مقدار برابر است با  $\theta$ ، و در نتیجه

$$\theta \sim \frac{\hbar}{ap} \sim \frac{\lambda}{ak} \quad (۳۲-۲۳)$$

این نتیجه با نتیجه اپتیکی  $\theta \sim \lambda/a$  توافق دارد. این ویژگیها هم در پراکندگی هسته‌ای و هم در پراکندگی ذره در انرژیهای زیاد مشاهده می‌شوند، زیرا ناحیه مرکزی هسته‌ها و پروتونها شدیداً



شکل ۲۳-۳ توزیع زاویه‌ای پراکندگی پروتونهای  $1000 \text{ MeV}$  ( $1 \text{ GeV}$ ) از هسته‌های  $^{16}\text{O}$ . در این توزیع زاویه‌ای فرورفتگی‌هایی دیده می‌شوند که مشخصه پراش هستند. انحراف از نقش پراش فرانهور (در ایتیک) به علت این است که هسته‌ها لبه تیز ندارند و جاذب کامل هم نیستند. این منحنی حاصل یک محاسبه نظری است که این اثرات را به حساب آورده است.<sup>۶</sup>

جاذب هستند، و لبه‌های آنها کم و بیش تیز هستند (شکل ۲۳-۳).

۶. اقتباس مجاز از



## پراکندگی در انرژیهای کم

با استفاده از بسط تغییر فاز ۲۳-۱۷ می‌توان سطح مقطع دیفرانسیلی را برحسب تغییر فازها بیان کرد:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} \left| \sum_l (2l+1) e^{i\delta_l(k)} \sin \delta_l(k) P_l(\cos \theta) \right|^2 \quad (۲۳-۳۳)$$

بر اساس تطابق با نظریه کلاسیک، انتظار داریم که تکانه زاویه‌ای دخیل در پراکندگی دارای کران  $pa$  باشد که در آن  $p$  تکانه مرکز جرم و  $a$  برد نیروها است. بنابراین، انتظار داریم که

$$l \lesssim \frac{pa}{\hbar} = ka \quad (۲۳-۳۴)$$

با محدود کردن مجموع در ۲۳-۳۳، می‌توان با برازش سطح مقطع دیفرانسیلی اندازه‌گیری شده در چند زاویه به صورتی مانند

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_{n=0}^N A_n (\cos \theta)^n \quad (۲۳-۳۵)$$

تغییر فازها را برای تعداد محدودی از مقادیر  $l$  تعیین کرد. ابهاماتی وجود دارند، از جمله اینکه اگر علامت تمام تغییر فازها را عوض کنیم سطح مقطع تغییر نمی‌کند. اما اینها را می‌توان با استفاده از نظریه، پیوستگی از انرژیهای کم، و شگردهای دیگر رفع کرد. امید می‌رود که از تغییر فازها، که داده‌های تجربی مربوط به آنها از داده‌های مربوط به سطح مقطعها به نظریه نزدیکترند، بتوان اطلاعاتی درباره برهم‌کنش به دست آورد.

تغییر فازهای،  $\delta_l(k)$  و پتانسیل  $V(r)$  از طریق معادله شرودینگر به هم مربوط می‌شوند؛ معادله شعاعی جوابی دارد که با تقریب یک ضریب دامنه دارای رفتار مجانبی زیر است

$$R_l(r) \sim \frac{1}{r} \sin \left[ kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l(k) \right] \quad (۲۳-۳۶)$$

بنابراین، با داشتن  $V(r)$ ، روش سرراست تعیین  $\delta_l(k)$  انتگرال‌گیری عددی معادله شعاعی تا مقادیر  $r$  که دورتر از برد پتانسیل هستند و بررسی رفتار مجانبی است. در واقع، این کاری است که عملاً انجام می‌شود، اما از این راه تصویر روشنی درباره خواص تغییر فازها به دست نمی‌آید. برای کسب اطلاعات بیشتر درباره تغییر فازها، چاه پتانسیل مربعی را در نظر می‌گیریم. در فصل ۱۰ دیدیم که

$$\tan \delta_l(k) = -\frac{C}{B} \quad (۲۳-۳۷)$$

که در آن نسبت طرف راست از جور کردن تابع موج شعاعی داخلی و خارجی (رابطه ۱۰-۸۵) به دست می‌آید:

$$\kappa \frac{j_l'(\kappa a)}{j_l(\kappa a)} = k \frac{j_l'(ka) + (C/B)n_l'(ka)}{j_l(ka) + (C/B)n_l(ka)} \quad (38-23)$$

در این معادله

$$\kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0) \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (39-23)$$

و علامت ' به معنای مشتق‌گیری نسبت به شناسه است. برای پتانسیل جاذبه داریم  $V_0 > 0$ . بنابراین

$$\tan \delta_l(k) = \frac{kj_l'(ka) j_l(\kappa a) - \kappa j_l(ka) j_l'(ka)}{\kappa n_l'(ka) j_l(\kappa a) - \kappa n_l(ka) j_l'(ka)} \quad (40-23)$$

این رابطه چندان گویا نیست، اما می‌توان آن را در بعضی موارد حدی ساده کرد. (الف) موردی را در نظر بگیرید که

$$ka \ll l \quad (41-23)$$

لزومی ندارد که  $ka \ll l$  با استفاده از فرمولهای ۱۰-۶۶ و ۱۰-۶۷ به دست می‌آوریم

$$\tan \delta_l(k) \simeq \frac{2l+1}{[1 \times 3 \times 5 \dots (2l+1)]^2} (ka)^{2l+1} \frac{l j_l(\kappa a) - \kappa a j_l'(\kappa a)}{(l+1) j_l(\kappa a) + \kappa a j_l'(\kappa a)} \quad (42-23)$$

که به ازای مقادیر بزرگ  $l$  سریعتر از  $e^{-l}$  افت می‌کند حتی اگر  $ka \gg l$ . رفتار

$$\tan \delta_l(k) \sim k^{2l+1} \quad (43-23)$$

به ازای  $ka \rightarrow 0$  منحصر به چاه پتانسیل مربعی نیست بلکه برای تمام پتانسیلهای به اندازه کافی هموار صادق است، و این یک پیامد سد مرکزگریزی است که نمی‌گذارد امواجی که انرژی آنها خیلی کمتر از ارتفاع سد است تحت تأثیر پتانسیل قرار گیرند.

(ب) به ازای مقادیر مشخصی از انرژی، مخرج کسر  $۲۳-۴۰$  صفر می‌شود، و در نتیجه در این انرژیها تغییر فاز از  $\pi/۲$ ، یا به طور کلی از  $(n + ۱/۲)\pi$ ، می‌گذرد. وقتی تغییر فاز  $\pi/۲$  است، سطح مقطع پاره‌موج

$$\sigma_l(k) = \frac{4\pi(2l+1)}{k^2} \sin^2 \delta_l(k) \quad (۴۴-۲۳)$$

بیشترین مقدار ممکن را دارد. وقتی  $\tan \delta_l(k)$  به سرعت بینهایت شود و از  $-\infty$  به افزایش ادامه دهد پراکندگی تشدید می‌داریم. برای توجیه این نامگذاری، و توضیح اینکه چه موقع پراکندگی تشدید روی می‌دهد، چاه پتانسیل را بسیار عمیق و همچنین  $l$  را بزرگ می‌گیریم، به طوری که

$$\kappa a \gg l \gg ka \quad (۴۵-۲۳)$$

بنابراین، می‌توان از  $۴۲-۲۳$  برای  $\tan \delta_l(k)$  استفاده کرد، و این وقتی بینهایت می‌شود که

$$(l+1)j_l(\kappa a) + \kappa a j_l'(\kappa a) = 0 \quad (۴۶-۲۳)$$

چون  $l \gg \kappa a$ ، شرط بالا تقریباً معادل است با

$$\frac{(l+1)}{\kappa a} \cos\left(\kappa a - \frac{1}{4}\pi\right) - \sin\left(\kappa a - \frac{1}{4}\pi\right) = 0$$

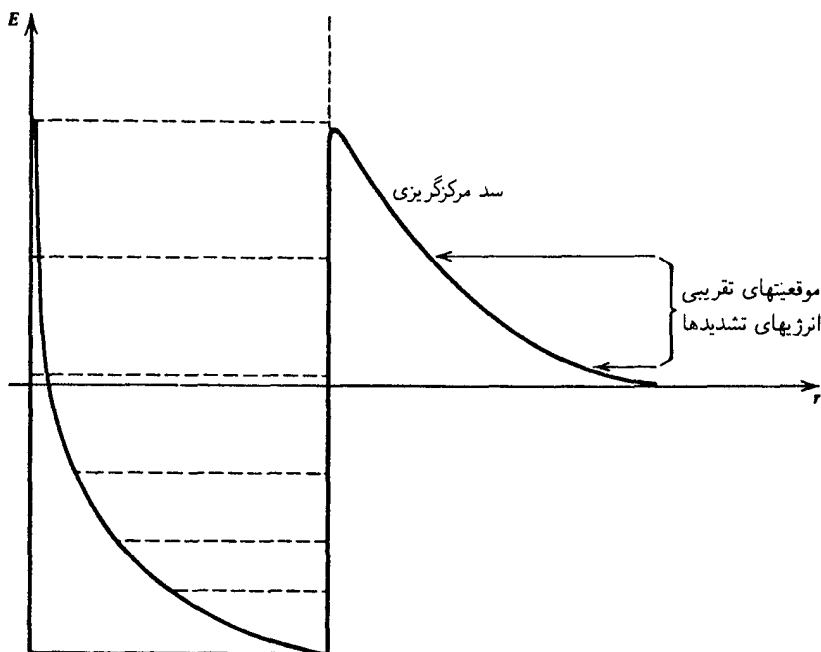
یعنی

$$\tan\left(\kappa a - \frac{1}{4}\pi\right) \simeq \frac{l+1}{\kappa a} \quad (۴۷-۲۳)$$

چون طرف راست بسیار کوچک است، شرط تشدید عبارت است از

$$\kappa a - \frac{1}{4}\pi \cong n\pi + \frac{l+1}{\kappa a} \quad (۴۸-۲۳)$$

اما این همان شرط  $۱۰-۷۶$  برای وجود ترازهای گسسته در جعبه سه بعدی است، و در نتیجه پراکندگی تشدید وقتی روی می‌دهد که انرژی فرودی درست به اندازه‌ای باشد که با یک تراز انرژی تطبیق کند. چون  $E > 0$ ، این ترازها واقعاً حالت‌های مقید نیستند، بلکه چنانکه شکل  $۲۳-۴$  نشان می‌دهد ترازهایی هستند که اگر سد بینهایت ضخیم می‌بود مقید می‌شدند. ضخامت سد بینهایت



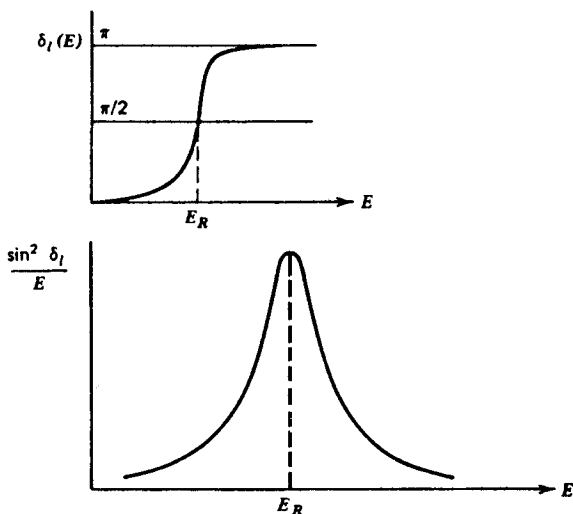
شکل ۲۳-۴ نمودار نمایشگر چاه پتانسیل مربعی با سد مرکزگریزی. خط چینها ترازهای انرژی را در یک چاه مربعی نامتناهی به عرض  $a$  نشان می‌دهند، و موقعیتهای تقریبی انرژیهای پراکندگی تشدیدی در سمت راست نشان داده شده‌اند. موقعیت پایین بسیار مشخصتر از موقعیت بالا است.

نیست، اما ذره‌ای که دقیقاً با انرژی مناسب پراکنده می‌شود باز هم "می‌داند" که یک تراز مجاز وجود دارد.

در مبحث ویژه ۴، پراکندگی فوتون در انرژی متناظر با حالتی را بررسی می‌کنیم که باید در غیاب جفت‌شدگی به میدان تابش پایا باشد. در آنجا همین وضعیت، و همچنین یک رفتار تشدیدی، را خواهیم دید.

### فرمول برایت-ویگنر

چنانکه ۲۳-۴۲ نشان می‌دهد، تغییر فاز به‌ازای مقادیر کوچک  $ka$  بسیار کوچک است. با وجود این، وقتی  $ka$  تغییر می‌کند و از تشدید می‌گذرد،  $\delta_l$  به سرعت زیاد می‌شود و به اندازه  $\pi$  افزایش می‌یابد؛ در نتیجه، سطح مقطع پاره‌موج ۲۳-۴۴ یک قله بسیار تیز در انرژی تشدید پیدا می‌کند (شکل ۲۳-۵). این رفتار بسیار شبیه به سطح مقطع پراکندگی الکترونها از  $\text{He}^+$  در انرژی مربوط به حالت برانگیخته  $2s$  (شکل ۱۸-۴) است. در نزدیکی انرژی تشدید، تغییر فاز به سرعت از



شکل ۲۳-۵ سطح مقطع پاره‌موج مربوط به تغییر فاز که در قسمت بالا رسم شده است.

$\pi/2$  می‌گذرد. این رفتار را می‌توان با رابطه زیر نشان داد

$$\tan \delta_l \approx \frac{\gamma(ka)^{2l+1}}{E - E_{\text{تندید}}} \quad (۲۳-۴۹)$$

این رابطه به سطح مقطع پاره‌موج زیر می‌رسد

$$\sigma_l = \frac{4\pi(2l+1)}{k^2} \frac{\tan^2 \delta_l}{1 + \tan^2 \delta_l} = \frac{4\pi(2l+1)}{k^2} \frac{[\gamma(ka)^{2l+1}]^2}{(E - E_{\text{تندید}})^2 + [\gamma(ka)^{2l+1}]^2} \quad (۲۳-۵۰)$$

که فرمول برایت-ویگنر برای سطح مقطعهای تشدید است. باز هم این رفتار منحصر به چاه پتانسیل مربعی نیست بلکه مشخصه تمام پتانسیلهایی است که برای آنها حالت‌های شبه پایدار می‌توانند حالت‌های مقیدی را در بیش از  $E = 0$  به وجود آورند. صرفاً برای کامل بودن بحث متذکر می‌شویم که

$$\begin{aligned} f_l(k) &= \frac{e^{2i\delta_l(k)} - 1}{2ik} = \frac{1 + i \tan \delta_l}{1 - i \tan \delta_l} - 1 \\ &= \frac{\tan \delta_l}{k(1 - i \tan \delta_l)} = \frac{\gamma(ka)^{2l+1}/k}{E - E_{\text{تندید}} - i\gamma(ka)^{2l+1}} \end{aligned} \quad (۲۳-۵۱)$$

اگر پراکندگی غیرتشدیدی قابل ملاحظه باشد، دامنهٔ پراکندگی به صورت زیر خواهد بود

$$f_l(k) = f_l^{\text{تشدیدی}}(k) + f_l^{\text{غیرتشدیدی}}(k) \quad (۵۲-۲۳)$$

پراکندگی موج  $S$  برای چاه مربعی

در انرژیهای کم، پراکندگی عمدتاً در حالت‌های  $S$  است، و در نتیجه می‌توان تنها  $l = 0$  را در نظر گرفت. ساده‌تر این است که به جای استفاده از  $۲۳-۴۰$  تغییر فاز را مستقیماً محاسبه کنیم. جواب داخل چاه که در  $r = 0$  منظم است عبارت است از

$$u(r) = rR(r) = C \sin \kappa r \quad (۵۳-۲۳)$$

و این را باید با جواب خارج چاه یعنی

$$u(r) = \sin(kr + \delta) \quad (۵۴-۲۳)$$

جور کنیم. از پیوستگی  $(\nabla u)(du/dr)$  در  $r = a$  داریم

$$\kappa \cot \kappa a = k \cot(ka + \delta)$$

یعنی

$$\tan \delta = \frac{(k/\kappa)\tan \kappa a - \tan ka}{1 + (k/\kappa)\tan \kappa a \tan ka} \quad (۵۵-۲۳)$$

اگر تعریف کنیم

$$\tan qa = \frac{k}{\kappa} \tan \kappa a$$

آنگاه

$$\tan \delta = \frac{\tan qa - \tan ka}{1 + \tan qa \tan ka} = \tan (qa - ka)$$

یعنی

$$\delta = \tan^{-1} \left( \frac{k}{\kappa} \tan \kappa a \right) - ka \quad (۵۶-۲۳)$$

با توجه به ۳۳-۳۹ می‌توان نوشت

$$(\kappa a)^2 = (ka)^2 + \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} \quad (57-23)$$

که در آن برای پتانسیل جاذبه داریم  $V_0 > 0$ . بنابراین، در انرژیهای بسیار کم، با استفاده از  $\tan x \simeq x$  به‌ازای  $x \ll 1$  به‌دست می‌آوریم

$$\tan \delta \approx \delta \approx ka \left( \frac{\tan \kappa a}{\kappa a} - 1 \right) \quad (58-23)$$

وقتی  $\kappa a$  از  $\pi/2$  می‌گذرد (فرض کنید چاه پتانسیل را به‌تدریج عمیق می‌کنیم)، که درست این شرط است که چاه برای به‌وجود آمدن یک حالت مقید به‌اندازه کافی عمیق باشد (معادله ۵-۶۹)، آنگاه  $\tan \kappa a \rightarrow \infty$  و ۲۳-۵۵ نشان می‌دهد که

$$\tan \delta = \frac{1}{\tan \kappa a} \rightarrow \infty \quad (59-23)$$

یعنی  $\delta$  از  $\pi/2$  می‌گذرد. به یک معنا، حالت مقید در انرژی صفر مانند تشدید است. وقتی چاه کمی عمیق‌تر می‌شود، باز هم داریم  $\tan \delta \sim O(ka)$  و پیوستگی ایجاب می‌کند در شاخه‌ای باشیم که

$$\delta \approx ka \left( \frac{\tan \kappa a}{\kappa a} - 1 \right) \quad (\text{بدون حالت مقید}) \quad (60-23)$$

$$\delta \approx \pi + ka \left( \frac{\tan \kappa a}{\kappa a} - 1 \right) \quad (\text{با حالت مقید})$$

اگر پتانسیل باز هم عمیق‌تر شود، دومین حالت مقید به‌وجود می‌آید،  $\kappa a$  از  $3\pi/2$  می‌گذرد، و داریم  $\delta \approx \pi + ka[(\tan \kappa a / \kappa a) - 1]$ ، و غیره. یک نتیجه کلی، به‌نام قضیه لویسون، وجود دارد که بنابه آن

$$\delta(0) - \delta(\infty) = N_B \pi \quad (61-23)$$

که در آن  $N_B$  تعداد حالت‌های مقید است، و ۲۳-۶۰ مثالی از آن است.

### رابطهٔ میان دامنهٔ پراکندگی و انرژی بستگی

در انرژیهای بسیار کم فقط  $l = 0$  در سطح مقطع سهم است، و این سهم عبارت است از

$$\sigma \cong \frac{4\pi}{k^2} (ka)^2 \left( \frac{\tan \kappa a}{\kappa a} - 1 \right)^2 = 4\pi a^2 \left( \frac{\tan \kappa a}{\kappa a} - 1 \right)^2 \quad (62-23)$$

که مقداری ثابت است. البته یک تصحیح از مرتبهٔ  $(ka)^2$  روی این نتیجه خواهیم داشت. اگر پراکندگی نوترون-پروتون را در نظر بگیریم، می‌دانیم که پتانسیل باید به‌گونه‌ای باشد که انرژی بستگی درست دوترون را به‌دست دهد. اگر بنویسیم

$$E = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}$$

و

$$\kappa = \sqrt{-\alpha^2 + \frac{2mV_0}{\hbar^2}}$$

(عملاً برای مسئلهٔ حالت مقید  $k^2 = -\alpha^2$ ) از جورکردن تابع موج خارج از پتانسیل  $u(r) = A e^{-\alpha r}$  به جواب داخل آن  $B \sin \kappa r$  در مرز به‌دست می‌آوریم

$$\kappa \cot \kappa a = -\alpha \quad (63-23)$$

به‌ازای  $k \ll \kappa$  داریم

$$\left( \frac{\tan \kappa a}{\kappa a} \right)_{\text{پراکندگی}} \cong \left( \frac{\tan \kappa a}{\kappa a} \right)_{\text{دوترون}} = -\frac{1}{a\alpha} \quad (64-23)$$

بنابراین

$$\sigma \cong 4\pi a^2 \left( 1 + \frac{1}{a\alpha} \right)^2 \cong \frac{4\pi}{\alpha^2} (1 + 2a\alpha) \quad (65-23)$$

بدین ترتیب، در تقریب انرژی کم ۶۴-۲۳ می‌توان از مسئلهٔ تعیین پتانسیل و سپس محاسبهٔ سطح مقطع اجتناب کرد. این تقریب تنها وقتی به‌کار می‌آید که انرژی بستگی کوچک باشد. کمیت  $1/a$  فاصله‌ای است که تابع موج دوترون در آن امتداد دارد، و این فاصله بسیار بیشتر از برد پتانسیل  $a$  برای دستگاه مقید سست است. در انرژیهای کم، سطح مقطع پراکندگی را  $1/a$  تعیین می‌کند نه برد پتانسیل.



## پراکندگی وابسته به اسپین

در دهه ۱۹۳۰ شکل پتانسیل نوترون-پروتون توجه بسیاری را به خود جلب کرده بود، زیرا امید می‌رفت که این پتانسیل اطلاعاتی اساسی درباره ویژگیهای کلی نیروهای هسته‌ای به دست دهد. آزمایشهای اولیه در انرژیهای کم با پتانسیلهای مختلفی جور درمی‌آمدند. پس از مدتی معلوم شد که تقریباً هر پتانسیلی با شکل معقول کارساز است به شرط اینکه عمق و برد مناسب انتخاب شوند. در سال ۱۹۴۷ شووینگر نشان داد (و بعداً بته به روش ساده‌تری محاسبه کرد) که در انرژیهای کم همیشه با تقریب خوب می‌توان نوشت

$$k \cot \delta = -\frac{1}{A} + \frac{1}{r_0} k^2 \quad (۶۶-۲۳)$$

که در آن  $A$  طول پراکندگی نامیده می‌شود، و  $r_0$  برد مؤثر است. سطح مقطع در آستانه طول پراکندگی را تعیین می‌کند:

$$\sigma \cong 4\pi A^2 \quad (۶۷-۲۳)$$

و برد مؤثر را وابستگی انرژی تعیین می‌کند. رابطه میان این پارامترها و پارامترهای توصیف‌کننده پتانسیل با شکل پتانسیل تغییر می‌کند، اما برازش دو پارامتری به داده‌ها همیشه امکانپذیر است. این فرمول برد مؤثر نشان می‌دهد که برای کاوش شکل پتانسیل باید به انرژیهای زیادتر برویم. انرژی بستگی دوترون  $2.23 \text{ MeV}$  است. بنابراین، با توجه به اینکه  $m$  در بحث ما جرم کاهیده یعنی  $M_p/2$  است، به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \frac{1}{\alpha} &= \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mE}} = \frac{\hbar c}{\sqrt{M_p c^2 E}} = \frac{\hbar}{M_p c} \sqrt{\frac{M_p c^2}{E}} \\ &\cong \frac{10^{-27}}{1.6 \times 10^{-24} \times 3 \times 10^{10}} \sqrt{\frac{940}{2.23}} = 4.3 \times 10^{-12} \text{ cm} \end{aligned}$$

و در نتیجه

$$\frac{4\pi}{\alpha^2} \cong 2.5 \times 10^{-24} \text{ cm}^2 = 2.5 \text{ b}$$

یک محاسبه دقیقتر به این پیش‌بینی می‌رسد که سطح مقطع در آستانه چهار بارن است. اندازه‌گیری با نوترونهای گرمایی نتیجه ۲۱ بارن را می‌دهد!

دلیل این اختلاف به حساب نیاوردن اسپین نوترون و پروتون است. اگر پتانسیل مستقل از اسپین بود آنگاه تمام حالت‌های اسپینی به صورت یکسان پراکنده می‌شدند، یعنی اهمیتی نداشت

که اسپین ذرات "بالا" باشد یا "پایین". اگر پتانسیل وابسته به اسپین باشد، یک شکل ممکن این پتانسیل عبارت است از

$$V(r) = V_1(r) + \sigma_p \cdot \sigma_n V_2(r) \quad (۶۸-۲۳)$$

در این مورد، اسپین دیگر یک عدد کوانتومی خوب نیست، و باید حالتها را با توجه به اسپین کل و تکانه زاویه‌ای کل دسته‌بندی کرد، یعنی با  $l = 0$  چهار حالت به یک سه‌تایی  ${}^3S_1$  و یک تک‌تایی  ${}^1S_0$  تقسیم می‌شوند. لزومی ندارد که این دو حالت به صورت یکسان پراکنده شوند، و از این رو در واقع دو تغییر فاز داریم:  $\delta_l$  برای سه‌تایی و  $\delta_s$  برای تک‌تایی. گذار سه‌تایی-تک‌تایی روی نمی‌دهد، زیرا تکانه زاویه‌ای کل  $l$  باید در حالت‌های اولیه و نهایی یکسان باشد. سطح مقطع کل در هر مورد با تعداد حالت‌های نهایی موزون می‌شود (سطح مقطع شامل یک جمع روی حالت‌های نهایی است و به مقدار مؤلفه  $l$  تکانه زاویه‌ای بستگی ندارد)، و در نتیجه

$$\sigma = \frac{3}{4}\sigma_l + \frac{1}{4}\sigma_s \quad (۶۹-۲۳)$$

برای نیروهای مستقل از اسپین داریم  $\sigma = \sigma_l = \sigma_s$ .

دوترون یک حالت  ${}^3S_1$  است، و از این رو چهار بارن در واقع برای  $\sigma_l$  پیش‌بینی شده است. از اینجا نتیجه می‌گیریم که

$$\sigma_s = 4\sigma - 3\sigma_l = 72b \quad (۷۰-۲۳)$$

چون در آستانه هستیم، به دست می‌آوریم

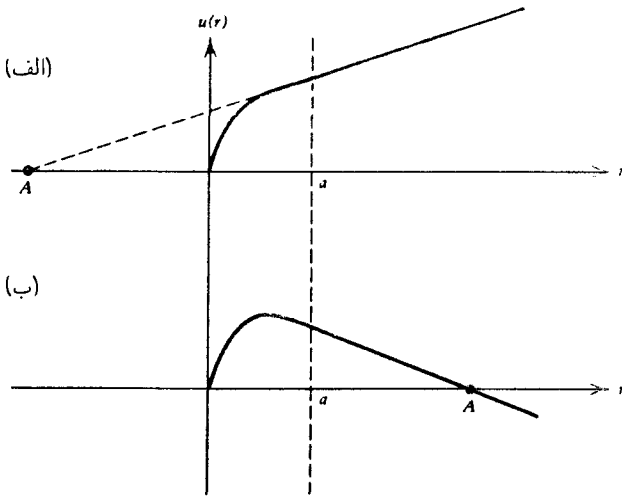
$$|A_s| = \sqrt{\frac{72 \times 10^{-22}}{4\pi}} \cong 2.4 \times 10^{-12} \text{ cm} \quad (۷۱-۲۳)$$

نتیجه قبلی ایجاب می‌کند که

$$|A_l| = \sqrt{\frac{4 \times 10^{-22}}{4\pi}} \cong 4.7 \times 10^{-12} \text{ cm} \quad (۷۲-۲۳)$$

اکنون باید علامت  $A_s$  و  $A_l$  را تعیین کنیم. در آستانه داریم  $-1/A \approx k/\delta \approx k \cot \delta$ . بنابراین،  $\delta_l = -A_l k$  و  $\delta_s = -A_s k$  بدین ترتیب، توابع موج مجانبی به صورت زیر هستند

$$\sin(kr + \delta_{l,s}) \cong \sin k(r - A_{l,s}) \cong k(r - A_{l,s}) \quad (۷۳-۲۳)$$



شکل ۶-۲۳ نمودار  $u(r)$  برای جواب موج  $s$  در نزدیکی آسانه. خارج از برد شعاع  $r = a$  تابع موج به صورت  $C(r - A)$  است. [این صورت با ۶-۲۳، که بسط  $\sin(kr + \delta)$  است، تعارضی ندارد. می‌توانستیم  $u(r)$  را به صورت  $(C/k) \sin(kr + \delta)$  هم بگیریم، زیرا بهنجارش اختیاری است. در واقع، شیب خط را تابع موج داخلی و مکان  $A$  تعیین می‌کنند.] علامت  $A$  بستگی به این دارد که تابع موج داخلی به طرف محور  $r$  برگردد، (مورد ب)، یا برنگردد، (مورد الف). چون اگر یک حالت مقید ضعیف داشته باشیم تابع موج باید برگردد (تا بتواند با یک نمایی که به‌کندی کاهش می‌یابد جور شود) و چون انتظار نداریم که تابع موج در داخل پتانسیل به تغییرات  $E$  حول صفر حساسیت زیادی داشته باشد، نتیجه می‌گیریم که برای پتانسیلی که یک حالت مقید با مقدار کوچک  $B$  دارد باید  $A > 0$ .

دو مورد ممکن در شکل ۶-۲۳ نشان داده شده‌اند. می‌دانیم که تابع موج برای حالت سه‌تایی درست قبل از لبهٔ چاه به طرف محور طول برمی‌گردد (زیرا یک حالت مقید داریم) و در نتیجه برای این حالت باید  $A_1 > 0$ .

اگر  $A_1$  نیز مثبت بود، یک حالت مقید تک‌تایی با بستگی بسیار ضعیفتر به دست می‌آوردیم، زیرا تابع موج داخلی به یک تابع مجانبی بسیار بهتر متصل می‌شود. در واقع، انرژی بستگی برای این وضعیت باید  $70 \text{ keV}$  باشد. اما چنین حالت مقیدی مشاهده نشده است، که نشان می‌دهد  $A_1 < 0$ .

این انتخاب علامت عملاً با پراکندگی نوترون از مولکول  $\text{H}_2$  تأیید شده است. چنانکه می‌دانیم، مولکول  $\text{H}_2$  می‌تواند به صورت اورتو- $\text{H}_2$ ، با اسپینهایی که در حالت سه‌تایی هستند، و پارا- $\text{H}_2$ ، با دو اسپین پروتون در حالت تک‌تایی، وجود داشته باشد. برای نوترونهای بسیار کم‌انرژی، به طوری که طول موج آنها بسیار بزرگتر از فاصلهٔ پروتون-پروتون در مولکول باشد، دامنهٔ پراکندگی برای پراکندگی  $\text{H}_2$ -نوترون درست برابر است با مجموع دامنه‌های هر پراکندگی. می‌توان نشان داد که دامنهٔ پراکندگی

از پارا- $H_2$  با دامنه پراکندگی از اورتو- $H_2$  متفاوت است و در هر یک از آنها ترکیبهای خطی ۱- $A_1$  و ۱- $A_2$  دخالت دارند. این واقعیت که  $\sigma_{para} \cong 3.91$  و  $\sigma_{ortho} \cong 12.51$  را می‌توان به این طریق توضیح داد. محاسبه به علت وجود چندین اثر که باید آنها را به حساب آورد پیچیده است، از جمله اینکه جرم مؤثر پروتون در یک مولکول با جرم پروتون آزاد تفاوت دارد، و اینکه مولکولها واقعاً ساکن نیستند بلکه با توزیعی مربوط به دما (از مرتبه  $20^\circ K$ ) حرکت می‌کنند. اختلاف زیاد بین دو سطح مقطع با این تصحیحات تغییر چندانی نمی‌کند، و از این رو تنها توضیح آن می‌تواند منفی بودن  $A_1$  باشد.

## تقریب بورن

در انرژیهای زیادتر، پاره‌موجهای بسیاری در پراکندگی مؤثرند و از این رو بهتر است از تجزیه تکانه زاویه‌ای صرف‌نظر کنیم. روشی که هم برای پتانسیل ضعیف و هم برای انرژی زیاد به یک تقریب بسیار خوب می‌رسد تقریب بورن است که در آن فرایند پراکندگی را همچون یک گذار، درست مانند گذارهایی که در فصل ۲۱ بیان کردیم، در نظر می‌گیریم، با این تفاوت که در اینجا گذارهای

پیوستار  $\rightarrow$  پیوستار

را در نظر می‌گیریم.

اگر در دستگاه مرکز جرم کار کنیم، عملاً یک مسئله تک‌ذره‌ای داریم، و این ذره از یک حالت اولیه که با ویژه‌تابع زیر توصیف می‌شود

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{r}/\hbar} \quad (74-23)$$

به حالت نهایی که با

$$\psi_f(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}_f \cdot \mathbf{r}/\hbar} \quad (75-23)$$

توصیف می‌شود گذاری انجام می‌دهد؛  $\mathbf{p}_f$  و  $\mathbf{p}_i$  به ترتیب تکانه‌های اولیه و نهایی هستند. آهنگ گذار، بنا به قاعده طلایی ۲۱-۵۹، عبارت است از

$$R_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \int \frac{V d^3\mathbf{p}_f}{(2\pi\hbar)^3} |M_{fi}|^2 \delta \left( \frac{p_f^2}{2m} - \frac{p_i^2}{2m} \right) \quad (76-23)$$

تابع دلتا بیانگر پایستگی انرژی است. اگر جرم ذرات خروجی با جرم ذرات ورودی تفاوت داشته باشد، یا اگر هدف برانگیخته شود، تابع دلتا شکل متفاوتی پیدا می‌کند، اما همیشه به صورت  $\delta[(p_f^2/\lambda m) - E]$  است که در آن  $E$  انرژی جنبشی موجود برای ذره نهایی است. عنصر ماتریس  $M_{fi}$  از رابطه زیر به دست می‌آید

$$\begin{aligned} M_{fi} &= \langle \psi_f | V | \psi_i \rangle = \int d^3\mathbf{r} \frac{e^{-i\mathbf{p}_f \cdot \mathbf{r}/\hbar}}{\sqrt{V}} V(\mathbf{r}) \frac{e^{i\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{r}/\hbar}}{\sqrt{V}} \\ &= \frac{1}{V} \int d^3\mathbf{r} e^{-i\Delta \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (۷۷-۲۳)$$

که در آن  $\Delta = \mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i$ . این عنصر ماتریس را به صورت زیر می‌نویسیم

$$M_{fi} = \frac{1}{V} \tilde{V}(\Delta) \quad (۷۸-۲۳)$$

با جاگذاری در ۷۶-۲۳ به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} R_{i \rightarrow f} &= \frac{2\pi}{\hbar} \int d\Omega \frac{V p_f^2 dp_f}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{V^2} |\tilde{V}(\Delta)|^2 \delta\left(\frac{p_f^2}{2m} - E\right) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{V} \int d\Omega p_f m \frac{p_f dp_f}{m} \delta\left(\frac{p_f^2}{2m} - E\right) |\tilde{V}(\Delta)|^2 \\ &= \frac{1}{4\pi^2 \hbar^2} \frac{1}{V} \int d\Omega p_f m |\tilde{V}(\Delta)|^2 \end{aligned} \quad (۷۹-۲۳)$$

که در آن از  $p_f dp_f/m = d(p_f^2/2m)$  استفاده کرده‌ایم و روی تابع دلتا انتگرال گرفته‌ایم. بنابراین باید  $p_f$  را برابر با  $(2mE)^{1/2}$  بگیریم، و فراموش نکنیم که  $m$  در اینجا جرم کاهیده ذره نهایی است.

این رابطه وابستگی ناخواسته‌ای به حجم جعبه کوانتس دارد، اما این واقعاً دور از انتظار نیست. توابع موج بالا به یک ذره در جعبه‌ای به حجم  $V$  بهنجار شده‌اند، و در نتیجه با افزایش  $V$  تعداد گذارها مسلماً کاهش می‌یابد. مشکل از اینجا ناشی می‌شود که مسئله‌ای را مطرح می‌کنیم که مطابقتی با آزمایش ما ندارد. آنچه انجام می‌دهیم عبارت است از فرستادن شاری از ذرات فرودی بر یکدیگر (البته این در چارچوب مرکز جرم است؛ در چارچوب آزمایشگاه یکی از ذرات ساکن است). اگر بخواهیم شار یک ذره در سانتیمتر مربع در ثانیه داشته باشیم، باید شار بالا را در  $V$  ضرب و بر حجم استوانه‌ای با قاعده  $1\text{cm}^2$  و بر سرعت نسبی ذرات در چارچوب مرکز جرم در

حالت اولیه تقسیم کنیم. تعداد گذارها به ازای شار واحد درست برابر با سطح مقطع است. بنابراین، داریم

$$d\sigma = \frac{1}{4\pi^2 h^4} \frac{1}{|v_{نسبی}|} d\Omega p_f m |\tilde{V}(\Delta)|^2 \quad (۸۰-۲۳)$$

در چارچوب مرکز جرم، چون دو ذره فرودی با تکانه‌های مساوی و با علامت مخالف  $p_i$  به طرف یکدیگر حرکت می‌کنند سرعت نسبی برابر است با

$$|v_{نسبی}| = \frac{p_i}{m_1} + \frac{p_i}{m_2} = p_i \left( \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) = \frac{p_i}{m_{کاهیده}^{(i)}} \quad (۸۱-۲۳)$$

که در آن  $m_1$  و  $m_2$  جرم ذرات هستند. بدین ترتیب، اگر جرمهای کاهیده و تکانه‌های اولیه و نهایی یکسان نباشند، داریم

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4\pi^2} \frac{p_f}{p_i} m_{کاهیده}^{(f)} m_{کاهیده}^{(i)} \left| \frac{1}{h^2} \tilde{V}(\Delta) \right|^2 \quad (۸۲-۲۳)$$

اگر ذرات اولیه و نهایی یکی باشند، به دست می‌آوریم

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m_{کاهیده}^2}{4\pi^2} \left| \frac{1}{h^2} \tilde{V}(\Delta) \right|^2 \quad (۸۳-۲۳)$$

اگر جرم یکی از ذرات بسیار بیشتر از جرم ذره دیگر باشد آنگاه  $m \rightarrow m_{کاهیده}$ ، که در آن  $m$  جرم ذره سبکتر است. از مقایسه رابطه بالا با ۱۵-۲۳ می‌بینیم که

$$f(\theta, \phi) = -\frac{m_{کاهیده}}{2\pi h^2} \tilde{V}(\Delta) \quad (۸۴-۲۳)$$

در واقع، برای تعیین علامت باید مقایسه مفصلتری با بسط پاره‌موجی انجام دهیم. در اینجا به این کار نمی‌پردازیم.

به‌عنوان مثالی از کاربرد تقریب بورن، سطح مقطع پراکندگی ذره‌ای به جرم  $m$  و بار  $Z_1$  از یک پتانسیل کولنی با بار  $Z_2$  را محاسبه می‌کنیم. چشمه میدان کولنی را بینهایت سنگین می‌گیریم، و از این‌رو جرم در ۲۳-۸۳ جرم ذره فرودی است. برای عمومیت بحث (و چنانکه خواهیم دید، به دلایل فنی) میدان کولنی را استتار شده می‌گیریم، به طوری که

$$V(\mathbf{r}) = Z_1 Z_2 e^{\gamma} \frac{e^{-r/a}}{r} \quad (۸۵-۲۳)$$

که در آن  $a$  شعاع استتار است. اکنون باید کمیت زیر را محاسبه کنیم

$$\tilde{V}(\Delta) = Z_1 Z_2 e^{\gamma} \int d^3 \mathbf{r} e^{-i\Delta \cdot \mathbf{r}} \frac{e^{-r/a}}{r} \quad (۸۶-۲۳)$$

اگر راستای  $\Delta$  را محور  $z$  بگیریم به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \int d^3 \mathbf{r} e^{-i\Delta \cdot \mathbf{r}} \frac{e^{-r/a}}{r} &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^\infty r^2 dr e^{-i\Delta r \cos \theta} \frac{e^{-r/a}}{r} \\ &= 2\pi \int_0^\infty r dr e^{-r/a} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) e^{-i\Delta r \cos \theta} \\ &= \frac{2\pi}{i\Delta} \int_0^\infty dr e^{-r/a} (e^{i\Delta r} - e^{-i\Delta r}) \quad (۸۷-۲۳) \\ &= \frac{2\pi}{i\Delta} \left( \frac{1}{(1/a) - i\Delta} - \frac{1}{(1/a) + i\Delta} \right) = \frac{4\pi}{(1/a^2) + \Delta^2} \end{aligned}$$

اما

$$\Delta^2 = \frac{1}{\hbar^2} (\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i)^2 = \frac{1}{\hbar^2} (2p^2 - 2\mathbf{p}_f \cdot \mathbf{p}_i) = \frac{2p^2}{\hbar^2} (1 - \cos \theta) \quad (۸۸-۲۳)$$

و در نتیجه سطح مقطع عبارت است از

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{m^2}{4\pi^2} \frac{1}{\hbar^2} (Z_1 Z_2 e^{\gamma})^2 \frac{16\pi^2}{[(2p^2/\hbar^2)(1 - \cos \theta) + (1/a^2)]^2} \\ &= \left( \frac{2m Z_1 Z_2 e^{\gamma}}{4p^2 \sin^2(\theta/2) + (\hbar^2/a^2)} \right)^2 \\ &= \left( \frac{Z_1 Z_2 e^{\gamma}}{4E \sin^2(\theta/2) + (\hbar^2/2ma^2)} \right)^2 \quad (۸۹-۲۳) \end{aligned}$$

که در آن  $E$  را به جای  $p^2/2m$  گذاشته‌ایم و از  $(1 - \cos \theta)/2 = \sin^2(\theta/2)$  استفاده کرده‌ایم. زاویه  $\theta$  که در ۸۸-۲۳ وارد شده زاویه پراکندگی در چارچوب مرکز جرم است. در غیاب استتار ( $a \rightarrow \infty$ ) رابطه بالا به فرمول رادفورد تبدیل می‌شود. در این مورد،  $\hbar$  وجود ندارد، و نسخه ب فرمول کلاسیک یکی است. اگر عامل استتار را در ۸۶-۲۳ در نظر نمی‌گرفتیم یک انتگرال معریف به دست می‌آمد. انتگرالهای مبهم را اغلب با استفاده از این نوع عامل‌های همگرایی محاسبه می‌کنند.

تقریب بورن محدودیتهای خاص خود را دارد. به عنوان مثال، دیدیم که  $\tilde{V}(\Delta)$  حقیقی است، و در نتیجه  $f(\theta)$  نیز در این تقریب حقیقی است. این نتیجه با توجه به قضیهٔ اپتیکی ایجاب می‌کند که سطح مقطع صفر باشد. در واقع، تقریب بورن تنها وقتی خوب است که یا (الف) پتانسیل ضعیف باشد، که در نتیجه سطح مقطع برحسب یک پارامتر کوچک از مرتبهٔ دوم است؛ این مورد باعث سازگاری تقریب بورن با قضیهٔ اپتیکی می‌شود، یا (ب) انرژی پتانسیل چنان زیاد باشد که سطح مقطع به صفر میل کند. این وضعیت برای اکثر پتانسیلهای هموار صادق است، اما برای ذرات واقعی صدق نمی‌کند؛ در اینجا به نظر می‌رسد که سطح مقطع در انرژیهای بسیار زیاد ثابت می‌ماند، و نمی‌توان انتظار داشت که تقریب بورن چیزی بیشتر از یک راهنما برای رفتار دامنهٔ پراکندگی باشد. به عنوان آخرین نکته، متذکر می‌شویم که اگر پتانسیل وابسته به اسپین باشد بدیهی است که حالت‌های ابتدایی و نهایی در ۲۳-۷۷ باید علاوه بر توابع موج فضایی متضمن توابع موج اسپینی نیز باشند. بنابراین، به عنوان مثال، اگر پتانسیل نوترون-پروتون به صورت زیر باشد

$$V(r) = V_1(r) + \sigma_P \cdot \sigma_N V_2(r)$$

آنگاه تقریب بورن به صورت زیر درمی‌آید

$$M_{fi} = \frac{1}{V} \int d^3r e^{-i\Delta \cdot r} \xi_f^+ V(r) \xi_i$$

که در آن  $\xi_i$  و  $\xi_f$  حالت‌های اسپینی ابتدایی و نهایی دستگاه نوترون-پروتون را نشان می‌دهند.

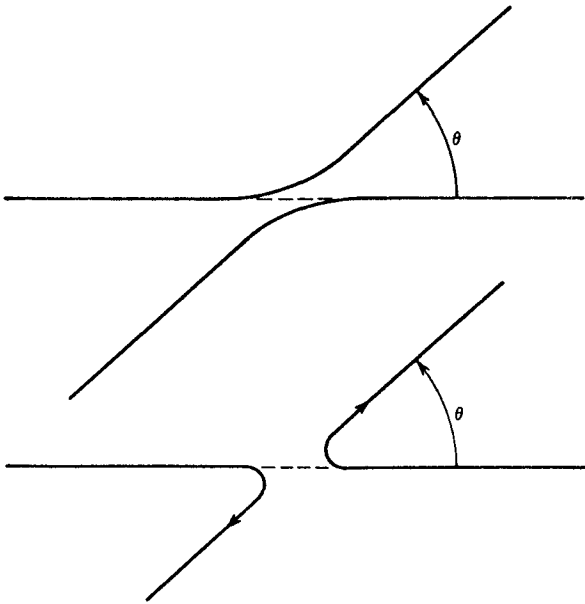
## پراکندگی ذرات یکسان

وقتی دو ذرهٔ یکسان پراکنده می‌شوند، راهی برای تشخیص انحراف یک ذره در زاویهٔ  $\theta$  و انحراف آن در زاویهٔ  $\theta - \pi$  در چارچوب مرکز جرم وجود ندارد، زیرا پایستگی تکانه ایجاب می‌کند که اگر یکی از ذرات در زاویهٔ  $\theta$  پراکنده شد ذرهٔ دیگر در راستای  $\theta - \pi$  حرکت کند (شکل ۲۳-۷). به لحاظ کلاسیک نیز یکسانی ذرات روی سطح مقطع پراکندگی تأثیر دارد، زیرا تعداد شمارشها در یک شمارشگر معین مجموع شمارشهای مربوط به دو ذره است. بنابراین

$$\sigma_{cl}(\theta) = \sigma(\theta) + \sigma(\pi - \theta) \quad (۲۳-۹۰)$$

در مکانیک کوانتومی راهی برای تشخیص دو حالت نهایی از یکدیگر وجود ندارد، و در نتیجه دو دامنهٔ  $f(\theta)$  و  $f(\pi - \theta)$  می‌توانند با هم تداخل کنند. بنابراین، سطح مقطع پراکندگی بری دو ذره





شکل ۷-۲۳ راستهای مجانبی در پراکنندگی دو ذره یکسان در زاویه مرکز جرمی  $\theta$ .

یکسان با اسپین صفر (بوزون)، مثلاً ذرات  $\alpha$ ، برابر است با

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \quad (91-23)$$

یا

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 + [f'(\theta)f(\pi - \theta) + f(\theta)f'(\pi - \theta)] \quad (92-23)$$

که تفاوت آن با نتیجه کلاسیک در جمله تداخلی است، و این به عنوان مثال سبب تقویت در  $\pi/2$  می شود:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\pi/2} = 4 \left|f\left(\frac{\pi}{2}\right)\right|^2 \quad (93-23)$$

در حالی که نتیجه بدون تداخل برابر است با

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\pi/2} = 2 \left|f\left(\frac{\pi}{2}\right)\right|^2 \quad (94-23)$$

وقتی پراکندگی دو ذره با اسپین  $1/2$ ، مثلاً پراکندگی پروتون-پروتون یا الکترون-الکترون، را بررسی می‌کنیم، دامنه باید نشاندهنده پادتقارن اساسی تابع موج کل تحت تعویض دو ذره باشد. اگر دو ذره در یک حالت تکتایی اسپینی باشند، تابع موج فضایی باید متقارن باشد، و

$$\frac{d\sigma_s}{d\Omega} = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \quad (95-23)$$

اگر دو ذره در یک حالت سه‌تایی اسپینی باشند، تابع موج فضایی باید پادمتقارن باشد، و

$$\frac{d\sigma_t}{d\Omega} = |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 \quad (96-23)$$

در پراکندگی دو پروتون ناقطبیده، تمام حالت‌های اسپینی به یک اندازه محتمل‌اند، و از این رو احتمال یافتن این دو پروتون در یک حالت سه‌تایی سه برابر احتمال یافتن آنها در یک حالت تکتایی است، به طوری که

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{3}{4} \frac{d\sigma_t}{d\Omega} + \frac{1}{4} \frac{d\sigma_s}{d\Omega} \\ &= \frac{3}{4} |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 + \frac{1}{4} |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 - \frac{1}{2} [f(\theta)f^*(\pi - \theta) + f^*(\theta)f(\pi - \theta)] \end{aligned} \quad (97-23)$$

برای پراکندگی پروتون-پروتون و همچنین پراکندگی  $\alpha-\alpha$ ، دامنه اصلی  $f(\theta)$  مجموع یک جمله هسته‌ای (اگر انرژیها بیش از اندازه کم نباشند) و یک جمله کولنی است. ذرات یکسان چه بوزون باشند چه فرمیون، تحت تعویض  $\theta \rightarrow \pi - \theta$  تقارن داریم.

### پراکندگی از اتمهای شبکه

ملاحظات تقارن در پراکندگی ذرات از شبکه بلور نیز به‌کار می‌آیند. اگر از اسپین صرف‌نظر کنیم، که در نتیجه وارونه شدن اسپین الکترون ("بالا" ← "پایین"، یا برعکس) اهمیت نخواهد داشت، دامنه پراکندگی  $f(\theta)$  در انرژیهای کم مستقل از زاویه می‌شود (پراکندگی موج  $S$ ) و جواب معادله شرودینگر برای یک اتم در نقطه شبکه  $\mathbf{a}_i$  دارای صورت مجانبی زیر است

$$\psi(\mathbf{r}) \sim e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{a}_i)} + f \frac{e^{i\mathbf{k}|\mathbf{r} - \mathbf{a}_i|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{a}_i|} \quad (98-23)$$

$$\begin{aligned}
 k|\mathbf{r} - \mathbf{a}_i| &= k(\mathbf{r}^{\prime 2} - 2\mathbf{r} \cdot \mathbf{a}_i + a_i^{\prime 2})^{1/2} \\
 &\cong kr \left( 1 - \frac{2\mathbf{r} \cdot \mathbf{a}_i}{r^2} \right)^{1/2} \quad (99-23) \\
 &\cong kr - k\hat{l}_r \cdot \mathbf{a}_i
 \end{aligned}$$

که در آن  $k\hat{l}_r$  تکانه نهایی  $\mathbf{k}'$  زیرا برداری است با بزرگی  $k$  که هم جهت با  $\mathbf{r}$  (نقطه مشاهده) است. با تقسیم بر ضریب فاز  $e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i}$ ، صورت مجانبی زیر را برای تابع موج به دست می آوریم

$$\psi \sim e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + f e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{a}_i} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i} \frac{e^{ikr}}{r} + 0 \left( \frac{1}{r^2} \right) \quad (100-23)$$

و در نتیجه دامنه پراکندگی عبارت است از

$$f(\theta) = f e^{-i\Delta \cdot \mathbf{a}_i}, \quad \Delta = \mathbf{k}' - \mathbf{k} \quad (101-23)$$

در وضعیتی که نمی توان گفت کدام اتم در بلور باعث پراکندگی شده است، دامنه کل با مجموع تمام دامنه های پراکندگی انفرادی برابر است. این مورد در واقع مربوط به پراکندگی کشسان کم انرژی است که در آن پس زنی مشاهده نمی شود و اسپین اندازه گیری نمی شود. بدین ترتیب، برای فرایند همدوس داریم

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| f \sum_{\text{اتمها}} e^{-i\Delta \cdot \mathbf{a}_i} \right|^2 \quad (102-23)$$

اگر یک آرایه مکعبی ساده از نقطه های شبکه داشته باشیم، به طوری که

$$\mathbf{a}_i = a(n_x \hat{l}_x + n_y \hat{l}_y + n_z \hat{l}_z) \quad -N \leq n_x, n_y, n_z \leq N \quad (103-23)$$

(فاصله ها در تمام راستاها مضارب درستی از  $a$  هستند)، آنگاه

$$\sum e^{-i\Delta \cdot \mathbf{a}_i} = \sum_{n_x=-N}^N \sum_{n_y=-N}^N \sum_{n_z=-N}^N e^{-i\Delta_x n_x} e^{-i\Delta_y n_y} e^{-i\Delta_z n_z}$$

با استفاده از

$$\begin{aligned} \sum_{n=-N}^N e^{i\alpha n} &= e^{-i\alpha N} (1 + e^{i\alpha} + e^{2i\alpha} + \dots + e^{i\alpha N}) \\ &= e^{i\alpha N} \frac{e^{i\alpha(2N+1)} - 1}{e^{i\alpha} - 1} = \frac{e^{i\alpha(N+1/2)} - e^{-i\alpha(N+1/2)}}{e^{i\alpha/2} - e^{-i\alpha/2}} \quad (104-23) \\ &= \frac{e^{i\alpha(N+1/2)} - e^{-i\alpha(N+1/2)}}{e^{i\alpha/2} - e^{-i\alpha/2}} = \frac{\sin \alpha \left(N + \frac{1}{2}\right)}{\sin \alpha/2} \end{aligned}$$

به نتیجه زیر می‌رسیم

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 \frac{\sin^2 \alpha_x \left(N + \frac{1}{2}\right)}{\sin^2 \alpha_x/2} \cdot \frac{\sin^2 \alpha_y \left(N + \frac{1}{2}\right)}{\sin^2 \alpha_y/2} \cdot \frac{\sin^2 \alpha_z \left(N + \frac{1}{2}\right)}{\sin^2 \alpha_z/2} \quad (105-23)$$

که در آن

$$\alpha_x = a \Delta_x - 2\pi\nu_x \quad (\nu_x = \text{عدد درست}), \quad (106-23)$$

و غیره. تعمیمی که قبلاً گفتیم در اینجا نیز صدق می‌کند، زیرا تبدیل  $\alpha \rightarrow \alpha - 2\pi\nu$  که در آن  $\nu$  یک عدد درست است،  $105-23$  را تغییر نمی‌دهد. رابطه  $105-23$  چندان گویا نیست. اما اگر  $N$  بزرگ باشد، هر یک از عوامل آن وقتی  $\alpha_x, \dots$  به صفر نزدیک هستند قله تیزی پیدا می‌کنند. در واقع، با استفاده از

$$\frac{\sin^2 Nu}{u^2/4} \rightarrow 4\pi N \delta(u) \quad (107-23)$$

که با یک تعویض متغیر ساده از  $20-21$  نتیجه می‌شود، به دست می‌آوریم

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 (2\pi)^2 (2N)^2 \delta(a\Delta - 2\pi\nu) \quad (108-23)$$

تعداد کل آنها  $(2N)^2$  است، و از این رو سطح مقطع به‌ازای هر اتم عبارت است از

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 \frac{(2\pi)^2}{a^2} \delta\left(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \frac{2\pi\nu}{a}\right) \quad (109-23)$$

بنابراین، سطح مقطع دیفرانسیلی بسیار کوچک است مگر در جهتهایی که از رابطهٔ زیر به دست می‌آیند

$$k' - k = \frac{2\pi}{a} \nu \quad (۱۱۰-۲۳)$$

که در آنها سطح مقطع دیفرانسیلی به شدت زیاد می‌شود. شرایط بالا را شرایط براگ می‌نامند، و اعداد درست  $\nu_x, \nu_y, \nu_z$  و شاخصهای میلر برای صفحه‌های براگ هستند. روابطی را که هم‌اکنون به دست آوردیم می‌توان به بلورهای پیچیده‌تر تعمیم داد. این رابطه‌ها برای مطالعهٔ ساختار بلور، با استفاده از نوترون‌ها یا پرتوهای x به عنوان ذرات فرودی، یا استفاده از بلور شناخته شده برای مطالعهٔ پرتوهای x که در گذارهای اتمی به صورت فوتونهای پراثری گسیل می‌شوند، نیز مورد استفاده قرار می‌گیرند.

## مسائل

۱-۲۳ نشان دهید که برای پتانسیل مرکزی  $V(\mathbf{r}) = V(r)$  می‌توان عنصر ماتریس  $M_{fi}$  در ۲۲-۷۷ را به صورت زیر نوشت

$$M_{fi} = \frac{1}{V} \frac{4\pi\hbar}{\Delta} \int_0^\infty r dr V(r) \sin r \Delta$$

توجه کنید که این عنصر ماتریس تابع زوجی از  $\Delta$  است، یعنی تابعی است از

$$\Delta^2 = (\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i)^2 / \hbar^2$$

۲-۲۳ پتانسیل زیر را در نظر بگیرید

$$V(r) = V_0 e^{-r/a}$$

با استفاده از تقریب بورن، سطح مقطع دیفرانسیلی  $d\sigma/d\Omega$  را برحسب زاویهٔ پراکندگی مرکز جرمی  $\theta$  به دست آورید. نتیجه را با سطح مقطع دیفرانسیلی برای پتانسیل یوکاوا

$$V(r) = V_0 b \frac{e^{-r/b}}{r}$$

مقایسه کنید (به ۲۳-۸۵ تا ۲۳-۸۹ مراجعه کنید). برای این مقایسه، پارامترهای مربوط به دو مورد را به گونه‌ای تنظیم کنید که دو سطح مقطع دیفرانسیلی و شبیه‌های آنها در جهت جلو در  $\Delta = 0^\circ$  یکسان شوند. شاید بهتر باشد چند مقدار عددی معین برای  $V_0$ ،  $a$  و  $b$  انتخاب کنید و مقایسه را به صورت نموداری انجام دهید. با یک استدلال کیفی علت اختلاف زیاد بین پیش‌بینیهای مربوط به انتقالهای تکانه بزرگ را بیان کنید.

۳-۲۳ پتانسیل زیر را در نظر بگیرید

$$V(r) = V_0 a \frac{e^{-r/a}}{r}$$

اگر پارامتر برد  $a$  برابر با  $1.2 \times 10^{-12} \text{ cm} = 1.2 \text{ fm}$  باشد و بزرگی  $V_0$  برابر با  $10^\circ \text{ MeV}$ ، سطح مقطع کل پراکندگی پروتون-پروتون را با انرژی مرکز جرمی  $10^\circ \text{ MeV}$  در تقریب بورن محاسبه کنید. پراکندگی کولنی را نادیده بگیرید، اما یکسان بودن پروتونها را در نظر داشته باشید.

[تذکر: با استفاده از رابطه  $\hbar^2 \Delta^2 = (\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i)^2 = 2p^2(1 - \cos \theta)$  می‌توان نوشت  $d\Omega = 2\pi d(\cos \theta) = \frac{\hbar^2 \pi}{p^2} d(\Delta^2)$

۴-۲۳ فرض کنید دامنه پراکندگی برای پروتون-پروتون به صورت زیر است

$$f(\theta) = \xi_f^+(A + B\sigma_P \cdot \sigma_N)\xi_i$$

که در آن  $\xi_i$  و  $\xi_f$  حالت‌های اسپینی اولیه و نهایی دستگاه نوترون-پروتون هستند. حالت‌های ممکن عبارت‌اند از

$$\begin{aligned} \xi_i &= \chi_1^{(P)} \chi_1^{(N)} & \xi_f &= \chi_1^{(P)} \chi_1^{(N)} \\ & \chi_1^{(P)} \chi_1^{(N)} & & \chi_1^{(P)} \chi_1^{(N)} \\ & \chi_1^{(P)} \chi_1^{(N)} & & \chi_1^{(P)} \chi_1^{(N)} \\ & \chi_1^{(P)} \chi_1^{(N)} & & \chi_1^{(P)} \chi_1^{(N)} \end{aligned}$$

تمام ۱۶ دامنه پراکندگی را با استفاده از رابطه زیر محاسبه کنید

$$\sigma_P \cdot \sigma_N = \sigma_z^{(P)} \sigma_z^{(N)} + 2(\sigma_+^{(P)} \sigma_-^{(N)} + \sigma_-^{(P)} \sigma_+^{(N)})$$

که در آن، در نمایشی که  $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$  و  $\chi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  و  $\chi_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  داریم

$$\sigma_+ = \frac{\sigma_z + i\sigma_y}{2} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_- = \frac{\sigma_z - i\sigma_y}{2} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

نتایج و سطح مقطعها را در جدول بنویسید.

۵-۲۳ اگر یکی از حالت‌های اسپینی (مثلاً پروتون اولیه، یا نوترون اولیه) را اندازه‌گیری نکنیم، برای تعیین سطح مقطع باید روی حالت‌های اسپینی اندازه‌گیری نشده جمع بزنیم. فرض کنید اسپینهای پروتون اولیه و نهایی را اندازه نگرفته‌ایم. با فرض اینکه حالت نوترون اولیه "بالا" است، رابطه سطح مقطعهای مربوط به نوترون نهایی "بالا" و نوترون نهایی "پایین" را بنویسید. قطبش  $P$  را که با رابطه زیر تعریف می‌شود به دست آورید

$$P = \frac{\sigma \uparrow - \sigma \downarrow}{\sigma \uparrow + \sigma \downarrow}$$

که در آن  $\sigma \uparrow$  سطح مقطع مربوط به نوترون نهایی بالا و  $\sigma \downarrow$  سطح مقطع مربوط به نوترون نهایی پایین است.

۶-۲۳ با استفاده از جدولی که در مسئله ۴-۲۳ به دست آورده‌اید، سطح مقطعهای پراکندگی سه‌تایی ← سه‌تایی و تک‌تایی ← تک‌تایی را محاسبه کنید. نشان دهید پراکندگی تک‌تایی ← سه‌تایی صفر است. چون (برحسب  $h$ )

$$\frac{1}{4}\sigma_P + \frac{1}{4}\sigma_N = S$$

به دست می‌آوریم

$$\sigma_P \cdot \sigma_N = 2S^2 - 3$$

وقتی روی حالت سه‌تایی عمل می‌کند ۱

وقتی روی حالت تک‌تایی عمل می‌کند ۳ -

با استفاده از رابطه بالا، نتایجی را که به دست آورده‌اید واریسی کنید. توجه کنید که دامنه مستقل از  $m_S$  است و از این رو  $m_S$  باید در حالت‌های اسپینی اولیه و نهایی یکی باشد. سه حالت در سه‌تایی وجود دارند که همگی به یک اندازه در سطح مقطع سه‌تایی سهم هستند، و تنها یک حالت در سطح مقطع تک‌تایی سهم دارد.

[تذکر: در محاسبه دامنه‌هایی مانند

$$\frac{1}{\sqrt{4}}(\chi_1^{(P)} \chi_1^{(N)} - \chi_1^{(P)} \chi_1^{(N)}) (A + B\sigma_P \cdot \sigma_N) \frac{1}{\sqrt{4}}(\chi_1^{(P)} \chi_1^{(N)} - \chi_1^{(P)} \chi_1^{(N)})$$

دامنه‌های چهار جمله قبل از مجذور کردن جمع می‌شوند. آیا می‌توانید دلیل آن را توضیح دهید؟]

۷-۲۳ انتگرال زیر را در نظر بگیرید

$$I(kr) = \int_0^\infty d\theta \sin \theta g(\cos \theta) e^{-ikr \cos \theta} = \int_{-1}^1 du g(u) e^{-ikru}$$

که در آن  $g(\cos \theta)$  حول  $\theta = \theta_0$  به شدت جایگزیده است، و بینهایت مشتق‌پذیر است. برای مثال، این تابع می‌تواند به صورت زیر باشد

$$g = e^{-\alpha^2 (\cos \theta - \cos \theta_0)^2}$$

که در آن  $\alpha$  بزرگ است. بنابراین، می‌توان فرض کرد  $g(u)$  و تمام مشتق‌های آن در  $u = \pm 1$  صفر هستند. نشان دهید که در این مورد وقتی  $kr \rightarrow \infty$  تابع  $I(kr)$  سریعتر از هر توان  $kr$  صفر می‌شود.

[راهنمایی: بنویسید  $e^{-ikru} = (i/kr)(d/du)e^{-ikru}$  و انتگرال جزء به جزء بگیرید.]

### مراجع

نظریهٔ پراکندگی در تمام کتابهای درسی که در آخرین کتاب معرفی شده‌اند بررسی شده است. علاوه بر آن، کتابهای پیشرفته‌ای نیز یافت می‌شوند که تنها به این موضوع اختصاص دارند. مناسبترین آنها برای دانشجو عبارت است از

N F Mott and H S W Massey, *The Theory of Atomic Collisions* (3rd edition), Oxford University Press (Clarendon), Oxford, 1965.

یک رهیافت صوری‌تر در کتاب زیر ارائه شده است

L S Rodberg and R M Thaler, *Introduction to the Quantum Theory of Scattering*, Academic Press, New York, 1967.

کتابهای پیشرفته‌تر عبارت‌اند از

M L Goldberger and K M Watson, *Collision Theory*, John Wiley & Sons, New York, 1965.

R Newton, *Scattering Theory of Waves and Particles*, McGraw-Hill, New York, 1966.



## جذب تابش در ماده

فرایند وارون واپاشی تابشی اتمها، یعنی گیراندازی فوتونها همراه با برانگیخته شدن اتمها، نیز می‌تواند روی دهد. اگر انرژی فوتون بیشتر از انرژی یونش باشد الکترون به پیوستار برانگیخته می‌شود. این پدیده را اثر فوتوالکتریک می‌نامند و سازوکار مهمی در جذب تابش در ماده است. بنابه قاعده پلائی ۲۱-۵۹، آهنگ گذار برای فرایند

$$\gamma + (\text{اتم}) \rightarrow (\text{اتم})' + e \quad (۱-۲۴)$$

عبارت است از

$$\begin{aligned} R &= \frac{\gamma \pi}{\hbar} \int \frac{V d^3 \mathbf{p}_e}{(\gamma \pi \hbar)^{\gamma}} |M_{fi}|^{\gamma} \delta \left( \hbar \omega - E_B - \frac{p_e^{\gamma}}{\gamma m} \right) \\ &= \frac{\gamma \pi}{\hbar} \int \frac{d\Omega V}{(\gamma \pi \hbar)^{\gamma}} \int m p_e d \left( \frac{p_e^{\gamma}}{\gamma m} \right) |M_{fi}|^{\gamma} \delta \left( \hbar \omega - E_B - \frac{p_e^{\gamma}}{\gamma m} \right) \quad (۲-۲۴) \\ &= \frac{\gamma \pi V}{\hbar} \int d\Omega \frac{m p_e}{(\gamma \pi \hbar)^{\gamma}} |M_{fi}|^{\gamma} \end{aligned}$$

که در آن  $m$  جرم الکترون است، تابع دلتا پایستگی انرژی را نشان می‌دهد،  $E_B$  انرژی بستگی الکترون در اتم است، و  $p_\epsilon$  در آخرین سطر مقداری است که شناسه تابع دلتا را صفر می‌کند. عنصر ماتریس عبارت است از

$$\frac{e}{mc} \left( \frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V} \right)^{1/2} \int d^3r \psi_f^*(\mathbf{r}) \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{p} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \psi_i(\mathbf{r}) \quad (3-24)$$

پتانسیل برداری، همچون در فصل ۲۱، به یک فوتون در حجم  $V$  بهنجار شده است، و  $\psi_i(\mathbf{r})$  و  $\psi_f(\mathbf{r})$  توابع موج الکترون در حالت‌های اولیه و نهایی هستند. برای یک اتم هیدروژنگونه، با فرض اینکه الکترون در حالت پایه است، داریم

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_0} \quad (4-24)$$

تابع موج حالت نهایی را باید جواب معادله شرودینگر با پتانسیل کولنی برای  $E > 0$  بگیریم. در بررسی اتم هیدروژن درباره این جواب بحث نکردیم. این جواب را می‌توان به صورت دقیق نوشت اما مانند انتگرال ۳-۲۴ کاملاً پیچیده است. اگر انرژی فوتون بسیار بیشتر از انرژی یونش باشد، برهم‌کنش مانده الکترون گسیل شده با یونی که از خود به جا می‌گذارد اهمیت کمتری می‌یابد، و می‌توانیم  $\psi_f(\mathbf{r})$  را با یک موج تخت تقریب بگیریم. چون فرض می‌کنیم تنها یک اتم در حجم  $V$  داریم، تنها یک الکترون در این حجم خواهیم داشت، و در نتیجه بهنجارش به‌گونه‌ای است که

$$\psi_f(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}_e \cdot \mathbf{r} / \hbar} \quad (5-24)$$

عامل  $V$  که در فضای فاز ظاهر می‌شود  $[V d^3\mathbf{p} / (2\pi\hbar)^3]$  به همین بهنجارش مربوط است، یعنی این دو عامل مستقل از یکدیگر نیستند. مجذور عنصر ماتریس تا اندازه‌ای ساده است زیرا حالت نهایی یک ویژه‌حالت تکانه است، و در نتیجه

$$\langle f | \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{p}_{op} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} | i \rangle = \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{p}_e \langle f | e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} | i \rangle \quad (6-24)$$

بنابراین، مجذور عنصر ماتریس عبارت است از

$$|M_{fi}|^2 \simeq \left( \frac{e}{mc} \right)^2 \frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V} \cdot \frac{1}{V} \frac{1}{\pi} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^2 (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{p}_e)^2 \times \left| \int d^3r \mathbf{r} e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{p}_e/\hbar) \cdot \mathbf{r}} e^{-Zr/a_0} \right|^2 \quad (7-24)$$

این انتگرال را بعداً محاسبه خواهیم کرد. در اینجا متذکر می‌شویم که آهنگ گذار به این دلیل دارای عامل  $1/V$  است که در حجم  $V$  با تنها یک فوتون سروکار داریم. اکنون به بررسی سطح مقطع اثر فوتوالکتریک می‌پردازیم. برای اینکه شار یک فوتون بر سانتیمتر مربع داشته باشیم، چگالی فوتونها باید  $1/c$  بر سانتیمترمکعب باشد (و در نتیجه استوانه‌ای با مساحت قاعده واحد و با طول  $c$  مربوط به بازه زمان ۱ ثانیه حاوی یک فوتون خواهد بود)، یعنی باید آهنگ گذار را در  $V/c$  ضرب کنیم. از ترکیب ۲-۲۴ و ۷-۲۴، سطح مقطع دیفرانسیلی زیر را به دست می‌آوریم

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{mp_c}{(2\pi\hbar)^2} \left(\frac{e}{mc}\right)^2 \frac{2\pi\hbar c^2}{\omega} \frac{1}{\pi} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^2 (\epsilon \cdot \mathbf{p}_c)^2 \quad (8-24)$$

$$\times \frac{1}{c} \left| \int d^3\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{p}_c/\hbar)\cdot\mathbf{r}} e^{-r/a_0} \right|^2$$

در این رابطه  $d\Omega$  زاویه فضایی حول  $\mathbf{p}_c$  است. انتگرال روی تمام راستاهای الکترون سطح مقطع کل  $\sigma$  برای اثر فوتوالکتریک را به دست می‌دهد. اگر اتمهای هدف با چگالی  $N$  اتم در سانتیمترمکعب توزیع شده باشند آنگاه قطعه‌ای از ماده هدف با مساحت  $A$  و ضخامت  $dx$  حاوی  $NA dx$  اتم خواهد بود. هر اتم دارای سطح مقطع  $\sigma$  برای واکنش تحت بررسی است، و در نتیجه مساحت مؤثر کل که باریکه با آن مواجه می‌شود  $NA\sigma dx$  است. اگر  $n$  ذره در باریکه فرودی داشته باشیم، تعداد ذراتی که در ضخامت  $dx$  در هدف برهم‌کنش می‌کنند با رابطه زیر داده می‌شود

$$\frac{\text{ذرات برهم‌کنش‌کننده}}{\text{ذرات فرودی}} = \frac{\text{سطح مقطع}}{\text{مساحت کل}}$$

یا

$$\frac{dn}{n} = -\frac{NA\sigma dx}{A} = -N\sigma dx \quad (9-24)$$

علامت منفی نشان می‌دهد که ذرات از باریکه حذف می‌شوند. با انتگرال‌گیری به دست می‌آوریم

$$n(x) = n_0 e^{-N\sigma x} \quad (10-24)$$

که در آن  $n_0$  تعداد ذرات فرودی و  $n(x)$  تعداد ذراتی است که پس از پیمودن ضخامت  $x$  در باریکه باقی مانده‌اند. کمیت  $\lambda = 1/N\sigma$  بعد طول دارد و مسافت آزاد میانگین نامیده می‌شود. اگرچه گاهی مسافت آزاد میانگین را برای اثر فوتوالکتریک، تولید جفت و غیره به کار می‌بریم، اما آنچه اندازه‌گیری می‌شود سطح مقطع است.

برای به دست آوردن مرتبه بزرگی مسافت‌های آزاد میانگین، توجه کنید که  $N = N_0 \rho / A$  که در آن  $N_0$  عدد آووگادرو ( $6.02 \times 10^{23}$ )، چگالی برحسب گرم بر سانتیمتر مکعب، و  $A$  وزن اتمی است. سطح مقطع برخورد‌های مولکولی را می‌توان از خواص گازها برآورد کرد، و معلوم می‌شود که مرتبه بزرگی آن  $10^{-16} \text{cm}^2$  است، که با اندازه‌های اتمی که از مرتبه  $10^{-8} \text{cm}$  هستند سازگار است.<sup>۱</sup> به زودی خواهیم دید که این تخمین برای مقطع فوتوالکتریک معقول نیست. بنا به تعریف مسافت آزاد میانگین  $\lambda$ ، در ماده‌ای با چگالی  $\rho$  و وزن اتمی  $A$ ، اگر سطح مقطع را برحسب بارن ( $10^{-24} \text{cm}^2$ ) بیان کنیم، به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{1}{N\sigma} = \frac{A}{\rho} \frac{1}{6.02 \times 10^{23} \sigma} \\ &= \frac{A}{\rho} \frac{1.67}{\sigma(\text{بارن})} \end{aligned} \quad (11-24)$$

برای محاسبه سطح مقطع ۸-۲۴ باید انتگرال زیر را به دست آوریم

$$\int d^3\mathbf{r} e^{i(\mathbf{h}\mathbf{k} - \mathbf{p}\mathbf{c}) \cdot \mathbf{r} / h} e^{-Zr/a_0} \quad (12-24)$$

با توجه به ۸۷-۲۳، و تغییر جزئی نمادنگاری، داریم

$$\int d^3\mathbf{r} e^{i\Delta \cdot \mathbf{r}} \frac{e^{-\mu r}}{r} = \frac{4\pi}{\mu^2 + \Delta^2} \quad (13-24)$$

با مشتق‌گیری نسبت به  $\mu$  به دست می‌آوریم

$$\int d^3\mathbf{r} e^{-i\Delta \cdot \mathbf{r}} e^{-\mu r} = \frac{4\pi\mu}{(\mu^2 + \Delta^2)^2} \quad (14-24)$$

اکنون می‌توان سطح مقطع را محاسبه کرد. با ترکیب مناسبی از عوامل، سرانجام به رابطه زیر می‌رسیم

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 32 Z^5 a_0^2 \left( \frac{p_e c}{\hbar \omega} \right) \left( \frac{\epsilon \cdot \mathbf{p}_e}{mc} \right)^2 \frac{1}{(Z^2 + a_0^2 \Delta^2)^2} \quad (15-24)$$

۱. به همین ترتیب، سطح مقطع در فیزیک هسته‌ای از مرتبه  $10^{-24} \text{cm}^2$  (یک بارن) است، و سطح مقطعهایی که در فیزیک ذرات مشاهده می‌شوند از مرتبه  $10^{-27} \text{cm}^2$  (میلی بارن) هستند که تا میکروبارن برای واکنش‌های نادر و حتی  $10^{-24} \text{cm}^2$  برای واکنش‌های بسیار نادر نوترینو در انرژی‌های کم نزول می‌کنند.

که در آن

$$\Delta = \frac{(\hbar \mathbf{k} - \mathbf{p}_e)}{\hbar} = \frac{(\mathbf{p}_\gamma - \mathbf{p}_e)}{\hbar}$$

چون رابطه میان انرژی الکترون و انرژی فوتون به صورت زیر است

$$\hbar\omega = E_B + \frac{p_e^2}{2m} \quad (۱۶-۲۴)$$

می بینیم که برای انرژیهای بسیار بیشتر از انرژی بستگی می توان نوشت  $\hbar\omega \cong p_e^2/2m$ . بنابراین

$$\begin{aligned} \frac{p_e c}{\hbar\omega} \left( \frac{\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{p}_e}{mc} \right) &\cong \frac{2p_e}{mc} (\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}}_e)^2 \\ \Delta^2 &= \frac{1}{\hbar^2} (\mathbf{p}_\gamma - \mathbf{p}_e)^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left[ \left( \frac{\hbar\omega}{c} \right)^2 - 2 \frac{\hbar\omega}{c} p_e \hat{\mathbf{p}}_\gamma \cdot \hat{\mathbf{p}}_e + p_e^2 \right] \\ &\quad (۱۷-۲۴) \end{aligned}$$

$$\cong \frac{1}{\hbar^2} \left[ p_e^2 - \left( \frac{p_e^2}{mc} \right) \hat{\mathbf{p}}_\gamma \cdot \hat{\mathbf{p}}_e \right]$$

$$\cong \frac{p_e^2}{\hbar^2} \left( 1 - \frac{v_e}{c} \hat{\mathbf{p}}_\gamma \cdot \hat{\mathbf{p}}_e \right)$$

که برای الکترونهای غیرنسبیتی،  $p_e \ll mc$ ، برقرار است. <sup>۲</sup> تکانه فوتون  $\hbar \mathbf{k}$  را با  $\mathbf{p}_\gamma$  نشان داده ایم، و علامت <sup>۲</sup> را مطابق معمول برای بردار یکه به کار برده ایم. با جاگذاری در ۱۵-۲۴ به دست می آوریم

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= 64 Z^5 a_0^2 \left( \frac{p_e}{mc} \right) \frac{(\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}}_e)^2}{\left[ Z^2 + \frac{p_e^2}{\alpha^2 m^2 c^2} \left( 1 - \frac{v_e}{c} \hat{\mathbf{p}}_e \cdot \hat{\mathbf{p}}_\gamma \right) \right]^2} \\ &\quad (۱۸-۲۴) \\ &= \frac{64 Z^5 \alpha^4 a_0^2 \left( \frac{p_e}{mc} \right) (\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}}_e)^2}{\left[ (\alpha Z)^2 + \frac{p_e^2}{m^2 c^2} \left( 1 - \frac{v_e}{c} \hat{\mathbf{p}}_e \cdot \hat{\mathbf{p}}_\gamma \right) \right]^2} \end{aligned}$$

۲. برای الکترونهای نسبیتی باید از معادله دیراک برای توصیف فرایند استفاده کنیم. اثراتی غیر از اثر فووالکتریک وقتی مهم می شوند که  $E_e \simeq 1 \text{ MeV}$ .

اگر راستای تکانه فوتون را محور  $z$  و دو راستای قطبش فوتون  $\epsilon^{(1)}$  و  $\epsilon^{(2)}$  را به ترتیب در راستاهای  $x$  و  $y$  بگیریم، آنگاه با نوشتن

$$\hat{\mathbf{p}}_e = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta) \quad (19-24)$$

داریم  $(\mathbf{p}_e \cdot \epsilon^{(1)})^2 = \sin^2 \theta \cos^2 \phi$  و  $(\mathbf{p}_e \cdot \epsilon^{(2)})^2 = \sin^2 \theta \sin^2 \phi$ ، و در نتیجه میانگین صورت کسر روی دو راستای قطبش — سطح مقطع اثر فوتوالکتریک را با فوتونهای ناقطبیده محاسبه می‌کنیم — عبارت است از

$$\overline{(\hat{\mathbf{p}}_e \cdot \epsilon)^2} = \frac{1}{4} (\sin^2 \theta \sin^2 \phi + \sin^2 \theta \cos^2 \phi) = \frac{1}{4} \sin^2 \theta \quad (20-24)$$

همچنین داریم

$$\hat{\mathbf{p}}_e \cdot \hat{\mathbf{p}}_\gamma = \cos \theta \quad (21-24)$$

و از این رو، با نوشتن  $p_e^2/2m = E$  به دست می‌آوریم

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{32\sqrt{2} Z^5 \alpha^4 a_0^2 (E/mc^2)^{1/2} \sin^2 \theta}{\left[ (\alpha Z)^2 + \frac{2E}{mc^2} \left( 1 - \frac{v_e}{c} \cos \theta \right) \right]^2} \quad (22-24)$$

برای عناصر سبک، شرطی که قبلاً اعمال کردیم، یعنی  $\hbar\omega \gg E_B$  که معادل است با

$$E \gg \frac{1}{4} mc^2 (Z\alpha)^2 \quad (23-24)$$

درگستره وسیع معقولی از انرژیها صادق است. با جاگذاری ۲۳-۲۴ در ۲۲-۲۴، می‌بینیم که مخرج کسر ساده می‌شود و سطح مقطع به صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 2\sqrt{2} Z^5 \alpha^4 a_0^2 \left( \frac{E}{mc^2} \right)^{-3/2} \frac{\sin^2 \theta}{\left( 1 - \frac{v_e}{c} \cos \theta \right)^2} \quad (24-24)$$

اکنون به بررسی جنبه‌های مختلف این فرمول می‌پردازیم:

۱. اولاً این حدس مبهم که چون اندازه‌های اتمی باید از مرتبه  $10^{-8}$  cm باشند سطح مقطع باید از مرتبه  $10^{-16}$  cm<sup>۲</sup> باشد غلط است! البته عامل  $a_0^2$  از همین مرتبه بزرگی است، اما در عدد بی بعد  $(1/137)^4$  که به سختی می‌توان از آن صرف‌نظر کرد ضرب می‌شود. باید جستجو کنیم چه چیز باعث شده است که در برآوردهای خود تا این حد اشتباه کنیم. اگر آخرین عامل زاویه‌ای در ۲۴-۲۴ را، که بعداً درباره آن بحث می‌کنیم، نادیده بگیریم می‌بینیم که با استفاده از

$$E = \frac{1}{4} m v_e^2$$

می‌توان ضریب جلو کسر را به صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} 2\sqrt{2} a_0^2 Z^5 \alpha^4 \left( \frac{m c^2}{E} \right)^{3/2} &= 32 a_0^2 Z^5 \alpha^4 \left( \frac{c}{v_e} \right)^3 \\ &= 32 \left( \frac{a_0}{Z} \right)^2 \alpha \left( \frac{\alpha Z c}{v_e} \right)^3 \end{aligned} \quad (25-24)$$

که مفیدتر است. مهمتر از همه، یک عامل منفرد  $\alpha$  در این صورت ظاهر شده است، که وقتی تنها یک فوتون گسیل یا جذب می‌شود باید همیشه ظاهر شود. جفت‌شدگی پتانسیل برداری به بار الکتریکی متناسب با بار  $e$  است، و مجذور  $e$  متناسب با  $\alpha$  است. عامل  $(a_0/Z)^2$ ، در مقایسه با  $a_0^2$ ، معیار بهتری برای مساحت اتم است، زیرا اتم هیدروژن‌گونه با بار  $Z$  را بررسی می‌کنیم. آنچه باقی می‌ماند در واقع توان بزرگ  $V$  برای نسبت سرعت "مداری" الکترون در اتم به سرعت الکترون آزاد خروجی است.

نسبت  $(\alpha Z c / v_e)$  [و نه صرفاً  $(c/v_e)$  که این هم بی‌بعد است] به این دلیل ظاهر می‌شود که همپوشی میان تابع موج الکترون آزاد و تابع موج الکترون مقید در عنصر ماتریس دخیل است، یعنی مجذور عنصر ماتریس به این احتمال مربوط می‌شود که از اندازه‌گیری تکانه الکترون مقید مقدار  $p_e$  به دست آید. وابستگی تابعی  $f(\alpha Z c / v_e)$ ، در این مورد توان هشتم،<sup>۳</sup> را نمی‌توان با استدلال کیفی و کلی حدس زد. برای مثال، اگر تابع موج الکترون گاوسی بود  $[\psi_i(\mathbf{r}) \propto e^{-r^2/a^2}]$ ، افت  $f$  با افزایش سرعت بسیار سریعتر از توان هشتم بود. دلیل مشکل حدس زدن این است که توزیع تکانه الکترون در ناحیه‌ای با پهنای

$$\Delta p \sim \frac{h}{a_0/Z} \sim \frac{hZ}{h/mc\alpha} \sim Z\alpha mc \quad (26-24)$$

۳. یک عامل  $p_e$  در فضای فاز وجود دارد، و در نتیجه مجذور عنصر ماتریس به توان هشتم  $(\alpha Z c / v_e)$  منجر می‌شود.

جایگزیده است و به‌ازای  $p_e \gg Z\alpha mc$  به نقاط دور این توزیع می‌رسیم. این وضعیت، باز هم بنابه رابطهٔ عدم قطعیت، به توزیع شعاعی تابع موج در مقادیر کوچک  $l$  و به‌طور حساسی به‌حالت، مخصوصاً به‌تکانهٔ زاویه‌ای، وابسته است. این وابستگی از فروپاشی فوتونی در فیزیک هسته‌ای یک ابزار بسیار مفید ساخته است.

۲. توزیع زاویه‌ای در  $d\sigma/d\Omega$  عبارت است از

$$F(\theta) = \frac{\sin^2 \theta}{[\gamma - (v_e/c) \cos \theta]^2} \quad (27-24)$$

ابتدا توجه کنید که سطح مقطع در جهت جلو صفر می‌شود. این پیامد عرضی بودن قطبش فوتونها است. عنصر ماتریس متناسب با  $\mathbf{p}_e \cdot \boldsymbol{\epsilon}$  است، و وقتی  $\mathbf{p}_e$  با تکانهٔ فوتون موازی باشد این عامل صفر می‌شود. مخرج کسر، به علت توان چهارم، تأثیر شدیدی بر توزیع زاویه‌ای دارد. وقتی  $v_e/c$  به یک نزدیک شود این تأثیر بسیار بارز می‌شود، اما حتی برای مقادیر میانهٔ  $v_e/c$  یک قلهٔ قابل توجه در نزدیکی جهت جلو، که در آن مخرج کمترین مقدار خود را دارد، وجود خواهد داشت. این متناظر با مقدار کمینهٔ انتقال تکانه بین فوتون و الکترون،  $(\mathbf{p}_\gamma - \mathbf{p}_e)^2$ ، است.

برای بحث در ناحیهٔ نسبی، باید محاسبات مفصلتری انجام داد. فرمولی که هم اکنون به‌دست آوردیم در قلمرو اعتبار خود کارایی خوبی دارد.<sup>۴</sup> در انرژیهای بسیار کم، تابع موج دقیقتری برای الکترون خروجی باید به‌کار ببریم. این تابع موج باید برهم‌کنش کولنی بین هسته و الکترون را نشان دهد. بدیهی است که پایتتر از آستانهٔ یونش مربوط به سست‌ترین الکترون در یک پوستهٔ خارجی اثر فوتوالکتریک روی نمی‌دهد. با افزایش انرژی در بالای آستانه الکترونها از پوسته‌های درونی‌تر فوتو تولید می‌شوند. با ترسیم سطح مقطع کل یا بهتر از آن ضریب جذب جرمی  $N\sigma/\rho$ <sup>۵</sup> برحسب طول‌موج فوتون، نموداری مانند شکل ۲۴-۱ به‌دست می‌آید. "دندانهٔ  $K$ " به خروج الکترونها  $n = 1$  مربوط می‌شود؛ دندانه‌های  $L$  متناظر با الکترونهاى مختلف در حالت‌های  $n = 2$  هستند. این دندانه‌ها در انرژیهای بستگی الکترونهاى مختلف روی می‌دهند. بنابه قانون تجربی موزلی، دندانه‌ها در انرژیهای زیر واقع‌اند

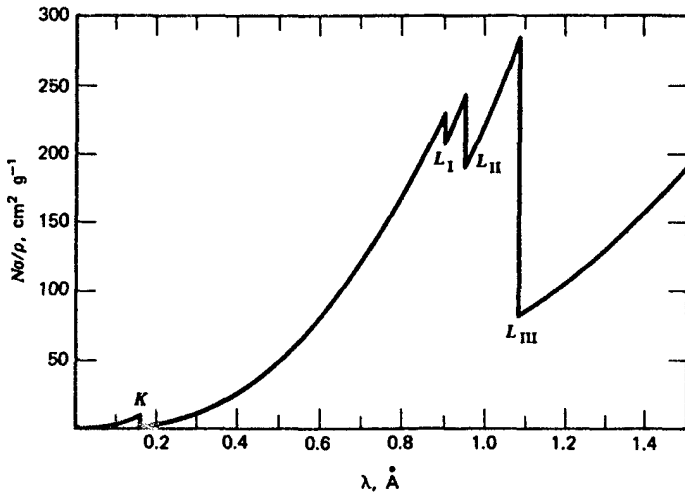
$$E = 13.6 \frac{(Z - \sigma_n)^2}{n^2} \text{eV} \quad (28-24)$$

که در آن "ثابت استتار"  $\sigma_n$  تقریباً برابر است با  $1 + 2n$ . این فرمول درست همان چیزی است که برای اوربیتال‌های  $ns$  انتظار داریم، و استتار از تمام الکترونهاى دیگر  $s$  ناشی می‌شود.

۴. در محاسبهٔ جذب تابش نتیجه‌ای را که به دست آوردیم باید در ۲ ضرب کنیم، زیرا دو الکترون در حالت پایه، البته به‌استثنای هیدروژن، وجود دارند.

۵. این کمیت برابر است با  $N_0 \sigma/A$  که در آن  $N_0$  عدد آووگادرو و  $A$  وزن اتمی است.





شکل ۲۴-۱ ضریب جذب جرمی  $N\sigma/\rho$  برای پلاتین برحسب طول موج فوتون.

در انرژیهای نسبیته، سطح مقطع با سرعت کمتری، به صورت  $(E/m)^{-1}$  و نه  $(E/m)^{-3/2}$ ، افت می‌کند، اما در انرژیهای حدود  $5\text{MeV}$  اثر فوتوالکتریک تا جایی که به جذب تابش مربوط می‌شود اهمیت خود را از دست می‌دهد. در ناحیه انرژی  $5\text{eV}$  تا  $5\text{MeV}$ ، اثر کامپتون اثر جذبی غالب می‌شود.

در اینجا الکترونهاى آزاد فوتونها را پراکنده می‌کنند. در بسامدهای کم، این اثر یک توضیح کلاسیک دارد: تابش الکترومغناطیسی در برخورد با الکترون به آن شتاب می‌دهد، و تابشی که بار شتابدار گسیل می‌کند تابش پراکنده است. سطح مقطع کلاسیک تامسون به صورت زیر است

$$\sigma_T = \frac{8\pi}{3} \left( \frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \quad (24-29)$$

در مکانیک کوانتومی، دامنه پراکندگی (عنصر ماتریس) باید متناسب با  $e^2$  باشد، زیرا دو فوتون دخالت دارند. وقتی در بسط  $21-23$  هر دو جمله را نگاه داریم، چون اختلال در هامیلتونی عبارت است از

$$\frac{e}{mc} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2(\mathbf{r}, t) \quad (24-30)$$

می‌بینیم که سهم  $e^2$  در دامنه پراکندگی می‌تواند دو منشأ داشته باشد:  
 ۱. منشأ اول یک سهم مرتبه اول از جمله  $e^2 \mathbf{A}^2(\mathbf{r}, t) / 2mc^2$  است.

۲. منشأ دوم یک جمله اختلال مرتبه دوم از جفت‌شدگی  $e\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)/mc$  است. چون صورتبندی اختلال مرتبه دوم را شرح ندادیم، به بیان نتایج بسنده می‌کنیم. (الف) در آستانه، با پیمانه  $\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0$  که از آن استفاده کرده‌ایم، تمام دامنه ناشی از جمله شامل  $e^2 \mathbf{A}^2(\mathbf{r}, t)/2mc^2$  است.

(ب) عنصر ماتریس مرتبه دوم به صورت زیر است

$$-\sum_n \frac{\langle f | e\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}/mc | n \rangle \langle n | e\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}/mc | i \rangle}{E_n - E_i} \quad (31-24)$$

که در آن "جمع" روی حالت‌های میانی "n" وقتی n شامل حالت‌های پیوستار باشد به معنای انتگرال روی تمام تکانه‌ها نیز هست. کافی نیست که حالت‌های میانی تک الکترون مربوط به دنباله

$$\gamma_i + e_i \rightarrow e' \rightarrow \gamma_f + e_f$$

و حالت‌های میانی با یک الکترون و دو فوتون مربوط به فرایند

$$e_i + \gamma_i \rightarrow \gamma_i + \gamma_f + e' \rightarrow \gamma_f + e_f$$

را در نظر بگیریم. معلوم شده است که امکان ایجاد یک زوج الکترون-پوزیترون "مجازی" توسط فوتون فرودی، که نابودی پوزیترون توسط الکترون فرودی را به دنبال دارد، با گسیل فوتون نهایی همچون در

$$e_i + \gamma_i \rightarrow e_i + e_f + e^{+'} \rightarrow \gamma_f + e_f$$

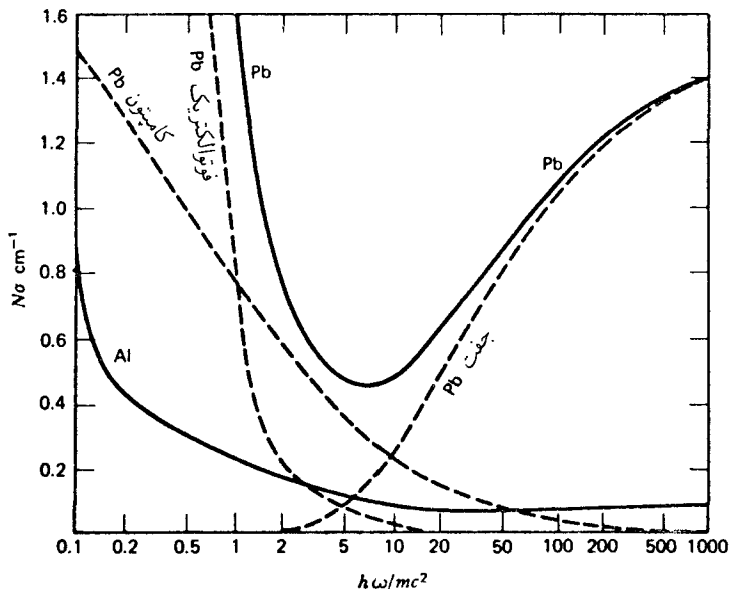
و فرایند

$$e_i + \gamma_i \rightarrow e_i + \gamma_i + \gamma_f + e_f + e^{+'} \rightarrow \gamma_f + e_f$$

را نیز باید در نظر گرفت. محاسبه به فرمول کلاین-نیشینا می‌رسد

$$\sigma = 2\pi \left( \frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \left\{ \frac{1+x}{x^2} \left[ \frac{2(1+x)}{1+2x} - \frac{1}{x} \log(1+2x) \right] + \frac{1}{2x} \log(1+2x) - \frac{1+3x}{(1+2x)^2} \right\} \quad (32-24)$$

$$x = \frac{\hbar\omega}{mc^2}$$



شکل ۲-۲۴ ضریب جذب کل برای سرب و آلومینیم نسبت به انرژی (برحسب جرم سکون الکترون،  $0.51\text{MeV}$ )، سطح مقطع فوتوالکتریک برای Al در مقیاسی که در اینجا نشان داده شده است قابل چشمپوشی است.

که با آزمایش کاملاً توافق دارد. این فرمول در بسامدهای کم به صورت زیر درمی آید

$$\sigma = \frac{8\pi}{3} \left( \frac{e^2}{mc^2} \right)^2 (1 - 2x) \quad (۳۳-۲۴)$$

و در بسامدهای زیاد ( $x \gg 1$ ) تبدیل می شود به

$$\sigma = \pi \left( \frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{1}{x} \left( \log 2x + \frac{1}{2} \right) \quad (۳۴-۲۴)$$

بنابراین، سطح مقطع کامپتون نیز در انرژیهای زیاد کاهش می یابد. در انرژیهای بیشتر از چند  $\text{MeV}$ ، فرایند جذبی غالب تولید زوج است.

جالب توجه است که فوتون در انرژیهای به اندازه کافی زیاد،  $h\nu > 2mc^2$  می تواند به یک الکترون و یک پوزیترون تبدیل شود (شکل ۲-۲۴). پوزیترون را می توان واقعاً "پادالکترون" نامید؛ پوزیترون و الکترون دارای جرم و اسپین یکسان هستند، و همچنین بار و گشتاور مغناطیسی آنها دارای مقدار یکسان اما با علامت مخالف هستند، و جفت شدگی غیرنسبیتی با میدان الکترومغناطیسی از تعویض  $\mathbf{p}$  با  $\mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)/c$  به دست می آید. این تبدیل به ماده تنها در حضور یک ذره

سوم، مثلاً یک هسته، می‌تواند روی دهد، زیرا برای فرایند

$$\gamma \rightarrow e + e^+$$

پایستگی انرژی و تکانه نمی‌تواند برقرار باشد. برای اثبات بدون محاسبات سینماتیکی طولانی، فرایند وارون یعنی  $\gamma \rightarrow e + e^+$  را در چارچوب مرکز جرم در نظر می‌گیریم. الکترون و پوزیترون دارای تکانه‌های مساوی و مخالف هستند، و در نتیجه حالت نهایی دارای انرژی  $\sqrt{2(m^2c^2 + p^2c^2)}$  و تکانه  $0$  است. فوتونی با انرژی  $E$  حامل تکانه  $E/c$  است. اگر یک هسته حضور داشته باشد می‌تواند انرژی و تکانه را جذب کند (برای هسته سنگین این انرژی بسیار کوچک است،  $(p^2/2M)$ ، و در نتیجه موازنه انرژی و تکانه امکانپذیر می‌شود.

محاسبه

$$\gamma + \text{هسته} \rightarrow e + e^+ + \text{هسته}$$

فراتر از سطح این کتاب است. نظریه الکترودینامیک کوانتومی که در این محاسبات به‌کار می‌رود نیز نشان می‌دهد که می‌توان ذرات را از یک طرف رابطه به طرف دیگر منتقل کرد با این شرط که ذرات منتقل شده را با پادذره‌های آنها عوض کنیم. بنابراین، پیش‌بینی می‌کنیم که فرایند

$$\gamma + e^\pm \rightarrow e^\pm + \text{هسته}$$

نیز می‌تواند روی دهد، و عنصر ماتریس آن رابطه بسیار نزدیکی با عنصر ماتریس تولید زوج دارد. این پیش‌بینی با آزمایش تأیید شده است، و فرایند بالا منشأ رگبار پرتو کیهانی است. یک پرتو فرودی  $\gamma$  با انرژی بسیار زیاد (که می‌تواند ناشی از واپاشی  $2\gamma \rightarrow \pi^0$  باشد، که در آن  $\pi^0$  از برخورد یک پروتون پرتو کیهانی اولیه با یک هسته در جو بالا تولید شده است) یک زوج به‌وجود می‌آورد، به‌طوری که هر عضو آن حامل تقریباً نیمی از انرژی اولیه است. هر عضو، چنانکه قبلاً نشان داده شد، می‌تواند یک فوتون تولید کند،<sup>۶</sup> و محصولات نهایی می‌توانند فوتونها و زوجهای دیگری تولید کنند. رگبارهای حاصل از رویدادهای بسیار پرانرژی در قسمت بالایی جو می‌توانند ناحیه‌هایی با مساحت چندین کیلومتر مربع را بیوشانند! رگبارهایی که در شمارنده‌ها تولید می‌شوند برای تشخیص فوتونها یا الکترونها به‌کار می‌روند. ذرات باردار سنگینتر انحراف کمتری پیدا می‌کنند، و از این رو تابش کمتری خواهند داشت.

۶. این فرایند را تابش ترمزی می‌نامند، و می‌توان آن‌را از دیدگاه کلاسیک توضیح داد: باری که در میدان کولنی هسته منحرف می‌شود شتاب می‌گیرد، و در نتیجه تابش می‌کند.

محاسبات تفصیلی نشان می‌دهند که اتلاف انرژی در ماده از طریق این فرایندها از قانون زیر پیروی می‌کند

$$E(x) = E_{\text{فردی}} e^{-x/L} \quad (35-24)$$

که در آن "طول تابش" از رابطه زیر به دست می‌آید

$$L = \frac{(m^2 c^2 / h^2) A}{4 Z^2 \alpha^2 N_0 \rho \log(183/Z^{1/2})} \quad (36-24)$$

که در آن  $N_0$  عدد آووگادرو ( $6.02 \times 10^{23}$ )،  $m$  جرم الکترون،  $A$  وزن اتمی،  $Z$  بار هسته، و  $\rho$  چگالی ماده (برحسب گرم بر سانتیمتر مکعب) است. "طول تولید زوج" از رابطه زیر به دست می‌آید

$$L_{\text{زوج}} = \frac{9}{7} L \quad (37-24)$$

این فرمول برای  $Z$ های بسیار کم مناسب نیست. مقادیر نوعی  $L$  عبارت‌اند از

هوا	۳۳۰ m
آلمینیم	۹۷ cm
سرب	۰٫۵۳ cm

تابش ترمزی سازوکار اتلاف انرژی غالب برای الکترونها در انرژیهای زیاد است. در انرژیهای کمتر، یونش غالب است. کمبود جا اجازه نمی‌دهد که درباره این اثر اساساً کلاسیک بحث کنیم.

## مسائل

۱-۲۴ سطح مقطع فرایند زیر را محاسبه کنید

$$\gamma + \text{دوترون} \rightarrow N + P$$

نحوه کار با مورد اثر فوتوالکتریک یکسان است. در محاسبه عنصر ماتریس، تابع موج حالت نهایی باز هم به صورت زیر است

$$\psi_f(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}$$

که در آن  $\mathbf{p}$  تکانه فوتون است. در انرژیهای کم، طول موج تابش بسیار بزرگتر از "اندازه" دوترون است، و از این رو  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \approx 1$  برای محاسبه

$$\int d^3r e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \psi_i(\mathbf{r})$$

از تابع بهنجار شده زیر استفاده کنید

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{N}{\sqrt{4\pi}} e^{-\alpha(r-r_0)} & r > r_0 \\ = 0 & r < r_0 \end{cases}$$

برای چه انرژیهایی انتظار دارید که طول موج فوتون بسیار بزرگتر از برد پتانسیل  $r_0 \cong 1.2 \text{ fm}$  باشد؟

۲۴-۲ اصل توازن تفصیلی عنصرهای ماتریس فرایندهای زیر را به هم مربوط می‌کند

$$A + a \rightarrow B + b \quad (1)$$

و

$$B + b \rightarrow A + a \quad (2)$$

بنابراین

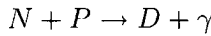
$$\sum |M_{(1)}|^2 = \sum |M_{(2)}|^2$$

که در آن جمع روی حالت‌های اسپینی اولیه و نهایی زده می‌شود. با توجه به اینکه در محاسبه آهنگ گذار یا سطح مقطع روی حالت‌های اسپینی اولیه میانگین می‌گیریم و روی حالت‌های اسپینی نهایی جمع می‌زنیم، نشان دهید که برای آهنگ‌های گذار داریم

$$\frac{(2J_A + 1)(2J_a + 1)}{p_a^2 (dp_b/dE_b)} \frac{dR_{(1)}}{d\Omega_b} = \frac{(2J_B + 1)(2J_b + 1)}{p_a^2 (dp_a/dE_a)} \frac{dR_{(2)}}{d\Omega_a}$$

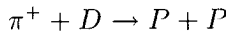
که در آن  $J_A, J_a, J_B, J_b$  اسپینهای ذرات،  $p_a$  و  $p_b$  تکانه‌های مرکز جرمی ذرات  $a$  و  $b$  و فرایندهای (۱) و (۲) باید در یک انرژی کل روی دهند،  $E_a$  و  $E_b$  انرژیهای مربوط ذرات، و

$d\Omega_{ii}$  و  $d\Omega_{ii}$  زاویه‌های فضایی هستند که ذرات  $a$  و  $b$  در آنها مشاهده می‌شوند. با استفاده از این نتیجه، سطح مقطع فرایند گیراندازی تابشی

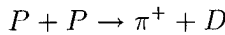


را بر حسب سطح مقطعی که در مسئله ۲۴-۱ محاسبه کرده‌اید بیان کنید. توجه کنید که عامل  $(2J + 1)$  برای فوتونها ۲ است زیرا تنها دو حالت قطبش وجود دارند، و اسپین دوترون نیز ۱ است.

۳-۲۴ سطح مقطع واکنش



را که در آن  $\pi^+$  فرودی دارای انرژی جنبشی آزمایشگاهی  $24 \text{ MeV}$  است اندازه‌گیری کرده‌ایم و مقدار آن را  $10^{-27} \text{ cm}^2 \times 3 \times 10^3$  به دست آورده‌ایم. (الف) در چه انرژی آزمایشگاهی می‌توان با اندازه‌گیری سطح مقطع فرایند



توازن تفصیلی را آزمود؟ (جرم پيون برابر است با  $m_{\pi^+} c^2 = 140 \text{ MeV}$  و  $M_p c^2 = 940 \text{ MeV}$ ؛  $M_D \cong 2M_p$ )

(ب) با توجه به اینکه اسپین  $\pi^+$  صفر است، چه سطح مقطعی برای این واکنش پیش‌بینی می‌شود؟

۴-۲۴ طول تابش در زنون مایع را به دست آورید ( $Z = 54$ ،  $A = 131$ ، و  $\rho = 3.09 \text{ g/cm}^3$ )  
 ۵-۲۴ فرض کنید الکترون با یک پتانسیل مربعی به هسته وابسته است. تغییرات سطح مقطع اثر فوتوالکتریک را بر حسب انرژی به دست آورید. فرض کنید انرژی فوتون بسیار بیشتر از انرژی بستگی الکترون است و پتانسیل کوتاه برد است.  
 [راهنمایی: به مسئله ۲۴-۱ مراجعه کنید.]

## مراجع

سازوکارهای جذب تابش در ماده در اکثر کتابهای درسی فیزیک جدید بررسی شده‌اند (مراجع آخر این کتاب را ببینید). برای بحث کاملی درباره روشهای تجربی اندازه‌گیری اثرات مختلف، مراجعه کنید به

## پیوست الف

### انتگرال فوریه و توابع دلتا

فرض کنید تابع  $f(x)$  دوره‌ای است و دوره آن  $2L$  است:

$$f(x) = f(x + 2L) \quad (\text{الف-۱})$$

این نوع تابع را می‌توان به یک رشته فوریه در بازه  $(-L, L)$  بسط داد که عبارت است از

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \cos \frac{n\pi x}{L} + \sum_{n=1}^{\infty} B_n \sin \frac{n\pi x}{L} \quad (\text{الف-۲})$$

این رشته را می‌توان به صورت زیر درآورد

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n e^{in\pi x/L} \quad (\text{الف-۳})$$

که مسلماً ممکن است، زیرا

$$\cos \frac{n\pi x}{L} = \frac{1}{2} (e^{in\pi x/L} + e^{-in\pi x/L})$$

$$\sin \frac{n\pi x}{L} = \frac{1}{2i} (e^{in\pi x/L} - e^{-in\pi x/L})$$



ضرایب بسط با استفاده از رابطه راست هنجاری

$$\frac{1}{\sqrt{L}} \int_{-L}^L dx e^{in\pi x/L} e^{-im\pi x/L} = \delta_{mn} = \begin{cases} 1 & m = n \\ 0 & m \neq n \end{cases} \quad (\text{الف-۴})$$

به دست می‌آیند:

$$a_n = \frac{1}{\sqrt{L}} \int_{-L}^L dx f(x) e^{-in\pi x/L} \quad (\text{الف-۵})$$

اکنون الف-۳ را با وارد کردن  $\Delta n$ ، که تفاضل دو عدد درست متوالی است، می‌نویسیم. چون  $\Delta n = 1$  داریم

$$\begin{aligned} f(x) &= \sum_n a_n e^{in\pi x/L} \Delta n \\ &= \frac{L}{\pi} \sum_n a_n e^{in\pi x/L} \frac{\pi \Delta n}{L} \end{aligned} \quad (\text{الف-۶})$$

با تغییری در نمادنگاری به صورت

$$\frac{\pi n}{L} = k \quad (\text{الف-۷})$$

به دست می‌آوریم

$$\frac{\pi \Delta n}{L} = \Delta k \quad (\text{الف-۸})$$

همچنین می‌نویسیم

$$\frac{L a_n}{\pi} = \frac{A(k)}{\sqrt{2\pi}} \quad (\text{الف-۹})$$

بدین ترتیب، الف-۶ به صورت زیر درمی‌آید

$$f(x) = \sum \frac{A(k)}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \Delta k \quad (\text{الف-۱۰})$$

اگر  $L \rightarrow \infty$  آنگاه متغیر  $k$  پیوسته خواهد شد، زیرا  $\Delta k$  بینهایت کوچک می‌شود. با توجه به تعریف انتگرال ریمنان، می‌توان الف-۱ را در حد به صورت زیر نوشت

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk A(k) e^{ikx} \quad (\text{الف-۱۱})$$

ضریب  $A(k)$  با رابطه زیر داده می‌شود

$$\begin{aligned} A(k) &= \sqrt{2\pi} \frac{1}{\pi} \cdot \frac{1}{2L} \int_{-L}^L dx f(x) e^{-in\pi x/L} \\ &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-ikx} \end{aligned} \quad (\text{الف-۱۲})$$

معادله‌های الف-۱۱ و الف-۱۲ را تبدیلهای انتگرالی فوریه می‌نامند. اگر معادله دوم را در اولی قرار دهیم به دست می‌آوریم

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} \int_{-\infty}^{\infty} dy f(y) e^{-iky} \quad (\text{الف-۱۳})$$

اکنون فرض می‌کنیم ترتیب انتگرالها را می‌توان عوض کرد. بنابراین، می‌نویسیم

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dy f(y) \left[ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ik(x-y)} \right] \quad (\text{الف-۱۴})$$

برای آنکه این رابطه صادق باشد، کمیت داخل کروشه که آن را با  $\delta(x-y)$  نشان می‌دهیم

$$\delta(x-y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ik(x-y)} \quad (\text{الف-۱۵})$$

تابع دلتای دیراک می‌نامیم باید یک نوع تابع کاملاً خاص باشد. این تابع باید به ازای  $y \neq x$  صفر شود و وقتی  $x-y=0$  باید به نحوی مناسب به بینهایت میل کند، زیرا گستره انتگرال‌گیری بینهایت کوچک است. بنابراین، دلتای دیراک یک تابع به معنای متداول ریاضی نیست، بلکه "تابع تعمیم یافته" یا "توزیع" است.<sup>۱</sup> تابع دلتای دیراک به خودی خود معنا ندارد، و تنها به شرطی می‌تواند

۱. نظریه توزیعات را ریاضیدان فرانسوی لوران شوارتز توسعه داد. برای یک بررسی مقدماتی می‌توانید به کتاب زیر مراجعه کنید:

معنا داشته باشد که همیشه به صورت زیر ظاهر شود

$$\int dx f(x) \delta(x - a)$$

که در آن تابع  $f(x)$  در گستره مقادیر شناسه تابع دلتا به اندازه کافی هموار است. با وجود این، می توان عملیات را مستقیماً روی تابع دلتا انجام داد، اما باید در نظر داشت که تمام روابطی که می نویسیم تنها زیر علامت انتگرال می توانند روی دهند. خواص زیر را می توان برای تابع دلتا اثبات کرد:

۱.

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x) \quad (\text{الف-۱۶})$$

که پیامد رابطه زیر است

$$f(x) = \int dy f(y) \delta(x - y) \quad (\text{الف-۱۷})$$

اگر بنویسیم  $x = a\xi$  و  $y = a\eta$ ، به دست می آوریم

$$f(a\xi) = |a| \int d\eta f(a\eta) \delta[a(\xi - \eta)]$$

از طرف دیگر،

$$f(a\xi) = \int d\eta f(a\eta) \delta(\xi - \eta)$$

از مقایسه به الف-۱۶ می رسیم.

۲. رابطه ای که از الف-۱۶ نتیجه می شود عبارت است از

$$\delta(x^2 - a^2) = \frac{1}{2|a|} [\delta(x - a) + \delta(x + a)] \quad (\text{الف-۱۸})$$

این رابطه از اینجا به دست می آید که شناسه تابع دلتا در  $x = a$  و  $x = -a$  صفر می شود. بنابراین،

دو سهم وجود دارند:

$$\begin{aligned} \delta(x^2 - a^2) &= \delta[(x - a)(x + a)] \\ &= \frac{1}{|x + a|} \delta(x - a) + \frac{1}{|x - a|} \delta(x + a) \\ &= \frac{1}{2|a|} [\delta(x - a) + \delta(x + a)] \end{aligned}$$

از این کلی‌تر، می‌توان نشان داد

$$\delta[f(x)] = \sum_i \frac{\delta(x - x_i)}{|df/dx|_{x=x_i}} \quad (\text{الف-۱۹})$$

که در آن  $x_i$ ها ریشه‌های  $f(x)$  در بازه انتگرال‌گیری هستند.

علاوه بر نمایش الف-۱۵ برای تابع دلتا، نمایش‌های دیگری نیز وجود دارند که می‌توانند مفید باشند. چند نمایش تابع دلتا را در زیر بررسی می‌کنیم.  
(الف) نمایش الف-۱۵ را به صورت زیر می‌نویسیم

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-L}^L dk e^{ikx} \quad (\text{الف-۲۰})$$

انتگرال را می‌توان محاسبه کرد، و به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \delta(x) &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \frac{e^{iLx} - e^{-iLx}}{ix} \\ &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\sin Lx}{\pi x} \end{aligned} \quad (\text{الف-۲۱})$$

(ب) تابع  $\Delta(x, a)$  را که به صورت زیر تعریف می‌شود در نظر می‌گیریم

$$\begin{aligned} \Delta(x, a) &= 0 & x < -a \\ &= \frac{1}{2a} & -a < x < a \\ &= 0 & a < x \end{aligned} \quad (\text{الف-۲۲})$$

بنابراین،

$$\delta(x) = \lim_{a \rightarrow 0} \Delta(x, a) \quad (\text{الف-۲۳})$$

واضح است که انتگرال حاصلضرب  $\Delta(x, a)$  و یک تابع  $f(x)$  که در نزدیکی مبدأ هموار است تنها در مبدأ سهم خواهد داشت:

$$\begin{aligned} \lim_{a \rightarrow 0} \int dx f(x) \Delta(x, a) &= f(0) \lim_{a \rightarrow 0} \int dx \Delta(x, a) \\ &= f(0) \end{aligned}$$

(ج) به همین ترتیب، هر تابع قله دار، که مساحت زیر آن به ۱ بهنجار شده باشد، در حدی که پهنای قله به صفر میل می کند به یک تابع دلتا نزدیک می شود. می توان نشان داد که دو رابطه زیر نمایشهای تابع دلتا هستند

$$\delta(x) = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{a}{x^2 + a^2} \quad (\text{الف-۲۴})$$

و

$$\delta(x) = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha^2 x^2}$$

(د) گاهی با چندجمله ایهای راست هنجار سروکار داریم، که آنها را با نماد کلی  $P_n(x)$  نشان می دهیم. این چندجمله ایها دارای خاصیت زیر هستند

$$\int dx P_m(x) P_n(x) w(x) = \delta_{mn} \quad (\text{الف-۲۶})$$

که در آن  $w(x)$  ممکن است واحد یا یک تابع ساده باشد، که آن را تابع وزن می نامند. برای توابعی که می توان آنها را برحسب این چندجمله ایهای متعامد بسط داد می توان نوشت

$$f(x) = \sum_n a_n P_n(x) \quad (\text{الف-۲۷})$$

اگر دو طرف این رابطه را در  $w(x) P_m(x)$  ضرب کنیم و روی  $x$  انتگرال بگیریم به دست می آوریم

$$a_m = \int dy w(y) f(y) P_m(y) \quad (\text{الف-۲۸})$$

با جاگذاری در الف-۲۷، و با آمادگی برای کار با "توابع تعمیم یافته"، جای جمع و انتگرال را بدون هیچ قید و شرطی عوض می‌کنیم:

$$\begin{aligned} f(x) &= \sum_n P_n(x) \int dy w(y) f(y) P_n(y) \\ &= \int dy f(y) \left( \sum_n P_n(x) w(y) P_n(y) \right) \end{aligned} \quad (\text{الف-۲۹})$$

بدین ترتیب، به نمایش دیگری از تابع دلتا می‌رسیم. مثالهای  $P_n(x)$  عبارت‌اند از چندجمله‌ایهای لژاندر، چندجمله‌ایهای هرمیت و چندجمله‌ایهای لاگر، که تمام اینها در مسائل مکانیک کوانتومی ظاهر می‌شوند.

چون تابع دلتا همیشه به صورت حاصلضرب با یک تابع هموار زیر علامت انتگرال ظاهر می‌شود، می‌توان برای آن مشتق تعریف کرد. به عنوان مثال،

$$\begin{aligned} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx f(x) \frac{d}{dx} \delta(x) &= \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \frac{d}{dx} [f(x) \delta(x)] - \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \frac{df(x)}{dx} \delta(x) \\ &= - \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \frac{df(x)}{dx} \delta(x) \\ &= - \left( \frac{df}{dx} \right)_{x=0} \end{aligned} \quad (\text{الف-۳۰})$$

و غیره. تابع دلتا ابزار بسیار مفیدی است که در هر بخشی از ریاضی فیزیک با آن روبه‌رو می‌شویم. انتگرال تابع دلتا عبارت است از

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^x dy \delta(y-a) &= 0 \quad x < a \\ &= 1 \quad x > a \\ &\equiv \theta(x-a) \end{aligned} \quad (\text{الف-۳۱})$$

که نمادنگاری متعارف برای این تابع ناپیوسته است که تابع پله‌ای نامیده می‌شود. برعکس، مشتق تابع پله‌ای  $\theta(x-a)$  تابع دلتای دیراک است:

$$\frac{d}{dx} \theta(x-a) = \delta(x-a) \quad (\text{الف-۳۲})$$

## پیوست ب

### عملگرها

در این پیوست بعضی از مباحث مربوط به عملگرهای خطی را بررسی می‌کنیم. توابع انتگرال‌پذیر مجذوری مجموعه‌ی توابع قابل قبول را تشکیل می‌دهند. اگر  $\psi_1(x)$  و  $\psi_2(x)$  انتگرال‌پذیر مجذوری و  $\alpha$  و  $\beta$  اعداد مختلط اختیاری باشند، چون تابع

$$\psi(x) = \alpha\psi_1(x) + \beta\psi_2(x) \quad (\text{ب-۱})$$

انتگرال‌پذیر مجذوری است، می‌گوییم  $\psi$ ‌ها یک فضای خطی تشکیل می‌دهند. عملگر  $A$  در این فضا یک نگاشت است:

$$A\psi(x) = \phi(x)$$

در این فضا، عملگر  $A$  یک نگاشت خطی است. در میان تمام عملگرها یک زیر مجموعه وجود دارد که عملگرهای مجذوری نامیده می‌شوند، و این خاصیت را دارند که

$$A\alpha\psi(x) = \alpha A\psi(x)$$

که در آن  $\alpha$  یک ثابت مختلط اختیاری است، و همچنین

$$A[\alpha\psi_1(x) + \beta\psi_2(x)] = \alpha A\psi_1(x) + \beta A\psi_2(x) \quad (۴-ب)$$

که در آن  $\alpha$  و  $\beta$  اعداد مختلط‌اند. یک زیرمجموعهٔ دیگر عبارت است از عملگرهای هرمیتی که برای آنها مقدار انتظاری به‌ازای تمام توابع قابل قبول  $\psi(x)$ ، یعنی

$$\langle A \rangle_\psi = \int dx \psi^*(x) A\psi(x) \quad (۵-ب)$$

حقیقی است. ابتدا ثابت می‌کنیم که برای تمام توابع قابل قبول  $\psi_1$  و  $\psi_2$  رابطهٔ زیر برقرار است

$$\int dx \psi_1^*(x) A\psi_2(x) = \int dx [A\psi_2(x)]^* \psi_1(x) \quad (۶-ب)$$

حقیقی بودن  $\langle A \rangle$  ایجاب می‌کند که

$$\int dx \psi^*(x) A\psi(x) = \int dx [A\psi(x)]^* \psi(x) \quad (۷-ب)$$

اکنون به‌جای  $\psi(x)$  قرار می‌دهیم

$$\psi(x) = \psi_1(x) + \lambda\psi_2(x) \quad (۸-ب)$$

و در نتیجه

$$\int dx (\psi_1^* + \lambda^*\psi_2^*) A(\psi_1 + \lambda\psi_2) = \int dx (\psi_1 + \lambda\psi_2) (A\psi_1 + \lambda A\psi_2)^* \quad (۹-ب)$$

با استفاده از هرمیتی بودن  $A$ ، یعنی

$$\int dx \psi_i^* A\psi_j = \int dx \psi_j (A\psi_i)^* \quad i = 1, 2 \quad (۱۰-ب)$$

به‌دست می‌آوریم

$$\lambda \int dx \psi_2^* A\psi_1 + \lambda \int dx \psi_1^* A\psi_2 = \lambda \int dx \psi_2 (A\psi_1)^* + \lambda^* \int dx \psi_1 (A\psi_2)^* \quad (۱۱-ب)$$



چون  $\lambda$  یک عدد مختلط اختیاری است، ضرایب  $\lambda$  و همچنین ضرایب  $\lambda^*$  در دو طرف باید جداگانه با هم برابر باشند. بنابراین،

$$\int dx \psi_{\nu}^{\dagger} A \psi_{\lambda} = \int dx (A \psi_{\nu})^{\dagger} \psi_{\lambda} \quad (۱۲-ب)$$

نتیجه دیگری که می‌خواهیم اثبات کنیم این است که ویژه‌تابعهای یک عملگر هرمیتی، مربوط به ویژه‌مقدارهای مختلف، متعامند. دو معادله زیر را در نظر بگیرید

$$A \psi_{\lambda}(x) = a_{\lambda} \psi_{\lambda}(x)$$

و

$$[A \psi_{\nu}(x)]^{\dagger} = a_{\nu} \psi_{\nu}^{\dagger}(x) \quad (۱۳-ب)$$

توجه کنید که  $a_{\nu}$  حقیقی است زیرا ویژه‌مقدارهای عملگرهای هرمیتی حقیقی هستند.  $a_{\nu}$  را در معادله اول و  $\psi_{\lambda}$  را در معادله دوم ضرب کرده‌ای می‌کنیم:

$$\begin{aligned} \int dx \psi_{\nu}^{\dagger} A \psi_{\lambda}(x) &= a_{\lambda} \int dx \psi_{\nu}^{\dagger}(x) \psi_{\lambda}(x) dx \\ \int dx (A \psi_{\nu})^{\dagger} \psi_{\lambda}(x) &= a_{\nu} \int dx \psi_{\nu}^{\dagger}(x) \psi_{\lambda}(x) dx \end{aligned} \quad (۱۴-ب)$$

از تقریب این دو به دست می‌آوریم

$$(a_{\lambda} - a_{\nu}) \int dx \psi_{\nu}^{\dagger}(x) \psi_{\lambda}(x) dx = \int dx \psi_{\nu}^{\dagger} A \psi_{\lambda} - \int dx (A \psi_{\nu})^{\dagger} \psi_{\lambda} \quad (۱۵-ب)$$

$$= 0$$

بنابراین، اگر  $a_{\lambda} \neq a_{\nu}$  داریم

$$\int dx \psi_{\nu}^{\dagger}(x) \psi_{\lambda}(x) dx = 0 \quad (۱۶-ب)$$

اگر همیوگ هرمیتی عملگر  $A$  را با  $A^{\dagger}$  نشان دهیم به طوری که

$$\int dx (A \psi_{\nu})^{\dagger} \psi_{\lambda} \equiv \int dx \psi_{\nu}^{\dagger} A^{\dagger} \psi_{\lambda} \quad (۱۷-ب)$$

آنگاه برای عملگر هرمیتی داریم

$$A = A^\dagger \quad (\text{ب-۱۸})$$

می‌توان نشان داد

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger \quad (\text{ب-۱۹})$$

برای این کار، می‌نویسیم

$$\begin{aligned} \int \psi_\nu^\dagger (AB)^\dagger \psi_\lambda &= \int (AB \psi_\nu)^\dagger \psi_\lambda \\ &= \int (B \psi_\nu)^\dagger (A^\dagger \psi_\lambda) \\ &= \int \psi_\nu^\dagger B^\dagger (A^\dagger \psi_\lambda) \\ &= \int \psi_\nu^\dagger B^\dagger A^\dagger \psi_\lambda \end{aligned} \quad (\text{ب-۲۰})$$

تعمیم این رابطه به صورت زیر است

$$(ABC \dots Z)^\dagger = A^\dagger \dots C^\dagger B^\dagger A^\dagger \quad (\text{ب-۲۱})$$

شرط لازم و کافی برای هرمیتی بودن حاصلضرب دو عملگر هرمیتی این است که این دو عملگر با هم جابه‌جا شوند:

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger = BA = AB + [B, A] \quad (\text{ب-۲۲})$$

نتیجه دیگر این است که برای هر عملگر  $A$  عملگرهای زیر هرمیتی هستند

$$\begin{aligned} A + A^\dagger \\ i(A - A^\dagger) \\ AA^\dagger \end{aligned} \quad (\text{ب-۲۳})$$

اکنون "روابط عدم قطعیت" را اثبات می‌کنیم. بنابه تعریف داریم

$$(\Delta A)^2 = \langle A^\dagger \rangle - \langle A \rangle^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle \quad (\text{ب-۲۴})$$

قرار می‌دهیم

$$\begin{aligned} U &= A - \langle A \rangle \\ V &= B - \langle B \rangle \end{aligned} \quad (25\text{-ب})$$

و می‌نویسیم

$$\phi = U\psi + i\lambda V\psi \quad (26\text{-ب})$$

که در آن  $\lambda$  یک پارامتر حقیقی است.  $\phi$  را در خودش ضرب نرده‌ای می‌کنیم:

$$I(\lambda) = \int dx \phi^\dagger \phi \geq 0 \quad (27\text{-ب})$$

اگر  $A$  و  $B$  هرمیتی باشند  $U$  و  $V$  نیز هرمیتی هستند. در نتیجه، می‌توان نوشت

$$\begin{aligned} I(\lambda) &= \int dx (U\psi + i\lambda V\psi)^\dagger (U\psi + i\lambda V\psi) \\ &= \int dx (U\psi)^\dagger (U\psi) + \lambda^2 \int dx (V\psi)^\dagger (V\psi) \\ &\quad + i\lambda \int dx [(U\psi)^\dagger (V\psi) - (V\psi)^\dagger (U\psi)] \\ &= \int dx \psi^\dagger (U^\dagger + \lambda^2 V^\dagger + i\lambda[U, V])\psi \\ &= (\Delta A)^\dagger + \lambda^2 (\Delta B)^\dagger + i\lambda \int dx \psi^\dagger [U, V]\psi \\ &= (\Delta A)^\dagger + \lambda^2 (\Delta B)^\dagger + i\lambda \langle [A, B] \rangle \end{aligned} \quad (28\text{-ب})$$

این کمیت وقتی کمینه است که

$$2\lambda(\Delta B)^\dagger + i\langle [A, B] \rangle = 0 \quad (29\text{-ب})$$

یا

$$\lambda = -i \frac{\langle [A, B] \rangle}{2(\Delta B)^\dagger} \quad (30\text{-ب})$$

با جاگذاری در  $I(\lambda)$  به دست می آوریم

$$(\Delta A)^2 - \frac{\langle [A, B] \rangle^2}{4(\Delta B)^2} + \frac{\langle [A, B] \rangle^2}{2(\Delta B)^2} \geq 0.$$

یعنی

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4} \langle i[A, B] \rangle^2 \quad (\text{ب-۳۱})$$

در ضمن، طرف چپ رابطه بالا وقتی کمترین مقدار خود را دارد که  $U\psi$  و  $V\psi$  با یکدیگر متناسب باشند. بنابراین، برای عملگرهای  $x$  و  $p$  در این مورد داریم

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d\psi(x)}{dx} + i\beta x\psi(x) = 0 \quad (\text{ب-۳۲})$$

جواب این معادله عبارت است از

$$\psi(x) = C e^{-\beta(x^2/2\hbar)} \quad (\text{ب-۳۳})$$

که ویژه تابع حالت پایه نوسانگر هماهنگ است. شایان توجه است که رابطه عدم قطعیت

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4} (\langle i[A, B] \rangle)^2 \quad (\text{ب-۳۴})$$

بدون هیچ استفاده‌ای از مفاهیم موجی یا دوجانبگی بین یک موج و تبدیل فوریه آن به دست آمده است. این نتیجه صرفاً مثبتی بر خواص عملگری مشاهده پذیرهای  $A$  و  $B$  است. این پیوست را با بیان چند خاصیت از جابه جاگرها به پایان می بریم.  
(الف)

$$[A, B] = -[B, A] \quad (\text{ب-۳۵})$$

(ب)

$$\begin{aligned} [A, B]^\dagger &= (AB)^\dagger - (BA)^\dagger \\ &= B^\dagger A^\dagger - A^\dagger B^\dagger \\ &= [B^\dagger, A^\dagger] \end{aligned} \quad (\text{ب-۳۶})$$

(ج) اگر  $A$  و  $B$  هرمیتی باشند،  $[A, B]$  نیز هرمیتی است. این نتیجه مستقیماً از خواص بالا به دست می‌آید.  
(د)

$$\begin{aligned} [AB, C] &= ABC' - C'AB \\ &= ABC' - AC'B + AC'B - C'AB \quad (\text{ب-۳۷}) \\ &= A[B, C'] + [A, C']B \end{aligned}$$

(ه) جمله به جمله می‌توان نشان داد که

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!} [A, [A, B]] + \frac{1}{3!} [A, [A, [A, B]]] + \dots \quad (\text{ب-۳۸})$$

که لم بیکر-هاوسدورف نامیده می‌شود و کاربردهایی در محاسبات با عملگرها دارد.  
(و) به سادگی می‌توان نشان داد

$$[A, [B, C']] + [B, [C', -A]] + [C', [A, B]] = 0 \quad (\text{ب-۳۹})$$

که اتحاد یاکوبی نامیده می‌شود.

برای بحث گسترده‌تر درباره عملگرها و فضاهاى خطی قلمرو آنها می‌توانید به کتاب زیر مراجعه کنید

J D Jackson, *Mathematics for Quantum Mechanics*, W A Benjamin, New York, 1962.

# مبحث ویژه ۱

## سینماتیک نسبیتی

در این بخش چند فرمول را که در ساده کردن اثرات تبدیلیهای نسبیتی از یک چارچوب مرجع به دیگری مفیدند به اختصار بیان می‌کنیم. یک کاربرد نمونه در پراکندگی پیش می‌آید: نظریه با چارچوب مرکز جرم و آزمایش با چارچوب آزمایشگاه سروکار دارد، و نتایج این دو را باید با هم مقایسه کرد. روش ساده‌سازی که باید از آن استفاده شود بر مبنای دو نتیجه از نظریه نسبیت خاص است: (الف) حاصلضرب زده‌ای چارچوب‌های  $A_\mu = (A_0, \mathbf{A})$  و  $B_\mu = (B_0, \mathbf{B})$  که با رابطه زیر تعریف می‌شود

$$A \cdot B = A_\mu B_\mu \equiv (A_0 B_0 - \mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) \quad (1-1)$$

تحت تبدیلات لورنتس ناورد است.

(ب) انرژی و تکانه یک ذره به صورت چارچوب‌زیر تبدیل می‌شوند

$$p_\mu = \left( \frac{E}{c}, \mathbf{p} \right) \quad (2-1)$$

که مجذور "طول" آن برحسب جرم سکون ذره عبارت است از

$$p^\nu = p_\mu p_\mu = \frac{E^2}{c^2} - \mathbf{p}^2 = m^2 c^2 \quad (3-1)$$

به‌طور کلی، برخورد بین دو ذره که به دو ذره در حالت نهایی منجر می‌شود، مانند

$$A(p_A) + B(p_B) \rightarrow C(p_C) + D(p_D)$$

فقط با دو عدد مشخص می‌شود. علت آن است که برای چهار تکانه  $۴ \times ۴ = ۱۶$  مؤلفه مختلف داریم؛ این ۱۶ مؤلفه با چهار شرط جرم (۱م-۳) و چهار شرط پایستگی انرژی-تکانه محدود می‌شوند؛ علاوه بر این، ناوردایی تحت انتقال و چرخش ایجاب می‌کند که شش مختصه دیگر، یعنی تکانه مرکز جرم، سمتگیری صفحه پراکندگی در فضا، و انتخاب محورها در این صفحه، بی‌تأثیر باشند. از دو ناوردای مشخص‌کننده برخورد، یکی را به صورت

$$s = (p_A + p_B)^2 = (p_C + p_D)^2 \quad (۴-۱م)$$

که جمله دوم آن از پایستگی چارتکانه ناشی می‌شود، و دیگری را به صورت زیر انتخاب می‌کنیم

$$t = (p_C - p_A)^2 = (p_D - p_B)^2 \quad (۵-۱م)$$

یک انتخاب ممکن دیگر عبارت است از

$$u = (p_D - p_A)^2 = (p_C - p_B)^2 \quad (۶-۱م)$$

این سه ناوردا مستقل از یکدیگر نیستند زیرا، با توجه به رابطه  $p_{A\mu} + p_{B\mu} = p_{C\mu} + p_{D\mu}$  که می‌توان آن را به سادگی اثبات کرد، قانون پایستگی انرژی-تکانه ایجاب می‌کند که

$$s + t + u = m_A^2 c^2 + m_B^2 c^2 + m_C^2 c^2 + m_D^2 c^2 \quad (۷-۱م)$$

مفهوم این ناورداها را در زیر بیان می‌کنیم:

$s$ : در چارچوب مرکز جرم، که در آن کمیتها را با ستاره نشان می‌دهیم، داریم

$$\mathbf{p}_A^* + \mathbf{p}_B^* = 0 \quad (۸-۱م)$$

بنابراین،

$$\begin{aligned} s &= (p_{\circ A}^* + p_{\circ B}^*)^2 - (\mathbf{p}_A^* + \mathbf{p}_B^*)^2 \\ &= \left( \frac{E_A^*}{c} + \frac{E_B^*}{c} \right)^2 \\ &= \frac{1}{c^2} (E_A^* + E_B^*)^2 \end{aligned} \quad (۹-۱م)$$

که، با تقریب ضریب  $c^2$ ، مجذور انرژی کل در چارچوب مرکز جرم است.  $t$ : معنی در یک مورد خاص (اما بسیار متداول) که در آن ذرات  $A$  و  $C$  و همچنین  $B$  و  $D$  یکسان هستند، مثلاً در واکنشهای

$$\pi + P \rightarrow \pi + P$$

و

$$\gamma + e \rightarrow \gamma + e$$

تا اندازه‌ای روشنتر است. در این مورد، در چارچوب مرکز جرم، از

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_B^* &= -\mathbf{p}_A^* & \mathbf{p}_D^* &= -\mathbf{p}_C^* \\ E_A^* + E_B^* &= E_C^* + E_D^* \end{aligned} \quad (10-1م)$$

و

$$m_A = m_C \quad m_B = m_D \quad (11-1م)$$

نتیجه می‌گیریم که

$$\begin{aligned} (\mathbf{p}_A^{*2} c^2 + m_A^2 c^4)^{1/2} + (\mathbf{p}_A^{*2} c^2 + m_B^2 c^4)^{1/2} &= (\mathbf{p}_C^{*2} c^2 + m_A^2 c^4)^{1/2} \\ &+ (\mathbf{p}_C^{*2} c^2 + m_B^2 c^4)^{1/2} \end{aligned}$$

یعنی

$$E_A^* = E_C^* \quad E_B^* = E_D^* \quad (12-1م)$$

بنابراین،

$$\begin{aligned} t &= (p_A - p_C)^2 = \left( \frac{E_A^*}{c} - \frac{E_C^*}{c} \right)^2 - (\mathbf{p}_A^* - \mathbf{p}_C^*)^2 \\ &= -(\mathbf{p}_A^* - \mathbf{p}_C^*)^2 \end{aligned} \quad (13-1م)$$



یعنی  $t$  منفی مجذور انتقال تکانه در چارچوب مرکز جرم است. توجه کنید که  $t$  به زاویه پراکندگی مرکز جرمی مربوط می‌شود. از رابطه بالا داریم

$$\begin{aligned} t &= -\mathbf{p}_A^{*\gamma} - \mathbf{p}_C^{*\gamma} + \gamma \mathbf{p}_A^* \cdot \mathbf{p}_C^* \\ &= -\mathbf{p}_A^{*\gamma} - \mathbf{p}_C^{*\gamma} + \gamma |\mathbf{p}_A^*| |\mathbf{p}_C^*| \cos \theta^* \end{aligned} \quad (۱۴-۱م)$$

چارچوب آزمایشگاه با  $\mathbf{p}_B^L = 0$  مشخص می‌شود، و در آن

$$p_{B\mu} = (m_{BC}, 0) \quad (۱۵-۱م)$$

بنابراین،

$$\begin{aligned} s &= (p_A + p_B)^\gamma = p_A^\gamma + p_B^\gamma + \gamma p_A p_B \\ &= m_A^\gamma c^\gamma + m_B^\gamma c^\gamma + \gamma m_B E_A^L \end{aligned} \quad (۱۶-۱م)$$

و

$$\begin{aligned} t &= (p_D - p_B)^\gamma \\ &= m_D^\gamma c^\gamma + m_B^\gamma c^\gamma - \gamma m_B E_D^L \\ &= (p_A - p_C)^\gamma \\ &= m_A^\gamma c^\gamma + m_C^\gamma c^\gamma - \gamma E_A^L E_C^L / c^\gamma + \gamma \mathbf{p}_A^L \cdot \mathbf{p}_C^L \\ &= m_A^\gamma c^\gamma + m_C^\gamma c^\gamma - \gamma E_A^L E_C^L / c^\gamma + \gamma |\mathbf{p}_A^L| |\mathbf{p}_C^L| \cos \theta^L \end{aligned} \quad (۱۷-۱م)$$

از این نتیجه، و با استفاده از

$$E_A^L + m_{BC} c^\gamma = E_C^L + E_D^L \quad (۱۸-۱م)$$

و ناوردایی  $s$  و  $t$ ، یعنی اینکه  $s$  و  $t$  در چارچوبهای مرکز جرم و آزمایشگاه (یا هر چارچوب دیگری) مقادیر یکسانی دارند، می‌توان رابطه میان زاویه پراکندگی مرکز جرمی و زاویه پراکندگی آزمایشگاهی و همچنین رابطه میان انرژیها در دو چارچوب را به دست آورد. ویژگیهای تبدیل سطح مقطع دیفرانسیلی  $d\sigma/d(\cos \theta)$  از ناوردایی  $d\sigma$ ، که می‌توان آن را با فرمولبندی نسبیتی نظریه پراکندگی اثبات کرد، به دست می‌آید. بنابراین،

$$\frac{d\sigma}{dt} \quad (۱۹-۱م)$$

ناوردا است، و برای نمایش سطح مقطع به صورتی که تبدیلهای از یک چارچوب به چارچوب دیگر از همه آسانتر انجام شوند، بهتر است آن را برحسب  $s$  و  $t$  بنویسیم. این کار را در اینجا انجام نمی‌دهیم. به عنوان یک نکته حاشیه‌ای بهایی، متذکر می‌شویم که رابطهٔ مربوط به

$$\int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}$$

ناوردای نسبیتی نیست. اما ناوردایی آشکار

$$\begin{aligned} & \int \dots \int d^3 p \delta(p^2 - m^2 c^2) \\ &= \int d^3 \mathbf{p} \int_{p_0 > 0} dp_0 \delta(p_0^2 - \mathbf{p}^2 - m^2 c^2) \quad (20-1\text{م}) \\ &= \int d^3 \mathbf{p} \frac{1}{2\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2 c^2}} = \frac{c}{2} \frac{d^3 \mathbf{p}}{(\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4)^{1/2}} \end{aligned}$$

نشان می‌دهد که

$$\int \frac{d^3 \mathbf{p}}{E} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \quad (21-1\text{م})$$

ناوردا است. عناصر ماتریس در نظریه‌های نسبیتی همیشه به ذراتی مربوط می‌شوند که نه مطابق با

$$\frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}$$

بلکه مطابق با

$$\frac{1}{\sqrt{V}} \frac{1}{\sqrt{E}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}$$

بهنجار می‌شوند، و در نتیجه عوامل لازم از مجذور عنصر ماتریس به دست می‌آیند.

## مبحث ویژه ۲

### عملگر چگالی

در بحثهای خود همیشه با تحول زمانی دستگاههای فیزیکی سروکار داشتیم که حالت‌های اولیه آنها به صورت زیر بودند

$$|\psi\rangle = \sum_n C_n |u_n\rangle \quad (۱-۲م)$$

این نوع آنهایی اولیه غالباً آنهایی نیستند که با روش آماده‌سازی حالتها فراهم می‌شوند. به جای یک مجموعه آماری متشکل از حالت‌های یکسان  $|\psi\rangle$ ، ممکن است تعدادی مجموعه آماری مختلف داشته باشیم که اندازه‌گیریها باید روی آنها انجام شوند. این مجموعه‌های آماری می‌توانند به صورت زیر باشند

$$|\psi^{(i)}\rangle = \sum_n C_n^{(i)} |u_n\rangle \quad (۲-۲م)$$

و همه آنچه می‌دانیم این است که احتمال یافتن یک مجموعه آماری که با  $(i)$  مشخص شده است  $p_i$  است و

$$\sum_i p_i = 1 \quad (۳-۲م)$$

برای مثال، ممکن است باریکه‌ای از اتمهای هیدروژن در یک حالت برانگیخته، با انرژی معین و تکانه زاویه‌ای مداری  $l$ ، و کاملاً ناقطبیته داشته باشیم، و از این رو تمام مقادیر  $m$ ، با  $-l \leq m \leq l$

به یک اندازه محتمل هستند. در این مورد،  $p_m = 1/(2l + 1)$  که مستقل از  $m$  است. صحیح نیست بگوییم این باریکه با تابع موج

$$|\psi\rangle = \sum_m C_m |Y_{lm}\rangle \quad (4-2م)$$

که در آن  $|C_m|^2 = 1/(2m + 1)$ ، توصیف می‌شود، زیرا وضعیت فیزیکی  $2m + 1$  باریکه مستقل را نشان می‌دهد، و در نتیجه هیچ رابطه فازی بین مقادیر مختلف  $m$  وجود ندارد. با استفاده از عملگر چگالی می‌توان هر دو مورد را بررسی کرد.

### حالت ناب

ابتدا حالت ناب را در نظر می‌گیریم. عملگر چگالی  $\rho$  با رابطه زیر تعریف می‌شود

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| \quad (5-2م)$$

که می‌توان آن را به صورت زیر نوشت

$$\rho = \sum_{m,n} C_n C_m^* |u_n\rangle\langle u_m| \quad (6-2م)$$

عناصر ماتریس  $\rho$  در پایه  $u_n$  عبارت‌اند از

$$\begin{aligned} \rho_{kl} &= \langle u_k | \rho | u_l \rangle = \langle u_k | \sum_{m,n} C_n C_m^* |u_n\rangle\langle u_m| | u_l \rangle \\ &= C_k C_l^* \end{aligned} \quad (7-2م)$$

مشاهده می‌کنیم که  
(الف)

$$\rho^\dagger = |\psi\rangle\langle\psi| \psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = \rho \quad (8-2م)$$

(ب)

$$\text{Tr } \rho = \sum_k \rho_{kk} = \sum_k |C_k|^2 = 1 \quad (9-2م)$$

(ج) همچنین، مقدار انتظاری هر مشاهده‌پذیری مانند  $A$  را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned}\langle A \rangle &= \langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_{m,n} C_m^* \langle u_m | A | u_n \rangle C_n \\ &= \sum_{m,n} C_m^* C_n A_{mn} = \sum_{m,n} A_{mn} \rho_{nm} \\ &= \text{Tr}(A\rho)\end{aligned}\quad (10-2م)$$

نتایج ۸-۲ تا ۱۰-۲ از انتخاب مجموعه کامل بردارهای پایه  $|u_n\rangle$  مستقل هستند. برای اثبات، مجموعه  $|v_n\rangle$  را در نظر می‌گیریم. بنابه قضیه کلی بسط، می‌توان نوشت

$$|v_n\rangle = \sum_m T_m^{(n)} |u_m\rangle$$

که در آن

$$T_m^{(n)} = \langle u_m | v_n \rangle \equiv T_{mn}$$

توجه کنید که

$$\begin{aligned}\sum_n T_{mn}(T^+)_{nk} &= \sum_n T_{mn} T_{kn}^* = \sum_n \langle u_m | v_n \rangle \langle u_k | v_n \rangle^* \\ &= \sum_n \langle u_m | v_n \rangle \langle v_n | u_k \rangle = \delta_{mk}\end{aligned}$$

که نشان می‌دهد ماتریس  $T$  یکانی است. بنابراین،

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &= \sum_k D_k |v_k\rangle \\ &= \sum_k D_k T_{kl} |u_l\rangle\end{aligned}$$

و در نتیجه

$$C_l = D_k T_{kl} = (T^{\text{tr}})_{lk} D_k \equiv U_{lk} D_k$$

چون  $T$  یکانی است، ترانهاد آن یعنی  $U \equiv T^{\text{tr}}$  نیز یکانی است. بنابراین،

$$\rho_{kl} = C_k C_l^* = (U)_{km} D_m (U)_{ln}^* D_n^*$$

$$= U \rho_D(U)^+$$

که در آن  $\rho_D$  عملگر چگالی در پایه  $v$  است. بدین ترتیب، داریم

$$\rho_D = U^+ \rho U$$

از یکانی بودن  $U$  نتیجه می‌شود که خواص  $\rho$  برای  $\rho_D$  نیز صدق می‌کنند. چون  $\rho = \rho^+$  می‌توان  $\rho$  را با یک تبدیل یکانی قطری کرد. این نشان می‌دهد که می‌توان پایه‌ای مانند  $|v_n\rangle$  انتخاب کرد که در آن  $\rho$  قطری باشد. چون  $\rho^2 = \rho$ ، ویژه‌مقدارهای آن تنها می‌توانند ۱ یا ۰ باشند، و چون  $\text{tr} \rho = 1$ ، تنها یکی از ویژه‌مقدارها می‌تواند ۱ باشد و بقیه باید صفر باشند. بنابراین، تنها یکی از  $D_k$ ها می‌تواند مخالف صفر باشد. این نشان می‌دهد که در یک پایه مناسب، حالت ناب حالتی است که ویژه‌حالت بزرگترین مجموعه مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده‌ای باشد که ویژه‌تابعهای آنها مجموعه  $|v_n\rangle$  هستند.

### حالت آمیخته

برای حالت آمیخته عملگر چگالی را با رابطه زیر تعریف می‌کنیم

$$\rho = \sum_i |\psi^{(i)}\rangle p_i \langle \psi^{(i)}| \quad (11-2م)$$

که در پایه  $|u_n\rangle$  به صورت زیر نوشته می‌شود

$$\rho = \sum_i \sum_{m,n} C_n^{(i)} C_m^{(i)*} p_i |u_n\rangle \langle u_m|$$

و از این رو

$$\rho_{kl} = \langle u_k | \rho | u_l \rangle = \sum_i p_i C_k^{(i)} C_l^{(i)*} \quad (12-2م)$$

توجه کنید که  $\rho_{kl} = \rho_{lk}^*$ ، و این نشان می‌دهد که  $\rho$  هرمیتی است. چون

$$\sum_n |C_n^{(i)}|^2 = 1$$

نتیجه می‌گیریم، مانند سابق، که

$$\text{Tr } \rho = \sum_k \rho_{kk} = \sum_i p_i = 1 \quad (۱۳-۲م)$$

همچنین، مانند مورد حالت ناب، داریم

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_i p_i \langle \psi^{(i)} | A | \psi^{(i)} \rangle \\ &= \sum_i \sum_{mn} p_i \langle \psi^{(i)} | u_n \rangle \langle u_m | A | u_m \rangle \langle u_m | \psi^{(i)} \rangle \\ &= \sum_i \sum_{mn} p_i C_m^{(i)} C_n^{(i)*} A_{nm} \\ &= \sum_{mn} \rho_{mn} A_{nm} = \text{Tr} (\rho A) \end{aligned} \quad (۱۴-۲م)$$

اما رابطه  $\rho^\dagger = \rho$  دیگر صادق نیست. در واقع

$$\rho^\dagger = \sum_j \sum_i |\psi^{(j)}\rangle p_j \langle \psi^{(i)} | \psi^{(j)} \rangle p_i \langle \psi^{(i)} | = \sum_i |\psi^{(i)}\rangle p_i^\dagger \langle \psi^{(i)} |$$

و چون  $\sum_i p_i = 1$ ، برای حالت آمیخته به دست می‌آوریم

$$\text{Tr } \rho^\dagger = \sum_i p_i^\dagger < 1 \quad (۱۵-۲م)$$

از معادله شرودینگر

$$\frac{d}{dt} |\psi^{(i)}\rangle = -\frac{i}{\hbar} H |\psi^{(i)}\rangle$$

و (چون  $H = H^\dagger$ )

$$\frac{d}{dt} \langle \psi^{(i)} | = \frac{i}{\hbar} \langle \psi^{(i)} | H$$

نتیجه می‌گیریم که

$$\frac{d}{dt} \rho = -\frac{i}{\hbar} H \rho + \frac{i}{\hbar} \rho H = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho] \quad (۱۶-۲م)$$

توجه کنید که علامت در اینجا مخالف علامت رابطه آهنگ تغییر زمانی عملگرهای دیگر است:

$$\frac{d}{dt}A = \frac{i}{\hbar}[H, A]$$

ساده‌ترین کاربرد صورتبندی بالا در توصیف باریکه‌ای از الکترون‌ها یا ذرات دیگر با اسپین  $1/2$  است. در اینجا  $\rho$  یک ماتریس هرمیتی  $2 \times 2$  است. کلی‌ترین شکل این ماتریس عبارت است از

$$\rho = \frac{1}{4}(a\mathbb{1} + \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \quad (17-2م)$$

که در آن  $a$  و  $\mathbf{b}$  حقیقی هستند. شرط  $\text{Tr}\rho = 1$  ایجاب می‌کند که  $a = 1$ . می‌توان  $\rho^2$  را به صورت زیر محاسبه کرد:

$$\begin{aligned} \rho^2 &= \frac{1}{4}(1 + \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma})(1 + \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{4}(1 + b^2 + 2\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \\ &= \frac{1}{4}\left(\frac{1+b^2}{2} + \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}\right) \quad (18-2م) \end{aligned}$$

ماتریس چگالی  $\rho$  تنها به شرطی یک حالت ناب را توصیف می‌کند که  $\rho^2 = \rho$ ، یعنی اگر  $b^2 = 1$ . برای حالت آمیخته، از م ۱۵-۲ نتیجه می‌گیریم که  $b^2 < 1$ .

اکنون می‌خواهیم یک تعبیر فیزیکی برای  $\mathbf{b}$  به دست آوریم. مخلوطی از باریکه‌هایی با اسپین  $1/2$  را در نظر بگیرید. هر یک از باریکه‌ها الکترونهایی در راستای محور  $z$  یا  $x$  یا  $y$  دارند. کسری از ذرات را که در یک ویژه‌حالت  $\sigma_2$  با ویژه‌مقدار  $+1$  هستند با  $f_2^{(+)}$  نشان می‌دهیم؛ کسری را که در ویژه‌حالت  $\sigma_2$  با ویژه‌مقدار  $-1$  هستند با  $f_2^{(-)}$  نشان می‌دهیم، و غیره، به طوری که

$$f_2^{(+)} + f_2^{(-)} + f_1^{(+)} + f_1^{(-)} + f_2^{(+)} + f_2^{(-)} = 1 \quad (19-2م)$$

ویژه‌حالت‌های  $\sigma_x$ ،  $\sigma_y$  و  $\sigma_z$  با ویژه‌مقدارهای  $\pm 1$  عبارت‌اند از

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$



بنابراین، ماتریس چگالی به صورت زیر است

$$\begin{aligned} \rho = & f_{\tau}^{(+)} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1 \ 0) + f_{\tau}^{(-)} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (0 \ 1) + f_{\nu}^{(+)} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} (1/\sqrt{2} \ 1/\sqrt{2}) \\ & + f_{\nu}^{(-)} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} (1/\sqrt{2} \ -1/\sqrt{2}) + f_{\eta}^{(+)} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} \end{pmatrix} (1/\sqrt{2} \ -i/\sqrt{2}) \\ & + f_{\eta}^{(-)} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} \end{pmatrix} (1/\sqrt{2} \ i/\sqrt{2}) \end{aligned}$$

با کمی محاسبه، و با استفاده از م ۲-۱۹، این  $\rho$  به صورت زیر درمی آید

$$\rho = \frac{1}{4} + \frac{1}{4} \sigma \cdot P \quad (20-2m)$$

که در آن  $P_i = f_i^{(+)} - f_i^{(-)}$ . کسری از ذرات در یک مخلوط که در جهت  $z$  هستند منهای کسری که در جهت  $-z$  هستند قطبش در راستای  $z$  نامیده می شود، و آن را با  $P_z$  نشان می دهیم. برای سایر راستاها نیز به همین ترتیب است. بنابراین، از مقایسه م ۲-۲۰ با م ۲-۱۸، می توان  $\mathbf{b}$  را بردار قطبش برآیند باریکه  $\mathbf{P}$  تعبیر کرد. در مورد باریکه های اتمها با تکانه زاویه ای  $l$ ، کلی ترین صورت  $\rho$  یک ماتریس هرمیتی  $(2l+1) \times (2l+1)$  است، و تعبیر عناصر آن پیچیده تر است. بحث بیشتر درباره ماتریس چگالی فراتر از مجال این کتاب است.

## مبحث ویژه ۳

### تقریب و نترل-کرامرز-بریلوئن

این روش تقریبی مخصوصاً وقتی مفید است که با پتانسیلهای کند تغییر سروکار داریم. معنای دقیق این بعداً روشن خواهد شد. هدف حل معادله زیر است

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \psi(x) = 0 \quad (1-3م)$$

و برای این کار، مفید است که بنویسیم

$$\psi(x) = R(x) e^{iS(x)/\hbar} \quad (2-3م)$$

آنگاه

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} = \left[ \frac{d^2 R}{dx^2} + \frac{2i}{\hbar} \frac{dR}{dx} \frac{dS}{dx} + \frac{i}{\hbar} R \frac{d^2 S}{dx^2} - \frac{1}{\hbar^2} R \left( \frac{dS}{dx} \right)^2 \right] e^{iS(x)/\hbar} \quad (3-3م)$$

پس از جاگذاری در م ۳-۱ و تفکیک قسمتهای انگاری و حقیقی، این معادله دیفرانسیل به دو قسمت تقسیم می‌شود. از قسمت انگاری به دست می‌آوریم

$$R \frac{d^2 S}{dx^2} + 2 \frac{dR}{dx} \frac{dS}{dx} = 0 \quad (4-3م)$$

یعنی

$$\frac{d}{dx} \left( \log \frac{dS}{dx} + \nu \log R \right) = 0$$

که جواب آن عبارت است از

$$\frac{dS}{dx} = \frac{C}{R^\nu} \quad (5-3م)$$

از قسمت حقیقی داریم

$$\frac{d^\nu R}{dx^\nu} - \frac{\nu}{h^\nu} R \left( \frac{dS}{dx} \right)^\nu + \frac{\nu m [E - V(x)]}{h^\nu} R = 0$$

که پس از جاگذاری م ۵-۳ به صورت زیر درمی آید

$$\frac{d^\nu R}{dx^\nu} - \frac{C^\nu}{h^\nu} \frac{\nu}{R^\nu} + \frac{\nu m [E - V(x)]}{h^\nu} R = 0 \quad (6-3م)$$

در اینجا تقریب زیر را به کار می بریم

$$\frac{\nu}{R} \frac{d^\nu R}{dx^\nu} \ll \frac{C^\nu}{h^\nu} \frac{\nu}{R^\nu} = \frac{\nu}{h^\nu} \left( \frac{dS}{dx} \right)^\nu \quad (7-3م)$$

و در نتیجه، با حذف جمله اول در م ۶-۳، به دست می آوریم

$$\frac{C^\nu}{R^\nu} = \nu m [E - V(x)] \quad (8-3م)$$

بنابراین

$$\frac{C}{R^\nu} = \frac{dS}{dx} = \sqrt{\nu m [E - V(x)]} \quad (9-3م)$$

و سرانجام

$$S(x) = \int_{x_0}^x dy \sqrt{\nu m [E - V(x)]} \quad (10-3م)$$

شرط اعتبار را می‌توان به گزاره‌ای درباره تغییر  $V(x)$  تبدیل کرد. این شرط در صورتی برقرار است که  $V(x)$  در یک طول موج به‌کندی تغییر کند؛ طول موج از یک نقطه به نقطه دیگر تغییر می‌کند، اما برای پتانسیل کند تغییر  $V(x)$  با رابطه زیر تعریف می‌شود

$$\lambda(x) = \frac{\hbar}{p(x)} = \frac{\hbar}{\{2m[E - V(x)]\}^{1/2}} \quad (11-3م)$$

نقاطی که در آنها

$$E - V(x) = 0 \quad (12-3م)$$

نیاز به بررسی خاص دارد، زیرا چنانکه دیده می‌شود  $R(x)$  در معادله تقریبی م ۳-۸ در این نقاط تکین است. چون تابع موج و در نتیجه  $R(x)$  نمی‌تواند تکین باشد، تکنیکی  $R(x)$  به معنای این است که تقریب م ۳-۷ در این نقاط ضعیف است. این نقاط ویژه را نقاط برگشت می‌نامند، زیرا در این نقاط است که ذره کلاسیک برمی‌گردد: ذره کلاسیک تنها در ناحیه  $E - V(x)$  می‌تواند حرکت کند. روش بررسی جوابها در نزدیکی نقاط برگشت تا اندازه‌ای فنی‌تر از آن است که در اینجا بیان کنیم. اساس کار این است که یک جواب در طرف چپ نقطه برگشت [ جایی که در آن  $E > V(x)$  ] به صورت زیر داریم

$$\psi(x) = R e^i \int_{x_1}^x dy \sqrt{(2m/\hbar^2)[E - V(y)]} \quad (13-3م)$$

و جوابی در طرف راست نقطه برگشت [ که در آن  $E < V(x)$  ] داریم، و فرمولی لازم داریم که بین آنها درونبایی کند. در حوالی نقطه برگشت می‌توان  $\sqrt{(2m/\hbar^2)[E - V(x)]}$  را با یک خط راست در یک بازه کوچک تقریب گرفت، و معادله شرودینگر را به‌طور دقیق حل کرد. چون این یک معادله مرتبه دوم است دو ثابت قابل تنظیم خواهیم داشت که یکی از آنها با برازش جواب به م ۳-۱۳ تعیین می‌شود و دیگری با برازش آن به

$$\psi(x) = R e^{-\int_{x_1}^x dy \sqrt{(2m/\hbar^2)[V(y) - E]}} \quad (14-3م)$$

که جواب در طرف راست نقطه برگشت است.<sup>۱</sup> وقتی  $x$  افزایش می‌یابد دامنه جواب بالا کاهش

۱. برای تفصیل بیشتر می‌توانید به هر کتاب پیشرفته‌تری درباره مکانیک کوانتومی، از جمله دو کتاب زیر، مراجعه کنید.

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

L. I Schiff, *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, New York, 1968.

می‌یابد. تضعیف کل در نقطه برگشت دوم، وقتی باز هم  $E \geq V(x)$ ، عبارت است از

$$\frac{\psi(x_{II})}{\psi(x_I)} \simeq e^{-\int_{x_I}^{x_{II}} dy \sqrt{(2m/\hbar^2)[V(y)-E]}} \quad (م-۱۵)$$

که دقیقاً جذر احتمال تراکسیل است که در فصل ۵ به دست آوردیم.

## مبحث ویژه ۴

### طول عمر، پهنای خط، و تشدید

در این بخش سه کار انجام می‌دهیم:

- (الف) با استفاده از رهیافت کلی وایسکوف و ویگنر، روش نسبتاً دقیقتری برای بررسی آهنگهای گذار بیان می‌کنیم که نشان می‌دهد چگونه افت نمایی به وجود می‌آید.
- (ب) نشان می‌دهیم که چگونه شکل لورنتسی برای پهنای خط به وجود می‌آید.
- (ج) نشان می‌دهیم که دامنه پراکندگی فوتون از اتم در حالت پایه، وقتی انرژی فوتون فرودی برابر با انرژی (جابه‌جا شده) مربوط به حالت برانگیخته است، به شدت قله‌دار می‌شود.
- برای اینکه مسئله تا حد امکان ساده شود، اتمی را تنها با دو تراز، یکی حالت پایه با انرژی صفر و دیگری یک حالت برانگیخته با انرژی  $E$ ، در نظر می‌گیریم. این دو حالت به میدان الکترومغناطیسی، که آن را نرده‌ای می‌گیریم، جفت می‌شوند، و در نتیجه هیچ بردار قطبشی ظاهر نمی‌شود. تنها یک زیرمجموعه از ویژه‌حالت‌های  $H_0$  را انتخاب می‌کنیم که متشکل است از حالت برانگیخته  $\phi_1$  که برای آن

$$H_0 \phi_1 = E \phi_1 \quad (1-4م)$$

و حالت پایه به علاوه یک فوتون،  $\phi(\mathbf{k})$ ، که برای آن

$$H_0 \phi(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) \phi(\mathbf{k}) \quad (2-4م)$$

و در بسط یک تابع اختیاری به این زیرمجموعه بسنده می‌کنیم. این کار مسلماً وقتی موجه است که جفت‌شدگی میان دو حالت  $\phi_1$  و  $\phi(\mathbf{k})$  از طریق پتانسیل  $V$ ، مانند جفت‌شدگی الکترومغناطیسی،

کوچک باشد زیرا آنگاه تأثیر حالتهای دو فوتونی، سه فوتونی و ... قابل چشمپوشی است. توجه کنید که حتی وقتی  $\mathbf{k}$  به گونه‌ای است که انرژیهای  $\varepsilon(\mathbf{k})$  و  $E$  با هم برابرند، داریم

$$\langle \phi_1 | \phi(\mathbf{k}) \rangle = 0 \quad (3-4م)$$

این حالتها به این دلیل متعامدند که در یکی از آنها فوتون داریم و در دیگری نداریم، و نیز برای یکی از آنها اتم برانگیخته است و برای دیگری نیست. جواب معادله

$$i\hbar \frac{d\psi(t)}{dt} = (H_0 + V)\psi(t) \quad (4-4م)$$

را می‌توان برحسب مجموعه کامل بسط داد:

$$\psi(t) = a(t)\phi_1 e^{-iEt/\hbar} + \int d^r \mathbf{k} b(\mathbf{k}, t)\phi(\mathbf{k})e^{-i\varepsilon(\mathbf{k})t/\hbar} \quad (5-4م)$$

با جاگذاری در م ۴-۴، به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{da}{dt} e^{-iEt/\hbar} \phi_1 + Ea e^{-iEt/\hbar} \phi_1 \\ + i\hbar \int d^r \mathbf{k} \frac{db(\mathbf{k}, t)}{dt} e^{-i\varepsilon(\mathbf{k})t/\hbar} \phi(\mathbf{k}) + \int d^r \mathbf{k} \varepsilon(\mathbf{k}) b(\mathbf{k}, t) e^{-i\varepsilon(\mathbf{k})t/\hbar} \phi(\mathbf{k}) \\ = Ea(t) e^{-iEt/\hbar} \phi_1 + \int d^r \mathbf{k} \varepsilon(\mathbf{k}) b(\mathbf{k}, t) e^{-i\varepsilon(\mathbf{k})t/\hbar} \phi(\mathbf{k}) \\ + a(t) e^{iEt/\hbar} V \phi_1 + \int d^r \mathbf{k} b(\mathbf{k}, t) e^{-i\varepsilon(\mathbf{k})t/\hbar} V \phi(\mathbf{k}) \end{aligned}$$

حاصلضرب نرده‌ای با  $\phi_1$  را محاسبه می‌کنیم:

$$i\hbar \frac{da}{dt} = a(t) \langle \phi_1 | V | \phi_1 \rangle + \int d^r \mathbf{k} b(\mathbf{k}, t) e^{-i[\varepsilon(\mathbf{k}) - E]t/\hbar} \langle \phi_1 | V | \phi(\mathbf{k}) \rangle$$

چون  $V$  وقتی روی یک حالت عمل می‌کند تعداد فوتونها را بنابه فرض به اندازه ۱ تغییر می‌دهد، باید  $\langle \phi_1 | V | \phi_1 \rangle = 0$ . با نمادنگاری

$$\begin{aligned} \varepsilon(\mathbf{k}) - E &= \hbar\omega(\mathbf{k}) \\ \langle \phi_1 | V | \phi(\mathbf{k}) \rangle &= M(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (6-4م)$$

معادله به صورت زیر درمی آید

$$i\hbar \frac{da(t)}{dt} = \int d^r \mathbf{k} b(\mathbf{k}, t) e^{-i\omega(\mathbf{k})t} M(\mathbf{k}) \quad (۷-۴م)$$

اگر ضرب نرده‌ای در  $\phi(\mathbf{q})$  را انجام دهیم، و مجدداً با استفاده از شمارش تعداد فوتونها قرار دهیم  $\langle \phi(\mathbf{q}) | V | \phi(\mathbf{k}) \rangle = 0$ ، با توجه به رابطهٔ بهنجارش

$$\langle \phi(\mathbf{q}) | \phi(\mathbf{k}) \rangle = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \quad (۸-۴م)$$

معادلهٔ زیر را به دست می آوریم

$$i\hbar \frac{db(\mathbf{q}, t)}{dt} = a(t) e^{i\omega(\mathbf{q})t} M^*(\mathbf{q}) \quad (۹-۴م)$$

چون اگر حالت برانگیخته در  $t = 0$  اشغال شده باشد  $b(\mathbf{k}, 0) = 0$ ، جواب این معادله عبارت است از

$$b(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{i\hbar} M^*(\mathbf{k}) \int_0^t dt' e^{i\omega(\mathbf{k})t'} a(t') \quad (۱۰-۴م)$$

با جاگذاری در م ۷-۴ به معادلهٔ زیر می رسیم

$$\frac{da(t)}{dt} = -\frac{1}{\hbar^2} \int d^r \mathbf{k} |M(\mathbf{k})|^2 e^{-i\omega(\mathbf{k})t} \int_0^t dt' a(t') e^{i\omega(\mathbf{k})t'} \quad (۱۱-۴م)$$

اکنون فرض می کنیم جواب این معادله به ازای مقادیر بزرگ  $t$  به صورت زیر است

$$a(t) = a_0 e^{-zt} \quad (۱۲-۴م)$$

با جاگذاری در م ۱۱-۴ به دست می آوریم

$$\begin{aligned} -ze^{-zt} &= -\frac{1}{\hbar^2} \int d^r \mathbf{k} |M(\mathbf{k})|^2 \frac{e^{-i\omega(\mathbf{k})t}}{i\omega(\mathbf{k}) - z} (e^{i\omega(\mathbf{k})t} e^{-zt} - 1) \\ &= -\frac{1}{\hbar^2} \int d^r \mathbf{k} |M(\mathbf{k})|^2 \frac{1}{i\omega(\mathbf{k}) - z} (e^{-zt} - e^{-i\omega(\mathbf{k})t}) \end{aligned} \quad (۱۳-۴م)$$



جمله دوم به‌ازای مقادیر بزرگ  $t$  صفر می‌شود، زیرا تابع زیر انتگرال حاصلضرب تابعی از  $\mathbf{k}$  با تغییرات هموار و تابع کران‌داری است که به‌سرعت تغییر می‌کند، و می‌توان نشان داد که انتگرال بنابه لم ریمان-لبگ سریعتر از هر توان  $1/t$  صفر می‌شود. بنابراین، آنچه باقی می‌ماند عبارت است از

$$z = \frac{1}{\hbar^2} \int d^3\mathbf{k} |M(\mathbf{k})|^2 \frac{1}{i\omega(\mathbf{k}) - z} \quad (14-4م)$$

اکنون می‌نویسیم

$$z = \frac{\gamma}{2} + \frac{i\Delta}{\hbar} \quad (15-4م)$$

و چون  $|M(\mathbf{k})|^2$  کوچک‌اند،  $\gamma$  و  $\Delta/\hbar$  نیز کوچک‌اند. با جاگذاری در م ۱۴-۴ و حذف حاصلضرب کوچکتر  $\Delta/\hbar$  و  $|M(\mathbf{k})|^2$ ، به‌دست می‌آوریم

$$\frac{\gamma}{2} + \frac{i\Delta}{\hbar} = \frac{1}{\hbar^2} \int d^3\mathbf{k} |M(\mathbf{k})|^2 \frac{-i\omega(\mathbf{k}) + \gamma/2}{(\gamma/2)^2 + (\omega(\mathbf{k}) - \Delta/\hbar)^2} \quad (16-4م)$$

با استفاده از رابطه

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0^+} \frac{\lambda}{\sigma^2 + \lambda^2} = \pi \delta(\sigma) \quad (17-4م)$$

معادله ۱۶-۴ به دو معادله زیر تفکیک می‌شود

$$\begin{aligned} \gamma &= \frac{2\pi}{\hbar} \int d^3\mathbf{k} |M(\mathbf{k})|^2 \delta(\hbar\omega(\mathbf{k}) - \Delta) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \int d^3\mathbf{k} |M(\mathbf{k})|^2 \delta(\varepsilon(\mathbf{k}) - (E + \Delta)) \end{aligned} \quad (18-4م)$$

و

$$\begin{aligned} \Delta &= - \int d^3\mathbf{k} |M(\mathbf{k})|^2 \frac{1}{\hbar\omega(\mathbf{k}) - \Delta} \\ &= \int d^3\mathbf{k} |M(\mathbf{k})|^2 \frac{1}{E + \Delta - \varepsilon(\mathbf{k})} \end{aligned} \quad (19-4م)$$

در هر دو انتگرال، می‌توان  $\Delta$  را در شناسه تابع دلتا و در مخرج کسر، با توجه به‌دقت محاسبه، حذف کرد، اما آن‌را نگه می‌داریم تا بر این نکته تأکید کنیم که این  $E + \Delta$  است که همه جا ظاهر

می‌شود، یعنی انرژی حالت برانگیخته به اندازه  $\Delta$  جابه‌جا شده است. بدین ترتیب، ضریب  $\phi_1$  در  $\psi(t)$ ، با شرط اولیه

$$a(0) = a_0 = 1 \quad (20-4م)$$

عبارت است از

$$a(t) = e^{-\gamma t/2} e^{-i(E+\Delta)t/\hbar} \quad (21-4م)$$

و احتمال یافتن  $\psi(t)$  در حالت اولیه  $\phi_1$  پس از زمان (طولانی)  $t$  برابر است با

$$|a(t)|^2 = e^{-\gamma t} \quad (22-4م)$$

از م ۱۸-۴ ملاحظه می‌کنیم که  $\gamma$  آهنگ افت است که در نظریه اختلال محاسبه می‌شود. همچنین ضریب فاز، چنانکه مقایسه با ۱۶-۱۶ نشان می‌دهد، متضمن انرژی جابه‌جاشده به اندازه جابه‌جایی انرژی اختلال مرتبه دوم است. تنها تفاوت آن است که حالت‌های میانی که روی آنها جمع زده می‌شود در اینجا یک پیوستار تشکیل می‌دهند. چون مخرج کسر در م ۱۰-۴ می‌تواند صفر شود، باید از فرمول زیر استفاده کنیم

$$i\Delta/\hbar = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{1}{\hbar^2} \int d^3k |M(\mathbf{k})|^2 \frac{-i\omega(\mathbf{k})}{\lambda^2 + (\omega(\mathbf{k}) - \Delta/\hbar)^2} \quad (23-4م)$$

کمیت قابل توجه دیگر احتمال تحول حالت  $\psi(t)$  به  $\phi(\mathbf{k})$  در  $t = \infty$  است. این احتمال برابر است با  $|b(\mathbf{k}, \infty)|^2$ ، که در آن بنابه م ۱۰-۴ و م ۱۲-۴ داریم

$$\begin{aligned} b(\mathbf{k}, \infty) &= \frac{1}{i\hbar} M^*(\mathbf{k}) \int_0^\infty dt' e^{-[z - i\omega(\mathbf{k})]t'} \\ &= \frac{M^*(\mathbf{k})}{i\hbar} \frac{1}{z - \omega(\mathbf{k})} \end{aligned}$$

بنابراین،

$$b(\mathbf{k}, \infty) = \frac{M^*(\mathbf{k})}{\varepsilon(\mathbf{k}) - E - \int d^3k' \frac{|M(\mathbf{k}')|^2}{E - \varepsilon(\mathbf{k}')} + i\hbar\gamma/2} \quad (24-4م)$$

و مجذور قدرمطلق آن عبارت است از

$$|b(\mathbf{k}, \infty)|^2 = \frac{|M(\mathbf{k})|^2}{[\varepsilon(\mathbf{k}) - E - \Delta]^2 + (\hbar\gamma/2)^2} \quad (25-4م)$$

که شکل لورنتسی پهنای خط را می‌دهد: انرژی فوتون حول انرژی جابه‌جاشده تراز برانگیخته، با پهنایی که با  $\hbar\gamma/2$  توصیف می‌شود، متمرکز شده است.

همین شکل در مسئله پراکندگی ظاهر می‌شود. پراکندگی یک "فوتون" با تکانه  $\mathbf{k}_i$  را از اتمی در حالت پایه در نظر بگیرید. حالت دستگاه باز هم با  $\mathbf{k}_i$ ،  $\mathbf{k}_f$ ،  $\mathbf{k}_i$  و  $\mathbf{k}_f$  توصیف می‌شود، با این استثنا که در ابتدا، که در اینجا به معنای در  $t = -\infty$  است، حالت با  $\phi(\mathbf{k}_i)$  مشخص می‌شود، و از این رو

$$b(\mathbf{q}, t) = \delta(\mathbf{q} - \mathbf{k}_i) \quad t = -\infty \text{ در} \quad (26-4م)$$

بنابراین، با انتگرال گرفتن از  $\mathbf{k}_i$  به دست می‌آوریم

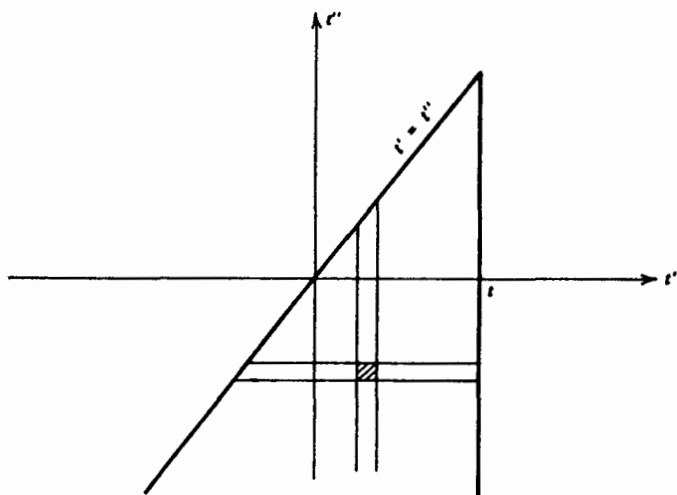
$$b(\mathbf{q}, t) = \delta(\mathbf{q} - \mathbf{k}_i) + \frac{1}{i\hbar} M^*(\mathbf{q}) \int_{-\infty}^t dt' a(t') e^{i\omega(\mathbf{q})t'} \quad (27-4م)$$

اکنون باید دامنه گذار به یک حالت نهایی را تعیین کنیم که در آن فوتون در  $t = +\infty$  دارای تکانه  $\mathbf{k}_f$  است. با استفاده از معادله بالا داریم

$$\begin{aligned} \langle \phi(\mathbf{k}_f) | \psi(+\infty) \rangle &= b(\mathbf{k}_f, +\infty) \\ &= \delta(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i) - \frac{i}{\hbar} M^*(\mathbf{k}_f) \int_{-\infty}^{\infty} dt' a(t') e^{i\omega_f t'} \quad (28-4م) \\ &(\omega_f \equiv \omega(\mathbf{k}_f)) \end{aligned}$$

با جاگذاری  $\mathbf{k}_i$  در  $\mathbf{k}_f$  به معادله زیر می‌رسیم

$$\frac{da(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} e^{-i\omega_i t} M(\mathbf{k}_i) - \frac{1}{\hbar^2} \int d^3\mathbf{k} |M(\mathbf{k})|^2 e^{-i\omega(\mathbf{k})t} \int_{-\infty}^t dt' a(t') e^{i\omega(\mathbf{k})t'} \quad (29-4م)$$



شکل م ۱-۴ انتگرال در معادله م ۳۰-۴ را می‌توان یا به صورت "مجموع" نوارهای قائم، مانند این معادله، یا به صورت مجموع نوارهای افقی، مانند معادله م ۳۲-۴، نوشت. از همین تغییر ترتیب در م ۳۳-۴ استفاده شده است بجز اینکه خط قائم در  $t''$  به  $+\infty$  منتقل شده است.

از این معادله می‌توان انتگرال گرفت، و با توجه به اینکه  $a(-\infty) = 0$  به دست می‌آوریم

$$a(t) = \frac{M(\mathbf{k}_i)}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{-i\omega_i t'} \quad (30-4m)$$

$$- \frac{1}{\hbar^2} \int d^r \mathbf{k} |M(\mathbf{k})|^2 \int_{-\infty}^t dt' e^{-i\omega(\mathbf{k})t'} \int_{-\infty}^{t'} dt'' a(t'') e^{i\omega(\mathbf{k})t''}$$

اما انتگرال  $\int_{-\infty}^t dt' e^{-i\omega_i t'}$  خوش تعریف نیست. روش متعارف این است که آن را به صورت زیر بنویسیم

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^t dt' e^{-i(\omega_i + i\epsilon)t'} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} i \frac{e^{-i(\omega_i + i\epsilon)t}}{\omega_i + i\epsilon} \quad (31-4m)$$

استفاده از ضریب همگرایی، که می‌توان بعداً آن را به صورت مناسبی صفر کرد، تا اندازه‌ای شبیه به در نظر گرفتن پتانسیل کولنی به عنوان حد پتانسیل کولنی استتار شده است، که در فصل ۲۳ به آن اشاره شد. اکنون با توجه به شکل م ۱-۴ می‌توان دید که

$$\int_{-\infty}^t dt' e^{-i\omega(\mathbf{k})t'} \int_{-\infty}^{t'} dt'' a(t'') e^{i\omega(\mathbf{k})t''} = \int_{-\infty}^t dt'' a(t'') e^{i\omega(\mathbf{k})t''} \int_{t''}^t dt' e^{-i\omega(\mathbf{k})t'}$$

$$= \frac{i}{\omega(\mathbf{k})} \int_{-\infty}^t dt'' a(t'') [e^{-i\omega(\mathbf{k})(t-t'')} - 1]$$

و در نتیجه

$$a(t) = \frac{M(\mathbf{k}_i) e^{-i\omega_i t}}{h(\omega_i + i\varepsilon)} - \frac{i}{\hbar^2} \int d^r \mathbf{k} \frac{|M(\mathbf{k})|^2}{\omega(\mathbf{k})} \int_{-\infty}^t dt'' a(t'') [e^{-i\omega(\mathbf{k})(t-t'')} - 1] \quad (۳۲-۴م)$$

بنا به م ۴-۲۸، کمیت حائز اهمیت برای پراکندگی در جهتی غیر از جهت جلو (که در نتیجه می توان از جمله اول صرف نظر کرد) عبارت است از

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt a(t) e^{i\omega_f t} = \frac{M(\mathbf{k}_i)}{\hbar(\omega_i + i\varepsilon)} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega_f - \omega_i)t}$$

$$- \frac{i}{\hbar^2} \int d^r \mathbf{k} \frac{|M(\mathbf{k})|^2}{\omega(\mathbf{k})} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_f t} \int_{-\infty}^t dt'' a(t'') [e^{-i\omega(\mathbf{k})(t-t'')} - 1]$$

$$= \frac{2\pi M(\mathbf{k}_i)}{\hbar(\omega_i + i\varepsilon)} \delta(\omega_f - \omega_i) \quad (۳۳-۴م)$$

$$- \frac{i}{\hbar^2} \int d^r \mathbf{k} \frac{|M(\mathbf{k})|^2}{\omega(\mathbf{k})} \int_{-\infty}^{\infty} dt'' a(t'') \int_{t''}^{\infty} dt \{ e^{i\omega(\mathbf{k})t''} e^{i[\omega_f - \omega(\mathbf{k})t]} - e^{i\omega_f t} \}$$

که در آن در سطر آخر باز هم انتگرال را با استفاده از شکل م ۴-۱ نوشته ایم. انتگرال گیری روی  $t$  را باز هم می توان با استفاده از روش ضریب همگرایی انجام داد، و در نتیجه م ۴-۳۳ به صورت زیر درمی آید

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt a(t) e^{i\omega_f t} = \frac{2\pi M(\mathbf{k}_i) \delta(\omega_f - \omega_i)}{\hbar(\omega_i + i\varepsilon)} + \frac{1}{\hbar^2} \int d^r \mathbf{k} \frac{|M(\mathbf{k})|^2}{\omega(\mathbf{k})} \int_{-\infty}^{\infty} dt'' a(t'') e^{i\omega_f t''}$$

$$\times \left[ \frac{1}{\omega_f - \omega(\mathbf{k}) + i\varepsilon} - \frac{1}{\omega_f + i\varepsilon} \right]$$

که در واقع معادله‌ای برای یک مجهول است. از حل این معادله داریم

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt a(t) e^{i\omega_f t} = \frac{2\pi M(\mathbf{k}_i) \delta(\omega_f - \omega_i)}{\hbar(\omega_i + i\varepsilon)} \quad (34-4م)$$

$$\times \frac{1}{1 - \frac{1}{\hbar^2 \omega_f} \int d^3 \mathbf{k} \frac{|M(\mathbf{k})|^2}{\omega_f - \omega(\mathbf{k}) + i\varepsilon}}$$

بنابراین، برای جهت غیر جلو به دست می‌آوریم

$$b(\mathbf{k}_f, \infty) = -\frac{i}{\hbar} M^*(\mathbf{k}_f) \cdot 2\pi M(\mathbf{k}_i) \delta(\omega_f - \omega_i)$$

$$\times \frac{1}{\hbar\omega_i + i\varepsilon - \int d^3 \mathbf{k} \frac{|M(\mathbf{k})|^2}{\hbar\omega_f - \hbar\omega(\mathbf{k}) + i\varepsilon}} \quad (35-4م)$$

$$= \frac{-2\pi i \delta(\hbar\omega_f - \hbar\omega_i) M(\mathbf{k}_i) M^*(\mathbf{k}_f)}{\varepsilon(\mathbf{k}_i) - E - \int d^3 \mathbf{k} \frac{|M(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon(\mathbf{k}_i) - \varepsilon(\mathbf{k})} + i\pi \int d^3 \mathbf{k} |M(\mathbf{k})|^2 \delta[\varepsilon(\mathbf{k}_i) - \varepsilon(\mathbf{k})]}$$

وقتی انرژی فرودی  $\varepsilon_i$  (مساوی با انرژی نهایی  $\varepsilon_f$ ) نزدیک به انرژی حالت برانگیخته اتم است، که مانند م ۴-۲۵ به  $E + \Delta E$  جابه‌جا شده است، دامنه قله تیزی پیدا می‌کند. این نتیجه تفسیرهای آخر فصل ۱۸ را تأیید می‌کند.

## ثابتهای فیزیکی<sup>۱</sup>

$6.0221367(36) \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$	$N_0$ (عدد آووگادرو)
$2.99792458 \times 10^{10} \text{ cm s}^{-1}$	$c$ (سرعت نور، تعریف)
$1.60217733(49) \times 10^{-19} \text{ C}$	$e$ (بار الکترون)
$4.80653199(15) \times 10^{-10} \text{ esu}$	
$1.60217733(49) \times 10^{-6} \text{ erg}$	۱ MeV
$1.05457266(63) \times 10^{-27} \text{ erg s}$	$h$ (ثابت پلانک بخش بر $2\pi$ )
$6.5821220(20) \times 10^{-22} \text{ MeV s}$	
$1/137.0359895(61)$	$\alpha$ (ثابت ساختار ریز $e^2/\hbar c$ )
$1.380658(12) \times 10^{-16} \text{ erg K}^{-1}$	$k$ (ثابت بولتزمن)
$9.1093897(54) \times 10^{-28} \text{ g}$	$m_e$ (جرم الکترون)
$0.5109989461(15) \text{ MeV}/c^2$	
$1.6726231(10) \times 10^{-24} \text{ g}$	$m_p$ (جرم پروتون)
$938.27231(28) \text{ MeV}/c^2$	
$1.6749286(1) \times 10^{-24} \text{ g}$	$m_n$ (جرم نوترون)
$939.56563(28) \text{ MeV}/c^2$	
$1.6605402(10) \times 10^{-24} \text{ g}$	$(m(C^{12})/12) \text{ amu}$
$931.49432(28) \text{ MeV}/c^2$	
$0.529177249(24) \times 10^{-8} \text{ cm}$	$(\hbar/m_e c \alpha) a_0$
$13.605698(40) \text{ eV}$	$(m_e c^2 \alpha^2/2) R_\infty$
$6.67259(85) \times 10^{-8} \text{ cm}^2 \text{ g}^{-1} \text{ s}^{-2}$	$G$ (ثابت گرانش)
$0.578838263(52) \times 10^{-14} \text{ MeV G}^{-1}$	$\mu_B$ (مگنتون بور $e\hbar/2m_e c$ )

۱. اعداد از مقاله بسیار جالب زیر اقتباس شده‌اند:

## مراجع<sup>۱</sup>

G Baym, *Lectures on Quantum Mechanics*, W A Benjamin, New York, 1969.

کتابی است بسیار جذاب، با تعادل مناسبی بین صورتبندی، استدلالهای شهودی و کاربرد. این کتاب را باید پیشرفته در نظر گرفت، و قابل فهم برای دانشجویی که مطالب کتاب حاضر را فراگرفته است.<sup>۱</sup>

H A Bethe and R W Jackiw, *Intermediate Quantum Mechanics* (2nd edition), W A Benjamin, New York, 1968.

این کتاب حاوی بحثهای مفصلی درباره روشهای محاسباتی قابل کاربرد در نظریه ساختار اتمی، شکافتگیهای چند تایی، اثر فوتوالکتریک و برخوردهای اتمی است. بسیاری از مطالب در کتابهای درسی دیگر یافت نمی‌شوند، و از این رو یک کتاب درسی پیشرفته و همچنین یک مرجع جامع است.

H A Bethe and E E Salpeter, *Quantum Mechanics of One -and Two- Electron Atoms*, Springer-Verlag, Berlin/ New York, 1957.

این تجدید چاپ مقاله مؤلفان در *Handbuch der Physik* یک بررسی دقیق، مفصل و قاطع از مسئله مورد نظر است. این کتاب درباره آنها است نه مکانیک کوانتومی، و سطح آن بالاست. این مقاله یک مرجع عالی است.

D Bohm, *Quantum Theory*, Dover Publ, New York, 1989.

این کتابی است در سطح کتاب حاضر، که با سبکی پراکنده نوشته شده است. مؤلف توجه بسیاری به اصول نظریه کوانتومی دارد و یک بحث عالی درباره نظریه کوانتومی فرایند اندازه‌گیری ارائه می‌کند. چند کاربرد بیان شده‌اند و تعداد مسائل اندک است.

۱. کتابهای بسیاری در (باره) مکانیک کوانتومی نوشته شده‌اند. بعضی از آنها را مطالعه کرده‌ام، بعضی را خوانده‌ام، چندتایی را نگاه کرده‌ام، و احتمالاً تعدادی نیز از نظرم دور مانده‌اند. سیاهه‌ای که در اینجا ارائه کرده‌ام جامع نیست، و اگر اسمی از کتابی برده نشده است به معنای انتقاد از آن نیست. مخصوصاً کتابهای شیمی کوانتومی معرفی نشده‌اند.



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

این کتابی است که بسیار خوب نوشته شده است و حدود نیمی از آن به نظریهٔ امواج و مکانیک کلاسیک اختصاص یافته است. سطح آن قابل مقایسه با کتاب حاضر است.

J J Brehm and W J Mullin, *Introduction to the Structure of Matter*, John Wiley & Sons, New York, 1989.

این کتابی است پیشرفته و فراگیر که قسمت اعظم فیزیک نوین را با سبکی بسیار خواندنی دربر می‌گیرد. یک مرجع عالی برای هر کس که خواهان تفصیل کیفی‌تری برای مباحثی است که در کتاب حاضر شتابزده به آنها اشاره شده است.

E U Condon and G H Shortley, *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge University Press, Cambridge, England, 1959.

این یک مرجع بسیار مفصل دربارهٔ تمام جوانب طیفهای اتمی است، اگرچه از روشهای جدید مبتنی بر نظریهٔ گروه استفاده نمی‌کند. این کتاب بسیار پیشرفته است، و از این رو نارساییهای آن در توسعهٔ روشها برای هیچکس بجز متخصصان اهمیتی ندارد. برای دانشجو بسیار مفید است.

S Brandt and H D Dahmen, *Quantum Mechanics on the Personal Computer* (3rd edition), Springer-Verlag, New York, 1994.

این کتاب که در آن کامپیوترهای شخصی ابزار اصلی آموزش مکانیک کوانتومی است تنها کتابی است از این نوع که من دیده‌ام. چون کامپیوترهای شخصی روز به روز متداولتر می‌شوند و دانشجویان به استفاده از آنها بیشتر عادت می‌کنند، بهره گرفتن از آنها برای یافتن جوابهای معادلهٔ شرودینگر امری اجتناب‌ناپذیر است.

C Cohen-Tannoudji, B Diu, and F Laloe, *Quantum Mechanics*, John Wiley & Sons, New York, 1977.

این کتابی است دانشنامه مانند با بیشتر از هزار صفحه، که در آن بررسی مفصلی از بسیاری از جوانب فیزیک اتمی یافت می‌شود. سطح ریاضی آن تا حد زیادی بالاتر از کتاب حاضر است.

R H Dicke and J P Wittke, *Introduction to Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, Reading, Mass, 1960.

از این کتاب بسیار لذت برده‌ام. سطح آن قابل مقایسه با کتاب حاضر است، و چند مبحث که در اینجا بیان نشده‌اند، مخصوصاً آمار کوانتومی، را بررسی می‌کند. مسائل آن عالی هستند.

P A M Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics* (4th edition), Oxford University Press (Clarendon), Oxford, 1958.

کتابی است بس عالی از یکی از پدیدآوردندگان اصلی مکانیک کوانتومی. دانشجویی که مطالب کتاب حاضر را مطالعه کرده است مشکلی با کتاب دیراک نخواهد داشت، و اگر جداً خواهان مهارت در مکانیک کوانتومی باشد باید دیر یا زود به مطالعه آن بپردازد.

R P Feynman and A R Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York, 1965.

در سال ۱۹۴۸، ریچارد فیلیپس فاینمن فرمولبندی متفاوتی برای مکانیک کوانتومی ارائه کرد. در این کتاب هم‌ارزی این فرمولبندی با نظریه متعارف نشان داده شده است، و در چند محاسبه از بیان "انتگرال مسیر" برای دامنه کلی استفاده شده است. انتخاب مطالب بسیار جالب توجه است. دیدگاه کتاب با دیدگاه کتاب حاضر تفاوت دارد، و از این رو این کتاب نسبتاً پیشرفته‌تر می‌تواند یک مکمل عالی برای کتاب حاضر باشد.

R P Feynman, R B Leighton, and M Sands, *The Feynman Lectures on Physics*, Vol 3, *Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, Reading, Mass, 1965.

در این مقدمه بر مکانیک کوانتومی، فاینمن انتگرال مسیر را کنار گذاشته است و موضوع را از دیدگاه بردارهای حالت مطرح می‌کند. تعداد زیادی مثال جذاب با حداقل ابزار ریاضی بررسی شده‌اند. یک مکمل عالی که تنها کمبود آن مسائل آخر فصل است.

K Gottfried, *Quantum Mechanics*, Vol 1, *Fundamentals*, W A Benjamin, New York, 1966.

این یک کتاب بسیار پیشرفته است که وجه تمایزش دقتی است که با آن مباحث گوناگون بررسی شده‌اند. بررسی فرایند اندازه‌گیری و اصول ناوردایی عالی است. دانشجویی که به مطالب کتاب حاضر احاطه یافته است باید بتواند کتاب گاتفرید را بخواند، به شرط اینکه ریاضیات مورد نیاز را بداند.

D Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N J 1995.

این کتاب جذاب بسیار خوب نوشته شده است و تقریباً در سطح دیکی و ویتکه یا ساکسون است، با انتخاب خوبی از مباحث، از جمله بحثی درباره فاز هندسی.

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

این تجدید چاپ سخنرانیهای هایزنبرگ در سال ۱۹۳۰ درباره معنای فیزیکی نظریه کوانتومی هنوز هم خواندنی است. بحث روابط عدم قطعیت مخصوصاً مفید است.

H A Kramers, *Quantum Mechanics*, Interscience, New York, 1957.

این کتابی است از یکی از پایه‌گذاران موضوع که بهترین قسمتهای آن بحث اسپین و درآمدی بر نظریه کوانتومی نسبیتی است، که هر دو نسبتاً پیشرفته‌اند. دانشجویی که مشکلی با مکانیک کوانتومی ندارد پراکنده‌خوانی این کتاب را لذت‌بخش و آموزنده خواهد یافت.

L D Landau and E M Lifshitz, *Quantum Mechanics (Nonrelativistic Theory)* (2nd edition), Addison-Wesley, Reading, Mass, 1965.

این کتاب لاندائو و لیفشیتز کتابی از یک دوره بس عالی است که تمام فیزیک نظری را در بر می‌گیرد، و به‌سختی می‌توان گفت که یک کتاب درسی برای دانشجویان است مگر پیشرفته‌ترین آنها. اما هر دانشجویی که به سطح عالی رسید در این کتاب چیزهای مفید زیادی خواهد یافت. دانشجو از لحاظ ریاضی با مشکلی روبه‌رو نخواهد شد.

Richard L Liboff, *Introductory Quantum Mechanics*, Holden-Day, San Francisco, 1980.

این کتابی است بسیار جذاب که تقریباً در سطح ریاضی یکسانی با کتاب حاضر نوشته شده است، و بسیاری از مطالب دوسوم اول کتاب حاضر را با تفصیل بیشتری در برمی‌گیرد. این هم یک مرجع عالی است.

Harry J Lipkin, *Quantum Mechanics – New Approaches to Selected Topics*, North-Holland, Amsterdam, 1973.

این کتاب به تعدادی از مباحث پیشرفته در کاربرد مکانیک کوانتومی با بیانی ساده پرداخته است. فیزیک همیشه مهم‌ترین قسمت بحث است، و دانشجویی که بر کتاب حاضر مسلط است از آن لذت و بهره فراوانی خواهد برد.

A Messiah, *Quantum Mechanics* (in 2 volumes), John Wiley & Sons, New York, 1968.

این کتاب پوشش کاملی از نظریه کوانتومی، از بررسی پتانسیلهای یک‌بعدی تا کوانتس میدان الکترومغناطیسی و معادله موج نسبیتی دیراک، است. کتابی است پیشرفته، و از لحاظ پیچیدگی ریاضی در حد دانشجویان کارشناسی ارشد است. این کتاب فوق‌العاده با ارزش است.

E Merzbacher, *Quantum Mechanics* (3rd edition), John Wiley & Sons, New York, 1998.

این کتاب همراه با کتاب شیف، به حق، کتاب درسی متعارف برای سال اول کارشناسی ارشد است. گستره کامل مفاهیم و پدیده‌ها با ایجاز و سلیقه بررسی شده است، و برای دانشجویی که مطالب کتاب حاضر را مطالعه کرده است قابل استفاده است.

R Omnes, *The Interpretation of Quantum Mechanics*, Princeton University Press, Princeton, N J, 1994.

یک کتاب مهم که به کارهای اخیر در گسترش تعبیر متعارف مکانیک کوانتومی می‌پردازد.

D Park, *Introduction to the Quantum Theory*, (3rd edition) McGraw-Hill, New York, 1984.

این کتاب جذاب در سطح کتاب حاضر نوشته شده است. از میان مباحث مورد بررسی، موضوع آمار کوانتومی است، که کتاب حاضر فاقد آن است، و با روشنی ارائه شده است.

W Pauli, *Die Allgemeinen Prinzipien der Wellenmechanik Handbuch der Physik*, Vol 5/1, Springer-Verlag, Berlin/New York, 1958.

دانشجوی پیشرفته‌ای که آلمانی می‌داند در این تجدید چاپ مقاله پاولی در سال ۱۹۳۰ بحث قاطع و فشرده‌ای از مکانیک کوانتومی خواهد یافت. هیچ کاربردی ذکر نشده است. اما تمام مطالب مهم در آن دیده می‌شود.

P J E Peebles, *Quantum Mechanics*, Princeton University Press, Princeton, N J, 1992.

این کتاب درسی است که با قلمی شیوا در سطح کارشناسی نوشته شده است. تفاوت آن با کتابهای دیگر در این سطح (بجز کتاب بوهم) بحث مفصلی است درباره اینکه فرایند اندازه‌گیری در مکانیک کوانتومی واقعاً چه معنایی دارد.

A B Pippard, *The Physics of Vibration*, Cambridge University Press, Cambridge, England, 1978.

این کتاب تمام انواع نوسانگرها، کلاسیک و مکانیک کوانتومی، را در برمی‌گیرد. به معنای متداول، کتاب درسی نیست، اما خواندن آن لذت بخش است.

J L Powell and B Crasemann, *Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, Reading Mass, 1961.

قوت این کتاب در بررسی موشکافانه تمام جزئیات ریاضی مکانیک موجی و مکانیک ماتریسی است. احتمالاً تمام جنبه‌های ریاضی موضوعاتی که در کتاب حاضر نادیده گرفته شده‌اند در این کتاب یافت می‌شوند. حاوی بحث خوبی درباره تقریب WKB و خواص عمومی معادلات

دیفرانسیل مرتبهٔ دوم است. تعداد کاربردها نسبتاً کم است، و تعداد تمرینها بیشتر از تعداد مسائل است.

M E Rose, *Elementary Theory of Angular Momentum*, John Wiley & Sons, New York, 1937.

بررسی پیشرفته‌ای از تکانهٔ زاویه‌ای و کاربردهای فراوان در فیزیک اتمی و هسته‌ای.

J J Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, (S. F. Editor), Addison-Wesley, Reading, Mass, 1994.

این کتاب عالی را ساکورایی فقید در سطح نسبتاً پیشرفته‌تری از کتاب حاضر، مانند کتابهای مرزباخر و شیف، نوشته است. این کتاب درسی سال اول کارشناسی ارشد با انتخاب مباحثی که طبعاً به مکانیک کوانتومی پیشرفتهٔ مورد علاقهٔ فیزیکدانهای ذرات بنیادی کشیده می‌شود سبک نوینی دارد. کتاب حاوی مجموعه‌ای عالی از مسائل است.

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

این کتاب در سطح کتاب حاضر و مرجع مفیدی است، زیرا انتخاب مباحث تنها کمی تفاوت دارد، و همچنین تأکید و انتخاب کاربردها. کتاب حاوی مجموعه‌ای عالی از مسائل است.

L I Schiff, *Quantum Mechanics* (3rd edition), McGraw-Hill, New York, 1968.

این یکی از کتابهای درسی متعارف برای سال اول کارشناسی ارشد است. شاید کمی بیش از حد فشرده باشد، و از این‌رو برای دانشجویی که آمادگی کامل دارد از همه مناسبتر است. پیچیدگی ریاضی آن از سطح کتاب حاضر بالاتر است.

F Schwabl, *Quantum Mechanics*, Springer-Verlag, New York, 1992.

این یک کتاب پیشرفته‌تر با انتخاب جالبی از مباحث است.

R Shankar, *Principles of Quantum Mechanics*, Plenum Press, New York, 1980.

این کتابی است پیچیده‌تر و از لحاظ ریاضی پیشرفته‌تر از کتاب حاضر، که حاوی بررسی جانشینی برای بعضی از مباحث این کتاب است، و مرجع خوبی است.

M P Silverman, *And Yet it Moves; Strange Systems and Subtle Questions in Physics*, Cambridge University Press, New York, 1993.

این کتاب به بررسی کیفی مباحثی می‌پردازد که اصول اساسی نظریه کوانتومی را تشکیل می‌دهند. خواندن این کتاب برای دانشجویی که قسمت بیشتر کتاب حاضر را خوانده باشد کاملاً قابل درک و سرگرم‌کننده است.

## فهرست راهنما

- آزمایش
- ~ پراش دیویسون-گرم ۲۱،۲۰
- ~ پراش نوترون ۲۱
- ~ دوشکافی ۴۵،۲۹
- ~ ذهنی ۲۹
- آستانهٔ پراکندگی ۵۱۲
- آمار
- ~ بوز-اینشتین ۱۹۶
- ~ فرمی-دیراک ۱۹۶
- آهنگ افت ۵۷۷
- اتم
- ~ بور ۲۸،۲۲
- ~ دوترازی در میدان الکتریکی ۴۷۸
- ~ هلیم ۳۷۴
- اثرات اصل طرد در سه ~ ۳۷۷
- ~ در اثر دافعهٔ الکترون-الکترون ۳۷۸
- ~ در اورتوهلیم (سه‌تایی) و پاراهلیم (تکتایی) ۳۸۵
- ~ در برهم‌کنش تبادل ۳۸۲،۳۸۱
- ~ در جابه‌جایی تا مرتبهٔ اول ۳۷۸
- ~ در حالت پایه ۳۸۸
- ~ هیدروژن ۲۶۰
- الگوی بور در ~ ۲۵،۲۴
- ~ در اثرات انرژی جنبشی نسبی ۳۵۹
- ~ در اثرات جرم کاهیده ۳۷۰
- ~ در جفت‌شدگی اسپین-مدار ۳۵۹
- طیف انرژی ~ ۲۶۱
- مدار دایره‌ای در نظریهٔ کوانتومی ~ ۲۶۸
- معادلهٔ شعاعی ~ ۲۶۰
- واگنی طیف ~ ۲۶۴
- اثر
- ~ آهارانوف-بوهم ۲۹۷،۲۹۴
- ~ اشتراک ۳۴۷
- ~ برای حالت‌های  $n = ۲$  ۳۵۰
- ~ در تکانهٔ دوقطبی دائمی ۳۴۸
- ~ در دلیل وجود جملهٔ دوم ۳۴۸
- قطبش‌پذیری ~ ۳۵۰
- ~ اصل طرد ۲۰۷
- ~ انرژی جنبشی نسبی ۳۵۹
- ~ بهنجار زیمان ۲۸۲
- ~ تبدالی در هلیم ۳۸۳،۳۸۲
- ~ حرکت تقدیمی و توماس ۳۶۰
- ~ رامسائر و تاونزند ۱۰۰
- ~ فوتوالکتریک ۱۵

- ۳۸۵ ~ وردشی  
 ~ برای ساختار آنها ۳۹۴  
 ~ برای مولکول  $H_2$ ، ۴۱۳، ۴۱۴  
 ~ ریتز ۳۸۵، ۳۹۵  
 ~ ریلی-ریتز ۳۸۱، ۳۸۵  
 اعداد  
 ~ جادویی ۲۳۲  
 ~ کوانتومی ۲۸  
 الکترون جفت شده ۴۲۳  
 (الگوی)  
 ~ اتمی رادرفورد ۲۲، ۲۳  
 ~ گروونیک-پنی ۱۲۵  
 انتشار بسته‌های موج ۳۸  
 انتقال فاز ۲۳۴، ۴۹۸  
 ~ برای پراکندگی چاه مربعی ۵۰۴، ۵۰۵  
 انتگرال  
 ~ پذیرمی مجذوری توابع موج ۵۵  
 ~ فوریه ۳۷، ۵۴۳  
 ~ همپوشی ۲۰۰  
 انرژی  
 ~ فرمی ۱۰۵، ۲۰۹  
 ~ نقطه صفر ۱۳۷  
 ~ همپاری ۱۰، ۱۱  
 اوربیتالها ۳۸۴، ۴۱۹، ۴۲۰  
 اورتوهلیم (سه‌تایی) ۳۸۵  
 اهمیت فازها ۵۵  
 بردار پتانسیل ۲۷۶  
 ~ برای ثابت میدان مغناطیسی ۲۸۰، ۲۸۹  
 ~ برای گسیل و جذب فوتون ۴۴۰، ۴۶۶  
 بسامد  
 ~ دبی ۴۸۹  
 ~ رابی ۴۸۲  
 ~ سیکلوترون ۳۱۵  
 ~ لارمور ۲۸۲  
 عامل زاویه‌ای ~ ۵۳۴  
 ~ کامپتون ۱۷  
 ~ در فرمول کلاین-نیشینا ۵۳۷  
 طول موج ~ ۲۰  
 ~ کوانتومی هال ۲۹۱  
 ~ مایسنر ۲۹۵  
 ~ موسباور ۴۸۶  
 ~ برای استفاده در انتقال به سرخ گرانشی ۴۹۱  
 ~ ناپه‌نچار زیمان ۳۶۴  
 احتمال  
 ~ تراگسیل ۵۷۲  
 ~ گذار ۴۳۸  
 اختلال واگنی برای اثر اشتارک خطی ۳۵۰  
 ارتعاش  
 ~ مولکولها ۴۲۹  
 ~ هسته‌ها در مولکولها ۴۲۹  
 اسپین  
 ~ تک‌تایی ۳۲۶  
 ~ سه‌تایی ۳۲۶  
 ~ وقاعده‌های شدت ۴۵۷  
 اسپینورها ۳۱۰  
 استار بار هسته‌ای ۳۸۱  
 اصل  
 ~ بسط و تعبیر ۷۷  
 ضریب ~ ۷۹، ۱۴۷، ۱۴۸  
 ~ پاؤلی ۱۹۵، ۱۹۶  
 ~ در حالت‌های دو اسپینور ۳۳۶، ۳۳۷، ۳۳۸  
 ~ تشکیل ۳۹۹  
 ~ تطابق ۲۸  
 ~ بور ۲۸  
 ~ در آهنگ واپاشی ۳۴  
 ~ عدم قطعیت هایزنبرگ ۳۰  
 ~ مربوط به چگالی دوقطبی تابشی ۴۵۸



پراکندگی ۴۹۴

- آستانه طول ~ ۵۱۲
- ~ از قرص سیاه ۵۰۱
- ~ اورتو-H<sub>2</sub> و پارا-H<sub>2</sub> ۵۱۴
- ~ تشدید ۵۰۶
- ~ در فرمول برایت-ویگنر ۵۰۷
- ~ در اتمهای شبکه ۵۲۱
- ~ در انرژیهای کم ۵۰۴
- ~ در تقریب بورن ۵۱۵
- ~ در چاه مربعی ۵۰۴
- ~ ذرات یکسان ۵۱۹
- ~ سایه ۵۰۲
- ~ کشسان ۴۹۹
- ~ موج S برای چاه مربعی ۵۰۹
- ~ میدان کولنی ۵۱۷
- ~ ناکشسان ۵۰۲
- ~ نوترون-فوتون ۵۱۲
- ~ وابسته به اسپین ۵۱۲
- ~ همدوس بلور ۵۲۲
- پس زنی در اثر موسباور ۴۹۰
- پله پتانسیل ۹۴
- ~ بازتابیده ۹۷
- پمپاژ اپتیکی ۴۷۲
- پوزیترون ۵۳۸
- پهن شدگی دوپلری ۴۷۴
- پیامدهای ناوردایی چرخشی ۲۱۷

تابش

- ~ اتمی ۴۳۴
- ~ در تابش چارقفبی الکتریکی ۴۵۳
- ~ در تابش دوقطبی الکتریکی ۴۵۲
- ~ در تابش دوقطبی مغناطیسی ۴۵۳
- ~ در نظریه اختلال ۴۳۴
- ~ به صورت کوانتومی ۱۲
- ~ جسم سیاه ۶

بسته‌های موج ۳۶

- انتشار ~ ۳۸
- ~ پهن ۴۱
- پهنای ~ ۳۸، ۳۷
- ~ گاوسی ۳۸، ۳۷
- ~ معادله شرودینگر ۴۱
- ~ و قله نامتناهی ۸۴
- بوزون ۱۹۶
- پاراهلیم (تکتایی) ۳۸۵
- پارینه ۸۶
- ~ در تابع موج ۳۳۷
- ~ در یک پیون کند ۳۳۷
- پایستگی

- ~ احتمال ۵۷
- ~ تکانه ۱۸۶
- ~ در ناوردایی هامیلتونی ۱۸۸
- ~ زاویه‌ای انرژی ۷۰
- ~ زاویه‌ای پارینه ۸۷
- ~ کل ۱۸۸
- ~ شار در معادله شعاعی ۴۹۴
- پتانسیل
- ~ الکترومغناطیسی ۲۷۶
- ~ بی‌دررو ۴۳۷
- ~ تابع دلتا ۱۱۸، ۹۶
- ~ جعبه در جعبه دوار ۲۳۱
- ~ دوره‌ای ۱۲۵
- ~ کولنی ۵۱۷
- ~ وابسته به اسپین ۳۲۸

پدیده

- ~ پراکندگی از قرص سیاه ۵۰۱
- ~ تونل زنی ۱۰۴
- ~ در حالت ابررسانایی ۱۰۸
- ~ میکروسکوپی (STM) ۱۰۶
- ~ فرومغناطیسی در بسط هایزنبرگ ۳۸۳

- چگالی انرزی ~ ۴۷۰  
 قانون ریلی-جینز در ~ ۹  
 قانون وین در ~ ۹  
 ~ میکروموج کیهانی زمینه ۱۳
- تکانه
- تابع
- ~ بسل ۲۹۹  
 ~ کروی ۲۲۸  
 ~ دلتا ۵۴۳  
 ~ دیراک ۸۱  
 ~ کار ۱۶، ۱۵  
 ~ موج ۱۹۵  
 ~ پادمقارن ۱۹۵  
 ~ حالت‌های پاریده ۴۵۸  
 ~ دامنه مکان ۱۷۳  
 ~ در فضای تکانه ۶۰  
 ~ دوره‌ای ۱۲۶، ۴۴۴  
 ~ فاز ۵۵، ۵۶  
 ~ مستقل از زمان ۷۰  
 ~ نویمان کروی ۲۲۸  
 ~ هنکل کروی ۲۲۹  
 تبدیل داخلی ۴۶۴  
 تداخل سنج فابری-پرو ۱۰۰  
 ترازهای لاندائو ۲۸۹  
 تشدید پارامغناطیسی ۳۱۶  
 تعبیر احتمالاتی ۵۳، ۵۴  
 تغییر
- ~ در پراکندگی تشدیدی ۵۰۶  
 ~ کوانتوم-الکترودینامیکی ۴۴۳  
 تقارن هامیلتونی ۸۷، ۸۸  
 تقریب
- ~ بورن ۵۱۵  
 ~ در پراکندگی کولن ۵۱۷  
 محدودیت‌های ~ ۵۱۹  
 ~ دوقطبی الکتریکی ۴۴۹  
 قاعده گزینش در ~ ۴۵۱
- ~ موج چرخان ۴۸۰  
 ~ و نترل-کرامرز-بریلوئن ۱۰۳، ۵۶۹
- ~ دوقطبی دائمی ۳۴۸  
 ~ زاویه‌ای ۲۴۰  
 ~ اسپین ۳۱۰  
 ~ پایسته کل ۱۸۸  
 توابع ویژه ~ ۲۴۹  
 ~ در اصول موضوعه بور ۲۳، ۲۴  
 رابطه جابه‌جایی ~ ۲۲۰  
 عملگر ~ ۲۱۸، ۲۱۹، ۲۴۰، ۲۴۱  
 عملگر افزایشنده و کاهشنده برای ~ ۲۴۵  
 ~ ماتریس ۳۰۵  
 ~ و ناوردایی پایستگی تحت چرخش  
 ۲۱۹، ۲۱۸  
 ویژه‌مقدارهای ~ ۲۴۸  
 ~ طیف پیوسته ۸۱  
 ~ فوتون ۱۸  
 ~ موج الکترومغناطیسی ۱۸  
 ~ ویژه‌تابع بهنجار ۱۴۷  
 توان گسیل ۶  
 توزیع
- ~ احتمال بولترمن ۱۱  
 ~ پلانک ۹، ۱۰  
 توصیف طیف نمایی حالت‌های پایه ۴۰۳  
 ~ در قاعده هوند ۴۰۳  
 تونل زنی ۱۰۸  
 ~ در ابررساناها ۱۰۸  
 ~ در سد پتانسیل ۱۰۹، ۱۱۰  
 ~ در گسیل سرد ۱۰۵  
 ~ در واپاشی آلفا ۱۰۹
- ثابت
- ~ پلانک ۹، ۱۰، ۲۴، ۲۵  
 ~ حرکت ۸۷

- ~ ساختار ریز ۲۶  
 ~ های فیزیکی ۵۸۲
- جوابهای پیوستار برای ~ ۲۳۳  
 ~ در حالت سه بعدی حالت‌های مقید ۲۳۵
- چرخش مولکولها ۴۲۸  
 چرخنده در معادله ویژه مقداری ۲۴۴  
 چگالی
- ~ انرزی الکترومغناطیسی ۴۴۲  
 ~ دوقطبی تابشی ۴۵۷، ۴۵۸  
 ~ واسپین ۴۵۷  
 چندجمله‌ای
- ~ لاگر ۲۶۶  
 اصل وردشی در ~ ۳۹۶  
 ~ لژاندر ۲۵۱  
 ~ هرمیت ۱۳۵
- حاصلضرب زده‌ای ۱۵۰  
 حالت
- ~ پادمتقارن ۱۹۵  
 ~ پایا ۲۴، ۳۵۵، ۴۷۲  
 ~ پایه ۲۰۰  
 ~ برای ذرات آزاد در یک جعبه ۲۰۰  
 ~ ذره در جعبه ۷۵  
 ~ شبه پایدار ۴۷۲، ۴۷۳  
 ~ مقید در چاه پتانسیل ۱۱۳، ۲۳۵، ۲۳۶  
 ~ مقید در چاه مربعی ۱۱۷  
 ~ همدوس ۱۸۱  
 حد کلاسیک قضیه اهرنفتست ۱۶۱  
 حرکت
- ~ اسپین ۳۱۵  
 ~ در میدان مغناطیسی ۳۱۵  
 ~ در میدان مغناطیسی ۲۸۴  
 ~ کلاسیک الکترون در میدان مغناطیسی  
 ثابت ۲۸۸  
 ~ مرکز جرم ۱۹۱، ۲۱۶
- جدول تناوبی ۴۰۷  
 جذب ۵۰۰، ۴۹۹، ۶  
 ~ تابش ۵۳۸  
 تولید زوج در ~ ۵۳۸  
 ~ در اثر فوتوالکتریک ۵۲۸  
 ~ در اثر کامپتون ۵۳۶  
 ~ در ماده ۵۲۸
- جرم
- ~ ستاره ۲۱۱  
 ~ سکون ذره ۱۸  
 ~ سکون فوتون ۱۸  
 ~ کاهیده ۱۹۲  
 اثرات هیدروژن در ~ ۳۷۰  
 معادله دیفرانسیلی ~ ۲۶۳
- جریان احتمال ۵۶  
 جعبه پتانسیل ۷۳  
 جفت‌شدگی ۴۴۰  
 ~ آنها در میدان تابشی ۴۴۰  
 ~ غیرنسبیتی ۵۳۸
- جمع
- ~ اسپین و تکانه زاویه‌ای مداری ۳۳۰  
 ~ تکانه زاویه‌ای در اسپینهای دوتایی ۳۲۴  
 ~ تکانه زاویه‌ای مدار ۳۳۰  
 جواب منظم تابع بسل کروی ۲۲۸
- چاربردار ۵۵۷  
 چاه
- ~ پتانسیل ۹۹  
 حالت‌های مقید در ~ ۱۱۳  
 ~ در حالت تابع موج-پارته ۱۱۷  
 ~ نامتناهی ۲۳۰  
 ~ مربعی ۲۳۳

- خودیونش ۳۸۸  
 خواص موجی ماده ۵  
 دترمینان اسلیتر ۳۹۸  
 ~ برای تابع موج فرمیون ۱۹۸  
 دستگاه دو ذره‌ای  
 ~ در معادله تک‌ذره‌ای ۱۹۳  
 ~ ذرات یکسان ۱۹۳  
 دستگاه  $N$  ذره‌ای ۱۸۶  
 ذره  
 ~ آزاد در جعبه ۲۰۶  
 ~ شرودینگر ۸۰  
 ویژه‌تابع ~ ۸۱، ۸۰  
 ~ در جعبه ۲۳۰، ۲۰۶، ۷۴، ۷۳  
 ~ یکسان ۱۹۳  
 ~ و تقارن تابع موج ۱۹۳، ۱۹۴  
 رابطه  
 ~ استفان-بولتزمن ۱۰  
 ~ تامتیت ۱۴۹  
 ~ جابه‌جایی ۶۴  
 ~ برای  $x$  و  $p$  ۶۴  
 ~ عدم قطعیت ۴۳، ۴۴، ۴۶، ۴۷  
 اثبات ~ ۵۵۳  
 ~ انرژی-زمان ۴۷  
 تعریف ~ ۱۵۷  
 برآوردهای مرتبه بزرگی ~ ۴۷  
 ~ کاملیت نمادنگاری دیراک ۱۷۴  
 رشته فوریه ۵۴۳  
 رفتار موجی ۵۶  
 رگبار پرتوکیهانی ۵۳۹  
 روش  
 ~ بورن-اینهایمر ۴۳۲  
 ~ پیوند والاسی، مولکول ۴۲۰  
 ~ تقریب هارتری ۳۹۵  
 ساختار  
 ~ اتمها ۳۹۴  
 ~ برانگیخته ۳۹۹  
 ~ پوسته در هسته ۲۳۲  
 ~ فوق ریز ۳۶۷  
 ~ کلی مکانیک موجی ۱۴۴  
 ~ نوار ۱۲۹  
 ستاره نوترونی ۲۱۳  
 سد پتانسیل ۱۰۱  
 سرد کردن اتمها ۴۷۴  
 سرعت گروه ۴۰، ۴۱  
 سطح مقطع ۴۹۴  
 ~ برای اثر فوتوالکتریک ۵۳۰، ۵۳۱  
 ~ برخورد ۴۹۴  
 ~ پراکندگی  
 ~ ذرات یکسان ۵۱۹، ۵۲۰  
 ~ کولن ۵۱۸، ۵۱۹  
 ~ تامسون ۵۳۶  
 تغییر فازها در ~ ۵۰۴  
 ~ در رابطه میان انرژی بستگی ۵۱۱  
 ~ در قضیه ایتیکی ۴۹۹  
 ~ ذرات یکسان ۵۱۹  
 ~ قرص سیاه ۵۰۱  
 ~ کشسان و ناکشسان ۴۹۹، ۵۰۰، ۵۰۱  
 ~ کل ۴۹۸  
 سیاره رادرفورد ۲۲  
 سیستم دو ذره‌ای ذره آزاد ۱۹۰  
 سینماتیک نسبی ۵۵۷  
 شاخصهای میلر ۵۲۴  
 شار  
 جریان ~ ۵۶

- ~ محصور کوانتیده ۲۹۵  
 شرط  
 ~ بازتاب براگ ۵۲۴، ۱۲۹  
 ~ راست‌هنجاری ۱۴۶، ۷۵  
 شکل خط لورتسی ۴۶۱  
 ضریب  
 ~ جذب ۶  
 ~ القایی ۴۶۸  
 ~ جرمی ۵۳۵  
 ~ بسط ۷۹  
 ~ مقدار انتظاری ۱۴۸، ۱۴۷، ۷۸  
 ~ بهنجارش اوربیتالهای مولکولی ۴۱۵  
 ~ تراگسیل برای سد پتانسیل ۱۰۲  
 ~ در روش تقریب و نازل-کرامرز-بریلوئن ۱۰۳  
 ~ کلبش-گوردان ۳۳۵  
 ~  $A$  و  $B$  اینشتین ۴۶۷  
 طول  
 ~ تابشی ۵۴۰  
 ~ تشدید ۵۷۳  
 ~ عمر ۵۷۳  
 ~ پهنای خط ۵۷۳  
 ~ مغناطیسی ۲۹۱، ۲۹۰  
 ~ موج کاهیده ۲۶  
 طیف  
 ~ اتم هیدروژن ۲۵، ۲۴  
 ~ انرژی نوسانگر هماهنگ ۱۶۶  
 ~ هلیوم ۳۷۶، ۳۷۷  
 عدد پیوند ۴۲۵  
 عدم قطعیت هایزنبرگ ۴۳، ۴۴، ۴۶، ۴۷  
 عملگر ۵۹، ۷۰، ۵۵۰  
 ~ افزایشنده برای تکانه زاویه‌ای ۲۴۵  
 ~ افزایشنده و کاهنده ۱۷۰  
 ~ انرژی ۶۳  
 ~ پارته ۸۷  
 ~ تبادل ۱۹۴  
 ~ پارته ۱۹۵  
 ~ تکانه ۵۹، ۶۰  
 ~ در ثابت حرکت ۱۹۰  
 ویژه‌تابع ~ ۸۰، ۸۱، ۱۴۶، ۱۴۷  
 ~ هرمیتی ۶۵  
 ~ چگالی ۵۶۲  
 حالت آمیخته ~ ۵۶۵  
 حالت ناب در ~ ۵۶۳  
 ~ خطی ۷۰، ۱۵۰، ۵۵۰  
 ~ ماتریسهای خطی ۳۰۷  
 ~ مکان ۱۷۲  
 ویژه‌حالت و ویژه‌تابع در ~ ۱۷۲  
 ~ هامیلتونی ۶۳، ۶۴، ۱۵۰، ۵۵۰، ۵۵۱  
 ~ هرمیتی ۱۵۰، ۱۵۱، ۵۵۱  
 ~ همیوگ هرمیتی ۱۵۲  
 عنصر ماتریس برای گذار  $۱۶ \rightarrow 2p$  ۴۵۵  
 فرمول  
 ~ اثر فونوالکتریک اینشتین ۱۵، ۱۶  
 ~ برایت-ویگنر ۵۰۷  
 ~ برد مؤثر ۵۱۲  
 ~ رادرفورد برای پراکندگی کولنی ۵۱۸، ۵۱۹  
 ~ فاؤلر-نوردهایم ۱۰۶  
 ~ کلاین-نیشینا ۵۳۷  
 فرمیون ۱۹۶  
 انرژی کل از  $N$  در یک جعبه ۲۰۸، ۲۰۹  
 ~ در چاه پتانسیل ۱۹۶  
 فشار  
 ~ گرانشی ۲۱۱

- ~ واگنی ۲۱۰  
فضای فاز  
~ برای الکترونها ۴۴۷  
~ برای بیشتر حالت‌های ویژه ۴۴۷  
~ و برای فوتون ۴۴۴  
~ فوتونی دوترون ۴۵۳  
فرومغناطیس و اثرات تبادلی ۳۸۳، ۳۸۴  
فوتون ۱۶، ۱۷
- قاعده  
~ جمع ۳۳۵  
~ برای ضریب کلبش-گوردان ۳۳۵  
~ توماس-رایش-کوهن ۳۵۶  
~ طلایی ۴۴۷  
~ برای آهنگ گذار ۴۴۷، ۴۴۸  
~ کوانتس زومرفلد-ویلسون ۲۸  
~ کلی جمع تکانه‌های زاویه‌ای ۳۳۳  
~ گزینش ۳۸۴، ۴۵۱  
~ گذارهای صفر-صفر ۴۵۴  
~ هوند ۳۸۳، ۴۰۳
- قانون  
~ استفان-بولتزمن ۱۰، ۱۱  
~ پایستگی ۵۷  
~ تکانه زاویه‌ای ۲۱۸، ۲۱۹  
~ تجربی موزلی ۵۳۵  
~ ریلی-جینز ۴۶۸  
~ در تابش جسم سیاه ۸، ۹  
~ کیرشهوف در تابش گرمایی ۶، ۷  
~ گرمایی ویژه دولون-پتی ۱۱  
~ وین ۴۶۹  
~ در تابش جسم سیاه ۶  
~ همپاری کلاسیک ۱۰
- قضیه  
~ ایتیکی ۴۹۹، ۵۰۰، ۵۰۱  
~ بسط ۲۵۳
- ~ برای هماهنگی‌های کروی ۲۵۴  
~ موج تخت ۲۵۴  
~ بلوخ ۱۲۷  
~ بی‌دررو ۴۶۳  
~ پارسوال ۶۰  
~ فاینمن-هلمن ۳۹۱  
~ فلوکه ۱۲۷  
~ لوینسون ۵۱۰  
~ ویربال ۲۷۳
- قطبش ۵۶۸  
قفس دیکی و ویتکه ۳۰  
کاواک ۴۷۳  
کوانتس  
~ تکانه زاویه‌ای ۲۳، ۲۷، ۲۸، ۳۲  
~ شار ۲۹۴  
~ مغناطیسی ۲۹۴  
گاف انرژی ابررسانایی ۱۰۸  
گذار  
~ چارقطبی الکتریکی ۴۵۳  
~ دوقطبی مغناطیسی ۴۵۳  
گسیل  
~ القایی و جذب ۴۶۷، ۴۶۸  
~ در ضرایب  $A$  و  $B$  اینشتین ۴۶۷  
~ سرد ۱۰۵  
~ و جذب فوتون ۴۴۰، ۴۶۶، ۴۸۲  
گشتاور  
~ دوقطبی مغناطیسی ۳۱۳، ۳۱۴  
~ لختی مولکول هم‌هسته ۴۲۹
- لم  
~ بیکر-هاوسدورت ۵۵۶  
~ ریمان-لیگ ۴۹۷  
لیزرها ۴۷۰

- مانستگی فضای بردار ۱۴۹  
 ماتریس ۳۰۲، ۳۰۱  
 ~ پاؤلی ۳۰۹  
 ~ ستونی ۳۰۸  
 عملگر اسپین در ~ ۳۰۸  
 ~ همیوخ هرمیتی ۳۰۴  
 مجموعه کامل  
 ~ مشاهده پذیرها ۱۵۶  
 ~ ویژه تابعها ۱۴۵، ۱۴۷، ۱۴۸  
 مختصات استوانه‌ای ۲۸۶  
 مدار  
 ~ بور ۲۳  
 ~ دایره‌ای در اتم هیدروژن ۲۶۸  
 ~ در میدان مغناطیسی ثابت ۲۸۷، ۲۸۸  
 مدول کپهای ۲۱۰  
 واگتی ~ ۲۱۰  
 مساحت آزاد میانگین ۵۳۰  
 مسئله ذره-موج ۲۹  
 مشاهده پذیرها(ی) ۱۵۰  
 ~ عملگر تکانه ۱۴۶  
 ~ همزمان ۱۵۴  
 مشاهده جهشهای کوانتومی ۴۸۲  
 معادله  
 ~ شرودینگر ۴۲  
 ~ برای الکترون در میدان مغناطیسی  
 ثابت ۲۸۰  
 ~ برای بار ذره‌ای ۲۷۹  
 ~ برای پتانسیل مرکزی ۲۱۵، ۲۱۶  
 ~ برای ذره  $N$  ۱۸۶  
 جداسازی متغیرها در ~ ۲۲۱  
 ~ در انتگرال پذیری نامتناهی ۵۵  
 ~ در جعبه سه بعدی ۲۰۶، ۲۱۵  
 ~ در مختصه مرکز جرم ۱۹۱  
 ~ ذره آزاد ۵۳
- ساختار مجرد ~ ۱۷۵  
 معادله شعاعی برای پتانسیل مرکزی ~  
 ۲۲۴  
 ~ و تعبیر احتمالاتی ۵۳  
 ~ شعاعی برای پتانسیل مرکزی ۲۲۴  
 ~ برای اتم هیدروژن ۲۶۶  
 ~ برای جواب منظم و نامنظم ۲۲۶، ۲۲۷  
 ذره آزاد ۲۲۸  
 ~ کلاسیک حرکت در حد کوانتومی ۱۶۱  
 ~ ماکسول ۲۷۵  
 ~ ویژه مقدار ۶۹  
 ~ برای ذره در جعبه ۷۳  
 ~ برای  $L_z$  ۲۴۲، ۲۴۳  
 ~ در عملگر خطی ۷۰  
 ~ در نمایش ماتریس ۳۰۸  
 مقادیر انتظاری ۵۸  
 ~ اتم هیدروژن ۲۷۱  
 ~ انرژی در تعداد گرهای ۷۶  
 ~ حقیقی ۶۵  
 مکان عملگر ۱۷۷  
 ملاس نوری ۴۷۷  
 موج پادمقارن  
 دترمینان اسلیتر ~ ۱۹۸  
 کی پادمقارن سازی لازم است؟ در ۱۹۸  
 مولکول  
 انرژی الکترون در ~ ۴۱۴  
 اوربیتالهای ~ ۴۱۴، ۴۱۹، ۴۲۰  
 حالت‌های برانگیخته ~ ۴۱۸  
 حرکت چرخشی ~ ۴۲۸  
 ساختار چند ~ ساده ۴۲۴  
 ~  $H_2$  ۴۱۹  
 ~  $H_2^+$  ۴۱۳  
 مهبانگ ۱۳  
 میدان مغناطیسی ثابت در الکترون ۲۸۰

